

特集 どのように結晶成長現象をモデル化するか？

ヘテロエピタキシャル成長におけるミスフィット転位と島状構造

勝野弘康¹・上羽牧夫²・齋藤幸夫³

転位を持つヘテロエピタキシャル成長の表面形態について2次元弾性格子模型を用いたこれまでの研究を紹介する。転位が作る結晶中の非一様な歪み場により、吸着原子は特定のサイトに集められる。その結果、平坦な表面上での次の層の核生成サイトが、転位直上もしくは転位間の中間位置の2つの場合に分かれる。また、いくつかの吸着量でエネルギー最低となる平衡形状を決めることで、吸着物結晶の成長様式を推測した。表面を完全に濡らす通常の半導体結晶の組み合わせを想定すると、格子不整合が大きくなるにつれ、Frank-van der Merwe (FM) 成長、Stranski-Krastanov (SK) 成長、転位を含むSK成長、転位を含むFM成長と変化する。また、SK成長と転位を含むFM成長の間の領域で一時的に島状構造が現れうることがわかった。

1. はじめに

Si/Ge や InGs/GaAs に代表される半導体材料を用いたヘテロエピタキシャル成長では、結晶内部に蓄積される歪みによって、自発的にナノスケールの島状構造が現れる。基板結晶と吸着物結晶が同じもの（ホモエピタキシャル成長）であれば、表面エネルギーを最小にする形状、すなわち層成長（Frank-van der Merwe 成長：FM）となる。しかしながら基板結晶と吸着物結晶が異なると、それぞれの結晶構造や格子定数などの物理的性質や化学的性質が異なるために、吸着種が基板に吸着したとしてもその内部に歪みが生じる。格子の不整合がある程度大きくなると、吸着層が厚くなるに従って歪みによるエネルギー不利を解消するために、吸着層の上に量子ドットのような均一で微細な島状構造を作る（Stranski-Krastanov 成長：SK）。さらに格子不整合度が大きくなると、基板に直接島状構造を作る（Volmer-Weber 成長：VW）。定性的には表面積を小さくしようとする表面エネルギーと格子不整合によって生じた結晶内部の歪みを緩和させる弾性エネルギーの競合の結果と理解でき、成長初期段階の表面変化の違いから上記のように3つの成長様式に分類されている。理論的には連続弾性論を用いた方法^{1,2,3)}、格子模型を用いた方法^{4,5,6)}によって吸着物結晶の成長の様子が調べられている。本稿では、格子模型を用いたエネルギー計算方法の紹介とともに、格子欠陥として多くの系で報告されているミスフィット転位の導入も考慮した成長様式の理論的研究を紹介する。

2. 弾性格子模型と格子グリーン関数法

まず、本稿で扱う弾性格子模型とその他の模型との差異

について触れておく。ヘテロエピタキシャル成長では、結晶の歪みが重要な役割を果たす。表面形状は結晶の持つ歪みによりさまざま変化するため、系の歪みを正確に評価するにはどのようにしたらよいか、ということが問題になる。歪みに関しては、広く用いられている連続弾性論がある。適当な近似のもとであれば解析解が得られることもあり、その有用性は大きい。連続弾性理論による解析方法はマクロスケールではその正しさを疑うべくもないが、結晶の格子が見えるようなナノメートルサイズの系ではその有効性が不明である。また、結晶成長のように原子が一つずつ積み重なっていく過程を調べるためには、原子一つ吸着した際のエネルギー変化を調べなければならない。第一原理計算による解析ではそのようなエネルギー変化を調べることが可能ではあるが、現状の計算機では、結晶成長のような動的な変化を調べるには性能不足を否めない。本稿では、各原子を最近接原子間、次近接原子間を伸び縮みできるバネでつないだ弾性格子模型^{7,8)}を用いる。本学会誌でも、弾性格子模型の紹介がなされている⁹⁾が、本稿でも簡単に概説をしておく。

現実には3次元系であるが、簡単のために本稿では2次元系を扱う。基板結晶は格子定数が a の正方格子の(10)面を用い、吸着物結晶として、格子定数 b の正方格子を用いることにする(図1)。両者の格子定数の違いである格子不整合度 f を以下のように定義する。

$$f = \frac{b-a}{a} \quad (1)$$

吸着物結晶の格子定数の方が大きければ $f > 0$ となる。 $f =$

¹ 学習院大学計算機センター 〒171-8588 東京都豊島区目白1-5-1

² 名古屋大学理学研究科物理学教室 〒464-8602 名古屋市千種区不老町

³ 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

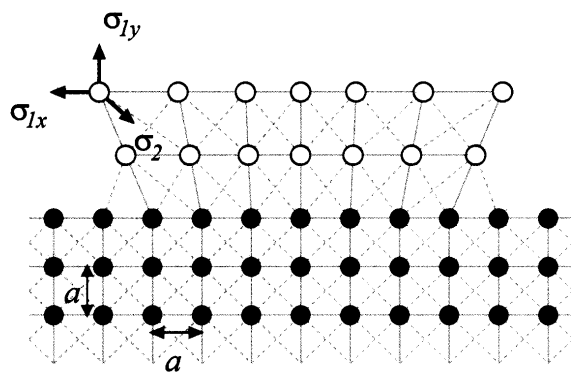


図1 下地より大きな格子定数の吸着物結晶の島。

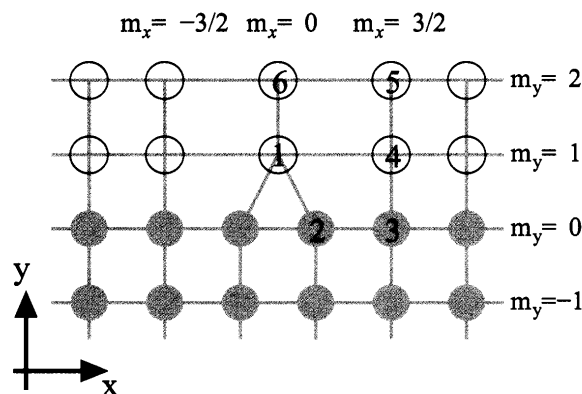


図2 格子模型におけるミスフィット転位。

0での原子間ポテンシャルのうち、変位の0次の項（平衡位置での値）は結合エネルギー J 、1次の係数は自発応力 σ_0 、2次の係数はバネ定数 K を意味する。自発応力 σ_0 は、バルクや(10)表面では何も作用しない。しかし、たとえばステップが存在すると力の不均衡が生じ、自発的に格子を歪ませる。格子模型では自発応力があるので、ステップ間の弾性相互作用を自然な形で導入できる。吸着物結晶内において、これらの定数は格子不整合度 f を用いて以下のように変更される。

$$J'_{1x} = J_1 - \sigma_0 f a - K(fa)^2, \quad (2)$$

$$J'_{1y} = J_1 + \frac{1}{3} \sigma_0 f a - \frac{K}{9} (fa)^2, \quad (3)$$

$$J'_2 = J_2 + \frac{1}{3} \sigma_0 f a - \frac{K}{9} (fa)^2, \quad (4)$$

$$\sigma'_{1x} = \sigma_0 + 2Kfa, \quad (5)$$

$$\sigma'_{1y} = -2\sigma_2 = \sigma_0 - \frac{2K}{3} fa. \quad (6)$$

添字の1, 2はそれぞれ最近接, 次近接を表し, 最近接については横, 縦方向で異なるため, それぞれを x, y と記している。等方弾性体の場合には, 最近接, 次近接ポテンシャルエネルギーの変位の2次の係数 K_1, K_2 に $K_1 = 2K_2 = 2K$ の関係がある。この系の弾性的性質は, ヤング率 $E = 8K/3$, ポアソン比 $\nu = 1/3$ となっている。 $f > 0$ のとき, 吸着物結晶層が基板結晶に欠陥なく吸着したとすると, 横方向に圧縮され, 縦方向には伸びることになる。図1のように島ができていれば, 島の側面で格子歪みを緩和できる。なお, $f = 0$ であれば, 基板結晶と吸着物結晶が同種ということになり, ホモエピタキシの系を考えていることになる。

さて, 歪みの効果は長距離に及ぶ。基板結晶の弾性的効

果はどのように取り扱えばよいだろうか。一つの方法としては, 十分に厚い基板格子を用いる方法がある。基板の厚さを変えても結果が変わらなければ, 基板からの寄与は十分に取りこめているというわけである。基板結晶をまじめに多く考慮することは, 数値計算上の時間的制約から考えても避けたいところである。この点については, 齋藤によって考案されている格子グリーン関数法¹⁰⁾によって解消できる。この方法は, 半無限平面の基板の弾性的性質を基板結晶最上層の1層のみで近似なく扱うことができる。格子グリーン関数法は, 連続弾性論でよく知られている半平面のグリーン関数¹¹⁾の格子模型版に相当する。基板表面原子に加わっている力から任意の位置にある基板表面原子の変位が求まる。本稿では, その逆であるカーネル関数 $H_{\alpha\beta}(m_x - m'_x)$ を用いる。形式的には, 格子間隔を単位とした位置座標 $(m_x, 0)$ にある表面原子に加わる力 $f_\alpha(m_x, 0)$ は, 全ての表面原子の変位 $u_\beta(m'_x, 0)$ を用いて,

$$f_\alpha(m_x, 0) = - \sum_{\beta=x,y} \sum_{m'_x=1}^L H_{\alpha\beta}(m_x - m'_x) u_\beta(m'_x, 0), \quad (7)$$

と書ける。ただし, x 方向に周期境界条件を用いており, そのサイズを L としてある。

本稿では, さらにミスフィット転位を扱えるようにする。簡単のためにホモエピタキシャル系で, バーガスベクトル $(-1, 0)$ の刃状転位が導入された原子の格子位置を具体的に考えてみると, 例えば, 図2のようになる。図2では, 平らな(01)表面を持つ基板結晶が $m_y \leq 0$ にあり, その上に吸着層が2層吸着している。転位線は奥行き方向に伸びていることになる。番号がふつてある原子の間隔に着目すると, 他の原子間隔にくらべ原子間隔が大きい結合状態となる。最近接ペアである(1,4), (5,6), 次近接ペアである(1,3), (1,5), (4,6)のような組は, 単純にバネが伸びていると考える。以下では, 簡単のために, 転位が吸着物結晶と基板結晶の界面に導入された状態だけを扱う。一般に界面での原子間相互作用は, 吸着物結晶内部や基板

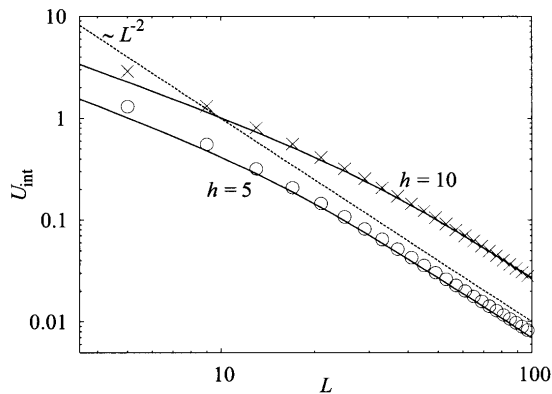


図3 距離 L 離れた時の転位間相互作用エネルギー、 h は吸着量を表す。記号：格子模型，実線：連続弾性論。

結晶内部のものとは異なる。ここでは、格子不整合による結晶の歪みの効果のみに焦点を当てたいので、結合エネルギー、自発応力、弾性定数は、界面と吸着物結晶内部のものは同じとする。また、特に断りがないかぎり、長さの単位として $a=1$ 、エネルギーの単位として $Ka^2=1$ を用いる。

以上のようにすべての原子間ポテンシャルを定義できれば、系のエネルギーはバネのエネルギーを勘定すればよいことになる。実際の数値計算では、各原子に加わる合力がゼロになるように原子を力学的な平衡位置へ緩和させ、ポテンシャルエネルギーを足し合わせることで、平衡位置での系のエネルギーを求める。

上記のように拡張した格子模型の転位と連続弾性論による転位とを比較しておく。その一例として、平らな基板結晶と数層の吸着物結晶との界面に周期的に転位が導入された場合について、転位間の弾性相互作用エネルギーを調べた結果を図3に示す。3次元で得られている連続性理論での厳密解¹²⁾を2次元の解に修正したものが実線で示してある。 h は表面から転位までの吸着層の厚さを表している。吸着層が薄い場合にはわずかにずれるが、これは連続弾性論では無視している転位芯まわりの力の分布による効果である¹³⁾。転位間隔 L が大きくなれば、転位間弾性相互作用は距離の逆2乗に比例して、両者はよく一致している。同時に、これは模型の正当性が確かめられたことにもなる。また、転位間の弾性相互作用エネルギーが距離の逆2乗で変化することから、転位を欠陥のない結晶中での力の双極子モーメント¹⁴⁾として扱ってよいことが分かる。バルクでの転位間の弾性相互作用エネルギーは距離について対数的に変化するが、表面近傍では、距離のべきで変化する。べきの変化については、次のように考えることができる。下半分の半無限空間の表面に距離 r だけ離れて二つの転位が入った結晶に対して、これをひっくり返して上半分の半無限空間に転位の入った結晶を一緒に考える。両者を押しつけて接合したものを想像すると、これは正負の転位を対し、その二組を r だけ離して無限結晶に入れた状態であ

る。転位間の相互作用ポテンシャルが距離の対数であるから、この正負の転位対間の相互作用ポテンシャルは距離の逆2乗である¹⁵⁾。ただし、もともと考えていた結晶の自由表面ではストレスの法線成分が零なのに対し結晶を仮想的に接合したときには変位の法線成分が零であるから、境界条件が異なる。厳密な対応ではないが、定性的には上記のように考えることができるだろう。

3. 転位と核生成位置の関係

本稿では、最終的には成長様式を調べる。その際、吸着物結晶の内部に転位を持つ島状構造も考慮したい。表面に形成される島構造は、吸着原子が一つずつ集まってできるものである。すなわち、表面のすぐ下に転位が存在したとき、特定のサイトに吸着原子が集まりやすければ、その位置に島が出現すると予想できる。転位と島の位置関係を知るために、転位と吸着原子の弾性相互作用について調べることにする。

原子配置の一例を図4のようにとる。□が基板原子を、■が吸着物結晶の原子を表している。図4では、余分に吸着した原子がちょうど転位の真上にある場合を描いてあり、転位と吸着原子間の距離 x がゼロの場合に相当する。横方向のサイズを L として周期境界条件を課す、周期 L で転位と吸着原子が配列していることになる。この余分に吸着した原子の位置を変え、格子模型によってエネルギー

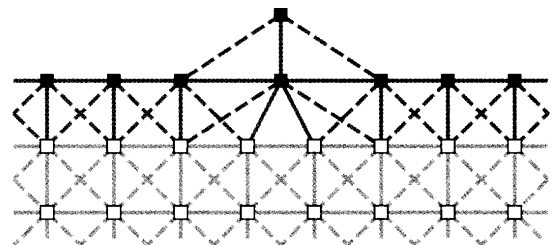


図4 界面に転位を持つ1層の吸着層の上に余分な原子が1つ吸着した状況。

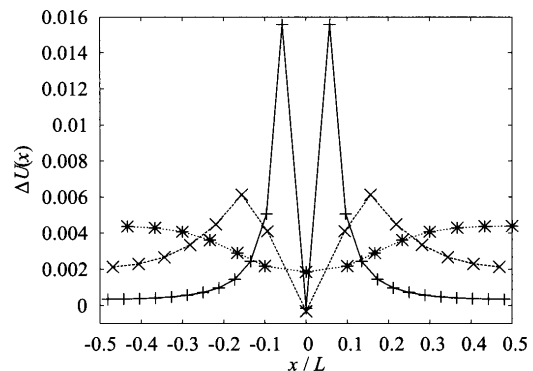


図5 転位と吸着原子の弾性相互作用。+ : $h=1$, $L=26$; × : $h=2$, $L=16$; * : $h=5$, $L=15$ 。各線は、データ点を結んだだけである。

を求めることにより、転位と吸着原子の弾性相互作用を調べることが可能である。その結果の一例を図5に示す。格子不整合度を $f=0.075$ 、吸着層の厚さ h を1モノレイヤー (ML), 2 ML, 5 MLとしてある。各条件における転位間距離 L は、余分な吸着原子がないときに格子不整合を緩和してエネルギーが最小になる間隔にとった。それぞれ、 $h=1$ では $L=26a$ 、 $h=2$ では $L=16a$ 、 $h=5$ では $L=15a$ である¹⁶⁾。横軸は、転位と余分な吸着原子の距離 x を転位間隔 L で割ったものとしてある。縦軸は、転位と余分な吸着原子の相互作用 $\Delta U(x)$ である。 $\Delta U(x)$ は、以下のようにして求める。まず、格子模型を用いて、図4のような配置に対するエネルギーを求める。このエネルギー $U(x)$ は、転位一本あたりのエネルギー、転位間弾性相互作用エネルギー、余分な吸着原子1個あたりのエネルギー、吸着原子間弾性相互作用エネルギー、転位と余分な吸着原子の弾性相互作用エネルギーを含んでいる。そこで、吸着原子が無く周期 L で転位が配列しているだけのときのエネルギー E_d 、転位が無く余分な吸着原子が周期 L で配列しているだけのときのエネルギー E_a を格子模型によって求め、 $U(x)$ から引く。また、それぞれのエネルギーの基準を、格子不整合による一様歪みを受けた場合の吸着層のエネルギーとする。以上より、転位と余分な吸着原子の相互作用エネルギーは、

$$\Delta U(x) = U(x) - E_d - E_a + Ef^2hL/2 \quad (8)$$

と定義できる。重要な点は、相互作用 $\Delta U(x)$ が最小となるのは、吸着原子が転位の真上 $x=0$ に来たときであることである。また、吸着層が薄い場合には、転位の真上 ($x=0$) と転位の中間 ($x=L/2$) の2点に相互作用エネルギー極小となる点がある。逆に相互作用エネルギーが最大となる点は、吸着層が薄ければ、およそ吸着層の厚さ h に比例して変化しているのに対して、吸着層が厚くなれば $x=L/2$ の1点のみとなる。吸着層が厚くなると、極大と極小の点でのエネルギー差は、小さくなるものの、弾性エネルギーが最低となる点は、転位の真上である $x=0$ の場所から変化しない。

相互作用エネルギー $\Delta U(x)$ の位置依存性は、格子模型で見積もった表面歪みにほぼ等しく、両者は密接に関係している。一般に、平らな表面に原子が吸着すると、その表面には、力の分布である力の双極子が生じる¹⁷⁾。系の弾性エネルギーは近似的に、吸着原子が作る力の双極子モーメント d_{xx} と転位が作る表面の歪み u_{xx} の積 $-d_{xx}u_{xx}/2$ である。格子模型の場合、(10) 面上の吸着原子の作る力の双極子モーメント d_{xx} はおよそ次近接原子間の自発応力 σ^2 によって決まり、 $d_{xx}<0$ である (図6)。 d_{xx} が場所によらず一定だと思えば、吸着原子が受けるポテンシャルの形状はおよそ転位が作る表面歪みが決めていると考えて差し支えないことが分かる。

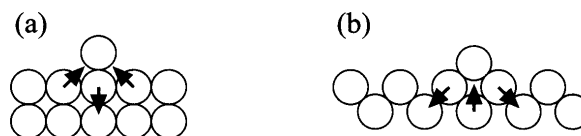


図6 (a) 正方格子の(10)面上での吸着原子による力の双極子モーメント $d_{xx}<0$ 。(b) (11)面上でのモーメント $d_{xx}>0$ 。

今回調べた転位はバーガスベクトル -1 のものであったが、 $+1$ の場合¹⁹⁾には、表面歪み u_{xx} の符号を変えるだけである。このことから相互作用最小となる位置が判定でき、吸着原子の吸着サイトに関係したモーメント d_{xx} と格子不整合度 f の符号を調べることで核生成位置に関する予想ができる¹⁸⁾。十分に吸着層が厚くなった ($h \geq L/2$) と、 $d_{xx}f < 0$ であれば、転位の真上 ($x=0$) で核生成が起こると考えられる。逆に、 $d_{xx}f > 0$ であれば、転位の中間 ($x=L/2$) で核生成が起こるであろう。吸着層が薄い ($h < L/2$) ときは、相互作用エネルギー $\Delta U(x)$ が極小を2点持つために、多少複雑になる。 $d_{xx}f < 0$ であれば、転位の真上と転位の間の両方で核生成が起こると考えられる。ただし、 $\Delta U(x)$ の最小値は $x=0$ の点であったこと (図5) を考慮すると、転位の真上の方が、核生成率が大きいと予想できる。 $d_{xx}f > 0$ であれば、転位から吸着層の厚さ h 程度離れた、 $x \sim \pm h$ あたりで、核生成が起こると考えられる。転位の真上では、常に相互作用エネルギーが最大となっていたことを考慮すれば、転位の真上に吸着原子が来にくく、結果的に、クラスタは転位の間に現れると考えられる。いくつかの実験例をみると、Ag/MgO (001) 上での Co の成長²⁰⁾ では転位直上で、InAs/GaAs (110) 上での Ga の成長²¹⁾ では転位間でクラスタが多く分布していることから、上記の解釈とつじつまが合っている。

4. 転位を含む吸着物結晶の成長様式

前節までに得た知見を用いてヘテロエピタキシャル成長での吸着物結晶の成長様式について格子模型を用いて推測してみる。

方法としては、吸着量を固定して、いろいろな表面形態のエネルギーを調べ、その比較から、ある不整合度 f における最低エネルギーを持つ平衡形状を決める。実際に起こる成長では平衡形が連続的に出現すると考えて、成長様式を推測する。簡単のためにこれまでと同様に、基板結晶内部、吸着物結晶内部の性質を同じにし、結合エネルギー $J = J_1 = 2J_2$ の制限をつけ、自発応力は $\sigma_0 a = 0.1$ とする。また、界面では結合エネルギーを1.1倍にするにとどめ、弾性的性質は同じとする。

平衡形状の候補として、完全に平らな層 (L)、層と島が共存する形状 (LI)、島のみの構造 (I) とそれぞれに転位が加わっている形状 (LD, LID, ID) の合計6種類を考える (図7)。島の形状は簡単のために $J_1 = 2J_2$ から決

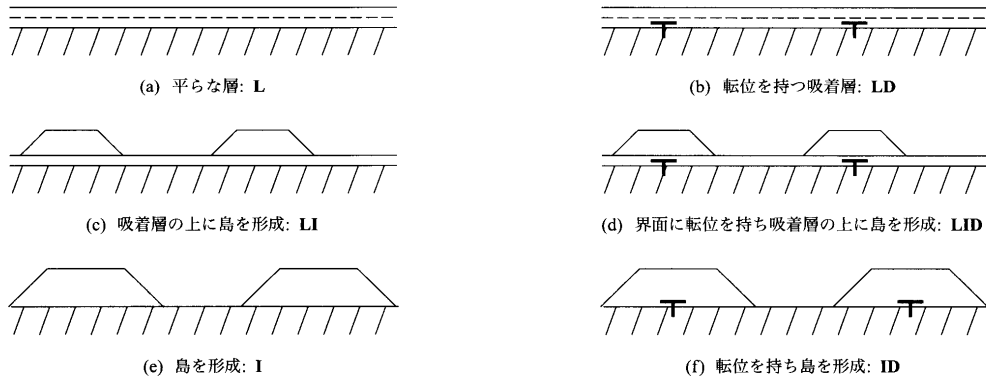


図7 平衡形状の候補

まる平衡形の一部を用いる。また、転位と吸着原子の弾性相互作用が引力的であったため、転位周辺で次の層の成長が始まると考える。転位の周期と島の配置の周期は同じとしている。

計算結果の一例として、結合エネルギー $J=0.1$ 、格子不整合度 $f=0.05$ での各表面形態のエネルギーの系のサイズ L 依存性を図8に示す。サイズ L が大きいということは、島のサイズが大きい、もしくは島間/転位間の距離が大きいということを意味する。連続弾性論を用いてエネルギーのサイズ依存性をフィッティングすることで、数値的には計算困難なサイズ L の大きな領域についても検討している(図中の曲線)。横軸を転位間隔、あるいは島間隔を表す L にとり、縦軸の U_{tot}/N は、吸着原子1個あたりのエネルギーを表している。記号と表面形態の対応は、層状形態 L :実線、島状構造 I : \triangle 、転位を持つ層状形態 LD : \bullet 、転位を含む島状構造 ID : \blacktriangle となっている。

図8(a)では、1 MLでのエネルギー計算結果が示されている。実線で示された層状形態 L のエネルギーは、他の表面形態と異なり、系のサイズ依存性がなく一定である。結合エネルギーより、層状形態 L のエネルギーは、 $U_{\text{tot}}/N = -0.3171$ と求まる。島状形態 I や ID は、明らかに層状形態 L よりもエネルギーが高い。また、臨界膜厚²²⁾を越えていないため、平らな吸着層に転位を導入するとエネルギー的に不利となる。図中では、系の大きさ L が300以上において、層状形態 L と転位を含む層状形態 LD の線が重なっているように見えるが、臨界膜厚を考慮すると、 LD は、 L よりも高いエネルギー状態であると言える。以上のことから、このときの平衡形状は層状形態 L と判定できる。2 ML(図8(b))では、1 MLで考慮した表面形態に加えて島と層が形成される LI 、さらに転位を含む LID を考慮した。それぞれ、 LI : \square 、 LID : \blacksquare の記号で示されている。ただし、エネルギーが高くなる島状形態 I 、 ID のエネルギー曲線は描いていない。2 MLのときも1 MLのときと同様、臨界膜厚以下である。1 MLのときとは異なり、サイズ L が大きくなると、他の表面形態よりも転位を含む表面形態 LID のエネルギーが下がるよう

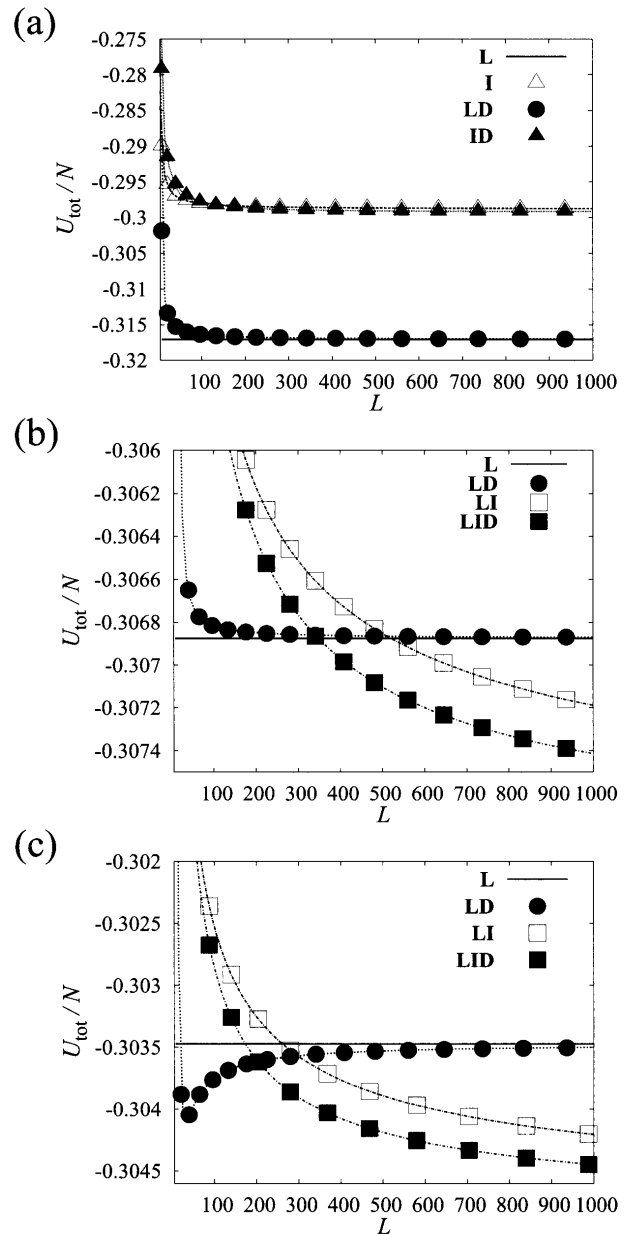


図8 $J=0.1$, $f=0.05$ での表面形態エネルギー変化。(a): 1 ML, (b): 2 ML, (c): 3 ML。(a), (b)では、 $L > 300$ において、 L と LD の線がほぼ重なっている。

にみえる。しかし、フィッティングによれば、系のサイズが 10^4 程度以上になれば、**LI** のエネルギーのほうが低い。よって、平衡形状は **LI** と判定できる。吸着量 3 ML (図 8 (c)) のときには臨界膜厚を越えているものの、島のサイズが大きくなると、表面形態 **LI** のエネルギーがもっとも低くなる。よって、平衡形状は 2 ML と同じ **LI** である。以上の結果から、 $J=0.1$, $f=0.05$ のときには、吸着量が増すにつれ、表面の平衡形状は **L** → **LI** → **LI** のように変化し、**SK** 成長が期待される。

その他も同様に平衡形状から成長様式を推測し、まとめたものが図 9 である²³⁾。エネルギーの単位として $Ka^2=1$ を選んでいるため、この図の縦軸は結合エネルギーと弾性エネルギーの比を表していることになる。

$J=0.1$ がおよそ典型的な半導体のパラメータに相当している²⁴⁾ と考えられるため、その近傍での不整合度の変化による成長様式の変化をみてみることにする。

不整合度 $f=0$ であれば、表面の平衡形状が、**L** → **L** → **L** と変化している。このことから、層成長である **FM** 成長が予想される。

$0.025 < f < 0.07$ 程度では、表面の平衡形状が **L** → **LI** → **LI** と変化することから、はじめに層を形成し、その上に島ができ、その島が大きくなるという描像が得られ、**SK** 成長が予想される。

不整合度 $f=0.075$ では、表面の平衡形状が **L** → **LI** → **LD** のように変化している。はじめに層が形成され、その上にコヒーレントな島ができるが、その後転位が導入され、層成長するような成長様式が期待される。文献²⁵⁾ では、**SK** 成長といわれる **InGa_N/Ga_N (0001)** での島の形状と大きさの関係についての報告がある。そこでは、成長初期には、吸着層上に小さな島が多数できるのに対して、吸着量を多くすると、吸着層の上に、コヒーレントに吸着している角錐型の小さな島と転位を持つ角柱型の大きな島の 2 種類が観測されている。角錐型の島の高さは島の底面の大きさに比例しているが、角柱型の島の高さはほぼ一定である。この結果は、島成長 (3 次元成長) から層成長 (2 次元成長) へと変化した、とも解釈することができる。図 9 で **Transient Islands** と書いた領域はこのような成長に対応する可能性がある。

$f > 0.1$ では、平衡形状が **LD** → **LD** → **LD** となったことから転位を持つ **Frank-van der Merwe** 成長となると予想される。

以上から、エピタキシャル成長中における吸着物結晶の成長様式は不整合度が小さいときには、これまでの理解と相違なく、不整合度の増加に対して、**FM** 成長、**SK** 成長となることがわかる。さらに、不整合度が大きいときには、転位を持つ **FM** 成長となる。またごく狭い領域ではあるが、一時的に島を形成する領域も見られた。定性的には、わずかな歪みを解消させる場合には、島形成による格子の緩和が選ばれ、大きな歪みを解消するためには、転位の導入が

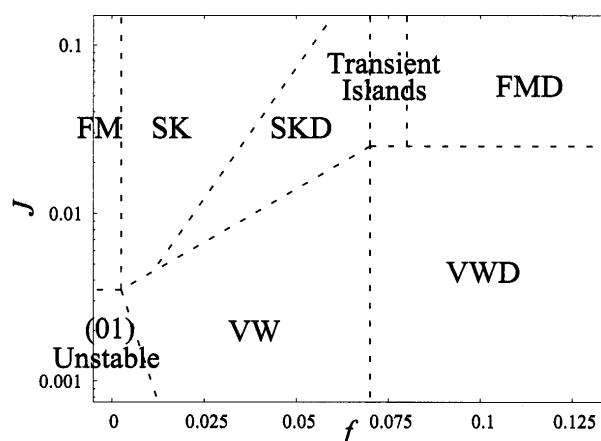


図 9 結合エネルギー J と不整合度 f の変化による成長様式の変化。FMD, SKD, VWD は転位を持つ FM, SK, VW を表す。

選ばれることが見て取れる。

本稿では、結合エネルギーと不整合度に焦点を当てて成長様式の変化を調べたが、バネ定数 K 、自発応力 σ_0 の変化についても触れておこう。エネルギースケールを考えると、図 9 の縦軸はバネ定数の逆数に読みかえることができる。結晶が硬い、すなわちバネ定数が大きいときには、**SK** 領域が狭くなり、**VW** 領域が大きくなる。おそらく、吸着層を形成した際のエネルギー増加が大きくなるためだと考えられる。一方、自発応力が大きくなると、島の側面に現れるステップでの弾性緩和が大きくなる。島状構造が層状構造よりもエネルギー的に優位になり、**VW** 領域が大きくなると考えられる。

5. ま と め

本稿では、弾性格子模型を用いたヘテロエピタキシャル成長での表面形状に関する研究を紹介した。ミスフィット転位は結晶表面に一樣でない歪み場を作るため、吸着原子を特定サイトに引きつける。これが核形成サイトになる可能性が高い。また、ミスフィット転位を考慮して成長様式についても調べた。これまで知られていたように、格子不整合の増加とともに、およそ **FM**, **SK**, **VW** が出現するが、結合エネルギー J が小さい時には転位を持つ **VW**、大きい時には転位をもつ **FM** が現れる。また、転位と島状構造の共存 (**SKD**) や、3 次元成長から 2 次元成長に切り替わるような成長 (**Transient Islands**) のような領域も現れた。これまでは単純に成長様式というと **FM**, **SK**, **VW** の 3 種類に分類されているが、転位を考慮するだけでその様子が大きく変わりうる。以上は簡単な 2 次元模型の結果であり、実験とは直接比べられるものではないが、転位の有無と言う視点から薄膜成長過程を見直すことは有益であろう。

参考文献

- 1) J. Tersoff and R. M. Tromp: Phys. Rev. Lett., **70** (1993) 2782
- 2) I. Daruka and A. -L. Barabási: Phys. Rev. Lett., **79** (1997) 3708
- 3) V. A. Shchukin and D. Bimberg: Rev. Mod. Phys., **71** (1999) 1125
- 4) H. Katsuno, H. Uemura, M. Uwaha, and Y. Saito: J. Cryst. Growth, **275** (2005) e283
- 5) M. T. Lung, C. H. Lam, and L. M. Sander: Phys. Rev. Lett., **95** (2005) 086102
- 6) A. Baskaran, J. Devita, and P. Smerka: Continuum. Mech. Thermodyn., **22** (2010) 1
- 7) H. Uemura, M. Uwaha, and Y. Saito: J. Phys. Soc. Jpn., **71** (2002) 1296
- 8) H. Uemura, M. Uwaha, and Y. Saito: J. Phys. Soc. Jpn., **72** (2003) 2856
- 9) 齋藤幸夫, 上村英明, 上羽牧夫: 結晶成長学会誌, **29** (2002) 8
- 10) Y. Saito, H. Uemura, and M. Uwaha: Phys. Rev., B **63** (2001) 045422
- 11) ランダウ, リフシッツ著, 佐藤常三, 石橋善弘訳: 弾性理論, (東京図書増補新版, 1989)
- 12) J. R. Willis, S. C. Jain, and R. Bullough: Philo. Mag., A **62** (1990) 115
- 13) H. Katsuno, M. Uwaha, and Y. Saito: J. Cryst. Growth, **310** (2008) 1380
- 14) 距離と力の積で定義されるテンソル量である. この場合には, モーメントの xx 成分の大きさが Eah である.
- 15) 連続弾性論を真面目に考えてもよいが, 冪だけを考えるならば, 静電相互作用との対応による解説がある. 上羽牧夫: Crystal Letters **42** (2009) 7. (<http://www.slab.phys.nagoyau.ac.jp/uwaha/uwaha09cl3.pdf>)
- 16) 本稿では議論していないが, この転位間隔は, 不整合度が 0.071 である次の実験報告と同程度である. G. Springholz and K. Wiesauer: Phys. Rev. Lett., **88** (2002) 015507
- 17) A. Pimpinelli and J. Villain: *Physics of Crystal Growth* (Cambridge University Press, Cambridge, 1998)
- 18) H. Katsuno, M. Uwaha, and Y. Saito: J. Phys. Soc. Jpn., **76** (2007) 044605
- 19) これは, 格子不整合度の符号が反転した場合に相当する.
- 20) F. Leroy, G. Genaud, A. Letoublon, R. Lazzari, C. Motte, and J. Goniakowski: Phys. Rev. Lett., **95** (2005) 185501
- 21) N. Oyama, A. Ohtake, S. Tsukamoto, N. Koguchi, and T. Ohno: Jpn. J. Appl. Phys., **43** (2004) L1422
- 22) J. W. Matthews and A. E. Blakeslee: J. Cryst. Growth, **27** (1974) 118
- 23) H. Katsuno, M. Uwaha, and Y. Satio: Surf. Sci., **62** (2008) 3461
- 24) 典型的な半導体 (Si, SiGe など) では, 表面エネルギー: $\gamma_{sc} \sim 1$ [J/m²], 格子定数: $a_{sc} \sim 5$ [Å], ヤング率: $E_{sc} \sim 100$ [GPa] であり, その比は, $\gamma_{sc} = E_{sc} a_{sc} \sim 0.02$ である. 本稿の格子模型では, このような系を対象として, パラメータ設定を行っている. 結合エネルギー $J_1 = 2J_2 = 0.1$ のとき, (01) 表面の表面エネルギー: $(J_1 + 2J_2)/2 = 0.1$. 格子定数: $a = 1$, ヤング率: $8K/3 = 8/3$ であるから, その比は 0.04 となる.
- 25) Y. Liu, Y. G. Cao, H. S. Wu, and M. H. Xie: Phys. Rev., B **71** (2005) 153406

(2011年5月9日受理)

Review

Growth Modes with Misfit Dislocations
in HeteroepitaxyHiroyasu Katsuno¹, Makio Uwaha², and Yukio Saito³

We study equilibrium shapes of adsorbate crystals by allowing a possibility of dislocations on an elastic substrate in a two-dimensional lattice model. On a flat adsorbate surface with a periodic array of misfit dislocations, the preferential adsorption site is found to be either on the top or at the midpoint of the dislocations depending on the sign of the force dipole moment of the adatom and the sign of the misfit parameter. From the equilibrium shapes determined for various coverages, we infer the growth mode. As the misfit parameter increases, the growth mode changes from the Frank-van der Merwe (FM) to the Stranski-Krastanov (SK), further to the FM with dislocations for a parameter range of ordinary semiconductor materials. Conceivable growth modes such as the SK with dislocations appear in a parameter range between the SK and the FM with dislocations.

¹ Computer Centre, Gakushuin University, 1-5-1 Mejiro, Toshima-ku, Tokyo 171-8588, Japan² Department of Physics, Nagoya University, Furo-cho, Chikusa-ku, Nagoya 464-8602, Japan³ Department of Physics, Keio University, 3-14-1 Hiyoshi, Kohoku-ku, Yokohama 223-8522, Japan