

らせん転位と Mg 不純物との複合体を含む GaN の

第一原理電子構造解析

First-Principles Electronic Structure Analysis in GaN with Screw Dislocation and Mg Impurity Complex

名大院工¹, 名大未来研², 学習院大計算機センター³, 九大応力研⁴○中野 崇志¹, 原嶋 庸介², 長川 健太², 洗平 昌晃^{2,1}, 白石 賢二^{2,1}, 押山 淳², 草場 彰³, 寒川 義裕^{4,2}, 田中 敦之², 本田 善央^{2,1}, 天野 浩^{2,1}Graduate School of Engineering, Nagoya Univ.¹, IMASS, Nagoya Univ.², Computer Centre, Gakushuin Univ.³, RIAM, Kyushu Univ.⁴, Takashi Nakano¹, Yosuke Harashima², Kenta Chokawa², Masaaki Araidai^{2,1}, Kenji Shiraiishi^{2,1}, Atsushi Oshiyama², Akira Kusaba², Yoshihiro Kangawa^{4,2}, Atsushi Tanaka², Yoshio Honda^{2,1}, Hiroshi Amano^{2,1}
E-mail: nakano.takashi@h.mbox.nagoya-u.ac.jp

窒化ガリウム(GaN)を用いた縦型 MOSFET (GaN-VMOSFETs)では、逆方向バイアス印加時のリーク電流の発生が問題となっており、その抑制がデバイス実現に向けた課題となっている。GaN のドリフト層成長では、基板から引き継がれた貫通転位が観測されており[1]、この貫通転位が GaN パワーデバイスの性能を低下させることが指摘されている[2]。GaN 自立基板上に作製された 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報告されている[1]。さらに、p 層中にドーパされた Mg 不純物が、p-n 接合を貫通して存在する転位を通じて n 層へと拡散することが観測されている[3,4]。Mg 不純物とらせん転位との複合体ではバルクとは異なる電子状態が生じていると考えられ、リーク電流に影響する可能性があるが、具体的な伝導機構は明らかになっていない。転位と不純物の複合体によるリーク電流への影響を理解するためには、その電子状態を解明することが必要である。我々は、密度汎関数理論に基づく第一原理計算を行い、Mg 不純物とらせん転位との複合体の電子構造を解析することで、逆方向リーク電流発生への影響を議論する。

初めに、不純物の含まれないらせん転位の転位芯構造を決定するため、複数の転位芯構造の安定性を比較し、Ga-filled core 構造 (Double(0)2 構造と Single(0)6 構造)が安定であると明らかにした。次に、これらの系に対して、転位芯から様々離れた距離にある Ga 原子一つを Mg 原子に置換し、安定な置換位置を調べた結果、Mg 原子が転位芯に近づくほど安定化し、らせん転位は Mg 不純物を引き付けることが明らかになった(Fig. 1(a))。置換したそれぞれの構造に対して電子状態を解析したところ、どちらの転位芯構造においても、Mg 原子が転位芯に近づくにつれ、Mg と転位の複合状態が伝導帯に向けて上昇することが明らかになった(Fig. 1(d))。以上の結果から、らせん転位の周りに Mg 不純物が存在すると、Mg とらせん転位との複合体が形成され、Mg がドナーのような振る舞いをする。そのため Mg-doped p 型 GaN はらせん転位近傍で n 型の振る舞いをし、逆方向バイアス印加時にはリークスポットとなる。これは実験結果と一致しており我々の計算によりリーク発生機構が示された。

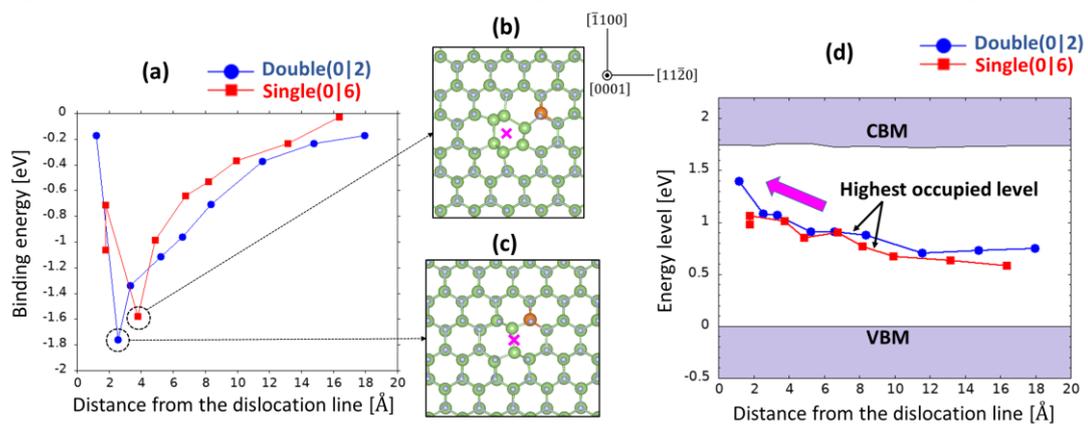


Fig. 1 (a) The binding energy of Mg with the screw dislocation of the Double(0)2 core and the Single(0)6 core. Horizontal axis is the Mg distance from the dislocation line. The origin of the binding energy is set to that at an infinite distance from the dislocation line. (b), (c) The most stable core structure of Mg-dislocation complex of a Double(0)2 core and 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 levels of the system with the Mg-dislocation complex. CBM and VBM denote conduction band minimum and valence band maximum, respectively.

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。

References : [1] S. Usami, et al., Appl. Phys. Lett. 112, 182106 (2018). [2] Y. Mera et al., IEICE Trans. Electron. E83-C (2000) 4., [3] S. Usami et al., Appl. Phys. Lett. 114, 232105 (2019). [4] J. Chen et al., Appl. Phys. Express 12, 051010 (2019).