

Формирование поверхностей GaAs с атомно-гладкими террасами и моноатомными ступенями: эксперимент и Монте-Карло-моделирование

Д.М. Казанцев^{1,2,*}, И.О. Ахундов^{1,2}, В.Л. Альперович^{1,2}, А.Н. Карпов¹, Н.Л. Шварц^{1,3}, А.С. Кожухов¹, А.В. Латышев^{1,2}, А.С. Терехов¹

¹ Институт физики полупроводников СО РАН, просп. Лаврентьева, 13, Новосибирск, 630090

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

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

* kazantsev-83@yandex.ru

Установлено, что термическое выглаживание поверхности GaAs(001) в условиях равновесия с парами мышьяка и галлия может быть описано моделированием методом Монте-Карло на кристалле Косселя. Из сравнения результатов эксперимента и моделирования оценены значения энергии латеральных связей поверхностных атомов и энергии активации диффузии.

Введение

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

Методика эксперимента

При термическом выглаживании поверхности $\text{c}^{\text{re}}\text{-ready}$ подложек GaAs(001) равновесие с парами Ga и As обеспечивалось присутствием насыщенного раствора-расплава мышьяка в галлии. Морфология поверхности изучалась методом атомно-силовой микроскопии (АСМ). Моделирование процесса выглаживания за счет поверхностной диффузии проводилось методом МК на кристалле Косселя размером 256×256 ячеек (атомных единиц) в стандартном приближении «твердое на твердом». Исходная модельная шероховатая поверхность приготавливалась добавлением случайного рельефа к гладкой наклонной плоскости.

Результаты и обсуждение

На рис. 1 показаны изображения рельефа поверхности, измеренные методом АСМ (a-d) и полученные методом МК (i-m) при различных длительностях прогрева. Несмотря на значительное различие масштабов измеренных и рассчитанных изображений, моделирование позволило выявить различные этапы кинетики формирования террасированной поверхности, которые состоят в рекомбинации адатомов и вакансий, зарождении островков и увеличении их размеров («остwaldовское созревание»), встраивании островков в ступени и выпрямлении ступеней. Таким образом, основные особенности измеренной кинетики выглаживания поверхности GaAs(001) описываются на качественном уровне с помощью МК-моделирования.

Для количественного описания процесса выглаживания использовались автокорреляционные функции, показанные на рис. 1(e-h, n-q), преобразование Фурье и длина атомных ступеней [2]. На рис. 2 показаны зависимости корреляционных длин (КД) в направлении вдоль (λ_l) и поперек (λ_{tr}) ступеней от времени отжига t . Видно, что при $t \leq 40$ мин расчетные длины λ_l и λ_{tr} совпадают, а при $t \geq 40$ мин λ_l резко увеличивается. Такое поведение обусловлено тем, что на начальном этапе выглаживания обе КД соответствуют среднему размеру островков. После встраивания островков в ступени корреляционные