

GaN における貫通刃状転位の電子状態解析

Electronic structure analysis at threading edge dislocation in GaN

名大工¹, 名大院工², 名大未来研³ [○]中野 崇志¹, 洗平 昌晃^{3,2}, 白石 賢二^{3,2},
田中 敦之³, 本田 善央³, 天野 浩³

Nagoya Univ.¹, Graduate School of Engineering, Nagoya Univ.², IMASS, Nagoya Univ.³

[○]T. Nakano¹, M. Araidai^{3,2}, K. Shiraishi^{3,2}, A. Tanaka³, Y. Honda³, H. Amano³

E-mail: nakano.takashi@h.mbox.nagoya-u.ac.jp

GaN (Gallium Nitride)は次世代半導体として、電子デバイスや電子工学デバイスの幅広い分野で注目を集めている。GaNはSi (Silicon)に比べてバンドギャップが約3倍と広く、熱伝導率、絶縁破壊電界、電子飽和速度等で優れた特性を持っている[1]。そのためGaNは高耐圧・高耐熱・小型化・高速動作の次世代パワー半導体として期待されている。しかし、GaNの結晶成長においては、サファイア(Al_2O_3)基板やSiC基板との間での格子不整合や熱的不整合によって、高密度の貫通転位が生じる[2,3]。貫通転位はGaNを用いた電子デバイスの性能を低下させることが分かっている[4]、混合転位やらせん転位はGaN電子デバイスにおいて観測されるリーク電流の主な原因になっている可能性があるという研究もある[5,6]。したがって、GaNの貫通転位を電子状態の観点から解明し、リーク電流が発生する原因を明らかにすることが、高品質・省電力なGaN電子デバイスの作製を目指す上で非常に重要である。混合転位やらせん転位について調べる前段階として、本研究ではGaNの1/3[11-20]貫通刃状転位に着目し、密度汎関数理論に基づく第一原理計算を用いて、その電子状態を明らかにする。

GaNの1/3[11-20]貫通刃状転位の電子状態を解明するために、貫通刃状転位の原子モデルを作成した。スーパーセル内に数百原子が含まれる初期原子モデルをもとに、構造最適化を行った。例としてスーパーセル内に222原子が含まれる系の初期原子モデルをFig. 1に示す。Fig. 1(a)とFig. 1(b)に[0001]方向と[1-210]方向から見た場合のモデルが示されている。[0001]方向には周期的境界条件を課し、[1-210]方向と[10-10]方向には真空層を設けて表面上に水素終端を行った四角柱状の原子モデルを用いた。GaNの1/3[11-20]貫通刃状

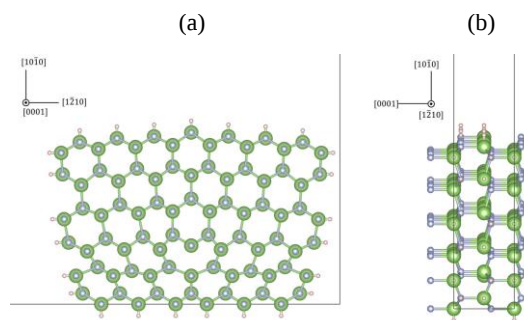


Fig.1 (a) Top and (b) side views of the threading edge dislocation model with 8-atoms ring core. Green, blue and light orange balls are Ga, N, and H atoms, respectively.

転位のコア構造にはいくつかの種類があるが[7,8]、本研究では8員環構造や4員環構造、5/7員環構造を作成し、これらの最安定原子構造における電子状態を計算した。

構造最適化および電子状態は、密度汎関数法に基づく第一原理計算コードであるVASP (Vienna Ab-initio Simulation Package)[9]を用いて計算した。

Fig. 1のような原子数が約200の系における各コア構造の電子状態密度Fig. 2に示す。Fig. 2(a)、Fig. 2(b)、Fig. 2(c)、Fig. 2(d)はそれぞれ8員環構造、4員環構造、5/7員環構造、GaNバルクの電子状態密度を表している。Fig. 2中の0 eVに示した黒線はフェルミエネルギーを表しており、緑で示した部分はバンドギャップを表している。8員環構造はバンドギャップが他の4員環構造や5/7員環構造よりもやや大きく、またGaNバルクにも比較的近いと、リーク電流が流れにくく比較的稳定である可能性がある。本講演ではさらに大きな原子数の系において、電子状態をより詳細に解析する。

謝辞

本研究は「省エネルギー社会の実現に資する次世代半導体研究開発」(文部科学省)からの委託を受けたプロジェクトの一環として行われた。

Reference

- [1] T. Shinohe, TOSHIBA Review, **59** (2004) 2. [2] F. A. Ponce, D. Cherns, W. T. Young, and J. W. Steeds, Appl. Phys. Lett. **69** (1996) 770. [3] W. Qian, G. S. Rohrer, M. Skowronski, K. Doverspike, L. B. Rowland, and D. K. Gaskill, Appl. Phys. Lett. **67** (1995) 2284. [4] Y. Mera and K. Maeda, IEICE Trans. Electron. E83-C (2000) 4. [5] E. G. Brazel, M. A. Chin, and V. Narayanamurti, Appl. Phys. Lett. **74** (1999) 2367. [6] J. W. P. Hsu, M. J. Manfra, R. J. Molnar, and B. Heying, J. S. Speck, Appl. Phys. Lett. **81** (2002) 79–81. [7] R. Gröger, L. Leconte, and A. Ostapovets, Comput. Mater. Sci. **99** (2015) 195–202. [8] I. Belabbas, J. Chen, and G. Nouet, Comput. Mater. Sci. **90** (2014) 71–81. [9] G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B **54** (1996) 169.

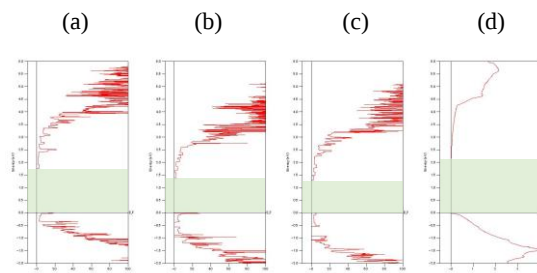


Fig.2 Density of states of (a) 8-atoms ring core, (b) 4-atoms ring core, (c) 5/7-atoms ring core, and (d) bulk GaN models.