

# ワイドギャップ半導体 $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>のドーパント存在サイト同定・電子状態評価

ミクロな原子構造を計算シミュレーションによって評価可能

測定法 : 計算科学・データ解析  
 製品分野 : パワーデバイス・酸化物半導体  
 分析目的 : 構造評価・化学結合状態評価・電子状態評価

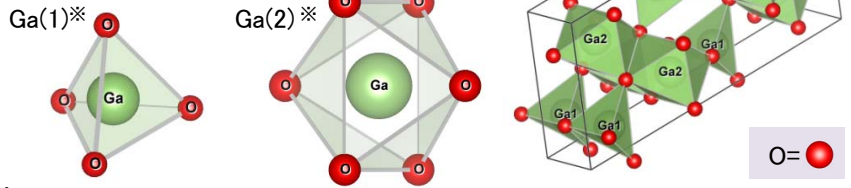
## 概要

$\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>は広いバンドギャップを有し、優れた送電効率や低コスト化の面で次世代パワーデバイスや酸化物半導体の材料として期待されています。近年、 $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>はSiまたはSnのドーピングでn型化することが報告されています。本資料では、 $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>にSiもしくはSnをドーブしたモデルに対して構造最適化計算を実施し、各ドーパントが結晶中でどのサイトを占有しやすいかを評価しました。続いて、得られた構造モデルから状態密度を計算し、ドーピングによる電子状態の変化を調査しました。

## データ

### ■ $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 構造

$\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>の構造を右図※に示します。Gaの存在するサイトは、周囲のO原子が作る四面体の中心にあるサイト: Ga(1)と、周囲のO原子が作る八面体の中心にあるサイト: Ga(2)の2種類が存在します。



### ■ Si,Snドーブ時の構造最適化

2種類存在するGaのサイトに対し、SiもしくはSnを置換したモデルを作成し、構造最適化計算を実施することで各ドーパント元素の存在サイトの同定を行いました。

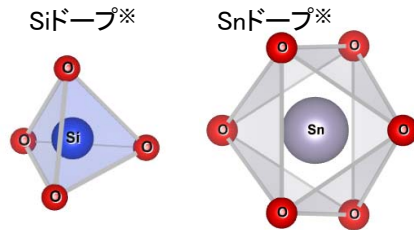
構造最適化後の安定化エネルギー

ドーパント	Si		Sn	
	Ga(1)	Ga(2)	Ga(1)	Ga(2)
エネルギー[eV/unit cell]	<b>-22037.853</b>	-22037.667	-22058.017	<b>-22058.224</b>

ドーブされたSiはGa(1)サイト(4配位)の位置で安定化します。  
 ドーブされたSnはGa(2)サイト(6配位)の位置で安定化します。

構造最適化後のドーパント周囲の構造

サイト	Ga(1)		Ga(2)	
	-	Si	-	Sn
ドーパント	-	Si	-	Sn
平均結合距離[Å]	1.867	1.699	2.028	2.077
結合距離標準偏差	0.016	<b>0.007</b>	0.063	<b>0.036</b>
多面体体積[Å <sup>3</sup> ]	3.306	<b>2.480</b>	10.863	<b>11.731</b>



・SiはGa(1)サイトへ置換することで、四面体の歪みを小さくし、O原子との結合距離を短くします。  
 ・SnはGa(2)サイトへ置換することで、八面体の歪みを小さくし、O原子との結合距離を長くします。

※VESTA(<https://jp-minerals.org/vesta/jp/>)を利用

分析サービスで、あなたの研究開発を強力サポート!

一般財団法人 **MIST** 材料科学技術振興財団

TEL : 03-3749-2525 E-mail : info@mst.or.jp  
 URL : <https://www.mst.or.jp/>

# ワイドギャップ半導体 $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> のドーパント存在サイト同定・電子状態評価

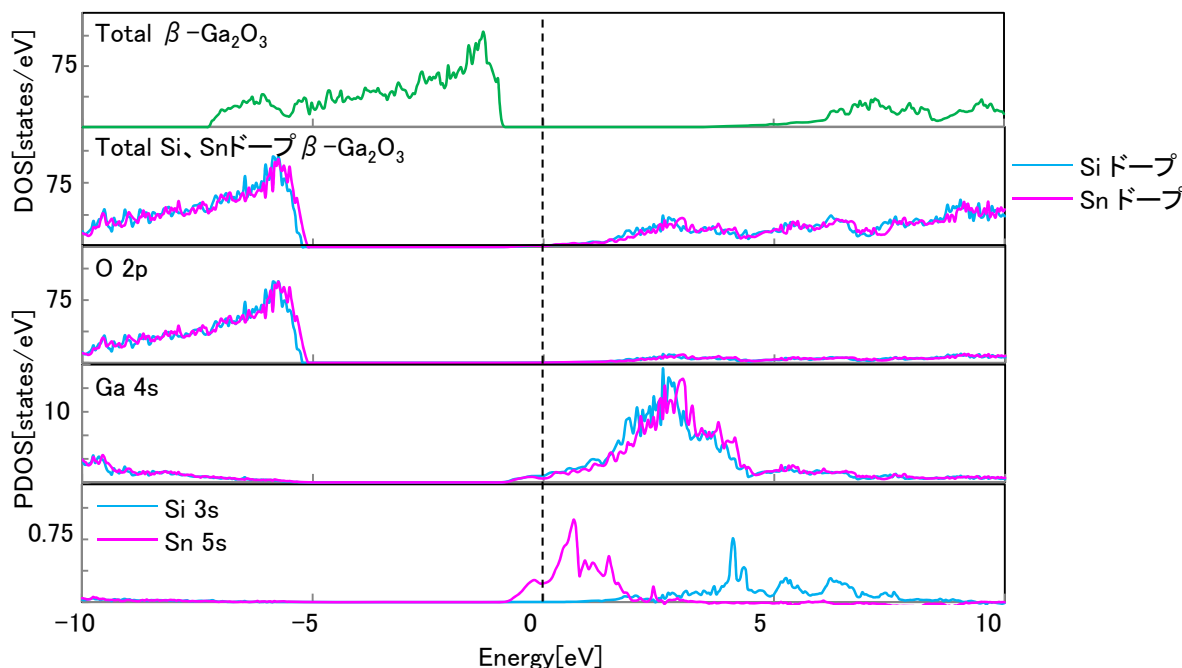
ミクロな原子構造を計算シミュレーションによって評価可能

測定法 : 計算科学・データ解析  
 製品分野 : パワーデバイス・酸化物半導体  
 分析目的 : 構造評価・化学結合状態評価・電子状態評価

## データ

### ■ 状態密度

$\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>及びSi、Snドーパ  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>の状態密度(DOS)、部分状態密度(PDOS)を求めました。



### 計算結果

ドーパント	-	Si	Sn
サイト	-	Ga(1)	Ga(2)
VBM[eV]	-0.8	-5.2	-5.1
VBMを構成する主な軌道	O 2p	O 2p	O 2p
CBM[eV]	3.6	<b>-0.8</b>	<b>-0.8</b>
CBMを構成する主な軌道	Ga 4s	Ga 4s	Ga 4s Sn 5s
バンドギャップ[eV]	4.4	4.4	4.3
光学ギャップ[eV]	4.4	<b>5.2</b>	<b>5.1</b>

Si、Snをドーパントとしたとき、いずれもフェルミ準位が伝導帯下端(CBM)に位置し、n型化が確認されました。また、いずれのドーパントにおいても光学ギャップが広がることを確認されました。



✓ 実験が難しいナノスケールの現象を、計算シミュレーションから評価が可能

分析サービスで、あなたの研究開発を強力サポート！