

2次元成長, 3次元成長を分ける成長メカニズム

Growth Mechanisms Inducing Two and Three Dimensional Growth Modes

三重大院工 ○伊藤 智徳

Mie Univ., ○Tomonori Ito

E-mail: tom@phen.mie-u.ac.jp

- はじめに** エピタキシャル成長モードとして, Frank-van der Merwe モード (2次元成長), Stranski-Krastanov モード (3次元成長) 等が知られている。これらは格子不整合度と密接な関係があると考えられているが, InAs/GaAs 系において面方位依存性が見いだされているように, そのメカニズムについては不明な点が多い。本講演では InAs/GaAs 系を対象に, 表面, 界面におけるひずみ緩和と成長モードとの関連を, 巨視的, 微視的理論手法を用いて議論する。
- 計算方法** 成長モードについては自由エネルギー表式を, ひずみ緩和については第一原理計算, 原子間ポテンシャル計算を, それぞれ用いることで, InAs/GaAs 系の成長モードを検討する。
- 計算結果及び考察** 成長モードとして2次元転位成長 (2D-MD) と3次元島成長 (3D-coh) を考えると, 自由エネルギー表式から2つの成長様式境界は $\beta/\alpha = 1/(2\gamma)(E_d/l_0)$ で与えられる。ここで, E_d は転位形成エネルギー, l_0 は完全にひずみ緩和する際の転位間隔, γ は表面エネルギー, β は島形成による表面積増分, α は島形成によるひずみエネルギー変化分である。図 1(a) は2つの成長モード境界を, γ と β/α の関数として表したものである。 E_d が大きい(001)では3D-coh 領域が, E_d が小さい(111)A では2D-MD 領域がそれぞれ広いこと, 中間の E_d をもつ(110)はこれらの中に位置することがわかる。これらの結果は, (001)で3次元島が, (111)A で界面転位が見いだされていること, また(110)では界面転位に加えて, ひずみ緩和層 (SR) 挿入により3次元島が出現することと定性的に一致している。図 1(b)に(110)における2D-MD, 3D-coh と2D-coh 間のエネルギー差の成長膜厚依存性を示す。成長モードは, ひずみ緩和のない状態では2D-MD (青線) となるが, ひずみ緩和した状態では3D-coh (赤線) に変化することがわかる。これは, ひずみ緩和による γ の低下が3次元島形成に有利になることに起因している。講演では表面再構成も含めて議論する。

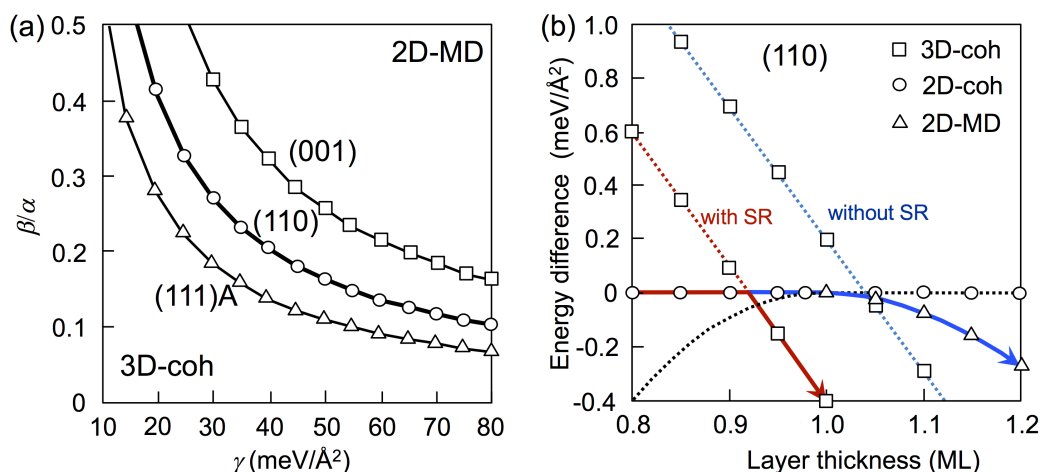


図 1. (a) 成長モード境界および (b) (110)成長モードの膜厚依存性計算結果。