

(100) InP 有機金属気相エピタキシーにおける $\omega$ 方向依存 Zn 基板側拡散の理論的説明

A theoretical explanation of misorientation-direction-dependent backward diffusion of Zn in (100) InP during metalorganic vapor-phase epitaxy

法政大 ○望月 和浩, 太田 博, 三島 友義, 堀切 文正, 西村 智朗

Hosei Univ. ○K. Mochizuki, H. Ohta, T. Mishima, F. Horikiri, T. Nishimura

E-mail: kazuhiro.mochizuki.66@hosei.ac.jp

はじめに InP の有機金属気相エピタキシーにおける p 型不純物である Zn の基板側拡散がオフ方向に依存する現象[1]を, キンクの平均移動速度  $V_{\text{kink}}$  の相違から説明した[2]ので報告する。

**仮定** (111)A 面方向へオフした InP(100)表面のステップ(A ステップ)におけるキンク密度は, (111)B 面方向へオフした InP(100) 表面のステップ(B ステップ)におけるキンク密度に比較して低い[3]。A ステップにおける  $V_{\text{kink}}$  は B ステップにおける  $V_{\text{kink}}$  より高速と考え, 以下を仮定した。

- 1) A ステップまで表面拡散した Zn は, キンクで格子位置に取り込まれる時間的余裕が無い場合, 格子間位置( $\text{Zn}_i$ )に入り, kickout 機構[4]により拡散する。
- 2) B ステップまで表面拡散した Zn は, キンクで In 副格子位置( $\text{Zn}_{\text{In}}$ )に取り込まれ, dissociative 機構[4]により拡散する。また, 正孔( $h$ )濃度は  $\text{Zn}_{\text{In}}$  濃度( $C_s$ )にほぼ等しい。
- 3) P 過剰雰囲気下の InP (100)表面における点欠陥形成エネルギーのフェルミエネルギー( $E_F$ )依存性は, P 過剰雰囲気下の InP (110)表面における点欠陥形成エネルギーの  $E_F$  依存性[5]に等しい。

| オフ方向     | キンク密度 | キンク速度 | 仮定     |          |                                                                                   |                                              |
|----------|-------|-------|--------|----------|-----------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------|
|          |       |       | Zn 位置  | 成長初期 導電型 | 格子間Zn密度 決定機構                                                                      | 平衡定数                                         |
| (111)A 面 | 低     | 高     | 格子間    | 半絶縁性またはp | kickout: $\text{Zn}_i^{2+} + \text{V}_{\text{In}}^{3-} = \text{Zn}_{\text{In}}^-$ | $K_A = C_s / (C_i C_{\text{V}_{\text{In}}})$ |
| (111)B 面 | 高     | 低     | In サイト | p        | dissociative: $\text{Zn}_i^{2+} = \text{Zn}_{\text{In}}^- + \text{In}_i^+ + 2h$   | $K_B = C_s^3 C_{\text{In}}^- / C_i$          |

**検討** InP バルクにおける  $\text{Zn}_{\text{In}}$  および  $\text{Zn}_i$  の形成エネルギーの  $E_F$  依存性[6]を考慮すると,  $E_F$  が禁制帯下半分に位置する場合,  $\text{Zn}_{\text{In}}$ ,  $\text{Zn}_i$ ,  $\text{V}_{\text{In}}$  (バルク)および  $\text{In}_i$ (表面)の電荷状態は, それぞれ-1, +2, -3, +1 である。 $\text{Zn}_i$  密度に比較して  $\text{Zn}_{\text{In}}$  密度が無視できる場合の  $C_s$  の鉛直( $z$ )方向拡散方程式

$$\frac{\partial C_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \frac{3D_i C_s^2 C_{\text{In}}}{K_A} \frac{\partial C_s}{\partial z} \quad [(111)\text{A 面方向オフ}] \quad (1a)$$

$$\frac{\partial C_s}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \frac{D_i}{K_B C_{\text{V}_{\text{In}}}} \frac{\partial C_s}{\partial z} \quad [(111)\text{B 面方向オフ}] \quad (1b)$$

は, Chu らのユニバーサル拡散分布[4]において, ソース濃度  $C_0 = 5.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , 時間  $t = 3276 \text{ s}$  [1], ならびに次数  $n = 2$  [(111)A 面方向オフ]および 0 [(111)B 面方向オフ], 平衡定数  $K = 3K_A^{-1} C_{\text{In}} (C_s/C_0)^2$  [(111)A 面方向オフ]および  $K_B^{-1} C_{\text{V}_{\text{In}}}^{-1}$  [(111)B 面方向オフ]とすると, 実験結果[1]が再現した(Fig. 1)。

**まとめ** A および B ステップにおける  $V_{\text{kink}}$  の相違に基づき, 実験結果[1]を説明できた。

[1] A. Ozcan-Atar et al., Appl. Surf. Sci. **688**, 162360 (2025). [2] K. Mochizuki et al., Jpn. J. Appl. Phys. **64**, 038006 (2025). [3] A. Gocalinska et al., Phys. Rev. B **86**, 165307 (2012). [4] S.N.G. Chu et al., J. Appl. Phys. **78**, 3001 (1995). [5] A. Höglund et al., Phys. Rev. B **74**, 075332 (2006). [6] A. Höglund et al., *ibid* **77**, 113201 (2008).

