

# 窒化物半導体におけるピラミッド型インバージョンドメイン形成の理論解析 An *Ab initio*-based approach for formation of pyramidal inversion domain boundaries in nitride semiconductors

三重大院工, °(M2) 仁木 克英, 秋山 亨, 伊藤 智徳

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

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

【はじめに】 GaN 等の窒化物半導体においては Mg 濃度を  $2 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$  以上まで増加させるとピラミッド型インバージョンドメイン(PID)と呼ばれる欠陥が形成することが報告されており[1-3]、キャリア濃度も低下することが示唆されている[4]。PID は(0001)面を上面に、 $\{11\bar{2}3\}$ 面を側面として六角錐台形を形成しており上面に Mg 原子が取り込まれることが指摘されているが、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。これまでに我々は、第一原理計算に基づいて Mg を含む系における界面エネルギーを算出し、(0001)面に加えて $\{11\bar{2}3\}$ 面において Mg 原子が取り込まれた界面が安定となることを見出した[5]。本研究では、これら界面エネルギーを用いて GaN および AlN における PID 形成エネルギーを算出し、フェルミエネルギーの関数として見積もった置換型 Mg の形成エネルギーと比較することで、PID 形成と Mg 濃度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】 Fig. は AlN における置換型 Mg 濃度を、PID サイズ  $w$  および全 Mg 濃度の関数として示した等高線図である。この図から、PID サイズの増大に伴い、Mg 濃度の増大に対する置換型 Mg の割合が減少することが解る。具体的には、 $w > 2 \text{ nm}$  になると  $1 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$  以上の Mg 濃度では Al 置換型 Mg の濃度は  $1 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$  以下に減少する。これは PID 形成エネルギーの方が置換型 Mg の形成エネルギーよりも低いため Mg 原子が PID に優先的に取り込まれることに起因している。また、GaN の結果[5]と比較すると、AlN の方が置換型 Mg 濃度の減少は顕著であることが解る。以上の結果は、GaN に加え AlN においても高 Mg 濃度における PID 形成は置換型 Mg 濃度ひいてはキャリア濃度を低下させ得ることを示唆している。

以上の結果は、GaN に加え AlN においても高 Mg 濃度における PID 形成は置換型 Mg 濃度ひいてはキャリア濃度を低下させ得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] K. Niki *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys., submitted (2021).

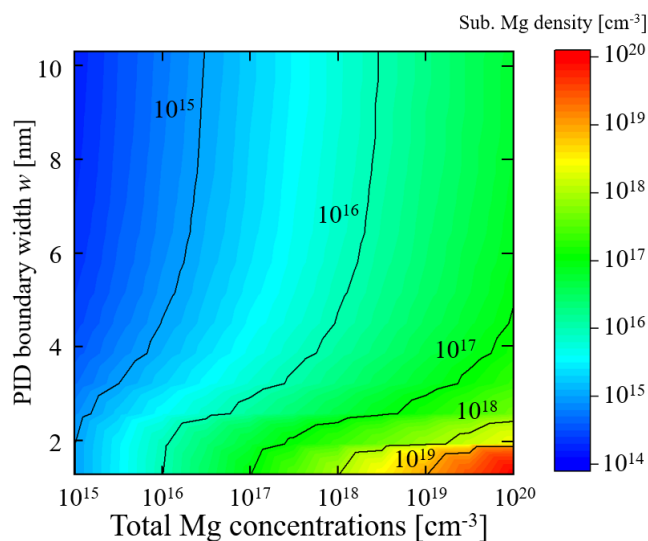


Fig. Calculated contour plots for density of substitutional Mg as functions of PID width and total Mg concentrations obtained by comparing the formation energy of substitutional Mg with those of PID boundaries in AlN.