

Summary of Doctoral Thesis

Title of Doctoral Thesis: Fermi level engineering of solution-processed amorphous ultra-wide bandgap semiconductor towards transparent thin-film (透明薄膜トランジスタに向けた溶液プロセスアモルファスウルトラワイドバンドギャップ半導体のフェルミ準位エンジニアリング).

Name: Diki Purnawati

Summary of Doctoral Thesis:

The realization of future generation electronics requires large-scale production using transparent, cost-effective, and harsh-environment-resistant materials. Inevitably, the huge research interest has shifted from wide bandgap materials ($E_g > 3.0$ eV) to ultra-wide bandgap materials ($E_g > 4.0$ eV), such as solution-processed amorphous Gallium Oxide (a-Ga₂O_x) which has valuable features. Nevertheless, obtaining electrical conduction on as-deposited a-Ga₂O_x is quite challenging because the combination of ultra-wide bandgap and an amorphous structure has serious difficulties in attaining electronic conduction. Thus, developing semiconducting solution-processed a-Ga₂O_x will be a superb research achievement. In this dissertation, Fermi level engineering of oxide semiconductor film is proposed by modifying the a-Ga₂O_x film properties through experimental and machine learning approaches.

Chapter 2 presents the first demonstration of semiconducting solution-processed a-Ga₂O_x material. By utilizing Fermi level engineering as an attractive approach, insulating a-Ga₂O_x has been successfully converted into its semiconducting state. Fermi level engineering is a technique for material design which rely on the Fermi level shifting phenomena by varying experimental conditions. Fermi level estimation via UV-Visible spectra and XPS reveal the Fermi level shifting phenomena is mainly affected by the hydrogen doping from the H₂ annealing.

Chapter 3 presents the first demonstration of semiconducting as-deposited solution-processed a-Ga₂O_x material. By monitoring and controlling relative humidity during thin film deposition, decent performance of as-deposited a-Ga₂O_x TFTs were

achieved. The result showed that hydrogen doping which drive the electron doping might have originated from either hydrogen annealing or water vapor (humidity). Those hydrogen doping are vital factors to achieve the semiconducting behavior of as-deposited a-Ga₂O_x TFTs

In Chapter 4, excellent Fermi level prediction of 87% accuracy by Machine Learning method has successfully achieved. By using regression models, experimental data was used as an input to further train the algorithm. The results show that machine learning models can be used to predict the Fermi level of ultra-wide bandgap a-Ga₂O_x film. Likewise, it can identify optimized fabrication parameters to achieve the minimum Fermi level value. This method will be beneficial for rapid and cost-effective optimization of ultra-wide bandgap material design for future electronic applications.

This dissertation demonstrates a comprehensive study of amorphous ultra-wide bandgap material modification via Fermi level engineering from both experimental and machine learning approaches. These approaches will be valuable for rapid and cost-effective optimization of ultra-wide bandgap material design for future electronic applications.

名前	Diki Purnawati
----	----------------

論文審査結果の概要:

次世代のエレクトロニクス材料を探求するには、透明で費用対効果が高く、過酷な環境に強い材料を使用した大規模な生産が必要である。近年、ワイドバンドギャップ材料 ($E_g > 3.0 \text{ eV}$) から超ワイドバンドギャップ材料 ($E_g > 4.0 \text{ eV}$) へと関心は移行してきている。しかし、堆積したままの $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 上で電気伝導を達成することは非常に困難であった。これは、超ワイドバンドギャップとアモルファス構造の組み合わせが電子伝導を促進する上で問題があったためである。そこで、本研究では大規模生産を見据えたコストの低い溶液処理に着目し、溶液処理された半導体 $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ の開発を目指した。この研究では、酸化物半導体膜のフェルミ準位エンジニアリングが、実験的および機械学習アプローチを通じて $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 膜の特性を最適化することを提案している。

本研究では、始めに、溶液処理された $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 材料の薄膜形成を行った。フェルミレベルエンジニアリングを利用することにより、絶縁体の $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ を半導体状態に変換することに成功した。フェルミ準位エンジニアリングは、フェルミ準位シフト現象に依存する実験条件を変化させる材料設計の手法である。紫外可視スペクトルと XPS によるフェルミ準位推定から、フェルミ準位シフト現象が主に H_2 アニールによる水素ドーピングの影響を受けることを示した。また、薄膜堆積中の相対湿度を監視および制御することにより、堆積したままの $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ TFT の適切な性能が達成された。加えて、電子ドーピングを促進する水素ドーピングは、水素アニールまたは水蒸気 (湿気) のいずれかに起因する可能性があることを示した。この実験を通して、水素ドーピングは、堆積したままの $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ TFT の半導体挙動を達成するための重要な要素であることが判明した。

機械学習法によるフェルミ準位推定では、87% の精度という優れたフェルミ準位予測モデルの構築に成功した。モデル構築のためのトレーニングデータとして実験データを使用した。本研究の解析結果から、機械学習モデルを使用することにより、超ワイドバンドギャップ $\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 膜のフェルミ準位を予測できることが示された。さらに、機械学習モデルを利用することで、最小フェルミ準位値を達成するための最適化された製造パラメーターを提案することに成功した。本論文で提案された方法は、将来の電子工学応用に向けて超ワイドバンドギャップ材料設計の迅速かつ費用対効果の高い最適化に役立つと考える。

以上のことから、本論文は実験的アプローチと機械学習アプローチの両方からのフェルミ準位エンジニアリングによる非晶質の超ワイドバンドギャップ材料の包括的な研究を示している。審査員一同は博士(工学)の学位論文として価値あるものと認めた。