

格子歪みによる α -Ga₂O₃ のバンドギャップエンジニアリング

Bandgap engineering of α -Ga₂O₃ by lattice strain

三重大院工¹ ○河村 貴宏¹、秋山 亨¹

Mie Univ.¹ ○Takahiro Kawamura¹, Toru Akiyama¹

E-mail: tkawamura@mach.mie-u.ac.jp

はじめに Ga₂O₃ は GaN や SiC よりも大きなバンドギャップ (約 5 eV) と絶縁破壊電界 (約 8 MW/cm) を持つことから、超高耐圧パワーデバイスとしての利用が期待されている [1]。Ga₂O₃ デバイスの利用範囲の拡大に向け、組成や格子歪み制御によるバンドエンジニアリングに関する知見が求められている。そこで本研究では第一原理計算を用いて α -Ga₂O₃ のバンド構造解析を行い、バンドギャップと格子歪みとの関係を調べた。

計算方法 計算には第一原理計算プログラムパッケージ Quantum ESPRESSO [2] を用いた。最初に図 1(a) に示す 30 原子で構成される conventional cell を用いて構造最適化計算を行い、静水圧、c 軸方向への 1 軸歪み、および c 面内方向への 2 軸歪み (図 1(c)) を加えた場合の格子定数を求める。次にその格子定数をもつ 10 原子で構成される primitive cell (図 1b) を作成し、原子座標の最適化とバンド構造解析を行った。また、バンド構造解析を行う際には現実的な値を得るために、pseudopotential self-interaction correction (pSIC) 法 [3,4] による補正を行った。

結果および考察 2 軸歪みを加えた場合のバンドギャップと格子歪みの関係を図 2 に示す。横軸はプラスが引張歪み、マイナスが圧縮歪みを示している。6%の圧縮歪みが加わった時にバンドギャップ (間接) は最大 (5.13 eV) となり、無歪みの値 (4.68 eV) と比較して約 10%増加した。また、この最大となる点から圧縮・引張りのどちらの歪みが増加してもバンドギャップは減少する傾向を示した。同様の傾向が III-V 族化合物半導体で報告されており、その理由としては引張歪みでは価電子帯上端付近の軽い正孔バンドが上昇し、逆に圧縮歪みでは重い正孔バンドが上昇するため、結果的に圧縮・引張りどちらの条件下でも歪みが大きくなるにつれてバンドギャップは減少すると考えられている [5]。また、 α -Ga₂O₃ は通常は間接遷移型半導体であるが、格子歪みが $-20\% \leq \epsilon \leq -10\%$ と $12\% \leq \epsilon \leq 20\%$ の範囲では直接遷移型に変化する傾向が見られた。

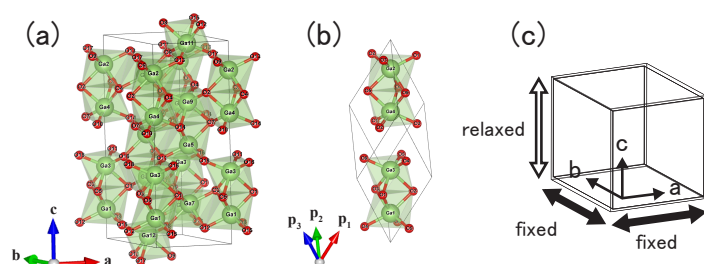


図 1: α -Ga₂O₃ の (a) conventional cell と (b) primitive cell (空間群 R $\bar{3}$ c)。 (c) 2 軸歪みの模式図。

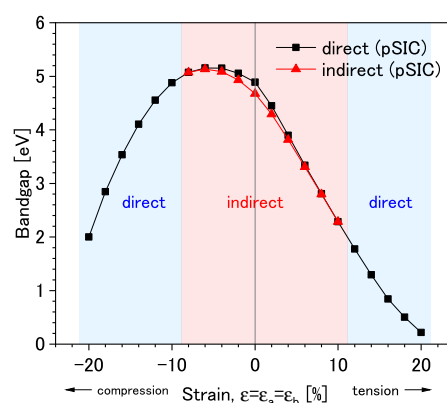


図 2: 2 軸歪みとバンドギャップの関係

[1] S. J. Pearton et al., J. Appl. Phys. **124**, 220901 (2018). [2] P. Giannozzi et al., J. Phys.: Condens. Matter, **29**, 465901 (2017). [3] A. Filippetti et al., Phys. Rev. B **67**, 125109 (2003). [4] M. Wierzbowska et al., Phys. Rev. B **84**, 245129 (2011). [5] S. C. Jain et al., Semicond. Sci. Technol. **11**, 641 (1996).