

アモルファス Ge 薄膜の結晶化における安定相と準安定相の競合

Competition of stable and metastable phases in the crystallization of sputter-deposited amorphous Ge films

阪府大工, 仲村 龍介

Osaka Prefecture University, Ryusuke Nakamura

E-mail: nakamura@mtr.osakafu-u.ac.jp

多結晶ゲルマニウム薄膜デバイスの作製においては、低温度での結晶化と高性能化の両立を目指して研究が進められている。性能を左右する結晶薄膜のマイクロ組織および結晶構造は、初期のアモルファス薄膜の構造と構造変化の経路に応じて多様な状態になりうる。したがって、アモルファスの構造および構造変化と、結晶化の挙動を丹念に追跡することが重要である。これまでの研究で、スパッタリングで作製した a-Ge を結晶化させると、安定なダイヤモンド立方構造の結晶相と準安定な六方晶構造の結晶相の出現が競合することを見出した[1,2]。両者の出現は、アモルファマトリックス中の中距離構造レベルの“非平衡性”と関連することを報告している。透過型電子顕微鏡を用いた実験研究と分子動力学シミュレーションを交えたこれまでの研究結果を紹介し、今後の展望も併せて発表する。

Fig. 1 (a', b')に室温で時効した試料に高フラックスの電子線を照射して結晶化させたときの TEM 像を示す。時効時間が 3 日の結晶化組織(a')には、100~200 nm 程度の粒径・形状ともに不均一な粗大粒子（コントラストの暗い部分）が現れる。一方、時効時間 7 ヶ月の試料では、粒径 10 nm の均一なナノ結晶組織が出現する (b')。後者の結晶構造はダイヤモンド立方構造であるのに対し、前者の粗大粒子は六方晶構造である。作製直後の非平衡度の高いアモルファスからは六方晶構造の粒子の出現が支配的となる。アモルファス構造の緩和とともに六方晶構造の粒子の出現は抑制され、安定なダイヤモンド立方構造が優勢となる。アモルファス構造の二体分布解析や分子動力学シミュレーションを行った結果、作製直後のアモルファス構造には中距離範囲の規則性（Medium-range ordered）クラスターが存在する(a)のに対し、室温で 7 ヶ月時効した試料には液体的な原子相関をもつ領域が存在する(b)ことが示唆された。その場加熱実験の結果なども紹介しながら、アモルファスの構造遷移のメカニズムと結晶構造との対応を詳細に議論する。

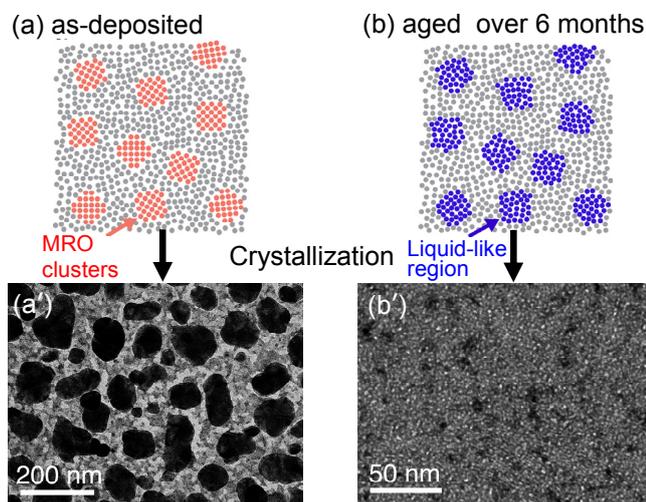


Fig. 1 An example of crystallization microstructure of sputter-deposited a-Ge (a', b'). (a) and (b) show a schematic illustration of structure of a-Ge before and after aging at room temperature, respectively.

[1] M. Okugawa, R. Nakamura, et al., J. Appl. Phys., **119**, 214309 (2016).

[2] M. Okugawa, R. Nakamura, et al., AIP Advances, **6**, 125035 (2016).