

# 25pYK-1 SiC結晶成長の第一原理計算

関学大理工 西谷滋人, 金子忠昭

First principles calculations on SiC crystal growth,  
Kwansei Gakuin Univ., Shigeto R. Nishitani, and Tadaaki Kaneko.

【緒言】次世代の高出力デバイスの有望な素材であるシリコンカーバイド (SiC) を溶液から成長させる新しい手法を著者らは開発している. 図1に模式的に示した通り, 系の温度分布は一定であるが, 溶媒Siを挟んで対向している3Cと4HSiCのエネルギー差つまり化学ポテンシャルの差によって物質移動が起こり, 結晶成長が進行する. この成長の駆動力は合成ダイヤモンドと同じである. この新規な結晶成長の実験結果を解釈する第一原理計算の結果を報告する.

【計算結果】有限温度の自由エネルギー差: Si-C系では3Cが全温度域で安定とする状態図が一般に受け入れられている. しかし, 第一原理計算で得られた phonon-DOSを用いた擬調和振動子近似による有限温度での自由エネルギーの見積もりでは, 1000Kまでは4Hが安定, 3Cが準安定であることが示唆された.

この結果は, 液体Siの溶媒を挟んで3C相から4H相が等温環境で晶出する実験結果と整合している.

**表面エネルギー:** SiCの溶媒成長においてフラットな成長面となる(0001)面は, 極性界面である. そこで, 化学ポテンシャル差を取り入れた表面エネルギー計算を実行した. その結果, (0001)面がそれに直交する面に対して, Si-richでは安定, C-richでは不安定となる結果が得られた. これは, SiCの成長に特有のマイクロパイプの生成消滅が環境に依存していることを示唆している.

**表面拡散:** (0001)面でのC原子の拡散過程での活性化エネルギーは, もっとも低い方向では1eV程度であり, 容易に拡散が可能であることを示唆している. これらの結果から得られた, SiCの準安定溶媒成長機構の概要について報告する.

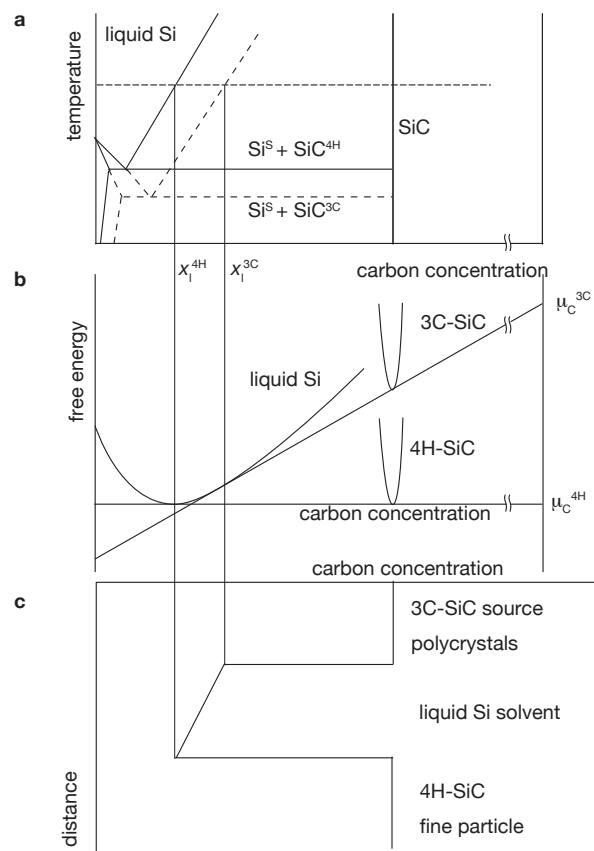


図1: Si-C系のa) 準安定平衡状態図, b) 自由エネルギー曲線, c) 実験系の濃度プロファイルの模式図.