

p 型 α -Ga₂O₃ の実現に向けたコランダム構造酸化物の 第一原理計算による検討

Investigation of corundum structured oxide semiconductors
by first principles calculations for realization of p-type α -Ga₂O₃

和歌山大学システム工学部 ○(M2) 逸見篤人, 宇野和行

Wakayama University, ○Atsuto Itsumi and Kazuyuki Uno

E-mail: s206019@wakayama-u.ac.jp, kuno@wakayama-u.ac.jp

[はじめに] α 型酸化ガリウム(α -Ga₂O₃)は酸化ガリウムの準安定相であり、約 5.6 eV[1]のバンドギャップもつ酸化物半導体である。そのバンドギャップの大きさから高耐压デバイスへの応用が期待されるが、p 型伝導を示すアクセプタ不純物は見出されていない。これは α -Ga₂O₃ の価電子帯が安定な O(2p)軌道で構成されていることによる要因が大きいと考えられる。ところがコランダム構造をもつ酸化イリジウム(α -Ir₂O₃)は p 型伝導を示すことが報告されている[2,3]。バンド構造から α -Ir₂O₃ は d 軌道が価電子帯を構成していることが第一原理計算からわかっている[4]。今発表では第一原理計算による α -Ir₂O₃ および関連物質の電子構造の検討を行ったので報告する。

[計算手法] 第一原理計算の実施は VASP を用いて PBE+HSE06 で行った。 α -Ir₂O₃ の価電子帯は Ir(5d)軌道で構成されていることを受けて、仮想コランダム構造の遷移金属酸化物 M₂O₃(M = Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn)のバンド計算を行い、O(2p)軌道と d 軌道が混在するものを探した。また、Ir₂O₃ がどのような結晶構造の場合に、実験で報告されている X 線のピーク位置にピークを出現させるのかについても計算を行った。

[結果と考察] 仮想コランダム構造の遷移金属酸化物のバンド計算の結果について述べる。Sc(Z=21)から原子番号が大きくなるにつれて d 軌道が O(2p)軌道に近づき、Co₂O₃ 近辺で両者が混ざり、Zn₂O₃ では O(2p)軌道の下に抜ける傾向があった。図 1 に α -Ga₂O₃/ α -Co₂O₃ ヘテロ接合の予測を O(2s)のエネルギーを合わせることによって行った結果について示す。 α -Co₂O₃ のバンドギャップは 3.69 eV であり、Co(3d)軌道が α -Ga₂O₃ の O(2p)軌道とほぼ一致していることが分かる。以上から、 α -Ga₂O₃ に Co をドーピングすることで α -Ga₂O₃ の価電子帯付近の軌道と Co の d 軌道が混在し、 α -Ir₂O₃ と類似の伝導形態を示す可能性がある。 α -Ir₂O₃ に関する検討については当日報告する。

[参考文献] [1]H. He et al., Phys. Rev. B74, 195123 (2006). [2]K. Kaneko et al., Appl. Phys. Lett. 118, 102104 (2021). [3] S. Kan et al., Appl. Phys. Lett. 113, 212104 (2018). [4] 宇野ら、2019 年春応物 11a-S011-1.

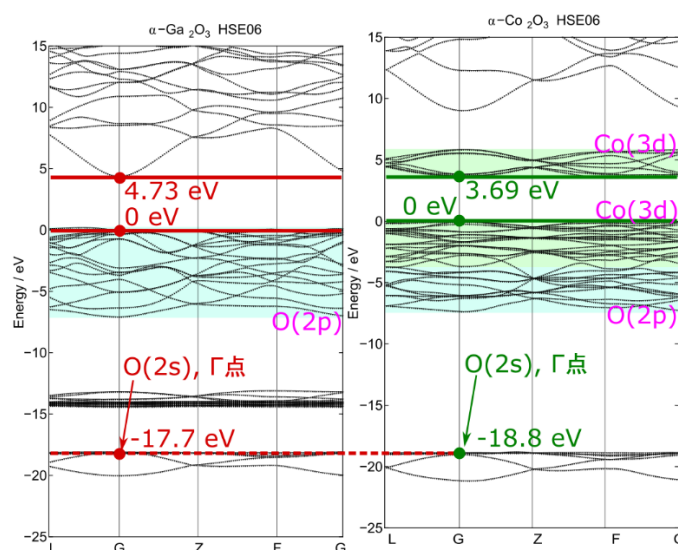


Fig.1 Band structures of α -Ga₂O₃ and α -Co₂O₃