

報告番号	甲 第 12797 号
------	-------------

主論文の要旨

論文題目 **GaN MOSFET 用ゲート絶縁膜の理論的研究**
(Theoretical study on the gate insulators for GaN MOSFET)

氏 名 長川 健太

論文内容の要旨

現代社会では大規模に張り巡らされた送電網のおかげで容易に電力を確保することができ、多くの機器の動力源として電気が使用されている。その結果として、身の回りには非常に多くの高性能な電化製品が溢れて、電力消費量も増加している。これに加え、高度な情報化社会と呼ばれるようになった近年では、データセンターや様々なセンサーなど、20世紀後半には規模の小さかった分野での電力消費も大きく増加している。このような目まぐるしい発展の一方で、低炭素化社会・低エネルギー消費社会を実現することも社会的な要請となっており、電気を動力源とする機器においても高性能だけでなく省エネルギー化が求められている。電気をを用いた機器において必要不可欠な装置として電力変換装置があり、これにより発電所から送られてきた電気の電圧変換や交直変換、周波数変換が行われ、それぞれの機器に適した形で使用されるようになる。このような装置をパワーデバイスと呼び、より高エネルギー変換効率なパワーデバイスの実現により、社会全体での電力損失を大幅に削減することが可能となる。従来のパワーデバイスには、安定動作かつ高変換効率を得られ、安価に作成ができる Si を用いた MOSFET が使用されていた。しかし、Si MOSFET は高耐圧なデバイスにおいてエネルギー損失が大きくなることが知られており、近年の自動車や電車、送電網で使用される高耐圧かつ高変換効率なパワーデバイスへの需要に応えられなくなっていた。このような需要に応えるため、Si を他の材料に置き換えることで、より高性能なパワーデバイスを作成する試みが多くなされおり、その新規材料の1つとして GaN が注目を浴びている。GaN は 3.39 eV という大きなバンドギャップのため、Si よりも高耐圧かつ高変換効率な MOSFET を作成することができ、エネルギー損

失を 90%以上減らすことが可能である。しかし、GaN を用いた MOSFET の研究は現在が黎明期であり、依然として多くの課題が存在している。その 1 つとして、GaN MOSFET に用いる適切な絶縁膜の選択およびその作成法が挙げられる。MOSFET では、使用する絶縁膜の特性や得られる GaN/絶縁膜の界面特性がキャリア移動度や絶縁特性などデバイス性能を決定する。そのため、様々な絶縁膜や GaN/絶縁膜界面の特性の知見を広げていくことが GaN MOSFET の実現に必要となる。これまで、実験により様々な GaN/絶縁膜界面の電気特性は報告されているが、理論計算を用いた原子レベルの微視的な視点からの、界面構造予測や電子状態予測はなされていなかった。そのため、本研究では、第一原理計算やバンドダイアグラムを用いた理論計算を行い、絶縁膜の特性や GaN/絶縁膜界面構造について議論を行った。

本論文の構成は以下のようになっている。

1 章では半導体素子の歴史と、その中でパワーデバイスが担ってきた役割と現代における重要性を確認し、将来的な需要についても述べる。その上で、本研究における主題である GaN やその他のパワー半導体材料を用いたパワーデバイスの現状やそれぞれの課題を整理し、行うべき研究課題を明らかにした。

2 章では、6,7 章で用いた密度汎関数理論に基づく第一原理計算について、その計算手法を詳細に記述した。

3 章から 5 章では GaN/酸化膜界面のバンドダイアグラムを用いて、電子移動を伴う界面酸化反応について議論した。絶縁膜として使用する酸化物により反応に寄与する欠陥構造が変化し、また欠陥のエネルギー準位と GaN のフェルミ準位の相対位置により電子移動の方向とエネルギー利得(損失)の大きさが変化する。これは p-GaN と n-GaN では得られる界面構造が異なることを示している。SiO₂ を用いた場合には n-GaN との界面を形成することで n-GaN から SiO₂ へと電子が移動し V_O 欠陥形成による O 原子放出が発生する。HfO₂ などの high- κ 酸化膜を用いた場合には p-GaN との界面形成により、酸化膜から GaN への電子移動と O 原子放出(V_O 欠陥形成)が発生する。電子移動の方向が異なるが、どちらの場合においても、V_O 欠陥形成とこれに伴う電子移動がエネルギー利得を生みだしその結果として界面酸化が発生し Ga₂O₃ 層が形成されることが明らかになった。また Ga₂O₃ が形成された界面構造ではバンドオフセットが大きくなりゲートリーク電流が減少すると期待される。一方で、界面近傍の欠陥に捕獲される電子の影響により、閾値変動が発生する。Al₂O₃ を用いた場合には O_i 欠陥が界面反応を引き起こす原因となることが明らかになった。p-GaN/Al₂O₃ 界面では O_i 欠陥を解消して O 原子を放出することで界面酸化が発生し Ga₂O₃ が形成される。一方で n-GaN/Al₂O₃ 界面では n-GaN から O_i 欠陥へと電子が移動することで非常に大きなエネルギー利得が発生することが明らかになった。そのため Al₂O₃ の堆積プロセスにおいて n-GaN/Ga₂O₃/Al₂O₃ のような構造が発生しても、Ga₂O₃ 層を分解して Al₂O₃ 中に O_i 欠陥を形成することでエネルギー利得が発生し、界面中間層のない n-GaN/Al₂O₃ 構

造が得られる。このように GaN のフェルミ準位と絶縁膜の組み合わせにより得られる構造が変化し、また電子移動による界面ダイポールの形成がバンドオフセットや閾値電圧にも変化を与える。そのため材料の特性だけではなく、界面を形成することで発生する欠陥形成や電気特性の変化まで考慮した上での材料選択が重要となると考えられる。

6章では GaN MOS ゲート酸化膜として新たに注目されている $\text{Al}_{1-x}\text{Si}_x\text{O}_y$ 複合酸化膜の絶縁特性について検討を行った。通常の Al_2O_3 では高温での熱処理により結晶化が発生し、リーク電流を引き起こすことが問題となっていたが、 $\text{Al}_{1-x}\text{Si}_x\text{O}_y$ 膜ではこの問題は発生せず高い絶縁特性を示す。そこで第一原理計算により $\text{Al}_{1-x}\text{Si}_x\text{O}_y$ 膜中の V_O 欠陥がどのような性質を示すかを調査し、 $\text{Al}_{1-x}\text{Si}_x\text{O}_y$ 膜は V_O 欠陥により絶縁特性を劣化させる欠陥が発生しづらいことを明らかにした。 V_O 欠陥は局所構造に依存してその電気状態を変化させ、発生する一部の構造はバンドギャップ内に欠陥準位を発生させる。しかし、 V_O 欠陥拡散の活性化障壁が小さいため熱処理を行うことでより安定な構造へと変化し、その結果として欠陥準位も消失する。このように、 V_O 欠陥形成による欠陥準位が発生しないため、デバイスの繰り返し動作による欠陥が増加しづらく、閾値電圧変動も発生しない。そのため $\text{Al}_{1-x}\text{Si}_x\text{O}_y$ 膜は GaN MOS ゲート酸化膜として優れた絶縁性能を示す有力な候補であると考えられる。

7章では GaN/ Al_2O_3 の界面構造モデルを作成し第一原理計算を行うことで、実験的に形成され得る理想的な界面構造および、その界面構造が引き起こす電子状態のデバイスへの影響について微視的な視点から議論した。理想的な GaN(0001)面は Ga 原子が最表面に現れており、界面形成により Ga-Al 結合または Ga-O 結合が形成される。2つの結合を比較すると Ga-O 結合の方が高い結合強度を示し、優先的に形成されることが明らかになった。しかしその結合の強さから、界面における O 原子密度が高い場合には複数の Ga-O 結合を有する Ga 原子が発生し、この Ga 原子は Al_2O_3 へと近づくことで Ga-N 結合を切断し界面欠陥準位形成の原因となる。また結合強度的には形成されづらい Ga-Al 結合は、存在するとバンドギャップ内に多くの欠陥準位を形成するため必ず取り除く必要がある。以上の結果から、GaN(0001)面上に Al_2O_3 を堆積する際には、O 原子を含むガスの濃度を制御し、また Al 原子が直接 GaN に吸着することを避けるようなプロセスを行う必要がある。

8章では、今後の課題として、各章において議論しきれなかった項目について記述した。本研究では理論計算を行うために様々なモデルを設定したが、多くのものは非常に簡易なモデルを用いた近似となっている。本研究の結果だけでも多くの重要な知見が得られたと考えているが、より現実に近い系を模擬した計算を行うことで、さらに詳細な議論が可能になると考えられる。

以上のように、本研究では理論計算により、次世代パワーデバイスとして期待される GaN MOSFET 実現に向けて、酸化膜や界面の特性について考察を行った。本研究の結果は実験だけでは得ることのできない非常に微視的な情報を含んでおり、実験で得られた結果を考察するための、またプロセス改善を行っていく上での指針となると考えている。GaN MOSFET 実現に向けては、本研究で注目した酸化膜やその界面の問題以外にも多くの課題

がある。これらの課題についても第一原理計算などによる、原子レベルの微視的な観点からの知見も必要になると考えられる。そのため、本研究で得られた知見や、今後の理論計算によって得られる新たな知見が GaN MOSFET 実現に向けた多くの研究に寄与し、低炭素社会実現の土台となることを期待する。