

Кинетическое огрубление рельефа поверхности GaAs: эксперимент и Монте-Карло моделирование

Казанцев Д.М.^{1,2}, Ахундов И.О.¹, Кожухов А.С.¹, Альперович В.Л.^{1,2}, Латышев А.В.^{1,2}

¹ИФП им. А.В. Ржанова СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. ак. Лаврентьева, 13

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

Атомно-гладкие поверхности кристаллов необходимы для научных исследований, а также создания наноструктур и приборов. В работах [1,2] была разработана методика получения поверхностей GaAs с атомно-гладкими террасами, разделенными ступенями монокристаллической высоты. Эта методика состоит в отжиге в условиях, близких к равновесию между кристаллом и парами мышьяка и галлия, когда не происходит ни роста, ни сублимации, и позволяет получать ступенчато-террасированные поверхности при отжиге GaAs «*epi-ready*» подложек с малой исходной величиной среднеквадратичной шероховатости $\rho \sim 0.1 - 0.2$ нм. Для выглаживания поверхностей с большей величиной шероховатости желательно увеличить температуру отжига, чтобы ускорить массоперенос на поверхности. Однако максимальная температура отжига ограничивается разупорядочением (огрублением) рельефа поверхности, которое наблюдается при высоких температурах $T \geq 700^\circ\text{C}$ и состоит в разрушении ступенчато-террасированной морфологии, формировании островков или ямок более чем монокристаллической высоты и эшелонов ступеней [1]. Известно, что огрубление рельефа 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]. Помимо этого, разупорядочение поверхности может быть вызвано кинетическими неустойчивостями, возникающими из-за отклонения условий отжига от равновесия в сторону роста или сублимации. Задача данной работы состоит в выяснении причин разупорядочения поверхности GaAs при высоких температурах.

Методики отжига GaAs и измерения рельефа поверхности с помощью атомно-силовой микроскопии описаны ранее [1,2]. Моделирование эволюции рельефа поверхности проводилось методом Монте-Карло в модели кристалла Косселя с параметрами (энергии активации поверхностной диффузии, латеральной связи, десорбции адатомов), определенными ранее из описания экспериментальной кинетики выглаживания [4]. Моделирование показало, что термодинамический огрубляющий переход должен происходить при температурах $T \sim 1800 - 2000^\circ\text{C}$, существенно больших, чем в эксперименте. Экспериментально и с помощью моделирования установлено, что термическое разупорядочение поверхности GaAs обусловлено кинетическими неустойчивостями при отклонении условий отжига от равновесия в сторону роста или сублимации. Эта гипотеза объясняет экспериментально наблюдавшееся формирование мультислойных островков или ямок при отклонении условий отжига от равновесных в сторону сублимации или роста, соответственно, а также эффекты эшелонирования ступеней. Островки и ямки образуются благодаря обтеканию «центров торможения» атомными ступенями. Обсуждается возможная природа центров торможения. Изучена зависимость эффектов эшелонирования ступеней на центрах торможения от угла отклонения поверхности от сингулярной грани. Установлено, что эшелоны формируются при достаточно больших углах отклонения и, соответственно, малой ширине террас на исходной ступенчато-террасированной поверхности. Рассмотрены тепловые флуктуации формы атомных ступеней с различной кристаллографической ориентацией.

[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] J. Lapujoulade, *Surf. Sci. Rep.* **20**, 191 (1994).

[4] D.M. Kazantsev, I.O. Akhundov et al., *Appl. Surf. Sci.* **333**, 141 (2015).