

# 1 具体的な適用例

## 1.1 SiC 表面エネルギー計算

### 1.1.1 背景

SiC は現在，半導体材料として主に用いられている Si に比べ，高耐圧，低損失等の優れた物性的特徴から次世代パワー半導体材料として注目されている．しかし，実用化が遅れている原因として，SiC の単結晶成長が困難であり，単結晶に多くの欠陥を生む事が上げられる．

SiC 単結晶成長には，主に Lely 法と呼ばれる気相成長法が用いられている．これは原料の 3C-SiC を気化させ，C 坩堝から大量の C が溶けている不活性ガスを介し，種結晶の 4H-SiC へ運び，結晶を成長させる．この成長環境は C の濃度が高く C-rich である．この環境で成長させた SiC 単結晶には，マイクロパイプ欠陥が (0001) 面上に確認されており，その様相を図 1 に示した．

一方，関西学院大学・金子教授らが MSE 法と呼ばれる液相成長法を開発した．これは原料の 3C-SiC から溶け出した Si 原子と C 原子を液体 Si を介して，種結晶の 4H-SiC へ運び，結晶を成長させる．この成長環境は液体 Si に囲まれている為，Si-rich である．この環境で成長させた SiC 単結晶には，マイクロパイプ欠陥は見られず，低欠陥で高品質な単結晶成長を実現している．

SiC を単結晶成長させると，どのように成長し，マイクロパイプ欠陥の有無に関係しているのかを調べる為，相対的な結果となった両手法をモデルにした．本説では，VASP を用いた第一原理計算によるアプローチを紹介する．

図 1: (0001) 面上に発生するマイクロパイプ欠陥