

森川良忠、稲垣耕司、小野倫也、木崎栄年（阪大院工）、濱田幾太郎（物材機構）
小林広明、江川隆輔、小松一彦（東北大サイバー）、柳澤将（琉球大理）

機能性界面の大規模第一原理計算手法の開発と応用

JHPCN

本研究では、酸化物触媒表面や界面、水/半導体界面、有機デバイス界面等、半導体デバイスや燃料電池、二次電池、触媒等の応用上重要なでの界面における原子構造や電子構造、および、反応過程を出来る限り現実に近いモデルを用いて精度の高い第一原理シミュレーションを行い、その特性を支配する要因を明らかにすることを目指す。それによって、現象の背後にある原理を解明するのみならず、それらの知見を生かして、より有用な界面を計算機シミュレーションによりデザインする指針を与えることを目指す。

First-Principles analysis of CARE process of GaN - Initial stage of etching process -

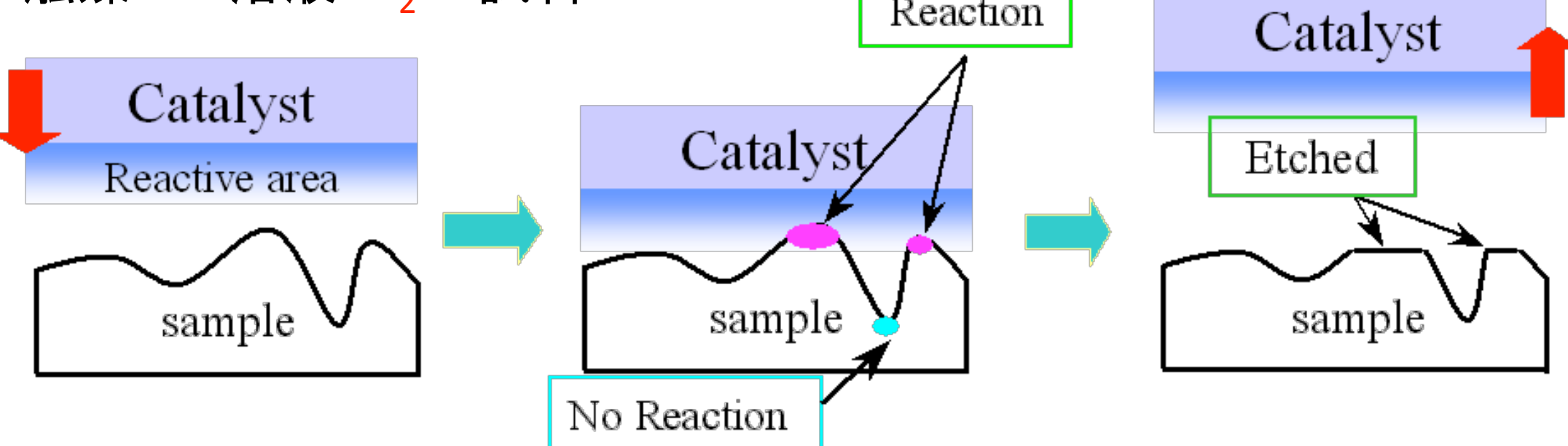
Mari Oue, Kouji Inagaki, Kazuto Yamauchi and Yoshitada Morikawa

Department of Precision Science and Technology, Graduate School of Engineering, Osaka University

Introduction / Catalyst referred etching(CARE)

水中でGaNにPt等を接触させると平坦化加工ができ
結晶性の良いステップ-テラス構造を得られる

触媒: Pt 溶液: H_2O 試料: GaN



Ref. J. Murata et al, J.Cryst.Growth. 310(2008)1637.

J. Murata et al, Jpn.J.Appl.Phys.48(2009)121001.

問題点

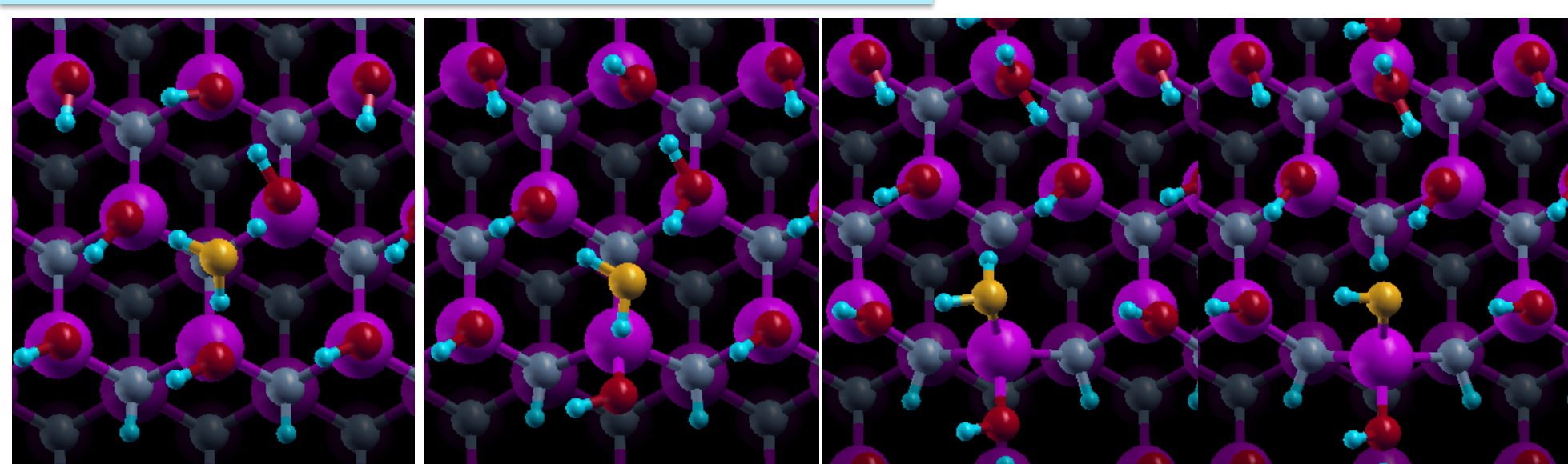
加工速度が遅い

CARE 加工後表面
(1.00 μm × 1.00 μm)

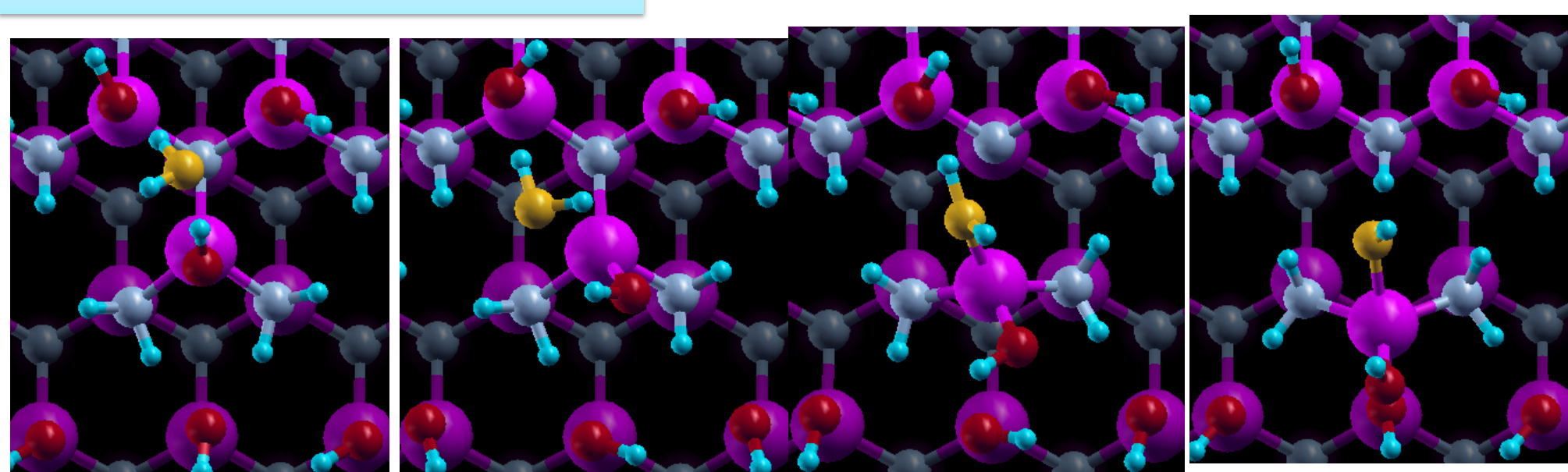
結果

ステップ-テラス構造

Back bond

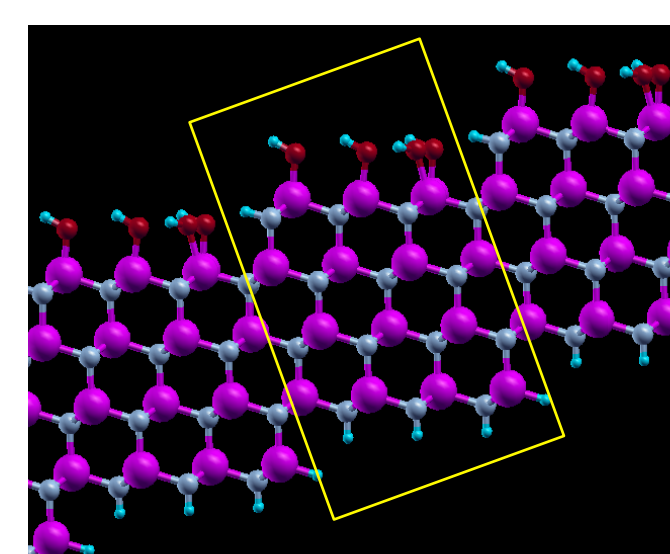


キンク構造

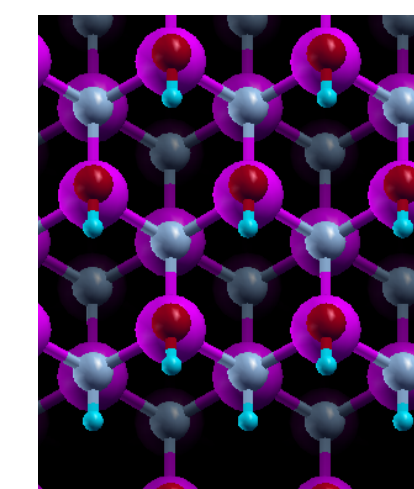


Calculation method and model

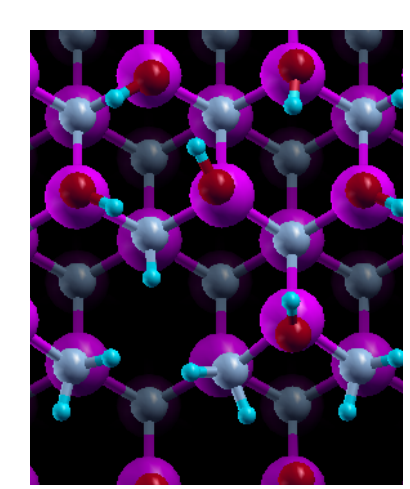
STATE
(Simulation Tool
for Atom TEchnology)
○ 密度汎関数法(DFT)
○ GGA-PBE汎関数
○ ウルトラソフト擬ポテンシャル
○ 平面波展開法
○ Climbing image NEB
(Nudged elastic band) 法
Ref. Henkelman *et al*,
J. Chem. Phys. 113, 9901 (2000)



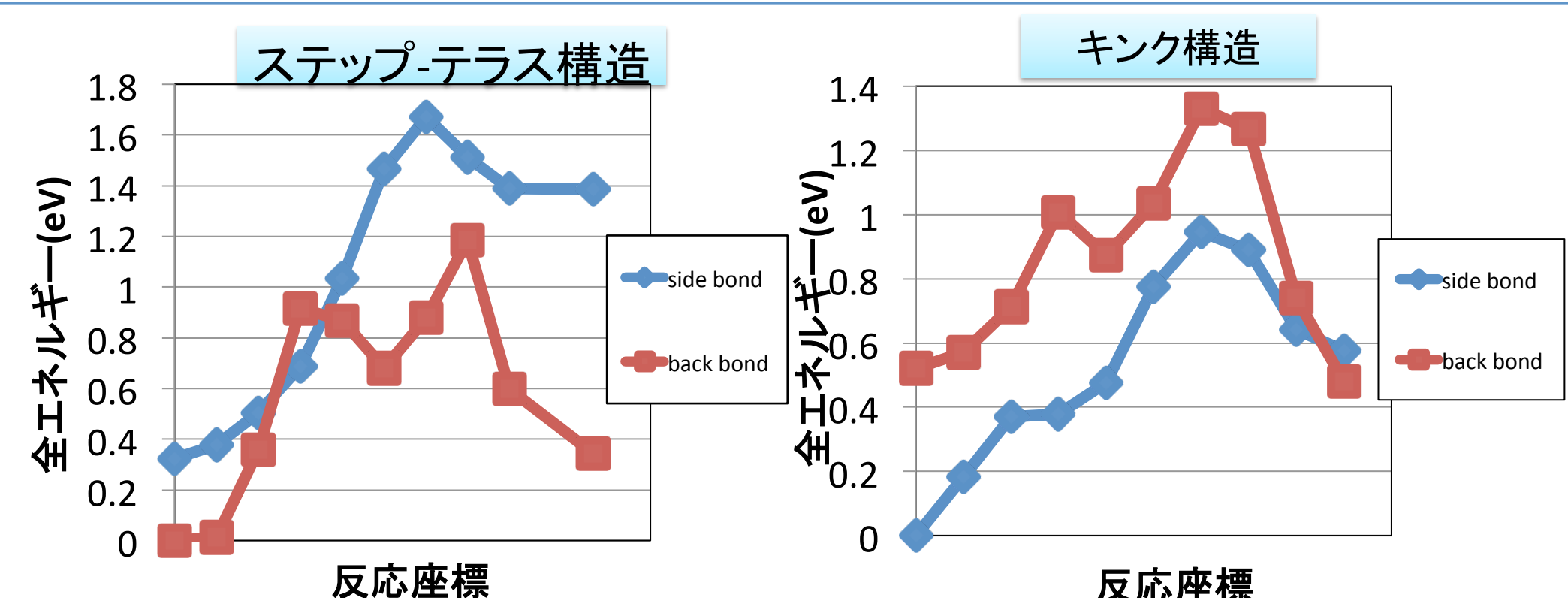
ステップ-
テラス構造



キンク構造



セル 11.923×17.884×40.000



Conclusion

- ステップ-テラス構造、キンク構造共にback bondへの解離吸着の反応障壁が低く、終状態は安定化した
 - キンク構造の方がステップ-テラス構造よりも反応障壁は低かった
- 今後の予定
- プロトンリレーを介した H_2O 分子の解離吸着について調べる
 - Pt 存在下での反応について調べる