

## InAs/GaAs (110) 系におけるひずみ緩和と成長様式に関する理論検討

### Theoretical investigations for strain relaxation and growth mode of InAs/GaAs(110)

三重大院工<sup>1</sup>, ○伊藤 智徳<sup>1</sup>, 海田 諒<sup>1</sup>, 秋山 亨<sup>1</sup>, 中村 浩次<sup>1</sup>

Mie Univ.<sup>1</sup>, Tomonori Ito<sup>1</sup>, Ryo Kaida<sup>1</sup>, Toru Akiyama<sup>1</sup>, Kohji Nakamura<sup>1</sup>

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

1. はじめに これまで我々は InAs/GaAs(001), (111)A 系について, ひずみ緩和機構と成長様式の関係について検討してきた。本研究では InAs/GaAs(110)系を対象に同様の検討を行うと共に, ひずみ緩和による表面エネルギー変化と成長様式との関連を議論する。

2. 計算方法 成長様式については自由エネルギー表式を, 表面エネルギーのひずみ依存性については第一原理計算を, それぞれ用いることで, InAs/GaAs(110)系の成長過程を検討する。

3. 計算結果及び考察 成長様式として2次元転位成長 (2D-MD) と3次元島成長 (3D-coherent) 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,  $\gamma$  は表面エネルギー,  $\beta$  は島形成による表面積増分,  $\alpha$  は島形成によるひずみエネルギー変化分である。図 1(a)は既報 [1] の  $E_d=0.960$  eV/Å,  $l_0=58.76$  Å を代入して得た2つの成長様式境界を,  $\gamma$  と  $\beta/\alpha$  の関数として表したものである。図中に(001)および(111)Aに関する結果も合わせて示す。(001)では3D-coherent領域が,(111)Aでは2D-MD領域がそれぞれ広いこと,(110)はこれらの中にあることがわかる。これらの結果は,(001)で3次元島成長が,(111)Aで2次元転位成長が見いだされている[2]こと, また(110)では2次元転位成長が一般的であるものの, ひずみ緩和層挿入により3次元島成長が出現することと定性的に一致している。図 1(b)に InAs(110)表面エネルギー $\gamma$ の格子定数依存性を示す。ひずみ緩和とともに $\gamma$ は減少する。図 1(a)から, ひずみ緩和による $\gamma$ の低下は,  $\beta/\alpha$ 一定の条件下で3次元島成長に有利に作用すると考えられ, 上記実験結果とも定性的に一致する。

参考文献: [1] K. Shiraishi et al., J. Cryst. Growth **237-239** (2002) 206. [2] A. Aierken et al., Appl. Surf. Sci. **254** (2008) 2072.

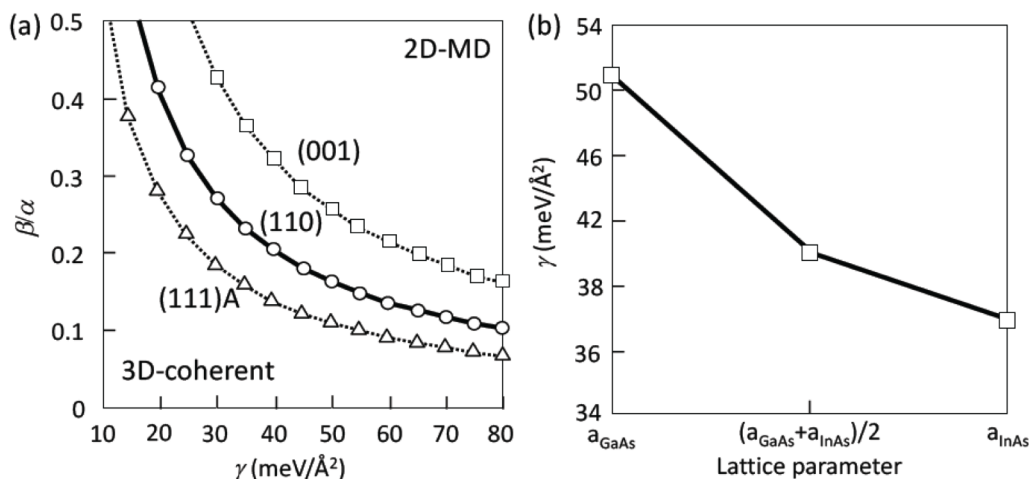


図 1. (a) 成長様式境界および (b) InAs(110)表面エネルギーの計算結果