

第一原理計算による GaN 中 N 空孔複合欠陥の安定性解析

Stability analysis of N-vacancy complexes in GaN by first principles calculations

富士電機 [○]大内 祐貴, 田中 亮 上野 勝典, 高島 信也

Fuji Electric, [○]Yuki Ohuchi, Ryo Tanaka, Katsunori Ueno, and Shinya Takashima

E-mail: oouchi-yuuki@fujielectric.com

【はじめに】

GaN を用いた縦型 MOSFET は次世代パワーデバイスとして期待されている。コスト、信頼性の観点で優れる Mg イオン注入による p 型層の形成は重要な要素技術である。しかし、イオン注入では多数の複合化した空孔欠陥が p 型伝導を妨げると考えられている。したがって、イオン注入による p 型伝導の制御にはこのような複合空孔欠陥の形成メカニズムを明らかにする必要がある。今回、イオン注入により生成する欠陥構造を推測するため、N 空孔欠陥が複合化した構造について第一原理計算による安定性の解析を行った結果を報告する。

【計算手法】

ウルツ鉱型 GaN の超格子モデル(240 原子)において、Ga 空孔に N 空孔が複合化した構造 [$V_{Ga}(V_N)_n$ ($n = 1-4$)] を作製した。第一原理計算コード CASTEP を用いて構造最適化計算を行い、欠陥形成エネルギーを求めた。エネルギー計算の汎関数には GGA および HSE06 を用いた。

【結果と考察】

Fig. 1 に Ga 過剰環境における $V_{Ga}V_N$ および $V_{Ga}(V_N)_4$ の形成エネルギーのフェルミ準位 (E_F) 依存性を示す。 $V_{Ga}V_N$ の場合、全ての E_F において複合化前の状態 [$V_{Ga} + V_N$] よりも $V_{Ga}V_N$ のエネルギーが低いことから、熱処理により空孔欠陥の複合化が安定に進むことが示唆された。これはフォトルミネッセンスや陽電子消滅の実験とも整合する結果である[1,2]。一方、 $V_{Ga}(V_N)_4$ の場合、p 型領域においては、複合化前の状態 [$V_{Ga}(V_N)_3 + V_N$] のエネルギーの方が低いことから、複合化が安定ではなくなることが分かった。これらの結果から、空孔欠陥は、熱処理に伴い複合化するが、p 型化が進むと V_N が V_{Ga} よりも多い複合欠陥は不安定化し、 V_N の乖離や V_{Ga} との複合化が起こる可能性が示唆された。

【謝辞】

本研究は、名古屋大学未来材料・システム研究所の白石賢二教授、洗平昌晃助教、長川健太氏から助言を頂き実施いたしました。深く感謝致します。

【参考文献】

- [1] K. Kojima *et al.*, Appl. Phys. Express 10 (2017) 061002.
 [2] A. Uedono *et al.*, Phys. Status. Solidi B 255 (2018) 1700521.

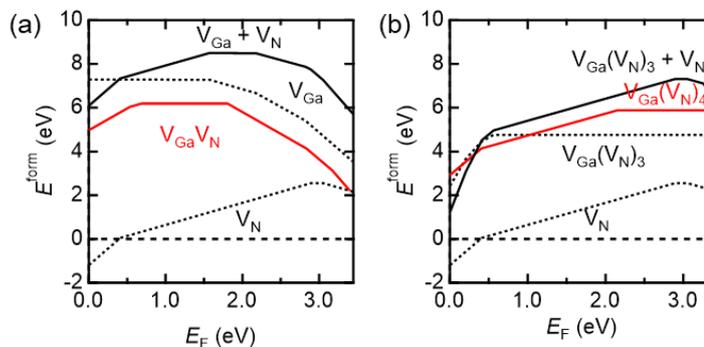


Figure 1. Formation energies of (a) $V_{Ga}V_N$ and (b) $V_{Ga}(V_N)_4$ under Ga-rich condition as a function of the Fermi energy (E_F) in the energy gap measured from the valence-band top.