

α -Ga₂O₃/Al₂O₃ 超格子のバンド構造解析

Band Structure Analysis of α -Ga₂O₃/Al₂O₃ Superlattices

三重大院工¹ ○河村 貴宏¹、秋山 亨¹Mie Univ.¹, ○Takahiro Kawamura¹, Toru Akiyama¹

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

はじめに Ga₂O₃ の準安定相の 1 つである α -Ga₂O₃ は同じ結晶構造を持つ α -Al₂O₃ との混晶やヘテロ構造、超格子構造の形成が可能である。ヘテロ構造や超格子構造においては各層の格子定数差によって格子歪みが発生するため、コヒーレント成長可能な膜厚の制限や成長条件の最適化が課題となっておりまだまだ開発途上であるが [1]、今後のデバイス応用を見据えて、結晶成長技術の向上と共にその基本的特性の理解が必要である。そこで本研究では α -Ga₂O₃/Al₂O₃ 超格子におけるバンドエンジニアリングの指針を得ることを目的として、第一原理計算を用いてバンド構造解析を行った。

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 (QE) [2] を用いた。図 1 に示すように、 α -Ga₂O₃ と α -Al₂O₃ の六方晶構造の単位格子を c 軸方向に重ねた計算モデル（原子数 60 個）を用いた。全方向に周期境界条件を用いることで、c 軸方向に α -Ga₂O₃ と α -Al₂O₃ が交互に積み重なった超格子構造となる。この計算モデルに対して格子ベクトルと原子座標の最適化を行った後にバンド構造計算を行った。また、バンド構造解析では実験値と比較可能なバンドギャップ値を得るために、QE に組み込まれている pseudopotential self-interaction correction (pSIC) 法 [3,4] を用いて補正を行った。

結果および考察 図 2 と 3 に無歪み ($\epsilon=0$) の場合と、a、b 軸方向の格子定数を α -Al₂O₃ の値に合わせて固定した場合 ($\epsilon_{a,b}=-2.5\%$ 、マイナスは圧縮、c 軸方向には緩和させた) のバンド構造の計算結果を示している。価電子帯上端のエネルギーをゼロにしている。無歪みの場合は Γ 点における直接遷移エネルギーは 5.12 eV、間接遷移エネルギーは 5.05 eV であったので、エネルギー差は小さいが間接遷移型であった。一方で $\epsilon_{a,b}=-2.5\%$ の場合は直接遷移型であり、その遷移エネルギーは 5.45 eV であった。この結果は超格子のバンドギャップはその格子定数（格子歪み）に依存して変化する事を示している。加えて、バンドギャップは超格子の層厚・組成にも依存するので、層厚・組成・格子歪みの制御を組み合わせることで緻密なバンドギャップ制御が可能になると期待される。

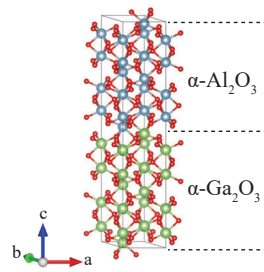


図 1: α -Ga₂O₃/Al₂O₃ 超格子の計算モデル

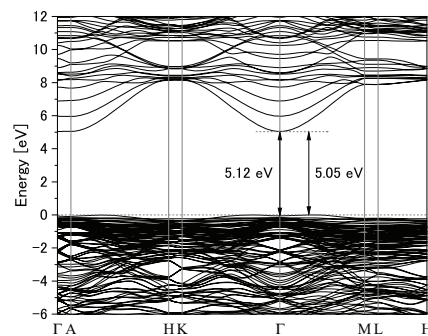


図 2: α -Ga₂O₃/Al₂O₃ 超格子のバンド構造 ($\epsilon=0$)

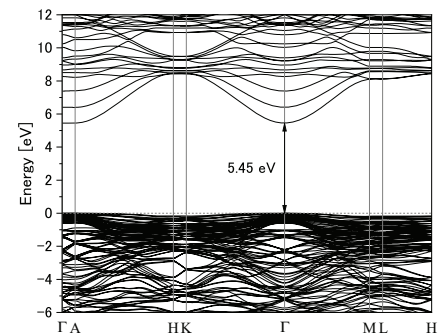


図 3: α -Ga₂O₃/Al₂O₃ 超格子のバンド構造 ($\epsilon_{a,b}=-2.5\%$)

[1] T. Oshima et al., Appl. Phys. Express **11**, 065501 (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).