強制振動子法を用いたポーラス SiC のフォノン解析

Numerical Study on Phonon Properties of Porous Silicon-Carbide System by Force Vibrational Method

福井大院工, °佐藤祐大, 大八木 晋, 橋本 明弘

Graduate School of Electrical & Electronics Engineering, University of Fukui,

°Yuta Sato, Shin Oyagi, Akihiro Hashimoto

[はじめに]

炭化ケイ素(SiC)はシリコン(Si)と比較して耐熱性や広いエネルギーギャップを有し、また、熱伝導率が高いという特性を持つためパワーデバイス用の半導体材料として利用されている。近年、ポーラス化により単結晶と同様の導電率を保持しつつ、熱伝導率を低下させ得ることが報告され[1]、高温用熱伝変換材料としての応用も期待されている。しかしながら、ポーラス SiC の応用研究が活発に行われているにも関わらず、そのフォノン物性に関する研究報告は少ない。本研究では、複雑な系の格子振動に対して有効な解析手法である強制振動子法[2]を用いたポーラス SiC 格子振動解析により、ポーラス化によるフォノン物性への影響について調べたので報告する。

[実験方法]

図 1 に本研究で用いた 4H-SiC モデルを示す。原子数は約 13000 個である。このモデルは 4 層周期を有し、実際の 4H-SiC 結晶構造に対応させている。4H-SiC モデルから Si 及び C 原子を引き抜くことによりポーラス SiC を形成し、その孔径及び欠陥密度を変化させて振動解析を行った。

[結果・考察]

図 2 に 4H-SiC 中の欠陥密度を変化させた場合のフォノン状態密度を示す。欠陥の割合が増加するにつれてピーク位置が低周波数側へシフトしていることが分かる。また、フォノン状態密度が全体にブロードになっていることも分かった。これはポーラス化により最近接原子との結合が減少するためである。そのためポーラス化は孔径と比較して欠陥密度の影響を受けると考えられる。以上のことから、ポーラス化によりフォノン状態密度が低周波数側へピークシフトするため熱伝導率の低下に影響していると示唆される。ポーラス化における孔径及び欠陥密度の影響については当日議論する。

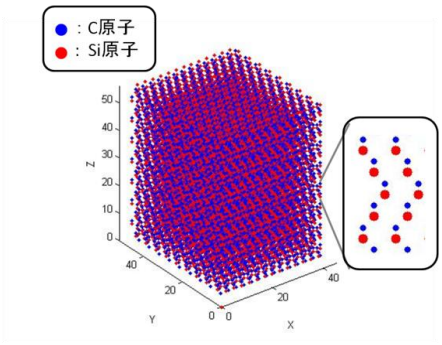

図 1. 4H-SiC 解析モデル

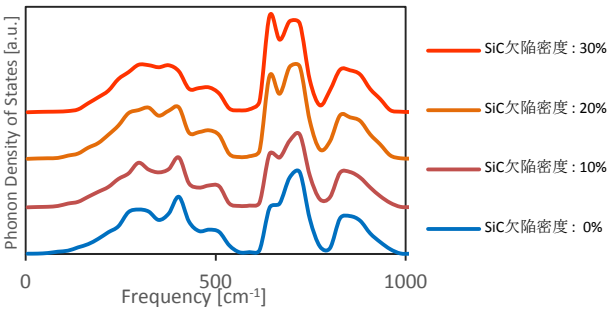

図 2. 欠陥密度を変化させた 4H-SiC モデルのフォノン状態密度

[1] 河本邦仁, *表面*, **31**, 233 (1993).
[2] M. L. Williams, H. J. Maris, *Phys. Rev. B* **31**, 4508 (1985).

© 2017年 応用物理学会