

## 酸化ガス照射下での XPS による GaN 表面化学状態の動的その場観察

Dynamic observation of oxidation on GaN surface by real-time XPS under irradiating oxidation gas

物材機構<sup>1</sup>, 原子力機構<sup>2</sup>, 理研 AIP<sup>3</sup> ○角谷正友<sup>1</sup>, 津田泰孝<sup>2</sup>, 坂本徹哉<sup>2</sup>, 隅田真人<sup>3</sup>,

Sang Liwen<sup>1</sup>, 原田善之<sup>1</sup>, 富永亜希<sup>2</sup>, 吉越章隆<sup>2</sup>

NIMS<sup>1</sup>, JAEA<sup>2</sup>, RIKEN AIP<sup>3</sup>, OM. Sumiya<sup>1</sup>, Y. Tsuda<sup>2</sup>, T. Sakamoto<sup>2</sup>, M. Sumita<sup>3</sup>, L. Sang<sup>1</sup>, Y. Harada<sup>1</sup>,

A. Tominaga<sup>2</sup>, and A. Yoshigoe<sup>2</sup>

E-mail: SUMIYA.Masatomo@nims.go.jp

**【はじめに】**現在の GaN MOS パワーデバイスには+c GaN 面上に積層した npn 構造にトレンチやファセットを形成して m 面などをチャンネルとして動作する。極性構造を持つ GaN 表面は面方位によって酸素取込が異なるために[1]、酸化物絶縁層を形成する際にできる界面準位も表面方位に依存すると考えられる。界面準位形成メカニズムの理解に向けて GaN 表面と酸化ガスとの面方位依存性を検討することは重要となる。我々は GaN 結晶表面にさまざまな酸化ガスを照射しながら、その場光電子分光法(XPS)で O 1s スペクトルをリアルタイムに観察し、極性を考慮した GaN 表面モデルから化学状態の考察を行った。

**【実験】**用いた試料は HVPE で成長した+c 面、-c 面および m 面のバルク GaN や MOCVD で成長した GaN 薄膜である。試料を SPring-8 BL23SU の表面実験ステーションに導入した。チャンバー内で 20 分間 900 °C でアニール( $1 \times 10^{-8}$  Pa)を行った後、温度を 200 °C で O<sub>2</sub>、N<sub>2</sub>O、NO ガス分子線(Flux 量:約  $5 \times 10^{14}$  cm<sup>-2</sup> sec<sup>-1</sup>, Energy: 2.2 eV)を照射しながら、GaN 表面の O 1s スペクトルの時間変化を XPS (励起 X 線エネルギー 729.5 eV)で 30 秒ごとにリアルタイムに検出した。極性と表面スピンを考慮した GaN 表面モデルから[2]、第一原理分子動力学計算によって XPS で観測した酸素化学状態の面方位依存性を解析した。

**【結果】**図 1 に O<sub>2</sub>、N<sub>2</sub>O、NO の分子線をそれぞれの GaN 結晶面に照射した時の O1s コアスペクトル強度の照射時間依存性を示す。金属に対する酸化力(ギブス自由エネルギー)とは逆に O<sub>2</sub> 分子線照射で GaN 表面に酸素が最も多く吸着することがわかった。面方位に着目した場合、Ga 終端の+c GaN や Ga 原子が露出している m-GaN 表面に酸素がより吸着しやすい傾向にある。酸素吸着速度が遅いにも関わらず実験的には-c GaN 面に酸素不純物が多く取り込まれる理由は、熱アニールしても-c GaN 表面から酸素は脱離しにくいことから一旦吸着した酸素が抜けにくいと考えられる。

O<sub>2</sub> 分子線照射に対して O 1s スペクトルから+c 表面では主に 2 つの化学結合状態が変化する(図中)。理論計算からも分子吸着と解離吸着の 2 つの状態が安定に存在し、基底状態で三重項状態スピンを持つ酸素分子は+c GaN 表面でスピンを交換しながら乖離吸着していくことが計算からも明らかとなった。チャンネルとなる m 面でも表面スピンは存在し、O<sub>2</sub> 分子と反応するが、Ga や N の表面原子が大きく移動することが分子動力学計算で示された。

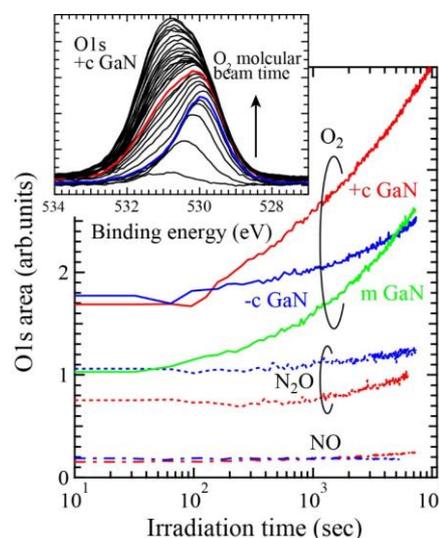


Fig.1 Variation of integral area of O 1s spectra for +c (red), -c (blue), and m (green) -GaN bulk surfaces as a function of irradiation time of oxidation gaseous molecular beam. Inset shows the variation of O1s spectra of +c GaN during O<sub>2</sub> molecular beam irradiation.

**謝辞** 本研究の一部は新学術領域「特異構造の結晶科学」(JP16H06424)の支援を受けた。

**参考文献** M. Sumiya et al., [1] Appl. Phys. Lett. **76**, 2098 (2000). [2] J. Phys. Chem. C **124**, 25282 (2020).