

SiC レクチャーシリーズ

3. SiC の結晶構造とエネルギーバンド

SiC の結晶構造とエネルギーバンド

半導体の材料である SiC は化学量論比 1:1 のケイ素(Si)と炭素(C)により構成される結晶であり、化合物半導体の一種です。ケイ素、炭素ともに IV 族元素のため、各原子は 4 つの共有結合軌道を持ち、シリコンと炭素は四面体配位で交互に結合し結晶を形成しています。

SiC の結晶は、一対の Si 原子と C 原子からなる単位構造を最稠密に積層させた構造をもちます。SiC にはこの単位構造の積層順が異なり、安定な結晶(ポリタイプ)が多数存在しています。図 1 に、Si 原子と C 原子からなる単位構造を平面状に並べたものを最稠密に積層させる場合の重ね方を示します。それぞれの平面構造の上に他の平面構造を積層させる場合、二通りの重ね方が存在します。例えば、平面 A 上のサイト B またはサイト C に積層可能です。このため、多くの積層順が可能となり、また SiC では積層順の違いによるエネルギー差が比較的小さいため、積層の構造(周期)が異なる結晶が存在します。

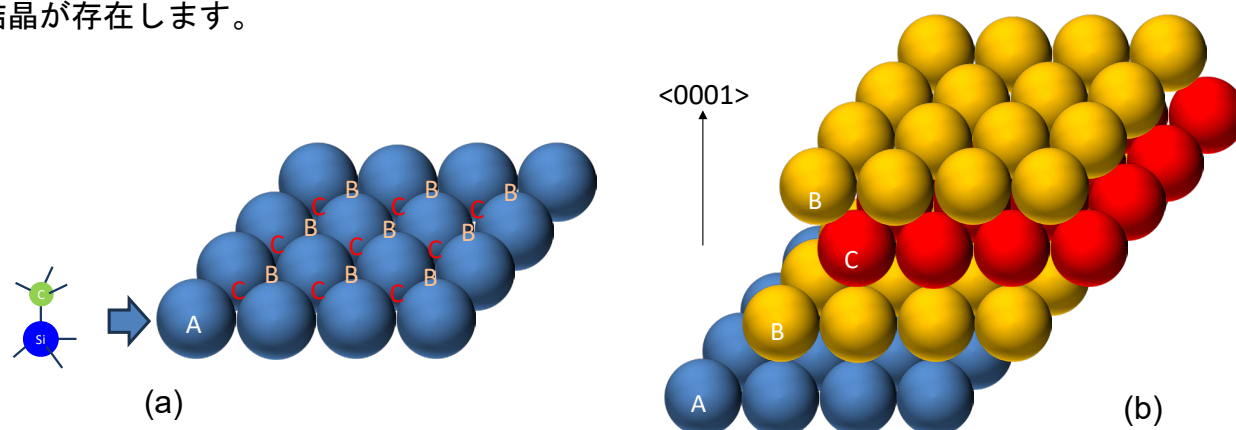


図 1 (a) 平面に配置した Si-C ペアの単位構造とその上に単位構造を積層する際のサイト
(b) 4H 型 SiC の積層順

SiC の代表的なポリタイプに、3C 型、4H 型、6H 型などがあります。ここで、数字は積層の周期を表し、C は立方晶(Cubic)を、H は六方晶(Hexagonal)を表しています。SiC の結晶を作製する際の温度などの条件の違いにより支配的に形成されるポリタイプが決まります。4H 型 SiC の積層の順序を図 1 に、各種ポリタイプの積層順を表 1 にまとめています。

表 1 SiC の各種ポリタイプの積層順

Polytype	Stacking sequence
2H	AB••
3C	ABC•••
4H	ABCB••••
6H	ABCACB••••••
15R	ABCACBCABACBCB••

半導体 SiC は間接遷移型のエネルギー帯構造を持ち、ポリタイプにより異なるバンドギャップエネルギーを持ちます。例えば、4H 型 SiC の場合、バンドギャップエネルギーは Si の約 3 倍の大きさで 3.26eV です。

ちなみに、可視光のエネルギーは 1.7eV～3.3eV であり、純度の高い 4H 型 SiC の結晶は可視光に対し透明です。SiC の高濃度 n 型結晶は伝導帯にキャリアの電子が多く存在します。これらがバンド構造による特定のエネルギーの可視光を吸収するため、デバイスの作製に用いる SiC 基板は黄～緑の色を示します。

半導体のバンドギャップエネルギーは、一般に、構成原子間の結合距離(原子半径)が小さい程、大きくなる傾向を示します。例えば、SiC のバンドギャップエネルギーは Si (1.1eV)より大きく、C (ダイヤモンド) (5.5eV)よりも小さいです。また、GaN の原子間距離が 0.192nm であり、SiC の原子間距離は 0.189nm と近いこと、両者のバンドギャップエネルギーは近い値となります。なお、GaN は 3.4eV です。

バンドギャップエネルギーが大きいということは価電子帯から伝導帯への電子励起による電子-正孔対の生成に要するエネルギーが大きいことを示しており、言い換えるなら、パワーデバイスの性能を決める絶縁破壊を生じる電界が大きいことを表しています。これにより SiC はパワーデバイスの主流材料の Si と比べて高電圧に耐える性質をもつことになり、パワーデバイス用半導体として望ましいです。表 2 に、SiC の各種ポリタイプのバンドギャップエネルギーを示します。

表 2 SiC のポリタイプの違いによるバンドギャップエネルギー

Polytype	Band gap energy
2H	3.33 eV
3C	2.39 eV
4H	3.26 eV
6H	3.02 eV
15R	2.99 eV

安定に存在するポリタイプの中で電力変換用のパワーデバイスには、通常、絶縁破壊電界強度が大きく、かつ、電気特性の異方性が小さい 4H 型 SiC が用いられます。今日、市販されているパワーデバイス用の SiC 基板はほとんどが n 型の導電性をもつ 4H 型であり、4° オフ(0001)面 (Si の未結合軌道が表面から垂直に伸びる面) にデバイスが作製されます。

SiC 結晶の内部には局所的に Si-C 層の積層順に誤りが生じた結晶欠陥(積層欠陥)が存在することがあります。積層順が変わると、伝導帯および価電子帯のエネルギーレベルも変わるため、例えば 4H 型 SiC 中に部分的に他の積層順が入り込むと、この領域は周囲よりもエネルギーギャップが小さくなり、井戸型ポテンシャルを形成します。ここにバイポーラ電流が流れる場合、キャリアである電子、正孔が捕獲され、SiC デバイスの電気伝導にオン抵抗の増加等の影響を与えます。デバイスを作製する際はこれに対して配慮が必要であり、三菱電機では各種テストや独自のデバイス構造の設計などにより対策をしています。

以上
2025 年 1 月