

GaN-MIS 型デバイスのためのフッ素終端技術の開発と欠陥制御

Defect control with fluorine for GaN-MIS type electronic devices


 物材機構¹ ◯屋山 巴¹, 知京 豊裕¹

National Institute for Materials Science¹ ◯Tomoe Yayama¹, Toyohiro Chikyow¹

E-mail: YAYAMA.Tomoe@nims.go.jp

AlGaIn/GaN ヘテロ構造を用いたパワーデバイスにおいて、近年では MIS 構造を使ったデバイスやそのためのイオン注入などのプロセス開発が進められている。その実現のためには GaN 膜中の欠陥を低減すると同時に、表面界面のダングリングボンドを終端し、デバイス特性を改善、安定化する必要がある。Si では水素による欠陥の終端が極めて効果的であり、MOSFET への発展に大きく貢献した。窒化物半導体においても水素終端は一般的に用いられているが、水素は窒化物成長時の 800°C 程度の高温環境下では容易に脱離するため、窒化物に最適化されたより安定な終端方法が必要である。本研究では、水素に代わる終端元素の候補としてフッ素に着目した。フッ素は電気陰性度が大きいこと、ダングリングボンドとの強力な結合が期待できる。さらに原子半径が比較的小さいため、結晶内部への拡散に適しており、後工程での表面安定化プロセス実現の可能性はある。フッ素の終端元素としての適性を調べるため、第一原理計算を用いて GaN の窒素欠陥に対するフッ素終端の安定性を評価し、その下での電子状態を調べた。

本研究における電子状態および全エネルギー計算は密度汎関数法に基づく第一原理計算によって行い、パッケージソフトウェア VASP を用いた。表面欠陥および結晶内部の面欠陥界面をモデル化するため、GaN-(0001)面 2x2 表面スラブモデルを用い、水素、フッ素およびこれらと窒素が複合的に吸着した種々の表面再構成モデルを作製して表面生成エネルギーを計算し、安定性を評価した。本研究では一般化勾配近似(GGA)の下で Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE)による交換相関汎関数を用い、平面波基底のカットオフエネルギーは 800eV とした。(000-1)面側の窒素ダングリングボンドは 3/4 電子をもつ仮想水素で終端した。

図 1(a)に水素、フッ素が共存する雰囲気下での GaN-(0001)面表面再構成構造を一覧化した表面状態図を、図 1(b)に各構造の略図を示す。縦横の軸はフッ素、水素の表面での濃度に対応しており、水素終端表面 NH_3+3NH_2 構造は極めてフッ素濃度が低い場合にのみ見られ、ほとんどの条件でフッ素が表面に吸着した状態が安定であることがわかる。現れる表面はいずれもエレクトロンカウンティングモデルを満たすものであるが、特に 3つの Ga ダングリングボンドに F 原子が吸着した 3Ga-F 構造の安定領域が広い。さらにこの構造のバンド構造を計算したところ、Ga ダングリングボンドによって生じる欠陥準位がフッ素によって良く終端され、ギャップ内に準位が生じないことがわかった。このことは、表面および内部の欠陥の安定化に対するフッ素終端の有効性を示している。

