

p 型から n 型へ変える GaN 中のらせん転位と Mg の複合体: 第一原理計算と 3 次元アトムプローブ解析によるアプローチ

Conversion from p-type GaN to n-type by Complexes of Screw Dislocations and Mg: First-principles Calculation and Atom Probe Tomography Analysis

名大未来研¹, 名大院工², 九大応力研³, 東芝ナノアナリシス⁴ ○ 原嶋 庸介¹, 中野 崇志²,
長川 健太¹, 白石 賢二^{1,2}, 押山 淳¹, 寒川 義裕^{3,1}, 宇佐美 茂佳², 間山 憲仁⁴, 戸田 一也⁴,
田中 敦之¹, 本田 善央^{1,2}, 天野 浩^{1,2}

IMaSS, Nagoya Univ.¹, Grad. Sch. Engineering, Nagoya Univ.², RIAM, Kyushu Univ.³,
Toshiba Nanoanalysis Corp.⁴ ○ Yosuke Harashima¹, Takashi Nakano², Kenta Chokawa¹,
Kenji Shiraishi^{1,2}, Atsushi Oshiyama¹, Yoshihiro Kangawa^{3,1}, Shigeyoshi Usami²,
Norihito Mayama⁴, Kazuya Toda⁴, Atsushi Tanaka¹, Yoshio Honda^{1,2}, and Hiroshi Amano^{1,2}
E-mail: yosuke.harashima@imass.nagoya-u.ac.jp

GaN はパワー半導体デバイス材料として高いポテンシャルを持つ化合物であるが、欠陥が生じないように結晶成長させることが難しく、そのポテンシャルを発揮するためには欠陥のような特異構造の物性の理解および制御が重要である。特に基板から引き継がれる貫通転位はリーク電流の原因となっており、デバイス性能および信頼性を低下させている。デバイス性能や信頼性を保障するには、リーク電流発生機構を明らかにする必要がある、現在、様々に研究されている。最近の 3 次元アトムプローブ解析から転位周辺への Mg 不純物の凝集が報告されている。そこで、転位と Mg との複合体の物性を理解し、リーク電流発生との関係を明らかにすることが求められている。

本研究では第一原理計算を使って GaN 中のらせん転位-Mg 複合体の電子状態を明らかにし、アトムプローブを使ってリーク電流が生じるらせん転位への Mg の凝集を調べた [1]。まず我々はらせん転位を含む超格子を用意し、その中の一つの Ga を Mg で置換した系の電子状態を求めた。Mg の置換位置を変えてエネルギーを調べたところ図 1(a) のように Mg が転位に強く束縛されることがわかった。また、Mg と転位が近くなると最高占有準位が伝導帯に近づくことがわかった [図 1(b)]。これは転位と Mg の複合体がドナーとして働くこと、つまり p 型不純物の Mg が転位との複合体になると局所的な n 型領域を生じさせることを示唆している。一方、GaN の p-n ダイオード中でリーク電流が観測されていた部分をアトムプローブで観察してみると [図 1(c)]、らせん転位の周りに Mg が凝集していることがわかった。これは第一原理計算の結果と整合している。

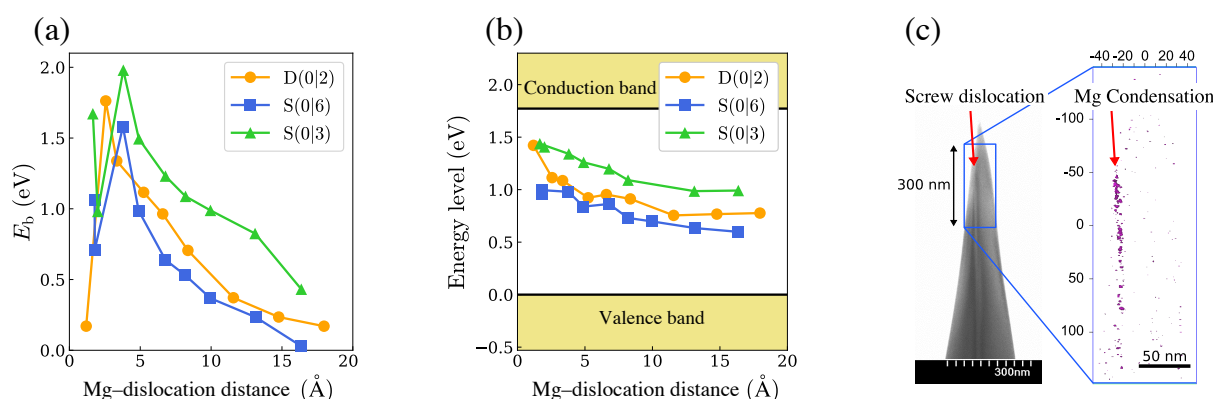


図 1: (a) Binding energies of the Mg-dislocation complexes of the core structures: D(0|2), S(0|6), S(0|3). (b) Highest occupied levels of the complexes. (c) Scanning transmission electron microscope and atom probe tomographic images. The purple dots represent the isoconcentration surface of 0.4 at. % of Mg.

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」事業 JPJ005357 の助成を受けたものです。

参考文献 [1] T. Nakano, Y. Harashima, *et al.*, arXiv:2004.06876 (2020).