

(5) ポスター発表

Muogen で探る透明酸化物半導体 IGZO 中の不純物水素の電子状態

P1

Local electronic structure of impurity hydrogen in transparent semi-conductor IGZO simulated by muogen

平石 雅俊 hiramasa@post.kek.jp

高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所

InGaZnO₄ (通称 IGZO) はバンドギャップがおよそ 3.2 eV の透明酸化物半導体である。電界効果移動度はおよそ 10 cm²/V・s で、これはアモルファスシリコンのおよそ 10~20 倍にも達する。比較的低温のプロセスで大面積、かつ高品質なアモルファスの膜形成が可能であるため、低コストでの生産が可能であり、現在ではディスプレイやタッチパネルに 응용が進んでいる。しかしながら、薄膜トランジスタ (TFT) での問題として、ゲートにマイナスの電圧をかけて照射を行うと閾値電圧がマイナス側にシフトする現象 (NBIS) が知られており、水素がその特性に関して重要な役割を果たしていることが指摘されている [1]。

そこで我々は、IGZO における水素の電子状態 (荷電状態、格子間位置) を調べる目的で、ミュオンスピン回転実験 (μ SR) を茨城県にある J-PARC MLF 実験施設の S1 ビームラインと、スイス PSI 研究所の LEM にて行った。 μ SR 実験は、ミュオン自身が物質中で擬似水素として振る舞う点で特徴的であり、希薄極限での水素の状態をシミュレートすることが可能である [我々は、元素としてのミュオンの性質を表すために Muogen (Mu) という言葉を提唱している]。物質内部に打ち込まれたミュオンは、格子間位置に静止したのち、超高感度の磁気プローブとして振る舞い、周囲の核スピンや電子スピンとの相互作用によってミュオンスピン偏極に回転や緩和が生じる。この挙動を調べることで、擬似水素としてのミュオンの局所電子状態を調べることができる。

実験の結果、結晶 IGZO [図 1(a)] やアモルファス試料 (as-deposited) では、久保・鳥谷部関数と呼ばれるミュオン近傍の核スピンからの磁場に由来する Gauss 型のスペクトルが観測された [2]。これはミュオンが荷電状態 (Mu^+ または Mu^-) にあることを示唆している。第一原理計算による水素のシミュレーションとの組み合わせから、ミュオンは Zn-O の結合中心位置で Mu^+ の状態で安定化することが明らかになった。この場合、対応する水素は、イオン化 ($\text{H} \rightarrow \text{H}^+ + \text{e}^-$) によって、ドナーとして働く。一方で、水素プラズマ処理を行った薄膜試料 (a-IGZO:H) では、図 1(b) に示すように、低温での信号強度の消失と、指数関数型の緩和が観測された。後者の成分は、外部横磁場下での回転信号から、常磁性スピンを伴っていることが分かる [図 1(c)]。また、前者については小さな縦磁場

で緩和が抑制されることから、水素の核スピンに由来する準静的な磁場分布である。指数関数型での緩和は、水素とミュオン間の距離に分布があることを意味し、a-IGZO:H では一部のミュオンが Mu^- と H^- のペアで酸素空孔を占有していることを示唆している。これは、DFT 計算などによって NBIS への関与が報告されている、酸素空孔中に 2 つの水素 (2H^-) がトラップされた状態が実際に起こり得ることを強く示唆している [3]。

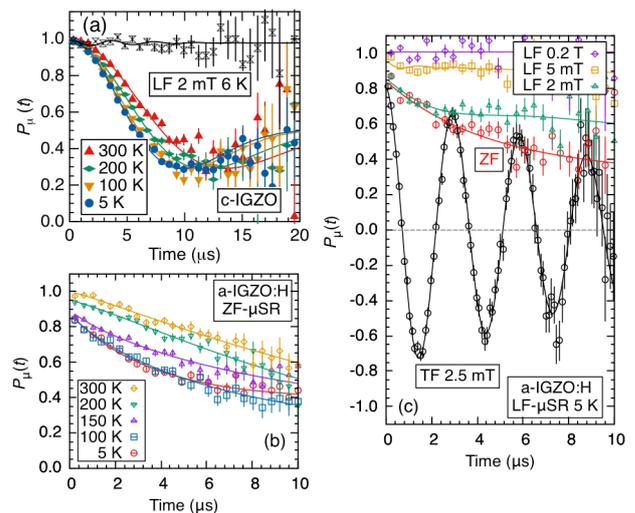


図 1 結晶 IGZO (a) と、水素チャージアモルファス IGZO a-IGZO:H (b) の μ SR 時間スペクトルの温度依存性。(c) 5 K における a-IGZO:H の様々な外部磁場条件 [横磁場(TF)、縦磁場(LF)] での μ SR 時間スペクトル。

[共著者(所属)]

小嶋健児^{1,2}, 岡部博孝¹, 幸田章宏^{1,2}, 門野良典^{1,2}, 井手啓介³, 松石聡⁴, 雲見日出也⁴, 神谷利夫^{3,4}, 細野秀雄^{3,4}
¹KEK 物構研, ²総合研究大学院大学, ³東工大フロンティア研, ⁴東工大元素センター (MCES)

[関連プロジェクト]

元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>電子材料拠点

[参考文献]

- [1] J. Bang, *et al.*, Appl. Phys. Lett. **110** (2017) 232105
- [2] K. M. Kojima, *et al.*, Appl. Phys. Lett. **115** (2019) 122104
- [3] H. Li, *et al.*, Phys. Rev. Mat. **2** (2018) 074601