

n-GaN/Al₂O₃ 界面における Ga₂O₃ 層消失の理論予測

Theoretical prediction of disappearance of Ga₂O₃ layer at the n-GaN/Al₂O₃ interfaces

○長川 健太¹, 白石 賢二^{2,1}

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

○Kenta Chokawa¹ and Kenji Shiraishi^{2,1}

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

1. はじめに

GaN MOSFET 実現に向けて様々なゲート絶縁膜が研究されているが、その中でも Al₂O₃ は大きなバンドギャップや高誘電率を有するため、有力な候補の 1 つである。GaN/Al₂O₃ 界面の界面構造や電子状態は、MOSFET の性能や信頼性に大きな影響を与えるため、非常に関心が高く、理論・実験により多くの報告がなされている。我々は先行研究において、n-GaN/SiO₂ 界面において Ga₂O₃ 層が自発的に形成されることを理論的に明らかにした。本研究では GaN/Al₂O₃ 界面においても、Ga₂O₃ 層が関連する界面反応が存在するのではないかと考え、理論計算を行った。

2. 結果

本研究では n-GaN/Al₂O₃ 界面におけるバンドオフセットと、欠陥や Ga₂O₃ 層の形成エネルギーを用いて、界面反応前後の全エネルギーを比較することで、界面反応が発生可能かを議論する。先行研究では SiO₂ 中の欠陥として酸素空孔欠陥に注目していたが、Al₂O₃ は格子間酸素 (O_i) 欠陥の方が形成されやすいため、O_i 欠陥を含む Al₂O₃ が堆積されているとして議論を行う。この界面ではフェルミ準位が GaN の伝導帯近傍に、O_i 欠陥準位は GaN の Al₂O₃ の価電子帯から 1.0 eV 上に位置する。また、Al₂O₃ 中の O_i 欠陥は GaN の伝導帯から 4.2 eV 下に (0/-2) 遷移準位を有しており、フェルミ準位がこの準位より高い位置に存在する場合には負に帯電した O_i 欠陥 (O_i²⁻) に変化する。そのため、n-GaN/Al₂O₃ 界面ではフェルミ準位から電子が移動し O_i²⁻ 欠陥となる。このとき、電子移動により、電子 1 つあたり 4.2 eV のエネルギー利得が発生する。このように n-GaN/Al₂O₃ 界面では O_i 欠陥が存在すると、電子移動により大きなエネルギー利得が発生する。そこで、Al₂O₃ 堆積時に界面酸

化が発生し、n-GaN/Ga₂O₃/Al₂O₃ 構造が形成される場合を仮定する[図 1.(a)]。このとき、Ga₂O₃ 層が次式のように分解し、放出された O 原子が Al₂O₃ 中で O_i²⁻ 欠陥となるのではないかと考えた。



この分解反応によるエネルギー損失は 1518K において 1.8 eV と報告されており、2 つの O_i 欠陥を形成することが可能でとなる[図 1.(b)]。O_i 欠陥の形成エネルギーは 4.0 eV であり、エネルギー損失が発生するが、電子移動による利得で補うことができ、全反応を通してのエネルギー利得は

$$E = 4 \times 4.2 - 2 \times 4.0 - 1.9 = 6.9 \text{ eV}$$

となり、大きな利得が発生する。つまり、n-GaN/Ga₂O₃/Al₂O₃ 構造は自然に分解し、Al₂O₃ 中に O_i 欠陥を形成して n-GaN/Al₂O₃ 構造となる[図 1.(c)]。

当日の講演では p-GaN/Al₂O₃ 界面についても考察を行う。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)からの委託を受けたプロジェクトの一環として行われた。

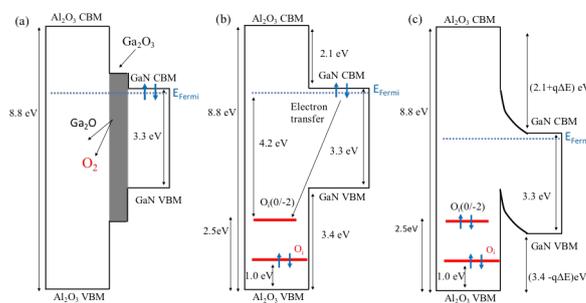


Fig. 1. Schematic illustrations of the band alignment between the (a) n-GaN/Ga₂O₃/Al₂O₃ (b) n-GaN/Al₂O₃. (c) Two electrons are transferred to the O_i defect in the Al₂O₃ resulting in the band bending.