

岩塩型 MgZnO 混晶のドーピング傾向の予測

Prediction of doping trends in rock salt structured MgZnO alloys

都産技研¹, 京都大学², 工学院大学³, ○太田 優一¹, 金子 健太郎², 尾沼 猛儀³, 藤田 静雄²

TIRI¹, Kyoto Univ.², Kogakuin Univ.³, °Y. Ota¹, K. Kaneko², T. Onuma³, S. Fujita²

E-mail: ota.yuichi@iri-tokyo.jp

我々は超ワイドギャップ半導体(UWBG)として MgO ならびにその混晶のデバイス応用を目指している[1]。しかし一般的に UWBG はドーピングが難しく、キャリアの制御が困難である。これまで理論や経験的にドーピング限界を示す報告があるが、混晶系に対する理解は進んでいない。そこで本研究では岩塩型 MgZnO 混晶系に対し簡易的にドーピングの傾向を見積る手法を検討し、n 型ドーピング可能な組成を予測することを目的とした。

本研究ではドーピングの傾向を予測するために、MgZnO のバンドアライメントを半経験的に推定した。また n 型のドーピングを制限する指標としてドーピングピンニングエネルギー($\delta\varepsilon_F^{(n)}$)を採用し、混晶系の $\delta\varepsilon_F^{(n)}$ を簡易的なモデルで計算した[2]。

Fig. 1 に既存のワイドギャップ半導体($E_g > 2\text{eV}$)の $\delta\varepsilon_F^{(n)}$ とバンドギャップ(E_g)等で規格化した電荷中性準位(charge neutrality level; CNL)の関係を示す。 $\delta\varepsilon_F^{(n)}$ に着目すると、n 型が報告されている物質はほぼ全て 0 eV 以上の値となっている。この結果から、n 型ドーピングが可能な指標として $\delta\varepsilon_F^{(n)}$ が 0 eV 以上であることが望ましく、MgO では n 型化が困難であることがわかった。Fig. 2 に $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ 混晶の自然な伝導帯下端(CBM)と $\delta\varepsilon_F^{(n)}$ の Mg 組成依存性を示す。 $\delta\varepsilon_F^{(n)}$ は定義上 CBM より上に位置している方が n 型ドーピングが容易であることを表している。よって、 $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ の混晶では Mg 組成 70%以下で n 型化が実現できる可能性が高いことを見出した。

[1] T. Onuma *et al.*, Appl. Phys. Lett. **119**, 132105 (2021). [2] A. Goyal *et al.*, Chem. Mater. **32**, 4467

(2020). 【謝辞】本研究の一部は科研費(20H00246)の援助を受けた。

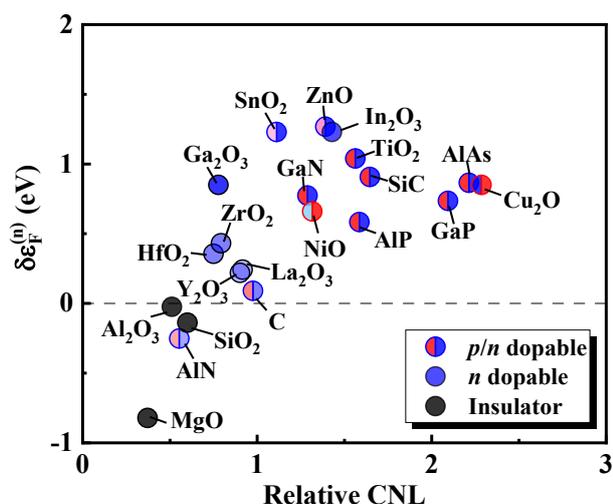


Fig.1 Relative CNL and $\delta\varepsilon_F^{(n)}$ of archetypal widegap semiconductors.

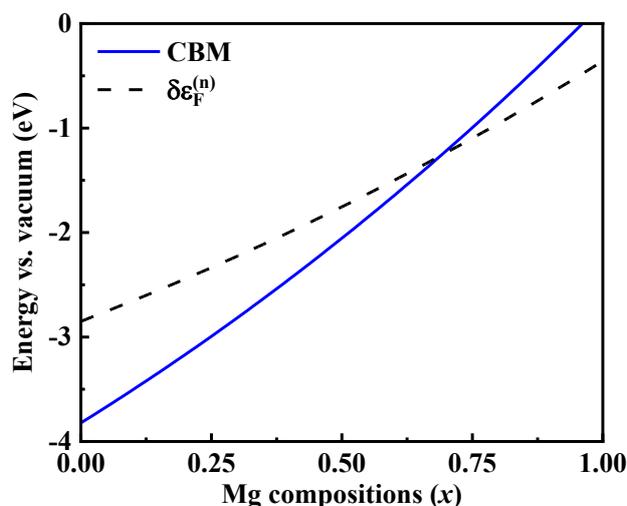


Fig.2 Doping pinning energies and the absolute natural CBM position for $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ alloys.