

ホモエピタキシャル成長によるシリコン多形の結晶成長の可能性 -自由エネルギーによる評価-

Possibilities of Growth of Si Polytypes by Homoepitaxial Growth: Evaluation by the Free Energy

東工大理¹ °北 玲男¹, 豊田 雅之¹, 斎藤 晋¹

Tokyo. Inst. Tech¹, °Reo Kita¹, Masayuki Toyoda¹, Susumu Saito¹

E-mail: kita@stat.phys.titech.ac.jp

Si は半導体に用いられる最も重要な元素のひとつである。Si と同様に sp^3 混成軌道を取る原子からなる結晶は様々な結晶多形をとりうるということが知られている。例えば、炭素では自然界で 2H と呼ばれる構造をもつ結晶が実際に発見され [1]、SiC は非常に多くの結晶多形の存在が報告されている[2]。実は Si についても、以前、高温高压下において 2H 構造をもつ Si の存在が確認されたという報告[3]がなされたが、最近、4H 相合成の報告[4]もなされた。これらの Si の結晶多形においてはバンドギャップ値を含め、多形ごとに異なる性質を持つことが予言されており、その合成は興味深い課題である。多くの物質においては a 、 b 軸方向に圧縮した時、 c 軸方向の結合距離は大きくなるため、Si でもこの時、 c 軸方向の結合距離がより長い 2H 相、4H 相が安定な相となることが期待される。我々は、Si のホモエピタキシャル CVD 成長を想定し、基盤を 2 軸性圧力で加圧することで、3C(3H) 以外の結晶相成長の可能性を探っている。本研究では密度汎関数法および密度汎関数摂動法を用いて、Si の結晶多形である 2H、3H(3C)、4H 構造の各結晶構造について 2 軸性の加圧によるエネルギー安定性の比較を行った。最初に、各構造について格子定数 a ごとに全エネルギーが最小となるように格子定数 c の値も含めて構造最適化を行った。さらに格子振動の効果も含めた自由エネルギーを格子定数 a の関数として求めた(図 1)。その結果、 a 軸方向に 1~2% 圧縮(6~10 GPa)すると 4H が 3H よりも安定となる温度が存在し、 a 軸方向に 5% 圧縮(15~20 GPa)したとき、2H が 3H よりも安定となる温度が存在した。さらに、6~7% 圧縮(約 22 GPa)すると、高温下において 2H 相と 4H 相のエネルギー安定性がほぼ同じになることが分かった。以上の結果から、実際に 2 軸性の圧力を加えることができれば、結晶多形の合成の可能性があることが分かった。

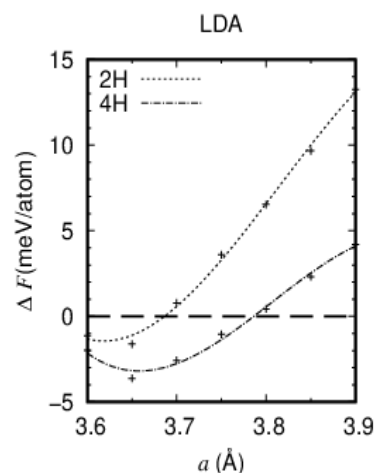


Fig.1 Free energies of 2H and 4H relative to 3H at 1300K.

- [1] C.Frondel and U.B.Marvin: Nature **214**, 587 (1967)
- [2] P. T. B. Shaffer: Acta Cryst. B **25**, 477 (1968)
- [3] R.H.Wentorf Jr. and J.S.Kasper : Science **139**, 338 (1963)
- [4] S. Pandolf et al.: Nono Letters **18**, 9 (2018)