

放射光が明らかにした IGZO 半導体の構造とデバイス性能の劣化原因： 不純物水素や過剰酸素がつくっていたバンドギャップ内欠陥

東工大元素センター¹、応セラ研² 神谷利夫^{1,2}、細野秀雄^{1,2}
tkamiya@mssl.titech.ac.jp

アモルファス In-Ga-Zn-O (a-IGZO) に代表されるアモルファス酸化物半導体 (AOS) は、透明・フレキシブル・高移動度の薄膜トランジスタ (TFT) を室温で作製できることから、シリコン、有機半導体に次ぐ新しい TFT 半導体用材料として注目され、2012 年からタブレット、スマートフォン、PC モニター、大型有機 EL TV などに実用化されている。この過程で、IGZO TFT が印加電圧や光照射によって動作特性が変化する「劣化」が問題となり、その原因の解明と解決法の開発が重要となった。そのためには AOS の原子配列、電子構造、欠陥構造などの基礎研究が必須であるが、AOS は非晶質であるがゆえに、構造解析・同定法が制限されることが問題となる。最近では第一原理計算などで信頼性の高い構造モデルを構築することも可能であるが、実験による支持データがなければ、その後の研究基盤は非常に脆いものになる。

本講演では、このような状況でどのように放射光を用いた解析が AOS TFT 研究の役に立ったのか、実例をあげながら紹介したい。a-IGZO 中の原子配列を決めるには、古典分子動力学と第一原理計算により構造モデルを組み立て、その妥当性を SPring-8 BL01B1 の薄膜 EXAFS 測定により確認した [1]。非晶質物質では第二近接以降の配位数を極端に過小評価することが問題となったが、これは非晶質構造中のすべての原子からの EXAFS 信号から説明できた [2]。この構造モデルが、酸化物半導体では結晶でも非晶質でも電子の有効質量に大きな差がないことを理論的に証明するとともに、その後の欠陥構造、不純物 (水素) 効果の基盤となった。

欠陥の直接測定については、BL47XU および BL15XU の硬 X 線光電子分光 (HAXPES) が大きな役割を果たしている [4,5]。通常の Si などの半導体では、半導体デバイスの動作を左右する欠陥濃度は 10^{17} cm^{-3} よりもはるかに低く、PES などの分光法で直接欠陥を検出することはできない。しかしながら、幸か不幸か a-IGZO の場合は、HAXPES で十分に検出可能な 10^{20} cm^{-3} 以上の高濃度欠陥が価電子帯直上に検出された [3]。これも、「バンドギャップ中に 10^{17} cm^{-3} 以上の欠陥があるとデバイスが動かない」という、通常の半導体の常識を覆す結果であった。この見かけ上の矛盾は、AOS のバンドギャップが 3.0 eV 程度と非常に大きいために、価電子側の「非常に深い」欠陥が n 型 TFT の動作に影響しないということで説明するとともに、デバイス物理の理解を書き換える結果にもなった。一方で、このように深い欠陥であっても、価電子帯直上欠陥から伝導帯への励起が問題になる、可視光照射、高温、TFT の閾値電圧下特性、不安定性には問題となった。実際に、適切な酸化物層を a-IGZO TFT の上に形成することで光照射不安定性の起こるフォトンエネルギーをバンドギャップ近傍まで引き上げることに成功した。価電子帯直上欠陥の起源については、空孔、弱結合酸素、不純物水素 (-OH) が寄与していることも HAXPES とその他の測定と組み合わせることで明らかになってきた [5]。

[1] K. Nomura, T. Kamiya, H. Ohta, T. Uruga, M. Hirano, H. Hosono, Phys. Rev. B **75**, 0351212 (2007).

[2] T. Kamiya, K. Nomura, H. Hosono, J. Display Technol. **5**, 273 (2009).

[3] K. Nomura et al., Appl. Phys. Lett. **92**, 202117 (2008).

[4] H. Tang et al., J. Appl. Phys. **118**, 205703 (2015).

[5] K. Nomura, T. Kamiya, H. Hosono, Appl. Phys. Lett. **99**, 053505 (2011).