

22aWA-2

SiC多形の熱膨張の第一原理計算

関西学院大院 理工 石井英樹, 竹田諒平, 西谷滋人, 金子忠昭, 大谷昇

First principles calculations on thermal expansion of SiC polytypes,

Kwansei Gakuin Univ., H. Ishii, R. Takeda, S. R. Nishitani, T. Kaneko and N. Ohtani.

【背景】次世代パワーデバイスの素材として有望視されているSiCの単結晶を液相から安価に作成する準安定溶媒エピタキシー法を発表者らは開発している。このプロセスは4H-SiCを基板, 3C-SiCを原料として使用し, その間に溶媒として液体Siの薄膜を挟み込んだ構成をとる。これはよく知られた溶媒移動法と似ているが, 温度勾配が存在しない。溶媒移動の駆動力はSiC多形の化学ポテンシャル差である。ところが, SiCのエネルギー差は微妙で, 実験から求める事が非常に困難である。本研究では, 第一原理計算によってフォノン分散を求め, 振動効果を取り入れた高温での3C, 4Hおよび6H-SiC多形の自由エネルギーを計算した。さらに熱膨張を求め, 実験結果と比較し, その安定性への影響を検討した。

【結果】第一原理計算には, 擬ポテンシャル法によるVASPを用い, フォノン計算にはMedeAを利用した。図1が4Hを基準にした, SiC多形の振動の自由エネルギーから求めた温度依存性である。体積一定の計算に比べて, 6Hはほとんど変化ないが, 3Cへの変態温度が高温側にシフトしている。一方, 図2に示したSiC多形の体積膨張率から求めた温度依存性では, 4H-SiCや6H-SiCと比べ, 3C-SiCの熱膨張率が極端に高かった。高温における3C-SiCの不安定化の原因は, 体積膨張ではなく, 硬さの上昇によるものと考えられる。

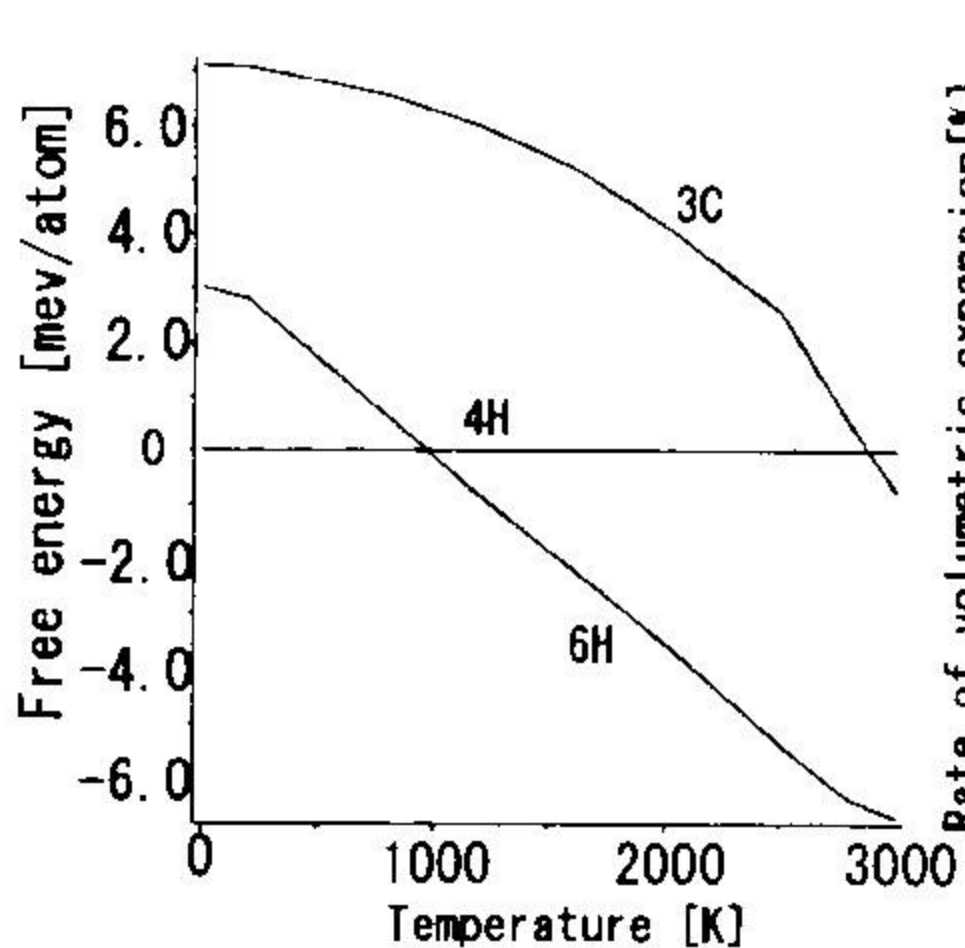


図1. Temperature dependency of free energy with thermal expansion.

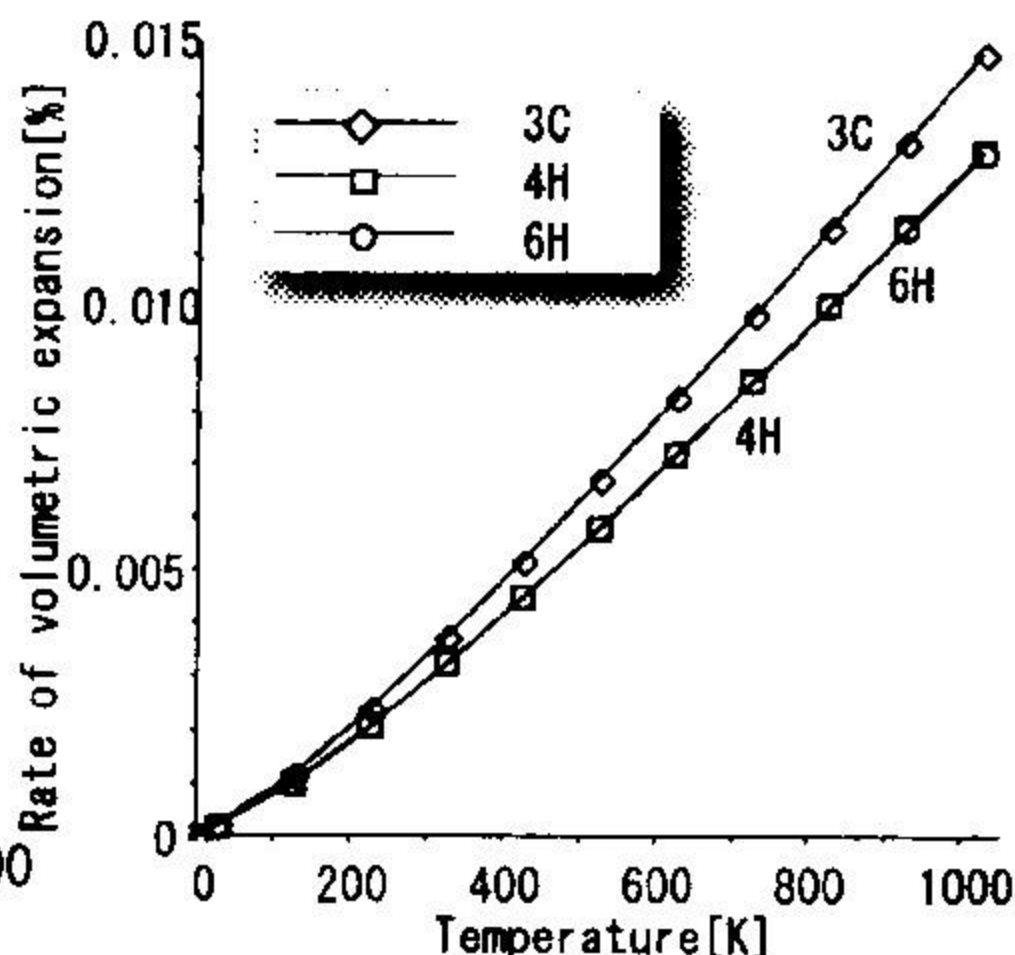


図2. Temperature dependency of volumetric expansion.