

ワイドギャップ半導体の衝突イオン化係数にバンド構造が与える影響の解析

Effects of Band Structure on Impact Ionization Coefficients in Wide Bandgap Semiconductors

○ 田中 一^{1,2}, 木本 恒暢¹, 森 伸也² (京大¹, 阪大院工²)○ Hajime Tanaka^{1,2}, Tsunenobu Kimoto¹, Nobuya Mori² (Kyoto Univ.¹, Osaka Univ.²)

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

背景 ワイドギャップ半導体における高い絶縁破壊電界は、通常バンドギャップ E_g の大きさにより説明されるが、有効質量やブリルアンゾーン (BZ) 幅など他のパラメータの影響については十分に理解されていない。本研究では、バンド構造が衝突イオン化係数に与える影響を、モンテカルロ法を用いて、系統的に解析した。

計算方法 本研究では、以下のような x, y, z の3方向に \cos 型の依存性を持つ $E-k$ 分散を仮定した。

$$E_n(k_x, k_y, k_z) = (n-1)\Delta E + \sum_{i=x,y,z} \frac{1}{2m^*} \left(\frac{\hbar}{a_i} \right)^2 \times 2[1 - \cos(k_i a_i)], \quad \frac{\pi}{a_i} = k_{i,\text{BZE}}, \quad n = 1, 2, \dots, N \quad (1)$$

ここで、バンド端有効質量は $m^* = 0.3m_0$ とした。 a_i は i 方向 ($i = x, y, z$) の格子定数であり、BZ 幅 $2 \times k_{i,\text{BZE}} = 2\pi/a_i$ を決定する。本研究では $a_y = a_z = 0.5 \text{ nm}$ とし、 a_x を変数とした。 n はバンド指標、 ΔE はバンド間隔であり、 $a_x = 0.5 \text{ nm}$ についてはバンド本数 $N = 10$ 、 $\Delta E = 1 \text{ eV}$ とした。他方 $a_x = 1 \text{ nm}$ については、BZ 体積が半分となることに対応して、 N を倍の20とし、全バンド幅が $a_x = 0.5 \text{ nm}$ の場合と同一となるように $\Delta E \simeq 0.55 \text{ eV}$ とした。 a_x を変化させることで、4H-SiC などの大きなユニットセルを持つ物質で見られるゾーンフォールディングの影響を解析する。上記のバンド構造を考慮し、 x 方向の電界の下での衝突イオン化係数 α をモンテカルロ法を用いて計算した。この際、音響および無極性光学フォノン散乱の散乱レートおよび衝突イオン化レートを、4H-SiC に対するパラメータを用いて考慮した [1,2]。

結果 2種類のBZ幅 ($k_{x,\text{BZE}} = \pi/(0.5 \text{ nm}), \pi/(1 \text{ nm})$) に対して計算した、温度 100, 300, 500 K での α の電界依存性を図1に示す。 $k_{x,\text{BZE}} = \pi/(0.5 \text{ nm})$ の場合、温度増加とともに α は減少する。これは、フォノン散乱の増加に由来し、通常観測される振る舞いと同様である。他方、より小さなBZ幅 $k_{x,\text{BZE}} = \pi/(1 \text{ nm})$ に対しては、著しく小さい α の値が得られた。これはBZ幅が小さくなったことによる群速度の低下から予想される結果である。一方、温度依存性に関しては、温度増加とともに α が増加するという、通常と逆の振る舞いが得られた。さらに、 $k_{x,\text{BZE}} = \pi/(1 \text{ nm})$ かつ高電界の条件においては、ドリフト速度も高温ほど上昇することが分かった。この振る舞いの理由として、プロト振動が考えられる。プロト振動が生じている場合、フォノン散乱の増加がドリフト速度の増加につながるということが知られている [3]。実際に、電子の運動を解析した結果、 $k_{x,\text{BZE}} = \pi/(1 \text{ nm})$ では実空間での振動が見られた。このメカニズムは、4H-SiC における (0001) 方向の電子の衝突イオン化係数がほぼ温度に依存しない [4] という実験結果の振る舞いと矛盾しない。

図2には、BZ幅は一定とし、 E_g (衝突イオン化の閾値エネルギーと等しい) を変化させた場合の α の電界依存性を示す。予想される通り、 E_g の増加に伴い α は減少するが、 E_g を 3.26 eV から 5.26 eV まで増加させても、 $k_{x,\text{BZE}}$ が $\pi/(0.5 \text{ nm})$ から $\pi/(1 \text{ nm})$ に減少した場合 (図1) ほど α は低下しない。このことは、 α に対するBZ幅の影響の大きさを示しており、 α の材料・方位依存性を論ずるにあたり重要な知見となる。

[1] H. Iwata and K. M. Itoh, *JAP* **89**, 6228 (2001). [2] Y. Kamakura *et al.*, *SISPAD2016*, 47 (2016).

[3] S. Rott *et al.*, *PRB* **59**, 7334 (1999). [4] H. Niwa *et al.*, *IEEE TED* **62**, 3326 (2015).

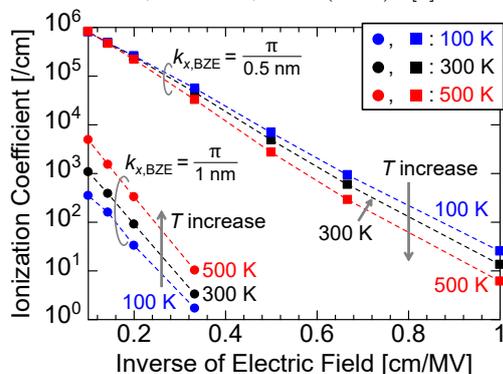


Fig. 1: Electric field dependence of impact ionization coefficients at different T for two $k_{x,\text{BZE}}$ values of $\pi/(0.5 \text{ nm})$ and $\pi/(1 \text{ nm})$.

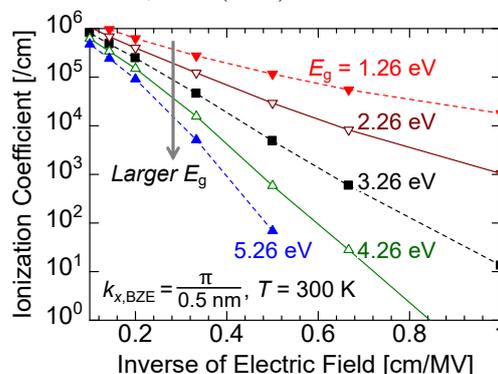


Fig. 2: Impact ionization coefficients for different E_g . $k_{x,\text{BZE}} = \pi/(0.5 \text{ nm})$ and $T = 300 \text{ K}$ are commonly assumed in this figure.