

(Al₂O₃)_{1-x}(SiO₂)_x/GaN 界面の原子構造と電子構造の第一原理計算による考察
 First-principles calculation study on the atomic and electronic structures at the (Al₂O₃)_{1-x}(SiO₂)_x/GaN interfaces

○長川健太¹, 白石賢二^{1,2}, 押山淳¹

¹名古屋大学未来材料・システム研究所,²名古屋大学工

○K. Chokawa¹, K. Shiraishi^{2,1}, A. Oshiyama¹

IMaSS, Nagoya Univ.¹, Institute of Engineering, Nagoya Univ.²

E-mail: chokawa@nagoya.ac.jp

1. はじめに

GaNを用いたMOSデバイス作成のため、SiO₂とAl₂O₃の混晶である(AI₂O₃)_{1-x}(SiO₂)_x (AlSiOと呼ぶ)の研究が行われており、高い絶縁特性や低い界面準位密度が報告されている[1]。しかしAlSiO/GaN界面構造は明らかになっておらず、また、酸化膜/GaN界面構造の理論計算は行われてきているが、アモルファス状の酸化膜を用いた報告はなされていない。そこで本研究では密度汎関数理論に基づく第一原理計算を用いて、アモルファスAlSiO/GaN界面の原子構造および電子状態について議論する。

2. 計算手法と計算モデル

本研究では平面波基底を用いるVASPを使用した[2]。計算はGGA交換相関汎関数、PAWポテンシャルを用いて行っており、カットオフエネルギーは500eVとした。本研究ではx=0.38の(AI₂O₃)_{1-x}(SiO₂)_xモデルを作成する。第一原理分子動力学(MD)計算を用いて、melt-quench計算を行うことでAlSiOをアモルファス化させ、AlSiO/GaN(0001)界面およびAlSiO/GaN(000-1)界面を作成した。

3. 結果

MD計算の結果、AlSiO/GaN(0001)界面ではGa-O結合だけが、AlSiO/GaN(000-1)界面ではAl-N結合とSi-N結合が形成され、界面形成前に存

在する未結合手は全て消失した(Fig. 1)。Ga原子、Al原子、Si原子はGaN/AlSiO系においてカチオンとして、O原子とN原子はアニオンとして振る舞う。本計算で形成された結合は、アニオンとカチオンの結合であり、その他の発生しうるカチオン同士やアニオン同士の結合(Ga-Al結合やO-N結合)と比較して安定である。

得られた界面構造の状態密度を計算した結果、AlSiOバルク内部の欠陥準位や界面構造由来の準位がバンドギャップ内に発生しないことが明らかになった。そのため、理想的なAlSiO/GaN界面を用いたMOSデバイスは、高耐圧かつ高いキャリア移動度を有することが期待できる。

References

- [1] D. Kikuta *et al.*, J. Vac. Sci. Technol. A **35**, 01B122 (2017).
 [2] G. Kresse *et al.*, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).

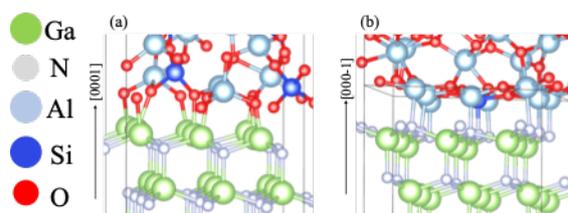


Fig. 1 Atomic structures at the (a) AlSiO/GaN(0001) and (b) AlSiO/GaN(000-1) interfaces.