

# GaN におけるらせん転位と Mg および H 不純物の複合体の電子構造解析 Electronic Structure Analysis of a Complex of Screw Dislocation, Mg and H Impurities in GaN

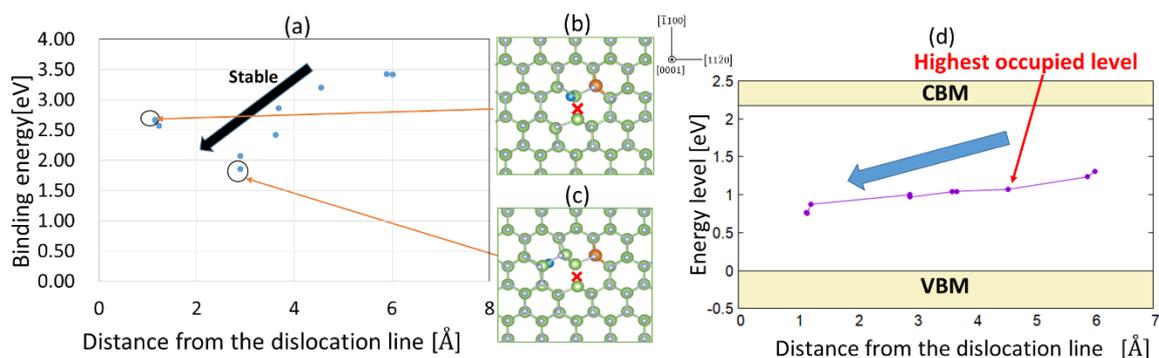
名大工<sup>1</sup>, 名大院工<sup>2</sup>, 名大未来研<sup>3</sup>

○井上 尚輝<sup>1</sup>, 中野 崇志<sup>2</sup>, 原嶋 庸介<sup>3</sup>, 洗平 昌晃<sup>3,2</sup>, 白石 賢二<sup>3,2</sup>, 押山 淳<sup>3</sup>,  
Nagoya Univ.<sup>1</sup> Graduate School of Engineering, Nagoya Univ.<sup>2</sup>, IMASS, Nagoya Univ.<sup>3</sup>,  
°Naoki Inoue<sup>1</sup>, Takashi Nakano<sup>2</sup>, Yosuke Harashima<sup>3</sup>, Masaaki Araidai<sup>3,2</sup>, Kenji Shiraiishi<sup>3,2</sup>,  
Atsushi Oshiyama<sup>3</sup>

E-mail: inoue.naoki@f.mbox.nagoya-u.ac.jp

GaN はデバイス特性に優れた次世代パワー半導体として注目されている[1]。GaN パワーデバイスの高電界動作には、逆バイアス印加時のリーク電流の抑制が重要課題である。先行研究から、GaN 中の貫通転位によるデバイスの性能の低下が指摘されている [2]。また、GaN 自立基板上縦型 p-n ダイオードにおいて、p 層中の Mg が貫通転位を通じて n 層へ拡散することが報告されている[3]。さらに第一原理計算により、Mg 不純物がらせん転位の周りに強く凝集し、複合体が形成されることが示されている[4]。その複合体は、ギャップ中の準位を伝導帯に近づけることから、局所的に n 型化させ、リーク電流の原因になることが示唆されている[4]。一方で GaN 中の Mg 原子と H 原子は、Mg-H 複合体を形成することが多く報告されている[5,6]。転位と不純物のリーク電流への影響を理解するには、転位と Mg 不純物との複合体に H 不純物が含まれる系の電子構造を解明する必要がある。本研究では、 $\mathbf{b}=[0001]$ のらせん転位に Mg および H 不純物が含まれる複合体において第一原理計算を行い、らせん転位と Mg との複合体と H 原子の相互作用、およびその電子構造を解析した。計算は密度汎関数理論に基づく第一原理計算コード VASP [7] を用いた。

最初に、転位の含まれない系において Mg-H の束縛エネルギーを解析したところ、H 原子は Mg の近傍で安定し、Mg-H の複合体が形成されることが明らかになった。次に、らせん転位と Mg との複合体の安定構造[4]に対する H 原子の束縛エネルギーを調べた(Fig. 1(a))。通常、H 不純物は n 型 GaN に入り込まないことが指摘されているが[8]、らせん転位と Mg との複合体により生じる局所的な n 型領域に対しては H 不純物が凝集し、らせん転位と Mg および H の複合体が形成されることが明らかになった。さらに、らせん転位と Mg および H の複合体の電子状態を解析した(Fig. 1(d))。その結果、H 原子が転位芯に近づくほど、系の Highest occupied level が価電子帯に向け下降することが明らかになった。らせん転位と Mg および H が含まれる複合体においては、らせん転位と Mg の複合体が示す n 型の傾向[4]が緩和され、リーク電流の発生を抑制すると考えられる。この Highest occupied level の下降の原因としては、転位準位と H 由来のドナー準位による混成効果が考えられる。本講演ではさらに H 不純物の凝集やその電子構造について詳細に述べる。



**Fig. 1** (a) H-dislocation distance dependence of the binding energy. (b),(c) H, Mg impurity and the screw dislocation models. Green, gray, orange and blue balls indicate Ga, N, Mg and H atoms, respectively. (d) Distance dependence of the highest occupied level. Horizontal axis is the same as (a). CBM and VBM denote a conduction band minimum and a 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] T. Shinohe, TOSHIBA Review, 59 (2004) 2., [2] Y. Mera et al., IEICE Trans. Electron. E83-C (2000) 4., [3] S. Usami et al., Appl. Phys. Lett. 114, 232105 (2019)., [4] T. Nakano et al., The 80<sup>th</sup> JSAP Autumn Meeting 21p-E310-5 (2019). [5] T. Narita et al., Appl. Phys. Express **12**, 12 (2019). [6] J. L. Lyons et al., Phys. Rev. Lett. **108**, 156403 (2012). [7] G. Kresse et al., Phys. Rev. B **54** (1996) 169. [8] J. Neugebauer et al., Appl. Phys. Lett. **68** (13), 25 (1996)