

バンドアンフォールディング法による窒素ドーピング β -Ga₂O₃ のバンド構造

Electronic band structures of N-doped β -Ga₂O₃ by band-unfolding method

都産技研 ○太田 優一

TIRI ○Yuichi Ota

E-mail: ota.yuichi@iri-tokyo.jp

次世代パワーデバイス材料として酸化ガリウム(Ga₂O₃)が期待されている。最近、イオン注入によるドーピングによって縦型デバイスの動作実証に成功するなど、著しい進展を見せている[1]。しかし、O が N に置換されることで深いアクセプタ準位を形成すると言われているが、異なる 3 つの O サイトで電子状態にどのような変化があるかは明確になっていない。そこで本研究では密度汎関数理論(DFT)に基づく第一原理計算によって、N の導入サイトが異なる場合の電子状態の変化を明らかにすることを目的とした。

計算モデルとして β -Ga₂O₃ の基本単位格子を 2×2×2 倍したスーパーセル(80 原子)を用いた。O(I),O(II),O(III)サイトの原子を N で 1 つ置換したモデルをそれぞれ N_{O(I)},N_{O(II)},N_{O(III)}として構築した。原子位置の緩和を Quantum Espresso で行った後、バンド計算は Wien2k で実施した。またアンフォールディング法には fold2Bloch パッケージを使用した[2]。

Fig. 1 に(a)N_{O(I)}, (b)N_{O(II)}, (c)N_{O(III)}モデルのアンフォールディングしたバンド構造を示す。なお Bloch スペクトルの重みはカラーバーで示している。窒素がドーピングされることによって、(a)N_{O(I)} および(c)N_{O(III)}でフェルミレベル近傍に弱い局在準位が確認できる。また、本計算においては N_{O(III)}の準位が最も深いアクセプタとなっている。一方、最安定といわれている(b)N_{O(II)}のモデルでは窒素に関わる準位が独立してフェルミレベル近傍に存在しないという結果であった。以上の結果から置換する N 原子はその O サイトの種類に依存して、異なるアクセプタ準位を形成する可能性が高いことがわかった。

[1] M. H. Wong *et al.*, IEEE Electr. Dev. Lett., **40**(3), 431 (2019).

[2] O. Rubel *et al.*, Phys. Rev. B **90**, 115202 (2014).

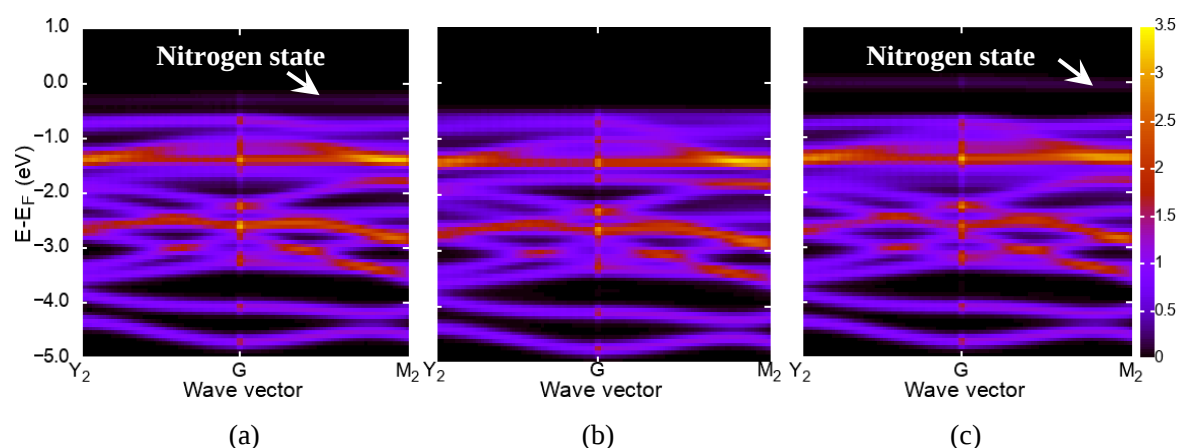


Fig. 1. Unfold band structures of (a) N_{O(I)}, (b) N_{O(II)}, (c) N_{O(III)} model for β -Ga₂O₃.