19a-PB1-21

ダイヤモンドのバンド計算に基づくホットキャリア輸送特性の考察

Consideration of Hot Carrier Transport Properties in Diamond Based on First Principle Calculations

阪大院工 ○ 脇村 豪, 鎌倉 良成

Osaka Univ. ○Go Wakimura and Yoshinari Kamakura

E-mail: wakimura@si.eei.eng.osaka-u.ac.jp

【はじめに】 ダイヤモンドは高いブレークダウン電圧や高い熱伝導率を示すことで知られており、次世代パワーデバイス材料としても注目を集めているものの、そのホットキャリア輸送特性には未解明の部分も多い。これまでフルバンドモンテカルロ法を用いたシミュレーション予測 [1] 等が報告されてきたが、最近、実験的に示された破壊電界が理論的なインパクトイオン化係数に基づく予測値を超えているとの指摘もなされている [2]。そこで本研究では、より高精度なバンド計算法を用い、ホットキャリアシミュレーションで仮定されたモデルや近似の再検証を試みたので報告する。

【計算方法と結果】 密度汎関数法に基づく第一原理計算コード VASP (Vienna ab-initio simulation program) [3] を用いて、バルクダイヤモンドのバンド計算を行った。今回は格子定数として実験値 (a = 3.57 Å) を仮定し、カットオフエネルギーを 400 eV として計算を行った。Fig. 1 と Fig. 2 にそれぞれエネルギーバンド構造と状態密度 (DOS) の計算結果を示す。ハイブリッド汎関数 (HSE06) を用いることで、バンドギャップエネルギーが 5.23 eV となり、実験値 (5.5 eV [4]) と近い値が得られた [5]。経験的擬ポテンシャル法 (EPM) による計算結果 [1] と比較したが、価電子帯上端部が良く一致しているものの、伝導帯については差異が確認された。電子有効質量やバンド非放物線性、あるいは DOS を通じフォノン散乱確率、インパクトイオン化率などに影響を与えるものと考えられる。

【参考文献】 [1] T. Watanabe et al., J. Appl. Phys. **95**, 4866 (2004). [2] A. Hiraiwa et al., J. Appl. Phys. **114**, 034506 (2013). [3] G. Kresse et al., Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996). [4] F.J. Himpsel et al., Phys. Rev. B. **22**, 1967 (1980). [5] X. Liu et al., Cent. Eur. J. Phys. 1-13 (2008).

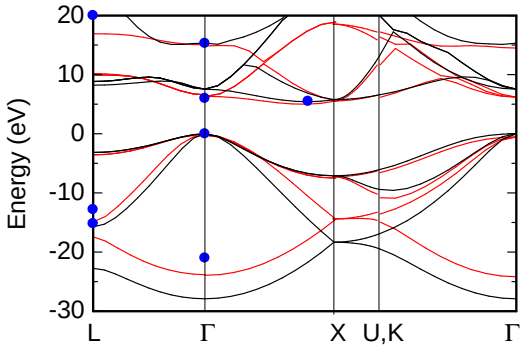

Fig. 1: Calculated energy bands for diamond (red line: this work, black line: EPM [1]) compared with experimental critical points [4] (dots).

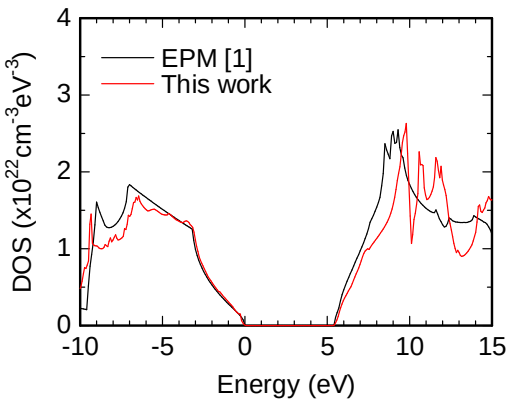

Fig. 2: Calculated density of states for diamond (red line: this work, black line: EPM [1])

© 2014 年　応用物理学会