

第一原理計算を用いた欠陥のある GaN の絶縁破壊電界の予測

First-principles Estimation of Breakdown Electric Field of defected GaN

早大理工¹, 宇宙研²

張 恵^{1, 2}, 小林 大輔², 山本 知之¹, 廣瀬 和之^{1, 2}

Waseda Univ.¹, ISAS/JAXA²

°Hui Zhang^{1, 2}, Daisuke Kobayashi², Tomoyuki Yamamoto¹, Kazuyuki Hirose^{1, 2}

E-mail: kmkp-n-pguinskl@ruri.waseda.jp, hirose@isas.jaxa.jp

【はじめに】

絶縁破壊電界 E_{bd} が Si の 10 倍である GaN を用いることで、パワーデバイスは理論上約 900 倍の低電力損失を実現できる。一方で GaN 結晶中に発生する高密度の欠陥により、その性能が十分に発揮できないことが報告されており[1]、欠陥が性能に与える影響を理解することが求められている。ここで性能に影響を及ぼす欠陥として貫通転位及び不純物酸素がある。貫通転位は垂直リークの原因となり E_{bd} を低下させ、デバイス性能を劣化させる。不純物酸素は貫通転位と同じくリーク電流パスとして働き、貫通転位の 1 つである c 軸らせん転位に沿って析出することが報告されている[1,2]。すなわち、欠陥による性能劣化には、貫通転位自身の影響と共に、転位芯への酸素の偏析の影響を考慮することが不可欠だ。そこで本研究では貫通転位と酸素が共存する系を再現し、この構造がパワーデバイス性能に与える影響を定量的に予測した。

【計算方法】

欠陥がある系の E_{bd} を簡便に予測する為に提案されたパラメータ・回復率 RR [3]を用いて、欠陥がある GaN 系の E_{bd} を予測する。全電子 LAPW+lo 法に基づく第一原理計算パッケージ WIEN2k [4]を用いて、欠陥(c 軸らせん転位、不純物酸素) があるウルツ鉱構造の GaN に対して、RR を計算した。RR は特定の原子の内殻から電子を取り除いた際の、取り除く電子数に対するその原子の価電子の変化量で定義される[5]。本研究では N 原子から電子を取り除いた。初期構造として $4 \times 2 \times 1$

倍に拡張したウルツ鉱構造 GaN に対して、線形弾性論 [6] に基づき c 軸らせん転位を導入した。次いで、酸素を含む GaN (完全結晶・らせん転位)系のエネルギーをサイトごとに比較し、転位芯に最近接の N 原子と置換した O 原子がエネルギー的に安定であったことから、このサイトに不純物酸素を導入した。電子相関には GGA ポテンシャルを用いた。

【計算結果】

転位と酸素が共存する系にて 4 つの N 原子サイト毎に RR を計算し、RR の分布とその平均値から予測した E_{bd} を Fig.1 に示す。完全結晶 AlN と GaN の文献値 E_{bd} [7]と計算値 RR を用いて検量線を引き[8]、任意の RR に対応する未知の E_{bd} を予測した。Fig.1 の RR の分布より、完全結晶と比較して、転位と酸素が共存する欠陥系の E_{bd} が最大 40%劣化すると予測できた。

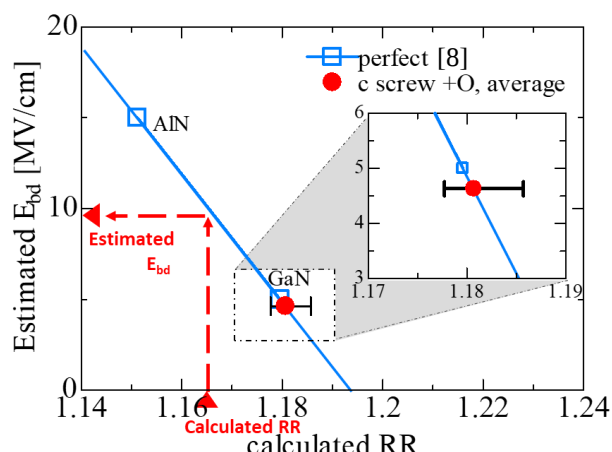


Fig1. Relation between RR and estimated E_{bd} ($4 \times 2 \times 1$ supercell, defected GaN)

- [1] Hsu et al, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 79 (2002).
- [2] P.P.Michalowski et al., *Chem. Commun.*, **55**, 11539-11542, (2019).
- [3] H. Seki et al., *Jpn. J. Appl. Phys.* **51** (2012) 04DA07.
- [4] P. Blaha, et al., WIEN2k, Universitat Wien, Austria, (2001).
- [5] K. Hirose et al., *Appl. Phys. Lett.* **93**, 193503 (2008).
- [6] J. P. Hirth and J. Lothe, "Theory of Dislocations", Wiley, New York, (1982).
- [7] L. M. Wang, Proc. 25th Inter. Conf. Microelectronics, (2006) 576.
- [8] H. Zhang et al., in 80th JSAP (2019) 18a-PB3-14.