

研究課題 (テーマ)		新規 p 型ワイドバンドギャップ半導体の開拓	
研究者	所属学科等	職	氏 名
代表者	知能ロボット工学科	講師	太田 優一
分担者			
研究結果の概要			
一般的に広いバンドギャップ持つ半導体をワイドバンドギャップ半導体と称する。この中でも特に 4 eV 以上のバンドギャップを持つ物質を超ワイドバンドギャップ(UWBG)半導体として区分している。この UWBG 半導体は深紫外発光素子やパワーデバイス応用に向けて研究開発が進んでいるが、実用化に対しては n 型と p 型の両極性のドーピング制御が難しいことが課題となっている。ダイヤモンド等の少数の例外を除くと、UWBG 半導体のほとんどが電子を多数キャリアとする n 型半導体しかできておらず、デバイス開発の大きな課題となっている。したがって UWBG 半導体で p 型伝導を示す物質を提案することは、既存のデバイス開発の進展に大きく寄与できる可能性がある。 そこで本研究では新しい p 型伝導を示す UWBG 半導体を新たに提案することを目的に実施した。電子状態計算は密度汎関数理論に基づく第一原理計算によって行い、バンドギャップの推定や p 型ドーピングの可能性などを検討した。なお標準的な第一原理電子状態(バンド)計算の結果では、バンドギャップを過小評価することが知られている。そこで本研究では経験的な線形補完やハイブリッド汎関数によってギャップ値に補正を施した。また、米国 Materials project 等のデータベースや書籍等の情報に基づいて予め候補物質をスクリーニングした。なお、スクリーニング前に人体に有害である鉛等を含む物質は人為的に除外している。 まずバンド計算によって補正前のバンドギャップが 2 eV 未満の物質は候補から除外し、既によく知られている物質が多い 2 元素の物質も計算コスト低減のために検討しなかった。その結果、酸化物や窒化物の 3 元素系、すなわち ABO_n や CDN_m 等が複数の候補として浮上した。ここで、A, B, C, D はある特定の元素で、n, m は正の整数である。この中でも補正後のバンドギャップが 7 eV 以下であり、かつ経験的なドーピング基準を参照して p 型伝導が実現できる可能性を検討した。ここで採用した経験的基準とは真空準位を基準とした価電子帯の位置、すなわちイオン化ポテンシャルが 7 eV 以下であることとした。最終的にこのような条件を満たす物質群を絞り込み、広いギャップを有する p 型半導体、ならびにその条件等を見出すことができた。本研究成果によって新しい p 型ワイドバンドギャップ半導体を具体的に提案する指針を確立することができた。なお、検証段階であるが、複数の物質が p 型 UWBG 半導体であることを見出している。以上の結果から、新規 p 型ワイドバンドギャップ半導体の開拓が実現できたといえる。			
今後の展開			
実用化においては実際に物質の合成や、候補物質に適したドーパントの探索が重要となる。そのため、まずは正孔ドーピングが可能な元素の探索や適切な置換サイトの検討が必要となる。また実際に合成するために実験家との連携を推進し、新しい p 型半導体によるデバイス実現に向けて基礎的な検討を進めていく予定である。			