

GaN 結晶成長シミュレーションの新展開： 第一原理計算に基づくアプローチ

Computer Modeling and Simulation of GaN Vapor Phase Epitaxy: An Ab Initio-Based Approach

九大応研¹, 名大未来研² ° 寒川 義裕^{1,2}, 白石 賢二², 柿本 浩一¹

RIAM, Kyushu Univ.¹, IMaSS, Nagoya Univ.²,

°Yoshihiro Kangawa^{1,2}, Katsunori Yoshimatsu², Kenji Shiraishi², Koichi Kakimoto¹

E-mail: kangawa@riam.kyushu-u.ac.jp

都市生活の様々なシーンにおいて交流－直流変換、周波数変換などの電力変換が行われている。電力変換時の電力損失は電力変換器に搭載されている電力用半導体素子（パワーデバイス）の性能に影響される。一般に普及している Si パワーデバイスを用いた電力変換器では 5～15%程度の電力変換損失を生じる。現在、電力変換損失の低減に向けて GaN を用いた低損失パワーデバイスの開発が進められている。本研究では、デバイス品質の GaN 結晶成長に資する理論・シミュレーション手法を構築し、材料開発の加速に貢献することを目的とする。

デバイス品質の GaN 結晶を開発するためには、デバイス性能に影響を及ぼす結晶欠陥の密度を低減する必要がある。炭素 (C) のような不純物（点欠陥）は、混入メカニズムの解明および成長プロセスの制御によって混入を抑制することができる。しかし、工業的に用いられている MOVPE (Metalorganic Vapor Phase Epitaxy) などの気相成長は大気圧下あるいは低圧下で行われているため、例えば電子線プローブを用いた表面構造解析などの混入メカニズム解明に向けたその場観察実験が困難である。寒川らは、従来、絶対零度・高真空環境に対して行われていた第一原理計算による表面構造解析を、有限温度 (T)・有限ガス分圧 (p) の寄与を考慮できるように拡張している¹⁾。また、ここで構築した第一原理計算に基づくアプローチを用いて種々の窒化物半導体表面の構造状態図 (p - T 表面相図) を作成している²⁾。本研究では、第一原理計算に基づくアプローチと熱力学解析を組み合わせた新たな理論解析手法を構築し、成長面方位・表面再構成と成長の駆動力の相関解析を可能としている。本理論解析手法を活用することにより実際の成長条件 (T , p_{III} , p_{NH_3} , N/III 比など) における表面再構成構造を予測することができる。すなわち、計算機実験による表面再構成のその場観察が可能となる。ここで得られた知見を成長実験にフィードバックすることにより、不純物の混入メカニズム解明ひいては成長プロセス制御に資する指導原理を理論主導で予測・提言することができる。本講演では、新たに構築した理論解析手法の概要を説明し、窒化物半導体 MOVPE における表面再構成と成長の駆動力の相関を議論する。また、本理論解析手法と数値流体力学との結合によるマルチフィジックス・マルチスケール結晶成長シミュレーションへの展開についても紹介する。

謝辞

マルチフィジックス・マルチスケール結晶成長シミュレーションにおける数値流体力学に関する部分の定式化は芳松克則准教授 (名大未来研)、岡本直也助教 (名大院工) により行われました。謹んで感謝申し上げます。本研究の一部は文科省「省エネルギー社会の実現に資する次世代半導体研究開発」プロジェクトの支援により行われました。

参考文献

- 1) Y. Kangawa, T. Ito, A. Taguchi, K. Shiraishi, T. Ohachi; *Surf. Sci.* **493** (2001) 178.
- 2) Y. Kangawa, T. Akiyama, T. Ito, K. Shiraishi, T. Nakayama; *Materials* **6** (2013) 3309.