

HCl を用いた SiC CVD 成長におけるステップ端の水素被覆の理論研究

Study of Adsorption of H on Stepped SiC Surface during CVD using HCl

○名大院工¹, 名大未来研²

○(M1)木村 友哉¹, 長川 健太², 押山 淳², 白石 賢二^{2,1}

Graduate School of Eng., Nagoya Univ.¹, IMaSS, Nagoya Univ.²

Tomoya Kimura¹, Kenta Chokawa², Atsushi Oshiyama², and Kenji Shiraiishi^{2,1}

E-mail: kimura.tomoya@d.mbox.nagoya-u.ac.jp

次世代パワー半導体である炭化ケイ素(SiC)は、すでに一部のパワーデバイスで実用化されており、更なる高性能化が期待されている。SiCのエピタキシャル成長には、主に化学気相成長法(CVD)が用いられており、Si原料にはSiH₄、C原料にはC₃H₈が使用される。また、添加ガスにHClを導入することで、結晶の高速成長や高品質化を試みる研究も行われている(HCVD)。最近、HCVD法における気相中の反応が研究され、成長温度である1600°C付近ではC₂H₂やSiCl₂が多く存在していることが明らかになった[1]。さらに、HCVD環境下では、SiC(0001)表面は水素で覆われており、Siの表面吸着は発生しないことが判明した[1]。また、SiC(0001)表面に現れるステップ端構造に関する研究が行われ、その安定構造が明らかにされた[2]。しかし、HCVD環境下におけるステップ端の構造は明らかになっていない。原子スケールでのSiC成長メカニズムを明らかにするためには、ステップ端構造に対する理解が必要不可欠である。そこで本研究では、水素の被覆に焦点を絞り、第一原理計算を用いて、SiC(0001)表面に現れるステップ端の水素終端構造を調べた。

SiC(0001)表面に現れるステップ構造は結晶基板の傾斜方向によって変化する[2]。本研究では、結晶基板が<1120>方向に傾斜した際に現れるステップ構造(SCステップ)を研究対象とする。まず、SCステップで考えられる水素終端構造を網羅的に挙げ、それぞれに対して構造最適化を試みた。そして形成エネルギーを計算した結果、試みた構造は4種類の水素終端構造に収束することが判明した(Fig.1)。次に、理想気体モデル近似を用いて、4種類の構造の水素被覆率を計算し、その温度依存性を調べた。計算結果をFig.2に示す。成長温度の1600°C付近では、Si端に水素を1つ付けた構造(②)が最も大きな被覆率(約30%)となった。ただし、この水素被覆率は、SiC(0001)表面の水素被覆率よりも小さい値であった。この結果より、SiC(0001)表面よりもステップ端の方が高い反応性を持っており、そのため、HCVD環境下では気相中に存在する分子の取り込みが促進されると考えられる。

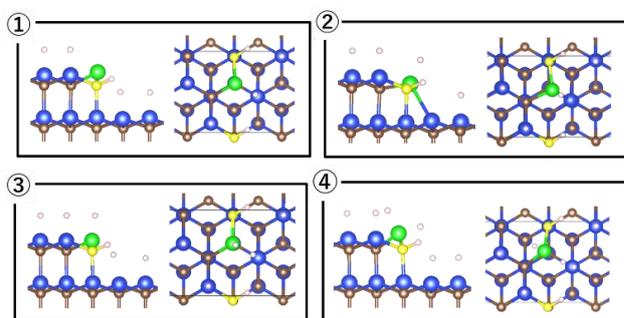


Fig.1: The structures of SC step covered with H. Blue, brown, green, yellow, and pink spheres represent Si atoms, C atoms, Si edge atoms, C edge atoms, and H atoms, respectively.

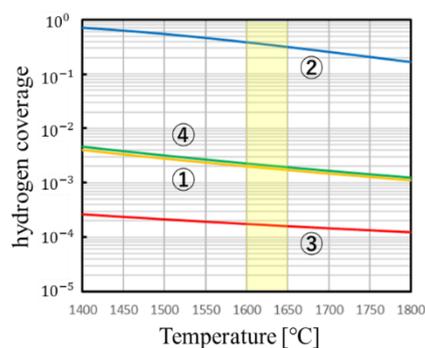


Fig.2: Hydrogen coverage of each structures of SC step covered with H as a function of the temperature.

Reference

[1]長川健太他, 2020 春季応用物理学会, [2] K. Seino, et al., Appl. Phys. Express **13**, 015506 (2020)