

## 28aB04

## 半導体格子不整合系でのエピタキシー成長とミスフィット転位

## Theoretical Study on the Epitaxial Growth and Misfit-Dislocations

早稲田大学<sup>1</sup>、金材技研<sup>2</sup>、NTT物性基礎研<sup>3</sup>、三重大学<sup>4</sup>宮城島規<sup>1</sup>、岡島康<sup>1</sup>、武田京三郎<sup>1</sup>、小山紀久<sup>2</sup>、大野隆央<sup>2</sup>、白石賢二<sup>3</sup>、伊藤智徳<sup>4</sup><sup>1</sup>Dept. of Materials Sci. & Engi., Waseda Univ.,<sup>2</sup>National Research Institute for Metals,<sup>3</sup>NTT Basic Research Labs.,<sup>4</sup>Mie UniversityN. Miyagishima<sup>1</sup>, K. Okajima<sup>1</sup>, K. Takeda<sup>1</sup>, N. Oyama<sup>2</sup>, T. Ohno<sup>2</sup>, K. Shiraishi<sup>3</sup>, T. Ito<sup>4</sup>

Combining the two approaches of the phenomenological theory and the atomistic analysis, we clarified the characteristics of the hetero-epitaxial growth, focusing on the misfit dislocation generated at the semiconductor interfaces. We apply these theories to GaSb/GaAs(001) system. In the atomistic analysis we found a 5&7 membered ring structure at the dislocation core by using first-principles calculations.

半導体ヘテロエピタキシャル成長過程を巨視的描像と微視的描像の2つを組み合わせることにより理論的に検討した。表面形成、格子歪み、転位形成などを現象論的パラメーターとして自由エネルギー定式化に導入すれば、自由エネルギー最小の軌跡を辿ることにより、成長過程の特徴である転位形成や島形成などは記述できる(巨視的描像)。一方、第一原理エネルギー計算は転位芯周りの詳細な原子構造ならびに電子構造を与える(微視的描像)。本研究ではこれらの2つの描像を組み合わせることにより、自由エネルギー定式化で必要な種々の現象論的パラメーターの数値的評価法も提案し、あわせて実際の半導体ヘテロエピタキシャル系への適用結果を報告する。

以下に GaSb/GaAs(001)系での適用結果を示す。ミスフィット転位(MD)芯構造はⅢ族及びⅤ族の同族ボンドを含んだ5&7員環構造をとることが第一原理計算により明らかとなった(図1)。また成長膜厚を変化させた系に関してMDを含む系と含まない系の全エネルギー差を算出することにより、その傾きと切片から格子歪みエネルギー並びに転位形成エネルギーを見積もった(図2)。これらのパラメーターを用いて臨界膜厚を見積もったところ実験結果<sup>[1]</sup>とよく一致した。講演では InAs/GaAs(110)系についても報告する

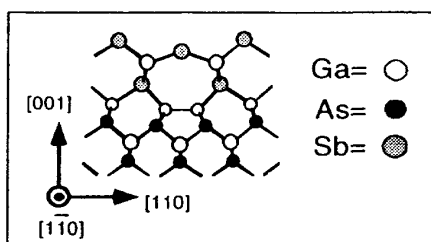


図1 [110]の転位芯構造と5&amp;7員環構造

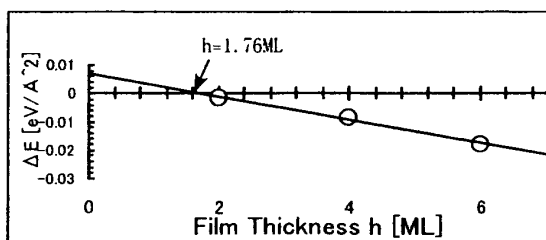


図2 臨界膜厚の見積もり

参考文献 [1] J.M.Kang, et al., J. Crystal Growth, 143, 115(1994).