

第一原理計算を用いた α -Ga₂O₃(0001)表面構造の解析

Analysis of α -Ga₂O₃ (0001) surface structure using first-principles calculations

三重大学大学院工学研究科 ¹O(M2) 大山 隼人¹, 河村 貴宏¹

Mie Univ.¹, ^oHayato Oyama¹, Takahiro Kawamura¹

E-mail: 418M115@m.mie-u.ac.jp

α 型酸化ガリウム(α -Ga₂O₃)は, SiC と GaN よりも更に大きなバンドギャップを有する半導体であり[1], パワーデバイスに用いると SiC と GaN を上回る高効率・低損失が期待できる. しかし, α -Ga₂O₃ の結晶成長に関する実験は発展途上で, 結晶成長のプロセスについて分かっていないことが多い. α -Ga₂O₃ の結晶成長プロセス解明の一環として, 本研究では第一原理計算を用いて α -Ga₂O₃(0001)面の表面構造解析を行い, Ga と O 原子の吸着について考察した.

計算には第一原理分子動力学プログラム“STATE-Senri” [2]を用いた. (0001)理想表面を基準表面構造として, そこに Ga と O 原子を吸着させた表面構造のシミュレーションを行った. それらの結果から各表面構造モデルと基準表面の全エネルギーを比較し, Ga と O 原子の吸着エネルギーを算出した.

Ga 原子 1 個を吸着させた場合は図 1(a)に示す表面構造をとり, その時の吸着エネルギーは 2.32 eV であった. O 原子 1 個の場合は図 1(b)の表面構造をとり, 吸着エネルギーは 0.40 eV で非常に小さい値であった. 次に図 1(a)の表面構造にさらに Ga と O 原子を 1 個吸着させた場合についても計算した. Ga 原子を 1 個追加した場合は図 1(c)の表面構造をとり, 吸着エネルギーは 2.72 eV であった. O 原子を 1 個追加した場合は図 1(d)の表面構造をとり, 吸着エネルギーは 5.82 eV であった. これらの結果から, (0001) 面では単独の O 原子は安定に吸着しないが, 周囲に Ga 原子がある状態で安定に吸着することが分かった.

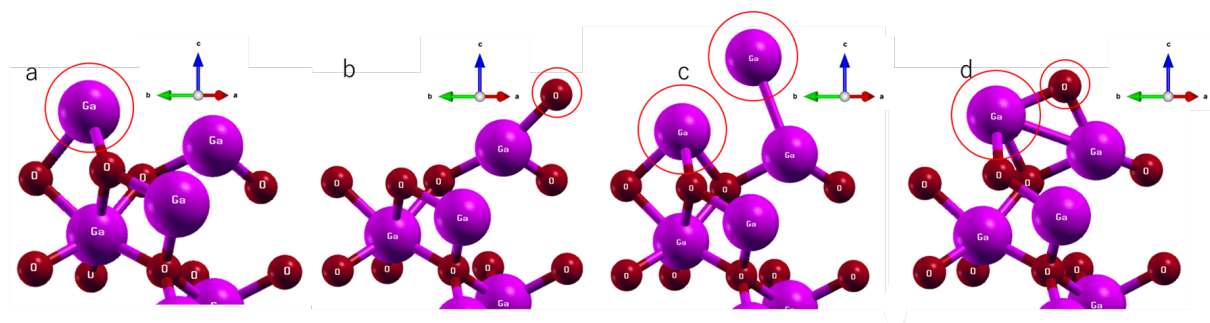


図 1: α -Ga₂O₃ の計算モデル. (a)Ga 原子が 1 個吸着した構造, (b)O 原子が 1 個吸着した構造, (c)Ga 原子が 1 個吸着した構造, (d)Ga 原子と O 原子が 1 個ずつ吸着した構造. 丸で囲んだ原子が理想表面に吸着させた原子.

[1] A. Segura et al., Phys. Rev. Mater. **1**, 024604 (2017).

[2] Y. Morikawa, Phys. Rev. B **51**, 14802 (1995)