

# アモルファスSiにおける結晶成長 面方位依存性の原子スケール解析

アモルファスSi結晶化の分子動力学計算によって、加熱 *in-situ* TEM観察において確認されている、結晶面方位による成長速度の違いを原子スケールで解析した。本手法を用いる事で、結晶成長を利用したデバイス作製において重要となる、結晶粒径の拡大化等に役立つ情報を提供できる。

## 1. 実験: Si膜の結晶成長速度算出および結晶面方位解析【加熱 *in-situ* TEM & ACOM-TEM】

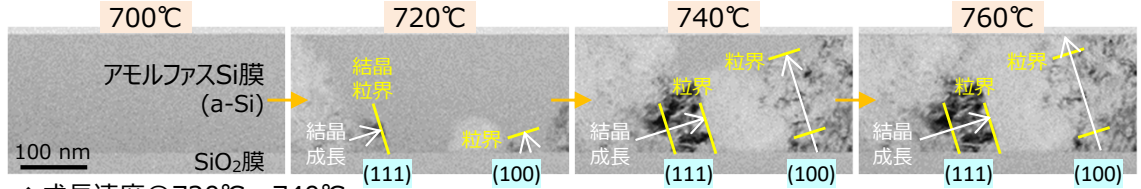
**サンプル**  
a-Si(180 nm)/SiO<sub>2</sub>/Si-sub.

**加熱条件**  
温度: 600°C→800°C  
昇温速度: 10°C/min

**評価手法**

- ①加熱 *in-situ* TEM観察  
結晶成長速度算出
- ②ACOM-TEM  
結晶面方位解析

### 結晶成長速度と結晶面方位の関係



◆成長速度@720°C→740°C

結晶面方位	(111)	(100)
成長速度(nm/min)	32.6	62.4

結晶面方位により成長速度が異なる。

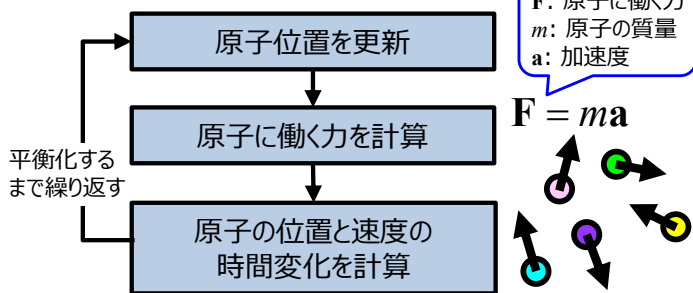
シミュレーション解析技術を用いて、成長速度の結晶面方位依存性の原因を調査。

関連技術資料: P02139「同一視野における加熱 *in-situ* TEM観察とACOM-TEMによる結晶成長メカニズム解析」

## 2. 計算: アモルファスSi結晶化シミュレーション【分子動力学計算】

### 分子動力学 Molecular Dynamics (MD)

ニュートンの運動方程式に従って、原子や分子の時間発展を追跡する手法。

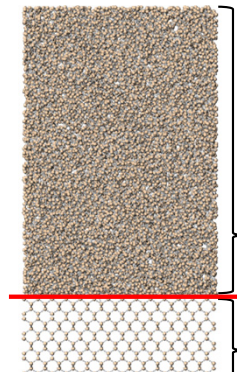


全原子を考慮したMD計算により、a-Siが結晶化していく過程を原子スケールで予測する事が可能。

### アモルファス/結晶(a/c)界面構造のMD計算

結晶Si(c-Si)に接したa-Si(a/c界面)のMD計算を実施し、c-Si(100), (110), (111)面の3種類の面方位での結晶成長の様子を比較。

### a/c界面の計算モデル



**計算条件** \*T. Kumagai et al., Comput. Mater. Sci. 39, 457 (2007).  
 • NPTアンサンブルのMD計算  
 • シミュレーション温度: 973.15 K (700 °C)  
 • 力場ポテンシャル: 改良版Tersoffモデル\*

膜厚7.88 nmのa-Si層

a/c界面

膜厚1.5 nm以上のc-Si層

界面に平行な方向は周期的

### 各シミュレーション時間におけるa/c界面構造のスナップショット

面方位	0 ns	100 ns	200 ns	300 ns
(100) 初期界面				
(110)				
(111)				

- (100)面では、顕著な欠陥を生じることなくスムーズに成長し、最も速く結晶化が進行する。→ 実験の傾向と一致。
- (110)、(111)面では、結晶化途中でファセットや積層欠陥が生じ、成長速度が低下する。

TEM観察に基づく結晶構造解析に、分子動力学シミュレーションを加えた独自の解析技術により、アモルファス結晶化における結晶成長のメカニズムを明らかにします。