

SiCの結晶表面における 第一原理計算

情報科学科 西谷研究室 4718 寺井 健太

平成20年2月21日

概要

SiCはすぐれた物理的，化学的特徴を有することからSiに代わる次世代パワーエレクトロニクス半導体材料として，近年注目されている．現在，使用されているSi半導体に比べると高耐圧，低損失であり，さらに熱伝導率が高いことが知られている．そして，Siの3倍のバンドギャップを持ち，また融点が高いことから高温状態でも動作が可能である．

このSiCのバルク成長には昇華法，いわゆる気相成長法が主に使用されている．しかし，Si中の炭素溶解度が極めて低いため，その成長速度の遅さを理由として，原理的に高品質な結晶を作成することが可能な液相成長の開発が困難と考えられてきた．

ところが，関西学院大学の金子教授らによって高品質SiCの単結晶を製作する全く新しい原理に基づいた成長手法が，発明された．これは液相成長法である準安定溶媒エピタキシー（Metastable Solvent Epitaxy）と呼ばれている．MSEは全く新しい成長法であり，その成長機構に関しては不明な点が多い．表面エネルギーがどのような値であるのか，またMSEにおいてSiC単結晶の結晶表面が原子レベルでどのような構造になっているのかは定かではない．

本研究では，MSEの結晶成長はSiCの面方位によって結晶成長や酸化速度が異なり，結晶成長の様相が違うことから，SiCの表面構造を作成し，その典型的な面を対象として，第一原理計算を用いて，3C,4H,6H-SiCの表面エネルギーを計算し，成長しやすい面の検討を行った．その結果，最も安定な4H-SiC(11-20)面と最も不安定な4H-SiCの(0001)面を用いると最も結晶成長しやすいという知見を得た．

次に，結晶成長の素過程である「放出」「拡散」「吸着」の「拡散」に注目した．表面拡散のとき結晶表面で原子はどのような経路を辿るのか検討した．Si面，Si修飾したC面でそれぞれ3点とり，C原子を付着させた時の第一原理計算を行い，その経路を導き出すことができた．

目次

第1章	序論	4
1.1	半導体炭化珪素の歴史	4
1.2	SiCの結晶多形	5
1.3	SiCの物性	5
1.4	単結晶SiCの面方位	9
1.5	表面エネルギー	13
1.6	準安定溶媒エピタキシー (MSE)	13
1.6.1	構造	15
1.6.2	状態図	15
1.6.3	モデル化	16
1.6.4	MSEプロセスにおける素過程	16
第2章	SiCの表面エネルギーの第一原理計算	19
2.1	表面エネルギーの計算のながれ	19
2.2	SiCの構造を作成	19
2.2.1	MedeAについて	19
2.2.2	ユニットセルの作成	20
2.2.3	スーパーセルの作成	22
2.2.4	スラブモデルの作成	24
2.3	平面波基底擬ポテンシャル法	29
2.3.1	計算ファイルの説明	29
2.4	表面エネルギーの計算	30
2.5	計算の確認	30
2.6	計算結果の考察	30
2.6.1	計算結果	30
2.6.2	MSEのメカニズム	30
2.6.3	考察	34

第 3 章	結晶表面での原子位置の第一原理計算	35
3.1	計算原理	35
3.2	真空-固体, 液体-固体の第一原理計算	35
3.3	計算のながれ	35
3.4	Si 面と C 面	36
3.5	計算手法	36
3.6	計算結果の考察	40
3.6.1	計算結果	40
3.6.2	考察	42
第 4 章	総括	45
付 録 A	MedeA によるスラブ構造の計算の使用法	49
A.1	セルの作成	49
A.1.1	モデルウィンドウを開く	49
A.1.2	対称性の設定	49
A.1.3	格子定数の設定	49
A.1.4	原子の入力	50
A.2	スーパーセルの構築	52
A.3	スラブモデルの構築	52
A.4	VASP の計算	52
A.4.1	計算設定	52
A.4.2	計算実行	53
A.4.3	計算結果	53
付 録 B	maple による表面エネルギーの計算	54

第1章 序論

1.1 半導体炭化珪素の歴史

半導体炭化珪素 (SiC) は, Si と C という地球上に多く存在する元素から構成されているにもかかわらず, 天然には隕石中にわずかに見出せるだけで, 大きな結晶塊は存在しない. しかし, 研究上では 19 世紀の初めにはその存在が知られており, 歴史的には最も古い化合物半導体の一つである.

SiC が半導体として研究されるようになったのは, 1955 年に昇華法 (Lery 法) [1] により高純度の SiC 単結晶が得られるようになってからである. しかし, レーリー法は自然核発生を利用する結晶成長技術であるために, 結晶の大きさは 10mm 角ほどで, 形も不揃いであったため, 工業的には適さなかった. また, Si 素子の驚異的な発展により, SiC 素子の研究開発は 1970 年代には下火になってしまった. しかし, 1981 年に Tairov らによって開発された改良レーリー法により大きな 6H-SiC 単結晶のインゴットが得られるようになる. 改良レーリー法は, 温度勾配を設けた成長系内を不活性ガスで満たすことにより原料の輸送過程を制御し, さらに種結晶を使うことにより結晶成長の各生成過程を制御することがバルク結晶成長法として大きなブレイクスルーとなった. 一方, エピタキシャル成長においては, 1987 年に (0001) Si 面から数度傾いた結晶面を用いることによりステップでの成長を促進させる「ステップ制御エピタキシー」が開発され, 成長ポリタイプの制御, 成長表面の平坦化と成長表面の低温化が達成された. これと同時期に米国のベンチャー企業から 6H-SiC ウエハの市販が始まり, 良質な基盤結晶とエピタキシャル膜が得られるようになったことで, SiC は半導体素子用材料として再び注目されるようになった. 素子化技術においては, 1980 年代以降, SiC は多くの青色発光候補材料で困難であった pn 接合が可能であったことから, 青色発光ダイオード素子の有力な材料として研究開発が進められていた. しかし, 1993 年に窒素化合物半導体で高輝度青色発光素子が開発されると, 間接遷移

型半導体である SiC は，研究対象からはずれ，その後は，高パワー，高周波パワーデバイスが主な研究開発のターゲットとなった．

1.2 SiC の結晶多形

SiC は珪素 (silicon : Si) と炭素 (carbon : C) の 4 族原子同士から構成された唯一の化合物である．Si が C より電気陰性度が大きいことにより約 18% のイオン性を持つ共有結合型の結晶で，結晶学的には，同一の組成で c 軸方向に対して多様な積層構造をとることができ，100 種類以上の結晶多形 (ポリタイプ) が存在する．ポリタイプとは，一次元的な積層構造の異なる結晶構造をいう．多くの結晶多形の中でも発生確率が高い 3C-，4H-，6H-SiC の結晶構造を図 1.1 に示す．これら結晶多形の表記方法は，積層方向の単位格子に含まれる Si-C 単位層の数と，結晶系の頭文字 (C : 立方晶，H : 六方晶，R : 菱面体) を組み合わせて表されている．立方晶は 3C のみで，これを β -SiC，その他をまとめて α -SiC と呼ぶこともある．ポリタイプによって種々の物理的特性が異なるため，応用上重要な意味を持つてくる [2]．

SiC の全てのポリタイプにおいて，Si と C の比は 1 対 1 で， $1/4$ の C ($1/4$ の Si) を四つの頂点に配し，中央に Si (C) 配した正四面体を基本最小構造とする．この正四面体を頂点が重なるように配置すると，a，b，c の三種類の配置が考えられる．また正四面体は面内で 180° 回転した配置をとることができ，このときの配置を a^* ， b^* ， c^* とする．この三種類の配置にどの向きの正四面体を重ねていくのかによって SiC のポリタイプが形成される．3C-SiC の正四面体の積層順序は abcabc となり，4H-SiC と 6H-SiC の積層構造はそれぞれ aba^*c^* と $abcb^*a^*c^*$ となる．

図 1.2，1.3，1.4 はそれぞれ 3C-，4H-，6H-SiC の結晶構造である．赤線で囲まれているのがそれぞれのユニットセルである．3C-SiC は炭素原子が 3 周期で立方晶をなし，4H-，6H-SiC は炭素原子がそれぞれ 4 周期，6 周期で六方晶をなす結晶構造である．

1.3 SiC の物性

SiC は多くの結晶多形が存在し，それぞれ物性が異なる．SiC は Si と比べて約 3 倍バンドギャップが大きく，約 4 倍の熱伝導度と熱の放射能力が大きいため，大電力制御の半導体デバイスの適用において，高温まで安

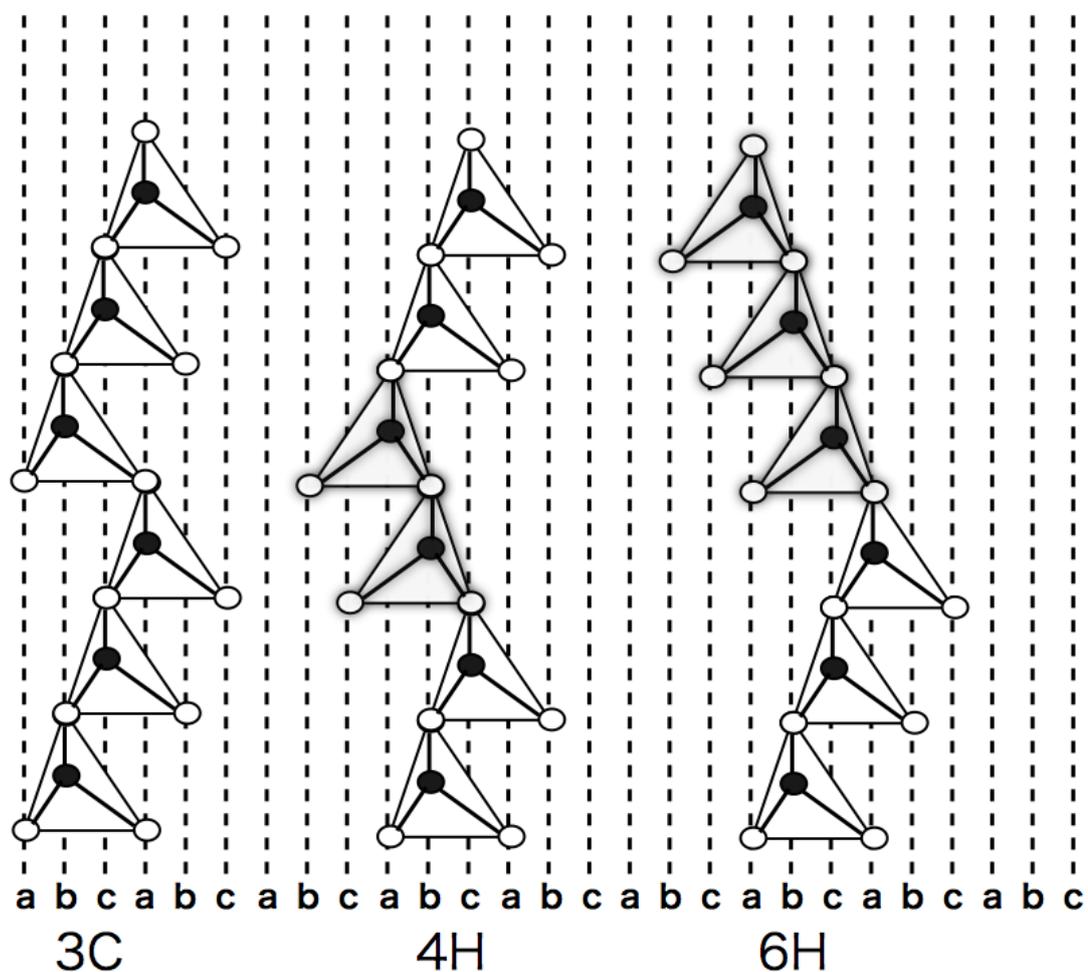


図 1.1: 代表的な SiC 結晶多形の結晶構造の (11-20) 面へ投影図。○が炭素 (C), ●がシリコン (Si) である。中心に 1 つの Si, 1/4C を 4 つの頂点に配した正四面体を SiC の最小単位として, この正四面体の積層周期の違いが SiC における結晶多形構造である。

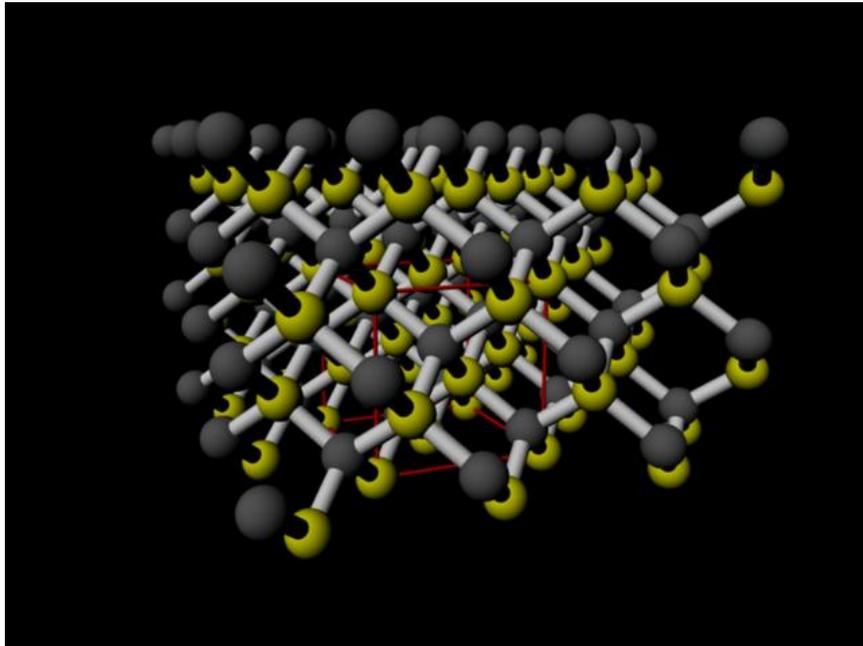


図 1.2: 3C-SiC の結晶構造 .

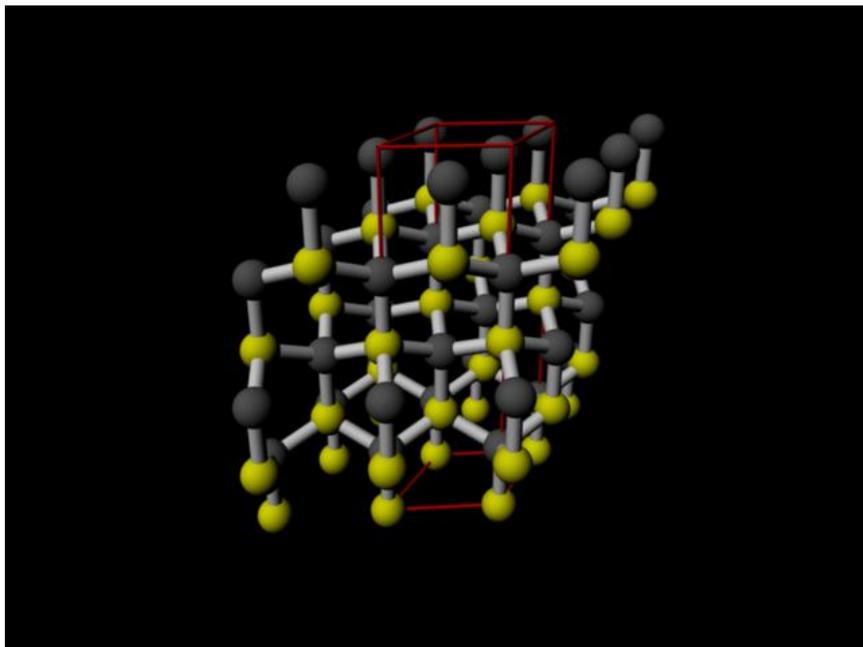


図 1.3: 4H-SiC の結晶構造 .

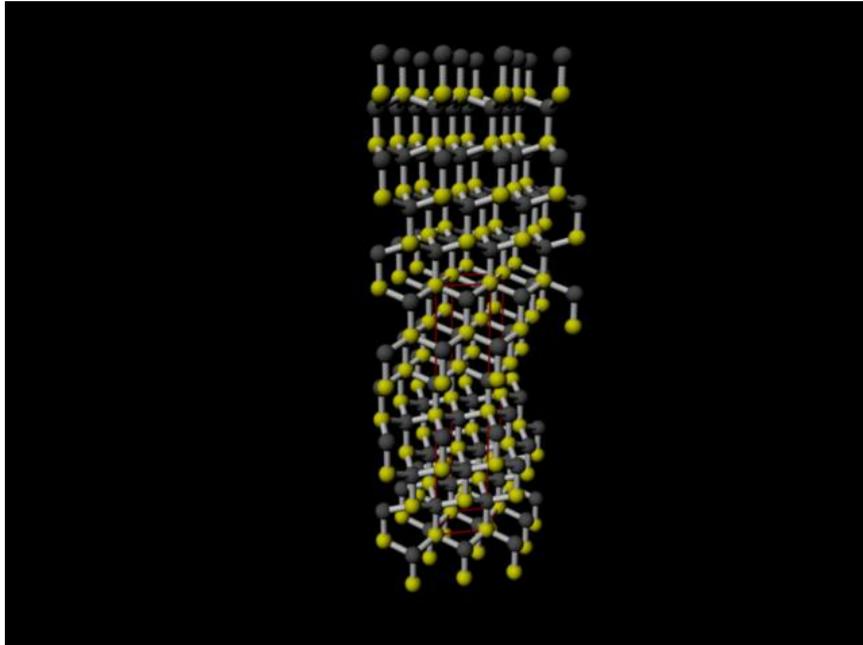


図 1.4: 6H-SiC の結晶構造 .

定な動作が可能で、破壊に対する耐量大きい。また、絶縁破壊電解が Si に比べると大きく、Si パワーデバイスでは困難だった大容量と高速動作の両立が可能となる [3] .

3C-SiC はポリタイプの中で唯一、立方晶をとり、結晶の対象性が高く、等方的であるため、デバイス設計が容易である。また、低温において良質な結晶が作製可能なため、大面積化によるコスト低減や、さまざまなデバイスへの応用などが魅力的である。また、従来、デバイス化研究 6H-SiC が用いられてきたが、4H-SiCの方が移動度は高く、移動度の異方性が小さいことから、パワーデバイス作製時に高い性能が期待される。また、SiC は極性結晶であり、デバイス作製時に 0001 面を使う場合には (0001) Si 面と (000-1) C 面の選択がある。面方位によって SiC の結晶成長や酸化速度などが異なることや、成長の様相が違う [4] . そのためデバイス設計には異方性も考慮しなくてはならない。

半導体	Si	GaAs	SiC			GaN	ダイヤモンド
			3C	4H	6H		
結晶構造	Dia	ZB	ZB	Hex	Hex	WZ	Dia
格子定数 (Å)	5.43	5.65	4.36	3.08 ^a , 10.05 ^c	3.08 ^a , 15.12 ^c	3.16 ^a , 5.12 ^c	3.567
バンドギャップ E_g (ev)	1.1135	1.428	2.2	3.02	2.86	3.39	5.47
熱伝導度 κ (w/cmK)	1.51	0.54	4.9	4.9	4.9	1.3	20

図 1.5: 一般的な半導体材料 (Si, GaAs) と代表的なワイドバンドギャップ半導体 (SiC, GaN, ダイヤモンド) の物性値.

1.4 単結晶 SiC の面方位

本研究では、典型的な面である 3 面を対象としている。立方晶をなす 3C-SiC は、(111) 面、(1-10) 面、(11-2) 面。また、六方晶をなす 4H-、6H-SiC では、(0001) 面、(11-20) 面、(1-100) 面の表面エネルギーの計算を行った。

(0001) 面、(11-20) 面、(1-100) 面を簡単な六方晶の図と MAYA によって視覚化された結晶モデルを用いて説明する。また、以下の図では 4H-SiC の結晶モデルを使用している。

- (0001) 面

この面は c-SiC にとって最も基本となる面である。この面は昇華法により成長したバルク結晶からも多く切り出せる面であり、貴重な SiC バルク結晶の有効利用という観点からも最も優れた面である。結晶学的にこの面を見ると、最表面原子は 1 層下の 3 つの原子と結合を持っている。そして、最表面原子が Si 原子の面を (0001) 面または Si 面と呼び、最表面原子が C 原子の面を (000-1) 面または C 面と呼ぶ (図 1.6 参照)。SiC は 12% のイオン結合性を有した共有結合により結ばれており、Si 原子と C 原子の電気陰性度は異なる。このため、Si 原子はわずかに正に帯電しており、C 原子が並んだ C 面と Si 原子が並んだ Si 面はそれぞれ極性を有している。

- (11-20) 面

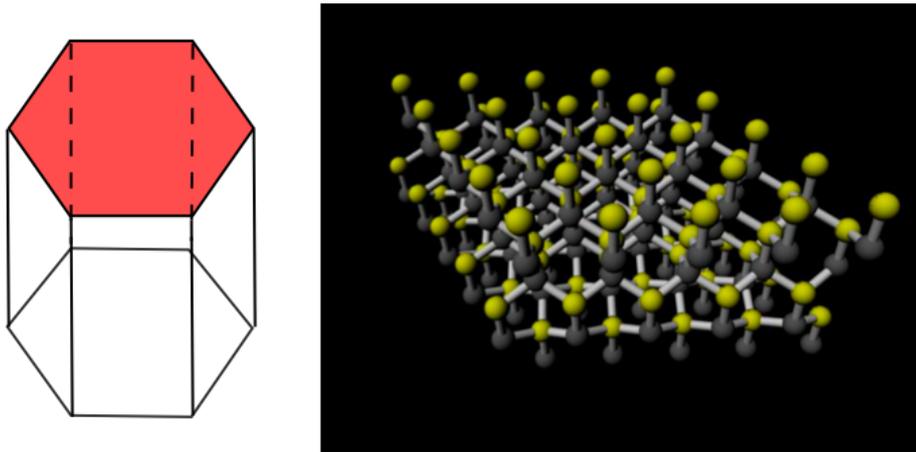


図 1.6: 単結晶 SiC における (0001) 面.

この面は， $2H$ -SiC にとって最も基本となる (0001) 面に対して垂直な，代表的な面の一つであり，(0001) から [11-20] 方向に 90° 傾けた面である（図 1.7 参照）．この面は， $2H$ -SiC の周期的折り返し構造を反映した Si 原子と C 原子からなるジグザグの原子配列が表面を覆う．このため，この面は無極性面であり，電子移動度が高い，酸化速度が早いなどの特徴を有しており，MOS トランジスタの基板面として近年注目されている．

- (1-100) 面

この面は，(0001) 面と (11-20) 面に対して垂直な面であり，(0001) から [1-100] 方向に 90° 傾けた面である（図 1.8 参照）．この面は，最表面の Si 原子と C 原子が同じ高さで表面を覆う．このため，この面は無極性面で，原子配列より平坦な面を作りやすい．

また，立方晶をなす $3C$ -SiC の 3 面と六方晶をなす $4H$ -， $6H$ -SiC の 3 面はそれぞれ，(111) 面は (0001) 面，(1-10) 面は (11-20) 面．(11-2) 面は (1-100) 面に対応している（図 1.9，1.10，1.11 参照）．

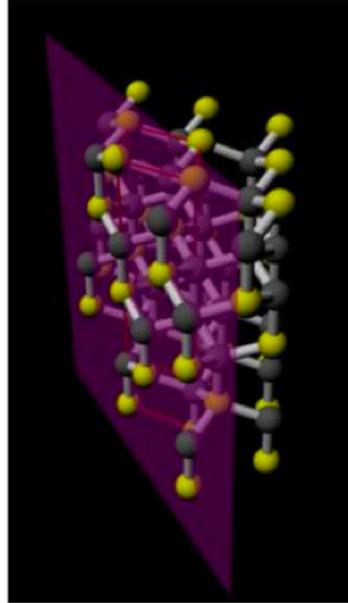
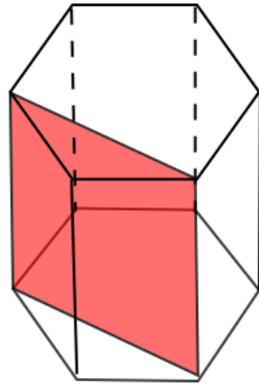


図 1.7: 単結晶 SiC における (11-20) 面.

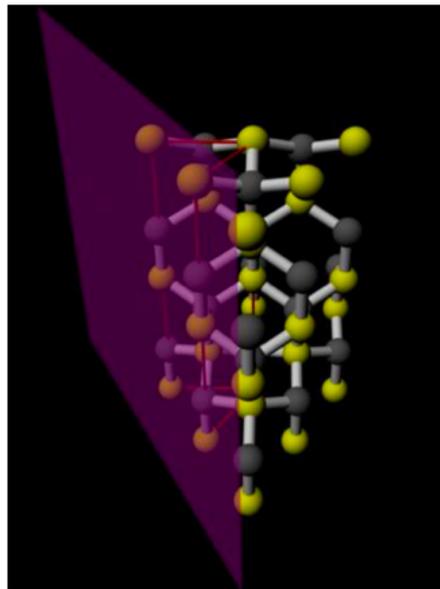
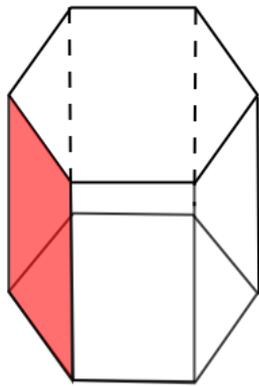


図 1.8: 単結晶 SiC における (1-100) 面.

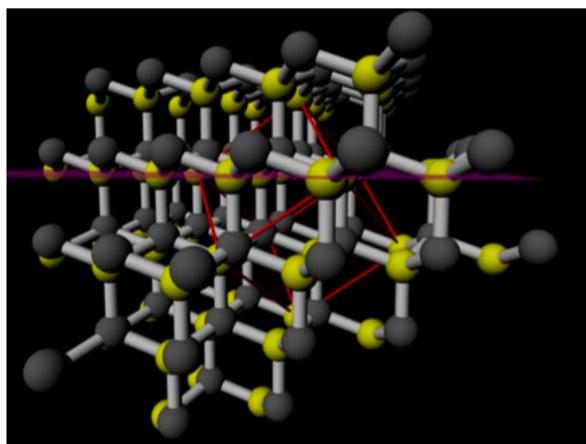
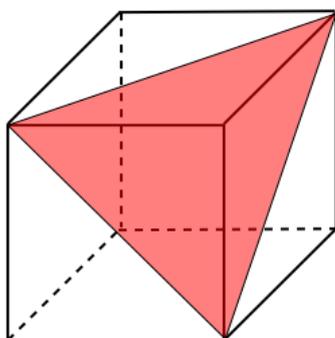


図 1.9: 単結晶 SiC の立方晶における (111) 面と六方晶における (0001) 面.

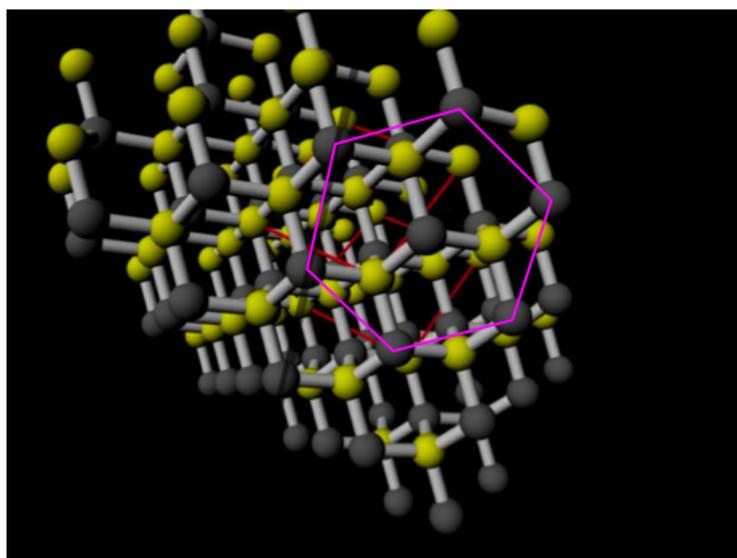
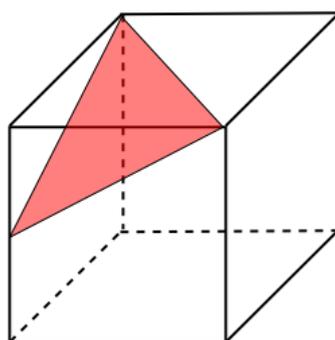


図 1.10: 単結晶 SiC の立方晶における (1-10) 面と六方晶における (11-20) 面.

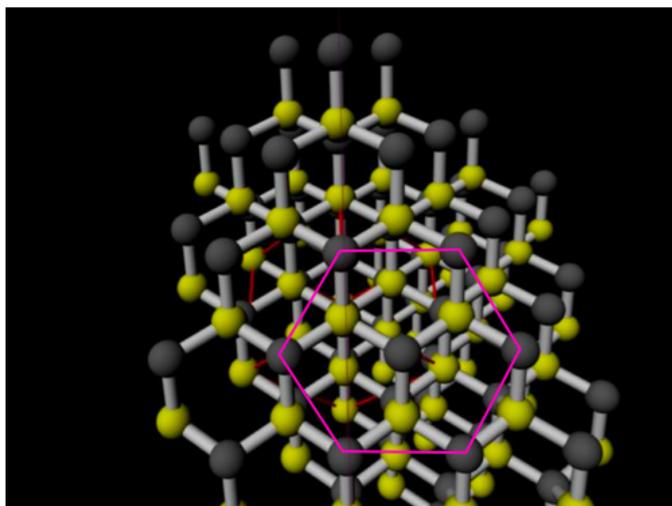
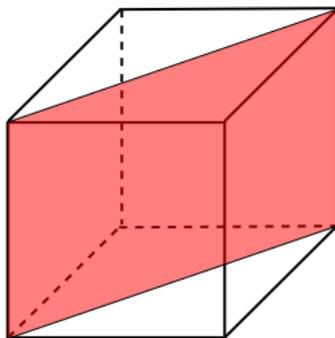


図 1.11: 単結晶 SiC の立方晶における (11-2) 面と六方晶における (1-100) 面.

1.5 表面エネルギー

結晶表面近くでは，原子数は内部の対称性の高い完全結晶またはバルクの原子数に比べて非常に少ないため表面に垂直な方向での対称性が破れる．また，結晶表面では結晶の結合が切れ (図 1.12 参照) ダングリングボンドが形成され，不安定な状態になりエネルギーを持つ [5]．この表面の全エネルギーを表面エネルギーという．この不安定な状態の表面エネルギーは，結晶内部の安定な状態よりも高いエネルギーを持つ．

1.6 準安定溶媒エピタキシー (MSE)

準安定溶媒エピタキシー (MSE) とは関西学院大学の金子教授らによって提案された新たな結晶成長法である．従来の，結晶成長法では温度差を駆動力としてきたが，このプロセスでは結晶表面のエネルギーの違いから結晶成長が進む．

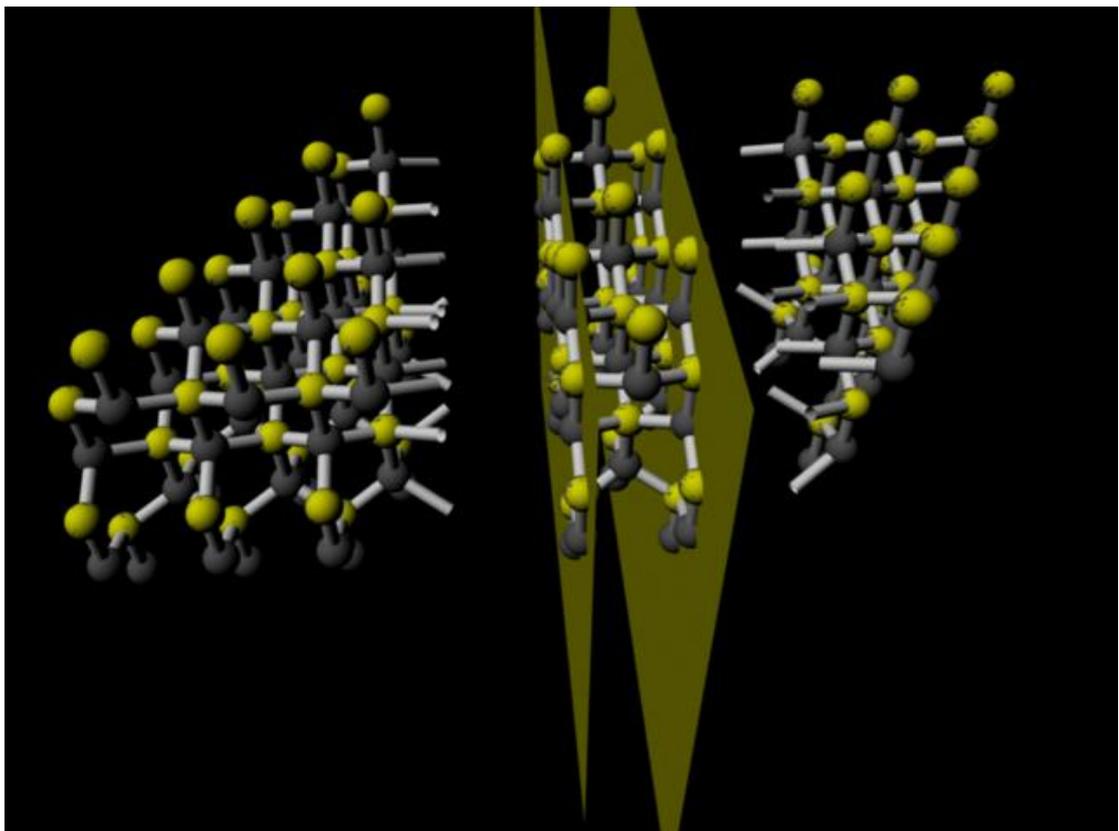


図 1.12: (11-20) 面を真空にし, 結合を切った 4H-SiC のスラブモデル.

1.6.1 構造

MSE は二つの SiC(実験では 4H-SiC と 3C-SiC) のウエハーが液体 Si の薄膜を挟む構造をし、ある一定の温度 (1700) のまま結晶成長をさせる (図 1.13) . その時、熱的に安定な 4H-SiC のウエハーが基板 (seed) , 不安定な 3C-SiC のウエハーが原料板 (feed) となる .

そして、実験結果は等温過程において feed 側は溶け出し、seed 側に SiC 単結晶が析出した .

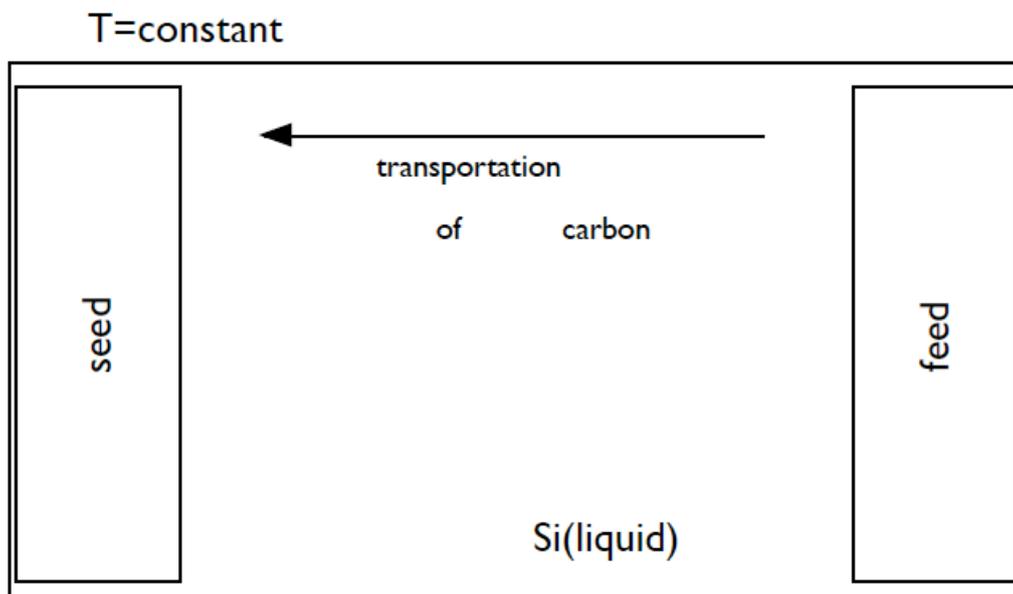


図 1.13: MSE プロセスの概略図

1.6.2 状態図

3C-SiC は 4H-SiC よりも準安定であるので、共晶温度は必ず低くなる . それに伴って、準安定の 3C-SiC の液相線は 4H-SiC の液相線よりも炭素濃度が大きくなる . したがって、Si-C の二元系の状態図は図 1.14 となる . 3C-SiC と 4H-SiC の共晶反応はそれぞれ破線と実線で示した .

この状態図の横軸は炭素濃度で、0 から始まって SiC の単結晶の位置を 0.5 とした . また、縦軸は温度をとり、線を引いてある位置を実験温度とみなした .

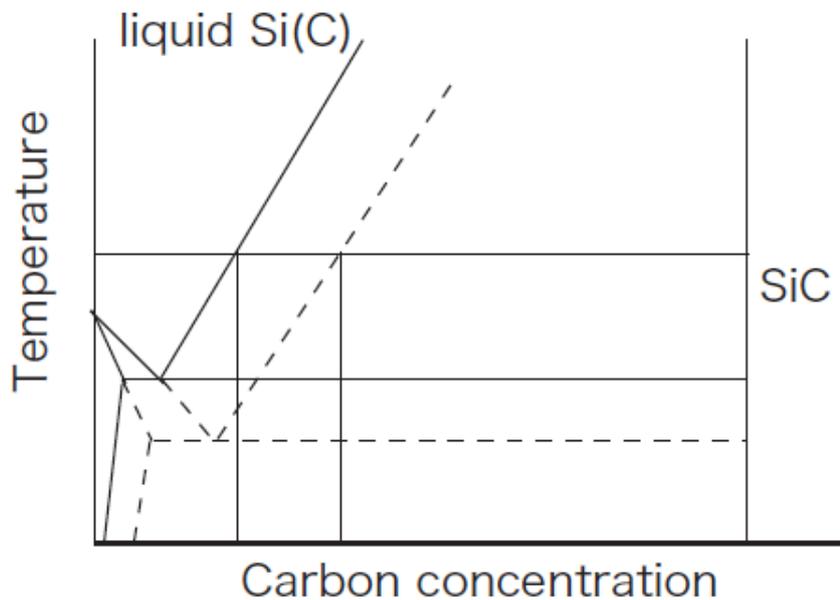


図 1.14: Si-C の二元系の状態図

1.6.3 モデル化

MSEの構造から得られた事は液体 Si 内では対流が抑制され、溶質の輸送が拡散方程式にのみ依存する。その事と、挟み込む SiC のウエハーの二元系の状態図から、MSE における結晶成長の濃度プロファイルを単純にモデル化した。(図 1.15)

1.6.4 MSE プロセスにおける素過程

素過程とは素構造 (elementary structure; それ以上分解できない基本単位) によって構成される構造の挙動のことである。図 1.16 に MSE における素過程を示した。MSE プロセスにおいて素過程となるのは「拡散」、「吸着」、「放出」である。

図 1.17 に結晶表面の構造を示した。結晶表面は図 1.17 に示されているようにテラス、ステップ、キンク、空孔に大別する事が出来る。結晶表面のテラスについての原子はテラスで拡散しながら、徐々にステップの方へと近づいて行く。その後ステップからキンクへたどり着き、結合し析出する。

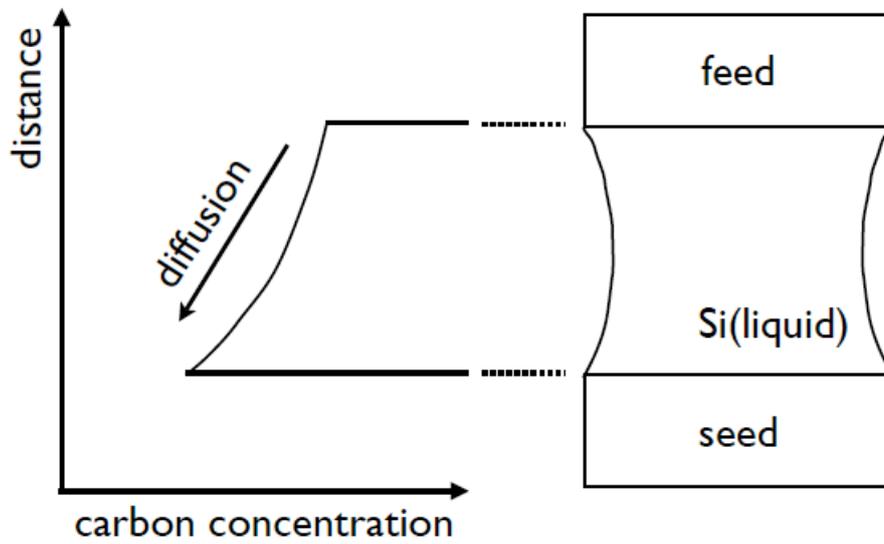


図 1.15: 単純なモデル化

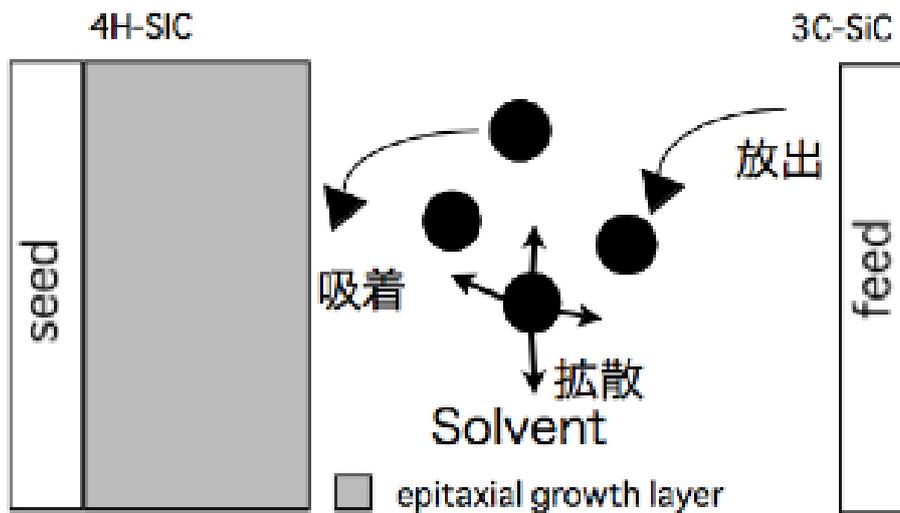


図 1.16: 素過程 .

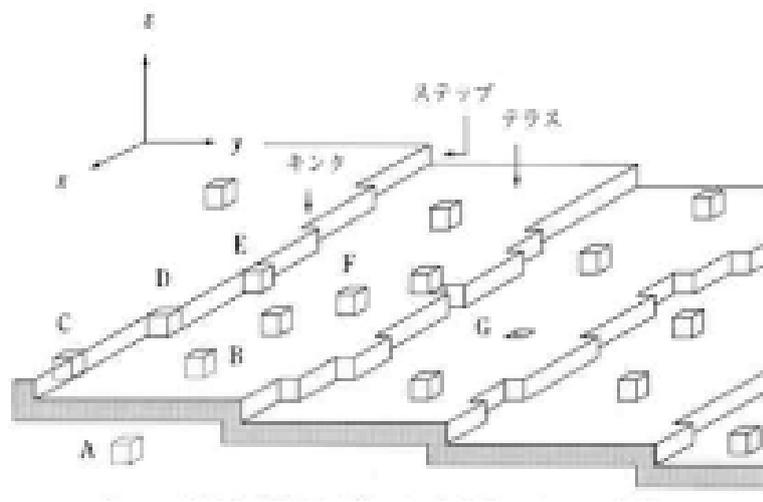


図 1.17: 結晶表面の構造 [6].

第2章 SiCの表面エネルギーの 第一原理計算

2.1 表面エネルギーの計算のながれ

表面エネルギーを求める計算のながれについて簡単に説明する．次のような手順で行う．

1. MedeA というソフトウェアを使って 3C-,4H-,6H-SiC のバルクモデル，各面のスラブモデルを作成する．
2. 第一原理計算ソフトは VASP(Vienna Ab-initio Simulation Package) を用いて 1 で作成した結晶モデルのエネルギーを求める．
3. VASP で求めた結晶モデルのエネルギーから単位面積あたりの表面エネルギーを求める．
4. 精度を上げるためスラブの長さを 2 倍にし，1 から 3 を繰り返す．そして，計算結果の確認を行う．

以下さらに詳しく説明していく．

2.2 SiCの構造を作成

2.2.1 MedeA について

MedeA というソフトウェアを使って結晶モデルを作成する．MedeA は、データベースと第一原理計算の手法を一つのプラットフォームで統合した，材料設計支援のための統合ソフトウェアである．グラフィックスイインターフェースおよび計算プログラムは全て Windows システム上で稼働するので、構造の検索，構築，編集，計算，解析までを 1 つのプラットフォーム上で行うことができる．

2.2.2 ユニットセルの作成

原子の位置情報を入力しユニットセルを作成する。MedeA で作成された単位格子は周期的境界条件に基づいた、無限に列になるモデルの一部である。

以下に本研究で使用した 3C-SiC の原子位置ファイル (POSCAR) を示す。

```
(F-43m) 3C-SiC (VASP)
1.0
4.36000000 0.00000000 0.00000000
0.00000008 4.36000000 0.00000000
0.00000008 0.00000008 4.36000000
4 4
Direct
0.00000000 0.00000000 0.00000000
0.50000000 0.50000000 0.00000000
0.50000000 0.00000000 0.50000000
0.00000000 0.50000000 0.50000000
0.25000000 0.25000000 0.25000000
0.75000000 0.75000000 0.25000000
0.75000000 0.25000000 0.75000000
0.25000000 0.75000000 0.75000000
```

前項の原子位置ファイル内の「1.0」は、ユニットセルの倍率を表している。ユニットセルを拡大したい時は「1.05」、縮小したい時は「0.95」という様に変換すると、ユニットセルを変化させることができる。次に

```
4.36000000 0.00000000 0.00000000
```

という数字はそれぞれ左から x 軸, y 軸, z 軸を表している。つまり $(x, y, z) = (4.36, 0.0, 0.0)$ という意味である。これは、格子定数であり、単位は Å である。次に、Direct の上の「4 4」は原子の個数を表している。そして、Direct の下の数字は原子の位置を示している。この数字は、距離ではなく、上の数字の格子定数に対する比で表されている。例えば、

```
0.75000000 0.75000000 0.25000000
```

という位置の

```
0.00000000 0.00000000 0.00000000
```

を基準とした長さを求めたいときは $(x, y, z) = (4.36 \times 0.75, 4.36 \times 0.75, 4.36 \times 0.25)$ を解けば求めることができる。

同様に 4H-,6H-SiC の原子位置ファイルを紹介する .

(P6_3mc) 4H_SiC (VASP)

1.0

3.08000000	0.00000000	0.00000000
-1.53999993	2.66735828	0.00000000
0.00000018	0.00000032	10.05000000

4 4

Direct

0.00000000	0.00000000	0.00000000
0.00000000	0.00000000	0.50000000
0.33333333	0.66666667	0.24982500
0.66666667	0.33333333	0.74982500
0.33333333	0.66666667	0.43732500
0.66666667	0.33333333	0.93732500
0.00000000	0.00000000	0.18750000
0.00000000	0.00000000	0.68750000

(P6_3mc) 6H_SiC (VASP)

1.0

3.08000000	0.00000000	0.00000000
-1.53999993	2.66735828	0.00000000
0.00000028	0.00000048	15.12000000

6 6

Direct

0.00000000	0.00000000	0.12540000
0.00000000	0.00000000	0.62540000
0.33333333	0.66666667	0.79190000
0.66666667	0.33333333	0.29190000
0.33333333	0.66666667	0.45840000
0.66666667	0.33333333	0.95840000
0.00000000	0.00000000	0.00000000
0.00000000	0.00000000	0.50000000
0.33333333	0.66666667	0.66670000
0.66666667	0.33333333	0.16670000

0.33333333	0.66666667	0.33320000
0.66666667	0.33333333	0.83320000

下の図 2.1, 2.2, 2.3 は, 以上のファイルの位置情報を入力し, 作成した結晶モデルである .

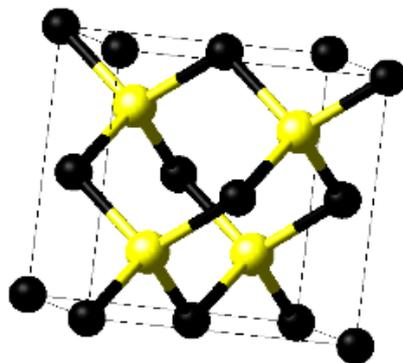


図 2.1: MedeA で作成した 3C-SiC のユニットセルの結晶モデル .

2.2.3 スーパーセルの作成

何らかの周期的な原子構造をもつ物質に対して計算を適用するためにユニットセルからスーパーセルを作成する . バルクモデルの電子状態を結晶の周期性を利用して現実的な計算によって取り扱うことを可能にするが、一般的に、結晶粒どうしが接する粒界や異種物質界面付近の周期性は結晶自身のものとは異なる . そこで、二次元周期性を持つ界面について、反転した界面構造を界面に垂直方向にも交互に積層した三次元の周期構造を考え、その周期的境界条件によってできるセルがスーパーセルである [7] .

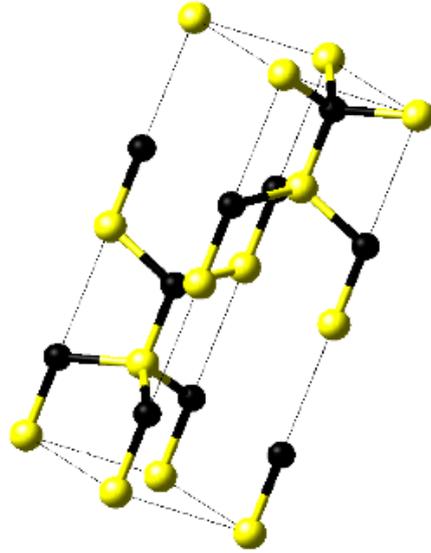


図 2.2: MedeA で作成した 4H-SiC のユニットセルの結晶モデル .

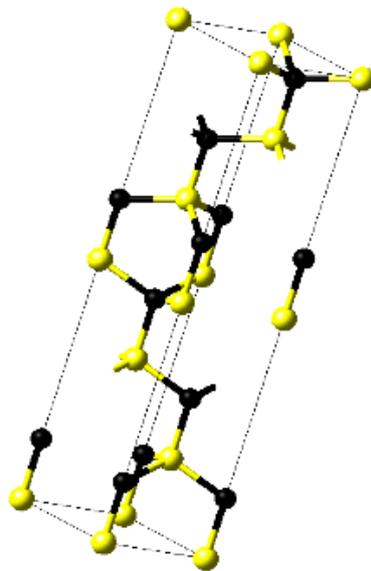


図 2.3: MedeA で作成した 6H-SiC のユニットセルの結晶モデル .

本研究では、3C-SiC は x 軸, y 軸, z 軸方向に $2 \times 2 \times 2$ のスーパーセル, また, 4H-, 6H-SiC は $2 \times 2 \times 1$ のスーパーセルを使用した。

下の図 2.4, 2.5, 2.6 は, 図 2.1, 2.2, 2.3 を Medea のスーパーセルを構築するツールである Supercell Builder を使用し作成した結晶モデルである。

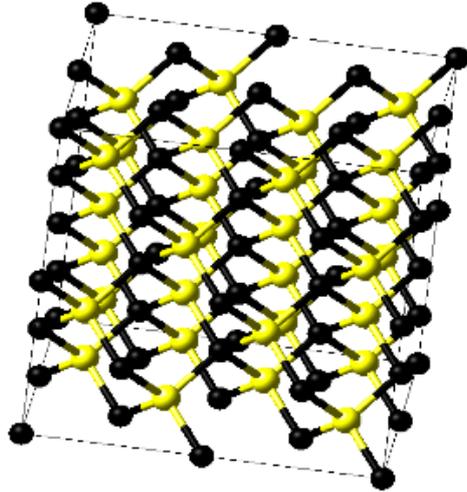


図 2.4: 3C-SiC のユニットセルを $2 \times 2 \times 2$ のスーパーセルにした結晶モデル。

2.2.4 スラブモデルの作成

結晶モデルの表面は表面垂直方向に対して対称性を持たないので、このままでは、バルクモデルに用いるような三次元モデルに対して行われる計算を、そのまま適用することができない [8]。結晶モデルの表面に対して、バルクモデルの計算手法を導入するために、真空層で原子層をサンドイッチした構造 (図 2.7, 2.8, 2.9 参照) によって、無限に続く表面構造を実現するモデルをスラブモデルという。

ここでは表面垂直方向に長いセルであるスーパーセルを使用しているため、高精度の結晶表面の計算を実現できる。しかし、注意しなくてはならないのが原子層と真空層を十分に厚くしなくてはならないことである。周期的に存在する他のスーパーセル (隣接するセル) の結晶平板が真空領域を通して相互作用しないように十分広い真空層をとる。また、個々

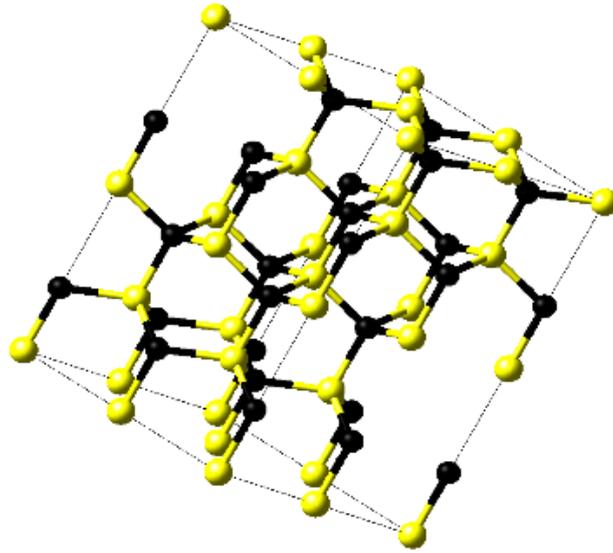


図 2.5: 4H-SiC のユニットセルを $2 \times 2 \times 2$ のスーパーセルにした結晶モデル .

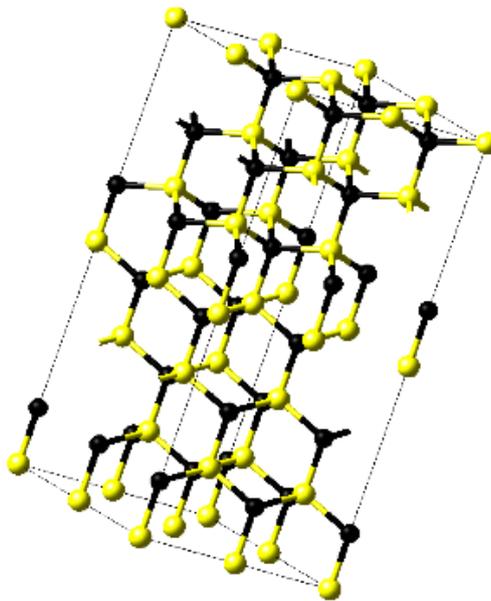


図 2.6: 6H-SiC のユニットセルを $2 \times 2 \times 2$ のスーパーセルにした結晶モデル .

のスーパーセルの結晶平板における二つの表面が、バルク結晶を通して相互作用しないように十分に結晶平板を厚くしなくてはならない。

下の図 2.7, 2.8, 2.9 は, 3C-, 4H-, 6H-SiC のスーパーセルのスラブモデルである。本研究の対象である面の上下に真空層を作成した表面構造の結晶モデルである。

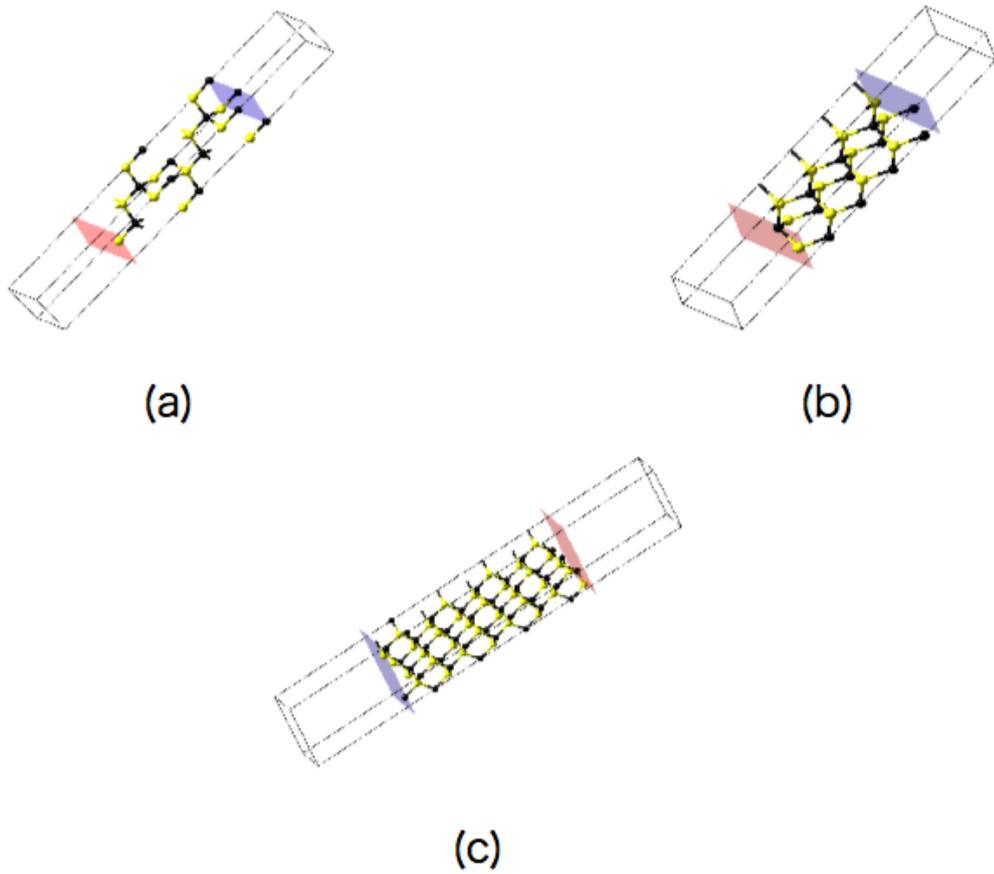


図 2.7: 3C-SiC スーパーセルの各三面の上下を真空にし, 表面構造を模した結晶モデル。(a)(111) 面におけるスラブモデル, (b)(1-10) 面におけるスラブモデル, (c)(11-2) 面におけるスラブモデル

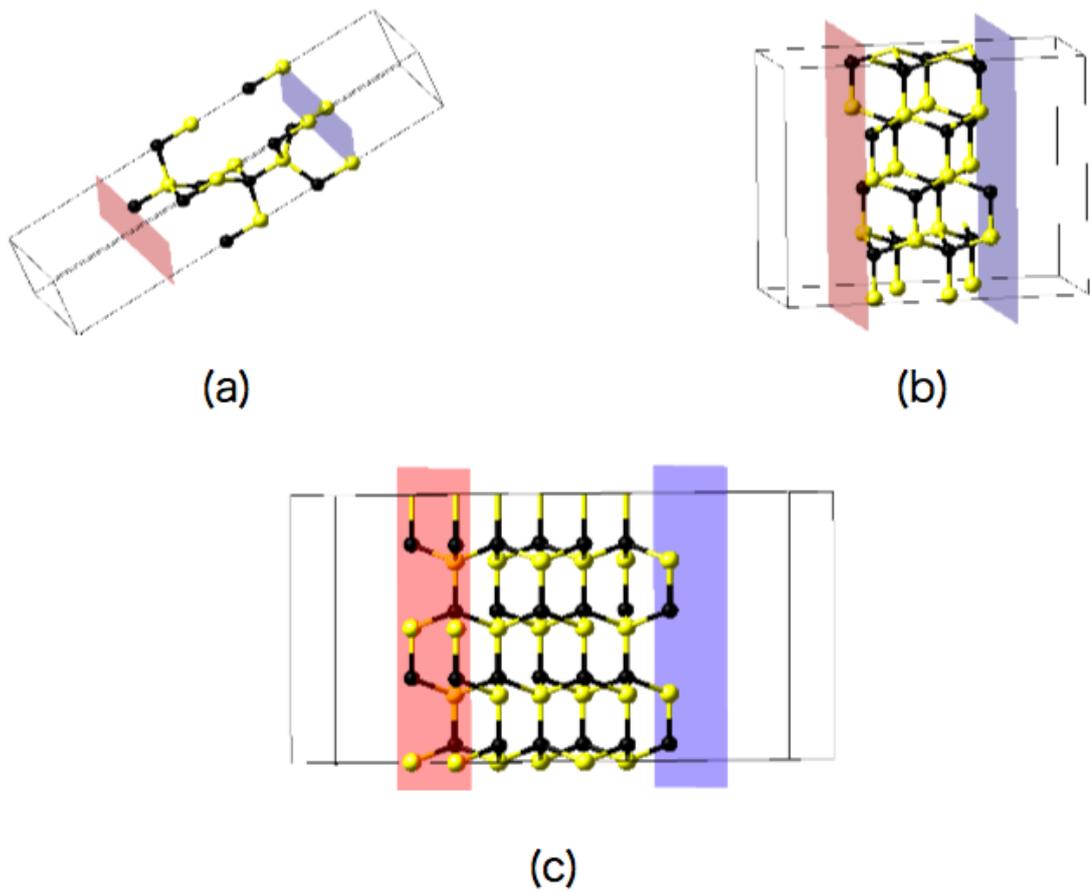


図 2.8: 4H-SiC スーパーセルの各三面の上下を真空にし，表面構造を模した結晶モデル．(a)(0001) 面におけるスラブモデル，(b)(11-20) 面におけるスラブモデル，(c)(1-100) 面におけるスラブモデル

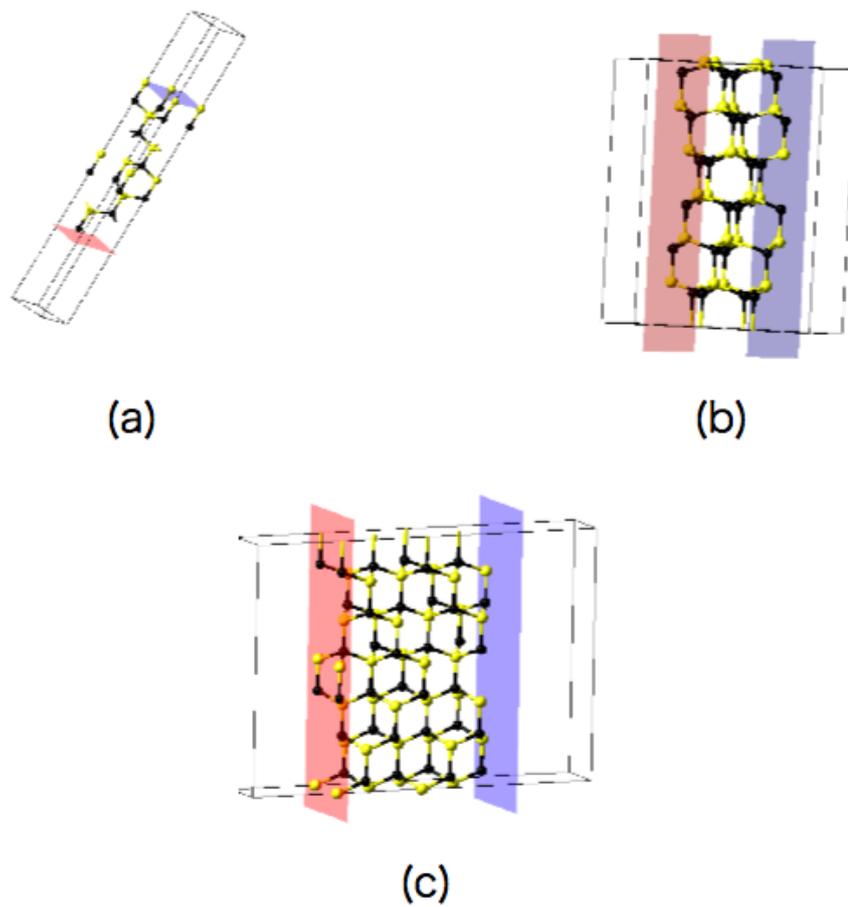


図 2.9: 6H-SiC スーパーセルの各三面の上下を真空にし, 表面構造を模した結晶モデル. (a)(0001) 面におけるスラブモデル, (b)(11-20) 面におけるスラブモデル, (c)(1-100) 面におけるスラブモデル

2.3 平面波基底擬ポテンシャル法

密度汎関数に基づく第一原理擬ポテンシャル法によるバンド計算 VASP code を用いて計算を行う。この手法では、3次元周期境界条件を満たす平面波の基底関数を用いて電子被占有の軌道を展開し、その波動関数をもとに一電子方程式を解くことにより電子状態を求める。交換相関ポテンシャルは GGA (generalized gradient approximation) を用いた。そして、擬ポテンシャルとして PAW (projector augmented wave) を用いた。

2.3.1 計算ファイルの説明

VASP の計算を実行させるためには、MedeA で作成した原子モデル以外にも各ファイルを用意しなければならない。それぞれのファイルがどのような入力を担うかを簡単に記しておく。

INCAR

計算を制御するための入力パラメーターが収められているファイル。

KPOINTS

計算に使用される K 点を指定するためのファイル。

autocalc

外部緩和における計算を自動でできるシェルスクリプト。

POSCAR

計算する原子モデルの格子定数と原子座標が収められている。

POTCAR

計算し使用されている各元素のポテンシャルが収められている。

res.energy

自動化で計算した際の計算結果が出力されていく。

2.4 表面エネルギーの計算

物質の表面エネルギーはバルクモデルからその面を切り出すのに必要なエネルギーとして定義される。バルクモデルのエネルギーとスラブモデルのエネルギーから以下のような式で見積もられる。

まず、表面一原子あたりのエネルギー差を求める。 E_{slab} をスラブモデルのエネルギー、 E_{bulk} をバルクモデルのエネルギーとすると表面一原子あたりのエネルギー差 ΔE は次のように表される。

$$\Delta E = E_{\text{slab}} - E_{\text{bulk}} > 0 \quad (2.1)$$

次に面積を S とすると単位面積あたりの表面エネルギー E_{surf} は式 2.2 から求めることができる。

$$E_{\text{surf}} = \frac{\Delta E}{S} \quad (2.2)$$

2.5 計算の確認

計算の精度を上げるため、スラブの厚みを2倍にした結晶モデルを作成し計算の確認をする。例として、3C-SiCの(111)面におけるスラブモデルと同じ面でスラブの厚みを2倍にした結晶モデルを下に示す。他の3C-, 4H-, 6H-SiCのモデルも同じ方法で作成した。

2.6 計算結果の考察

2.6.1 計算結果

表 2.1, 2.2, 2.3 は、3C-, 4H-, 6H-SiC のバルクモデルと各面のスラブモデルのエネルギーである。これらの値から表面エネルギーを求め、表 2.4 と図 2.11 にまとめた。

2.6.2 MSE のメカニズム

ここで、もう一度、MSE のメカニズムについて簡単に説明する。MSE では温度一定で駆動力を濃度差として結晶成長する。そして、面方位によって SiC の結晶成長や酸化速度が異なり、結晶成長の様相が違う。

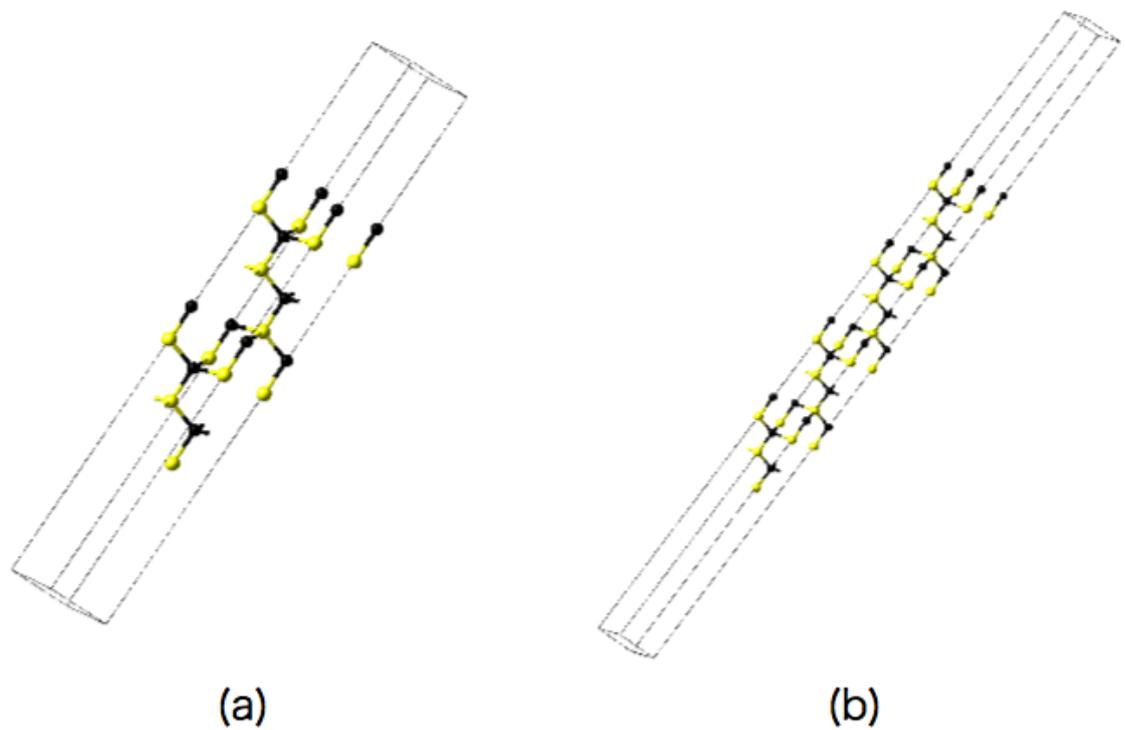


図 2.10: 3C-SiC の (111) 面のスラブモデルと同じ面でスラブの厚みを 2 倍にした結晶モデルとの比較 . (a)3C-SiC のスラブモデル , (b) スラブの厚みを 2 倍にしたスラブモデル

表 2.1: 3C-SiC のバルクモデルと各面のスラブモデルのエネルギー .

	結晶モデルの原子の数	エネルギー (eV)
バルクモデル	64	-481.90
(111) 面のスラブモデル	12	-83.17
(1-10) 面のスラブモデル	16	-114.27
(11-2) 面のスラブモデル	48	-348.16

表 2.2: 4H-SiC のバルクモデルと各面のスラブモデルのエネルギー .

	結晶モデルの原子の数	エネルギー (eV)
バルクモデル	32	-240.94
(0001) 面のスラブモデル	16	-113.21
(11-20) 面のスラブモデル	32	-217.81
(1-100) 面のスラブモデル	32	-223.42

表 2.3: 6H-SiC ののバルクモデルと各面のスラブモデルのエネルギー .

	結晶モデルの原子の数	エネルギー (eV)
バルクモデル	64	-481.90
(0001) 面のスラブモデル	24	-173.45
(11-20) 面のスラブモデル	32	-325.87
(1-100) 面のスラブモデル	32	-335.76

表 2.4: 3C-, 4H-, 6H-SiC の各面における表面エネルギー (J/m^2) .

	(0001) 面	(11-20) 面	(1-100) 面
3C-SiC	6.92	3.64	4.47
4H-SiC	7.03	3.42	4.49
6H-SiC	6.97	3.50	4.38

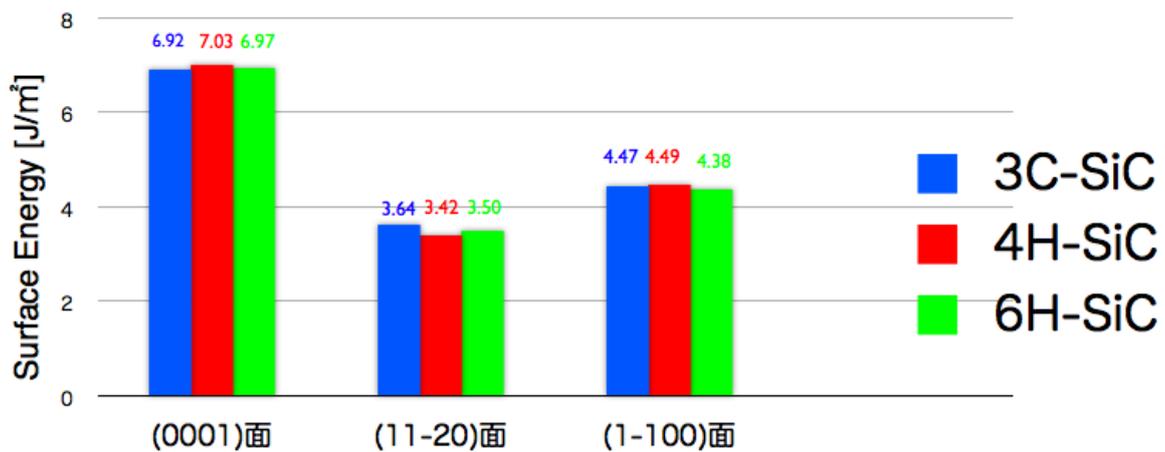


図 2.11: 表 2.4 のグラフ.

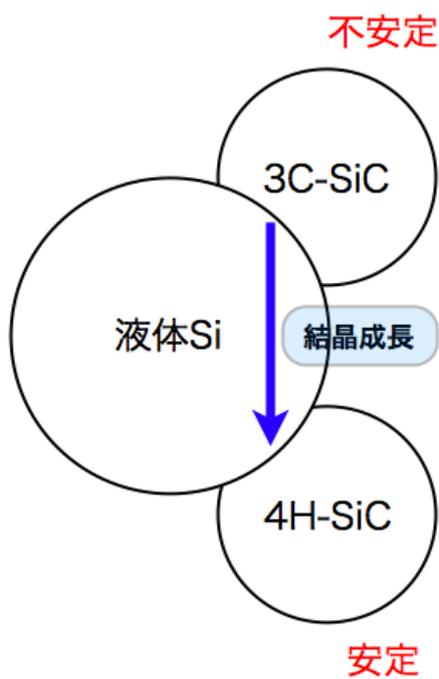


図 2.12: MSE の簡単な模式図.

図 2.12 のように 4H-SiC は安定，3C-SiC は 4H-SiC に比べ準安定であるので，不安定な 3C-SiC から安定な 4H-SiC へ結晶成長していく．

2.6.3 考察

エネルギーが高いときは不安定，低い時は安定となる．そして，不安定な物質から安定な物質へ結晶成長していく．つまり，表面エネルギーの差が大きくなる面の 2 面を用いると最も効率よく結晶成長すると考えられる．図 2.11 より最も安定な 4H-SiC(11-20) 面と最も不安定な 4H-SiC の(0001) 面を用いると最も結晶成長しやすいと考えられる．

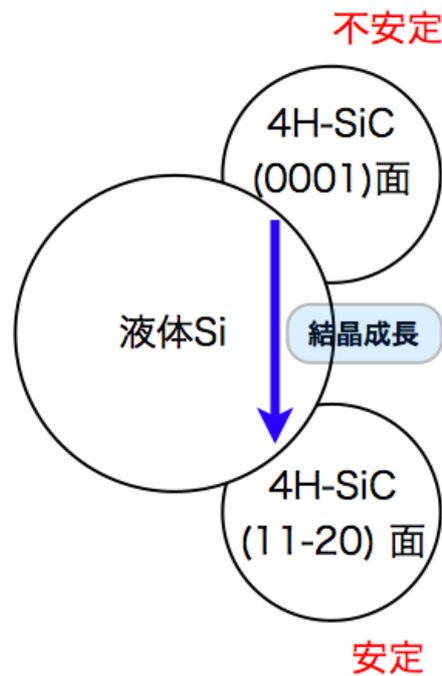


図 2.13: 本研究の結果より考えられる最も効率の良い MSE の簡単な模式図．

第3章 結晶表面での原子位置の 第一原理計算

結晶表面での原子位置の第一原理計算を行うにあたり，第2章と同様にSiCの構造の作成には原子モデル構築ソフトMedeAを，また，結晶表面での原子位置の第一原理計算には平面波基底擬ポテンシャル法によるバンド計算VASP codeを使用した．

3.1 計算原理

今回，実験で観測されている4H-SiC(0001)面の結晶表面での原子位置の第一原理計算をした．原子の移動経路を導き出すために，4H-SiC(0001)面スラブモデルの結晶表面であるSi面上にC 1原子を結合させ，そのC原子のエネルギーを計算し，その結果から表面拡散時の原子の移動経路を考察する．

3.2 真空-固体，液体-固体の第一原理計算

今回MedeAで計算した結果は真空-固体の第一原理計算である．しかし実際は液体(溶媒シリコン)-固体(4H-SiC)である．そのため実際の系とは少しずれている．

3.3 計算のながれ

結晶表面での原子位置の第一原理計算ながれについて簡単に説明する．次のような手順で行う．

1. 原子モデル構築ソフト MedeA を使って 4H-SiC の (0001) 面のスラブモデル，Si 面に C 1 原子を結合させたモデルを作成する．その際，C 原子を z 軸方向にリラクゼーションさせ，いくつかの原子位置におけるエネルギーを計算する．
2. 第一原理計算ソフトは VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) を用いて 1 で作成した結晶モデルのエネルギーを求める．
3. VASP で求めたスラブモデルのエネルギーと Si 面に C 1 原子を結合させたモデルのエネルギーの差を計算し，C 原子 1 つのエネルギーを求める．
4. 計算結果から表面拡散時の原子の移動経路を考察する．

以下さらに詳しく説明していく．

3.4 Si 面と C 面

計算を行う結晶モデルでは，4H-SiC の (0001) 面の Si 面，(000-1) 面の C 面に Si を修飾した面における C 原子の計算をする．

図 3.1 に Si 面と C 面の定義を示した．図 3.1 に示されているように Si 面・C 面とは結合ボンドが 1 つの Si-C 結合を切断したときに注目する方向の違いである．Si 面，C 面とは結合ボンドが切断したとき，Si 原子面が表面となる方向を向いた面が Si 面であり，逆に C 原子が表面となる方向を向いた面が C 面となる．

3.5 計算手法

図 3.2 に表面エネルギー計算を行った結晶構造を示した．黄色のボールを Si 原子，黒のボールを C 原子としている．図 3.2 に図 3.3 のように C 原子を結合させる．図 3.4 は図 3.2 の上部である Si 面を表し，図 3.5 は図 3.2 の下部である Si を修飾した C 面を表している．これらの面での表面拡散，付着原子位置および原子の付着する面の安定性を解明するため図 3.4 の 1~3，図 3.5 の 1~3 の計 6 点，そして，それぞれを z 軸方向にリラクゼーションさせ，いくつかの原子位置におけるエネルギーを計算を MedeA で行った．

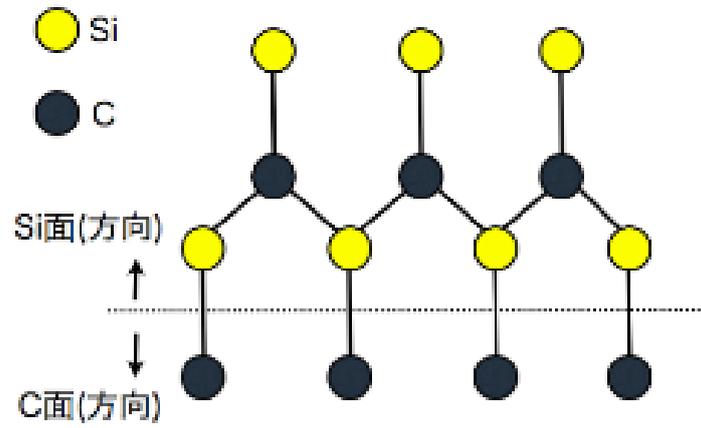


図 3.1: Si 面と C 面の模式図 .

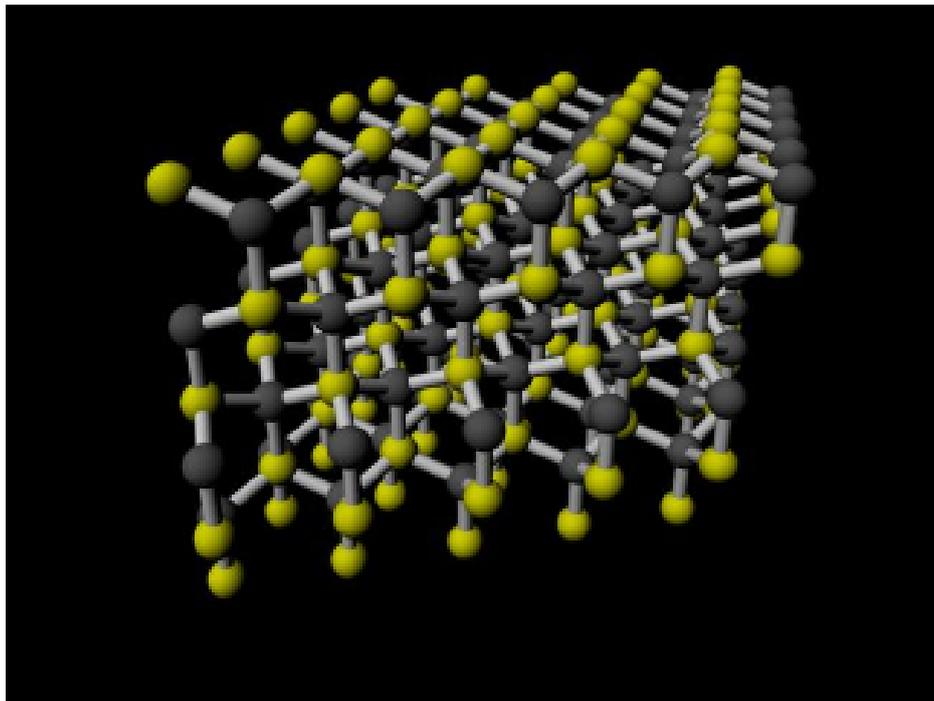


図 3.2: 表面計算をした結晶の結晶構造 .

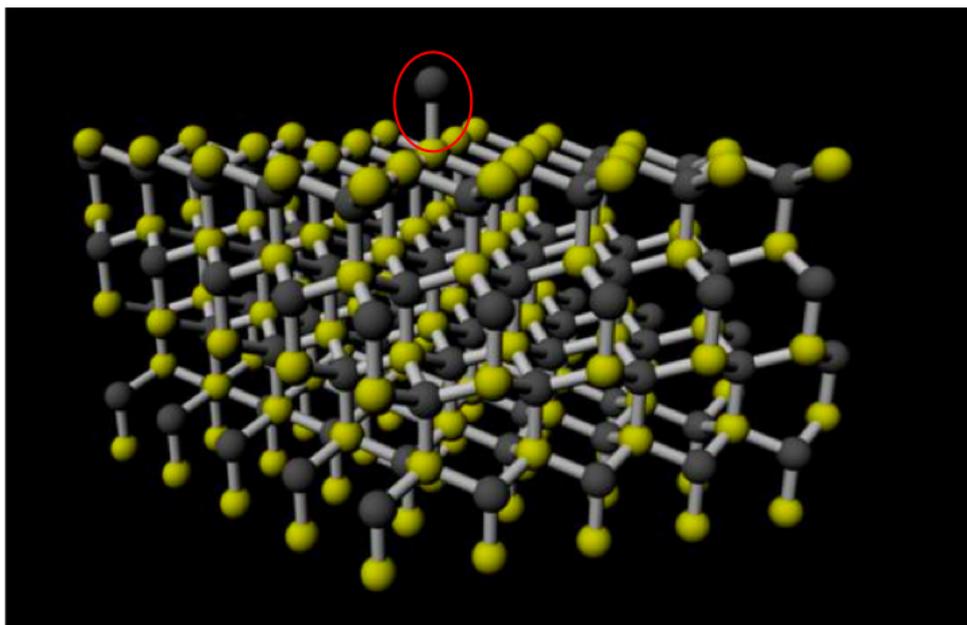


図 3.3: 結晶表面に C1 原子を結合させた結晶構造 .

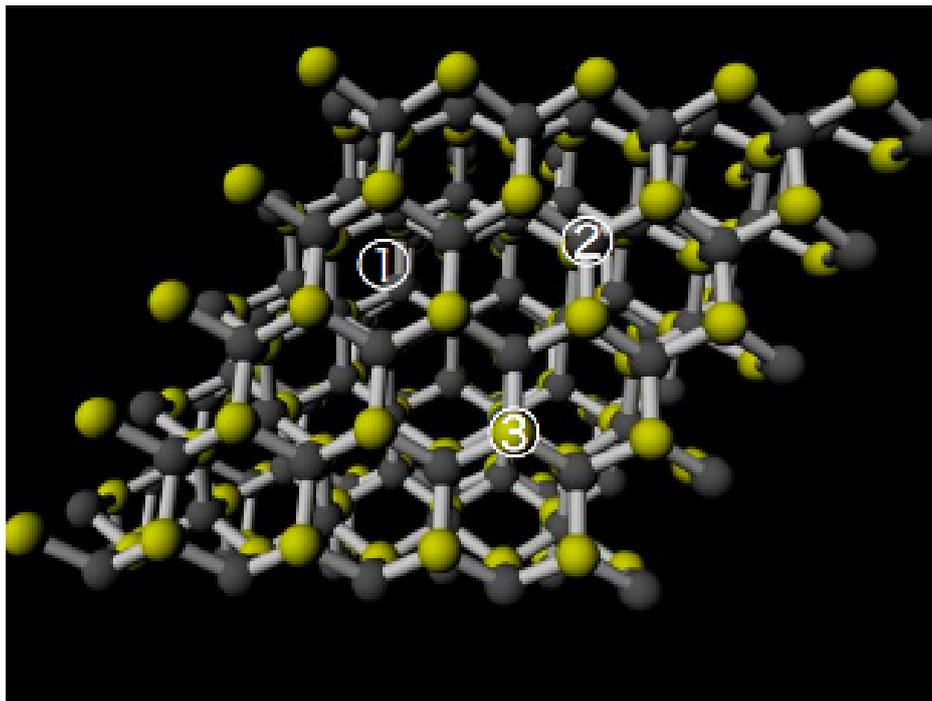


図 3.4: 図 3.2 を上部から見た結晶構造 .

図 3.4 の面から 3 点取り, 計算を行った。点 1 ではすぐ下に炭素原子がなく空洞になっている。点 2 ではすぐ下に炭素原子が存在している点 3 は炭素原子が結合をする場所である。

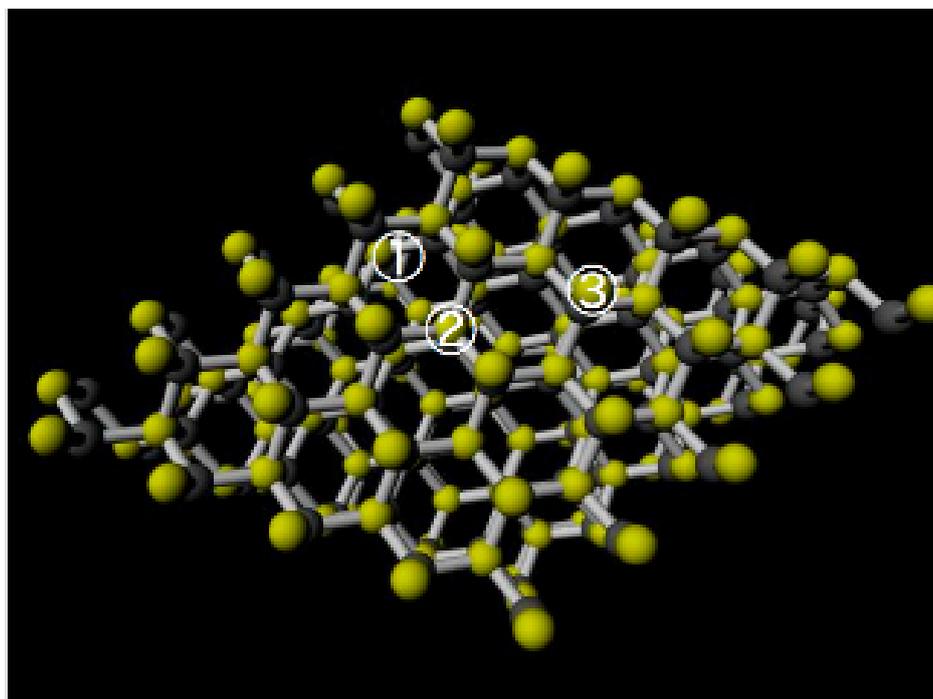


図 3.5: 図 3.2 を下部から見た結晶構造。

図 3.5 の面から 3 点取り, 計算を行った。点 1 ではすぐ下に炭素原子がなく空洞になっている。点 2 ではすぐ下に炭素原子が存在している点 3 は炭素原子が結合をする場所である。

3.6 計算結果の考察

3.6.1 計算結果

表 3.1 表,3.1 は図 3.4 , 図 3.5 での C 原子のエネルギーである。

表 3.1: 図 3.4 の 1,2,3 で計算したエネルギーと Si からの距離 .

Si からの距離 ()	1	2	3
0.916183125	-3.94	-2.44	-4.17
0.715183125	-1.62	-4.14	-6.05
0.514183125	20.83	-6.00	-7.43
0.313183125	113.32	-7.38	-8.01
0.212683125	254.17	-8.00	-7.95
0.112183125	718.49	-7.70	-7.66

表 3.2: 図 3.5 の 1,2,3 で計算したエネルギーと Si からの距離 .

Si からの距離 ()	1	2	3
1.545187500	-2.45	-2.36	-2.36
1.344187500	-3.54	-3.41	-3.42
1.143187500	-4.83	-4.76	-4.71
0.942187500	-5.79	-6.21	-6.12
0.741187500	-3.60	-7.44	-7.62
0.540187500	15.37	-7.82	-8.74
0.339187500	93.04	-6.61	-7.80
0.138187500	529.60	-3.80	-7.94

表 3.1 , 3.2 から最安定位置と最安定エネルギーを表 3.3, 表 3.4 にまとめた .

表 3.3: 図 3.4 の 1,2,3 で計算した最安定エネルギーと最安定位置 .

場所	最安定エネルギー (eV)	最安定位置 ()
1	-7.82	0.540187500
2	-8.74	0.540187500
3	-5.79	0.942187500

表 3.4: 図 3.5 の 1,2,3 で計算した最安定エネルギーと最安定位置 .

場所	最安定エネルギー (eV)	最安定位置 ()
1	-8.00	0.212683125
2	-8.01	0.313183125
3	-3.94	0.916183125

3.6.2 考察

図 3.6 , 3.7 に Si 面 , Si 修飾をした C 面に C 原子を吸着させた時のエネルギー準位の模式図を示した . 図 3.6 , 3.7 より C 原子の拡散には経路がいくつかあることがわかる . それら C 原子の拡散経路の模式図を図 3.8 に示した . 図 3.8 より拡散には赤色の矢印と青色の矢印の 2 つの経路が考えられる . このうち , 実際に原子が通る経路は最も活性化エネルギー , つまりエネルギーの山が低い経路をとると考えられる . SiC の表面においては , 図 3.6 , 3.7 より , C 面を Si 修飾した面での経路つまり図 3.8 の赤色の矢印で示された経路を通ることが考えられる .

ここでもう一度 , 図 3.4 , 3.5 に注目する . この結晶表面上で $2 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 1 \rightarrow \dots$ のように 3 を通らずに様々な所へ拡散していく .

Si 面である図 3.4 の場所 2 が最安定位置であることから , C 面よりも Si 面に C 原子が付着する方が安定であることがわかった .

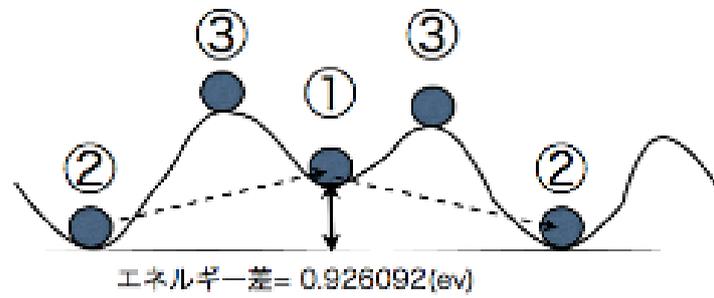


図 3.6: Si 面に C 原子を吸着させた時のエネルギー準位を示した模式図 . 1,2,3 は図 3.4 に示した吸着サイトをそれぞれ示している .

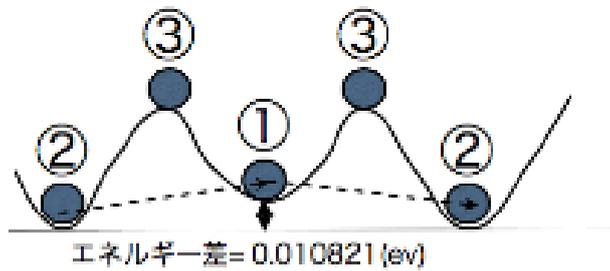


図 3.7: Si 修飾をした C 面に C 原子を吸着させた時のエネルギー準位を示した模式図 . 1,2,3 は図 3.5 に示した吸着サイトをそれぞれ示している .

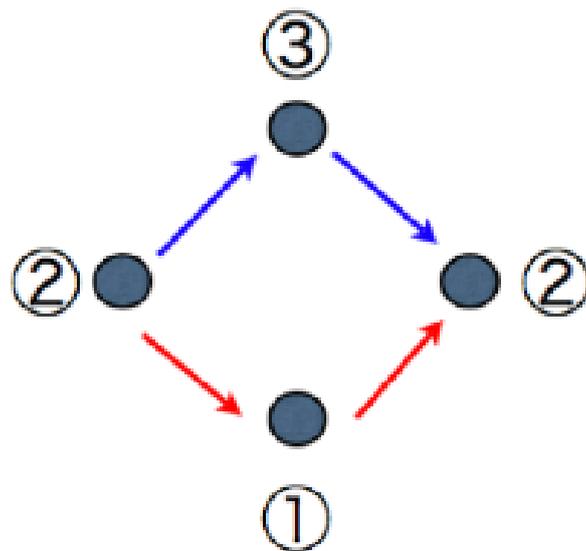


図 3.8: C 原子の表面拡散の模式図 . 1,2,3 はそれぞれ計算した原子のサイトを表している .

第4章 総括

本研究では、結晶表面の原子レベルでの構造をモデル化し、第一原理計算を用いてエネルギーの計算をした。その結果、以下のような知見が得られた。

- 求めた値から表面エネルギーを計算した 3C-, 4H-, 6H-SiC の (0001) 面, (11-20) 面, (1-100) 面の中で最も安定なのが 4H-SiC(11-20) 面と最も不安定なのが 4H-SiC の (0001) 面であること。また、本来、安定であるという結果が多く報告されている (0001) 面が本研究で 3 面の中で最も不安定な面であることがわかった (表 2.4 参照)。しかし、これは、(0001) 面が polar(極性) 界面であることから正確な値を得にくいことを考慮しなくてはならない。
- Si 面, Si 修飾した C 面で合計 6 点を取りさらに z 軸方向にリラクゼーションさせ数カ所の第一原理計算を行った。その結果、図 4.1, 4.2, この結晶表面上で $2 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 1 \rightarrow \dots$ のような 3 を通らずに様々な所へ拡散していくことがわかった。また、エネルギー差が均衡しているため断定はできないが Si 面側に最小なエネルギーが得られた。C 側の方が最安定エネルギーと準安定エネルギーの差が小さかった。これより Si 面に C 原子が付着する方が安定であることがわかった。

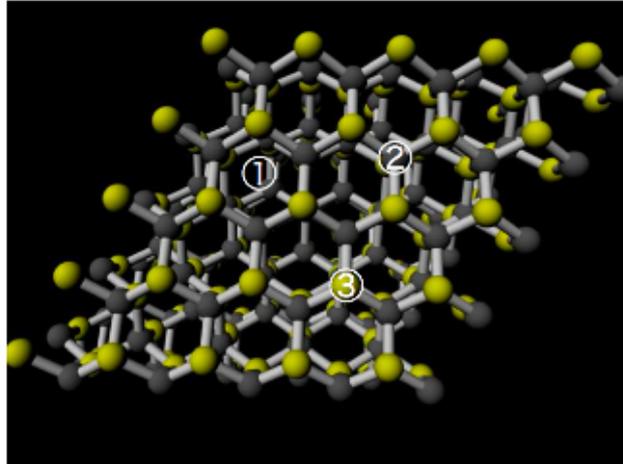


図 4.1: 図 3.2 を上部から見た結晶構造 .

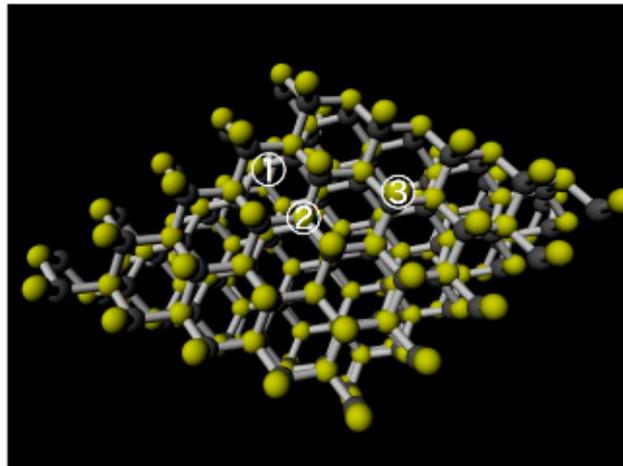


図 4.2: 図 3.2 を下部から見た結晶構造 .

謝辞

本研究を遂行するにあたり，終始多大なる有益なご指導，及び丁寧な助言を頂いた西谷滋人教授に深い感謝の意を表します．

また，本研究を進めるにつれ，西谷研究室員の皆様にも様々な知識の供給，ご協力を頂き，本研究を大成する事ができました．最後になりましたが，この場を借りて心から深く御礼申し上げます．

引用文献

- [1] S.T.Sheppard,et al:” Characteristics of Inversion-Chemical and Buried-Channel MOS Devices in 6H-SiC” , IEEE Trans.,on Electron Device,41 (1994) 1257.
- [2] 関西学院大学, 博士論文, 2004年1月, 浅岡康著.『極薄液層環境を用いた単結晶 SiC 薄膜成長に関する研究』
- [3] 『炭化珪素の特徴』 <http://www.geocities.co.jp/Bookend-Kenji/5046/sic2.html> (2008/2/5 アクセス)
- [4] 荒井和雄・吉田貞史 共著『SiC素子の基礎と応用』(オーム社,2003)
- [5] 西谷滋人著.『固体物理の基礎』(森北出版株式会社,2006)
- [6] 上羽牧夫 責任編集.『結晶成長のしくみを探る その物理的基礎』,(共立出版株式会社,2002).
- [7] 『界面設計ラボ』 <http://www.onri.go.jp/Vl/intface/calculation/tips.html> (2008/2/2 アクセス)
- [8] 『スーパーセル法,スラブモデル』 http://hermes.esys.tsukuba.ac.jp/tshimizu/abinitio/supercell_method.htm (2008/2/2 アクセス)

付録A MedeAによるスラブ構造の計算の使用法

A.1 セルの作成

A.1.1 モデルウィンドウを開く

File では新しいファイル作成したり，すでにあるファイルを読み込んだりすることができる．ここでは，新しいファイルの作成する．

MedeA のメインメニューから「File > New」を選択する．そしたら，周期境界を示すボックスのみが表示された「Untitled」の名前がついたウィンドウが表示される．

A.1.2 対称性の設定

1. まず，対称性の情報を入力する．
2. MedeA のメインメニューから「Edit > Edit structure...」を選択する．または，モデルウィンドウ上でマウス右クリックし，「Edit Symmetry...」を選択する．
3. 「Strucute Editor」が表示される．現在の対称性は P1 となっている．「Spacegroup:」の右にあるボタンをクリックする．3C SiC の対称性は F-43m 4H 6H-SiC の対称性は $P6_3mc$ なので，「Primitive」のリストの中から選択して OK のボタンをクリックする．

A.1.3 格子定数の設定

1. 続いて，格子定数を変更する．デフォルトでは，新しい格子の定数は $a=b=c=10$ ， $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ になっている．

2. MedaA のメインメニューから「Edit > Edit strucute 」を選択し、「Structure Editor」を開いたら「Cell」タブを選択する。または、モデルウィンドウ上では右クリックし、「Edit Cell...」を選択する。
3. 3C SiC は対称性が F-43m と規定されているため、a 軸の長さのみ変更可能になっている。3C SiC の格子定数はおよそ 4.36 なので、A:の右のボックスに 4.36 と入力する。

表 A.1: 3C SiC の格子定数の例。

A	B	C	α	β	γ
4.36	4.36	4.36	90	90	90

4. 4H 6H SiC は対称性が P6₃mc と規定されているため、a,c 軸の長さのみ変更可能になっている。4H SiC の a,c 軸の格子定数はおよそ 3.08 , 10.05 なので、A:の右のボックスに 3.08 , C:の右のボックスに 10.05 と入力する。
5. 6H SiC の a,c 軸の格子定数はおよそ 3.08 , 15.12 なので、A:の右のボックスに 3.08 , C:の右のボックスに 15.12 と入力する。

表 A.2: 4H SiC の格子定数の例。

A	B	C	α	β	γ
3.08	3.08	10.05	90	90	120

表 A.3: 6H SiC の格子定数の例。

A	B	C	α	β	γ
3.08	3.08	15.12	90	90	120

A.1.4 原子の入力

1. MedeA のメニューから「Edit > Edit structure... 」を選択し、「Structure Editor」を開いたら「Add Atom」タブを選択する。ま

たは，マウス右クリックから「Add Atom..」を選択し，Structure Editor を開く．

2. まず，C原子を挿入する．Element 部分にはデフォルトでCが入っているなので，そのまま SiC の C を挿入していく．Si 原子はキーボード入力で Si と変更するか，その右側にあるアイコンをクリックして，周期律表を開き Si を選択する．

表 A.4: 3C SiC の原子位置の例．

Name	X	Y	Z
Si	0	0	0
C	0.25	0.25	0.25

表 A.5: 4H SiC の原子位置の例．

Name	X	Y	Z
Si	0	0	0
Si2	0.33333	0.66667	0.25
C	0	0	0.17
C2	0.33333	0.66667	0.43750

表 A.6: 6H SiC の原子位置の例．

Name	X	Y	Z
Si	0	0	0
Si2	0.33333	0.66667	0.66667
Si3	0.33333	0.66667	0.33333
C	0	0	0.125
C2	0.33333	0.66667	0.45833
C3	0.33333	0.66667	0.79167

A.2 スーパーセルの構築

1. スーパーセルの構築はツールを使用し作成できるため，簡単に説明する。「Edit > Build supercells...」を選択する。
2. 「Supercell Builders」ウィンドウが起動する。「number of cell」に数値を入力し，OK ボタンをクリックするとスーパーセルが構築されたモデルウィンドウが開きます。

A.3 スラブモデルの構築

1. スラブモデルの構築はツールを使用し作成できるため，簡単に説明する。「Edit > Build surface...」を選択する。
2. 「Surface Builders」ウィンドウが起動する。「Miller Indices」に数値を入力し，OK ボタンをクリックするとスラブモデルが作成されます。

A.4 VASP の計算

A.4.1 計算設定

1. SiC の構造の最適化を計算する。MedeA メインメニューから「Tools > VASP.4.6」を選択する。しばらくするとメインメニューに VASP.4.6 が追加されるので、「VASP.4.6 > RUN」を選択する。
2. Calculation タブで以下の設定を行う。
 - Type of calculation を Single Point から Structure Optimization に変更する。
 - Structure Optimization Parameters の 3 つのチェックボックス全てをチェックする。
 - Tile は 4H-SiC なら 4H-SiC などと入力するとよい。
 - 設定が終わったら Run ボタンをクリックする。

A.4.2 計算実行

1. キューとプライオリティの指定を行う。
2. キューは `takeda3` と `remote` がありお互い4つの Job を実行することができ、それ以上の Job を実行すると待ち状態 (pending) になる。
3. プライオリティは優先度のことであり、数を多くすると優先度が上がり、小さくすると優先度が下がる。デフォルトでは5になっている。
4. 設定が終わったら Run ボタンをクリックする。

A.4.3 計算結果

1. MedeA メインメニューの「Job Control > View and Job Control」を選択する。しばらくすると、ウェブブラウザが起動し、ジョブ制御画面が現れる。
2. 黒いバーの中あるいはパイパーリンクされている Jobs をクリックすると、ジョブ一覧表が表示される。
3. ジョブの番号が割り当てられている。Status の部分には現在のジョブの状態が分かる。Status 部分には以下の状態が存在する。
4. Status が finished になった番号をクリックする。
5. Available Output Files の一番上のファイル `Job.out` をクリックする。このファイルが計算のサマリになる。
6. `Job.out` ファイルの中には計算条件、計算結果 (構造, エネルギー, 力, 圧力, 計算時間) に関する情報が収められている。構造最適化計算を行った場合は計算前後の構造についての情報が入っている。構造最適化の結果、元の格子からわずかに格子が収縮した状態で安定構造が求まっている。

付録B mapleによる表面エネルギーの計算

4H-SiC-2*2*1-001 (0001) 面

S:=sqrt(3)*a^2/2;

a:=3.08962*10⁽⁻¹⁰⁾;

evalf(S);

```

1 (1/2) 2
- 3      a
2
-10
3.089620000 10
-20
8.266863511 10

```

E1:=-120.474557;

E2:=-113.211610;

dE:=(E2-E1)/2;

dE2:=dE*1.60218*10⁽⁻¹⁹⁾;

```

-120.474557
-113.211610
3.63147350
-19
5.818274212 10

```

G:=evalf(dE2/S);

```
7.038067348
```

restart;

4H-SiC-2*2*1-110 (11-20) 面

S:=5.35138*10⁽⁻¹⁰⁾*10.1021*10⁽⁻¹⁰⁾;

```

-19
5.406017590 10
E1:=-240.949114;
E2:=-217.812981;
dE:=(E2-E1)/2;
dE2:=dE*1.60218*10(-19);
-240.949114
-217.812981
11.5680665
-18
1.853412478 10
G:=evalf(dE2/S);
3.428424801
restart;
4H-SiC-2*2*1-100 (1-100) 面
S:=10.1021*10(-10)*3.08962*10(-10);
-19
3.121165020 10
E1:=-240.949114;
E2:=-223.423598;
dE:=(E2-E1)/2;
dE2:=dE*1.60218*10(-19);
-240.949114
-223.423598
8.7627580
-18
1.403951561 10
G:=evalf(dE2/S);
4.498165115
restart;
6H-SiC-2*2*1-001 (0001) 面
S:=3.09*10(-10)*2.6761*10(-10);
-20
8.269149000 10
E1:=-90.34633;

```

```

E2:=-83.148221;
dE:=(E2-E1)/2;
dE2:=dE*1.60218*10(-19);
-90.34633
-83.148221
3.59905450
-19
5.766333139 10
G:=evalf(dE2/S);
6.973309030
restart;
6H-SiC-2*2*1-110 (11-20) 面
S:=5.35224*10(-10)*15.148*10(-10);
-19
8.107573152 10
E1:=-361.385329;
E2:=-325.870522;
dE:=(E2-E1)/2;
dE2:=dE*1.60218*10(-19);
-361.385329
-325.870522
17.7574035
-18
2.845055674 10
G:=evalf(dE2/S);
3.509133523
restart;
6H-SiC-2*2*1-100 (1-100) 面
S:=15.148*10(-10)*3.09011*10(-10);
-19
4.680898628 10
E1:=-361.385329;
E2:=-335.762479;
dE:=(E2-E1)/2;
dE2:=dE*1.60218*10(-19);

```

```

-361.385329
-335.762479
12.8114250
-18
2.052620891 10
G:=evalf(dE2/S);
4.385100072

```

```

restart;
3C-SiC-2*2*2- (111) 面
S:=3.08299*10^(-10)*2.6699477*10^(-10);
-20
8.231422060 10

```

```

E1:=-90.2917185;
E2:=-83.171251;
dE:=(E2-E1)/2;
dE2:=dE*1.60218*10^(-19);
-90.2917185
-83.171251
3.56023375
-19
5.704135310 10
G:=evalf(dE2/S);
6.929708219

```

```

3C-SiC-2*2*2(1-10) 面
restart;
S:=3.08297*10^(-10)*4.36*10^(-10);
-19
1.344174920 10
E1:=-120.388958;
E2:=-114.273044;
dE:=(E2-E1)/2;
dE2:=dE*1.60218*10^(-19);
-120.388958

```

```

-114.273044
3.05795700
-19
4.899397546 10
G:=evalf(dE2/S);
3.644910698
restart;
3C-SiC-2*2*2- (11-2) 面
S:=3.08298*10^(-10)*7.5517*10^(-10);
-19
2.328174007 10
E1:=-361.166874;
E2:=-348.160945;
dE:=(E2-E1)/2;
dE2:=dE*1.60218*10^(-19);
-361.166874
-348.160945
6.5029645
-18
1.041891966 10
G:=evalf(dE2/S);
4.475146458

```