

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(学生), 西谷滋人, 金子忠昭, 大谷昇.

【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-SiCでは{0001}, {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。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、対象となる面で区切ったスラブモデルを作成した。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】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となった。最も表面エネルギーが小さいのは約 3.5J/m^2 の{11-20}面であった。約 4.2J/m^2 をとる{0001}面が実験では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、{11-20}面が最安定を示したことから、実際の成長においては、結晶の外形は動的な機構によって決定していることが示唆された。