

ワイドギャップ半導体 β -Ga₂O₃における水素の局所電子状態

Local electronic structure of hydrogen in wide-gap semiconductor β -Ga₂O₃

KEK 物構研¹, 総研大², 東工大フロンティア研³, 東工大元素センター (MCES)⁴

○ 平石 雅俊¹, 岡部 博孝¹, 幸田 章宏^{1,2}, 門野 良典^{1,2}, 井手 啓介³, 神谷 利夫^{3,4}, 細野 秀雄^{3,4}

KEK-IMSS¹, Sokendai², Tokyo Tech MSL³, Tokyo Tech (MCES)⁴

○ M. Hiraishi¹, H. Okabe¹, A. Koda^{1,2}, R. Kadono^{1,2}, K. Ide³, T. Kamiya^{3,4}, H. Hosono^{3,4}

E-mail: hiramasa@post.kek.jp

β -Ga₂O₃ はおよそ 4.9 eV の大きなバンドギャップを示すことから、高耐圧のパワーデバイス用半導体として注目されている材料である。Si や Sn をドーピングすることで n 型の電気伝導を示すことがよく知られているが [1]、近年の理論計算からは格子間水素もまた n 型ドーピングの起源となり得ることが指摘されている [2]。しかしながら、希薄極限にある水素を調べることは難しく、実験的な知見は水素を多量に導入した場合でのみ得られることが多い。

そこで我々は、ミュオンスピン回転・緩和法 (μ SR) によって β -Ga₂O₃ における水素の電子状態を調べた。水素の軽い同位体であるミュオン (Mu) は、物質中で擬似水素として振る舞うことから、希薄極限にある水素の電子状態をシミュレートすることが可能である。

単結晶を用いて行った室温での μ SR 実験の結果を Fig. 1 に示す。ミュオン近傍の Ga 原子核スピンからの双極子磁場に由来する Gauss 関数型で緩和する成分 (Mu_1) と、緩和をほとんど示さない成分 (Mu_2) の 2 成分の信号が観測された。水素が少なくとも 2 つ異なる状態をとることを示唆しているが、 Mu_1 と Mu_2 の成分比は温度依存性を示し、50~60 K で Mu_1 成分が極大を示すことが明らかになった。この結果は、粉末試料で行われた先行研究 [3] とは大きく異なっており、Mu の状態が試料の質に大きく左右されることを示唆している。

Mu_1 成分の詳細を調べるため、第一原理計算によって希薄水素のシミュレーション (構造緩和計算) を行い、得られた構造での水素位置における μ SR スペクトルの緩和率 (Fig. 1 中の Δ) を求め、実験値との比較を行った。室温における Δ の実験値 [$0.1343(11) \mu\text{s}^{-1}$] は、理論研究 [2] によって報告されている、水素が 3 配位の酸素と OH 結合した場合のシミュレーション値 ($\Delta_{\text{sim}} = 0.1369 \mu\text{s}^{-1}$) とよく一致することがわかった。

講演では緩和率の温度依存性や、他の水素サイト候補でのシミュレーション結果についても報告し、希薄極限にある水素の電子状態について議論する。

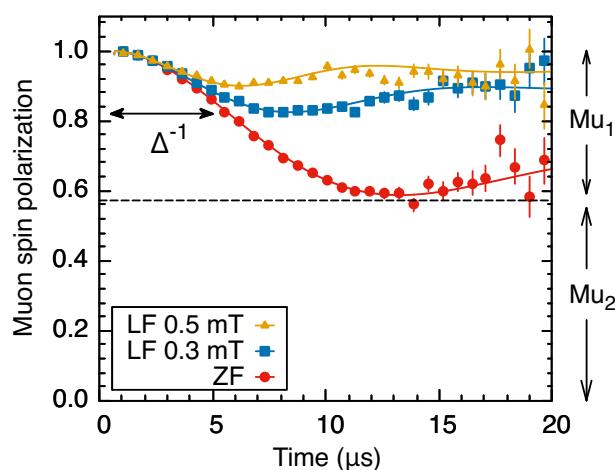


Fig 1: μ SR time spectra of single crystalline β -Ga₂O₃ under zero field (ZF) and longitudinal field (LF) measured at room temperature.

参考文献

- [1] M. Orita, *et. al.*, Appl. Phys. Lett. **77**, 4166 (2000)
- [2] J. B. Varley, *et. al.*, Appl. Phys. Lett. **97**, 142106 (2010)
- [3] P. D. C. King *et. al.*, Appl. Phys. Lett. **96**, 062110 (2010)