

Na フラックスを用いた SiC 溶液成長における溶液構造の解析

Analysis of Solution Structure in Solution growth of SiC with Na Flux

三重大学大学院工学研究科 ○(M2) 村田 拓郎, 河村 貴宏

Mie Univ. °Takuro Murata¹, Takahiro Kawamura¹

E-mail: 418M147@m.mie-u.ac.jp

溶液成長法は転位の少ない高品質な SiC 結晶成長法として期待されている。各種溶媒が用いられているが^[1], ナトリウムを使用すると低温での結晶成長が可能であることが報告されている^[2]。Na フラックスを用いた SiC 溶液成長の実現性について検討するため, 本研究では第一原理計算を用いて C 原子を含んだ Si-Na 溶液のシミュレーションを行い, C 原子の結合状態を調べた。

シミュレーションには第一原理分子動力学プログラム “STATE-Senri”^[3]を用いた。C 原子 1 個を含む総原子数 54 個の Si-Na 溶液の計算モデルを用いて, 2273 K で 2 ps の有限温度 MD 計算を行った。図 1(a)と 1(b)にそれぞれ Si:Na 組成比を 5:5 と 3:7 とした場合の結果を示す。この結果を用いて状態密度解析を行い, C 原子の結合状態を調べた。

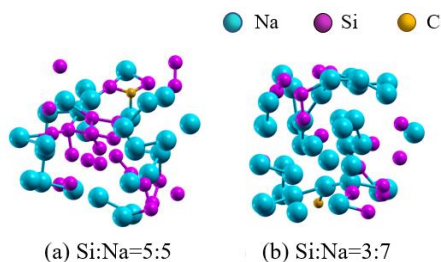


図 1 計算に用いた溶液モデル

得られた部分状態密度(PDOS)と C 原子の局所状態密度(AOLDOS)を図 2 に示す。図 2(a)と 2(b)はそれぞれ Si:Na 組成比を 5:5 および 3:7 とした場合の結果である。図 2(a)では Si は多数の弱いピークを形成しており, 約-4.0 eV において C と Si の結合に関係するピークが見られる。C 原子の AOLDOS は, C 原子の p 軌道が Si との間に結合

を有することを示している。一方図 2(b)では, Si のピークは図 2(a)の場合よりも鋭くなり, 約-6.0 eV および-2.0 eV で C との結合ピークが見られた。これらのことから, Si-Na 溶媒においては Na が多いほど C と Si の結合性が向上していると考えられる。

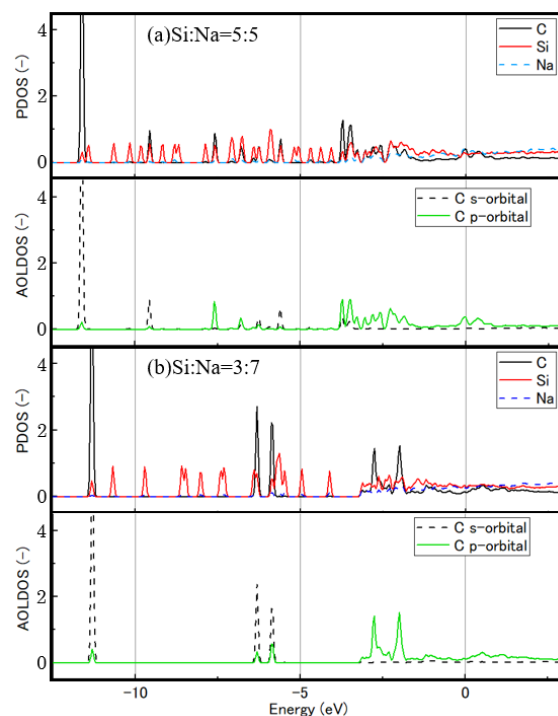


図 2 各原子の PDOS および C 原子の AOLDOS

参考文献

- [1] 宇治原徹・島村清史・宇佐美德隆・太子敏則・樋口幹雄・吉村政志, 日本結晶成長学会誌, Vol. 42, No. 1 (2015)
- [2] H. Morito, et al., J. Alloys Compd., **480**, 723 (2009).
- [3] Y. Morikawa, Phys. Rev. B **51**, 14802 (1995).