

α -Ga₂O₃ 中固有点欠陥の局所構造と電子状態

Structural and Electronic Properties of Native Point Defects in α -Ga₂O₃

東工大フロンティア研, °小林 拓真, 我毛 智哉, 熊谷 悠, 大場 史康, 松下 雄一郎

Tokyo Tech, °Takuma Kobayashi, Tomoya Gake, Yu Kumagai, Fumiyasu Oba, Yu-ichiro Matsushita

E-mail: kobayashi.t.cp@msl.titech.ac.jp

Ga₂O₃ は広い禁制帯幅を有することから、パワーデバイスやソーラーブラインド型光検出器用材料として期待されている。Ga₂O₃ の5つの結晶多形 ($\alpha, \beta, \gamma, \delta, \epsilon$) の内、常温常圧における最安定相である β 相に加え、準安定相である α 相の単結晶がミスド CVD 法により得られるようになり[1]、近年注目を集めている。しかし、デバイス特性を大きく左右する α -Ga₂O₃ 中の点欠陥に関する報告は僅少である。本研究では、第一原理計算を用いて、 α -Ga₂O₃ 中の固有点欠陥の局所原子構造、形成エネルギー、および電子状態を調べた[2]ので、それを報告する。

計算には、VASP コード [3]を用いた。交換-相関汎関数には Heyd-Scuseria-Ernzerhof(HSE) 汎関数[4]を用い、帯電した点欠陥の形成エネルギーのセルサイズ依存性の補正には拡張型 FNV 法[5,6]を用いた。まず単位胞の構造最適化を行い、理論格子定数 ($a=4.964, c=13.392 \text{ \AA}$) が、実験値 ($a=4.983, c=13.433 \text{ \AA}$) [7]とよく整合することを確認した。そこで、得られた格子定数に基づいて120原子のスーパーセルを用意し、欠陥を含んだ系に対して原子位置の最適化を行った。

図1に(a) Ga-rich および (b) O-rich 雰囲気下における Ga および O 空孔 ($V_{\text{Ga}}, V_{\text{O}}$)、それらの最近接ペア ($V_{\text{Ga}}-V_{\text{O}}$)、格子間 Ga および O ($\text{Ga}_{i,1-3}, \text{O}_{i,1-3}$) の欠陥形成エネルギーを示す。なお、格子間位置については、対称性の高い3つの格子間サイトを検討しており、それが添え字 1-3 に対応している。図1を見ると、Ga-rich および O-rich のいずれの環境においても、フェルミレベルが伝導帯下端近傍に位置する場合、負に帯電した V_{Ga} が安定であり、価電子帯上端近傍では正に帯電した Ga_i が安定であることが分かる。また、Ga-rich 条件下では、アクセプタ型の V_{Ga} の形成が O-rich 条件に比べて抑制できるので、 n 型ドーピングに適している。一方 Ga-rich であっても、 V_{O} は深いドナーであるため、伝導電子を放出しないと思われる。発表では、個々の欠陥の微視的原子構造および電子状態について、より詳細に議論を行う。

計算は主に東京大学物性研究所および筑波大学計算科学研究センターのスーパーコンピュータを用いて行われました。本研究は JSPS 科研費 18H03770 および 18H03873 の助成を受けたものです。

- [1] D. Shinohara and S. Fujita, *Jpn. J. Appl. Phys.* **47**, 7311 (2008).
- [2] T. Kobayashi, *et al.*, arXiv:1906.03765 (2019).
- [3] G. Kresse and J. Furthmüller, *Phys. Rev. B* **54**, 11169 (1996).
- [4] J. Heyd, *et al.*, *J. Chem. Phys.* **118**, 8207 (2003).
- [5] C. Freysoldt, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 016402 (2009).
- [6] Y. Kumagai and F. Oba, *Phys. Rev. B* **89**, 195205 (2014).
- [7] M. Marezio and J. P. Remeika, *J. Chem. Phys.* **46**, 1862 (1967).

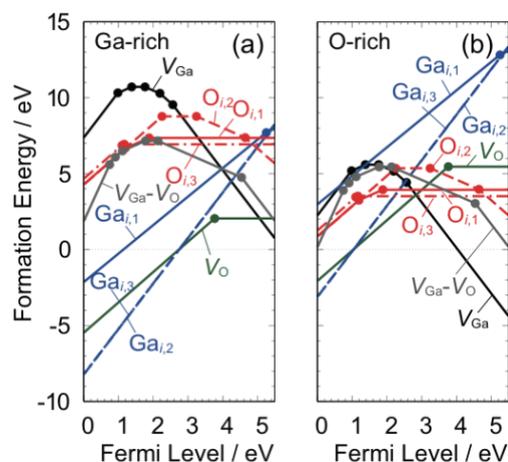


Fig. 1: Formation energies of native point defects in α -Ga₂O₃ either at (a) the Ga-rich and (b) the O-rich limit. Zeros of the Fermi level are set at the VBM.