

エピタキシャル成長のマルチフィジックスシミュレーションの現状

Multi-Physics Simulation of Epitaxial Growth

名大未来研¹, 名大院工², 名大計科セ³, 九大応力研⁴, 名大 VBL⁵ ○白石賢二^{1,2}, 関口一樹²,
長川健太², 白川裕規², 川上賢人², 山本芳裕², 洗平昌晃^{1,2}, 永松謙太郎¹, 新田州吾¹,
岡本直也^{3,2}, 芳松克則^{1,2}, 寒川義裕^{4,1}, 柿本浩一⁴, 天野浩^{1,2,5}

IMaSS, Nagoya Univ.¹, Graduate School of Engineering, Nagoya Univ.², CCS, Nagoya Univ.³,
RIAM, Kyushu Univ.⁴, VBL Nagoya Univ.⁵

○K. Shiraishi^{1,2}, K. Sekiguchi², K. Chokawa², H. Shirakawa², K. Kawakami², Y. Yamamoto²,
M. Araidai^{1,2}, K. Nagamatsu¹, S. Nitta¹, N. Okamoto³, K. Yoshimatsu^{1,2}, Y. Kangawa^{4,1},
K. Kakimoto⁴, and H. Amano^{1,2,3}

E-mail: shiraishi@cse.nagoya-u.ac.jp

1. はじめに

エピタキシャル成長はナノ構造やナノ物質合成に広く利用されているが、その制御はこれまで実験家の経験と勘に頼るところが多かった。このような背景の下、インフォマティクスを用いてシステムティックにエピタキシャル成長の条件を決定しようという動きが出てきている。結晶成長の実験を行うのは一日がかりであるため、実験だけでインフォマティクス用のデータを収集するのは困難である。そこで期待されているのが、結晶成長シミュレーションの有効利用である。そのために用いるシミュレーションは物理的に正確でなくてはならない。本研究では GaN の MOVPE 成長を例に取り、エピタキシャル成長シミュレーションの現在の状況について我々の研究を中心に紹介する。

2. 第一原理計算と熱力学的解析の結果

これまでの GaN の MOVPE 成長シミュレーションでは TMG と NH₃ が反応してアダクト (CH₃)₂Ga(NH₂) が形成され、それを起点に GaN の結晶成長が進行するとしてシミュレーションが行われてきた[1,2]。ところが、第一原理計算と熱力学を組み合わせて解析したところ、Fig.1 に示すように絶対零度ではアダクト形成が最安定であるが、通常の成長温度ではアダクト (CH₃)₂Ga(NH₂) は形成されず、TMG は Ga 原子ガスに分解されることがわかった[3]。この結果は、アダクト形成は極微量であり、TMG 分解によって Ga 原子ガスが主に形成されることを示した永松らの高精度質量分析の結果と非常によく一致する[4]。従って、GaN の MOVPE 成長シミュレーションがインフォマティクスに耐えうる物理的に正確なものになるには、根本的にシミュレーションの仮定を変える必要があることがわかる。すなわち、考察すべき主反応を Ga(gas) + NH₃ → GaN(solid) + 3/2H₂ としてシミュレーションを行わなければならないわけである。

3. マルチフィジックスシミュレーション

上記の結果を踏まえて、結晶成長シミュレーションの体系を構築した。本シミュレーションでは、結晶成長による原料ガスの消失をノイマンの境界条件として取り入れ、主な成長表面での化学反応を Ga 原子ガスと NH₃ からの GaN 形成として流体力学シミュレーションを行った。結果については講演で紹介する予定である。

謝辞

本研究は「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」(文部科学省)からの委託を受けたプロジェクトの一環として行われた。

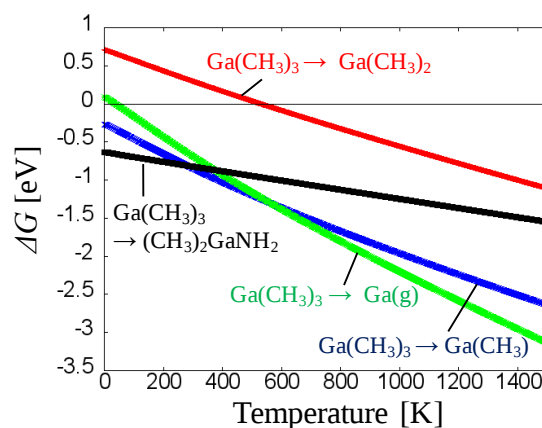


Fig.1. Calculated Gibbs free energy difference ΔG . The red, blue, green and black lines show ΔG for the reactions in which TMG becomes DMG, MMG, Ga and the (CH₃)₂GaNH₂ adduct, respectively.

Reference

- [1] A. Thon *et al.*, Appl. Phys. Lett. 69, 55 (1996).
- [2] D. Sengupta, *et al.*, J. Cryst. Growth 279, 369 (2005).
- [3] K. Sekiguchi *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys., in press.
- [4] K. Nagamatsu *et al.*, phys. status solidi b, in press