

令和 3 年 6 月 22 日現在

機関番号：14101

研究種目：新学術領域研究（研究領域提案型）

研究期間：2016～2020

課題番号：16H06418

研究課題名（和文）計算科学によるヘテロボンドの理論的材料設計

研究課題名（英文）Computational materials design for hetero-bond manipulation

研究代表者

伊藤 智徳 (ITO, Tomonori)

三重大学・工学研究科・招へい教授

研究者番号：80314136

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 54,600,000円

研究成果の概要（和文）：格子欠陥、表面・界面、ナノ構造を“特異構造”として統一的に位置づけ、表面・界面を“場”として形成される“特異構造”に至る一連の過程を計算科学の立場から理論的に検討した。特異構造を包括的に取り扱うために、温度、圧力を考慮した量子論的アプローチを基盤として、各種計算手法を独自開発した。これら計算手法を窒化物半導体を中心とした化合物半導体に適用し、現実の成長条件を反映した表面構造、不純物原子取り込み、極性反転、原子層薄膜形成、量子ドット形成、ナノワイヤ形状等について特異構造物性も含めて検討を行った。得られた知見から支配因子を抽出することで特異構造創成指針を明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

半導体は、情報・環境分野における次世代デバイス開発においても重要な役割を果たすことが期待されている。この半導体がデバイス（例えばトランジスタやLED）として機能するためには不完全性である欠陥の制御が不可欠である。本研究では、さまざまな欠陥を“特異構造”として統一的に位置づけ、特異構造を特徴づける“ヘテロボンド”に注目して、表面・界面を“場”として形成される“特異構造”に至る一連の過程を包括的に検討した。得られた成果に基づいて、現実の成長条件下での特異構造の創成指針さらには新奇物性発現の可能性を明らかにした。

研究成果の概要（英文）：Singularity structures including various lattice defects and nano-structures are systematically investigated from the computational materials science viewpoints. To this end, many computational methods are newly developed in addition to the ab initio-based approach incorporating growth conditions such as temperature and beam-equivalent pressure. Using these computational methods, singularity structure formation and its properties, such as surface reconstruction, dislocation, impurity, polarity, nanowire, quantum dot, and two-dimensional materials for compound semiconductors (mainly III-N compounds), are successfully clarified under the realistic growth conditions. On the basis of the results obtained in this study, crucial factors for the singularity structure formation are discussed to propose guiding principles for realizing them.

研究分野：結晶工学

キーワード：計算科学 特異構造 窒化物半導体 ナノ構造

## 様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

半導体中の不純物原子、転位、積層欠陥を始めとする格子欠陥は、半導体の材料物性、デバイス特性に大きな影響を及ぼすため、広義の欠陥と位置づけられる表面、ヘテロ界面も含めて多くの理論、実験研究の対象とされてきた。さらに、エピタキシャル成長により形成される、量子ドット、ナノワイヤに代表されるナノ構造も、その応用可能性への期待から多くの研究が行われている。しかしながら従来の研究においては、それぞれの欠陥、ナノ構造を個別に対象とすることが一般的であり、とりわけ表面・界面が重要な役割を果たすエピタキシャル成長における、表面・界面と格子欠陥あるいはナノ構造の形成といった一連の過程を包括的に取り扱う研究は極めて少ない。これは、現実のエピタキシャル成長条件下での表面・界面に関わる基礎的な知見の不足に起因するところが大きい。

### 2. 研究の目的

欠陥およびナノ構造を“特異構造”として統一的に位置づけ、特異構造を特徴づける“ヘテロボンド”に注目して、表面・界面を“場”として形成される“特異構造”に至る一連の過程を包括的に検討する。このために計算科学手法を用いて、表面・界面を予測、現実の成長条件下での特異構造の創成指針さらには新奇物性発現の可能性を明らかにする。

### 3. 研究の方法

量子論的アプローチに加えて、特異構造を包括的に取り扱うための独自計算手法を開発、導入する。これに基づきⅢ族窒化物を中心に、現実の成長条件に即した表面構造、不純物原子取り込み、極性反転、ナノワイヤ形状、原子層構造、自然超格子、量子ドット形成等について物性も含めて検討する。得られた知見から支配因子を抽出することで特異構造創成指針を明らかにする。

### 4. 研究成果

(1) 独自計算手法の開発/導入：特異構造形成の“場”としての表面構造状態図予測のための成長条件（温度、圧力）を考慮した「量子論的アプローチ」、特異構造形成におけるナノ視点とマクロ視点を融合するための「成長様式エネルギーマクロ理論」、界面エネルギー厳密評価のための「表面・界面エネルギー理論」、原子層物質安定性検討を可能にする「原子間ポテンシャル表式」等の独自計算手法を新たに開発/導入した。

(2) 極性反転機構の解明：「表面・界面エネルギー理論」を AlN/SiC (0001) 界面、GaN/ZnO (0001) 界面へと適用し、界面エネルギーにより界面での原子配列および安定構造を決定し、実験結果との比較からその妥当性を検証した。さらに (1-101) 面および (11-22) 面等の半極性面を扱うための手法の拡張を行い、有機金属気相成長条件下での AlN 半極性面および AlN 極性反転型欠陥における原子配列および安定構造の解明に適用した。これらの結果に基づき、AlN 基板上での極性反転および酸素起因極性反転へと適用して、その物理的起源を明らかにした。また、図 1 に示すような温度および圧力の関数として安定な表面および界面構造を表した状態図を作成することにより、実験結果と計算結果を直接的に比較することに成功した。

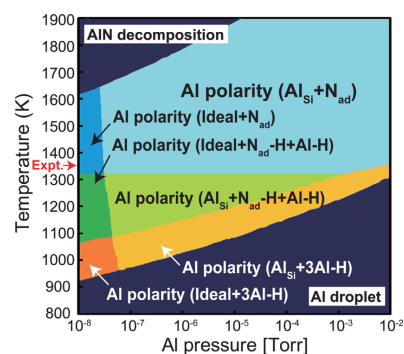


図 1 表面・界面構造状態図

(3) ナノワイヤ形成過程の解明：特異構造としてナノワイヤを取り上げ、「量子論的アプローチ」を中心手法として GaN における有機金属エピタキシャル成長の気相からの原子および分子の表面への吸着および脱離過程、これら原子および分子の表面での（マイグレーション等の）挙動を明らかにした。図 2 に示すような異なる面方位からなる表面（複合ファセット）において有機金属気相成長（MOVPE）でのキャリアガス依存性に対する検討を行い、成長温度および圧力に依存性して変化する表面構造に起因して、これらの挙動が大きく変化、その結果としてナノワイヤの成長様式が大きく変化することを見出した。さらに同様のアプローチをステップに適用、キャリアガスに依存した表面モルフォロジーの変化が、ステップ端でのマイグレーション障壁の非対称性（シュエーベル障壁）に起因することを明らかにした。

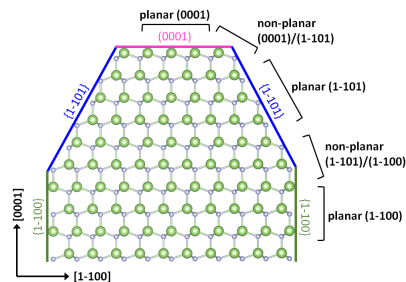


図 2 複合ファセットの模式図

(4) 自然超格子形成機構の解明：微傾斜 GaN(1-100) 基板上の AlInN エピタキシャル成長において実験的に見いだされている、 $\langle 1-100 \rangle$  および  $\langle 0001 \rangle$  に Al 過剰な原子面と In 過剰な原子面が交互に積層した自然超格子構造を対象に、その形成機構について検討を行った。 $[0001]$  に微傾斜した GaN(1-100) 基板上のステップ端には、下地のアニオン (N) と 2 本の結合を有するカチオンサ

イト (A サイト) と 1 本の結合を有するカチオンサイト (B サイト) の 2 種類のサイトが、1 分子層 (ML) ステップの上方と下方に分かれて存在している。Al-N 結合の方が In-N 結合よりも結合エネルギーが大きいことから、前者が A サイトを、後者が B サイトを占有した方が系のエネルギーが低下する。1ML ステップ端において Al と In が上下のサイトを優先的に占有しながらステップフロー成長が進行することで、自然超格子が形成されることを見いだした (図 3)。さらに AlInN におけるバンドギャップの組成および基板格子定数との相関を明らかにした。

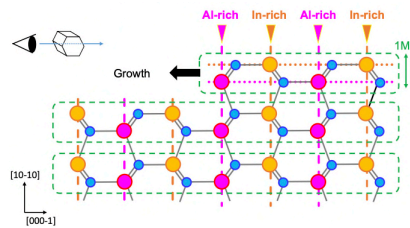


図 3 自然超格子形成機構の模式図

(5) 表面反応過程の解明: GaN の有機金属気相成長 (MOVPE) における表面反応過程を、新たに「非平衡量子熱力学 (SEAQT)」を適用することで解明した。GaN MOVPE では分解速度の遅い  $\text{NH}_3$  原料ガスは未分解 (非平衡) の状態で成長表面に到達することが知られている。従来の熱力学解析では成長表面近傍における  $\text{NH}_3$  分解率を仮定して平衡論の枠組みでその吸着確率 (空間・時間平均) を解析していた。そこで非平衡過程を扱う SEAQT 法を結晶成長プロセスの解析に適用し、GaN 成長表面における  $\text{NH}_3$  吸着確率の時間発展を明らかにするとともに、 $\text{Ga}(\text{CH}_3)_3$  原料ガスから分解生成された  $\text{CH}_4$  の吸着確率の時間発展 (図 4) についても解明し、炭素混入量の制御に資する重要な知見を得た。

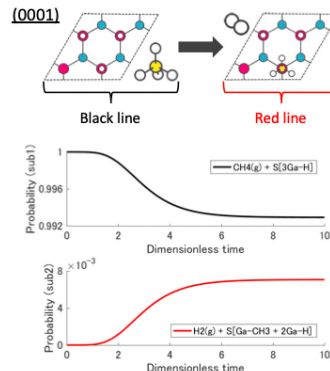


図 4  $\text{CH}_4$  吸着確率の時間発展

(6) 正孔濃度制御指針の提案: 室温発振に成功している UVB (ultraviolet-B) レーザー構造における、組成傾斜 AlGaIn 分極ドープ層での正孔濃度増大に向けた指針について検討した。組成傾斜 AlGaIn 層に Mg アクセプタを添加する場合、意図せぬ酸素混入により補償効果が生じる可能性がある。窒化マグネシウムの析出が生じない低濃度 Mg ドープの条件では、成長表面下において Mg-O 複合欠陥が形成される結果、酸素混入量の増加、すなわち補償効果が生じる可能性を見いだした。一方、 $2\text{Mg-O}$ 、 $3\text{Mg-O}$  複合欠陥は浅いアクセプタ準位を形成するとの報告があることから、正孔濃度の制御には Mg 濃度の制御 (Mg/O 比の制御) が重要であることを明らかにした。

(7) 新奇原子層物質の提案: 特異構造として原子層物質を取り上げ、III 族窒化物についてグラファイト状原子層物質の安定性を検討した。その結果、原子層物質はグラファイトとは異なり、原子層間で化学結合する構造 (Hex 構造) となっていること、一定原子層厚以下で安定となることを見いだした。この知見に基づき「原子間ポテンシャル表式」を用いた数万原子からなる系の大規模計算から、AlIn および BGaN 等の混晶原子層物質の安定性、混和性へと展開した。さらに 16 種類の IV-IV 族、III-V 族、II-VI 族化合物について検討を行い、特に原子層厚が小さい場合に 2 層ハニカム (DLHC) 構造が新奇原子層構造として出現し得ることを明らかにした。またグラフェン/III-V 族 DLHC 超格子について、グラフェンと同等の安定性をもつこと、超格子形成に伴う対称性低下が、グラフェンで見られるディラックコーンの消失、エネルギーギャップの出現をもたらすことを見いだした (図 5)。

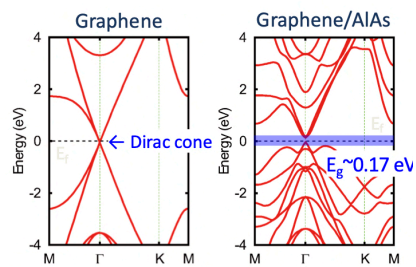


図 5 超格子によるバンド構造変化

(8) 量子ドット創成指針の提案: 特異構造として量子ドットを取り上げ、表面 (再構成)・界面 (転位) と量子ドット形成の関連を明らかにした。図 6 に「成長様式エネルギーマクロ理論」から導いたヘテロエピタキシャル成長様式境界の模式図を示す ( $\gamma$  は表面エネルギー、 $\beta$  は量子ドット形成によるエネルギー増分)。図中の曲線は量子ドット安定領域 (3D) と界面転位安定領域 (2D) との境界を表す。2D 領域に位置する ( $\gamma_0, \beta_0$ ) で指定される状態を考えると、量子ドット形成のためには矢印 [(A) 3D 領域の拡大、(B)  $\gamma_0$  の減少、(C)  $\beta_0$  の減少] で示す 3 つの方策が考えられる。成長条件下でのエネルギー計算から、(A) 3D 領域の拡大には、格子不整合度の増大、表面原子の自由度が制限される表面再構成構造の選択、(B)  $\gamma_0$  の減少には界面ひずみ緩和層の導入、(C)  $\beta_0$  の減少には成長雰囲気を選択、がそれぞれ有効であることを明らかにした。

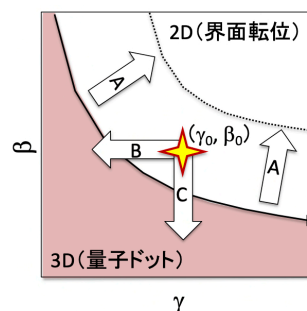


図 6 成長様式境界の模式図

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計63件（うち査読付論文 62件 / うち国際共著 11件 / うちオープンアクセス 6件）

1. 著者名 Ohka Takumi, Akiyama Toru, Pradipto Abdul Muizz, Nakamura Kohji, Ito Tomonori	4. 巻 20
2. 論文標題 Effect of Step Edges on Adsorption Behavior for GaN(0001) Surfaces during Metalorganic Vapor Phase Epitaxy: An Ab Initio Study	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Crystal Growth & Design	6. 最初と最後の頁 4358 ~ 4365
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.cgd.0c00117	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -
1. 著者名 Seta Yuki, Akiyama Toru, Pradipto Abdul Muizz, Nakamura Kohji, Ito Tomonori	4. 巻 13
2. 論文標題 Roles of growth kinetics on GaN non-planar facets under metalorganic vapor phase epitaxy condition	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 065505 ~ 065505
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1882-0786/ab9182	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -
1. 著者名 Kawamura Takahiro, Akiyama Toru, Kitamoto Akira, Imanishi Masayuki, Yoshimura Masashi, Mori Yusuke, Morikawa Yoshitada, Kangawa Yoshihiro, Kakimoto Koichi	4. 巻 549
2. 論文標題 Absolute surface energies of oxygen-adsorbed GaN surfaces	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Crystal Growth	6. 最初と最後の頁 125868 ~ 125868
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jcrysgro.2020.125868	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -
1. 著者名 Shintaku Fumiya, Yoshio Daichi, Kangawa Yoshihiro, Iwata Jun-Ichi, Oshiyama Atsushi, Shiraishi Kenji, Tanaka Atsushi, Amano Hiroshi	4. 巻 13
2. 論文標題 Computational study of oxygen stability in vicinal m(10-10)-GaN growth by MOVPE	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 055507 ~ 055507
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1882-0786/ab8723	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -

1. 著者名 Akiyama Toru, Kawamura Takahiro, Ito Tomonori	4. 巻 118
2. 論文標題 Computational discovery of stable phases of graphene and h-BN van der Waals heterostructures composed of group III-V binary compounds	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Applied Physics Letters	6. 最初と最後の頁 023101 ~ 023101
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0032452	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -

1. 著者名 Kangawa Yoshihiro, Kusaba Akira, Kempisty Pawel, Shiraishi Kenji, Nitta Shugo, Amano Hiroshi	4. 巻 21
2. 論文標題 Progress in Modeling Compound Semiconductor Epitaxy: Unintentional Doping in GaN MOVPE	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Crystal Growth & Design	6. 最初と最後の頁 1878 ~ 1890
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.cgd.0c01564	査読の有無 有
オープンアクセス 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 該当する

1. 著者名 Kempisty Pawel, Kangawa Yoshihiro	4. 巻 100
2. 論文標題 Evolution of the free energy of the GaN(0001) surface based on first-principles phonon calculations	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 085304-1 ~ 12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.100.085304	査読の有無 有
オープンアクセス 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 該当する

1. 著者名 Kusaba Akira, Li Guanchen, Kempisty Pawel, von Spakovsky Michael, Kangawa Yoshihiro	4. 巻 12
2. 論文標題 CH4 Adsorption Probability on GaN(0001) and (000-1) during Metalorganic Vapor Phase Epitaxy and Its Relationship to Carbon Contamination in the Films	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Materials	6. 最初と最後の頁 972-1 ~ 14
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/ma12060972	査読の有無 有
オープンアクセス 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 該当する

1. 著者名 Inatomi Y., Kangawa Y., Pimpinelli A., Einstein T. L.	4. 巻 3
2. 論文標題 Kinetic-thermodynamic model for carbon incorporation during step-flow growth of GaN by metalorganic vapor phase epitaxy	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 013401-1~8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.3.013401	査読の有無 有
オープンアクセス 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 該当する

1. 著者名 Akiyama Toru, Nakamura Kohji, Ito Tomonori	4. 巻 30
2. 論文標題 Effects of surface and twinning energies on twinning-superlattice formation in group III-V semiconductor nanowires: a first-principles study	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Nanotechnology	6. 最初と最後の頁 234001-1~7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-6528/ab06d0	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -

1. 著者名 Akiyama Toru, Tsuboi Yuma, Nakamura Kohji, Ito Tomonori	4. 巻 511
2. 論文標題 An ab initio study for the formation of two-dimensional III-nitride compound ultrathin films: Effects of Ag(1 1 1) substrate	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Crystal Growth	6. 最初と最後の頁 89~92
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jcrysgro.2019.01.036	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -

1. 著者名 Ito Tomonori, Akiyama Toru, Nakamura Kohji	4. 巻 512
2. 論文標題 Growth mode in heteroepitaxial system from nano- and macro-theoretical viewpoints	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Crystal Growth	6. 最初と最後の頁 41~46
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jcrysgro.2019.01.028	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -

1. 著者名 Akiyama Toru, Seta Yuki, Nakamura Kohji, Ito Tomonori	4. 巻 3
2. 論文標題 Modified approach for calculating individual energies of polar and semipolar surfaces of group-III nitrides	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 023401-1 ~ 10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.3.023401	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -

1. 著者名 Seta Yuki, Akiyama Toru, Pradipto Abdul Muizz, Nakamura Kohji, Ito Tomonori	4. 巻 510
2. 論文標題 Absolute surface energies of semipolar planes of AlN during metalorganic vapor phase epitaxy growth	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Crystal Growth	6. 最初と最後の頁 7 ~ 12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jcrysgro.2018.12.011	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -

1. 著者名 Uchino Motoshi, Akiyama Toru, Nakamura Kohji, Ito Tomonori	4. 巻 57
2. 論文標題 An ab initio approach to polarity inversion of AlN and GaN films on AlN(000-1) substrate with Al overlayers: an insight from interface energies	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 098001 ~ 098001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/JJAP.57.098001	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -

1. 著者名 Akiyama Toru, Nakamura Kohji, Ito Tomonori	4. 巻 11
2. 論文標題 Effects of lattice constraint on structures and electronic properties of BAlN and BGaN alloys: A first-principles study	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 025501 ~ 025501
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/apex.11.025501	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -

1. 著者名 Kempisty Pawel, Kangawa Yoshihiro, Kusaba Akira, Shiraishi Kenji, Krukowski Stanislaw, Bockowski Michal, Kakimoto Koichi, Amano Hiroshi	4. 巻 111
2. 論文標題 DFT modeling of carbon incorporation in GaN(0001) and GaN(000-1) metalorganic vapor phase epitaxy	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Applied Physics Letters	6. 最初と最後の頁 141602 ~ 141602
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.4991608	査読の有無 有
オープンアクセス 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 該当する

1. 著者名 Kusaba Akira, Li Guanchen, von Spakovsky Michael, Kangawa Yoshihiro, Kakimoto Koichi	4. 巻 10
2. 論文標題 Modeling the Non-Equilibrium Process of the Chemical Adsorption of Ammonia on GaN(0001) Reconstructed Surfaces Based on Steepest-Entropy-Ascent Quantum Thermodynamics	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Materials	6. 最初と最後の頁 948 ~ 948
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/ma10080948	査読の有無 有
オープンアクセス 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 該当する

1. 著者名 Ito Tomonori, Akiyama Toru, Nakamura Kohji	4. 巻 477
2. 論文標題 Ab initio-based approach to novel behavior in semiconductor hetero-epitaxial growth	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of Crystal Growth	6. 最初と最後の頁 12 ~ 18
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jcrysgro.2017.03.010	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -

1. 著者名 Kusaba Akira, Kangawa Yoshihiro, Kempisty Pawel, Valencia Hubert, Shiraishi Kenji, Kumagai Yoshinao, Kakimoto Koichi, Koukitu Akinori	4. 巻 56
2. 論文標題 Thermodynamic analysis of (0001) and (000-1) GaN metalorganic vapor phase epitaxy	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 070304 ~ 070304
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/jjap.56.070304	査読の有無 有
オープンアクセス 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 該当する



1. 著者名 A. Kusaba, Y. Kangawa, P. Kempisty, K. Shiraishi, K. Kakimoto, A. Koukitu	4. 巻 9
2. 論文標題 Advances in modeling semiconductor epitaxy: Contributions of growth orientation and surface reconstruction to InN metalorganic vapor phase epitaxy	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 125601-1-4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/APEX.9.125601	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -

1. 著者名 T. Akiyama, H. Nakane, K. Nakamura, and T. Ito	4. 巻 94
2. 論文標題 Effective approach for accurately calculating individual energy for polar heterojunction interfaces	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 115302-1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.94.115302	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -

1. 著者名 T. Ito and T. Akiyama	4. 巻 7
2. 論文標題 Recent Progress in Computational Materials Science for Semiconductor Epitaxial Growth	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Crystals	6. 最初と最後の頁 46-1-38
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/cryst7020046	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -

1. 著者名 Y. Inatomi, Y. Kangawa, K. Kakimoto, A. Koukitu	4. 巻 56
2. 論文標題 Improved thermodynamic analysis of gas reactions for compound semiconductor growth by vapor-phase epitaxy	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 038002-1-3
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/JJAP.56.038002	査読の有無 有
オープンアクセス 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 -

[学会発表] 計230件(うち招待講演 44件/うち国際学会 132件)

1. 発表者名 Paweł Kempisty, Konrad Sakowski, Akira Kusaba, and Yoshihiro Kangawa
2. 発表標題 Quantitative compatibility of ab initio thermodynamics with real growth processes of III nitrides semiconductors
3. 学会等名 The 8th Asian Conference on Crystal Growth and Crystal Technology (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Akira Kusaba, Yoshihiro Kangawa
2. 発表標題 More quantitative prediction of III-nitride growth: theoretical and data-driven approaches
3. 学会等名 International Symposium on Wide Gap Semiconductor Growth, Process and Device Simulation 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Toru Akiyama, Yuki Seta, Takumi Ohka, Tomonori Ito
2. 発表標題 Recent progress in computational materials science for III-nitride epitaxial growth: effects of growth kinetics on surface morphologies and nanostructures
3. 学会等名 International Symposium on Wide Gap Semiconductor Growth, Process and Device Simulation 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yoshihiro Kangawa
2. 発表標題 Impurity incorporation mechanism in GaN MOVPE: ab initio-based approach
3. 学会等名 SPIE Photonic West OPTO (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 寒川義裕
2. 発表標題 窒化物半導体成長プロセスの理論解析：不純物混入機構
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 寒川義裕
2. 発表標題 不純物混入と深紫外デバイス特性の相関
3. 学会等名 2020年第81回応用物理学会秋季学術講演会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 伊藤智徳
2. 発表標題 表面・界面制御による特異構造創成
3. 学会等名 2021年第68回応用物理学会春季学術講演会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yoshihiro Kangawa, Pawel, Kempisty, and Kenji Shiraishi
2. 発表標題 A new theoretical approach to nitride crystal growth: impurity incorporation mechanism
3. 学会等名 13th International Conference on Nitride Semiconductors（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yoshihiro Kangawa
2. 発表標題 Unintentional doping in GaN MOVPE: A new theoretical model
3. 学会等名 1st International Workshop on AlGaN based UV-Laserdiodes (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tomonori Ito
2. 発表標題 Computational materials science for nitride semiconductor epitaxial growth
3. 学会等名 8th International Symposium on Control of Semiconductor Interfaces (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 伊藤智徳
2. 発表標題 計算材料科学で識る窒化物半導体のナノ構造・エピタキシャル成長
3. 学会等名 第48回結晶成長国内会議 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 寒川義裕
2. 発表標題 未来材料開拓に向けた相界面制御
3. 学会等名 第48回結晶成長国内会議 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 秋山亨, 中村浩次, 伊藤智徳
2. 発表標題 族室化物における表面・界面構造の理論解析
3. 学会等名 第47 回結晶成長国内会議 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 寒川義裕
2. 発表標題 GaN MOVPEにおける炭素取込み機構の考察
3. 学会等名 第47 回結晶成長国内会議 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 伊藤智徳
2. 発表標題 計算科学で見るGaN エピタキシャル成長
3. 学会等名 2018 年秋季第79 回応用物理学会学術講演会 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Tomonori Ito
2. 発表標題 Growth mode in heteroepitaxial system from nano- and macro-theoretical viewpoints
3. 学会等名 The 20th International Conference on Molecular Beam Epitaxy (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yoshihiro Kangawa, Pawel Kempisty, and Kenji Shiraishi
2. 発表標題 Theoretical study: Impurity incorporation in GaN MOVPE
3. 学会等名 The 7th International Symposium of Growth of III-Nitrides (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Y. Kangawa, P. Kempisty, S. Krukowski, K. Shiraishi, K. Kakimoto
2. 発表標題 Surface reconstruction and impurity incorporation in GaN MOVPE: Ab initio-based modeling
3. 学会等名 The 19th International Conference on Metalorganic Vapor Phase Epitaxy (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Y. Kangawa, P. Kempisty, K. Shiraishi, K. Kakimoto
2. 発表標題 Theory of GaN MOVPE process considering surface reconstruction
3. 学会等名 SPIE photonic west OPTO (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 伊藤智徳
2. 発表標題 2次元成長, 3次元成長を分ける成長メカニズム
3. 学会等名 2017年秋季第78回応用物理学会学術講演会 (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 伊藤智徳
2. 発表標題 結晶成長条件下での窒化物半導体非極性表面構造の安定性
3. 学会等名 2016年秋季第77回応用物理学会学術講演会（招待講演）
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 寒川 義裕, 白石 賢二, 柿本 浩一
2. 発表標題 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
3. 学会等名 2016年秋季第77回応用物理学会学術講演会（招待講演）
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Y. Kangawa
2. 発表標題 First Principles Based Simulation for Compound Semiconductor Growth Processes
3. 学会等名 2016 International Conference on Solid State devices and Materials (SSDM 2016) Short Course（招待講演）
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Y. Kangawa
2. 発表標題 Ab Initio-Based Approach to Crystal Growth of Nitride Semiconductors: Contribution of Growth Orientation and Surface Reconstruction
3. 学会等名 International Workshop on Nitride Semiconductors 2016（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2016年

〔図書〕 計2件

1. 著者名 Tomonori Ito, Toru Akiyama, Yoshihiro Kangawa Takashi Nakayama, Kenji Shiraishi	4. 発行年 2018年
2. 出版社 Springer	5. 総ページ数 223
3. 書名 Epitaxial Growth of III-Nitride Compounds Computational Approach	

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	秋山 亨 (Akiyama Toru)  (40362363)	三重大学・工学研究科・准教授  (14101)	
研究分担者	正直 花奈子 (Shojiki Kanako)  (60779734)	三重大学・工学研究科・助教  (14101)	
研究分担者	河村 貴宏 (Kawamura Takahiro)  (80581511)	三重大学・工学研究科・助教  (14101)	
研究分担者	寒川 義裕 (Kangawa Yoshihiro)  (90327320)	九州大学・応用力学研究所・教授  (17102)	
研究分担者	平松 和政 (Hiramatsu Kazumasa)  (50165205)	三重大学・地域イノベーション学研究科・特任教授(研究担当)  (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1件



国際研究集会 International Workshop on UV Materials and Devices 2017 (IWUMD 2017)	開催年 2017年～2017年
--	--------------------

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			
ポーランド	Institute of High Pressure Physics			
米国	Rice University	University of Maryland	Virginia Institute of Technology	
英国	Oxford University			