

4H-SiC 表面の π -結合鎖模型の安定性についての第一原理解析

First-principles analysis on stability of π -bonded chain model of 4H-SiC surface

物材機構¹, 高効率電子デバイス材料コンソーシアム², 東大生産研³

○金子 智昭^{1,2}, 山崎 隆浩^{1,2}, 田島 暢夫^{1,2}, 大野 隆央^{1,2,3}

NIMS¹, MARCEED², Tokyo Univ.³

○Tomoaki Kaneko^{1,2}, Takahiro Yamasaki^{1,2}, Nobuo Tajima^{1,2}, Takahisa Ohno^{1,2,3}

E-mail: KANEKO.Tomoaki@nims.go.jp

Si(111) の表面再構成として Pandey による 2×1 π -結合鎖模型が知られている[1]。これは、最表面の Si 原子が 2 層目の Si 原子と結合を組み替え、五員環と七員環を構成するもので、七員環の頂上にある Si 原子が π -結合を作る事により安定化する。Pandey による理論的な提案の後、実験的にも観測されている。このような構造の可能性について C(111), Ge(111) などでも計算が行われて、C(111) では実験的にも確認されている。しかし、SiC 表面での π -結合鎖模型の安定性や電子状態については調べられていない。本研究では、 π -結合鎖模型の表面再構成について 4H-SiC(0001)、(000-1) について密度汎関数理論に基づく第一原理計算を行い、その安定性と電子状態について調べた。第一原理計算には PHASE コードを用いて [2]、GGA の範囲で行った。

得られた構造を図に示す。これらは理想表面の構造より 20-30 meV 程度、表面の基本単位格子 (4SiC を含む) あたりエネルギーが低く安定である事が分かった。しかし、これらの値は C(111) の -0.48 eV、Si(111) の -0.16eV と比べるとかなり小さい。五員環と七員環の境界に 4H-SiC (0001) では Si-Si 結合が、(000-1)では C-C 結合が見られるが、SiC のイオン性からこれらの結合は弱まっていると期待され、小さなエネルギー利得になったと考えられる。また、C(111) では金属的な表面状態、Si(111) では 0.17~0.35 eV のバンドギャップが得られたが、4H-SiC(0001) では 0.66 eV, (000-1) では 1.1 eV と大きなギャップが得られた。これは C と Si の π -軌道のエネルギー差に起因していると考えられる。

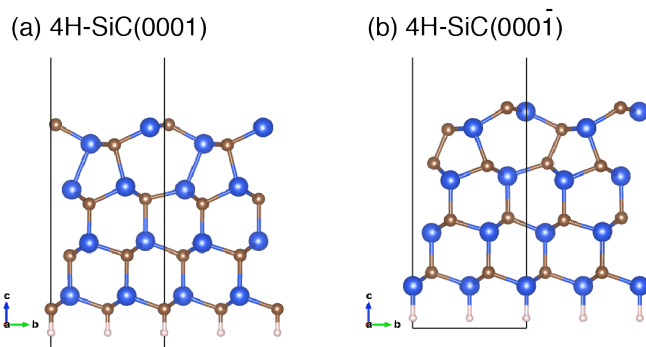


図 : 4H-SiC に対して得られた π -chain 構造 : (a) 4H-SiC(0001), (b) 4H-SiC(000-1) の場合。青、茶、ピンクはそれぞれ Si, C, H 原子を表す。

参考文献

[1] K. C. Pandey, Phys. Rev. Lett. **47**, 1913 (1981).

[2] <http://azuma.nims.go.jp>

謝辞 : この研究は HPCI 戦略プログラムの支援を受けておこなわれました。