

SiC(0001)微斜面のステップバンチングとナノファセット形成の第一原理的研究
First-Principles Study on Step Bunching and Nanofacet Formation on SiC(0001) vicinal Surfaces

澤田啓介、岩田潤一、押山淳

K. Sawada, J. -I. Iwata, and A. Oshiyama

東京大学工学系研究科物理工学専攻

Department of Applied Physics, The University of Tokyo, Hongo Tokyo 113-8656

固体のエピタキシャル成長中、自己組織化される表面ナノ構造は興味深い物性を示し、ナノデバイスのテンプレートとして用いられる[1]。特に、表面上に高い Miller 指数をもつ小さな面(ナノファセット)は典型的な表面ナノ構造であり、金属、半導体を含む固体微斜面上で頻繁に形成され、その形成メカニズムは主に古典的な弾性理論や表面ステップの運動の現象論によって議論されている。しかしながら、微細化の進むナノデバイス応用を考える上で、表面ナノ構造の形成は制御可能にすることが望ましく、古典的描像や現象論だけでなく、電子状態に基づいて原子レベルにおいてファセット化を詳しく調べる事が必要不可欠である。

次世代パワーデバイスとして応用が期待されている SiC のエピタキシャル成長中に、(0001)面から $[11\bar{2}n]$ 方向にわずかに傾いた微斜面において、ナノファセットが周期的に形成される事が報告されている[2, 3]。また STM の観測によって、そのナノファセットは原子ステップがバンチングを起こして形成しており、そのファセットの高さが SiC バルク構造のユニットセルの高さの整数倍または半整数倍に量子化されていることが明らかとなっている[2-4]。

本発表では、密度汎関数理論に基づく第一原理電子構造計算によって 4H-SiC(0001) 表面の原子ステップ構造を同定し、ナノファセットの形成メカニズムを明らかにする。ナノファセットが単一の SiC 二層の高さを持つステップで形成されている事、ステップがバンチングしてファセットを形成する方が、ファセットの無いならかな微斜面よりも、エネルギー的に安定である事を示す。また、SiC(0001)表面のファセット化のメカニズムは、積層順序の異なる SiC(0001)表面間のエネルギーを比較する事によって説明できる事を示す。

[1] J. Stangl, V. Holy', and G. Bauer, Rev. Mod. Phys. **76**, 725 (2004).

[2] H. Nakagawa, S. Tanaka, and I. Suemune, Phys. Rev. Lett. **91**, 226107 (2003).

[3] M. Fujii and S. Tanaka, Phys. Rev. Lett. **99**, 016102 (2007).

[4] K. Arima, H. Hara, J. Murata, T. Ishida, R. Okamoto, K. Yagi, Y. Sano, H. Mimura, and K. Yamauchi, Appl. Phys. Lett. **90**, 202106 (2007).