

GaN/SiO₂ 界面のホールトラップの原因の理論的究明とその対策

Investigation of the cause of hole traps at the GaN/SiO₂ interface and countermeasures

名大工¹, 名大未来研² ○(B)服部 柊人¹, 長川 健太², 押山 淳², 白石 賢二^{2,1}

School of Engineering, Nagoya Univ.¹, IMASS, Nagoya Univ.²

°Shuto Hattori¹, Kenta Chokawa¹, Atsushi Oshiyama², and Kenji Shiraishi^{2,1}

E-mail: hattori.shuto@b.mbox.nagoya-u.ac.jp

【はじめに】

次世代パワーデバイスである GaN-MOSFET は、電力効率・動作速度の大きな向上が見込まれており、現在盛んに研究開発が行われている。MOS の絶縁体材料には SiO₂ が有力視されており、GaN/SiO₂ 界面の特性を調べる実験が行われている。実験では界面に多量のホールトラップの存在が報告されており[1]、MOSFET の不安定性の原因になっている。本研究では、GaN/SiO₂ 界面で生じるホールトラップの原因を究明するために、GaN 上に a-SiO₂ 層を堆積したモデルを作成し、第一原理計算によって界面準位の評価を行った。モデルの作成には第一原理分子動力学計算(MD 計算)を用いて GaN バルク(0001)表面上で SiO₂ 結晶を融解後冷却することで、a-SiO₂ と GaN との安定な界面構造を用意した。

【結果と考察】

第一原理 MD 計算により GaN 表面上で a-SiO₂ を形成した結果、発生した界面構造を Fig.1(a)に示す。この構造は1つの Ga のダングリングボンドと1つ3配位の O 原子を界面近傍に持つが、Ga のダングリングボンドの準位は伝導帯中にあり欠陥準位にならないことがわかった。要するにこの構造はエレクトロンカウンティング則を満たしており、界面の結合ボンドが完全に占有された電子的に安定な構造である。次に、界面準位の評価を行うためにバンド構造計算を行った。その結果、価電子帯の上部に界面 Ga-O-Si 結合中の O 原子の lone pair に局在した準位が発生していることが分かった(Fig.1(b))。この準位は GaN のギャップ中に存在するためホールトラップになると考えられる。このように GaN/a-SiO₂ 界面のホールトラップの物理的起源は Ga-O-Si 構造中における O の lone pair であることが判明した。

我々はさらに、Ga-O-Si 構造中における O の lone pair のエネルギー準位を低下させるための試みを行った。MD 計算により得られた GaN/SiO₂

界面モデルの表面 Ga を全て Al に置換して構造最適化を行った。その結果、得られた構造と電子状態を解析した。得られた界面構造は Al 置換前の構造と大きな変化は無く、1つの Al のダングリングボンドと1つの3配位の O 原子を界面近傍に持つエレクトロンカウンティング則を満たした安定な構造である(Fig.2(a))。次にこの界面モデルのバンド構造を Fig.2(b)に示す。この図からわかるようにこれまで価電子帯上方に出現していた界面 O 原子の lone pair に局在した状態が価電子帯の中に埋もれて、欠陥準位を形成しないことがわかった。つまり、GaN/a-SiO₂ 界面は界面に一層の Al 原子を挿入することでホールトラップのない界面を形成できることが分かった。

以上の現象は界面ダイポールによって生じしていると推測した。そこで界面原子の荷電状態を調査したところ、界面の Ga-O 結合により O に強く電子が引き付けられ極性が偏っていることが分かった。このダイポールによって O 原子の lone pair 状態が高エネルギー側にシフトと考えられる。一方 Al を挿入した界面では、Al から N へ移動する電子数の割合が増加しており、Al-O ダイポールを打ち消し、ホールトラップ形成が抑制されたと考えられる。

【結論】

我々は第一原理 MD 計算によって GaN/a-SiO₂ 界面のホールトラップの原因は界面の Ga-O-Si 結合中の O の lone pair であることを解明した。また、このホールトラップは界面への Al の挿入で抑制できることを理論的に示した。

【謝辞】

本研究は、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。

【参考文献】

[1]山田他, 第 79 回秋季応用物理学会, 19p-CE-10 (2018).

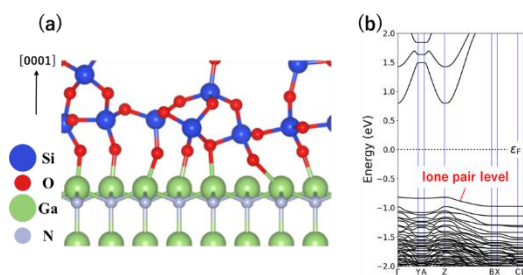


Fig.1 (a) The atomic structure of GaN/a-SiO₂ interface obtained by first principles MD calculation. The species of atoms are indicated in the inset. (b) Calculated band structure of GaN/a-SiO₂ interface.

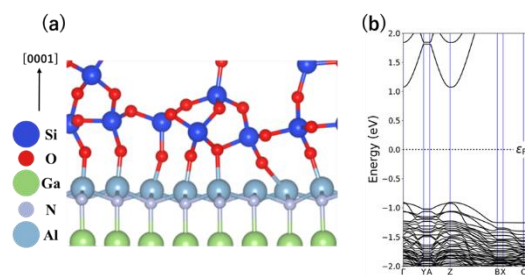


Fig.2 (a) The atomic structure of GaN/a-SiO₂ interface with one monolayer interfacial Al obtained by first principles MD calculation. (b) Calculated band structure of GaN/a-SiO₂ interface with one monolayer interfacial Al.