

Разупорядочение ступенчато-террасированной поверхности GaAs: эксперимент и Монте-Карло моделирование

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

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 при отжиге подложек GaAs(001) в присутствии насыщенного раствора-расплава Ga-As при температурах $T \geq 700$ °C вместо выглаживания поверхности, которое наблюдается при более низких температурах, происходит разупорядочение (огрубление) рельефа. Сопоставление эксперимента с результатом моделирования методом Монте-Карло свидетельствует о том, что разупорядочение обусловлено не термодинамическим «огрубляющим переходом», а отклонением условий отжига от равновесия в сторону сублимации или роста.

Введение

В работах [1, 2] была предложена и реализована методика получения поверхностей GaAs с регулярными атомно-гладкими террасами, разделенными ступенями моноатомной высоты, путем отжига в условиях равновесия между кристаллом и парами мышьяка и галлия. При высоких температурах отжига $T \geq 700$ °C выглаживание сменяется разупорядочением (огрублением) рельефа поверхности, которое состоит в разрушении ступенчато-террасированной морфологии, формировании эшелонов ступеней, а также островков более чем моноатомной высоты [1]. Огрубление поверхности кристалла при высокой температуре может быть обусловлено термодинамическим «огрубляющим переходом» («roughening transition»), при котором, за счет энтропийного вклада в свободную энергию, линейное натяжение атомных ступеней обращается в ноль и становится выгодной спонтанная генерация ступеней [3]. Другая возможная причина огрубления поверхности может быть связана с кинетическими нестабильностями при отклонении условий отжига от равновесных в сторону сублимации или роста кристалла. Задача данной работы состоит в выяснении механизма огрубления рельефа поверхности GaAs при высоких температурах.

Методика эксперимента

В эксперименте в качестве исходных использовались поверхности GaAs(001) со ступенчато-

террасированной морфологией, приготовленные отжигом образцов «epi-ready» подложек при $T = 600\text{--}650$ °C в условиях, близких к равновесию с парами мышьяка и галлия, когда потоки атомов на поверхность и с поверхности в среднем уравновешены и нет ни сублимации, ни роста [1, 2]. Равновесие обеспечивалось присутствием насыщенного раствора-расплава Ga-As. Морфология поверхности определялась с помощью атомно-силовой микроскопии (АСМ). Моделирование разупорядочения поверхности при высоких температурах проводилось методом Монте-Карло; ранее этим методом описана кинетика выглаживания поверхности GaAs(001) [4].

Результаты и обсуждение

Моделирование термодинамического огрубляющего перехода на поверхности подтвердило предположение о том, что температура отжига в эксперименте недостаточна для разупорядочения поверхности: этот переход происходит при температуре на ~ 30% выше, чем в эксперименте. Полученная в моделировании температура огрубляющего перехода хорошо согласуется с теоретическим предсказанием [3] для определенной ранее энергии связи между поверхностными атомами [4].

Для выяснения причины разупорядочения, наблюдаемого в эксперименте, в присутствии расплава Ga-As был проведен отжиг двух одинаковых образцов со ступенчато-террасированной морфологией,