

第一原理計算による GaN/ β -Ga₂O₃ 界面構造の理論解析

Theoretical investigations for structure and stability at the GaN/ β -Ga₂O₃ interface

三重大院工, [○](M2)日紫喜文昭, 秋山亨, 河村貴宏, 伊藤智徳

Mie University, [○]Fumiaki Hishiki, Toru Akiyama, Takahiro Kawamura and Tomonori Ito

E-mail: 420m612@m.mie-u.ac.jp

【はじめに】 GaNは大きなバンドギャップを持つことから光デバイスに加えてパワーデバイスとしての応用が期待されている。GaNにおける金属-酸化物-半導体電界効果トランジスタ(GaN-MOSFET)においてゲート絶縁膜として酸化物を得る方法としてGaN表面を酸化する方法があり、高温での熱酸化では β 相のGa₂O₃(β -Ga₂O₃)とGaNとの界面の形成が報告されている[1,2]。一方、比較的低温での熱酸化においては α 相のGa₂O₃(α -Ga₂O₃)との界面の形成[3]も報告されており、酸化条件と界面構造ならびに形成するGa₂O₃の構造との関係性については不明な点が多い。またGaN/Ga₂O₃界面が形成するGa₂O₃の安定性に及ぼす影響についても検討されていないのが現状である。そこで本研究では、Ga₂O₃における最安定構造である β -Ga₂O₃に注目し、GaN/ β -Ga₂O₃界面の構造および安定性を第一原理計算に基づき検討する。方位関係として実験的に報告のあるGaN(0001)|| β -Ga₂O₃(201)およびGaN[1 $\bar{1}$ 00]|| β -Ga₂O₃[010]を満たす界面[1]において様々な構造を考慮して形成エネルギーを計算し、GaN(0001)基板上での β -Ga₂O₃形成における界面の寄与について議論する。

【結果および考察】 Fig. 1は(6 $\times$ 1)のユニットセルを用いたGaN/ β -Ga₂O₃界面スラブモデルでの形成エネルギーをGaの化学ポテンシャルの関数として表したものである。ここでの形成エネルギーは、3層(ML)の β -Ga₂O₃を積層させてGa-Oボンドを形成する界面(3 ML Ga-O)を基準としており、Ga-Gaボンドの形成やGaおよびO空孔(それぞれV_{Ga}およびV_O)を導入した界面構造も考慮している。この図から、Ga-rich条件において3 ML Ga-Oが最も形成エネルギーが低くなるのに対して、O-rich条件においては4つのV_{Ga}を含みGa-Gaボンドを形成する界面(3 ML Ga-Ga+4V_{Ga})が最も形成エネルギーが低くなる。Ga化学ポテンシャルに依存した安定構造の変化は、酸化条件によって安定となる界面構造が変化することを示唆しており、GaN(0001)面の酸化による β -Ga₂O₃の形成には界面の安定性が大きく寄与することが考えられる。講演では界面エネルギーを用いた安定性の評価についても議論する。

【参考文献】 [1] W. Wei *et al.*, Mater. Sci. Semi. Process. **15**, 578 (2012). [2] T. Yamada *et al.*, J. Appl. Phys. **121**, 0355303 (2017). [3] Y. Dong *et al.*, J. Vac. Sci. Technol. B **24**, 2080 (2006).

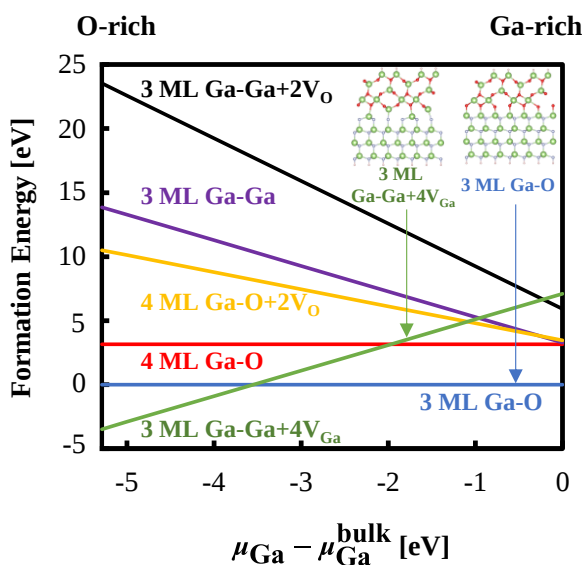


Fig. 1 Calculated formation energy of the GaN/ β -Ga₂O₃ interface for various atomic configurations as a function of Ga chemical potential. Geometries of stable interface are also shown. Green, blue, red, and pink circles denote Ga, N, O, and artificial H atoms, respectively.