

1 P130

量子化学に基づくⅢ族化合物の SiC(100)面への吸着過程の研究

(横浜国大院工) 佐藤浩太 ○戸島 玲

1. 緒言

現在、革新的な物性向上が困難であるとされている Si に代わる半導体素子として注目されている。SiC は積層順序の組み合わせにより様々な多形を持つ。中でも 3C-SiC は、SiC の多形の中で結晶内における電子の走行速度が最も高く、従来研究が進んでいる Si に類似した結晶構造(立方晶)を持つため、高速、高効率、微細化に適した素材であると考えられる。また、基板としても Si とは格子定数が異なり、耐熱性も高いという特徴を持つ。

当研究室で行っていた Si 表面上への BP 薄膜の成長において Si の代わりに SiC を用いることで格子不整合を抑えることも出来ることがわかっている。そこで本研究ではパワーデバイスとしての活躍が期待される SiC について量子化学に基づく表面への化合物の吸着過程の研究からその特性を調べる。

2. 方法

本研究の量子化学計算には Gaussian03、近似法には B3LYP 法、基底関数には 6-31G*を用いた。まず、SiC の表面原子を Si、C としてそれぞれのクラスターを構造最適化した。ジボランの近づけ方には様々あるが、B₂H₆ 分子が動くように設計し、B₂H₆ 分子をクラスター表面に対し平行、垂直にして近づけることで初期構造を決定した。Si 表面の SiC、C 表面の SiC それぞれの基板として図 1.2 のクラスターを用いた。また、初期構造を図 3 に示した。

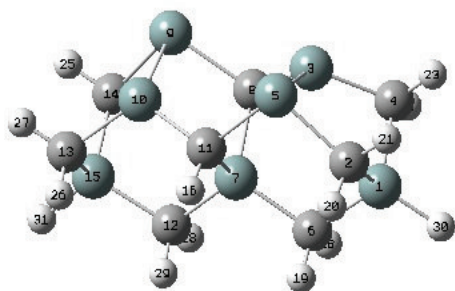


図 1. Si-SiC クラスター

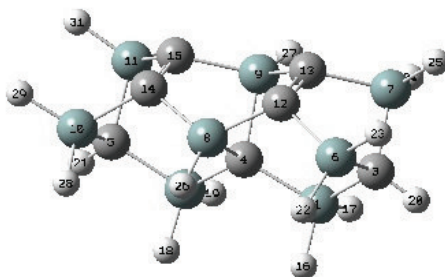


図 2. C-SiC クラスター

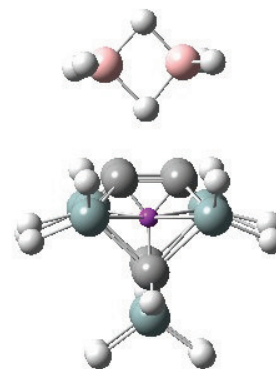


図 3. クラスターと吸着種

次に吸着種として BCl₃、AlCl₃ を用い、その表面での反応を調査した。この研究では Si,C 表面での 3 族化合物の吸着をドーパントとなる B のソースになり得る BCl₃、AlCl₃ について比較検討し研究を進めていった。

こちらのモデルではクラスター内にダミー原子を用い、吸着種との距離を固定した。エネルギー曲面を求められるように吸着種を表面へ徐々に近づけ繰り返し計算を行った。その際、計算コストの低減のために SiC の第一層目以外を固定し計算を行った。

3.結果と考察

クラスターを構造最適化した結果、Si-SiCはシリコン(001)面と似た非対称のダイマーを形成した。またダングリングボンドがHOMO、LUMOを形成しており、ダイマーの外側に変位しているSiのダングリングボンドがHOMO、内側に変位しているSiのダングリングボンドがLUMOとなっている。

・ジボランの吸着

本研究室のSiC表面へのPH₃の吸着過程の研究による結果ではSi-SiC表面がC-SiC表面より反応性が高く、安定化エネルギーも大きかった。しかし、表1に示したようにB₂H₆の場合Si-SiC表面よりC-SiC表面の方の反応性が高くなり、異なる結果が得られた。その大きな理由としては、Si表面と

表1. ジボランの吸着によるエネルギーの変化

	ΔE [kcal/mol]
Si-SiC(平行)	-35.539
Si-SiC(垂直)	-48.227
C-SiC(垂直)	-53.424

C表面での電荷密度の違いがあげられる。電子不足化合物であるB₂H₆は大きく負に帯電しているC-SiC表面において安定化が大きくなり、対照的に非共有電子対を持つPH₃は大きく正に帯電しているSi-SiC表面において安定化エネルギーが大きくなっていることが考えられる。細かく見ると、Si表面のHOMOのダングリングボンド側とジボランが近づいていきジボランの3中心2電子結合を崩して、BH₂、BH₄に別れて結合した。C表面では水素の解離吸着が起こった。このようにSi表面、C表面ではそれぞれ振る舞いが大きく異なる。

・AlCl₃の吸着

図4のグラフはC表面のSiCへAlCl₃を近づけたエネルギーの変化を固定した2層目との距離に対して示したものである。この結果からはAlCl₃はB₂H₆ほどではないがC表面上で安定するが表面構造を大きく変化させることはなかった。最もエネルギーの低かった二層目との距離が3.5Åの構造を図5に示す。この距離では三つのAl-Cl結合は2.08Åから2.11Åと離れ、表面のダイマー間の二重結合も弱まっている。また、AlCl₃からC表面へ電荷が強く引き寄せられていることも分かった。

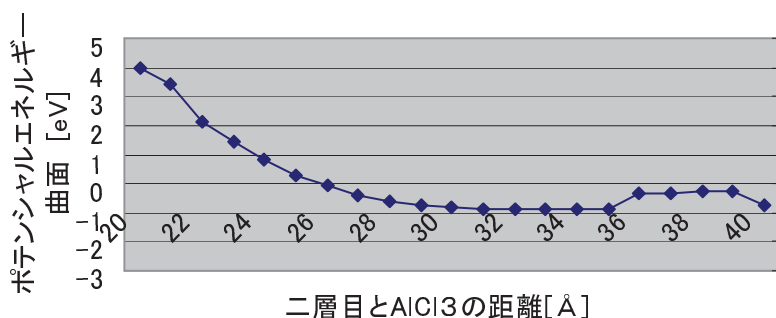


図4. C-SiへのAlCl₃の吸着

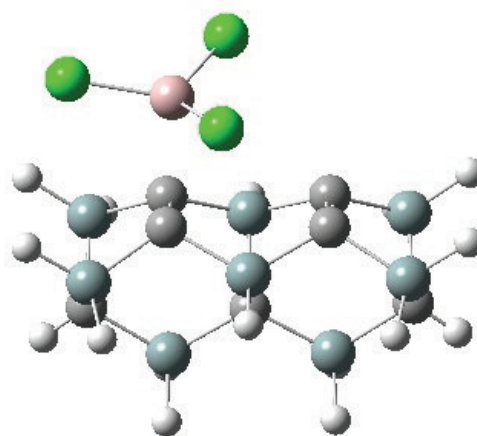


図5. C-SiC+AlCl₃の安定構造