

論文審査の結果の要旨および担当者

報告番号	※ 甲 第 12797 号
------	---------------

氏 名 長川 健太

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)

論文審査担当者

主査	名古屋大学	教授	白石 賢二
委員	名古屋大学	教授	宮崎 誠一
委員	名古屋大学	准教授	堀田 昌宏
委員	名古屋大学	准教授	芳松 克則

論文審査の結果の要旨

長川健太君提出の論文「GaN MOSFET用ゲート絶縁膜の理論的研究」は、理論計算によってGaN MOSFET用のゲート絶縁膜とGaNとゲート絶縁膜の間の界面構造や界面反応を議論したもので、GaNとゲート絶縁膜界面で起こる諸現象を明らかにし、実験研究者に多くの示唆を与えている。各章の概要は以下の通りである。

第1章では、半導体素子の歴史、MOSFETの動作原理にはじまり、パワーデバイスの基本原理から市場規模等のパワーデバイスを取り巻く現状について詳しく述べている。

第2章では、本博士論文の一部で用いる第一原理計算手法について詳細に説明している。ボルン・オッペンハイマー近似に始まって密度汎関数法の基本原理からKohn-Sham方程式の導出、さらに本研究で用いる擬ポテンシャル法から結晶に用いる平面波基底の第一原理計算手法や結合状態解析法について述べている。

第3章では、n-GaN/SiO₂界面におけるGa₂O₃層の自発形成について理論的に議論している。通常はSiO₂中にO空孔欠陥(Vo)が自発的に形成することはあり得ない。しかし、n-GaN/SiO₂界面においては、高い位置にあるフェルミレベルからSiO₂中のVo²⁺欠陥に電子移動が起こり、この電子移動によるエネルギー利得が極めて大きいため、通常は形成されないSiO₂中のVo欠陥が自発的に形成される。Voの自発形成によって生じたO原子はGaNを酸化し、結果的にn-GaN/SiO₂界面にGa₂O₃層を自発形成することになる。この結果は最近物質材料研究機構の三石らが報告している実験結果をよく一致するものである。また、Ga₂O₃層の自発形成の際に起こるn-GaNからSiO₂への電荷移動により界面にダイポールが形成され、SiO₂のGaNに対する伝導帯オフセットが増加する。この傾向は阪大の渡部教授のグループの実験報告と一致する。

第4章では、p-GaN/HfO₂界面におけるGa₂O₃層の自発形成について理論的に議論している。HfO₂はVoが形成されやすい材料であるが、HfO₂単体ではVoの自発形成は起こらない。ところが、HfO₂がp-GaNと界面を形成すると様子が変わってくる。HfO₂中にVoが形成されO原子が放出される。このとき生じたVo準位からp-GaNのフェルミレベルに電子が流れ込むことによるエネルギー利得とGaNが酸化されるエネルギー利得によってp-GaN/HfO₂界面の間にはGa₂O₃層の自発形成が起こることを理論的に予言した。

第5章では、n-GaN/Al₂O₃界面におけるGa₂O₃中間層の自然消滅について理論的に議論している。n-GaN/Al₂O₃界面の間にGa₂O₃中間層が存在していたとする。これはGaNの自然酸化によって形成されたGa₂O₃層を想定したものである。この中間層から酸素が抜け、Al₂O₃中の格子間酸素(O_i)になることを考える。O_iのエネルギー準位はAl₂O₃の価電子帯上端から約1eVの位置にあるので、Ga₂O₃中間層からO原子が抜けてAl₂O₃のO_iが形成されると、それと同時にn-GaNのフェルミレベルからO_iのエネルギー準位への電荷移動が起こる。この電荷移動のエネルギー利得は非常に大きくGa₂O₃中間層からO原子抜けは自発的に生じることになる。この結果、初期の構造にGa₂O₃中間層が存在してもその上にAl₂O₃を積層することでGa₂O₃中間層が自然消滅することになる。このGa₂O₃中間層が自然消滅はいくつかの実験結果と整合するものである。

第6章では、Si原子導入によるAl₂O₃中の酸素空孔欠陥準位の消失について議論している。Al₂O₃中のO原子空孔の欠陥準位はGaNのバンドギャップ中に位置するため、リーク電流等GaN MOSFETの性能劣化に重大な影響を及ぼす。このO原子空孔の欠陥準位をなくすことがGaN MOSFETの信頼性向上に極めて重要である。Al₂O₃絶縁膜中にSi原子を導入したAlSiO絶縁膜ではO原子空孔はAl原子に隣接した位置には形成されず2つのSi原子に挟まれた位置に形成され、2つのSi原子は共有結合ボンドを形成し、O原子空孔はGaNのバンドギャップ中に欠陥準位を形成しないようになる。このようにAl₂O₃絶縁膜中にSi原子を導入したAlSiO絶縁膜は、O原子空孔を起源とする欠陥準位がGaNのバンドギャップ中に形成されないため、高い信頼性のGaN MOSFET用の絶縁膜となることを理論的に示した。本研究成果は豊田中央研究所の菊田らの実験結果をよく説明するものであると同時に、GaN MOSFET用のゲート絶縁膜形成技術に有力な指針を与えた。

第7章では、GaN/Al₂O₃界面構造について第一原理計算を用いて議論している。GaN/Al₂O₃界面の結合がAl-Gaの時にはGaNのバンドギャップ中に界面準位が形成される。また界面の結合がAl-Oの時にはGaNの価電子帯付近にN原子のダングリングボンド起因の欠陥準位が形成されることがわかった。ところが、エレクトロンカウンティングルールを考慮して界面の酸素量を減少させることによって界面準位のない理想的なGaN/Al₂O₃界面が形成できることを原子レベルで示した。本研究はGaNとAl₂O₃ゲート絶縁膜は理想的には界面準位なしにMOSFET構造を実現できることを明らかにしており、今後のGaN MOSFET技術が将来性に満ちたものであることを示唆する結果になった。

論文審査の結果の要旨

第 8 章では残された課題と今後の展望について述べ、第 9 章では本研究の結論を与えている。

以上のように本論文は、GaN MOSFET用のゲート絶縁膜及びGaN/ゲート絶縁膜界面の界面構造、界面反応を理論計算を用いて体系的に論じたものである。通常は起こりえない界面反応が電荷移動を考慮すると自発的に生じることを指摘する等、界面物理としても界面技術としても非常に重要な研究成果を含んでおり、今後のGaN MOSFET技術への貢献は非常に大きいと考えられる。よって、本論文の提出者である長川健太君は博士（工学）の学位を受けるに十分な資格があると判断した。