AlON ゲート絶縁膜への Hf 添加によるホールリーク抑制の物理的起源

The physical origin of the suppression of hole leakage by Hf incorporation in AlON

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],
[1]Graduate School of Engineering, Nagoya Univ., [2]IMaSS, Nagoya Univ.,
[3]Graduate School of Engineering, Osaka Univ., ○Takuya Nagura[1], Kenta Chokawa[1], Masaaki Araidai[1,2], Takuji Hosoi[3], Heiji Watanabe[3], Atsushi Oshiyama[2], 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。そして、SiC, GaN を用いた MOSFET の絶縁膜の有力な候補として、誘電率が高くバンドギャップも比較的大きい Al_2O_3 が挙げられる。

ところが、Al_2O_3 絶縁膜を用いた SiC や GaN MOS デバイスに正バイアスを印加したところ、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[1,2]。また、Al_2O_3 中に N 原子を添加した AlON においては、固定電荷が低減されることも報告されている[1]。

しかし近年の研究で、AlON ゲート絶縁膜を用いた SiC-MOSFET に負バイアスを印加したところ、ホールリークが発生してしまうことが確認された[3]。これは、AlON 中の N 原子により形成された、バンドギャップ中の欠陥準位に起因することが確認されている[4]。また、AlON に Hf 原子を添加させた HfAlON 絶縁膜を用いることで、バンドギャップ中の欠陥準位が消滅し、ホールリークを抑制できることも確認されている[3,4]。

しかし、Hf 添加により、バンドギャップ中の N 原子の欠陥準位がなぜ消滅するのかは未だに解明されていない。よって本研究では、第一原理計算を用いて、Hf 添加による欠陥準位消滅のメカニズムを原子・電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第一原理計算コード VASP 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 α-Al_2O_3 を準備した。カットオフエネルギーは 500eV とした。

まず、アモルファス AlON モデルを作成する為、Al_2O_3 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、構造最適化を行った。続いて、AlON モデル中の Al 原子 4 つを Hf 原子 3 つに置換し、構造最適化を行うことで、HfAlON モデルを作成した。

3. 計算結果

まず、HfAlON モデル中の Hf-N 結合の有無による状態密度の変化を調べた。Hf 原子添加前のモデル(Fig. 1(a))と、AlON 中の N 原子近傍に Hf 原子を添加したモデル(Fig. 1(b))で比較したところ、バンドギャップ中の N 原子の欠陥準位が消滅していることが確認された。一方で、Hf 原子と N 原子が結合していない HfAlON モデル(Fig. 1(c))においては、バンドギャップ中の N 原子の欠陥準位が消滅していなかった。以上より、添加 Hf 原子が AlON 中の N 原子と結合することで、バンドギャップ中の欠陥準位が消滅しホールリークが抑制されるのだと考えられる。

続いて、Bader Charge 解析を用いて、モデル中の N 原子の価電子数を調べた[5]。結果、AlON モデルよりも、Hf-N 結合のある HfAlON モデルの方が、N 原子の価電子は 0.2~0.6 個ほど少ないことが分かった。このように、Hf 添加により N 原子の価電子数が減少することで、N 原子のポテンシャルエネルギーが減少する。そして、N 原子の状態密度が負にシフトし、バンドギャップ中の欠陥準位の消滅につながるのだと考えられる。

以上より、Hf 原子を N 原子の近傍に添加した場合においては、N 原子の欠陥準位がバンドギャップ中から消滅し、ホールリークを抑制できることが分かった。また Hf 添加によって N 原子の価電子数が減少することが、バンドギャップ中の欠陥準位消滅につながるのだと考えられる。

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. Hosoi et al, IEDM Tech. Dig., 2012, p. 159.
[2] E. Kojima et al, Appl. Phys. Express **11** 061501 (2018).
[3] T. Hosoi et al, Ext. Abstr. International Symposium on Power Semiconductor Devices and ICs. 2017.
[4] 名倉 拓哉 他, AlONゲート絶縁膜へのHf原子混入効果に関する理論的研究, 第79回応用物理学会秋季学術講演会 (2018).
[5] R. F. Bader, Atoms in Molecules: A Quantum Theory (Oxford University Press, Oxford, U.K., (1990).

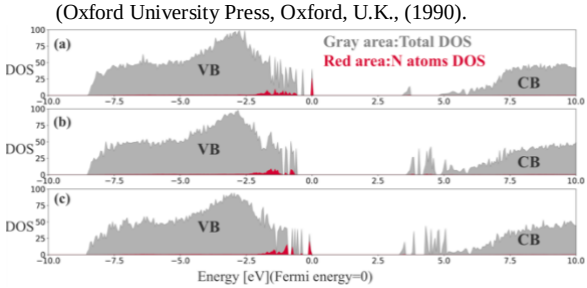

Fig.1: Density of states for (a)AlON and (b)HfAlON with Hf-N bonds and (c)HfAlON without Hf-N bonds.