

4H-SiC 中のシングルショックレー型積層欠陥の拡大/縮小現象 解明を目指したエネルギーモデル

Energy model for expansion/contraction of single Shockley stacking faults in 4H-SiC

京都大学工学研究科 ○飯島彬文, 須田淳, 木本恒暢

Kyoto Univ. ○Akifumi Iijima, Jun Suda, and Tsunenobu Kimoto

E-mail: iijima@semicon.kuee.kyoto-u.ac.jp

【はじめに】 SiCバイポーラデバイス中に存在する基底面転位(BPD)は、通電時にシングルショックレー型積層欠陥(1SSF)の形成核となり、デバイス特性の劣化を引き起こす[1]。1SSFの拡大はBPDや1SSF周囲の電子正孔再結合によって生じる。また低キャリア注入時や高温環境下でのキャリア注入時には1SSFが縮小することも知られている。本研究では、キャリア注入による非平衡状態における複雑な1SSFの挙動を記述するため、キャリアのエネルギー利得を用いたモデルを提唱する。

【計算方法】本モデルでは図1のような1SSFを含む系を考える。主な式は図の下に記している。電子が1SSF由来の量子井戸に流れ込むことによって形成されるポテンシャル障壁(qV_i)は、電荷バランスの式(式(1))を解くことによって得られる。ここで、過剰キャリア密度(Δn)とドーピング密度によって決定される擬フェルミ準位を用いて、系のキャリア密度分布(n, p)を見積もる。次に、電子と正孔のエネルギーを求め(式(2), (3))、1SSFを含む系全体のエネルギー(E_{SF})を計算する(式(4))。同様に、4H-SiCの完全結晶のエネルギー(E_{4H})も計算し(式(5) - (7))、後者と前者の差をとることで、1SSFのエネルギー利得 Δ を算出した($\Delta = E_{4H} - E_{SF}$, 式(8))。このエネルギー利得 Δ が1SSFの形成エネルギーを上回っている場合、1SSFの拡大が起こると考えられる。

【結果と考察】上記モデルにより得られるエネルギー利得 Δ の温度依存性を図 2 に示す。ここでドナー密度は $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ である。エネルギー利得 Δ は温度の上昇にしたがって減少する。この結果はキャリア注入量を固定し温度を上昇すると($\sim 450 \text{ K}$)、1SSF が縮小するという報告例と定性的に一致する。ここで黄色の領域は1SSFの形成エネルギー($\sim 10 \text{ mJ/m}^2$)を表している。1SSFの拡大/縮小の臨界点はエネルギー利得 Δ が1SSFの形成エネルギーに達する点であり、この点がその閾値であると捉えることができる。図2の場合、300 Kでは $\Delta n = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ が閾値であると読み取れる。図2からこの閾値は温度、過剰キャリア密度に依存することが分かる。本モデルは従来の“擬フェルミ準位モデル” [2]より定量的かつ具体的に1SSFの挙動を説明できる。

[1] M. Skowronski et al., *J. Appl. Phys.*, **99**, 011101 (2006).

[2] J. Caldwell et al., *J. Appl. Phys.*, **108**, 044503 (2010).

本研究の一部は、総合科学技術・イノベーション会議のSIP（戦略的イノベーション創造プログラム）「次世代パワーエレクトロニクス/SiC次世代パワーエレクトロニクスの統合的研究開発」（管理法人：NEDO）によって実施されました。

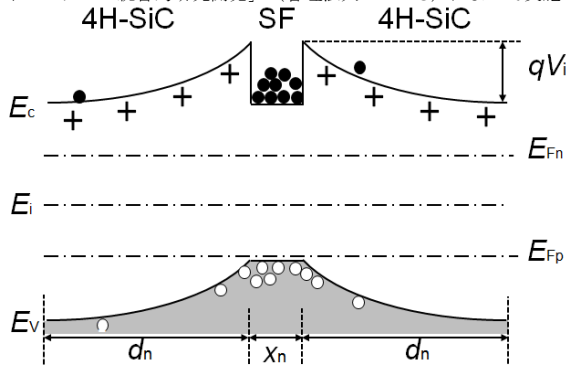


図1: n型1SSFを含む4H-SiCのバンド図。 d_n は空乏層幅、 x_n は積層欠陥の厚さ、 E_i は真性フェルミ準位、 E_c は伝導帯の底、 E_v は価電子帯の頂上、 E_{Fn} 、 E_{Fp} は電子、正孔の擬フェルミ準位、 qV_i は電子が1SSFに流れ込むことによって生じるポテンシャル障壁を表す。

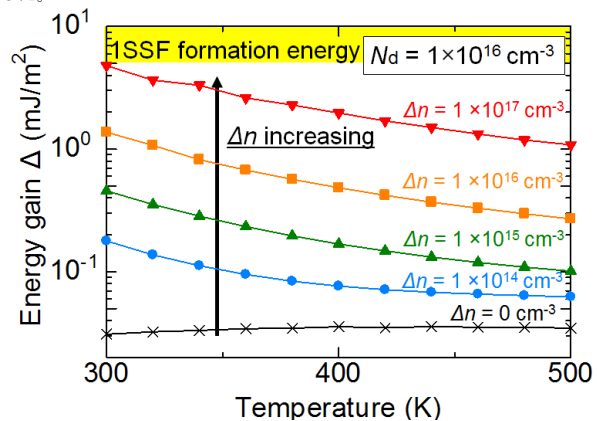


図2: 1SSFのエネルギー利得 Δ の温度依存性（ドナー密度： $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ）。黄色の領域は1SSFの形成エネルギーを表しており、 Δn は過剰キャリア密度である。

Major equations in the proposed model:

$$n = p + N_d^+ \quad (1)$$

$$E_{nSF} = \int_{E_i + qV_i}^{\infty} D_{2c}(E) F_n(E) (E - E_i) dE + 2 \int_0^{d_n} \int_{E_c + V(x)}^{\infty} D_{3c}(E) F_n(E) (E - E_i) dE dx \quad (2)$$

$$E_{pSF} = x_n \int_{-\infty}^{qV_i} D_{3h}(E) F_p(E) (E_i - E) dE + 2 \int_0^{d_n} \int_{E_v + V(x)}^{-\infty} D_{3h}(E) F_p(E) (E_i - E) dE dx \quad (3)$$

$$E_{SF} = E_{nSF} + E_{pSF} : \text{Electrostatic energy of 1SSF} \quad (4)$$

$$E_{n4H} = w_C \left[\int_{E_c}^{\infty} D_{3c}(E) F_n(E) (E - E_i) dE + (N_d - N_d^+) (E_d - E_i) \right] \quad (5)$$

$$E_{p4H} = w_V \int_{-\infty}^{E_v} D_{3h}(E) F_p(E) (E_i - E) dE \quad (6)$$

$$E_{4H} = E_{n4H} + E_{p4H} : \text{Electrostatic energy of perfect 4H} \quad (7)$$

$$\Delta = E_{4H} - E_{SF} : \text{Electrostatic energy gain of 1SSF} \quad (8)$$

$D_{2c}(E)$: 2-dimensional density of states (2D-DOS) for electrons $D_{3c}(E)$: 3D-DOS for electrons $D_{3h}(E)$: 3D-DOS for holes
 E_d : Donor level $F_n(E)$: Fermi distribution function for electrons $V(x)$: Potential function near 1SSF
 $F_p(E)$: Fermi distribution function for holes w_C, w_V : Thickness of a perfect SiC crystal