

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ И КИНЕТИЧЕСКОЕ РАЗУПОРЯДОЧЕНИЕ:
МОДЕЛИРОВАНИЕ МОНТЕ-КАРЛО И ЭКСПЕРИМЕНТ НА GaAs

Атомно-гладкие поверхности кристаллов необходимы для научных исследований, создания наноструктур и приборов микро- и оптоэлектроники. В работах [1, 2] была разработана методика получения поверхностей GaAs с регулярными атомно-гладкими террасами, разделенными ступенями моноатомной высоты, путем отжига в условиях, близких к равновесию между кристаллом и парами мышьяка и галлия, когда не происходит ни роста, ни сублимации. При температурах отжига $T \geq 700^\circ\text{C}$ выглаживание сменяется разупорядочением поверхности, которое состоит в формировании эшелонов ступеней, островков или озер более чем моноатомной высоты и разрушении ступенчато-террасированной морфологии [1]. В принципе, разупорядочение поверхности может быть обусловлено термодинамическим "огрубляющим переходом" ("roughening transition") к шероховатой поверхности при уменьшении линейного натяжения атомных ступеней до нуля, когда становится выгодной спонтанная генерация ступеней [3]. Кроме того, разупорядочение поверхности может быть вызвано кинетическими неустойчивостями, возникающими, в свою очередь, из-за отклонения условий отжига от равновесия в сторону роста или сублимации. Задача данной работы состоит в выяснении причины разупорядочения поверхности GaAs при высоких температурах с помощью моделирования термодинамического и кинетического разупорядочения методом Монте-Карло.

Моделирование подтвердило, что наблюдаемое в эксперименте разупорядочение поверхности не может быть объяснено термодинамическим огрубляющим переходом, поскольку этот переход должен происходить при температурах $T \sim 1800 - 2000^\circ\text{C}$, существенно больших, чем в эксперименте. Экспериментально и с помощью моделирования показано, что разупорядочение поверхности GaAs при высоких температурах вызвано кинетическими неустойчивостями при отклонении условий отжига от равновесия в сторону роста или сублимации. Обсуждаются микроскопические механизмы кинетических неустойчивостей, приводящие к разупорядочению поверхностей. Экспериментальная морфология разупорядоченных поверхностей качественно описана с помощью моделирования кинетического разупорядочения в широком диапазоне ширины террас исходной ступенчато-террасированной поверхности. Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 14-02-00352) и Российского научного фонда (грант 14-22-00143).

1. V.L. Alperovich et al., *Appl. Phys. Lett.*, **94**, 101908 (2009)
2. I.O. Akhundov et al., *Appl. Surf. Sci.*, **269**, 2 (2013)
3. J. Lapujoulade, *Surf. Sci. Rep.*, **20**, 191 (1994)