

機関番号：14401

研究種目：若手研究

研究期間：2021～2023

課題番号：21K14195

研究課題名（和文）ワイドギャップ半導体における衝突イオン化現象の理論研究

研究課題名（英文）Theoretical Study on Impact Ionization Phenomena in Wide-bandgap Semiconductors

研究代表者

田中 一（Tanaka, Hajime）

大阪大学・大学院工学研究科・助教

研究者番号：40853346

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,500,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、各種ワイドギャップ半導体における衝突イオン化係数をはじめとした高電界キャリア輸送を理論的に解析した。炭化ケイ素・窒化ガリウム・酸化ガリウムのフルバンド構造を考慮したモンテカルロシミュレーションと、解析的なバンド構造を考慮したモンテカルロシミュレーションとの双方を行った。これらに基づき、衝突イオン化係数の振る舞いをバンド構造や散乱レートなどに着目して議論した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、各種ワイドギャップ半導体における高電界キャリア輸送特性、特に衝突イオン化係数の振る舞いについて物理的な理解を与えている。また、実験結果や、より負荷の大きい数値計算による結果を、計算負荷をある程度抑えつつ再現するモデルを提示している。これらは、半導体材料物性への理解を深めるという学術的な側面と、デバイスの絶縁破壊特性の予測やその高耐圧化へ向けた構造設計・材料選択のための基礎となるといった実用的な側面との両面において意義のある成果であると言える。

研究成果の概要（英文）：In this study, we theoretically analyzed the high-field carrier transport properties, such as the impact ionization coefficients, in various wide-bandgap semiconductors. We performed Monte Carlo simulations considering the full band structures of silicon carbide, gallium nitride, and gallium oxide. Monte Carlo simulations considering the analytical band structures were also performed. Based on both simulations, we discussed the behaviors of the impact ionization coefficients focusing on the band structures and scattering rates.

研究分野：半導体物性

キーワード：モンテカルロ 高電界 衝突イオン化 ワイドギャップ半導体

様式 C - 19 , F - 19 - 1 (共通)

1. 研究開始当初の背景

パワーデバイスを用いた電力変換は現代社会にとって必要不可欠なものである。しかし、現在主に用いられている Si パワーデバイスは、材料物性によって決まる限界に直面している。そこで、このような Si デバイスの限界を突破することができる新材料として、炭化ケイ素 (SiC)、窒化ガリウム (GaN)、酸化ガリウム (Ga_2O_3) などのワイドギャップ半導体が注目されている。これらの材料は、大きなバンドギャップを持ち、絶縁破壊電界強度も大きいため、同程度の耐圧を持つ素子を作製した場合の導通損失を Si の場合と比べ大幅に低減できる。SiC および GaN パワーデバイスについては既に製品化され普及が進みつつある。 Ga_2O_3 についても国内外で研究が進められている。

このようなワイドギャップ半導体へのパワーデバイス材料としての期待は、上で述べたように、その絶縁破壊電界の大きさに由来する。しかし、絶縁破壊電界を決定する物性値である、キャリアの衝突イオン化係数 (キャリアが電界下で単位距離を走行する間に、価電子帯の電子を伝導帯に励起して、電子正孔対を生成させる、すなわち衝突イオン化を生じる回数) についての理解は不十分である。実験の面では、SiC・GaN について衝突イオン化係数の測定値が報告されているが、その結果に対する物理的解釈は明確でない。 Ga_2O_3 についてはさらにデータが不足している。そのため、様々なワイドギャップ半導体における衝突イオン化係数について、その材料依存性を含めた振る舞いの理解を深めることが求められている。特に、ワイドギャップ半導体で衝突イオン化が生じる際には、Si や GaAs などバンドギャップの小さな材料と比べ、キャリアが、より大きな運動エネルギーを持ち、高エネルギー領域に存在する多数のバンドが伝導に寄与する。そこで、ワイドギャップ半導体における衝突イオン化を記述するには、高エネルギー領域の多数のバンドを考慮することが重要となる。

2. 研究の目的

本研究では、以上を踏まえ、高エネルギー領域に存在する多数のバンドを考慮し、SiC、GaN、 Ga_2O_3 などのワイドギャップ半導体における衝突イオン化係数を始めとした高電界キャリア輸送現象を理論的に理解し、特に衝突イオン化係数にバンド構造や散乱レートなど材料の特性が与える影響を解明することを目的とした。さらに、この目的のために必要な、伝導帯・価電子帯それぞれの中の複数のバンド間でのトンネル効果による遷移の記述など、必要な計算手法を開発することも目的とした。

3. 研究の方法

上記の目的のため、以下の4つを主要内容として研究を行った。

- (1) 解析的な数式で表現したバンド構造中の高電界キャリア輸送の解析
 - (2) Ga_2O_3 におけるバンド構造に対する強束縛モデルの構築および高電界電子輸送の解析
 - (3) GaN におけるバンド構造および高電界キャリア輸送の歪みに対する依存性の解析
 - (4) 4H-SiC における高電界キャリア輸送の解析
- これらのそれぞれの方法について、以下で述べる。

(1) 解析的な数式で表現したバンド構造中の高電界キャリア輸送の解析

フルバンドモンテカルロ法を用いて高電界キャリア輸送のシミュレーションを行った。本手法は、以降の(2)~(4)における各種材料での高電界キャリア輸送計算でも用いる手法である。ただし、(1)では、解析的な数式で表現した E - k 分散 (エネルギー E と波数 k の分散関係) を用いつつ、複数のバンドが一定のエネルギー間隔で並んだバンド構造を仮定することで、ワイドギャップ半導体での高電界輸送で重要となる多バンド性を考慮した解析を行った。また、解析的な E - k 分散として、一般的に仮定される放物線型ではなく、有限のブリルアンゾーン幅を持った \cos 関数型、およびそれをさらに変調し、バンド端での曲率 (有効質量) と平均的な勾配 (平均群速度) とを独立に変化させた E - k 分散も仮定した。これらのバンド構造を、仮想的な物質のフルバンド構造とみなして、これに対して、フォノンによるキャリアの散乱と衝突イオン化を考慮して、フルバンドモンテカルロシミュレーションを行った。

(2) Ga_2O_3 におけるバンド構造に対する強束縛モデルの構築および高電界電子輸送の解析

本内容に関しては、 Ga_2O_3 の複数の結晶構造の中で最安定構造である、 β 構造 Ga_2O_3 に注目し、まず、その伝導帯構造を記述するモデルを、経験的強束縛近似法の枠組みで構築した。経験的強束縛近似法は、目標とするバンド構造を再現するように経験的に決定したパラメータを用いて、原子軌道を基底として電子状態を記述する計算手法である。その後、本強束縛モデルによる伝導帯のフルバンド構造と、第一原理計算で求めた伝導帯のフルバンド構造とのそれぞれを考慮して、フルバンドモンテカルロ法による高電界電子輸送のシミュレーションを行った。

(3) GaN におけるバンド構造および高電界キャリア輸送の歪みに対する依存性の解析

本内容に関しては、まず、強束縛近似法によるバンド構造の計算を、先行研究 (J.-M. Jancu et al., Appl. Phys. Lett. 81, 4838 (2002).) のパラメータを用いて行った。さらに、歪みの印加による GaN の絶縁破壊特性の変化を検討するため、バンド構造、具体的には有効質量や群速度の歪みに応じた変化の解析を行った。得られた伝導帯・価電子帯双方のバンド構造を用いて、フルバンドモンテカルロ法による高電界キャリア輸送のシミュレーションを行った。この際には、Krieger-Iafrate 方程式を用いて、伝導帯・価電子帯のそれぞれの中での、複数のバンドの間でのトンネル効果による遷移を考慮して解析を行った。

(4) 4H-SiC における高電界キャリア輸送の解析

さらに、4H-SiC における電子および正孔の高電界輸送特性の解析をフルバンドモンテカルロ法により行った。4H-SiC については、バンド構造を第一原理計算で記述した。この場合には、トンネル効果によるバンド間遷移の考慮において Krieger-Iafrate 方程式のように波動関数を用いると計算負荷が大きくなるため、波動関数の情報を用いずに分散関係のみからトンネル確率を見積もる手法を開発して適用した。

4. 研究成果

(1) 解析的な数式で表現したバンド構造中の高電界キャリア輸送の解析

cos 関数型の解析バンドを用いて計算した衝突イオン化係数の、温度 T 及びブリルアンゾーン幅 G_x に対する依存性を図 1 に示す。横軸は電界の逆数としてプロットしている。図 1 より、ブリルアンゾーン幅 G_x が大きいほど、衝突イオン化係数が大きくなっていることが分かる。これは、平均的な群速度が、ブリルアンゾーン幅が大きいときほど大きくなることから理解できる。また、ブリルアンゾーン幅が小さいときには、衝突イオン化係数が顕著に小さくなっている (図 1 の $G_x = 2\pi/(1 \text{ nm})$)。これは、高電界印加時にブロッホ振動が生じていることに由来する。また、この条件では、温度依存性もその他の場合と逆転している。そこで、フォノン散乱の確率を変化させた詳細な解析を行った。高温で激しくなるフォノン散乱は、通常は電子の運動を障害して衝突イオン化係数を低下させる方向に作用する。一方、図 1 の $G_x = 2\pi/(1 \text{ nm})$ の場合には、フォノン散乱が電子の高エネルギーバンドへの乗り移りを促進し、その結果として、電子のエネルギーと衝突イオン化係数を増加させていることが分かった。また、バンド端の有効質量とバンド全体の平均的な群速度とを変化させた計算により、バンド端の有効質量よりも、平均的な群速度の方が、衝突イオン化係数に大きな影響を与えることを示した。

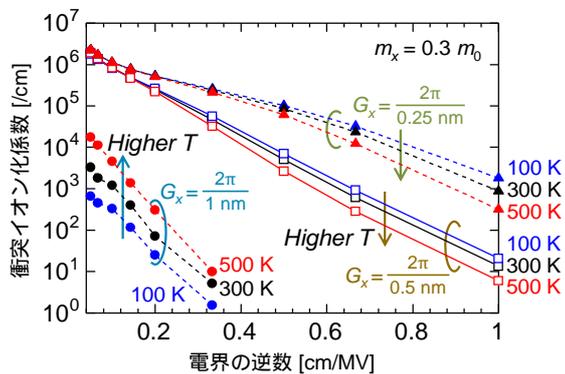


図 1: 解析バンドを仮定して求めた衝突イオン化係数の計算結果。

(2) Ga₂O₃ におけるバンド構造に対する強束縛モデルの構築および高電界電子輸送の解析

図 2 に本研究の強束縛モデルで計算した β -Ga₂O₃ のバンド構造を示す。赤線が本研究で得た強束縛パラメータを用いて計算した結果、黒線が第一原理計算の結果である。強束縛近似法により、第一原理計算によるバンド構造、特に伝導帯の E - k 分散と大きなバンドギャップを比較的良好に再現した。さらに、強束縛近似法で求めたバンド構造における各原子軌道成分の寄与を解析し、先行研究と整合することを確認した。

次に、強束縛近似法と第一原理計算とで得られた伝導帯構造を用いて、 β -Ga₂O₃ における電子輸送を解析した。まず、低電界における移動度の温度依存性を再現する散乱モデルを構築した。その後、そのモデルに基づいて高電界での輸送特性を計算した。その結果、先行研究で報告されている、第一原理計算に基づく複雑な散乱過程を考慮した衝突イオン化係数の振る舞いを、よりシンプルな散乱モ

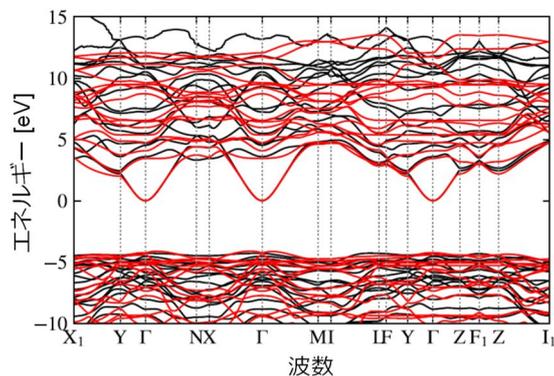


図 2: β -Ga₂O₃ のバンド構造。赤線が本研究で構築した強束縛モデルを用いて計算した結果、黒線が第一原理計算の結果。

デルによってある程度再現できることが分かった。また、衝突イオン化係数の異方性がバンド構造の異方性により理解できることを示した。

(3) GaNにおけるバンド構造および高電界キャリア輸送の歪みに対する依存性の解析

図3に、c軸方向への一軸圧縮歪みを与えた際のGaNのバンド構造を示す。このバンド構造における価電子帯 ($E < 0$ eV) に注目すると、一軸圧縮歪みを与えることで、-A方向のE-k分散の傾き、すなわち群速度が大きくなることが分かる。この結果は、図3に示す特定の波数での結果であるが、ブリルアンゾーン全域の波数を考慮した、より詳細な解析においても、同様に一軸圧縮歪みで0 eVから-3.5 eV付近での平均的な群速度が増加することが示された。

続いて、得られたバンド構造と波動関数を用いて、GaNにおける高電界キャリア輸送の、バンド間トンネル効果も考慮したシミュレーションを行った。まず、無歪の場合について、散乱の記述に用いるパラメータを調整し、衝突イオン化係数の実験値を再現した。そのうえで、歪みによるバンド構造の変化を考慮した計算を行い、衝突イオン化係数の歪みに対する依存性を解析した。図4に、一軸歪みを与えた際の、c軸方向への電界印加に対する電子と正孔の衝突イオン化係数の計算結果を示す。正孔の衝突イオン化係数は、上述の価電子帯の群速度の増加と、価電子帯幅の増加により、一軸圧縮歪みに対して増大する。他方、電子の衝突イオン化係数は逆向きの歪み依存性を示している。これらを考慮して絶縁破壊電界を計算したところ、電子と正孔の衝突イオン化係数の変化が打ち消し合うことで、絶縁破壊電界はほとんど歪みに依存しなかった。他の歪みおよび電界印加条件についても解析を行った結果、歪によるGaNの絶縁破壊特性の変化は小さいという結果を得た。

(4) 4H-SiCにおける高電界キャリア輸送の解析

4H-SiCにおける電子および正孔の衝突イオン化係数の理論解析を行い、温度依存性や異方性といった実験結果を再現する計算結果を得た。c軸方向に電界を印加した際の電子と正孔の衝突イオン化係数の計算結果を図5に示す。この条件での電子の衝突イオン化係数の温度依存性に関連して、(1)で行った解析的なバンド構造を仮定した計算でみられた現象と類似の、フォノン散乱の増加によって高エネルギーの電子が増加する現象が生じていることを見出した。この現象は、c軸方向に対応する波数空間のM-L方向での4H-SiCの伝導帯構造に、局所的なギャップが存在し、これにより電子が電界からエネルギーを得にくくなっていることに由来する。

以上、本研究では、研究期間全体を通じて、ワイドギャップ半導体における高電界キャリア輸送特性のシミュレーションのために有用なモデル・手法を開発するとともに、SiC, GaN, Ga₂O₃における高電界キャリア輸送の理論解析を行い、解析的なバンド構造を仮定した計算とも比較しつつ、これらの材料における衝突イオン化係数をはじめとした高電界物性についてバンド構造や散乱レートに基づく理解を与えた。

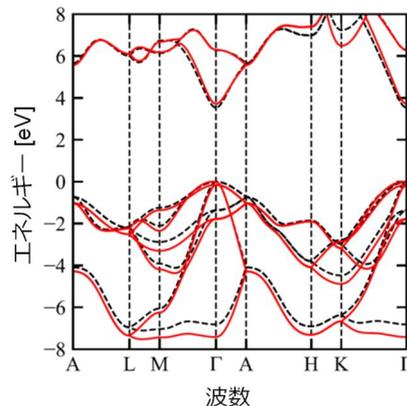


図3: 5%一軸圧縮歪みを与えたGaNのバンド構造。黒の破線が歪みを与えない場合の結果、赤の実線が歪みを与えた場合の結果。

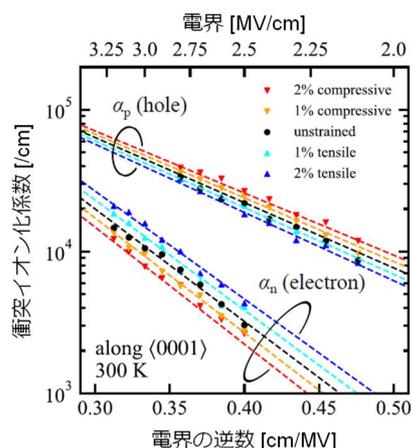


図4: 一軸歪みを与えたGaNにおける衝突イオン化係数の計算結果。

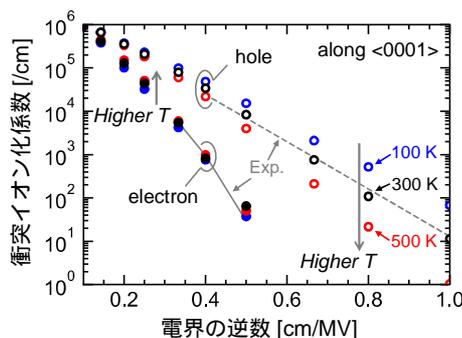


図5: 4H-SiCにおける衝突イオン化係数の計算結果。灰色破線で300 Kでの実験値 (H. Niwa et al., IEEE Trans. Electron Devices 62, 3326 (2015).) を示す。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

| | |
|---|----------------------|
| 1. 著者名 H. Tanaka, T. Kimoto, and N. Mori | 4. 巻 173 |
| 2. 論文標題 Theoretical study on high-field carrier transport and impact ionization coefficients in 4H-SiC | 5. 発行年 2024年 |
| 3. 雑誌名 Materials Science in Semiconductor Processing | 6. 最初と最後の頁 108126 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.mssp.2024.108126 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|---|----------------------|
| 1. 著者名 W. Miyazaki, H. Tanaka, and N. Mori | 4. 巻 63 |
| 2. 論文標題 Full-band Monte Carlo analysis of strain effects on carrier transport in GaN | 5. 発行年 2024年 |
| 3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics | 6. 最初と最後の頁 02SP35 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.35848/1347-4065/ad1005 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|--|----------------------|
| 1. 著者名 W. Miyazaki, H. Tanaka, and N. Mori | 4. 巻 62 |
| 2. 論文標題 Tight-binding analysis of the effect of strain on the band structure of GaN | 5. 発行年 2023年 |
| 3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics | 6. 最初と最後の頁 SC1076 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.35848/1347-4065/acb7fe | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|--|----------------------|
| 1. 著者名 H. Tanaka, T. Kimoto, and N. Mori | 4. 巻 131 |
| 2. 論文標題 Simulation analysis of high-field carrier transport in wide-bandgap semiconductors considering tunable band structures and scattering processes | 5. 発行年 2022年 |
| 3. 雑誌名 Journal of Applied Physics | 6. 最初と最後の頁 225701 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1063/5.0090308 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

〔学会発表〕 計8件（うち招待講演 1件 / うち国際学会 5件）

| |
|---------------------------------|
| 1. 発表者名 田中 一, 木本 恒暢, 森 伸也 |
| 2. 発表標題 4H-SiCの衝突イオン化係数の理論解析 |
| 3. 学会等名 第83回 応用物理学会 秋季学術講演会 |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 W. Miyazaki, H. Tanaka, and N. Mori |
| 2. 発表標題 Full-Band Monte Carlo Analysis of Strain Effects on Carrier Transport in GaN |
| 3. 学会等名 2023 International Conference on Solid State Devices and Materials (国際学会) |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 W. Miyazaki, H. Tanaka, and N. Mori |
| 2. 発表標題 Full-band Monte Carlo analysis of the effects of strain on the impact ionization of GaN |
| 3. 学会等名 22nd International Conference on Electron Dynamics in Semiconductors, Optoelectronics and Nanostructures (国際学会) |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 H. Tanaka, T. Kimoto, and N. Mori |
| 2. 発表標題 Impacts of band structures and scattering processes on high-field carrier transport in wide bandgap semiconductors |
| 3. 学会等名 International Workshop on Computational Nanotechnology (招待講演) (国際学会) |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 W. Miyazaki, H. Tanaka, and N. Mori |
| 2. 発表標題 Tight-binding and full-band Monte Carlo analysis of the strain effects in wurtzite GaN |
| 3. 学会等名 Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems 2022 (国際学会) |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 W. Miyazaki, H. Tanaka, and N. Mori |
| 2. 発表標題 Tight-Binding Analysis of the Effect of Strain on the Band Structure of GaN |
| 3. 学会等名 2022 International Conference on Solid State Devices and Materials (国際学会) |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 宮崎 航, 田中 一, 森 伸也 |
| 2. 発表標題 GaNのバンド構造に歪みを与える影響の強束縛近似法に基づく解析 |
| 3. 学会等名 第83回 応用物理学会 秋季学術講演会 |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 入田 一輝, 岡田 丈, 橋本 風渡, 田中 一, 森 伸也 |
| 2. 発表標題 強束縛近似法による酸化ガリウムの電子状態の解析に関する研究 |
| 3. 学会等名 第82回応用物理学会 秋季学術講演会 |
| 4. 発表年 2021年 |

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

| | 氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号) | 所属研究機関・部局・職 (機関番号) | 備考 |
|--|---------------------------|-----------------------|----|
|--|---------------------------|-----------------------|----|

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

| 共同研究相手国 | 相手方研究機関 |
|---------|---------|
|---------|---------|