

SiC(0001)表面のステップ端の微視的な構造の解明

Atomic structure of steps on vicinal SiC(0001) surfaces

名大未来研¹, イエナ大物理² ○(P)制野 かおり^{1,2}, 押山 淳¹

Nagoya Univ.¹, Jena Univ.², °Kaori Seino^{1,2}, Atsushi Oshiyama¹

E-mail: seino@comp.mp.pse.nagoya-u.ac.jp

電力損失を大幅に減少できるパワー半導体の SiC は、Si パワー半導体に置き換わる次世代パワー半導体として期待がなされており、実用化も始まっている。しかし、デバイス性能は理論値に達していなく、高品質の結晶の成長が必要とされる。結晶成長、とりわけエピタキシャル成長の理解において、基礎的な表面物性の理解は重要となってくる。そして、原子レベルでの表面構造を理解するにあたり、量子力学に基づく描像は正しい理解において必要であり、理論的研究、とりわけ密度汎関数法によるアプローチは有効な手段となる。

表面科学においても Si 表面に関する研究は多くなされているものの、SiC 表面に関してはそれほど多くはない。そして、表面上のステップは、結晶成長の理解をする上で欠かすことのできない構造の構成要素である。SiC 表面においてさまざまな面方位が考えられるが、SiC(0001)表面は結晶成長面として重要な表面である。密度汎関数法の計算によりステップのない SiC(0001)表面の微視的な構造の研究はなされているものの [1, 2]、ステップが加わることで、計算の規模が大きくなり、微視的な構造も複雑になる。そこで、我々は密度汎関数法を用いて SiC(0001)表面のステップ端の微視的な構造の解明を行なった。

SiC(0001)表面にはさまざまな段差のステップが存在するが、ここでは Si-C bilayer の 1 段差のステップを取り扱う。SiC(0001)表面では、 $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ と $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ の 2 つのオフ方向のステップを考えることが可能である。本研究では、 $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ 方向および $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 方向に対し、ステップ端の原子の種類 (Si 原子 and/or C 原子) とそのダングリングボンドの数が異なるいくつかの直線状のステップの微視的な構造モデルを考えた。そして、各々の構造モデルの安定構造を決定し、ステップ形成エネルギーを比較し安定性を議論した [3, 4]。直線状のステップの安定性の解釈から、SiC(0001)表面の結晶成長中のモフォロジーを説明することができる。さらに、エピタキシャル成長では、表面での原子拡散についての知見も重要となってくる。最も安定なステップ構造におけるステップ端での表面吸着原子の拡散についても検討をした [5]。

[1] M. Sabisch, P. Krüger, and J. Pollmann, Phys. Rev. B **55**, 10561 (1997).

[2] F. Bechstedt and J. Furthmüller, J. Phys.: Condens. Matter **16**, S1721 (2004).

[3] K. Seino and A. Oshiyama, Appl. Phys. Exp. **13**, 015506 (2020).

[4] K. Seino and A. Oshiyama, Phys. Rev. B **101**, 195307 (2020).

[5] K. Seino and A. Oshiyama, Appl. Surf. Sci. **561**, 149927 (2021).