

## SiC ガス成長における気相反応と表面再構成構造の予測

Prediction of vapor phase reactions and surface reconstruction structures in the CVD process of SiC

°長川 健太<sup>1</sup>, 寒川 義裕<sup>2,4</sup> 牧野 英美<sup>3</sup>, 細川 徳一<sup>3</sup>, 恩田 正一<sup>4</sup>, 白石 賢二<sup>4,1</sup>Graduate School of Engineering, Nagoya Univ.<sup>1</sup>, Research Institute for Applied Mechanics, Kyushu Univ.<sup>2</sup>, DENSO CORP.<sup>3</sup>, IMASS, Nagoya Univ.<sup>4</sup>°Kenta Chokawa<sup>1</sup>, Yoshihiro Kangawa<sup>2</sup>, Emi Makino<sup>3</sup>, Norikazu Hosokawa<sup>3</sup>, Shoichi Onda<sup>4</sup>, Kenji Shiraishi<sup>2,1</sup>

E-mail: chokawa@fluid.cse.nagoya-u.ac.jp

## 1. はじめに

SiC は高温・高電圧で使用できる高出力なパワーデバイスが実現できるため、大口径で高品質かつ高速なガス成長に期待がもたれている。2200～2500℃の高温で成長するガス成長法(HTCVD)は、実験による報告がなされているが[1]、理論計算による気相反応や表面反応の予測などはあまりなされていない。また SiC の表面再構成構造は多くの報告がなされているが、気相成長により形成される分子との関連性やガス成長時に現れる構造の議論などは少ない。そのため本研究では第一原理計算を用いて、SiC のガス成長における気相反応の解明、および表面再構成構造の決定を行う。

## 2. 計算手法と計算モデル

本研究では VASP コードを用いて第一原理計算を行った。またギブス自由エネルギーを用いた熱力学解析により気相分子の温度と分圧による影響を調べ[2]、気相反応前後のエネルギー差を計算することで、得られる分子構造の予測を行った。また、SiC(000-1)表面を有する SiC スラブモデルを作成し、得られた分子により形成される表面再構成構造を予測した。表面再構成構造の形成により得られる、単位面積あたりのエネルギー利得を比較することで、最安定な再構成構造を決定する。

## 3. 結果

原料として SiH<sub>4</sub> ガスおよび C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> ガス、およびキャリアガスとして H<sub>2</sub> ガスを想定し、それぞ

れの分圧を 0.1 atm, 0.1 atm, 1.0 atm とした。まず SiH<sub>4</sub> ガスが Si, Si<sub>2</sub>, Si<sub>3</sub>, Si<sub>4</sub> へと分解する反応について考察を行った結果 2500K を超える高温領域では Si 原子へと分解する反応が最も大きなエネルギー利得が発生することが分かった。また、C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> ガスの CH<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> への分解反応について計算した結果、C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> ガスへの分解が最も大きなエネルギー利得が発生することが分かった。さらに、高温において Si と C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> が反応し SiC<sub>2</sub> ガスが形成されることが分かった。以上の結果より、ガス成長に寄与する分子は Si, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, SiC<sub>2</sub> である事が明らかになった。また、ガス成長中に現れる再構成表面は(2x2)Si 再構成構造が現れる事が明らかになった。

## Reference

- [1] Y. Tokuda, et al., J. Cryst. Growth, **448**, 29 (2016).  
[2] Y. Kangawa et al., Surf. Sci. **493**, 178 (2001).

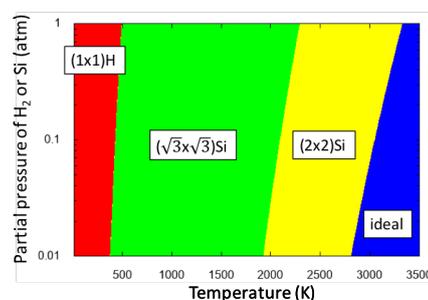


Fig. 1. Temperature and partial pressure dependence of reconstruction structure of SiC(000 $\bar{1}$ ) surface.