

InAs/GaAs(001)ぬれ層表面における成長初期過程に関する理論的検討： c(4×4)表面における吸着・脱離の挙動

Ab initio study for growth process of InAs/GaAs(001) wetting layer surface:

Adsorption and desorption behavior on c(4×4) surface

三重大院工, °米本和弘, 秋山亨, アブドゥルムイツツブラディプト, 中村浩次, 伊藤智徳

Mie University, °K. Yonemoto, T. Akiyama, A.-M. Pradipto, K. Nakamura, T. Ito

E-mail: 418m618@m.mie-u.ac.jp

はじめに 近年、分子線エピタキシャル成長を利用した InAs/GaAs(001)系が量子ドットを自己組織化する系として注目を集めている。しかしながら、その形成メカニズムは原子レベルでは解明されていないのが現状である。これまでに報告されている InAs/GaAs(001)系における走査型トンネル顕微鏡(Scanning Tunneling Microscope : STM)観察では、InAs 被覆率が約 0.76 モノレイヤー (ML)において InAs(001)-(4×3)表面(0.67 ML)および InAs(001)-(2×4)表面(1.38 ML)が混在することが観測されている[1]。一方、我々の第一原理計算から InAs(001)-(4×3)表面において InAs の成長は進行しないことを見出している[2]。また、In-As ダイマーおよび As-As ダイマーからなる c(4×4)表面(0.88 ML)が(4×3)表面および(2×4)表面の中間相として出現し得ることを見出しており、この c(4×4)表面を経由した(2×4)表面の形成が考えられる[3]。本研究では、温度および分子線圧力を考慮した量子論的アプローチにより中間相としての c(4×4)表面における In および As の吸着・脱離の挙動を明らかにし、c(4×4)表面から(2×4)表面への表面構造の変化を検討する。

結果及び考察 Fig.は表面構造状態図計算[4]から得られた c(4×4)表面における InAs 成長過程の模式図である。Fig. (a)に示される c(4×4)表面において As-As ダイマーから Is-As ダイマーへの置換および In 原子の吸着により Fig. (b)のような InAs 被覆率が 1.13 ML に相当する c(4×4)表面に変化する。また、Fig. (b)と同じ被覆率の(2×4)表面[Fig. (c)]における表面エネルギーは c(4×4)表面における表面エネルギーよりもユニットセル当たり 2.52 meV 低くなり、エレクトロンカウンティング則[5]を満たすように c(4×4)表面から(2×4)表面へと変化し得ることがわかる。さらに、(2×4)表面において In 原子の吸着および As 原子の脱離が起こり、最終的には STM 観察[2]においても見出されている(2×4)α2 表面[Fig. (d)]へと変化する。以上の計算結果は、c(4×4)表面の形成が InAs 量子ドットの形成機構を理解する上では重要であることを示唆している。

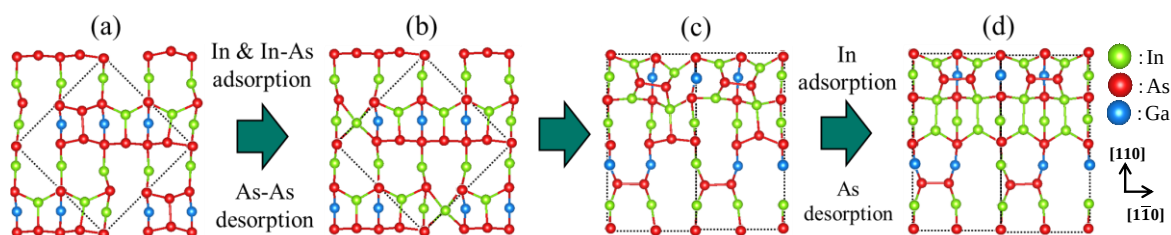


Fig. Schematic of structural change from (a) the InAs-c(4×4) surface with 0.88 ML to (d) the InAs-(2×4)α2 surface with 1.38 ML via (b) the InAs-c(4×4) surface with 1.13 ML and (c) the InAs-(2×4) surface with 1.13 ML. Dashed rhombus and rectangles represents the unit cells of c(4×4) and (2×4) surfaces, respectively.

参考文献

- [1] T. Ito *et al.*, J. Cryst. Growth **477**, 12 (2017). [2] J. Grabrowski *et al.*, Appl. Phys. Lett. **95**, 233118 (2009).
- [3] T. Ito *et al.*, Phys. Status Solidi A **216**, 1800476 (2019). [4] Y. Kangawa *et al.*, Surf. Sci. **507**, 285 (2002).
- [5] M.D. Pashley *et al.*, Phys. Rev. Lett. **60**, 2176 (1998).