SiC 溶液法における溶媒への金属添加による炭素溶解度変化の熱力学計算

Thermodynamic calculation of change in carbon solubility for various kinds of solvent for SiC solution growth

○畑佐 豪記[1]、原田 俊太[1]、田川 美穂[1]、村山 健太[1]、加藤 智久[2]、宇治原 徹[1]
([1]名大、[2]産総研)

°Goki Hatasa[1], Shunta Harada[1], Takenobu Sakai[1], Miho Tagawa[1], Kenta Murayama[1], Tomohisa Kato[2], Toru Ujihara[1] ([1]Nagoya Univ., [2]AIST)

E-mail: hatasa@sic.numse.nagoya-u.ac.jp

[背景] SiC パワーデバイスの信頼性向上においては、SiC 結晶の高品質化が極めて重要である。我々は、高品質結晶の実現に向けて、溶液法による SiC 結晶成長技術の確立に取り組んでいる。SiC 溶液法では、炭素溶解度を増加させ、結晶成長速度を上昇させるために、溶媒への Cr や Ti など金属元素の添加がしばしば行われている[1,2]。これらの金属元素は、バルク結晶中に取り込まれることが報告されており、デバイス製造プロセスの汚染等が懸念されている。本研究では結晶への不純物取り込みが少なく、かつ炭素溶解度を増加させる新たな元素の探索をするために、CALPHAD 法により種々の溶媒の炭素溶解度を計算した。

[計算方法] Bragg-Williams-Gorsky モデルに基づく正則溶体モデルにより、報告されている相互作用パラメータを用いて、Si-X (X = Cr, Ti, Fe, Al, W, Mo, Y) 溶媒の Gibbs 自由エネルギーを計算した。溶媒と SiC の熱力学平衡を考え、Si-X 溶媒の炭素溶解度を計算した。

[結果と考察] Figure 1.に Si-X 溶媒の 2073 K における炭素溶解度の組成 x（Si_{1-x}-X_x）依存性の計算結果を示す。SiC が初晶として析出すると考えられる組成において計算を行った。Cr や Ti は、炭素溶解度を大きく増加させる添加元素であり、Cr の場合 $x > 0.4$ の組成において、炭素溶解度は純 Si 溶媒と比べて 5 倍以上となる。Mo は Cr に匹敵する炭素溶解度の増加が期待できるが、SiC 以外の高融点の化合物を形成するため、添加量を増加させることができない。これに対して、Y は Cr 以上の炭素溶解度を有し、$Si_{0.7}$-$Y_{0.3}$ 溶媒では、バルク成長で用いられている $Si_{0.6}$-$Cr_{0.4}$ 溶媒[1]を上回る炭素溶解度となることが明らかとなった。また Y は Ti や Cr よりも不純物として取り込まれにくいことが明らかとなっており[3]、不純物取り込みの抑制と成長速度の上昇を両立できる可能性が示唆された。

[謝辞] 本研究は、総合科学技術・イノベーション会議の SIP（戦略的イノベーション創造プログラム）「次世代パワーエレクトロニクス／SiC 次世代パワーエレクトロニクス の統合的研究開発」（管理法人：NEDO）によって実施されました。

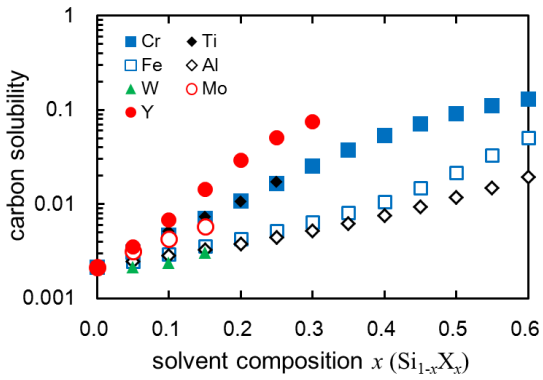

Figure 1. Calculated carbon solubility for various solvents with the different compositions.

[参考文献]

[1] T. Mitani, et al., J. Cryst. Growth, 401 (2014) 681.
[2] K. Danno, et al., Mater. Sci. Forum, 645-648 (2010) 13.
[3] 原田俊太ら、先進パワー半導体分科会第 2 回講演会　講演予稿集 60-61 (2015).

© 2016年 応用物理学会