

20a-D9-5

次世代 TCAD(1) 金属/4H-SiC(0001)界面のショットキーバリア高さの 第一原理計算

First-Principles calculations of Schottky barrier height of Metal/4H-SiC(0001) interfaces

アドバンスソフト株式会社 ○加藤信彦, 西原慧径, 森一樹, 岡崎一行, 小池秀耀

AdvanceSoft Corp., ○Nobuhiko Kato, Satomichi Nishihara, Kazuki Mori, Kazuyuki Okazaki,

Hideaki Koike (E-mail: n-kato@advancesoft.jp)

ワイドギャップ半導体である SiC は次世代パワーデバイス材料として注目されており、特にショットキーバリアダイオード(SBD)では、従来の Si を用いた SBD では実現できなかった高耐圧化が実現されている。SBD の電流制御においてショットキーバリア高さ(SBH)を評価することは重要であるが、実験的にその詳細な情報を得ることは困難である。そこで本研究では金属/4H-SiC 界面の SBH を第一原理計算を用いて計算し、接触する金属の種類や 4H-SiC の接触面(Si 面、C 面)に対する依存性を解析した。使用したのは第一原理計算ソフト「Advance/PHASE v3.2」である。図 1 (a)に金属が Al の場合の計算モデルを示す。また図 1(b)および(c)に、界面およびバルク位置での層分割状態密度 (LDOS) を示す。図 1(b)の界面位置ではフェルミ準位近傍に界面準位が現れており、SBH の値を見積もることができない。そこで図 1(c)のバルク位置で価電子帯トップのエネルギーを見積り、フェルミ準位との差から SBH を計算した。SBH の計算値は接触面が Si 面のとき 1.08eV、C 面のとき 0.32eV で、接触面が C 面の方が SBH が小さくなっており、6H-SiC での実験値(Si 面で 2.47eV、C 面で 2.22eV)と比べて絶対値は異なるが、傾向は対応していた。講演では他の金属との接触モデルおよび Hybrid 汎関数法を用いた計算結果も紹介する予定である。

謝辞：本研究の一部は(独)科学技術振興機構 A-STEP プログラムの助成を受けて行われた。

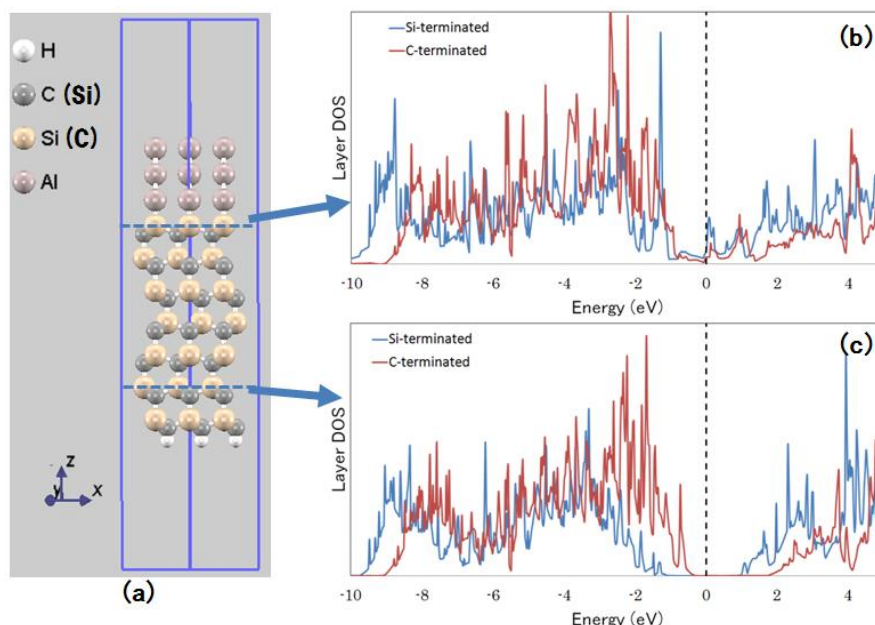


図 1 (a)Al/4H-SiC(0001)界面のモデル (b)界面付近の LDOS (c) バルク位置での LDOS. 破線はフェルミ準位.