

3_酸化ガリウムへのイオン注入

青木正彦

今回は次世代パワー半導体デバイスとして期待されているベータ型酸化ガリウムへのイオン注入現象について説明します⁽¹⁾。

結晶構造

MARLOWE コードでは単結晶構造を扱うことができます。しかしながらターゲットの構造を正確に設定しなければなりません。結晶の単位格子における原子の配置、結合エネルギー、結晶の振動状態を表すデバイ温度などを与えなければなりません。単位格子における原子の配置に関しては結晶の対称性を理解していなければ正しいデータを与えることができません。ここでは最初に結晶構造を指定するために必要な情報を紹介します。MARLOWE では以下のような結晶系を扱うことができます。

1. 単純(Primitive)
2. 体心(Body-centered)
3. A センタリング(End-centered A)
4. B センタリング(End-centered B)
5. C センタリング (End-centered C)
6. 面心 (Face-centered)

前回取り上げた窒化ガリウムは hP4 と表現されます。これは六方晶(hexagonal)の構造の単純格子(Primitive)であり原子が4個含まれることとなります。結晶軸座標の値は以下の通りです。

	x	y	Z
Ga	0.0	0.0	0.0
Ga	0.3333	-0.3334	0.5
N	0.0	0.0	0.3772
N	0.3333	-0.3334	-0.1228

さてベータ型酸化ガリウムの結晶構造はピアソン記号では mC20 となります。この表記は'm'が単斜晶(monoclinic)を表し、'C'はC センタリングを表しています。そして'20'は単位格子内に原子が20個含まれていることを示しています。C センタリングとは基本となる結晶をC面の中心位置に平行移動させて本来の結晶構造を作る操作を意味します。具体的には平行移動のベクトルは(0.5, 0.5, 0)となります。具体的な結晶軸座標を以下の表にまとめました。この構造に対する対称性の操作により最終的に20個の格子が作られます。

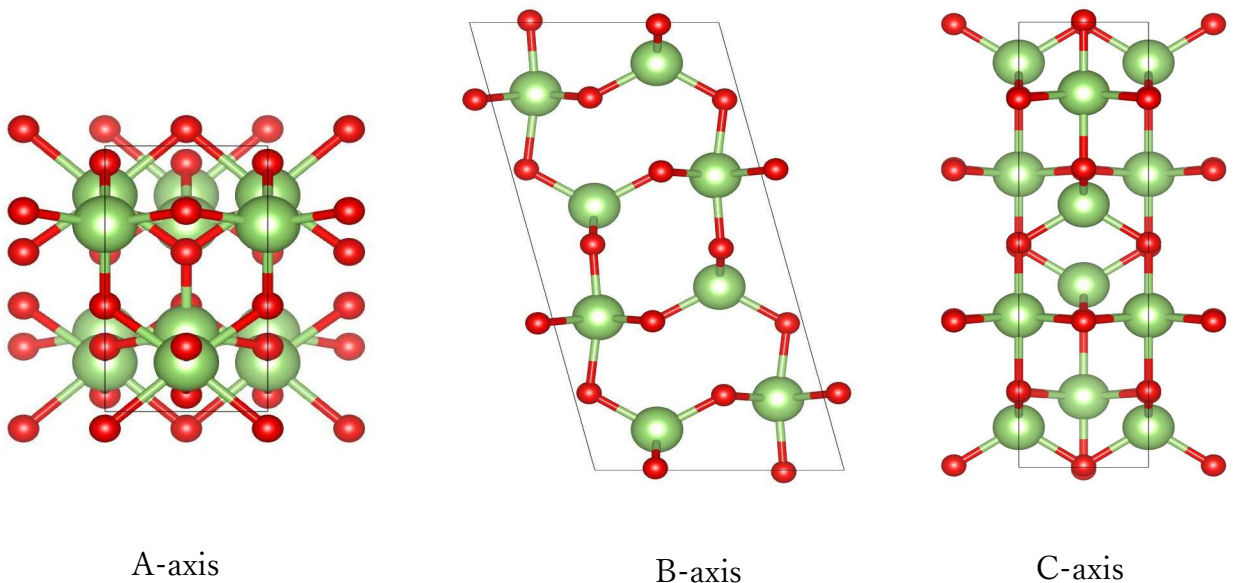
	x	Y	Z
Ga1	0.0904	0	0.2948
O1	0.1674	0	0.6011
O2	0.1721	0	0.0635
Ga2	0.3414	0	0.1857
O3	0.5043	0	0.2447
Ga1	0.9096	0	0.7052
O1	0.8326	0	0.3989
O2	0.8279	0	0.9365
Ga2	0.6586	0	0.8143
O3	0.4957	0	0.7553

ベータ型酸化ガリウムの場合、格子定数は a 軸=12.2247 Å, b 軸=3.0403 Å および c 軸=5.8088 Å です。結晶軸のなす角度は $\alpha = 90$ 度, $\beta = 103.82$ 度および $\gamma = 90$ 度となります。酸化ガリウムの単位格子の体積は下記の式で表されます。

$$V = \frac{1}{2} abc \sin\beta$$

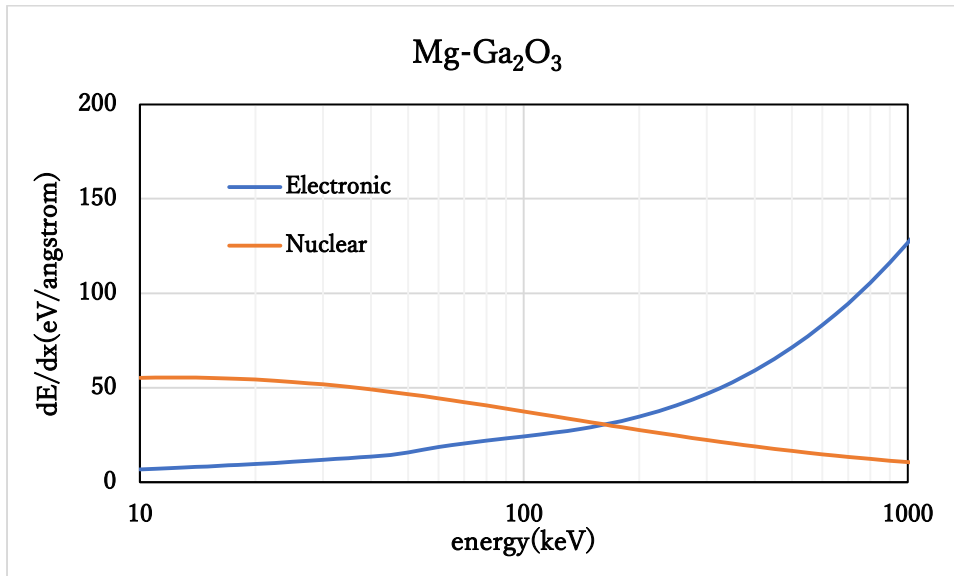
この式から体積は 209.356 \AA^3 となります。この値から原子密度は $9.55 \text{E}22 \text{ n/cm}^3$ と求められます。

下記に各結晶面から見た場合の結晶構造を示します。この結晶モデルは VESTA⁽²⁾ および ReciPro⁽³⁾ というソフトウェアによって作成されました。

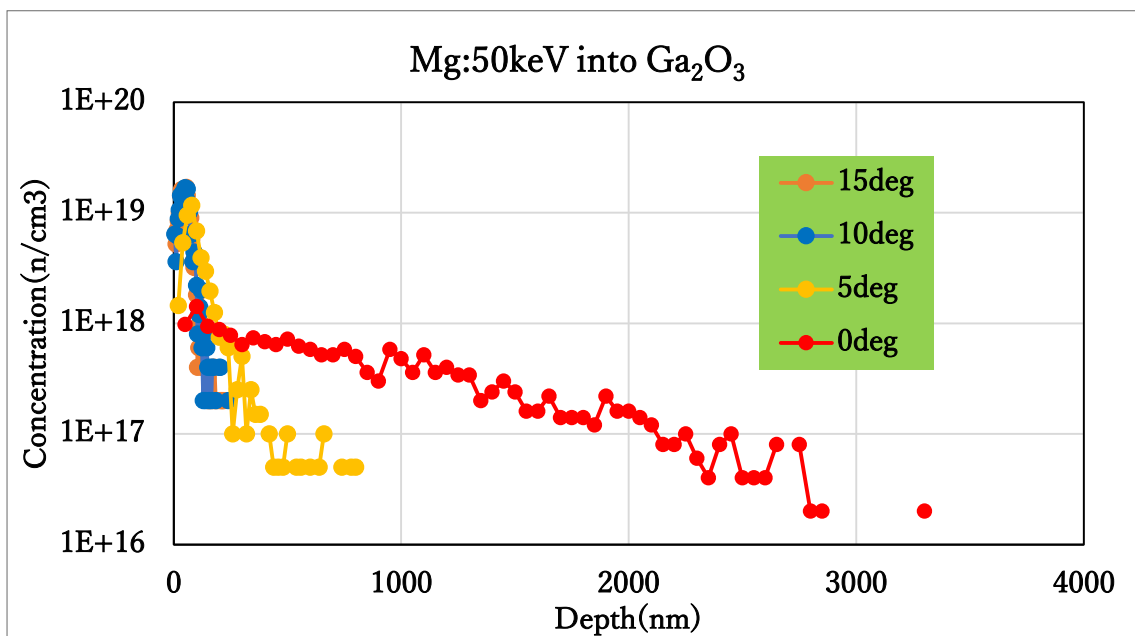


ベータ型酸化ガリウムへのイオン注入

前回の記事で説明したようにイオン注入現象は核による阻止能と電子による阻止能によって説明できます。Mg を酸化ガリウムに注入した場合の阻止能をシミュレーションコード SRIM⁽⁴⁾によって求めた結果を次のグラフに示します。核阻止能と電子阻止能が一致するエネルギーは 180keV 付近となります。このエネルギー以下では核による阻止能が支配的で、このエネルギー以上では電子による阻止能が支配的になります。

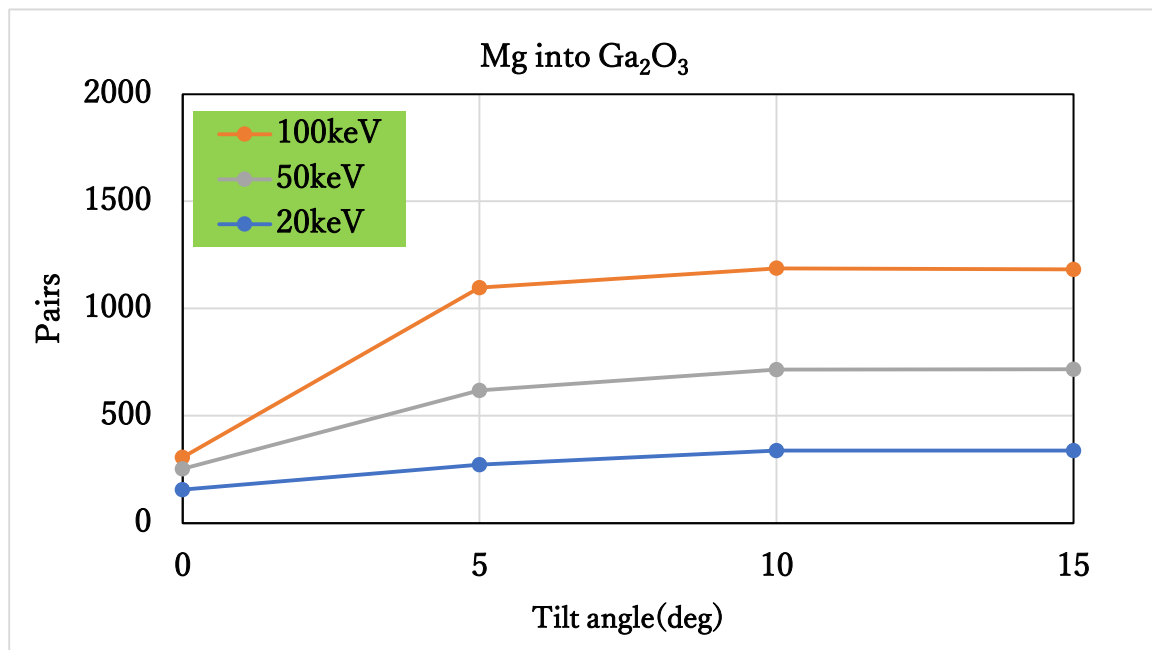


結晶構造から考えると b 軸に沿ってイオンを注入するとイオンが基板深くまですり抜けるチャンネルリング現象が生じやすいことがわかります。下記のグラフはベータ型酸化ガリウムにイオン注入した場合のプロファイルを示しています。プロファイルからわかるように b 軸に沿ってイオン注入を行うとチャンネルリングが生じて 2 μ m 程度の深さまで侵入します。しかしチルト角度をつけることによってランダム注入条件が実現し、チャンネルリングを抑制できることが分かります。



イオン注入によるダメージ

イオン注入によるダメージは衝突によって生じるフレンケル対の数によって評価できます。次の図にはチルト角度を変えた場合にフレンケル対の数がどのように変わるかを調べた結果を示します。エネルギーが低い場合はチルト角度を変えてもフレンケル対の数は大きく増加していません。しかしエネルギーが高くなるとチルト角度によってフレンケル対の数が増加し、5度以上のチルト角度でフレンケル対の数が安定することが分かります。



以上のように窒化ガリウムへのイオン注入現象を MARLOWE コードによる解析結果を用いて説明しました。他のターゲットに関しても結晶構造を正確に指定することによってイオン注入現象を解析することができます。

参考文献

- 1) Z. Hou, et. al., Electronics devices Lett.39, 6, 869 (2018)
- 2) K. Momma and F. Izumi, “VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data,” J. Appl. Crystallogr., **44**, 1272–1276 (2011)
- 3) http://pmsl.planet.sci.kobe-u.ac.jp/~seto/?page_id=19&lang=ja
- 4) <http://www.srim.org/>

お問い合わせ先： 株式会社イオンテクノセンター

URL: <https://iontc.co.jp/contact/>