

〈一般研究課題〉 半導体パワーデバイスの実用化に向けた
窒化ガリウム中欠陥の物性解明
助成研究者 名古屋大学 堀田 昌宏



半導体パワーデバイスの実用化に向けた 窒化ガリウム中欠陥の物性解明

堀田 昌宏
(名古屋大学)

Characterization of point defects in gallium nitride for semiconductor power device applications

Masahiro Horita
(Nagoya University)

Abstract :

Energy levels due to intrinsic point defects are identified by deep-level transient spectroscopy (DLTS) for vertical GaN power device applications. Electron-beam (EB) irradiation created nitrogen vacancies (V_N) and nitrogen interstitials (N_I) in n- and p-type GaN layers grown via metalorganic vapor phase epitaxy on freestanding GaN substrates, where the irradiation energies were selected to be within 100–401 keV to displace only nitrogen atoms in GaN. For n-type GaN, two electron traps, EE1 ($E_C-0.13$ eV) and EE2 ($E_C-0.98$ eV), were observed in the DLTS spectra. On the basis of a comparison with the results of recent first-principles calculations, we attributed the EE1 and EE2 peaks to nitrogen vacancies $V_N(+/0)$ and nitrogen interstitials $N_I(0/-)$, respectively. Furthermore, annealing led to reductions of the densities of these traps at the same rate. The reduction of the densities of EE1 and EE2 can be explained by the migration of N_I and the subsequent recombination with V_N . For p-type GaN, one hole trap, EHa ($E_V+0.52$ eV) was observed in the DLTS spectra. The EHa peak was attributed to nitrogen vacancies $V_N(3+/+)$ or nitrogen interstitials $N_I(2+/+)$, compared with the results of first-principles calculations. We also found that the EHa peak was changed by forward current in pn diodes.

1. はじめに

半導体パワーデバイスは、鉄道、自動車、太陽光/風力発電所から家電製品、情報機器の電源まで、様々な場面で用いられ、現代社会を支えている。超スマート社会実現に向けて、省エネルギー技術の開発が急務であり、半導体パワーデバイスは、さらなる性能向上が求められている。現在、パワーデバイス用材料には主にSiが用いられているが、Siデバイスは物性値から決まる物理的限界に達しつつある。この限界を打開する次世代パワーデバイス用材料として、ワイドギャップ半導体である窒化ガリウム(GaN)が注目を集めている。GaNは、Siと比較して、約3倍のバンドギャップ(3.4 eV)、約10倍の絶縁破壊電界(3.3 MV/cm)を有しており、高耐圧・低オン抵抗、さらに高温動作が可能な次世代パワーデバイス材料として期待されている。近年のバルク結晶技術の進歩により、低転位GaN自立基板が実現、市販されるようになり、高純度かつ低欠陥密度のホモエピタキシャルGaN成長が可能になったことから、従来の横型高電子移動度トランジスタ(HEMT)構造デバイスのみならず、縦型パワーデバイスの研究開発も活発化している。図1に縦型パワーデバイスの一例として、トレンチ型金属-酸化膜-半導体電界効果トランジスタ(MOSFET)の構造を示す。縦型パワーデバイスは、耐圧維持層である低濃度ドーパント型エピタキシャル成長層(以下、エピ層)、チャンネルとなるp型領域(ドーピング濃度: $10^{17} \sim 10^{18} \text{ cm}^{-3}$)とMOS界面構造、コンタクトのための高濃度n型およびp型領域から構成されており、ドーピング濃度を高い精度で制御しつつこれらの構造を形成する必要がある。一方で、これらの構造を作製するためには、イオン注入や反応性イオンエッチングなど、様々なプロセスを経る必要があり、これらのプロセスにおいては、種々の点欠陥が導入される。これらの点欠陥は、バンドギャップ中に準位を形成し、結果ドーピング濃度変化やキャリア移動度の低下の原因となる。高性能パワーデバイスを実現するためには、デバイスに導入される種々の点欠陥各々について、その物性や挙動を理解し、点欠陥の導入を抑制するためのプロセスの改良、あるいは点欠陥に対応したデバイス設計を行うことが必要不可欠である。

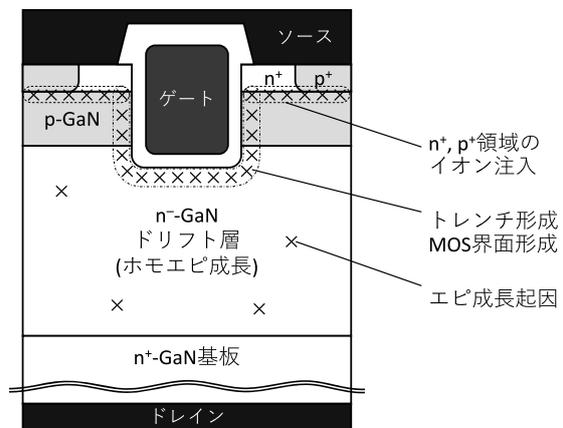


図1. トレンチ型MOSFETの構造とプロセスにより導入される点欠陥

2. 電子線照射による意図的欠陥導入

プロセス中に導入される点欠陥は、構成元素以外の元素が混入することによる不純物欠陥と、結晶を構成する原子が結晶中の異なるサイトに位置することによる真性欠陥に分類されるが、中でも真性欠陥は、それを直接評価する手法が限られており、GaNにおいて、真性欠陥の知見は極めて限定的であるのが現状である。本研究では、この真性欠陥の物性や挙動を明らかにすることを目的とし、研究に取り組んだ。真性欠陥の物性評価には、欠陥の濃度を変化させた試料が必要である。一般的に、エピタキシャル成長時の条件を変化させれば、真性欠陥の濃度は変化すると考えられるが、この方法においては、複数種の真性欠陥の濃度が同時に変化することから、特性変化の原因を特定することが困難である。そこで本研究では、電子線(EB)照射によってGaNに特定の点欠陥を意

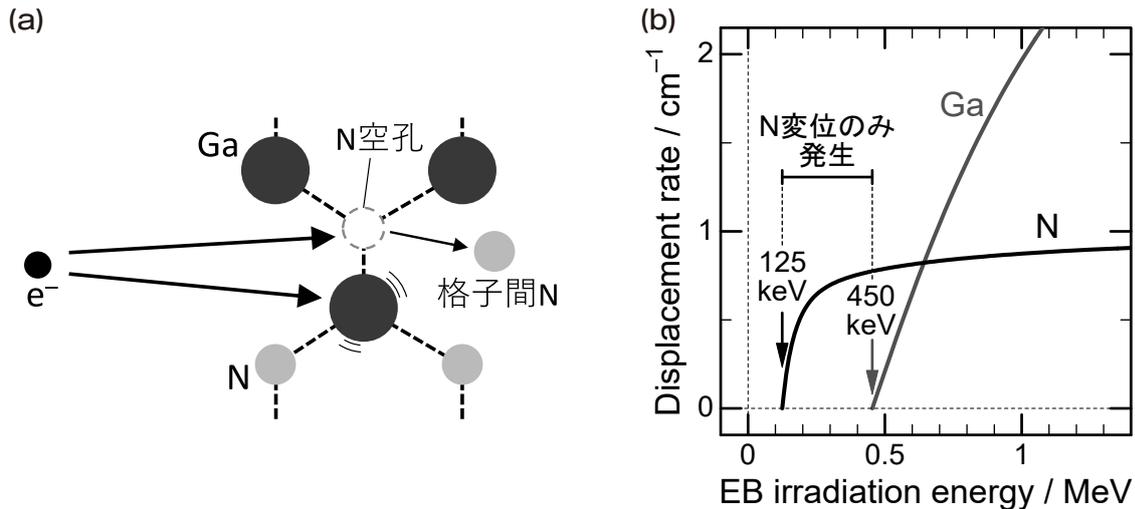


図2. (a) EB照射による原子変位の様子、(b) GaNにおけるGa、N各原子の変位レート

図的に導入し、評価することを試みる。GaNに対して百keV～数MeVのエネルギーをもつEBを照射することで、図2(a)に示すように、GaやNの原子を変位させ、空孔や格子間原子を形成することができる。図2(b)は、GaNへのEB照射におけるGaやNの変位レートの、照射エネルギー依存性である^{1,2)}。N原子変位のしきい値は、Ga原子変位のしきい値よりも低く、これらしきい値の間のエネルギーでEB照射を行うことで、N原子変位のみを発生させることが可能である。本研究では、N原子変位のみを発生させたGaNに対して、深い準位過渡容量分光(DLTS)法を用いて、バンドギャップ内に存在する準位を調べることで、窒素空孔(V_N)および格子間窒素(N_i)が形成する準位の物性と挙動を明らかにすることを試みた。

3. 実験方法

EB照射および評価を行った試料の構造を図3に示す。Ni/n-GaNショットキーバリアダイオード(n型評価SBD)を用いてn型GaN中の電子トラップを、 p^-/n^+ ダイオード(p型評価PND)を用いてp型GaN中の正孔トラップをそれぞれ評価した。各エピ層の成長は、自立GaN基板上への有機金属気相エピタキシー(MOVPE)によって行った。n型評価SBDでは、Siドープn型GaN(濃度 $2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 、膜厚 $3 \mu\text{m}$)の成長後、裏面にTi/Alオーミック電極を形成した。次にEB照射を行い、最後にNiショットキー電極を形成した。p型評価PNDでは、Siドープn型GaN(濃度 $6 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$)、Mgドープp型GaN(濃度 $8 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 、膜厚 $3 \mu\text{m}$)、高濃度Mgドープp型層を成長後、表面にNi/Auオーミック電極、裏面にTi/Alオーミック電極をそれぞれ形成し、デバイス形成後にEB照射を行った。いずれの試料も、オーミック電極形成のための熱処理($550 \sim 650^\circ\text{C}$)は、EB照射前に行っており、この熱処理がEB照射によって形成された欠陥に影響を与えないようにしている。EB照射エネルギーは、 $137 \sim 401 \text{ keV}$ の間で変化させ、

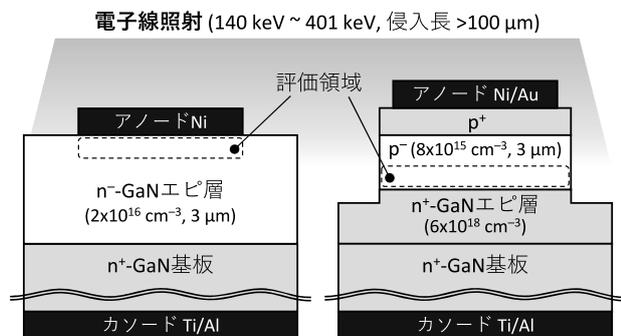


図3. DLTS評価に用いたデバイスの構造。
左: n型GaN評価用SBD、右: p型GaN評価用PND。

照射フルエンスは、 $0 \sim 2.4 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ の範囲で行った。ここで、照射するEBの侵入長は $100 \mu\text{m}$ 以上であり、評価対象の膜厚($\sim 3 \mu\text{m}$)と比べて十分長いことから、EB照射による点欠陥形成は、深さ方向に対して均一であるとみなすことができる。これらの試料に対して、DLTS法³⁾によってトラップの評価を行った。DLTS法は、ダイオードにおいて、逆バイアス(電圧 V_r)状態から、パルス電圧(電圧 V_p 、時間 t_p)を印加することで、空乏層内のトラップを多数キャリアによって占有させた後、トラップがキャリアを放出する過程を過渡容量変化によって検出し、トラップを評価する方法である。測定条件の典型的な値は、 $V_r = -5 \text{ V}$ 、 $V_p = 0 \text{ V}$ 、 $t_p = 200 \text{ ms}$ である。測定温度、および過渡応答の観測時間を変化させることで、準位のスペクトル(それぞれDLTS、ICTSスペクトルと呼ばれる)を得ることができ、ピークの高さから準位の密度を算出することができる。また、スペクトルから得られる放出時定数のアレニウスプロットをとることによって、傾きから準位のエネルギー深さ、切片から捕獲断面積が得られる。

4. 実験結果

4.1 Ni/n-GaNショットキーバリアダイオードによって評価した電子トラップ

n型評価SBDに対して、照射フルエンスを変化させてEB照射を行った場合のDLTSおよびICTSスペクトルを図4に示す。as-grown(未照射)試料を含むすべての試料において、E1 ($E_c - 0.24 \text{ eV}$)およびE3 ($E_c - 0.56 \text{ eV}$)トラップが観測されており、これらはn型GaNのエピ層に存在するトラップであることが報告されている⁴⁾。これに対して、EB照射を行った試料において、as-grown試料では観測されないピークEE1およびEE2が観測された。これらは、照射フルエンスに応じて増加しており、EB照射に起因する準位であると言える。図5にEE1およびEE2のアレニウスプロットを示す。EE1およびEE2のエネルギー準位は、それぞれ $E_c - 0.13 \text{ eV}$ 、 $E_c - 0.98 \text{ eV}$ であった。GaNの点欠陥が形成する準位は、第一原理計算によって予測することが可能であり、いくつかの報告がある。単一の原子空孔および格子間原子で、伝導帯下 1 eV の範囲では、 $V_N(+/0)$: $E_c - (0.004 \sim 0.30) \text{ eV}$ ^{5,7-9)}、 $N_i(0/-)$: $E_c - 1 \text{ eV}$ ^{6,8)}、 $V_{Ga}(Ga空孔)(2-/3-)$: $E_c - (0.71 \sim 1.11) \text{ eV}$ ^{8,9)}、 $Ga_i(格子間Ga)(2+/+)$: $E_c - 0.94 \text{ eV}$ ⁸⁾の報告がある。EB照射では、空孔と格子間原子がペアで生成されることを考慮すると、EE1およびEE2は、それぞれ V_N および N_i であると考えられる。

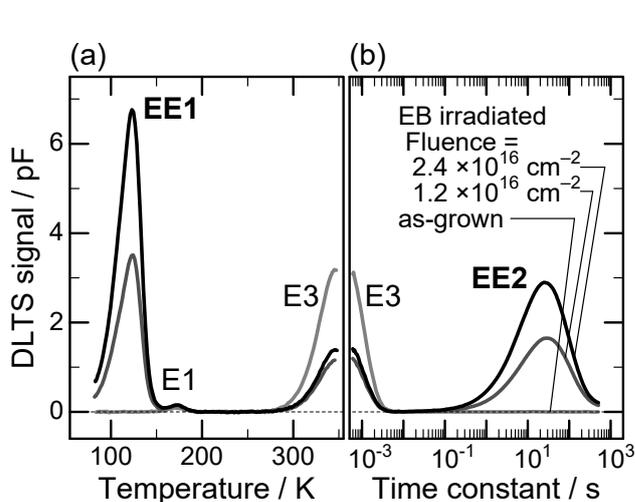


図4. EB照射を行ったn型GaNのDLTSスペクトル

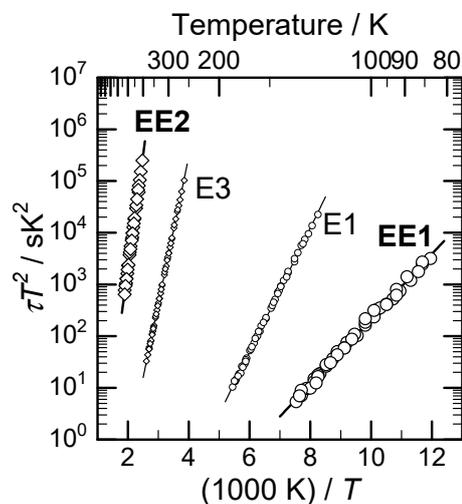


図5. 電子トラップEE1、EE2のアレニウスプロット

EE1およびEE2が出現するエネルギーしきい値を調べるため、照射フルエンスを $2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ で一定とし、照射エネルギーを100~401 keVで変化させた試料を作製し、DLTS評価を行った。EE1に着目すると、照射エネルギー137 keV以上では、ピークが観測されるのに対して、100 keVではピークが観測されなかった。EE1のトラップ密度のエネルギー依存性より、EE1すなわち V_N が導入される照射エネルギーのしきい値が125 keVであると算出され、これよりN原子のdisplacement energyが、21.8 eVであることが分かった。

また、EB照射を行ったn型GaNに対して、熱処理を行うことで、これらのトラップの挙動を調べた。図6は、DLTS測定において、複数回のスキャンを行いつつ、スキャンの最高温度を上昇させることで得たDLTSスペクトルである。DLTS測定の高温領域では、試料は測定と同時に一定時間熱処理されることから、この複数回スキャンDLTSスペクトルの変化は、熱処理がトラップに与える影響を示している。温度スキャン回数の増加とともに、EE1およびEE2のトラップ密度が減少している様子が観測され、その減少幅はEE1とEE2でおよそ1:1であった。EE1、EE2がそれぞれ

V_N 、 N_i であり、これら点欠陥がマイグレーションすることによって、対消滅していると考えられる。 V_N および N_i の、第一原理計算によるマイグレーション障壁の報告値は、それぞれ3.8 eV、1.9 eV¹⁰⁾であり、 N_i の方が小さいことから、 N_i がマイグレーションしていると考えられる。このように、EB照射によってN原子のみ変位させることによって、 V_N および N_i が形成する電子トラップの観測に成功し、また、熱処理によるそれらの挙動についての知見を得ることができた。

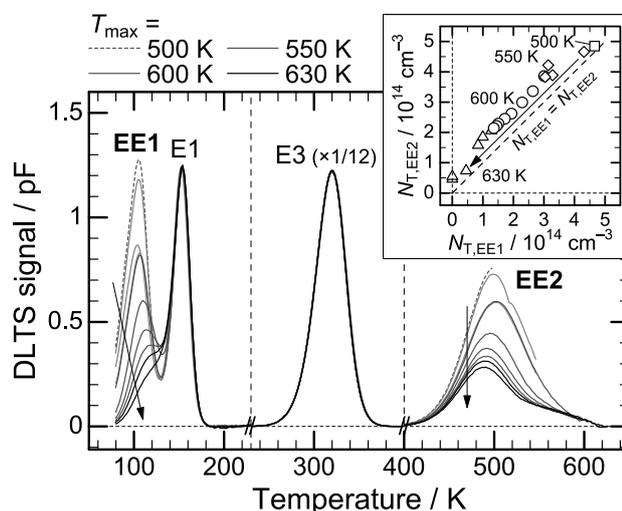


図6. DLTS複数回スキャンにおけるスペクトルの変化

4.2 p/n⁺ダイオードによって評価した正孔トラップ

p型評価PNDに対して、エネルギー137 keV、フルエンス $2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ でEB照射を行った場合のICTSスペクトルを図7に示す。as-grown試料およびEB照射において、 H_a ($E_V+0.83 \text{ eV}$)が観測されており、これはp型GaNのエピ層に存在する炭素に起因するトラップであることが報告されている¹¹⁾。一方で、EB照射を行った試料では、as-grown試料では観測されないピーク観測され、EB照射に起因する正孔トラップEHaが存在することが分かった。図8に示すアレニウスプロットより、EHaのエネルギー準位は、 $E_V+0.52 \text{ eV}$ であった。第一原理計算による予測と比較すると、EHaは、N原子変位関連欠陥である $V_N(3+/+)$: $E_V+(0.45 \sim 0.54 \text{ eV})$ ^{5-9,12)}あるいは、 $N_i(2+/+)$: $E_V+(0.51 \sim 0.99 \text{ eV})$ ^{6,8,12)}のいずれかであると考えられる。

また、正孔トラップEHaにおいては、異常な挙動が観測された。評価に用いたPNDに対して、順バイアスを印加し、 20 Acm^{-2} の電流密度で、500s間電流を流すと、図7に示すように、EHaトラップが減少するとともに、新たなトラップEHbが出現することが分かった。図8にEHbのアレニウスプロットを示す。EHbのエネルギー準位は、 $E_V+0.5 \text{ eV}$ であり、EHaの近傍ではあるものの、

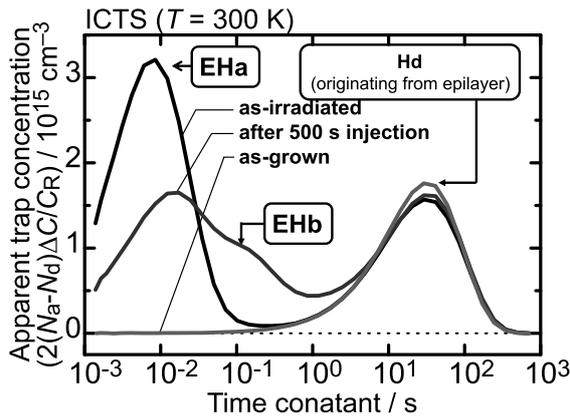


図7. EB照射を行ったp型GaNのDLTSスペクトル。PNDへ順バイアスを印加した後に観測されるスペクトルも示す。

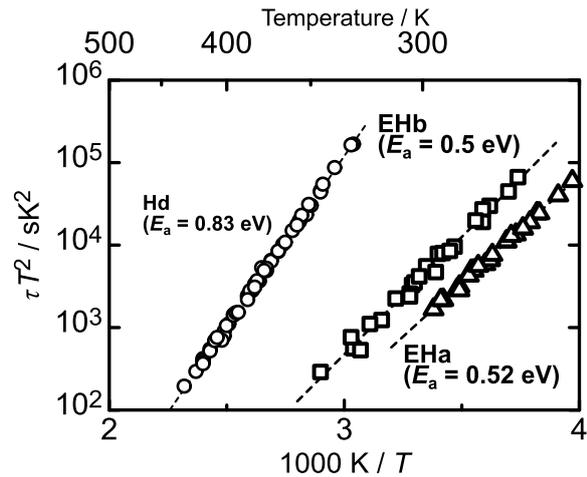


図8. 正孔トラップEHa、Ehbのアレニウスプロット

捕獲断面積は異なっており、EHaとは別のトラップであると言える。Ehbの出現とEHaの減少が同時に起こるとから、EHaの起源(V_N または N_I)と他の点欠陥の反応によって複合欠陥が形成されEhbとして観測されたと考えられる。 V_N および N_I の一方しか観測されていないことの原因や、Ehbの形成過程などについては、今後詳細に調べていく必要があるが、EB照射によって形成される正孔トラップについても一定の知見を得ることができた。

5. まとめ

GaN中に形成される真性欠陥の物性および挙動を解明することを目的とし、GaNに対して、N原子変位のみ発生すると予測されるエネルギーのEB照射を行い、照射前後のDLTS・ICTSスペクトルを比較することにより、バンドギャップ内に形成されたトラップを観測した。n型GaNにおいては、EE1 ($E_c-0.13$ eV)およびEE2 ($E_c-0.98$ eV)が観測された。これらは、それぞれ V_N および N_I であると考えられ、第一原理計算の報告による予測と矛盾しない結果であった。また、熱処理に対する挙動観測では、これらの密度が1:1で減少する様子が観測され、これらの点欠陥が V_N および N_I であり、マイグレーションによって対消滅する様子を示していると言える。p型GaNにおいては、EHa ($E_v+0.52$ eV)が観測された。このトラップは、 V_N 、 N_I の一方であると考えられる。また、ダイオードへの順バイアス印加によって、EHaが変化することが分かった。本研究では、 V_N および N_I に関連する点欠陥が形成するトラップの知見を得ることができた。真性欠陥の全容解明に対しては、まだ限定的ではあるが、継続的に V_N と N_I の定量的考察を行うとともに、Ga変位関連欠陥も調べていくことで、点欠陥の理解を深め、GaNパワーデバイスプロセスで導入される点欠陥の予測・対処を可能にする基礎的知見を蓄積していく。

参考文献

- [1] D. C. Look, D. C. Reynolds, J. W. Hemsky, J. R. Sizelove, R. L. Jones, and R. J. Molnar, *Phys. Rev. Lett.*, **79**, 2273 (1997).
- [2] M. Horita, T. Narita, T. Kachi, and J. Suda, *Appl. Phys. Lett.*, **118**, 012106 (2021).
- [3] D. V. Lang, *J. Appl. Phys.*, **45**, 3014 (1979).

- [4] M. Horita, T. Narita, T. Kachi, and J. Suda, *Appl. Phys. Express*, **13**, 071007 (2020).
- [5] Q. M. Yan, A. Janotti, M. Scheffler, and C. G. Van de Walle, *Appl. Phys. Lett.*, **100**, 142110 (2012).
- [6] H. J. von Bardeleben, J. L. Cantin, U. Gerstmann, A. Scholle, S. GreulichWeber, E. Rauls, M. Landmann, W. G. Schmidt, A. Gentils, J. Botsoa, and M. F. Barthe, *Phys. Rev. Lett.*, **109**, 206402 (2012).
- [7] M. A. Reshchikov, D. O. Demchenko, J. D. McNamara, S. Fernandez-Garrido, and R. Calarco, *Phys. Rev. B*, **90**, 035207 (2014).
- [8] J. L. Lyons and C. G. Van de Walle, *npj Comput. Mater.*, **3**, 12 (2017).
- [9] M. Matsubara and E. Bellotti, *J. Appl. Phys.*, **121**, 195701 (2017).
- [10] A. Kyrtos, M. Matsubara, and E. Bellotti, *Phys. Rev. B*, **93**, 245201 (2016).
- [11] T. Narita, Y. Tokuda, T. Kogiso, K. Tomita, and T. Kachi, *J. Appl. Phys.*, **123**, 161405 (2018).
- [12] I. C. Diallo and D. O. Demchenko, *Phys. Rev. Appl.*, **6**, 1 (2016).