第一原理計算による SiO_2 中 Ga の電子状態解析

Electronic states of Ga in SiO_2 by first principles calculations

富士電機　○大内 祐貴，小笠原 美紀，広瀬 隆之，松山秀昭，上野 勝典，高島信也

Fuji Electric, ○Yuki Ohuchi, Miki Ogasawara, Takayuki Hirose, Hideaki Matsuyama, Katsunori Ueno, and Shinya Takashima

E-mail: oouchi-yuuki@fujielectric.com

【はじめに】

GaN を用いた MOSFET は次世代パワーデバイスとして期待されている。GaN 上の絶縁酸化膜としては、大きなバンドギャップやバンドオフセットの相性などから、SiO_2 が注目されている。しかし、GaN 上に成膜された SiO_2 では、熱処理による Ga の拡散が見出され、絶縁膜の信頼性などへの影響が懸念されている[1,2]。最近では、Ga の拡散環境の違いによる影響も指摘されており[3]、詳細な微視的メカニズムについて議論が続いている。今回、SiO_2 中に拡散した Ga がリークパスの原因になるかを調べるため、第一原理計算を用いて単結晶 SiO_2 中の Ga 不純物が形成するギャップ内準位の解析を行った結果を報告する。

【計算手法】

β-トリジマイト型 SiO_2 の超格子モデル（216 原子）において、Ga 不純物と O の結合状態が異なる 2 つの構造［Si サイト置換 Ga（Ga_{Si}）、格子間 Ga（Ga_i）］を作製した。第一原理計算コード CASTEP を用いて構造最適化計算を行い、欠陥形成エネルギーを求めた。

【結果と考察】

Fig. 1 に Si 過剰・O 過剰環境下における Ga_{Si} および Ga_i の欠陥形成エネルギーについてフェルミ準位（E_F）依存性を示す。Si 過剰な環境では Ga_i が Ga_{Si} に対して安定であるのに対し、O 過剰な環境では Ga_{Si} の方が安定であり、Ga の置かれる環境によって Ga と O の安定な結合状態は変わることが分かった。一方、本計算で用いた構造は、いずれも E_F = 3〜5 eV に準位をもち、GaN のギャップ内に含まれうることから、リークパスの原因になる可能性が示唆された。

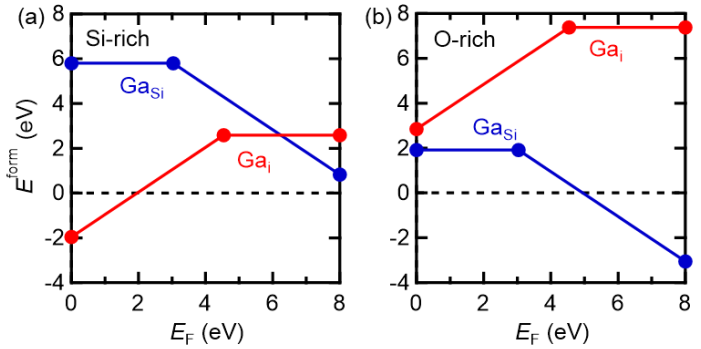

Figure 1. Formation energies of Ga_{Si} and Ga_i in (a)Si- and (b)O-rich conditions as a function of Fermi level (E_F).

【謝辞】

本研究は、名古屋大学未来材料・システム研究所の白石賢二教授、洗平昌晃助教、長川健太氏から助言を頂き実施いたしました。深く感謝致します。

[1] 片岡他，第 77 回応用物理学会秋季学術講演会 14a-P6-13 (2016).

[2] T. Yamada *et al.*, Appl. Phys. Express **11**, 015701 (2018).

[3] 和田他，第 80 回応用物理学会秋季学術講演会 20a-E301-8 (2019).

© 2020年 応用物理学会