

# 擬似水素ミュオンと第一原理計算で調べた IGZO 中の水素の電子状態

<sup>1</sup>高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所 (KEK-IMSS), <sup>2</sup>TRIUMF, <sup>3</sup>総研大,

<sup>4</sup>東工大フロンティア研, <sup>5</sup>東工大元素センター (MCES)

平石 雅俊<sup>1</sup>, 小嶋 健児<sup>2</sup>, 岡部 博孝<sup>1</sup>, 幸田 章宏<sup>1,3</sup>, 門野 良典<sup>1,3</sup>, 井手 啓介<sup>4</sup>, 松石 聡<sup>5</sup>,

雲見 日出也<sup>5</sup>, 神谷 利夫<sup>4,5</sup>, 細野 秀雄<sup>5</sup>

InGaZnO<sub>4</sub> (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。大きな電界効果移動度 (10 cm<sup>2</sup>/V・s) を示すこと、低コストで高品質なアモルファスの膜形成が可能であることなどから、既に様々な製品のディスプレイ駆動用半導体として実用化されている。しかしながら、薄膜トランジスタ (TFT) での応用上の問題として、ゲートにマイナスの電圧をかけて光照射を行い続ける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与していることが指摘されている<sup>1</sup>。

そこで我々はミュオンスピン回転 ( $\mu$ SR) 実験を行い、InGaZnO<sub>4</sub> 中における水素の電子状態 (荷電状態、格子間位置) を調べた。 $\mu$ SR 実験では、ミュオン (Mu) 自身が物質中で擬似水素として振る舞うので、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。

実験の結果、結晶 IGZO [図 1(a)] やアモルファス試料では、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<sup>2</sup>。これはミュオンが荷電状態 (Mu<sup>+</sup>または Mu<sup>-</sup>) にあることを示唆している。

第一原理計算による希薄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<sup>+</sup>の状態安定化することが明らかになった。対応する水素は、イオン化 (H → H<sup>+</sup>+e<sup>-</sup>) によって、ドナーとして働く。一方、水素プラズマ処理を行なった薄膜試料 (a-IGZO:H) では、図 1(b)に示すように、低温における信号強度の低下と、指数関数型での緩和が観測された。後者は、水素とミュオン間の距離に分布が存在することを示唆し、一部のミュオンが Mu<sup>-</sup>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<sup>3</sup>によって NBIS への関与が指摘されている、酸素空孔中に 2 つの水素 (2H<sup>+</sup>) 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。

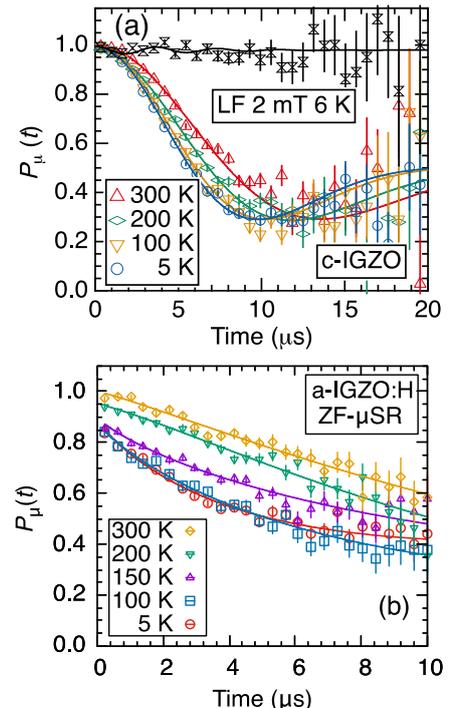


図 1: 結晶 IGZO (a) と、水素チャージアモルファス IGZO (b) の  $\mu$ SR 時間スペクトルの温度依存性。

## 参考文献

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