

# 電場下の金属/半導体界面における欠陥の挙動; その理論的検討

## Defect formation at metal/semiconductor interfaces in electric field;

### First principles study

千葉大理<sup>1</sup> ○(M2)長澤 立樹<sup>1</sup>, 中山 隆史<sup>1</sup>

Chiba Univ.<sup>1</sup> °Riki Nagasawa<sup>1</sup>, Takashi Nakayama<sup>1</sup>

E-mail: adga1795@chiba-u.jp

金属電極/絶縁体基板界面に電圧を印加して電場を発生させると、電極から基板に侵入して拡散する金属原子の量が電場強度の指数関数で増大することが知られている[1]。我々はこれまで、電場下での金属/SiO<sub>2</sub>界面における金属原子の侵入を調べ、電場は金属原子をイオン化させ、その侵入障壁を電場強度に比例して減少させ、侵入を促進させることを明らかにした[2,3]。ところで、侵入した金属原子は基板にとっては欠陥であるため、同様にイオン化する欠陥に対しても、電場下の界面ではその挙動がバルク内の場合からは大きく変化すると考えられる。そこで、本研究では基板中の欠陥の形成エネルギーが電場下の界面近傍ではどのように変化するかを、第一原理計算を用いて検討した。

基板としては高電圧を印加することが期待されるワイドギャップ半導体 GaN を用い、欠陥としては N 空孔を考えた (バルク中では N 空孔はできにくいことが分かっている[4])。計算は、密度汎関数理論に基づき、VASP code を用いた。電場は、金属/GaN 膜の金属膜から電荷を抜くことで実現した[2,3]。Fig.1(a)は、Al/GaN 界面での静電ポテンシャルを界面からの距離の関数として示したものである。様々な強度の電場が界面から約 10Å の領域で実現されていることが分かる。

Fig.1(b)に、Al/GaN 界面近傍における、様々な強度の電場下での N 空孔の形成エネルギーを、界面からの距離の関数として示した。形成エネルギー  $E_{\text{form}}$  は  $E_{\text{form}} = E(V_N) - E(0) + \frac{1}{2} E(N_2)$  と定義した ( $E(V_N)$ ,  $E(0)$  は N 空孔がある・ない場合の全エネルギー、 $E(N_2)$  は窒素分子のエネルギー)。電場がない時(黒線)でも、界面近傍では N 空孔の形成エネルギーはバルク中より約 2eV 小さくなる。これは、界面では N 空孔の電子状態が金属の電子状態と混成するため、及び N 空孔から電極に電子移動が起こるためである[3,5]。電場強度が大きくなると、形成エネルギーは電場強度にほぼ線形で減少する。これは、N 空孔がイオン化しているためである[3]。

講演では、基板が SiC になった場合についても議論する予定である。

- [1] J. D. McBrayer et al., J. Electrochem. Soc., **133**, 1242 (1986).  
 [2] Y. Asayama et al., Mater. Sci. Semicond. Process. **70**, 78 (2017).  
 [3] R. Nagasawa et al., Jpn. J. Appl. Phys. **57**, 04FB05 (2018). [4] K. Laaksonen et al, J. Phys. Condens. Matter. **21**, 015803 (2009). [5] S. Sasaki et al, Jpn. J. Appl. Phys. **55**, 111302 (2016)

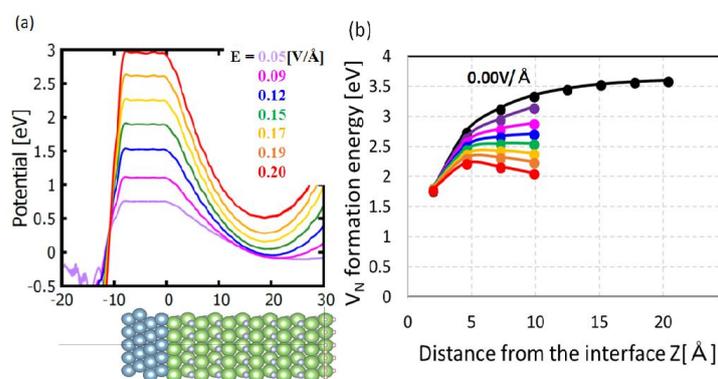


Fig.1 (a) Local electrostatic potential profile along (001) direction in an Al/GaN slab unit cell in various electric-field strengths, as a function of distance from the interface. (b) Formation energy of nitrogen vacancy ( $V_N$ ) around Al/GaN interface in various electric field strengths, as a function of distance from the interface. Respective line corresponds to that with the same color in (a).