

β -Ga₂O₃ の積層欠陥 I. すべり系と部分転位 Stacking Faults in β -Ga₂O₃ I. Slip System and Partial Dislocations

産総研 ○山口博隆

AIST ○Hirotaka Yamaguchi

E-mail: yamaguchi-hr@aist.go.jp

パワーエレクトロニクス応用が期待されている酸化ガリウム (β -Ga₂O₃) の結晶は単斜晶系であるが、その結晶構造の特異性から、転位構造などの基礎となるすべり系についての知見は少ない。これまで、私たちは β -Ga₂O₃ の結晶構造を考察し、低指数のすべり系モデルを提案した[1]。それは、 β -Ga₂O₃ における O 副格子の「歪んだ」三次元最密充填構造に基づいたもので、 $\{\bar{2}01\}$ 、 $\{101\}$ 、 $\{310\}$ 、 $\{3\bar{1}0\}$ の 4 面と各面内の並進ベクトルから構成される。これらの 4 面は、面心立方格子の $\{111\}$ に対応した最密面である。

ここでは、 $\{\bar{2}01\}$ における部分転位を考察する。 $\{\bar{2}01\}$ の積層方向には、GaO₄ 四面体と GaO₆ 八面体が交互に配列しているが、GaO₆ 部では O-Ga-O の 3 層が最密積層構造をとる。すなわち、面内の原子位置を a 、 b 、 c で表すとき、O-Ga-O は $ab'c$ のようになる。ここで、 b 位置の Ga イオンは $1/3$ が空格子であることから b' と表した。 $\{\bar{2}01\}$ ではバーガースベクトル $\mathbf{b}$ として、 $\langle 010 \rangle$ と $\frac{1}{2}\langle 112 \rangle$ が考えられる。このうち、前者では図 2 における $\overrightarrow{SS'} \rightarrow \overrightarrow{Ss} + \overrightarrow{sS'}$ ($\mathbf{b} = [010] \rightarrow \frac{1}{18}[\bar{1}9\bar{2}] + \frac{1}{18}[192]$) が考えられ、Si におけるショックレー型と類似の部分転位となる。一方後者では、Ga 層内の $1/3$ が周期的に空格子となる長周期構造を、最小ステップ $\mathbf{b}_1 = \frac{1}{6}[\bar{1}3\bar{2}]$ 、 $\mathbf{b}_2 = \frac{1}{6}[132]$ (超格子部分転位) で分解した $\overrightarrow{TT'} \rightarrow \overrightarrow{Tt_1} + \overrightarrow{t_1t_2} + \overrightarrow{t_2T'}$ ($\mathbf{b} = \frac{1}{2}[112] \rightarrow \mathbf{b}_2 + \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2$) が考えられる。

[1] H. Yamaguchi, A. Kuramata and T. Masui, Superlattices and Microstructures **99**,99 (2016).

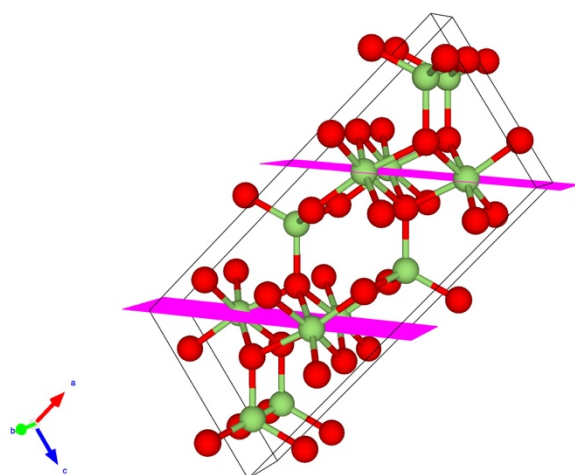


Figure 1 Crystal structure of β -Ga₂O₃. The $\{\bar{2}01\}$ planes are shown along the Ga layers of GaO₆ units.

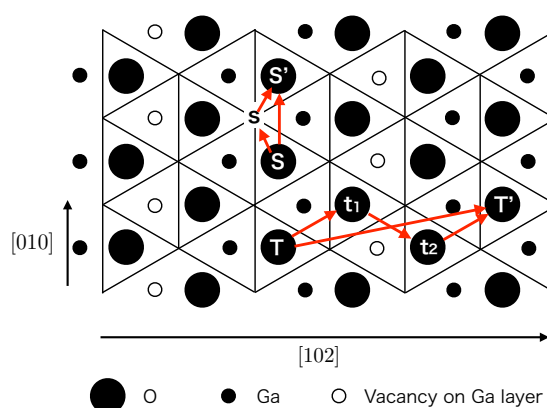


Figure 2 Displacements of Oxygen ions in the $\{\bar{2}01\}$ plane. $\overrightarrow{SS'} = [010]$ and $\overrightarrow{TT'} = \frac{1}{2}[112]$.