

SiC 結晶多形における振動自由エネルギーの第一原理計算

関西学院大理工, 山本洋佑, 西谷滋人, 金子忠昭

First principles calculations on vibration free energies of SiC polytypes

Kwansei Gakuin University, Y.Yamamoto, S.R.Nishitani, T.Kaneko

【緒言】近年, 高品質な SiC 単結晶を生成する新奇の成長手法が関学大金子らによって開発された. その手法は Metastable Solvent Epitaxy (MSE) と呼称されており, 基板に 4H-SiC, 原料板に 3C-SiC, その間に液体 Si を挟むサンドイッチ構造をとる. その成長メカニズムは, 実験温度における両多形の相安定性の差から生じる溶解度限に起因すると考えられる. しかし既報の状態図, および第一原理計算によって求められた SiC 結晶多形における相安定性のヒエラルキーは MSE と整合していない. 現在最も広く受け入れられている Si-C 二元系状態図 (Fig. 1) では, 他の多形は言及されているものの, 全温度域において 3C-SiC が最安定相と報告されている.

【手法】本研究では, 上記矛盾を解明するため, 有限温度における第一原理計算から自由エネルギーを算出し, SiC 結晶多形の相安定性を検討した. なお, 第一原理計算には, 平面波基底擬ポテンシャル法の VASP (Vienna ab-initio simulation package) を用い, フォノン計算には直接法の MedeA-phonon を用いた.

【結果】我々の計算結果を Fig. 2 に示した. 全温度域において 3C-SiC は最安定相とはならず, 低温域で 4H-SiC が, 高温になるにつれて 6H-SiC が最安定相となり, 相変態がみられるという新たな知見を得られた. しかしどの多形間の自由エネルギー差も微小であり, 計算精度が不十分な可能性がある. 今後, さらに高精度なフルポテンシャル法を用い, 相安定性を検討する必要がある.

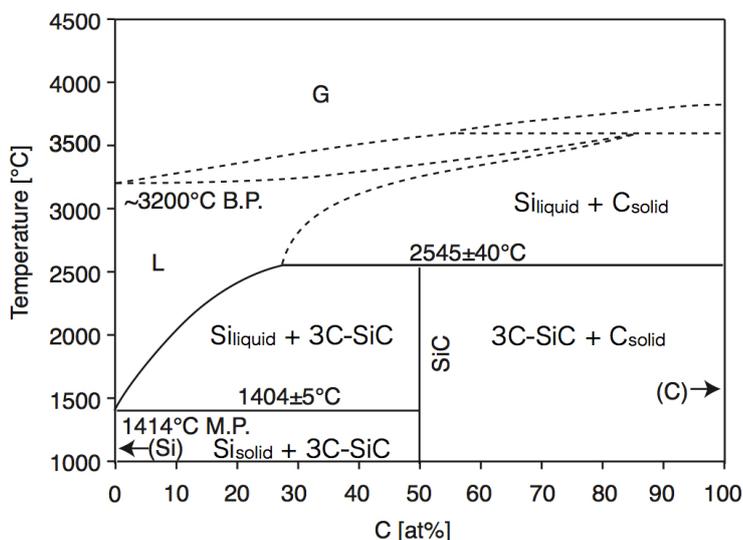


Fig. 1 Si-C 二元系状態図.

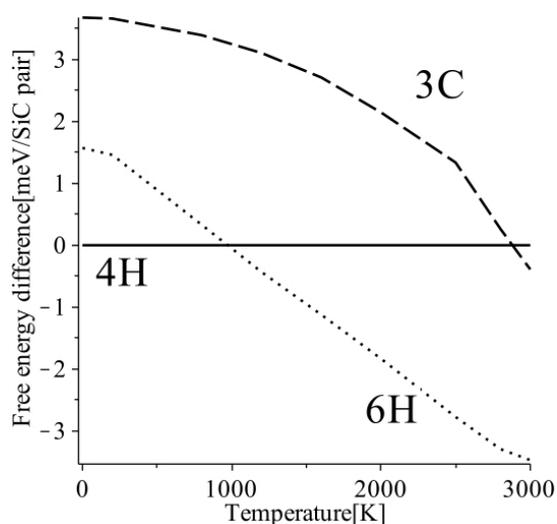


Fig. 2 4H-SiC を基準とした SiC 結晶多形における自由エネルギーの温度依存性.