# n-type GaN/$SiO_2$界面における酸化ガリウム層自己形成の理論予測

Theoretical prediction of a self-forming gallium oxide at an n-type GaN/$SiO_2$ interface

°長川 健太 [1], 成田 哲生 [2], 菊田 大悟 [2], 加地 徹 [3], 塩崎 宏司 [3], 白石 賢二 [3,1]

**Graduate School of Engineering, Nagoya Univ.[1], Toyota Central R&D Labs., Inc.,[2], IMaSS, Nagoya Univ.[3]**

**°Kenta Chokawa[1], Tetsuo Narita[2], Daigo Kikuta[3], Tetsu Kachi[3], Koji Shiozaki[3], Kenji Shiraishi[3,1]**

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

## 1. 背景

GaN-MOSFETs の絶縁膜として $SiO_2$ 誘電膜の研究が盛んに行われており、GaN/$SiO_2$ 界面のトラップ密度やバンドオフセット、デイバス特性などが報告されている。しかし、界面において発生する化学反応や、その結果として生じる界面構造などについての理論的な考察はあまり行われていない。先行研究では界面のバンドダイアグラムとそのフェルミ準位に注目して化学反応を予測し、後に実験により確認がなされた。そのため本研究では n-GaN/$SiO_2$ 界面においても同様の考察を行う事で、界面における化学反応を予測する。

## 2. 結果

まず n-GaN/$SiO_2$ 界面近傍において n-GaN から $SiO_2$ へと電子が移動することで、$SiO_2$ 膜内に負に帯電した酸素空孔欠陥($V_O^{-2}$)が形成されることを確認した。この反応の駆動力は n-GaN のフェルミ準位から$V_O^{-2}$への電子移動によるエネルギー利得であり、$SiO_2$ 単体では自発的には発生しない。この$V_O^{-2}$形成により放出された O 原子が界面において GaN を酸化すると予測し、反応による形成エネルギーを計算した。その結果、GaN の酸化により大きなエネルギー利得が発生し $Ga_2O_3$ 層が形成されることが明らかになった。以上の結果から n-GaN/$SiO_2$ 界面では電子移動が$V_O^{-2}$を引き起こし、GaN が酸化され自発的に $Ga_2O_3$ 層を形成することが明らかになった。これは最新の実験結果と良く一致している。[1] この反応は GaN からの電子移動が反応の駆動力となるため、電子移動が発生しない p-GaN/SiO2 界面においては発生しないことが予測される。

**謝辞**:本研究はトヨタ先端技術公募研究として行われています。

**Reference** [1] K. Mitsuishi et al., Jpn. J. Appl. Phys. 56, 110312 (2017).

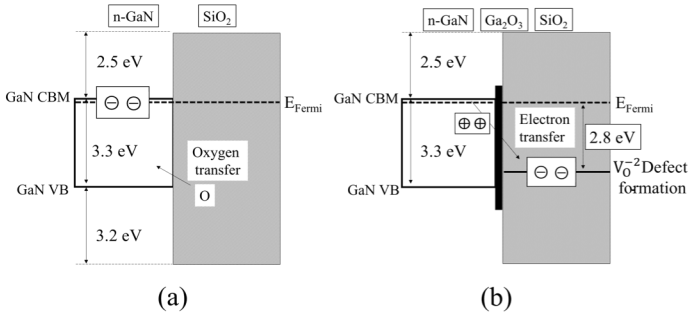


Fig. 1 Schematic illustrations of the self-formation of a $Ga_2O_3$ layer at the n-GaN/$SiO_2$ interface (a) Band alignment between n-GaN and $SiO_2$. The Fermi level position is located near the conduction band minimum (CBM) of the GaN. (b) Two electrons are transferred to the $SiO_2$ and a $V_O^{-2}$ is formed together with the self-formation of $Ga_2O_3$.