

第一原理計算による GaN/Al₂O₃ 界面構造の考察

First Principles Calculations Study on the Structure of GaN/Al₂O₃ Interface

名大院工¹, 名大未来研² ◯長川 健太¹, 洗平 昌晃^{1,2}, 白石 賢二^{1,2}

Graduate School of Engineering, Nagoya Univ.¹, IMASS, Nagoya Univ.²

◯Kenta Chokawa¹, Masaaki Araidai^{2,1}, Kenji Shiraishi^{2,1}

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

1. はじめに

高耐圧で低消費電力なデバイス作成のため GaN を用いた MOSFET への期待が高まっている。GaN はパワー半導体材料として比較される SiC 以上に大きなバンドギャップを有しており、理論的にはより高性能なデバイスを作成できる。これまで多くの GaN HEMT 構造デバイスの研究が行われており、その知見を MOSFET の作成に活かすことができると考えられる。しかし HEMT 構造と MOSFET 構造の大きな違いとして、GaN の上に良質な絶縁膜を形成する必要がある。MOSFET デバイスにおいて界面構造および絶縁膜の性質は性能や信頼性に大きく寄与する要因となる。絶縁膜の材料候補として Al₂O₃ がよく研究されている。本研究では第一原理計算を用いて GaN/Al₂O₃ 界面の構造および、電子状態について考察を行った。

2. 計算結果と考察

本研究では計算モデルとして GaN (0001)/ α -Al₂O₃ スラブモデルを作成した。初期界面構造は Ga-O 結合によって形成されていた。この初期界面構造は構造最適化後でも変化しなかった。この時、界面に存在する Al₂O₃ を形成していた O 原子は 1つの Ga 原子と Ga-O 結合を形成し 3 配位となっていた。また、Ga 原子は O 原子と 1つまたは 2つの Ga-O 結合を形成していた。Ga-O 結合が 1つである場合には Ga 原子は 4 配位であり安定化する。一方、O 原子と 2つの結合を形成した

Ga 原子は 5 配位数となっており、電子過剰となっている。このとき 5 配位数となった Ga 原子が Al₂O₃ 層に近づき、最終的に 1つの Ga-N 結合を切断して 4 配位化し安定することが確認された。結合を切断された N 原子の未結合手はそのまま残るため、界面近傍の GaN 層には 3 配位の N 原子が 3つ形成されている。この欠陥準位を確認すると価電子帯上端から 0.6~1.0eV の範囲に欠陥準位を形成することが分かった (Fig. 1)。講演では他の界面構造や欠陥についての議論も行う。

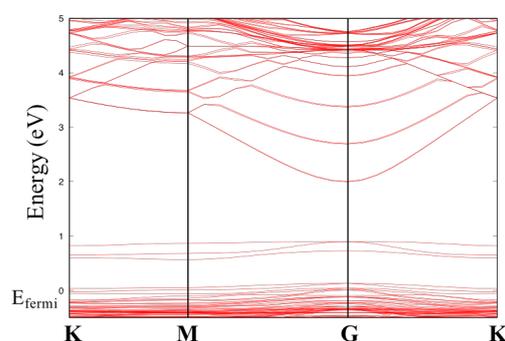


Fig. 1. Electronic structure of GaN/Al₂O₃ interface model. Fermi energy is set to 0.0 eV. The defect levels which are originated from the dangling bond of N atoms appear at the 0.6 eV above the valence band maximum.