

Al₂O₃ ゲート絶縁膜への N 混入による影響に関する理論的考察

Theory of the Effect of incorporation nitrogen atoms in the Al₂O₃ gate dielectric

○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)

○¹Eiji 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。一方で、GaN デバイスを実現させるためには、最適な絶縁膜の作製が重要である。GaN デバイスに用いる絶縁膜の候補としては SiO₂, Al₂O₃, HfO₂ 等が挙げられ、SiO₂ と Al₂O₃ は GaN-MOSFET として用いる時、伝導帯のオフセットが大きくなるため絶縁膜として有力な候補となっている。他方で、Al₂O₃ 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 Al₂O₃ 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、Al₂O₃ 絶縁膜はストレス誘起のゲートリーク電流と負の固定電荷形成が大きな問題となっている。一方、先行研究において、Al₂O₃ に N を混入した AlON 絶縁膜が上記の問題を解決し、デバイスの性能が上がる事が報告されている[1]。この報告から Al₂O₃ 中の N がデバイス信頼性向上に大きな役割を果たしていると考えられる。しかし、Al₂O₃ 絶縁膜のストレス誘起のゲートリーク電流と負の固定電荷の起源、そして N 混入の詳細なメカニズムはほとんど明らかになっていない。そこで我々は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、N 混入の効果を理論的に考察した。

2. 結果と考察

はじめに我々は Al₂O₃ 中の O 空孔(V_O)と Al 空孔(V_{Al})がストレス誘起のゲートリーク電流と負の固定電荷に起因すると考え、系の電子状態と荷電状態について調べた。その結果、V_O 欠陥準位がギャップ中に現れ、リーク電流の起源となることを明らかにした。一方、V_{Al} の形成エネルギーは 8.12eV と非常に大きな値をとるため、V_{Al} 単体の欠陥は形成されにくいと考えられる。そこで V_O-V_{Al} 複合欠陥を考察した。その結果、V_O-V_{Al} 複合欠陥は負の荷電状態をとることがわかった。また、形成エネルギーを見積もると 2.59eV となり、V_O が存在すると V_{Al} も同時に形成されやすくなる。さらに電流注入等により系のフェルミレベルが上昇すると V_O-V_{Al} 複合欠陥が自動的に形成され、負の固定電荷が生じることを明らかにした Fig. 1(a)。

ところが、Al₂O₃ 中に N が混入すると状況は一変す

る。N 混入によって V_O 欠陥準位は完全に消滅する。これは V_O 欠陥に由来する準位にトラップされていた電子が価電子帯上端の N2p 軌道に移動することで V_O が V_O²⁺ に変化し、V_O と V_O 周りの Al³⁺ のクーロン引力が減少することで Al³⁺ が外側へ移動し系が安定化することでリーク電流経路が取り除かれるためである。このメカニズムの模式図は Fig. 2 に示す。このことから N はリーク電流減少に効果的である。また、N 混入によって V_O-V_{Al} 複合欠陥における V_{Al} の形成エネルギーが大きく上昇し負の固定電荷は形成されなくなる Fig. 1(b)。これは N 混入により負の固定電荷に起因する V_O-V_{Al} 複合欠陥を抑制できることを意味する。つまり、N 混入は Al₂O₃ 絶縁膜で生じる問題を解決し、デバイス信頼性を飛躍的に向上させることができる。よって AlON は GaN-MOSFET の絶縁膜として非常に有力な候補となる。

References

- [1] R. Asahara et al, Appl. Phys. Exp. **9**, 101002 (2016).
[2] G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B **47**, 558, (1993).

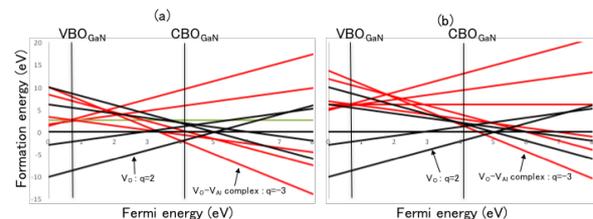


Fig.1 Formation energy diagram. (a) V_O-V_{Al} complex without N (b) V_O-V_{Al} complex with N.

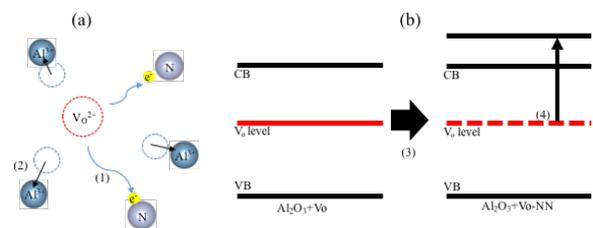


Fig.2 Schematic illustration of the effects of incorporating N atoms. (a) suppression of the negative fixed charge; (1) electron transfer from V_O to the N atoms; (2) outward movement of Al³⁺ ions due to the increase in the Al³⁺-Al³⁺ Coulomb repulsion; (b) elimination of the leakage path; (3) drastic elevation of the V_O level due to the decrease in Coulomb attraction to the Al³⁺ ions around V_O; (4) removal of the gate leakage path due to the elimination of the V_O level.