準粒子自己無撞着 GW 法による酸化ガリウムの電子構造と誘電特性

Electronic structure and dielectric constant in gallium oxide by quasi-particle self-consistent GW method

金沢大 [1], ○(M1)村中 和輝 [1], 兵頭 功 [1], パルデデ チャンドロ [1], 小幡 正雄 [1], 小田 竜樹 [1]

Kanazawa Univ. [1], ○Kazuki Muranaka[1], Ko Hyodo[1], Pardede Chandro[1], Masao Obata[1], Tatsuki Oda[1]

E-mail: muranaka.kazuki@stu.kanazawa-u.ac.jp

社会のデジタル化が進み、電子デバイスの需要が大きく高まっている。半導体の市場は、IoT、5G、電気自動車などの再生可能エネルギーなどの分野で大きく成長すると予測されている。従来の半導体材料の Si に比べて、広いバンドギャップ、大きな絶縁破壊電界などの物性定数を持ち、高電圧や大電流の制御、エネルギーの低損失化、高速スイッチング、デバイスの小型化が期待される次世代の半導体であるパワー半導体は、盛んに研究開発が行われている。パワー半導体材料である SiC、GaN、Ga_2O_3、C の市場が、2022 年に 1249 億円と見込まれ、Si 市場の 2 兆 2137 億円に比べ小さいが、2030 年には 1 兆 469 億円にまで成長すると予測されている[1]。β-Ga_2O_3 は、Si、SiC、GaN に比べ、より広いバンドギャップと大きな絶縁破壊電界を持つが、熱伝導率が非常に低く、熱の排出が困難である欠点がある。そのため、β-Ga_2O_3 の低熱伝導率を改善することを目的に、Al_2O_3 の(0001)面に β-Ga_2O_3 をエピタキシャル成長させる研究[2]が行われている。

本研究では、スラブ系での電子構造や物性定数を明らかにする目的で先端的理論計算を行った。β-Ga_2O_3 を対象にバルク構造、(100)面に切り出したスラブ構造、(-201)面に切り出したスラブ構造について電子構造を調査した。計算方法は 1 粒子シュレディンガー方程式を解くが、交換相関(XC)ポテンシャルには、一般化勾配近似(GGA)、準粒子自己無撞着 GW 近似(QSGW)、ハイブリッド近似の 3 つの近似を採用して比較した。ハイブリッド近似では GGA と QSGW の XC ポテンシャルをそれぞれ 20%、80%用いた QSGW80 を採用した。また、スラブ構造では有効遮蔽媒質法を用いた。QSGW80 ではバルク構造で、直接遷移バンドギャップが 4.90eV と得られ、これは実験値の 4.76eV[3]に比べて約 3%大きい値である。(100)スラブ構造では直接遷移バンドギャップが 3.83eV、比誘電率が 3.55 とバルク構造の実験値の 3.57[4]に近い値が得られた。講演発表では(-201)スラブ構造についても計算結果を報告する予定である。

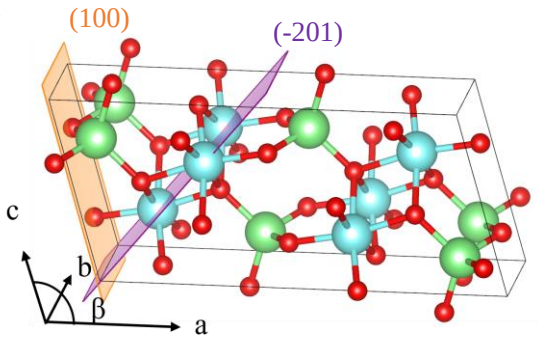

Figure. Structure of β-Ga_2O_3 (monoclinic)

参考文献

[1] Fuji Keizai Group press release 22054 (2022).

[2] Y. An et al., J. Adv. Dielectr. **9**, 1950032 (2019).

[3] H. Peelaers and C. Walle, Phys. Status Solidi B **252**, 828 (2015).

[4] B. Liu et al., Appl. Phys. Lett. **91**, 172102 (2007).