

ワイドギャップ半導体窒化ホウ素における不純物添加効果

○太田 優一^{*1)}、時田 幸一^{*1)}、渡辺 洋人^{*2)}

■キーワード ワイドギャップ半導体、窒化ホウ素、不純物、第一原理計算

1. 深紫外領域にバンドギャップを持つ窒化ホウ素
2. 遷移金属ドーピングの効果検証
3. 第一原理計算によるドーパント探索

■研究の目的

窒化ホウ素 (BN) は広い禁止帯幅 (ワイドバンドギャップ) を有することが知られており、デバイス応用が期待されている材料である^[1]。しかし、この結晶の合成は極めて困難であることが知られ、基礎的な物性も未だ明確になっていない状態である。このような材料には、実験結果を参照せずに電子状態をシミュレーションできる第一原理計算が有効である。そこで、本研究では第一原理計算によって BN の不純物添加により可視光応答する準位を形成する元素を決定した。

■研究内容

(1) 計算方法

不純物を添加した状態を模擬するために、BN のスーパーセルを構築した。これは、例えば $B_{31}N_{32}X$ という基本単位を持つ結晶を計算することに相当する。ここで X には遷移金属元素を入れる。このようにして構築したスーパーセルの例を図 1 に示す。図 1 の例は、立方晶窒化ホウ素 (c-BN) で、B サイトに X を置換させたモデルとなっている。

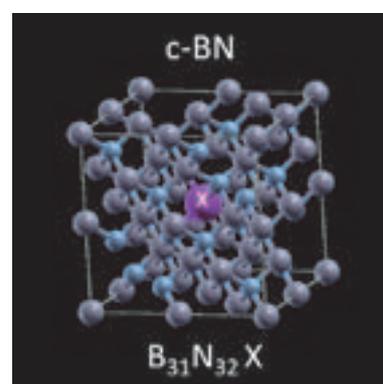


図 1. c-BN のスーパーセルモデル

(2) 可視光応答する準位を形成する元素の決定

X に導入する遷移金属元素は原子番号 21 ~ 30 までをそれぞれ入れ替えて計算した。まず、バンドギャップ中に準位を形成するか否かを状態密度図 (Density Of States: 以下、DOS という) を計算することによって判断した。これによってバンドギャップ中に準位形成可能な元素をスクリーニングした。その後、バンドギャップを正確に求めるために、F. Tran らによって提案された手法でバンドギャップの補正を行った^[2]。

最終的に各不純物導入の容易さを形成エネルギーで比較した。その結果 Ni を導入する場合が最も形成エネルギーが低く、不純物として添加しやすいことが判明した。Ni を導入した場合の c-BN の DOS を図 2 に示す。価電子帯上端 (VBM) から伝導帯下端 (CBM) の距離がバンドギャップに相当する。このバンドギャップの間にアップスピン及びダウンスピンそれぞれ 1 つずつ準位が形成されていることが分かる。この準位は Ni の d 電子の局在によって作られており、これによって BN の可視光領域での応答が可能になることを意味する結果が得られた。

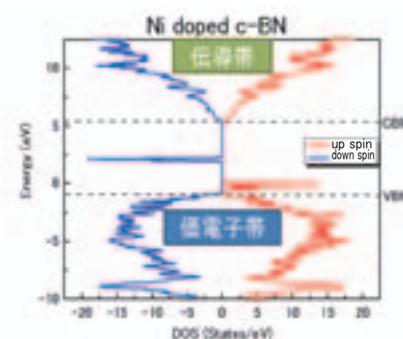


図 2. Ni ドープ c-BN の状態密度図

■研究の新規性・優位性

中間バンド (または準位) を形成する元素を見出した。これによって可視光応答する BN 系デバイスの研究開発が可能であることが明らかになった。本研究で採用した第一原理計算では、実験的に検証しにくい物性の予測も可能であり、材料の研究開発の指針として活用できる。

最先端の材料の研究開発において第一原理計算の活用は非常に優位である。

■産業への展開・提案

- ①新規材料探索
- ②物性の正確な予測
- ③実験結果の検証

参考文献

- [1] K. Watanabe *et al.*, Nature Materials, Vol.3, pp.404-409 (2004)
 [2] F. Tran *et al.*, Phys. Rev. Lett., Vol.102, pp.226401-1-226401-4 (2009)

*1) 電子半導体技術グループ、*2) 材料技術グループ、

H25.10 ~ H26.9【基盤研究】ワイドギャップ半導体窒化ホウ素における不純物添加効果