

自己組織化量子ドットの フェーズフィールドシミュレーション

Phase-Field Simulation of Self-Assembled Quantum Dots

高木 知弘 (神戸大・海科) 長谷部 忠司 (神戸大・工) 富田 佳宏 (神戸大・工)

Tomohiro TAKAKI, Kobe University

Tadashi HASEBE, Kobe University

Yoshihiro TOMITA, Kobe University

FAX: 078-431-6286 E-mail: takaki@maritime.kobe-u.ac.jp

Phase-field model for simulating the self-assembled quantum dot formation has been developed in which the driving force of the surface evolution is the elastic strain energy due to the lattice misfit strain. The variations of surface morphology and energy have been examined by performing two dimensional phase-field simulation with and without an anisotropy of surface energy.

1. 緒言

電子デバイスの飛躍的な改善を目指し、ヘテロエピタキシャル成長による基板上への量子ドットの自己組織化成長が注目されている。本研究では、基板上の薄膜が島状形態に自己組織化する過程を再現することのできるフェーズフィールドモデルを構築する。またシミュレーションを行うことにより、自己組織化過程の形態変化およびエネルギー変化を考察する。

2. フェーズフィールドモデル

基板、薄膜および気相によって構成される系を考える。この系の全自由エネルギー F として、次式で示す Ginzburg-Landau 型の自由エネルギー汎関数を採用する。

$$F = \int_V \left\{ f_d(\phi) + p(\phi) f_e(\phi, \varepsilon_{ij}) + \frac{a^2}{2} |\nabla\phi|^2 \right\} dV \quad (1)$$

ここで、 ϕ は固相 (= 基板 + 薄膜) 中で 1, 気相中で 0 の値をとるフェーズフィールド, ε_{ij} はひずみテンソル, a は ϕ の勾配修正係数, $p(\phi) = \phi^3 (10 - 15\phi + 6\phi^2)$ である。ダブルウェルポテンシャル $f_d(\phi)$ と弾性ひずみエネルギー密度 $f_e(\phi, \varepsilon_{ij})$ は次式で表される。

$$f_d(\phi) = W g(\phi) \quad (2)$$

$$f_e(\phi, \varepsilon_{ij}) = \frac{1}{2} D_{ijkl}(\phi) (\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^0) (\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^0) \quad (3)$$

ここで、 W は表面のエネルギー障壁, $g(\phi) = \phi^2 (1 - \phi)^2$, ε_{ij}^0 は基板と薄膜の格子不整合により生じる薄膜内の初期ひずみである。 $D_{ijkl}(\phi)$ は気相中で零, 固相中で弾性率 D_{ijkl}^0 の値を持つ滑らかに変化する弾性係数である。

表面エネルギーの異方性は、次に示す $a(\theta)$ を用いて考慮している。

$$a(\theta) = \bar{a} \{1 + \gamma \cos 4\theta\} \quad (4)$$

ここで、 θ は表面法線方向と x 軸との角度, γ は異方性強度であり、4 回対称としている。

以上より、次のような表面エネルギーの異方性を考慮した二次元問題における時間発展 Ginzburg-Landau 方

程式を得ることができる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial\phi}{\partial t} &= \nabla \cdot \left(M \nabla \frac{\delta F}{\delta\phi} \right) \\ &= M \nabla^2 \left[2\phi (1 - \phi) (1 - 2\phi) W + 30g(\phi) f_e(\phi, \varepsilon_{ij}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial}{\partial x} \left(a \frac{\partial a}{\partial\theta} \frac{\partial\phi}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(a \frac{\partial a}{\partial\theta} \frac{\partial\phi}{\partial x} \right) - \nabla \cdot (a^2 \nabla\phi) \right] \end{aligned} \quad (5)$$

$$\frac{\delta F}{\delta\varepsilon_{ij}} = \{ D_{ijkl} (\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^0) \}_{,j} = \sigma_{ij,j} = 0 \quad (6)$$

ここで、フェーズフィールド ϕ は保存量としている。 M はフェーズフィールドの易動度である。また、表面の移動に対して応力場は瞬間的に追従するとして、常に応力平衡が満足されていると仮定している。

式 (4) 中の \bar{a} と式 (5) 中の W は、式 (5) の一次元問題における定常状態を考えることで、次のように表面エネルギー σ と表面幅 δ に関係付けることができる。

$$\bar{a} = \sqrt{\frac{3\delta\sigma}{b}}, \quad W = \frac{6\sigma b}{\delta} \quad (7)$$

ここで、表面幅 δ を $\lambda < \phi < (1 - \lambda)$ の領域とすると、 $b = 2 \tanh^{-1} (1 - 2\lambda)$ が得られる。

なお、シミュレーションの過程において基板の形態は変わらないとし、基板内において式 (5) 中の弾性ひずみエネルギー項を $f_e(\phi, \varepsilon_{ij}) = 0$ としている。

3. 数値シミュレーション

式 (5) のフェーズフィールド方程式は差分法を用いて、式 (6) は平面ひずみ問題として 4 節点アイソパラメ

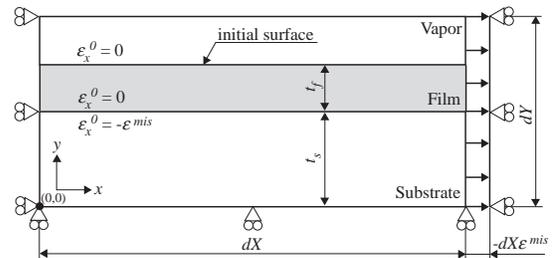


Fig. 1 Computational model

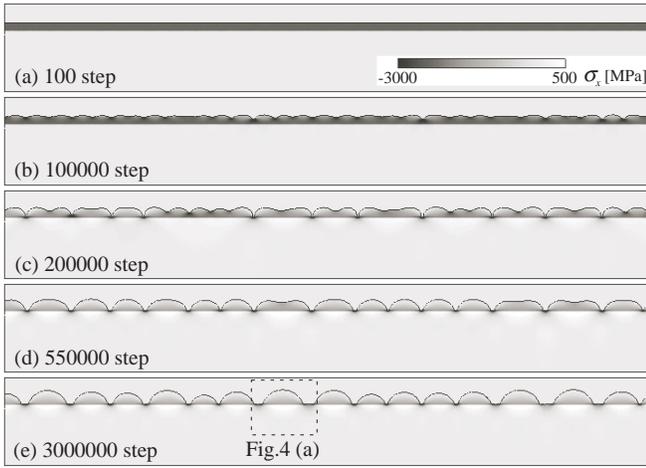


Fig. 2 Time evolution of surface morphology and stress distribution σ_x in the case of $\gamma = 0.0$

リック要素を用いた有限要素法を用いて離散化を行っている．式 (5) の時間発展は前進差分法を用いている．

図 1 は解析領域，初期条件，境界条件を示している．基板と薄膜の格子不整合による薄膜内のミスフィットひずみ ε^{mis} は，基板格子サイズ a_s と薄膜格子サイズ a_f を用いて， $\varepsilon^{mis} = (a_f - a_s) / a_s$ として表される．シミュレーションでは基板の形態は変化しないと仮定しているため，薄膜内よりも基板内でミスフィットひずみ ε^{mis} を考慮する方が便利である．そこで，基板内の x 方向の初期ひずみ $\varepsilon_x^0 = -\varepsilon^{mis}$ ，薄膜内の初期ひずみ $\varepsilon_x^0 = 0$ としている．

境界条件としては，フェーズフィールド ϕ に関しては，解析領域の左右端部において周期境界，上端部は $\phi = 0$ に固定，下端部では $\phi = 1$ に固定としている．応力場の解析では，左端部の x 方向変位，下端部の y 方向変位を拘束し，右端部に x 方向の $-dX\varepsilon^{mis}$ の強制変位を与えている．

次章に示すシミュレーション結果では，以下のパラメータを用いている．解析領域長 $dX = 10.08 \mu\text{m}$ ，解析領域幅 $dY = 1.34 \mu\text{m}$ ，差分格子と有限要素サイズ $dx = dy = 0.01 \mu\text{m}$ ，基板厚さ $t_s = 0.94 \mu\text{m}$ ，薄膜厚さ $t_f = 0.12 \mu\text{m}$ ，表面エネルギー $\sigma = 1.23 \text{ J/m}^2$ ，異方性強度 $\gamma = 0.1$ ，表面幅 $\delta = 4 dx$ ，易動度 $M = 0.1 \text{ m}^5/\text{Js}$ ，ヤング率 $E = 104 \text{ GPa}$ ，ポアソン比 $\nu = 0.27$ ，時間増分 $dt = 0.025 \text{ fs}$ ，ミスフィットひずみ $\varepsilon^{mis} = 0.02$ ．ここで，易動度 M は仮定した値を用いているため，時間は実時間ではない．

4. シミュレーション結果

図 2 と図 3 は，表面エネルギーの異方性強度 γ をそれぞれ 0.0, 0.1 とした場合の，表面形態および x 方向応力 σ_x 分布の時間変化を示している．表面はフェーズフィールド $\phi = 0.5$ の位置とし実線で示している．初期表面にはわずかな乱れを生じさせている．図 2 の $\gamma = 0.0$ の場合，(b) で表面にうねりが生じ，その谷の応力が高い箇所から溝が生じ，島形態が形成されている．一方，図 3 の $\gamma = 0.1$ の場合，(a) で既に小さな島形態が確認でき，それらが結合しあって徐々に大きな島形態を形成している．図 4 は図 2(e) と図 3(e) 内の点線で囲んだ領域

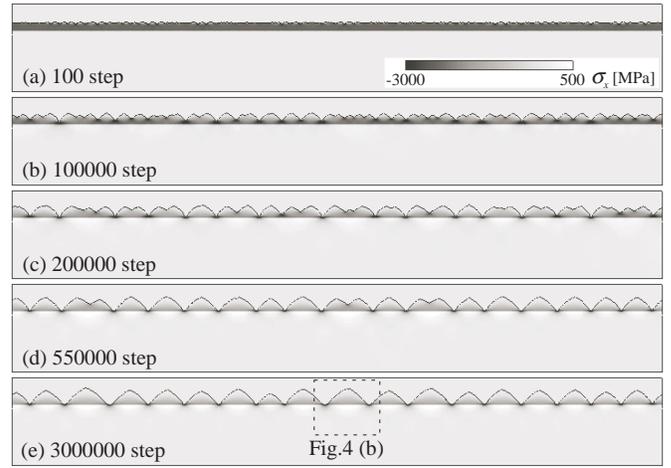


Fig. 3 Time evolution of surface morphology and stress distribution σ_x in the case of $\gamma = 0.1$

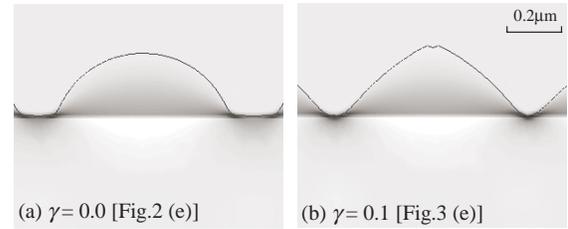


Fig. 4 Close-up views of domain enclosed by broken line in Fig.2(e) and Fig.3(e)

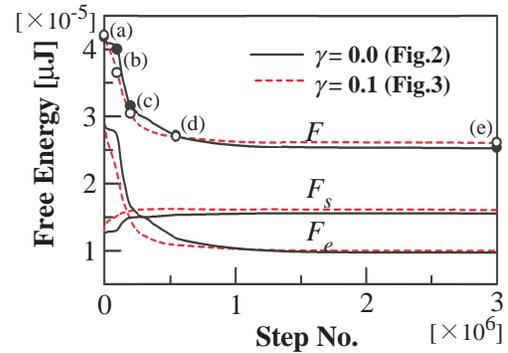


Fig. 5 Variations of energy

の拡大図である．(a)(b) いずれも，島内上部で応力の絶対値が小さく，下部へ行くほど高くなっており，島と基板の境界付近で高い応力集中を呈している．また，島形態下側の基板内では引張り応力が生じ，島間では逆に圧縮応力が生じていることがわかる．図 5 はエネルギー F ， F_s ， F_e の変化を示している． F は式 (1) で表される全エネルギー， F_e は全弾性ひずみエネルギー， F_s は F から F_e を差し引いた表面の存在による过剩エネルギーである．図 5 中の (a) ~ (e) は図 2 と図 3 のそれらと対応している．

結言および参考文献は省略．