

機械学習ポテンシャルMDを用いた a-Al₂O₃/GaN 界面の欠陥状態解析

Defect state analysis of a-Al₂O₃/GaN interface using machine learning potential MD

名大工¹, 産総研² ○(M1)佐藤 昂輝¹, 上沼 睦典², 陣内亮典¹, 旭 良司¹

Nagoya Univ.¹, AIST², °Koki Sato¹, Mutsunori Uenuma², Jinnouchi Ryosuke, Ryoji Asahi¹

E-mail: sato.koki.e0@s.mail.nagoya-u.ac.jp

GaN を用いた半導体デバイスは、省エネ、省資源に大きな役割を果たす次世代のパワーエレクトロニクスとして注目されている。GaN を基板に用いたパワーデバイスにおける大きな課題のひとつは良質な絶縁膜の形成である。ゲート絶縁膜としてアモルファスアルミナ (a-Al₂O₃) を用いた場合、その形成時に熱酸化により酸化ガリウム層 (GaO_x) が生成され、それによる欠陥準位や固定電荷がデバイス特性の低下や劣化要因となることが指摘されている。一方、酸化ガリウム層を適切に制御することで高品質な界面が形成される可能性が実験により示唆されており[1]、界面構造と物性の詳細な理解が望まれている。そこで本研究では、a-Al₂O₃/GaO/GaN 界面の原子モデルを機械学習ポテンシャル分子動力学シミュレーション (MLP-MD) [2]によって生成し、界面構造が物性に及ぼす影響を調べた。

まず、第一原理分子動力学計算を用いた液体急冷法によってアルミナをアモルファス化し、実験から提案された界面構造を参考に、a-Al₂O₃/GaO/GaN 界面モデルを作成した。次に、このモデルを用いた第一原理計算のデータを on-the-fly 法によって学習することで機械学習ポテンシャルを構築した。このポテンシャルを用いた MLP-MD によって、大規模モデル(約 1000 原子)に対して長時間緩和を行い、得られた構造の電子状態解析を行った。

a-Al₂O₃/GaO/GaN 界面モデルを 400–800 K で 1 ns 緩和させた構造に対して、第一原理計算によって欠陥構造を評価した結果、Ga-O 結合の未形成部分に欠陥準位が形成されることが分かった (Fig.1)。また緩和温度が高温になるほど、界面における Ga の拡散が顕著になり、欠陥準位の形成もより顕著に観察された。計算で得られた界面構造は、光電子ホログラフィ[1]から得られた界面原子の局所構造とほぼコンシステントであることが確認できた。一方、GaO 層を挿入しない界面では、Ga-O 結合の未形成部分や Ga-N 結合の消失による欠陥準位が観測された。これらの結果より、Ga-O 結合の形成を促進する条件下で欠陥準位密度が低減することが示唆された。

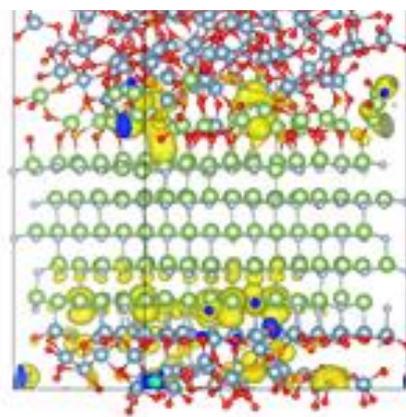


Fig.1: Interface structure of a-Al₂O₃/GaO/GaN where in-gap defect states are visualized (yellow).

(1) Uenuma et al., Appl. Phys. Express 15, 085501 (2022).

(2) Jinnouchi, Miwa, Karsai, Kresse, Asahi, J. Phys. Chem. Lett. 11, 6946 (2020).