

GaN(0001)基板上に形成する Ga₂O₃ 膜の構造安定性の理論解析： 膜厚依存性の検討

Theoretical investigations for structural stability of Ga₂O₃ oxide films on GaN(0001) substrate

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ため、光デバイスに加えて電子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る。この方法においては、高温での熱酸化ではGaNとβ相のGa₂O₃(β-Ga₂O₃)との界面を形成し[1,2]、比較的低温での熱酸化ではα相のGa₂O₃(α-Ga₂O₃)との界面の形成[3]が報告されている。これまでに我々は、GaN/Ga₂O₃界面構造の安定性を第一原理計算にもとづく界面エネルギーを評価することで検討し、成長条件に依存して異なる界面構造をとり得ることを見出した[4]。本研究では、GaN/Ga₂O₃界面において形成される酸化膜の形成について自由エネルギーを用いて検討する。GaN/Ga₂O₃界面構造としてこれまでの理論検討において明らかにしたGaN/α-Ga₂O₃およびGaN/β-Ga₂O₃において安定となる界面構造を採用してその界面エネルギーを用い、さらにバルク領域および表面の効果も考慮することで、膜厚の関数として形成するGa₂O₃薄膜の構造について議論する。

【結果および考察】 Fig. 1はGaN/Ga₂O₃界面で形成する4つの界面構造に対して自由エネルギー $F = A(\sigma_{\text{int}} + \sigma_{\text{surf}}) + Ah\varepsilon_{\text{Ga}_2\text{O}_3}(\sigma_{\text{int}}$ および σ_{surf} はそれぞれ界面および表面エネルギー、 A は表面積、 $\varepsilon_{\text{Ga}_2\text{O}_3}$ は単位体積当たりの凝集エネルギー)をGa₂O₃膜の膜厚 h の関数として計算し、GaN/β-Ga₂O₃界面においてGa-O結合をもつ界面構造(Ga-O:β)の自由エネルギーを基準として示したものである。この図から、膜厚が小さい場合、α-Ga₂O₃を形成することがわかり、界面構造として、Ga-O結合をもちGa原子空孔とN原子を(O原子で)置換した構造(Ga-O+V_{Ga}+3O_N:α)が安定となる。また、 $h > 5.45$ Åの膜厚においてはGa-O:βが安定となる。このような膜厚に依存した安定なGa₂O₃薄膜の構造変化は、αおよびβ相における表面エネルギーの違いに起因している。以上の結果は、GaN表面において酸化により形成するGa₂O₃薄膜の構造変化を示唆しており、異なる構造のGa₂O₃薄膜が形成する実験結果[2]とも定性的に一致している。

【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). [4] 日紫喜文昭他, 第82回秋季応物学会, 23p-P07-15 (2021).

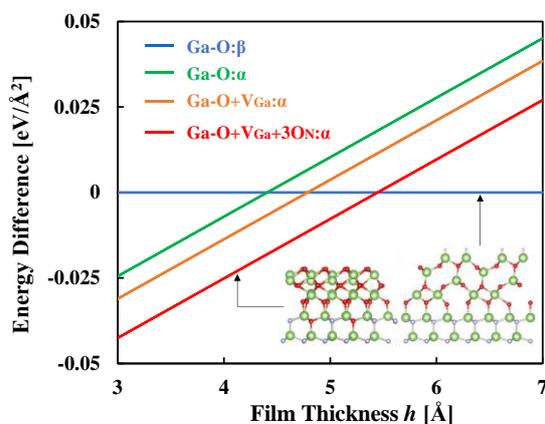


Fig. 1 Free energy difference as a function of film thickness h of Ga₂O₃. Blue, green, orange, and red lines denote the values of each interface structure of GaN/Ga₂O₃, respectively. Green, blue, red, and pink circles denote in geometries Ga, N, O, and artificial H atoms, respectively.