

HCl 環境下での SiC CVD 成長における気相反応と表面構造の予測

Prediction of gas reactions and surface structures under the CVD process of SiC with HCl gas

°長川 健太¹, 醍醐 佳明², 水島 一郎^{2,3}, 依田 孝^{2,3}, 白石 賢二¹

名古屋大未来研¹, ニューフレアテクノロジー², 東工大未来研³

°K. Chokawa¹, Y. Daigo², I. Mizushima^{2,3}, T. Yoda^{2,3}, K. Shiraishi¹

IMaSS, Nagoya Univ.¹, NuFlare Technology², FIRST, Tokyo Institute of Technology³

E-mail: chokawa@nagoya.ac.jp

1. はじめに

SiC パワーデバイスの更なる普及には、より大口径で高品質かつ高速な CVD 成長の実現が重要な課題の 1 つとなっている。以前の研究では SiC の高温 CVD 結晶成長中 (ソースガス: $C_3H_8 + SiH_4 + H_2 + N_2$) の気相反応や表面反応の予測を行った。 C_3H_8 ガスは高温では C_2H_2 ガスへ、 SiH_4 ガスは低温では Si クラスタとなり温度が上昇すると分解し、また(0001)表面は Si 終端構造が安定となることを明らかにした[1,2]。

約 1500~1800°C で行う SiC の CVD 成長では上記のソースガスに HCl ガスを添加し成長速度を向上させている。このようなガス条件下で、気相反応により形成される分子や SiC 表面構造は異なったものになると考えられる。そのため本研究では第一原理計算を用いて、SiC の HCl 環境下での CVD 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

基底状態での構造および全エネルギーを求めるために VASP コードを用いて第一原理計算を行った[3]。また気相に存在する分子のケミカルポテンシャルの温度と分圧による影響を考慮するために、ギブス自由エネルギーを用いた熱力学解析を行った[4]。平衡定数と分圧の関係式について連立方程式をたて、これを解くことで各温度における各分子の平衡分圧を決定する。また、(2×2),

(3×3)表面を有する 4H-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。

3. 結果

本研究では流入ガス条件を(1)全圧を 1atm, (2) $P_{SiH_4} / P_{C_3H_8} = 3.0$, (3) $P_{H_2} / P_{SiH_4} = 50.0$, (4) $P_{HCl} / P_{SiH_4} = 10.0$, (5) $P_{N_2} = P_{C_3H_8}$ と、28 種の分子を含む 23 個の反応式を仮定して拘束条件下で方程式を解き、平衡分圧を決定した。その結果、実験温度(1500~1800°C)では流入ガスは $SiCl_2, CH_4$ または C_2H_2 へと分解することが明らかになった。以前の HCl がいない場合の結果との比較により、HCl 添加の気相反応への効果は Si クラスタを分解させることだと考えられる。高温 CVD 成長の特徴としても、高温での Si クラスタの分解が見られており、高速成長には Si クラスタの分解が重要になると考えられる。

当日の講演では HCl 添加による CVD 成長中の表面構造への影響についても数値計算により明らかにし、結晶成長機構との関わりについて議論する。

References

- [1] K. Chokawa et al., 2018 春季応用物理学会
- [2] K. Chokawa et al., JJAP. **58**, 115501 (2019).
- [3] G. Kresse et al., Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).
- [4] Y. Kangawa et al., Surf. Sci. **493**, 178 (2001).