

超高真空下で加熱した ZnO 結晶中の欠陥と光・電子特性

Defects and Optoelectronic Properties in ZnO Crystals Annealed in Vacuum

物材機構¹, 物材機構/SPring-8² ○大澤 健男¹, 渡邊 賢¹, 橋口 未奈子¹, 坂口 勲¹,
上田 茂典², 大橋 直樹¹

NIMS¹, NIMS/SPring-8² ○Takeo Ohsawa¹, Ken Watanabe¹, Minako Hashiguchi¹,
Isao Sakaguchi¹, Shigenori Ueda², Naoki Ohashi¹

E-mail: ohsawa.takeo@nims.go.jp

【はじめに】高純度な酸化物半導体を利用して，トランジスタや LED などの電子デバイスを作製する研究が進んでいる．その一端を担う酸化亜鉛 (ZnO) においても，発光効率や電子輸送特性を向上させる上で，格子欠陥や微量不純物の課題が残されている．さらに，加熱時において，意図に反して結晶内に混入される水素不純物が，導電性や光学特性を左右することが示唆されている．^[1,2] その改善のため，加熱処理時の外部からの不純物混入を徹底的に排除するにあたり，超高真空中 (UHV) で加熱を実施した．加熱前後における光・電子物性と欠陥構造を総括的に検討したので報告する．

【実験】空孔欠陥を導入するため，UHV 下 ($b.p. 3 \times 10^{-10}$ Torr) で ZnO 単結晶を高温加熱 (600 ~ 1200°C) で加熱した．それらの空孔欠陥を含む ZnO 結晶について，光・電子物性測定 (フォトルミネッセンス，ホール効果，電気容量-電圧測定など)，ならびに 2 次イオン質量分析を行った．X 線光電子分光にて，ZnO 表面と内部の電子状態を併せて評価した．

【結果】各温度で加熱後のキャリア濃度を図 1 に示す．尚，本試料として，未研磨かつ未熱処理 ZnO 単結晶を用いている．As-received では 10^{15} cm^{-3} であるのに対し，加熱温度上昇にしたがってキャリア濃度が単調減少し，1200°C 後においては 10^{13} cm^{-3} 台に達した．また，移動度も 2 桁低下しており，ホール効果の結果から，アクセプター性亜鉛空孔 (V_{Zn}) の導入が考えられる．発光特性においても，加熱前は発光ピークが見られないものの，1200°C 加熱後では約 2.3 eV の緑色発光が強く観測され，特性が顕著に変化した．これらの結果も V_{Zn} の影響を示唆しており，^[3] DFT 計算による報告と合致する．^[4] 当日は，これらの欠陥準位を含めて議論する．

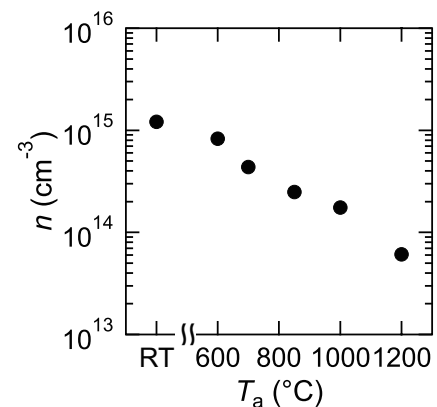


図 1: ZnO 結晶中のキャリア濃度 (n) の加熱温度 (T_a) 依存性．

参考文献

- [1] C.G. Van de Walle, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1012 (2000).
- [2] N. Ohashi *et al.* *Appl. Phys. Lett.* **80**, 2869 (2002).
- [3] A.F. Kohan *et al.* *Phys. Rev. B* **61**, 15019 (2000).
- [4] A. Janotti and C.G. Van de Walle, *Phys. Rev. B* **76**, 165202 (2007).