

21pTD-1

SiCの有限温度における相安定性の第一原理計算

関学大院理工 竹田 諒平, 西谷 滋人, 金子 忠昭

First Principles Calculations of SiC vibrational free energy.
Kwansei Gakuin Univ., R. Takeda, S.R. Nishitani and T. Kaneko.

SiCは半導体デバイスとして使える欠陥の少ない単結晶を得るのが難しい欠点があったが、結晶成長技術が進んで、実用的な半導体デバイスが試作されるようになった。SiCは多くの多形結晶がある化合物である。この研究では3C, 4H, 6H-SiCの有限温度のときの自由エネルギーを第一原理計算で求める事によって、SiCの結晶成長を制御する必要な知見を得ることを目的とする。

第一原理計算ソフトはVASP (Vienna Ab-initio Simulation Package)を使用する。第一原理計算ソフトVASPだけで求められたSiCの物性は原子の振動のない状態における物性である。そこで、Phonon という格子振動の物性を計算するためのツールを使用する。

Fig. 1は第一原理計算で求めた3C, 4H, 6H-SiCのエネルギーの体積依存性を求めた曲線であり、体積に対するエネルギーはほとんど同じである事が解る。それに対して、Fig. 2は6H-SiCを基準にして温度に対する自由エネルギーを出したものである。こちらは、温度に対してエネルギーの差があることが解る。中間温度では6H-SiCが最も安定な構造であり、自由エネルギーは3C > 4H > 6Hとなっており、結晶成長させるときの実験結果と一致する。

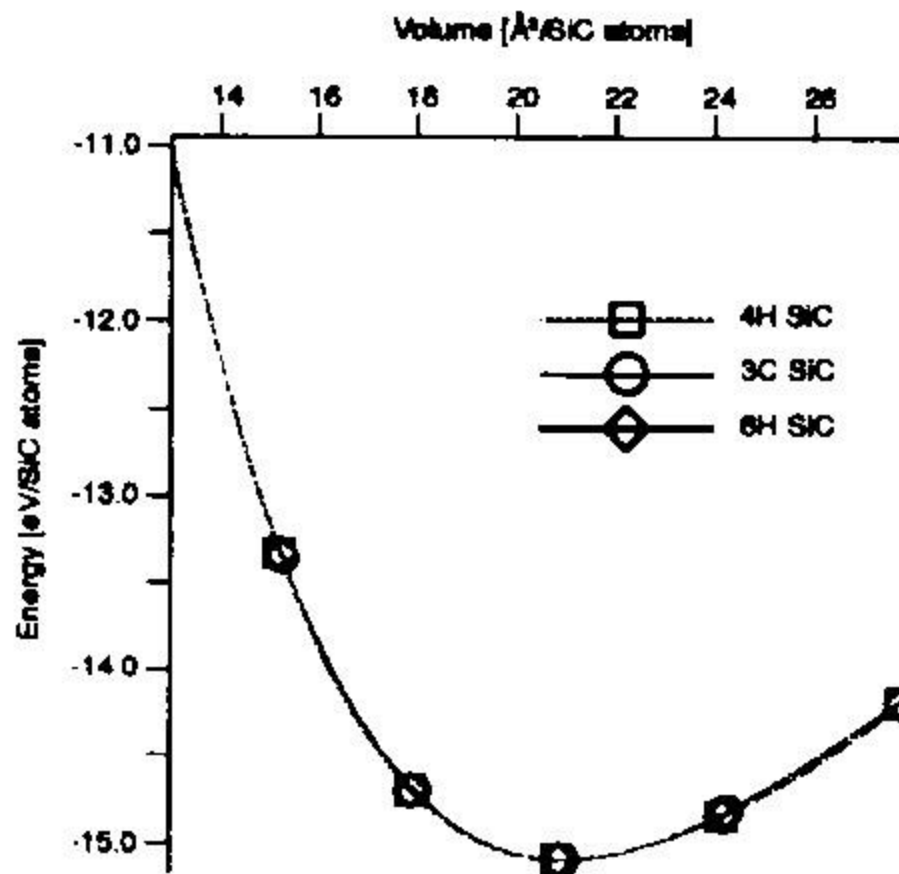


Fig. 1 Energy-Volume curve

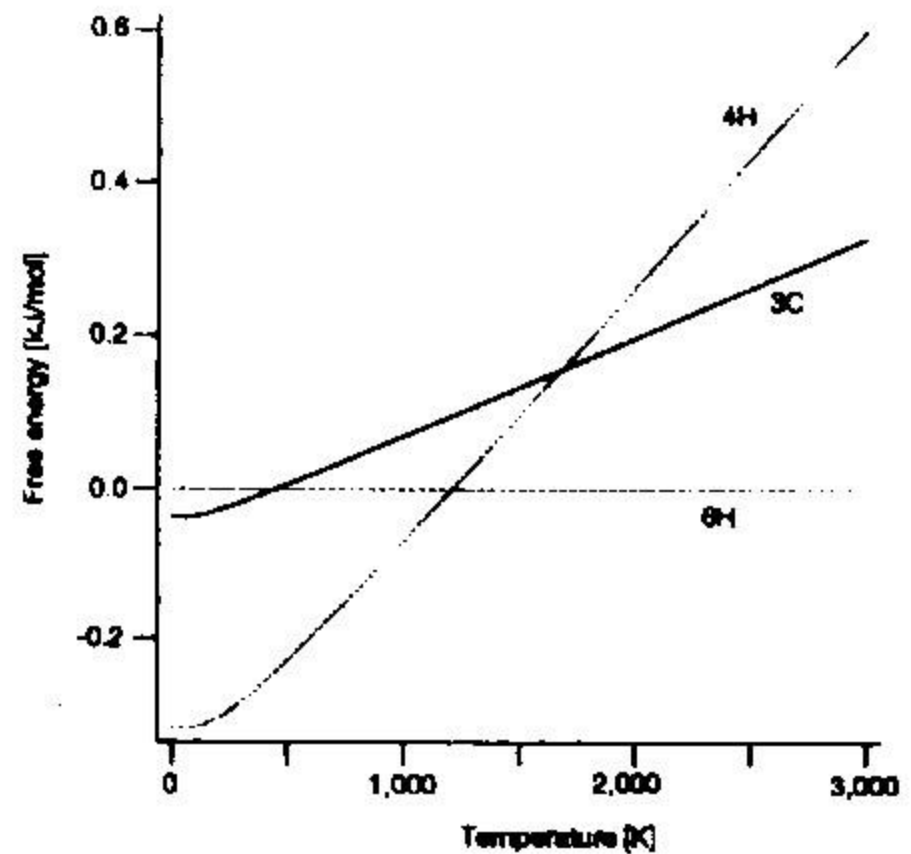


Fig. 2 Temperature dependency vibrational free energy