

Аннотация

В выпускной квалификационной работе изучены микроскопические механизмы термического выглаживания и разупорядочения рельефа (огрубления) поверхностей полупроводников. Для решения поставленных задач проведено моделирование процессов выглаживания и огрубления поверхности кристалла методом Монте-Карло и сопоставление результатов моделирования с экспериментами на GaAs(001). Для количественного описания морфологии поверхности полупроводников использована длина атомных ступеней.

Исполнитель (Ф.И.О.): Казанцев Дмитрий Михайлович

Наименование ВКР: Моделирование процессов термического выглаживания и разупорядочения поверхности полупроводников

Объект исследования: Микроскопические механизмы термического выглаживания и разупорядочения поверхности кристаллов

Цель: Определение условий и исследование механизмов формирования и разупорядочения ступенчато-террасированных поверхностей GaAs при отжиге в условиях, близких к равновесным.

Методы исследования: Моделирование Монте-Карло, атомно-силовая микроскопия, двумерный автокорреляционный и Фурье-анализ

Научная новизна:

1. Впервые промоделировано выглаживание поверхности полупроводников в условиях, близких к равновесным, и определены параметры поверхности GaAs(001), влияющие на процесс выглаживания, из сопоставления с экспериментом.
2. С помощью Фурье- и автокорреляционного анализа выявлена анизотропия рельефа поверхности, связанная с кристаллографической анизотропией и анизотропией, задаваемой направлением вицинальных ступеней.
3. Выявлены особенности остwaldовского созревания на ступенчато-террасированной поверхности, связанные с пространственным разделением островков и озер и встраиванием островков в ступени.
4. Показано, что образование мультислойных островков и озер, с которого начинается огрубление поверхности, обусловлено обтеканием движущимися ступенями центров торможения при сублимации или росте, соответственно.

Теоретическая/практическая значимость исследования:

1. Показано, что моделирование Монте-Карло в однокомпонентной модели Коссея описывает формирование ступенчато-террасированной поверхности полупроводников на качественном и количественном уровне. Определены параметры, определяющих процесс выглаживания: энергия латеральных связей поверхностных атомов, энергия активации поверхностной диффузии и энергия десорбции адатомов.
2. С помощью моделирования Монте-Карло и сопоставления результатов моделирования с экспериментом показано, что огрубление поверхности при повышенных температурах отжига $T \geq 700^\circ\text{C}$ вызвано отклонением условий отжига от равновесия в сторону роста или сублимации и предложен механизм формирования мультислойных островков и озер, а также эшелонов ступеней.

Область применения: Данная работа представляет собой фундаментальное исследование.

Список ключевых слов: Арсенид галлия, выглаживание поверхности, огрубление поверхности, моноатомные ступени, ступенчато-террасированная морфология, кинетические неустойчивости, моделирование Монте-Карло, оствальдовское созревание, корреляционная длина, центры торможения ступеней, барьер Швбееля.

Апробация работы:

Результаты работы представлены на Международных симпозиумах “Наноструктуры: физика и технология” (Санкт-Петербург, 2013, 2017), Российской конференции по физике полупроводников (Санкт-Петербург, 2013, Звенигород, 2015, Екатеринбург, 2017), Международных симпозиумах “Нанофизика и нанoeлектроника” (Нижний Новгород, 2014, 2015, 2016), научных семинарах ИФП СО РАН. По полученным результатам опубликовано 16 работ.

Публикации по теме диссертации:

Список статей:

1. D.M. Kazantsev, I.O. Akhundov, V.L. Alperovich, N.L. Shwartz, A.S. Kozhukhov, A.V. Latyshev, Thermal smoothing and roughening of GaAs surfaces: experiment and Monte Carlo simulation, Semiconductors 52, 2018, 618–621. doi:10.21883/FTP.2018.05.45858.47
2. I.O. Akhundov, D.M. Kazantsev, A.S. Kozhuhov, V.L. Alperovich, Optimization of conditions for thermal smoothing GaAs surfaces, J. Phys. Conf. Ser. 993, 2018, 012010. doi:10.1088/1742-6596/993/1/012010
3. D.M. Kazantsev, I.O. Akhundov, A.S. Kozhukhov, V.L. Alperovich, Thermodynamic and kinetic roughening: Monte Carlo simulation and experiment on GaAs, J.

Phys. Conf. Ser. 816, 2017, 012008. doi:10.1088/1742-6596/816/1/012008

4. I.O. Akhundov, D.M. Kazantsev, V.L. Alperovich, D.V. Sheglov, A.S. Kozhukhov, A.V. Latyshev, Local monitoring of atomic steps on GaAs(001) surface under oxidation, wet removal of oxides and thermal smoothing, Appl. Surf. Sci. 406, 2017, p. 307–311. doi:10.1016/j.apsusc.2017.02.062

5. I.O. Akhundov, D.M. Kazantsev, A.S. Kozhuhov, V.L. Alperovich, Thermal roughening of GaAs surface by dislocation-induced step-flow sublimation, J. Phys. Conf. Ser. 741, 2016, 012042. doi:10.1088/1742-6596/741/1/012042

6. I.O. Akhundov, D.M. Kazantsev, V.L. Alperovich, N.S. Rudaya, E.E. Rodyakina, A.V. Latyshev, Formation and interaction of dislocation-induced and vicinal monatomic steps on a GaAs(001) surface under stress relaxation, Scripta Materialia 114, 2016, p. 125–128. doi:10.1016/j.scriptamat.2015.12.017

7. D.M. Kazantsev, I.O. Akhundov, N.L. Schwartz, V.L. Alperovich, A.V. Latyshev, Anisotropy in Ostwald ripening and step-terraced surface formation on GaAs(001): experiment and Monte Carlo simulation, Appl. Surf. Sci. 359, 2015, p. 372–379. doi:10.1016/j.apsusc.2015.10.074

8. D.M. Kazantsev, I.O. Akhundov, A.N. Karpov, N.L. Schwartz, V.L. Alperovich, A.S. Terekhov, A.V. Latyshev, Monte Carlo simulation of GaAs(001) surface smoothing in equilibrium conditions, Appl. Surf. Sci. 333, 2015, p. 141–146. doi:10.1016/j.apsusc.2015.01.226.

Тезисы докладов:

1. Д.М. Казанцев, И.О. Ахундов, А.С. Кожухов, В.Л. Альперович, А.В. Латышев, Кинетическое огрубление рельефа поверхности GaAs: эксперимент и Монте-Карло моделирование, Тезисы докладов XIII Российской конференции по физике полупроводников, Екатеринбург, 2017, с. 89.

2. V.L. Alperovich, D.M. Kazantsev, I.O. Akhundov, A.S. Kozhukhov, A.V. Latyshev, Thermal smoothing and roughening of semiconductor surfaces: experiment on GaAs and Monte Carlo simulation, 25th Int. Symp. Nanostructures: Physics and Technology, St.Petersburg, 2017, p. 256–258.

3. Д.М. Казанцев, И.О. Ахундов, А.С. Кожухов, В.Л. Альперович, Термодинамическое и кинетическое разупорядочение: моделирование Монте-Карло и эксперимент на GaAs, Тезисы докладов XVIII Всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике, Санкт-Петербург, 2016, с. 19.

4. Д.М. Казанцев, И.О. Ахундов, Н.Л. Шварц, В.Л. Альперович, А.В. Латышев, Разупорядочение ступенчато-террасированной поверхности GaAs: эксперимент и Монте-Карло моделирование, Материалы XX Международного симпозиума “Нанوفизика и наноэлектроника”, Нижний Новгород, 2016, с. 598-599.
5. Д.М. Казанцев, И.О. Ахундов, Н.Л. Шварц, В.Л. Альперович, А.С. Терехов, А.В. Латышев, Выглаживание и разупорядочение ступенчато-террасированной поверхности GaAs: эксперимент и Монте-Карло моделирование, Тезисы докладов XII Российской конференции по физике полупроводников, Звенигород, 2015, с. 148.
6. В.Л. Альперович, И.О. Ахундов, Н.С. Рудая, А.С. Ярошевич, Д.М. Казанцев, Н.Л. Шварц, Е.Е. Родякина, А.С. Кожухов, А.В. Латышев, А.С. Терехов, Вицинальные и дислокационные моноатомные ступени на атомно-гладких поверхностях GaAs(001), Труды XIX Международного симпозиума “Нанوفизика и наноэлектроника”, Нижний Новгород, 2015, с. 229-230.
7. В.Л. Альперович, И.О. Ахундов, Д.М. Казанцев, Н.С. Рудая, Е.Е. Родякина, А.С. Кожухов, Д.В. Щеглов, А.Н. Карпов, Н.Л. Шварц, А.С. Терехов, А.В. Латышев, Формирование террасированных поверхностей арсенида галлия в равновесных условиях, Юбилейный сборник избранных трудов Института физики полупроводников им. А.В. Ржанова, Новосибирск, 2014, с. 221-240.
8. Д.М. Казанцев, И.О. Ахундов, В.Л. Альперович, А.Н. Карпов, Н.Л. Шварц, А.С. Кожухов, А.В. Латышев, А.С. Терехов, Формирование поверхностей GaAs с атомно-гладкими террасами и моноатомными ступенями: эксперимент и Монте-Карло моделирование, Труды XVIII Международного симпозиума “Нанوفизика и наноэлектроника”, Нижний Новгород, 2014, с. 390.
9. В.Л. Альперович, И.О. Ахундов, Н.С. Рудая, Д.М. Казанцев, Е.Е. Родякина, А.В. Латышев, А.С. Терехов, Атомно-гладкие поверхности GaAs(001) с прямолинейными моноатомными ступенями, индуцированными дислокациями, Тезисы докладов XI Российской конференции по физике полупроводников, Санкт-Петербург, 2013, с. 60.
10. D.M. Kazantsev, I.O. Akhundov, A.N. Karpov, N.L. Shwartz, V.L. Alperovich, A.V. Latyshev, Monte Carlo simulation of GaAs smoothing in equilibrium conditions, 21th Int. Symp. Nanostructures: Physics and Technology, St.Petersburg, 2013, p. 279–280.