

SiC表面拡散の第一原理計算

関西学院大院 理工 ○山本洋佑, 西谷滋人, 金子忠昭, 大谷昇

【背景】現在SiCのバルク成長に多形のエネルギー差を駆動力とし、高品質のSiCの単結晶を生成する成長手法が、著者らによって開発された。これは準安定溶媒エピタキシー(Metastable Solvent Epitaxy)と称しており、4H・3C-SiCをそれぞれ基板・原料板とし、その間に液体Siの溶媒薄膜を挟み込んだ構成をとる。本研究では、4H-SiCの成長面である{0001}面において、C原子がどのような経路を辿るか第一原理計算により検討した。

【手法／結果】実験は固液界面での反応であるが、計算は真空との界面を想定した。C原子を付着させた表面モデルを作成し、その原子を縦方向に振り、第一原理計算により安定位置を求めた。図1に示したごとく、ある拡散経路における活性化エネルギーが小さく、高速に拡散する事が期待される結果が得られた。

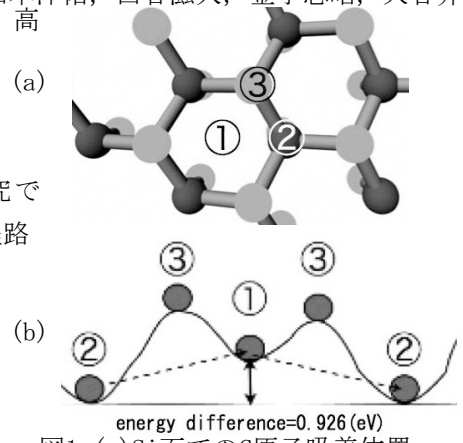


図1 (a) Si面でのC原子吸着位置.
白球がSi原子, 黒球がC原子.
(b) C原子の活性化エネルギーの模式図.