

SiC と AlN/GaN 短周期超格子によるパワーデバイスの理論的提案

Theoretical proposal of power devices based on SiC and

AlN/GaN short period super lattices

○小嶋 英嗣¹、長川 健太¹、白川 裕規¹、洗平 昌晃^{1,2}、海老原 康裕³、金村 高司³、恩田 正一^{2,3}、白石 賢二^{1,2}、(¹ 名大院工、² 名大未来研、³ 株式会社デンソー)○¹Eiji Kojima, ¹Kenta Chokawa, ¹Hiroki Shirakawa, ^{1,2}Masaaki Araidai,³Yasuhiro Ebihara, ³Takashi Kanemura, ³Shoichi Onda and ^{1,2}Kenji Shiraishi(¹ Graduate School of Engineering, Nagoya University, ² Institute of Materials and System for Sustainability, Nagoya University, ³ Denso Corporation)

E-mail: kojima@fluid.cse.nagoya-u.ac.jp

1. はじめに

SiC と $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ は Si よりも優れた物性を持つため、次世代パワーデバイス材料として大変注目を集めている。我々は本研究において、SiC と $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ を組み合わせることで、SiC、 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 個々の MOSFET よりも優れた性能を発揮する縦型ハイブリッドパワーデバイスを考えた。このデバイス実現の必要条件の1つとして、SiC/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 界面のコンダクションバンドオフセットをゼロに近づける必要がある。ゼロに近づけることで、ソースドレイン間にスムーズに電子が流れるようになるからである。このことを踏まえ我々は、第一原理計算により SiC/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 界面のコンダクションバンドオフセットを計算し、オフセットがゼロとなる条件を明らかにすることで、SiC/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ のヘテロ接合による、縦型 MOSFET の実現可能性を調査した。

2. 計算方法

本研究では、図1のような 4H-SiC/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 2x2、各々 12 原子層からなる超格子モデルを用いた。 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 作成にあたっては、須田グループによる先行研究を参考にし、短周期 AlN/GaN 超格子による AlGa_N 擬似混晶を用いてモデル作成を行った。この手法を用いることで、SiC との濡れ性の良い AlN から成長を開始できることや、原子層という制御しやすいパラメータで Al 組成を変化させることができる[1]。例えば、 $x=0.25$ は AlN/GaN/GaN/GaN のような短周期により作成した。電子状態の計算、構造緩和は密度汎関数法に基づく第一原理計算コードである VASP (Vienna Ab initio Simulation Package) コード[2]を用いて計算した。

3. 結果と考察

我々が作成したモデルの 4H-SiC/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ は周期境界を持つため、界面原子の配位数と価電子数を考慮すると、中心界面の Si-N 結合は 1/4 個の余分な電子を持つ。もう一方の界面の Ga-C 結合は 1/4 個だけ電子が不足しているため、界面間に電荷の偏りが生じている。我々はこの問題を解決するために合理的な二つの方法を行った。一つ目は中心界面の N 原子ともう一方の界面の C 原子を置換することであり、二つ目は中心界面の Si 原

子ともう一方の界面の Ga 原子を置換することである。これらの置換を行うことで、極性のない界面を作成した。また、全エネルギーの比較から、置換した2つのモデルの方が置換しないモデルよりも安定であることがわかった。以上から、我々が行った置換は実際のヘテロ接合面においても実現されると考えられる。

N-C 置換したモデルと Si-Ga 置換したモデルの全エネルギーを比較したところ後者の方が安定であったため Si-Ga 置換モデルと短周期 AlN/GaN により、4H-SiC/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ のコンダクションバンドオフセット値を調べると、図2のようになった。このグラフから、Al 組成の増加に伴いコンダクションバンドオフセット値は減少していることがわかる。またグラフから、約 75% でゼロになることがわかった。よって、Si-Ga 置換による、4H-SiC/ $\text{Al}_{0.75}\text{Ga}_{0.25}\text{N}$ 界面が将来の縦型パワーデバイス実現において有望であるということがわかった。

References

- [1] H. Miyake, T. Kimoto, J. Suda, IEEE Trans. Electron Devices 60 (2013) 2768.
 [2] G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B 47, 558, (1993).

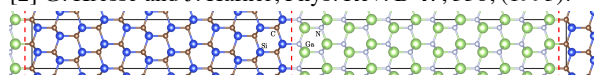


Fig.1 Side view of a pristine 4H-SiC/GaN 2x2 interface model. The solid line and the dashed lines indicate the unit-cell boundary and the interfaces, respectively. The atomic layers on the left of the central interface are SiC, where the larger balls are Si atoms and smaller ones C atoms. The atomic layers on the right are GaN, where the larger balls are Ga atoms and smaller ones N atoms.

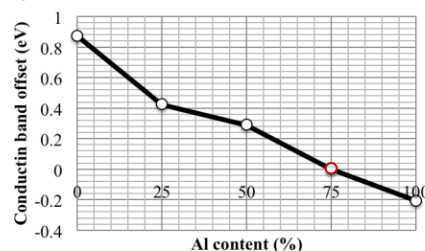


Fig.2 Al content dependence of 4H-SiC/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ conduction-band offset. The white circles are the calculation results.