

**МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО  
ПРОЦЕССА ВЫГЛАЖИВАНИЯ ПОВЕРХНОСТИ GaAs (001)  
В РАВНОВЕСНЫХ УСЛОВИЯХ**

Д. М. Казанцев

Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН  
Новосибирский государственный университет

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 поверхностей GaAs(001) с помощью моделирования методом Монте-Карло.

Установлено, что основные особенности экспериментальной кинетики выглаживания поверхности GaAs(001) описываются на качественном уровне с помощью моделирования по методу Монте-Карло. Моделирование позволило выявить 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]. Из сравнения кинетики измеренной длины ступеней с расчетом по методу Монте-Карло в модели кристалла Косселя оценены значения параметров, определяющих процесс выглаживания: энергия латеральных связей поверхностных атомов и энергия активации диффузии. Обсуждаются относительные вклады переноса атомов путем поверхностной диффузии и через газовую фазу в процесс выглаживания.

---

1. V. L. Alperovich, I. O. Akhundov, N. S. Rudaya, D. V. Sheglov, E. E. Rodyakina, A. V. Latyshev, and A. S. Terekhov. Appl. Phys. Lett. 94, 101908 (2009).

2. I. O. Akhundov, V. L. Alperovich, A. V. Latyshev, and A. S. Terekhov. Appl. Surf. Sci. 269, 2 (2013).

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук В. Л. Альперович.