

GaN における Mg アクセプターの拡散機構の理論的検討

Theoretical studies on behavior of Mg acceptors in GaN

名大未来研¹, イエナ大物理², 名大院工³

○(P)制野 かおり^{1,2}, 押山 淳¹, 櫻井 亮介³, 白石 賢二^{1,3}

IMass, Nagoya Univ.¹, Jena Univ.², Graduate School of Engineering, Nagoya Univ.³

°Kaori Seino^{1,2}, Atsushi Oshiyama¹, Ryosuke Sakurai³, Kenji Shiraishi^{1,3}

E-mail: seino@comp.mp.pse.nagoya-u.ac.jp

GaN は、省エネルギー次世代パワーデバイスへの応用に向け、さまざまな方向からの研究がなされている。次世代パワーデバイス用半導体材料としては、SiC の方が現時点では GaN よりも市場規模も大きく、多くの機器に採用し始めているが、GaN は SiC の持たない特性から小型・高周波での用途で期待がなされている。青色 LED を作成するのに p 型 GaN を作成することが課題であったのと同様に、パワーデバイス用途のための GaN においても p 型 GaN の形成が鍵を握る要素である。パワーデバイスを設計する上で選択的な領域での p 型ドーピングが重要であり、それを実現する方法としてイオン注入技術が用いられている。GaN については Mg をイオン注入してもうまく p 型にならない問題があったが、超高压高温でアニールする方法により Mg イオン注入による高品質 p 型 GaN が実現した [1,2]。高温プロセスでは、p 型アクセプターである Mg 原子の原子拡散が起こる可能性が考えられる。一方で、実験的に GaN 結晶中の Mg アクセプターの原子拡散プロセスを捉えることは難しい。

半導体中の欠陥や不純物の微視的構造やその諸物性は、理論的手法、とりわけ量子力学に基づくアプローチからも明らかにしていくことが可能である [3]。GaN に関してもこれまで第一原理計算により GaN 結晶中のさまざまな欠陥や不純物に対する性質が明らかにされてきているが [4]、GaN の Mg アクセプターについて全てが明らかにされているわけではなく、とりわけ Mg アクセプターの拡散についてはほとんど明らかにされていない。そこで、本研究では計算機シミュレーションの視点から、GaN における Mg アクセプターの原子拡散を探っていこうと思う。

計算には密度汎関数理論に基づく計算コード VASP を用いた。本研究では、欠陥のない wurtzite 構造の GaN 結晶として 360 原子が含まれるユニットセルを考え、バンドギャップなどの物性値を従来の方法よりも高い精度で計算ができるハイブリッド汎関数を用いた。また、Mg 原子の拡散のプロセスとしては、Ga 原子に置換された Mg 原子が Ga 空孔サイトに拡散をする vacancy 機構を考えた。電荷状態の影響などを含めて GaN 結晶中の Mg アクセプターの拡散機構を議論していく。

[1] T. Narita *et al.*, J. Appl. Phys. **128**, 090901 (2020).

[2] T. Kachi *et al.*, J. Appl. Phys. **132**, 130901 (2022).

[3] 押山 淳, 応用物理 **57**, 1284 (1988).

[4] J. L. Lyons, D. Wickramaratne, and C. G. Van de Walle, J. Appl. Phys. **129**, 111101 (2021).