

Аннотация

В выпускной квалификационной работе приводятся результаты Монте-Карло моделирования развития поверхности арсенида галлия в процессе неравновесных высокотемпературных отжигов (ленгмюровского испарения) и в процессе роста планарных нанопроволок GaAs по механизму пар-жидкость-кристалл, катализированных каплями галлия. Интерес к каплям галлия связан с их применением при создании наноструктур на основе GaAs методом капельной эпитаксии и росте нанопроволок по механизму пар-жидкость-кристалл. Капли галлия образуются при осаждении галлия на поверхность кристалла или при ленгмюровском испарении арсенида галлия. Формирование капель галлия в процессе отжигов GaAs происходит при температурах, превышающих температуру конгруэнтного испарения, и сопровождается развитием рельефа поверхности подложки. Исследование кинетики развития морфологии поверхности в процессе ленгмюровского испарения важно для понимания того, как система приходит в стационарное состояние. Знание кинетики ленгмюровского испарения обеспечивает правильное определение стационарных характеристик испарения, таких как скорость испарения GaAs, температура конгруэнтного испарения, энергия активации десорбции компонентов.

Тема движения капель галлия в процессе отжига GaAs и роста планарных нанопроволок GaAs требует особого внимания. На сегодняшний день открытым остается вопрос о причинах направленного движения капель галлия в процессе высокотемпературных отжигов арсенида галлия. Ответ на этот вопрос может помочь при самокаталитическом росте массива однонаправленных планарных нанопроволок GaAs, формирующихся по механизму пар-жидкость-кристалл с использованием капель галлия в качестве катализатора. Интерес к планарным нанопроволокам, растущим вдоль поверхности подложки, связан с перспективами их использования в стандартной планарной технологии при создании приборов на их основе. На сегодняшний день требуется выявление и изучение основных процессов ответственных за самокаталитический рост планарных нанопроволок при молекулярно-лучевой. Для самокаталитического роста планарных нанопроволок GaAs важными является поиск оптимальных ростовых условий и свойств пассивирующего слоя поверхности подложки, обеспечивающих планарный режим роста.

В рамках данной работы с помощью моделирования методом Монте-Карло исследуются развитие морфологии поверхностей GaAs с ориентациями (111)А и (111)В в процессе ленгмюровского испарения на атомарном уровне и зависимость основных характеристик ленгмюровского испарения от температуры, ориентации и морфологии подложек GaAs. Результаты, полученные по отжигу арсенида галлия, использовались при реализации модели самокаталитического роста планарных GaAs нанопроволок по механизму пар-жидкость-кристалл.

Исполнитель (Ф.И.О): Спирина Анна Александровна

Наименование выпускной научно-квалификационной работы: Движение капель галлия в процессе высокотемпературных отжигов GaAs и роста планарных нанопроволок GaAs

Объект исследования: морфология поверхности GaAs в процессе ленгмюровского испарения и самокаталитического роста планарных нанопроволок GaAs по механизму пар-жидкость-кристалл

Цель: определить микроскопические механизмы и макроскопические характеристики ленгмюровского испарения GaAs(111) и выявить физические закономерности формирования планарных нанопроволок GaAs по механизму пар-жидкость-кристалл с использованием галлия в качестве катализатора роста.

Методы исследования: моделирование методом Монте-Карло.

Научная новизна:

- Впервые получены кинетические и температурные зависимости скоростей испарения сингулярных и вицинальных подложек GaAs(111)A и GaAs(111)B в широком диапазоне температур.
- Впервые получены зависимости температуры конгруэнтного испарения от угла разориентации поверхности. Показано, что температура конгруэнтного испарения поверхностей (111)A T_c^A и (111)B T_c^B по-разному реагирует на степень разориентации поверхности и концентрацию поверхностных дефектов. Показано, что при изменении угла отклонения поверхности от 0.1° до 5.2° величина T_c^A уменьшается на 200 К, величина T_c^B – на 50 К.
- Предложен новый механизм движения капель галлия на начальных стадиях высокотемпературных отжигов GaAs. Причиной движения капель является стремление к достижению равновесной концентрации мышьяка в объеме капель галлия при заданной температуре отжига. Направление движения капель определяется анизотропией травления фасеток (111)A и (111)B на латеральной границе раздела капля-подложка.
- Продемонстрировано влияние капель галлия на движение ступеней вицинальных поверхностей в процессе испарения GaAs. Найдено, что капли галлия могут быть причиной локального эшелонирования ступеней при отжиге подложек GaAs(111) с большим отклонением от сингулярности.
- Впервые на атомарном уровне проанализировано формирование трехмерного кристалла GaAs на границе раздела капля-подложка, задающего направление роста нанопроволок по механизму пар-жидкость-кристалл. Получено, что форма 3D кристалла зависит от ориентации подложки. Показано, что на поверхности (001) существует два, а на поверхности (111)A – три направления роста нанопроволок вдоль подложки, на поверхности (111)B – четыре направления роста, три из которых планарные и одно – перпендикулярное подложке.
- Показано, что рост планарных проволок на поверхности (111)A более устойчив, по сравнению с (111)B. Выявлен диапазон температур и скоростей осаждения, в котором наблюдался рост планарных нанопроволок на поверхностях GaAs(111)A.
- Проанализированы причины перехода с планарного на непланарный режим роста нанопроволок GaAs. Предложены варианты роста, способствующие одностороннему росту массива планарных нанопроволок.

Теоретическая и практическая значимость:

Полученные кинетические зависимости скоростей испарения подложек GaAs важны для понимания того, как система приходит в стационарное состояние в процессе отжига, и какие атомарные механизмы при этом протекают. Знание кинетики ленгмюровского испарения арсенида галлия обеспечивает правильное определение стационарных характеристик испарения. Только детальное изучение кинетики отжигов GaAs на атомарном уровне позволило выявить, что поверхности GaAs(111)B в условиях конгруэнтного испарения испаряются мультислойно в отличие от поверхности

GaAs(111)A. Это означает, что поверхность GaAs(111)B после отжига даже при температурах ниже температуры конгруэнтного испарения не является атомарно-гладкой.

Зависимости основных характеристик лэнгмюровского испарения (скорости испарения компонентов, температура конгруэнтного испарения, энергии активации десорбции) от разориентации поверхности подложки представляют особый практический интерес, поскольку реальные поверхности всегда имеют некоторый угол отклонения от сингулярности. Влияние ширины террас на макрохарактеристики испарения и роста кристалла обусловлены атомарными процессами, протекающими на поверхности. Без рассмотрения взаимодействия атомов на поверхности невозможно адекватно объяснить изменения скоростей роста и испарения кристалла при изменении угла отклонения.

Имитационное моделирование позволяет выявить условия роста планарных нанопроволок на основе арсенида галлия по механизму пар-жидкость-кристалл методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Полученные результаты по самокаталитическому росту планарных нанопроволок GaAs могут использоваться при оптимизации технологии формирования массива планарных нанопроволок GaAs выращенных при использовании галлия в качестве катализатора роста. Проведенные вычислительные эксперименты и анализ их результатов позволит сократить количество громоздких и дорогостоящих экспериментов.

Область применения: данная работа представляет собой фундаментальное исследование.

Список ключевых слов: арсенид галлия, капли галлия, лэнгмюровское испарение, конгруэнтное испарение, неконгруэнтное испарение, температура конгруэнтного испарения, кинетика испарения, скорость испарения, эшелонирование ступеней, планарные нанопроволоки, самокаталитический рост, механизм пар-жидкость-кристалл, фронт роста, молекулярно-лучевая эпитаксия, сингулярная поверхность, вицинальная поверхность, морфология поверхности, десорбция, поверхностная диффузия, Монте-Карло, моделирование

Апробация работы:

Основные результаты, полученные в рамках данной работы, представлялись и обсуждались на конкурсах молодых учёных и семинарах ИФП СО РАН, а также докладывались на следующих российских и международных конференциях: 18-я Всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике (Санкт-Петербург, 2016), VI Всероссийская конференция по наноматериалам НАНО 2016 (Москва, 2016), XVIII Всероссийская конференция молодых ученых по математическому моделированию и информационным технологиям (Иркутск, 2017), 19-я Всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике (Санкт-Петербург, 2017), 56-ая Международная научная студенческая конференция МНСК-18 (Новосибирск, 2018), 26th International Symposium «Nanostructures: Physics and Technology» (Минск, Белоруссия, 2018), 19th International Conference of Young Specialists on Micro/Nanotechnologies and Electron Devices (EDM, Алтай, 2018), The Fourth Asian School-Conference on Physics and Technology of Nanostructured Materials (Владивосток, 2018), 20th European Workshop on Molecular Beam Epitaxy (EuroMBE, Lenggries, Germany, 2019), 20th International Conference of Young Specialists on Micro/Nanotechnologies and Electron Devices (EDM, Алтай, 2019), 14-я Российская конференция по физике полупроводников "Полупроводники-2019" (Новосибирск, 2019), Nanowire Week 2019 (Pisa, Italy, 2019), XX Всероссийская конференция молодых учёных по математическому моделированию и

информационным технологиям (Новосибирск, 2019), 21-я Всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике (Санкт-Петербург, 2019), Progress in Applied Surface, Interface, and Thin Film Science SURFINT-SREN VI (Florence, Italy, 2019), Кузнецовские чтения - 2020, Пятый семинар по проблемам химического осаждения из газовой фазы (Новосибирск, 2020), 21th International Conference of Young Specialists on Micro/Nanotechnologies and Electron Devices EDM 2020 (Новосибирск, 2020), 5th Asian School-Conference on Physics and Technology of Nanostructured Materials (Vladivostok, 2020), II Международная конференция Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов (Москва, 2020), XXII Всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике (Санкт-Петербург, 2020), Школа молодых ученых «Актуальные проблемы полупроводниковых наносистем» АППН-2020 (Новосибирск, 2020), XIII Сибирский семинар по высокотемпературной сверхпроводимости и физике наноструктур (Новосибирск, 2021), 22nd International Conference of Young Professionals in Electron Devices and Materials EDM (Алтай, 2021), III Международная конференция Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов (Москва, 2021), Российская конференция и школа молодых ученых по актуальным проблемам полупроводниковой фотоэлектроники (с участием иностранных ученых) «Фотоника 2021» (Новосибирск, 2021).

Результаты исследований по теме представляемой научно-квалификационной работы опубликованы в 12 статьях в рецензируемых научных журналах, входящих в перечень ВАК, и 24 тезисах докладов в трудах российских и международных конференций.

Публикации:

Статьи:

1. A. A. Spirina, A. G. Nastovjak, N. L. Schwartz, Influence of GaAs substrates properties on the congruent evaporation temperature, Journal of Physics: Conference Series, Vol. 993, No 1, pp. 12011, 2018.
2. А. А. Спирина, А. Г. Настовьяк, С.В. Усенков, Н. Л. Шварц, Решеточная Монте-Карло модель ленгмюровского испарения полупроводников АІІІВ, Вычислительные технологии, Vol. 23, No 6, pp 81-94, 2018.
3. A. A. Spirina, A. G. Nastovjak, N. L. Schwartz, Surface Orientation Influence on the Langmuir Evaporation Characteristics of GaAs Substrates, Defect and Diffusion Forum, Vol. 386, pp 21-26, 2018.
4. A. A. Spirina, I. G. Neizvestny, N. L. Schwartz, Comparative Characteristics of GaAs and InAs Langmuir Evaporation - Monte Carlo Simulation, Defect and Diffusion Forum, Vol. 386, pp 27-32, 2018.
5. A. A. Spirina, A. G. Nastovjak, I. G. Neizvestny, N. L. Schwartz, Monte Carlo simulation of Ga droplet movement during the GaAs Langmuir evaporation, Semiconductors, Vol. 52, No 16, pp 2133-2137, 2018.
6. Spirina, N. Schwartz, Metal droplet formation and motion during the III-V semiconductor evaporation, Materials Science in Semiconductor Processing, Vol. 100, pp. 319-325, 2019. doi.org/10.1016/j.mssp.2019.05.012, (Scopus, WoS)
7. A. A. Spirina, I. G. Neizvestny, N. L. Schwartz, Initial stages of planar GaAs nanowire growth – Monte Carlo simulation, Semiconductors, Vol. 53, No 16, pp 81-84, 2019.
8. А. А. Спирина, Н. Л. Шварц, Влияние температуры на морфологию планарных нанопроволок GaAs (моделирование), Физика и техника полупроводников, 54, 2, 156-160, 2020.

9. Spirina A. A., Shwartz N. L. Influence of gallium and arsenic deposition rates on the GaAs planar nanowire morphology. *Journal of Physics: Conference Series*, 1482, 12007, 2020.
10. A.A. Spirina, V.L. Alperovich, N.L. Shwartz, Langmuir evaporation of GaAs(111)A and GaAs(111)B: Monte Carlo simulation, *Applied Surface Science*, 540, 1, 148281, 2021.
11. A.A. Spirina, N.L. Shwartz, Influence of GaAs substrate misorientation on gallium and arsenic evaporation rates, *Journal of Physics: Conference Series*, 1851, 1, 12001, 2021.
12. A.A. Spirina, N.L. Shwartz, Time evolution of GaAs(111) surface morphology and desorption rate during Langmuir evaporation: Monte Carlo simulation, *Materials Science in Semiconductor Processing*, 134, p 106025, 2021.

Тезисы и труды конференций:

1. А. А. Спирина, Н. Л. Шварц, Исследование преобразования морфологии поверхностей подложек GaAs с помощью моделирования, 56-ая Международная научная студенческая конференция МНСК-18, 22-27 апреля 2018, Новосибирск, стр. 62.
2. А. А. Spirina, A. G. Nastovjak, N. L. Shwartz, Characteristics of Ga droplet movement during the GaAs Langmuir evaporation, 26th Int. Symp. «Nanostructures: Physics and Technology» (Минск, Белоруссия), 2018., стр 140-141.
3. А. А. Spirina, A. G. Nastovjak, N. L. Shwartz, GaAs Substrates Langmuir Evaporation Kinetics, in 19th International Conference of Young Specialists on Micro/Nanotechnologies and Electron Devices (Алтай), 2018. doi: 10.1109/EDM.2018.8435019, стр 36-39.
4. А. А. Spirina, A. G. Nastovjak, N. L. Shwartz, Surface orientation influence on the characteristics of GaAs substrates high-temperature annealing, The Fourth Asian School-Conference on Physics and Technology of Nanostructured Materials (Владивосток), 2018, стр 125-127.
5. А. А. Spirina, I. G. Neizvestny, N. L. Shwartz, Examination of GaAs and InAs Langmuir evaporation by simulation, The Fourth Asian School-Conference on Physics and Technology of Nanostructured Materials (Владивосток), 2018, стр 96-97.
6. А. А. Spirina, A. G. Nastovjak, N. L. Shwartz, Analyses of new crystal layer formation at droplet-crystal interface during AIIIBV nanowire growth by Monte Carlo simulation, 20th European Workshop on Molecular Beam Epitaxy (EuroMBE 2019), Lenggries, Germany, February 17th to 20th, 2019, p. PII-11.
7. А. А. Spirina, N. L. Shwartz, Simulation of Planar Nanowire Growth Based on AIIIBV Semiconductors, 20th International Conference of Young Specialists on Micro/Nanotechnologies and Electron Devices (EDM 2019), Altai Republic (Russia), June 29 - July 3 2019, p. 36-39. ISBN: 978-1-7281-1753-9, ISSN: 2325-419X, DOI: 10.1109/EDM.2019.8823490.
8. Шварц Н.Л., Спирина А.А., Движение капель металла при высокотемпературных отжигах полупроводников III-V (Монте Карло моделирование), XIV Российская конференция по физике полупроводников, Новосибирск, 9 - 13 сентября 2019, р. 139, ISBN: 978-5-00150-446-7
9. Спирина А.А., Шварц Н.Л., Условия формирования планарных нанопроволок GaAs (моделирование), XIV Российская конференция по физике полупроводников, Новосибирск, 9 - 13 сентября 2019, р. 133, ISBN: 978-5-00150-446-7.
10. Anna Spirina, Nataliya Shwartz, Monte Carlo simulation of planar GaAs nanowire growth, Nanowire Week 2019, Pisa (Tuscany) Italy, September 23 to 27, 2019, p. PI.09, <http://webtheory.sns.it/nanowireweek2019/>
11. А. А. Спирина, Н. Л. Шварц, В.С. Деревщиков, Решеточная Монте-Карло модель сорбции/регенерации высокотемпературного регенерируемого сорбента, XX Всероссийская конференция молодых учёных по математическому моделированию и

информационным технологиям, Новосибирск, 28 октября - 1 ноября 2019 г, р. 44, ISBN: 978-5-905569-13-5.

12. Спирина А.А., Шварц Н.Л., Влияние скоростей осаждения галлия и мышьяка на морфологию планарных нанопроволок GaAs (моделирование), 21-я Всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике, Санкт-Петербург, 25 – 29 ноября 2019.

13. N.L. Schwartz, A.A. Spirina, V.L. Alperovich, Evolution of III-V semiconductor surface morphology during Langmuir evaporation, Progress in Applied Surface, Interface, and Thin Film Science (SURFINT-SREN VI), November 18 – 21, 2019, Florence, Italy, pp 150-153, ISBN 978-80-223-3811-9

14. А. А. Спирина, Н. Л. Шварц, Анализ CVD роста планарных нанопроволок GaAs по механизму пар-жидкость-кристалл, Кузнецовские чтения - 2020, Пятый семинар по проблемам химического осаждения из газовой фазы, 3 – 5 февраля 2020, Новосибирск, pp 38

15. A. A. Spirina, N. L. Schwartz, Annealing Kinetics of GaAs under Incongruent Evaporation Conditions, 21th International Conference of Young Specialists on Micro/Nanotechnologies and Electron Devices (EDM 2020), Novosibirsk (Russia), June 29 - July 4 2020, p. 19-22. ISBN: 978-1-7281-6846-3, ISSN: 2325-419X, DOI: 10.1109/EDM49804.2020.9153347

16. A.A.Spirina, N.L.Schwartz, Influence of the surface treatment on the GaAs planar nanowire morphology, Fifth Asian School-Conference on Physics and Technology of Nanostructured Material, Vladivostok, Russia, July 30 - August 03, 2020, p. 67, ISBN: 978-5-8044-1698-1

17. А. А. Спирина, Н. Л. Шварц, Влияние обработки поверхности подложки на морфологию GaAs планарных нанопроволок (моделирование методом Монте-Карло), II Международная конференция Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов, 19 - 21 октября 2020, Москва, р. 82-85, ISBN: 978-5-317-06483-9, DOI: 10.29003/m1525.MMMSEC-2020/82-85.

18. А. А. Спирина, Н. Л. Шварц, Влияние разориентации поверхности арсенида галлия на скорости испарения галлия и мышьяка, XXII Всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике, 23-27 ноября 2020, Санкт-Петербург, р. 26,

19. А. А. Спирина, Н. Л. Шварц, Эшелонирование ступеней на поверхности GaAs(111)A при лэнгмюровском испарении, Школа молодых ученых "Актуальные проблемы полупроводниковых наносистем", 14-16 декабря 2020, Новосибирск, р. 57-58

20. А. А. Спирина, Н. Л. Шварц, Влияние угла отклонения поверхности GaAs(111) на характеристики движения капель галлия в процессе неравновесных отжигов, XIII Сибирский семинар по высокотемпературной сверхпроводимости и физике наноструктур, 24 – 25 мая 2021 года, Новосибирск, р. 19

21. A.A.Spirina, N.L.Schwartz, GaAs Planar Nanowire Growth on Vicinal GaAs(111)A Substrates, IEEE 22nd International Conference of Young Professionals in Electron Devices and Materials, June 30 - July 4, 2021, Altai, Russia

22. Кудрич С. В., Спирина А. А., Шварц Н. Л., Моделирование методом Монте-Карло формирования и движения капель золота по поверхности кремния, XXII Всероссийская конференция молодых ученых по математическому моделированию и информационным технологиям, 25-29 октября 2021, Новосибирск

23. А. А. Спирина, Н. Л. Шварц, Особенности развития рельефа поверхности арсенида галлия в процессе неравновесных отжигов (Монте-Карло моделирование), III Международная конференция Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов, 25 - 27 октября 2021, Москва

24. А. А. Спирина, Н. Л. Шварц, Влияние ориентации поверхности на характеристики высокотемпературных отжигов подложек арсенида галлия, Российская конференция и школа молодых ученых по актуальным проблемам полупроводниковой фотоэлектроники (с участием иностранных ученых) (Фотоника 2021), 4-10 октября 2021, Новосибирск