結晶欠陥を導入したモンテカルロシミュレーションによる自己集合量子ドットのモフォロジー変化

Coarsening effects on morphology of self-assembled quantum dots by kinetic Monte Carlo simulation

○村松　修[1]、笹倉　弘理[2]、武藤　俊一[1]（1. 北大院工、2. 北大創生研究機構）

°Osamu Muramatsu[1], Hirotaka Sasakura[2], Shunich Muto[1], (1.Hokkaido Univ. , 2.CRIS)

E-mail: kagayakutokinanakade@eis.hokudai.ac.jp

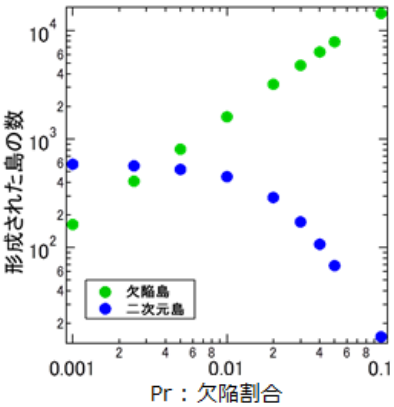

Fig 1.形成された島の数の Pr 依存性

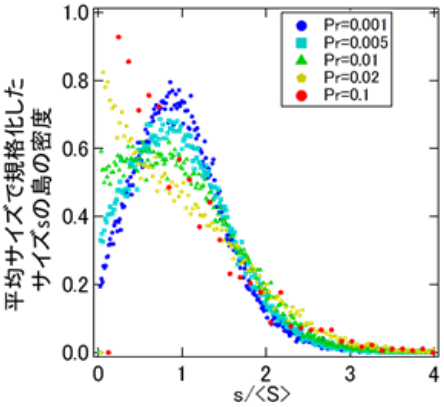

Fig 2.二次元島のサイズ分布のスケール関数

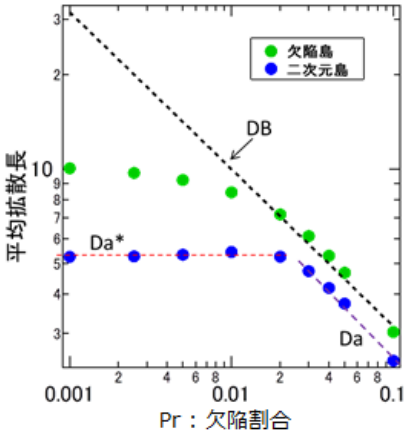

Fig 3.実効的な平均拡散長

【はじめに】格子定数の異なる半導体の界面で自己形成する量子ドット(QD)のモフォロジーは，QD 成長前の基板状態により大きく変化する．我々はエピタキシャル成長した InAs/GaAs QD の体積分布が臨界クラスターサイズ i=1 の二次元島のサイズ分布のスケール関数となることを報告してきた[1]．今回，モンテカルロシミュレーションにより QD 成長前の基板に含まれる結晶欠陥が誘起するモフォロジーの変化を評価したので報告する．

【シミュレーションモデル】結晶欠陥をランダムに配置した 400×400 の正方格子上で，二次元島(i=1)の成長シミュレーションを表面被覆率 θ =0.3 まで行った．原子の拡散レートと供給レートの比は 10^6 とし，欠陥に到達した拡散原子は捕獲されz方向に成長するポイントアイランドモデル（欠陥島）を採用した．

【結果】Fig. 1 に成長した二次元島(青●)と欠陥島(緑▲)の数の結晶欠陥(Pr=欠陥の数/400^2)依存性を示す．欠陥島の数は Pr の増加に伴いほぼ線形に増加しているが，二次元島の数は Pr<0.01 では変化が無く，その後減少している．Fig. 2 に二次元島のサイズのスケール分布を示す．Pr>0.01 では i=1 の核形成モデルを用いているが，i=0 へと徐々に変化している．これは二次元島を形成した原子の実効的な拡散距離(Da)が Pr<0.01 ではほぼ一定(Da*)であり，欠陥の影響を受けず成長したため i=1 のスケール分布をとるが，Pr>0.01 では欠陥間の平均距離(DB)が Da* よりも短くなるため，二次元島の核形成が阻害されただけでなく，Da が短い原子のみが核形成したためだと考えられる．これは拡散長の短い Al 等を含んだ混晶系の QD の成長におけるスケール分布の変化に対応している[2]．

[1] Y. Ebiko *et. al.*, Phys. Rev. Lett.**80** (1998) 2650 [2] X.M.Lu *et. al.*, Jpn.J.Appl. Phys. **52** (2013) 025602

© 2016年 応用物理学会