

## 23pYF-5 SiC 多形の高温安定性の第一原理計算

関西学院大理工 西谷滋人, 竹田諒平, 石井英樹, 金子忠昭

First principles calculations on phase stability of SiC polytypes.

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

【目的】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 の新奇な単結晶作成法として準安定溶媒エピタキシー法を, 発表者らは提案している. その動作原理においては, 3C, 4H, 6H などの SiC 多形の高温安定性が問題となる. 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自由エネルギーから SiC 多形の安定性を議論する.

【背景】SiC の液相からの新しい成長法では, 3C 構造の多結晶原料から, 液体 Si を溶媒として, 4H 構造の単結晶を育成する. この系では溶媒 Si を数十から数百  $\mu\text{m}$  と非常に薄く均熱に保持している. この系での結晶成長の駆動力は, 溶媒が SiC と接する界面での平衡濃度の差で, 各多形の安定一準安定の差がその起源となる. ところが, SiC の多形のエネルギー差は微妙で, 実験からも確定していない.

【計算結果】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 が得られた結果である. ここでは, 有限温度による熱膨張も取り入れて計算している. 絶対零度の安定性は僅かな差であるが, 3C が最も不安定で, 4H, 6H と安定化していた. しかし, 零点振動も含めると 4H と 6H の安定性は逆転する. さらに温度を上げると高温で 4H と 6H の安定性が逆転することがわかった. これらの結果は現在得られている実験結果を再現するものである.

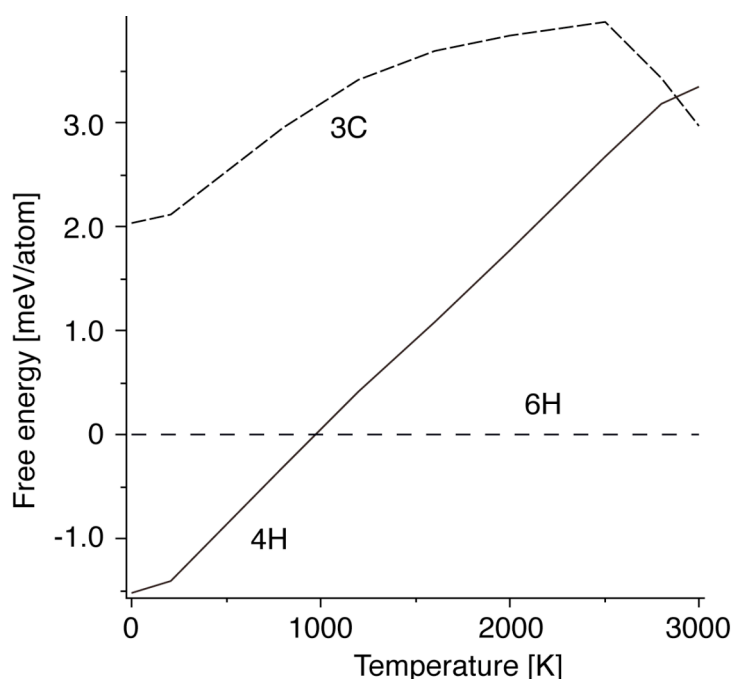


図 1 SiC 多形の自由エネルギー差.