

SiC(0001)表面の安定な金属吸着サイトの第一原理計算による探索

○石井 純子^{1*}, 松嶋 茂憲¹, 内藤 正路²¹北九州工業高等専門学校, ²九州工業大学

Investigation based on first-principles band calculation of stable metal adsorption sites on SiC (0001) surface

○Junko Ishii^{1*}, Shigenori Matsushima¹ and Masamichi Naitoh²¹ National Institute of Technology, Kitakyushu College, ² Kyushu Institute of Technology

1. はじめに

炭化ケイ素 (SiC) は、強度、熱的および化学的安定性に優れる化合物半導体であり、次世代のパワー半導体基板材料として期待されている¹⁾。半導体基板には金属が積層されるが、そのデバイス性能は半導体-金属接合界面の物性の影響を受ける。よって、半導体基板と金属が接合した界面の構造について知見を得ることは非常に重要である。本研究では、その第一段階として炭素原子が4周期で六方晶を形成する4H-SiCの(0001)表面を例に取り上げる。金属原子(Ni, Pt, Pd, Cu)の吸着によって(0001)面の構造がどのように変化するのか、また(0001)面における金属原子の安定な吸着サイトについても明らかにする。

2. 計算方法

第一原理バンド計算はCASTEP²⁾を用いて実行した。交換相関相互作用は一般化密度勾配法の枠内で取扱い、擬ポテンシャルにはVanderbilt-type³⁾の非局所ウルトラソフト擬ポテンシャルを使用した。平面波のカットオフ・エネルギーは、すべての計算において600 eVとした。k点サンプリングには5×5×1のk点メッシュを用い、13のk点を選択した。計算モデルには、 $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ 構造を持つ4H-SiC(0001)を使用し、スラブモデルの厚みは5パイレイヤとした。底面の影響をなくすために水素で終端し、真空層の厚みは10 Åとした。

3. 結果と考察

Fig. 1に示すように、金属原子の吸着位置が異なる3種類の4H-SiC(0001)スラブモデルを準備し、構造最適化計算を実施した。金属原子にはNiを用いた。最適化計算から、3種類のモデルを比較すると、Ni原子の吸着エネルギーはtype-Iにおいて最も低いこと、即ちtype-Iの場合が最も安定な吸着位置であることがわ

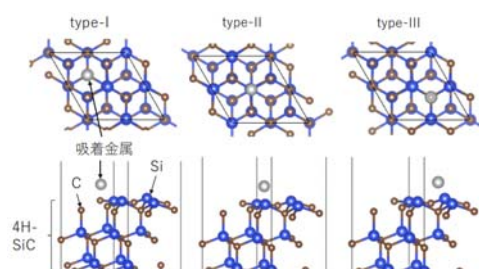


Fig. 1 SiC(0001)上のNi金属吸着モデル

かった。そこで、type-Iを用いてNi原子以外の金属原子(Ni, Pt, Pd, Cu)を吸着させて同様の計算を行った。各金属の吸着エネルギーをTable 1に示す。Table 1からNi, Pt, Pd, Cuの4種の金属の中ではPtの吸着エネルギーが-2.0919 eVと最も低下しており、最も安定な吸着が形成されていると考えられる。

Table 1 SiC上の金属吸着エネルギー

モデルタイプ	吸着金属	金属吸着エネルギー(eV)
type-I	Ni	-0.6181
type-II		-0.5966
type-III		-0.5966
type-I	Pd	-1.2877
	Pt	-2.0919
	Cu	-0.6185

4. 結論

SiC(0001)面にNi原子を吸着させると、3種類のスラブモデルのうちtype-Iが最もエネルギー的に安定であった。また、4種類の金属原子(Ni, Pt, Pd, Cu)の中では、Ptが最も安定な吸着を形成することがわかった。

文 献

- 1) N. Chasserio, S. Guillemet-Fritsch, T. Lebey, S. Dagdag, J. Electron. Mater., **38** (1), 164 (2009).
- 2) M. C. Payne, M. P. Teter, D. C. Allan, T. A. Arias, and J. D. Joannopoulos, Rev. Mod. Phys., **64**, 1045 (1992).
- 3) D. Vanderbilt, Phys. Rev. B, **41**, 7892(R) (1990).

*E-mail: ishij@kct.ac.jp