

SiC表面エネルギーの第一原理計算

関西学院大院大理工 戸賀瀬健介, 寺井健太, 西谷滋人, 金子忠昭, 大谷昇

First-principles calculation on Surface Energy of SiC,

Kwansei Gakuin University, K. Togase, K. Terai, S. R. Nishitani, T. Kaneko and N. Ohtani

【目的】準安定溶媒エピタキシー(Metastable Solvent Epitaxy)は、著者らが開発しているSiC溶液成長の新奇なプロセスである。そこでは、4H-SiCを基板(seed)、3C-SiCを原料板(feed)として使用し、その間に溶媒として液体Siの薄膜を挟み込むことで、SiCをSiの準安定溶媒からエピタキシャル成長させる。このプロセスにおける結晶成長の制御には、成長面の方位依存性を明らかにする必要がある。本研究では、SiCの代表的な結晶表面において第一原理計算を行い、表面エネルギーを求めた。

【方法】表面エネルギーを計算するにあたって、代表的なSiC結晶の多形として3C、4H、6H-SiCを対象とした。次に代表的な面として4H、6Hでは{0001}、{11-20}、{1-100}面の表面エネルギーを、立方晶をとる3C-SiCについてはそれらと等価となる{111}、{1-10}、{11-2}面を計算の対象とした。原子モデル構築ソフトMedeAを用いて、3C、4H、6H-SiCのバルクモデルと、対象となる面のスラブモデルとを作成した。第一原理計算は平面波基底擬ポテンシャル法であるVASPを用い、その値から単位面積あたりの表面エネルギーを求めた。

【結果】計算結果を図1にまとめた。各面の表面エネルギーは3C、4H、6H-SiCのいずれの多形でもほぼ同じである。{0001}面の面エネルギーは他の面に比べて大きく、{11-20}面の表面エネルギーが最も小さくなった。実験によると{0001}面が最も面積が大きく平坦な結晶成長を示している。計算結果では、{0001}面が最も不安定であったことから、実際の成長においては、結晶の成長は{11-20}面によって決定されること予想された。

