第一原理計算による SiC 表面のステップモフォロジーの検討

Step morphology on SiC surfaces clarified by first-principles calculations

名大未来研 [1]，クロスアビリティ [2]　°制野 かおり [1,2]，押山 淳 [1]

Nagoya Univ. [1], X-Ability Co., Ltd. [2], °Kaori Seino[1,2], Atsushi Oshiyama[1]

E-mail: seino@ccs.engg.nagoya-u.ac.jp

SiC{0001}面は SiC のエピタキシャル成長で一般に用いられている面である。オフ角度を持つ(0001)Si 面ではオフ方向に依存してステップモフォロジーが異なる。オフ方向が$\langle 1\bar{1}00\rangle$である場合は直線状に伸びるステップが観察されている一方で、オフ方向が$\langle 11\bar{2}0\rangle$である場合はジグザグ状のステップが観察されている [1]。この表面のステップモフォロジーの違いはエネルギー論から理解が可能ではあるが、実際にはまだ示されていない。

エネルギー論からのステップモフォロジーの理解においては、ステップの微視的な構造の理解が必要になる。そのため、本研究では、SiC のステップ形成エネルギーを計算するために大規模計算に効率的な実空間シミュレーション法 [2] を取り入れた第一原理計算を行なった [3]。本計算は Si 面に焦点を絞り、ステップ構造として単 Si-C 層の高さのステップを用い、SiC の多彩な結晶多形においては 3C-SiC を用いた。3C-SiC は閃亜鉛鉱構造であるので、Si 面の表面は 3C-SiC(111)と表記される。ステップ形成エネルギーを計算するにあたり、ステップの微視的な構造を決定した。オフ方向が$\langle 1\bar{1}00\rangle$の基板でステップが直線状に伸びる理由は、直線状のステップのステップ形成エネルギーがオフ方向が$\langle 11\bar{2}0\rangle$である場合よりもオフ方向が$\langle 1\bar{1}00\rangle$である場合の方が低いためである。オフ方向が$\langle 11\bar{2}0\rangle$である場合はジグザグ状のステップが直線状のステップよりもステップ形成エネルギーが低いため、オフ方向が$\langle 11\bar{2}0\rangle$の基板ではジグザグ状のステップが形成される。直線状のステップでは、テラスの上段と下段の Si 原子同士の結合によりステップ構造が安定化される。図 1 に示すジグザグ状に伸びる表面ステップ構造は、ステップ形成エネルギーの低い直線状のステップの組み合わせにより構成される。

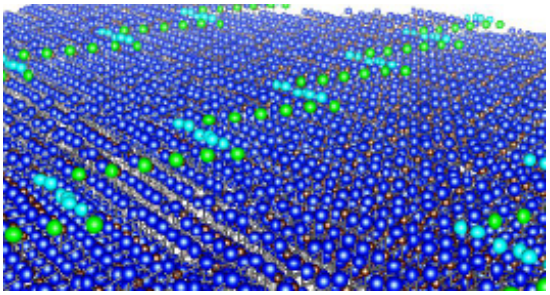

Figure 1: Perspective view of the calculated meandering step structures on the $\langle 11\bar{2}0\rangle$ vicinal surface. Green and blue balls represent the step edge atoms.

[1] T. Ueda, H. Nishino, and H. Matsunami, J. Cryst. Growth **104**, 695 (1990).
[2] J.-I. Iwata *et al.*, J. Comput. Phys. **229**, 2339 (2010).
[3] K. Seino and A. Oshiyama, Appl. Phys. Exp. **13**, 015506 (2020).

© 2020年 応用物理学会