

ワイドギャップ半導体 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ における水素の局所電子状態 II

Local electronic structure of hydrogen in wide-gap semiconductor $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ II

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. Hosono⁴

E-mail: hiramasa@post.kek.jp

$\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ は、その大きなバンドギャップ ($E_g \sim 4.9$ eV) から、高電圧パワーデバイス用の材料として注目されている。Si や Sn をドーピングすると n 型の伝導性を示すことが知られているが [1], 理論計算 [2] では、格子間水素も n 型ドーピングの起源となりうることが報告されていることから、水素の電子状態についても注目を集めている。我々は、水素の軽い同位体である素粒子ミュオン (Mu) を用いるミュオンスピン回転・緩和法 (μSR) によって、 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ における擬似水素としてのミュオンの電子状態を調べている。

Fig. 1 は、単結晶 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ (001) で得られた室温での μSR 時間スペクトルである。スペクトルは、ミュオン近傍にある Ga の核磁気モーメントからのランダムな双極子磁場によってガウス関数型で有限の緩和率 (Δ) を示す成分 (Mu_1) と、ほとんど緩和を示さない成分 (Mu_2 , $\Delta \sim 0$) に分けられる。以前の発表では、計算で得られた緩和率との対応から、 Mu_1 の状態が 3 配位の酸素と OH 結合した水素に対応していることを報告した [3]。本発表では、 Mu_2 成分について報告する。

一般に、 Δ がほぼ 0 となるのは、ミュオンの感じる内部磁場分布がほぼ 0 の場合、または、ミュオンの感じる磁場が高速で揺動している場合である。Ga 原子は比較的大きな核磁気モーメントを有する元素であり、結晶構造内で Ga の作る双極子磁場がほぼ 0 となるサイトはない。また、核磁気モーメント自身の揺らぎの時間スケールは 10^{-4} 秒のオーダーであり、 μSR の時間スケール内 (10^{-6} 秒) ではほぼ静的と見なせる。よって Mu_2 成分は、ミュオン自身の高速運動によって緩和が抑制されていることを示唆している。

講演では、 Mu_2 の体積分率の温度依存性や第一原理計算で求めたポテンシャルなどについても報告し、 Mu_2 の運動の詳細について議論する。

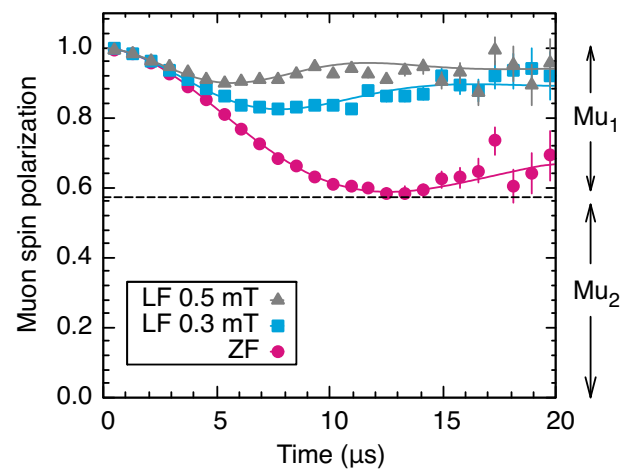


Fig 1: μSR time spectra of single crystalline $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ under zero field (ZF) and longitudinal field (LF) measured at room temperature.

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] 平石, 他, 第 81 回応用物理学会秋季学術講演会 9p-Z20-9