

2 具体的な適用例

2.1 SiC 表面における C 原子の活性化エネルギー

2.1.1 準安定溶媒エピタキシーで生成された 4H-SiC 単結晶における {0001} 表面

現在 SiC のバルク成長には気相成長法が主に使用されており，原理的に低欠陥な結晶作成が可能な液相成長法の開発は困難と考えられてきた．ところが，高品質の SiC 単結晶を生成する成長手法が，関学大金子らによって開発された．これは準安定溶媒エピタキシー (Metastable Solvent Epitaxy) と呼称されており，4H-SiC を基板，3C-SiC を原料板として使用し，その間に溶媒として液体 Si の薄膜を挟み込んだサンドイッチ構成をとる．

図 4 に示した通り，MSE で生成された 4H-SiC 単結晶の {0001} 面の形状に差異が見られる．Si 原子で形成される (0001) 面 (図 4(a) Si-face) か，Si 修飾された C 原子で形成される (000-1) 面 (図 4(b) C-face) かに起因し，C-face は Si-face に比べて極端にステップが少ない．この両面に各ステップの高さは等しく，C-face はフラットな表面となっている一方，Si-face には多くのステップが存在する．

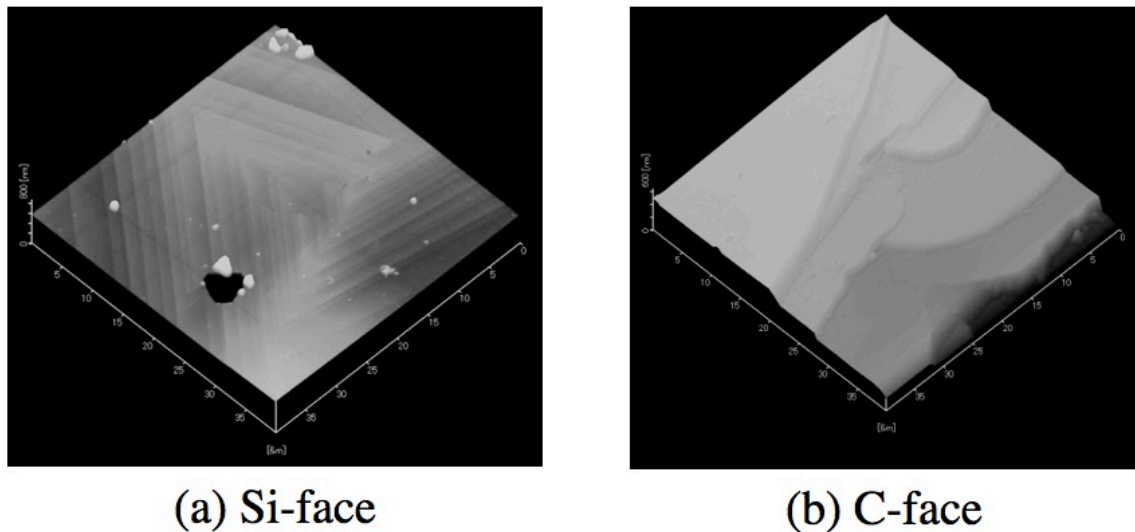


図 4: 4H-SiC の (a) Si-face (b) C-face における C 原子の吸着位置.

2.1.2 4H-SiC の {0001} 面における C 原子の拡散経路

背景 MSE において両界面が接する環境相は微量の C 原子が拡散してる液体 Si 薄膜であり，差異はない．数十 μm という液体 Si の十分な薄さから，原料板から溶け出した C 原子は基板へ即座に輸送されると考えられ，吸着頻度は十分である．吸着頻度が十分であれば，核生成の機会も増える．しかし両面ともに同環境相に接しており，上述した環境相の希薄さから吸着頻度，核生成頻度に差はないと考えられる．したがって両面の形状は，吸着した C 原子の表面拡散速度に依存すると考えられる．本節では，結晶表面に C 原子を吸着させ，吸着位置別の活性化エネルギーから求めた表面拡散経路を紹介する．

手法 実験は固液界面での反応であるが，計算は真空との界面を想定した．図 5(a) の Si-face, 及び (b) の C-face で特徴的な 3 点を取り，C 原子を付着させたモデルを作成した．第一原理計算は表面を固定し，付着させた C 原子の位置を縦方向に振り，安定位置を求めた．そしてこれらの値からそれぞれの表面拡散経路の活性化エネルギーを求めた．

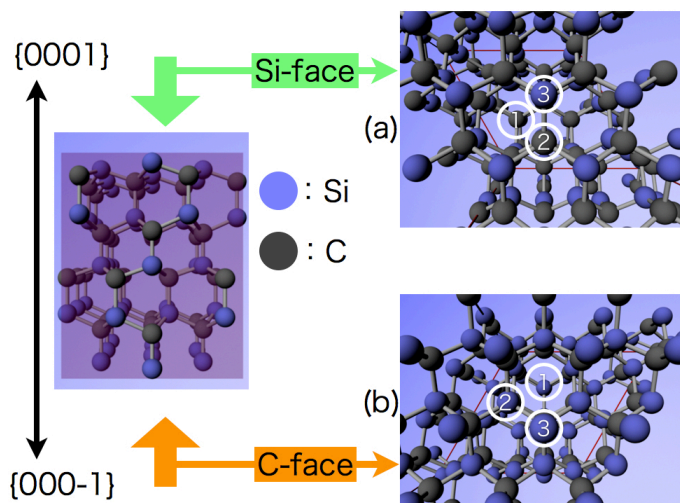


図 5: 4H-SiC の (a) Si-face (b) C-face における C 原子の吸着位置.

結果 図 6 は Si-face, C-face における C 原子が拡散する際の活性化エネルギーの模式図である．ここでは，両面においてもサイト 3 はエネルギーレベルが高く，C 原子は $2 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 1$ のようにサイト 3 を通らずに，拡散すると予想される．また Si-face および C-face 共に，拡散経路における活性化エネルギーは小さく，高速に拡散する事が期待される．特に，C-face 側ではエネルギーバリアがほとんどなく，さらに等価な拡散経路が多数存在するため，高速な拡散が期待でき，表面に付着した原子は即座にキンクに運ばれると予想できる．

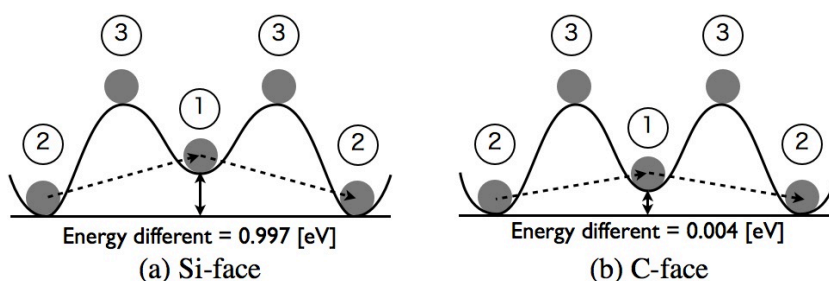


図 6: (a)Si-face (b)C-face での C 原子の活性化エネルギーの模式図.