Моделирование структурного полиморфизма в нанопроволоках GaAs на базе решеточной модели

А.Г. Настовьяк^{1,2}, Н.Л. Шварц^{1,2}

¹ Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск, 630090, пр. ак. Лаврентьева, 13

² Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, 630073, пр. К.Маркса, 20
тел: +7 (383) 333-1475, факс: +7 (383) 333-2771, эл. почта: alla@isp.nsc.ru

DOI 10.34077/RCS2021-102

В нанопроволоках (НП) на основе материалов AlGaAs, в отличие от трехмерных структур, наблюдается структурный полиморфизм материала [1]. Для объемных материалов AlGaAs характерна кристаллическая решетка типа цинковой обманки, так как объемная энергия такой структуры является наименьшей. Однако, поверхностная энергия фазы цинковой обманки выше, чем фазы вюрцита, поэтому фаза вюрцита наблюдается в нанобъектах, в которых доля атомов, занимающих положение на поверхности, велика по сравнению с объемным положением [2]. Важной задачей технологии создания нанопроволок на основе материалов AlGaAs является контролируемый рост материала одной фазы и контролируемое переключение фаз в процессе роста для создания гетеропереходов внутри нанопроволоки.

Настоящая работа посвящена моделированию роста различных кристаллических фаз в процессе формирования НП GaAs по механизму пар-жидкость-кристалл. Моделирование проводилось на основе решеточной модели. Каждый узел мог быть либо свободен, либо занят частицей. С частицами могли происходить различные события: акты адсорбции, десорбции, диффузии и химические превращения. Вероятность этих событий и их последовательность задаются энергиями активации, которые являются входными параметрами модели. Начальная морфология модельной системы выглядела следующим образом: прямоугольная подложка GaAs размером 35×40 нм с ориентацией (111)B была покрыта слоем маски различной толщины с круглым отверстием в центре, в котором была размещена капля галлия. При осаждении на подложку атомов Ga и молекул As₂ под каплей начиналась кристаллизация арсенида галлия. Это происходило за счет растворения осаждаемого вещества в капле и кристаллизации под ней на границе раздела жидкость-кристалл. В предлагаемой в настоящей работе модели была возможна кристаллизация обеих фаз GaAs – типа цинковой обманки и вюрцита. Для простоты реальная кристаллическая структура вюрцитной фазы не рассматривалась, а различия между фазами задавались за счет разных энергий связи атомов в разных фазах. Вероятности зарождения обеих фаз в центре грани под каплей галлия были одинаковыми, тогда как зарождение на тройной линии задавалось более вероятным для фазы вюрцита. Это оправдано, так как поверхностная энергия вюрцитной фазы ниже, чем цинковой обманки.

Представленная модель позволила объяснить полученный ранее экспериментальный результат – формирование пьедестала НП с кристаллической структурой цинковой обманки и последующее переключение фазы роста на вюрцит [3]. Поскольку фаза вюрцита дает выигрыш в поверхностной энергии, то она оказывается характерна для объектов с большим отношением поверхность/объем. На начальных стадиях роста, когда формируется основание НП, боковые стенки

нанопроволоки не имеют контакта с вакуумом (вставка к Рис.), поэтому GaAs кристаллизуется с решеткой цинковой обманки. Однако, по мере, отдаления капли от маски роль боковой поверхности НП возрастает и, при достаточно малых диаметрах капли, начинается кристаллизация фазы вюрцита (Рис.).

Литература

- [1] F. Panciera, Z. Baraissov, G. Patriarche, V.G. Dubrovskii, F. Glas, L. Travers, U. Mirsaidov, J.-C. Harmand. // Nano Lett. 2020. V. 20. P. 1669-1675.
- [2] T. Akiyama, K. Sano, K. Nakamura, T. Ito. J. Appl. Physics. 2006. V. 45. P. L275-L278.
- [3] F. Glas, J.-C. Harmand, G. Patriarche // Phys. Rev. Lett. 2007. V. 99. P. 146101.