

На правах рукописи

Казанцев Дмитрий Михайлович

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ
ТЕРМИЧЕСКОГО ВЫГЛАЖИВАНИЯ И РАЗУПОРЯДОЧЕНИЯ
ПОВЕРХНОСТИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

01.04.10 – физика полупроводников

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Новосибирск – 2018

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук.

Научный руководитель:

Альперович Виталий Львович, доктор физико-математических наук.

Официальные оппоненты:

Эрвье Юрий Юрьевич, доктор физико-математических наук, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», заведующий кафедрой физики полупроводников физического факультета.

Азатьян Сергей Геннадьевич, кандидат физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт автоматики и процессов управления Дальневосточного отделения Российской академии наук, научный сотрудник лаборатории технологий двумерной микроэлектроники.

Ведущая организация:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук.

Защита состоится «22» января 2019 года в 15.00 на заседании диссертационного совета Д 003.037.01 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук по адресу: 630090, Новосибирск, проспект академика Лаврентьева, 13.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук:

www.isp.nsc.ru/obrazovanie/dissertatsionnyj-sovet/zasedaniya/kazantsev-dmitrij-mikhajlovich

Автореферат разослан «7» ноября 2018 года.

Учёный секретарь диссертационного совета,
доктор физико-математических наук

Погосов Артур Григорьевич

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы

Атомно-гладкие поверхности полупроводников необходимы для фундаментальных исследований поверхностных процессов и создания полупроводниковых приборов. Только на гладких поверхностях возможно воспроизводимое создание наноструктур с использованием явлений самоорганизации при росте кристаллов [1,2] или современных методов зондовой микроскопии [3,4]. Хорошо известно, что поверхности кремния с регулярными атомно-гладкими террасами, разделенными прямолинейными моноатомными ступенями, можно получить отжигом в вакууме [5,6]. Ширина террас определяется углом отклонения поверхности от сингулярной грани. Для выглаживания полупроводниковых соединений $A^{III}B^V$ отжиг в вакууме не подходит из-за нарушения стехиометрии поверхности при высоких температурах за счет большей летучести элемента V группы [7]. В работах [8,9] был разработан метод получения ступенчато-террасированных поверхностей GaAs отжигом “epi-ready” подложек в условиях, близких к равновесию между поверхностью и парами мышьяка и галлия, когда нет ни сублимации, ни роста. Этот метод оказался менее затратным и более эффективным по сравнению с экспериментами по термическому выглаживанию GaAs в установках молекулярно-лучевой эпитаксии [10] и эпитаксии из металлорганических соединений [11].

К началу выполнения данной работы возможность выглаживания поверхности GaAs была показана экспериментально, и механизмы выглаживания на качественном уровне поняты [8,9], однако количественное описание процесса формирования ступенчато-террасированной поверхности отсутствовало. Такое теоретическое описание необходимо для выяснения вкладов отдельных микроскопических механизмов выглаживания на различных этапах формирования ступенчато-террасированной поверхности, определения параметров модели, предсказания результатов экспериментов при различных условиях отжига и с различными значениями шероховатости исходной поверхности и, таким образом, оптимизации условий термического выглаживания.

Оставались невыясненными также механизмы разупорядочения рельефа (“огрубления”) поверхности GaAs, которое наблюдается в эксперименте при высоких температурах $T \geq 700^\circ\text{C}$ и состоит в разрушении ступенчато-террасированной морфологии за счет искривления формы ступеней, образования высоких и глубоких “мультислойных” островков и озёр, а также эшелонов ступеней [8]. Разупорядочение может быть вызвано термодинамическим “огрубляющим переходом” (“roughening transition”), когда линейное натяжение атомных ступеней уменьшается до нуля из-за энтропийного вклада в свободную энергию поверхности, и образование новых ступеней становится энергетически выгодным [12,13]. Разупорядочение поверхности может быть также связано с кинетическими неустойчивостями, которые возникают из-за отклонения условий отжига от равновесия. Вопрос о механизмах разупорядочения рельефа поверхности при высоких температурах представляет не только научный, но и практический интерес, поскольку увеличение температуры отжига способствует эффективному массопереносу на поверхности и, как следствие, уменьшению длительности выглаживания. Однако температура отжига ограничена сверху огрублением поверхности.

В настоящее время адекватной аналитической теории выглаживания и разупорядочения поверхности кристаллов нет, поэтому описание экспериментов целесообразно проводить с помощью численных методов. Одним из эффективных методов описания процессов массопереноса на поверхности является метод моделирования Монте-Карло. Этот метод широко используется для изучения эволюции рельефа поверхности при росте кристаллов [14,15,16].

Цель данной работы заключалась в выяснении механизмов термического выглаживания и разупорядочения поверхностей GaAs с помощью метода моделирования Монте-Карло и сопоставления результатов моделирования с экспериментом, определении параметров модели и оптимизации условий выглаживания.

Для достижения поставленной цели в данной работе решались следующие **основные задачи:**

1. Описать процесс формирования ступенчато-террасированной поверхности GaAs(001) при отжиге с помощью моделирования методом Монте-Карло в модели кристалла Косселя и найти параметры модели, определяющие процесс выглаживания.

2. Проанализировать экспериментальные данные по выглаживанию поверхности с литографической меткой для определения величины отклонения условий отжига GaAs от равновесия.

3. Выявить кристаллографическую анизотропию рельефа поверхности GaAs(001) в процессе выглаживания.

4. Изучить особенности оствальдовского созревания островков и озёр на ступенчато-террасированной поверхности.

5. Установить причины и выяснить микроскопические механизмы разупорядочения рельефа поверхности GaAs(001) при высоких температурах $T \geq 700^\circ\text{C}$.

6. Объяснить особенности разупорядочения рельефа ступенчато-террасированных поверхностей GaAs(001) с различной шириной террас.

7. Оптимизировать условия (уменьшить длительность) выглаживания поверхностей GaAs с учетом ограничений, налагаемых процессами разупорядочения рельефа поверхности при высоких температурах.

Методология и методы исследования:

Для решения поставленных задач использовалось моделирование термического выглаживания и разупорядочения поверхности кристаллов методом Монте-Карло. Параметры модели определялись из сопоставления с экспериментом кинетики длины ступеней и размеров островков. Анизотропия рельефа и особенности оствальдовского созревания в процессе формирования ступенчато-террасированной поверхности изучались с помощью автокорреляционного и Фурье-анализа. Эти методы использовались для качественного и количественного анализа ранее полученных экспериментальных результатов по термическому выглаживанию и разупоря-

дочению рельефа поверхности GaAs(001) в условиях, близких к равновесию с парами Ga и As.

Научная новизна полученных результатов состоит в следующем:

1. Из сопоставления результатов моделирования с экспериментом на GaAs(001) найдены параметры, определяющие процесс выглаживания полупроводника в условиях, близких к равновесным.

2. С помощью Фурье- и автокорреляционного анализа выявлена кристаллографическая анизотропия рельефа поверхности, а также анизотропия, задаваемая направлением вицинальных ступеней.

3. Выявлены особенности оствальдовского созревания на ступенчато-террасированной поверхности, связанные с пространственным разделением островков и озёр вицинальными ступенями, а также со встраиванием островков и озёр в ступени.

4. Показано, что образование мультислойных островков и озёр при огрублении поверхности обусловлено обтеканием движущимися ступенями центров торможения при сублимации и росте, соответственно.

Практическая ценность работы:

1. Определены эффективные параметры модели кристалла Косселя, определяющие процесс выглаживания поверхности GaAs(001): энергии латеральных связей, активации диффузии и десорбции атомов. Эти параметры могут быть использованы для оптимизации, с помощью моделирования Монте-Карло, условий выглаживания поверхностей с различной исходной шероховатостью.

2. С помощью моделирования Монте-Карло и сопоставления результатов моделирования с экспериментом показано, что огрубление поверхности при повышенных температурах $T \geq 700^\circ\text{C}$ вызвано отклонением условий отжига от равновесия. Предложен механизм формирования мультислойных островков и озёр, а также эшелонов ступеней.

3. Найдены оптимальные условия получения ступенчато-террасированных поверхностей GaAs(001) с помощью двухэтапного отжига при относительно высокой и низкой температурах на первом и втором этапах, соответственно.

На защиту выносятся следующие положения:

1. Моделирование Монте-Карло в модели кристалла Косселя позволяет описать процесс формирования ступенчато-террасированной поверхности GaAs(001), найти значения эффективных параметров, определяющих этот процесс, и выявить кристаллографическую анизотропию поверхности в процессе термического выглаживания.

2. На ступенчато-террасированной поверхности пространственное разделение островков и озёр, расположенных вблизи вицинальных ступеней, на ниже- и вышележащих террасах, соответственно, препятствует их рекомбинации. Оствальдовское созревание островков и озёр сменяется уменьшением их среднего размера за счет встраивания в ступени.

3. Кинетическое огрубление поверхности GaAs(001) при отклонении условий отжига от равновесия обусловлено обтеканием движущимися вицинальными ступенями участков поверхности, на которых рост и сублимация подавлены.

Степень достоверности полученных результатов обеспечивается применением апробированных программ для моделирования методом Монте-Карло, накоплением необходимой статистики при одинаковых начальных условиях для корректной оценки степени воспроизводимости и точности моделирования, сопоставлением с экспериментальными данными, а также с работами других авторов.

Апробация работы:

Полученные результаты были представлены на Международных симпозиумах “Наноструктуры: физика и технология” (Санкт-Петербург, 2013, 2017), Российских конференциях по физике полупроводников (Санкт-Петербург, 2013, Звенигород, 2015, Екатеринбург, 2017), Международных симпозиумах “Нанопизика и наноэлектроника” (Нижний Новгород, 2014, 2015, 2016), Международной конференции по

физике полупроводников (Монпелье, Франция, 2018), научных семинарах ИФП СО РАН.

Публикации:

Результаты исследований по теме диссертации опубликованы в 6 статьях в рецензируемых научных изданиях, 1 главе в монографии и 9 тезисах и трудах российских и международных конференций [A1–A16].

Личный вклад соискателя в диссертационную работу. Соискателем усовершенствована программа моделирования эволюции рельефа поверхности кристалла методом Монте-Карло. Это позволило промоделировать выглаживание в равновесных условиях, на порядок увеличить скорость счета и площадь моделируемого участка поверхности кристалла. Лично соискателем проведены моделирование выглаживания и огрубления поверхности, обработка и анализ результатов, а также сравнение с экспериментом на GaAs; предложен и реализован способ перенормировки параметров, учитывающий разницу масштабов участков поверхности в эксперименте и моделировании. Обсуждение результатов и написание статей проводилось совместно с соавторами опубликованных работ. Соискатель лично представлял результаты на 7 российских и международных конференциях.

Структура и объем диссертации:

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы. Диссертация содержит 112 страниц и включает 26 рисунков и список литературы из 85 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность темы работы, сформулированы цель и задачи исследования, а также защищаемые положения.

В первой главе рассмотрены методы описания рельефа поверхности кристаллов, известные из литературы экспериментальные данные по получению гладких поверхностей полупроводников, способы теоретического описания выглаживания поверхности. Приведены значения микроскопических параметров массопереноса на

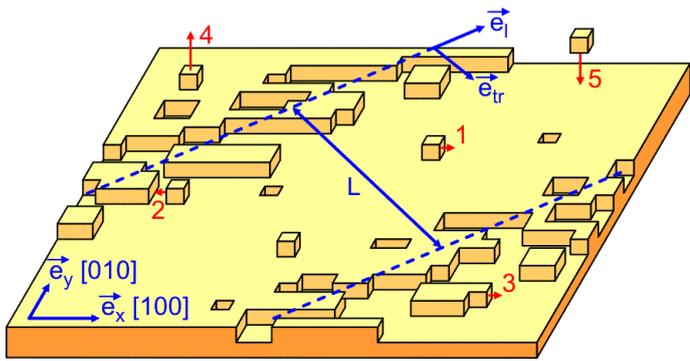


Рисунок 1. Моделирование Монте-Карло выглаживания поверхности: (1) перемещение атома в соседнее положение на террасе; (2) встраивание в ступень; (3) выход из ступени; (4) десорбция с террасы; (5) адсорбция на террасу. Среднее положение формирующихся вицинальных ступеней показано пунктирными линиями. L – ширина террасы.

ности и моделирования Монте-Карло [A3,A5]. Эксперименты по термическому выглаживанию поверхности GaAs проводились при $T = 600 - 650^\circ\text{C}$ в условиях, близких к равновесию между поверхностью и парами Ga и As [8,9]. Отжиги при повышенных температурах $T = 700 - 775^\circ\text{C}$, приводящие к разупорядочению поверхности, проводились в той же установке. Морфология исходной и отожженной поверхности GaAs изучалась *ex situ* методом атомно-силовой микроскопии (АСМ).

Моделирование процессов выглаживания и разупорядочения рельефа поверхности проводилось методом Монте-Карло в однокомпонентной модели, на кристалле Коссея [A3,A5]. Постоянная решетки модельного кристалла была принята равной 0.4 нм, что соответствует латеральному межатомному расстоянию на нереконструированной поверхности GaAs(001). Модель учитывает перемещение "атомов" на соседние свободные места на террасе, встраивание в ступени, выход из ступеней и десорбцию (рис. 1). Вероятность каждого события в единицу времени определяется в соответствии с уравнением $P = \nu_0 e^{-E/kT}$, где $\nu_0 \sim 10^{13}$ Гц – частота Дебая, E – энергия активации соответствующего события: энергия активации диффузии E_d или десорбции E_{des} , k – постоянная Больцмана, T – температура. Если после события число латеральных связей атома уменьшается на n , энергия активации увеличивается

поверхности GaAs(001). Обсуждаются возможные механизмы огрубления поверхности при высоких температурах. В конце главы сформулированы задачи данной работы.

Во второй главе изложена методика проведенных ранее экспериментов по выглаживанию поверхности GaAs(001) [8,9] и детально описаны использованные в данной работе методы задания исходной шероховатой поверх-

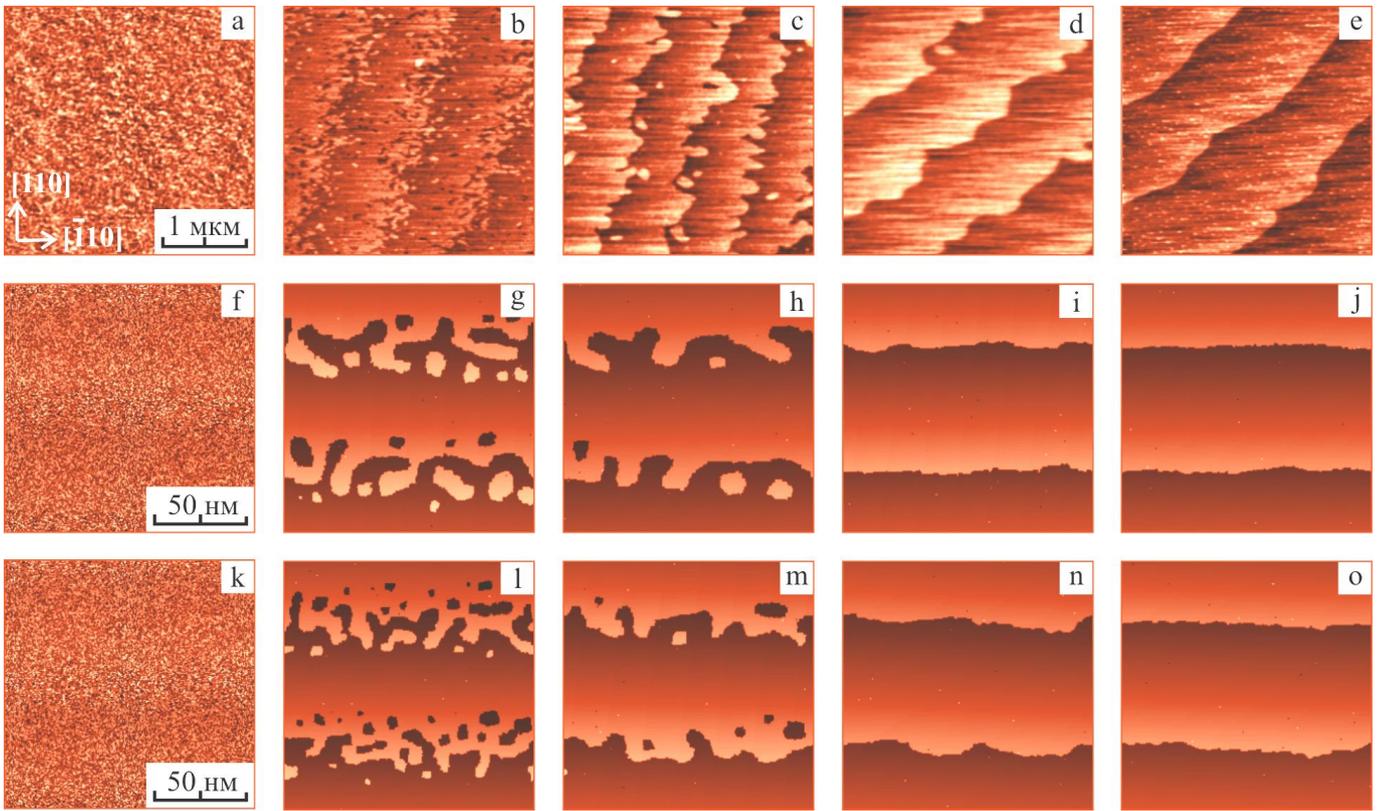


Рисунок 2. Экспериментальные (а–е) и модельные (f–o) изображения поверхности до (a,f,k) и после отжига при температуре 625°C в течение 15 мин (b,g,l), 40 мин (c,h,m), 120 мин (d,i,n) и 480 мин (e,j,o) без учета (f–j) и с учетом (k–o) переноса атомов через газовую фазу. Изменения ширины и направления террас в эксперименте (верхний ряд) обусловлены плавными изменениями угла разориентации по площади подложки.

ется на энергию nE_b , нужную, чтобы разорвать эти связи: $P = \nu_0 e^{-(E+nE_b)/kT}$. Для моделирования равновесных условий десорбция атомов уравновешивается потоком атомов на поверхность.

В третьей главе приведены результаты описания экспериментов по термическому выглаживанию GaAs(001) с помощью моделирования Монте-Карло [A1–A4, A8,A9,A16]. На рис. 2 показаны экспериментальная (верхний ряд) и модельная (средний и нижний ряды, без учета и с учетом переноса через газовую фазу, соответственно) эволюция рельефа поверхности при выглаживании в равновесных условиях. Исходные шероховатые поверхности показаны в левой колонке. Время отжига увеличивается слева направо. Моделирование проводилось на поверхности с линейными размерами в 20 раз меньше, чем размер АСМ-изображений, из-за ограниченных вычислительных ресурсов. Несмотря на простоту модели и разные размеры экспериментальных и модельных поверхностей, моделирование качественно вос-

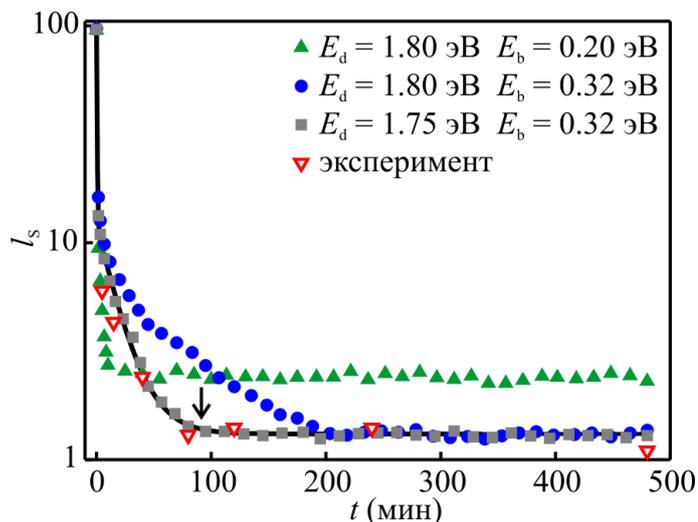


Рисунок 3. Экспериментальная и модельные кинетики длины ступеней, рассчитанные для различных значений энергии активации диффузии E_d и энергии латеральных связей E_b . Стрелкой указано время выглаживания в эксперименте.

производит эволюцию экспериментальной морфологии поверхности и позволяет проследить основные этапы выглаживания поверхности. Эти этапы состоят в быстрой рекомбинации соседних адатомов и адвакансий, небольших островков и озер; росте крупных островков (или озер) за счет маленьких (“оствальдовское созревание”, рис. 2b,g,l); встраивании островков и озер в ступени (рис. 3c,h,m) и выпрямлении ступеней (рис. 3d–e,i–j,n–o) [A3]. Сравнение модельных изображений поверхности в

среднем и нижнем рядах показывает, что учет переноса атомов через газовую фазу приводит к уменьшению среднего размера островков.

Для того, чтобы количественно описать формирование ступенчато-террасированной поверхности и найти параметры модели, которые определяют этот процесс, сравнивались модельная и экспериментальная кинетики полной длины моноатомных ступеней L_s , которая лучше характеризует формирование ступенчато-террасированной морфологии, чем среднеквадратичная шероховатость [8,9]. На рис. 3 показана кинетика безразмерной длины ступеней $l_s = L_s / L_0$, нормированной на длину прямолинейных ступеней на идеальной вицинальной поверхности L_0 . Из сравнения эксперимента с результатами моделирования определены энергия активации диффузии $E_d = 1.75 \pm 0.03$ эВ и энергия латеральных связей $E_b = 0.32 \pm 0.02$ эВ. Полученное значение E_d необходимо скорректировать с учетом разницы в размерах модельных и экспериментальных участков поверхности. Для этого было проведено моделирование выглаживания при разной ширине террас L . Из экстраполяции зависимости $E_d(L)$ до экспериментальной ширины террас ($L = 1.25$ мкм), получена энергия активации диффузии $E_d = 1.20 \pm 0.03$ эВ. Чтобы

определить вклад переноса атомов через газовую фазу в процесс выглаживания поверхности, с экспериментом также сравнивался средний размер островков через 15 мин после начала отжига. Итоговые значения модельных параметров таковы: энергия активации диффузии $E_d = 1.3 \pm 0.05$ эВ, энергия латеральных связей $E_b = 0.32 \pm 0.02$ эВ и энергия десорбции адатомов $E_{des} = 2.1 \pm 0.05$ эВ [A3].

Для определения близости условий отжига к равновесным по смещению атомных ступеней, был проведен анализ результатов эксперимента по выглаживанию поверхности GaAs(001) с литографической меткой [A9]. В этом эксперименте на поверхности GaAs(001) с помощью АСМ-индуцированного окисления с последующим удалением оксидов была сделана канавка шириной 100 нм и глубиной 10 нм по периметру квадрата размером 5 x 5 мкм². Эта канавка использовалась как метка для определения положения отдельных атомных ступеней и измерения их сдвига после отжига. Эксперимент показал, что при температуре отжига $T = 625^\circ\text{C}$, атомные ступени сдвигаются слабо и, следовательно, условия близки к равновесным. Количественный анализ формы и положения ступеней позволил выявить небольшой средний сдвиг ступеней 130 ± 40 нм в направлении нижележащей террасы, что соответствует отклонению условий отжига от равновесия в сторону роста. Оценка скорости роста составляет $V = 1.5 \cdot 10^{-4}$ МС/с. Анализ результатов эксперимента с литографической меткой позволил уточнить кинетику выглаживания поверхности и скорректировать энергию десорбции адатомов $E_{des} = 1.9 \pm 0.05$ эВ.

В четвертой главе рассмотрены анизотропия рельефа в процессе формирования ступенчато-террасированной морфологии и особенности оствальдовского созревания островков на вицинальной поверхности [A2,A4–A5,A8]. Для того, чтобы выявить и описать количественно анизотропию рельефа формирующейся ступенчато-террасированной поверхности, использовался двумерный Фурье- и автокорреляционный анализ. На начальном этапе выглаживания, до образования вицинальных ступеней, удалось выявить кристаллографическую анизотропию рельефа поверхности, связанную, предположительно, с анизотропией поверхностной диффузии. Из анизотропии формы островков определена анизотропия энергии активации диффу-

зии $\Delta E_d = 0.1$ эВ. Как и следовало ожидать, на этапе формирования вицинальных ступеней, как в АСМ изображениях, так и в картинах двумерных Фурье-образов и АКФ, отчетливо проявляется анизотропия рельефа в направлениях вдоль и поперек ступеней. При этом кристаллографическая анизотропия уменьшается, но не исчезает полностью. Эта остаточная кристаллографическая анизотропия означает, что неровности ступеней вытянуты преимущественно в направлении $[\bar{1} 10]$ [A5,A8].

Из рис. 2 видно, что на начальном этапе выглаживания средние размеры островков увеличиваются. На плоской поверхности увеличение размеров крупных островков за счет мелких (оствальдовское созревание) приводит, в конечном счете, к образованию одного большого острова. Из экспериментальных и модельных изображений на рис. 2b–c,g–h,l–m видно, что островки и озера сосредоточены вблизи формирующих вицинальных ступеней, на ниже- и вышележащих террасах, соответственно, а средние области террас относительно плоские. Такое разделение островков и озер связано с избытком и недостатком материала вблизи формирующихся вицинальных ступеней, на ниже- и вышележащих террасах, соответственно [A5]. Пространственное разделение островков и озер препятствует их рекомбинации и приводит к раздельному оствальдовскому созреванию островков и озер. На заключительном этапе выглаживания островки и озера встраиваются в вицинальные ступени. Таким образом, на ступенчато-террасированной поверхности вицинальные ступени играют роль наиболее крупных островков или озер [A4,A5]. Установлено, что в процессе встраивания островки и озера остаются неподвижными, но уменьшаются в размерах за счет выхода адатомов и адвакансий, соответственно, и их последующей диффузии к ступеням.

В пятой главе приведены экспериментальные данные, свидетельствующие о том, что в условиях, использованных в работе [8], разупорядочение рельефа связано с кинетическими неустойчивостями, а также качественное объяснение и количественное описание моделированием Монте-Карло процесса образования мультислойных островков и озёр [A4,A6–A7,A10–A16]. В работе [8] экспериментально показано, что при высоких температурах $T \geq 700^\circ$ термическое выглаживание GaAs

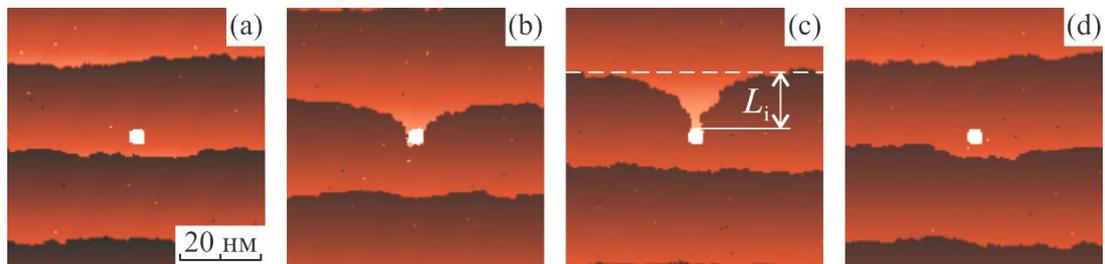
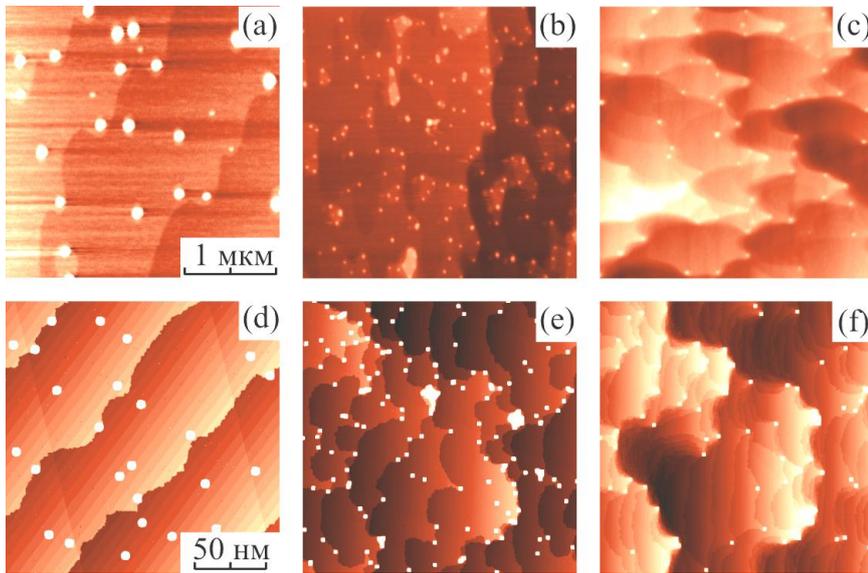


Рисунок 4. Моделирование обтекания ступенями центра торможения.

сменяется разупорядочением рельефа (“огрублением”) поверхности. Это разупорядочение состоит в разрушении ступенчато-террасированной морфологии и образовании эшелонов ступеней, а также мультислойных островков и озёр. Причина разупорядочения может состоять в фундаментальном разупорядочивающем переходе [12,10]. Однако, согласно оценке в модели кристалла Коссея [A6,A7], температура перехода $T_R \approx 1925^\circ\text{C}$ должна превышать температуру плавления кристалла $T_m = 1240^\circ\text{C}$. Это означает, что в рамках использованной модели, экспериментально наблюдаемое огрубление поверхности GaAs нельзя объяснить термодинамическим огрубляющим переходом.

Огрубление поверхности GaAs при повышенных температурах обусловлено кинетическими неустойчивостями, вызванными отклонением условий отжига от равновесия в сторону сублимации или роста. Образование мультислойных островков и озер может быть объяснено обтеканием моноатомными ступенями участков поверхности, на которых сублимация и рост подавлены [A10,A12,A15]. В данной работе это объяснение подтверждено результатами моделирования взаимодействия ступеней с одной такой областью. На рис. 4 показано модельное изображение рельефа ступенчато-террасированной поверхности в процессе сублимации с одной областью в центре, на которой сублимация искусственно запрещена. Эта область играет роль центра торможения для ступеней. При сублимации ступени движутся вверх. Видно, что ступень обтекает центр торможения и, таким образом, образует залив (рис. 4b). Далее залив удлиняется и сужается (рис. 4c), и, в конце концов, ступень отрывается от центра торможения (рис. 4d). Из рис. 4d видно, что следующая ступень приближается к центру торможения. Каждый раз, когда моноатомная ступень проходит через центр торможения, высота центра торможения увеличивается на



один монослой относительно понизившегося уровня террасы. Так образуются мультислойные островки при сублимации поверхности. Образование мультислойных озер при росте поверхности происходит аналогично.

Проведено сравнение разупорядоченного рельефа вицинальных поверхностей с

Рисунок 5. Экспериментальные (a-c) и модельные (d-f) изображения поверхностей с исходной шириной террас в эксперименте: 1.4 мкм (a), 0.3 мкм (b), 0.07 мкм (c).

разной исходной шириной террас [A12,A15]. На поверхности с относительно широкими террасами (~ 1 мкм) ступени проходят через центры торможения свободно, одна за другой (рис. 5a). Видно, что поверхность остается ступенчато-террасированной, хотя на ступенях образуются неровности вблизи островов. На поверхностях с меньшей шириной террас, новые ступени подходят к центрам торможения прежде, чем оторвутся предыдущие, что приводит к эшелонированию ступеней. Так образуются многослойные “плато” (рис. 5b) и вытянутые, “пальцеобразные” эшелоны ступеней (рис. 5c), окаймленные островками. Разупорядочение поверхности, обусловленное торможением и эшелонированием ступеней, качественно воспроизводится моделированием (рис. 5d-f). Оказалось, что для этого нужно ослабить массоперенос между ступенями и вышележащими террасами, введя барьер Швёбеля.

В заключительной части пятой главы проведена оптимизация условий выглаживания с учетом высокотемпературного огрубления поверхности. Разупорядочение рельефа поверхности ограничивает температуру и, следовательно, эффективность термического выглаживания, поскольку скорость массопереноса вдоль поверхности, необходимого для выглаживания, экспоненциально растет с температурой. Проверена гипотеза о возможности повышения эффективности выглаживания с помощью

двухэтапного отжига: на первом этапе проводится отжиг при высокой температуре в течение короткого времени, чтобы эффективно выгладить относительно крупномасштабные шероховатости и при этом не допустить огрубления рельефа за счет кинетических неустойчивостей. На втором этапе, для выглаживания мелкомасштабных шероховатостей, проводится отжиг при низкой температуре, ниже порога разупорядочения рельефа поверхности. Моделирование Монте-Карло показало, что с помощью двухэтапного отжига можно сократить длительность выглаживания поверхности GaAs на порядок (по сравнению с одноэтапным отжигом) и выглаживать поверхности с большей, чем ранее [8,9], исходной шероховатостью. Результаты моделирования соответствуют данным предварительного эксперимента по двухэтапному выглаживанию [A13,A14].

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Методом моделирования Монте-Карло качественно и количественно описаны процессы термического выглаживания поверхности GaAs(001) в равновесных условиях. Из сравнения результатов моделирования с экспериментами определены энергии активации диффузии $E_d = 1.3$ эВ и десорбции адатомов $E_{des} = 1.9$ эВ, а также энергия латеральной связи $E_b = 0.32$ эВ на поверхности GaAs(001).

2. Из анализа экспериментов по термическому выглаживанию поверхности на образцах с литографической меткой, по смещению конкретных атомных ступеней оценена сверху величина отклонения от равновесия при температурах отжига $T \leq 625^\circ\text{C}$.

3. Методами моделирования Монте-Карло, а также с помощью Фурье- и автокорреляционного анализа изучена анизотропия рельефа при формировании ступенчато-террасированной поверхности GaAs(001). Выявлена кристаллографическая анизотропия рельефа на начальном этапе выглаживания.

4. Изучены особенности оствальдовского созревания в присутствии вицинальных ступеней, разделяющих островки и озёра. Рост средних размеров островков и озёр на начальном этапе выглаживания соответствует оствальдовскому созреванию

на сингулярной грани, а последующее уменьшение их размеров связано со встраиванием в ступени.

5. Показано, что разупорядочение рельефа поверхности GaAs при $T \geq 700^\circ\text{C}$ вызвано развитием кинетических неустойчивостей, возникающих при отклонении условий отжига от равновесия в сторону роста или сублимации. Формирование мультислойных островков и озёр объяснено обтеканием ступенями участков поверхности, на которых сублимация и рост подавлены.

6. С помощью моделирования Монте-Карло изучены особенности разупорядочения рельефа vicинальных поверхностей с различной шириной террас. Объяснено формирование эшелонов ступеней при малой (≤ 0.3 мкм) ширине террас.

7. Найдены оптимальные условия двухэтапного термического выглаживания поверхности, состоящего в выглаживании крупномасштабных неровностей при высокой температуре и мелких неровностей при меньшей температуре.

Результаты работы изложены в следующих публикациях:

- A1. 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.
- A2. 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 “Нанопфизика и нанопэлектроника”. Нижний Новгород, 2014. – с. 390.
- A3. D.M. Kazantsev, I.O. Akhundov, A.N. Karpov, N.L. Shwartz, V.L. Alperovich, A.S. Terekhov, A.V. Latyshev. Monte Carlo simulation of GaAs(001) surface smoothing in equilibrium conditions. // Appl. Surf. Sci. – 2015. – V. 333. – P. 141 – 146. [doi:10.1016/j.apsusc.2015.01.226](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2015.01.226)

- A4. 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.
- A5. D.M. Kazantsev, I.O. Akhundov, N.L. Shwartz, 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. – 2015. – V. 359. – P. 372–379. [doi:10.1016/j.apsusc.2015.10.074](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2015.10.074)
- A6. 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 “Нанофизика и нанoeлектроника”. Нижний Новгород, 2016. – с. 598 – 599.
- A7. 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 нанoeлектронике. Санкт-Петербург, 2016. – с. 19.
- A8. V.L. Alperovich, I.O. Akhundov, D.M. Kazantsev, N.S. Rudaya, E.E. Rodyakina, A.S. Kozhukhov, D.V. Sheglov, A.N. Karpov, N.L. Shwartz, A.S. Terekhov, A.V. Latyshev. Formation of GaAs step-terraced surfaces by annealing in equilibrium conditions // Advances in Semiconductor Nanostructures: Growth, Characterization, Properties and Applications. Elsevier, 2016. – p. 255–277.
- A9. 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. – 2017. – V. 406. – P. 307 – 311. [doi:10.1016/j.apsusc.2017.02.062](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2017.02.062)

- A10. 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. – 2017. – V. 816. – P. 012008. [doi:10.1088/1742-6596/816/1/012008](https://doi.org/10.1088/1742-6596/816/1/012008)
- A11. 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.
- A12. 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.
- A13. И.О. Ахундов, Д.М. Казанцев, А.С. Кожухов, В.Л. Альперович. Оптимизация условий термического выглаживания поверхности арсенида галлия. // Тезисы докладов XIX Всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике. Санкт-Петербург, 2017. – с. 17.
- A14. I.O. Akhundov, D.M. Kazantsev, A.S. Kozhuhov, V.L. Alperovich. Optimization of conditions for thermal smoothing GaAs surfaces. // J. Phys. Conf. Ser. – 2018. – V. 993. – P. 012010. [doi:10.1088/1742-6596/993/1/012010](https://doi.org/10.1088/1742-6596/993/1/012010)
- A15. D.M. Kazantsev, I.O. Akhundov, V.L. Alperovich, N.L. Schwartz, A.S. Kozhukhov, A.V. Latyshev. Thermal smoothing and roughening of GaAs surfaces: experiment and Monte Carlo simulation. // Semiconductors. – 2018. – V. 52. – P. 618 – 621. [doi:10.21883/FTP.2018.05.45858.47](https://doi.org/10.21883/FTP.2018.05.45858.47)
- A16. D.M. Kazantsev, I.O. Akhundov, N.L. Schwartz, V.L. Alperovich, A.V. Latyshev. Thermal roughening of GaAs surface: experiment and Monte Carlo simulation. // Abstracts of 34th international conference on the physics of semiconductors. Montpellier, France, 2018. www.icps2018.org/en/program/abstract

Список цитируемой литературы:

1. C. Teichert. Self-organization of nanostructures in semiconductor heteroepitaxy. // *Phys. Rep.* – 2002. – V. 365. – P. 335 – 432.
2. F. Xu, P.W. Huang, J.H. Huang, W.N. Lee, T.S. Chin, H.C. Ku, Y.W. Du. Self-assembly and magnetic properties of MnAs nanowires on GaAs(001) substrate. // *J. Appl. Phys.* – 2010. – V. 107. – P. 063909.
3. M.F. Crommie, C.P. Lutz, D.M. Eigler. Confinement of electrons to quantum corrals on a metal surface. // *Science.* – 1993. – V. 262. – P. 218 – 220.
4. M. Kawamura, N. Paul, V. Cherepanov, B. Voigtlander. Nanowires and nanorings at the atomic level. // *Phys. Rev. Lett.* – 2003. – V. 91. – P. 096102.
5. A.V. Latyshev, A.L. Aseev, A.B. Krasilnikov, S.I. Stenin. Transformations on clean Si(111) stepped surface during sublimation. // *Surf. Sci.* – 1989. – V. 213. – P. 157 – 169.
6. H.C. Jeong, E.D. Williams. Steps on surfaces: experiment and theory. // *Surf. Sci. Rep.* – 1999. – V. 34. – P. 171 – 294.
7. Y. Fan, I. Karpov, G. Bratina, L. Sorba, W. Gladfelter, A. Franciosi. Atomic scale roughness of GaAs(001)2×4 surfaces. // *J. Vac. Sci. Technol. B.* – 1996. – V. 14. – P. 623 – 631.
8. V.L. Alperovich, I.O. Akhundov, N.S. Rudaya, D.V. Sheglov, E.E. Rodyakina, A.V. Latyshev, A.S. Terekhov. Step-terraced morphology of GaAs(001) substrates prepared at quasiequilibrium conditions. // *Appl. Phys. Lett.* – 2009. – V. 94. – P. 101908.
9. I.O. Akhundov, V.L. Alperovich, A.V. Latyshev, A.S. Terekhov. Kinetics of atomic smoothing GaAs(001) surface in equilibrium conditions. // *Appl. Surf. Sci.* – 2013. – V. 269. – P. 2 – 6.
10. Z. Ding, D.W. Bullock, P.M. Thibado, V.P. LaBella, K. Mullen. Atomic-scale observation of temperature and pressure driven preroughening and roughening. // *Phys. Rev. Lett.* – 2003. – V. 90. – P. 216109.

11. J.E. Epler, T.A. Jung, H.P. Schweizer. Evolution of monolayer terrace topography on (100) GaAs annealed under an arsine hydrogen ambient. // *Appl. Phys. Lett.* – 1993. – V. 62. – P. 143 – 145.
12. J. Lapujoulade. The roughening of metal surfaces. // *Surf. Sci. Rep.* – 1994. – V. 20. – P. 191 – 249.
13. A. Pimpinelli, J. Villain. *Physics of crystal growth*. Cambridge University Press, 1998. – 377 p.
14. T. Shitara, D.D. Vvedensky, M.R. Wilby, J. Zhang, J.H. Neave, B.A. Joyce. Step-density variations and reflection high-energy electron-diffraction intensity oscillations during epitaxial growth on vicinal GaAs(001). // *Phys. Rev. B.* – 1992. – V. 46. – P. 6815 – 6824.
15. T. Kawamura, A. Ishii. Monte Carlo simulation of recovery process after MBE growth on GaAs(100). // *Surf. Sci.* – 2001. – V. 493. – P. 438 – 446.
16. M. Itoh. Atomic-scale homoepitaxial growth simulations of reconstructed III–V surfaces. // *Prog. Surf. Sci.* – 2001. – V. 66. – P. 53 – 153.