

# 分子動力学法による 結晶成長シミュレーション及び物性解析

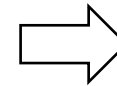
# 分子動力学法とは

個々の粒子(原子・分子)の微視的な運動を追跡することで、微視的(ミクロ)および巨視的(マクロ)な物性について評価, 現象を説明する計算方法.

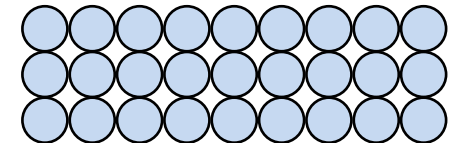
マクロな物性

- 弾性定数
- 熱伝導率
- 粘性係数(流体)

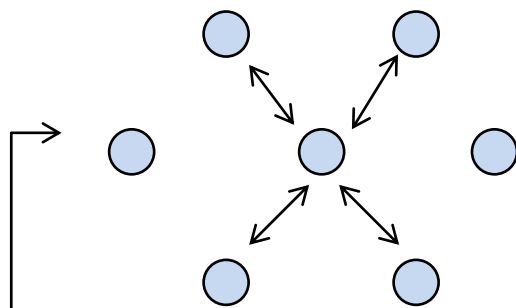
連続体



原子・分子



分子動力学法

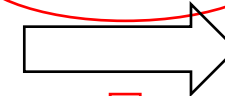


原子間力  
運動エネルギー(速度)  
ポテンシャルエネルギー

数値積分  $\Delta t$

原子座標・速度・加速度の更新

原子の運動



物性解析

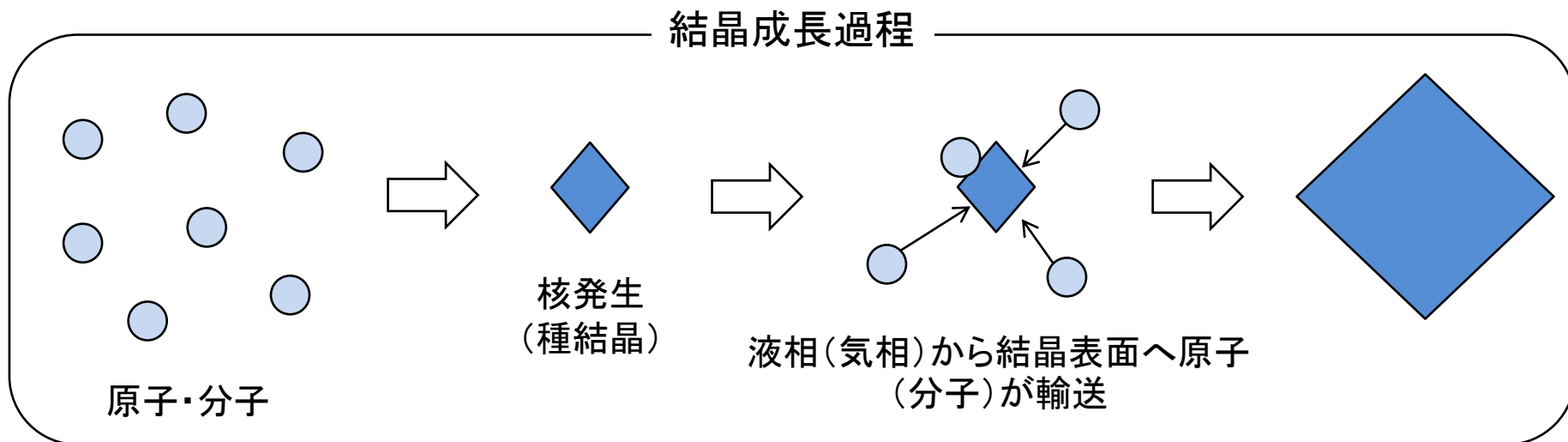
弾性定数  
粘性係数  
熱伝導率  
拡散係数

結晶成長中の原子挙動

# 結晶成長

結晶: 原子・分子が規則正しく配列している物質

金属 (Fe, Al, etc.)・半導体 (Si, Ge, etc.), 有機物, タンパク質など



分子動力学法による結晶成長機構の解明



計算機シミュレーションによって原子・分子レベルで結晶成長過程を調べる

# ワイドバンドギャップ半導体

GaN(窒化ガリウム), SiC(炭化ケイ素), ダイヤモンド ( Si(シリコン) )

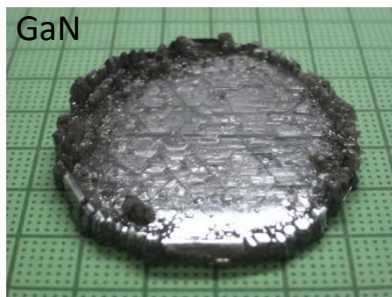
バンドギャップ[eV]

3.4

3.3

5.4

1.1



GaN  
F. Kawamura et al., J. Cryst. Growth 311 (2009) 3019.



©豊田合成

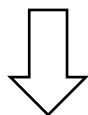


©Nippon Steel Materials Co.,Ltd.

- ワイドバンドギャップ → 高絶縁破壊電界 → 高出力動作
- 原子間結合力が強い → 化学的に安定

パワーデバイス  
省エネルギーデバイス

フォノンの格子散乱が抑制 → 高熱伝導率・飽和電子速度



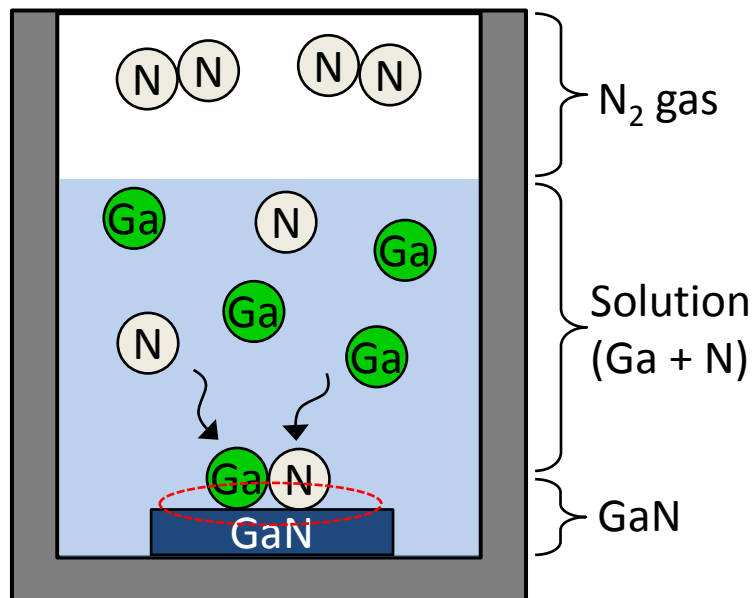
結晶成長が困難  
高品質・大型結晶が得られていない  
成長メカニズムに不明な点が多く残っている



- 分子動力学法による結晶成長シミュレーション  
成長過程の原子運動を調べる
- 成長メカニズムの解明
  - 高品質・大型結晶成長の指針

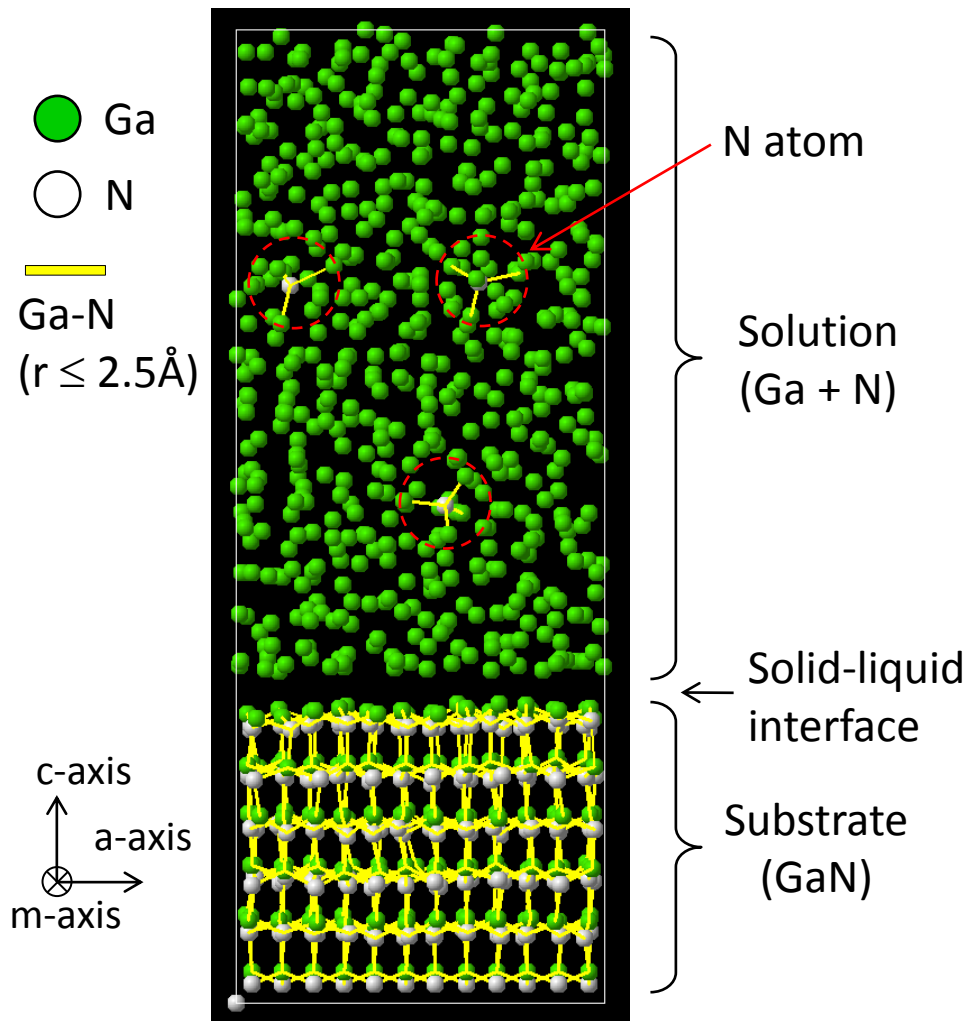
# 計算例 GaN溶液成長シミュレーション

## 溶液成長の模式図

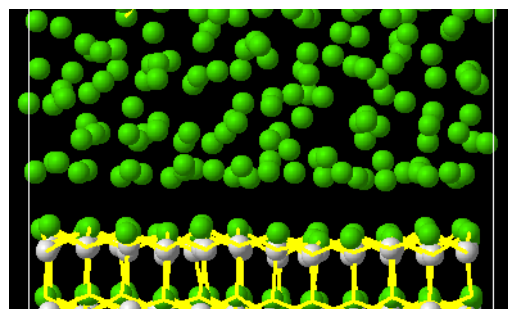


成長表面の  
シミュレーション

## シミュレーションモデル

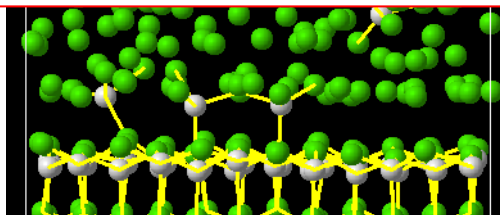


# Ga面上の成長過程 (c面成長, 2500K)

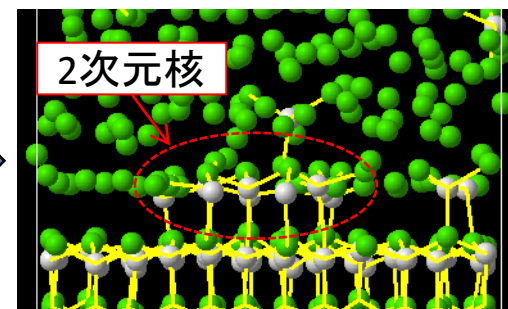


500ps

成長界面のGa-N結合手が1本のため不安定 → 表面拡散

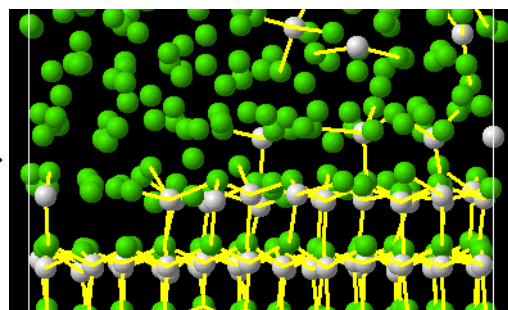


1026ps

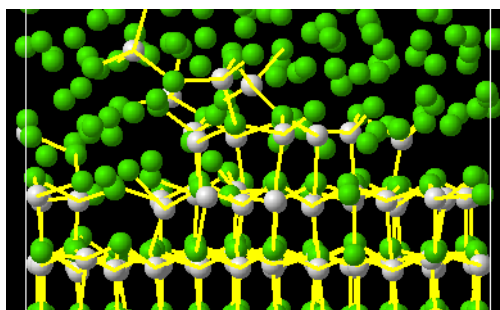


2次元核

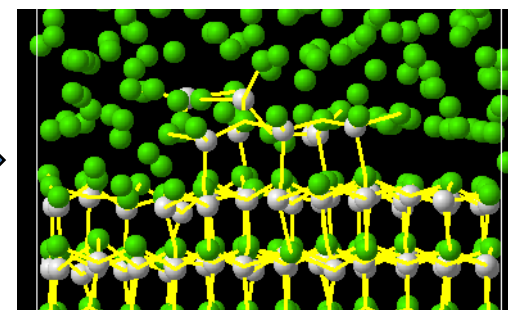
2780ps



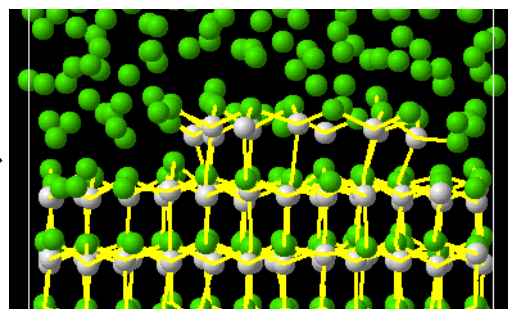
4112ps



6251ps



7107ps

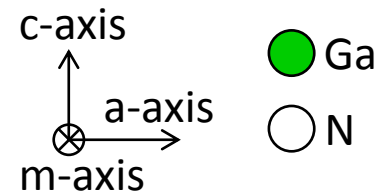


15000ps

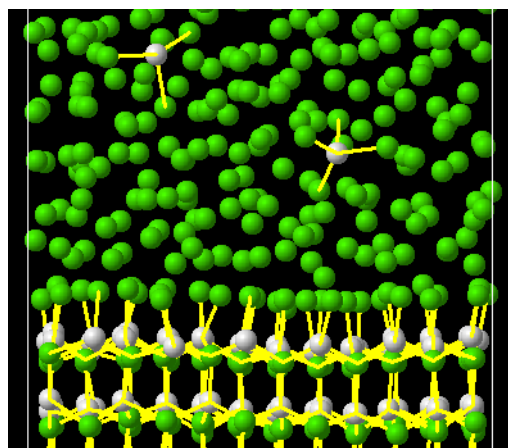
2次元核生成 → 沿面成長

成長面は平坦

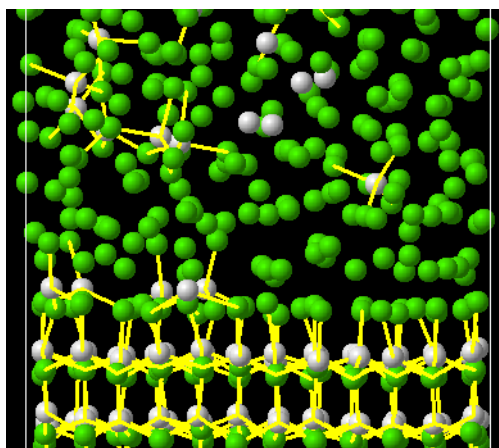
( 1層目は83%完成 )  
( 2層目は28% )



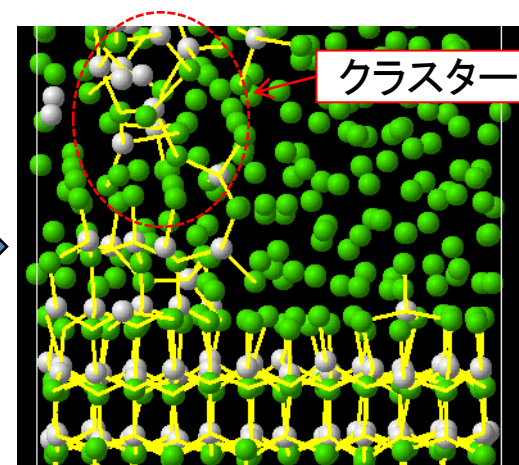
# N面上の成長過程 (c面成長, 2500K)



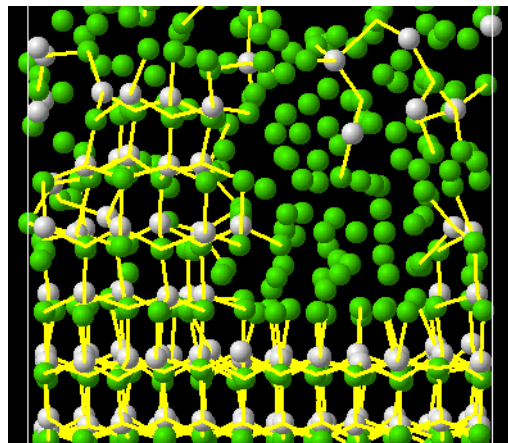
488ps



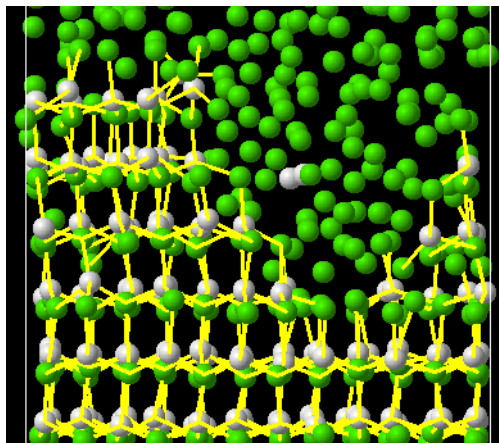
2451ps



3750ps



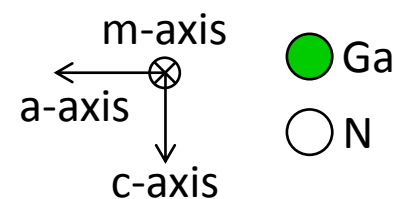
4880ps



15000ps

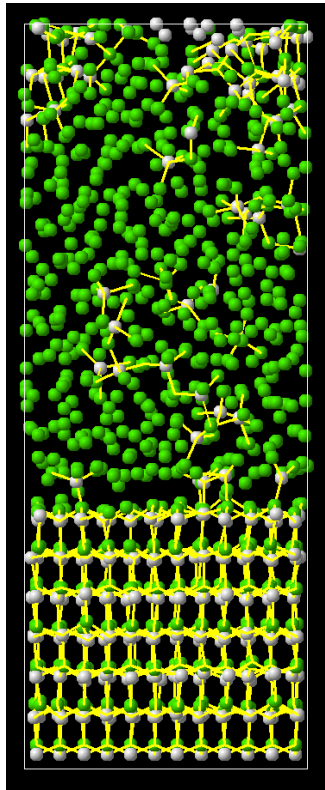
付着成長に近い  
成長面は凹凸  
(クラスターが付着したため?)

〔 1層目は61%完成  
2層目は44% 〕

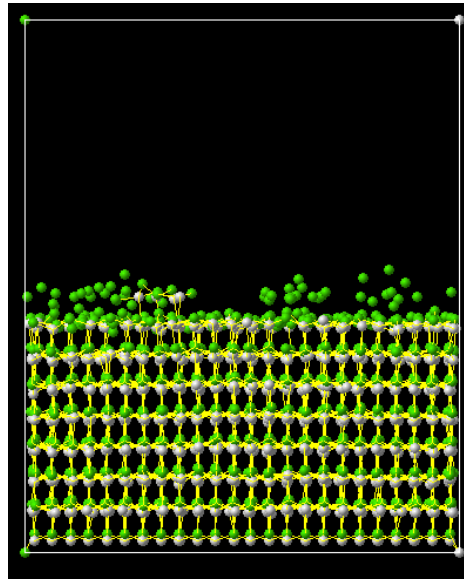




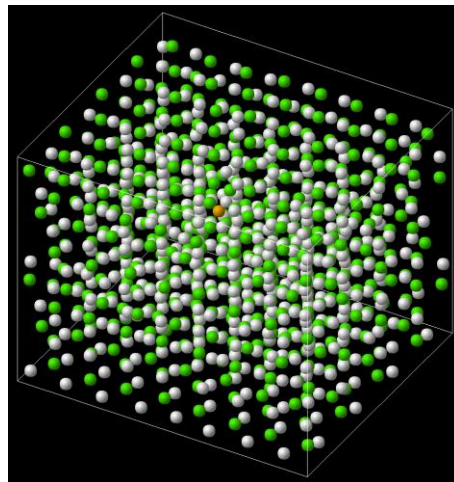
# その他の計算例



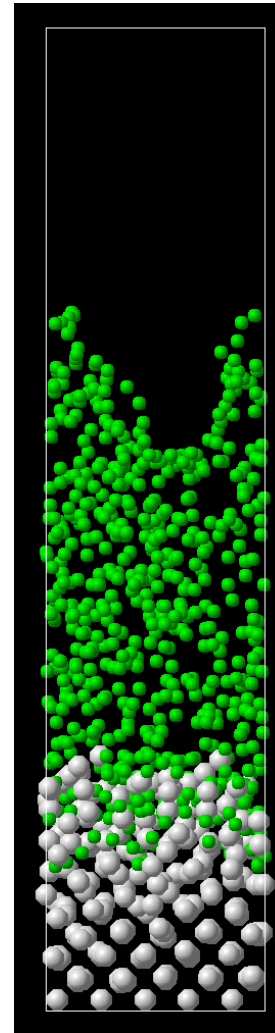
GaNの溶液成長



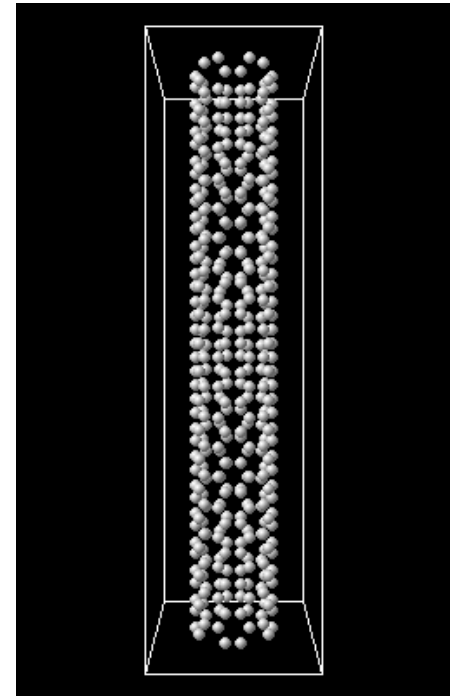
GaNの気相成長



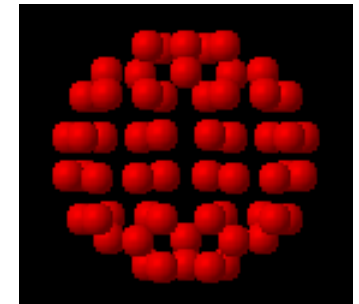
SiC中の自己拡散



DLC



SWCNT



フラーレン