モンテカルロ計算による GaN(001)基板上 InAs ぬれ層の表面構造変化の理論的検討 Monte Carlo simulations for structural change of InAs wetting layer surface on GaAs(001) substrate

三重大院工、〇秋山亨、米本和弘、日紫喜文昭、アブドルムィッツプラディプト、中村浩次、伊藤智徳 Mie University, OT. Akiyama, K. Yonemoto, F. Hishiki, A. -M. Pradipto, K. Nakamura, T. Ito E-mail: akiyama@phen.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。InAs/GaAs(001)系における走査型トンネル顕微鏡(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、これまでに我々は第一原理計算により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、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、このc(4×4)表面を経由した(2×4)表面の形成を提案している[2-4]。さらに、(4×3)表面および(2×4)表面が混在する表面においてはIn原子が吸着し易くなることも見出している[5]。本研究では、これら第一原理計算によって得られた各表面構造におけるInおよびAsの吸着・脱離の挙動から、InAs被覆率の増大に伴う表面構造およびIn原子の吸着サイトの変化に対するモンテカルロ(MC)シミュレーションを実行し、c(4×4)表面から(2×4)表面への表面構造変化の過程およびIn原子の吸着とInAs被覆率との関係性を検討する。

【結果および考察】Fig.1はMCシミュレーションによって得られたInAsぬれ層表面の原子配列を示 したものである。この図からInAs被覆率に依存して表面構造が変化し、それに伴ってIn原子の吸着 サイトの数およびその分布も変化することがわかる。InAs被覆率が0.90 ML程度に達するまでは、 表面構造が様々に変化するもののIn 原子が吸着しない表面が出現することから、In原子の吸着サ イト数は減少する。InAs被覆率が1.10 MLになるとFig.1(b)に示すように(4×3)表面および(2×4)表面 が混在する領域が出現する。また、この混在する領域の出現によりIn原子が吸着するサイトが増加 して、1.05~1.15 MLの範囲でIn原子の吸着サイト数が最大となる。さらにInAs被覆率が増加する と、Fig.1(c)に示すように(2×4)表面となる領域が増大して吸着サイト数が減少する。このようなIn 原子の吸着サイト数の増減から、(4×3)表面および(2×4)表面の混在する領域の出現がIn原子の吸着 サイト数の増減に対して寄与することがわかる。以上の結果は、InAs被覆率が1.10 ML以降におけ る表面においてIn原子の吸着が促進され、量子ドットの形成の要因となり結晶核の形成に関与し得 ることを示唆している。

【参考文献】[1] J. Grabrowski *et al.*, Appl. Phys. Lett. **95**, 233118 (2009). [2] T. Ito *et al.*, J. Cryst. Growth **477**, 12 (2017). [3] T. Ito *et al.*, Phys. Status Solidi A **216**, 1800476 (2019). [4] K. Yonemoto *et al.*, J. Cryst. Growth **532**, 125369 (2020). [5] 米本 他, 第48回結晶成長国内会議, 31p-P21 (2019).



Fig. 1 Calculated surface structures of InAs wetting layer on GaAs(001) substrate for (a) 0.90, (b) 1.10, and (c) 1.30 ML obtained by MC simulations. Green, purple, and yellow areas denote (4×3) surface, mixture of (4×3) and (2×4) surfaces, (2×4) surface, respectively. Cross mark represents the stable adsorption sites of In adatom.