

Выглаживание и разупорядочение ступенчато-террасированной поверхности GaAs: эксперимент и Монте-Карло моделирование

Д. М. Казанцев¹, И. О. Ахундов¹, Н. Л. Шварц^{1,3}, В. Л. Альперович^{1,2},
А. С. Терехов¹, А. В. Латышев^{1,2}

¹Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова, пр. ак. Лаврентьева, 13, Новосибирск, 630090, Россия.

²Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090, Россия.

³Новосибирский государственный технический университет, пр. К. Маркса, 20, Новосибирск, 630073, Россия.

тел: (383) 330-98-74, факс: (383) 333-27-71, эл. почта: kazantsev-83@yandex.ru

Атомно-гладкие поверхности полупроводников необходимы для научных исследований, а также для создания наноструктур и приборов микро- и оптоэлектроники. В работах [1,2] была предложена и реализована методика получения поверхностей GaAs(001) с регулярными атомно-гладкими террасами, разделенными ступенями моноатомной высоты, путем отжига в условиях равновесия между кристаллом и парами мышьяка и галлия. Данная работа посвящена выяснению механизмов атомного выглаживания и разупорядочения поверхностей GaAs(001) с помощью моделирования методом Монте-Карло.

Установлено, что основные особенности измеренной кинетики выглаживания поверхности GaAs(001) описываются на качественном уровне с помощью моделирования по методу Монте-Карло в модели кристалла Косселя. Выявлены различные этапы кинетики формирования террасированной поверхности, которые состоят в рекомбинации адатомов и вакансий, зарождении островков и увеличении их размеров («оствальдовское созревание»), встраивании островков в ступени и выпрямлении ступеней. Для количественного описания процесса выглаживания использовалась длина атомных ступеней, которая более адекватно характеризует процесс формирования террасированной поверхности, чем среднеквадратичная шероховатость [2], и средний размер островков. Сравнение измеренной кинетики длины ступеней и среднего размера островков с расчетом позволило оценить значения параметров, определяющих процесс выглаживания: энергия латеральных связей поверхностных атомов, энергия активации поверхностной диффузии и энергия десорбции адатомов [3]. С помощью Фурье и автокорреляционного анализа изучены особенности оствальдовского созревания на террасах и анизотропия рельефа поверхности.

При увеличении температуры отжига в эксперименте выглаживание поверхности сменяется её разупорядочением (огрублением рельефа). Моделирование показало, что фундаментальный «огрубляющий переход» (“roughening transition”) должен происходить при температурах, существенно превышающих экспериментальные значения. Обсуждаются возможные механизмы разупорядочения поверхности, обусловленные отклонением условий отжига от равновесных.

Литература

- [1] V. L. Alperovich, I. O. Akhundov *et al.*, Appl. Phys. Lett. **94**, 101908 (2009).
- [2] I. O. Akhundov, V. L. Alperovich *et al.*, Appl. Surf. Sci. **269**, 2 (2013).
- [3] D. M. Kazantsev, I. O. Akhundov *et al.*, Appl. Surf. Sci. **333**, 141 (2015).