

IGZO 結晶における原子配置と酸素欠損の関係

Relationship between arrangement of atoms and oxygen vacancy in IGZO crystal

株式会社半導体エネルギー研究所

○高橋 正弘、中山 智則、菊地 彰、中島 基、山崎 舜平

Semiconductor Energy Laboratory Co., Ltd., Japan

M. Takahashi, T. Nakayama, E. Kikuchi, M. Nakashima and S. Yamazaki

E-mail: takahasi@sel.co.jp

近年、結晶性の In-Ga-Zn oxide (IGZO) として CAAC (c-axis aligned crystalline) - IGZO を用いた酸化物半導体素子が精力的に研究されている。IGZO において、酸素欠損 (V_O) に水素がトラップされた欠陥はキャリアの生成源となるため、酸素欠損を制御する事は非常に重要である[1]。これまでに我々は、結晶性が高い IGZO では酸素欠損は形成され難い、という計算結果を報告している[2]。InGaZnO₄ 結晶の構造解析によると、Ga、Zn は同じ位置を占めており、それらは様々な配置を取る可能性がある。しかし、前報告では InGaZnO₄ 結晶モデルにおける Ga、Zn 配置の規則性が高かったため、酸素と近接する Ga、Zn の配置は限られていた。今回、酸素と近接する Ga、Zn 配置の組み合わせが多いモデル (Fig.1) において、 V_O の形成し易さと近接する原子配置との関係について調べた。 V_O の形成し易さを評価するため、第一原理計算を用いて V_O の形成エネルギーを算出した。算出は (Ga, Zn)O 層の酸素に対してのみ行った。 V_O の形成エネルギー (E_{form}) は、 $E_{\text{form}} = E_{\text{tot}}(V_O) - E_{\text{tot}}(\text{perfect}) + \mu_O$ から求めた。 E_{form} が小さいほど V_O が形成し易くなる。ここで、 $E_{\text{tot}}(V_O)$ は V_O を含むモデルの原子緩和後の全エネルギー、 $E_{\text{tot}}(\text{perfect})$ は欠陥の無い InGaZnO₄ 結晶モデルの全エネルギー、 μ_O は酸素の化学ポテンシャルであり酸素分子の全エネルギーの半分とした。Fig.2 に、算出した V_O の形成エネルギーを V_O と近接する Zn の数に対してプロットしたグラフを示す。Fig.2 より、近接する Zn の数が増えるにつれて V_O の形成エネルギーが小さくなっており、(Ga, Zn)O 層において、近接する Zn の数が多い酸素ほど酸素欠損を形成し易いことが計算より示唆された。当日は組成を変えた IGZO における酸素欠損についても議論する。

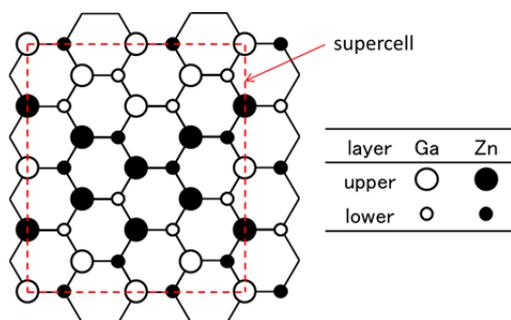


Fig.1 Schematic diagram of arrangement of Ga and Zn in two (Ga, Zn)O layers of InGaZnO₄ model used for this calculation.

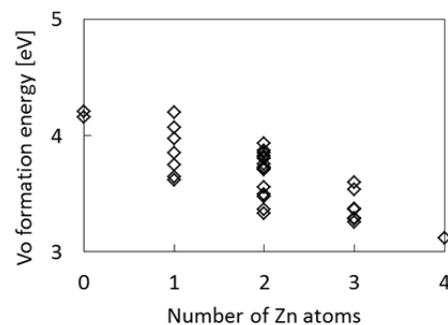


Fig.2 Formation energy of an oxygen vacancy in (Ga, Zn)O layers as a function of number of Zn atoms close to the oxygen vacancy.

[1] M. Nakashima, et al., J. Appl. Phys. 116, 213703 (2014).

[2] 高橋正弘他、第73回応用物理学会学術講演会予稿集 13a-H7-1(2012).