金属酸化物におけるドーピング特性と結晶子配向制御による高キャリア輸送

Characteristics of Doping issues and Tailoring of Crystallographic Orientation Distribution to Achieve High Carrier Transport of Metal Oxides

高知工科大総研 [1] ○山本 哲也 [1], 野本 淳一 [1], 牧野 久雄 [1]

Kochi Univ. of Tech. [1], °Tetsuya Yamamoto[1], Junichi Nomoto[1], Hisao Makino[1]
E-mail: yamamoto.tetsuya@kochi-tech.ac.jp

金属酸化物における化学結合状態の特徴は、対極的な関係にある共有結合性とイオン結合性との混成状態にある．両結合がもたらす結晶安定性は、前者では混成軌道（例: sp^3 など）間の反発力によるバランスに，後者では正負電荷間の引力相互作用と同符号電荷間の反発相互作用とのバランスに因る．伝導型 (p 型, n 型) や電気伝導性 (キャリア密度、キャリア移動度 (輸送)) などの制御を行う場合，化学結合力の弱い金属 - 酸素間結合 (例：遷移金属の d 軌道と酸素 p 軌道との混成反結合電子状態が伝導帯ではなく，価電子帯に在る場合など) を利用した真性欠陥を中心に設計する場合と，母体化合物構成元素とは異なる元素を利用する場合とに大きく分かれる．目的 (学術及び応用) 達成の可否は，キャリア (電子、正孔) の局在性 (格子分極に支配される) と非局在性 (軌道の拡がりに支配される) とをいかに操れるかで決まる (FIG. 1). 応用性に富むヘテロ接合による多結晶薄膜では，多くの場合，モザイク性があり，上記いずれの場合も粒界偏析に因るキャリア散乱や結晶子配向性の度合いや残留応力に影響する．その結果，結晶子内点欠陥・転位，吸着サイト密度やキャリア輸送特性の変化 (FIG. 2) などが生じ，その特性を機能として利用する新規/新奇な応用の発展性へと繋がる．研究者にとって、金属酸化物材料群は、材料科学と工学との宝庫である．

本講演では (1) 金属酸化物のドーピング特性 (格子系歪みや局在・非局在傾向をもたらす要因など) を系統的 (Chemical Trend) に理解すべく，他の金属化合物と比較，と (2) 多結晶薄膜配向制御による空孔欠陥制御やキャリア輸送設計など，とに焦点を当て，理論 (第 1 原理電子構造計算をも含む) と実験との両面から，金属酸化物材料群の魅力解明に迫る．

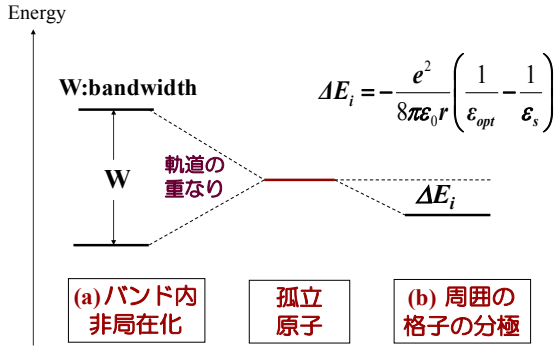

FIG. 1 The energy of valence electron can be lowered either thorough (a) delocalization in a band, or (b) localization by polarizing the surrounding lattice.

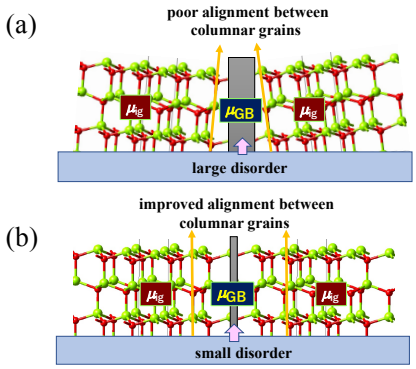

FIG. 2 Polycrystalline films with (a) poor and (b) well-defined (0001) orientated columnar structures. μ_{ig}: intrinsic carrier mobility.

References:
(1) T. Yamamoto and H. Katayama-Yoshida, “Materials Design for the Fabrication of Low-resistivity *p*-Type GaN Using a Codoping Method”, Jpn. J. Appl. Phys. **36** (1997) L180-L183.
(2) T. Yamamoto and H. Katayama-Yoshida, “Electronic structures of *p*-type GaN codoped with Be or Mg as the acceptors and Si or O as the donor codopants”, J. Crystal Growth, **189/190** (1998) 532-536.
(3) T. Yamamoto and H. Katayama-Yoshida, “Solution Using a Codoping Method to Unipolarity for the Fabrication of *p*-Type ZnO”, Jpn. J. Appl. Phys. **38** (1999) L166-L169.
(4) T. Yamamoto, “Codoping Method for Solutions to Doping Problems in Wide-Band-Gap Semiconductors”, physica status solidi (a) **193** (2002) 423-433.
(5) T. Yamamoto, “Control of N-Impurity States in N-Doped ZnO, ZnS and ZnTe”, Jpn. J. Appl. Phys. **42** (2003) pp. L514-L516.
(6) T. Yamada, A. Miyake, S. Kishimoto, H. Makino, N. Yamamoto and T. Yamamoto, “Low-resistivity Ga-doped ZnO thin films of less than 100 nm thickness prepared by ion plating with direct current arc discharge”, Appl. Phys. Lett. **91** (2007) 051915.
(7) J. Nomoto, H. Makino and T. Yamamoto, “High-Hall-Mobility Al-Doped ZnO Films Having Textured Polycrystalline Structure with a Well-Defined (0001) Orientation”, Nanoscale Res. Lett. (2016) 11:320 DOI: 10. 1186/s11671-016-1535-1.

© 2017年 応用物理学会