Условия формирования планарных нанопроволок GaAs (моделирование)

Спирина А.А.¹, Шварц Н.Л.^{1,2}

¹ ИФП СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13

² НГТУ, 630073, Новосибирск, пр. К. Маркса, 20

DOI 10.34077/Semicond2019-133

Представлены результаты моделирования самокаталитического роста планарных нитевидных нанокристаллов арсенида галлия. Ранее экспериментально было показано, что переход режима роста кристаллов с вертикального на планарный происходит либо при уменьшении, либо при сильном увеличении потока мышьяка относительно потока галлия [1]. Выбор между планарным и вертикальным направлениями роста кристалла определяется свойствами поверхности подложки (обычно подложка покрывается пленкой-маской) и соотношением поступающих в каплю потоков мышьяка: с поверхности подложки (за счет диффузионного сбора) и непосредственно из внешнего потока. Поверхность $\{111\}B$ является фронтом роста нитевидных нанокристаллов на основе полупроводников III-V [2]. В данной работе проводился поиск условий устойчивого роста планарных нанопроволок по механизму пар-жидкость-кристалл на основе решеточной Монте-Карло модели. На Рис.1а показано схематичное изображение бокового сечения подложки GaAs(111)A, покрытой пленкой-маской, с растущей GaAs нанопроволокой, а на Рис.1б три возможные направления планарного роста. На начальной стадии роста под каплей формируется трехмерный кристалл GaAs по своей форме напоминающий половину усеченного октаэдра (Рис.1в). Поверхность такого кристалла состоит из четырех плоскостей $\{111\}$ соединённых тремя плоскостями $\{100\}$. Конкретная ориентация верхней плоскости 3D кристалла из семейства $\{111\}$ задается поверхностью подложки. После формирования трехмерного кристалла под каплей, начинается рост планарных нанопроволок, то есть перемещение капли-затравки путем приращения кристалла нитевидной формы. Исследовалось влияние свойств пассивирующего слоя поверхности подложки на морфологию планарного нанокристалла. Найдена оптимальная величина эффективной энергии активации десорбции молекулярного мышьяка с пленки-маски, соответствующая стабильному росту планарных нанопроволок на поверхности GaAs(111)A. На рис.1г представлено изображение планарной нанопроволоки на поверхности GaAs(111)A. Нанопроволока непрерывно связана с пассивирующим слоем, на протяжении всей длины кристалла объемные дефекты в модельном кристалле не обнаружены, поверхность нанопроволоки атомарно гладкая.

Рис.1. – Схематичные изображения GaAs нанопроволоки (а) боковое сечение, (б) вид сверху; изображения модельных поверхностей (в) 3D GaAs кристалла под каплей и (г) GaAs(111)A после роста при $T = 890\text{ K}$ с потоками $F(\text{Ga}) = 3\text{ MC/c}$, $F(\text{As}_2) = 20\text{ MC/c}$

Работа выполнена при поддержке программ РАН.

[1] F. Bastiman et al., *Nanotechnology*, **27**, 095601 (2016).

[2] S.A. Fortuna et al., *Nano Lett.*, **8**, 4421 (2008).