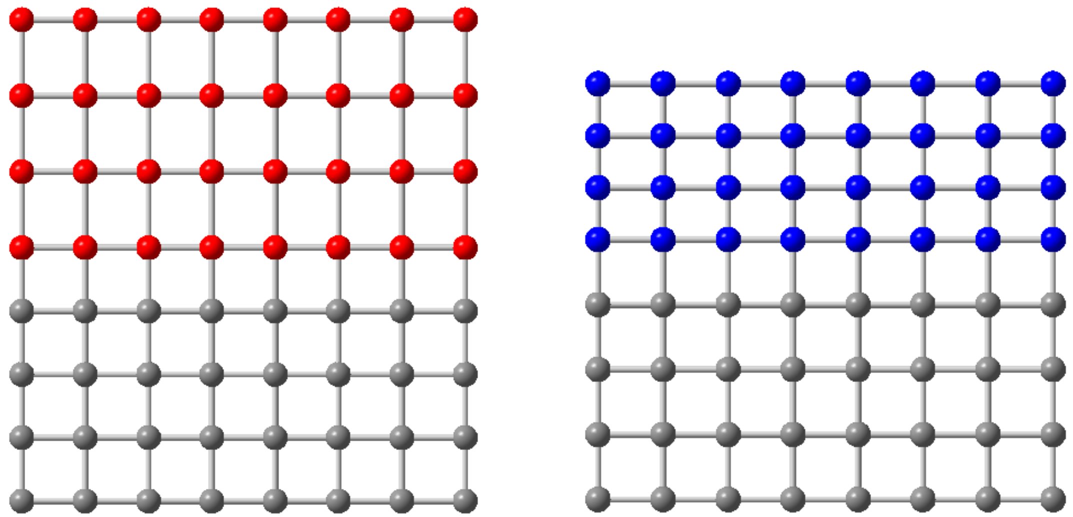
前回の内容

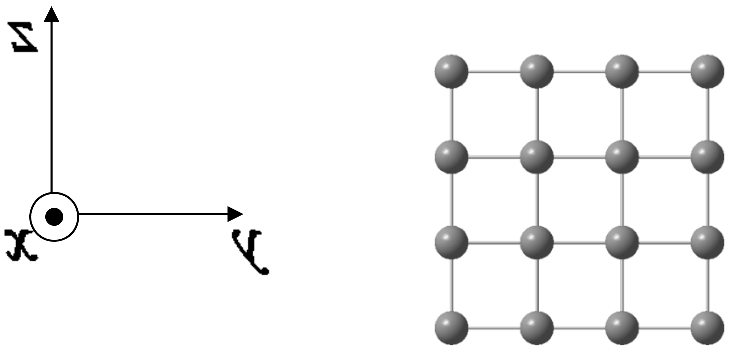
1. 格子歪
    - 結晶の歪
    - 歪、応力、歪エネルギーの定義
    - 不整合歪（基板と成長層の格子不整合に起因する歪）
    - 熱歪（成長温度から室温に下げるとき、基板と成長層の熱膨張係数の差によって発生する歪）

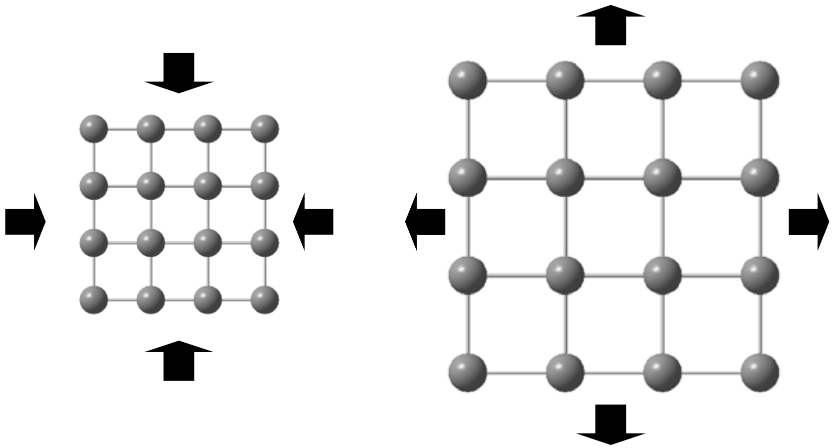


今日の内容

1. 格子欠陥
    - 転位、積層欠陥
2. ミラー指数
    - 結晶の方位、面の表現方法

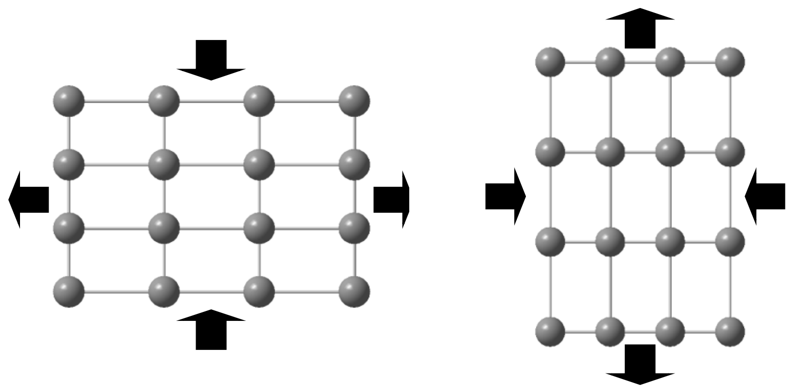
半導体結晶でよく取り扱う歪





静水圧歪

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz}$$

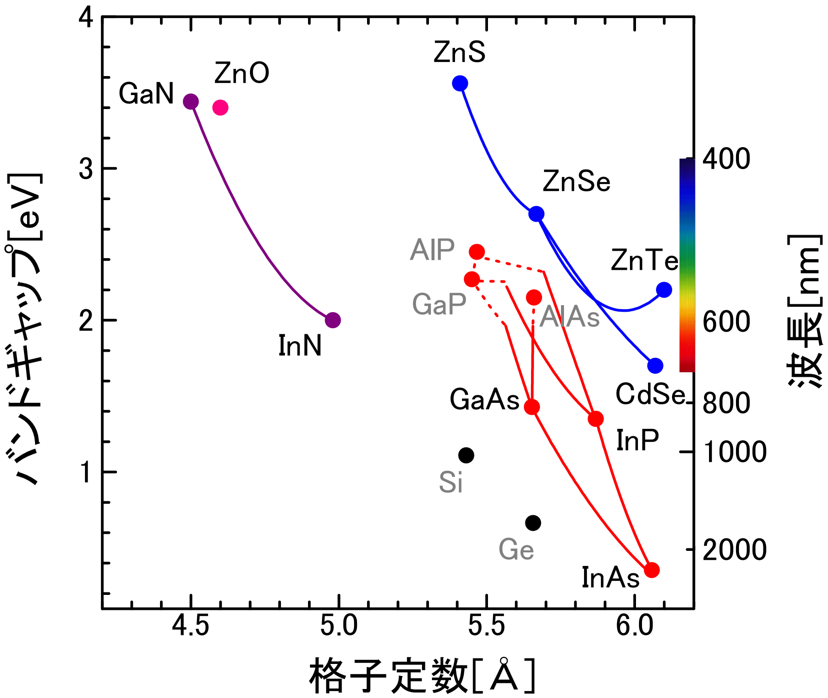


1軸異方性歪

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} \neq \varepsilon_{zz}$$

エピタキシーにおける歪

•成長層(epitaxial layer)と基板(substrate)の組み合わせによって、成長層が歪むかどうかが決まる



•epi とsubが同じ場合（homo-epitaxy）

例：GaAs/GaAs, GaP/GaP, Si/Si

歪は生じない

•epiとsubが違う場合（hetero-epitaxy）

例：InGaAs/GaAs, GaN/Al_2O_3, SiGe/Si

歪が発生

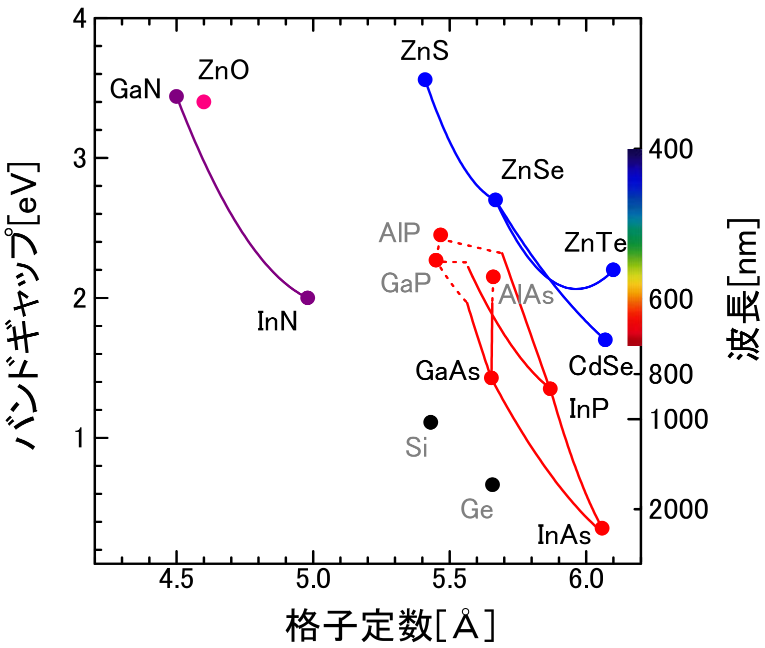
ヘテロエピタキシーにおける歪の原因

•格子不整合歪

成長層と基板の格子定数が異なる

•熱歪

成長層と基板の熱膨張係数が異なる



•ヘテロエピタキシーでは基板の選択が重要

•どちらも1軸異方性歪(成長層と基板の界面は2次元)

ヘテロエピタキシーにおける成長層の歪

成長層
（～10μm）

基板
（～500μm）

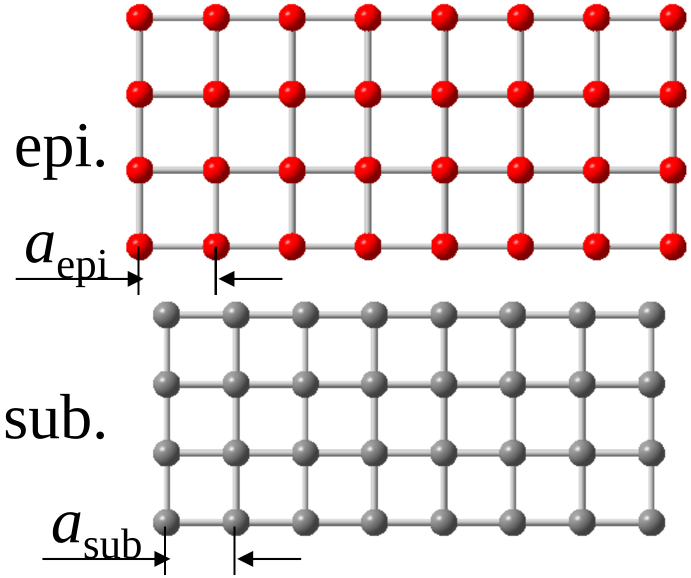
厚さの違いにより、

成長層 ⟶ 歪む
基板 ⟶ 歪まない

と考えるのが一般的

基板が成長層と同じくらい薄くなると、
基板も歪む

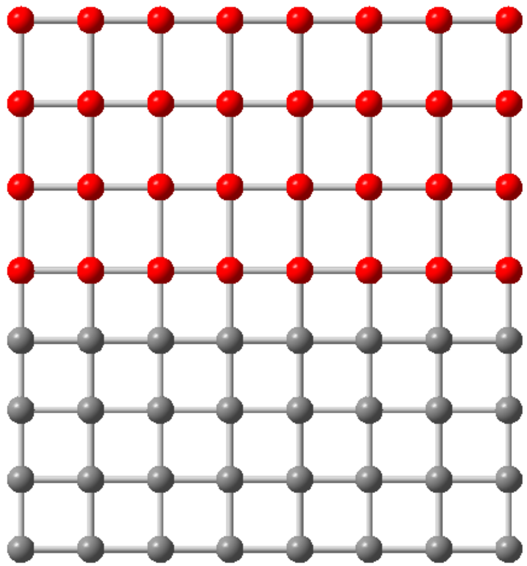
1軸異方性歪

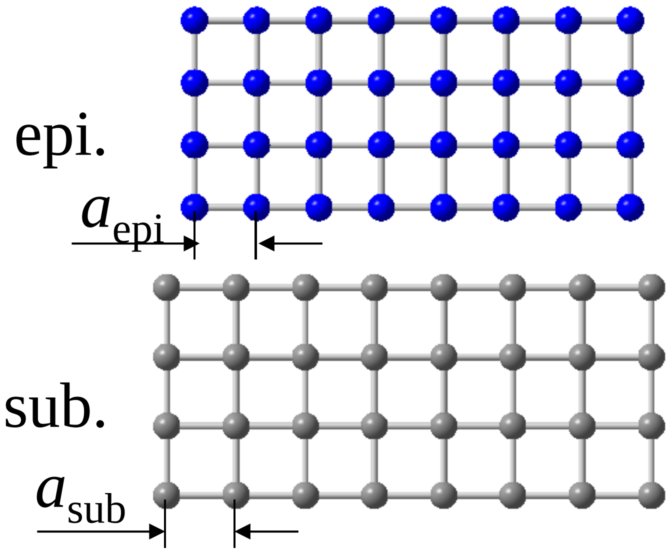


$a_{epi} > a_{sub}$

成長面内で<u>圧縮</u>

成長方向に<u>引っ張り</u>

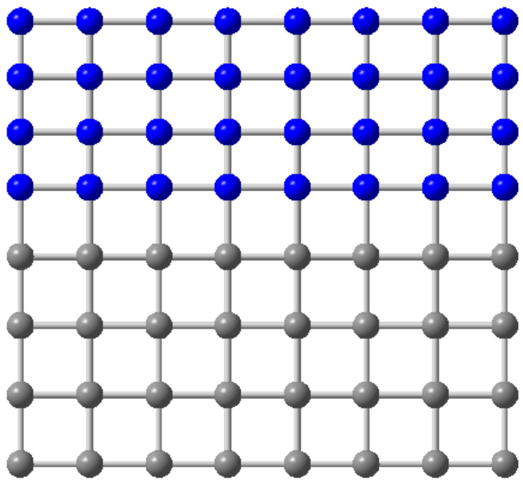




$a_{epi} < a_{sub}$

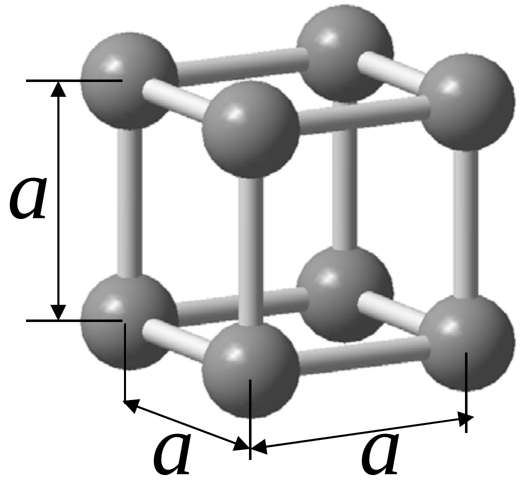
成長面内で<u>引っ張り</u>

成長方向に<u>圧縮</u>



熱による格子定数の変化（格子定数の温度依存性）

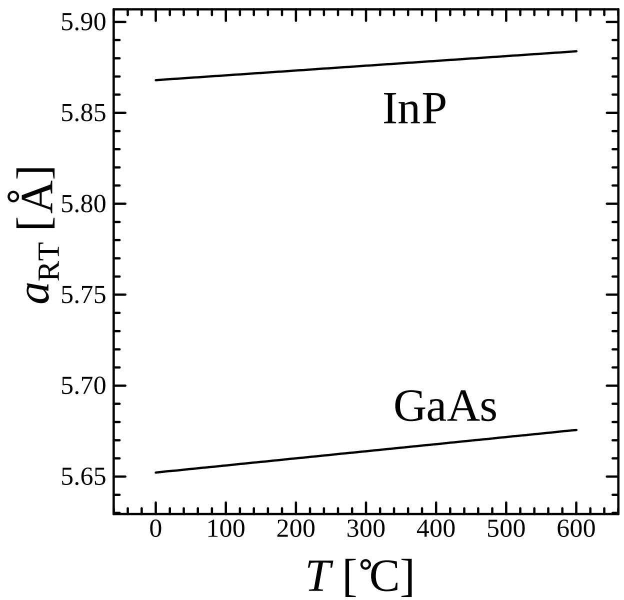
$$a(T) = a_{\mathrm{RT}}\{1+\alpha(T-300)\}$$



$$\alpha = \frac{\dfrac{a(T)-a_{\mathrm{RT}}}{a_{\mathrm{RT}}}}{T-300}$$

熱膨張係数

	GaAs	InP
a_{RT}[Å]	5.6533	5.8687
α[K^{-1}]	6.9×10^{-6}	4.5×10^{-6}



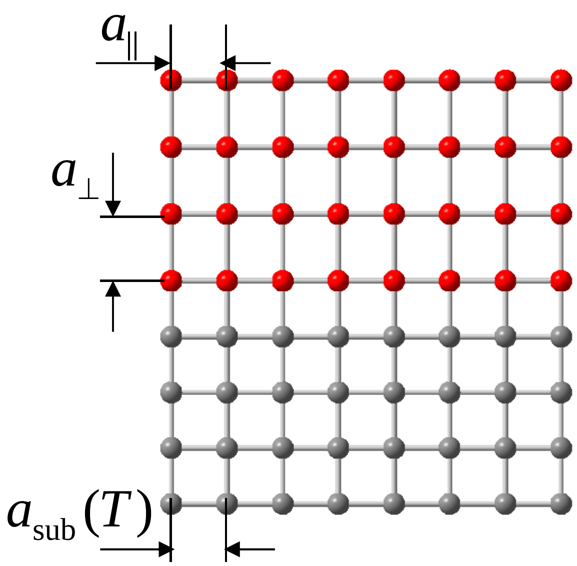
熱による格子間隔の変化（歪成長の場合）

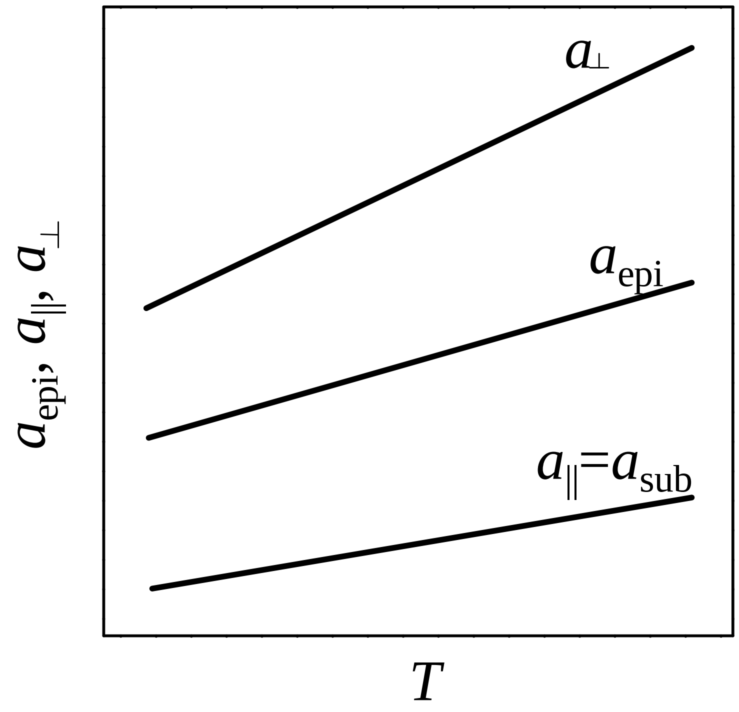
成長面内

$$a_{\parallel}(T) = a_{\mathrm{sub}}(T) = a_{\mathrm{sub,RT}}\left\{1 + \alpha_{\mathrm{sub}}(T - 300)\right\}$$

成長方向

$$a_{\perp}(T) = a_{\mathrm{epi}}(T) - 2\frac{c_{12}}{c_{11}}\left(a_{\mathrm{sub}}(T) - a_{\mathrm{epi}}(T)\right)$$



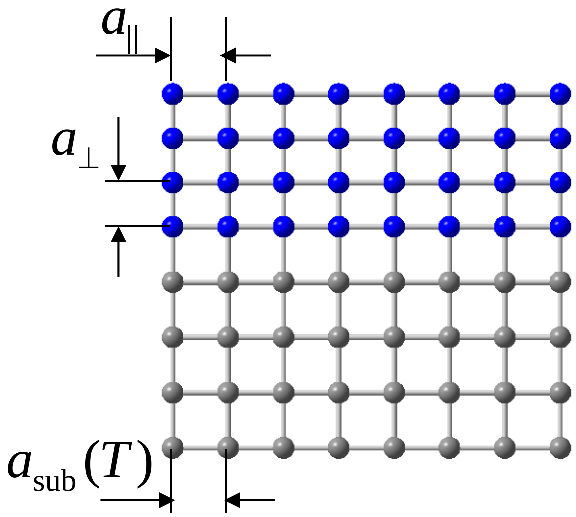


$$\left.\begin{aligned} a_{\mathrm{epi}} &> a_{\mathrm{sub}} \\ \alpha_{\mathrm{epi}} &> \alpha_{\mathrm{sub}} \end{aligned}\right\}$$ のとき

熱による格子間隔の変化（成長温度で緩和し、降温する場合）

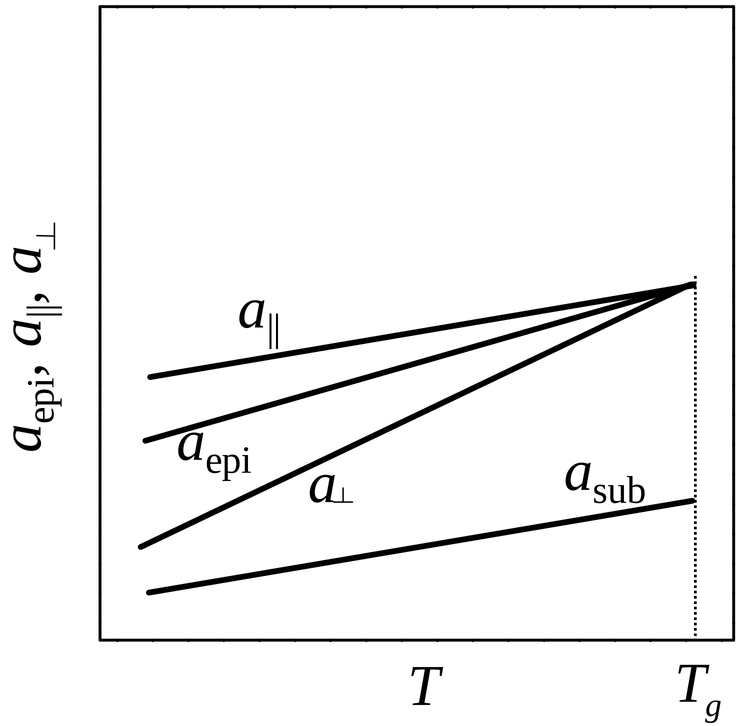
成長面内

$$a_{\parallel}(T) = a_{\mathrm{epi}}(T_g)\left\{1 + \alpha_{\mathrm{sub}}\left(T - T_g\right)\right\}$$



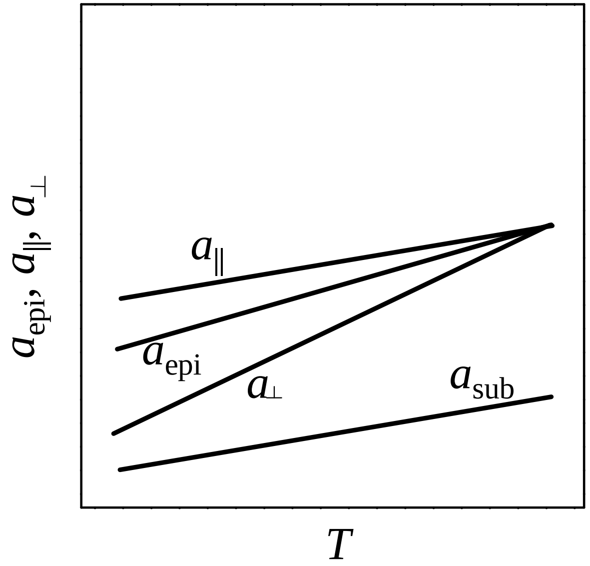
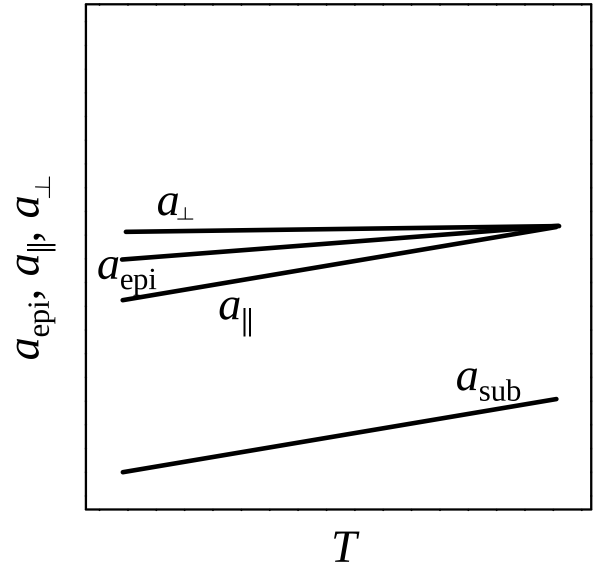
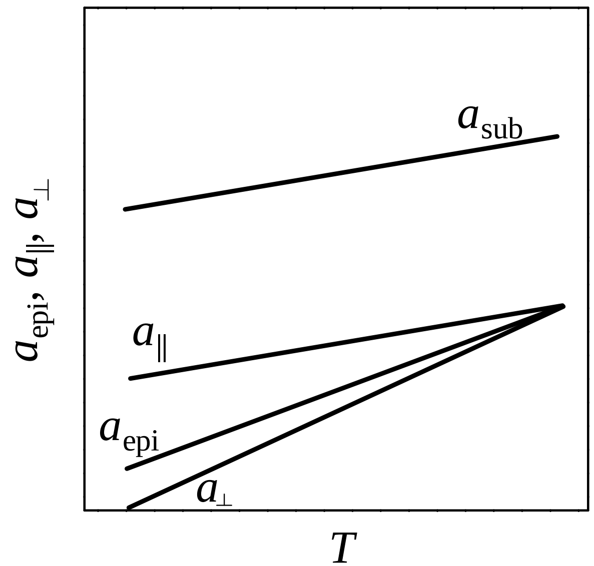
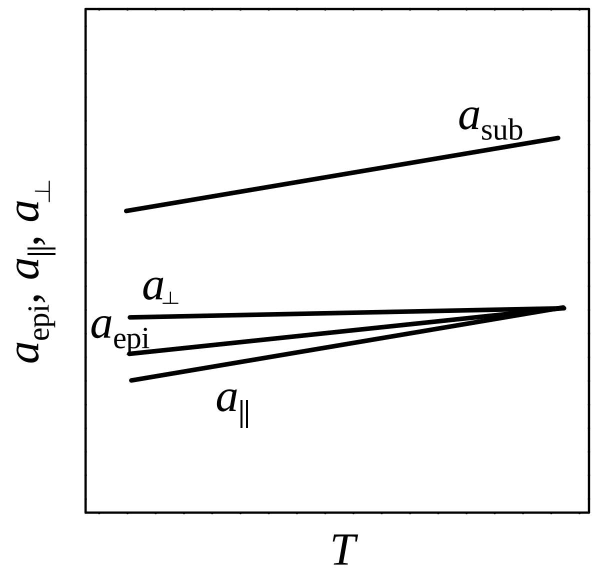
成長方向

$$a_{\perp}(T) = a_{\mathrm{epi}}(T) - 2\frac{c_{12}}{c_{11}}\left(a_{\parallel}(T) - a_{\mathrm{epi}}(T)\right)$$



$$\left.\begin{aligned} a_{\mathrm{epi}} &> a_{\mathrm{sub}} \\ \alpha_{\mathrm{epi}} &> \alpha_{\mathrm{sub}} \end{aligned}\right\}$$ のとき

熱による格子間隔の変化（成長温度で緩和し、降温する場合）

	$\alpha_{\mathrm{epi}} > \alpha_{\mathrm{sub}}$	$\alpha_{\mathrm{epi}} < \alpha_{\mathrm{sub}}$
$a_{\mathrm{epi}} > a_{\mathrm{sub}}$		
$a_{\mathrm{epi}} < a_{\mathrm{sub}}$		

歪の緩和

- ３次元成長
- 転位（dislocation)
- クラック

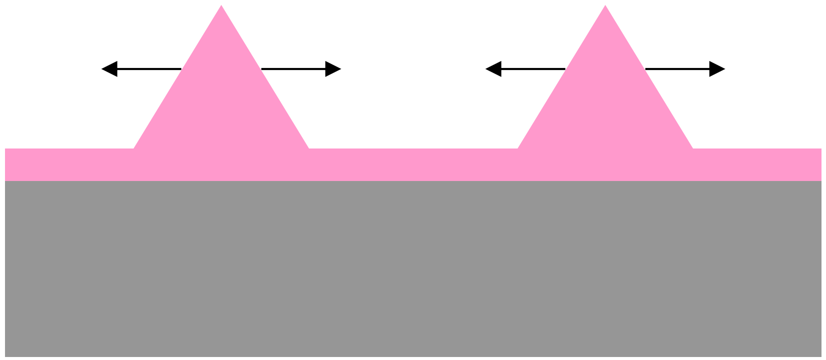
3次元成長

<u>２次元成長</u>

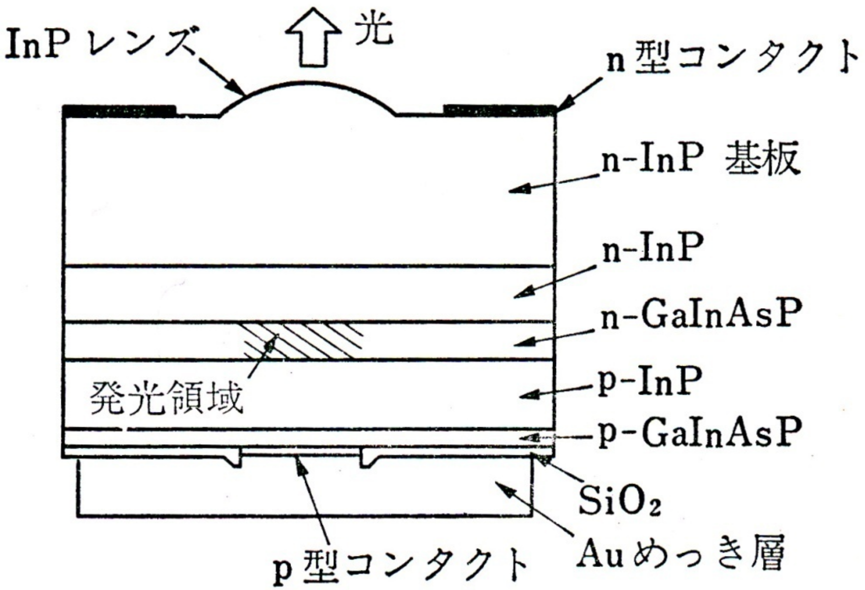
成長面内に応力が生じる

<u>３次元成長</u>

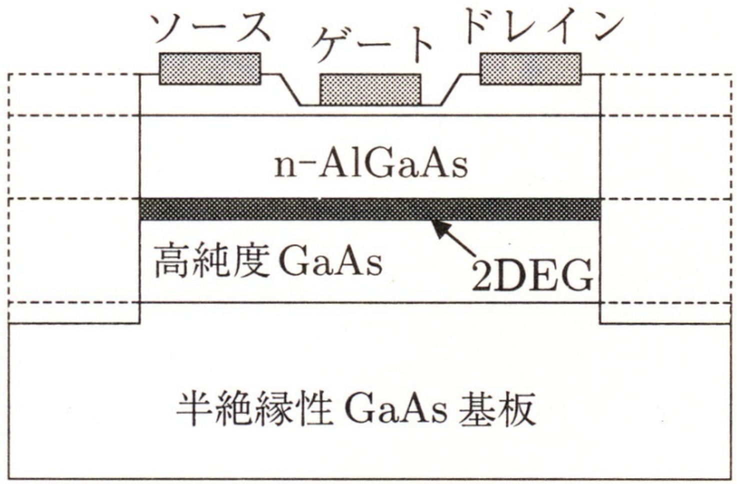
島の表面では表面方向に原子が動けるので歪エネルギーが低減できる



デバイスの構造

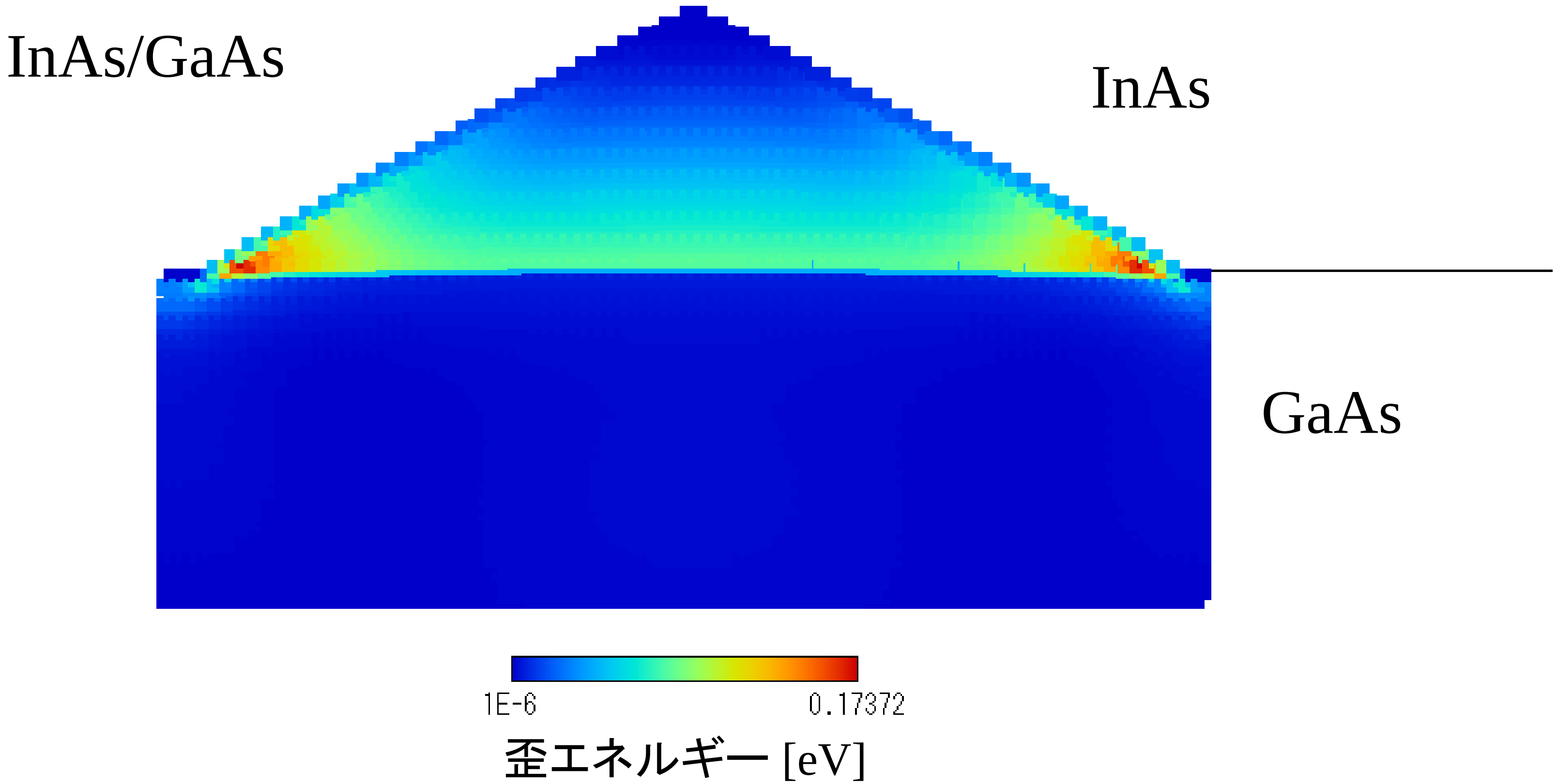


LED



HEMT

3次元成長部の歪エネルギー



	GaAs	InAs
格子定数[Å]	5.653	6.06

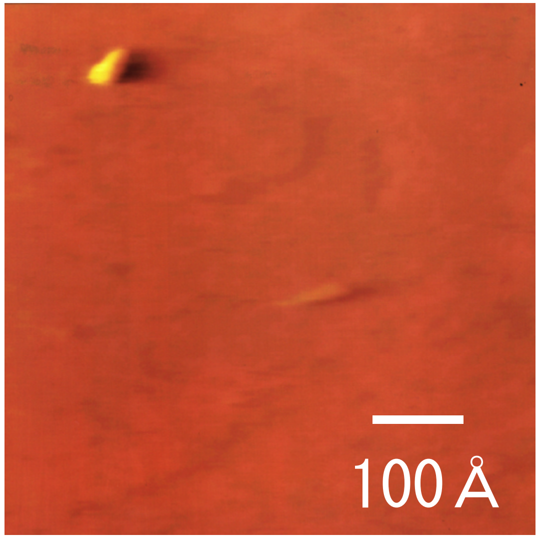
InAsが受ける歪は

圧縮歪

$$\varepsilon = \frac{a_{\mathrm{GaAs}} - a_{\mathrm{InAs}}}{a_{\mathrm{InAs}}} = -6.7\%$$

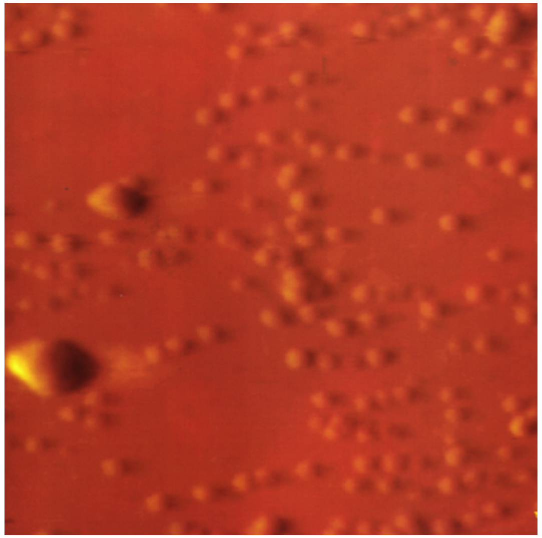
3次元成長を利用した量子ドットの形成

1ML

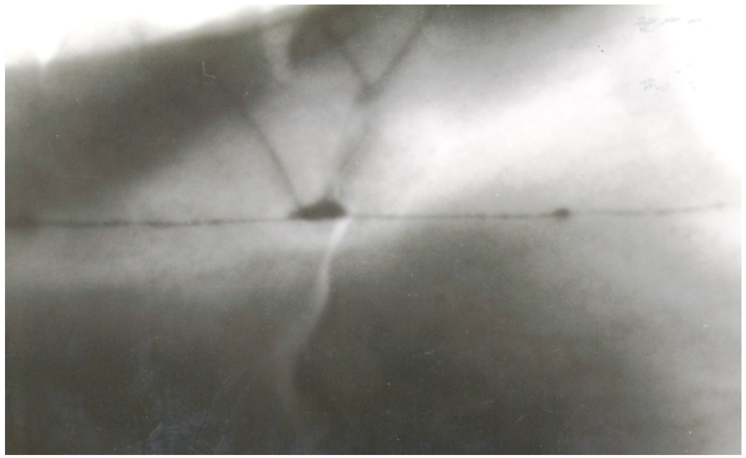


AFM像

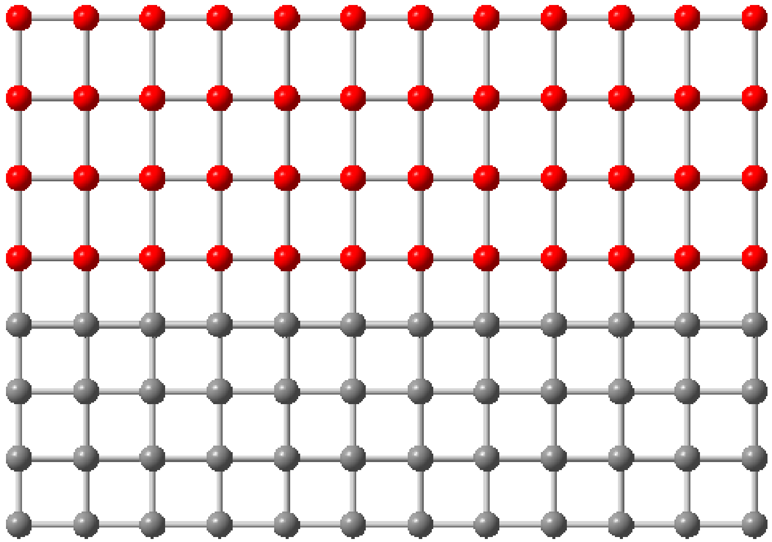
2ML



断面TEM像

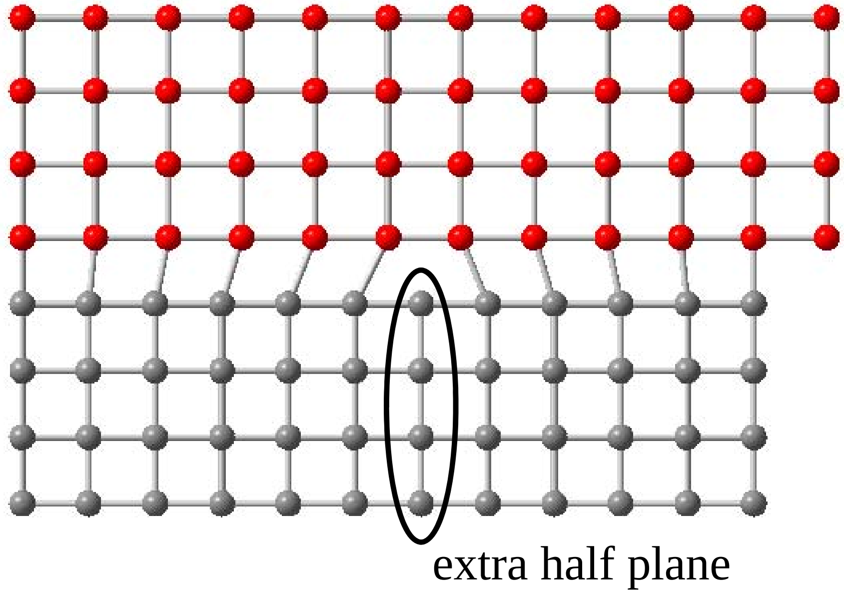


転位(dislocation)



転位がない状態

(歪んでいる)



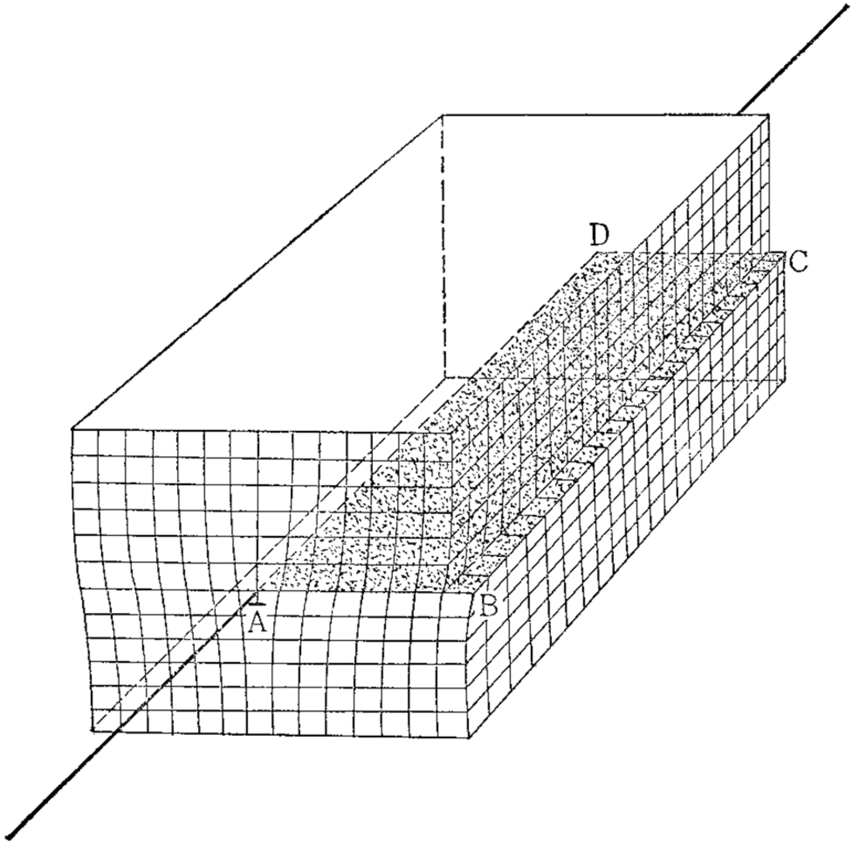
転位がある状態

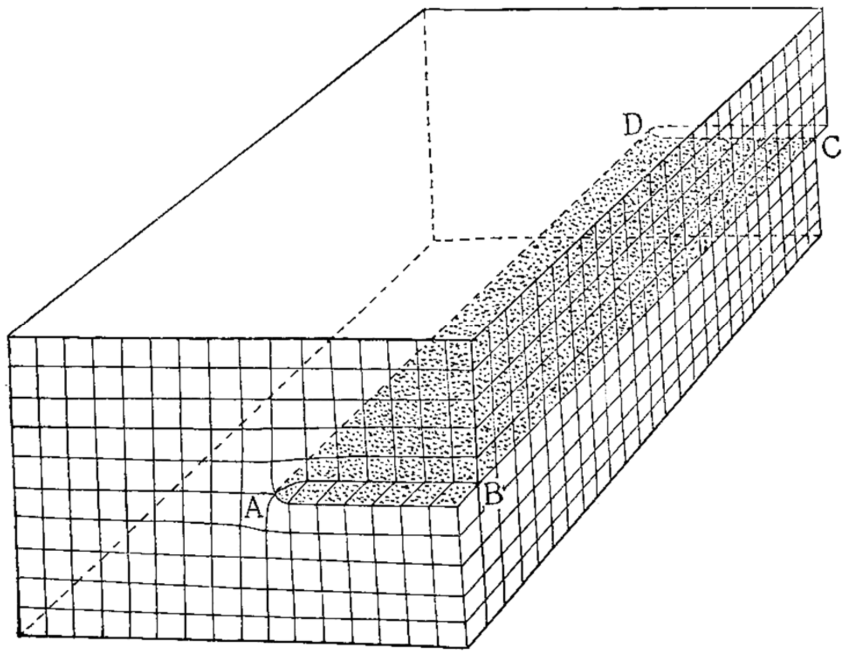
(歪は緩和した)

•原子列が移動することによって、線状の欠陥が形成

•塑性変形

刃状転位(edge dislocation)とらせん転位(screw dislocaton)





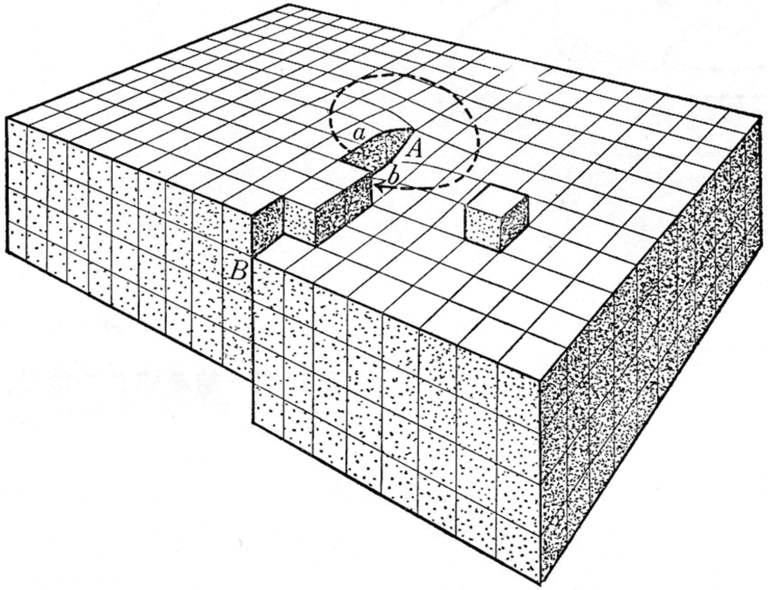
刃状転位

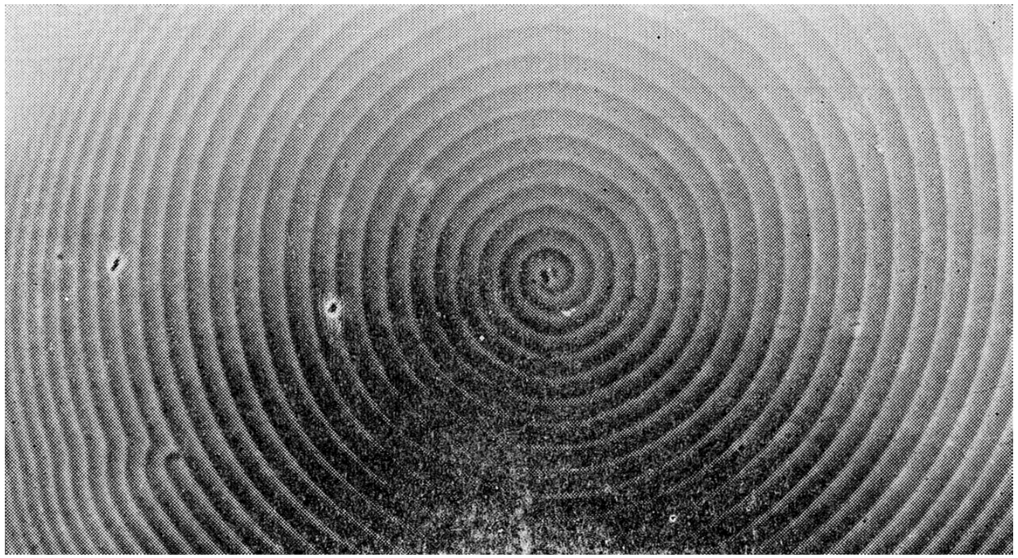
らせん転位

転位の方向と変位の方向が垂直

転位の方向と変位の方向が平行

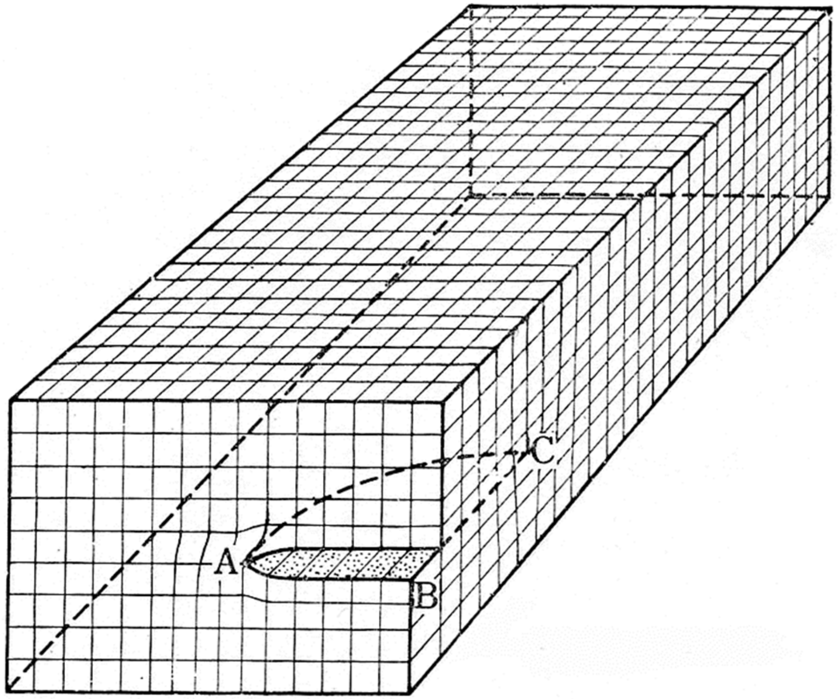
らせん転位によるスパイラル成長

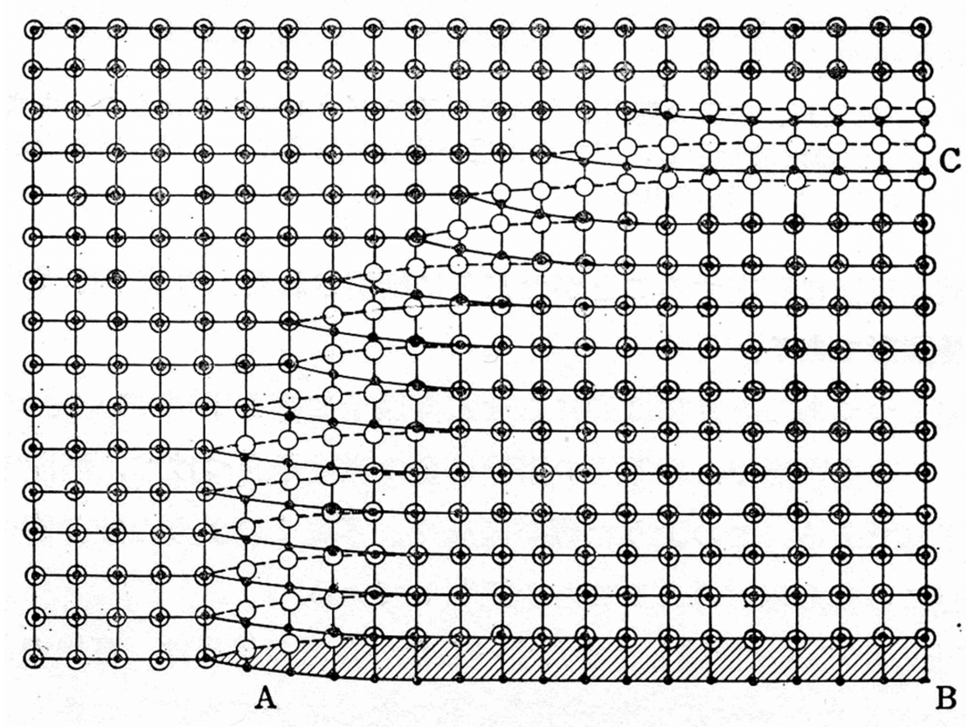




SiC

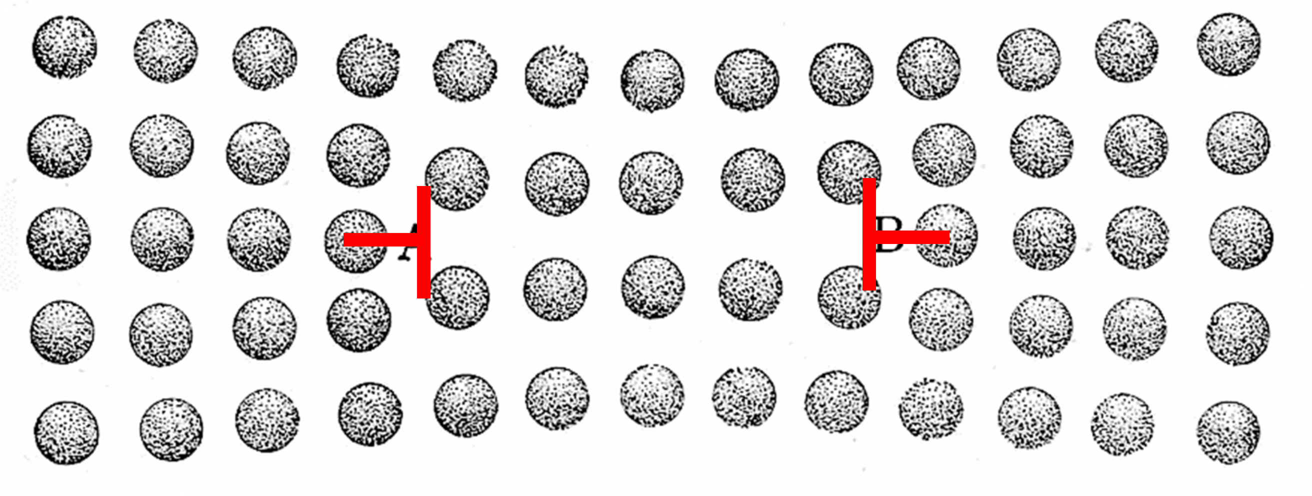
混合転位



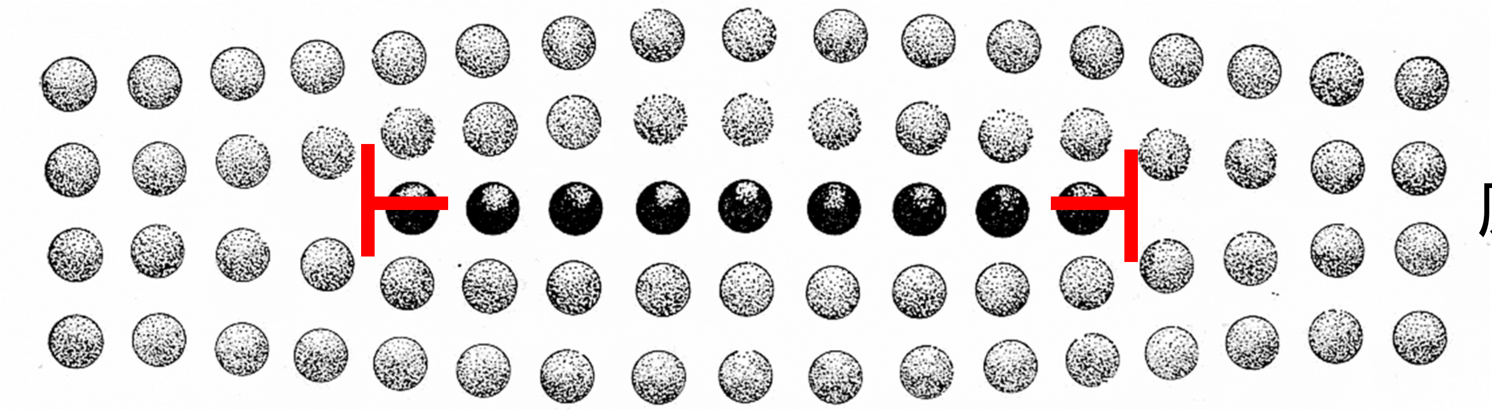


- Aの部分ではらせん転位
- Bの部分では刃状転位

原子面の欠如、挿入による転位

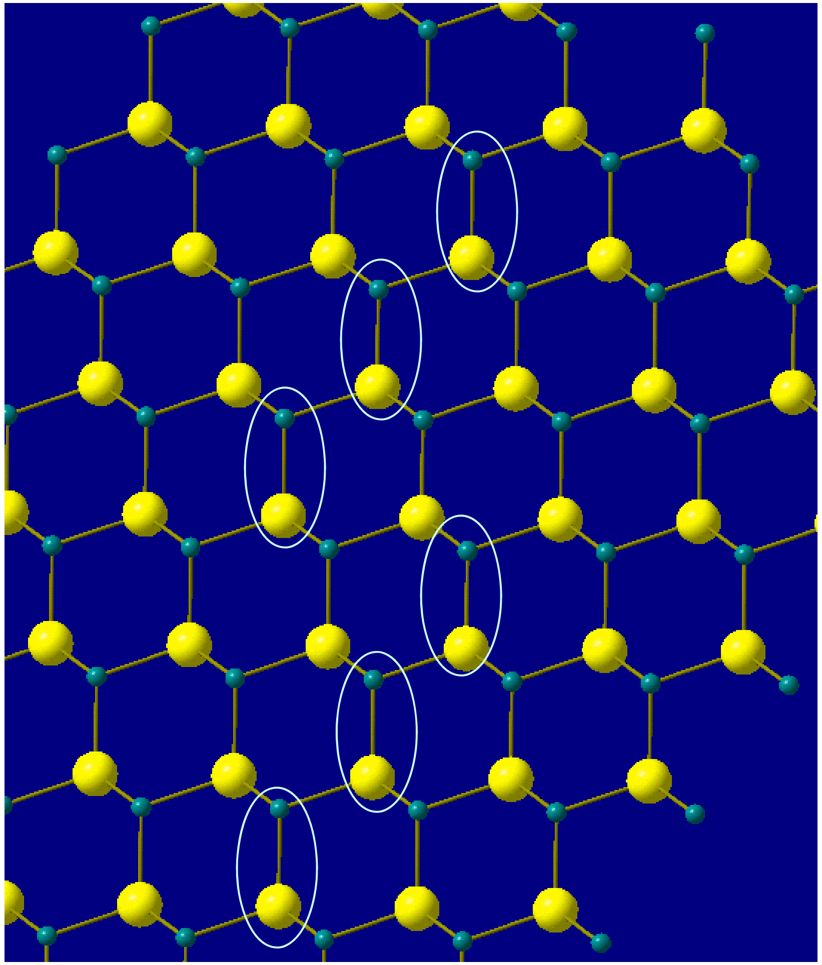


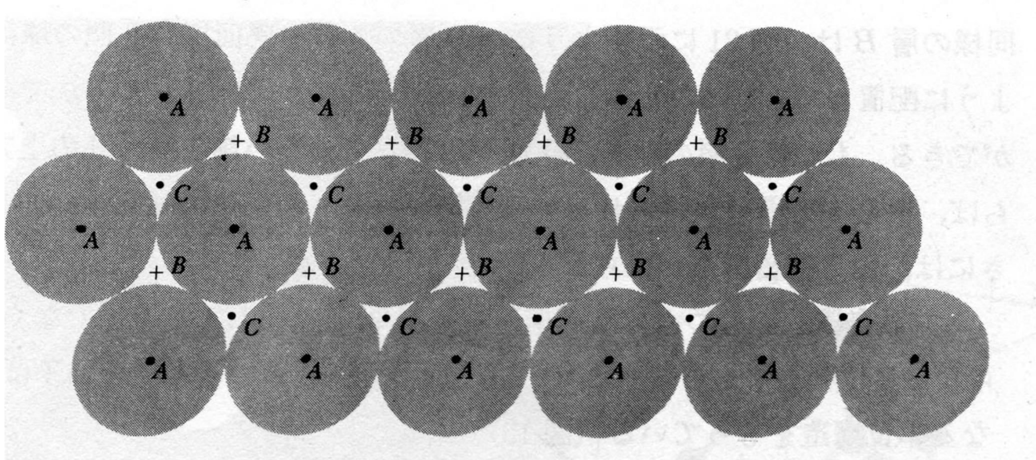
原子面の欠如



原子面の挿入

積層欠陥





·面心立方格子

ABCABCABC・・・・・・ABC

·六方最密格子

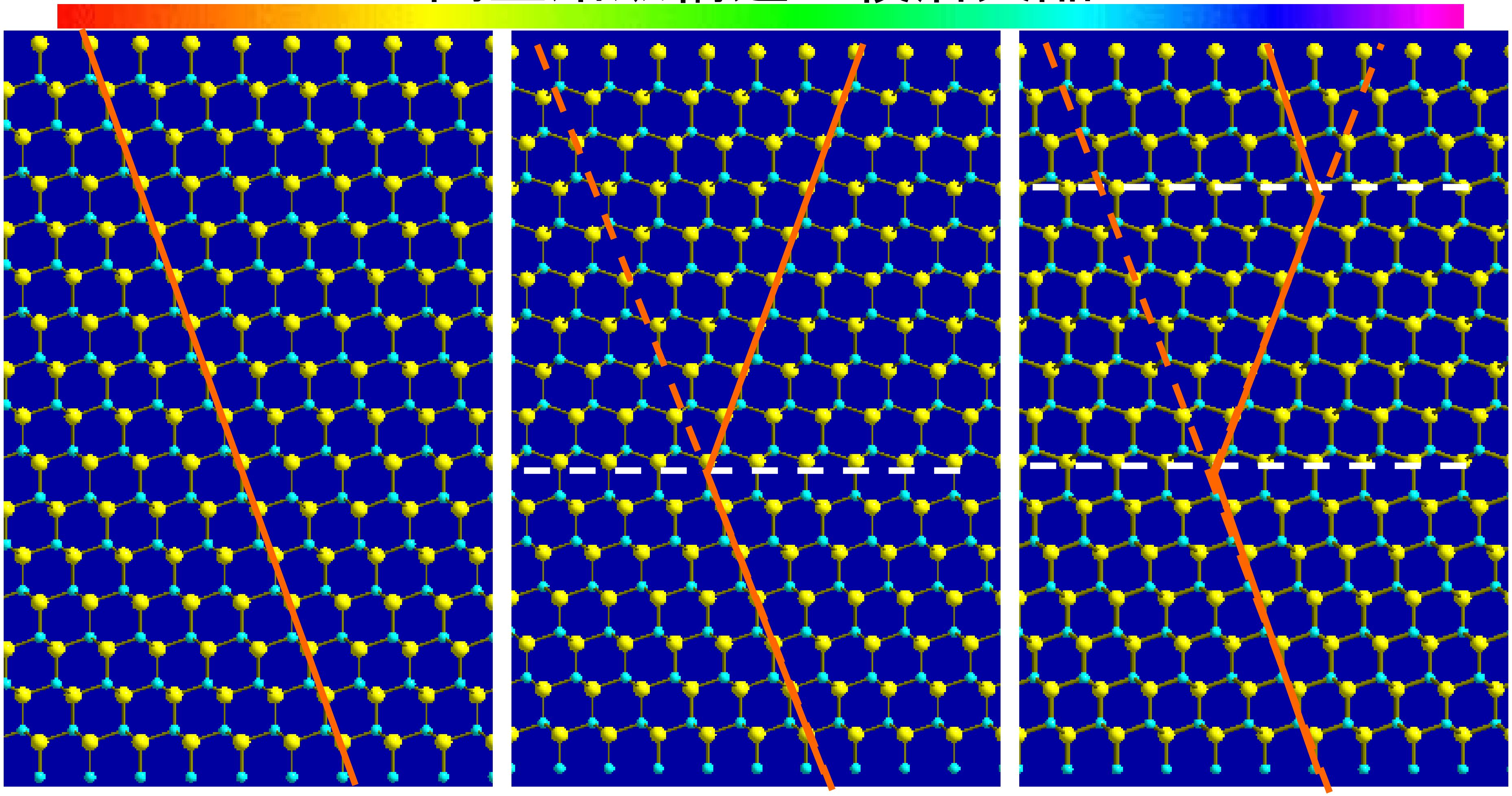
ABABABABAB・・・・ABAB

·積層欠陥を含む場合

ABCABCBCABCABCBABC

ABCABCABCABCABCABC

閃亜鉛鉱構造の積層欠陥



・面内で結晶が回転している

・でも結合手は過不足なく繋がっている

転位の電子顕微鏡写真(格子像)

InAs

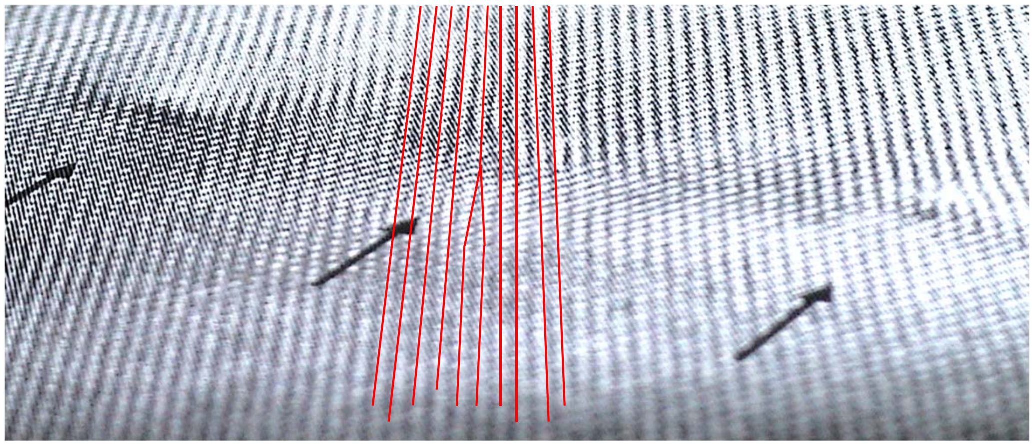
GaAs

格子定数

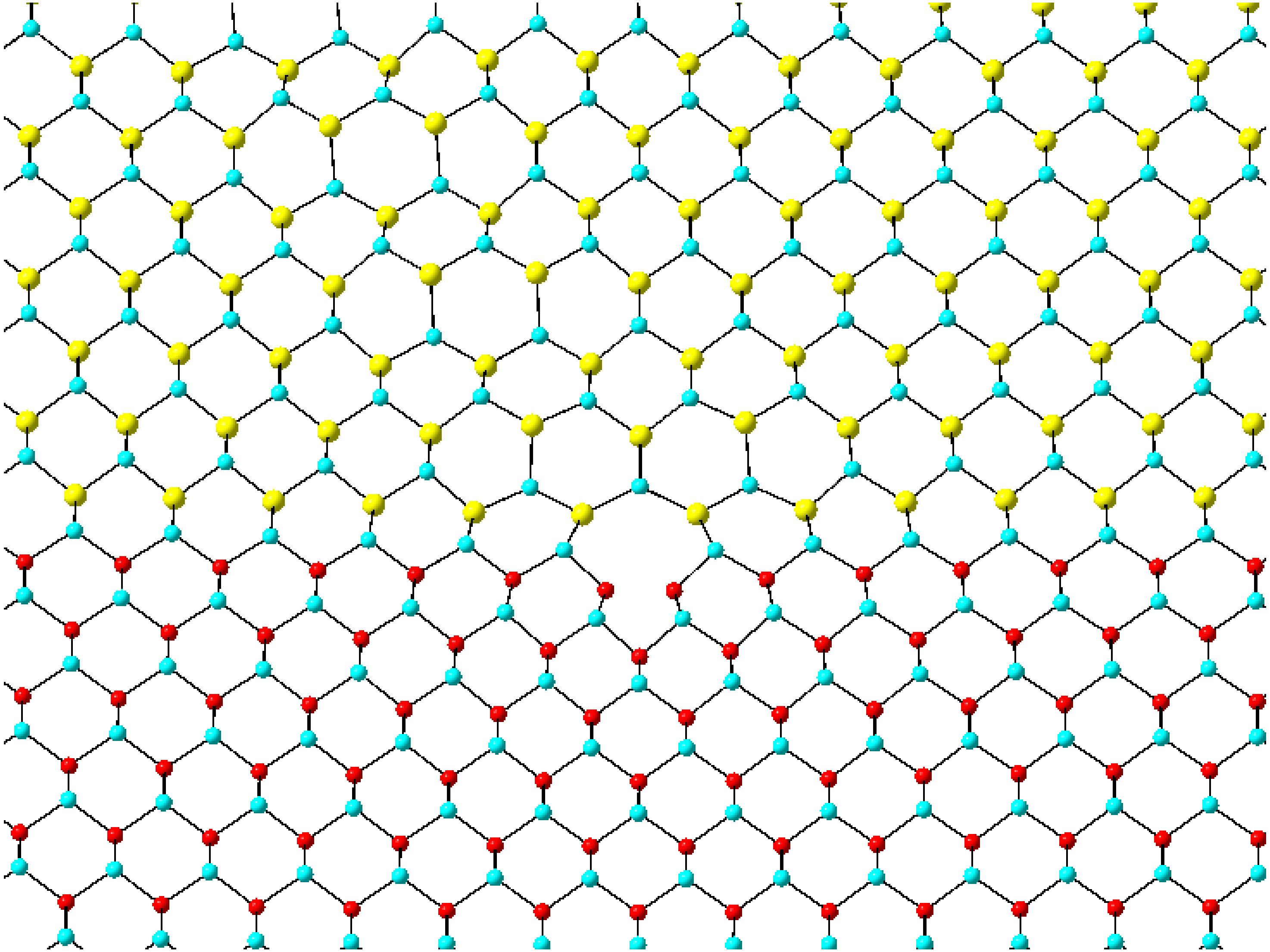
GaAs 5.653 Å
InAs 6.07 Å

7%の格子不整合

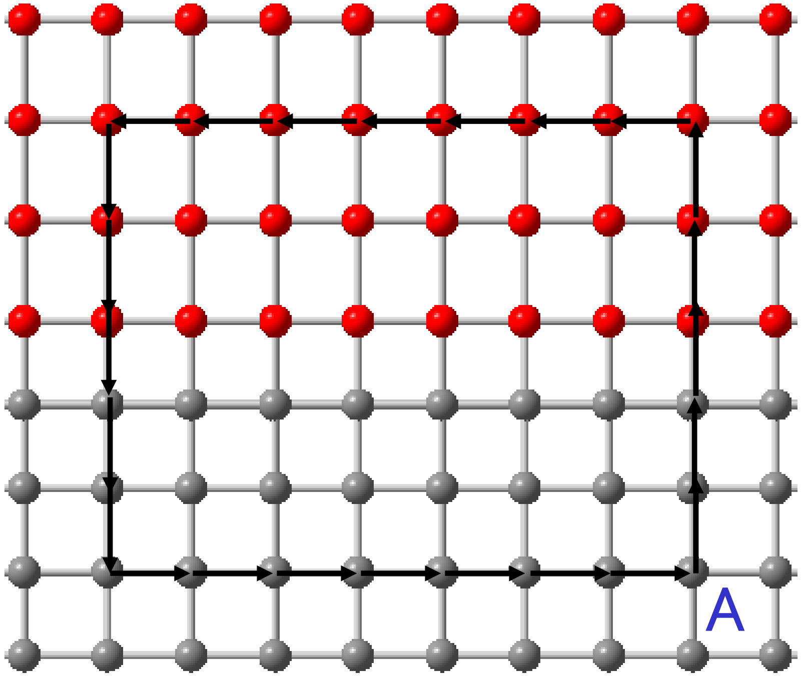
上の写真を
右斜め下から
見たもの

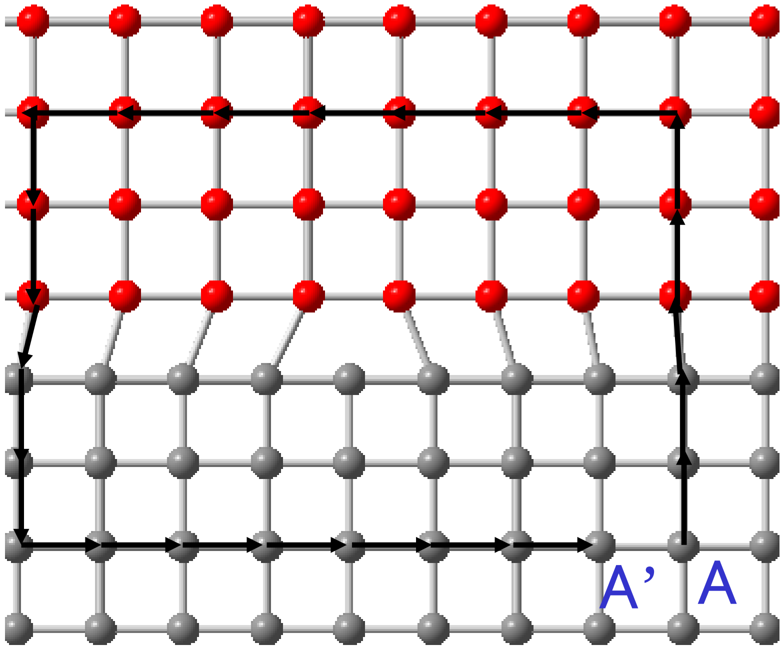


閃亜鉛鉱構造の90°転位



バーガーズベクトル





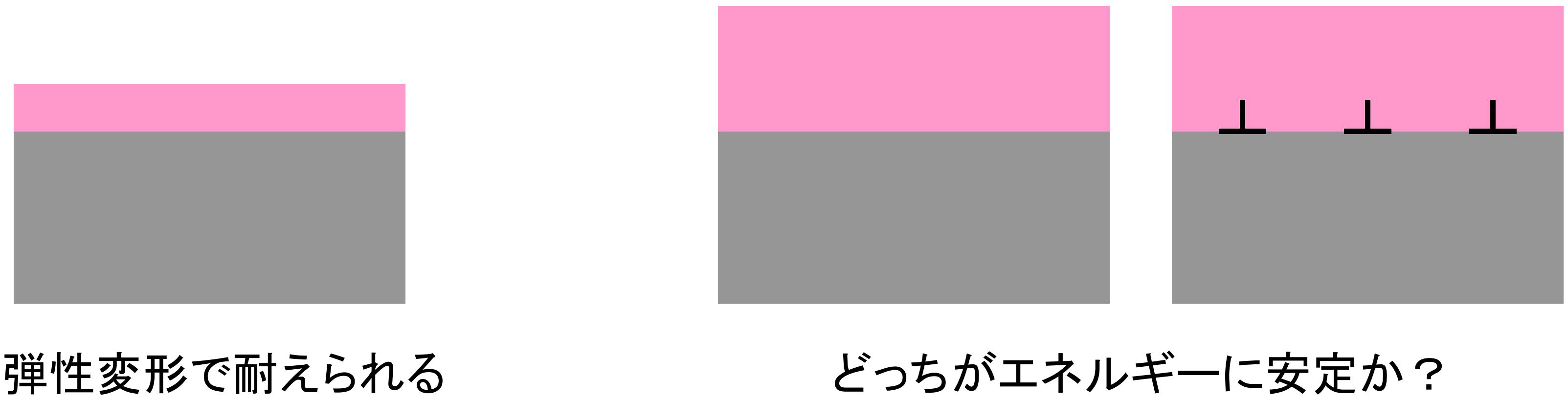
1. きれいな結晶で格子点をつないで閉ループをつくる
2. 転位を含むようにループを適用
3. 始点と終点の差がバーガーズベクトル

$$\mathbf{b} = \overrightarrow{\mathrm{OA}} - \overrightarrow{\mathrm{OA'}}$$ または $$\mathbf{b} = \overrightarrow{\mathrm{OA'}} - \overrightarrow{\mathrm{OA}}$$

バーガーズベクトルは転位による原子位置の変位を表す

臨界膜厚

- 歪エネルギーは成長層の厚さに比例
- ある一定の膜厚以上では転位によって歪が緩和



臨界膜厚（critical thickness）・・・ 転位が発生する膜厚

臨界膜厚の計算モデル

•force balance model

J.W. Matthews and A.E. Blakeslee, J.Crystal Growth **116**, 118(1974)

基板からの貫通転位が歪による応力で曲げられ、界面に平行になるかどうか

•energy balance model

R. People and J.C. Bean, Appl. Phys. Lett. **47**, 322(1985)

転位があるときとないときの歪エネルギーの大小

結晶面の指数

(hkl)面とは･･･

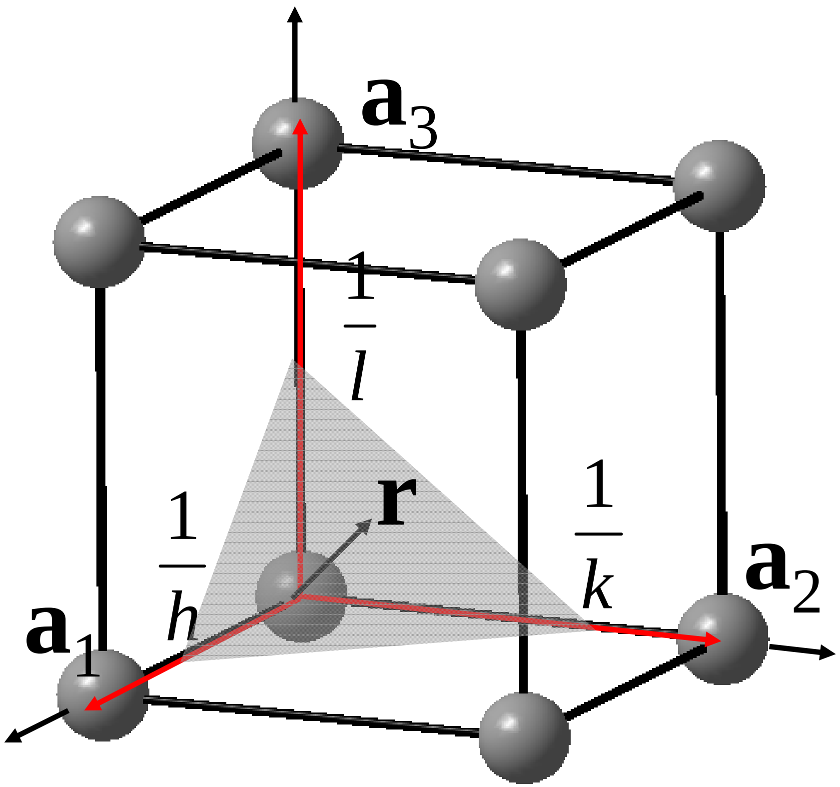
$\mathbf{a}_1$方向に$1/h$,
$\mathbf{a}_2$方向に$1/k$,
$\mathbf{a}_3$方向に$1/l$,
で定義される3点を含む平面

[hkl]方向とは･･･

$$\mathbf{r} = h\mathbf{a}_1 + k\mathbf{a}_2 + l\mathbf{a}_3$$

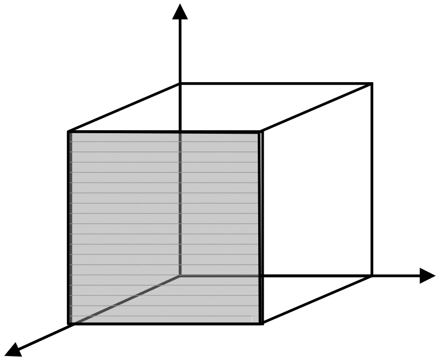
ベクトル$\mathbf{r}$の方向

$|\mathbf{r}|$に意味はない

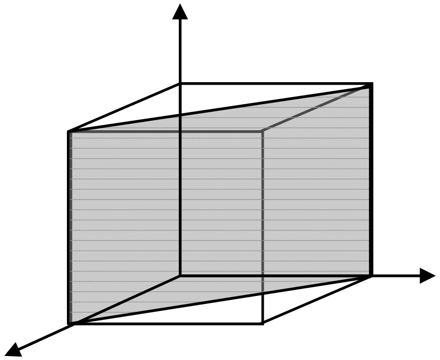


[hkl]方向と(hkl)面は垂直(立方晶の場合)

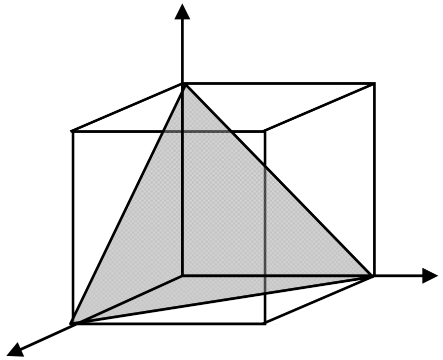
例



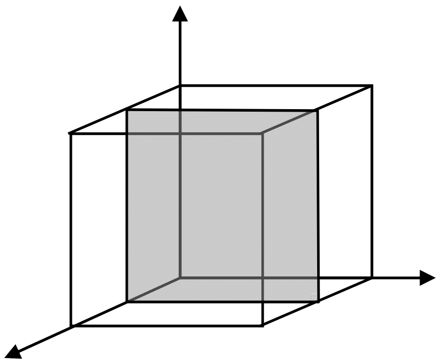
(100)



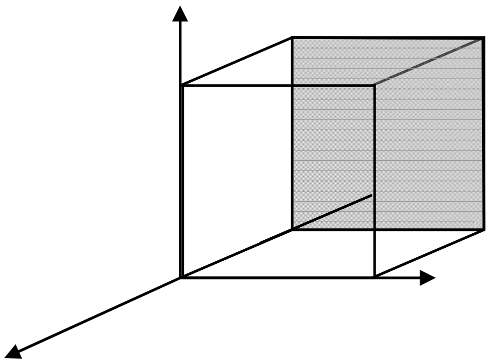
(110)



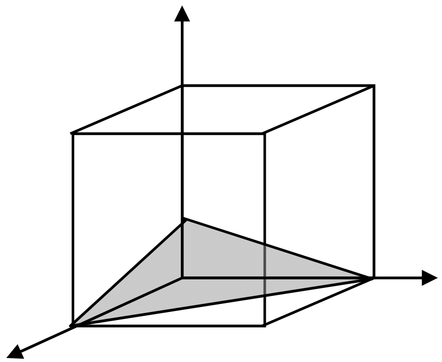
(111)



(200)



$(\bar{1}00)$



(113)

括弧(かっこ)の定義

面を表す場合

(hkl)

$\{hkl\} \longrightarrow$ (hkl)と等価な面をまとめて表す場合

$$\{100\} \;=\; (100),(010),(00\bar{1}),\cdots\cdots$$

方向を表す場合

$[hkl]$

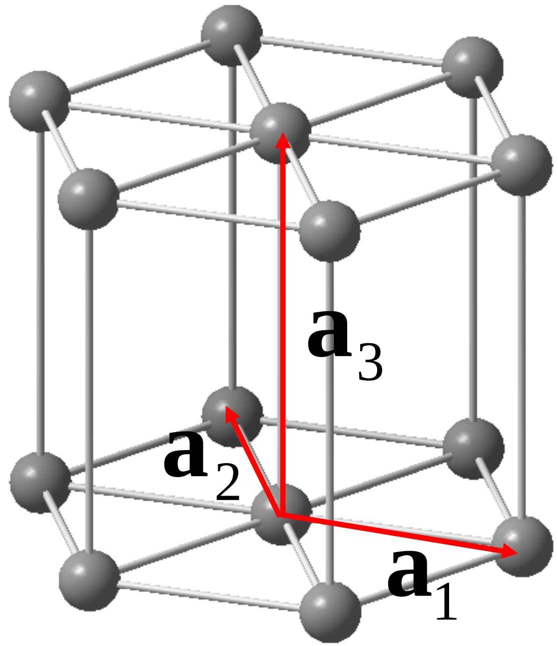
$\langle hkl\rangle \longrightarrow \langle hkl\rangle$と等価な方向をまとめて表す場合

$$<100> \;=\; [100],[010],[00\bar{1}]\;,\cdots\cdots$$

六方晶の場合

底面だけで3個、高さ方向に1個
の指数を用いる

$$(\underbrace{10\bar{1}}_{\text{底面}}\underset{\uparrow\,\text{高さ}}{0}),\ (11\bar{2}0),\ (0001),\ \cdots\cdots$$

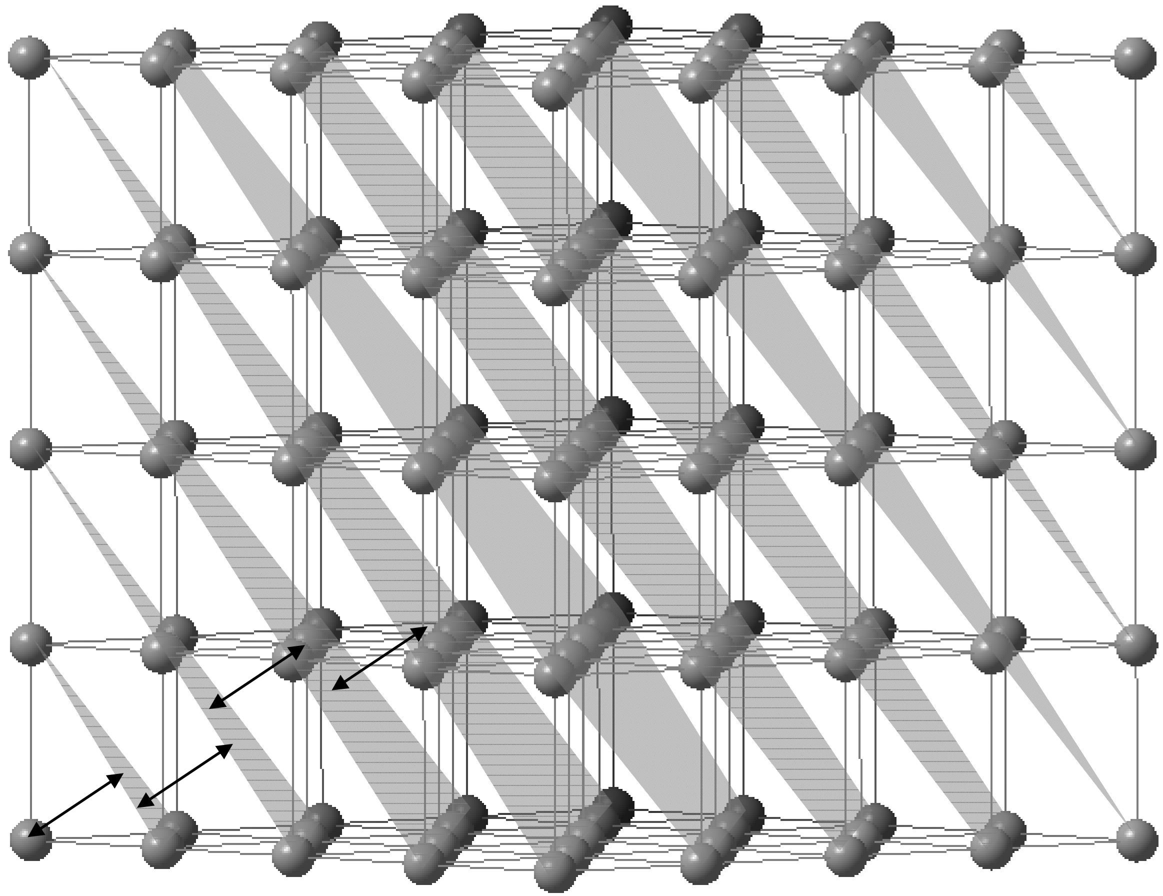


平面上で独立なベクトルは2個しかないので、
3番目の指数は独立ではない

$$\left.\begin{array}{l} (\,h\quad k\quad -h\text{-}k\quad l\,) \\ (\,h\quad k\quad \cdot\quad l\,) \\ (\,h\quad k\quad l\,) \end{array}\right\}\ \text{さまざまな表記法がある}$$

面間隔

(111)面の場合



各面間の間隔　＝　原点と原点に最も近い面までの距離

面間隔

$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\mathbf{G}|}$$ ただし $\mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \qquad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \qquad \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}$$

立方晶の場合

$$d_{hkl}{}^2 = \frac{a^2}{h^2 + k^2 + l^2}$$

六方晶の場合

$$d_{hkl}{}^2 = \frac{a^2}{\frac{4}{3}\left(h^2 + k^2 + hk\right) + \left(\frac{a}{c}\right)^2 l^2}$$

今日の内容

1. 格子欠陥
    - 3次元成長
    - 積層欠陥
    - 転位（刃状転位、らせん転位、バーガーズベクトル）

2. ミラー指数
    - 結晶面の指数
    - 括弧の定義
    - 六方晶の場合