

人工力誘起反応法を用いた結晶構造予測：炭化ケイ素への適用

¹横浜市大院生命ナノ, ²北大院理, ³WPI-ICReDD, ⁴NIMS
○高木牧人¹, 前田理^{2,3,4}, 立川仁典¹

【序論】

炭化ケイ素は炭素とケイ素が一对一の割合で組み合わさった結晶であり、ダイヤモンド型構造(3C-SiC)やウルツ鉱型構造(2H-SiC)など多くの構造が報告されている。炭化ケイ素はワイドギャップ半導体であるが、結晶構造によってバンドギャップは異なることが報告されている^[1]。このため、炭化ケイ素がどのような結晶構造を取りうるか興味を持たれている。しかしながら、実験では特定の結晶構造を作り分けることは難しく、理論計算による結晶構造予測に期待されている。近年、我々は反応経路自動探索法の1つである人工力誘起反応法(AFIR法)^[2]を周期系へ拡張することで効率的な結晶構造探索を実現した(PBC/AFIR法)^[3]。本研究ではPBC/AFIR法を用いて炭化ケイ素の結晶構造探索を行なった。得られた構造に対しバンドギャップの計算も行い、構造の特徴との関連を議論した。

【結果・考察】

計算対象は単位格子中に炭素原子とケイ素原子がそれぞれ8原子含まれている系($\text{Si}_8\text{C}_8/\text{unit-cell}$)とした。ランダムに生成した1つの初期構造からPBC/AFIR法による炭化ケイ素の結晶構造探索を行い、10000種類以上の構造が得られた。得られた構造の中には3C-SiC, 4H-SiC, 6H-SiCや2H-SiCなど先行研究で報告されている構造も含まれている(図1)。また、探索ではこれらの構造と同程度の熱力学的安定性を持つが、これまでに報告されていない構造も得られた。この中にはバンドギャップが3C-SiCよりも小さい構造も含まれている。詳細は当日報告する。

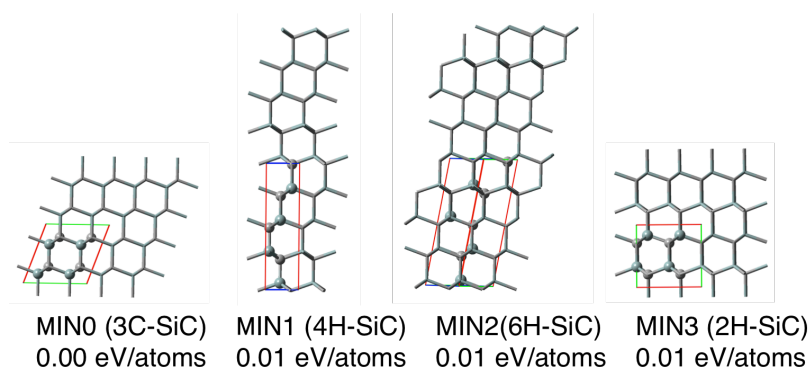


図1. 探索で得られた安定な炭化ケイの素結晶構造.

【参考文献】

- [1] C. Persson and U. Lindelfelt, *Phys. Rev. B* **54**, 10257 (1996).
- [2] S. Maeda, Y. Harabuchi, M. Takagi, K. Saita, K. Suzuki, T. Ichino, Y. Sumiya, K. Sugiyama, and Y. Ono, *J. Comput. Chem.* **39**, 233 (2018).
- [3] M. Takagi, T. Taketsugu, H. Kino, Y. Tateyama, K. Terakura, and S. Maeda, *Phys. Rev. B* **95**, 184110 (2017).