

# 第一原理計算を用いた SiC 多形における回復率の検討

Study on recovery rate of SiC polymorphs by first-principles calculation

早大理工,<sup>1</sup> 宇宙研<sup>2</sup>

○(M1) 山口 記功,<sup>1,2</sup> 小林 大輔,<sup>2</sup> 山本 知之,<sup>1</sup> 廣瀬 和之<sup>2</sup>

Waseda Univ.,<sup>1</sup> ISAS/JAXA.<sup>2</sup>

°Kiko Yamaguchi,<sup>1,2</sup> Daisuke Kobayashi,<sup>2</sup> Tomoyuki Yamamoto,<sup>1</sup> and Kazuyuki Hirose<sup>2</sup>

E-mail: [kikou.yamaguchi@ac.jaxa.jp](mailto:kikou.yamaguchi@ac.jaxa.jp), [hirose@isas.jaxa.jp](mailto:hirose@isas.jaxa.jp)

【はじめに】 これまでに我々は回復率というパラメータを提案し、分子軌道法を用いて求めたこのパラメータが様々な絶縁体の絶縁破壊電界 ( $E_{bd}$ ) の実験値と良い相関がある事を見出した[1][2]。しかし同一組成の多形に対して適用可能かはわかっていない。SiCは積層パターンの違いにより200種類以上の多形を取ることが知られている[3]。本研究では第一原理計算を用いてこの相関がSiCの多形間でも成立するのか、また回復率が結晶構造をどこまで反映しているのかを探った。

【計算手法】 先行研究[1], [2]で対象となった、 $E_{bd}$ の実験値が報告されている4種類のSi化合物(Si, 4H型SiC,  $Si_3N_4$ ,  $SiO_2$ )と3C型SiCと6H型SiCの回復率を全電子第一原理計算パッケージWIEN2k[4]を用いて計算した。計算には日本結晶学会のデータベースにある構造モデルを元に作成したスーパーセルを用いた。回復率は内殻から電子を取り除くことで内部電界を発生させ、その際の価電子の偏りから求めている。これは価電子の誘電応答特性を表すパラメータであり絶縁破壊現象の素過程である衝突電離の起こりやすさを表していると考えられる。

【計算結果】 まず全電子第一原理計算を用いて求めた場合においても4種類のSi化合物(Fig. 1 ●)において回復率が大きくなるに従い  $E_{bd}$  が低下するという相関を確認することが出来た。次に3C型SiCの回復率( $0.434 \pm 0.005$ )と6H型のSiCの回復率( $0.431 \pm 0.005$ )を同様に  $E_{bd}$  の実験値(1.80~3.00 MV/cm, 2.80~3.20 MV/cm [5])の平均値に対してプロットした(Fig. 1 ○)。その結果どちらも4種類のSi化合物のプロットを結ぶ直線の近くに来ることが確認された。そのため4種類のSi化合物における回復率と  $E_{bd}$  の間の相関が多形間でも成り立つことがわかった。SiC多形は全てSiを中心としてCが正四面体の頂点に来る基本構造を取っており積層の向きと周期のみが異なっている。この各多形の積層パターンはHexagonality(六方晶性)と呼ばれるパラメータで区別されており、これは回復率がHexagonality, すなわち第二近接以遠の構造をも反映したパラメータだと言うことを示している。このことから回復率が表していると考えられる衝突電離の起こりやすさも局所構造のみならず第二近接以遠の構造を反映しているということがわかった。

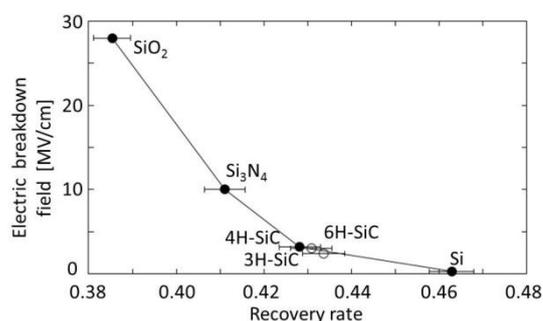


Fig.1 The relationship between electrical breakdown field and recovery rate

[1] H. Seki et al., J. Appl. Phys., 51, 04DA07 (2012).

[2] S. Wakao et al., in IWDTF 2013, P-22.

[3] T. T. Luong et al., Electron. Mater. Lett., Vol. 11, No. 3 (2015).

[4] <http://www.wien2k.at/>.

[5] M. B. J. Wijesundara and R. Azevedo, Silicon Carbide Microsystems for Harsh Environments (Springer, New York, 2011).

[6] Z. Huang et al., AIP, Adv, 5, 097204 (2015).