## らせん転位および Mg 不純物を含む GaN の電子構造解析

Electronic Structure Analysis in GaN with Mg Impurities and Screw Dislocation

名大院工<sup>1</sup>.名大未来研<sup>2</sup>.学習院大計算機センター<sup>3</sup>.九大応力研<sup>4</sup>

原嶋 庸介<sup>2</sup>, 長川 健太<sup>2</sup>, 洗平 昌晃<sup>2,1</sup>, 白石 賢二<sup>2,1</sup>, 押山 淳<sup>2</sup>, 寒川 義裕<sup>4,2</sup>, 田中 敦之<sup>2</sup>, 本田 善央<sup>2,1</sup>, 天野 浩<sup>2,1</sup> <sup>0</sup>中野 崇志<sup>1</sup>. 草場 彰<sup>3</sup>.

Graduate School of Engineering, Nagoya Univ.<sup>1</sup>, IMaSS, Nagoya Univ.<sup>2</sup>,

Computer Centre, Gakushuin Univ.<sup>3</sup>, RIAM, Kyushu Univ.<sup>4</sup>

<sup>°</sup>Takashi Nakano<sup>1</sup>, Yosuke Harashima<sup>2</sup>, Kenta Chokawa<sup>2</sup>, Masaaki Araidai<sup>2,1</sup>, Kenji Shiraishi<sup>2,1</sup>,

Atsushi Oshiyama<sup>2</sup>, Akira Kusaba<sup>3</sup>, Yoshihiro Kangawa<sup>4,2</sup>, Atsushi Tanaka<sup>2</sup>, Yoshio Honda<sup>2,1</sup>, Hiroshi Amano<sup>2,1</sup>

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

GaNはSiに比べてデバイス特性に優れた次世代半導体として、パワーデバイスの幅広い分野で注目 を集めている[1]。GaN の結晶成長において、基板から引き継がれた貫通転位が GaN 基板上でも観測さ れている[2-4]。貫通転位はリーク電流を発生させ、GaN 電子デバイスの性能を低下させる[5]。宇佐美 らの報告によると、GaN 自立基板上縦型 p-n ダイオードにおいて、ドープされた Mg 不純物による純 らせん転位(b=[0001])近傍への凝集が高濃度(10<sup>19</sup> cm<sup>-3</sup>)で観測されており、Mg 不純物のらせん転位への 偏りがリーク電流に寄与している可能性がある[6]。転位および Mg 不純物のリーク電流への寄与を理 解するには、まず原子レベルでの転位に対する不純物の凝集およびその電子構造について理解する必 要がある。そこで我々はリーク電流の起源の解明に向け、b=[0001]のらせん転位に Mg 不純物が入った 系において、原子レベルでの Mg 不純物の振る舞いおよびその電子構造を解析した。

最初に、らせん転位の転位芯構造を決定するため、密度汎関数理論に基づく第一原理計算コードで ある VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) [7] を用いて、不純物なしのらせん転位において、各転 位芯構造の安定性を調べた。その結果、結晶成長条件を考慮すると、Ga-filled core 構造が最安定であっ た。次に、Ga-filled core 構造を持つらせん転位の系に対して、転位芯から距離が様々離れた位置にある Ga 原子一つを Mg 原子に置換し、各安定性を計算したところ(Fig. 1(a))、Mg 不純物はらせん転位の周 りに凝集することが明らかとなった。転位芯からの Mg 原子の距離が様々離れた各系に対して電子状 態を解析したところ(Fig. 1(d))、Mg原子が転位芯に近づくほど、フェルミ準位が伝導帯下端に近づくこ とから、らせん転位周りに Mg 不純物が凝集すると n 型化することが明らかになった。らせん転位周 りへの Mg 不純物の偏りは、p-n ダイオードの p 型領域においてもドナー準位を生成し、リーク電流に 寄与する可能性がある。本講演では、らせん転位と Mg 不純物を含む GaN においてさらに詳細な電子 構造について述べる。



Fig. 1 (a) Mg position dependence of the formation energy in the system with the screw dislocation. (b),(c) Mg impurity and the screw dislocation models. Green, blue and orange balls indicate Ga, N and Mg atoms, respectively. (d) The relationship between the distance from the dislocation core of the Mg position and the fermi energy in each system.

謝辞: 本研究は文部科学省「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」の委託を 受けたものです。

References : [1] T. Shinohe, TOSHIBA Review, 59 (2004) 2., [2] F. A. Ponce et al., Appl. Phys. Lett. 69 (1996) 770., [3] W. Qian et al., Appl. Phys. Lett. 67 (1995) 2284., [4] S. Usami et al., Appl. Phys. Lett. 112, 182106 (2018)., [5] Y. Mera et al., IEICE Trans. Electron. E83-C (2000) 4., [6] S.Usami et al., 2019 JSAP Meeting 9a-W541-11 (2019)., [7] G. Kresse et al., Phys. Rev. B 54 (1996) 169.