

フルバンドモンテカルロ法を用いたバルク 4H-SiC の衝突電離係数の異方性解析

Analysis of Anisotropic Ionization Coefficient in

Bulk 4H-SiC with Full-Band Monte Carlo Simulation

阪大工¹, 鳥取大工² ○藤田 流星¹, 上岡 良季¹, 小谷 岳生², 鎌倉 良成¹, 森 伸也¹Osaka Univ¹., Tottori Univ². ○R. Fujita¹, Y. Ueoka¹, T. Kotani², Y. Kamakura¹, and N. Mori¹

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

1. 背景と目的

近年、耐圧や電力変換効率の高さから 4H-SiC のパワーデバイスへ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衝突電離の特性については不明な点も多く、シミュレーション解析用の高精度なモデルの構築が求められている。本研究では、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衝突電離率を取り入れたフルバンドモンテカルロ(FBMC)シミュレータにより、バルク 4H-SiC 中の電子と正孔の衝突電離係数(α, β)の電界強度および電界方向依存性を解析した。さらに、得られた結果を解析式で表現し、その結果を用いてダイオード降伏電圧を計算したので報告する。

2. 計算方法と結果

QSGW 法[1]によって求めたバルク 4H-SiC のバンド構造と衝突電離率を FBMC 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変形ポテンシャルフォノン散乱(音響/光学)、および衝突電離である。フォノン散乱確率については、過去に報告されたモデル式[3]を用いて計算を行った[4]。Fig.1 に α の電界依存性のシミュレーション結果を示す。電界の $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 方向成分(F_x)と $\langle 0001 \rangle$ 方向成分(F_y)を変化させたときの α の等高線をプロットした(赤実線)。Fig.1 では $\langle 0001 \rangle$ 方向と $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 方向における衝突電離係数を一致させ、Hatakeyama らによって報告された角度依存性を考慮した結果[5]も同時に示したが(青点線)、特に y 軸($\langle 0001 \rangle$ 方向)付近において等高線の形状が異なっていることが分かる。

FBMC シミュレーションで得られた α の電界依存性の結果を次式で表現した。

$$\alpha(F_x, F_y) = a \exp \left[\frac{(1-\epsilon)f_x + (1-\zeta)f_y - \sqrt{D}}{2\epsilon f_x^2 + 2\zeta f_y^2} \right] \quad (1)$$

ここで、

$$f_x \equiv F_x/b_x, f_y \equiv F_y/b_y, A \equiv \ln(a_y/a_x)$$

$$a \equiv a_x^{\beta_x} a_y^{\beta_y}, \beta_x \equiv \frac{\epsilon f_x^2}{\epsilon f_x^2 + \zeta f_y^2}, \beta_y \equiv \frac{\epsilon f_y^2}{\epsilon f_x^2 + \zeta f_y^2}$$

$$D \equiv (1+\epsilon)^2 f_x^2 + (1+\zeta)^2 f_y^2 + 2(1-\epsilon)(1-\zeta)f_x f_y - 4\epsilon(1-\zeta)A f_x^2 f_y + 4(1-\epsilon)\zeta A f_x f_y^2 - 4\epsilon\zeta A^2 f_x^2 f_y^2$$

$$\epsilon \equiv \frac{3(\gamma-1)}{\gamma+1}, \zeta \equiv \frac{3(\delta-1)}{\delta+1}$$

であり、 $a_x, a_y, b_x, b_y, \gamma, \delta$ はフィッティングパラメータである。 β についても同様のモデル化を行った上で、一次元階段接合ダイオード($N_a = 2.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}, N_d = 4.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$)のアバランシェ降伏電圧 V_{BD} をイオン化積分計算[6]を用いて求めた結果を Fig.2 に示す。PN 接合の方向を様々に変化させた時の角度依存性をプロットした。FBMC に基づく V_{BD} (赤)のほか、Hatakeyama らの衝突電離係数式[5]を用いて求めた V_{BD} (緑)、さらに FBMC で求めた $\langle 0001 \rangle$ 方向と $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 方向の電界依存性に Hatakeyama らの異方性式[5]を用いた V_{BD} (青)を比較している。赤と青で示した計算結果を比較すると、PN 接合の方向が $\langle 0001 \rangle$ 方向、あるいは $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 方向から外れると異なる V_{BD} を示した。

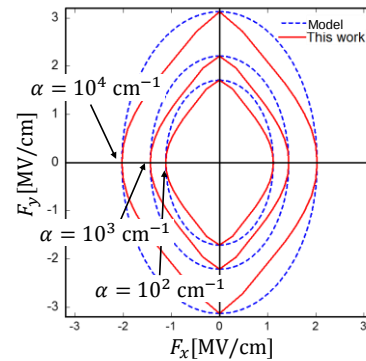


Fig.1. Contour lines of ionization coefficient are plotted on $F_x - F_y$ plane. Red solid lines show the results of this work. Blue dashed lines show the model based on [5].

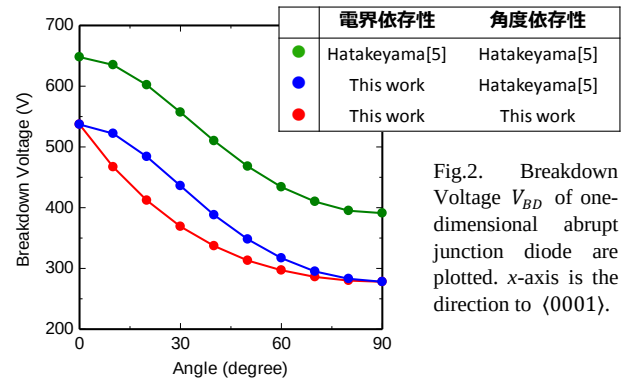


Fig.2. Breakdown Voltage V_{BD} of one-dimensional abrupt junction diode are plotted. x-axis is the direction to $\langle 0001 \rangle$.

参考文献

- [1] T. Kotani, J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 094711 (2014). [2] T. Kotani et al., Phys. Rev. B **81**, 125201 (2010). [3] A. Akturk et al., J. Appl. Phys. **105**, 033703 (2009). [4] Fujita et al., SISPAD2017, p.289. [5] T. Hatakeyama et al., J. Appl. Phys. **85**, 1380 (2004). [6] T. Kimoto et al., *Fundamentals of Silicon Carbide Technology* (Wiley, Singapore, 2014)