

第一原理計算を用いた転位および不純物がある半導体中における hopping 伝導モデルの構築

Modeling of the hopping conduction in semiconductors with dislocation and impurities from first-principles calculation

名大未来研¹, 名大院工² ○原嶋 庸介¹、中野 崇志²、押山 淳¹、白石 賢二^{1,2}

IMaSS, Nagoya Univ.¹, Graduate School of Engineering, Nagoya Univ.²,

○Yosuke Harashima¹, Takashi Nakano², Atsushi Oshiyama¹, Kenji Shiraishi^{1,2}

E-mail: yosuke.harashima@imass.nagoya-u.ac.jp

パワー半導体素子は我々の生活に密接に関わっており、その性能向上は重要な課題である。GaN はバンドギャップなどの基礎物性が従来の半導体物質よりも適しており、GaN のパワー半導体素子は高性能であることが期待されている。パワー半導体は、その用途から高電圧下での正常動作が要求されるが、ここで問題になるのは、逆電圧印加時のリーク電流である。実験の先行研究から、このリーク電流が半導体素子中の転位がある付近で生じていることがわかっている。また、転位の付近では Mg 不純物の濃度が高くなっていることも報告されている [1]。これらの事実から、リーク電流は転位と不純物によって生じた局在準位間の hopping 伝導であると考えられる。hopping 伝導を媒介する局在準位の電子状態は第一原理計算を用いることで解析することができるが、hopping 伝導はメゾスコピック領域の現象であるため、第一原理計算で取り扱うには計算リソースが大きくなり過ぎる。

我々は、GaN 中の転位および不純物によって生じた局在電子状態と hopping 伝導との関係を明らかにするために、第一原理計算で求めた状態密度から、有効 hopping 伝導モデルを構築する。第一原理計算の結果から、転位と Mg 不純物の相対位置によって状態密度と Fermi 準位が変化することがわかっている。hopping 伝導を記述するモデルには variable range hopping の概念が用いられてきたが、本研究ではこれに転位と不純物によって生じた局在準位の分布をモデルに反映させ、そのモデルを用いて高電圧下での電流電圧特性を求める。講演では有効モデルへ第一原理状態密度を反映させる方法の詳細と、いくつかの典型的な例について計算した電流電圧特性について議論する。

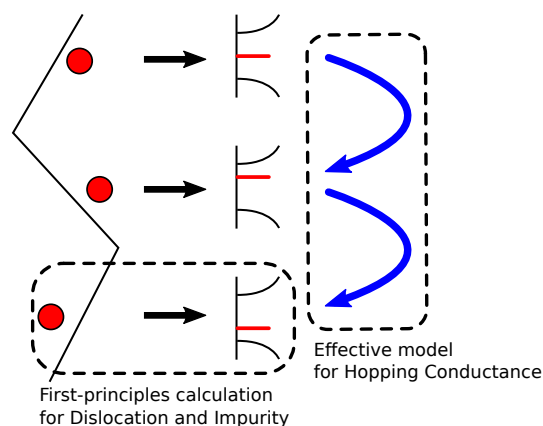


図 1: A schematic picture of our approach for the hopping current. First-principles calculation gives some typical cases of the density of states (middle of the figure) in GaN with dislocation (zigzag line) and an impurity (red circles). We construct an effective hopping model between the localized model from the density of states (red lines).

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。

参考文献 S. Usami, et al, 2019 JSAP Meeting 9a-W541-11 (2019).