

コランダム構造を有する酸化物半導体の第一原理計算による評価 First-principles Study for Oxide Semiconductors with Corundum Structures

○ 宇野 和行, 中村 太紀, 田中 一郎 (和歌山大システム工)

○ Kazuyuki Uno, Taiki Nakamura, and Ichiro Tanaka (Wakayama University)

E-mail: kuno@sys.wakayama-u.ac.jp

【はじめに】 α 型酸化ガリウム (α -Ga₂O₃) は 5.6 eV の禁制帯幅をもつことが報告されている酸化物半導体であり [1]、他のコランダム系の酸化物半導体と混晶や異種接合を形成できることから注目が集まっている [2]。その中で、酸化イリジウム (Ir₂O₃) は p 型伝導を示すことが報告されており、p 型化が困難な Ga₂O₃ 系酸化物半導体において、縦型のスイッチング素子の実現につながる重要な材料である [3]。しかし、金属イオンはさまざまな価数をとることが分かっているので、単相の材料を得ることが実験的に難しい場合がある。そこで本研究では、第一原理計算を用いて酸化イリジウムなどの構造評価を行った。なお、 α -Ga₂O₃ および β -Ga₂O₃ については B3LYP ハイブリッド関数による報告が既報である [4]。

【格子定数の評価】計算は CPU に Core i7 を搭載した一般的な PC を用い、第一原理計算パッケージには VASP[5] を用いた。単位格子はコランダム構造の最小単位格子である菱面体晶を用い、構造評価には PBE、逆格子空間は 9×9×9 の Monkhorst Pack で分割して計算した。Al については 11 個、Ga は 13 個、Ir については 17 個の電子を

価電子としたポテンシャルを用いた。計算結果を六方晶に変換したときの格子定数を表 1 に示した。 α -Al₂O₃、 α -Ga₂O₃ については実験値として報告されている値と比較すると大きな値となっているが、差異は 0.7% 以下である。 α -Ir₂O₃ については単結晶の報告がなかったので、計算結果の妥当性を検証するためにルチル構造の IrO₂ の計算を同じ条件で行ったところ、格子定数は $a=4.474\text{\AA}$ 、 $c=3.166\text{\AA}$ と求まり、実験値として報告されている値に対して 0.8% 以下の差異に収まっていた。

【バンド構造の評価】バンド構造の計算には、VASP を用い、HSE06 ハイブリッド関数で評価を行った。GGA など通常の密度汎関数法ではバンドギャップが実験値と大きな差異をもつことが知られているが、HSE06 を用いると、その差が改善されることが知られている [6]。逆格子空間は 4×4×4 の Monkhorst Pack で分割して計算した。これは文献 [4] と同じ分割数である。

図 1 に α -Ga₂O₃ の、図 2 に α -Ir₂O₃ の E-k

分散曲線を示した。 α -Ga₂O₃ については、 Γ 点におけるギャップは 4.76 eV (文献 [3] では 5.08 eV) と求まった。 α -Ir₂O₃ については Γ 点付近が価電子帯の頂上であり、 Γ 点におけるギャップは 2.96 eV であった。伝導帯の下端は F 点近傍にあり、伝導帯 F 点と価電子帯 Γ 点のギャップは 2.62 eV であった。しかし、価電子帯 Γ 点頂上と F 点頂上の差は 170 meV であり、明確に間接遷移型であるとは言い難い。原子種ごとの状態密度を解析したところ、図 2 に示した α -Ir₂O₃ の -5~10 eV にあるバンドが酸素 2p バンドであることが分かった。価電子帯および伝導帯は Ir の d 電子が構成しており、価電子帯頂上付近は e_g 対称性をもつ電子が、伝導帯は t_{2g} 対称性をもつ電子が構成していた。

表 1: 格子定数の計算値

	a	c
Al ₂ O ₃	4.758Å	12.96Å
Ga ₂ O ₃	5.015Å	13.45Å
Ir ₂ O ₃	5.235Å	13.88Å

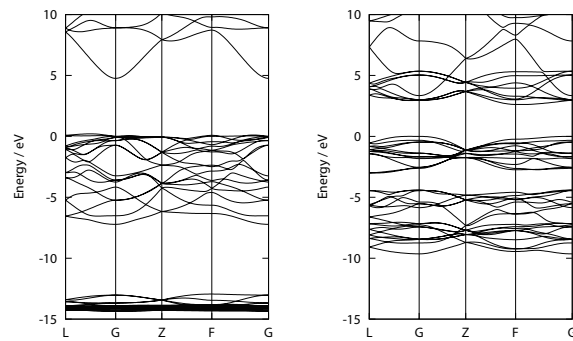


図 1: Ga₂O₃ の分散曲線 図 2: Ir₂O₃ の分散曲線

【参考文献】 [1] A. Segura *et al.*, Phys. Rev. Mater. **1**, 024604 (2017), [2] 金子健太郎, 「酸化物半導体の物性とデバイス応用」、材料 66 巻、58-65 ページ (2017), [3] S. Kan, *et al.*, Appl. Phys. Lett. **113**, 212104 (2018), [4] H. He, *et al.*, Phys. Rev. B **74**, 195123 (2006), [5] G. Kresse, *et al.*, Phys. Rev. B **47**, 558 (1993), [6] A. J. Garza, *et al.*, J. Phys. Chem. Lett. **7**, 4165 (2016).