



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

博士学位論文

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

永溝 幸周

2025 年 7 月

大阪大学大学院工学研究科

目次

第 1 章	序論	1
1.1	パワー半導体材料としての 4H-SiC への期待	1
1.2	4H-SiC MOSFET の高性能化	2
1.3	4H-SiC MOS 反転層の電子状態計算における課題	2
1.4	研究目的および論文構成	5
	参考文献	5
第 2 章	SiC の特徴と計算手法	9
2.1	はじめに	9
2.2	4H-SiC の結晶構造	9
2.2.1	SiC の結晶多形	9
2.2.2	4H-SiC の格子・逆格子・原子位置	12
2.3	4H-SiC の電子構造	14
2.3.1	伝導帯のバンド構造	14
2.3.2	浮遊電子状態	15
2.4	計算手法	16
2.4.1	経験的擬ポテンシャル法	17
2.4.2	酸化膜/4H-SiC(0001) 界面の記述	21
2.4.3	局所状態密度の計算	25
2.4.4	反転層の記述	26
2.4.5	有効質量近似法	26
2.5	まとめ	27
	参考文献	27
第 3 章	SiC MOS 反転層における電子状態のワニエ・シュタルク局在	31
3.1	はじめに	31
3.2	一様電界下のバンド構造	32

3.3	シミュレーション結果	33
3.3.1	高エネルギーサブバンドの電子状態	33
3.3.2	高エネルギー領域のサブバンド構造	36
3.3.3	低エネルギーサブバンドの解析	37
3.4	まとめ	43
	参考文献	43
第 4 章	界面構造の 4H-SiC 反転層電子状態への影響	47
4.1	はじめに	47
4.2	解析手法	48
4.2.1	電子状態と界面との距離	48
4.2.2	バルク伝導帯の電子状態の混成	49
4.3	シミュレーション結果	50
4.3.1	低電界下の反転層電子状態	50
4.3.2	高電界下の反転層電子状態	55
4.3.3	有効質量近似法との比較	57
4.4	まとめ	60
	参考文献	61
第 5 章	自己無撞着計算による反転層電子状態の解析	63
5.1	はじめに	63
5.2	シュレディンガー・ポアソン方程式	64
5.2.1	ポアソン方程式の解	64
5.2.2	自己無撞着計算	66
5.3	シミュレーション結果	67
5.4	まとめ	71
	参考文献	73
第 6 章	コンパクトな経験的強結合近似モデルによるバルク 4H-SiC の伝導帯の記述	75
6.1	はじめに	75
6.2	強結合ハミルトニアン	76
6.3	本研究で提案する強結合モデル	78
6.4	シミュレーション結果	80
6.4.1	バンド構造	80
6.4.2	波動関数	81
6.5	まとめ	83

参考文献	84
第 7 章 結論	87

第 1 章

序論

1.1 パワー半導体材料としての 4H-SiC への期待

半導体を用いたトランジスタは、計算機などの弱電系からインバータなどの強電系まで様々な場で活用されており、高速な演算や低損失な電力変換などで社会に貢献している。トランジスタで発生する電力損失は、主に切り替え時のスイッチング損失や導通時のジュール損失である。これらを低減するための研究・開発がこれまで盛んに行われてきた。現在、トランジスタに最も多く使用されている半導体材料はシリコン (Si) である。成熟した Si 半導体技術によって、強電系の分野では Si パワーデバイスが Si の材料物性とデバイス構造から決まる理論限界に近い性能を示している。更なる電力損失削減を実現するためには、より優れた特性を示すデバイス構造または半導体材料を用いたパワー半導体デバイスを開発しなければならない。現在では Si に変わるパワー半導体材料として炭化ケイ素 (SiC) [1] が注目され、その産業利用が進んでいる。SiC には、化学組成が同じでありながら結晶構造の異なる結晶多形が多数存在し、その中でも 4H 構造 [2] を持つ 4H-SiC が応用上最も優れた結晶多形であるとされている。4H-SiC は 3.26 eV という大きなバンドギャップを持ち、Si の約 10 倍の絶縁破壊電界強度を示す。この大きな絶縁破壊電界強度は、SiC パワーデバイスの耐電圧の増大だけでなく、ON 抵抗の低減にも寄与する [3, 4]。また、SiC の熱伝導率は Si の約 3 倍である上に、大きなバンドギャップに由来して高温での安定動作が可能であることから、簡素で低消費電力な冷却機構を採用できる。さらに、金属-酸化膜-半導体 (MOS) 構造を形成することを考えると、SiC を熱酸化して得られる酸化物が二酸化ケイ素 (SiO_2) であることは、他のワイドバンドギャップ材料に対する大きな利点である。これらの優れた性質から、4H-SiC を用いたパワー半導体デバイスが注目されている。

1.2 4H-SiC MOSFET の高性能化

4H-SiC を材料とする金属–酸化膜–半導体電界効果トランジスタ (MOSFET) は、既に高電圧における電力変換用途で従来の Si MOSFET を超える性能を実現しており、実用化が進んでいる。現在、4H-SiC MOSFET の更なる性能向上に向けて、MOS 反転層のチャンネル抵抗を低減することが重要な課題となっている [4]。特に低耐圧 MOSFET においてはオン抵抗を占めるチャンネル抵抗の割合が大きくなるため、低耐圧用途の 4H-SiC MOSFET の実用化が進んでいない。大きなチャンネル抵抗の原因は、バルク 4H-SiC の電子移動度に大きく劣る 4H-SiC MOS 反転層のチャンネル移動度にある。バルク 4H-SiC の電子移動度がおよそ $1000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 程度 [3] であるのに対して、従来の 4H-SiC MOS 反転層のチャンネル移動度は数 cm^2/Vs から数十 cm^2/Vs であった [5–9]。このチャンネル移動度の大きな劣化の要因は、主に、酸化膜/4H-SiC 界面に多量に生じる界面準位が反転層電子を捕獲することによる、反転層を伝導できる電子の減少にある。近年では、この界面準位の密度を低減し、界面準位に捕獲されていない可動電子の割合を大きくすることによる移動度の改善が報告されており [10–12]、 $100 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ を超えるチャンネル移動度も実現されている。現在では可動電子の移動度を向上するべく研究が進められているが、可動電子の移動度を抑制する詳細なメカニズムはまだ解明されておらず、明確な性能向上の指針は得られていない。

近年、酸化膜/4H-SiC 界面の近傍に可動電子の移動度を抑制する散乱源が存在することが報告され [13]、界面準位に捕獲された電子や界面固定電荷によるクーロン散乱、界面ラフネスによるラフネス散乱などが現在注目されている。また、反転層の Hall 移動度を計測した先行研究 [14–16] では、反転層電子の面密度増加に伴う Hall 移動度の増加が報告されている。この現象から、反転層においてはクーロン散乱源が反転層電子によってスクリーニング [17, 18] されていると考えられている。加えて、反転層電子の界面への接近が Hall 移動度の低下に関係していることが実験と理論の両面から示唆されている [16, 19]。しかし、反転層電子と界面との距離を実験的に計測することは困難であるため、電子状態計算によって反転層電子の波動関数や電子密度の空間分布を理論的に求める必要がある。

1.3 4H-SiC MOS 反転層の電子状態計算における課題

電子状態計算を用いる多くの先行研究 [16, 20–27] では、有効質量近似法 [28, 29] に基づいて 4H-SiC MOS 反転層が記述されてきた。有効質量近似法を用いる電子状態計算は、第一原理計算などと比べて極めて短い時間で効率的に反転層を解析できることから、従来の Si MOS 反転層の解析などに活用されてきた [30]。これに倣い、4H-SiC MOS 反転層

の電子状態解析においても有効質量近似法に基づく電子状態計算が採用されてきた。しかし、4H-SiC MOS 反転層の電子状態解析において有効質量近似法を採用することは必ずしも適切ではない。4H-SiC には、有効質量近似法では記述できない結晶構造・電子構造上の特徴がいくつか存在し、それらが 4H-SiC の電気的特性や反転層電子状態に大きく影響することが報告されている。図 1.1 に、4H-SiC MOSFET のデバイス構造および 4H-SiC に特有の性質を示すとともに、それぞれについて本論文で説明・議論している章の番号を示す。本論文の章構成については 1.4 節で具体的に述べ、ここでは 4H-SiC に特有の性質を概説する。4H-SiC は Si などに比べて結晶の対称性が低いため、酸化膜/4H-SiC(0001) 界面近傍での Si 原子と C 原子の配置（界面構造）としては、欠陥がないと仮定しても Cubic 界面構造と Hexagonal 界面構造の 2 種類が現れる。第一原理計算を用いた酸化膜/4H-SiC 界面近傍の電子状態計算 [31–33] では界面近傍の 4H-SiC 領域で電子状態が界面構造に敏感であることが報告されているほか、界面と反転層電子との距離に界面構造依存性があることも報告されている [19]。また、4H 構造は $\langle 0001 \rangle$ 方向に大きな格子定数を持つ超格子的な構造であり、伝導帯にも超格子に特有のミニバンド様の構造が現れ、高電界下の 4H-SiC においては負性微分抵抗が実験により確認されている [34]。さらに、4H-SiC の伝導帯には 2 種類の伝導帯谷存在し、伝導帯底の電子状態は、格子点間の空間に大きな存在確率を示す独特の空間分布から浮遊電子状態と呼ばれている [35–37]。この浮遊電子状態の性質から、SiC の結晶多形ごとのバンドギャップの違いや、電子状態が界面構造に敏感であることが説明される。4H-SiC は結晶構造と電子構造の両面で従来材料にない特徴を多く備えるが、有効質量近似法では伝導帯底の有効質量のみを記述することで高い計算効率を実現するため、上述の原子配置や 4H-SiC のフルバンド構造が考慮されない。4H-SiC MOS 反転層のチャネル移動度を抑制する散乱機構の解明に向けて、まずは、上述の 4H-SiC の特徴を原子論モデルで考慮した高精度な計算によって反転層電子状態の理論研究を進める必要がある。

なお、反転層の電子輸送特性を解析する理論的な研究手法として、数値計算による反転層の電子輸送シミュレーションが挙げられる。具体的な方法としてはモンテカルロシミュレーションや量子輸送シミュレーションがあるが、これらの方法で電子輸送特性を解析するためには、シミュレータに解析対象となる反転層のバンド構造や電子状態もしくはハミルトニアンなどを与える必要がある。将来的に、このような電子輸送シミュレーションを実施することを考えれば、原子論的でありながらも計算効率の高い電子状態計算モデルの開発が望まれる。

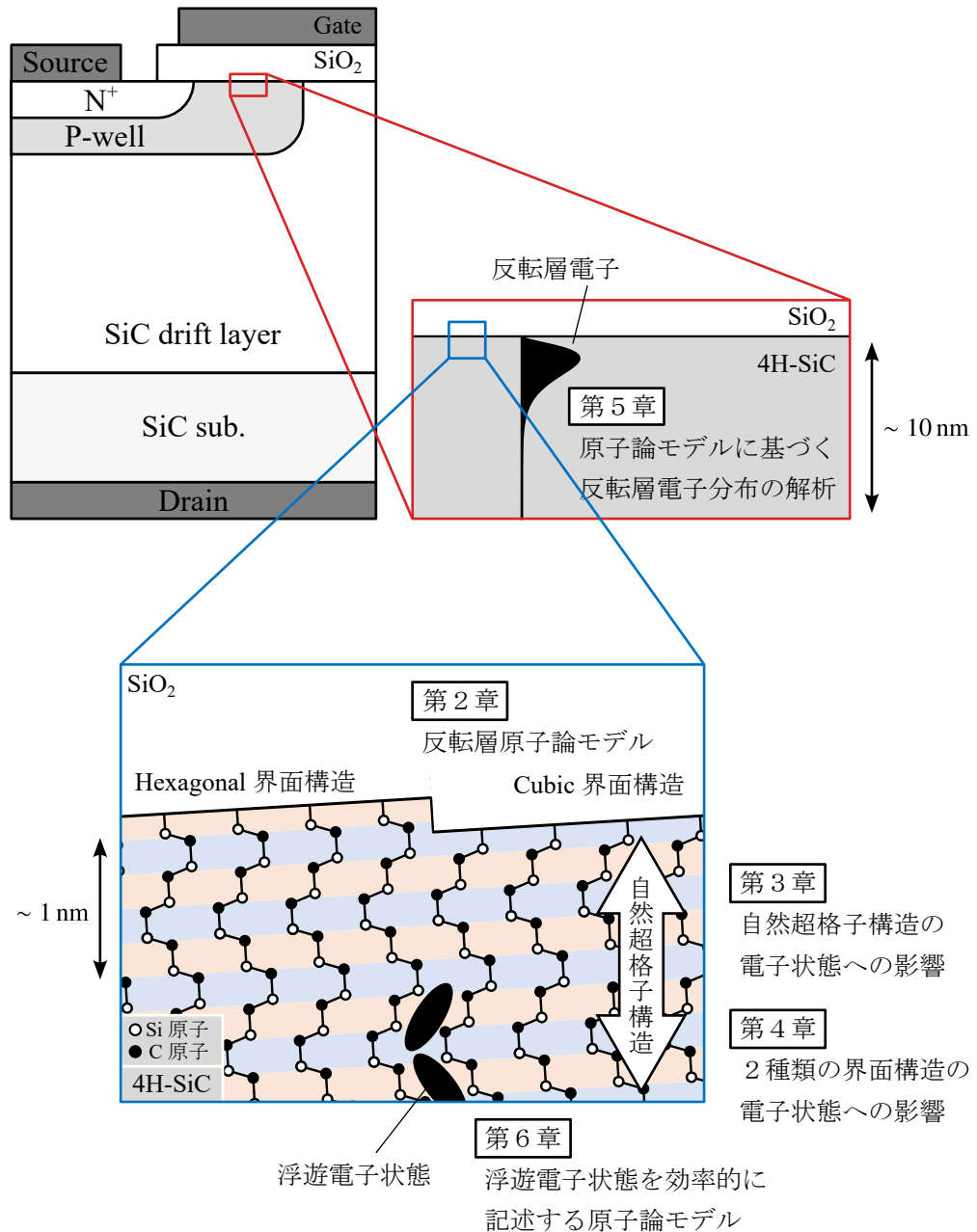


図 1.1: 4H-SiC MOSFET のデバイス構造と 4H-SiC に特有の性質の模式図. 各要素について説明・議論する本論文の章番号を併記する.

1.4 研究目的および論文構成

本研究の目的は、4H-SiC MOS デバイスの更なる性能向上に向けて、MOS 反転層内の電子状態を原子論的なモデルに基づく電子状態計算で解析し理解を深めること、および、伝導帯の高精度な記述が可能かつ低計算コストな原子論モデルを構築し 4H-SiC MOS 反転層の原子論的なモデルによる解析を加速することにある。

本論文は本章を含めて全 7 章から構成されている。第 2 章では、4H-SiC の特徴を概説したのち、本研究の基盤となる、経験的擬ポテンシャル法に基づく反転層の原子論モデルおよび電子状態計算手法を説明する。第 3 章では、4H-SiC が持つ超格子的な性質に焦点を当てて、MOS 反転層の電子状態を解析した研究の成果を述べる。第 4 章では、4H-SiC の界面構造に注目して、界面構造が MOS 反転層の電子状態に及ぼす影響を解析した研究の成果を述べる。第 5 章では、自己無撞着計算によって反転層の電子状態を決定したうえで、反転層中の個々の電子状態だけでなく、反転層電子の空間分布にも着目して解析した研究の成果を述べる。第 6 章では、計算効率の極めて高い原子論モデルを新たに提案し、提案モデルによるバルク 4H-SiC の伝導帯の高精度な記述を実証した成果について述べる。最後に、第 7 章で本研究を通して得られた成果をまとめる。

参考文献

- [1] T. Kimoto and J. A. Cooper, *Fundamentals of Silicon Carbide Technology: Growth, Characterization, Devices and Applications*, John Wiley & Sons (2014).
- [2] H. Matsunami and T. Kimoto, “Step-controlled epitaxial growth of SiC: High quality homoepitaxy,” *Mater. Sci. Eng. R Rep.*, **20**, 125 (1997).
- [3] T. Kimoto, “Material science and device physics in SiC technology for high-voltage power devices,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, **54**, 040103 (2015).
- [4] T. Kimoto and H. Watanabe, “Defect engineering in SiC technology for high-voltage power devices,” *Appl. Phys. Express*, **13**, 120101 (2020).
- [5] K. Ueno, R. Asai, and T. Tsuji, “4H-SiC MOSFETs utilizing the H₂ surface cleaning technique,” *IEEE Electron Device Lett.*, **19**, 244 (1998).
- [6] K. Ueno, R. Asai, and T. Tsuji, “H₂ surface treatment for gate-oxidation of SiC metal-oxide-semiconductor field effect transistors,” *Materials Science and Engineering: B*, **61**, 472 (1999).
- [7] G. Chung, C. Tin, J. Williams, K. McDonald, R. Chanana, R. A. Weller, S. Pantelides, L. C. Feldman, O. Holland, M. Das, et al., “Improved inversion channel mobility for

- 4H-SiC MOSFETs following high temperature anneals in nitric oxide,” *IEEE Electron Device Lett.*, **22**, 176 (2001).
- [8] K. Fujihira, Y. Tarui, M. Imaizumi, K.-i. Ohtsuka, T. Takami, T. Shiramizu, K. Kawase, J. Tanimura, and T. Ozeki, “Characteristics of 4H-SiC MOS interface annealed in N_2O ,” *Solid-State Electron.*, **49**, 896 (2005).
- [9] D. Okamoto, H. Yano, K. Hirata, T. Hatayama, and T. Fuyuki, “Improved inversion channel mobility in 4H-SiC MOSFETs on Si face utilizing phosphorus-doped gate oxide,” *IEEE Electron Device Lett.*, **31**, 710 (2010).
- [10] K. Tachiki and T. Kimoto, “Improvement of both n- and p-channel mobilities in 4H-SiC MOSFETs by high-temperature N_2 annealing,” *IEEE Trans. Electron Devices*, **68**, 638 (2020).
- [11] T. Kobayashi, T. Okuda, K. Tachiki, K. Ito, Y.-I. Matsushita, and T. Kimoto, “Design and formation of SiC (0001)/ SiO_2 interfaces via Si deposition followed by low-temperature oxidation and high-temperature nitridation,” *Appl. Phys. Express*, **13**, 091003 (2020).
- [12] K. Tachiki, M. Kaneko, and T. Kimoto, “Mobility improvement of 4H-SiC (0001) MOSFETs by a three-step process of H_2 etching, SiO_2 deposition, and interface nitridation,” *Appl. Phys. Express*, **14**, 031001 (2021).
- [13] M. Sometani, T. Hosoi, H. Hirai, T. Hatakeyama, S. Harada, H. Yano, T. Shimura, H. Watanabe, Y. Yonezawa, and H. Okumura, “Ideal phonon-scattering-limited mobility in inversion channels of 4H-SiC(0001) MOSFETs with ultralow net doping concentrations,” *Appl. Phys. Lett.*, **115**, 132102 (2019).
- [14] M. Noguchi, T. Iwamatsu, H. Amishiro, H. Watanabe, N. Miura, K. Kita, and S. Yamakawa, “Carrier transport properties in inversion layer of Si-face 4H-SiC MOSFET with nitrided oxide,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, **58**, 031004 (2019).
- [15] M. Noguchi, T. Iwamatsu, H. Amishiro, H. Watanabe, K. Kita, and N. Miura, “Hall effect mobility in inversion layer of 4H-SiC MOSFETs with a thermally grown gate oxide,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, **58**, SBBD14 (2019).
- [16] M. Noguchi, T. Iwamatsu, H. Amishiro, H. Watanabe, K. Kita, and N. Miura, “Coulomb-limited mobility in 4H-SiC MOS inversion layer as a function of inversion-carrier average distance from MOS interface,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, **59**, 051006 (2020).
- [17] Y. Nakabayashi, J. Koga, T. Ishihara, and S.-i. Takagi, “Physical origins of surface carrier density dependences of interface-and remote-coulomb scattering mobility in Si MOS inversion layer,” *Extended abstracts of the Conference on Solid State Devices and Materials*, vol.2005, 44 (2005).

- [18] Y. Nakabayashi, T. Ishihara, J. Koga, M. Takayanagi, and S.-i. Takagi, “New findings on inversion-layer mobility in highly doped channel Si MOSFETs,” *International Electron Devices Meeting (IEDM)*, 133 (2005).
- [19] H. Yoshioka, J.-I. Iwata, and Y.-I. Matsushita, “Atomic scale localization of Kohn–Sham wavefunction at SiO₂/4H-SiC interface under electric field, deviating from envelope function by effective mass approximation,” *Appl. Phys. Lett.*, **122**, 222104 (2023).
- [20] G. Pennington and N. Goldsman, “Self-consistent calculations for n-type hexagonal SiC inversion layers,” *J. Appl. Phys.*, **95**, 4223 (2004).
- [21] G. Pennington and N. Goldsman, “Simulation of electron transport in (0001) and (11 $\bar{2}$ 0) 4H-SiC inversion layers,” *J. Appl. Phys.*, **106**, 063701 (2009).
- [22] H. Tanaka and N. Mori, “Modeling of carrier scattering in MOS inversion layers with large density of interface states and simulation of electron Hall mobility in 4H-SiC MOSFETs,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, **59**, 031006 (2020).
- [23] K. Ito, T. Kobayashi, and T. Kimoto, “Effect of quantum confinement on the defect-induced localized levels in 4H-SiC(0001)/SiO₂ systems,” *J. Appl. Phys.*, **128**, 095702 (2020).
- [24] T. Ohashi, R. Iijima, and H. Yano, “Dominant scattering mechanism in SiC MOSFET: comparative study of the universal mobility and the theoretically calculated channel mobility,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, **59**, 034003 (2020).
- [25] W. Fu, H. Yano, T. Sakurai, and A. Ueda, “The effect of biaxial strain on the phonon-limited mobility in 4H-SiC MOSFETs,” *Appl. Phys. Express*, **16**, 081002 (2023).
- [26] K. Ito, H. Tanaka, M. Horita, J. Suda, and T. Kimoto, “Influence of fixed charges and trapped electrons on free electron mobility at 4H-SiC (0001)/SiO₂ interfaces with gate oxides annealed in NO or POCl₃,” *Appl. Phys. Express*, **17**, 081003 (2024).
- [27] X. Chi, K. Ito, T. Suto, A. Shima, M. Kaneko, and T. Kimoto, “Unique electron trapping and its impacts on electron mobility in SiC n-channel MOSFETs,” *2024 IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)*, 1 (2024).
- [28] C. Hamaguchi, *Basic Semiconductor Physics*, fourth edition, Springer (2023).
- [29] D. Esseni, P. Palestri, and L. Selmi, *Nanoscale MOS Transistors: Semi-Classical Transport and Applications*, Cambridge University Press (2011).
- [30] T. Ando, A. B. Fowler, and F. Stern, “Electronic properties of two-dimensional systems,” *Rev. Mod. Phys.*, **54**, 437 (1982).
- [31] C. J. Kirkham and T. Ono, “First-principles study on interlayer states at the 4H-SiC/SiO₂ interface and the effect of oxygen-related defects,” *J. Phys. Soc. Jpn.*, **85**, 024701 (2016).
- [32] T. Ono, C. J. Kirkham, S. Saito, and Y. Oshima, “Theoretical and experimental inves-

- tigation of the atomic and electronic structures at the 4H-SiC(0001)/SiO₂ interface,” Phys. Rev. B, **96**, 115311 (2017).
- [33] Y.-I. Matsushita and A. Oshiyama, “A novel intrinsic interface state controlled by atomic stacking sequence at interfaces of SiC/SiO₂,” Nano Lett., **17**, 6458 (2017).
- [34] V. Sankin and I. Stolichnov, “Negative differential conduction in the Bloch oscillations regime in the hexagonal silicon carbide polytypes 4H, 6H and 8H,” Superlattices Microstruct., **23**, 999 (1998).
- [35] Y.-I. Matsushita, S. Furuya, and A. Oshiyama, “Floating electron states in covalent semiconductors,” Phys. Rev. Lett., **108**, 246404 (2012).
- [36] Y.-I. Matsushita and A. Oshiyama, “Interstitial channels that control band gaps and effective masses in tetrahedrally bonded semiconductors,” Phys. Rev. Lett., **112**, 136403 (2014).
- [37] Y.-I. Matsushita and A. Oshiyama, “Comprehensive study on band-gap variations in sp^3 -bonded semiconductors: Roles of electronic states floating in internal space,” J. Phys. Soc. Jpn., **86**, 054702 (2017).

第 2 章

SiC の特徴と計算手法

2.1 はじめに

経験的擬ポテンシャル法 [1] は，4H-SiC を原子論的に記述可能でかつ 4H-SiC のフルバンド構造を考慮可能な電子状態計算手法である．第 3 章，第 4 章，第 5 章に記述される 4H-SiC MOS 反転層の電子状態計算は，すべてこの経験的擬ポテンシャル法に基づく方法で実施される．本章では，まず 4H-SiC の結晶構造と電子構造について概説する．続いて，経験的擬ポテンシャル法の概要を説明したのち，これに基づく 4H-SiC MOS 反転層のモデルを説明する．なお，本研究で新たに提案・実証する低計算コストな原子論モデルについては，第 6 章で説明する．

2.2 4H-SiC の結晶構造

2.2.1 SiC の結晶多形

第 1 章で述べたように SiC には多数の結晶多形が存在し，いずれの結晶多形についても図 2.1 に示す Si 原子（白丸）と C 原子（黒丸）からなる六方格子構造のバイレイヤを稠密に積み重ねた構造となっている．図 2.2 は積層方向からみた各バイレイヤの原子位置を示す．各バイレイヤは積層方向と垂直な面内での相対的な位置に自由度を持ち，図 2.2 で A, B, C で示される 3 種類の位置のいずれかに配置される．積み重ねられたそれぞれのバイレイヤを A, B, C の記号で表現することで，SiC の結晶構造を例えば ABCABC..... などと表記する．SiC における結晶多形間での構造の違いはバイレイヤの積層順序の違いとして記述できる．Ramsdell の表記法 [2] ではこの積層順序の周期及び結晶の対称性（Cubic, Hexagonal または Rhombohedral）から，各結晶多形を 2H-SiC, 3C-SiC, 4H-SiC, 6H-SiC, R15-SiC と表記する．代表的な結晶多形として，3C-SiC, 4H-SiC, 6H-SiC の構造を図 2.3 に示す．なお，SiC 結晶中では各バイレイヤの積層順序を反映した図 2.4 の鎖

状構造が見られる．本論文において SiC の構造を図示する際には，簡便な表現のために図 2.4 の鎖状構造を用いる．また，いずれの SiC 結晶多形においても各原子は隣接する 4 つの原子と sp^3 結合しており，局所的な構造については結晶多形間で大きな違いはないという特徴がある．

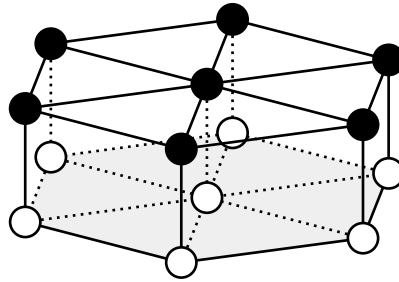


図 2.1: SiC 結晶を構成する Si 原子と C 原子からなる六方格子構造のバイレイヤ．白丸は Si 原子を，黒丸は C 原子を表す．

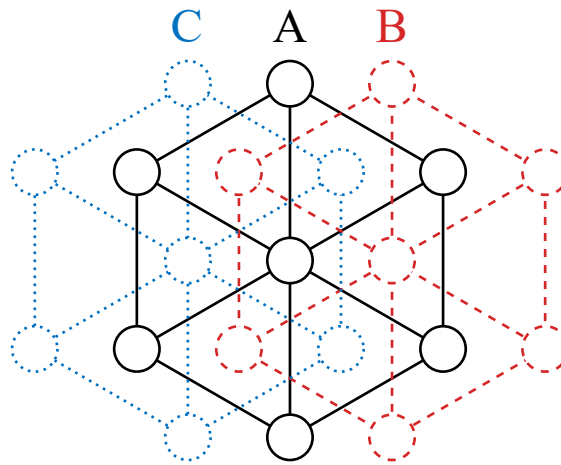


図 2.2: 3 種類のバイレイヤを積層方向から見た図．黒実線は A 層，赤破線は B 層，青点線は C 層を表す．○はバイレイヤ中の原子位置を表す．

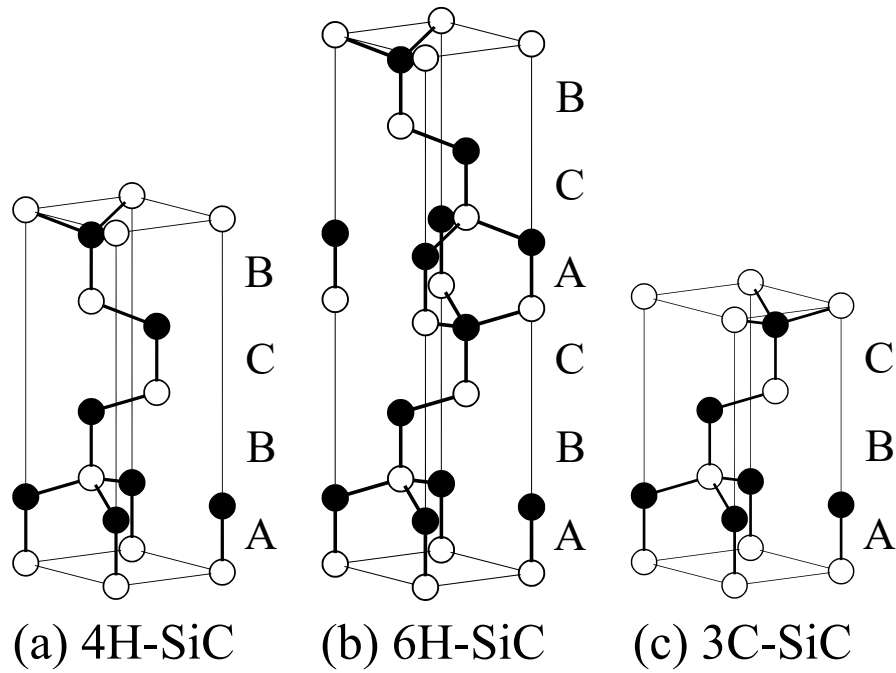


図 2.3: (a) 4H-SiC, (b) 6H-SiC, (c) 3C-SiC における単位胞内の原子配置. 白丸は Si 原子を, 黒丸は C 原子を表す.

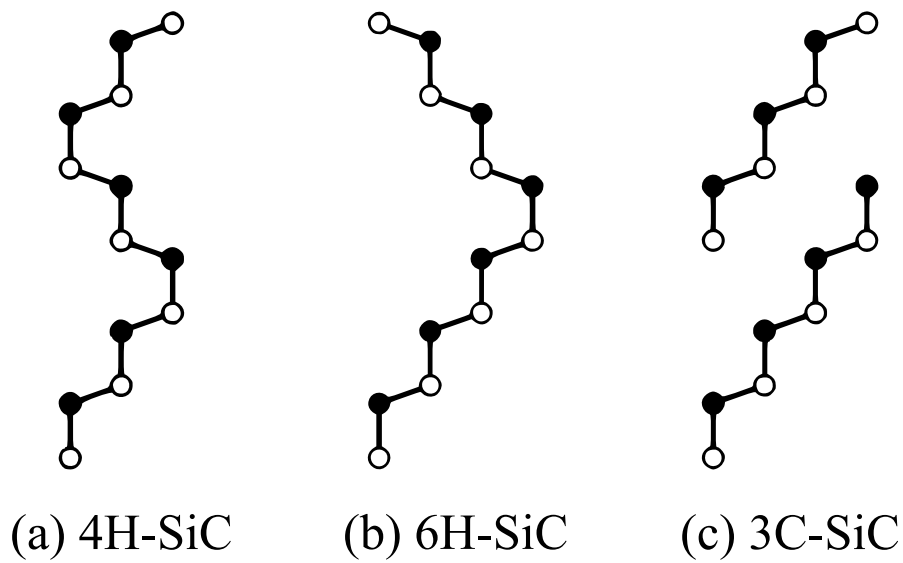


図 2.4: (a) 4H-SiC, (b) 6H-SiC, (c) 3C-SiC において見られる鎖状構造. 白丸は Si 原子を, 黒丸は C 原子を表す.

2.2.2 4H-SiC の格子・逆格子・原子位置

本節では、4H-SiC の結晶構造について述べる．図 2.5 に 4H-SiC の基本単位胞と基本並進ベクトルを示す．4H-SiC は六方晶であるためその基本単位胞はひし形の底面を持つ四角柱である．基本並進ベクトル $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ は底面に並行で、これらのなす角は 120 度である．基本並進ベクトル $\mathbf{a}_3$ は底面に垂直、つまり $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ に垂直である． $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ の長さを格子定数 a とおき、 $\mathbf{a}_3$ の長さを格子定数 c とおく．ここで $a = 0.308051 \text{ nm}$, $c = 1.008480 \text{ nm}$ [3] である． $\mathbf{a}_3$ 方向に平行な方向を c 軸方向（ミラー・ブラベ指数（Miller-Bravais indices）では $\langle 0001 \rangle$ 方向）と呼び、 $\mathbf{a}_1$ と $\mathbf{a}_2$ の方向を a 軸方向と呼ぶ． $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ は、直交座標系では下式で表される．

$$\mathbf{a}_1 = \frac{1}{2}a\hat{x} - \frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{y} + 0\hat{z} \quad (2.1)$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{1}{2}a\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{y} + 0\hat{z} \quad (2.2)$$

$$\mathbf{a}_3 = 0\hat{x} + 0\hat{y} + c\hat{z} \quad (2.3)$$

ここで、 $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ はそれぞれ x, y, z 方向の単位ベクトルを表す．4H-SiC を構成する 4 層のバイレイヤを添え字 i ($i = 1, 2, 3, 4$) で区別し、4H-SiC のユニットセル内の Si 原子と C 原

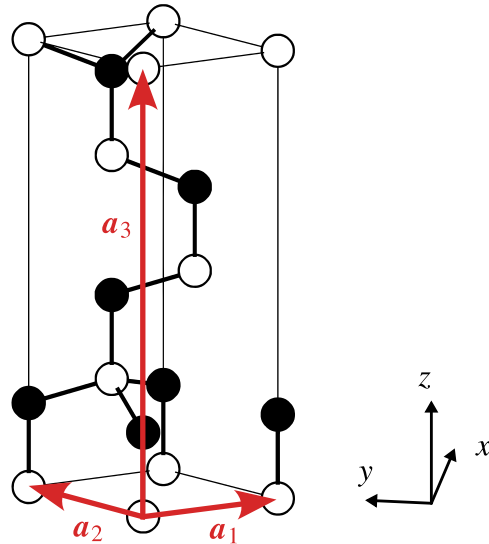


図 2.5: 4H-SiC の基本単位胞．赤矢印で基本格子ベクトル $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ を示す．

子の位置を以下のベクトル $\mathbf{r}_{\text{Si},i}, \mathbf{r}_{\text{C},i}$ で表す.

$$\mathbf{r}_{\text{Si},1} = 0\mathbf{a}_1 + 0\mathbf{a}_2 + 0\mathbf{a}_3 = 0\hat{x} + 0\hat{y} + 0\hat{z} \quad (2.4)$$

$$\mathbf{r}_{\text{Si},2} = \frac{1}{3}\mathbf{a}_1 - \frac{1}{3}\mathbf{a}_2 + \frac{1}{4}\mathbf{a}_3 = 0\hat{x} - \frac{1}{\sqrt{3}}a\hat{y} + \frac{1}{4}c\hat{z} \quad (2.5)$$

$$\mathbf{r}_{\text{Si},3} = -\frac{1}{3}\mathbf{a}_1 + \frac{1}{3}\mathbf{a}_2 + \frac{2}{4}\mathbf{a}_3 = 0\hat{x} + \frac{1}{\sqrt{3}}a\hat{y} + \frac{2}{4}c\hat{z} \quad (2.6)$$

$$\mathbf{r}_{\text{Si},4} = \frac{1}{3}\mathbf{a}_1 - \frac{1}{3}\mathbf{a}_2 + \frac{3}{4}\mathbf{a}_3 = 0\hat{x} - \frac{1}{\sqrt{3}}a\hat{y} + \frac{3}{4}c\hat{z} \quad (2.7)$$

$$\mathbf{r}_{\text{C},i} = \mathbf{r}_{\text{Si},i} + \frac{3}{16}\mathbf{a}_3 \quad (2.8)$$

また, 逆格子の基本並進ベクトル $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ は下式で表される.

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\hat{x} - \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{2\pi}{a}\hat{y} + 0\hat{z} \quad (2.9)$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\hat{x} + \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{2\pi}{a}\hat{y} + 0\hat{z} \quad (2.10)$$

$$\mathbf{b}_3 = 0\hat{x} + 0\hat{y} + \frac{2\pi}{c}\hat{z} \quad (2.11)$$

図 2.6 に 4H-SiC のブリルアンゾーンと $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ に加えて, 代表的な高対称点を示す. そ

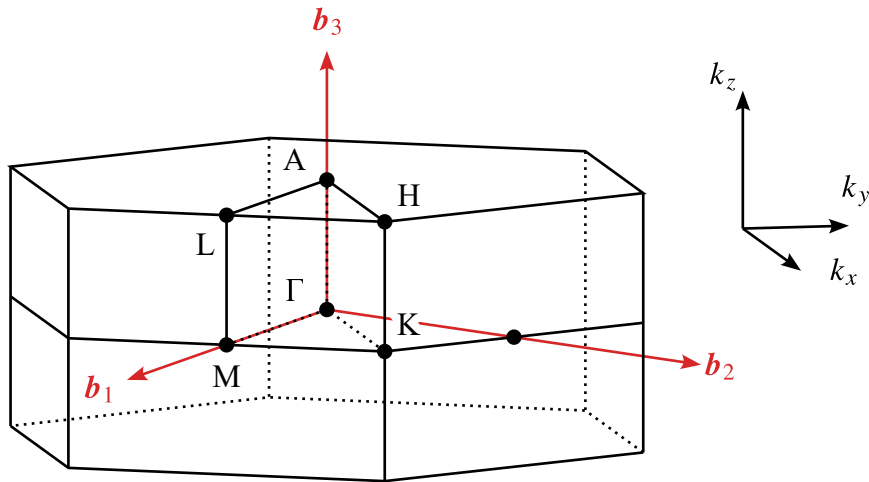


図 2.6: 4H-SiC のブリルアンゾーン. 黒丸は代表的な高対称点を示し, 赤矢印は逆格子空間の基本並進ベクトルを表す.

れぞれの高対称点の波数ベクトルを以下に示す.

$$\mathbf{k}_\Gamma = 0\mathbf{b}_1 + 0\mathbf{b}_2 + 0\mathbf{b}_3 = 0\hat{x} + 0\hat{y} + 0\hat{z} \quad (2.12)$$

$$\mathbf{k}_M = \frac{1}{2}\mathbf{b}_1 + 0\mathbf{b}_2 + 0\mathbf{b}_3 = \frac{\pi}{a}\hat{x} - \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{\pi}{a}\hat{y} + 0\hat{z} \quad (2.13)$$

$$\mathbf{k}_K = \frac{1}{3}\mathbf{b}_1 + \frac{1}{3}\mathbf{b}_2 + 0\mathbf{b}_3 = \frac{2}{3}\frac{2\pi}{a}\hat{x} + 0\hat{y} + 0\hat{z} \quad (2.14)$$

$$\mathbf{k}_A = 0\mathbf{b}_1 + 0\mathbf{b}_2 + \frac{1}{2}\mathbf{b}_3 = 0\hat{x} + 0\hat{y} + \frac{\pi}{c}\hat{z} \quad (2.15)$$

$$\mathbf{k}_L = \frac{1}{2}\mathbf{b}_1 + 0\mathbf{b}_2 + \frac{1}{2}\mathbf{b}_3 = \frac{\pi}{a}\hat{x} - \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{\pi}{a}\hat{y} + \frac{\pi}{c}\hat{z} \quad (2.16)$$

$$\mathbf{k}_H = \frac{1}{3}\mathbf{b}_1 + \frac{1}{3}\mathbf{b}_2 + \frac{1}{2}\mathbf{b}_3 = \frac{2}{3}\frac{2\pi}{a}\hat{x} + 0\hat{y} + \frac{\pi}{c}\hat{z} \quad (2.17)$$

2.3 4H-SiC の電子構造

2.3.1 伝導帯のバンド構造

バルク 4H-SiC は 2 種類の伝導帯谷 [4, 5] を持つことが知られている. 図 2.7 に示すバルク 4H-SiC の伝導帯のバンド構造からわかるように, M 点にエネルギーの異なる伝導帯谷が 2 つ存在し, そのエネルギー差は $\Delta E_{1-2} = 0.14 \text{ eV}$ [6] と小さい. 本研究では, エネ

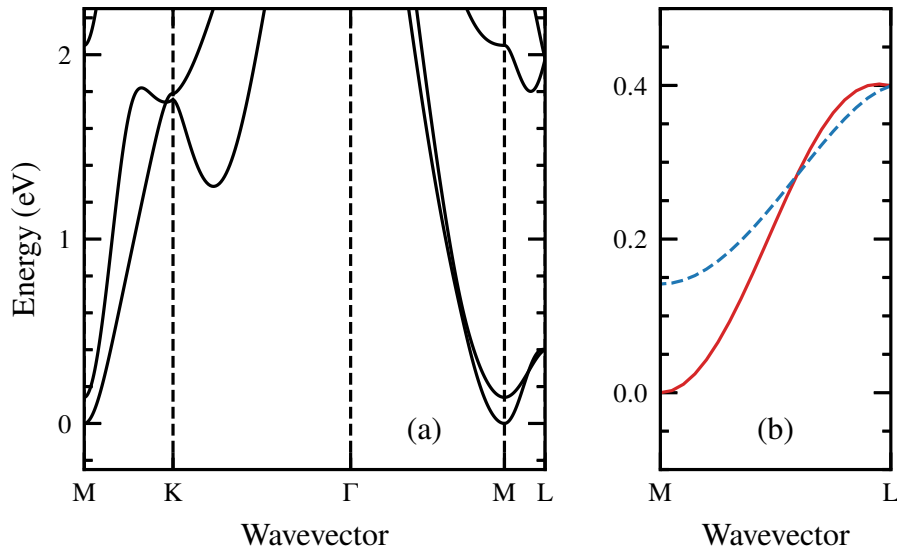


図 2.7: バルク 4H-SiC の伝導帯のバンド構造. (a) は第一ブリルアンゾーン内の主要な高対称点間のバンド構造. (b) は M-L 間のバンド構造の拡大図. 赤実線は下側伝導帯, 青破線は上側伝導帯を表す.

ルギーの小さい谷が属する伝導帯 [図 2.7(b) の赤実線] を下側伝導帯, もう一方の伝導帯 (同図の青破線) を上側伝導帯と呼ぶ. また, 図 2.7(b) に示すように, M-L 間にミニバンド様のバンド構造 [7] が現れることも 4H-SiC の特徴のひとつである.

2.3.2 浮遊電子状態

SiC の価電子帯頂上の電子状態は各原子を中心とする s 軌道と p 軌道の混成軌道 で記述できる. その一方で, SiC を含むいくつかの共有結合半導体においては, 伝導帯底の電子状態に s 軌道と p 軌道の線形結合では記述できない成分が多分に含まれることが近年の第一原理計算を用いた研究 [8, 9] で明らかにされた. この電子状態の波動関数は結晶中の原子近傍に局在せず, 原子から離れた位置に浮遊するような空間分布を示す. SiC の伝導帯底に見られるこの特徴的な電子状態を浮遊電子状態 (floating state[8]) と呼び, この性質を浮遊性 (floating nature[8]) と呼ぶ. この浮遊性の起源は C 原子と Si 原子の電気陰性度の差にあると考えられている [8, 9]. C 原子が Si 原子より大きな電気陰性度を持つことから, 価電子帯の電子の空間分布が C 原子側に偏ることで, 伝導帯の電子は C 原子から離れ, Si 原子に囲まれた空間により大きな存在確率を示す. ここでは, 浮遊電子状態の波動関数が大きな振幅を示す, 結晶中の原子から離れた空間を内部チャンネルと呼ぶ. 図 2.8 に代表的な SiC 結晶多形の内部チャンネルを灰色の楕円 (3C-SiC では灰色の帯) で

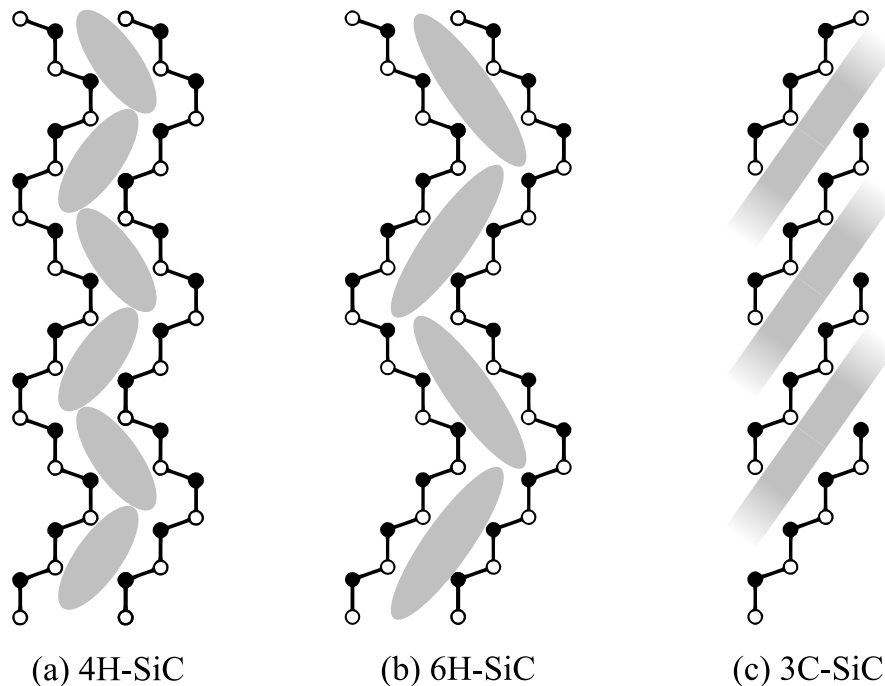


図 2.8: (a) 4H-SiC, (b) 6H-SiC, (c) 3C-SiC の結晶構造と内部チャンネル. 浮遊電子状態が分布する内部チャンネルを灰色の楕円または帯で示す.

示す。SiC は結晶多形ごとにバンドギャップ幅が大きく異なるが、この内部チャンネルの大きさに着目したモデルで結晶多形間のバンドギャップ幅の違いをよく説明できることが明らかになっている [9, 10]。図 2.8 の灰色領域の長手方向の長さを内部チャンネルの長さと考え、3C-SiC では内部チャンネルが $\langle 110 \rangle$ 方向に直線的に伸びその長さが無限であるのに対して、4H-SiC や 6H-SiC では内部チャンネルの形状がジグザグ状になっており、4H-SiC や 6H-SiC の内部チャンネル長は 3C-SiC より小さい。この小さい内部チャンネル長に浮遊電子状態が閉じ込められることで生じる量子閉じ込め効果によって伝導帯底のエネルギーが変化する。その一方で、SiC の価電子帯の電子状態はいずれの結晶多形でも最近接原子間の s 軌道や p 軌道の相互作用で記述でき、かつ局所的な構造は結晶多形に依存しないため、価電子帯頂上のエネルギーは結晶多形にほとんど依存しない。その結果、結晶多形が異なるのみであるにもかかわらず、量子閉じ込め効果の小さい 3C-SiC では、伝導帯底のエネルギーが小さくなるためバンドギャップが小さく (~ 2.23 eV [11]) なり、図 2.8 に示す結晶多形の中で最も内部チャンネル長が小さく量子閉じ込め効果の大きい 4H-SiC は大きなバンドギャップ (~ 3.26 eV [11]) を示し、6H-SiC は 4H-SiC より小さいバンドギャップ (~ 3.02 eV [11]) を示す。また、結晶多形に応じた原子配列の違いが浮遊電子状態に大きな影響を与えるのと同様に、酸化膜/4H-SiC 界面近傍での SiC の原子配置や、 SiO_2 の構造や、欠陥といった界面近傍の原子配置によって界面近傍における伝導帯底の電子状態が敏感に変化することが、第一原理計算によって示されている [12–14]。これらの背景から、SiC MOS 反転層の電子状態および電子輸送特性の解析にあたっては、原子配置と併せてこの電子状態の浮遊性を考慮する必要がある。

2.4 計算手法

表 2.1 に主要な電子状態解析手法の特徴をまとめる。第一原理計算では 4H-SiC の原子配置と浮遊電子状態、そして M–L 間のミニバンド様構造を含むフルバンド構造を考慮できるが、大きな計算資源を要求するため本研究における反転層電子状態の計算には利

表 2.1: 主要な電子状態計算手法。各計算手法における、計算負荷の大小と 4H-SiC の各種特徴の記述可能性。

	計算負荷	原子配置	浮遊電子状態	フルバンド
第一原理計算	大	記述可	記述可	記述可
経験的擬ポテンシャル法	中	記述可	記述可	記述可
経験的強結合近似法	小	記述可	記述困難	記述困難
有効質量近似法	極小	記述不可	記述不可	記述不可

用しない．本研究ではバルク 4H-SiC の電子状態を第一原理計算ソフト Vienna Ab initio Simulation Package (VASP)[15–18] を用いて計算し，以降に示す経験的手法の参考とするに留める．対して経験的擬ポテンシャル法 [1] は，原子配置，浮遊電子状態，フルバンド構造を考慮できる（2.4.1 節を参照）だけでなく，計算負荷が比較的小さい．この点から本研究における反転層の電子状態計算の基盤として経験的擬ポテンシャル法を採用する．計算負荷の観点では，経験的強結合近似法 [19] が経験的擬ポテンシャル法よりさらに有利である．しかし，基底関数に各原子位置を中心とする原子軌道関数を用いることから，2.3 節で説明した浮遊電子状態を記述することが困難である．原子軌道の線形結合による浮遊電子状態の再現を試みた研究 [20] では，浮遊性のない電子状態と比べて，浮遊電子状態の記述には高エネルギーの原子軌道を多数必要とすることが明らかにされている．有効質量近似法は，第 1 章で述べたように極めて小さい計算負荷が特徴であるが，原子配置，浮遊電子状態，フルバンド構造を記述できないことから本研究の目的には不適である．本節では，経験的擬ポテンシャル法に基づき記述される 4H-SiC MOS 反転層のモデルを説明する．なお，第 6 章で提案する低計算コストな原子論モデルは，経験的強結合近似法を土台とする手法であるが，浮遊電子状態の記述に有利な仮想的な原子軌道を基底関数に導入する点で新規性のある手法である．

2.4.1 経験的擬ポテンシャル法

経験的擬ポテンシャル法では，擬ポテンシャル $V_{\text{ps}}(\mathbf{r})$ を用いてバルク 4H-SiC を以下の 1 電子のシュレディンガー方程式で記述する．

$$H_{\text{B}}\phi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{n,\mathbf{k}}\phi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.18)$$

$$H_{\text{B}} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + V_{\text{ps}}(\mathbf{r}) \quad (2.19)$$

ここで， $\hbar$ はディラック定数， m_0 は真空中の電子の質量， $\mathbf{r}$ は実空間中の位置ベクトルである． $E_{n,\mathbf{k}}$ と $\phi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ はバンド番号 n ，波数 $\mathbf{k}$ の電子状態に対応する固有エネルギーと波動関数である．式 (2.18) を解いて得られる電子構造がバルク 4H-SiC の特性を示す様に， $V_{\text{ps}}(\mathbf{r})$ を経験的に決定する．以下では， $V_{\text{ps}}(\mathbf{r})$ の内部構造およびモデルを説明する．

$V_{\text{ps}}(\mathbf{r})$ の平面波展開は，展開係数を $V_{\mathbf{G}}$ として，次式で表される．

$$V_{\text{ps}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} V_{\mathbf{G}} \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}) \quad (2.20)$$

$$V_{\mathbf{G}} = \sum_{\alpha=\text{Si,C}} \sum_{j=1}^4 V_{\alpha,\mathbf{G}} \exp(-i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r}_{\alpha,j}) \quad (2.21)$$

$V_{\alpha,\mathbf{G}}$ は原子 α ($\in \text{Si, C}$) に対応する成分であり， $V_{\text{ps}}(\mathbf{r})$ は式 (2.21) を介して 4H-SiC の原

表 2.2: 4H-SiC のバンド構造が示す特徴的な物理量. その目標値と, 本研究で経験的に決定した擬ポテンシャル $V_{\text{ps}}(\mathbf{r})$ を用いて計算されるバンド構造から得られた値.

Physical quantities		Reference	This work
Lower CBM	$m_{\text{ML}}^{\text{L}}(m_0)$	0.33 [23]	0.333
	$m_{\text{MF}}^{\text{L}}(m_0)$	0.58 [23]	0.636
	$m_{\text{MK}}^{\text{L}}(m_0)$	0.31 [23]	0.312
Upper CBM	$m_{\text{ML}}^{\text{U}}(m_0)$	0.75 [4]	0.744
	$m_{\text{MF}}^{\text{U}}(m_0)$	0.80 [4]	0.788
	$m_{\text{MK}}^{\text{U}}(m_0)$	0.18 [4]	0.163
ΔE_{1-2} (eV)		0.14 [6]	0.141

子配置 $\mathbf{r}_{\alpha,j}$ を考慮している. $V_{\alpha,G}$ は以下のモデル関数 $V_{\alpha}^{\text{model}}(q)$ で記述される [21, 22].

$$V_{\alpha}^{\text{model}}(q) = \frac{a_{1,\alpha}[(a_{\text{B}}q)^2 - a_{2,\alpha}]}{\exp\{a_{3,\alpha}[(a_{\text{B}}q)^2 - a_{4,\alpha}]\} + 1} \Theta(q_{\text{max},\alpha} - q) \quad (2.22)$$

$$V_{\alpha,G} = V_{\alpha}^{\text{model}}(|\mathbf{G}|) \quad (2.23)$$

ここで a_{B} はボーア半径, $\Theta(q)$ は単位ステップ関数, $q_{\text{max},\alpha}$ はカットオフ波数, $a_{i,\alpha}$ [$i \in (1, 2, 3, 4)$] はモデルパラメータである. 本研究では原子種 α に依らず $q_{\text{max},\alpha} = \sqrt{11}(2\pi/a)$ としたうえで, $a_{i,\alpha}$ を α ごとに決定することでバルク 4H-SiC のバンド構造を記述する $V_{\text{ps}}(\mathbf{r})$ を得る.

4H-SiC のバンド構造にみられる特徴的な物理量に注目してフィッティングを行うことで $a_{i,\alpha}$ を決定する. 表 2.2 に, フィッティングに用いる 7 つの物理量について, その目標値およびフィッティングの結果得られた値を示す. フィッティングに用いるのは, 2 つの伝導帯底のエネルギー差 ΔE_{1-2} , 下側伝導帯底の有効質量 $m_{\text{ML}}^{\text{L}}, m_{\text{MF}}^{\text{L}}, m_{\text{MK}}^{\text{L}}$, そして上側伝導帯底の有効質量 $m_{\text{ML}}^{\text{U}}, m_{\text{MF}}^{\text{U}}, m_{\text{MK}}^{\text{U}}$ である. 上付き文字の L と U は下側伝導帯と上側伝導帯をそれぞれ表す. これら 7 つの物理量の目標値を X_i^{ref} , [$i = (1, \dots, 7)$, $X_i^{\text{ref}} = (\Delta E_{1-2}, m_{\text{ML}}^{\text{L}}, m_{\text{MF}}^{\text{L}}, m_{\text{MK}}^{\text{L}}, m_{\text{ML}}^{\text{U}}, m_{\text{MF}}^{\text{U}}, m_{\text{MK}}^{\text{U}})$] とおき, それぞれの i に対応する, 経験的擬ポテンシャル法による計算で得られる値を X_i [$i = (1, \dots, 7)$] とする. 次の評価関数 d_{eval} が最小となるように $a_{i,\alpha}$ を決定する.

$$d_{\text{eval}} = \left[\sum_{i=1}^7 \left(\frac{X_i - X_i^{\text{ref}}}{X_i^{\text{ref}}} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (2.24)$$

なお, 最小化には Nelder-Mead 法 [24] を用いる.

表 2.3: バルク 4H-SiC の伝導帯を再現する経験的擬ポテンシャルのモデルパラメータ $a_{i,\alpha}$. 単位は $a_{1,\alpha}$ のみ電子ボルトで, 他のパラメータは無次元である.

α	Si	C
$a_{1,\alpha}$ (eV)	0.83493×10^1	0.54133×10^0
$a_{2,\alpha}$	0.22818×10^1	0.99315×10^{-4}
$a_{3,\alpha}$	0.75563×10^0	0.13815×10^0
$a_{4,\alpha}$	0.98155×10^{-1}	0.55147×10^1

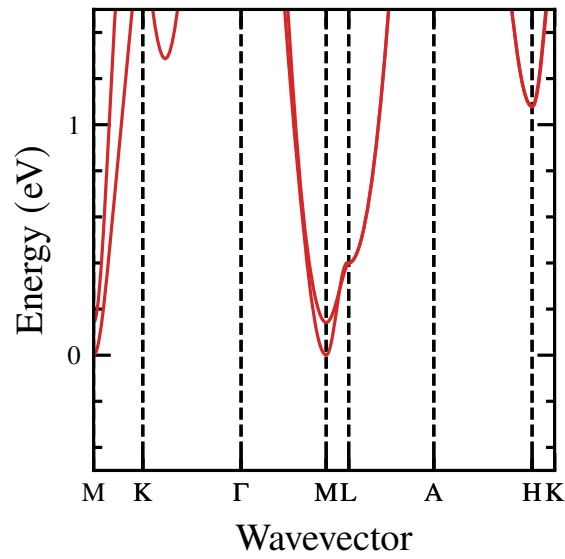


図 2.9: 経験的擬ポテンシャル法で計算されたバルク 4H-SiC の伝導帯のバンド構造.

フィッティングの結果得られた $a_{i,\alpha}$ の値を表 2.3 に示す. 表 2.3 のパラメータを用いて $V_{ps}(\mathbf{r})$ を構築し, 式 (2.18) を解いて得られるバンド構造を図 2.9 に示す. フィッティングに用いた 7 つの物理量に加えて, M-L 間のミニバンド様の構造を再現する $V_{ps}(\mathbf{r})$ を得ることができた. 下側伝導帯底の電子状態の波動関数を図 2.10 に示す. 図 2.10(a) は式 (2.18) の解, 図 2.10(b) は第一原理計算ソフト VASP [15–18] で計算した波動関数である. どちらの図も 4H-SiC の (11 $\bar{2}$ 0) 面上の波動関数を示す. ここで, 白丸と黒丸はそれぞれ (11 $\bar{2}$ 0) 面上に存在する Si 原子と C 原子の位置を示す. 第一原理計算で得られる下側伝導帯底の波動関数におおむね一致する波動関数が経験的擬ポテンシャル法に基づく計算によって得られた.

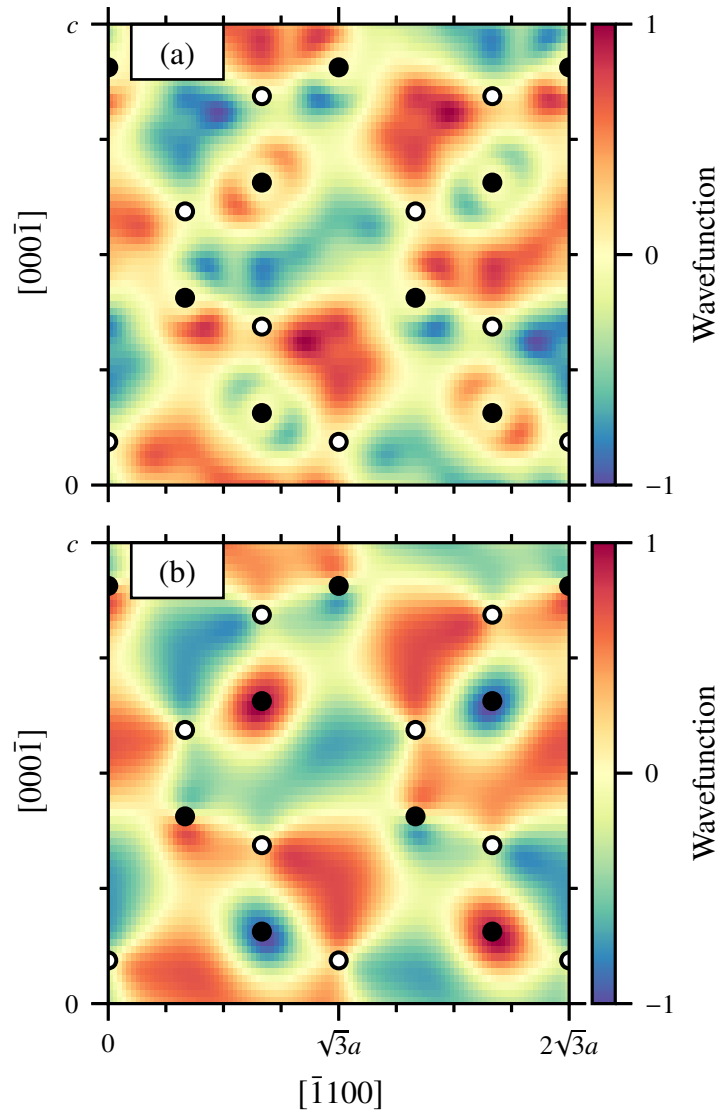


図 2.10: (a) 経験的擬ポテンシャル法と (b) 第一原理計算で得られたバルク 4H-SiC の下側伝導帯底における電子状態. 図は $(11\bar{2}0)$ 面上の波動関数を示す. 白丸と黒丸は $(11\bar{2}0)$ 面上の Si 原子と C 原子の位置を示す. 経験的擬ポテンシャル法に基づく計算で第一原理計算の結果におおむね一致する伝導帯底電子状態が得られた.

2.4.2 酸化膜/4H-SiC(0001) 界面の記述

本研究の計算では, 4H-SiC が (0001) 面 (Si 面) で酸化膜と界面を成す場合を考える. バルク 4H-SiC を記述するモデル [式 (2.18)] に対して (0001) 面と平行な面に境界条件を課すことで, 酸化膜/4H-SiC(0001) 界面を記述する. 以下に, 酸化膜/4H-SiC(0001) 界面近傍を記述するシュレディンガー方程式と境界条件を示す.

$$H_B \Psi_{n,k_\perp}(\mathbf{r}) = E_{n,k_\perp} \Psi_{n,k_\perp}(\mathbf{r}) \quad (2.25)$$

$$\Psi_{n,k_\perp}(z=0) = 0 \quad \Psi_{n,k_\perp}(z=L) = 0 \quad (2.26)$$

$E_{n,k_\perp}$ と $\Psi_{n,k_\perp}(\mathbf{r})$ はサブバンド番号 n , 波数 $k_\perp$ の電子状態に対応する固有エネルギーと波動関数である. 図 2.11 に式 (2.25) と式 (2.26) で記述する酸化物/4H-SiC(0001) 界面近傍の 4H-SiC 領域の模式図を示す. $z=0$ に適用する境界条件は酸化物/4H-SiC(0001) 界面を表す. z 方向の計算領域幅を有限値 L に制限するために, 裏面 ($z=L$) にもう一方の境界条件を課す. 4H-SiC 領域はバルク 4H-SiC を記述する擬ポテンシャル $V_{ps}(\mathbf{r})$ で記述する. なお, $V_{ps}(\mathbf{r})$ が記述する 4H-SiC は [0001] 方向が図 2.11 の z 軸負方向を向いており, この [0001] 方向と z 軸方向との関係は 2.2.2 節におけるそれとは逆になる.

4H-SiC 内の Si 原子位置は, 4H-SiC の対称性に着目して等価でない 2 種類の原子位置 (h-site, k-site と呼称) に分類できる. 図 2.12 に (11 $\bar{2}$ 0) 面上の原子配置を示し, h-site と k-site の例を示す. h-site の Si 原子層が酸化膜と界面を成す場合と k-site の Si 原子層が酸化膜と界面を成す場合では, 図 2.13 に示すように界面近傍の原子配置が異なる. 図 2.13 の白丸と黒丸は $V_{ps}(\mathbf{r})$ で記述される原子位置を表す. $z=0$ に最も近い Si 原子層の z 座

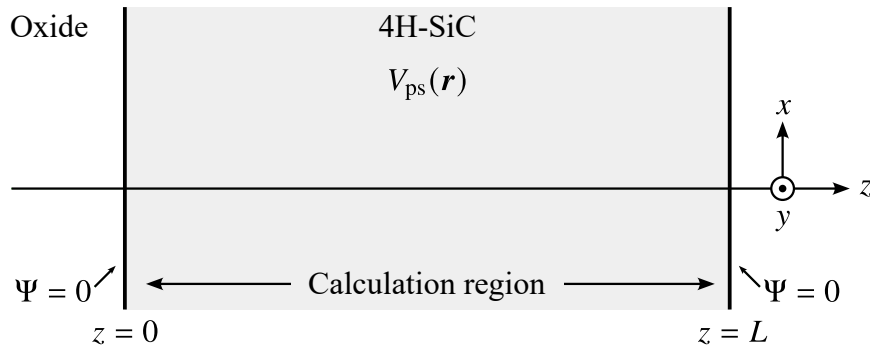


図 2.11: 酸化物/4H-SiC(0001) 界面近傍を記述するモデルの模式図. 擬ポテンシャル $V_{ps}(\mathbf{r})$ によって 4H-SiC 領域を記述する. 酸化膜/4H-SiC(0001) 界面は $z=0$ の平面に適用される境界条件で記述する. $z=L$ にも境界条件を設けることで, 計算領域幅 L を有限とする.

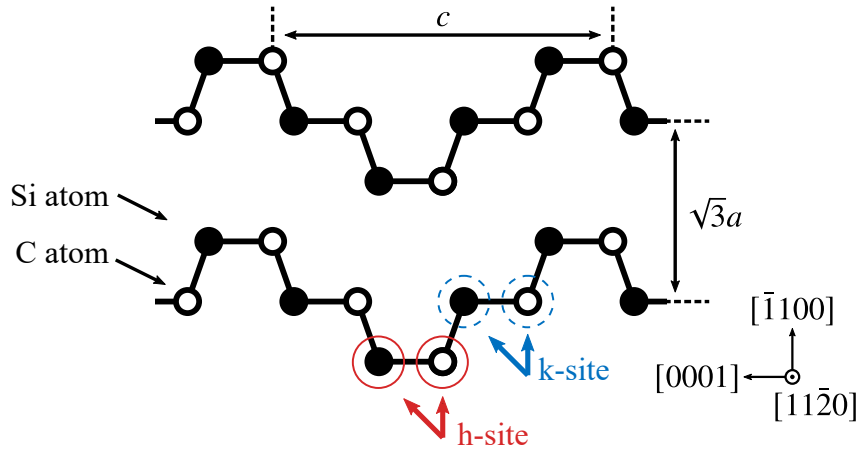


図 2.12: $(11\bar{2}0)$ 面上の原子位置. 白丸と黒丸はそれぞれ Si 原子と C 原子の位置を示す. h-site, k-site の一例をそれぞれ赤丸と青丸で示す.

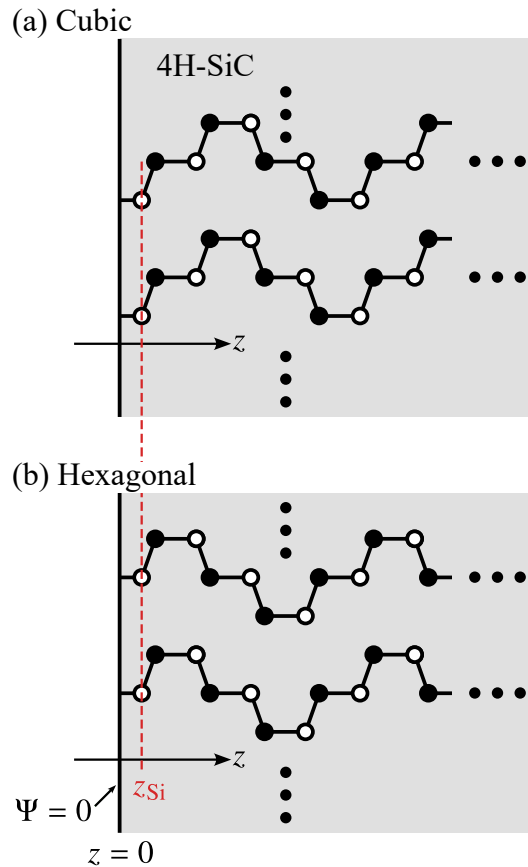


図 2.13: (a) Cubic 界面構造と (b) Hexagonal 界面構造の模式図. $z = 0$ は酸化膜/4H-SiC(0001) 界面を記述する境界条件が課される面である. $V_{ps}(\mathbf{r})$ で記述される原子位置を白丸と黒丸で表す. $z = 0$ に最も近い Si 原子層の位置を z_{Si} とする. Cubic (Hexagonal) 界面構造では, h-site (k-site) の Si 原子層が $z = 0$ に最も近い原子層となる.

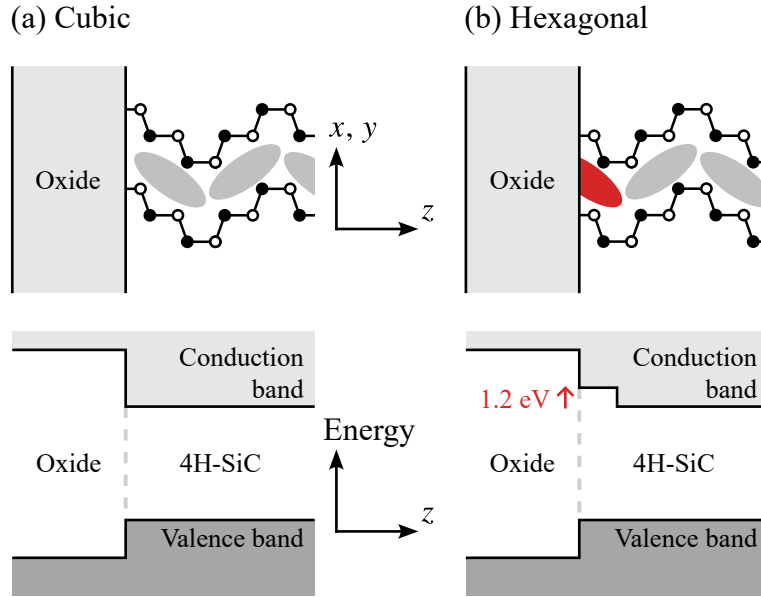


図 2.14: 各界面構造における内部チャネルの配置と局所状態密度の模式図。(a) は Cubic 界面構造, (b) は Hexagonal 界面構造を示す。各図上部では白丸で Si 原子を, 黒丸で C 原子を, 灰色の楕円で内部チャネルを表す。図下部では局所状態密度の模式図を示す。灰色の領域は局所状態密度が大きな値を示す伝導帯もしくは価電子帯の領域を表す。(b) でのみ, 赤色の楕円で示す界面近傍の内部チャネルが短くなり量子閉じ込め効果が大きくなることで, 局所状態密度の模式図が示すように界面近傍の伝導帯底のエネルギーが約 1.2 eV 大きくなる。

標を z_{Si} とする。図 2.13(a) では h-site の Si 原子層が $z = 0$ に最も近く, 図 2.13(b) では k-site の Si 原子層が $z = 0$ に最も近い。本研究では, 図 2.13(a) の構造を Cubic 界面構造, 図 2.13(b) の構造を Hexagonal 界面構造と呼ぶ。これらの界面構造が界面近傍の電子状態に与える影響は, 界面垂直方向に分布する局所状態密度 (2.4.3 節参照) に現れることが第一原理計算 [12–14] で報告されている。松下ら [12] の報告では, Cubic 界面構造の場合は界面近傍と界面から離れた領域で伝導帯底のエネルギーに大きな差がないのに対して, Hexagonal 界面構造の場合は界面近傍でのみ伝導帯底のエネルギーが 1.2 eV 程度増加した局所状態密度が観察される。各界面構造での局所状態密度分布の模式図を図 2.14 に示す。図 2.14 の上部に, 界面近傍の原子配置とともに内部チャネルを示す。図 2.14(b) に赤色の楕円で示すように, Hexagonal 界面構造の場合にのみ界面近傍の内部チャネルが短くなり, 局所的に内部チャネル内の電子状態の量子閉じ込め効果が大きくなることにより, 界面近傍で伝導帯底のエネルギーが増加する。本研究では, この局所状態密度の界面依存性を再現するために, $V_{\text{ps}}(\mathbf{r})$ を z 軸方向に並行移動させることで z_{Si} の値を調整した。その結果, $z_{\text{Si}} = (23/128)c$ の場合に局所状態密度の界面依存性が再現された。図 2.15 に,

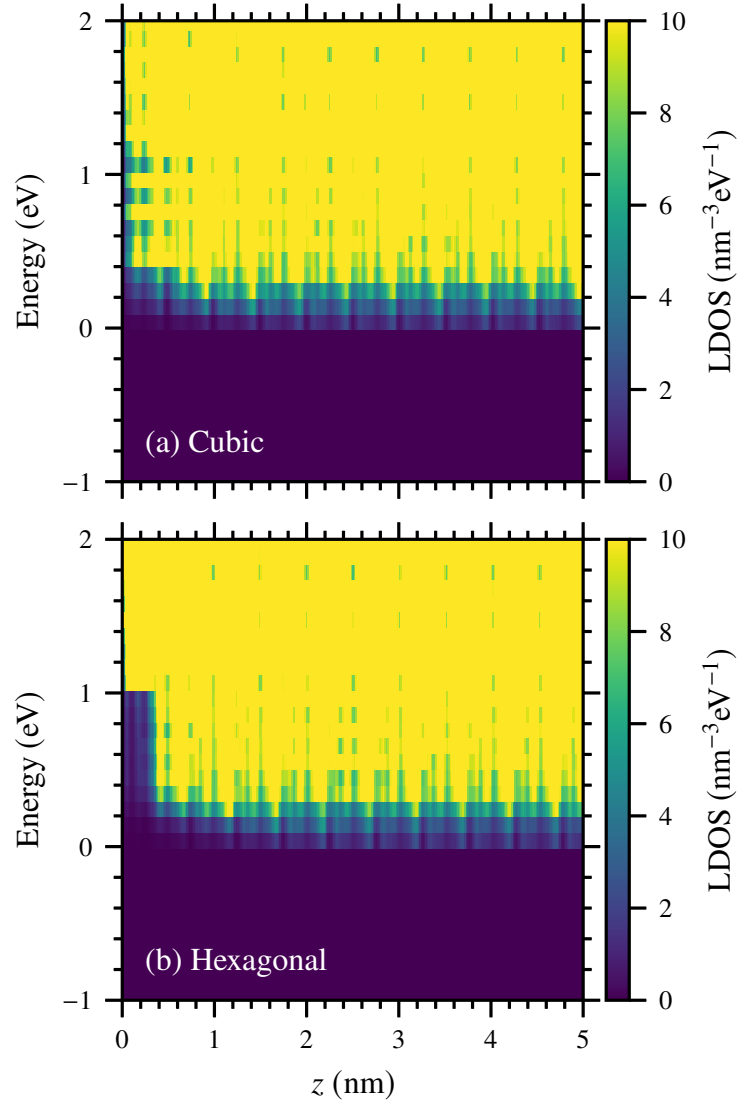


図 2.15: (a) Cubic 界面構造と (b) Hexagonal 界面構造における，酸化膜/4H-SiC(0001) 界面近傍の局所状態密度 (LDOS)．エネルギーはバルク 4H-SiC の伝導帯底のエネルギーを基準にとる． z 方向には $(1/64)c$ 間隔，エネルギー方向には 0.1 eV 間隔でメッシュを切って表示している． $z_{\text{Si}} = (23/128)c$ とした場合に，Hexagonal 界面構造における界面近傍での伝導帯底のエネルギーの増加 [12] が再現されている．

$z_{\text{Si}} = (23/128)c$ として経験的擬ポテンシャル法に基づく電子状態計算によって得られた局所状態密度を示す．図 2.15(a) は Cubic 界面構造の場合，図 2.15(b) は Hexagonal 界面構造の場合である．どちらの図も z 方向には $(1/64)c$ 間隔，エネルギー方向には 0.1 eV 間隔でメッシュを切って表示している．図 2.15 では，Hexagonal 界面構造の場合にのみ界面近傍で伝導帯底のエネルギーが約 1 eV 増加している．

上述した酸化膜/4H-SiC(0001) 界面の SiC 側の原子配置の他にも、酸化膜側の原子配置によっても界面近傍の局所状態密度が変化することが第一原理計算による研究で報告されている [13, 14]. 酸化膜側の酸素原子が界面に近い位置に配置される構造の中では、酸素原子の大きな電気陰性度に起因して、浮遊電子状態が界面近傍に波動関数の大きな振幅を持つことができなくなると考えられている. また、酸窒化された 4H-SiC(0001) の最表面には、表面再構成により $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30 \text{ deg}$ の構造が現れることが報告 [25] されているほか、酸化膜/4H-SiC 界面に導入された窒素原子によっても界面近傍の伝導帯底の電子状態が敏感に変化することが報告 [26] されている. ただし、本研究では酸化膜/4H-SiC(0001) 界面を記述するモデルを簡単化するために、界面の SiC 側の原子配置のみに注目する.

2.4.3 局所状態密度の計算

本研究では、界面垂直方向 (z 軸方向) に分布する局所状態密度 (局所状態密度) を $g(E, z)$ として以下で定義する.

$$g(E, z) = g_s \sum_n \frac{1}{4\pi^2} \int d\mathbf{k}_\perp \left[\delta(E - E_{n, \mathbf{k}_\perp}) \frac{1}{\Omega_S} \int_{\Omega_S} dx dy |\Psi_{n, \mathbf{k}_\perp}(\mathbf{r})|^2 \right] \quad (2.27)$$

ここで、 g_s はスピン縮退度 ($g_s = 2$) である. x - y 面内の積分領域 Ω_S は (0001) 面内の 2 次元の単位胞とし、同時に Ω_S はその面積を表す. 波動関数 $\Psi_{n, \mathbf{k}_\perp}(\mathbf{r})$ は

$$\frac{1}{\Omega_S} \int_{\Omega_S} dx dy \int dz |\Psi_{n, \mathbf{k}_\perp}(\mathbf{r})|^2 = 1 \quad (2.28)$$

で規格化されているものとする. $\mathbf{k}_\perp$ に関する積分は図 2.16 に示す 2 次元六方格子の第一ブリルアンゾーン全体を積分領域とする. ただし、4H-SiC の対称性から、 $\mathbf{k}_\perp$ に関する積分は図 2.16 に示す灰色の領域のみで行い、積分値に第一ブリルアンゾーン全体と灰色の領域の面積比である 12 をかけることで、第一ブリルアンゾーン全体での積分を代替する.

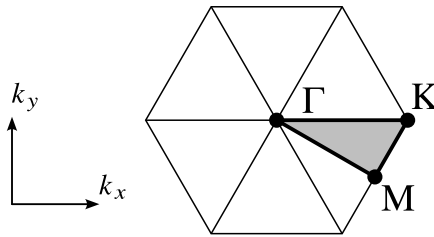


図 2.16: 2 次元六方格子の第一ブリルアンゾーン. 灰色の領域は局所状態密度の計算に用いられる積分領域を表す.

2.4.4 反転層の記述

前節までに酸化膜/4H-SiC(0001) 界面を記述するモデルを構築した．このモデルにさらに閉じ込めポテンシャル $V_{\text{conf}}(z)$ を印加した以下のシュレディンガー方程式を考える．

$$[H_B + V_{\text{conf}}(z)] \Psi_{n,k_\perp}(\mathbf{r}) = E_{n,k_\perp} \Psi_{n,k_\perp}(\mathbf{r}) \quad (2.29)$$

式 (2.29) と式 (2.26) で反転層を記述する． $V_{\text{conf}}(z)$ として，以下の，界面垂直方向に大きさ F の一様電界からなる三角ポテンシャルを用いる．

$$V_{\text{conf}}(z) = eFz \quad (2.30)$$

ただし，第5章の計算では，式 (2.29) のシュレディンガー方程式とポアソン方程式を連立したシュレディンガー・ポアソン方程式の解を $V_{\text{conf}}(z)$ として用いる．シュレディンガー・ポアソン方程式の詳細は第5章で述べる．

2.4.5 有効質量近似法

本研究では，経験的擬ポテンシャル法に基づき計算された反転層電子状態と比較するために，有効質量近似法に基づく反転層電子状態の計算も行う．有効質量近似法による4H-SiCの電子状態計算では，多くの場合4H-SiCの下側伝導帯底と上側伝導帯底をそれぞれ別の有効質量方程式で記述する．本研究では，酸化膜/4H-SiC(0001) 界面を次に示す2つの有効質量方程式と境界条件で記述する．

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_{\text{ML}}^L} \frac{d^2}{dz^2} + V_{\text{conf}}(z) \right] \xi_n^L(z) = \varepsilon_n^L \xi_n^L(z) \quad (2.31)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_{\text{ML}}^U} \frac{d^2}{dz^2} + V_{\text{conf}}(z) + \Delta E_{1-2} \right] \xi_n^U(z) = \varepsilon_n^U \xi_n^U(z) \quad (2.32)$$

$$\xi_n^L(z=0) = 0, \quad \xi_n^U(z=0) = 0 \quad (2.33)$$

式 (2.31) は下側伝導帯に由来するサブバンドを記述する有効質量方程式であり，他方，式 (2.32) は上側伝導帯に対応する有効質量方程式である．式 (2.31) の解 ε_n^L, ξ_n^L は式 (2.31) から得られる第 n サブバンドの底の電子状態を表す．式 (2.32) の解 ε_n^U, ξ_n^U についても同様である．(0001) 面内方向のサブバンド構造は放物線で近似する．式 (2.31) から得られるサブバンドのサブバンド構造は，M-K 方向に m_{MK}^L ，M- Γ 方向に $m_{\text{M}\Gamma}^L$ の有効質量を示すものとする．式 (2.32) から得られるサブバンドのサブバンド構造は，M-K 方向に m_{MK}^U ，M- Γ 方向に $m_{\text{M}\Gamma}^U$ の有効質量を示すものとする．下側伝導帯と上側伝導帯がそれぞれの伝導帯底の有効質量とエネルギー差 ΔE_{1-2} で記述される．

式 (2.31) や式 (2.32) の有効質量方程式において, $V_{\text{conf}}(z)$ が式 (2.30) の三角ポテンシャルである場合, その固有エネルギー及び波動関数は解析的に求めることができる. 波動関数は Airy 関数 [27] となる. また, 式 (2.33) の境界条件から, $z = 0$ で波動関数がゼロとなることを利用して, 固有エネルギーは Airy 関数のゼロ点の値 s_n [28] から次式で求めることができる.

$$\varepsilon_n^{\text{L}} = \left(\frac{\hbar^2 F^2}{2m_{\text{ML}}^{\text{L}}} \right)^{1/3} s_n, \quad (2.34)$$

$$\varepsilon_n^{\text{U}} = \left(\frac{\hbar^2 F^2}{2m_{\text{ML}}^{\text{U}}} \right)^{1/3} s_n + \Delta E_{1-2}, \quad (2.35)$$

2.5 まとめ

本章では, SiC の特性と本研究で用いる電子状態計算手法について概説した. まず, SiC の結晶構造について述べ, 続いて SiC の伝導帯のバンド構造および電子状態の特性を説明した. そして, 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するとともに, 比較対象となる有効質量近似法に基づく反転層のモデルについて説明した.

参考文献

- [1] M. L. Cohen and J. R. Chelikowsky, *Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors*, Springer (1988).
- [2] L. S. Ramsdell, “Studies on silicon carbide,” *Am. Mineral.*, **32**, 64 (1947).
- [3] A. Bauer, J. Kräußlich, L. Dressler, P. Kuschnerus, J. Wolf, K. Goetz, P. Käckell, J. Furthmüller, and F. Bechstedt, “High-precision determination of atomic positions in crystals: The case of 6H- and 4H-SiC,” *Phys. Rev. B*, **57**, 2647 (1998).
- [4] C. Persson and U. Lindefelt, “Relativistic band structure calculation of cubic and hexagonal SiC polytypes,” *J. Appl. Phys.*, **82**, 5496 (1997).
- [5] H.-E. Nilsson, U. Sannemo, and C. S. Petersson, “Monte Carlo simulation of electron transport in 4H-SiC using a two-band model with multiple minima,” *J. Appl. Phys.*, **80**, 3365 (1996).
- [6] B. Kaczer, H.-J. Im, J. P. Pelz, J. Chen, and W. J. Choyke, “Direct observation of conduction-band structure of 4H- and 6H-SiC using ballistic electron emission microscopy,” *Phys. Rev. B*, **57**, 4027 (1998).
- [7] S.-i. Nakamura, H. Kumagai, T. Kimoto, and H. Matsunami, “Anisotropy in breakdown field of 4H-SiC,” *Appl. Phys. Lett.*, **80**, 3355 (2002).

- [8] Y.-I. Matsushita, S. Furuya, and A. Oshiyama, “Floating electron states in covalent semiconductors,” *Phys. Rev. Lett.*, **108**, 246404 (2012).
- [9] Y.-I. Matsushita and A. Oshiyama, “Comprehensive study on band-gap variations in sp^3 -bonded semiconductors: Roles of electronic states floating in internal space,” *J. Phys. Soc. Jpn.*, **86**, 054702 (2017).
- [10] Y.-I. Matsushita and A. Oshiyama, “Interstitial channels that control band gaps and effective masses in tetrahedrally bonded semiconductors,” *Phys. Rev. Lett.*, **112**, 136403 (2014).
- [11] 松波 弘之, 大谷 昇, 木本 恒暢, 中村 孝, 半導体 SiC 技術と応用, 日刊工業新聞社 (2011).
- [12] Y.-I. Matsushita and A. Oshiyama, “A novel intrinsic interface state controlled by atomic stacking sequence at interfaces of SiC/SiO₂,” *Nano Lett.*, **17**, 6458 (2017).
- [13] T. Ono, C. J. Kirkham, S. Saito, and Y. Oshima, “Theoretical and experimental investigation of the atomic and electronic structures at the 4H-SiC(0001)/SiO₂ interface,” *Phys. Rev. B*, **96**, 115311 (2017).
- [14] C. J. Kirkham and T. Ono, “First-principles study on interlayer states at the 4H-SiC/SiO₂ interface and the effect of oxygen-related defects,” *J. Phys. Soc. Jpn.*, **85**, 024701 (2016).
- [15] G. Kresse and J. Hafner, “Ab initio molecular dynamics for liquid metals,” *Phys. Rev. B*, **47**, 558 (1993).
- [16] G. Kresse and J. Hafner, “Ab initio molecular-dynamics simulation of the liquid-metal–amorphous-semiconductor transition in germanium,” *Phys. Rev. B*, **49**, 14251 (1994).
- [17] G. Kresse and J. Furthmüller, “Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set,” *Comput. Mater. Sci.*, **6**, 15 (1996).
- [18] G. Kresse and J. Furthmüller, “Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set,” *Phys. Rev. B*, **54**, 11169 (1996).
- [19] J. C. Slater and G. F. Koster, “Simplified LCAO method for the periodic potential problem,” *Phys. Rev.*, **94**, 1498 (1954).
- [20] 松下 雄一郎, “Theoretical study on electron states floating in internal space of condensed matter based on first-principle calculations,” 博士論文, 東京大学 (2013).
- [21] M. Schlüter, J. R. Chelikowsky, S. G. Louie, and M. L. Cohen, “Self-consistent pseudopotential calculations for Si (111) surfaces: Unreconstructed (1×1) and reconstructed (2×1) model structures,” *Phys. Rev. B*, **12**, 4200 (1975).
- [22] J. R. Chelikowsky and M. L. Cohen, “Self-consistent pseudopotential calculation for the relaxed (110) surface of GaAs,” *Phys. Rev. B*, **20**, 4150 (1979).
- [23] D. Volm, B. K. Meyer, D. M. Hofmann, W. M. Chen, N. T. Son, C. Persson, U. Lin-

- defelt, O. Kordina, E. Sörman, A. O. Konstantinov, B. Monemar, and E. Janzén, “Determination of the electron effective-mass tensor in 4H-SiC,” *Phys. Rev. B*, **53**, 15409 (1996).
- [24] J. A. Nelder and R. Mead, “A Simplex Method for Function Minimization,” *Comput. J.*, **7**, 308 (1965).
- [25] T. Shirasawa, K. Hayashi, S. Mizuno, S. Tanaka, K. Nakatsuji, F. Komori, and H. Tochi-hara, “Epitaxial silicon oxynitride layer on a 6H-SiC (0001) surface,” *Phys. Rev. Lett.*, **98**, 136105 (2007).
- [26] M. Uemoto, N. Funaki, K. Yokota, T. Hosoi, and T. Ono, “Density functional theory study on the effect of no annealing for sic (0001) surface with atomic-scale steps,” *Appl. Phys. Express*, **17**, 011009 (2024).
- [27] J. H. Davies, *The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction*, Cambridge University Press (1998).
- [28] F. W. J. Olver, A. B. Olde Daalhuis, D. W. Lozier, B. I. Schneider, R. F. Boisvert, C. W. Clark, B. R. Miller, B. V. Saunders, H. S. Cohl, and M. A. McClain, eds., “*NIST Digital Library of Mathematical Functions*,” <https://dlmf.nist.gov/>, Release 1.2.4 of 2025-03-15.

第 3 章

SiC MOS 反転層における電子状態 のワニエ・シュタルク局在

3.1 はじめに

4H-SiC の $\langle 0001 \rangle$ 方向の格子定数は $c \sim 1 \text{ nm}$ [1] と比較的大きく、 $\langle 0001 \rangle$ 方向に 3C-SiC と 2H-SiC が 3C/2H/3C/2H と交互に積層した自然超格子構造を持つ。自然超格子構造の模式図を図 3.1 に示す。超格子周期 D は $c/2 \sim 0.5 \text{ nm}$ [2, 3] である。この自然超格子構造のために、バルク 4H-SiC の伝導帯は $\langle 0001 \rangle$ 方向に図 2.7 で示したミニバンド様の構造 [4] を形成し、この方向に高電界を印加することで電子状態にワニエ・シュタルク局在 (Wannier-Stark localization) [5] が生じることが報告されている [6]。このことから、酸化膜/4H-SiC(0001) 界面に反転層が形成される場合、 $\langle 0001 \rangle$ 方向に電界が印加されるため、反転層内にもワニエ・シュタルク局在状態が形成されると予想される。しかし、これまでの 4H-SiC 反転層電子状態の解析では、放物線状のバルクバンド構造を仮定しバンド端のみを再現する有効質量近似法が用いられてきた [7–14] ため、4H-SiC の自然超格子構造やミニバンド様の構造といった超格子の性質が反転層電子状態に与える影響を議論することはできない。4H-SiC のフルバンド構造を考慮した反転層解析の報告としては第一原理計算を用いたもの [15, 16] が存在するが、4H-SiC の超格子の性質と反転層電子状態の関係はまだ議論されていない。本研究 [17] では、第一原理計算より小さな計算負荷で 4H-SiC の原子配置とフルバンド構造を考慮できる経験的擬ポテンシャル法に基づいて、反転層電子状態を計算し解析した。本章では、反転層電子状態に現れる 4H-SiC の超格子の性質を説明すると共に、経験的擬ポテンシャル法に基づく計算の結果を有効質量近似法に基づく計算の結果と比較してその違いを議論する。

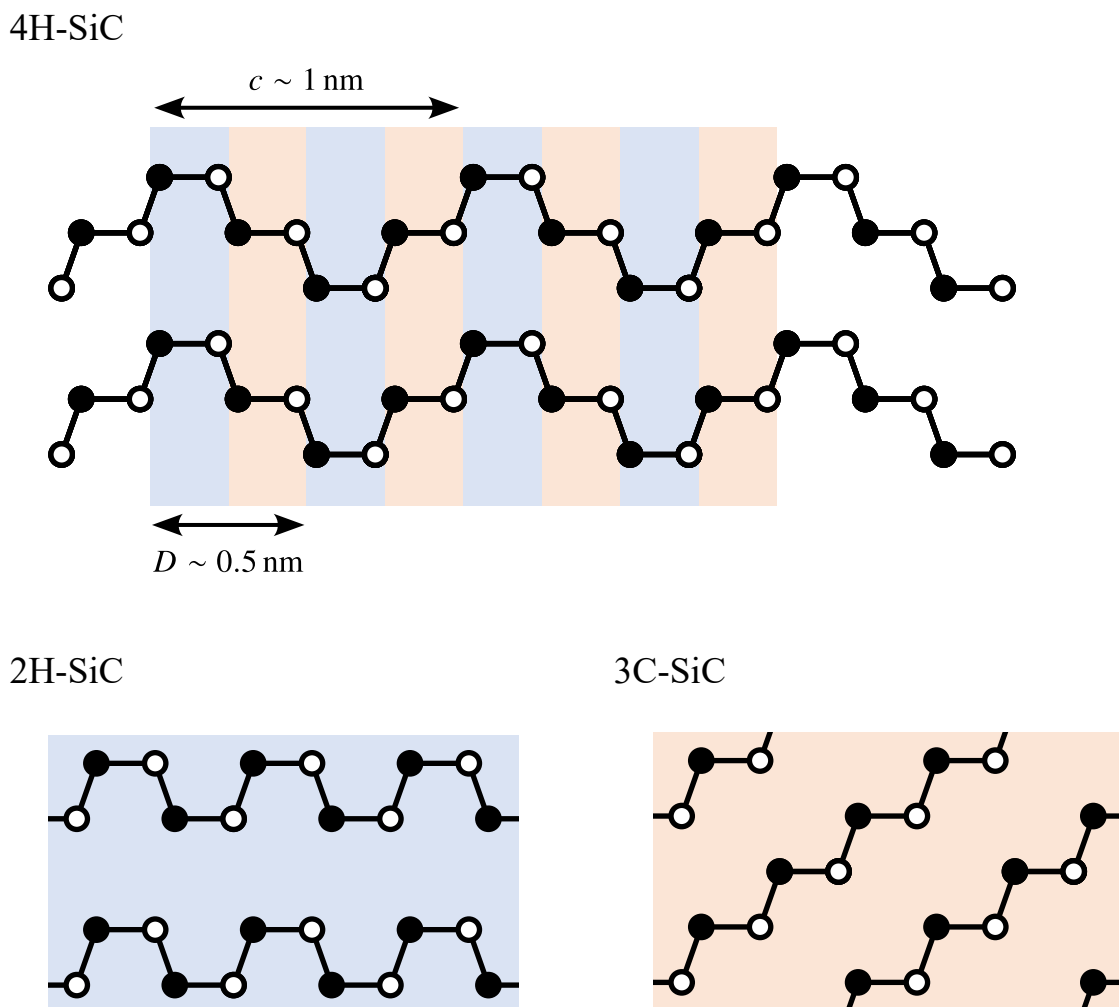


図 3.1: 4H-SiC が持つ自然超格子構造の模式図. 4H-SiC は 2H 構造（青色領域）と 3C 構造（赤色領域）を交互に繰り返す構造を持つ. 超格子定数 D は約 0.5 nm である. 図下部に 2H-SiC と 3C-SiC の構造を示す.

3.2 一様電界下のバンド構造

本節では、反転層に生じるサブバンドの一つがワニエ・シュタルク局在化した電子状態で構成される場合に、このことをサブバンド構造から確かめる方法を説明する. バルク 4H-SiC に $\langle 0001 \rangle$ 方向の一様電界を印加してワニエ・シュタルク局在状態を形成する場合、以下で説明する方法で電界垂直方向のバンド構造をバルク 4H-SiC のバンド構造（図 2.7）から見積もることができる. この見積もられたバンド構造は、反転層内のワニエ・シュタルク局在化した電子状態で構成されるサブバンドのサブバンド構造に一致すると予

想される。

半導体中の電子に一様電界 $\mathbf{F}$ を印加すると、電子は加速定理 [18] に従いその波数ベクトル $\mathbf{k}$ を

$$\mathbf{k}(t) = \frac{-e\mathbf{F}}{\hbar}t + \mathbf{k}(0) \quad (3.1)$$

で時間発展させながら、半導体のエネルギーバンド構造 $E(\mathbf{k})$ 上を走行する。ここで、時間発展に伴うバンド間遷移 [19] はないものと仮定する。 $E(\mathbf{k})$ が $\mathbf{F}$ と平行な方向にミニバンド構造を持つ場合、この電子はブリルアンゾーンを跨いで同一のバンド内を走行するブロッホ振動 [20] を生じる。電子が時間 T の間 $E(\mathbf{k})$ 上を走行する場合、その間の電子の平均エネルギー $\langle E \rangle$ は

$$\langle E \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T dt E(\mathbf{k}(t)). \quad (3.2)$$

となる。 T が十分大きい場合、この時間平均は $E(\mathbf{k})$ を第一ブリルアンゾーン内で電界方向に平均したもので置き換えることができる。このブロッホ振動はワニエ・シュタルク局在の古典論的描像であり、 $\langle E \rangle$ はワニエ・シュタルク局在状態の固有エネルギーに対応する。 $\mathbf{k}(0)$ を電界垂直方向の波数 $\mathbf{k}_\perp$ で置き換え、 $\mathbf{k}_\perp$ を変化させながら $\langle E \rangle$ を得ることで、ワニエ・シュタルク局在状態で構成されたバンドの電界垂直方向のバンド構造 $\langle E \rangle_{\mathbf{k}_\perp}$ を見積もる。

本研究では、4H-SiC に $\langle 0001 \rangle$ 方向の一様電界を印加することを考え、バルク 4H-SiC の伝導帯のバンド構造を $\langle 0001 \rangle$ 方向で平均する。ただし、図 2.7(b) に示す M-L 間の伝導帯のように下側伝導帯と上側伝導帯はブリルアンゾーン端で滑らかに接続されるため、ブロッホ振動する電子はこの 2 つの伝導帯を交互に走行する。これを考慮して、下側伝導帯と上側伝導帯を合わせて 1 つの伝導帯とみなした上で、そのエネルギーの平均をとる。このようにして得た各 $\mathbf{k}_\perp$ での平均エネルギー $\langle E \rangle_{\mathbf{k}_\perp}$ を、反転層のサブバンド構造と比較する。

3.3 シミュレーション結果

3.3.1 高エネルギーサブバンドの電子状態

ここでは、反転層を第 2 章で示したシュレディンガー方程式 [式 (2.29)] と境界条件 [式 (2.26)] で記述し、閉じ込めポテンシャルとして三角ポテンシャルを用いる。界面構造として Cubic 界面構造を仮定して、計算領域の幅 L は 15 nm とする。

経験的擬ポテンシャル法の結果

図 3.2(a) に、経験的擬ポテンシャル法により計算した各サブバンドの底（M 点）における電子状態を示す．灰色の実線は $F = 1 \text{ MV/cm}$ の三角ポテンシャルで記述された閉じ込めポテンシャル $V_{\text{conf}}(z)$ を表す．黒の実線は各サブバンド底の電子状態の z 方向の確率密度分布 $p(z)$ であり、以下の式で定義される．

$$p(z) = \frac{1}{\Omega_s} \int_{\Omega_s} dx dy |\Psi(\mathbf{r})|^2 \quad (3.3)$$

図 3.2(a) から、電子状態が赤色の帯で示した領域内で大きな振幅を示すことがわかる．赤帯のエネルギー幅は図 3.2(b) に示すバルク 4H-SiC の M-L 間のミニバンド様構造のエネルギー幅である．さらに、0.6 eV 以上のエネルギー領域では、各サブバンドの電子状態が非常に類似した空間分布を示すとともに、エネルギー方向と z 方向に等間隔に並ぶ、ワニエ・シュタルク階段 [20] の特徴を示している．周期 D の超格子では、ワニエ・シュタルク階段のエネルギー間隔は eFD となることが知られている [21]．3.1 節で述べたように、4H-SiC においては $D \sim 0.5 \text{ nm}$ であり、 $F = 1 \text{ MV/cm}$ から $eFD \sim 0.05 \text{ eV}$ となる．この

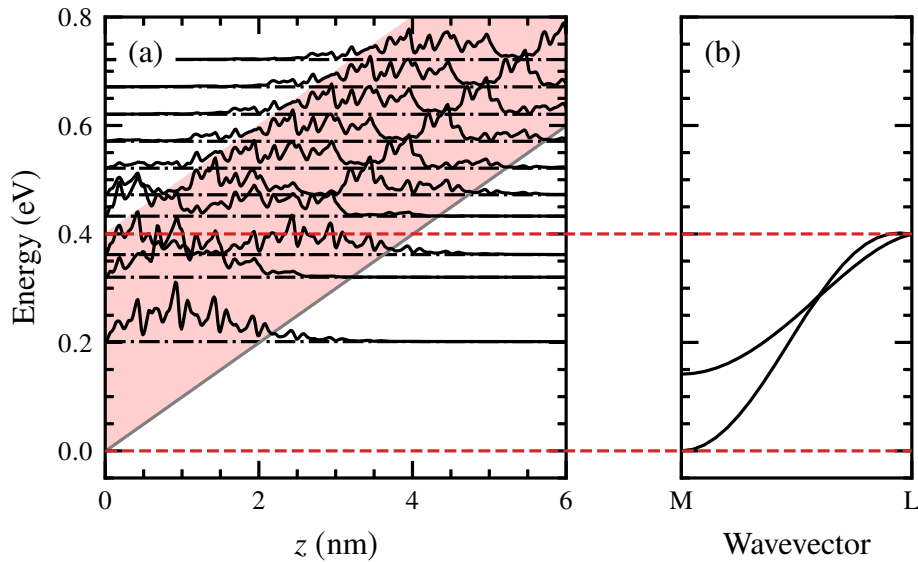


図 3.2: (a) 経験的擬ポテンシャル法で得られた反転層における各サブバンド底（M 点）での電子状態と、(b) バルク 4H-SiC の M-L 間のバンド構造．(a) の黒実線は電子状態の z 方向における確率密度分布 $p(z)$ を表す．灰色の実線は電界 $F = 1 \text{ MV/cm}$ の三角ポテンシャルで記述される閉じ込めポテンシャル $V_{\text{conf}}(z)$ を表す．赤色の帯領域のエネルギー幅は、(b) に示す M-L 間のミニバンド様構造のエネルギー幅である．

値は図 3.2(a) に示す約 0.05 eV のエネルギー間隔と一致する．この結果は高エネルギーのサブバンドで電子状態がワニエ・シュタルク局在状態となっていることを示している．

有効質量近似法の結果

図 3.3(a) は有効質量近似法に基づき計算した反転層内電子状態を示す．青色（緑色）の実線はバルク 4H-SiC の下側（上側）伝導帯に対応する有効質量方程式の解である．灰色の実線は $V_{\text{conf}}(z)$ を表す．灰色の破線は上側伝導帯に由来するサブバンド電子状態を閉じ込めるポテンシャル $V_{\text{conf}}(z) + \Delta E_{1-2}$ [式 (2.32) 参照] を表す．図 3.3(b) には，放物線で近似したバルク 4H-SiC のバンド構造を示す．青色（緑色）の実線はそれぞれ下側（上側）伝導帯に対応する．図 3.3(b) と図 3.2(b) のバンド構造は，バンド底付近でよく一致するが，バンド底から離れた領域では明らかに一致しない．図 3.3(a) に示す電子状態は高エネルギー領域でも界面近傍に大きな振幅を示し，ワニエ・シュタルク局在状態が生じていないことが確認できる．

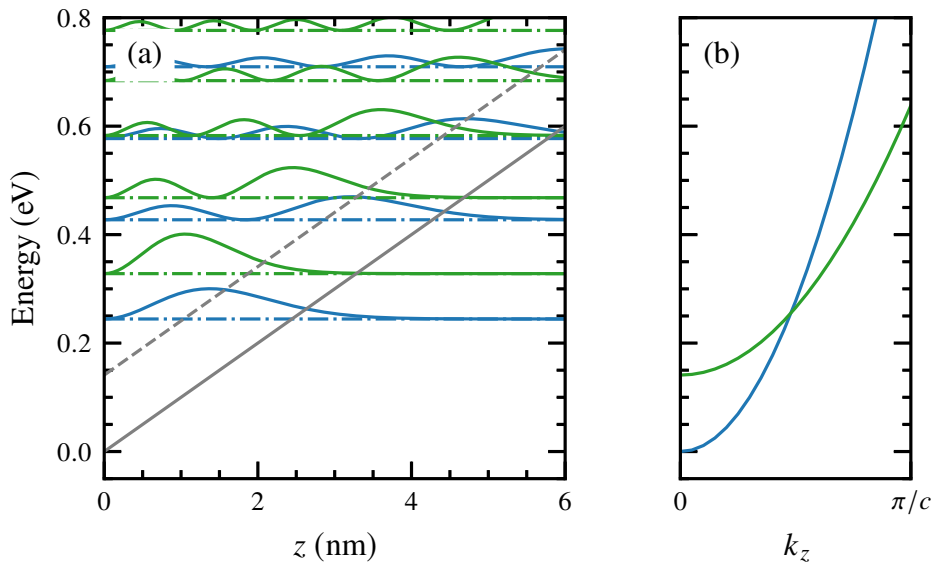


図 3.3: (a) 有効質量近似法で得られた反転層における各サブバンド底での電子状態および (b) 放物線近似されたバルク 4H-SiC のバンド構造．(a) において，青色（緑色）の実線は 4H-SiC バルクの下側（上側）伝導帯に対応する有効質量方程式の解である．灰色の実線は $V_{\text{conf}}(z)$ を表し，灰色の破線は $V_{\text{conf}}(z) + \Delta E_{1-2}$ を表す．図 3.2(a) の経験的擬ポテンシャル法の結果と異なり，高エネルギー領域にワニエ・シュタルク局在状態が生じない．

3.3.2 高エネルギー領域のサブバンド構造

3.3.1 節では 4H-SiC 反転層において、高エネルギーサブバンドの底にワニエ・シュタルク局在状態が生じることを示した。本節では、経験的擬ポテンシャル法で計算した反転層中のサブバンド構造を、3.2 節で示した方法で見積もられるバンド構造 $\langle E \rangle_{k_{\perp}}$ と比較することで、サブバンド底以外での電子状態のワニエ・シュタルク局在化を議論する。図 3.4 にバルク 4H-SiC のバンド構造を示す。図 3.4(a) は M-L 間のバンド構造、図 3.4(b) は M-L 方向に垂直な方向のバンド構造である。図 3.4(b) の赤線は Γ -M-K 面上のバンド構造を、青線は A-L-H 面上のバンド構造を表す。図 3.4(b) の青線は 1 本しか描画されていないように見えるが、A-L-H 面上では 4H-SiC の対称性から 2 本のバンドが縮退している。灰色線は Γ -M-K 平面と A-L-H 平面の間に等間隔に配置された 9 つの平面上でのバンド構造を示している。一様電界 F は M-L 方向に印加されるため、 $\langle E \rangle_{k_{\perp}}$ は図 3.4 に示す各電子状態のエネルギーを M-L 方向に沿って平均することで得られる。図 3.4(b) に緑線で $\langle E \rangle_{k_{\perp}}$ を示す。 $\langle E \rangle_{k_{\perp}}$ は図 3.4(b) の赤線 (2 本)・青線 (2 本)・灰色線 (18 本) をそれぞれ重み 0.5, 0.5, 1.0 で重み付き平均して得た値であり、この重みは数値積分で積分

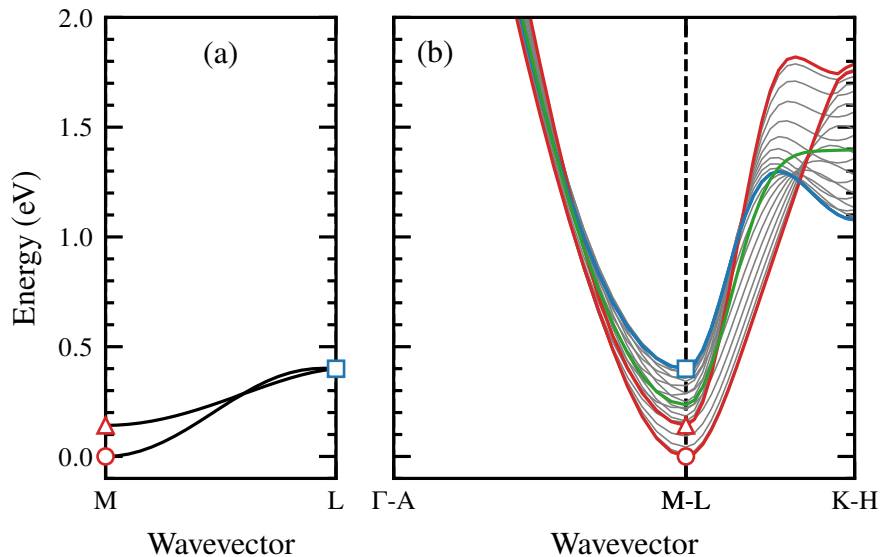


図 3.4: (a) バルク 4H-SiC の M-L 間のバンド構造と (b) M-L 方向に垂直な面内でのバンド構造. (b) において、赤線は Γ -M-K 平面上のバンド構造を、青線は A-L-H 平面上のバンド構造を示す。灰色の線は Γ -M-K 面と A-L-H 面の間に等間隔に配置される 9 つの平面上でのバンド構造を示す。緑線はバルク 4H-SiC のバンド構造を M-L 方向に平均して得られる $\langle E \rangle_{k_{\perp}}$ を示す。赤色と青色のマークは、(a) と (b) の両方の図に表示される M 点と L 点のエネルギーを表す。

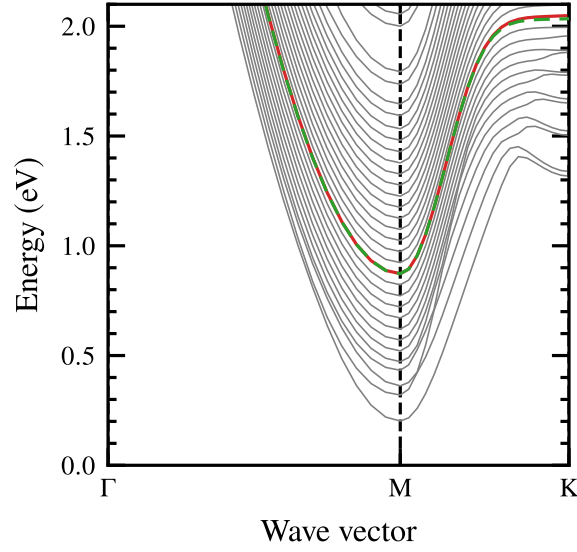


図 3.5: 経験的擬ポテンシャル法で計算された反転層内のサブバンドのバンド構造（灰実線）と $\langle E \rangle_{k_{\perp}}$ （緑破線）。 $\langle E \rangle_{k_{\perp}}$ はバンド底のエネルギーが 13 番目のサブバンド（赤実線）と一致するようにエネルギーがオフセットされている。

区間端点の重みを半分にすることに相当する。

図 3.5 に、 $F = 1 \text{ MV/cm}$ の反転層中のサブバンド構造を灰色の実線で示す。 $\langle E \rangle_{k_{\perp}}$ との比較のために、13 番目のサブバンドのみ赤実線で示す。緑破線は $\langle E \rangle_{k_{\perp}}$ を示す。緑破線においては、バンド底のエネルギーが赤実線と一致するようにエネルギーがオフセットされている。図 3.5 から、反転層中のサブバンド構造と $\langle E \rangle_{k_{\perp}}$ が良好に一致することがわかる。この結果は、反転層の電子状態計算で得られる高エネルギーサブバンドの電子状態がサブバンド底に限らずワニエ・シュタルク局在状態となっていることを示す。 $\langle E \rangle_{k_{\perp}}$ のバンド底における有効質量は $m_{M\Gamma} = 0.892 m_0$ および $m_{MK} = 0.209 m_0$ であり、経験的擬ポテンシャル法で直接計算した反転層の高エネルギーサブバンド底の有効質量と 0.5% 未満の誤差で一致する。なお、サブバンドエネルギーが eFL ($\sim 1.5 \text{ eV}$) を超えるサブバンドではサブバンド構造が $\langle E \rangle_{k_{\perp}}$ と一致しないが、これは計算領域幅 L が有限 (15 nm) であることで、裏面 ($z = L$) の境界条件が電子状態に影響するためである。

3.3.3 低エネルギーサブバンドの解析

本節では、反転層の電子伝導を考える上で重要な低エネルギーのサブバンドについて、経験的擬ポテンシャル法の結果と有効質量近似法の結果を比較してその違いを議論する。

サブバンドエネルギー

経験的擬ポテンシャル法と有効質量近似法でそれぞれ計算した反転層における最低エネルギーの4つのサブバンド底の電子状態について、図3.6に存在確率密度分布 $p(z)$ を示す。図3.6(a)の黒実線は経験的擬ポテンシャル法の結果を示し、図3.6(b)の青実線および緑実線は有効質量近似法の結果を示す。黒・青・緑の点線はそれぞれのサブバンドエネルギーを示す。灰色の実線と破線は、図3.3(a)と同様に、それぞれ $V_{\text{conf}}(z)$ と $V_{\text{conf}}(z) + \Delta E_{1-2}$ を示す。サブバンドエネルギーを経験的擬ポテンシャル法と有効質量近似法とで比較するために、経験的擬ポテンシャル法で得られる反転層電子状態を下側伝導帯由来のものと上側伝導帯由来のものに分類する。有効質量方程式[式(2.31)と式(2.32)]では、下側伝導帯に由来するサブバンドの電子状態は $V_{\text{conf}}(z)$ で閉じ込められ、上側伝導帯に由来するサブバンドでは $V_{\text{conf}}(z) + \Delta E_{1-2}$ に閉じ込められる。そのため、下側伝導帯〔上側伝導帯〕に由来するサブバンドでは、図3.6(b)からわかるように、 $V_{\text{conf}}(z)$ [$V_{\text{conf}}(z) + \Delta E_{1-2}$] がサブバンドエネルギーより大きくなる z 座標において $p(z)$ が小さくなる。この特徴を図3.6(a)

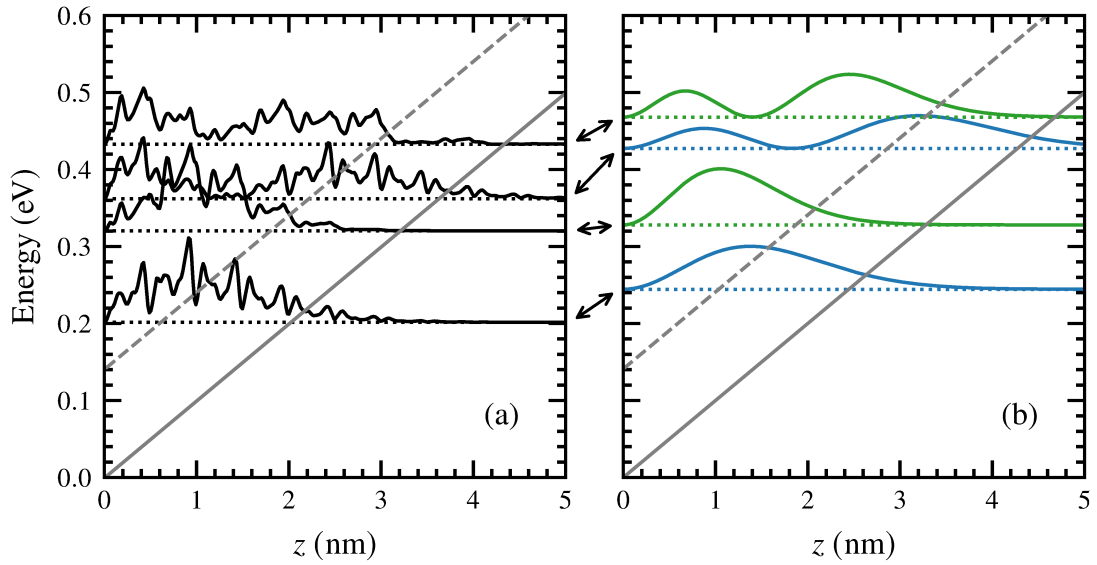


図 3.6: 反転層における最低エネルギーの4つのサブバンド底の電子状態。(a)は経験的擬ポテンシャル法の結果、(b)は有効質量近似法の結果を示す。黒・青・緑の実線は各電子状態の $p(z)$ を、点線はエネルギーを示す。(b)の青線(緑線)は下側伝導帯(上側伝導帯)に由来する有効質量方程式の解である。灰色の実線と破線はそれぞれ $V_{\text{conf}}(z)$ と $V_{\text{conf}}(z) + \Delta E_{1-2}$ を示す。(a)と(b)の間の黒矢印は、経験的擬ポテンシャル法の結果と有効質量近似法の結果との間での各電子状態の対応関係を示す。

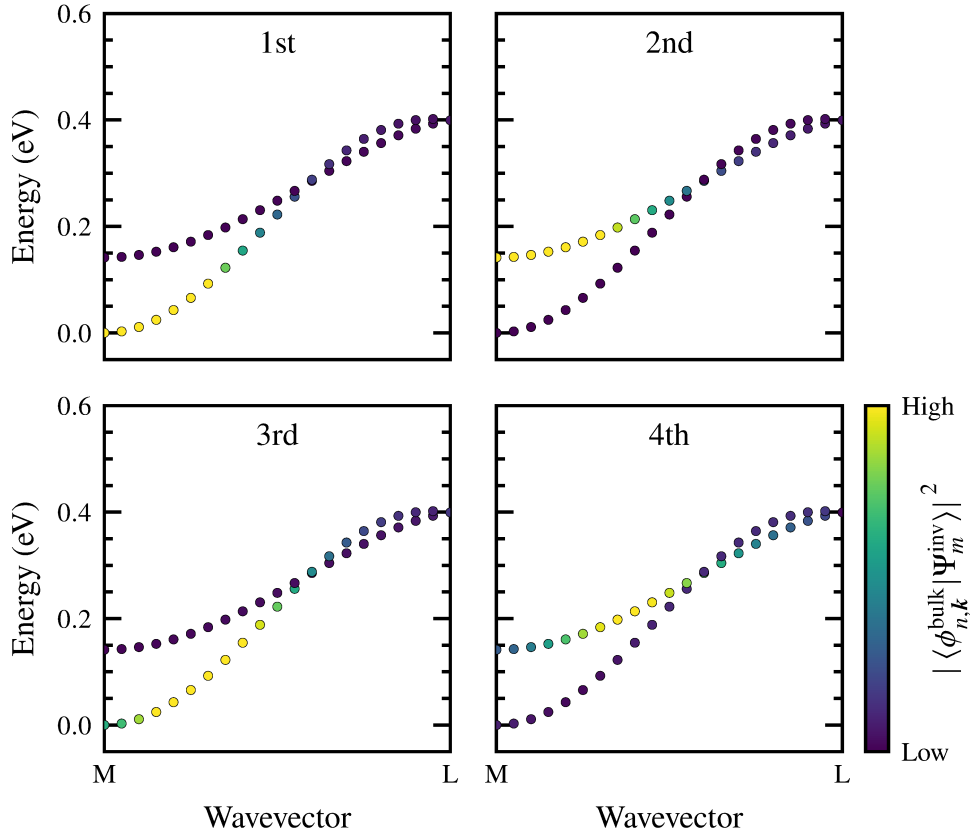


図 3.7: バルク 4H-SiC の電子状態 $\phi_{n,k}^{\text{bulk}}$ から反転層中の第 m サブバンド底 ($m = 1, 2, 3, 4$) の電子状態 Ψ_m^{inv} への寄与. マーカーはバルク 4H-SiC のバンド構造に沿って配置されている. 各マーカーの色は Ψ_m^{inv} から $\phi_{n,k}^{\text{bulk}}$ への射影の 2 乗 $|\langle \phi_{n,k}^{\text{bulk}} | \Psi_m^{\text{inv}} \rangle|^2$ を表す.

の電子状態にあてはめると, 第 1・第 3 サブバンドは下側伝導帯に由来し, 第 2・第 4 サブバンドは上側伝導帯に由来することがわかる. 加えて, 以下の方法で, 波動関数に注目してより定量的に分類することもできる. バルク 4H-SiC のバンド番号 n , 波数ベクトル k の伝導帯電子状態の波動関数を $\phi_{n,k}^{\text{bulk}}$ とおき, 経験的擬ポテンシャル法に基づき計算した反転層の m 番目のサブバンド底 (M 点) の波動関数を Ψ_m^{inv} で表す. 反転層の電子状態からバルクの電子状態への射影 $\langle \phi_{n,k}^{\text{bulk}} | \Psi_m^{\text{inv}} \rangle$ を計算し $|\langle \phi_{n,k}^{\text{bulk}} | \Psi_m^{\text{inv}} \rangle|^2$ が大きければ $\phi_{n,k}^{\text{bulk}}$ の Ψ_m^{inv} への寄与が大きいことがわかる. 図 3.7 に $|\langle \phi_{n,k}^{\text{bulk}} | \Psi_m^{\text{inv}} \rangle|^2$ を示す. 4 つの図はそれぞれ $m = 1, 2, 3, 4$ の Ψ_m^{inv} に対応する. マーカーはバルク 4H-SiC の M-L 間のバンド構造 [図 2.7(b)] に沿って配置されており, 各マーカーの色は $|\langle \phi_{n,k}^{\text{bulk}} | \Psi_m^{\text{inv}} \rangle|^2$ を表す. 図 3.7 より, 第 1 および第 3 サブバンドは下側伝導帯の電子状態の寄与が大きく, 第 2 および第 4 サブバンドはバルク上側伝導帯の寄与が大きいことがわかる. 以上で示したサブバンド

の分類に基づき、図 3.6(a) と図 3.6(b) の間に黒矢印でサブバンドの対応関係を示す。いずれのサブバンドでも経験的擬ポテンシャル法で得られた電子状態は、有効質量近似法の結果に比べてエネルギーが小さい。これは経験的擬ポテンシャル法で考慮されるバルク 4H-SiC のバンド構造の非放物線性が閉じ込め方向の有効質量を実効的に増加させることに由来する現象である。言い換えれば、この結果は、バンド構造を放物線で近似する有効質量近似法では反転層のサブバンドエネルギーを過大に見積もることを示している。

第1サブバンド底の有効質量

ここでは、反転層の第1サブバンド底における輸送方向の有効質量について議論する。第1サブバンド底の M- Γ 方向および M-K 方向の有効質量を $m_{M\Gamma}$ と m_{MK} とおく。図 3.8 に $m_{M\Gamma}$ の電界 F 依存性を示し、図 3.9 に m_{MK} の F 依存性を示す。黒実線は $m_{M\Gamma}$ と m_{MK} を示し、青点線はバルク 4H-SiC の有効質量 $m_{M\Gamma}^L = 0.636 m_0$ と $m_{MK}^L = 0.312 m_0$ を示す。図 3.8 と図 3.9 から、 F の増加とともに、 $m_{M\Gamma}$ は増大、 m_{MK} は減少し、第1サブバンド底の有効質量がより大きな異方性を持つことがわかる。この現象はバルク 4H-SiC のバンド構造の非放物線性から説明できる。バルク 4H-SiC における M-L 方向と垂直な面内でのバンド構造は、M-L 間近傍での有効質量が一定ではなく、M 点から L 点へ向かうにつれて、M- Γ 方向の有効質量は増加し、M-K 方向の有効質量は減少する。閉じ込め電界 F が大きいほど、バルク 4H-SiC のより高エネルギーな電子状態から反転層電子状態への寄与が大きくなるため、上述の非放物線性を反映して $m_{M\Gamma}$ はより大きく、 m_{MK} はより小さくなる。

下式で定義される状態密度有効質量 [20] は、異方的な有効質量と状態密度との関係を示す指標である。

$$m_d = \sqrt{m_{M\Gamma} m_{MK}} \quad (3.4)$$

図 3.10 の黒実線は m_d の F 依存性を示す。青点線はバルク 4H-SiC の伝導帯底の有効質量から求められる状態密度有効質量 $m_d^{\text{bulk}} = \sqrt{m_{M\Gamma}^L m_{MK}^L} = 0.445 m_0$ を示す。 m_d は F の増加とともに増加する傾向を示し、 $F = 1 \text{ MV/cm}$ で m_d^{bulk} より約 4% 大きくなった。これらの有効質量の F 依存性は反転層における電子の散乱確率に影響を与えるが、従来の有効質量近似法による電子状態計算では考慮されていない。

異方的な有効質量が電子移動度に及ぼす影響を、以下で定義される伝導度有効質量 m_c [22] で評価する。

$$m_c = \frac{2}{\frac{1}{m_{M\Gamma}} + \frac{1}{m_{MK}}} \quad (3.5)$$

図 3.11 に、 m_c の F 依存性を黒実線で示す。併せて、バルク 4H-SiC の (0001) 面内方向の伝導度有効質量 $m_c^{\text{bulk}} = 2/(1/m_{M\Gamma}^L + 1/m_{MK}^L) = 0.419 m_0$ を青線で示す。 m_c と m_c^{bulk} の差はわずかで、 $F < 1 \text{ MV/cm}$ の範囲でその差は最大でも約 1% である。これは、反転層

に電子を閉じ込めることによる m_c の変化という観点では、電子移動度はほとんど低下しないことを示している。

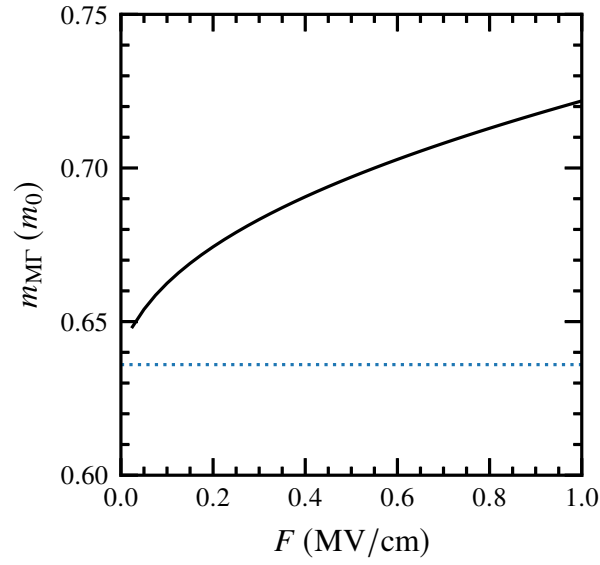


図 3.8: 第 1 サブバンド底の有効質量 $m_{\text{M}\Gamma}$ の電界 F 依存性 (黒実線). 青点線はバルク 4H-SiC の有効質量 $m_{\text{M}\Gamma}^{\text{L}} = 0.636 m_0$ を示す.

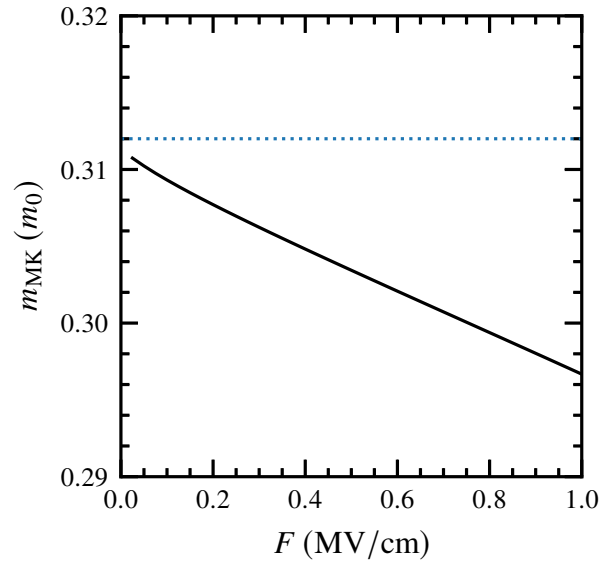


図 3.9: 第 1 サブバンド底の有効質量 m_{MK} の電界 F 依存性 (黒実線). 青点線はバルク 4H-SiC の有効質量 $m_{\text{MK}}^{\text{L}} = 0.312 m_0$ を示す.

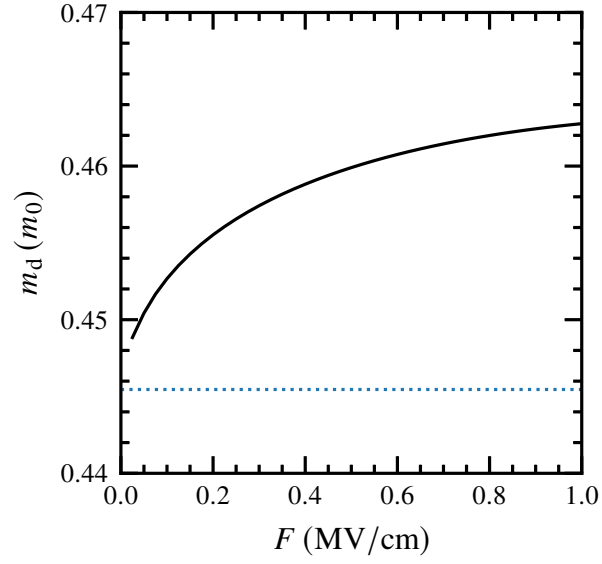


図 3.10: 第 1 サブバンド底の状態密度有効質量 m_d の電界 F 依存性 (黒実線). 青点線は m_d^{bulk} を示す.

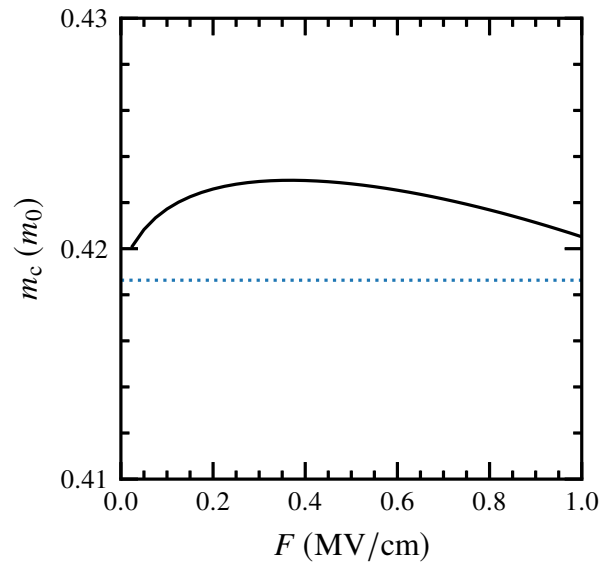


図 3.11: 第 1 サブバンド底の伝導度有効質量 m_c の電界 F 依存性 (黒実線). 青点線は m_c^{bulk} を示す.

3.4 まとめ

本章では、4H-SiC MOS 反転層の電子状態を経験的擬ポテンシャル法に基づいて計算し、これを有効質量近似法に基づく計算結果と比較することで、その違いを議論した。

まず、経験的擬ポテンシャル法に基づく反転層電子状態計算の結果から、高エネルギーサブバンドのサブバンド底の電子状態がワニエ・シュタルク局在状態となることがわかった。これは経験的擬ポテンシャル法によって 4H-SiC の超格子的性質（M-L 方向のミニバンド構造）が考慮されたことで生じた現象であり、超格子的性質を考慮しない有効質量近似法では再現され得ない。反転層の面内方向にかかる電界が大きい（ソースドレイン間の電位差が大きい）場合など反転層中の電子が面内方向に加速され大きなエネルギーを持ちうる場合は、このような高エネルギーの電子状態およびサブバンド構造を正確に考慮する必要がある。続いて、バルク 4H-SiC のバンド構造を電界方向に平均することで、反転層中の高エネルギー領域のサブバンド構造によく一致するバンド構造を得ることができた。この結果は、反転層の電子状態計算で得られる高エネルギーサブバンドの電子状態がサブバンド底に限らずワニエ・シュタルク局在状態となっていることを示す。また、低エネルギー領域のサブバンドのサブバンドエネルギーを比較した結果、バルク 4H-SiC のバンド構造を放物線で近似する有効質量近似法では、サブバンドエネルギーを経験的擬ポテンシャル法の結果より過大に見積もることが示された。最後に、経験的擬ポテンシャル法により得られる、第 1 サブバンド底の輸送方向の有効質量の閉じ込め電界への依存性を調べた。その結果、電界に依存して有効質量の異方性が大きく変化し、また状態密度有効質量も変化することが明らかになった。これは、電子輸送計算に経験的擬ポテンシャル法で求められるサブバンド構造を導入する場合、有効質量に電界依存性のない有効質量近似法でのサブバンド構造を用いる場合とは異なる輸送特性が得られる可能性を示している。一方で、第 1 サブバンド底の伝導度有効質量は電界にほぼ依存しないことがわかった。これは、伝導度有効質量の増加という観点での反転層の移動度低下は起こらないことを示している。

参考文献

- [1] A. Bauer, J. Kräußlich, L. Dressler, P. Kuschnerus, J. Wolf, K. Goetz, P. Käckell, J. Furthmüller, and F. Bechstedt, “High-precision determination of atomic positions in crystals: The case of 6H- and 4H-SiC,” *Phys. Rev. B*, **57**, 2647 (1998).
- [2] V. Sankin and I. Stolichnov, “Negative differential conduction in the Bloch oscillations regime in the hexagonal silicon carbide polytypes 4H, 6H and 8H,” *Superlattices Mi-*

- crostruct., **23**, 999 (1998).
- [3] T. Kimoto and J. A. Cooper, *Fundamentals of Silicon Carbide Technology: Growth, Characterization, Devices and Applications*, John Wiley & Sons (2014).
 - [4] S.-i. Nakamura, H. Kumagai, T. Kimoto, and H. Matsunami, “Anisotropy in breakdown field of 4H-SiC,” *Appl. Phys. Lett.*, **80**, 3355 (2002).
 - [5] G. H. Wannier, “Wave functions and effective hamiltonian for Bloch electrons in an electric field,” *Phys. Rev.*, **117**, 432 (1960).
 - [6] V. I. Sankin, “Wannier-stark localization in the natural superlattice of silicon carbide polytypes,” *Semiconductors*, **36**, 717 (2002).
 - [7] M. Noguchi, T. Iwamatsu, H. Amishiro, H. Watanabe, K. Kita, and N. Miura, “Coulomb-limited mobility in 4H-SiC MOS inversion layer as a function of inversion-carrier average distance from MOS interface,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, **59**, 051006 (2020).
 - [8] G. Pennington and N. Goldsman, “Self-consistent calculations for n-type hexagonal SiC inversion layers,” *J. Appl. Phys.*, **95**, 4223 (2004).
 - [9] G. Pennington and N. Goldsman, “Simulation of electron transport in (0001) and (11 $\bar{2}$ 0) 4H-SiC inversion layers,” *J. Appl. Phys.*, **106**, 063701 (2009).
 - [10] H. Tanaka and N. Mori, “Modeling of carrier scattering in MOS inversion layers with large density of interface states and simulation of electron Hall mobility in 4H-SiC MOSFETs,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, **59**, 031006 (2020).
 - [11] K. Ito, T. Kobayashi, and T. Kimoto, “Effect of quantum confinement on the defect-induced localized levels in 4H-SiC(0001)/SiO₂ systems,” *J. Appl. Phys.*, **128**, 095702 (2020).
 - [12] T. Ohashi, R. Iijima, and H. Yano, “Dominant scattering mechanism in SiC MOSFET: comparative study of the universal mobility and the theoretically calculated channel mobility,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, **59**, 034003 (2020).
 - [13] W. Fu, H. Yano, T. Sakurai, and A. Ueda, “The effect of biaxial strain on the phonon-limited mobility in 4H-SiC MOSFETs,” *Appl. Phys. Express*, **16**, 081002 (2023).
 - [14] K. Ito, H. Tanaka, M. Horita, J. Suda, and T. Kimoto, “Influence of fixed charges and trapped electrons on free electron mobility at 4H-SiC (0001)/SiO₂ interfaces with gate oxides annealed in NO or POCl₃,” *Appl. Phys. Express*, **17**, 081003 (2024).
 - [15] H. Yoshioka, J.-I. Iwata, and Y.-I. Matsushita, “Atomic scale localization of Kohn–Sham wavefunction at SiO₂/4H-SiC interface under electric field, deviating from envelope function by effective mass approximation,” *Appl. Phys. Lett.*, **122**, 222104 (2023).
 - [16] K. Tachiki, Y. Nishiya, J.-I. Iwata, and Y.-I. Matsushita, “Effect of nitrogen introduced at the SiC/SiO₂ interface and SiC side on the electronic states by first-principles calcu-

- lation,” Jpn. J. Appl. Phys., **62**, 061005 (2023).
- [17] S. Nagamizo, H. Tanaka, and N. Mori, “Wannier–Stark localization of electronic states in 4H-SiC MOS inversion layer,” Jpn. J. Appl. Phys., **63**, 02SP62 (2024).
- [18] C. Kittel and C.-Y. Fong, Quantum Theory of Solids, John Wiley & Sons (1987).
- [19] J. B. Krieger and G. J. Iafrate, “Time evolution of bloch electrons in a homogeneous electric field,” Phys. Rev. B, **33**, 5494 (1986).
- [20] J. H. Davies, The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction, Cambridge University Press (1998).
- [21] C. Jacoboni, Theory of Electron Transport in Semiconductors, Springer (2010).
- [22] C. Hamaguchi, Basic Semiconductor Physics, fourth edition, Springer (2023).

第 4 章

界面構造の 4H-SiC 反転層電子状態への影響

4.1 はじめに

第 2 章で述べたように，酸化膜/4H-SiC(0001) 界面に隣接する 4H-SiC の構造として，Cubic 界面構造，Hexagonal 界面構造と呼ばれる 2 種類の界面構造が存在する．近年の第一原理計算による研究 [1–3] では，これらの界面構造に応じて界面近傍の局所状態密度が大きく変化することが報告されている．しかし，界面構造が反転層電子状態に及ぼす影響についての議論はまだ十分に進んでいない．将来的にこのような界面構造の影響をモンテカルロ法などによる電子輸送計算に取り入れることを考えれば，第一原理計算や本研究で用いる経験的擬ポテンシャル法などの原子論的な手法で反転層電子状態を計算・解析し，有効質量近似法のような高効率な手法に基づく電子状態計算にも導入可能な簡易なモデルによる界面構造の反転層電子状態への影響の表現方法を模索することが重要である．

第一原理計算を用いて反転層電子状態を解析した研究 [4] により，Hexagonal 界面構造では Cubic 界面構造の場合より反転層電子状態が界面近傍により強く局在することが明らかにされ，さらにこの局在現象がチャネル移動度の劣化に寄与する可能性が示された．しかしながら，この局在現象が生じる原因やこれを抑制する方法についてはいまだ解明されていない．従来の有効質量近似法による電子状態計算 [5–8] ではこのような電子状態の局在現象が再現されないことから，4H-SiC の原子配置やフルバンド構造を考慮することで現れる現象であると予想される．第 3 章の結果から，高エネルギーサブバンドに生じるワニエ・シュタルク局在状態においては，バルク 4H-SiC の下側伝導帯と上側伝導帯の両方の電子状態が混成していることが明らかである．このことから，反転層の低エネルギーサブバンドにおいても，下側伝導帯と上側伝導帯の電子状態が混成した反転層電子状態が生じることが予想される．有効質量近似法に基づく電子状態計算では，下側伝導帯と上側

伝導帯を独立した 2 つの有効質量方程式で別個に記述しバンド構造を放物線に近似するため、このような電子状態の混成は起こりえない。また、第一原理計算を用いてバルク 4H-SiC のフルバンド構造を考慮した反転層電子状態の解析は数例報告されている [4, 9] が、このような電子状態の混成についてはいまだ議論されていない。

本研究 [10] では、Cubic 界面構造と Hexagonal 界面構造のそれぞれについて反転層電子状態を経験的擬ポテンシャル法に基づき計算し、界面構造が反転層電子状態に及ぼす影響を解析するとともに、Hexagonal 界面構造における反転層電子状態の局在の原因を議論する。また、有効質量近似法に基づいた反転層電子状態の計算も実施し、経験的擬ポテンシャル法の結果と比較することで、原子配置やフルバンド構造を考慮することによる反転層電子状態への影響を評価する。

4.2 解析手法

閉じ込めポテンシャル $V_{\text{conf}}(z)$ は、2.4.4 節で述べた電界 F の三角ポテンシャルとする。4H-SiC(0001) MOS 反転層における伝導帯底は、2 次元六方格子の第一ブリルアンゾーンにおける M 点に現れる。本章では、経験的擬ポテンシャル法に基づく計算で得られた各サブバンドの M 点における電子状態のみに着目して考察を行う。反転層内の電子状態に対する二つの異なる界面構造の影響を解析するため、サブバンドエネルギー、電子状態と界面との距離、下側・上側の各伝導帯の混成に注目する。

4.2.1 電子状態と界面との距離

経験的擬ポテンシャル法に基づく計算で得られる n 番目のサブバンドについて、サブバンドエネルギーを E_n 、M 点の電子状態の波動関数を $\Psi_n(\mathbf{r})$ 、 z 軸方向における確率密度分布を $p_n(z)$ とおく。 $p_n(z)$ は以下で求められる。

$$p_n(z) = \iint dx dy |\Psi_n(\mathbf{r})|^2 \quad (4.1)$$

$p_n(z)$ を用いて、電子状態の界面からの平均距離 $\langle z \rangle_n$ を以下で定義する。

$$\langle z \rangle_n = \int_0^L dz z p_n(z) \quad (4.2)$$

本章では、 E_n および $\langle z \rangle_n$ の F 依存性ならびに界面構造依存性を議論する。なお、各界面構造における結果は、上付き文字で区別する。例えば、Cubic 界面構造における n 番目のサブバンドエネルギーは E_n^{cub} で示し、Hexagonal 界面構造の場合は E_n^{hex} で示す。

4.2.2 バルク伝導帯の電子状態の混成

バルク 4H-SiC における電子状態の波動関数を、波数ベクトル $\mathbf{k}$ の下側伝導帯であれば $\phi_k^L(\mathbf{r})$ 、上側伝導帯であれば $\phi_k^U(\mathbf{r})$ で表す。 $\phi_k^L(\mathbf{r})$ から $\Psi_n(\mathbf{r})$ への寄与は、これらの波動関数の内積の二乗

$$|\langle \phi_k^L | \Psi_n \rangle|^2 = \left| \int_{U_{\text{inv}}} d\mathbf{r} \phi_k^{L*}(\mathbf{r}) \Psi_n(\mathbf{r}) \right|^2 \quad (4.3)$$

で評価できる。ここで、 U_{inv} は、反転層の計算領域における単位胞であり、 $\phi_k^L(\mathbf{r})$ 、 $\phi_k^U(\mathbf{r})$ 、 $\Psi_n(\mathbf{r})$ はそれぞれ

$$\int_{U_{\text{inv}}} d\mathbf{r} |\phi_k^L(\mathbf{r})|^2 = 1 \quad (4.4)$$

$$\int_{U_{\text{inv}}} d\mathbf{r} |\phi_k^U(\mathbf{r})|^2 = 1 \quad (4.5)$$

$$\int_{U_{\text{inv}}} d\mathbf{r} |\Psi_n(\mathbf{r})|^2 = 1 \quad (4.6)$$

で規格化されている。下側（上側）伝導帯全体から $\Psi_n(\mathbf{r})$ への寄与をそれぞれ C_n^L (C_n^U) とおき、以下の積分で求める。

$$C_n^L = \frac{L}{2\pi} \int_I dk |\langle \phi_k^L | \Psi_n \rangle|^2 \quad (4.7)$$

$$C_n^U = \frac{L}{2\pi} \int_I dk |\langle \phi_k^U | \Psi_n \rangle|^2 \quad (4.8)$$

ここで、積分区間 I は図 4.1 に赤線で示す、バルク 4H-SiC の第一ブリルアンゾーンの L-M-L を結ぶ線分である。下側伝導帯と上側伝導帯に由来するサブバンドにおいては $C_n^L + C_n^U \sim 1$ であり、 C_n^L が大きければ下側伝導帯から Ψ_n への寄与が大きく、 C_n^U が大きければ上側伝導帯からの寄与が大きいことを表す。 C_n^L と C_n^U の値から、2つのバルク伝導帯の混成の程度を量的に評価する。

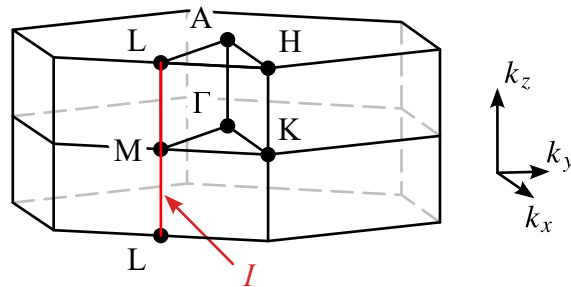


図 4.1: バルク 4H-SiC の第一ブリルアンゾーンと対称性の高い点。赤線分 (L-M-L) は式 (4.7) と式 (4.8) で用いられる積分区間 I 。

4.3 シミュレーション結果

計算領域の幅 L が小さい場合、特に F が小さい場合に $V_{\text{conf}}(z=L) - V_{\text{conf}}(z=0) = eFL$ が小さくなり、低エネルギーのサブバンドに裏面 ($z=L$) の境界条件が影響してしまう。そこで本章では、計算領域の幅 L を 100 nm とする。仮に $F = 0.1 \text{ MV/cm}$ の場合でも $eFL = 1 \text{ eV}$ であり、裏面の影響は十分に抑制される。

4.3.1 低電界下の反転層電子状態

図 4.2(a) に、 E_n の電界 F 依存性を示す。赤色の実線は E_n^{cub} を、青色の破線は E_n^{hex} をそれぞれ表す。図 4.2(a) では、 E_n が直線的な F 依存性を示すサブバンドと、下に凸の F 依存性を示すサブバンドがみられる。図 4.2(b) と図 4.2(c) も図 4.2(a) と同様に E_n の F 依存性を示す。ただし、図 4.2(b) [図 4.2(c)] では $C_n^{\text{L}} > 0.98$ [$C_n^{\text{U}} > 0.98$] を満たすサブバンドのみを赤色または青色の線で表示しており、そうでないサブバンドは灰色で表示されている。図 4.2(b) と図 4.2(c) からわかるように、直線的な F 依存性を示すサブバンドでは下側伝導帯の電子状態が反転層電子状態を支配 (C_n^{L} が大きく C_n^{U} が小さい) しており、下に凸の F 依存性を示すサブバンドでは上側伝導帯が反転層電子状態を支配 (C_n^{L} が小さく C_n^{U} が大きい) している。また、図 4.2 から、低電界領域 ($F < 1 \text{ MV/cm}$) における低エネルギーサブバンドでは下側伝導帯と上側伝導帯の電子状態がほとんど混成せず別々のサブバンドに分かれ、下側伝導帯が支配的なサブバンドにおいては $E_n^{\text{hex}} > E_n^{\text{cub}}$ であることがわかる。図 4.3 に示す $\langle z \rangle_1$ の F 依存性からは、サブバンドエネルギーの大小関係と同様に $\langle z \rangle_1^{\text{hex}} > \langle z \rangle_1^{\text{cub}}$ が成り立つことがわかる。なお、その他のサブバンド ($n \geq 2$) においても、その電子状態がバルク下側伝導帯に支配されている限り、 $\langle z \rangle_n^{\text{hex}} > \langle z \rangle_n^{\text{cub}}$ が成立する。以下では、 $F < 1 \text{ MV/cm}$ 領域においてバルク下側伝導帯が支配的なサブバンドに着目し、これらの電子状態を詳細に解析するとともに、バルク下側伝導帯が支配的なサブバンドにおいて E_n^{hex} と E_n^{cub} との間および $\langle z \rangle_n^{\text{hex}}$ と $\langle z \rangle_n^{\text{cub}}$ との間の関係を考察する。

$F = 0.3 \text{ MV/cm}$ での 3 つの低エネルギーサブバンドについて、 $p_n(z)$ を図 4.4 に示す。灰色の実線は $V_{\text{conf}}(z)$ を表し、灰色の破線は $V_{\text{conf}}(z) + \Delta E_{1-2}$ を表す。黒色の実線は $p_n(z)$ を、黒色の点線は E_n を表している。四角のマーカーは $\langle z \rangle_n$ を示している。図 4.2(b) と (c) から、 $F = 0.3 \text{ MV/cm}$ において第 1 および第 2 サブバンドはバルク下側伝導帯に、第 3 サブバンドはバルク上側伝導帯に支配されていることがわかる。また図 4.4 から、第 3 章でも示したように、下側伝導帯に支配される第 1 および第 2 サブバンドが $V_{\text{conf}}(z)$ で閉じ込められているのに対し、上側伝導帯に支配される第 3 サブバンドは $V_{\text{conf}}(z) + \Delta E_{1-2}$ で閉じ込められていることが確認できる。

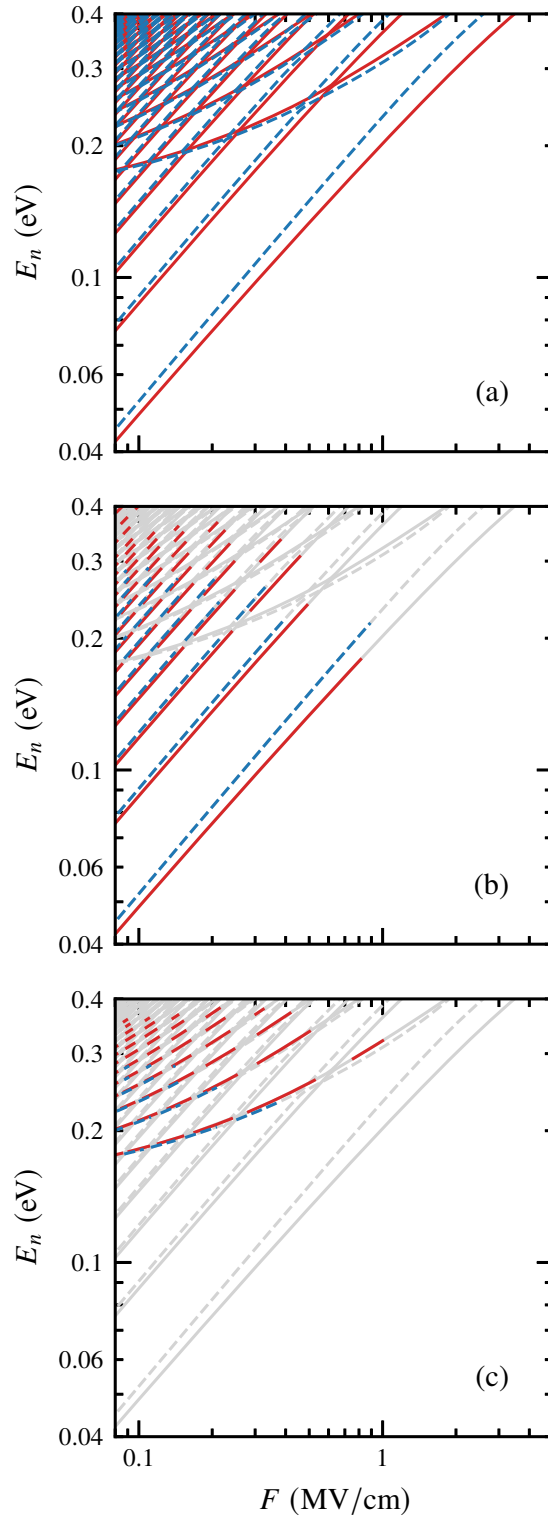


図 4.2: 各サブバンドのサブバンドエネルギー E_n の電界 F 依存性. 赤実線は E_n^{cub} を, 青破線は E_n^{hex} を示す. (b) では, $C_n^{\text{L}} > 0.98$ を満たすサブバンドが赤色または青色で表示され, それ以外は灰色で表示される. (c) では, $C_n^{\text{U}} > 0.98$ を満たすサブバンドが赤色または青色で表示される.

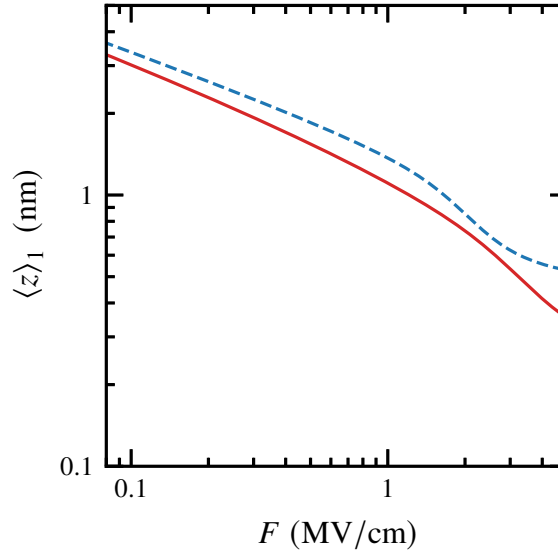


図 4.3: 電界 F に対する第 1 サブバンド底の電子状態の位置期待値 $\langle z \rangle_1$. 赤実線は $\langle z \rangle_1^{\text{cub}}$ を, 青破線は $\langle z \rangle_1^{\text{hex}}$ を示す.

図 4.4(b) から, 界面近傍に $p_n^{\text{hex}}(z)$ の値が小さい領域が存在し, その幅が 0.3 nm 程度であることがわかる. このような界面近傍の低 $p_n^{\text{hex}}(z)$ 領域は, 酸化物/4H-SiC(0001) 界面近傍の電子状態に関する先行の第一原理研究 [2, 3] でも報告されている. ここではこの Hexagonal 界面構造の場合に現れる低 $p_n^{\text{hex}}(z)$ 領域を失活層と呼ぶ. 失活層の厚さを仮に z_d とおく. 波動関数の振幅 (すなわち $p_n^{\text{hex}}(z)$) が抑制されていることから, この界面近傍の失活層には電子を界面から約 0.3 nm 遠ざける効果があると予想して, この効果を, 本来は $z = 0$, ポテンシャルエネルギー $V_{\text{conf}} = 0$ に位置する三角ポテンシャルの底が, $z = z_d$, $V_{\text{conf}} = eFz_d$ にずれる, と考える簡易なモデルで表現する. 三角ポテンシャルの底のずれに合わせて位置とエネルギーの基準をそれぞれ z_d と eFz_d だけ変化させた $E_n^{\text{hex}} - eFz_d$ と $\langle z \rangle_1^{\text{hex}} - z_d$ を図 4.5 に青破線で示す. ここでは $z_d = 0.33$ nm とする. 加えて, E_n^{cub} と $\langle z \rangle_1^{\text{cub}}$ を赤破線で示す. 比較のために, 有効質量近似法に基づいて計算される $\varepsilon_1^{\perp}$ を緑色の点線で図 4.5(a) に示す. 図 4.5 では, 下側伝導帯に支配されるサブバンドについて, $F < 1$ MV/cm の範囲で, E_n^{cub} と $E_n^{\text{hex}} - eFz_d$ および $\langle z \rangle_1^{\text{cub}}$ と $\langle z \rangle_1^{\text{hex}} - z_d$ がそれぞれ良好に一致する. この結果から, Hexagonal 界面構造の場合にのみ位置とエネルギーの基準を z_d と eFz_d ($z_d = 0.33$ nm) だけずらすという簡易な方法で, 下側伝導帯に支配されるサブバンドに及ぼす Cubic 界面構造と Hexagonal 界面構造の影響を記述できることがわかる. しかし, 図 4.5 の $F > 1$ MV/cm での乖離からわかるように, この方法では高電界領域での界面構造依存性を記述できていない. 次の 4.3.2 節では, 高電界条件下での電子状態に対する界面構造の影響を議論する.

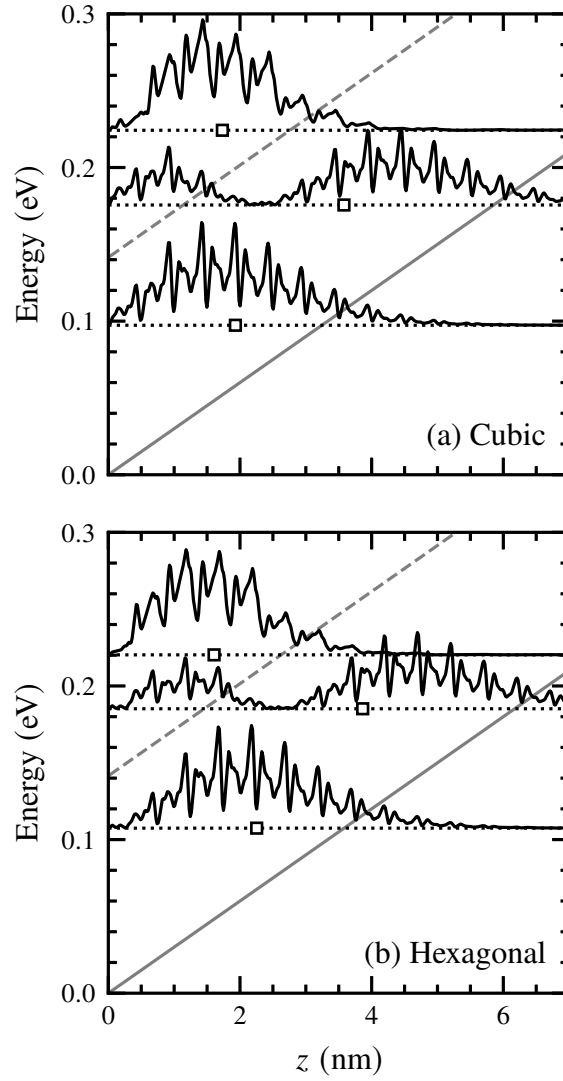


図 4.4: (a) Cubic 界面構造の場合と, (b) Hexagonal 界面構造の場合の, $F = 0.3 \text{ MV/cm}$ における 3 つの低エネルギーサブバンドの電子状態. 黒実線は $p_n(z)$, 黒点線は E_n , 四角のマーカーは $\langle z \rangle_n$ を表す. 灰色の実線と破線はそれぞれ $V_{\text{conf}}(z)$ と $V_{\text{conf}}(z) + \Delta E_{1-2}$ を表す.

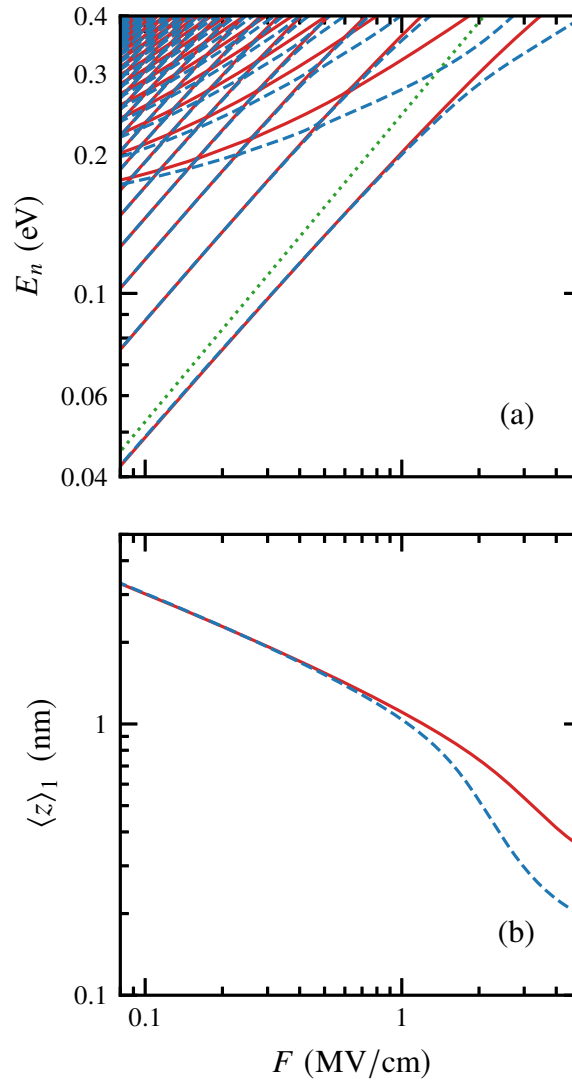


図 4.5: (a) E_n の F 依存性. 赤実線は E_n^{cub} を, 青破線はエネルギーの基準を eFz_d だけずらした $E_n^{\text{hex}} - eFz_d$ を示す. (b) $\langle z \rangle_1$ の F 依存性. 赤実線は $\langle z \rangle_1^{\text{cub}}$ を, 青破線は位置の基準を z_d だけずらした $\langle z \rangle_1^{\text{hex}} - z_d$ を示す. 比較のために, 下側伝導帯を記述する有効質量方程式を解いて得られる第 1 サブバンドのエネルギー ε_1^I を緑点線で (a) に示す.

4.3.2 高電界下の反転層電子状態

本節では，高電界領域 ($F > 1 \text{ MV/cm}$) における第 1 サブバンドの電子状態を解析する．図 4.6 に， $F = 2 \text{ MV/cm}$ での第 1 サブバンドの電子状態 $p_1(z)$ を示す．図 4.6(a) は Cubic 界面構造の場合，図 4.6(b) は Hexagonal 界面構造の場合を示す．図 4.6(a) では，存

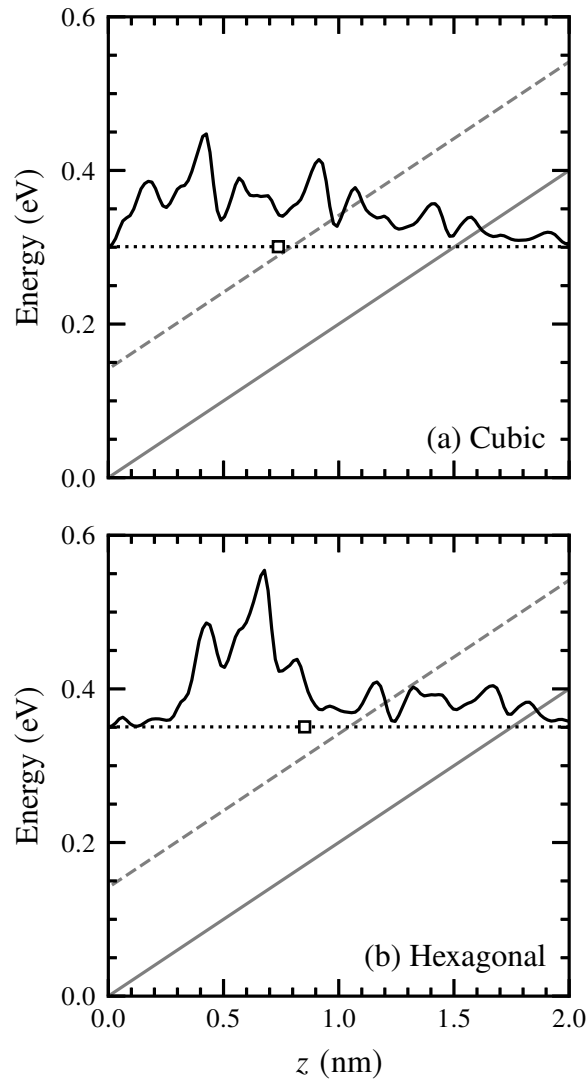


図 4.6: (a) Cubic 界面構造の場合と，(b) Hexagonal 界面構造の場合の， $F = 2.0 \text{ MV/cm}$ における第 1 サブバンドの電子状態．黒実線は $p_n(z)$ ，黒点線は E_n ，四角のマーカは $\langle z \rangle_n$ を表す．灰色の実線と破線はそれぞれ $V_{\text{conf}}(z)$ と $V_{\text{conf}}(z) + \Delta E_{1-2}$ を表す．Hexagonal 界面構造の場合に電子状態がより強く局在することがわかる．

在確率密度 $p_1^{\text{cub}}(z)$ が $V_{\text{conf}}(z)$ に閉じ込められた Airy 関数に類似した空間分布を示しており、この特徴は 3.3.3 節で述べた下側伝導帯に由来するサブバンドの特徴に一致する。また図 4.6(b) では界面から約 0.3 nm の領域で $p_1^{\text{hex}}(z)$ が小さくなっており、高電界条件下でも Hexagonal 界面構造であれば失活層が存在することがわかる。その一方で、電子状態が界面側に強く局在しており、Cubic 界面構造の場合や低電界条件下とは異なる空間分布を示している。この局在現象は、先行研究 [4] で Hexagonal 界面構造における高電界条件下での電子状態の局在化として報告されている。また、上述の高電界条件下でも失活層が維持されていることから、図 4.5(b) の $F > 1 \text{ MV/cm}$ で $\langle z \rangle_1^{\text{hex}} - z_d$ が $\langle z \rangle_1^{\text{cub}}$ を下回る現象は、Hexagonal 界面構造の場合に電子状態が界面側に局在することが原因であるとわかる。

続いて、Hexagonal 界面構造における高電界条件下での電子状態の局在化と、下側・上側の各伝導帯からの寄与の関係を議論する。図 4.7 に、各界面構造における C_1^L および C_1^U の F 依存性を示す。赤実線は Cubic 界面構造の結果を示し、青破線は Hexagonal 界

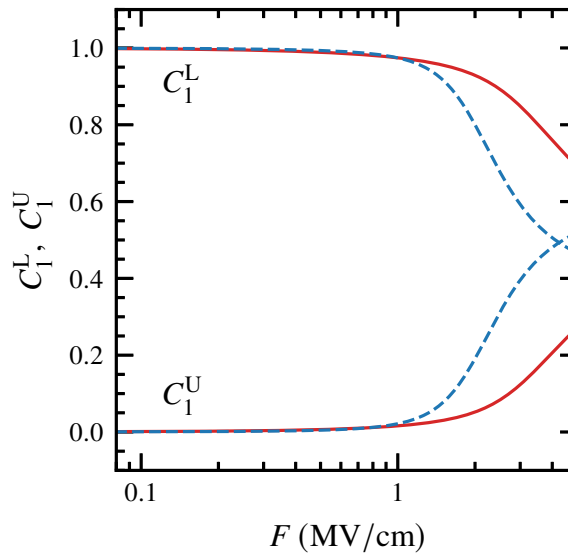


図 4.7: C_1^L と C_1^U の F 依存性. 赤実線と青破線はそれぞれ Cubic 界面構造と Hexagonal 界面構造の場合の結果を示す. Hexagonal 界面構造の場合は、比較的小さい F でも上側伝導帯からの寄与が大きくなることがわかる。

面構造の場合の結果を示す。図 4.7 からわかるように、 $F < 1 \text{ MV/cm}$ では C_1^L がほぼ 1 で下側伝導帯の寄与が支配的であるのに対して、 F が 1 MV/cm を超えると上側伝導帯の寄与が増加し始め、下側・上側の両伝導帯の電子状態の混成が進む。また、 C_1^L と C_1^U の F 依存性は界面構造ごとに異なる。例えば $F = 2 \text{ MV/cm}$ において、Cubic 界面構造では $C_1^U = 0.052$ と上側伝導帯の寄与が小さく、これは図 4.6(a) の $p_1(z)$ が下側伝導帯に由来するサブバンドの特徴を示すことと矛盾しない。一方で Hexagonal 界面構造では $C_1^U = 0.19$

と比較的大きな値をとる．この C_1^U の違いは，界面構造ごとのサブバンドエネルギーの違いから説明できる．図 4.2 において，上側伝導帯が支配的なサブバンドではサブバンドエネルギーの界面構造依存性が小さい．その一方で，下側伝導帯に支配される第 1 サブバンドでは失活層により $E_1^{\text{hex}} > E_1^{\text{cub}}$ となるため， E_1^{hex} は E_1^{cub} に比べて，上側伝導帯が支配的なサブバンドにエネルギー的に接近している．その結果，上側伝導帯の寄与が大きいサブバンドが第 2 サブバンドとなる高電界条件下で，Hexagonal 界面構造での第 1 サブバンドに上側伝導帯の寄与が現れやすく，Cubic 界面構造の場合より小さな F で C_1^U が大きな値を示す．逆に言えば，図 4.7 の低電界条件 ($F < 1 \text{ MV/cm}$) で第 1 サブバンドにおいて下側伝導帯の寄与が支配的になる理由は，上側伝導帯が支配的なサブバンドとのエネルギー差が大きいことにあると考えられる． C_1^U の増加に伴い，第 1 サブバンドの電子状態には上側伝導帯の特徴が現れると予想される．上側伝導帯に支配されたサブバンドの特徴は，3.3.3 節で述べたように， $V_{\text{conf}}(z) + \Delta E_{1-2}$ に閉じ込められた Airy 関数に類似した空間分布を示すことにある．図 4.6(b) の電子状態は上側伝導帯の寄与が比較的大きく ($C_1^U = 0.19$)， $V_{\text{conf}}(z) + \Delta E_{1-2} < E_1$ を満たす z 座標の範囲で大きな振幅を示す．このことから，上側伝導帯の寄与が大きくなることで， $p_1(z)$ は $V_{\text{conf}}(z) + \Delta E_{1-2} < E_1$ の領域に偏った分布を示すようになると考えられる．ここで，Cubic 界面構造の場合にも上側伝導帯の大きな寄与が現れる， $F = 4 \text{ MV/cm}$ での $p_1(z)$ を図 4.8 に示す．Cubic 界面構造の場合も Hexagonal 界面構造の場合も， $p_1(z)$ は $V_{\text{conf}}(z) + \Delta E_{1-2} < E_1$ の領域で大きな振幅を示しており，電子状態が界面側に局在していることがわかる．以上の結果から，上側伝導帯の寄与が増大することによって反転層電子状態が界面側に局在することが明らかになった．また，Hexagonal 界面構造では Cubic 界面構造の場合よりも第 1 サブバンドに上側伝導帯の寄与が現れやすく，電子状態が界面側に局在しやすいことが明らかになった．

4.3.3 有効質量近似法との比較

4.3.1 節での経験的擬ポテンシャル法による電子状態計算によって，低電界条件下では第 1 サブバンドの電子状態が下側伝導帯に支配されていることが明らかになった．本節では， $F < 1 \text{ MV/cm}$ での第 1 サブバンドのサブバンドエネルギーを，経験的擬ポテンシャル法の結果 (E_1^{cub} および $E_1^{\text{hex}} - eFz_d$) と下側伝導帯に対応する有効質量方程式の解 (ε_1^L) とで比較する．図 4.5(a) に，緑色の破線で ε_1^L の F 依存性を示す． ε_1^L が E_1^{cub} と $E_1^{\text{hex}} - eFz_d$ より大きいことは，第 3 章で述べたように，有効質量近似法においてバルクのバンド構造を放物線で近似することによりサブバンドエネルギーを過大に見積もることに起因する．ここでは，有効質量近似法の計算において有効質量を増加させる方向に補正することで， ε_1^L を E_1^{cub} と $E_1^{\text{hex}} - eFz_d$ に一致させることを考える．この補正のために増加した有効質量 $\tilde{m}^*$ を用いて，経験的擬ポテンシャル法で考慮されるフルバンド構造が第 1 サブバン

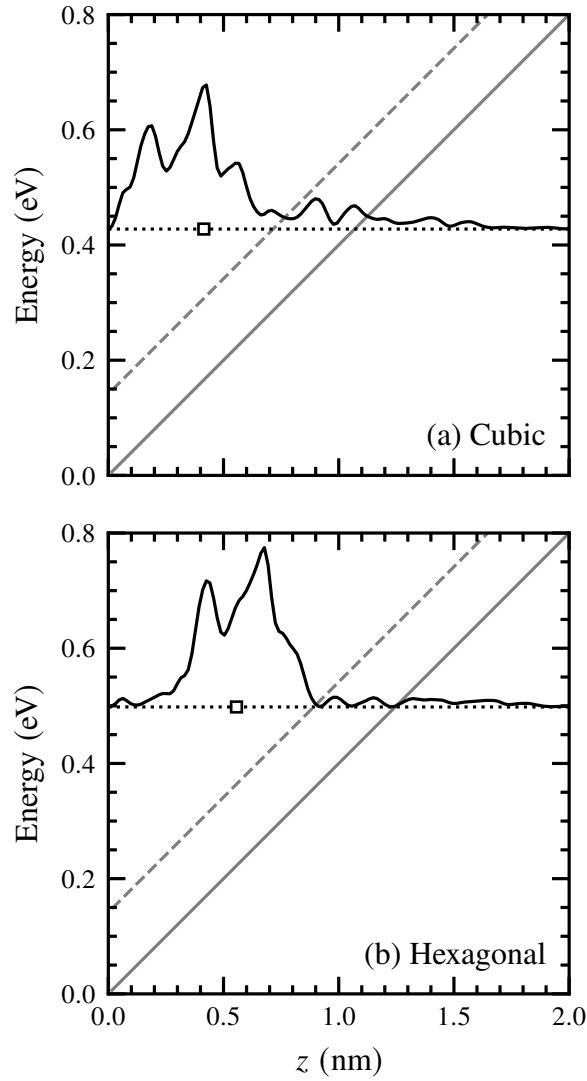


図 4.8: (a) Cubic 界面構造と, (b) Hexagonal 界面構造における, $F = 4 \text{ MV/cm}$ における第 1 サブバンドの電子状態. 黒実線は $p_n(z)$, 黒点線は E_n , 四角のマークは $\langle z \rangle_n$ を表す. 灰色の実線と破線はそれぞれ $V_{\text{conf}}(z)$ と $V_{\text{conf}}(z) + \Delta E_{1-2}$ を表す. どちらの電子状態も界面側に強く局在することがわかる.

ドのエネルギーに及ぼす影響を評価する. まず Cubic 界面構造の場合に着目して, ε_1^L が E_1^{cub} に一致するように m_{ML}^L をより大きな $\tilde{m}^*$ で置き換える. 2.4.5 節で述べたように, ε_1^L はバルク 4H-SiC の有効質量 m_{ML}^L から

$$\varepsilon_1^L = \left(\frac{\hbar^2 F^2}{2m_{\text{ML}}^L} \right)^{1/3} s_1 \quad (4.9)$$

で決定されるので,

$$E_1^{\text{cub}} = \left(\frac{\hbar^2 F^2}{2\tilde{m}^*} \right)^{1/3} s_1 \quad (4.10)$$

を満たす $\tilde{m}^*$ は

$$\tilde{m}^* = m_{\text{ML}}^L \left(\frac{\varepsilon_1^L}{E_1^{\text{cub}}} \right)^3 \quad (4.11)$$

で求められる. 一方, Hexagonal 界面構造の場合は, ε_1^L が $E_1^{\text{hex}} - eFz_d$ に一致するように $\tilde{m}^*$ を求める.

$$E_1^{\text{hex}} - eFz_d = \left(\frac{\hbar^2 F^2}{2\tilde{m}^*} \right)^{1/3} s_1 \quad (4.12)$$

として, $\tilde{m}^*$ を

$$\tilde{m}^* = m_{\text{ML}}^L \left(\frac{\varepsilon_1^L}{E_1^{\text{hex}} - eFz_d} \right)^3 \quad (4.13)$$

で求める. 図 4.9 に $\tilde{m}^*$ の F 依存性を示す. 赤実線は Cubic 界面構造における $\tilde{m}^*$ を, 青色の破線は Hexagonal 界面構造における $\tilde{m}^*$ をそれぞれ表す. 下側伝導帯の有効質量 $m_{\text{ML}}^L = 0.33 m_0$ も緑色の点線で示す. どちらの界面構造でも, F の増大に伴って $\tilde{m}^*$ は増加し, $F = 1 \text{ MV/cm}$ 付近で最大 $0.6 m_0$ ($\sim 2m_{\text{ML}}^L$) に達する. この結果は, 有効質量近似

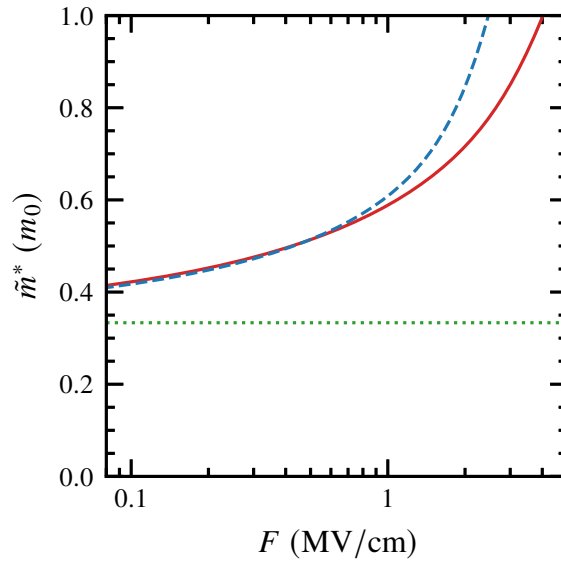


図 4.9: $\tilde{m}^*$ の F 依存性. 赤実線は, Cubic 界面構造の結果から式 (4.11) で計算されたもの. 青破線は, Hexagonal 界面構造の結果から式 (4.13) で計算されたもの. 比較のために, バルク 4H-SiC の有効質量 m_{ML}^L を緑点線で示す.

法に基づく計算では考慮されないバルク4H-SiCの〈0001〉方向の非放物線的なフルバンド構造がサブバンドエネルギーに及ぼす影響は、 $F = 1 \text{ MV/cm}$ では有効質量近似法において有効質量を約2倍に増加させることに匹敵するほど大きいことを示している。

4.4 まとめ

本章では、Cubic界面構造とHexagonal界面構造のそれぞれの反転層電子状態を経験的擬ポテンシャル法に基づき解析し、界面構造が反転層電子状態に及ぼす影響を議論した。また、有効質量近似法に基づいた反転層電子状態の計算も実施し、経験的擬ポテンシャル法の結果と比較した。

界面構造が反転層電子状態に及ぼす影響について、サブバンドエネルギー、電子状態と界面との距離、および下側・上側の両伝導帯の混成という3つの観点から詳細に検討した。その結果、閉じ込め方向の電界が小さい条件下では、界面構造の違いが電子状態に及ぼす影響を、電子を界面から約0.3 nm遠ざける失活層がHexagonal界面構造の場合にのみ存在するとする、有効質量近似法に基づくモデルにも導入できる簡潔な形で説明できることを明らかにした。

さらに、大きな電界の下では、有効質量近似法では考慮されてこなかった、下側伝導帯の電子状態と上側伝導帯の電子状態との混成が第1サブバンドの電子状態に生じ、この混成によって第1サブバンドの電子状態が界面近傍に強く局在することを示した。また、Hexagonal界面構造の場合には失活層の影響で第1サブバンドに上側伝導帯の寄与が現れやすいことを明らかにした。先行研究[4]ではこの反転層電子状態の界面側への局在がチャネル移動度の劣化に寄与する可能性が指摘されている。このことから、本研究では議論しなかった酸化膜側の原子配置や、界面の窒化による原子配置の再構成[11]などを考慮した様々な界面構造について同様の解析を行うことで、将来的に上側伝導帯の寄与が現れにくい（つまり反転層電子状態が界面側に局在しにくくチャネル移動度が劣化しにくい）界面構造を発見することができれば、これはチャネル移動度向上の一助となる。

最後に、経験的擬ポテンシャル法の結果と有効質量近似法の結果との間でサブバンドエネルギーを比較し、経験的擬ポテンシャル法でフルバンド構造を考慮することがサブバンドエネルギーに及ぼす影響を、有効質量近似法における有効質量の増加に換算して評価した。その結果、閉じ込め電界が 1 MV/cm の場合、フルバンド構造が第1サブバンドのサブバンドエネルギーに及ぼす影響は、有効質量近似法における有効質量を約2倍に増加させることに相当することが明らかになった。この結果は、4H-SiC MOS反転層の電子状態解析においてフルバンド構造を考慮することの重要性と、有効質量近似法での計算における有効質量の補正の必要性を示している。

参考文献

- [1] C. J. Kirkham and T. Ono, “First-principles study on interlayer states at the 4H-SiC/SiO₂ interface and the effect of oxygen-related defects,” *J. Phys. Soc. Jpn.*, **85**, 024701 (2016).
- [2] T. Ono, C. J. Kirkham, S. Saito, and Y. Oshima, “Theoretical and experimental investigation of the atomic and electronic structures at the 4H-SiC(0001)/SiO₂ interface,” *Phys. Rev. B*, **96**, 115311 (2017).
- [3] Y.-I. Matsushita and A. Oshiyama, “A novel intrinsic interface state controlled by atomic stacking sequence at interfaces of SiC/SiO₂,” *Nano Lett.*, **17**, 6458 (2017).
- [4] H. Yoshioka, J.-I. Iwata, and Y.-I. Matsushita, “Atomic scale localization of Kohn–Sham wavefunction at SiO₂/4H-SiC interface under electric field, deviating from envelope function by effective mass approximation,” *Appl. Phys. Lett.*, **122**, 222104 (2023).
- [5] G. Pennington and N. Goldsman, “Self-consistent calculations for n-type hexagonal SiC inversion layers,” *J. Appl. Phys.*, **95**, 4223 (2004).
- [6] T. Ohashi, R. Iijima, and H. Yano, “Dominant scattering mechanism in SiC MOSFET: comparative study of the universal mobility and the theoretically calculated channel mobility,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, **59**, 034003 (2020).
- [7] M. Noguchi, T. Iwamatsu, H. Amishiro, H. Watanabe, K. Kita, and N. Miura, “Coulomb-limited mobility in 4H-SiC MOS inversion layer as a function of inversion-carrier average distance from MOS interface,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, **59**, 051006 (2020).
- [8] 野口 宗隆, “4H-SiC MOSFET の反転層における電子移動度評価とキャリア散乱機構モデルの研究,” 博士論文, 東京大学 (2023).
- [9] K. Tachiki, Y. Nishiya, J.-I. Iwata, and Y.-I. Matsushita, “Effect of nitrogen introduced at the SiC/SiO₂ interface and SiC side on the electronic states by first-principles calculation,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, **62**, 061005 (2023).
- [10] S. Nagamizo, H. Tanaka, and N. Mori, “Impact of interface structure on electronic states in 4H-SiC inversion layer,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, **64**, 01SP02 (2025).
- [11] T. Shirasawa, K. Hayashi, S. Mizuno, S. Tanaka, K. Nakatsuji, F. Komori, and H. Tochi-hara, “Epitaxial silicon oxynitride layer on a 6H-SiC (0001) surface,” *Phys. Rev. Lett.*, **98**, 136105 (2007).

第 5 章

自己無撞着計算による反転層電子状態の解析

5.1 はじめに

これまでの第 3 章と第 4 章では，閉じ込めポテンシャル $V_{\text{conf}}(z)$ として三角ポテンシャルを適用し，反転層内の個々の電子状態に着目して議論を進めてきた．本章では，シュレディンガー・ポアソン方程式を自己無撞着計算で解くことで，より現実的な $V_{\text{conf}}(z)$ と反転層電子状態を得るとともに，反転層電子の空間分布についても計算し解析する．第 1 章で述べたように，反転層の Hall 移動度を計測した研究 [1–3] では反転層電子の面密度や反転層電子と界面との距離が Hall 移動度の増減に関係することが報告されている．本研究では，経験的擬ポテンシャル法に基づく反転層の自己無撞着計算の結果と，有効質量近似法に基づく自己無撞着計算の結果とで，反転層電子の面密度や反転層電子と界面の距離を比較する．その結果から，経験的擬ポテンシャル法に基づき計算された反転層電子状態は，有効質量近似法で得られる反転層電子状態に比べて Hall 移動度の制限を受けやすい空間分布を持つことを示す．

自己無撞着計算により得られる $V_{\text{conf}}(z)$ の模式図を図 5.1 に示す． $0 \leq z \leq L_A$ の領域に密度 N_A で均一に分布するイオン化アクセプタを仮定する． $0 \leq z \leq L$ ($L \sim 10 \text{ nm}$) の領域内でのみシュレディンガー方程式を解き，その外の領域では反転層電子状態の波動関数は 0 であるものとする． $z \geq L_A$ で $V_{\text{conf}}(z)$ は一定であるものとして，エネルギーの基準を $V_{\text{conf}}(z = L_A)$ にとる．フェルミエネルギー E_F は，SiC に添加されるアルミニウムのイオン化エネルギーが 200 meV 程度 [4] であることと 4H-SiC のバンドギャップが 3.26 eV [5] であることを参考に， $E_F = -3.0 \text{ eV}$ ($\sim 0.2 \text{ eV} - 3.26 \text{ eV}$) とする．計算条件として様々な表面ポテンシャル $\phi_S = -V_{\text{conf}}(z = 0)/e$ の値を与え，各 ϕ_S に対応する $V_{\text{conf}}(z)$ の自己無撞着解を得る．

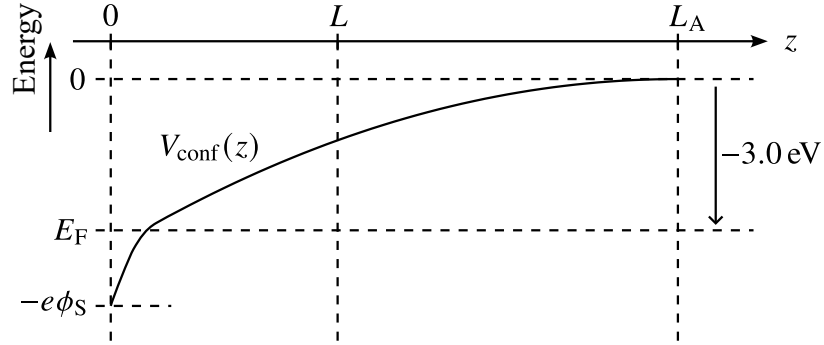


図 5.1: 閉じ込めポテンシャル $V_{\text{conf}}(z)$ の模式図. $0 < z < L_A$ の領域に存在するイオン化アクセプタ密度と $0 < z < L$ ($L \sim 10 \text{ nm}$) の領域に存在する反転層電子密度を電荷密度項とするポアソン方程式の解が $V_{\text{conf}}(z)$ となる.

5.2 シュレディンガー・ポアソン方程式

反転層を記述するシュレディンガー方程式 [式 (2.29)] と境界条件 [式 (2.26)] を再度以下に示す.

$$[H_B + V_{\text{conf}}(z)] \Psi_{n,k_\perp}(\mathbf{r}) = E_{n,k_\perp} \Psi_{n,k_\perp}(\mathbf{r}) \quad (5.1)$$

$$\Psi_{n,k_\perp}(z=0) = 0 \quad \Psi_{n,k_\perp}(z=L) = 0 \quad (5.2)$$

ここでは, 式 (5.1) および式 (5.2) と以下の 5.2.1 節で示すポアソン方程式とを連立したシュレディンガー・ポアソン方程式を解くことで, 閉じ込めポテンシャル $V_{\text{conf}}(z)$ や反転層電子状態 $E_{n,k_\perp}$, $\Psi_{n,k_\perp}(\mathbf{r})$ に加えて, 反転層電子の空間分布などを自己無撞着的に決定する.

5.2.1 ポアソン方程式の解

閉じ込めポテンシャル $V_{\text{conf}}(z)$ は, ポアソン方程式の解として以下で求められる. なお, 計算条件として, 反転層の ϕ_S の他に, 温度 T とイオン化アクセプタ密度 N_A が与えられる.

反転層電子が成す電荷密度分布を $\rho_e(z)$ とおく. $\rho_e(z)$ は式 (5.1) と式 (5.2) の解

$E_{n,k_\perp}, \Psi_{n,k_\perp}(\mathbf{r})$ と以下の関係にある.

$$\rho_e(z) = -e \int dE f(E - E_F) g(E, z) \quad (5.3)$$

$$f(E) = \left[1 + \exp\left(\frac{E}{k_B T}\right) \right]^{-1} \quad (5.4)$$

$$g(E, z) = g_s \sum_n \frac{1}{4\pi^2} \int d\mathbf{k}_\perp \left[\delta(E - E_{n,k_\perp}) \frac{1}{\Omega_s} \int_{\Omega_s} dx dy |\Psi_{n,k_\perp}(\mathbf{r})|^2 \right] \quad (5.5)$$

ここで, 関数 $f(E)$ はフェルミ・ディラック分布関数であり k_B はボルツマン定数を表す. また, $g(E, z)$ は式 (2.27) にも示した局所状態密度 LDOS である. $\rho_e(z)$ に対して以下のポアソン方程式

$$\frac{d^2}{dz^2} \left(\frac{V_e(z)}{-e} \right) = -\frac{\rho_e(z)}{\epsilon_0 \kappa_{4H-SiC}} \quad (5.6)$$

$$V_e(z = L) = 0 \quad \frac{d}{dz} V_e(z = L) = 0 \quad (5.7)$$

を解いて得られる静電ポテンシャルを $V_e(z)$ と置く. ここで, ϵ_0 は真空の誘電率であり, κ_{4H-SiC} は 4H-SiC の c 軸方向の比誘電率 10.32 [4] である. 一方で, イオン化アクセプタが成す電荷密度分布を $\rho_A(z)$ とする. 界面 ($z = 0$) から幅 L_A の領域で密度 N_A のイオン化アクセプタが存在するので,

$$\rho_A(z) = \begin{cases} -eN_A & (0 < z < L_A) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (5.8)$$

となる. $\rho_A(z)$ に対して以下のポアソン方程式

$$\frac{d^2}{dz^2} \left(\frac{V_A(z)}{-e} \right) = -\frac{\rho_A(z)}{\epsilon_0 \kappa_{4H-SiC}} \quad (5.9)$$

$$V_A(z = L_A) = 0, \quad \frac{d}{dz} V_A(z = L_A) = 0 \quad (5.10)$$

を解いて得られる静電ポテンシャルを $V_A(z)$ と置く. 式 (5.9) と式 (5.10) は解析的に解くことができ, $V_A(z)$ の解析解は以下になる.

$$V_A(z) = \begin{cases} -\frac{1}{2} \frac{e^2 N_A}{\epsilon_0 \kappa_{4H-SiC}} (L_A - z)^2 & (0 < z < L_A) \\ 0 & (L_A \leq z) \end{cases} \quad (5.11)$$

$V_e(z)$ と $V_A(z)$ の和で $V_{\text{conf}}(z) (= V_e(z) + V_A(z))$ を定義する. 計算条件として与えられる表面ポテンシャル ϕ_s の値に対して, $-e\phi_s = V_{\text{conf}}(0) = V_e(0) + V_A(0)$ が成り立つように L_A の値が次式で決定される.

$$L_A = \sqrt{\frac{2\epsilon_0 \kappa_{4H-SiC}}{e^2 N_A} [V_e(0) + e\phi_s]} \quad (5.12)$$

5.2.2 自己無撞着計算

本章の計算では、連立されたシュレディンガー方程式とポアソン方程式の両方を同時に矛盾なく満たす $V_{\text{conf}}(z)$, $E_{n,k_\perp}$, $\Psi_{n,k_\perp}(\mathbf{r})$ (および $\rho_e(z)$, $\rho_A(z)$, L_A) の自己無撞着解を求める必要がある。本研究では、自己無撞着計算を以下に手順を示す反復法で実装し、上述の自己無撞着解を得る。

自己無撞着計算において、 i 回目 (i は 1 以上の整数) の反復で得られる各種物理量を上付きの (i) で表す。適当な初期値として $\rho_e^{(0)}(z)$ を与える。各 i 回目の反復では、まず $\rho_e(z) = \rho_e^{(i-1)}(z)$ を仮定して式 (5.6) を解き、 $V_e^{(i)}(z)$ を得る。続いて、5.2.1 節の計算に沿って $L_A^{(i)}$, $\rho_A^{(i)}(z)$, $V_A^{(i)}(z)$ を決定し、 $V_{\text{conf}}^{(i)}(z)$ を得る。さらに、 $V_{\text{conf}}(z) = V_{\text{conf}}^{(i)}(z)$ を仮定してシュレディンガー方程式 [式 (5.1)] と境界条件 [式 (5.2)] から解 $E_{n,k_\perp}^{(i)}$, $\Psi_{n,k_\perp}^{(i)}(\mathbf{r})$ を得る。続いて、 $E_{n,k_\perp}^{(i)}$, $\Psi_{n,k_\perp}^{(i)}(\mathbf{r})$ から式 (5.3) に基づき得られる反転層電子の電子密度を求め、これを仮に $\tilde{\rho}_e^{(i)}(z)$ とおく。ここで、 $\rho_e^{(i)}(z) = \tilde{\rho}_e^{(i)}(z)$ とはせず、自己無撞着計算の収束性向上のために単純混合法 [6] を採用して、次式で $\rho_e^{(i)}(z)$ を決定する。

$$\rho_e^{(i)}(z) = \alpha \tilde{\rho}_e^{(i)}(z) + (1 - \alpha) \rho_e^{(i-1)}(z) \quad (5.13)$$

α は混合比 ($0 \leq \alpha \leq 1$) であり、本計算では $\alpha = 0.1$ とした。以上で i 回目の反復が終了し、以下の収束条件が満たされていないならば $i + 1$ 回目の反復に入る。

$$\sqrt{\frac{1}{L} \int_0^L dz \left[\frac{\rho_e^{(i-1)}(z) - \tilde{\rho}_e^{(i)}(z)}{|\tilde{\rho}_e^{(i)}(z)|} \right]^2} < \epsilon \quad (5.14)$$

ここで ϵ は許容誤差であり、本研究では $\epsilon = 1 \times 10^{-5}$ とする。

なお比較のために、以下に再度示す有効質量方程式 [式 (2.31) と式 (2.32)] および境界条件を 5.2.1 節のポアソン方程式と連立して、有効質量近似法に基づく反転層電子状態の自己無撞着計算も実施する。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_{\text{ML}}^L} \frac{d^2}{dz^2} + V_{\text{conf}}(z) \right] \xi_n^L(z) = \varepsilon_n^L \xi_n^L(z) \quad (5.15)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_{\text{ML}}^U} \frac{d^2}{dz^2} + V_{\text{conf}}(z) + \Delta E_{1-2} \right] \xi_n^U(z) = \varepsilon_n^U \xi_n^U(z) \quad (5.16)$$

$$\xi_n^L(z=0) = 0, \quad \xi_n^L(z=L) = 0 \quad (5.17)$$

$$\xi_n^U(z=0) = 0, \quad \xi_n^U(z=L) = 0 \quad (5.18)$$

5.3 シミュレーション結果

$T = 300 \text{ K}$, $N_A = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ とし, 様々な ϕ_S に対して自己無撞着計算を行った. 図 5.2 に, $\phi_S = 3.2 \text{ V}$ での局所状態密度分布 $g(E, z)$ を示す. 図 5.2(a) は Cubic 界面構造, 図 5.2(b) は Hexagonal 界面構造の場合の結果を示す. 閉じ込め電界のない場合 (図 2.15)

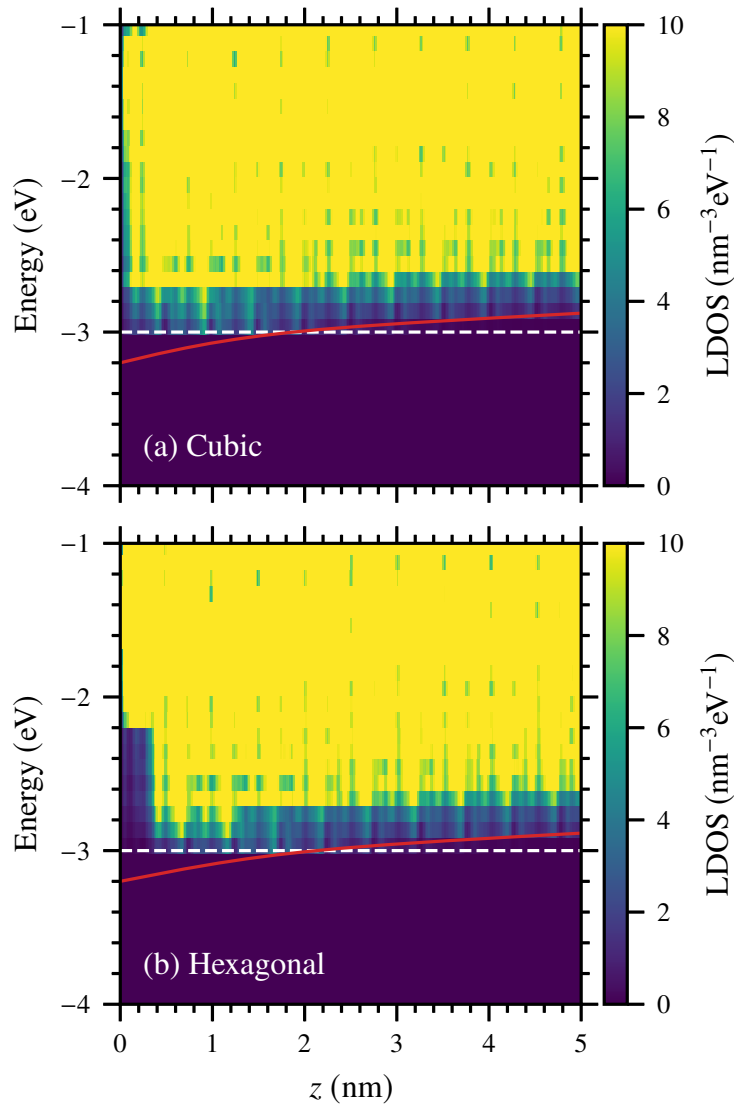


図 5.2: $\phi_S = 3.2 \text{ V}$ として自己無撞着計算によって得られた LDOS. (a) と (b) はそれぞれ Cubic 界面構造と Hexagonal 界面構造の場合の結果を示す. 赤線は $V_{\text{conf}}(z)$ を示す. 白破線はフェルミレベル $E_F = -3.0 \text{ eV}$ を示す. Hexagonal 界面構造の場合の界面近傍での伝導帯底エネルギーの増加が, 界面に閉じ込められた電子にも生じることがわかる.

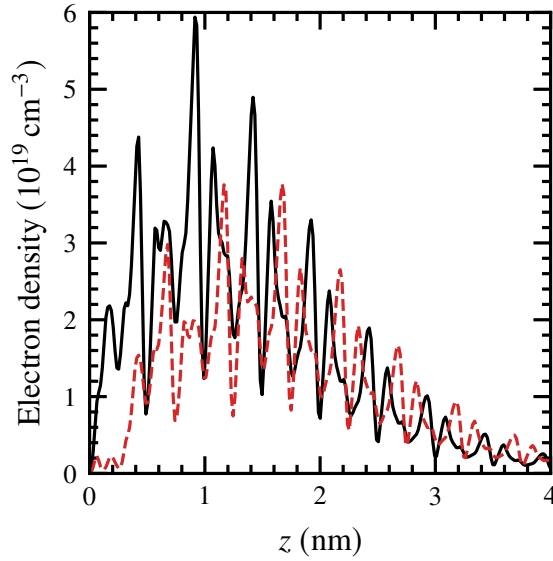


図 5.3: $\phi_S = 3.2 \text{ eV}$ での反転層電子の z 軸方向の密度分布 $n_e(z)$. 黒実線と赤破線はそれぞれ Cubic 界面構造と Hexagonal 界面構造の場合の結果を示す. Hexagonal 界面構造の場合に幅 $z_d = 0.33 \text{ nm}$ 程度の失活層の存在が電子密度分布にも現れることがわかる.

と同様に, 反転層中でも, Hexagonal 界面構造の場合に界面近傍の伝導帯底のエネルギーが増加することがわかる. 反転層電子の z 軸方向の密度分布を $n_e(z) = -\rho_e(z)/e$ とおく. 図 5.3 に $\phi_S = 3.2 \text{ V}$ での $n_e(z)$ を示す. 第 4 章で示した $V_{\text{conf}}(z)$ を三角ポテンシャルとした場合の反転層電子状態 (図 4.4) と同様に, Hexagonal 界面構造の場合に界面から z_d ($= 0.33 \text{ nm}$) 程度の幅の領域に $n_e(z)$ の小さい領域が存在することがわかる. 反転層電子の位置期待値 $\langle z \rangle$ (すなわち界面と反転層電子との距離の期待値) を

$$\langle z \rangle = \frac{\int_0^L dz z n_e(z)}{\int_0^L dz n_e(z)} \quad (5.19)$$

で定義し, それぞれの界面構造で $\langle z \rangle$ を計算し比較する. 図 5.4 に $\langle z \rangle$ の ϕ_S 依存性を示す. 黒実線は Cubic 界面構造の場合, 赤破線は Hexagonal 界面構造の場合の結果を示す. また, 青点線は有効質量近似法に基づいて計算された $\langle z \rangle$ を示す. 図 5.4 より, いずれの ϕ_S でも, Hexagonal 界面構造では Cubic 界面構造より z_d 程度大きな $\langle z \rangle$ を維持していることがわかる. この結果は, 第 4 章で述べた, 界面近傍への電子の侵入を阻む失活層の概念が, 自己無撞着計算を経て得られる反転層電子の空間分布に対しても有効であることを示す. また, 有効質量近似法の結果は経験的擬ポテンシャル法で記述された Cubic 界面構造の結果に比べて反転層電子の位置期待値を 0.4 nm 以上大きく見積もることがわかる. この結果は, 有効質量近似法においてサブバンドエネルギーが過大に評価されることで閉

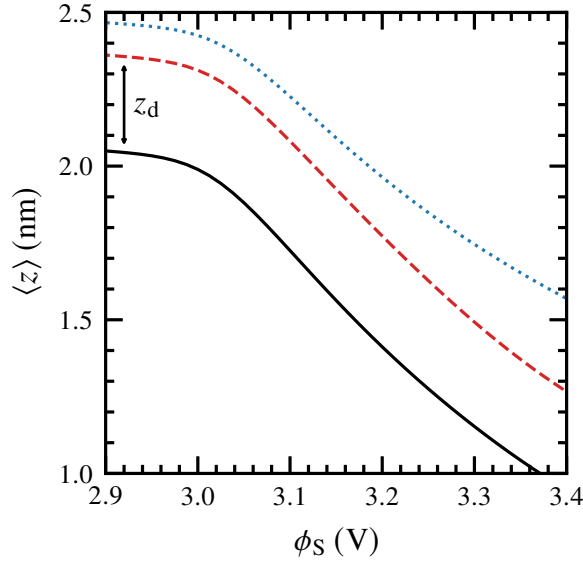


図 5.4: 反転層電子の位置期待値 $\langle z \rangle$ の表面ポテンシャル ϕ_s 依存性. 黒実線は Cubic 界面構造の場合, 赤破線は Hexagonal 界面構造の場合の結果を示す. 青点線は有効質量近似法に基づく計算の結果を示す. いずれの ϕ_s においても, Cubic 界面構造と Hexagonal 界面構造の場合で $\langle z \rangle$ が z_d 程度異なる. また, 有効質量近似法の結果は経験的擬ポテンシャル法の結果に比べて反転層電子の位置期待値を大きく見積もることがわかる.

じ込めポテンシャルによる実質的な閉じ込め幅が増加することに起因する.

反転層電子の面密度 N_S を

$$N_S = \int_0^L dz n_e(z) \quad (5.20)$$

で定義し, N_S の ϕ_s 依存性を図 5.5 に示す. 黒実線は Cubic 界面構造の場合, 赤破線は Hexagonal 界面構造の場合の結果を示す. また, 青点線で有効質量近似法に基づいて計算された N_S を示す. それぞれの図は N_S を線形目盛と対数目盛で示す. Cubic 界面構造の結果と比較して, 有効質量近似法の結果は約 0.6 倍と N_S を大幅に小さく見積もることがわかった. この結果から, 反転層電子の面密度の見積もりにおいては, 経験的擬ポテンシャル法のような原子論的でフルバンド構造を考慮できるモデルの採用が重要であることが示唆される. また, Cubic 界面構造の結果と比較して, Hexagonal 界面構造の場合は約 0.7 倍の小さな N_S を示しており, 界面構造を考慮した計算の重要性が示唆される. 図 5.6 に第 1 サブバンドのサブバンドエネルギー E_1 の ϕ_s 依存性を示す. 図 5.6 において, Cubic 界面構造 (黒実線) の結果と比べて, Hexagonal 界面構造の結果 (赤破線) と有効質量近似法の結果 (青点線) では E_1 が大きく, 上述の小さな N_S が大きな E_1 に由来することがわかる. なお, Hexagonal 界面構造の結果と有効質量近似法の結果で E_1 がほぼ

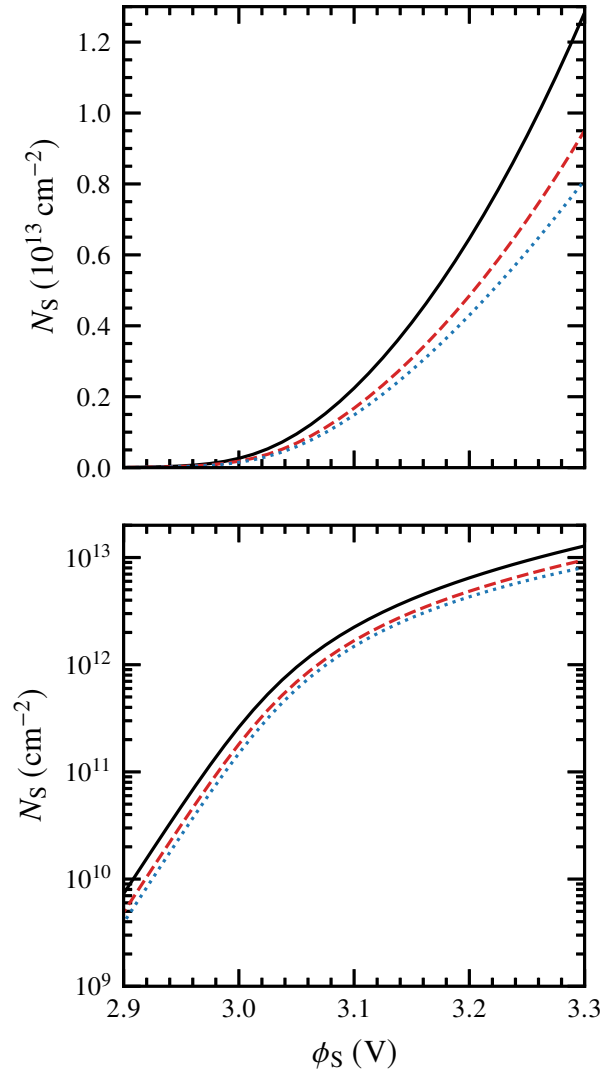


図 5.5: 反転層電子の面密度 N_S の ϕ_S 依存性. 黒実線と赤破線はそれぞれ Cubic 界面構造と Hexagonal 界面構造の場合の結果を示す. 青点線は有効質量近似法に基づく計算の結果を示す. それぞれの図は N_S を線形目盛と対数目盛で示す. 有効質量近似法の結果は Cubic 界面構造の結果の約 0.6 倍の電子密度を示す. また, Cubic 界面構造の結果に比べて, Hexagonal 界面構造の結果は約 0.7 倍の電子密度を示す.

同じ値を示しているが, それぞれ異なる原理で Cubic 界面構造の結果より大きな E_1 を示していることに注意が必要である. Hexagonal 界面構造の場合は, 第4章で述べた失活層の存在から, 閉じ込めポテンシャル $V_{\text{conf}}(z)$ の底が位置・エネルギーともにずれることで E_1 が増加している. 一方で, 有効質量近似法に基づく計算では, 第3章で述べたようにバルクのバンド構造を放物線近似すること起因して E_1 が大きく見積もられている.

次に, $\langle z \rangle$ および N_S と反転層電子の移動度の関係について議論する. 4H-SiC 反転層電

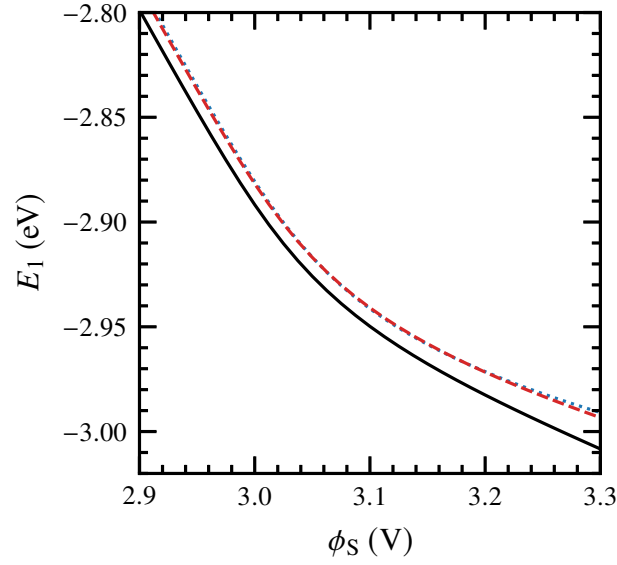


図 5.6: 第 1 サブバンドのサブバンドエネルギー E_1 の ϕ_S 依存性. 黒実線は Cubic 界面構造の場合, 赤破線は Hexagonal 界面構造の場合の結果を示す. 青点線は有効質量近似法に基づく計算の結果を示す.

子の Hall 移動度 μ_{Hall} を実験的に計測したうえで反転層電子と界面の距離の期待値を有効質量近似法に基づく電子状態計算を用いて評価した先行研究 [3, 7] では, 一定の N_S の下で逆基板バイアスの効果 [8] により $\langle z \rangle$ を小さくすることで, μ_{Hall} が小さくなることが報告されている. 本研究で得られた N_S と $\langle z \rangle$ の関係を図 5.7 に示す. 黒実線は Cubic 界面構造の場合, 赤破線は Hexagonal 界面構造の場合の結果を示す. 青点線は有効質量近似法に基づく計算の結果を示す. 経験的擬ポテンシャル法でのどちらの界面構造の結果も, 有効質量近似法の結果より小さな $\langle z \rangle$ を示している. 前述の先行研究 [3, 7] では, 界面から電子が 1 nm 離れるたびに μ_{Hall} が 2.7 倍前後に増加する結果が示されている. 仮に電子と界面との距離が 0.3 nm 減少する場合を考えると, $2.7^{-0.3} \sim 0.7$ と, μ_{Hall} が 30% 程度減少すると予想される. また, 経験的擬ポテンシャル法で得られた反転層電子状態を電子輸送計算に導入する場合, 有効質量近似法に基づく従来の電子輸送計算の結果 [9] に比べて小さな μ_{Hall} が得られることが予想される.

5.4 まとめ

本章では, シュレディンガー・ポアソン方程式を自己無撞着計算で解くことで, 反転層電子の空間分布を計算し解析した. この際, 経験的擬ポテンシャル法と有効質量近似法のそれぞれで自己無撞着計算を行い, その結果を比較した. 経験的擬ポテンシャル法の結果から, 界面構造ごとに界面と反転層電子との距離の期待値 $\langle z \rangle$ が異なることが示された.

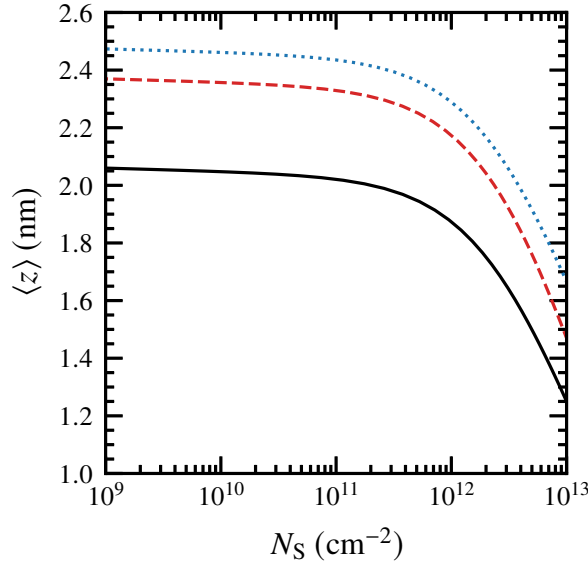


図 5.7: $\langle z \rangle$ の N_S 依存性. 黒実線と赤破線は経験的擬ポテンシャルに基づき計算された Cubic 界面構造と Hexagonal 界面構造の場合の結果をそれぞれ示す. 青点線は有効質量近似法に基づく計算の結果を示す. 経験的擬ポテンシャル法の結果はより小さな $\langle z \rangle$ を示し, これは界面近傍の散乱源による移動度の制限が従来予測より大きいことを示唆する.

この距離の差は失活層の幅 $z_d = 0.33$ nm 程度で, 表面ポテンシャル ϕ_s の大小に依らず維持された. この結果は, 第 4 章で示した失活層の影響が, 自己無撞着計算を経て計算される反転層電子密度分布にも現れることを示している. また, $\langle z \rangle$ を経験的擬ポテンシャル法の結果と有効質量近似法の結果とで比較したところ, 有効質量近似法では $\langle z \rangle$ を大きく見積もることが示された. これに加えて, 有効質量近似法に基づく計算では, 反転層電子の面密度を, 経験的擬ポテンシャル法の結果 (Cubic 界面構造の場合) と比べて, 表面ポテンシャルが同じ場合に 0.6 倍程度に小さく見積もることがわかった. これは有効質量近似で無視されたバルク 4H-SiC の非放物線的なバンド構造に起因する現象であり, フルバンド構造を考慮した計算の重要性を示している. また経験的擬ポテンシャル法の結果の中でも, 表面ポテンシャルが同じ場合に Hexagonal 界面構造では Cubic 界面構造の場合より反転層電子の面密度が約 0.7 倍と小さく見積もられた. このことから, 界面構造を考慮した計算もまた重要であることが示された. さらに, 経験的擬ポテンシャル法の結果と有効質量近似法の結果との間で反転層電子の面密度を揃えて $\langle z \rangle$ を比較したところ, 経験的擬ポテンシャル法の結果ではより小さな $\langle z \rangle$ が得られた. この結果から, 有効質量近似法で計算された反転層電子状態を用いる従来の電子輸送計算では, 界面近傍の散乱源による移動度の制限を過少に見積もっている可能性が示唆された. 将来的に, 経験的擬ポテンシャル法のようなフルバンド構造を考慮できる原子論的な手法で計算された反転層電子状

態を 4H-SiC 反転層の電子輸送計算に適用することで、4H-SiC 反転層における散乱源をより高精度に分離・同定することが可能になると期待される。

参考文献

- [1] M. Noguchi, T. Iwamatsu, H. Amishiro, H. Watanabe, N. Miura, K. Kita, and S. Yamakawa, “Carrier transport properties in inversion layer of Si-face 4H-SiC MOSFET with nitrided oxide,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, **58**, 031004 (2019).
- [2] M. Noguchi, T. Iwamatsu, H. Amishiro, H. Watanabe, K. Kita, and N. Miura, “Hall effect mobility in inversion layer of 4H-SiC MOSFETs with a thermally grown gate oxide,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, **58**, SBBD14 (2019).
- [3] M. Noguchi, T. Iwamatsu, H. Amishiro, H. Watanabe, K. Kita, and N. Miura, “Coulomb-limited mobility in 4H-SiC MOS inversion layer as a function of inversion-carrier average distance from MOS interface,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, **59**, 051006 (2020).
- [4] T. Kimoto and J. A. Cooper, *Fundamentals of Silicon Carbide Technology: Growth, Characterization, Devices and Applications*, John Wiley & Sons (2014).
- [5] 松波 弘之, 大谷 昇, 木本 恒暢, 中村 孝, 半導体 SiC 技術と応用, 日刊工業新聞社 (2011).
- [6] V. Eyert, “A comparative study on methods for convergence acceleration of iterative vector sequences,” *J. Comput. Phys.*, **124**, 271 (1996).
- [7] 野口 宗隆, “4H-SiC MOSFET の反転層における電子移動度評価とキャリア散乱機構モデルの研究,” 博士論文, 東京大学 (2023).
- [8] Y. Taur and T. H. Ning, *Fundamentals of modern VLSI devices*, Cambridge University Press (2021).
- [9] H. Tanaka and N. Mori, “Modeling of carrier scattering in MOS inversion layers with large density of interface states and simulation of electron Hall mobility in 4H-SiC MOSFETs,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, **59**, 031006 (2020).

第 6 章

コンパクトな経験的強結合近似モデルによるバルク 4H-SiC の伝導帯の記述

6.1 はじめに

半導体デバイスシミュレーションにおいて、高い精度と計算効率を兼ね備えたバンド構造モデルの開発は極めて重要である。IV 族半導体や III-V 族半導体などの立方晶結晶系においては、高精度かつコンパクトな強結合 (tight-binding) モデル [1, 2] (Vogl らが提唱した先駆的な sp^3s^* 強結合モデル [3] や Jancu の $sp^3d^5s^*$ 強結合モデル [4]) の開発により、フルバンド構造を考慮したモンテカルロシミュレータや量子輸送シミュレータが実現されたことが広く知られている [5–9]。パワー半導体デバイスの解析に向けて、炭化ケイ素 (SiC) などのワイドバンドギャップ半導体に対しても同様のモデルが必要とされている。しかし、SiC の産業的に重要な多形の一つである 4H-SiC [10–12] の場合、単位胞内に 8 個の原子が存在するため、ハミルトニアン行列が大規模化する。例えば、各原子について sp^3s^* 軌道を考慮する場合、ハミルトニアン行列のサイズは 40×40 となる。Bernstein ら [13] は、 sp^3d^5 基底を用いた Naval Research Laboratory (NRL) の非直交強結合近似法により、3C-SiC および 2H-SiC の価電子帯と伝導帯の両方を正確に再現できることを報告している。3C-SiC に対しては、 p^* 軌道 [14] とスピン軌道相互作用を組み込んだ強結合モデルも提案されている [15]。Laref と Laref [16] は、 sp^3s^* 基底を用いた半経験的強結合モデルの、種々の SiC 多形で利用可能なパラメータセットを構築し、これが 4H, 6H, および 8H-SiC におけるバンドギャップと有効質量を再現することを示した。これらのモデルは電子状態を比較的高精度に記述できるものの、輸送シミュレーションにおいてはよりコンパクトなモデルであることが望ましい。

強結合近似法では通常、原子軌道を基底関数として仮定する。しかしながら、松下ら [17–20] が示したように、4H-SiC の伝導帯は波動関数が格子点間に大きな振幅を持つ浮遊性を示す。したがって、4H-SiC の伝導帯を記述するためには、格子間に局在した軌道を基底として用いる方がより適切であると考えられる。そこで本研究 [21] では、このような基底を採用することで、4H-SiC の伝導帯の性質を正確に捉えるコンパクトな 4×4 ハミルトニアン行列を構築可能であることを示す。非平衡グリーン関数 (NEGF) 法 [22–27] を用いた量子輸送シミュレーションにおいて、この手法を率直に実装した場合、計算時間はハミルトニアン行列のサイズの 3 乗で増加する。したがって、ハミルトニアン行列のサイズを 10 分の 1 (40×40 から 4×4) に削減すれば、計算速度が約 1,000 倍向上することが期待される。

6.2 強結合ハミルトニアン

強結合ハミルトニアンの基底系を構築するにあたり、本研究では仮想的な s 軌道（以下「 s_f 軌道」と呼称）を格子間の位置に配置する。Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) [28–31] を用いて計算した 4H-SiC の下側伝導帯底の電子状態について、 $(11\bar{2}0)$ 面上の波動関数を図 6.1 に示す。白丸は Si 原子の位置を、黒丸は C 原子の位置をそれぞれ表している。波動関数の振幅が大きい領域（赤色および青緑色の領域）が、原子位置から離れた格子間の位置に現れる。本研究の強結合モデルでは 4H-SiC の単位胞あたり 4 つの s_f 軌道を仮定する。これらの軌道は、図 6.1 中で 0 から 3 までの添え字付き $\times$ 印で示された、波動関数の振幅が大きい位置に配置される。4H-SiC の基本格子ベクトルを

$$\mathbf{a}_1 = \left(\frac{1}{2}a, -\frac{\sqrt{3}}{2}a, 0 \right) \quad (6.1)$$

$$\mathbf{a}_2 = \left(\frac{1}{2}a, \frac{\sqrt{3}}{2}a, 0 \right) \quad (6.2)$$

$$\mathbf{a}_3 = (0, 0, c) \quad (6.3)$$

と定義すると、4 つの s_f 軌道の位置 τ_i ($i = 0, 1, 2, 3$) は

$$\tau_0 = \frac{2}{3}\mathbf{a}_1 + \frac{1}{3}\mathbf{a}_2 + \frac{1}{8}\mathbf{a}_3 \quad (6.4)$$

$$\tau_1 = \frac{2}{3}\mathbf{a}_1 + \frac{1}{3}\mathbf{a}_2 + \frac{3}{8}\mathbf{a}_3 \quad (6.5)$$

$$\tau_2 = \frac{1}{3}\mathbf{a}_1 + \frac{2}{3}\mathbf{a}_2 + \frac{5}{8}\mathbf{a}_3 \quad (6.6)$$

$$\tau_3 = \frac{1}{3}\mathbf{a}_1 + \frac{2}{3}\mathbf{a}_2 + \frac{7}{8}\mathbf{a}_3 \quad (6.7)$$

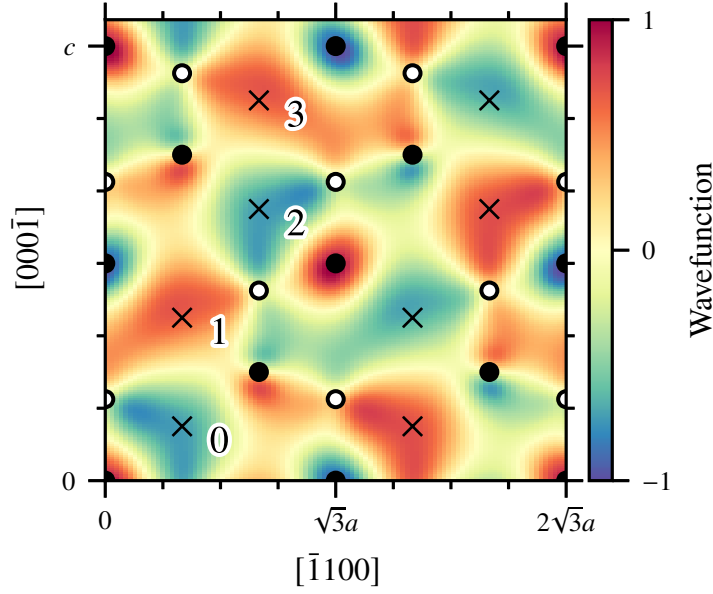


図 6.1: 第一原理計算により得た, 4H-SiC の下側伝導帯底における $(11\bar{2}0)$ 面上の波動関数. 白色の円は Si 原子の位置を, 黒色の円は C 原子の位置をそれぞれ表す. 波動関数が大きな振幅を示す領域 (赤色および青緑色の領域) は, 原子位置から離れた格子間の位置に現れる. 仮想的な s 軌道は, 波動関数が大きな振幅を示す $\times$ 印の位置に配置される.

で与えられる. ここで a と c はそれぞれ 4H-SiC の格子定数である. 全ての s_f 軌道の位置は $\mathbf{R} + \boldsymbol{\tau}_i$ で表され, ここで $\mathbf{R}$ は整数係数 ℓ_1, ℓ_2, ℓ_3 を持つ格子ベクトル $\mathbf{R} = \ell_1 \mathbf{a}_1 + \ell_2 \mathbf{a}_2 + \ell_3 \mathbf{a}_3$ で定義される. $\mathbf{R} + \boldsymbol{\tau}_i$ に位置する s_f 軌道と $\mathbf{R}' + \boldsymbol{\tau}_j$ に位置する別の s_f 軌道との間のハミルトニアン行列要素 (ホッピングエネルギー) は $V_{ij}(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$ で表記する. これらの表記法を用いると, 波数 $\mathbf{k}$ に対するハミルトニアン行列は以下のように表される:

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} V_{00}(\mathbf{k}) & V_{01}(\mathbf{k}) & V_{02}(\mathbf{k}) & V_{03}(\mathbf{k}) \\ V_{10}(\mathbf{k}) & V_{11}(\mathbf{k}) & V_{12}(\mathbf{k}) & V_{13}(\mathbf{k}) \\ V_{20}(\mathbf{k}) & V_{21}(\mathbf{k}) & V_{22}(\mathbf{k}) & V_{23}(\mathbf{k}) \\ V_{30}(\mathbf{k}) & V_{31}(\mathbf{k}) & V_{32}(\mathbf{k}) & V_{33}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (6.8)$$

ここで, 整数 $k, l (= 0, 1, 2, 3)$ に対して,

$$V_{kl}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{R}} V_{kl}(\mathbf{R}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}) \quad (6.9)$$

である.

6.3 本研究で提案する強結合モデル

ハミルトニアン行列要素を最適化することで，第一原理計算によるバンド構造に整合する2つの強結合モデル（モデル1とモデル2）を開発した．モデル1では7つの独立したフィッティングパラメータを使用し，下側伝導帯のみを精度良く再現できる．一方，モデル2では13の独立したフィッティングパラメータを採用し，下側伝導帯と上側伝導帯の両方を再現する．モデル1では，相互作用できる2つの s_f 軌道間の最大の距離を約 $\sqrt{2}a$ に制限している．これに対し，モデル2ではより長い距離（最大 c ）の相互作用を考慮している．図6.2に示す模式図に，モデル1とモデル2において相互作用が可能な s_f 軌道同士の距離を示す． $\times$ 印は s_f 軌道の位置を表す．4H-SiC の原子配置を図2.4(a)に示した鎖状構造で表す．モデル1において，赤い $\times$ 印の s_f 軌道と相互作用できるのは，半径約 $\sqrt{2}a$ の青い円の内側に存在する s_f 軌道のみである．モデル2においては，青い円の内側に加えて，赤矢印が指し示す s_f 軌道も相互作用できる．表6.1に最適化された強結合パラメータを示す．表中では，対角行列要素 $V_{ii}(\mathbf{R})$ について，オンサイトエネルギー $E_i (= V_{ii}(\mathbf{0}))$ とホッピングエネルギー $V_{ii}(\mathbf{R})$ ($\mathbf{R} \neq \mathbf{0}$) を分けて記載する．表6.1(b)に示したホッピングエネルギー値 $V(i, j, \mathbf{R})$ は代表的な値を選定したものである．一般の行列要素 $V_{kl}(\mathbf{R}')$ は，次のように系の対称性を考慮して導出する必要がある．特定の指数 i, j と格子ベクトル $\mathbf{R}$ の組を $(i, j, \mathbf{R})$ で表し，4H-SiC の対称性から等価な $(i, j, \mathbf{R})$ の集合を

$$S(i, j, \mathbf{R}) = \{(k, l, \mathbf{R}') \mid (k, l, \mathbf{R}') \approx (i, j, \mathbf{R})\} \quad (6.10)$$

と定義する．ここで $(k, l, \mathbf{R}') \approx (i, j, \mathbf{R})$ とは， $(k, l, \mathbf{R}')$ が $(i, j, \mathbf{R})$ と対称的に等価であることを意味する．対称的に等価であるとはつまり，4H-SiC の空間群 ($P6_3mc$) [32] にお

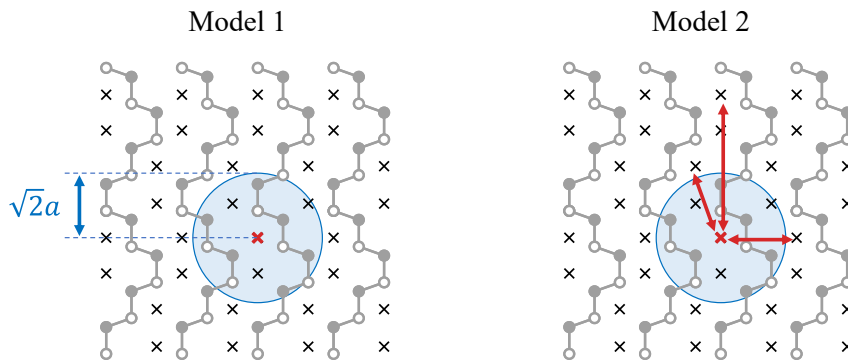


図 6.2: 強結合モデルの相互作用距離.

表 6.1: モデル 1 およびモデル 2 における強結合パラメータ. (a) オンサイトエネルギー E_i および (b) 代表的なホッピングエネルギー $V(i, j, \mathbf{R})$. 格子ベクトル $\mathbf{R} (= \ell_1 \mathbf{a}_1 + \ell_2 \mathbf{a}_2 + \ell_3 \mathbf{a}_3)$ は (ℓ_1, ℓ_2, ℓ_3) で表記される.

(a) オンサイトエネルギー E_i (eV)

	Model 1	Model 2
E_0, E_2	0	0
E_1, E_3	9.1835	4.7631

(b) 代表的なホッピングエネルギー $V(i, j, \mathbf{R})$ (eV)

i	j	$\mathbf{R}$	Model 1	Model 2
0	0	(1, 0, 0)	-0.0671	0.4738
0	0	(1, -1, 0)		0.0701
0	0	(0, 0, 1)		-0.2431
0	1	(0, 0, 0)	1.3685	1.2673
0	1	(1, 0, 0)	0.0113	0.0099
0	2	(0, 0, 0)		0.2870
1	1	(1, 0, 0)	-0.2665	-0.1725
1	1	(1, -1, 0)		0.8443
1	1	(0, 0, 1)		0.2254
1	2	(0, 0, 0)	1.0291	0.7420
1	2	(1, -1, 0)	-1.3253	-0.9513
1	3	(0, 0, 0)		1.1827

いて,

$$\mathbf{R}' + \boldsymbol{\tau}_k - \boldsymbol{\tau}_l = g(\mathbf{R} + \boldsymbol{\tau}_i - \boldsymbol{\tau}_j) \quad (6.11)$$

を満たす対称操作 g が存在することである. 例えば, $S(0, 0, (1, 0, 0))$ は

$$\begin{aligned} &\{(0, 0, (1, 0, 0)), (0, 0, (1, 1, 0)), (0, 0, (0, 1, 0)), \\ &(0, 0, (-1, 0, 0)), (0, 0, (-1, -1, 0)), (0, 0, (0, -1, 0)), \\ &(2, 2, (-1, 0, 0)), (2, 2, (-1, -1, 0)), (2, 2, (0, -1, 0)), \\ &(2, 2, (1, 0, 0)), (2, 2, (1, 1, 0)), (2, 2, (0, 1, 0))\}, \end{aligned} \quad (6.12)$$

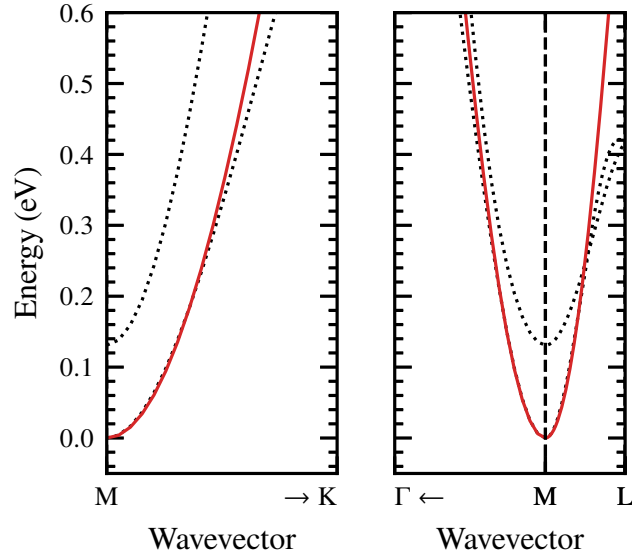


図 6.3: モデル 1 により得られるバルク 4H-SiC の伝導帯 (赤実線). 黒点線は第一原理計算の結果を示す. エネルギーは伝導帯底が 0 eV となるようにオフセットされている.

である. ここで格子ベクトル $\mathbf{R} (= \ell_1 \mathbf{a}_1 + \ell_2 \mathbf{a}_2 + \ell_3 \mathbf{a}_3)$ は (ℓ_1, ℓ_2, ℓ_3) で表記されている. 一般の行列要素 $V_{kl}(\mathbf{R}')$ は以下で与えられる.

$$V_{kl}(\mathbf{R}') = \begin{cases} V(i, j, \mathbf{R}) & \text{if there exists } (k, l, \mathbf{R}') \in S(i, j, \mathbf{R}) \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (6.13)$$

6.4 シミュレーション結果

6.4.1 バンド構造

図 6.3 および図 6.4 に, モデル 1 およびモデル 2 から得られたバンド構造をそれぞれ赤実線で示す. 黒点線は第一原理計算の結果を表す. どちらの計算でも, エネルギー軸は伝導帯底のエネルギーが 0 eV となるようにオフセットされている. 第 2 章で述べたように, 4H-SiC の伝導帯の大きな特徴は, 図中の黒破線で示される M-L 間のミニバンド様の構造 [33] の存在と, エネルギー差 (ΔE_{1-2}) の小さい 2 つの伝導帯底の存在 [34, 35] である. モデル 1 は下側伝導帯底を正確に再現している. しかしながら, 上側伝導帯底と M-L 間に観測されるミニバンド様の構造は再現できていない. これに対し, モデル 2 は 2 つの伝導帯底と M-L 間のミニバンド様の構造の両方を再現している.

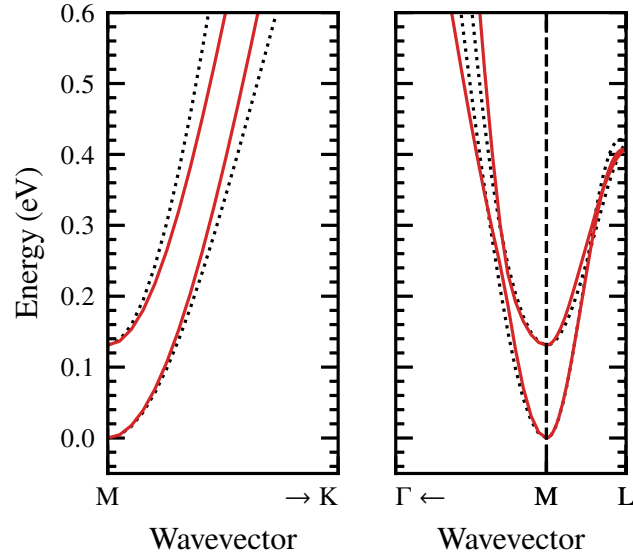


図 6.4: 図 6.3 と同様の図. ただし, 赤実線はモデル 2 により得られるバルク 4H-SiC の伝導帯を表す.

6.4.2 波動関数

波動関数の再現性を検証するため, 本研究では s_f 軌道の位置 (図 6.1 の $\times$ 印) における波動関数の符号に着目した. 第一原理計算で得られた下側伝導帯の波動関数 (図 6.1 を参照) を $\psi_L(\mathbf{r})$ とし, 上側伝導帯の波動関数を $\psi_U(\mathbf{r})$ とする. 図 6.5 に, $\psi_U(\mathbf{r})$ を示す. $\psi_L(\mathbf{r})$ と同様に, $\psi_U(\mathbf{r})$ についても波動関数が大きな振幅を示す領域は, 原子位置から離れた格子間の位置に現れる. 仮想的な s 軌道の位置 ($\times$ 印) は, $\psi_U(\mathbf{r})$ においても大きな振幅を示す位置と整合している. τ_i の位置における波動関数の符号を $s_{\alpha i} = \text{sgn}(\psi_{\alpha}(\tau_i))$ ($\alpha = L, U$) で表す. 下側伝導帯の場合, 図 6.1 に示すように $(s_{L0}, s_{L1}, s_{L2}, s_{L3}) = (-1, +1, -1, +1)$ となる. 上側伝導帯の場合, 図 6.5 に示すように $(s_{U0}, s_{U1}, s_{U2}, s_{U3}) = (+1, +1, -1, -1)$ である. モデル 1 およびモデル 2 から得られた強結合波動関数を表 6.2 に示す. 両モデルとも, 第一原理計算によって得られた波動関数の符号を正しく再現していることが確認できる.

以上の計算結果は, 電子状態の浮遊性を表現するための仮想的な s 軌道を導入することで, コンパクトな経験的強結合近似モデルによって 4H-SiC の伝導帯を適切に記述できることを実証している. このモデルでは, 基底関数系としてわずか 4 つの軌道と, 最大 13 個の強結合パラメータのみを要求する. この結果は, 電子状態の浮遊性という 4H-SiC の伝導帯の特性が極めて本質的かつ重要な役割を果たしていることを示している.

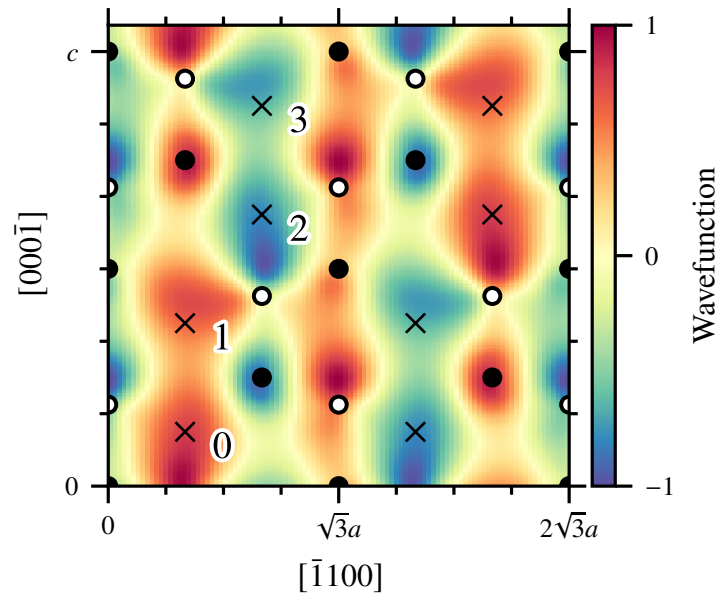


図 6.5: 第一原理計算により得た, 4H-SiC の上側伝導帯底における $(11\bar{2}0)$ 面上の波動関数. 白色の円は Si 原子の位置を, 黒色の円は C 原子の位置をそれぞれ表す. 波動関数が大きな振幅を示す領域 (赤色および青緑色の領域) は, 原子位置から離れた格子間の位置に現れる. 仮想的な s 軌道の位置 ($\times$ 印) は, 本図においても波動関数が大きな振幅を示す位置と整合している.

表 6.2: モデル 1 およびモデル 2 を用いて計算した伝導帯底 (下側伝導帯および上側伝導帯) における波動関数.

	Model 1	Model 2
ψ_{L0}	-0.633	-0.632
ψ_{L1}	0.315	0.317
ψ_{L2}	-0.633	-0.632
ψ_{L3}	0.315	0.317
ψ_{U0}		0.635
ψ_{U1}		0.311
ψ_{U2}		-0.635
ψ_{U3}		-0.311

6.5 まとめ

本章では、バルク 4H-SiC の伝導帯を記述する 2 つの強結合近似モデルを提案し、その有効性を実証した。これらのモデルはそれぞれモデル 1 およびモデル 2 と呼称され、原子サイトから離れた位置に存在する 4 つの仮想的な s 軌道のみから構成されている。この仮想的な s 軌道は、4H-SiC の伝導帯底の電子状態において波動関数が大きな振幅を示す位置に配置されている。これらのモデルは簡潔な構造でありながら、伝導帯を正確に再現するとともに、コンパクトな 4×4 の強結合ハミルトニアン行列を用いて極めて低い計算コストを実現する。

モデル 1 は 7 つの強結合パラメータのみを使用するにもかかわらず、4H-SiC の下側の伝導帯谷を正確に再現した。仮想的な s 軌道同士が相互作用できる距離が限られており ($\leq \sqrt{2}a$)、モデル 1 は上側伝導帯が実質的に影響しない輸送シミュレーションの分野に特に適している。例えば、第 4 章で示した第 1 サブバンドの電子状態が下側伝導帯から大きな寄与を受ける条件（閉じ込め電界 F が 1 MV/cm 以下）での電子状態と電子輸送特性のシミュレーションに活用できる。

これに対しモデル 2 は、4H-SiC 伝導帯の、2 つの伝導帯底のエネルギーギャップ ($\Delta E_{1,2}$)、M-L 方向に沿ったミニバンド様の構造、および下側・上側の両伝導帯底での波動関数の符号という、モデル 1 で再現されない特徴をも捉えた。この結果は 13 個の強結合パラメータのみを用いて達成された。

これらの結果は、4H-SiC の伝導帯における電子状態の浮遊性が、伝導帯を特徴づける本質的な特性であることを示している。

将来的に 4H-SiC 反転層の電子状態・電子輸送特性の解析に本研究で提案する強結合モデルを適用するには、まず本モデルを用いて酸化膜/4H-SiC 界面を記述する必要がある。第 2 章で説明し、第 4 章で注目した Cubic 界面構造と Hexagonal 界面構造との間での局所状態密度の差異は、4H-SiC の電子状態の浮遊性と内部チャネルによって説明される [20]。本強結合モデルで仮定した仮想的な s 軌道は、まさに浮遊電子状態と内部チャネルを表現するものであり、Cubic 界面構造と Hexagonal 界面構造の特徴を効率的に記述することが期待できる。また、酸化膜側の原子配置が酸化膜/4H-SiC 界面近傍の電子状態に及ぼす影響については、酸素原子などの大きな電気陰性度が界面近傍の浮遊電子状態に影響することによるものと予想されており [36, 37]、この現象についても本強結合モデルによる効率的な記述が期待できる。

参考文献

- [1] J. C. Slater and G. F. Koster, “Simplified LCAO method for the periodic potential problem,” *Phys. Rev.*, **94**, 1498 (1954).
- [2] W. A. Harrison, *Electronic Structure and the Properties of Solids: the physics of the chemical bond*, Dover Publications (1989).
- [3] P. Vogl, H. P. Hjalmarson, and J. D. Dow, “A semi-empirical tight-binding theory of the electronic structure of semiconductors,” *J. Phys. Chem. Solids.*, **44**, 365 (1983).
- [4] J.-M. Jancu, R. Scholz, F. Beltram, and F. Bassani, “Empirical *spds** tight-binding calculation for cubic semiconductors: General method and material parameters,” *Phys. Rev. B*, **57**, 6493 (1998).
- [5] R. Lake, G. Klimeck, R. C. Bowen, and D. Jovanovic, “Single and multiband modeling of quantum electron transport through layered semiconductor devices,” *J. Appl. Phys.*, **81**, 7845 (1997).
- [6] M. Luisier and G. Klimeck, “Atomistic full-band simulations of silicon nanowire transistors: Effects of electron-phonon scattering,” *Phys. Rev. B*, **80**, 155430 (2009).
- [7] G. Mil’nikov, N. Mori, and Y. Kamakura, “R-matrix method for quantum transport simulations in discrete systems,” *Phys. Rev. B*, **79**, 235337 (2009).
- [8] G. Mil’nikov, N. Mori, and Y. Kamakura, “Equivalent transport models in atomistic quantum wires,” *Phys. Rev. B*, **85**, 035317 (2012).
- [9] Y. Lee, J. Cao, and M. Luisier, “Atomistic simulation of nanoscale devices,” *IEEE Nanotechnol. Mag.*, **17**, 4 (2023).
- [10] J. A. Cooper, M. R. Melloch, R. Singh, A. Agarwal, and J. W. Palmour, “Status and prospects for SiC power MOSFETs,” *IEEE Trans. Electron Devices*, **49**, 658 (2002).
- [11] T. Kimoto and J. A. Cooper, *Fundamentals of Silicon Carbide Technology: Growth, Characterization, Devices and Applications*, John Wiley & Sons (2014).
- [12] T. Kimoto, “Material science and device physics in SiC technology for high-voltage power devices,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, **54**, 040103 (2015).
- [13] N. Bernstein, H. Gotsis, D. Papaconstantopoulos, and M. Mehl, “Tight-binding calculations of the band structure and total energies of the various polytypes of silicon carbide,” *Phys. Rev. B*, **71**, 075203 (2005).
- [14] M. Matos, “Electronic structure of several polytypes of SiC: A study of band dispersion from a semi-empirical approach,” *Physica B*, **324**, 15 (2002).
- [15] S. Kanai, T. Nishikawa, and S. Sato, “The *spds** $p^* + \Delta$ tight binding model for 3C-SiC,”

- Jpn. J. Appl. Phys., **63**, 040907 (2024).
- [16] A. Laref and S. Laref, “Electronic and optical properties of SiC polytypes using a transferable semi-empirical tight-binding model,” *Phys. Status Solidi B*, **245**, 89 (2008).
- [17] Y.-I. Matsushita, S. Furuya, and A. Oshiyama, “Floating electron states in covalent semiconductors,” *Phys. Rev. Lett.*, **108**, 246404 (2012).
- [18] Y.-I. Matsushita and A. Oshiyama, “Interstitial channels that control band gaps and effective masses in tetrahedrally bonded semiconductors,” *Phys. Rev. Lett.*, **112**, 136403 (2014).
- [19] Y.-I. Matsushita and A. Oshiyama, “Comprehensive study on band-gap variations in sp^3 -bonded semiconductors: Roles of electronic states floating in internal space,” *J. Phys. Soc. Jpn.*, **86**, 054702 (2017).
- [20] Y.-I. Matsushita and A. Oshiyama, “A novel intrinsic interface state controlled by atomic stacking sequence at interfaces of SiC/SiO₂,” *Nano Lett.*, **17**, 6458 (2017).
- [21] S. Nagamizo, H. Tanaka, and N. Mori, “Compact empirical tight-binding models for the conduction band of 4H-SiC considering the floating nature of electronic states,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, **64**, 080901 (2025).
- [22] L. P. Kadanoff, *Quantum Statistical Mechanics*, CRC Press (2018).
- [23] S. Datta, *Electronic transport in mesoscopic systems*, Cambridge University Press (1997).
- [24] M. Pourfath, *The non-equilibrium Green’s function method for nanoscale device simulation*, vol.3, Springer (2014).
- [25] S. Datta, *Quantum transport: atom to transistor*, Cambridge University Press (2005).
- [26] H. Haug, A.-P. Jauho, et al., *Quantum kinetics in transport and optics of semiconductors*, vol.2, Springer (2008).
- [27] M. Di Ventra, *Electrical transport in nanoscale systems*, Cambridge University Press (2008).
- [28] G. Kresse and J. Hafner, “Ab initio molecular dynamics for liquid metals,” *Phys. Rev. B*, **47**, 558 (1993).
- [29] G. Kresse and J. Hafner, “Ab initio molecular-dynamics simulation of the liquid-metal–amorphous-semiconductor transition in germanium,” *Phys. Rev. B*, **49**, 14251 (1994).
- [30] G. Kresse and J. Furthmüller, “Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set,” *Comput. Mater. Sci.*, **6**, 15 (1996).
- [31] G. Kresse and J. Furthmüller, “Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set,” *Phys. Rev. B*, **54**, 11169 (1996).
- [32] M. J. Mehl, D. Hicks, C. Toher, O. Levy, R. M. Hanson, G. Hart, and S. Curtarolo, “The

- AFLOW library of crystallographic prototypes: part 1,” *Comput. Mater. Sci.*, **136**, S1 (2017).
- [33] S.-i. Nakamura, H. Kumagai, T. Kimoto, and H. Matsunami, “Anisotropy in breakdown field of 4H-SiC,” *Appl. Phys. Lett.*, **80**, 3355 (2002).
- [34] C. Persson and U. Lindefelt, “Relativistic band structure calculation of cubic and hexagonal SiC polytypes,” *J. Appl. Phys.*, **82**, 5496 (1997).
- [35] H.-E. Nilsson, U. Sannemo, and C. S. Petersson, “Monte Carlo simulation of electron transport in 4H-SiC using a two-band model with multiple minima,” *J. Appl. Phys.*, **80**, 3365 (1996).
- [36] C. J. Kirkham and T. Ono, “First-principles study on interlayer states at the 4H-SiC/SiO₂ interface and the effect of oxygen-related defects,” *J. Phys. Soc. Jpn.*, **85**, 024701 (2016).
- [37] T. Ono, C. J. Kirkham, S. Saito, and Y. Oshima, “Theoretical and experimental investigation of the atomic and electronic structures at the 4H-SiC(0001)/SiO₂ interface,” *Phys. Rev. B*, **96**, 115311 (2017).

第 7 章

結論

本研究の目的は、4H-SiC MOS デバイスの更なる性能向上に向けて、4H-SiC MOS 反転層内の電子状態を原子論的なモデルに基づく電子状態計算で解析し理解を深めること、および、4H-SiC の伝導帯の高精度な記述が可能かつ低計算コストな原子論モデルを構築することである。この目的のもと、まず、反転層電子状態の計算においては経験的擬ポテンシャル法に基づく原子論的な反転層の記述を採用し、4H-SiC の原子配置やフルバンド構造が反転層内の電子状態や電子分布に及ぼす影響を解析した。そして、強結合近似法に基づく低計算コストな原子論モデルを新規に提案するとともに、提案モデルでバルク 4H-SiC の伝導帯を記述できることを実証した。

第 3 章では、経験的擬ポテンシャル法に基づき計算した反転層電子状態を 4H-SiC の超格子の性質に着目して解析した。その結果、高エネルギーのサブバンドに超格子に特有のワニエ・シュタルク局在状態が生じ、有効質量近似法で得られる電子状態とは大きく異なる空間分布を持つことを明らかにした。高エネルギーのサブバンドが反転層の電子輸送に寄与するのは、輸送方向に大きな電界が印加されるなどして反転層電子が大きなエネルギーを持つ場合である。本研究の結果は、このような条件下での電子輸送特性の解析においては、ワニエ・シュタルク局在状態を考慮するために原子論的なモデルを用いて反転層電子状態を計算する必要があることを示している。これに加えて、有効質量近似法では低エネルギー領域のサブバンドエネルギーを経験的擬ポテンシャル法の結果より大きく見積もっていることを示した。また、経験的擬ポテンシャル法に基づき計算された第 1 サブバンド底の有効質量の異方性や、状態密度有効質量が、有効質量近似法の結果と異なることを示した。

第 4 章では、経験的擬ポテンシャル法に基づく反転層の電子状態計算により、4H-SiC の界面構造とフルバンド構造が反転層電子状態に及ぼす影響を解析した。ここでは Cubic 界面構造と Hexagonal 界面構造と呼ばれる 2 種類の界面構造を考慮した。電子状態を解析した結果、反転層電子を界面から 0.3 nm 程度遠ざける失活層が Hexagonal 界面構造の

場合にのみ存在すると仮定することで、界面構造が電子状態に及ぼす影響を簡単に記述できることを示した。更に、先行研究で報告されていた、大きな閉じ込め電界の下で第1サブバンドの電子状態が界面近傍に強く局在する現象について、経験的擬ポテンシャル法に基づく計算で得られた反転層電子状態を用いて議論した。その結果、バルク 4H-SiC の下側伝導帯と上側伝導帯のそれぞれの電子状態が混成してサブバンド電子状態が形成されることに起因して反転層電子状態が界面近傍に局在することを明らかにした。加えて、非放物線的なフルバンド構造を考慮することによるサブバンドエネルギーの低下が、有効質量近似法に基づく計算において有効質量を約2倍に増加させることに相当しうることを明らかにした。

第5章では、シュレディンガー方程式とポアソン方程式を連立し、これについて自己無撞着計算を行うことで反転層中の電子分布を求めた。経験的擬ポテンシャル法に基づく計算では各界面構造ごとに電子分布を計算し比較した。その結果、界面構造ごとに界面と反転層電子の距離の期待値が異なり、この距離の差は第4章で示した失活層の幅 (~ 0.3 nm) 程度であることがわかった。また、有効質量近似法に基づく計算も行い、経験的擬ポテンシャル法の計算結果と比較したところ、経験的擬ポテンシャル法の場合に反転層電子がより界面側に偏ることが明らかになった。この結果から、反転層電子と界面との距離が小さい場合に移動度が低下することが実験的に報告されていることを踏まえて、有効質量近似法に基づいて反転層を記述し電子輸送計算を行う場合には界面近傍の散乱源が移動度に及ぼす影響を過少に見積もる可能性を示した。

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モデルを提案し、その有効性を実証した。提案モデルでは、4H-SiC における電子状態の浮遊性を効率的に記述するために、格子間に配置される4つの仮想的なs軌道を基底に導入した。さらに、基底の大きさ（つまり強結合ハミルトニアン行列のサイズ）を小さくするために、従来の強結合モデルで用いられてきた原子位置を中心とする原子軌道は全て基底から除外した。このモデルはバルク 4H-SiC 伝導帯を適切に再現するとともに、 4×4 の強結合ハミルトニアン行列による極めて低い計算コストを実現した。この結果は、4H-SiC の伝導帯における電子状態の浮遊性が伝導帯を特徴づける本質的な性質であることを示す。この提案モデルに基づいて反転層を記述する電子輸送シミュレータを構築することで、4H-SiC MOS 反転層の理論研究を大きく加速できると期待される。例えば、酸化膜/4H-SiC 界面のステップテラス構造や欠陥を原子論的に記述して反転層電子状態を解析する場合、従来の研究では第一原理的な手法による電子状態計算が採用されているが、これには膨大な計算資源を要する。対して、本研究で提案する強結合モデルで界面を原子論的に記述すれば、第一原理計算による計算と比べて極めて高速な電子状態計算と電子輸送計算を実現できる。

以上の研究により、有効質量近似法に基づく従来の計算では考慮されなかった 4H-SiC

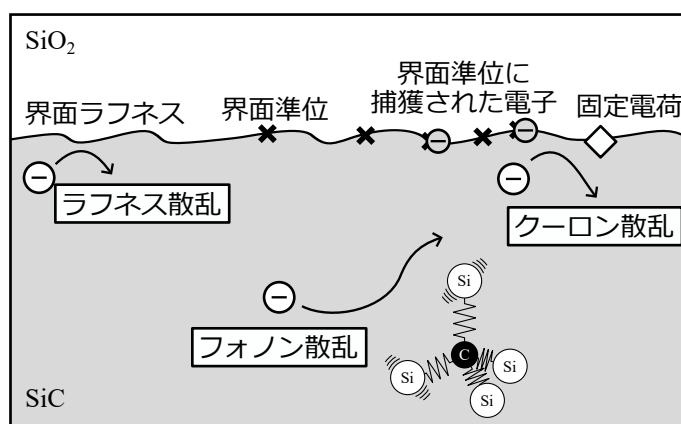


図 7.1: 4H-SiC MOS 反転層における散乱源候補の模式図.

の原子配置やフルバンド構造が、4H-SiC MOS 反転層の電子状態および電子分布に大きな影響を及ぼすことが明らかになり、原子論的なモデルを用いた電子状態計算の重要性が示された。これと同時に、4H-SiC MOS 反転層の原子論に基づく解析を加速することが期待される、極めて低計算コストなモデルが提案・実証された。

最後に、更なる研究課題と将来の展望について述べる。図 7.1 に、4H-SiC MOSFET のデバイス構造と SiC MOS 反転層における可動電子の主要な散乱源の候補を示す。これらの散乱源およびこれまで考慮されなかった微細な構造が反転層の移動度に及ぼす影響を、原子論モデルに基づく電子輸送計算で解析することが、次の課題となる。本研究で提案・実証した高効率な原子論モデルを用いることで、チャンネル長 100 nm 程度の反転層全体を原子論的に記述したうえでの電子輸送解析が現実的となる。このような大規模な系を用いて電子輸送特性を量子輸送計算で解析することは、(0001) 面のステップテラス構造や多様な界面構造が可動電子の移動度に及ぼす影響の解明に直接貢献する。また、このような微細構造による電子の散乱を、ボルツマン輸送方程式に導入可能な散乱モデルで記述できれば、電子輸送計算を用いた 4H-SiC MOS 反転層の設計最適化を促進できる。そして、低損失な 4H-SiC MOSFET の産業利用拡大に向けては、Technology Computer-Aided Design (TCAD) シミュレーションで利用可能な移動度モデルの構築が必要である。

以上の課題に取り組むことで、4H-SiC MOS 反転層における電子輸送の物理の深化、および省エネルギー社会の実現が期待される。

謝辞

本研究は、大阪大学大学院工学研究科電気電子情報通信工学専攻 森 伸也教授の御指導の下で行われたものであり、本研究を遂行するにあたり、終始変わらず懇切丁寧に御教示、御鞭撻を賜りましたことに深く感謝致します。

本論文を執筆するにあたり、多大な御助言、御指導を賜りました大阪大学大学院工学研究科物理学系専攻 渡部 平司教授、電気電子情報通信工学専攻 森 勇介教授に心より感謝致します。

本研究を進めるにあたり、日頃から貴重な御意見と御教示を賜りました松岡 俊匡准教授、田中 一助教（現、関西学院大学電気電子応用工学課程専任講師）に心より御礼申し上げます。

本論文に関して貴重な御教示を頂きました大阪大学大学院工学研究科電気電子情報通信工学専攻 小島 一信教授、片山 光浩教授、丸山 美帆子教授、福田 憲二郎教授、片山 竜二教授、近藤 正彦教授、廣瀬 哲也教授、大岩 顕教授、山崎 順教授、吉村 政志教授、余語 寛文教授、筑本 知子教授に深く感謝致します。

研究を進めるにあたり、多くの御助言を頂きました量子情報エレクトロニクスコースの方々に心から御礼申し上げます。また、研究生活の様々な面で数多くの御助言と御協力を賜りました先輩方、そして研究室の同期の皆様に感謝の意を表します。学会参加や研究に関連する手続きなど種々の事務的な面で御手伝い頂いた田村 智沙秘書に心より感謝致します。

本研究の開始当初から懇切なる御指導、御助言を頂き、研究生活の上でも大変お世話になりました橋本 風渡氏に心から感謝致します。

同じ研究室で研究を共にした Seyed Ali Mojtahedzadeh 氏、LIM Jin Hyong 氏、岡田 丈氏、Erlant Khalfani 氏には、研究生活の様々な面で大変お世話になり、深く感謝致します。

最後に、研究生活を通じて生活面や精神面で多大な御支援をいただきました両親に深く感謝致します。

研究業績

学術論文

1. Y. Murakami, S. Nagamizo, H. Tanaka, and N. Mori, “Theoretical analysis of tunneling current in 4H-SiC Schottky barrier diodes under reverse-biased conditions based on the complex band structure,” Japanese Journal of Applied Physics, **62**, SC1042, 2023.
2. S. Nagamizo, H. Tanaka, and N. Mori, “Wannier–Stark localization of electronic states in 4H-SiC MOS inversion layer,” Japanese Journal of Applied Physics, **63**, 02SP62, 2023.
3. Y. Murakami, S. Nagamizo, H. Tanaka, and N. Mori, “Analysis of tunneling probability in heavily doped 4H-SiC Schottky barrier diodes based on complex band structure considering barrier potential,” Japanese Journal of Applied Physics, **63**, 03SP46, 2024.
4. S. Nagamizo, H. Tanaka, and N. Mori, “Impact of interface structure on electronic states in 4H-SiC inversion layer,” Japanese Journal of Applied Physics, **64**, 01SP02, 2025.
5. S. Nagamizo, H. Tanaka, and N. Mori, “Compact empirical tight-binding models for the conduction band of 4H-SiC considering the floating nature of electronic states,” Japanese Journal of Applied Physics, Letter, **64**, 080901, 2025.
6. S. Nagamizo, H. Tanaka, and N. Mori, “Self-consistent calculation for 4H-SiC(0001) MOS inversion layer based on empirical pseudopotential method,” Japanese Journal of Applied Physics. (投稿準備中)

国際会議

1. S. Nagamizo, H. Tanaka, and N. Mori, “Electronic states in 4H-SiC MOS inversion layers considering crystal structure using empirical pseudopotential method,” The 21st

- International Workshop on Computational Nanotechnology, Virtual Conference, May 24–June 6, 2021.
2. S. Nagamizo, H. Tanaka, and N. Mori, “Analysis of electronic states at SiC MOS interface based on empirical pseudopotential method,” The 2021 International Meeting for Future of Electron Devices Kansai, Virtual Conference, November 18–19, 2021.
 3. N. Mori, S. Nagamizo, H. Tanaka, and G. Mil’nikov, “Semiconductor device modeling and simulation from an atomistic view,” International Symposium on Wide Gap Semiconductor Growth, Process and Device Simulation 2022, Virtual Conference, January 11–12, 2022.
 4. Y. Murakami, S. Nagamizo, H. Tanaka, and N. Mori, “Theoretical analysis of tunneling current in 4H-SiC Schottky barrier diodes under reverse-biased condition based on complex band structure,” 2022 International Conference on Solid State Devices and Materials, Chiba, Japan, September 26–29, 2022.
 5. Y. Murakami, S. Nagamizo, H. Tanaka, and N. Mori, “Theoretical analysis of tunneling effect in 4H-SiC Schottky barrier diodes based on complex band structure,” Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems 2022, Hawaii, USA, December 4–9, 2022.
 6. Y. Murakami, S. Nagamizo, H. Tanaka, and N. Mori, “Analysis of tunneling probability using complex bands considering barrier potential,” 22nd International Conference on Electron Dynamics in Semiconductors, Optoelectronics and Nanostructures, Münster, Germany, August 14–18, 2023.
 7. S. Nagamizo, H. Tanaka, and N. Mori, “Wannier-Stark localization of electronic states in 4H-SiC MOS inversion layer,” 2023 International Conference on Solid State Devices and Materials, Nagoya, Japan, September 5–8, 2023.
 8. Y. Murakami, S. Nagamizo, H. Tanaka, and N. Mori, “Analysis of tunneling effects in 4H-SiC Schottky barrier diodes based on complex band structure considering barrier potential,” 2023 International Conference on Solid State Devices and Materials, Nagoya, Japan, September 5–8, 2023.
 9. S. Nagamizo, H. Tanaka, and N. Mori, “Impact of interface structure on electronic states in 4H-SiC inversion layer,” 2024 International Conference on Solid State Devices and Materials, Himeji, Japan, September 1–4, 2024.

国内会議

1. 永溝 幸周, 田中 一, 森 伸也, “経験的擬ポテンシャル法を用いた 4H-SiC における浮遊電子状態の計算”, 先進パワー半導体分科会第 7 回講演会, オンライン会議, 2020 年 12 月 9 日.
2. 永溝 幸周, 田中 一, 森 伸也, “経験的擬ポテンシャル法に基づく SiC MOS 界面における電子状態の解析”, 応用物理学会秋季学術講演会, オンライン会議, 2021 年 9 月 11 日.
3. 永溝 幸周, 田中 一, 森 伸也, “経験的擬ポテンシャル法に基づく 4H-SiC MOS 反転層の擬 2 次元電子状態解析”, 先進パワー半導体分科会第 9 回講演会, 福岡国際会議場, 福岡県, 2022 年 12 月 20 日.
4. 田中 一, 村上 勇徳, 永溝 幸周, 田中 一, 森 伸也, “SiC における反転層移動度および高電界輸送現象のシミュレーション”, シリコンテクノロジー分科会 第 251 回研究集会, 金沢工業大学虎ノ門キャンパス, 東京都, 2024 年 7 月 11 日.
5. 永溝 幸周, 田中 一, 森 伸也, “4H-SiC MOS 反転層における電子状態の界面構造依存性”, 応用物理学会秋季学術講演会, 朱鷺メッセ, 新潟県, 2024 年 9 月 19 日.

受賞

1. 2021 年 11 月, IMFEDK Best Paper Award, “Analysis of Electronic States at SiC MOS Interface Based on Empirical Pseudopotential Method.”
2. 2022 年 3 月, 大阪大学大学院工学研究科 菅田-Cohen 賞 (修士).