

エピタキシャル成長におけるシリコン多形の結晶成長の可能性

Probability of epitaxial growth of silicon polytypes

¹北 玲男, ¹豊田 雅之, ¹斎藤 晋

¹Reo Kita, ¹Masayuki Toyoda, ¹Susumu Saito

¹Department of Physics, Tokyo Institute of technology

Email: kita@stat.phys.titech.ac.jp

sp^3 混成軌道をとる元素からなる結晶は様々な多形を持ち得ることが知られている。例えば、SiC では $2H$, $3C$, $4H$, $6H$ などの結晶多形が存在し、C では隕石中からダイヤモンドとともに $2H$ 構造を持つ結晶が実際に発見された[1]。Si でも 1963 年に高温高压下で $3C$ 構造の Si が $2H$ 構造に転移したという報告がある[2]。また、2018 年には $2H$ 構造よりもより安定であると予言されていた $4H$ 構造の Si が得られたという報告がなされた[3]。本研究では六方晶の a 軸方向のみに圧縮させた場合に、結晶多形間のエネルギー安定性の逆転が起こる格子定数の範囲を密度汎関数法、密度汎関数摂動法によるエネルギー計算により調べた。

格子定数 a が $3.75 \text{ \AA}$ のとき、600K 以上で $4H$ の自由エネルギーが $3C$ (実際には $3H$)よりも小さくなり格子定数 a が $3.7 \text{ \AA}$ のときは常に $4H$ が $2H$ よりも自由エネルギーが小さくなるという結果が得られた。さらに格子定数が $3.65 \text{ \AA}$ のとき、 $2H$ と $3H$ の自由エネルギーの逆転が見られたが、これらの格子定数のもとで $2H$ と $4H$ の自由エネルギーの逆転は見られなかった。以上の結果から格子定数 a だけを小さくするように基板に応力を加えることが可能であれば、Si のエピタキシャル成長において $2H$ 、 $4H$ のような結晶多形を成長できる可能性があることが分かった。

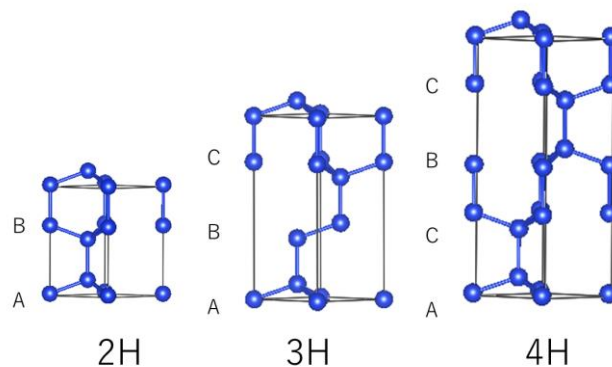


FIG. Structure of Silicon Polytypes

- [1] C.Frondel and U.B.Marvin, Nature (1967) **214**, 587
- [2] R.H.Wentorf Jr. and J.S.Kasper : Science (1963) **139**, 338.
- [3] S.Pandolf, C.Renero-Lecuna, Y.L.Godec, B.Baptiste, N.Menguy, M.Lazzeri, C.Gervais, K.Spector, W.A.Crichton, and O.O.Kurakevych : Nano lett. (2018) **18**, 9