

計算科学で見るワイドギャップ半導体 MOSFET 界面

MOSFET Interfaces of Wide Gap Semiconductors Studied by Computational Science

名大未来研 °白石賢二, 押山淳

IMaSS, Nagoya Univ., °Kenji. Shiraishi and Atsushi Oshiyama

E-mail: shiraishi@imass.nagoya-u.ac.jp

はじめに SiCやGaNに代表されるワイドギャップ半導体の MOSFET 界面はパワーデバイスの性能に直結するため非常に大きな関心が寄せられている。しかし、Si テクノロジーで利用される Si/SiO₂ 界面が極めて良好であるのに対して、SiC/SiO₂ 界面や GaN/SiO₂ 界面は欠陥準位密度低減等未だ多くの課題が残されている。本講演では SiC/SiO₂ 界面と GaN/SiO₂ 界面の特徴について計算科学の視点から議論する。

SiC/SiO₂ 界面の特徴 SiC の注目すべき特徴は SiC の伝導帯下端が通常考えられる Si と C の反結合軌道ではなく、内包空間に広がる Floating State から形成されていることである[1](Fig.1)。Floating State は SiC/SiO₂ 界面付近に存在する酸化誘起の欠陥によって格子に歪みが印加されると Floating State の量子閉じ込めの状態が変わりそのエネルギー準位が変化する。この結果、Fig.2 に示すように歪み誘起の有効量子井戸が形成されて伝導帯付近に極めて浅い欠陥準位が形成される[2,3]。これらの欠陥準位形成の抑制には SiC の熱酸化をできるだけ避けるようにして酸化誘起の欠陥が SiC/SiO₂ 界面に形成されるのを回避するのが処方箋であり、実験的にも有効である[4]。

GaN/SiO₂ 界面の特徴 GaN の注目すべき特徴は GaN 表面界面の Dangling bond (DB) を占有する電子数が非整数であることである。Ga の DB には 0.75 個の電子が占有され、N の DB には 1.25 個の電子が占有される。このような非整数個の電子をもつ DB を終端するには複雑な機構が必要である。現実には GaN(0001)/a-SiO₂ 界面を形成すると Fig.3 に示すように界面に Ga-O-Si ボンド、周囲に 2 個の Ga と 1 個の Si 原子を持つ 3 配位の O 原子、そして周囲に 2 個の Si と 1 個の Ga 原子を持つ 3 配位の O 原子が形成されて、非整数個の電子をもつ Ga の DB が過不足なく終端されている。一方、Ga 原子から O 原子への電荷移動が生じるため本来 SiO₂ の価電子帯であった O 原子の lone pair のエネルギー準位が上昇し、実験で報告されているホールトラップの原因となる[5,6]。

謝辞 本研究の一部は文部科学省革新的パワーエレクトロニクス創出基盤技術研究開発事業 JPJ009777 の助成を受けたものです。

[1] Y-I Matsushita et al. Phys. Rev. Lett. (2012). [2] K. Chokawa et al. Material Sci. Forum (2013). [3] K. Shiraishi et al. IEDM 2014. [4] K. Tachiki et al. Appl. Phys. Exp. (2021). [5] Y. Wada et al. Appl. Phys. Lett. (2022). [6]服部他, 本講演会.

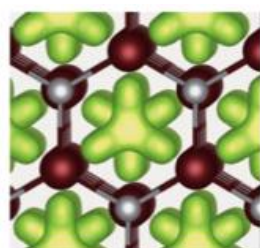


Fig.1 Wave function of SiC conduction band bottom.

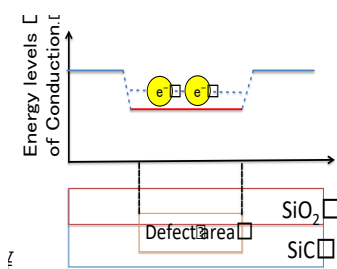


Fig.2. Schematic view of strain induced shallow defect level formation in SiC.

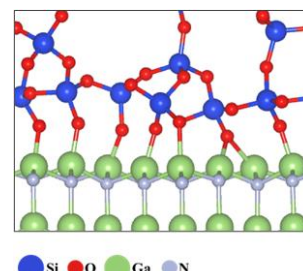


Fig.3. Atomic structure of the GaN/a-SiO₂ interface.