

## Tight-Binding 量子分子動力学法を用いた アモルファス IGZO の構造計算

### Calculation of Amorphous IGZO Structure using Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics

○森田 晋也<sup>1</sup>、伊藤 寿<sup>2</sup>、樋口 祐次<sup>2</sup>、尾澤 伸樹<sup>2</sup>、久保 百司<sup>2</sup>

(1. (株) 神戸製鋼所、2. 東北大学)

○Shinya Morita<sup>1</sup>, Hiroshi Ito<sup>2</sup>, Yuji Higuchi<sup>2</sup>, Nobuki Ozawa<sup>2</sup>, Momoji Kubo<sup>2</sup>

(1.Kobe Steel,LTD., 2.Tohoku Univ.)

E-mail: morita.shinya@kobelco.com

アモルファス酸化物半導体 IGZO (In-Ga-Zn-O)は高い電界効果移動度を有し、大面積のスパッタリング製膜が容易であることからフラットパネルディスプレイ用薄膜トランジスタ(TFT)の半導体材料として使用されつつある[1]。一方で TFT の信頼性向上においては IGZO 薄膜の高密度化、欠陥低減が重要であり、これまでアモルファス構造解析において X 線測定のほか、分子動力学シミュレーションによるアモルファス構造解析が行われてきた[2]。しかし、古典分子動力学法によるアモルファス構造の計算は、電子状態の計算が行われなため計算精度に問題がある。

そこで我々はより計算精度の高い方法でアモルファス IGZO の構造計算を行うために、分子軌道法に基づく Tight-Binding 量子分子動力学法を採用した。同手法では、実験値と第一原理計算の結果を再現するようにパラメータを決定することで、計算精度と計算速度を両立可能である。まず In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, ZnO の結晶構造をモデルに結晶構造が安定化するようにパラメータを調整したのち、IGZO 結晶構造、第一原理計算の結果を参照してパラメータを最終調整した。図 1 は同 Melt and Quench 法で作製したアモルファス IGZO の構造を示しており、同構造をもとに In,Ga,Zn,O 各原子における配位数分布を算出した (図 2)。陽イオンの配位数は In,Ga,Zn の順に多くなっており、XAFS 測定による解析結果と配位数の順列が一致することを確認した。Tight-Binding 量子分子動力学法を用いたアモルファス IGZO の構造について、実験結果との比較を報告する。

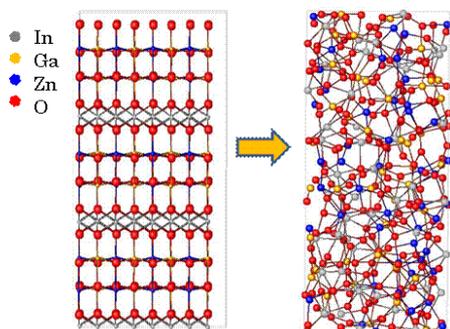


図 1. Melt and Quench による a-IGZO の構造

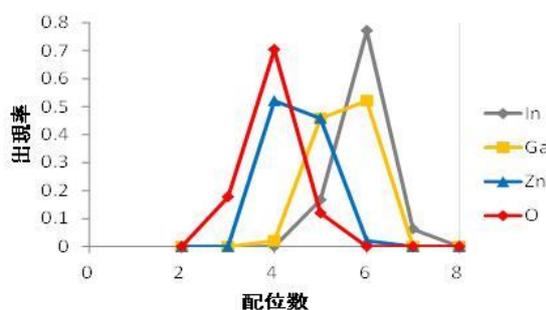


図 2. 作製した a-IGZO モデルの配位数分布

[1]. K. Nomura, H. Ohta, A. Takagi, T. Kamiya, M. Hirano, and H. Hosono; Nature 432 (2004) 488.

[2]. T. Kamiya, K. Nomura and H. Hosono; Phys. Status Solidi A 207, (2010) 1698.