

令和 5 年 5 月 31 日現在

機関番号：14401

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2021～2022

課題番号：21K18873

研究課題名（和文）半導体転位におけるキャリア集積機能の実験的評価

研究課題名（英文）An attempt to experimentally evaluate the interaction between dislocations and carriers in semiconductors

研究代表者

中村 篤智（Nakamura, Atsutomo）

大阪大学・大学院基礎工学研究科・教授

研究者番号：20419675

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 4,900,000円

研究成果の概要（和文）：半導体材料では、結晶格子欠陥の存在が自由電子やホールなどのキャリアの挙動に強く影響を与える。本研究では、格子欠陥の1つ、転位の影響に着目し、構造電荷を有する転位がキャリア挙動に及ぼす影響をナノスケールで計測する手法を検討した。実際に、構造電荷を有する極性界面上に転位を作りこみ、その特性を評価したところ、構造電荷が存在する場合に、転位に沿って電気伝導が発現することを確認できた。また、転位を導入した結晶ではマクロに電気伝導性に変化が生じることも確認できた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

半導体において転位は避けるべき欠陥として考えられている。しかしながら、我々の研究グループでは、転位のような欠陥がもたらす物性を、逆転の発想で応用する方法を検討している。転位の特異なナノ構造を利用すれば、希少な元素を添加することなく、材料機能を発現させることも可能である。このように、従来悪いものと思われていたものを利用するという発想の転換を図り、希少元素を利用しない材料開発を実現するための基礎的研究を行っている。本研究では、半導体の転位の機能を実際に評価する手法を考え、実施した。10年20年先に先駆的と見られることを目指した研究と考えている。

研究成果の概要（英文）：In semiconductor materials, the presence of crystal lattice defects strongly affects the behavior of carriers such as free electrons and holes. In this study, we focused on the effect of dislocations, one of the lattice defects, and investigated a method to measure the effect of dislocations with structural charges on carrier behavior on the nanoscale. As a result, it was confirmed that a change in macroscopic electrical conductivity occurred in the dislocation-introduced crystals and that structural charge at dislocations affected electric conductivity near the dislocations.

研究分野：欠陥科学

キーワード：転位 半導体 双結晶 単結晶 電気伝導

## 1. 研究開始当初の背景

転位とは、結晶中の原子配列の連続性が局所的に乱れた線状の格子欠陥のことである。半導体材料において転位は電子構造上の特異点となっており、その構造電荷の存在により材料特性を変質させることがある。なお、構造電荷は異なる複数の元素からなる化合物半導体の結晶格子欠陥に生じるものであり、転位の場合はエクストラハーフプレーンの元素の種類により正か負のどちらかの構造電荷をもつことになる。その結果として、半導体材料においては、結晶格子欠陥の一種である転位が、自由電子やホール挙動に強く影響を与えることになる。これは、部分的には、転位の構造電荷と自由電子やホールなどのキャリアが静電相互作用を起こすためである。ここで、例えば、一定の光環境下では、半導体は内部光電効果により、材料内部に電子やホールを励起させる。このように発生した電子やホールは、当然ながら構造電荷を有する転位と相互作用することになる。しかしながら、転位と電子やホールなどのキャリアの相互作用については不明な点が多いのが現状である。原因の一部には、転位が材料内部で四方八方に存在しているため、結果的に転位とキャリアの相互作用の評価が困難であったことが挙げられる。

## 2. 研究の目的

塑性変形による手法および双結晶法を利用して結晶内部に制御された転位組織を導入する。その上で、外部電界場における転位電気伝導特性の計測を行うことでキャリアの影響をナノスケールで計測し、集積機能について検討する。

## 3. 研究の方法

本研究では、2つの方法で結晶内部に転位を導入している。1つは塑性変形による方法であり、バルク結晶を圧縮により塑性変形させ、それにより内部に転位を導入する。もう1つの方法は双結晶法であり、2枚の単結晶基板を直接接合することで転位を接合面に形成させる。その後、電気物性評価装置および走査型プローブ顕微鏡を用いて、電気伝導特性を評価する。なお、構造電荷を有する転位のモデルとして、バンドギャップの高い極性結晶を用いて双結晶を作製することにも挑戦した。これにより、転位近傍に正もしくは負の構造電荷を導入することを試みた。

## 4. 研究成果

### (塑性変形による成果)

(100)面方位を有するバルク STO 単結晶を一軸圧縮により塑性変形させることで結晶内部に転位を導入した(図1)。その後、転位が電荷挙動に及ぼす影響を評価した。その結果、転位コア近傍では光伝導特性が大きく変化することがわかった。これはキャリアが転位に集積していることを示唆している。また、結晶内部に多数の転位を導入すると、結晶学的方位関係に応じてマクロな光伝導特性にも劇的な変化が生じることが示された。ひずみによる光起電力変化も観測され、酸化物半導体の転位がキャリア集積に大きな意味を持つことが確認された。

### (転位導入極性双結晶の作製成功)

極性結晶材料の LN 結晶を用いて、極性反転と転位導入により、構造電荷を有する界面上に転位を導入することに挑戦した。その結果、所定通りの試料が合成することに成功した。ここでは、2枚の単結晶基板を高温で拡散接合することによって、小傾角粒界と極性界面の両方の特性を併せ持つ双結晶を作製している。例として、図2に作製された双結晶の結晶

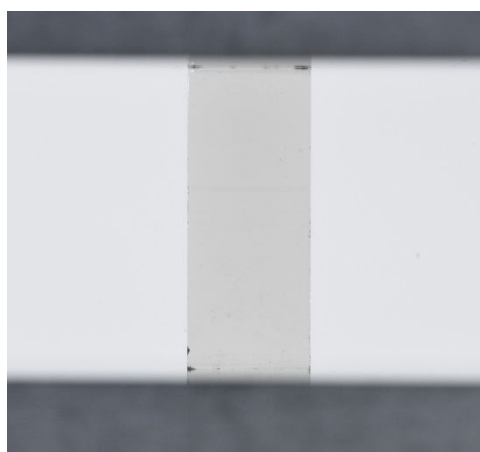


図1 変形初期の STO 結晶 .

方位関係を、図3に作製された極性界面と転位列の模式図を示す。

(電子顕微鏡観察)

転位導入後もしくは双結晶法で試料作製後には、形成される転位組織を観察し、転位がどのように形成されていくか確認することが必要となる。そこで、作製した結晶から電子顕微鏡観察用試料を作製した。作製方法は、切断・機械研磨・イオンミリングという一般的に用いられる方法と用いている。なお、電子顕微鏡観察は名古屋大学の超高压電子顕微鏡を用いて行った。

(走査型プローブ顕微鏡観察と物性測定)

転位の物性を理解するために、部分的に走査型プローブ顕微鏡(原子間力顕微鏡)を用いて評価した。対象材料は、転位を導入された半導体結晶および極性結晶である。なお、この評価の前には、試料表面を機械的研磨および機械化学研磨により鏡面としてある。対象としたのは、特に、転位が緻密に制御された双結晶転位列である。その結果、電気伝導特性について、興味深い知見を得た。極性を制御され、界面に構造電荷を有する界面上の転位において、顕著な電気伝導性が発現することが確認された(図4)。この材料は非常にバンドギャップが大きく、単なる極性のみや転位のみでは電気伝導を示さない強固な絶縁体的性質を示す。しかしながら、極性と転位の両方を存在させることで、検出可能なレベルまでの電気伝導を発現させることを確認した。これについては、現在も検討中であるが、以下のように考えている。すなわち、極性によりキャリアが集積される効果と転位により局所的に特異な電子構造を形成する効果が両立し、結果的に転位に沿ってキャリアが十分存在できるようになったためであると考えられた。

(まとめ)

本研究では、バンドギャップを有するいくつかの酸化物結晶および化合物半導体結晶を用いて、結晶内に制御された転位とキャリアの導入を行い、そこで生じた構造を電子顕微鏡により観察するとともに、走査型プローブ顕微鏡や電気伝導特性評価装置を用いて、特性を評価した。その結果、転位を導入した試料では、転位によってバルクの電気伝導特性すら変化することを確認するとともに、構造電荷制御を施された転位列を導入することで、高いバンドギャップを有する材料ですら、熱処理も添加元素もなしで電気伝導特性を発現させることを確認した。さらなる検証が必要となるが、キャリアの分布を構造的に制御することで、欠陥に基づいて材料の機能を大きく変化できることを示唆している。

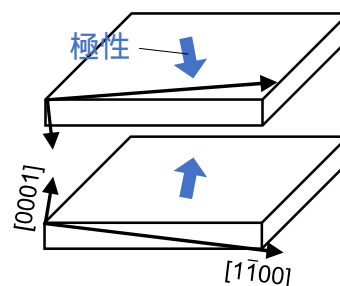


図2 双結晶方位模式図の例。

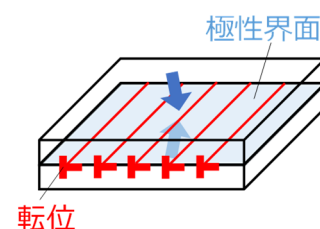


図3 極性界面と転位列の模式図。

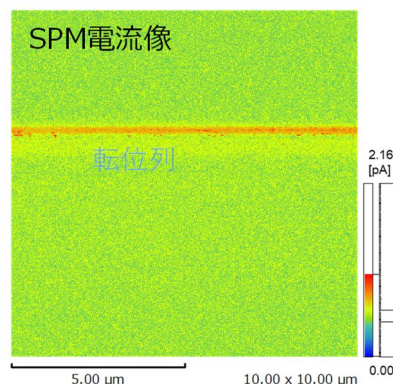


図4 転位列に沿った電気伝導計測結果の一例。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計0件

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------