

分子動力学法に基づく ZnO 結晶成長プロセスにおける 基板の極性が与える影響の解明

○川岸俊介, 許競翔, 大谷優介, 西松毅, 樋口祐次, 尾澤伸樹, 久保百司
東北大学金属材料研究所(〒980-8577 宮城県仙台市青葉区片平 2-1-1)

【緒言】

ZnO は 3.2 eV と大きいバンドギャップを持つ半導体であるため, 発光デバイスや電子デバイスに広く応用されている. ZnO 薄膜の光学特性は結晶品質等に大きく依存し[1], 結晶品質は基板の極性に大きく依存する. 高品質の薄膜を得るためには ZnO 基板上的結晶成長プロセスを原子スケールで解明することが重要である. しかし, 原子スケールにおける成長ダイナミクスを実験的に観察することは非常に困難である. そこで分子動力学法に基づく結晶成長シミュレーションを行うことにより, 基板の極性が ZnO 薄膜の結晶品質に与える影響を検討した.

【方法】

本研究では, ZnO 結晶成長シミュレーションを行うため, 力場には ReaxFF を用いた分子動力学プログラム Laskyo を用いた. 計算に用いたモデルを図 1 に示す. 基板は ZnO(0001)(Zn 極性面), (000-1)(O 極性面), (11-20)(無極性面)の 3 種類を用いた. 基板温度は 700 K, ZnO の照射速度は 900 m/s, 照射間隔は 1.5 ps とし, 基板の上に ZnO 薄膜を成長させた.

【結果】

ZnO 結晶成長における基板の極性が結晶品質に与える影響を検討するため, 各基板上でシミュレーションを行った. 約 1000 原子を照射した後の計算結果を図 2 に示す. 何れの基板上でも薄膜の成長が観察された. O 極性基板上(図 2(a))においては 6 員環構造が壊れたのに加えて, O₂ が生成し, 薄膜から脱離した. Zn 極性基板上(図 2(b))においても 6 員環構造が壊れた. 一方で, 無極性基板上(図 2(c))ではきれいな 6 員環構造が形成した(図 2(c)). 次に, 成長した薄膜の結晶性を評価するために, 成長層における Zn 原子欠陥と O 原子欠陥の数を調べた(図 3). この結果より, 欠陥の数は無極性面, Zn 極性面, O 極性面の順に多く, これは O 極性面, Zn 極性面, 無極性面の順で結晶性が良いという実験結果に一致する[2]. この原因を明らかにするため, 層ごとに断面図の構造を解析した結果, Zn 極性, O 極性基板上では 8 員環構造が形成されており, このため欠陥が生成したと考えられる. 加えて, O 極性基板上では薄膜成長過程で O₂ が生成・脱離したため, 欠陥の数が最も多くなったと考えられる. 一方で, 無極性基板の場合, 1 層目から 3 層目まで欠陥は生成しておらず, 高い結晶性を示した. 無極性基板の場合における薄膜の形成メカニズムは当日発表する.

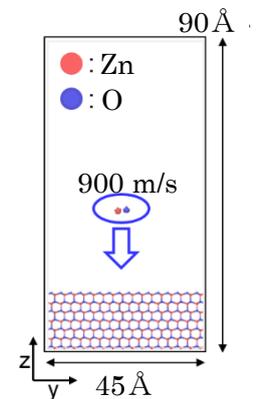


図 1 計算モデル

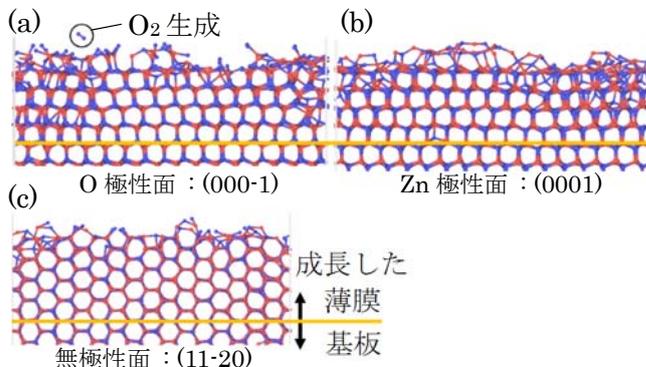


図 2 薄膜の成長シミュレーション

(a) O 極性基板 (b) Zn 極性基板 (c) 無極性基板

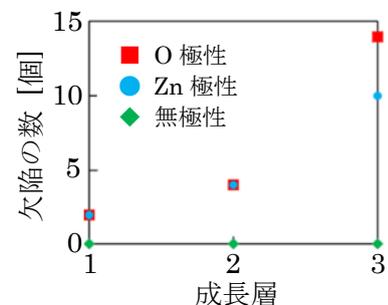


図 3 ZnO 薄膜成長層における欠陥の数

- 参考文献 [1] S. Dutta et al., Progress in Materials Science, 54 (2009) 89.
[2] K.-W. Kim et al., Thin Solid Films, 546 (2013) 114.

