

分子動力学法による窒化物半導体の超格子構造の格子歪み解析

Analysis of Lattice Distortion of Superlattice Structure of Nitride Semiconductor
by Molecular Dynamics三重大院工¹, 九大応力研² °雨川 将大¹, 吉村 善徳¹, 河村 貴宏¹, 鈴木 泰之¹,
寒川 義裕², 柿本 浩一²Mie Univ.¹, RIAM, Kyushu Univ.², °Masahiro Amekawa¹, Yoshinori Yoshimura¹,
Takahiro Kawamura¹, Yasuyuki Suzuki¹, Yoshihiro Kangawa², Koichi Kakimoto²

E-mail: 413m101@m.mie-u.ac.jp

はじめに MOVPE 法においてエピタキシャル層に発生する歪みを緩和することは重要であり、歪制御技術である GaN/AlN 超格子などの導入により歪みが低減し、高品質な膜が得られることが知られている。しかし、超格子の歪み緩和の働きについては未知な部分が多い。本研究では、超格子構造による歪み緩和に関する知見を得ることを目的に分子動力学法を用いて超格子構造を再現し、格子歪み解析を行った。

計算方法 窒化物半導体の結晶格子を組み合わせて超格子構造を再現し、混晶の場合には原子を不規則に配置してシミュレーションを行った。図 1 は $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}/\text{GaN}$ 超格子のシミュレーションモデルである。原子間力の計算には Brenner ポテンシャルを用い[1,2,3]、運動方程式の時間積分には Gear 法を使用した。圧力計算にはビリアル定理を用いて、温度 0 K で計算を行った。温度制御には速度スケール法を用いて計算を行い、セル全体を周期境界条件とした。

計算結果 図 2 は AlGaIn 層の各組成比における平均圧力をプロットした結果である。GaN と AlN の格子定数差から GaN 層は圧縮し、AlN 層は引張りとなる。したがってこの結果は、AlN の割合が増加するにつれて、GaN との格子定数差が大きくなるために各層の歪みが大きくなったことを表している。AlGaIn 層の圧力は組成比に比例して変化している。適切な組成比の AlGaIn 層を用いることで基板とエピタキシャル層の間の歪みを制御することができると考えられる。

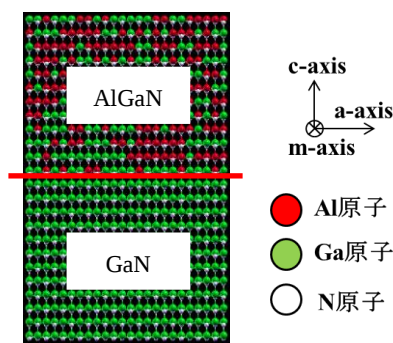
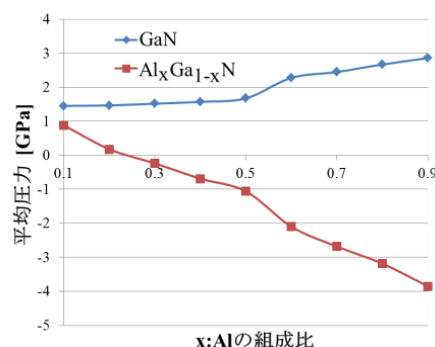
図 1. $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}/\text{GaN}$ 超格子のシミュレーションモデル

図 2. AlGaIn/GaN 超格子の各組成比の平均圧力

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)
- [3] J. Kioseoglou, Ph. Komninou and Th. Karakostas: Phys.stat.sol. (b) 245 (2008)