

縮退した多結晶透明導電性半導体薄膜のキャリア輸送に対する粒界の影響

The effect of grain boundary on carrier transport of degenerated transparent and conductive polycrystalline semiconductor thin films

金沢工大 OEDS R&D センター °宮田 俊弘, 南 内嗣

OEDS R&D Center, K I T °T. Miyata and T. Minami

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

【はじめに】我々は多結晶金属薄膜において報告されている粒界散乱の理論を使って、縮退した（電子密度 $n_e=10^{20}\text{-}10^{21}\text{ cm}^{-3}$ ）多結晶 Al 添加 ZnO (AZO)透明導電膜におけるキャリア輸送特性の説明を試みている．今回は、AZO 薄膜を含む縮退した多結晶透明導電性半導体薄膜のキャリア輸送特性に対する粒界の影響を、量子輸送理論から粒界散乱による伝導率低減を取り扱う Munoz らの理論¹⁾を使って詳細に検討する．

【理論計算】多結晶金属薄膜では双晶等による粒界（ポテンシャル障壁）を考えているが、多結晶透明導電性半導体薄膜では基板上に配向した柱状構造（平均粒径 d ）からなる粒界に、空乏層（もしくは蓄積層）等が生じるポテンシャル障壁（強さ $S=Ub(2m_c^*/\hbar^2)$ ； U は高さ、 b は深さ、 m_c^* は伝導帯の有効質量）を考える．粒界の周期の不規則性（乱雑性）の効果を導入するために、 n 番目の粒界の位置 x_n を $x_n=nd+\Delta_n$ （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）と考える．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伝導率の低減は、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 を用いて算出される． P_n の計算では粒内の電子の平均自由行程が ℓ （移動度が μ^{IN} ）の場合、散乱（反射）される有効な粒界の数が $n=\text{Int}(\ell/d)$ ； $n \geq 1$ として計算する．例えば、スパッタ成膜した AZO 薄膜では、 ℓ が 11~14[nm]程度で、 d が 15~30[nm]程度のため $n=1$ となり ($\ell < d$)、周期の不規則性 (Δ_n もしくは s) の影響は現れなかった．しかし、 d が約 5[nm]より小さくなり、 n が 1 以上に大きくなると周期の不規則性の影響が顕著に表れる．図 1 に示すように、AZO 薄膜の d が 2[nm] ($\ell > d$) で、 n_e の変化に対する μ_e を計算した結果 (n_e - μ_e 関係) は、 s に大きく依存し、 $s \leq 1 \times 10^{-11}$ 以下ではほとんど変化がなく、 $s \geq 5 \times 10^{-10}$ 以上では局在化が生じている．また、局在化はポテンシャル障壁の強さ S （ここでは、 b を変化させて計算）に強く依存した．図 2 に、 $d=5[\text{nm}]$ と仮定して s が 1×10^{-12} と $s=10$ のそれぞれの場合について、 b を変化させて計算した n_e - μ_e 関係を示す． n が 2 となり、 μ_e が粒界散乱 (s 及び b) に著しく影響されていることが分かる．

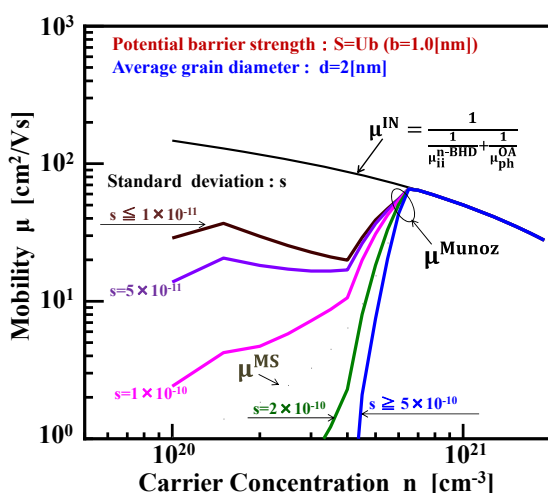


図 1 μ - n 関係

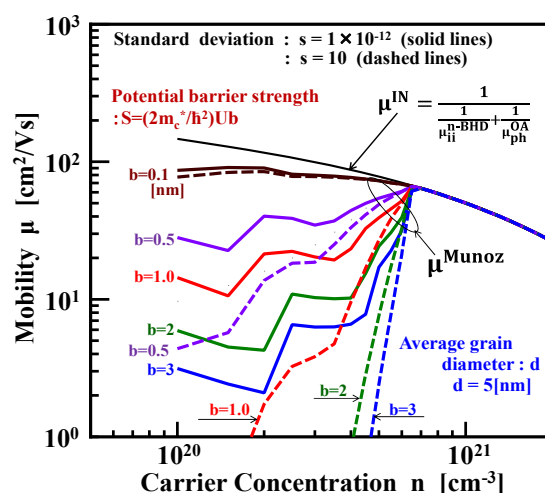


図 2 μ - n 関係

【まとめ】縮退した多結晶透明導電膜のキャリア輸送特性に対する粒界散乱の影響を検討した． $\ell < d$ では周期の不規則性は無視できるが、 $\ell > d$ では μ_e が著しく影響された．

1) C. Munoz et al., Appl. Phys. Reviews 4 (2017) 011102. & Appl. Surf. Sci. 329 (2015) 184.