

二次元核形成理論を用いた SiC 昇華法成長における多形安定性の非定常解析 Unsteady thermodynamic analysis of the polytype stability in PVT growth of SiC using 2D nucleation theory

九大院工¹, 九大応力研², 産総研³

○荒木清道¹, 高 冰², 中野 智², 西澤 伸一³, 柿本 浩一^{1,2}

Kyushu Univ.¹, RIAM, Kyushu Univ.², AIST³,

°Seido Araki¹, Satoshi Nakano², Bing Gao², Shin-ichi Nishizawa³, Koichi Kakimoto^{1,2}

E-mail: seido.araki@riam.kyushu-u.ac.jp

はじめに: 次世代パワーデバイス用材料として注目される SiC には多数の結晶多形が存在する。同一結晶中に複数の多形が混在することによる材料性能の劣化が問題視されており、所望の多形の分離成長技術が要求されている。本研究では、二次元核形成理論を用いた熱力学的解析により、SiC 昇華法成長の核形成過程において発生する結晶多形の成長条件依存性を調べた。

計算方法: SiC 昇華法における総合伝熱解析法^[1]を用いて、結晶成長炉内の温度分布及び、化学種 Si, SiC₂, Si₂C の分圧分布を計算した。基板上の各成分の分圧と基板温度により決定される平衡圧力から過飽和度を算出し、式(1)で表わされる二次元核形成理論^[2,3]を用いて 4H, 6H, 3C の結晶多形に対する二次元核形成エネルギーを算出した。

$$\Delta G_2^* = \sigma_i^2 b^4 / [\Delta\mu - \sqrt{3}/2b^2 (\sigma_i + \sigma_i - \sigma_s)] \quad (1)$$

ここで、 b は格子定数、 σ_i , σ_i , σ_s はそれぞれ二次元核の表面エネルギー、二次元核と基板の界面エネルギー、基板の表面エネルギーであり、 $\Delta\mu$ は相変化による化学ポテンシャル変化である。

結果: Fig.1 は成長温度 2400 K, 成長圧力 317 Pa で成長基板を 6H-SiC の C 面上とした場合の各多形における核形成エネルギーを表している。全体として 4H-SiC の核形成エネルギーが最も小さいため 4H が最安定多形である。また、3C-SiC は負の核形成エネルギーとなっていたため、核形成しないと言える。さらに、結晶の中心付近では 4H と 6H で核形成エネルギーの差が小さく、端に向けて次第に大きくなっていき、成長初期から後期にかけても差が次第に大きくなっていく。このことから、多形混入が最も起こりやすいのは、図中の破線で囲んだ領域付近であるということが分かる。

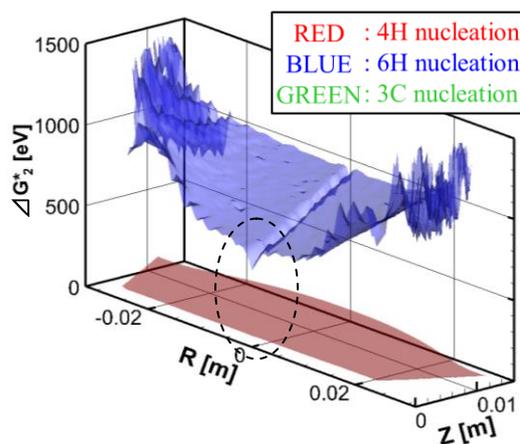


Fig.1 各多形の核形成エネルギー
(基板:6H C-face, 温度:2400K, 圧力 317 Pa)

[1] B. Gao, X.J. Chen, S. Nakano, S. Nishizawa, K. Kakimoto, J. Cryst. Growth, **312** (2010) 3349.

[2] K. Kakimoto, B. Gao, T. Shiramomo, S. Nakano, S. Nishizawa, J. Cryst. Growth, **324** (2011) 78.

[3] I. Markov, R. Kaischew, Kristall und Technik, **11** (1976) 685.