OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	原子論に基づく4H-SiC MOS反転層の電子状態解析に関する研究
Author(s)	永溝, 幸周
Citation	大阪大学, 2025, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/105253
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

様式３

論　文　内　容　の　要　旨

氏　　名　（　　永溝　幸周　　）	
論文題名	原子論に基づく4H-SiC MOS反転層の電子状態解析に関する研究

論文内容の要旨

本論文は，4H-SiCを材料とする電界効果トランジスタについて，その反転層に生じる電子状態を原子論的なモデルに基づく数値計算で解析した研究の成果をまとめたものであり，以下の7章で構成した．

第1章では，本研究の背景と目的を説明した．まず，4H-SiCデバイスの性能向上に向けて数値計算による反転層電子状態の解析が必要であることを述べた．また，その一方で原子論モデルによる反転層の解析例が少なく，反転層電子状態への理解が不足している点に課題があることを説明した．この背景を踏まえ，本研究の目的が，原子論モデルによる反転層電子状態の解析と，低計算コストな原子論モデルの提案・実証にあることを述べた．

第2章では，4H-SiCの特徴と計算手法を述べた．まず4H-SiCの特徴的な結晶構造を概説し，伝導帯の特徴である，2つの伝導帯谷（それぞれを下側伝導帯，上側伝導帯と呼ぶ）の存在，ミニバンド様の構造，電子状態の浮遊性を説明した．続いて，上述の特徴を全て考慮した，経験的擬ポテンシャル法に基づく反転層のモデルを説明した．さらに，酸化膜/4H-SiC(0001)界面の2種類の界面構造を説明した．最後に，経験的擬ポテンシャル法のモデルの比較対象として，有効質量近似法に基づく反転層のモデルを説明した．

第3章では，反転層の電子状態に現れる4H-SiCの超格子的な性質について述べた．はじめに，4H-SiCの結晶構造とバンド構造に見られる超格子的性質を説明した．また，高電界下で超格子に生じる電子状態のワニエ・シュタルク局在現象を説明した．経験的擬ポテンシャル法での計算結果から，有効質量近似法では再現できないワニエ・シュタルク局在状態が反転層の高エネルギーサブバンドに現れることがわかった．また，経験的擬ポテンシャル法でバルクの詳細なバンド構造が考慮されることで，低エネルギーサブバンドのエネルギーが有効質量近似法の結果より小さくなり，第1サブバンド底の有効質量の異方性が強くなることがわかった．

第4章では，酸化膜/4H-SiC界面の2種類の界面構造が反転層電子状態に及ぼす影響を解析した結果を述べた．はじめに，既知の界面構造依存性として，界面近傍の局所状態密度が界面構造に大きく依存すること，そして一方の界面構造の場合に反転層電子状態が局在することを説明した．続く説明では，経験的擬ポテンシャル法の計算では1つの反転層電子状態にバルクの2つの伝導帯が同時に寄与し得ることを示すとともに，それぞれの伝導帯からの寄与を量的に評価する方法を説明した．解析の結果，閉じ込め電界Fが小さい条件では，2つの界面構造での反転層電子状態の違いを，界面近傍で反転層電子の存在確率密度を低減する失活層の有無で簡潔に記述できることがわかった．また，一方の界面構造では，Fの増加に伴い上側伝導帯の寄与が増加しやすく，これにより電子状態が局在することを明らかにした．最後に，経験的擬ポテンシャル法で得られるサブバンドエネルギーを有効質量近似法の計算で再現するには，有効質量をバルクの約2倍にする必要があり，計算手法ごとの計算結果の乖離が大きいことを示した．

第5章では，自己無撞着計算によって反転層電子の空間分布を解析した結果を述べた．はじめに，先行研究で報告された，反転層電子の面密度を固定した場合の，電子の界面への接近に伴うHall移動度の低下について説明した．続いて，経験的擬ポテンシャル法に基づく自己無撞着計算の手続きを説明した．有効質量近似法に基づく自己無撞着計算も実行し経験的擬ポテンシャル法の結果と比較した結果，反転層電子の面密度が同じでも経験的擬ポテンシャル法の結果の方がより界面に電子が接近することがわかった．この結果は，有効質量近似法で計算した反転層電子状態を電子輸送計算に用いる場合，Hall移動度の低下を過少に見積ることを示唆している．

第6章では，バルク4H-SiCの伝導帯を記述する低計算コストな強結合近似モデルを提案・実証した．はじめに，提案モデルで採用する，浮遊電子状態の記述に適した独自の基底関数を説明した．続いて，ハミルトニアン行列の構築手続きを説明した．提案モデルにより，伝導帯のバンド構造および伝導帯底の波動関数の符号について，第一原理計算の結果をよく再現できることを実証した．この結果は，4H-SiCの反転層電子状態を原子論的なモデルで効率的に解析できる可能性を示した．

第7章では，本論文を通して得られた成果と知見を総括し，結論を述べた．

様式 7

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏　名	（　永溝　幸周　）

	(職)	氏　名
論文審査担当者	主 査　教授	森　伸也
	副 査　教授	森　勇介
	副 査　教授	渡部　平司
	副 査　教授	小島　一信
	副 査　教授	片山　光浩
	副 査　教授	丸山　美帆子
	副 査　教授	福田　憲二郎
	副 査　教授	片山　竜二
	副 査　教授	近藤　正彦
	副 査　教授	廣瀬　哲也

論文審査の結果の要旨

本論文は、4H-SiC を材料とする MOS 反転層の電子状態を原子論的モデルに基づいて解析しており、有効質量近似では捉えきれない現象を明確に示している。経験的擬ポテンシャル法を核とする原子論的な電子状態計算の枠組みを整備しており、界面構造の違い、および 4H-SiC に特有の多谷性・ミニバンド構造・浮遊電子状態を総合的に取り入れて評価している。併せて、将来の大規模輸送シミュレーションに資する低計算コストな強結合近似モデルを提案・実証しており、原子論的精度と実用性の両立を図っている。主要な成果を以下に示す。

(1) 反転層におけるワニエ・シュタルク局在の解析

経験的擬ポテンシャル法に基づく解析により、高電界下の高エネルギーサブバンドにワニエ・シュタルク局在状態が形成されることを示している。これは有効質量近似では再現できない特徴であり、4H-SiC の超格子的性質（多谷性やミニバンド様構造）を反映した原子論的な記述の必要性を具体的に示している。

(2) 界面構造が反転層電子状態に与える影響の解析

酸化膜/4H-SiC(0001) 界面の代表的な 2 種の構造を扱い、低電界では界面近傍の反転層電子の存在確率密度を減少させる「失活層」の存在を仮定することで両界面構造の差異を簡潔に記述できることを示している。また，先行研究で指摘されていた垂直電界が大きな条件下で電子状態が局在化する現象が，4H-SiC 特有の上側伝導帯が第１サブバンドの電子状態に及ぼす影響が増加することによるものであることを明らかにしている。

(3) 自己無撞着計算による空間分布の評価

経験的擬ポテンシャル法に基づく計算では有効質量近似に比べて電子が界面により接近することを示している。この成果は、反転層の原子論的な記述の重要性を強調するとともに、先行研究の知見と照らし合わせて、有効質量近似に基づく輸送計算では移動度を過大評価し得ることを示唆している。

(4) 低計算コストな強結合近似モデルの提案・実証

浮遊電子状態の記述に適した独自基底を導入したコンパクトな強結合近似モデルを構築しており、第一原理計算と整合する伝導帯バンド構造および波動関数の符号を再現することを実証している。これにより、反転層の原子論的な記述を維持しながら電子状態解析や輸送計算の高効率化に資する技術を提供している。

以上のように本論文は、4H-SiC MOS 反転層の電子状態に関する新たな知見を得るとともに、より実用的な計算モデルを提案し、その有効性を実証している。これらの成果は、SiC デバイスの物理解明と更なる高性能化に貢献するものである。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。