

熱膨張を加味した 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

First principles calculations of the vibration free energies of SiC polytypes including thermal expansion

Kwansei Gakuin Univ., Y. Yamamoto, and S. R. Nishitani

近年, 高品質なSiC単結晶を生成する新奇の成長手法Metastable Solvent Epitaxy (MSE) が関学大金子らによって開発された. その構成は, 基板に4H-SiC, 原料板に3C-SiC, その間に液体Siを溶媒として挟むサンドイッチ構造をとる. 結晶成長の駆動力は, 安定な4H-SiCと, 準安定な3C-SiCとのエネルギー差であると考えられる. しかし図1に示した既報のSi-C二元系状態図では, 六方晶系について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おり, MSEから予測されるSiC結晶多形における相安定性のヒエラルキーと整合しない[1].

我々は, 有限温度効果を取り入れた第一原理計算から自由エネルギーを求め, SiC結晶多形の相安定性を検討してきた. 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, MedeA-Phononを組み合わせることによって熱振動効果, ならびに熱膨張を考慮してきた. 今回, その計算精度について見直し, 擬ポテンシャルとして用いるPAW法と整合する平面波のカットオフエネルギー400eVにおいて, 再計算を行った. 我々の計算結果を図2に示した. 全温度域において6H-SiCが最安定相となり, 図1の状態図ならびにMSEの実験結果を再現するに至らなかった. 各多形間の自由エネルギー差が微小であることから, 擬ポテンシャル法では計算精度が不十分である可能性を示唆している. 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.

[1] R. W. Olesinski and G. J. Abbaschian, Bulletin of Alloy Phase Diagrams, 5 (1984), 486.

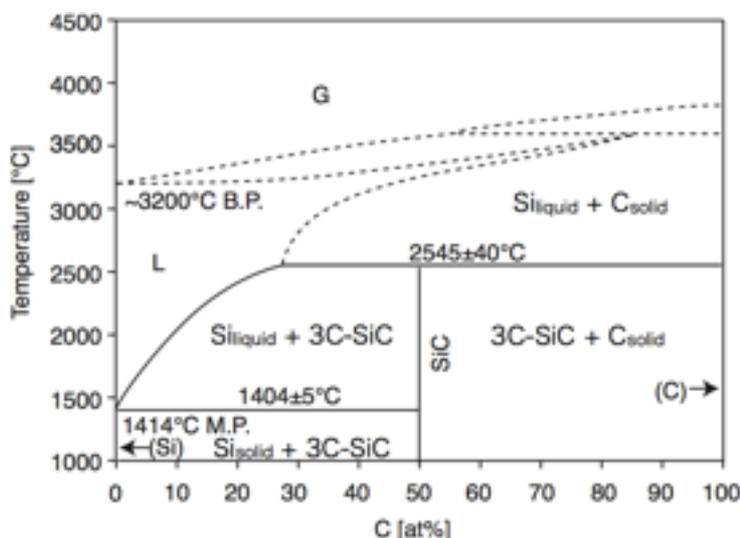


図1 Si-C 二元系状態図[1].

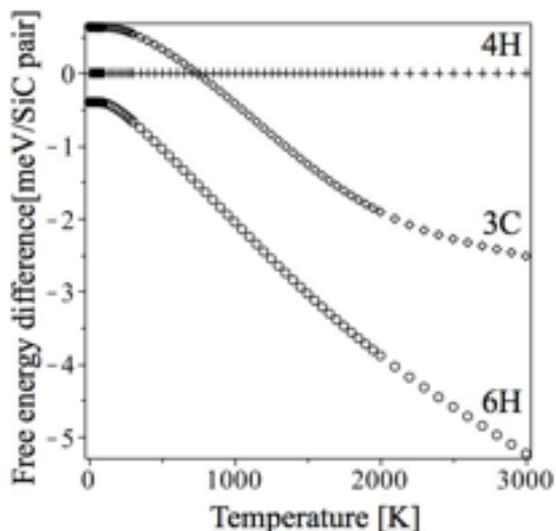


図2 4H-SiC を基準とした SiC 結晶多形における自由エネルギーの温度依存性.