

高濃度 Mg 添加 AlN および GaN におけるインバージョンドメイン形成に関する 理論的検討: 界面エネルギーによる評価

Theoretical study for the formation of inversion domain boundaries in AlN and GaN doped with Mg: interface energy calculations

三重大院工, ○秋山亨, 中村浩次, 伊藤智徳

Mie University, ○T. Akiyama, K. Nakamura, T Ito

E-mail: akiyama@phen.mie-u.ac.jp

【はじめに】III-V族窒化物半導体ではアクセプター不純物としてMgを高濃度にドーピングすると、Mgを含む逆ピラミッド状のインバージョンドメインが形成されることが知られており、このインバージョンドメインが形成するMg濃度においてキャリア濃度が低下することが報告されている[1,2]。しかしながら、これらインバージョンドメインの形成とMg濃度との関係性については不明な点が多く、インバージョンドメイン形成はキャリア濃度の低下に影響しないという報告もある[3]。これまでに我々は、異種基板上の窒化物ととの界面エネルギーを定量的に計算する手法を開発し、III-V族窒化物-基板界面およびN極性AlN基板上的極性反転へと適用して、その構造安定性を議論してきた[4-6]。本研究ではMg原子を含むインバージョンドメインを対象としてその界面エネルギーを計算し、Mg濃度とインバージョンドメイン形成との関係性を検討する。

【結果および考察】Figは GaN におけるインバージョンドメインを構成する各位面方位での極性反転をともなう (Mg 原子を含む) 界面におけるエネルギーを Ga 化学ポテンシャルの関数として示したものであり、エネルギーの基準はバルク状態の GaN となっている。同様の界面エネルギーが AlN においても得られ、この図から面方位に依存して界面エネルギーが異なり、Mg 原子が $3/2$ ML 取り込まれた $\{0001\}$ 界面において最低値 ($0.001 \text{ eV}/\text{\AA}^2$) をとりバルク状態の GaN と同等になることが解る。また、この界面は界面近傍に Mg 原子を取り込むことによって安定となっており、他の面方位においても Mg 原子を取り込むことで比較的安定な界面を形成し得ることも解る。各面方位の界面エネルギーを比較すると、 $\{11\bar{2}3\}$ 界面のエネルギーは $\{11\bar{2}2\}$ および $\{0001\}$ 界面のものよりも高く、インバージョンドメインは $\{11\bar{2}2\}$ および $\{0001\}$ 面によって構成されるものと考えられる。これら界面に取り込まれる Mg 原子の量を用いてインバージョンドメインに取り込まれる Mg 濃度を見積もると、インバージョンドメイン密度が $3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ と仮定すると $2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 程度となり、キャリア濃度が低下する Mg 濃度と対応したものになる。

【参考文献】[1] P. Vennéguès *et al.*, Appl. Phys. Lett. **77**, 880 (2000). [2] A. Bell *et al.*, Appl. Phys. Lett. **82**, 349 (2003). [3] T. Remmele *et al.*, Appl. Phys. Lett. **99**, 141913 (2011). [4] T. Akiyama *et al.*, Phys. Rev. B **94**, 115302 (2016). [5] H. Nakane *et al.*, J. Cryst. Growth **468**, 93 (2017). [6] 内野 他: 第 64 回春季応用物理学会 17p-P3-22 (2017).

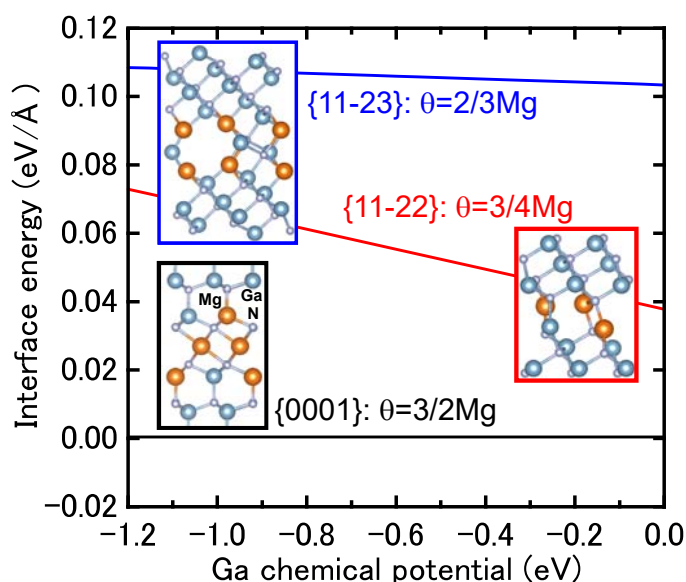


Fig. Calculated interface energies of Mg incorporated inversion domain boundaries for various interface orientations of GaN as a function of Ga chemical potentials. The energy of bulk GaN is set to zero. θ (monolayer) denotes effective Mg concentration at the interface. Geometries inversion domain boundary is also shown.