

学位申請論文公開講演会

日時：1月26日(金) 13:30 ~

申請者：勝野 弘康

場所：理学館大講義室 (B07)

題目：「ヘテロエピタキシャル系における転位と結晶表面形態の研究」

(主論文の要旨)

量子ドット作製に使われるナノスケール構造の結晶成長による自発的形成の原因が結晶の歪みであることから、微小スケールにおける弾性相互作用の研究が注目されている。これらの構造は、基板結晶上に異種結晶が成長するヘテロエピタキシャル成長で、界面エネルギーと弾性エネルギーの競合によって生み出される。その際、格子間隔の不整合を調整するミスフィット転位が重要だが、その微小な構造に対応する一般的理論はできていない。本研究では、原子レベルの表面形態の変化を扱える2次元弾性格子モデルに転位を導入し、数値計算に基づいた考察によって、既存の転位理論になかった一般的な知見を得た。また、格子モデルでの基底状態の原子配置を数値計算で決定することによって、ヘテロエピタキシャル系での島状構造形成のメカニズムについて考察した。

数値計算に使ったモデルは、最近接および次近接原子間を伸縮させたバネでつないだもので、自然な形で表面や格子欠陥での自発応力が発生する。また適切なつなぎ換えによって転位での原子配置を実現することができる。数値計算では、平らな表面を持つ半無限結晶を表面原子で置き換えることのできる格子 Green 関数法を導入して効率化をはかった。

連続体弾性理論では通常、転位芯の部分をくりぬいたモデルが使われるが、格子モデルでの相互作用を精査することによって、転位芯近傍での力の分布が相互作用に影響を及ぼし、転位対相互作用のバーガスベクトルの符号に対する対称性を破ることを見出した。ヘテロ界面にできるミスフィット転位間の相互作用としてもこの効果は重要であり、転位ネットワークの間隔について、最近の実験と厳密な弾性理論の不一致を解消しうることがわかった。

ミスフィット転位の導入は結晶表面に非一様な歪み場を作り出し、その上の吸着原子を特定の位置に引き寄せ、そこが次の原子層の核生成サイトとなる。転位の作る表面の歪み場には、格子不整合度と膜厚で決まる一般的な特徴があり、これと吸着原子の作る力の双極子モーメントの符号で、安定な位置が転位直上あるいは転位間の中間点のどちらかに決まることを示した。この事実は核生成サイトを判定するための簡便な判定法として使うことができる。

さらに、転位を含む吸着物結晶の様々な表面形態について、数値計算によってエネルギーの比較を行い、吸着量の関数として基底状態の配置を決めた。その結果をもとに、ヘテロエピタキシャル成長の格子不整合度による成長様式の変化を予想した。次元性の制約はあるものの、既存の理論では扱えない微小で急峻な表面構造についても信頼できる結果を得た。通常の格子不整合度での薄膜の成長様式については、転位をふくむ原子層上での島形成 (Stranski-Krastanov 成長) が臨界膜厚付近でおきる可能性があること、格子不整合度を大きくしても濡れ層なしの島成長 (Volmer-Weber 成長) は現れないことなどの新たな理論的予想を得た。