フルバンドモンテカルロ法による 4H-SiC の高電界電子輸送シミュレーション Simulation of High-Field Electron Transport in 4H-SiC with Full-Band Monte Carlo Method ¹阪大工,²鳥取大工 ⁰藤田 流星¹, 小長 晃輔¹,小谷 岳生²,鎌倉 良成¹,森 伸也¹ ¹Osaka Univ.,²Tottori Univ. [°]R. Fujita¹, K. Konaga¹, T. Kotani², Y. Kamakura¹, N. Mori¹

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

【はじめに】近年、耐圧や電力変換効率の高さから Si に代わるパワー半導体材料として、ワイドバンドギャップ半導体である 4H-SiC の応用が期待されている。しかし、絶縁破壊電圧を決定する主な要因である インパクトイオン化の機構や特性には未だ不明な点も多く、高精度なシミュレーション解析が求められている。今回、第一原理計算[1,2]から求めたエネルギーバンド構造およびインパクトイオン化率を取り入れたフルバンドモンテカルロ(FBMC)シミュレーションにより、バルク4H-SiC 中の電子の高電界輸送やインパクトイオン化の特性について調べたので報告する。

【計算方法と結果】 k 空間を格子に分割し(第1ブリルアンゾーン(BZ)のГ-M 点間を30分割)、QSGW 法 [1]によって求めた現実的なエネルギーバンド構造をMCシミュレータに取り入れた。考慮した散乱機構は、 高電界輸送特性への影響が大きいと考えられるフォノン散乱(音響、光学)、およびインパクトイオン化であ る。Fig. 1 に各散乱確率の電子エネルギー依存性を示す。今回、インパクトイオン化率については、 QSGW 法による計算[2]の結果を反映し、一方音響・光学フォノン変形ポテンシャル散乱確率については、 Akturk 6[3]により報告されたパラメータを用いて計算を行った。Fig. 2 に k 空間中の電子分布に対するシ ミュレーション結果を示す。高電界下では、電子は伝導帯の底の M バレー近傍のみならず、第一ブリル アンゾーン内の広い範囲に分布している様子が分かる。Fig. 3 には、イオン化係数αのシミュレーション結 果を実験値[4,5]と比較した。電界印加方向を(0001)および(1120)方向に加えたところ、後者の場合の方 がαが大きいというシミュレーション結果が得られた。4H-SiC のエネルギーバンド構造の異方性に起因す る結果であると考えられる[6]。なお、今回のシミュレーション結果は実験値を上回っているが、これは使用 したフォノン散乱モデルが特に光学フォノン放出過程の頻度を過少評価している可能性を示唆している。 [1] T. Kotani, J. Phys. Soc. Jpn. 83 (2014) 094711. [2] T. Kotani et al., Phys. Rev. B 81 (2010) 125201. [3] A. Akturk et al., J. Appl. Phys. 105, 033703 (2009). [4] T. Hatakeyama et al., J. Appl. Phys. 85, 1380 (2004). [5] H. Niwa et al., IEEE TED 62, 3326 (2015). [6] S.Nakamura et al., Appl. Phys. Lett.80,3555(2002)



Fig. 1: Electron scattering rates used in the simulation.Phonon scattering rates and impact ionization rate are plotted as a function of electron energy measured from the conduction band edge



Fig. 2:Simulated electron distribution in *k*-space of bulk 4H-SiC with an electric field of 3 MV/cm applied along <0001> direction. Red dots: electrons, Blue lines: first brillouin zone edge.



Fig.3: Impact ionization coefficient simulated with FBMC simulator (dots) compared with the experimental data[4,5] (lines)