

## InAs/InP ヘテロ構造ナノワイヤにおける歪のシミュレーション評価

## Strain simulation for InP/InAs heterostructure nanowires

NTT 物性基礎研<sup>1</sup>, °館野 功太<sup>1</sup>, Guoqiang Zhang<sup>1</sup>, 後藤 秀樹<sup>1</sup>NTT Basic Research Labs<sup>1</sup>, °K. Tateno<sup>1</sup>, G. Zhang<sup>1</sup>, H. Gotoh<sup>1</sup>

E-mail: tateno.kouta@lab.ntt.co.jp

半導体ヘテロ構造で歪を導入することにより、バンド構造を変えて電氣的、光学特性を大きく変えることができる。半導体ナノワイヤはある程度大きな格子定数差 (InAs と InP では 3.2%) の材料でも、原子間の結合を切らずに、エピタキシャル成長することができ、また、軸方向、動径方向へのヘテロ構造も可能であることから、様々な 3 次元ナノデバイス構造が期待される。しかしながら、ヘテロ構造ナノワイヤにおける歪の理解は未だ十分とはいえない。我々は、前回、自己触媒法で成長した InP/InAs ヘテロ構造ナノワイヤにおいてラマン測定を行い、InAs 由来の TO フォノンが高エネルギー側にシフトすることを確かめた[1]。今回、歪のシミュレーションを行い、ラマンや TEM 観察による格子像の結果と比較した。

計算は有限要素法を用い (COMSOL 社製)、zincblende 構造の弾性硬さテンソル、格子定数を元に、初期条件で格子を合わせた状態から定常状態となった時の歪を計算した。ここではナノワイヤの軸は [111] 方向とした。図 1(a) は高さ 400 nm、半径 100 nm、のナノワイヤで、InP で挟んだ InAs 層の厚さ (hw) が 100 nm の場合の応力を部分的にマッピングしたものである。InAs への強い圧縮応力の様子がわかる。図 1(b) は InAs 中心部分での歪量から計算したラマンシフト量を hw に対してプロットしたものである。hw が小さくなるほど InAs が InP のサイズの影響を受けるため、歪量が大きくなり、TO のシングレットのフォノンエネルギーが高エネルギー側に顕著にシフトする。この傾向はラマン測定の結果と一致する。この計算によるシミュレーションはナノ構造の歪を定性的に理解するには十分有効で簡易的な方法である。しかしながら、実際の結晶では[111]軸に垂直な双晶面が多く含まれる。我々は TEM において双晶面での格子間隔の変化を確認しており、現在その要因を調べている。wurtzite や zincblende、4H、6H で格子間隔が異なることは実験や第一原理計算で確認されおり[2]、そのような構造由来の変化を調べるのが今後の課題である。

発表では、InAs 薄膜の厚さやナノワイヤの径、周期構造における障壁層厚の依存性、コアシェル構造等についての計算結果を報告する予定である。

[1] G. Zhang et al., 春季応用物理学会 (2014) 18p-F11-6. [2] C. Panse et al., Phys. Rev. B84 (2011) 075217.

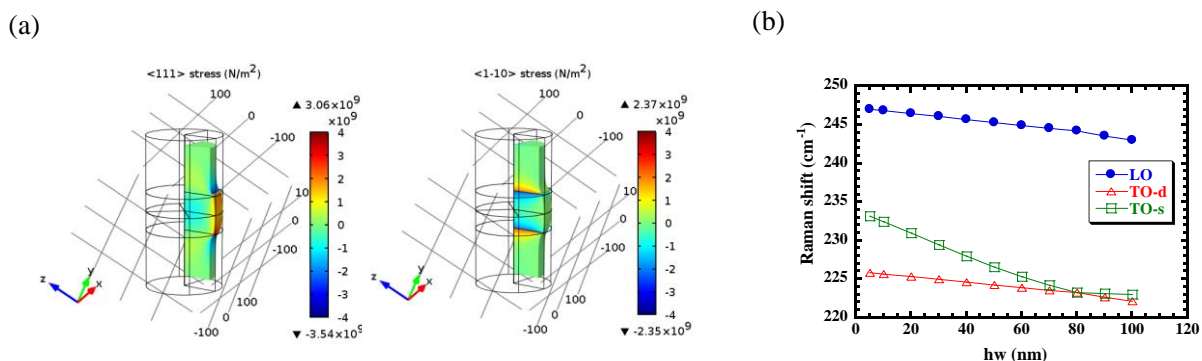


図 1 (a) InP/InAs/InP ナノワイヤの応力分布 左:  $\sigma_{111}$ , 右:  $\sigma_{1-10}$  (b) InAs 層厚 (hw) に対するラマンシフト