

第一原理計算による Ga_2O_3 中の複合欠陥の原子構造と電子状態の解明

First principles study on the atomic and electronic structures of complex defects in the Ga_2O_3

○長川 健太¹, 白石 賢二^{2,1}

Graduate School of Engineering, Nagoya Univ.¹, IMASS, Nagoya Univ.²

○Kenta Chokawa¹ and Kenji Shiraishi^{2,1}

E-mail: chokawa@fluid.cse.nagoya-u.ac.jp

1. はじめに

Ga_2O_3 は 4.9 eV と大きなバンドギャップを有しており、SiC や GaN などを用いたパワーデバイスよりもエネルギー損失を低減できることから、注目されている。 Ga_2O_3 は多くの結晶構造を有しており、安定構造である β - Ga_2O_3 が主に研究されていたが、 α - Ga_2O_3 などの異なる構造を用いた報告もなされるようになってきている (Fig. 1)。実験による Ga_2O_3 の報告は多くなされている一方で、理論計算による報告もなされており、 β - Ga_2O_3 中の O 原子空孔 (V_{O}) 欠陥や Ga 原子空孔 (V_{Ga}) 欠陥は多くの報告されている。しかし、それらの複合欠陥や α - Ga_2O_3 中の欠陥に関しては報告がない。そこで本研究では第一原理計算を用いてこれらの欠陥の構造や電子状態について議論する。

2. 計算手法と計算モデル

基底状態での構造および全エネルギーを求めるために VASP コードを用いて第一原理計算を行った [1]。計算モデルとして 120 原子から構成される α - Ga_2O_3 モデルと β - Ga_2O_3 モデルを作成した。また、これらのモデル内に欠陥を作成し、形成エネルギーを計算することで安定性を議論した。GGA 近似を用いた計算により安定な欠陥構造を決定した。形成エネルギーの計算条件は O 原子-rich な環境を仮定して計算を行った。

3. 結果

β - Ga_2O_3 は 3 つの異なる O 原子サイトと 2 つの異なる Ga 原子サイトが存在し、どのサイトから原子を取り除くかにより形成エネルギーが変化する。本研究では V_{O} 欠陥に対しては 0.8 eV, 1.2 eV, 1.5 eV、 V_{Ga} 欠陥に対しては 9.1 eV, 9.6 eV の形成エネルギーが得られ、先行研究に近い値となった [2]。次に V_{O} 欠陥と V_{Ga} 欠陥を有するモデルから、

原子をさらに 1 つ取り除き、 $2V_{\text{O}}$ 欠陥、 $2V_{\text{Ga}}$ 欠陥、 $V_{\text{O}}-V_{\text{Ga}}$ 欠陥を作成し、形成エネルギーを計算した。取り除く原子位置の組み合わせにより、得られる値が変化し、最も小さい値がそれぞれの複合欠陥で、2.0 eV, 18.2 eV, 5.3 eV となった。 $2V_{\text{O}}$ 欠陥、 $2V_{\text{Ga}}$ 欠陥の形成エネルギーは V_{O} 欠陥と V_{Ga} 欠陥の形成エネルギーを足し合わせた値に近く、欠陥複合による顕著な安定化は見られないが、 V_{O} 欠陥の近傍では V_{Ga} 欠陥が発生しやすくなることが分かった。

一方で、 α - Ga_2O_3 は全ての O 原子サイト、Ga 原子サイトがそれぞれ等価であり、 V_{O} 欠陥と V_{Ga} 欠陥の形成エネルギーは 1.6 eV, 9.2 eV となり、 β - Ga_2O_3 と近い値が得られている。同様に $2V_{\text{O}}$ 欠陥、 $2V_{\text{Ga}}$ 欠陥、 $V_{\text{O}}-V_{\text{Ga}}$ 欠陥を作成し形成エネルギーを計算した結果、最も小さいもので、3.1 eV, 18.1 eV, 5.4 eV となった。

当日の講演では O 原子-poor な環境での形成エネルギーや、各欠陥の欠陥準位、荷電状態での安定性についても議論する。

[1] G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).

[2] T. Zacherle, et. al., Phys. Rev. B **87**, 235206 (2013).

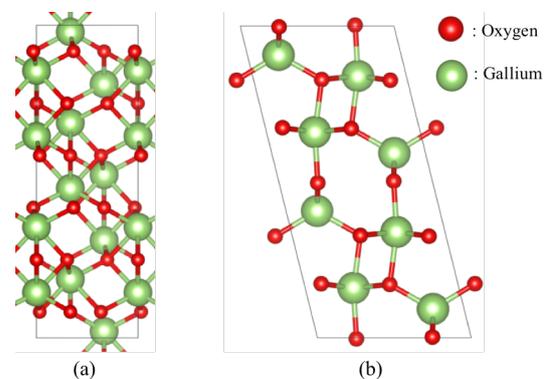


Fig. 1. (a) α - Ga_2O_3 と (b) β - Ga_2O_3 の原子構造