

GaN 成長表面における C-N 結合エネルギーの第一原理計算

First-Principles Calculation of C-N Bond Energy on GaN Growth Surface

三重大院工¹, 阪大院工² ○河村 貴宏^{1,2}, 今林 弘毅², 丸山 美帆子², 今出 完², 吉村 政志²,
森 勇介², 森川 良忠²

Graduate School of Engineering, Mie Univ.¹, Graduate School of Engineering, Osaka Univ.²

○Takahiro Kawamura¹, Hiroki Imabayashi², Mihoko Maruyama², Mamoru Imade²,

Masashi Yoshimura², Yusuke Mori², Yoshitada Morikawa²

E-mail: tkawamura@mach.mie-u.ac.jp

はじめに Na フラックス法による GaN 成長では、多結晶の発生の抑制し、成長速度を増加させるため原料融液中へ炭素を添加しているが、その効果の要因は明確には理解されていない。我々は炭素添加が GaN 成長過程に与える影響とその原理解明を目的として、第一原理計算を用いた解析を行っている。これまでの研究成果から、成長速度が増加する理由として、融液中の CN イオンが GaN 成長表面で C と N に分離することで N キャリアとして機能するのではないかと推測している。この考えを検証するには CN イオンが分離するかどうかを明らかにする必要がある。そこで本研究では第一原理計算を用いて GaN 成長表面における C-N 結合エネルギーの解析を行った。

計算方法 シミュレーションには第一原理計算プログラム“STATE-Senri”[2]を用いた。図 1 に原子数 63 個で構成されたキンクを有する GaN 結晶表面の計算モデルを示す。初期配置として結晶表面は Na-Ga 融液を模擬した Ga と Na 原子で覆われており、キンクに CN イオンを配置した。このモデルを用いて 1073K で 10ps の分子動力学シミュレーションを行い、Blue Moon 法により C-N 原子間の拘束距離とその拘束に必要な力 (mean force) の関係から C-N 結合エネルギーを求め、以前に同様の方法で計算した融液中における C-N 結合エネルギー [3] と比較した。

結果および考察 図 2 に成長表面 (growth surface) と融液中 (melt) における C-N 原子間拘束距離に対する mean force の変化を示している。図中の曲線を積分して求めた C-N 結合エネルギー (グラフ中の灰色部分) を比較すると、成長表面では約 1.2 eV であり、融液中における値 (Ga 有り 約 3.0 eV, Ga 無し 約 6.3 eV) と比較して非常に小さいことが分かった。この結果から CN イオンが成長表面で分離する可能性は十分にあると考えられる。融液中における C-N 結合エネルギーに関して、周囲に Ga が存在する方が小さい値を示すことから、今回用いた成長表面のモデルでは CN の周囲に多くの Ga 原子が存在するため、融液中よりも C-N 結合エネルギーが減少したと考えられる。

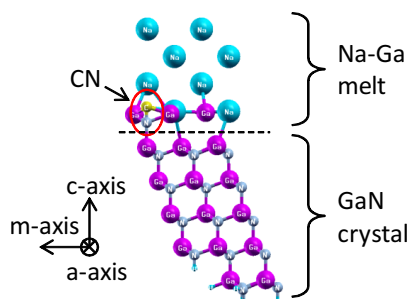


図 1: Schematic diagram of the simulation model.

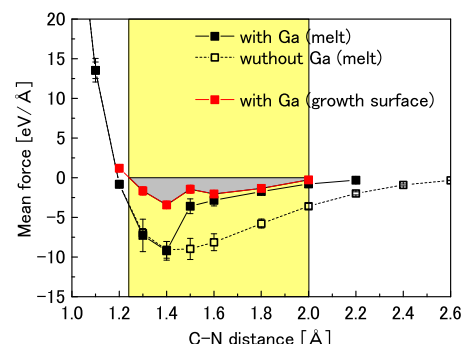


図 2: Mean force of C-N bond.

[1] 河村ら, 2014 年第 61 回応用物理学会春季学術講演会, 18p-E13-7.

[2] Y. Morikawa, Phys. Rev. B 51(1995) 14802.

[3] T. Kawamura et al., Jpn. J. Appl. Phys. 52 (2013) 08JA04.