

歪みによる SiC のバンドギャップ変調に関する理論的計算

Theoretical study of strain-induced modulation of the bandgap in SiC

°長川 健太¹, 白石 賢二^{2,1}

Graduate School of Engineering, Nagoya Univ.¹, IMASS, Nagoya Univ.²

°Kenta Chokawa¹, Kenji Shiraishi^{2,1}

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

1. はじめに

SiC は高温・高電圧で使用できる高出力なパワーデバイスが実現できるため、非常に多くの研究がなされている。SiC は様々な結晶多型が存在しており、それぞれが異なるバンドギャップを有している。バンドギャップは歪みの影響により変化することが知られており Si では多くの報告がなされているが、SiC においては報告が少ない[1]。特に歪みの影響の結晶多型依存性などは考えられてこなかった。さらに SiC を用いたパワーデバイスは c 面, a 面, m 面など様々な面を用いて作成する試みがなされており、歪みの影響の面依存性も重要になると考えられる。そのため本研究では第一原理計算を用いて等方歪みと二軸歪みが引き起こすバンドギャップ変調について調べる。

2. 計算手法と計算モデル

本研究では VASP コードを用いて第一原理計算を行い、構造の全エネルギーとバンドギャップを求めた[2]。SiC の結晶多型モデルとして 2H-SiC, 4H-SiC, 6H-SiC の構造を作成した。これらのモデルの格子定数 a 及び c/a をそれぞれ 2H-SiC: $a=3.091, c/a=1.641$, 4H-SiC: $a=3.093, c/a=3.274$, 6H-SiC: $a=3.094, c/a=4.907$ とした。各結晶多型モデルに対して最大 2% の圧縮及び引張り歪みを印可による、バンドギャップ変化を調べた。

3. 結果

Figure 1(a) に等方歪みに対する系の全エネルギーの変化を示した。歪みが 0% のときの値を中心として全エネルギーが変化しており、

適切な格子定数を選択していることが確認できた。またバンドギャップ変化を図 1(b) に示す。結晶多型間でのバンドギャップの変化率を比較すると 2H-SiC だけが、圧縮及び引張り歪み両方に対して大きく値が変化している。一方で 4H-SiC, 6H-SiC の場合には等方歪みに対してほとんど変化しなかった。また 2H-SiC と 6H-SiC では圧縮歪みが大きくなるとバンドギャップが減少しているが、4H-SiC では増加するという異なる傾向を示した。そのため 2% という大きな圧縮歪みが印可された場合には 2H-SiC のバンドギャップが 4H-SiC よりも小さくなる。当日の講演では a 面や m 面、また二軸歪みについての議論も行う。

Reference

- [1] F. M. Steel, et. al, J. Appl. Phys. **114**, 013702 (2013).
- [2] G. Kresse, et. al, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1999).

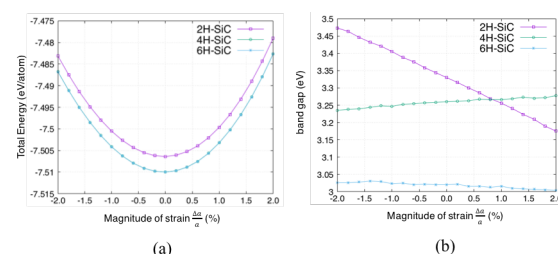


Fig. 1. Strain-induced changes of (a) total energies and (b) bandgap values for each polytypes of SiC.