

炭化ケイ素単結晶のピエゾ抵抗物性シミュレーション

(立命大, BEANS) ○中村 康一, 鳥山 寿之, 杉山 進

【序】 炭化ケイ素 (SiC) は高い熱伝導率と低い熱膨張率を有するだけでなく、シリコンに比べてバンドギャップが大きいために高温下でもリーク電流が小さく、高温・高線量環境において利用できる半導体材料として注目されている。SiC の結晶は積層構造によって決まるさまざまな結晶多形があり、種類に応じて結晶の電子構造やそれを基にした電気特性も異なる。本研究では SiC をメカニカルセンサの構成材料として応用することを念頭に、さまざまな結晶多形の単結晶バルクモデルやナノスケール低次元モデルに対する電子状態のひずみ応答を詳細に明らかにするとともに、ゲージファクターのキャリア濃度および温度依存性を予測してピエゾ抵抗センサの可能性について議論した。

【計算手法】 一般に、比抵抗テンソル $\vec{\rho}$ はキャリア濃度と有効質量テンソルを用いて表すことができる。キャリア濃度と有効質量テンソルは第一原理バンド構造から導出できる物性量であり、ひずみによってバンド構造が変わるとこれらの物性量に変化して、比抵抗に影響を及ぼすことになる。SiC のような伝導帯が多谷構造をもつ n 型半導体の場合、キャリア電子に関する電気伝導率テンソル \vec{G} は各バンドとそれぞれの谷 $\{v_{\alpha}\}$ に対して決まるバンドキャリア密度 $n_{j,\alpha}$ 、バンド有効質量テンソル $\vec{m}_{j,\alpha}^*$ 、および緩和時間テンソル $\vec{\tau}_{j,\alpha}$ を用いて

$$\vec{G} = \vec{\rho}^{-1} = e^2 \sum_{j \in \text{CB}} \sum_{v_{\alpha}} n_{j,\alpha} (\vec{m}_{j,\alpha}^*)^{-1} \cdot \vec{\tau}_{j,\alpha} \quad (1)$$

と書け^[1]、第一ブリルアンゾーン (1BZ) を $\{v_{\alpha}\}$ に対応して分割することにより、それぞれのバンドキャリア密度がフェルミエネルギー E_F と温度 T から決定される。n 型ドーパ状態は「単位格子あたりのキャリア数ごく微小ならばバンドエネルギーは真性半導体と同じ」という仮定の下にフェルミエネルギーをシフトさせることによって表現する^[1-3]。また、緩和時間については、「すべてのバンドの緩和時間が等しく、ひずみのあるなしに関わらず一定」という近似を用いた。この取り扱いは一見粗いようにも思われるが、ピエゾ抵抗係数やゲージファクターを求める際にはキャリア伝導率の比をとるので、緩和時間が打ち消されることを考慮すると簡単で有効な取り扱いである。

ひずみがないときの比抵抗テンソルの対角成分を ρ_0 とすると、単軸ひずみ ε に対する縦方向および横方向のゲージファクターはそれぞれ、

$$GF_l = \Delta\rho_l / \rho_0 \varepsilon; \quad GF_t = \Delta\rho_t / \rho_0 \varepsilon \quad (2)$$

と表される。ただし、 $\Delta\rho_l$ および $\Delta\rho_t$ は単軸応力を加えた向きを座標軸の 1 つとしたときの比抵抗テンソル対角成分変化量であり、 $\Delta\rho_l$ は単軸応力と平行な向きの変化量、 $\Delta\rho_t$ は垂直な向きの変化量をそれぞれ表す。

【結果および考察】 本研究で取り扱ったバルク SiC の単位格子を図 1 に示す。GGA レベルの第一原理電子状態計算を行ったところ、よく知られているとおりすべてのバルクモデルにおいて多谷構造をもつ伝導帯が得られた。間接バンドギャップの計算値 (表 1) は、立方晶である閃亜鉛鉱型 3C-SiC において特に狭くなる。

Table 1. Calculated band gaps of bulk SiC (eV).

	Calculated band gaps of bulk SiC (eV)
3C-SiC	1.36
2H-SiC	2.27
4H-SiC	2.00
6H-SiC	1.81

立方晶 3C-SiC の伝導帯の谷は逆格子空間座標軸と 1BZ 境界との交点上の 6 箇所であり、バルクシリコンの伝導帯の谷とは位置が異なるが、等バンドエネルギー面はバルクシリコンの場合と同様に回転楕円体構造となる。[001]方向や[110]方向に単軸引っ張りひずみを加えると、等しかった 6 箇所の谷底のバンドエネルギーに高低差が生じ、等価に分布していたキャリア電子がエネルギーのより低い谷に優先して分布するようになるため、伝導性が大きく変化する。一方、[111]方向の単軸引っ張りひずみを加えても 6 箇所の谷は等価のままなので伝導性は大きく変化せず、piezo抵抗特性はモビリティの変化のみによって決まる。それぞれの単軸引っ張りひずみに対し、 GF_L および GF_T はそれぞれバルクシリコン^[1,4]と定性的に同じ結果となった。

六方晶では結晶多形の種類によって谷の位置が異なり、伝導率のひずみ応答に違いがみられる。六方晶ウルツ鉱型 2H-SiC では伝導帯の最も深い谷が 1BZ 境界上の K 点に 6 箇所存在するが (図 2(a)), [0001]方向だけでなく[1100]方向の単軸引っ張りひずみに対しても 6 箇所の谷は等価の関係を持するため、[0001]方向および[1100]方向の両方とも大きなpiezo抵抗効果は見られない。対照的に、4H-SiC では伝導帯の最も深い谷が 1BZ 境界上の M 点にあり (図 2(b)), [1100]方向の単軸引っ張りひずみによって谷底のバンドエネルギーに高低差が生じるため、伝導性が変化して比較的大きな負の GF_L が得られた。6H-SiC でも M 点付近に伝導帯の谷が存在し、4H-SiC と同様のpiezo抵抗物性が得られた。

さらに、さまざまな結晶多形に関するナノシート構造を表現し、低次元化した場合の電子状態と n 型半導体電気特性についても検討した。低次元モデルのバンド構造は閉じ込め (confinement) 効果によってバルク SiC モデルの結果と対応づけられ、(111)面方位をもつナノシート構造においては(001)面方位のナノシートで観察できる擬直接バンドギャップ^[2]が発現しなかった。

GF_L および GF_T はキャリア電子分布の変化に起因するpiezo抵抗効果の場合について顕著なキャリア濃度および温度依存性が見られる^[1]。詳細な定量的議論については当日報告する。

[1] K. Nakamura, Y. Isono, T. Toriyama, and S. Sugiyama, Phys. Rev. B **80**, 045205 (2009).

[2] K. Nakamura *et al.*, IEEJ Trans. Electr. Electron. Eng. **5**, 157 (2010); Jpn. J. Appl. Phys. **49**, 06GH01 (2010).

[3] K. Nakamura *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **47**, 5132 (2008); Jpn. J. Appl. Phys. **48**, 06FG09 (2009).

[4] C. S. Smith, Phys. Rev. **94**, 42 (1954).

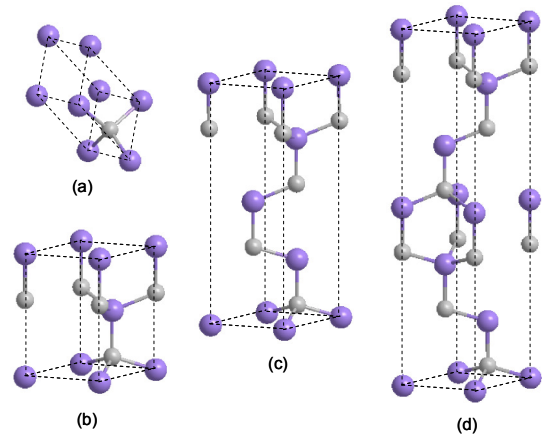


Fig. 1. The primitive unit cells of silicon carbide (SiC) polymorphs in our simulation: (a) 3C-SiC, (b) 2H-SiC, (c) 4H-SiC, and (d) 6H-SiC. There are 1, 2, 4, and 6 [SiC] units in the primitive unit cells, respectively.

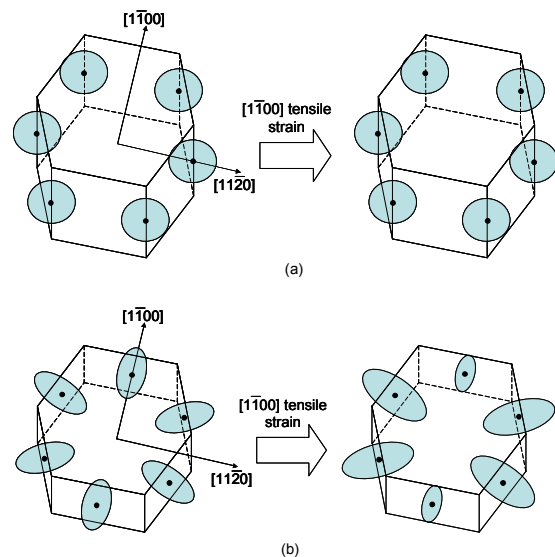


Fig. 2. Images of the first Brillouin zones and carrier distribution on the multi-valley band according to the [1100] tensile strain: (a) 2H-SiC and (b) 4H-SiC.