

強束縛近似法による $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ の電子状態の解析Analysis of electronic states of $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ by a tight binding method

阪大院工 ○入田 一輝, 岡田 丈, 橋本 風渡, 田中 一, 森 伸也

Osaka Univ., ○Kazuki Irita, Jo Okada, Futo Hashimoto, Hajime Tanaka, Nobuya Mori

E-mail: irita@si.eei.eng.osaka-u.ac.jp

$\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ は極めて大きなバンドギャップと絶縁破壊電界を有することから, 高耐圧, 低損失といった優れた特性を持つパワーデバイスを実現可能であると期待されている. さらに, 最安定構造である $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ は, 単結晶基板が低コストで製造可能であるという利点も有し [1], 盛んに研究が行われている. しかしながら, そのキャリア輸送計算に必要なバンド構造や電子状態を精度よく再現する経験的パラメータはいまだ報告されていない. そこで本研究では, $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ の電子状態を精度よく記述できる, 経験的強束縛近似法のパラメータを構築することを目的とした.

先行研究 [2] において, Ga 原子と O 原子それぞれの s 軌道と p 軌道を考慮した強束縛近似法のパラメータが与えられている. しかし, このパラメータによる計算結果は, 伝導帯の分散関係において, 第一原理計算の結果との一致が良くない. そこで, 本研究では, 第一原理計算で求めたバンド構造を再現するように, 強束縛パラメータのフィッティングを行った.

図 1 に $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ の単位胞を, 図 2 に $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ のバンド構造を示す. 図 2 の赤線が本研究で構築した強束縛パラメータを用いて計算した結果, 黒線が第一原理計算の結果である. 強束縛近似法は, 第一原理計算による伝導帯の第 1 バンド, 第 2 バンドの分散関係を広いエネルギー範囲において再現した. さらに, 平坦な価電子帯の分散関係および大きなバンドギャップも, 定性的に再現することを確認した.

次に, 強束縛近似法で求めた $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ のバンド構造における各原子軌道成分の寄与を解析した. 図 3 に, Ga 原子の s 軌道成分の各バンドへの寄与をカラープロットによって示す. 伝導帯の底においては主に Ga 原子の s 軌道成分の寄与が大きいことがわかる. これは, 第一原理計算による結果 [3] と整合する. さらに, その他の軌道成分についても同様の解析を行い, 本研究で得た強束縛パラメータにより求めた電子状態が, 第一原理計算による結果 [3] と矛盾しないことを確認した.

[1] 東脇 正高, 佐々木 公平, 表面科学 **35**, 103 (2014). [2] E. A. Albanesi *et al.*, Phys. Rev. B **46**, 13260 (1992). [3] H. He *et al.*, Appl. Phys. Lett. **88**, 261904 (2006).

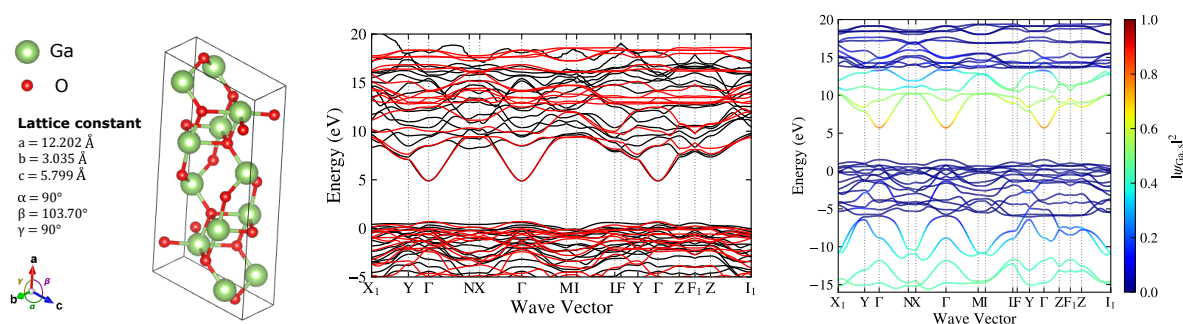


Fig. 1 [left]: Unit cell of $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$. **Fig. 2** [center]: Comparison of band structures of $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ calculated by the tight binding method (red line) and first-principles calculation (black line). **Fig. 3** [right]: Contribution of s -orbitals of Ga atoms to the band structure of $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$.