

M₂O₃ (M=Al, Ga, In) 混晶の結晶構造に関する第一原理計算

First-principles calculation of crystal structures of M₂O₃ (M=Al, Ga, In) alloys

関東学院大理工 ○島田 和宏, 伊藤未沙稀, 金子卓也, 小林伸之介

Kanto Gakuin Univ., °Kazuhiro Shimada, Misaki Ito, Takuya Kaneko, Shinnosuke Kobayashi

E-mail: shimada@kanto-gakuin.ac.jp

【はじめに】 Ga₂O₃ は、GaN や SiC 等のワイドギャップ半導体よりも優れた特性を持っているため、深紫外光を透過する透明電極や電界効果トランジスタ等の用途として期待されている。セスキ酸化物は、Ⅲ族を中心に四面体結合、六面体結合、八面体結合をすることから、その組み合わせによって様々な対称性を持った結晶構造を取ることができる。混晶系を考えた場合には、組成に対する格子定数の変化や、結晶構造の安定性に関する情報がデバイス設計に必要となる。本研究では、様々な対称性 (R $\bar{3}c$ 、C2/m、I $\bar{3}a$ 、Pna2₁、Pbca、P6₃/mmc等) を持った M₂O₃ (M=Al,Ga,In) 混晶について密度汎関数理論に基づいた第一原理計算を行ったので、報告する。

【計算方法と結果】 交換エネルギー汎関数は Wu-Cohen 型[1]の GGA 汎関数を用いた。単位胞内の原子の数は、80 原子 (R $\bar{3}c$ 、I $\bar{3}a$ 、Pna2₁)、160 原子 (Pbca、P6₃/mmc)、180 原子 (C2/m) とし、原子配置は準ランダム配置[2]とした。Fig. 1 は、(In_xGa_{1-x})₂O₃ 混晶系の全エネルギーの差をC2/mの対称性をもった Gallia 構造を基準として比較したものである。In モル分率 $0 \leq x \leq 0.15$ ではC2/mの対称性を持った Gallia 構造が安定、 $0.15 \leq x \leq 0.25$ では、R $\bar{3}c$ の対称性を持った Corundum 構造が安定、 $0.25 \leq x \leq 1$ では、Ia $\bar{3}$ の対称性を持った Bixbyite 構造が安定であり、 $0.15 \leq x \leq 0.25$ の領域以外では、R $\bar{3}c$ の対称性を持った Corundum 構造が準安定であることを示している。当日は他の混晶系の計算結果についても報告する。

【参考文献】 [1] Z. Wu and R. E. Cohen, Phys. Rev. B73, 235116 (2006). [2] A. van de Walle *et al.*, CALPHAD 42, 13(2013).

【謝辞】 本研究で行われた計算は、東京大学情報基盤センターのスーパーコンピューティングシステムを利用して行った。

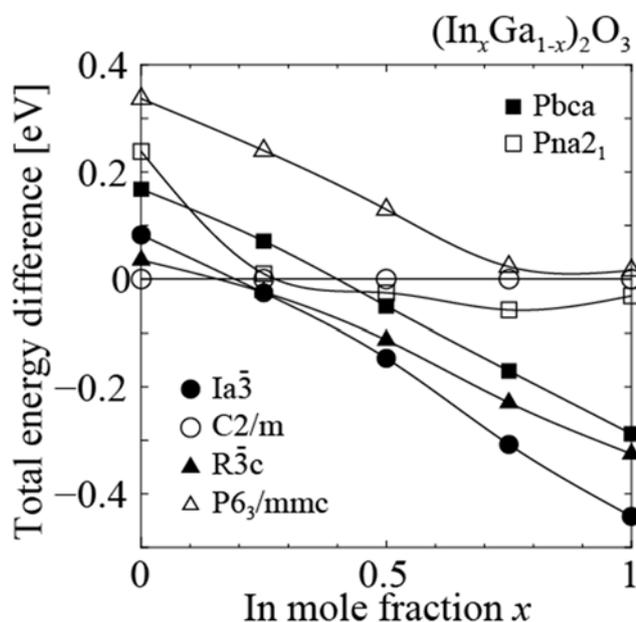


Fig. 1. Total energy difference between (In_xGa_{1-x})₂O₃ alloys of the different crystal structures.