

AION ゲート絶縁膜への Hf 原子混入効果に関する理論的研究

Theoretical study on the effect of incorporation of Hf atoms in AION gate dielectrics

名大院工¹, 名大未来研², 阪大院工³, 名倉 拓哉¹, 長川 健太¹, 洗平 昌晃^{1,2}, 細井 卓治³, 渡部 平司³, 押山 淳², 白石 賢二^{1,2},

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

³Graduate School of Engineering, Osaka Univ., [○]Takuya Nagura¹, Kenta Chokawa¹, Masaaki Araidai^{1,2}, Takuji Hosoi³, Heiji Watanabe³, Atsushi Oshiyama², and Kenji Shiraishi^{1,2}

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

1. 研究背景

SiC, GaN は、広いバンドギャップや優れた熱伝導率など優れた物性値を持つことから、Si に代わる次世代パワーデバイスの材料として注目されている。SiC, GaN を用いた MOSFET の絶縁膜の候補として、SiO₂, Al₂O₃, HfO₂ などが挙げられる。その中でも Al₂O₃ は誘電率が大きくバンドギャップが大きい為、特に有力な候補として注目されている[1]。

ところが、Al₂O₃ では負の固定電荷が発生してしまい、デバイスの信頼性を損なってしまうことが報告されている[2,3]。この負の固定電荷の原因は、Al₂O₃ 中の Al-O 複合空孔によって生じた欠陥であることが、小嶋らによって示されている[4]。また、Al₂O₃ 中に N を混入させた AION においては、その固定電荷が低減されることも報告されている。

しかし、近年の研究で、AION ゲート絶縁膜を用いた p-MOSFET では、ホールゲートリーク電流が発生し、信頼性低下の原因になっていることが確認された[5]。また、AION に Hf を混入させることで、このホールリーク電流を減少させられることも確認されている[5]。しかし、これらの現象の物理的起源については、未解明である。

よって本研究では、AION でホールリーク電流が流れるメカニズムについて、原子レベルで検討した。また、そのホールリーク電流が Hf 混入で減少するメカニズムについても同様に原子レベルで検討した。

2. 計算手法

本研究は、密度汎関数理論に基づく平面波基底の第一原理計算コード VASP (Vienna Ab initio Simulation Package) を用いて計算を行った。計算モデルとして、原子数 120 からなる 2 × 2 × 1 の α-Al₂O₃ を準備した。構造最適化においては、各原子が受ける力の最大値が 5.0 × 10⁻² [eV/Å] 以下になった時に計算終了となるよう設定し、カットオフエネルギーは 500eV とした。

3. 計算結果

まず AION モデルを作成する為、Al₂O₃ モデル中の O 原子 3 つと N 原子 2 つを置換し、第一原理分子動力学計算を行った。6000K で 10ps 熱した後、570K/ps の割合で 300K まで温度を下げた。そして、構造最適化を行い、AION モデルの各バンド構造を求めた。結果、Al₂O₃ では見られなかった新たな準位が、一部の AION モデルの価電子帯上端に現れることが分かった(Fig. 1(b))。この新たな準位が生

成された原因は、AION モデル中の N 原子の 2p 軌道であることが確認された。また、この新たな準位を生成する N 原子は、生成しない N 原子と比べ、周囲の Al 原子とより平坦な構造をとっていた。AION モデルで新たに現れた準位が価電子帯上端に存在することから、先行研究で報告されているホールリーク電流は、この準位を介して流れると考えられる。

次に、AION モデル中に Hf 原子を混入させた HfAION モデルを作成した(Fig. 1(a))。AION モデル中の価電子帯上端に新たな準位を生成する N 原子に着目し、その原子付近の Al 原子 4 つと Hf 原子 3 つを置換した。そして、構造最適化を行い、バンド構造を求めた。結果、AION モデルで新たに現れた準位が、HfAION モデルではバンドギャップ中から消滅していたことが分かった(Fig. 1(c))。この結果は、Hf 原子の混入によって、ホールリーク電流が減少した実験結果と一致するものである。

以上より、AION の構造によっては、N 原子 2p 軌道由来の準位が価電子帯上端に発生し、AION でのホールリーク電流の原因になっていることが分かった。また、Hf 原子を混入することでその準位がバンドギャップ中から消滅することも示された。

謝辞

本研究は「省エネルギー社会の実現に資する次世代半導体研究開発」(文部科学省)と総合科学技術・イノベーション会議の SIP (戦略的イノベーション創造プログラム)「次世代パワーエレクトロニクス」(管理法人: NEDO) によって実施されました。

Reference

- [1] T. Hashizume, S. Ootomo, and H. Hasegawa, Appl. Phys. Lett. **83**, 2952 (2003).
- [2] T. Hosoi et al, IEDM Tech. Dig., 2012, p. 159.
- [3] R. Asahara et al, Appl. Phys. Express **9**, 101002 (2016).
- [4] E. Kojima, K. Chokawa, H. Shirakawa, M. Araidai, T. Hosoi, H. Watanabe, and K. Shiraishi, Appl. Phys. Express **11** 061501 (2018).
- [5] T. Hosoi et al, Ext. Abstr. International Symposium on Power Semiconductor Devices and ICs. 2017.

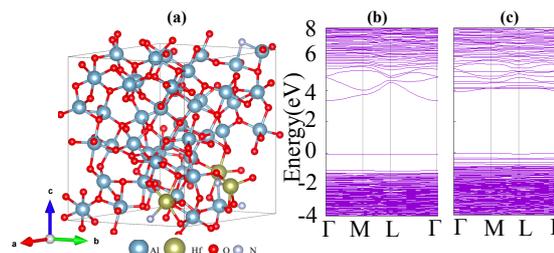


Fig.1: (a) HfAION model. Band structure of (b) AION model and (c) HfAION model.