

# 半導体格子不整合系における エピタキシャル成長の理論的研究 ——マクロスコピックな成長過程と ミクロスコピックな機構との関係——

## Theoretical Studies of Epitaxial Growth on Semiconductor Lattice-Mismatched Systems ——Relation between Macroscopic Growth Behavior and Microscopic Mechanism——

白石賢二<sup>\*1</sup>, 小山紀久<sup>\*2</sup>, 岡島 康<sup>\*3</sup>, 武田京三郎<sup>\*3</sup>,  
山口浩司<sup>\*1</sup>, 伊藤智徳<sup>\*4</sup>, 太田英二<sup>\*5</sup>, 大野隆央<sup>\*2</sup>

<sup>\*1</sup> NTT 物性科学基礎研究所, <sup>\*2</sup> 金属材料技術研究所  
<sup>\*3</sup> 早稲田大学理工学部, <sup>\*4</sup> 三重大学工学部, <sup>\*5</sup> 慶應義塾大学理工学部

Kenji Shiraishi<sup>\*1</sup>, Norihisa Oyama<sup>\*2</sup>, Ko Okajima<sup>\*3</sup>, Kyozauro Takeda<sup>\*3</sup>,  
Hiroshi Yamaguchi<sup>\*1</sup>, Tomonori Ito<sup>\*4</sup>, Eiji Ohta<sup>\*5</sup>, and Takahisa Ohno<sup>\*2</sup>

<sup>\*1</sup> NTT Basic Research Laboratories  
<sup>\*2</sup> National Research Institute for Metals  
<sup>\*3</sup> Department of Material Science and Engineering, Waseda University  
<sup>\*4</sup> Department of Physics Engineering, Mie University  
<sup>\*5</sup> Department of Applied Physics and Phisico-Infomatics, Keio University

(received for publication July 28, 2000)

We discuss the relation between microscopic mechanism and macroscopic growth behavior. First, we introduce a macroscopic theory of growth behavior in semiconductor heteroepitaxy that includes the effects of the formation of Stranski-Krastanov (SK) islands and the misfit-dislocations (MDs). This theory can reproduce the various types of growth behavior observed in heteroepitaxial growth. Next, we have formulated a procedure for determining the phenomenological parameters that includes atomistic calculations. The critical thickness of InAs/GaAs(110) obtained by this procedure is in good agreement with the experimentally obtained value.

E-mail : siraisi@will.brl.ntt.co.jp

NTT 物性科学基礎研究所

〒243-0198 神奈川県厚木市森の里若宮 3-1

NTT Basic Research Laboratories

3-1, Morinosato-Wakamiya Atsugi, Kanagawa 243-1098, Japan

金属材料技術研究所

〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1

National Research Institute for Metals

1-2-1, Sengen, Tsukuba, Ibaraki 305-0047, Japan

早稲田大学理工学部

〒169-8555 東京都新宿区大久保 3-4-1

Department of Material Science and Engineering, Waseda University

3-4-1, Okubo, Shinjuku-ku, Tokyo 169-8555, Japan

三重大学工学部

〒514-8507 三重県津市上浜町 1515

Department of Physics Engineering, Mie University

1515 Kamihama, Tsu, Mie 514-8507, Japan

慶應義塾大学理工学部

〒223-8522 神奈川県横浜市港北区日吉 3-14-1

Department of Applied Physics and Phisico-Infomatics, Keio University

3-14-1, Hiyoshi, Kohoku-ku, Yokohama, Kanagawa, 223-8522 Japan

## §1. はじめに

半導体格子不整合系のヘテロ構造は電子デバイスや光デバイスを作製する上で非常に期待されている構造で多くの研究が報告されている<sup>1)</sup>。これらのヘテロ構造はエピタキシャル成長を用いて作製されることが一般的である。このため、半導体格子不整合系のエピタキシャル成長機構の解明を目指して多くの研究が精力的に行われているが、実験で観察される複雑で多様な成長様式を体系的に説明することは非常に難しいのが現状である。これは、格子不整合系のエピタキシャル成長においては成長層の歪みを解放するために、(1) ミスフィット転位の形成、(2) 表面における Stranski-Krastanov 島(SK 島)の形成、(3) 界面における原子の相互拡散、など多くの現象が複雑に絡み合っ

て生じるからである。ここで挙げた個々の歪み解放機構と成長過程との関係を議論した研究は報告されている。古くは、van der Merwe<sup>2,4)</sup>、Matthews and Blakeslee<sup>5,6)</sup>はミスフィット転位の形成と成長過程の関係を成長層の歪みと転位形成の競合の観点から議論している。しかし、彼らの議論は転位形成のみに焦点を絞っており、SK 島の形成に関しては議論していない。一方 Tersoff<sup>7,8)</sup>は SK 島形成と成長過程の関係を議論しているが、転位の形成についての議論はされていない。中嶋<sup>9)</sup>は歪みエネルギー、表面エネルギー、界面エネルギーの競合の観点から成長過程を議論しているが転位形成を陽には議論していない。我々の知る限りミスフィット転位と SK 島の形成等複数の歪み解放機構を同時に、体系的に考察して複雑な成長過程との関係を議論した報告例はほとんどない。

本稿の大きな目的は(1) ミスフィット転位の形成、と(2) SK 島の形成、という2種類の歪み解放機構を考慮したときに出現する複雑な成長過程を体系的に考察した我々の研究例を紹介することである<sup>10)</sup>。ここで紹介する理論では、弾性定数や転位の形成エネルギーなどのいくつかのマクロスコピックなパラメータが現れる。本稿ではマクロスコピックなパラメータを第一原理計算などの原子レベルの計算に基づいて決定する手続きを紹介

する。さらに第一原理から決定されたパラメータに立脚した議論により、InAs/GaAs(110)系の成長過程を半ば定量的に再現することができる事例を紹介する。

## §2. マクロスコピック理論による成長過程の考察

### 2.1 理論の定式化

この節では成長過程の議論に用いるマクロスコピック理論の定式化をする。成長過程において Dynamics は、Energetics 同様に重要なファクターであるが、ここでは議論を単純化するために Energetics のみに基づいた考察を行う。しかし、後で述べるように Energetics のみに基づいた議論でも複雑で多様な成長過程を定性的に再現することがある程度可能である。

まずこれからの議論において中心的な役割を果たす「最適成長モード」を定義しよう。「最適成長モード」とは「与えられた成長層厚  $h$  において最小の自由エネルギーを与える成長モード」のことである。この節で述べる定式化とは与えられた成長膜厚において「最適成長モード」を Energetics に基づいて決定する手続きに他ならない。「最適成長モード」を決定するには、まずどのような成長モードが出現しうるか? ということを考察する必要がある。ここではミスフィット転位と SK 島の形成の2つの過程を考慮しているので、ぬれ層が形成される範囲で出現可能な成長モードは転位と SK 島の出現の有無によって次のように分類できる。

- (1) SK 島も転位も形成されない成長モード(二次元コヒーレント成長) (Fig. 1(a)).
- (2) SK 島は形成されるが転位は形成されない成長モード(SK コヒーレント成長) (Fig. 1(b)).
- (3) 転位は形成されるが SK 島は形成されない成長モード(二次元転位成長) (Fig. 1(c)).
- (4) SK 島と転位の双方が形成される成長モード(SK 転位成長) (Fig. 1(d)).

出現可能な4種類の成長モードを Fig. 1(a)-(d) に模式的に与える。与えられた成長膜厚  $h$  において、Fig. 1(a)-(d) の4種類の中で最も低い自由

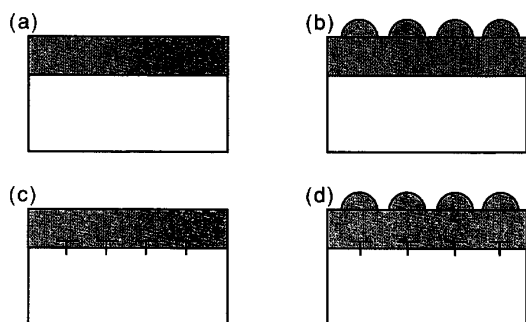


Fig. 1 Schematic views of possible growth modes.  
 (a) 2D-coherent mode, (b) SK-coherent mode,  
 (c) 2D-MD mode, and (d) SK-MD mode.

エネルギーを与える成長モードが本定式化における「最適成長モード」となる。したがって、成長膜厚を増加させたときに「最適成長モード」がどのように移り変わってゆくかを考察することで、格子不整合系における成長過程を議論することができる。

それではこれらの4種類の成長モードに対する自由エネルギーの表式はどうなるであろうか？以下に与える自由エネルギーの表式において、多くの物理パラメータを表す共通の記号を用いるのでも、これらの記号の意味について以下に記述しておく。

$\gamma$ : 成長層の表面エネルギー

$\beta$ : SK 島形成による成長層の表面積の増加

$\alpha$ : SK 島形成による成長層の歪みエネルギーの減少

$M$ : 有効弾性定数

$\epsilon_0$ : 系の格子不整合度

$l$ : 平均の転位間隔

$l_0$ : 転位の形成により格子不整合歪みが完全に解放されるとき転位間隔

$E_d$ : 転位の形成エネルギー

$h$ : 成長膜厚

界面での相互拡散、格子振動などの効果を見無視すると成長層の自由エネルギーは内部エネルギーで近似することができる。この近似のもとでは、二次元コヒーレント成長の自由エネルギーは成長層の表面エネルギーと歪みエネルギーの和によって表わされ、以下のように成長膜厚  $h$  の関数となる。

$$E_{\text{coh}}^{2\text{D}}(h) = \gamma + \frac{1}{2} M \epsilon_0^2 h \quad (1)$$

SK コヒーレント成長においては、(1)にSK 島形成による表面エネルギーの増加と歪みエネルギーの減少が加わるため、自由エネルギーの表式は

$$E_{\text{coh}}^{\text{SK}}(h) = \gamma(1+\beta) + \frac{1}{2} M(1-\alpha)\epsilon_0^2 h \quad (2)$$

のように  $h$  の関数になる。これに対し二次元転位成長の自由エネルギーは成長層の膜厚  $h$  に加えて平均の転位間隔  $l$  の関数にもなり、次のように表わせる

$$E_{\text{MDs}}^{2\text{D}}(h, l) = \gamma + \frac{1}{2} M \left[ \epsilon_0 \left( 1 - \frac{l_0}{l} \right) \right]^2 h + \frac{E_d}{l} \quad (3)$$

同様にSK 転位成長の自由エネルギーも  $h$  と  $l$  の関数として表わされ、

$$E_{\text{MDs}}^{\text{SK}}(h, l) = \gamma(1+\beta) + \frac{1}{2} M(1-\alpha) \times \left[ \epsilon_0 \left( 1 - \frac{l_0}{l} \right) \right]^2 h + \frac{E_d}{l} \quad (4)$$

のようになる。これらの表式からわかるように、前者2種類の成長モードに対する自由エネルギーは単純な成長膜厚  $h$  の関数として与えられるのに対し、後者2種類の成長モードは成長膜厚  $h$  と平均転位間隔  $l$  の関数として与えられる。現実の成長層の転位間隔は、自由エネルギーを最小とする値  $l = l^{\text{opt}}(h)$  をとるので、 $l^{\text{opt}}(h)$  を求めてみる。二次元転位成長における  $l^{\text{opt}}(h)$  は

$$l_{2\text{D-MDs}}^{\text{opt}}(h) = l_0 \left( 1 - \frac{h_c^{2\text{D-MDs}}}{h} \right)^{-1} \quad (5)$$

のように表わされる。ここで  $h_c^{2\text{D-MDs}}$  は二次元転位成長における臨界膜厚で、このときに一本の転位が界面に形成される。 $h_c^{2\text{D-MDs}}$  は次式で与えられる。

$$h_c^{2\text{D-MDs}} = \frac{E_d}{M \epsilon_0^2 l_0} \quad (6)$$

一方、SK 転位成長における  $l^{\text{opt}}(h)$  は次のように与えられる。

$$l_{\text{SK-MDs}}^{\text{opt}}(h) = l_0 \left( 1 - \frac{h_c^{\text{SK-MDs}}}{h} \right)^{-1} \quad (7)$$

ここに、 $h_c^{\text{SK-MDs}}$  はSK 転位成長における臨界膜厚で、

$$h_c^{SK-MDs} = \frac{E_d}{(1-\alpha)M\epsilon_0^2 l_0} \quad (8)$$

のように与えられる。式(5)および(7)で与えられる最適の転位間隔  $l^{opt}(h)$  を用いて  $l$  に関して最小化された自由エネルギーは以下のようにそれぞれ式(9)および(10)のように  $h$  の関数として与えられる。

$$E_{min MDs}^{2D}(h) = \gamma + \frac{E_d}{l_0} - \frac{E_d^2}{2M\epsilon_0^2 l_0^2 h} \quad (9)$$

$$E_{min MDs}^{SK}(h) = \gamma + \frac{E_d}{l_0} - \frac{E_d^2}{2(1-\alpha)M\epsilon_0^2 l_0^2 h} \quad (10)$$

こうして得られた各成長モードにおける自由エネルギーの表式(1), (2), (9), (10)を与えられた成長膜厚  $h$  において比較することによって、「最適成長モード」が決定される。さらに「最適成長モード」の成長膜厚依存性を考察することによって多様な成長過程を議論することができる。

### 2.2 成長過程の考察

前節の定式化を用いて、成長膜厚  $h$  の増加とともに「最適成長モード」がどのように移り変わるかを考察してみる。Fig. 2は、転位の形成エネルギーを変化させたときに出現する典型的な2つの成長過程を自由エネルギーの膜厚依存性とともにも模式的に示したものである。転位の形成エネルギー

が比較的小さいときは ( $E_d = 1.0 \text{ eV/\AA}$ )、成長のごく初期は二次元コヒーレント成長を示すが、成長膜厚が臨界膜厚  $h_c^{2D-MDs}$  を越えると界面に転位が形成されて二次元転位成長に成長モードが変化する。この後は成長モードに大きな変化は現れない。この成長過程は典型的な Frank-van der Merwe 成長 (FM 成長) で、このような成長は GaAs(110) 基板あるいは GaAs(111)A 基板の上の InAs のヘテロ成長において観察されている<sup>11,12)</sup>。これに対し、転位の形成エネルギーが比較的大きいときには ( $E_d = 2.0 \text{ eV/\AA}$ )、ごく初期に現れる二次元コヒーレント成長がまず成長膜厚  $h_T$  のときに SK コヒーレント成長に移る。さらに成長膜厚が増加して  $h_c^{SK-MDs}$  に達すると界面に転位が形成され、成長モードは SK 転位成長に変化する。ところがここで現れた SK 転位成長もこの後ずっと続くわけではなく、最終的に成長膜厚が  $h_P$  を越えると成長モードは二次元転位成長に移る。これはよく知られた Stranski-Krastanov (SK) 成長の一種で、多くの格子不整合系のエピタキシャル成長において観測されている。このように転位の形成エネルギー大小によって予想される成長過程が全く異なるものになり得ることが示された。ここで行った理論的考察は Energetics のみを考え Dynamics の効果を考慮していないにもかかわらず、自由エネルギー表式におけるパラメータの値を変化させることにより、さらに複雑で多様な成長過程を再現することができることを追記しておく。

簡単に成長過程における Dynamics の効果についても触れておこう。たとえば、成長膜厚が非常に厚くなったときに界面に新たに転位が形成され

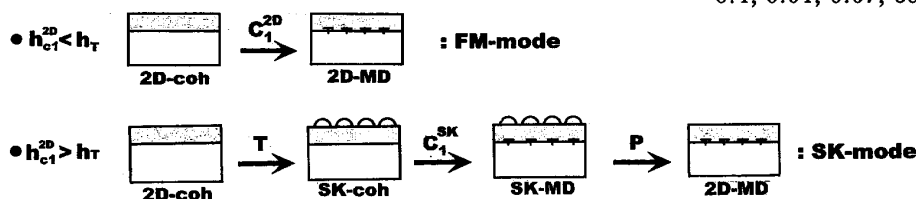
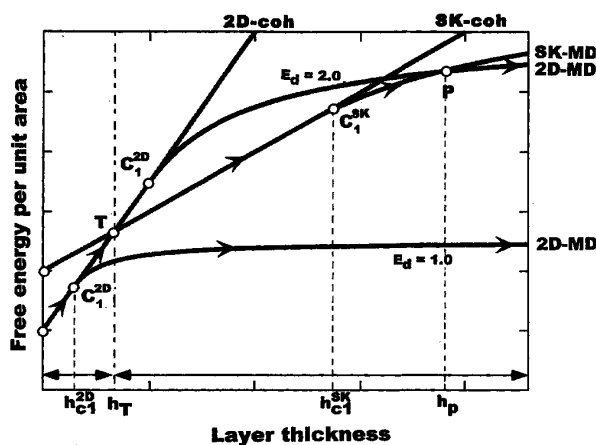


Fig. 2 Change in the free energy with layer thickness  $h$ . By tracing the trajectory of the optimal growth mode, the change in the growth mode can be described. Two typical growth behaviors (FM and SK) are illustrated. In this schematic figure,  $\alpha, \beta\gamma, \epsilon_0, l_0$  and  $M$  are set to 0.4, 0.04, 0.07, 60Å and  $1.0 \times 10^{11} \text{ N/m}^2$  respectively.

る方が自由エネルギーが低くなるケースについて考えてみよう。このケースではたとえ転位が形成された方がエネルギー的に得でも、成長層の厚さのために界面における転位形成は容易ではない。このことは、実験的に観測される多くの臨界膜厚が理論的に予想される臨界膜厚よりもずっと大きいことが多々あることに対応していると考えられる。

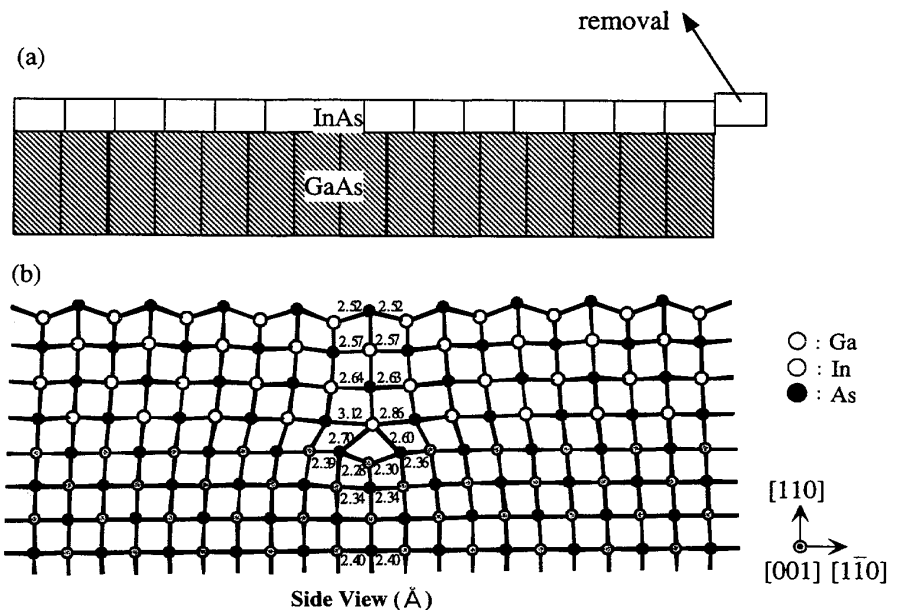
### §3 第一原理計算によるミスフィット転位の原子レベルの考察

前節では成長過程において転位の形成エネルギーが大きな役割を果たすことを述べた。転位の形成エネルギーは弾性論的に扱われることが多いが、このような扱いは物質の個性を反映していない。転位の形成エネルギーをより正確に扱うには原子レベルの転位芯構造に立脚したものでなくてはならない。ところが、格子不整合系の転位に関する第一原理計算はこれまでほとんど行われて来なかった。これは、現実を反映した計算を行うには非常に大きな規模の計算の必要があったからである。本節では原子レベルの転位計算の例として InAs/GaAs(110)系の転位の第一原理計算例を紹介する<sup>13)</sup>。さらに、第一原理計算で得られた結果に基づいて前節で議論したマクロスコピック理論のパラメータを決定し、InAs/GaAs(110)系の成長過程を議論する。

GaAs(110)表面上に InAs を成長すると、成長のごく初期に界面にミスフィット転位の周期的な配列(周期はおよそ60Å)が形成され、二次元的な成長が継続することが走査型トンネル顕微鏡(STM)によって観察されている<sup>11)</sup>。この実験においては、転位芯の直上に生じる表面のへこみ(0.5~0.7Å)をSTMによって観察することによって転位を観測している。この系は典型的なFM成長で二次元成長が継続する。

この系の転位芯の構造を第一原理計算で考察してみる。計算は局所密度汎関数法に基づいたノルム保存の擬ポテンシャルによって行った<sup>14,15)</sup>。擬波動関数は平面波で展開し、平面波のカットオフは7.29 Ryとした。交換相関ポテンシャルとしてはPerdewとZungerの関数形を用いた<sup>16)</sup>。またブリルアン・ゾーン積分は2個の $k$ 点を用いて遂行した。転位の計算はFig. 3(a)の模式図のように15周期のGaAs(110)基板上に14周期のInAs層を置き、1周期分のInAs層を取り除いた構造を初期構造とし、構造の最適化を行った。本計算は成長層の歪みが完全に解放されるように(001)方向を向いた90°の完全転位が平均の転位間隔 $l_0=58.76\text{\AA}$ で形成されたことに対応する。

InAs成長層が4原子層のときに、第一原理計算によって得られた得られた転位芯構造をFig. 3(b)に示す。転位芯は非常に特徴的な構造を呈し、中心に5配位のIn原子が存在することがわ



**Fig. 3**  
(a) Schematic view of the calculational procedure of the misfit dislocation generated at InAs/GaAs(110) heterointerfaces.  
(b) Obtained dislocation core structure of InAs/GaAs(110) heterointerface with an InAs layer is 4ML. Light, dark, and black circles indicate In, Ga, and As atoms, respectively. The numbers in the figure represent bond lengths (Å).

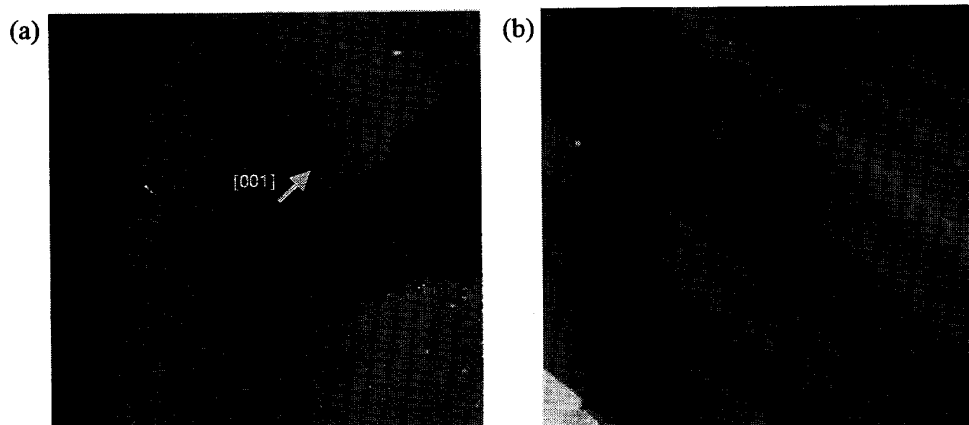


Fig. 4 An STM topographic image on a 5 ML-thick InAs film grown on GaAs(110) substrate. The area size is 100 nm × 100 nm. (a) 2.8 ML-thick InAs thin film grown on GaAs(110) substrate. (b) 5 ML-thick InAs film grown on GaAs(110) substrate.

かる．また5配位In原子の下方のGa原子は3配位になっている．詳しい電荷密度の解析の結果，Gaのdangling bondから隣接するAs原子への電荷移動が起きていることがわかった．すなわち，As原子に移動した電子が5配位In原子との5本目の結合を形成する担い手となると同時に，電子の送り手である3配位のGa原子のdangling bondは空になる．3配位Ga原子は同一層の原子に比べて0.7Å程度押し下げられているが，これはGaAs(110)表面で生じる表面電荷移動によって表面Ga原子が押し下げられるバックリング構造とも類似している．このような転位線近傍の構造緩和の結果として転位線直上の表面にへこみが発生することとなる．本計算で得られた転位線直上の表面のへこみはおよそ0.54Åとなり，実験で報告されている値 $0.55 \pm 0.05 \text{Å}$ とよい一致をみる．この特徴的な5配位構造は成長層の膜厚に依存せずに出現する．実際，InAs成長層が2原子層のときも，4原子層のときと同様に5配位In原子を含む転位芯構造が得られる．このように第一原理計算によって得られた5配位転位芯構造はInAs/GaAs(110)系において特徴的な構造である．5配位転位芯構造は現在のところ，実験的に確認されているわけではないが，今後研究の発展の中で観察される日がくることを期待したい．

以上のようにして得られた第一原理計算の結果はうまく組み合わせることによって前節で展開したマクロスコピック理論とつなぐことができる．

平均転位間隔 $l_0$ の系の全エネルギーはマクロスコピック理論における二次元転位成長における表式(3)  $E_{\text{MDs}}^{2\text{D}}(h, l)$ において $l=l_0$ としたことに対応する．したがって本第一原理計算で得られた全エネルギーは次の表式に相当する．

$$E_{\text{MDs}}^{2\text{D}}(h, l_0) = \gamma + \frac{E_d}{l_0} \quad (11)$$

一方，同じ成長膜厚で転位の存在しない系に対する全エネルギーはマクロスコピック理論における二次元コヒーレント成長の表式(1)に対応するので，2つの式(1)および(11)から得られる二次元コヒーレント成長と二次元転位成長のエネルギー差 $\Delta E(h)$ は，2つの未知数，有効弾性定数 $M$ とミスフィット転位の形成エネルギー $E_d$ を含む以下の形式で与えられる．

$$\begin{aligned} \Delta E(h) &= E_{\text{coh}}^{2\text{D}}(h) - E_{\text{MDs}}^{2\text{D}}(h, l_0) \\ &= -\frac{E_d}{l_0} + \frac{1}{2} M \varepsilon_0^2 h \end{aligned} \quad (12)$$

2つの成長膜厚に対して $\Delta E(h)$ を求めることによって $M$ と $E_d$ を第一原理から決定することができる．さらに，これらのパラメータを用いることによってこの系の臨界膜厚， $h_c^{2\text{D-MDs}}$ を決定できる．こうして求めた値は，

$$\begin{aligned} E_d &= 0.96 \text{ eV/Å}, \quad M = 1.22 \times 10^{11} \text{ N/m}^2, \\ h_c^{2\text{D-MDs}} &= 2.35 \text{ ML} \end{aligned} \quad (13)$$

である．さらに，同様に転位間隔 $l_0$ で転位が形成される方がコヒーレント成長するより安定になる成長膜厚は $h_c^{\text{Periodic}} = 4.7 \text{ ML}$ となる．これらの

マクロスコピックなパラメータの値について考察を加えてみる。有効弾性定数の値  $1.22 \times 10^{11}$  N/m<sup>2</sup> は InAs の弾性定数 ( $=0.4 \sim 0.8 \times 10^{11}$  N/m<sup>2</sup>) と同じオーダーになっていること、GaAs 基板と結合している影響もあることを考えると妥当な値が得られたと考えられる。一方、界面に形成された 90° の完全転位の形成エネルギー値  $0.96$  eV/Å は報告されている半導体結晶中の転位の形成エネルギー ( $2.0 \sim 8.0$  eV/Å) に比べて小さくなっている。これは、5 配位 In 原子を含む転位芯構造が同族原子同士の不安定なボンドをもたず、安定な III 族-V 族間のボンドのみを含んでいるためと理解できる。

以上の計算結果をふまえ、この系で成長中に転位が形成される様子を STM 観察で調べた結果、成長膜厚 2.8 ML のときに転位が観測されはじめ (Fig. 4(a)), 成長膜厚 5 ML のときに転位の周期的配列が形成されることがわかった (Fig. 4(b))。この実験結果は驚くべきことに理論値、 $h_c^{2D-MDs} = 2.35$  ML,  $h_c^{periodic} = 4.7$  ML とほぼ定量的に一致する。これは、実効的な転位の形成エネルギーなどのマクロスコピックパラメータの決定に精密な第一原理計算の情報に加わったことによると考えられる。

#### §4 おわりに

本稿では、ミスフィット転位の形成と SK 島の形成の 2 つの効果を取り込んだマクロスコピックな理論によって、格子不整合系のエピタキシャル成長において出現する複雑で多様な成長モードを体系的に記述できることを紹介した。さらに、マクロスコピック理論において現れるパラメータを第一原理計算に基づいて決定する手続きを示し、InAs/GaAs(110)系に適用した。こうして得られたパラメータを用いて理論的に予測される InAs/GaAs(110)系の臨界膜厚は、STM によって観察

される臨界膜厚とほぼ定量的に一致することがわかった。本研究はマクロスコピックな機構とマクロスコピックな成長過程が密接に関連していることを端的に示した格好の具体例であると思われる。今後もマイクロとマクロの関連に焦点をあてた研究のさらなる発展により、複雑な現象である結晶成長の理解が 21 世紀に向けてさらに進展することを期待する。

**謝辞** 本研究にあたり、東北大学の中嶋一雄教授、大阪市立大学の中山弘教授には有益な議論をいただきましたこと、心から感謝いたします。また、日頃から有益なコメントをいただいている NTT 物性基礎研の村瀬克実博士、高橋庸夫博士両博士にも感謝致します。本研究の一部は日本学術振興会・未来開拓学術推進事業「原子スケール表面界面制御」の援助を受けて行いました。

#### 【参考文献】

- 1) J. A. Venables, G. Spiller and M. Hanbucken: Rep. Prog. Phys., **40** (1984) 399.
- 2) J. H. van der Merwe: Critical Rev. in Solid Stat. Mat. Sci., **17** (1991) 187.
- 3) J. H. van der Merwe: J. Appl. Phys., **34** (1963) 117.
- 4) J. H. van der Merwe: J. Appl. Phys., **34** (1963) 123.
- 5) J. W. Matthews and A. E. Blakeslee: J. Crys. Growth, **29** (1975) 273.
- 6) J. W. Matthews and A. E. Blakeslee: J. Crys. Growth, **32** (1976) 265.
- 7) J. Tersoff: Phys. Rev. B **37** (1988) 6991.
- 8) J. Tersoff: Phys. Rev. Lett., **81** (1998) 3183.
- 9) K. Nakajima: Jpn. J. Appl. Phys., **38** (1999) 1875.
- 10) K. Okajima, K. Takeda, N. Oyama, E. Ohta, K. Shiraishi, and T. Ohno: Jpn. J. Appl. Phys., **39** (2000) in press.
- 11) J. G. Belk, J. L. Sudijono, X. M. Zhang, J. H. Neave, T. S. Jones, and B. A. Joyce: Phys. Rev. Lett., **78** (1997) 475.
- 12) H. Yamaguchi, J. G. Belk, X. M. Zhang, J. L. Sudijono, M. R. Fahy, T. S. Jones, D. W. Pashley and B. A. Joyce: Phys. Rev. B **55** (1997) 1337.
- 13) N. Oyama, E. Ohta, K. Takeda, K. Shiraishi, and H. Yamaguchi: J. Cryst. Growth, **201/202** (1999) 256.
- 14) D. R. Hamman, M. Schluter and C. Chiang: Phys. Rev. Lett., **43** (1979) 1494.
- 15) J. Ihm, A. Zunger and M. L. Cohen: J. Phys. C (Solid State Phys.), **12** (1979) 4409.
- 16) J. P. Perdew and A. Zunger: Phys. Rev. B **23** (1981) 5048.