

令和 3 年 4 月 30 日現在

機関番号：14101

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2018～2020

課題番号：18K04957

研究課題名(和文) 高品質バルクGaN成長に適した気相成長条件および結晶成長プロセスの解明

研究課題名(英文) Investigation of vapor phase epitaxy growth conditions for high quality bulk GaN and their crystal growth process

研究代表者

河村 貴宏 (Kawamura, Takahiro)

三重大学・工学研究科・助教

研究者番号：80581511

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：本研究ではOVPE法によるバルクGaN単結晶の成長機構の解明を目的として、第一原理計算を用いて(1) O不純物の吸着・脱離反応を含めたGaN成長プロセスの解明と(2) GaN成長における表面再構成とその面方位依存性に関する解析、の2つの研究を行った。(1)ではGaN結晶表面に吸着したO不純物の脱離エネルギーは大きく、OとOHの形では脱離は起こりにくいがH<sub>2</sub>Oに還元することで脱離しやすくなることを示した。(2)ではOVPE成長条件下ではGa分圧が増加するにしたがってO不純物を取り込みやすい(1-101)表面構造が現れやすくなることから、結晶に取り込まれるO不純物量が増加することを示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究により明らかになったGaN結晶表面におけるO不純物の吸着・脱離反応やその際にエネルギーの評価、また各面方位における表面生成エネルギーの絶対値を比較することで明らかにした成長条件と安定な面方位および表面構造との関係は、高品質かつ安価なGaN基板用のバルクGaN結晶成長法として期待されているOVPE法における結晶品質と不純物濃度制御の改善に貢献することが期待される。また、本研究を通して習得した手法はGaNにおける他の不純物に関する解析や、仮定する成長条件を変えることで様々な成長条件における安定な面方位や結晶形状の予測に応用することが出来る。

研究成果の概要(英文)：We carried out first-principles calculations to clarify the GaN crystal growth mechanism in OVPE method. First, we examined O adsorption and desorption on the GaN surface with kink, step, and terrace structures and found that O and OH hardly desorb from the GaN surface. Second, we simulated surface reconstruction on the polar, nonpolar, and semi-polar surface. The relationships of stable surface orientations and surface structures with the growth conditions of Ga pressure and temperature were examined. It was shown that as the Ga partial pressure increases, the (1-101) reconstructed surface with O impurity is more likely to appear, so that the amount of O impurities also increase.

研究分野：結晶工学、数値解析、固体物理学

キーワード：窒化ガリウム 第一原理計算 不純物 OVPE成長

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

GaN に代表される III-V 族窒化物半導体は発光デバイス、パワーデバイス、スイッチング損失を低減する省エネデバイスや太陽光発電デバイス用材料として期待されている。低コスト化の観点から安価なシリコンやサファイアが基板として用いられることが多いが、その際には基板材料との格子定数・熱膨張係数差に起因する欠陥や反り、クラックなどの問題が発生する。デバイス品質の観点から言えば同種基板、すなわち GaN 基板を用いることが理想である。基板用のバルク GaN 結晶成長に関する研究は長年行われているが、結晶品質、成長速度、不純物制御など複数の条件を満たす成長法の開発には至っておらず、GaN デバイスの実用化と普及のため高品質かつ大型バルク GaN 単結晶成長技術の開発が求められている。近年、Ga<sub>2</sub>O を原料として  $\text{Ga}_2\text{O} + 2\text{NH}_3 \rightarrow 2\text{GaN} + \text{H}_2\text{O} + 2\text{H}_2$  の反応で GaN 成長を行う気相成長法(Oxide Vapor Phase Epitaxy, OVPE) が注目されている[M. Imade et al., J. Cryst. Growth 312, 676 (2010)]。現状では高品質かつ高速成長を両立させることが難しく、また原料に酸素(O)が含まれるため O 不純物の制御が困難であるなど OVPE 法特有の問題もあるが、これらを解決することができれば連続成長が可能な大型バルク GaN 成長法としての実用化が期待される。OVPE 法の改善には結晶表面における原子・分子の吸着・脱離反応や不純物の取り込み、さらにその面方位依存性など結晶成長過程の基本的な部分を明らかにする必要がある。

### 2. 研究の目的

本研究では大型バルク GaN 単結晶成長技術の開発に向け、OVPE 法による GaN 結晶に適した成長条件の探索およびその結晶成長メカニズムを明らかにすることを目的として、(1) O 不純物の吸着・脱離反応を含めた GaN 成長プロセスの解明と(2) OVPE 法による GaN 成長における表面再構成とその面方位依存性に関する解析、の 2 つを研究目的とした。解析には原子スケールの検討が必要となるため、第一原理計算を用いる。

#### (1) O 不純物の吸着・脱離反応を含めた GaN 成長プロセスの解明

OVPE 法では成長雰囲気中に多量の O を含むため、O 不純物の制御が課題となっている。申請者はこれまでに O 不純物を考慮した OVPE 成長中の GaN 表面構造の解析を行ってきたが[若手研究 B(No.15K17459); T. Kawamura et al., Phys. Status Solidi B 254, 1600706 (2017)]、それらの結果は理想表面を基準とした解析であったため、結晶成長過程における議論ができない点を改良する必要がある。そこで本研究では結晶表面にキンクやステップ、また結晶欠陥が存在する場合の表面構造について検討を行うことで OVPE 成長における GaN 成長プロセスを検討する。

#### (2) OVPE 法による GaN 成長における表面再構成とその面方位依存性に関する解析

OVPE 法はバルク GaN 成長法として期待されているため、結晶径が大きくなるように成長することが望ましい。そのため、どの結晶面で成長させると大口径の結晶を得ることができるのかを知ることは重要である。同時に、O 不純物を減少させるため不純物の取り込みの少ない結晶面が表れることが望ましい。本研究では GaN の表面エネルギーの絶対値を基準とすることで、以前に行った表面構造解析の結果を利用して成長温度・圧力と表面構造の安定性の関係を調べ、成長条件と成長プロセス、および O 不純物の取り込みの面方位依存性の関係を明らかにする。

### 3. 研究の方法

#### (1) O 不純物の吸着・脱離反応を含めた GaN 成長プロセスの解明

図 1 に GaN(0001)面上にステップとキンク構造を含むように作成した計算モデルを示す。左側の図は実際に用いた計算モデルであり、この計算モデルに対して周期境界条件を適用することで、右側の図に示すように(0001)面にステップ、キンク、テラスが存在する構造の計算を行う。このステップ、キンク、テラスの位置に O 不純物(O, OH, H<sub>2</sub>O)を吸着させて構造最適化計算を行い、O 不純物が吸着した表面構造と O 不純物の脱離エネルギーを評価する。その際にエネルギー障壁は無いものと仮定する。また、GaN(000-1)面についても同様の計算を行う。

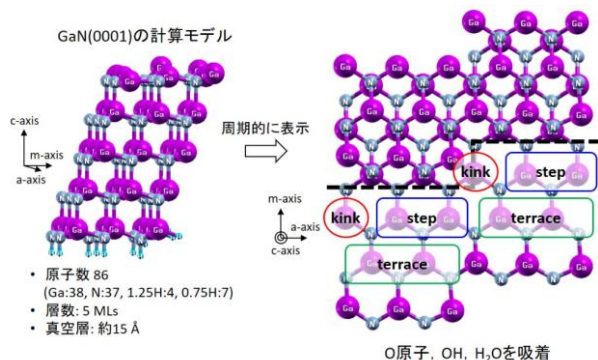


図 1 GaN(0001)面の計算モデル。紫色の原子は Ga、灰色の原子は N である。また底面側は仮想的な H で終端している。

#### (2) OVPE 法による GaN 成長における表面再構成とその面方位依存性に関する解析

GaN の極性面 ((0001)と(000-1))、無極性面 ((11-20)と(1-100))、および半極性面 ((1-101)と(1-10-1)) 上に、Ga、N、O、H で構成される原子または分子を吸着させた表面構造モデルに対

して構造最適化計算を行い、得られた全エネルギー値と基準（理想）表面とのエネルギー差から表面生成エネルギー $E_f$ を計算する。次に理想表面の表面エネルギーの絶対値 $\sigma^{ideal}$ を求める。これらの値を用いて、表面生成エネルギーの絶対値 $\sigma = E_f + \sigma^{ideal}$ を求める[T. Akiyama et al., Phys. Rev. Mater. 3, 023401 (2019)]。表面生成エネルギーは面ごとに基準エネルギーが異なるため、そのままでは異なる面の結果を比較することが出来ないが、表面エネルギーの絶対値を用いることでそれが可能になる。各面方位の表面生成エネルギーの絶対値を比較し、成長条件（温度と Ga ガス圧力）と安定な表面構造との関係を調べる。

#### 4. 研究成果

##### (1) O 不純物の吸着・脱離反応を含めた GaN 成長プロセスの解明

GaN(0001)面上に O 原子を吸着させた場合の表面構造を図 2 に示す。キンク（ステップ）に吸着した場合、O はキンク（ステップ）端の Ga と(0001)面上の Ga に結合し、N サイトに取り込まれた（図 2a と 2b）。一方、テラスに吸着した場合は c 軸方向から見た時に結晶構造の六角形の中心付近に位置し、(0001)面上の Ga 原子 3 個と結合した（図 2c）。キンク、ステップ、テラスに吸着した O の脱離エネルギーはそれぞれ 6.73 eV、6.66 eV、7.32 eV であった。キンクとステップにおいては O は 2 個の Ga と結合しており、テラスでは 3 個の Ga と結合しているため、テラスにおける O の脱離エネルギーの方が大きくなったと考えられる。

OH に関して、ステップに吸着した場合はステップ端の Ga と結合し、テラス上に吸着した場合は結晶表面の Ga と結合した。キンクの位置に吸着させた場合についても計算を試みたが、OH は 2 個の Ga と同時に結合することは無く、キンクの位置に吸着しなかった。OH の脱離エネルギーはステップでは約 4.5 eV、テラスでは約 5.0 eV であり、テラス上の方が大きな値となった。H<sub>2</sub>O に関しては、キンクとステップに吸着させた場合は OH と H に分解してそれぞれステップ端の Ga と N に吸着した。テラス上に吸着した場合は H<sub>2</sub>O の O が結晶表面の Ga と吸着したが、H<sub>2</sub>O にダングリングボンドは無いので、その結合は弱いと考えられる。実際に脱離エネルギーを評価したところ 1.78 eV であり、O や OH と比べて小さな値であった。

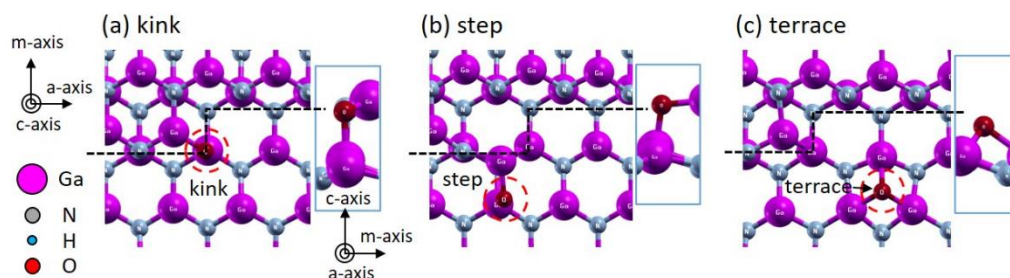


図 2 GaN(0001)面上に O 原子を吸着。

次に GaN(000-1)面上に O 原子を吸着させた場合の表面構造を図 3 に示す。キンクに吸着した場合、O は 2 個の Ga と結合し N サイトに取り込まれた（図 3a）。ステップに吸着した場合はステップ端の Ga と結晶表面の N に結合した（図 3b）。一方でテラスに吸着させようと試みたが、テラス上に安定に吸着することは無く、図 3c に示すようにステップに吸着させた場合と同様の配置を取った。この結果は O は N よりも Ga と結合しやすいことを示している。キンクとステップに吸着した O の脱離エネルギーはそれぞれ 5.03 eV と約 4.4 eV であった。2 個の Ga と結合したキンクにおける脱離エネルギーが、1 個の Ga と 1 個の N と結合したステップにおける値よりも大きいことから、O が Ga と結合した方が安定であると言える。

OH がキンクに吸着した場合は O と同じ位置に取り込まれた。一方、ステップに吸着した場合はステップ端の Ga 原子 1 個と結合した。H<sub>2</sub>O は分子のままではどの位置にも吸着することは無く、OH と H に分解してキンクとステップに吸着した。キンクに吸着した場合の OH の脱離エネルギーは約 4.5 eV であったが、ステップに吸着した場合の脱離エネルギーは吸着位置によって約 2.5~4.0 eV の範囲でばらつきがみられた。

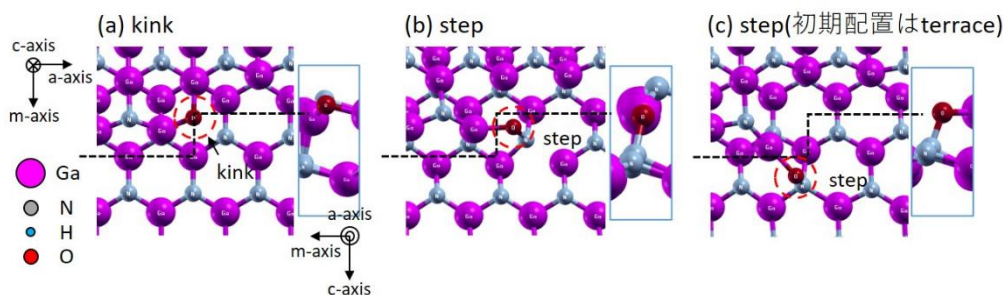


図 3 GaN(000-1)面上に O 原子を吸着。

図 4a と 4b にそれぞれ(0001)面上と(000-1)面上における O の脱離エネルギーをまとめたグラフを示す。図中の O atom、OH、H<sub>2</sub>O はそれぞれ吸着した原子・分子を示しており、kink、step、terrace は吸着位置を示している。またグラフ右側の V<sub>N</sub> はテラス最表面の N 原子を取り除いた N 欠陥を意味しており、この場合の値はこの N 欠陥に取り込まれた O の脱離エネルギーである。この N 欠陥に取り込まれた O の脱離エネルギーは(0001)面では約 6.5 eV、(000-1)面では約 7.0 eV であった。グラフ中の斜線部分は OVPE 法による GaN の成長条件を温度 1500 K、ガス分圧を 10<sup>-5</sup>–10<sup>-3</sup> atm と仮定した場合の O、OH、H<sub>2</sub>O のケミカルポテンシャルの値を示している。これらのグラフにおいて、脱離エネルギーが斜線部分より上であれば O 不純物は脱離しにくく結晶表面に吸着した状態が安定であり、逆に斜線部分より下であれば脱離しやすいことを表している。これらの結果から(0001)面では O > O (N 欠陥) > OH > H<sub>2</sub>O の順に脱離エネルギーが大きく、結晶表面から脱離しにくく結晶に取り込まれやすいと考えられる。キंक、ステップ、テラスに吸着した O とテラスに吸着した OH は脱離エネルギーが大きいため、GaN 成長条件下では結晶表面から脱離しにくいと考えられる。一方、H<sub>2</sub>O に関してはテラス上に吸着してもその脱離エネルギーは小さいため、容易に脱離すると考えられる。

次に(000-1)面では脱離エネルギーは O 原子(N 欠陥) > O 原子 > OH の順に大きいことから、結晶最表面の N と O が置換して取り込まれる置換型の O 欠陥が起こりやすいと考えられる。一方で、O はテラス最表面の N 上には吸着せず、キंकやステップ端の Ga と結合した。OH はステップに吸着する場合は吸着位置によってエネルギーのばらつきが大きいが、全体的に脱離エネルギーが小さいため、脱離が起こり得ると考えられる。

以上の結果から、O 不純物は脱離エネルギーが全体的に大きく、結晶表面から脱離させることは難しいと考えられる。実験的には H<sub>2</sub> ガスの供給量を増やすことで結晶中の O 不純物量を減少させることが出来ると報告されている[Y. Bu et al., J. Cryst. Growth 392, 1 (2014).]。H<sub>2</sub> ガスとの反応で O と OH を H<sub>2</sub>O に還元することで O 不純物を除去しやすくなると推測されているが、今回の原子スケールシミュレーションによってそれを裏付ける結果が得られた。

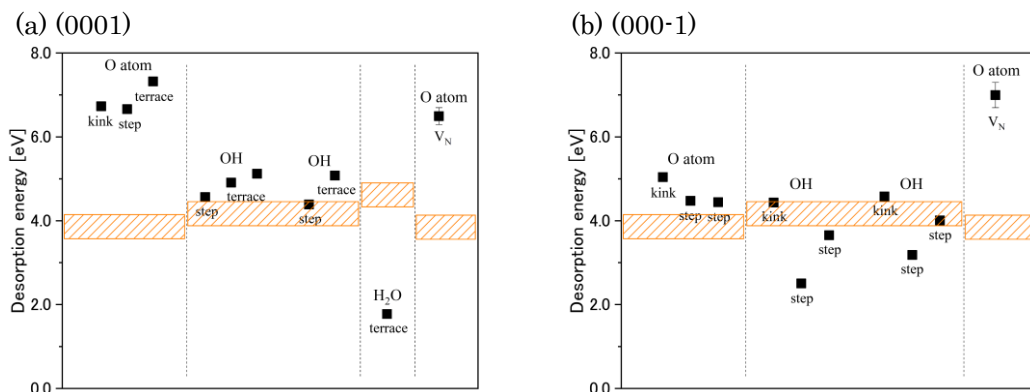


図 4 O 不純物の脱離エネルギー : (a) (0001)面と(b) (000-1)面。オレンジの斜線部分は 1500K、ガス分圧 10<sup>-5</sup>–10<sup>-3</sup> atm の範囲における O、OH、H<sub>2</sub>O のケミカルポテンシャル。

## (2) OVPE 法による GaN 成長における表面再構成とその面方位依存性に関する解析

図 5 に GaN の理想表面の表面エネルギーの絶対値と Ga ケミカルポテンシャルの関係を示す。横軸の  $\Delta\mu_{Ga}$  はバルク Ga 結晶におけるケミカルポテンシャルを基準とした Ga ケミカルポテンシャルのエネルギー変化を示しており、グラフの右側に行くほど Ga-rich (N-poor) 条件、左側に行くほど Ga-poor (N-rich) 条件であることを意味し、Ga ガス分圧に対応するパラメータと言える。半極性面の値については「~」記号の有無で 2 種類存在するが、これは表面エネルギーの絶対値を計算する際に 2 種類の表面構造を計算する必要があるためである。表面生成エネルギーの絶対値を評価する際には「~」記号の付いている方の値を用いた。

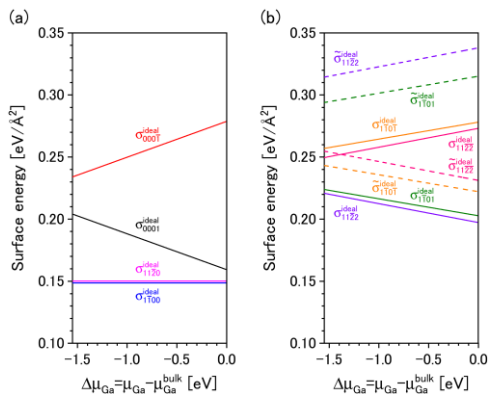


図 5 GaN の表面エネルギーの絶対値: (a) 極性面と無極性面、(b)半極性面。横軸は Ga ケミカルポテンシャル。

表面生成エネルギーの値[若手研究 B(No.15K17459); T. Kawamura et al., Jpn. J. Appl. Phys. 57, 115504 (2018)]と上記の理想表面エネルギーの絶対値を組み合わせ、表面生成エネルギーの絶対値を求め、各面方位の値を比較したグラフを図6に示す。図6aと6bはそれぞれO不純物を考慮しない場合と考慮した場合の結果である。なお、Gaケミカルポテンシャル以外の条件として、温度は1500 K、H<sub>2</sub>ガス分圧は0.1 atm、Oのケミカルポテンシャル $\mu_O$ は $\mu_{Ga_2O_3}^{bulk} = 2\mu_{Ga} + 3\mu_O$ の平衡条件を満たす値を用いた。ここで、 $\mu_{Ga_2O_3}^{bulk}$ はバルクGa<sub>2</sub>O<sub>3</sub>のケミカルポテンシャルである。OVPE法における一般的なGaN成長はGa分圧が10<sup>-5</sup>–10<sup>-3</sup> atmの範囲で行われるので、その範囲の表面生成エネルギーについて考察する。

表面エネルギーの大きさを比較すると、O不純物を考慮するかしないかに関わらず、(000-1) < (1-101) < (1-100) < (11-20) < (0001) < (1-10-1)の順になった。表面エネルギーが小さい方が安定であるため、(000-1)面が最も安定であることが分かる。この結果は[000-1]軸方向に成長させると、(000-1)面と(1-101)面のファセットが現れる実験結果[Y. Taniyama et al., Jpn. J. Appl. Phys. 55, 05FA11 (2016)]と一致する。一般的に[0001]軸方向に成長させることが多いので、その場合は(1-101)面のファセットが最も現れやすくなる。O不純物を考慮した場合の結果(図6b)を見ると、Gaケミカルポテンシャルが大きくなるにしたがって、(1-101)面の表面エネルギーが小さくなっていることが分かる。その時の(1-101)面の表面構造は図7に示すように表面にH原子とO原子が吸着している(4V<sub>N</sub>+3N-H+O構造)。この表面構造がより安定なるということは、O不純物がより結晶に取り込まれやすくなることを示唆している。実験ではGa分圧を大きくすると(1-101)面ファセットを含むラフな表面が現れやすくなり、結晶が黄や黒に着色することが知られている。この着色の原因にはGaの点欠陥や、そこにHやO不純物が組み合わさった複合欠陥が考えられている。したがって、OVPE成長条件下ではGa分圧が増加するにしたがってO不純物を取り込みやすい(1-101)表面構造が現れやすくなるため結晶に取り込まれるO不純物量が増加し、それが結晶の着色を引き起こすと考えられる。

結晶径を大きくするためには最も安定な(000-1)面が成長表面になる方向に成長させることが望ましいが、図6bを見ると(000-1)面はV<sub>N</sub>+O+2H表面構造(最表面のNがOに置換した欠陥を含む。図8参照)が安定であることが分かる。O不純物の脱離エネルギーの結果(図5b)において説明したように、(000-1)面上のN欠陥に取り込まれたO原子の脱離エネルギーは大きいいため脱離は起こりにくい。そのため、他の面方位と比べて(000-1)面のO不純物量は最も多くなると考えられる。以上の考察から、(000-1)面成長では結晶径の増大が期待できる一方で、O不純物の取り込み量が多くなると考えられる。

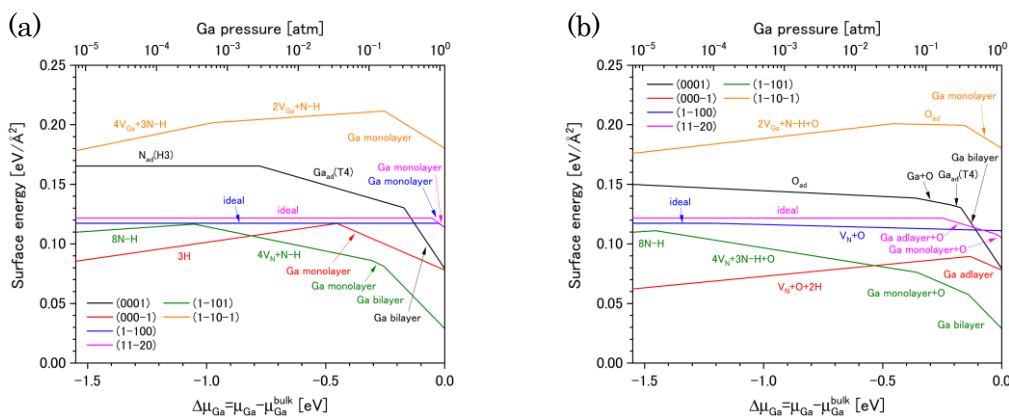


図6 GaNの表面エネルギーの絶対値: (a) 極性面と無極性面、(b)半極性面。横軸はGaケミカルポテンシャル。温度は1500 K、H<sub>2</sub>ガス分圧は0.1 atmで一定。

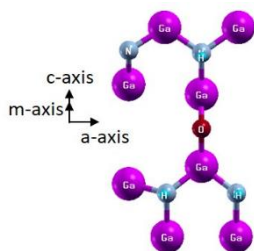


図7 (1-101)面上の4V<sub>N</sub>+3N-H+O表面構造



図8 (000-1)面上のV<sub>N</sub>+O+2H表面構造

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計3件（うち査読付論文 3件／うち国際共著 0件／うちオープンアクセス 1件）

|   |                          |
|---|--------------------------|
| 1. 著者名<br>Takahiro Kawamura, Masayuki Imanishi, Masashi Yoshimura, Yusuke Mori, and Yoshitada Morikawa        | 4. 巻<br>194              |
| 2. 論文標題<br>Activation free energies for formation and dissociation of N-N, C-C, and C-H bonds in a Na-Ga melt | 5. 発行年<br>2021年          |
| 3. 雑誌名<br>Computational Materials Science   | 6. 最初と最後の頁<br>110366-1-9 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子）<br>10.1016/j.commatsci.2021.110366  | 査読の有無<br>有               |
| オープンアクセス<br>オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難  | 国際共著<br>-                |

|  |                          |
|--|--------------------------|
| 1. 著者名<br>Takahiro Kawamura, Toru Akiyama, Akira Kitakoto, Masayuki Imanishi, Masashi Yoshimura, Yusuke Mori, Yoshitada Morikawa, Yoshihiro Kangawa, and Koichi Kakimoto | 4. 巻<br>549              |
| 2. 論文標題<br>Absolute surface energies of oxygen-adsorbed GaN surfaces   | 5. 発行年<br>2020年          |
| 3. 雑誌名<br>Journal of Crystal Growth  | 6. 最初と最後の頁<br>125868-1-7 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子）<br>10.1016/j.jcrysgro.2020.125868  | 査読の有無<br>有               |
| オープンアクセス<br>オープンアクセスとしている（また、その予定である）  | 国際共著<br>-                |

|   |                               |
|---|-------------------------------|
| 1. 著者名<br>Kawamura Takahiro, Kitamoto Akira, Imade Mamoru, Yoshimura Masashi, Mori Yusuke, Morikawa Yoshitada, Kangawa Yoshihiro, Kakimoto Koichi, Akiyama Toru | 4. 巻<br>57                    |
| 2. 論文標題<br>First-principles study of polar, nonpolar, and semipolar GaN surfaces during oxide vapor phase epitaxy growth  | 5. 発行年<br>2018年               |
| 3. 雑誌名<br>Japanese Journal of Applied Physics   | 6. 最初と最後の頁<br>115504 ~ 115504 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子）<br>10.7567/JJAP.57.115504   | 査読の有無<br>有                    |
| オープンアクセス<br>オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難  | 国際共著<br>-                     |

〔学会発表〕 計10件（うち招待講演 1件／うち国際学会 4件）

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Satoshi Ohata, Takahiro Kawamura, Akira Kitamoto, Masayuki Imanishi, Masashi Yoshimura, Yusuke Mori |
| 2. 発表標題<br>First-Principles Calculation of Electronic Structure of GaN with Point and Complex Defects          |
| 3. 学会等名<br>The 8th Asian Conference on Crystal Growth and Crystal Technology（国際学会）                             |
| 4. 発表年<br>2021年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>河村貴宏, 村田拓郎, 今西正幸, 吉村政志, 森勇介, 森川良忠        |
| 2. 発表標題<br>NaフラックスGaN成長における融液中のNとC原子に関する結合状態の第一原理計算 |
| 3. 学会等名<br>第48回結晶成長国内会議                             |
| 4. 発表年<br>2019年                                     |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>河村貴宏, 今西正幸, 吉村政志, 森勇介, 森川良忠                |
| 2. 発表標題<br>第一原理計算によるNa-Ga 融液中のN-N, C-C およびC-H 結合状態の解析 |
| 3. 学会等名<br>第80回応用物理学会秋季学術講演会                          |
| 4. 発表年<br>2019年                                       |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>河村貴宏, 北本啓, 今西正幸, 吉村政志, 森勇介, 森川良忠, 寒川義裕, 柿本浩一 |
| 2. 発表標題<br>酸素不純物を考慮したGaN表面エネルギーの面方位依存性                  |
| 3. 学会等名<br>第11回ナノ構造・エピタキシャル成長講演会                        |
| 4. 発表年<br>2019年   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Takahiro Kawamura, Akira Kitamoto, Masayuki Imanishi, Masashi Yoshimura, Yusuke Mori, Yoshitada Morikawa, Yoshihiro Kangawa, and Koichi Kakimoto |
| 2. 発表標題<br>First-principles calculation of absolute surface energies of GaN during oxide vapor phase epitaxy growth   |
| 3. 学会等名<br>19th International Conference on Crystal Growth and Epitaxy (国際学会)   |
| 4. 発表年<br>2019年   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>河村貴宏、竹田浩基、北本啓、今西正幸、吉村政志、森勇介、森川良忠、寒川義裕、柿本浩一 |
| 2. 発表標題<br>キンクおよびステップ構造を持つGaN極性表面におけるO不純物の脱離エネルギーの解析  |
| 3. 学会等名<br>第66回応用物理学会春季学術講演会                          |
| 4. 発表年<br>2019年                                       |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Hiroyuki Takeda, Takahiro Kawamura, Akira Kitamoto, Masayuki Imanishi, Masashi Yoshimura, Yusuke Mori, Yoshitada Morikawa, Yoshihiro Kangawa, and Koichi Kakimoto |
| 2. 発表標題<br>First-principles analysis of oxygen adsorption on kinked GaN(0001) surface  |
| 3. 学会等名<br>The International Workshop on Nitride Semiconductors 2018 (国際学会)  |
| 4. 発表年<br>2018年  |

|                                   |
|-----------------------------------|
| 1. 発表者名<br>河村貴宏                   |
| 2. 発表標題<br>第一原理計算によるGaN結晶成長に関する研究 |
| 3. 学会等名<br>第47回結晶成長国内会議 (招待講演)    |
| 4. 発表年<br>2018年                   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>竹田浩基、河村貴宏、鈴木泰之、北本啓、今西正幸、吉村政志、森勇介、森川良忠、寒川義裕、柿本浩一 |
| 2. 発表標題<br>OVPE成長条件下におけるGaN(0001)面のkink表面構造の解析             |
| 3. 学会等名<br>第10回ナノ構造・エピタキシャル成長講演会                           |
| 4. 発表年<br>2018年  |



|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Takahiro Kawamura, Akira Kitamoto, Mamoru Imade, Masashi Yoshimura, Yusuke Mori, Yoshitada Morikawa, Yoshihiro Kangawa, and Koichi Kakimoto |
| 2. 発表標題<br>First-Principles Calculations of GaN Surface Structures under OVPE Growth Conditions and Desorption Energies of Oxygen Impurities           |
| 3. 学会等名<br>19th International Conference on Metalorganic Vapor Phase Epitaxy (国際学会)  |
| 4. 発表年<br>2018年  |

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

|  |
|--|
| 三重大学大学院工学研究科機械工学専攻<br>量子応用工学研究室<br><a href="https://www.qm.mach.mie-u.ac.jp/research2.html">https://www.qm.mach.mie-u.ac.jp/research2.html</a> |
|--|

6. 研究組織

|       | 氏名<br>(ローマ字氏名)<br>(研究者番号)         | 所属研究機関・部局・職<br>(機関番号)            | 備考 |
|-------|-----------------------------------|----------------------------------|----|
| 研究協力者 | 森川 良忠<br><br>(Morikawa Yoshitada) | 大阪大学・工学研究科・教授<br><br>(14401)     |    |
| 研究協力者 | 森 勇介<br><br>(Mori Yusuke)         | 大阪大学・工学研究科・教授<br><br>(14401)     |    |
| 研究協力者 | 吉村 政志<br><br>(Yoshimura Masashi)  | 大阪大学・レーザー科学研究所・教授<br><br>(14401) |    |

6. 研究組織（つづき）

|       | 氏名<br>(ローマ字氏名)<br>(研究者番号)        | 所属研究機関・部局・職<br>(機関番号)          | 備考 |
|-------|----------------------------------|--------------------------------|----|
| 研究協力者 | 今西 正幸<br><br>(Imanishi Masayuki) | 大阪大学・工学研究科・准教授<br><br>(14401)  |    |
| 研究協力者 | 柿本 浩一<br><br>(Kakimoto Koichi)   | 九州大学・応用力学研究所・教授<br><br>(17102) |    |
| 研究協力者 | 寒川 義裕<br><br>(Kangawa Yoshihiro) | 九州大学・応用力学研究所・教授<br><br>(17102) |    |
| 研究協力者 | 秋山 亨<br><br>(Akiyama Toru)       | 三重大学・工学研究科・准教授<br><br>(14101)  |    |

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

| 共同研究相手国 | 相手方研究機関 |
|---------|---------|
|         |         |