アモルファス Al₂O₃絶縁膜中の O 空孔と Al 空孔の理論的検討

Theory of the oxygen and aluminum vacancies in amorphous Al₂O₃ gate insulators

^O小嶋 英嗣¹、長川 健太¹、白川 裕規¹、洗平 昌晃^{1,2}、白石 賢二^{1,2}、

(¹名大院工、²名大未来研)

⁰¹Eiji Kojima, ¹Kenta Chokawa, ¹Hiroki Shirakawa, ^{1,2}Masaaki Araidai, and ^{1,2}Kenji Shiraishi

(¹Graduate School of Engineering, Nagoya University,

²Institute of Materials and System for Sustainability, Nagoya University)

E-mail: kojima@fluid.cse.nagoya-u.ac.jp

1. はじめに

GaNはSiよりも優れた物性を持つため、次世 代パワーデバイス材料として大変注目を集め ている。[1]一方で、GaN デバイスを実現させる ためには、適切な絶縁膜を決定することが重要 になる。GaN デバイスに用いる絶縁膜の候補と してはSiO₂, Al₂O₃, HfO₂が挙げられ、SiO₂とAl₂O₃ は GaN と組み合わせた時、伝導帯のオフセット が大きいため絶縁膜として有力な候補となる。 他方で、A1₂0₃と HfO₂ は誘電率が高いという長 所を持つ。それゆえ、我々はオフセットと誘電 率の双方で良い特性を示す Al₂O₂が GaN デバイ スにおける非常に有望な絶縁膜だと考えた。し かし、絶縁膜を Al₂O₃とした GaN デバイスのリ ーク電流は絶縁膜を SiO₂ としたデバイスより も発生しやすい。我々はこの原因として、Al203 中に存在する0とA1空孔が影響するのではな いかと考えている。そこで本研究では第一原理 計算により、アモルファス Al₂O₃(a-Al₂O₃)中の0 と A1 空孔がどのような欠陥をもたらすのかを 研究した。

2. 計算方法

第一原理分子動力学計算(MD 計算)を行うこと で $a-Al_2O_3$ を作成した。計算モデルは密度 7.76g/cm³の120原子 α -Al₂O₃スーパーセルを用 いた。(Fig. 1-a)。そして 6000K の温度で一定 時間 MD 計算を行った後に、同様の計算を室温 まで下げていき最後に構造最適化を行った。さ らに、この $a-Al_2O_3$ から0またはA1原子を一個 取り除くことで空孔を作成し、構造最適化を実 行した(Fig. 1-b)。また、MD 計算、電子状態の 計算、構造最適化は密度汎関数法に基づく第一 原理計算コードである VASP(Vienna Ab initio Simulation Package)コード[2]を用いて計算した。 <u>3.結果と考察</u>

我々が作成した a-Al₂0₃ 中にはそれぞれ0原子 の配位数が 2,3,4 のパターン、Al 原子の配位数 が 4,5,6 のパターンがあった。それゆえ我々は 上記の配位数それぞれにおいて 0 または Al を 取り除くことで空孔を作り、バンドギャップ中 に欠陥が形成されるかを調べた。0 空孔に関し ていえば、0の配位数に関係なく、A1の正電荷の影響で、引力ポテンシャルが0空孔近くのA1 原子に形成されたことで欠陥準位が現れた (Fig. 2-a)。また、A1空孔に関しては、A1の配 位数に関係なく、0-0結合の反結合状態が欠陥 準位を生じさせることがわかった(Fig. 2-b)。

講演では a-A1₂0₃の欠陥の荷電状態依存性と 空孔に不純物を導入した時の影響に関しても 議論する予定である。

References

- M. Kodama, M. Sugimoto, E. Hayashi, N. Soejima, O. Ishiguro, M. Kanechika, K. Itoh, H. Ueda, T. Uesugi, and T. Kachi, Appl. Phys. Express 1, 021104, (2008).
- [2] G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B 47, 558, (1993).



Fig.1 Calculation models. (a) Initial structure (b) Optimized structure after cooling down. Red and blue balls are O and Al atoms, respectively



Fig.2 Band figure (a) O vacancy effect: The attractive potential was formed around the Al atoms near the O vacancy (b) Al vacancy effect: anti-bonding states of O-O bonds appeared in the band gap.