

界面エネルギーに基づく高濃度 Mg 添加 GaN における ピラミッド型インバージョンドメイン形成の評価

An *ab initio*-based approach for the formation of pyramidal inversion domain
boundaries in highly Mg-doped GaN

三重大院工, ° (M2) 仁木 克英, 秋山 亨, 伊藤 智徳

Mie Univ., °Katsuhide Niki, Toru Akiyama, and Tomonori Ito

E-mail: 420M611@m.mie-u.ac.jp

【はじめに】 III-V族窒化物半導体では Mg をアクセプター不純物として高濃度でドーピングすると、逆ピラミッド状のインバージョンドメイン(PID)が形成されることが知られている[1-3]。さらに、この PID を形成する Mg 濃度においてキャリア濃度も低下することが報告されている[4]。PID は(0001)面を上面に、 $\{11\bar{2}3\}$ 面を側面とした六角錐を形成しており、(0001)面に Mg 原子が取り込まれる界面構造が提案されている[5]。しかしながら、その界面の安定性ならびに PID 形成と Mg 濃度およびキャリア濃度との関係性については不明な点が多い。本研究では、界面エネルギーを定量的に計算する手法[6]を PID の界面へと適用し、界面エネルギーから PID の形成エネルギーを見積もることで、Mg 濃度と PID 形成およびキャリア濃度との関係性を検討する。

【結果および考察】 第一原理計算を用いて算出した(0001)面および $\{11\bar{2}3\}$ 面における界面エネルギーはともに $0.01 \text{ eV}/\text{\AA}^2$ 未満となった。この値は Mg を含まない界面に比べて $\sim 0.27 \text{ eV}/\text{\AA}^2$ 低いことから、Mg 原子は PID を構成する(0001)面に加えて $\{11\bar{2}3\}$ 面でも取り込まれ得ることが解る。Fig.はこの界面エネルギーを用いて見積もった PID の形成エネルギーと Ga 置換型 Mg の形成エネルギーを比較することで得られた状態図であり、PID のサイズおよび Mg 濃度の関数として示したものである。この図から、PID 形成および Ga 置換型 Mg の有無は PID のサイズおよび Mg 濃度に依存することが解る。PID のサイズが 10 nm 程度に

においては Mg 濃度 $2.1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 以上において全ての Mg 原子は PID の界面に取り込まれ、PID のサイズが 5.7 nm 以下では Mg 濃度に依らず常に Ga 置換型 Mg と PID が共存する。以上の結果は、PID の形成が GaN におけるキャリア濃度を決定する重要因子であることを示唆している。

【参考文献】 [1] P. Vennéguès *et al.*, Appl. Phys. Lett. **77**, 880 (2000). [2] L. T. Romano *et al.*, Appl. Phys. Lett. **79**, 2734 (2001). [3] M. Leroux *et al.*, Phys. Status Solidi A **192**, 394 (2002). [4] K. Iwata *et al.*, Appl. Phys. Express **12**, 031004 (2019). [5] J. E. Northrup, Appl. Phys. Lett. **82**, 2279 (2003). [6] T. Akiyama *et al.*, Phys. Rev. B **94**, 115302 (2016).

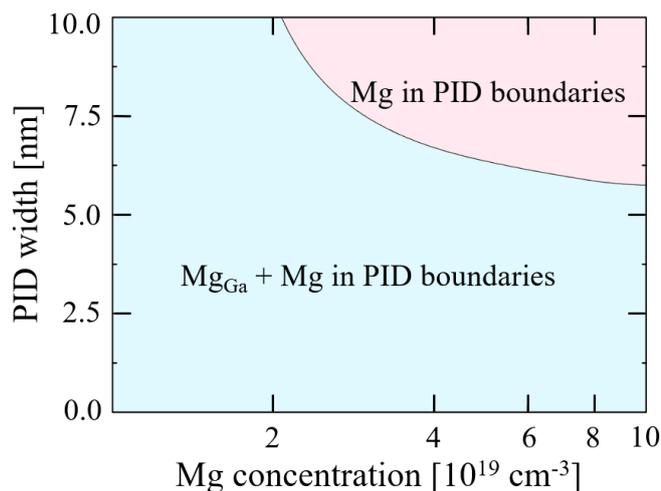


Fig. Calculated phase diagram between the system including only PID boundaries and that with both PID boundaries and substitutional Mg as functions of Mg concentration and size of PID boundaries.