

InAs/GaAs(001)ぬれ層表面での表面構造の変化に関する量子論的アプローチ

Ab initio-based approach to surface-structure change

on wetting layer of InAs/GaAs(001)

三重大院工, °平井健太郎, 秋山亭, 中村浩次, 伊藤智徳

Mie Univcity, °Kentaro Hirai, Toru Akiyama, Koji Nakamura, Tomonori Ito

E-mail:412M612@m.mie-u.ac.jp

【はじめに】GaAs(001)面上の InAs ぬれ層においては、成長条件に依存して表面構造が(2×3)表面から(2×4)表面へと変化することが知られており[1]、この表面構造の変化の過程が InAs 量子ドット形成と関連していることが示唆されている[2]。また、STM 観測により、実際の表面においては(2×3)表面から As ダイマーが脱離した($n \times 3$)表面も観測されている[3]。しかしながら、これら表面構造と InAs 成長との関係は不明な点が多い。これまで我々は、($n \times 3$)表面の安定性およびそこでの In 原子の吸着について検討を行い、(2×3)からの As ダイマーの脱離と脱離後に形成する($n \times 3$)表面での In 原子の吸着が、InAs 成長過程において重要であることを明らかにした。本研究では、As ダイマーの脱離と In 原子の吸着に伴う($n \times 3$)表面から(2×4)表面への表面構造の変化について理論的に検討する。

【計算方法】本研究では、第一原理全エネルギー計算によって得られる吸着エネルギーと、気相における As₄ 分子の化学ポテンシャルを比較することで温度と分子線圧力の関数として表面構造状態図を作成し、各表面での安定性を検討する。

【結果および考察】図は、温度および As₄ 分子線圧力の関数として表した(a) (6×3)表面及び(b)In 原子が吸着した(6×3)表面[(6×3)-ad]での As ダイマーの脱離に対する状態図である。これらの図から、In 原子を($n \times 3$)表面に吸着させることで、脱離温度が940Kから760K程度まで低下していることが分かる。この結果は、In 原子がセルフサーファクタント原子として振る舞い、As ダイマーの脱離を促進するためと考えられる。このことから、実際の成長では($n \times 3$)表面に複数の In 原子が吸着して、表面の As ダイマーが脱離し、($n \times 3$)表面から(2×4)表面に変化するものと思われる。講演では、($n \times 3$)表面から(2×4)表面に変化する際の、In 原子の吸着および As ダイマーの脱離の詳細について議論する。

[1] J.G. Belk *et al.*, Surf. Sci. **387** (1997)21 [2] T. Konishi *et al.*, Surf. Sci.**605**(2011) L1.

[6]J. Grabowski *et al.*, Appl.Phys. Lett. **95** (2009) 233118. [4] S. Tsukamoto *et al.*, Small. **2** (2006) 587.

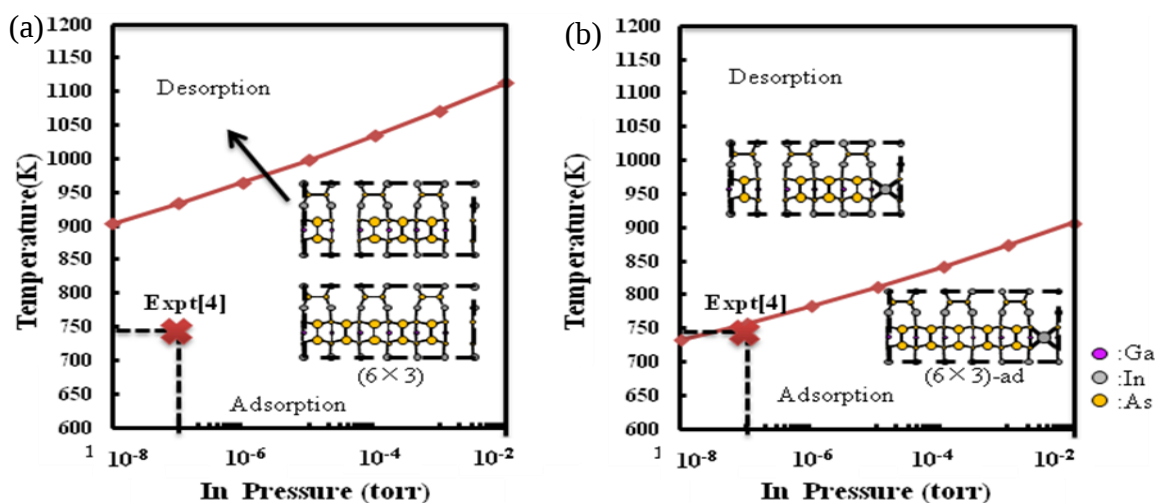


Fig. Calculated surface phase diagram for the desorption of As dimer on (6×3) and (6×3)-ad surfaces. Cross mark indicate the experimental growth condition in Ref. 3.