

## シリコン基板上ゲルマニウムハットクラスター成長過程に対するオーダーN法

### 第一原理計算による理論研究

#### Linear-scaling DFT study of the growth of Ge hut clusters on Si substrate

S. Arapan<sup>1</sup>、D. R. Bowler<sup>2</sup>、宮崎 剛<sup>1,2</sup>

Sergiu Arapan, David R. Bowler and Tsuyoshi Miyazaki

<sup>1</sup>物質・材料研究機構理論計算科学ユニット、<sup>2</sup>ロンドン大学(UCL) 物理天文学部

<sup>1</sup>Computational Materials Science Unit, National Institute for Materials Science (NIMS)

<sup>2</sup>Department of Physics and Astronomy, University College London (UCL)

最近のデバイスのサイズは数十ナノメートルの域に達し、その電子的特性は原子スケールの構造に強く依存している。様々なナノ構造の探索には、数万原子もしくはそれ以上を含む系に対する第一原理計算が必須となることが多い。オーダーN法第一原理計算プログラムCONQUESTは、数十万から百万原子以上を含む超大規模系に対しても構造最適化を含む第一原理計算を可能とする強力なプログラムである。本研究では、シリコン(001)表面上にゲルマニウムが成長する時に現れる3次元島（ハットクラスター）構造の成長過程のメカニズムをCONQUESTによる大規模第一原理計算によって明らかにすることを目的とする。ここから得られる知識を元に、ヘテロエピタキシー成長における格子不整合を積極的に用いた構造制御、そしてその結果得られる電子状態制御を実現可能とすることを最終目標とする。

シリコン表面上のゲルマニウムハットクラスターはある成長条件下で幅を変えずに長さだけを増加させて成長することが実験結果として報告されている。本研究では最初に、ハットクラスターの構造モデルとして、約2万原子を含む横に長いハットクラスターの構造を求めた。計算の結果、高さによってゲルマニウム間の平均距離が僅かに異なり、ストレス解放の程度が高さによって変わることを定量的に確認した。その後、大小二つのファセット面上をゲルマニウムダイマーが単一で吸着する際の多数の吸着位置に対して構造最適化計算を行い、吸着エネルギーの場所依存性を求めた。その結果、1)頂点や尾根が特に安定、ファセット間の稜線も安定、2)吸着位置が高い場合がより安定、3)縦と横のファセット面上で大きな差は見られない、4)ファセット下部はゲルマニウム平面上（ぬれ面上）よりも不安定、という結果が得られた。これらの結果から、吸着ゲルマニウムはあるエネルギー障壁を越えた後はハットクラスターの上部に集まるという事が示唆される。さらに、吸着ゲルマニウムがテラスを形成する際（不完全なファセット面）の安定化エネルギーを小さなファセット面上の上部、下部、そして大きなファセット面上の上部から形成する場合について計算した。その結果、小さなファセット面上を上部から埋める場合が初期過程において安定であることが分かった。以上から、ハットクラスターの結晶成長は小さなファセット面の上部から始まると結論される。

[1] T. Miyazaki, D. R. Bowler, M. J. Gillan and T. Ohno, JPSJ 77, 123706-1-4 (2008); T. Miyazaki, D. R. Bowler, R. Choudhury and M. J. Gillan, PRB 76, 115327-1-11 (2007).

[2] D. R. Bowler and T. Miyazaki, Rep. Prog. Phys. 75, 036503-1-43 (2012).