

InGaZnO の N 型化メカニズムに関する計算

Calculation for mechanism of N-type behavior in InGaZnO

株式会社半導体エネルギー研究所 ○中島 基、廣橋 拓也、高橋 正弘、山崎 舜平

Semiconductor Energy Laboratory Co., Ltd.,

○M. Nakashima, T. Hirohashi, M. Takahashi and S. Yamazaki

E-mail: mn0861@sel.co.jp

近年、酸化物半導体を用いた電子デバイスが大変注目されている。我々はワイドギャップ半導体である InGaZnO (IGZO) の上に SiN:H を直接成膜することで IGZO が透明のまま低抵抗化することを見出した。この低抵抗化した酸化物半導体 (Oxide Conductor; OC) を透明電極として活用すれば、OS-FET を液晶ディスプレイに応用する時に、マスク枚数を削減することが可能になる。この OC 化した OS 薄膜のメカニズムを解明するため硬 X 線光電子分光 (HX-PES) 等の実験を行い、水素の存在と酸素欠損 (V_O) の存在が極めて重要であることが分かった。その原因究明として、我々は IGZO 膜において水素は酸素と結合するに加えて、 V_O 中に水素が入り込んだ欠陥 (V_OH) が存在し、 V_OH が n 型ドナーのキャリアの供給源となっている可能性を見出した。そこで、 V_OH の安定性および荷電状態について第一原理計算を行った。

第一原理計算には VASP[1] を使用し、PAW 法、交換相関汎関数には GGA-PBE を用いた。はじめに InGaZnO₄ 結晶中の V_OH の安定性を評価するため、 V_OH をもつモデルを始状態 (図 1(a))、 V_O および V_O 近傍の酸素と結合した水素をもつモデルを終状態 (図 1(b)) として、Nudged Elastic Band (NEB) 法を用いて活性エネルギーを算出した。 V_O 存在下における水素拡散のエネルギー変化を図 1(c) に示す。酸素と結合した水素が V_O 中に入り V_OH を形成するには約 0.35 eV の活性エネルギーが必要であるが、 V_OH の水素が V_O から抜け出し近傍の酸素と結合する

には約 1.75 eV の活性エネルギーが必要であった。このことから、一旦 V_OH が形成されると水素は V_O から放出されにくいと考えられる。

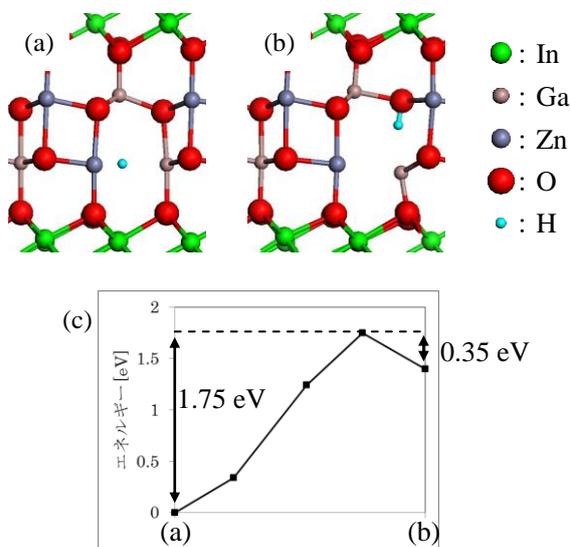


図 1 (a)始状態(V_OH)、(b)終状態(V_O, H)、
(c)水素拡散に対するエネルギー変化

次に、 V_OH 欠陥の遷移レベルを HSE ハイブリッド汎関数を用いた計算[2]より算出した。計算の結果、 V_OH 欠陥の(+/-)遷移レベルは伝導帯下端の下 0.1 eV 付近に位置しており、 V_OH はドナーとしての電子の供給源であり、IGZO において世界で初めてキャリア濃度の制御が可能である事を示唆する結果が得られた。

[1] G. Kresse, J. Hafner, Phys. Rev. B **48**, 13115 (1993).

[2] F. Oba, A. Togo, I. Tanaka, J. Paier G. Kresse, Phys. Rev. B **77**, 245202 (2008).