



## 応用物理学会春季学術講演会 注目講演プレスリリース

2023年 3月 13日

TiO<sub>2</sub> (110) 基板上ルチル型SnO<sub>2</sub>の選択成長

Selective-area-growth of rutile-type SnO<sub>2</sub> on TiO<sub>2</sub> (110) substrate

### 結晶の選択成長で、次世代パワーデバイス開発に有望なルチル型酸化物半導体の高品質化を実現する

京都大学<sup>1</sup>, 物材機構<sup>2</sup>, 立命館大学<sup>3</sup>,  
高根倫史<sup>1</sup>, 大島孝仁<sup>2</sup>, 田中勝久<sup>1</sup>, 金子健太郎<sup>3</sup>

#### 【発表概要】

- ・ 次世代のパワー半導体候補であるルチル型酸化物半導体の1つ、ルチル型酸化スズ (r-SnO<sub>2</sub>) の結晶成長機構を電子顕微鏡観察によって詳細に解明。
- ・ 結晶欠陥である転位の挙動が明らかになり、低転位密度で高品質なルチル型酸化物薄膜を作製する指針が得られた。

京都大学の高根倫史氏らの研究グループは、より高品質なルチル型酸化物半導体を実現するため、選択成長における結晶成長機構を明らかにした。ルチル型酸化チタン (r-TiO<sub>2</sub>) 基板上で、ルチル型酸化スズ (r-SnO<sub>2</sub>) を成長させる実験において、成長ダイナミクスの解明と、欠陥の少ない領域（低転位領域）の形成に成功した。今後は同研究を他のルチル型酸化物半導体へと応用していくことで、次世代パワーデバイス開発に要求される高品質な薄膜作製を目指す。

## 【詳細】

### 欠陥の少ないルチル型酸化物半導体を実現する

身近にあるパソコンなどのスマートデバイスから、電気自動車の電源回路にまで使われているパワー半導体。現在、その次世代材料の開発が進められている。中でも、革新的パワーデバイスの開発に直接結びつく、非常に広いバンドギャップ（※1）を持つ「ウルトラワイドバンドギャップ（UWBG）半導体」材料の研究開発が加速している。UWBG半導体の候補材料には、酸化ガリウム（ $\text{Ga}_2\text{O}_3$ 、バンドギャップ4.4 - 5.6eV）、ダイヤモンド（5.5eV）、窒化アルミニウム（ $\text{AlN}$ 、約6.0eV）、立方晶窒化ホウ素（c-BN、6.3eV）などがある。

京都大学の高根倫史氏らの研究グループは、ルチル型酸化物半導体、特にルチル型酸化ゲルマニウム（ $\text{r-GeO}_2$ ）に着目し、研究を進めてきた。 $\text{r-GeO}_2$ は、直接遷移型バンドギャップが4.7eVのUWBG半導体材料であり、p型・n型のドーピングが可能であることが先行研究で理論予測されている点が特色だ。同研究グループはこれまで、入手が比較的容易なルチル型酸化チタン（ $\text{r-TiO}_2$ ）単結晶基板上でのエピタキシャル成長に成功し、他のルチル型酸化物との混晶系を提唱してきた。すでに $\text{r-GeO}_2$ の次に大きな3.6 eVのバンドギャップを持つルチル型酸化スズ（ $\text{r-SnO}_2$ ）との混晶化に全組成範囲で成功している。

大きなバンドギャップを持ち、高機能なルチル型酸化物半導体だが、その結晶成長には課題があった。 $\text{r-GeO}_2$ を $\text{r-TiO}_2$ やサファイア基板上においてエピタキシャル成長させた場合、結晶の欠陥である「転位」が生じることが確認されている。とくに薄膜表面にまで達する転位である「貫通転位」はデバイス性能を低下させる可能性が高い。

「とくにパワーデバイスとして使う場合、これら転位によって、電子や正孔の移動度の低下、リーク電流の増加、耐電圧の低下など、デバイス性能が劣化することが知られています。本研究はこうした転位を低減し、高性能な次世代パワーデバイスの開発に結びつく知見を提案することを目的としています」（高根）

同研究では、 $\text{SiO}_2$ マスクが形成された $\text{r-TiO}_2$ 基板上で、 $\text{r-SnO}_2$ を成長させ、電子顕微鏡を用いて詳細に観察することで、結晶成長機構を明らかにするとともに低転位領域実現の条件を見出した。今後は同研究を $\text{r-GeO}_2$ など他のルチル型酸化物半導体へと応用していくことで、次世代パワーデバイスの開発に必要な、結晶の高品質化を目指すという。

### ルチル型酸化スズ（ $\text{r-SnO}_2$ ）の成長メカニズムを解明

同研究では、 $\text{r-SnO}_2$ の結晶成長機構を明らかにするために、微細加工された円形状とストライプ形状のマスクが形成された基板に対して結晶成長を行い、マスク開口部から選択的に成長した結晶を走査電子顕微鏡（SEM）で観察した。成長手法は「ミストCVD法」を用いた。同研究チーム

がこれまでGa<sub>2</sub>O<sub>3</sub>や酸化亜鉛などの酸化物の薄膜の成長に使ってきた手法である。より一般的な結晶成長法である「MOCVD（有機金属気相成長法）」などに比べて、簡便かつ安価な手法であることから採用したという。

まず、円形状のマスクパターン上で成長させた結晶は、六角形ファセット（平らな面によって覆われた表面）構造を形成して成長することが確認された（図1）。そしてこの結晶は、「ルチル結晶の平衡形（※2）」を再現することが明らかになったという。「r-SnO<sub>2</sub>の結晶が、理論計算で導かれた表面エネルギー密度に基づく平衡形を反映したファセット構造を有して成長するということが実験でわかりました。将来的な結晶成長の制御において重要な知見です」（高根）

また、ストライプ形状のマスクパターンでは、成長の初期段階では、複数の小さな“島状結晶”が形成され、三次元的に成長した（Volmer-Weberモード）。次にそれらは会合によってストライプ状の結晶となった。そして、最後にマスク上に結晶が広がっていく横方向成長へと移行していくことがわかった（図2）。

「これらの観察から、r-SnO<sub>2</sub>結晶の成長過程を初期段階から理解することができました。そしてストライプ形状のマスクパターン上での成長においてもストライプ側壁のファセット形状が理論計算で導かれた表面エネルギー密度の序列を反映していることがわかりました」（高根）

## 低転位領域を制御する技術の研究に向けて

さらに同研究グループは、成長したr-SnO<sub>2</sub>の結晶断面を透過電子顕微鏡（TEM）で観察した。すると、マスクパターンの窓部から見て横方向の成長領域における転位は、傾斜ファセット面に対して垂直に形成されていることが明らかになった（鏡像力効果）（図3）。また、低転位領域（マスク上の横方向成長結晶の下部に存在）の形成も確認でき（転位密度 $\leq 5 \times 10^8 \text{ cm}^{-2}$ ）、選択成長の有用性が確かめられた。

「今回の低転位領域はまだまだ小さいものですが、今回の結果から、ファセット面が理論計算で導かれた表面エネルギー密度を反映した平衡形に従うことがわかりました。このことから基板面方位やマスク方位を選択することで、ファセットの形状を制御し、転位の挙動を制御できると考えられます。今後は低転位領域をより大きくするようなファセット形成を研究していくことで、将来的なパワーデバイスの量産技術に貢献できるのではないかと考えています」（高根）

低転位領域を制御できる方法は、ルチル型酸化物半導体によってパワーデバイスを量産する際に重要な知見となる。今後は、基板面方位選択、マスクパターンの形状、微細加工の精度向上などによって、さらに低転位領域が大きな結晶成長の方法を研究開発していくという。

【注釈】

※1 **バンドギャップ** 結晶のバンド構造における、禁制帯のエネルギー幅のこと。この幅の大きさによって金属や絶縁体、半導体になる。

※2 **平衡形** 結晶における界面の自由エネルギーが最小になる形。

【図】

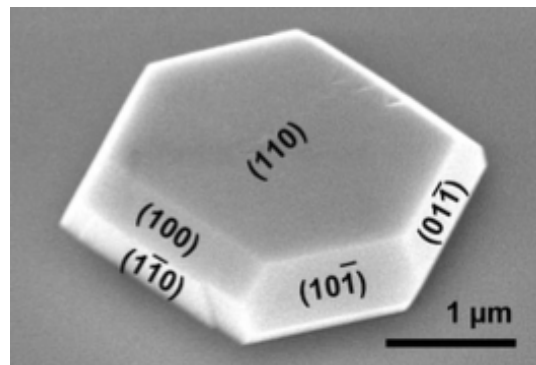


図1 円形状のマスクパターン開口窓上に選択成長をしたr-SnO<sub>2</sub>単結晶のSEM画像。

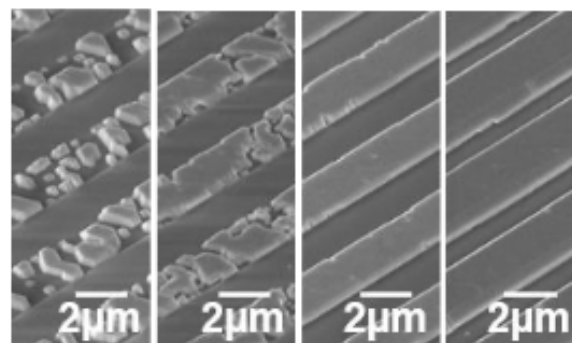


図2 ストライプ形状のマスクパターンの窓上のr-SnO<sub>2</sub>の成長過程を示すSEM画像（左から右）。

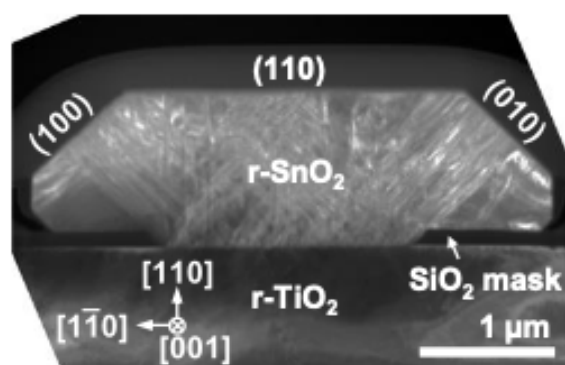


図3 ストライプ形状のマスクパターンの窓上に選択成長したr-SnO<sub>2</sub>の断面TEM像。