

GaN 中のらせん転位-不純物複合体の第一原理量子論による考察

First Principles Investigation of Impurity-Dislocation Complexes in GaN

名大未来研¹, 名大院工² ○白石 賢二^{1,2}

IMaSS, Nagoya Univ.¹, Graduate School of Engineering Nagoya Univ.², ○Kenji Shiraishi^{1,2}

E-mail: shiraishi@cse.nagoya-u.ac.jp

窒化ガリウム(GaN)は次世代パワー半導体材料として、期待を集めている。GaN を用いた縦型 MOSFET (GaN-VMOSFETs)では、ソース-ドレイン間の p-n 接合における逆方向リーク電流の発生が問題となっており、GaN パワーデバイスの実現にはリーク電流を抑制する必要がある。実際に、GaN 自立基板上縦型 p-n ダイオードにおいて、逆バイアス印加により検出されるリークスポットはらせん転位の位置に一致することが分かっている[1]。本研究では GaN 中の p 型不純物である Mg とらせん転位の複合体の電子構造を第一原理計算で明らかにし、p-n ダイオードにおける逆バイアス印加時のリークの原因を明らかにする。

Fig.1 が計算で様々ならせん転位構造の形成エネルギーである。図からわかるように Double(0)2 と表記される Closed Core から N 原子を 2 個抜いた構造が N リッチで安定となり、Single(0)6 と表記される Closed Core から N 原子を 6 個抜いた構造が Ga リッチで安定となる。次に安定であることがわかったらせん転位の周囲に Mg 原子を導入した。その結果、Fig.2(a)に示すように Mg 原子はらせん転位の周りに凝集することがわかった。さらに Mg がらせん転位付近に導入されると Fig.2(d)に示すように GaN の伝導帯下端付近に欠陥準位が出現する。すなわち、GaN 中のらせん転位-Mg 不純物複合体は n 型欠陥として振る舞うことが明らかとなった。これが GaN の p-n ダイオードにおける逆バイアスリークの物理的起源である。講演では詳細な電子状態についても議論する予定である。

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ある。

参考文献

[1] S. Usami, et. al., Appl. Phys. Lett. 112, 182106 (2018).

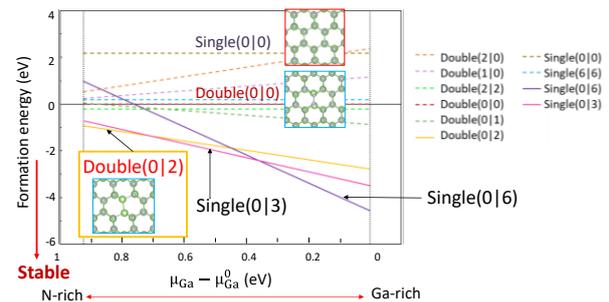


Fig.1: Formation energies of screw dislocations in GaN.

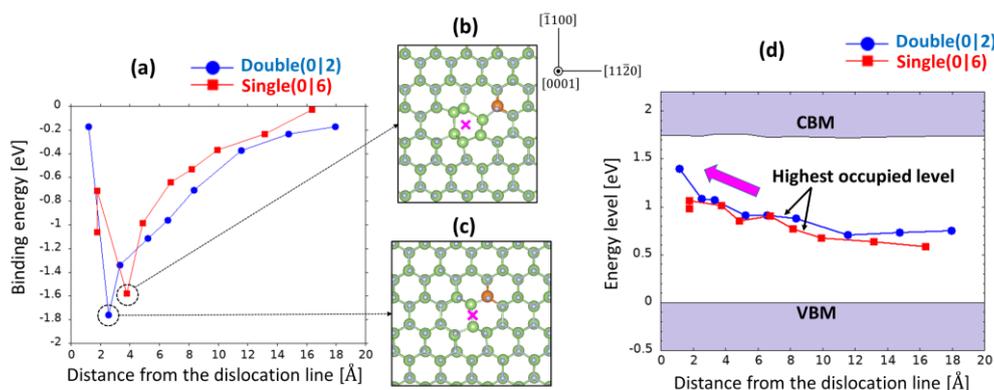


Fig. 2 (a) The binding energy of Mg with the screw dislocation of the Double(0)2 core and the Single(0)6 core.. (b) The most stable core structure of Mg-dislocation complex of a Double(0)2 core and (c) a Single(0)6 core. Green, blue and orange balls indicate Ga, N and Mg atoms, respectively. A pink cross marks denote the dislocation line. (d) Distance dependence of highest occupied level of the system with the Mg-dislocation complex. CBM and VBM denote conduction band minimum and valence band maximum, respectively.