透明導電性多結晶酸化物薄膜の粒界がキャリア輸送に及ぼす影響

The effect of grain boundary on carrier transport in transparent

and conductive polycrystalline oxide thin films

金沢工大 OEDS R&D センター 南 内嗣

OEDS R&D Center, K I T T. Minami

E-mail: minami@neptune.kanazawa-it.ac.jp

【はじめに】 我々は量子輸送理論から粒界散乱による電気伝導率(σ)の低減を取り扱う Munoz らの 理論[1]を使って、縮退した(電子密度 n=10²⁰-10²¹ cm⁻³)多結晶 Al 添加 ZnO (AZO)透明導電膜に おける右肩上がりのホール移動度と n との関係(μ_{Hall} -n 特性)及び急激な μ_{Hall} の低下が粒界の不 規則性(乱雑性)に起因すると報告している[2].今回は、縮退した AZO 薄膜における μ^{Hall} の温 度依存性(この依存性は n にも影響される)を Munoz らの理論を使って検討する.

【実験結果と理論的検討】 図1及び2に、スパッタ成膜した AZO 透明導電膜(成膜条件を変化) における典型的な μ_{Hall} の温度依存性及び μ_{Hall} -n 特性をそれぞれ示している. μ_{Hall} は n が 10²⁰ cm⁻³ 台の低い側(例えば、n=2.26×10²⁰ cm⁻³)及び 10¹⁹ cm⁻³ 台以下に低下すると温度 T が上昇するに伴っ て増大する傾向を呈し、10²⁰ cm⁻³ 台の高い側(例えば、n=6.41×10²⁰ cm⁻³)では逆に減少する. 右肩上 がり(傾きが正)に変化する μ_{Hall} の T 依存性は金属薄膜に関する Munoz らの理論では説明できな いので、我々は半導体の粒界での熱放出による粒界散乱(Seto の理論)の導入を検討した. そこ で、縮退を考慮した Seto の理論をイオン化不純物散乱(μ_{ii})及びフォノン散乱(μ_{ph})と共に Matthiessen 則が適用されるとして導入した. ところで、Munoz らの理論では粒界の周期の不規則性の効果を 導入するために、n 番目の粒界の位置 x_nを x_n=nd+ Δ_n (ただし、 Δ_n は不規則変数で標準偏差 s のガ ウス分布を採用)と考え、周期の不規則性が Krönig-Penney ポテンシャルを通過するキャリア(電 子)を邪魔するために生じる σ の低減は、電子が N 個の粒界列を通過する確率 T_N を転送行列 (transfer matrix) P_nを用いて算出し、 μ^{Munoz} を計算した.図1から明らかなように、いずれの膜にお いても理論値 $\mu^{Mu-Hall}$ と実験値は良いフィッティングが得られている.また、図2 中には、 $\mu^{Mu-Hall}$ (赤)及び上記の Matthiessen 則を μ_{ii} と μ_{ph} のみとして計算した μ^{Munoz} (熱放出による粒界散乱は 考慮されていない)を μ^{Mu-opt} で(茶)で示している.



【まとめ】 縮退を考慮した熱放出による粒界散乱(Setoの理論)を Munoz らの理論に導入して μ^{Munoz} を理論的に計算した結果, AZO 透明導電膜の実験結果 (μ_{Hall} の温度依存性及び μ_{Hall} -n 特性) のいずれにおいても良いフィッティングが得られた.

[1] C. Munoz et al., Appl. Phys. Reviews, 4 (2017) 011102. & Appl. Surf. Sci. 329 (2015) 184.
[2] T. Minami, T. Miyata, and H. Tokunaga, Phys. Status Solidi A, 216, (2018) 1700783.