第一原理電子構造研究による立方晶窒化ホウ素とダイヤモンドの不純物状態の予測

First-principles electronic-structure study of impurity-induced states in cubic BN and diamond

○山下 寛樹[1], 芳賀 太史[1], 藤本 義隆[1,2], 斎藤 晋[1,2,3]

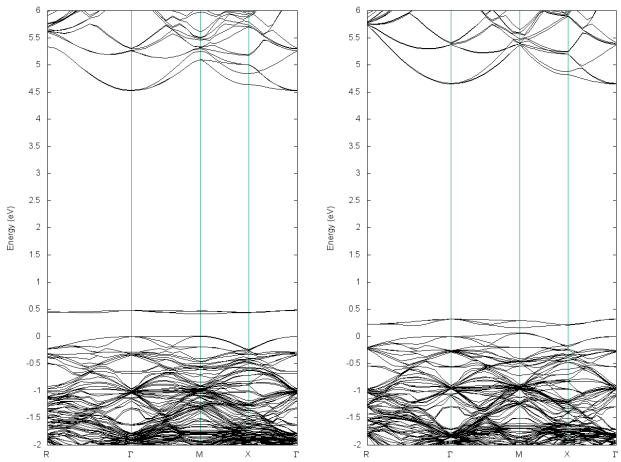
○Hiroki Yamashita[1], Taishi Haga[1], Yoshitaka Fujimoto[1,2], and Susumu Saito[1,2,3]

[1]Department of Physics
[2]Materials Research Center for Element Strategy
[3]Advanced Research Center for Quantum Physics and Nanoscience
Tokyo Institute of Technology

E-mail: hyamashita@stat.phys.titech.ac.jp

近年、次世代パワー半導体への応用が期待される物質として、非常に大きなバンドギャップ値を持つ、ダイヤモンド、および c-BN(立方晶窒化ホウ素)への注目が高まっている。これらの物質をパワーデバイスとして応用するには、半導体中にドープされた不純物が物性に与える影響についての正確な理解が欠かせない。密度汎関数法(DFT)に基づく第一原理計算は、物質の電子状態を高精度で予測する上で広く使われている手法であるが、不純物状態に対して DFT を用いると、ドナー状態 D、アクセプター状態 A は、実際よりも浅い結果となる。また、そのような問題のない GW 法は、非常に計算コストが掛かるため、広がった不純物状態への適用は困難である。従って、第一原理計算において、半導体中の不純物状態の正確な計算は、まだ十分に確立されていない重要な課題であると言える。そこで、我々は、適切な大きさの supercell にドナーとアクセプターを同時にドープした系を考慮することにより、DFT で正確な不純物状態を得ることができると考え、電子状態計算を行った。即ち、ニュートラルな D、A ではなくイオン化した D^+、A^-という電子状態を DFT で計算することで、ドナー状態、アクセプター状態の空間的な広がりと深さを正確に予測できると考えられるためである。

FIG. は、c-BN の 512 原子からなる格子定数 4*a* の立方体 supercell において、B、N サイトに炭素原子 C を同時にドープした場合と、N サイトのみに C をドープした場合の結果である。ドナー状態は伝導帯から分離しなかったが、アクセプター状態は、FIG. (b)では分散をもっているのに対し、同時ドープした FIG. (a)では、より深く、平坦で分散をもたない状態が得られていることが分かる。本講演では、c-BN では上記に加えて酸素 O、ケイ素 Si、ベリリウム Be、硫黄 S をドープした場合、ダイヤモンドではホウ素 B、窒素 N、リン P をドープした場合の結果についても報告する。



(a) (b)

FIG.

Calculated band structure of C-doped c-BN (512 atom/cell).

(a) B site and N site doping.

(b) N site doping.

© 2019年 応用物理学会