19a-B5-2

Ga 過剰条件下における GaN 成長表面の分子動力学シミュレーション

Molecular Dynamics Simulation of GaN growth surface under Ga-rich conditions

三重大院工 [1]，九大応力研 [2]　○林 寛哉 [1]，雨川 将大 [1]，河村 貴宏 [1]，鈴木 泰之 [1]，
寒川 義裕 [2]，柿本 浩一 [2]

Mie Univ. [1] , RIAM, Kyushu Univ. [2] ○Hiroya Hayashi [1], Masahiro Amekawa [1],Takahiro Kawamura [1],
Yasuyuki Suzuki [1], Yoshihiro Kangawa[2], Koichi Kakimoto[2]

E-mail: 412m138@m.mie-u.ac.jp

1. はじめに

これまで Ga 過剰条件下において GaN の成長過程の詳細を明らかにすることを目的とし，分子動力学法により GaN の結晶成長シミュレーションを行い, 結晶成長における温度依存性や N 原子の拡散や脱離といった原子の動きについて検討を行ってきた．本研究では，N を連続的に供給した場合の GaN 基板 c 面の成長過程について検討した．

2. 計算方法

Ga 過剰条件を表現するために GaN 基板 c 面上に Ga のドロップレットを設置しており，N 原子を基板上に垂直に入射することで結晶成長シミュレーションを行った（Fig.1 参照）．原子間力の計算には Brennner ポテンシャルを用いた[1,2]．また温度制御には速度スケーリング法と Nose-Hoover 法を用いた．セル側面には周期境界条件を用いた．最下層原子は固定し，セル上部から出た原子は計算から取り除くように設定した．

3. 計算結果

Fig.2 は基板の原子数が 2592 個，Ga ドロップレットと追加 N の原子数がそれぞれ 144 個と 200 個，設定温度が 2000K の条件におけるシミュレーション結果のスナップショットである．これにより Ga ドロップレットは常に基板上を動き回る様子が観察された. また基板上に垂直に入射された N は，基板上を拡散することで Ga ドロップレットの外側と接触し，そこから GaN が平面方向に成長する様子が観察された．

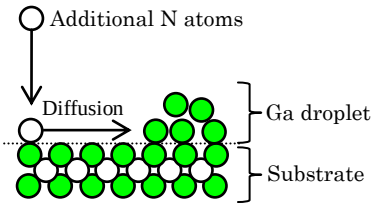

Fig.1: schematic diagram

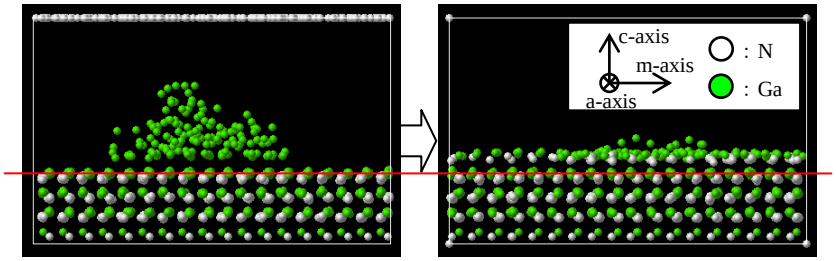

Fig.2: Snapshots of the growth under Ga-rich conditions.(Red line : Substrate suface)

4. 参考文献

[1] D. Brenner: Phys. Rev. B **42**, 9458 (1990).

[2] J. Nord, K. Albe, P. Erhart and K. Nordlund: J.Phys.: Condens. Matter **15**, 5649 (2003).

© 2013 年　応用物理学会