

GaN(0001)表面におけるトリメチルアルミニウム分子吸着の理論的研究

Theoretical study for
adsorption of tri-methyl aluminum molecule on GaN (0001) surface

村田製作所

○近田 旬佑、高尾 将和、本多 淳史、檜貝 信一、白露 幸祐、藤井 高志*

Murata Manufacturing

○Shunsuke Chikada, Masakazu Takao, Atsushi Honda, Shin'ichi Higai,

Kousuke Shiratsuyu, and Takashi Fujii*

E-mail: shunsuke_chikada@murata.co.jp

現在、パワーデバイス、高周波デバイスなどへの応用が期待されている GaN を基板とした MOS-HEMT では、化学的安定性と絶縁性の高さから、酸化アルミニウム (AlO_x) が、その絶縁膜の候補材料として検討されている。 AlO_x 絶縁膜の成膜には、高い平坦性、均一性から、原子層堆積 (ALD) 法が用いられる。ALD 法による MOS の成膜プロセスでは、高度な界面制御が必須であり、前駆体の表面吸着の初期過程についての知見は、非常に重要である。しかし、ALD 法は、そのプロセスが複雑なため、前駆体の吸着に関する詳しい観察が困難である。そこで、本研究では、第一原理に基づく理論計算により、ALD 法の Al 供給源であるトリメチルアルミニウム (TMA; $\text{Al}(\text{CH}_3)_3$) 分子について、GaN (0001) 表面における吸着を詳細に調べた。

本計算では、TMA の GaN 表面吸着構造の解析に、第一原理計算プログラム Vienna *Ab-initio* Simulation Package (VASP) を使用した。GaN (0001) 表面の構造モデルとして、6 原子層から成るスラブモデルを採用し、その表面上で、TMA 単量体の安定な吸着構造を求めた。さらに、分子軌道計算プログラム Gaussian を用いて、各原子間結合の詳細な解析を行った。

図に、計算より得られた、GaN (0001) 表面上の TMA の最安定吸着構造を示す。この吸着構造において、TMA メチル基の C 原子と基板表面の Ga 原子とは強い結合を形成しており、その結合は、TMA 内の Al-C 結合よりも強いことが明らかにされた。ALD 成膜プロセスにおいて、TMA の供給は、O の被覆後に行われるが、上記の結果より、O 被覆後、Ga が一部露出していた場合、その Ga と TMA メチル基の C とが強く結合してしまうと考えられる。この Ga-C 結合が、 AlO_x 膜中の有機物残存の一要因となり、ゲートリークなどの特性劣化をもたらすことが、本計算結果より示唆される。

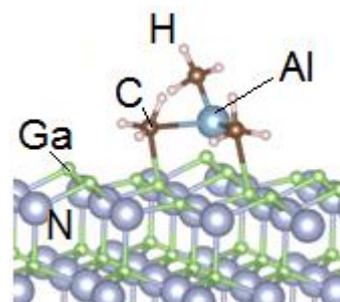


図: GaN (0001) 表面における
TMA 分子の最安定吸着構造。

* 現所属: 立命館大 総研
Res. Org. of Sci. and Eng., Ritsumeikan Univ.