

SiC表面エネルギーの第一原理計算

関西学院大理工 戸賀瀬健介, 西谷滋人, 金子忠昭

First-principles calculations on surface energy of SiC,
Kwansei Gakuin University, K.Togase, S.R.Nishitani, T.Kaneko

【緒言】 準安定溶媒エピタキシー (Metastable Solvent Epitaxy) は筆者らが開発した新奇なSiC液相成長法である。その構成は、基板に4H-SiC、原料板に3C-SiCを使用しており、その間に薄膜の液体Si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ている。MSEによって成長させたSiC単結晶は、面方位によって結晶成長の様子が異なる。また{0001}極性面が最大の面積を示すと報告されている。本研究では、このようなSiC極性面の環境依存性の原因を明らかにするため、第一原理計算によってSiCの表面エネルギーを求めた。

【手法】 代表的なSiC結晶の多形である3C, 4H, 6H-SiCを対象とした。表面方位は、六方晶となる4H, 6H-SiCでは極性面となる{0001}面とそれに直交する{11-20}, {1-100}面を、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。SiCのスラブモデルを構築し、化学ポテンシャル差を考慮して、単位面積あたりの表面エネルギーを求めた。なお、第一原理計算には、平面波擬ポテンシャル法であるVASPを用いた。

【結果】 計算結果をFig.1にまとめた。各面の表面エネルギーは(a)Si-rich, (b)C-richのいずれの環境においても、SiC多形の間で大きな差は見られなかった。極性面である{0001}面は、Si-rich環境では最安定面となり、C-rich環境では最も不安定な面となった。今回得られた計算結果は、MSEの実験において{0001}極性面が最大の面積を示すという結果と整合している。

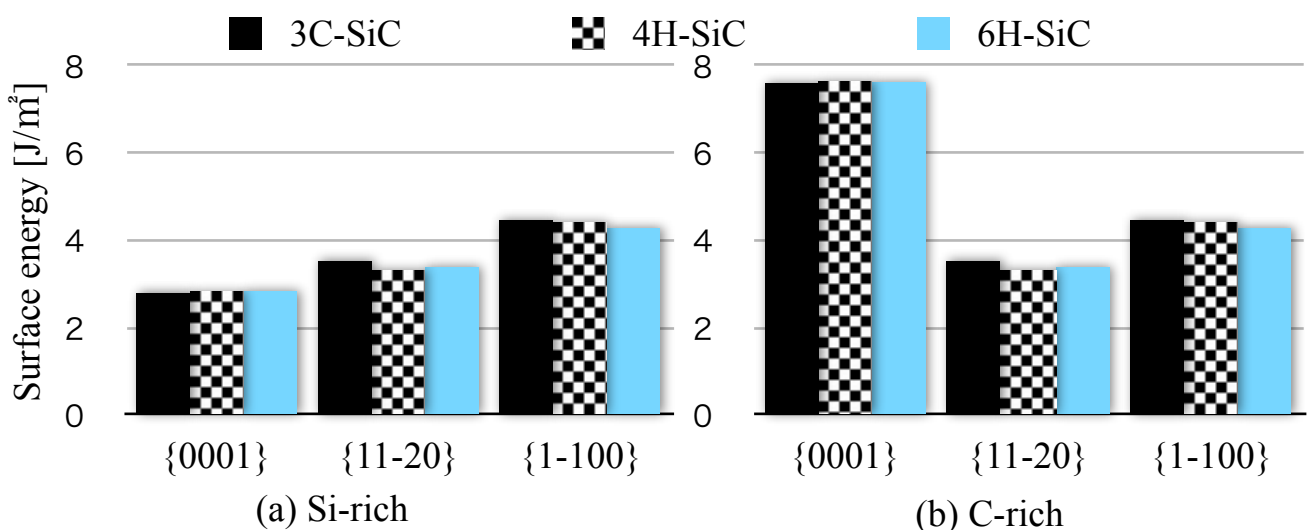


Fig.1 : 極性面における表面エネルギーの環境依存性.