

酸化物半導体の物性・材料設計：秩序と混沌

Development of Oxide Semiconductors towards Ultimate Functional Materials:

Deciphering Why the Structure of Matter is as It is

高知工科大総研¹, ○山本 哲也¹, 宋 華平¹, 野本 淳一¹, 牧野 久雄¹

Research Inst., Kochi Univ. Tech.¹, ○Tetsuya Yamamoto¹, Huaping Song¹,

Junichi Nomoto¹, Hisao Makino¹

E-mail: yamamoto.tetsuya@kochi-tech.ac.jp

ワイドバンドギャップ酸化物半導体は、酸素 (O) が多様な配位数をとり得ることを反映し、化学結合を形成する金属元素も多様化する。価電子帯は圧縮された O *p* 軌道波動関数で構成され、伝導帯は広がった金属元素 *s, p* 軌道波動関数で構成される。前記特徴ある波動関数をドーピング技術で操ることにより、電気・光・磁気といった3つの異なる機能を同一材料で創発できることが、ワイドバンドギャップ酸化物半導体の特徴である。本講演ではその1つである酸化亜鉛 (ZnO) に焦点を絞り、ドーピング技術による極限的機能発生に対する取り組みを議論する。

ZnO は4配位構造 (空間群: P6₃mc) をもつ六方晶系ウルツ鉱結晶構造を有し、直接遷移型半導体の1つである。バンドギャップ値は、ほぼ 3.3 eV (波長 376nm) であり、光機能 (吸収と発光) を活かした応用は下記の通りである。紫外線 (光 (UVA (315–400nm) 吸収価電子励起) センサー (紫外線カット化粧品は周知)、紫外光発光ダイオード、及び緑色蛍光体 (発光色: 青緑、発光ピーク波長: 505nm) など。光機能 (可視光+近赤外光領域での透明性) と導電機能とを併せ持つ機能材料としての応用は光電変換デバイス用・表示装置用透明電極 (図1) が挙げられる^[1]。

前記応用においては、センサー以外、いずれもドーピング技術を駆使したものである。他の半導体と比較した場合、特筆すべきは、*n* 型を例に挙げると、ドーピングレベルは数 at.% まで達し、キャリア密度も $10^{20} \sim 10^{21} \text{cm}^{-3}$ 台まで実現できることにある。これは O と化学結合する陽元素 M (伝導帯構成主要素) が II、III、および IV 族元素まで亘る酸化物半導体の共通事項である。一方で、構造 (M-O 化学結合状態に依存) と物性、特にキャリア輸送 (電子移動度) との相関や従来の自己補償モデルとの照合など、俯瞰的な研究は未踏であり、これからである。

我々は、*p* 型化実現^[2]を果たすべく、価電子帯最上 *p* 波動関数の制御的創造を最終目的として、先ずは (i) キャリア密度 N_e の最大限界値とそれを生み出すドーピング金属元素と第1近接 O との原子間距離 (N_e 依存性)、(ii) キャリア輸送 (電子移動度) の最大限界値 (電子の有効質量や緩和時間 (N_e 依存性))、(iii) (i) と (ii) とは共存できるか、これら3つを明白にすべく、極限機能透明導電膜実現を試みている。前記 (iii) の実現は、プラズモン振動の摩擦による光損失の軽減をもたらし、近赤外光領域周波数に対する、誘電関数虚部項の大きさは十分小さくなる。該機能材料は、応用としては理想的 (エネルギーの閉じ込め) なプラズモンナノ材料となり得ることが期待される。現段階での最新研究成果を基に議論し、今後の展望を述べたい。



図1 ZnO 透明電極実装 LCD TV

文献:

- [1] N. Yamamoto, H. Makino, S. Osone, A. Ujihara, T. Ito, H. Hokari, T. Maruyama and T. Yamamoto, "Development of Ga-doped ZnO transparent electrodes for liquid crystal display panels", *Thin Solid Films*, **520** (2012) pp.4131-4138.
- [2] T. Yamamoto, "Codoping Method for Solutions to Doping Problems in Wide-Band-Gap Semiconductors", *physica status solidi (a)*, **193** (2002) pp.423-433.