GaN 薄膜における貫通転位およびナノパイプ m 壁面の

第一原理計算に基づく電子状態解析

Electronic structure analysis at threading dislocation and at m-plane surface of nanopipes in GaN thin films 名大院工¹,名大未来研²,九大院工³,九大応力研⁴ ⁰中野 崇志¹,長川 健太¹,洗平 昌晃^{2,1},

名大院工¹,名大未来研²,九大院工³,九大応力研⁴ ^O中野 崇志¹,長川 健太¹,洗平 昌晃^{2,1}, 白石 賢二^{2,1},押山 淳²,宇佐美 茂佳¹,草場 彰³,寒川 義裕^{4,2},田中 敦之², 本田 善央^{2,1},天野 浩²¹

Graduate School of Engineering, Nagoya Univ. ¹, IMaSS, Nagoya Univ. ², Graduate School of Engineering, Kyushu Univ. ³, Research Institute for Applied Mechanics Kyushu Univ. ⁴, ^oTakashi Nakano¹, Kenta Chokawa¹, Masaaki Araidai^{2,1}, Kenji Shiraishi^{2,1}, Atsushi Oshiyama², Shigeyoshi Usami¹, Akira Kusaba³, Yoshihiro Kangawa^{4,2}, Atsushi Tanaka², Yoshio Honda^{2,1}, Hiroshi Amano^{2,1}

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

GaN (Gallium Nitride)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]。しか し、GaN 基板上に成長した GaN 薄膜には基板 結晶から引き継がれた貫通転位が存在してい 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 [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[5,6]。また最近では、GaN 薄膜中に中空の転 位芯を持つらせん転位(ナノパイプ)が形成され、 このナノパイプがリーク電流と相関があると の報告もある。しかし、これらの転位芯構造と 電子状態の関係について詳細には分かってお らず、リーク電流の起源について解明されてい ない。本講演では、低損失 GaN パワーデバイ スの作製・実用化に向けて、GaN 薄膜で観測さ れる転位芯構造と電子状態の関係性を明らか にすることで、リーク電流の原因について議論 する。具体的には、密度汎関数理論に基づく第 一原理計算を用いることで、GaN 薄膜において 観測されている[0001]らせん転位の成分を持っ たナノパイプについての構造と電子状態の関 係性を解明し、リーク電流の起源を報告する。

エピ層において観測されているナノパイプ は、m面を壁面に持った六角柱状に中空の構造 をしている。本講演では、リーク電流の測定工 程で生じるナノパイプ壁面(m面)への不純物吸 着とリーク電流の相関について詳細に議論す る。リーク電流の測定に伴うpオーミック電極 の作製工程では、酸素雰囲気下で行うことから、 ナノパイプ壁面への酸素吸着が考えられる。そ こで、GaNのm面へ酸素が吸着した構造の安 定性および電子状態について解析した(Fig. 1)。 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)[7]を用い て計算した。Fig. 1 (a)、(b)はGaNのm面への エネルギー的に安定な酸素吸着構造の[10-10] 方向および[1-100]方向に沿った図を示している。Fig.1(c)、(d)はそれぞれGaNのm面理想表面の電子状態密度、酸素吸着モデルの電子状態密度を示す。Fig.1(c)、(d)中の0eVに示した黒線の位置まで電子が詰まっている。Fig.1(c)に示したGaNのm面の理想表面の電子状態と比較し、Fig.1(d)に示したm面への酸素吸着構造では伝導帯下端付近の状態の数が増加している。このことから、ナノパイプ壁面への酸素吸着構造ではn-GaNにおいてリーク電流の原因になりうることが分かる。本講演ではナノパイプ壁面(m面)への不純物吸着とリーク電流の相関についてさらに詳細に議論する。

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

T. Shinohe, TOSHIBA Review, **59** (2004) 2. [2]
F. A. Ponce et al., Appl. Phys. Lett. **69** (1996) 770.
W. Qian et al., Appl. Phys. Lett. **67** (1995) 2284.
Y. Mera et al., IEICE Trans. Electron. E83-C (2000) 4. [5] E. G. Brazel et al., Appl. Phys. Lett. **74** (1999) 2367. [6] J. W. P. Hsu, et al., Appl. Phys. Lett. **81** (2002) 79–81. [7] G. Kresse et al., Phys. Rev. B **54** (1996) 169.



Fig.1 (a) Top and (b) side views of the oxygen adsorption model. Green, blue, red and light orange balls are Ga, N, O, and H atoms, respectively. Density of states of (c) m-plane ideal surface with same supercell, (d) oxygen adsorption model.