

分子動力学法によるアモルファス Ge の液相媒介結晶化過程の解析

Liquid-mediated crystallization in amorphous Ge studied by molecular-dynamics simulations

九州工大, [○](M1)長岡 駿弥, 石丸 学

Kyushu Inst. Technol., [○]Shunya Nagaoka, Manabu Ishimaru

E-mail: Nagaoka.shunya177@mail.kyutech.jp

Ge は Si よりも高いキャリア移動度を有するため高性能薄膜トランジスタ (TFT)としての応用が期待されている。TFT はアモルファス半導体へのレーザーやフラッシュランプ熱処理によって製造される。この際に、「爆発的結晶化」と呼ばれる数 m/s の速さで進行する結晶化が生じることが報告されている。爆発的結晶化は結晶/アモルファス界面に形成した薄い過冷却液体層を媒介として生じる可能性が提案されているが、実験的に極短時間での原子スケールの構造情報の取得は困難である。本研究では、極短時間の原子の動きを追跡できる分子動力学シミュレーションにより、アモルファス Ge (a-Ge)の結晶化過程を調査した。

シミュレーションには125,000個のGe原子を使用し、原子間相互作用の算出にはTersoffポテンシャルを用いた。シミュレーションはNPTアンサンブルの条件で行った。液体急冷により作製したa-Geの構造は実験結果を良く再現していた。このa-Geに1600~1900 Kで熱処理を施したところ、1800 Kでは熱処理開始直後に急速に結晶化が進行し、爆発的結晶化の可能性が示唆された。これに対し、1900 Kでは結晶化が見られなかった。1800 Kにおける原子配列を、Fig. 1 (a)に示す。青い原子はダイヤモンド型構造の領域、白い原子は結晶化していない領域である。原子配列のスナップショットではアモルファスと液体の区別がつかないため、原子の軌跡を調べた。Fig. 1 (b)は1.0 nsに渡る原子の軌跡である。原子の動きが大きい領域を赤、小さい領域を黄色で囲んでいる。液相の原子はアモルファス相よりも活発に動くため、原子の軌跡は空間を埋めつくすことになる。Fig. 1 (a)と1 (b)において赤線で囲んだ領域を見ると、およそ結晶化界面と一致していることが分かった。一方で、黄色線の領域は結晶化界面から離れた場所に存在する。したがって、1800 Kでは結晶化界面に液体層が形成され、それを介して結晶化が進行していることが推測された。また、各温度における結晶化速度を結晶化過程から測定したところ、1800 Kにおける結晶化速度は0.16 m/sとなり、一般的に爆発的結晶化と呼ばれる速さには達していなかった。その原因として、本実験における条件では結晶相とアモルファス相の間の温度勾配が再現されていなかったことが考えられる。今後の展望として、より正確に爆発的結晶化を再現する条件を探すことが求められる。

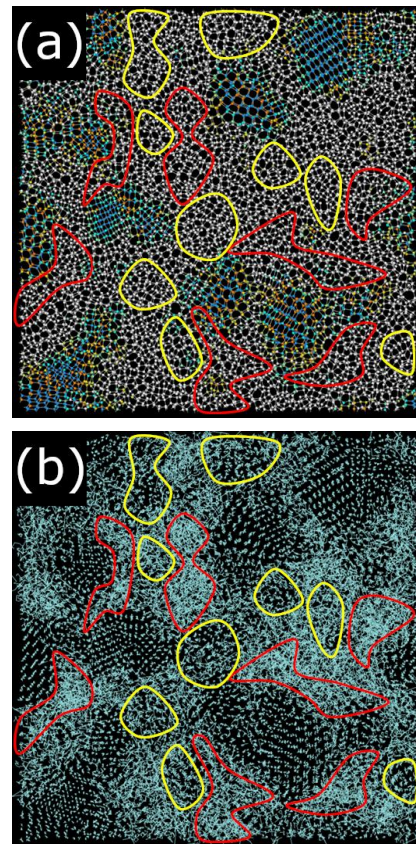


Fig. 1. (a) Atomic arrangements of MD cell annealed at 1800 K for 14.0 ns. (b) Trajectory for 1.0 ns.