

УДК 621.793.14

С.В. Балакирев, Ю.Ф. Блинов, М.С. Солодовник

**МОДЕЛЬ НАЧАЛЬНОЙ СТАДИИ ГОМОЭПИТАКСИАЛЬНОГО РОСТА
GAAS МЕТОДОМ МЛЭ С УЧЁТОМ СООТНОШЕНИЯ ПОТОКОВ
РОСТОВЫХ КОМПОНЕНТ***

Изложена кинетическая модель гомоэпитаксиального роста GaAs методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) на стадии зарождения и независимого роста островков, формирующих монослой (МС). Особенность модели заключается в учёте и количественной оценке влияния соотношения потоков мышьяка и галлия на характеристики двумерных островков GaAs. Показано, что при температуре 580 °С, скорости роста 0,05 МС/с и увеличении соотношения потоков V/III от 5 до 30 поверхностная плотность островков возрастает с $3 \cdot 10^{10}$ до $1,8 \cdot 10^{11}$ см⁻². При этом средний размер островков уменьшается с 37 до 15 нм. Однако при меньших скоростях роста разница в размерах становится ещё более существенной. Показано, что увеличение соотношения потоков приводит к уменьшению разброса массива островков по размерам. Полученные результаты могут быть использованы при оптимизации технологических режимов эпитаксиального роста наногетероструктур A^{III}B^V.

Нанотехнологии; наноструктуры; наноматериалы; полупроводники; молекулярно-лучевая эпитаксия; арсенид галлия; соотношение потоков V/III; кинетическое моделирование.

S.V. Balakirev, Y.F. Blinov, M.S. Solodovnik

**MODEL OF THE INITIAL STAGE OF GAAS HOMOEPITAXIAL GROWTH
BY MBE CONSIDERING GROWTH COMPONENTS FLUX RATIO**

A kinetic model homoepitaxial GaAs growth is presented by molecular-beam epitaxy (MBE) at a nascent stage and the independent growth of islands forming a monolayer (ML). The feature of the model is in accounting and quantifying the impact of flow ratio of arsenic and gallium on the characteristics of two-dimensional islands of GaAs. It is shown that at a temperature of 580 °C, the growth rate of 0,05 ML / s and an increase in flow ratio V / III from 5 to 30, the surface density of the islands increases from $3 \cdot 10^{10}$ to $1,8 \cdot 10^{11}$ cm⁻². The average size of the islands is reduced from 37 to 15 nm. However, at lower rates growth the difference in the sizes becomes even more significant. It is shown that increasing the ratio between the fluxes reduces the scatter island array size. The obtained results can be used to optimize the technological regimes of epitaxial growth nanoheterostructures A^{III}B^V.

Nanotechnology; nanostructures; nanomaterials; semiconductors; molecular beam epitaxy; gallium arsenide; V/III flux ratio; kinetic modeling.

Введение. Повышенные требования к структурам, лежащим в основе современных электронных приборов, приводят к необходимости создания новых и совершенствования существующих методов формирования элементов полупроводниковых устройств, в частности, на основе соединений A^{III}B^V. Знание динамических закономерностей позволяет проводить оптимизацию технологических режимов эпитаксиального роста тонких плёнок, в том числе по методу МЛЭ, обладающему рядом преимуществ по сравнению с другими методами [1–5]. Особенно важно при этом знание закономерностей роста на начальной стадии, так как на этом этапе задаются основные параметры растущей структуры.

* Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (проект №8.797.2014К).

Несмотря на обилие теоретических работ в области исследования влияния температуры подложки, скорости роста, времени отжига и других технологических параметров на структурные характеристики тонких плёнок [6–10], в литературе не приводятся модели, описывающие механизмы влияния на них соотношения потоков V/III. При этом большинство моделей основывается на допущении, что все параметры ростового процесса определяются потоком атомов III группы, а молекулы V группы задерживаются на поверхности в количестве, необходимом для обеспечения стехиометрического роста, и превышение их минимального потока не влияет на характер ростового процесса структуры. В то же время в ряде работ [11–13] экспериментально было показано существенное влияние потока мышьяка на характеристики островков, зарождающихся при МЛЭ соединений $A^{III}B^V$.

Целью данной работы является разработка математической модели начальной стадии гомоэпитаксиального роста GaAs методом МЛЭ с учётом влияния соотношения потоков ростовых компонент V/III на геометрические характеристики островков на стадиях зарождения и независимого роста.

Теоретическая модель. Согласно предложенной модели, интенсивность зарождения островков определяется поверхностной концентрацией первичных кластеров, образованных двумя атомами галлия и двумя атомами мышьяка. Концентрация первичных кластеров зависит от эффективного потока мышьяка на подложку, следовательно, определяет связь интенсивности зарождения островков и связанных с ней характеристик (поверхностная плотность и средний размер островков) с соотношением потоков V/III.

При МЛЭ GaAs/GaAs(001) рост реализуется по послыному механизму Франка – ван дер Мерве из двумерных зародышей монослойной высоты. Результаты экспериментов и численного моделирования для GaAs(001) демонстрируют, что монослой формируется через последовательное присоединение дуплетов галлия к димерным рядам мышьяка [9, 14, 15]. Так, в [14] показано, что наиболее сильная связь с поверхностью образуется при хемосорбции As_2 на паре атомов галлия, занимающих места в долинах с мышьяковыми доменами структуры $\alpha(2 \times 4)$, наиболее часто наблюдаемой в рассматриваемом в представленной модели диапазоне температур и соотношений потоков [16]. Концентрация дуплетов галлия определяется [17]:

$$n_2 = \frac{n_{Ga}}{2} (1 - e^{-x}), \quad (1)$$

где n_{Ga} – поверхностная концентрация атомов галлия, x – безразмерный временной параметр:

$$x = D_{Ga} \int_0^t n_{Ga} dt, \quad (2)$$

D_{Ga} – коэффициент диффузии атомов галлия.

Считается, что образование однокомпонентных кластеров галлия большего размера подавляется наличием на поверхности частиц мышьяка.

В излагаемой модели принято, что общий поток мышьяка поступает на подложку в форме тетрамеров. В процессе поверхностной миграции тетрамеров мышьяка в физисорбированном состоянии может происходить их десорбция, определяемая средним временем жизни тетрамера, или диссоциативная хемосорбция на дуплетах галлия [18]. Во втором случае пара атомов диссоциированной молекулы мышьяка десорбируется, а другая пара атомов встраивается в кристаллическую решётку [1]. Таким образом происходит связывание пары атомов мышьяка с дуплетом галлия и образование первичного кластера – центра роста островков критического размера. При этом формирование первичных кластеров сокращает вероятность распада дуплетов галлия на отдельные атомы.

Предварительные оценки показывают, что четырёхатомный кластер GaAs имеет значительно больший модуль энергии связи по сравнению с дуплетом галлия (–1181 и –202 кДж/моль соответственно), следовательно, первичный кластер представляет собой более устойчивую систему и будет являться зародышем новой фазы.

Поверхностная концентрация первичных кластеров определяется как произведение концентрации дуплетов галлия на коэффициент заравнивания дуплетов χ :

$$n_4 = n_2\chi, \quad (3)$$

$$\chi = n_{As}\sqrt{2\sigma}\lambda_{As}, \quad (4)$$

где n_{As} – концентрация тетрамеров мышьяка на поверхности, λ_{As} – диффузионная длина тетрамера мышьяка, σ – площадь, занимаемая одним атомом на поверхности. Квадратный корень $\sqrt{2\sigma}$ имеет смысл ступени, к которой присоединяются атомы мышьяка, – ступени дуплета галлия. Безразмерная величина χ имеет смысл вероятности образования первичного кластера за время жизни дуплета до его распада на отдельные атомы.

Поверхностная концентрация тетрамеров мышьяка определяется с учётом времени жизни физисорбированных молекул τ_A и эффективного потока тетрамеров на подложку J_{As} с учётом коэффициента прилипания [19]:

$$n_{As}(t) = J_{As}\tau_A \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_A}\right) \right]. \quad (5)$$

В связи с тем, что из адсорбированного тетрамера мышьяка в решётку встраивается только 2 атома, концентрация тетрамеров мышьяка, принимающих непосредственное участие в росте, равна концентрации пар мышьяка, присоединяющихся к дуплетам галлия, что и учитывается в выражении (4).

Время жизни молекулы мышьяка в физисорбированном состоянии определяется соотношением Френкеля [20]:

$$\tau_A = \nu_A^{-1} \exp\left(\frac{E_A}{k_B T}\right), \quad (6)$$

где ν_A – частота колебаний в направлении, перпендикулярном поверхности, по порядку величины равная частоте тепловых колебаний решётки ($\sim 10^{12} \text{ c}^{-1}$), E_A – энергия активации десорбции, k_B – постоянная Больцмана, T – температура поверхности. Параметр τ_A характеризует минимальную из средних величин продолжительности миграции тетрамера с момента адсорбции до момента десорбции четырёхатомной молекулы либо до момента диссоциации молекулы с десорбцией пары атомов мышьяка в виде димера или отдельных атомов и хемосорбцией двух других атомов. Время жизни хемосорбированных атомов мышьяка, так же как и атомов галлия, считается настолько большим, что их десорбцией в рассматриваемом диапазоне условий можно пренебречь.

Выражение (5) справедливо в отсутствие встраивания, когда на поверхности не происходит зарождение островков, в частности, в случае сингулярной поверхности [19]. Однако поток мышьяка задаётся таким образом, чтобы его было достаточно для формирования стехиометрической плёнки, а не встроившийся в решётку мышьяк десорбировался. Поэтому постоянное, практически неизменное значение, на которое довольно быстро выходит концентрация тетрамеров мышьяка, характеризует часть потока мышьяка, которая потребляется растущими островками. В представленной в данной работе модели учитывается ограничение, заключающееся в том, что минимальная концентрация адсорбированных молекул мышьяка на поверхности, начиная с момента нуклеации, должна быть равна или превышать концентрацию адатомов галлия, не присоединённых к зародышам.

Свободную энергию образования двумерного островка монослойной высоты на идеальной подложке можно записать в виде [21]:

$$\Delta F(i) = -i \ln(\zeta + 1) + 2\sqrt{ai} - \ln\left(\frac{n_0}{n}\right), \quad (7)$$

где i – количество атомов в островке, $n_0=1/\sigma$ – число узлов кристаллической решётки на единицу площади, a – энергетический параметр, соответствующий островку в форме квадрата.

Параметр ζ в выражении (7) – степень пересыщения адатомов, определяющая превышение фактической концентрации адатомов на поверхности n над равновесной концентрацией n_{eq} :

$$\zeta = n/n_{eq} - 1. \quad (8)$$

Первое слагаемое в выражении (7) есть разность химических потенциалов новой и старой фаз, второе – энергия края островка, связанная с обрывом химических связей, третье – статистическая поправка, связанная с вероятностью распределения n атомов по n_0 узлам решетки.

Пересыщение адатомов определяется по галлию, так как именно наличие свободных атомов галлия позволяет атомам мышьяка адсорбироваться на поверхности. В противном случае избыточный мышьяк десорбируется и формирование островков не происходит.

Интенсивность зарождения островков, определённую по формуле Зельдовича [22], наиболее удобно выразить в терминах пересыщения, играющего ключевую роль в формировании на поверхности новой фазы [8]:

$$I(\zeta) = \frac{n_{eq} l_D}{\sqrt{\pi} \sigma t_D} (\zeta + 1) \ln^{1/2}(\zeta + 1) \exp\left(-\frac{a}{\ln(\zeta + 1)}\right), \quad (9)$$

где l_D – длина диффузионного прыжка, t_D – среднее время между двумя последовательными диффузионными прыжками (диффузионное время), равное

$$t_D = \nu_D^{-1} \exp\left(\frac{E_D}{k_B T}\right), \quad (10)$$

ν_D – частота колебаний атомов кристаллической решётки в латеральном направлении, E_D – активационный барьер диффузии.

Для исследования стадии нуклеации островков удобно пользоваться методом Куни [23, 24]. Пересыщение как функция времени представляет собой функцию с одним максимумом, в котором поступление атомов из газообразной фазы уравновешивается их потреблением растущими островками. Все величины в точке максимума пересыщения в дальнейшем обозначаются индексом «*».

Согласно представленной модели степень пересыщения адатомов, достигнув максимума, изменяется незначительно в связи с тем, что количество атомов, поступающих на поверхность в единицу времени, становится примерно равным суммарной скорости их десорбции и потребления растущими островками. Такое предположение оправдано в интересующем нас диапазоне степеней заполнения 0-0,5, когда на поверхности ещё не происходят процессы коалесценции и ост-вальдского созревания. Согласно расчётам при температуре подложки 580 °С и диапазоне скоростей роста ν от 0,01 до 0,1 МС/с средняя скорость потребления адатомов растущими островками приблизительно равна скорости поступления атомов галлия на поверхность – потоку галлия с учётом десорбции. Скорость поступления адатомов в островки отличается от потока атомов на подложку не более чем в 1,7 раза, что позволяет считать эти величины примерно равными. Некоторое превышение потока атомов в островки над потоком на подложку связано с дополнительным потоком к островкам из газа адатомов, накопившихся на поверхности до начала нуклеации. Превышение потока атомов на подложку, наблюдаемое для скорости роста 0,01 МС/с, объясняется слишком низкой степенью пересыщения, при которой увеличение концентрации газа адатомов на поверхности преобладает над интенсивностью зарождения островков.

В рассматриваемой модели принято, что латеральный рост плёнки происходит за счёт присоединения к островкам адатомов галлия и последующего заравнивания их атомами мышьяка. При этом повышение концентрации частиц мышьяка на поверхности не приводит к избыточному поступлению атомов мышьяка к островкам из условий соблюдения стехиометричности соединения. По этой причине считается, что поток атомов в островки состоит из частиц обоих типов в равном соотношении и не зависит от соотношения потоков мышьяка и галлия на подложку. Соотношение потоков ростовых компонент приводит к изменению поверхностной плотности и среднего размера островков при неизменном общем количестве атомов в островках.

Здесь и в дальнейшем расчёт и сравнение проводятся для различных значений соотношения потоков и скорости роста, так как излагаемая модель является кинетической и требует рассмотрения различных режимов массопереноса. В то же время в задачи работы не входит термодинамический анализ процессов роста, в связи с чем в модели не приводятся зависимости характеристик плёнки от температуры поверхности подложки. В расчётах используется типичное значение температуры роста GaAs по методу МЛЭ, равное 580 °С.

Следуя [23, 24], функцию $I(\zeta)$ вблизи максимума можно представить в виде

$$I(\zeta) = I(\Phi_*) \exp \left[-\frac{\Gamma}{\Phi_*} (\Phi_* - \zeta) \right]. \quad (11)$$

Здесь

$$\Gamma = \frac{\Phi_*}{\Phi_* + 1} \frac{a}{\ln^2(\Phi_* + 1)} \quad (12)$$

есть большой параметр теории, по порядку величины равный критическому размеру островка i_c при $\zeta = \Phi_*$ [5]. Параметр Φ имеет смысл идеального пересыщения, которое установилось бы на поверхности в отсутствие зарождения островков. В работе [6] показано, что при $a \gg 1$, $\Phi_{max} \gg 1$ и $\Phi_* \sim 1$ (что соответствует стандартным режимам роста при МЛЭ). Выражение для Φ_* может быть записано следующим образом:

$$\Phi_* = \exp \left(\frac{a}{3 \ln Q} \right) - 1, \quad (13)$$

где Q – кинетический контрольный параметр [23].

Решая уравнение материального баланса и учитывая реальную зависимость степени пересыщения от времени согласно [6], можно получить следующую формулу для интенсивности нуклеации:

$$I(t) = I_* \exp \left[\frac{t-t_*}{\Delta t} - \exp \left(\frac{t-t_*}{\Delta t} \right) \right], \quad (14)$$

где выражению I_* соответствует формула (10).

Время Δt , имеющее смысл продолжительности стадии зарождения, определяется как:

$$\Delta t = \frac{\Phi_*}{\Gamma} \frac{\tau_A n_{eq}}{J t_A - n_{eq}(\Phi_* + 1)}. \quad (15)$$

Время t_* есть время достижения максимума пересыщения:

$$t_* = \tau_A \left[-\ln \left(1 - \frac{n_*}{J \tau_A} \right) \right]. \quad (16)$$

Как было указано выше, в предложенной модели концентрация адатомов в формуле для интенсивности зарождения заменена концентрацией первичных кластеров. Такое допущение возможно, потому что во время зарождения островков степень пересыщения максимальна и настолько велика, что концентрация первичных кластеров становится сопоставимой с концентрацией свободных адатомов, не участвующих в формировании островков. Кроме того, в выражении (3) за счёт насыщения концентраций мышьяка и дуплетов галлия учитывается изменение концентрации первичных кластеров, участвующих в зарождении, что связано с их ростом и преобразованием в закритические островки.

Учитывая неизменность степени пересыщения при $t > t_*$ и замену концентрации адатомов на концентрацию первичных кластеров, интенсивность зарождения островков можно выразить следующим образом:

$$I(t) = n_4(t_*) \sqrt{-\frac{\Delta F''(t_*, i_c)}{2\pi}} W^+(t_*, i_c) \exp \left[-F(t_*) + \frac{t-t_*}{\Delta t} - \exp \left(\frac{t-t_*}{\Delta t} \right) \right]. \quad (17)$$

На рис. 1 представлены рассчитанные зависимости скорости зародышеобразования от времени при скорости роста 0,05 МС/с и различных значениях потока мышьяка.

В связи с неизменностью потока атомов галлия для каждой из зависимостей повышение потока мышьяка приводит к соответствующему увеличению соотношения потоков V/III. В представленной модели для расчётов были выбраны соотношения потоков 5, 10 и 30.

Из представленных на рис. 1 зависимостей следует, что зарождение островков – достаточно быстрый процесс, который длится примерно 0,2 с и заканчивается менее чем через 1 секунду с момента начала роста при скорости 0,05 МС/с. К этому времени практически все островки достигают критического размера и нуклеация прекращается. Поэтому в дальнейшем весь материал, поступающий на поверхность, расходуется уже на рост закритических островков.

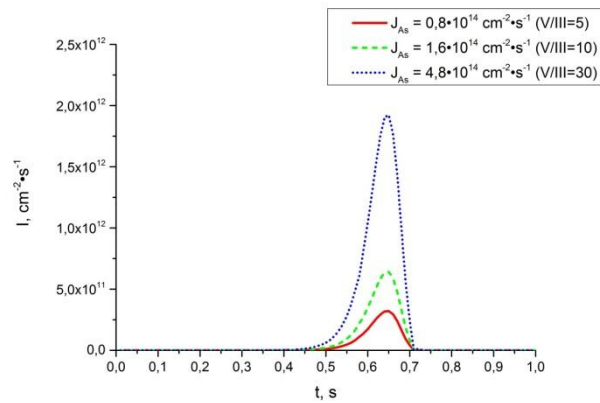


Рис. 1. Динамика изменения интенсивности нуклеации при скорости роста $v = 0,05$ МС/с и различных соотношениях потоков V/III

Увеличение соотношения потоков в 6 раз (рис. 1) приводит к увеличению максимума скорости нуклеации почти на порядок. Это связано с увеличением вероятности зародивания дуплетов галлия на поверхности и соответствующим повышением концентрации первичных кластеров в результате увеличения поверхностной концентрации адсорбированных тетрамеров мышьяка. В то же время соотношение потоков не влияет на время достижения максимума интенсивности зарождения островков, так как оно связано со временем достижения островками критического размера, величина которого зависит только от степени пересыщения адатомов по галлию.

Из рис. 1 также следует, что увеличение скорости роста приводит к значительному повышению скорости зарождения островков. В то же время наблюдается, что одно и то же значение максимума интенсивности нуклеации может достигаться при различных скоростях роста за счёт изменения соотношения потоков V/III. Это свидетельствует о существенном вкладе соотношения потоков ростовых компонент в кинетику эпитаксиального роста.

На рис. 2 представлены рассчитанные зависимости максимума интенсивности нуклеации от скорости роста при различных соотношениях потоков. Как видно из полученных зависимостей, наблюдается увеличение интенсивности зарождения более чем на три порядка при десятикратном увеличении скорости роста, а также увеличение почти на порядок при шестикратном повышении потока мышьяка относительно потока галлия. Такой характер представленных зависимостей связан с увеличением количества центров зарождения и роста островков на поверхности при увеличении как скорости роста, так и соотношения потоков.

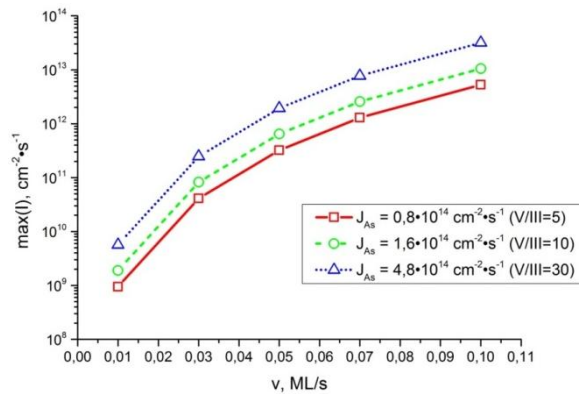


Рис. 2. Зависимость максимума интенсивности нуклеации от скорости роста при различных соотношениях потоков

Максимальное значение $v = 0,1$ МС/с соответствует режиму полной конденсации плёнки, наблюдаемому при МЛЭ [19]. Превышение этого значения приводит к нарушению иерархии временных масштабов конденсации, что является ограничением модели. Однако в большинстве случаев эпитаксиальный рост происходит при скоростях роста, не превышающих $0,1$ МС/с, так как чрезмерно быстрое осаждение материала приводит к уменьшению диффузии адатомов и, как следствие, увеличению шероховатости и низкому качеству поверхности.

Интегрируя выражение для интенсивности нуклеации по времени, можно получить поверхностную плотность островков N :

$$N(t) = \int_0^t I(t) dt = N_s \left\{ 1 - \exp \left[-\exp \left(\frac{t-t_*}{\Delta t} \right) \right] \right\}, \quad (18)$$

где N_s – постоянное значение плотности островков, на которое она выходит по окончании стадии нуклеации [6]:

$$N_s = I(\Phi_*) \Delta t. \quad (19)$$

Рассчитанные зависимости поверхностной плотности островков от времени представлены на рис. 3. Видно, что с увеличением времени плотность островков непрерывно возрастает до стационарного значения N_s , по достижении которого нуклеация почти полностью прекращается. Выход плотности на постоянное значение происходит в одно и то же время при любом значении соотношения потоков, так как это время определяется временем достижения максимального пересыщения, зависящего, главным образом, от потока атомов галлия.

В то же время значение поверхностной плотности существенным образом зависит от соотношения потоков, так как определяется концентрацией первичных кластеров на поверхности. При скорости роста $0,05$ МС/с, в диапазоне соотношений потоков от 5 до 30 поверхностная плотность островков изменяется от $3 \cdot 10^{10}$ до $1,8 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, что хорошо согласуется с данными экспериментальных работ [9, 10, 15].

Результаты и обсуждение. На рис. 4 приведены рассчитанные зависимости поверхностной плотности островков после выхода на стационарное значение от скорости роста при различных соотношениях потоков ростовых компонент. Видно, что увеличение как скорости роста, так и соотношения потоков приводит к значительному повышению поверхностной плотности островков. В то же время наблюдается, что одно и то же значение поверхностной плотности может достигаться при различных скоростях роста за счёт изменения соотношения потоков V/III .

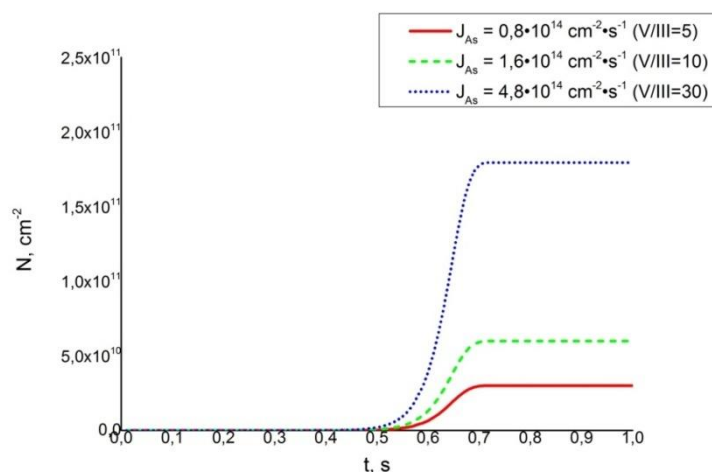


Рис. 3. Динамика изменения поверхностной плотности островков при скорости роста $v = 0,05$ МС/с и различных соотношениях потоков V/III

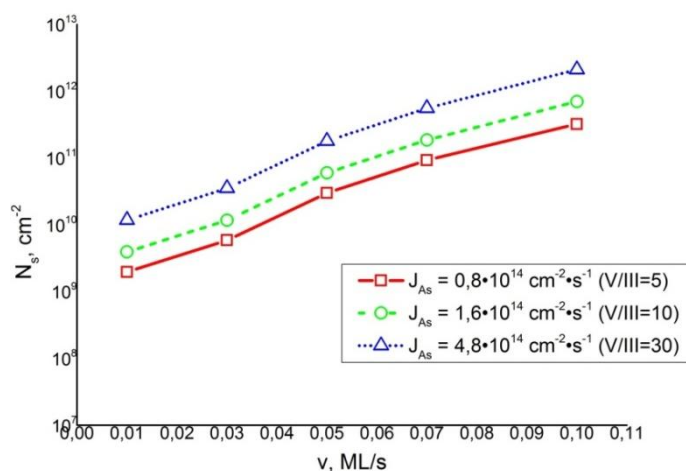


Рис. 4. Зависимость поверхностной плотности островков по окончании стадии нуклеации от скорости роста при различных соотношениях потоков

В связи с тем, что уравнение эволюции для функции распределения закритических островков по размерам является уравнением первого порядка со стационарным граничным условием в нуле и скорость роста островков не зависит от их размера ρ , распределение островков по размерам можно определить на основе выражения для скорости нуклеации (14) [24]:

$$f(\rho, t) = cN_s \exp\{c[\rho - \rho_*(t)] - e^{c[\rho - \rho_*(t)]}\}. \quad (20)$$

Константа c определяется из условия $\int_0^\infty d\rho f(\rho) = \int_0^t dt' I(t')$:

$$c = \frac{t_D}{n_{eq} \Phi_* \Delta t \sqrt{\sigma} l_D}. \quad (21)$$

Пользуясь δ -образной аппроксимацией для $I(t)$ [4] и делая допущения [26], применимые для рассматриваемого режима роста и не влияющие в значительной степени на результат [6], получим выражение для среднего размера островков:

$$\rho_*(x) = \sqrt{\frac{\Phi_* \theta_{eq} + y}{\sigma N_s}} \operatorname{th} \left\{ A \left[\left(\frac{\Phi_* \theta_{eq} + y}{\Phi_* \theta_{eq}} \right)^{3/2} - 1 \right] \right\}, \quad (22)$$

где параметры A и y – безразмерные параметры [6].

Рассчитанные зависимости среднего размера островков от времени представлены на рис. 5. Наблюдается резкое возрастание среднего размера на начальной стадии, так как его значения в модели приводятся с момента достижения критического размера. Спустя несколько долей секунды начинается плавное увеличение среднего размера островков.

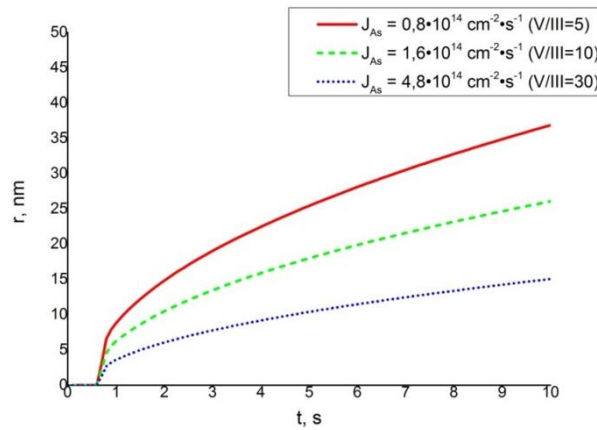


Рис. 5. Динамика изменения среднего размера островков при скорости роста $v = 0,05$ МС/с и различных соотношениях потоков V/III

Как видно из рисунка, время достижения критического размера не меняется при изменении соотношения потоков ростовых компонент, так как зависит, в основном, от скорости роста, определяемой в рассматриваемой модели только потоком галлия.

Также на рис. 5 показано, что с увеличением потока мышьяка средний размер островков уменьшается, что связано с увеличением поверхностной концентрации зародышей и расходом осаждаемого материала на большее количество островков.

На рис. 6 представлены рассчитанные зависимости среднего размера островков от скорости роста в момент, когда количество осаждённого материала составляет половину монослоя. Из построенного графика следует, что соотношение потоков оказывает большее влияние на средний размер островков при малых скоростях роста. Также показано, что повышение скорости роста приводит к закономерному снижению среднего размера островков.

На рис. 7 представлен график функций распределения островков по размерам при различных соотношениях потоков. Увеличение соотношения потоков приводит как к увеличению пика функции распределения, так и его сдвигу в область меньших размеров. Это связано с соответствующим уменьшением среднего размера островков и увеличением их поверхностной плотности. При этом функция распределения островков по размерам сужается.

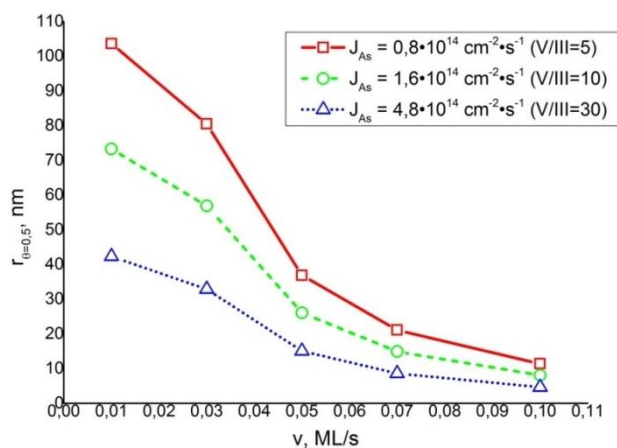


Рис. 6. Зависимость среднего размера островков после осаждения 0,5 МС GaAs от скорости роста при различных соотношениях потоков

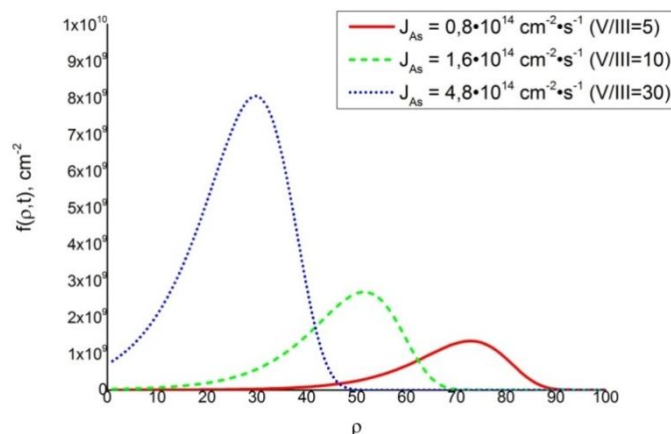


Рис. 7. Функции распределения островков по размерам при скорости роста $v = 0,05$ МС/с и различных соотношениях потоков V/III

Заключение. В работе изложена кинетическая модель начальной стадии роста плёнки GaAs, учитывающая зависимость характеристик массивов островков, зарождающихся в процессе роста, от соотношения потоков ростовых компонент. Результаты расчётов демонстрируют существенное влияние потока мышьяка на поверхностную плотность и средний размер островков, что свидетельствует о необходимости учёта данного параметра при формировании технологических режимов роста. Предложенная модель может быть использована для повышения эффективности управления и оптимизации процессов выращивания тонких плёнок методом МЛЭ.

Результаты получены с использованием оборудования Центра коллективного пользования и Научно-образовательного центра «Нанотехнологии» ЮФУ.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Ченг Л., Плоог К. Молекулярно-лучевая эпитаксия и гетероструктуры. – М.: Мир, 1989. – 582 с.

2. *Агеев О.А., Коломийцев А.С., Михайличенко А.В., Смирнов В.А., Пташник В.В., Солодовник М.С., Федотов А.А., Замбург Е.Г., Климин В.С., Ильин О.И., Громов А.Л., Рукомойкин А.В.* Получение наноразмерных структур на основе нанотехнологического комплекса НАНОФАБ НТК-9 // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2011. – № 1 (117). – С. 109-116.
3. *Агеев О.А., Варзарев Ю.Н., Солодовник М.С., Рукомойкин А.В.* Получение и исследование НЕМТ-структур на основе GaAs для СВЧ-полевых транзисторов на нанотехнологическом комплексе НАНОФАБ НТК-9 // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2011. – № 4 (117). – С. 13-21.
4. *Агеев О.А., Коноплев Б.Г., Рубаикина М.В., Рукомойкин А.В., Смирнов В.А., Солодовник М.С.* Исследование влияния геометрических параметров на модуль Юнга ориентированных нитевидных нанокристаллов GaAs методом атомно-силовой микроскопии // Российские нанотехнологии. – 2013. – № 1-2, Т. 8. – С. 20-25.
5. *Агеев О.А., Смирнов В.А., Солодовник М.С., Авилов В.И.* Исследование режимов локального анодного окисления эпитаксиальных структур арсенида галлия // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2011. – № 4 (117). – С. 8-13.
6. *Дубровский В.Г., Цырлин Г.Э.* Кинетика роста тонких пленок при зародышевом механизме формирования слоев // Физика и техника полупроводников. – 2005. – Т. 39, № 11. – С. 1312-1319.
7. *Дубровский В.Г., Сибирев Н.В., Цырлин Г.Э., Устинов В.М.* Теория формирования многослойных тонких пленок на поверхности твердого тела // Физика и техника полупроводников. – 2006. – Т. 40, № 3. – С. 257-263.
8. *Кукушкин С.А., Осипов А.В.* Процессы конденсации тонких пленок // Успехи физических наук. – 1998. – Т. 168, № 10. – С. 1083-1116.
9. *Joyce B.A., Vvedensky D.D., Bell G.R., Belk J.G., Itoh M., Jones T.S.* Nucleation and growth mechanisms during MBE of III-V compounds // Mat. Sci. Eng. B. – 1999. – Vol. 67. – P. 7-16.
10. *LaBella V. P., Bullock D. W., Ding Z., Emery C., Harter W. G., Thibado P. M.* Monte Carlo derived diffusion parameters for Ga on the GaAs(001)-(2×4) surface: A molecular beam epitaxy–scanning tunneling microscopy study // J. Vac. Sci. Tech. A. – 2000. – Vol. 18, № 4. – P. 1526-1531.
11. *Леденцов Н.Н., Устинов В.М., Щужин В.А., Копьев П.С., Алфёров Ж.И., Бимберг Д.* Гетероструктуры с квантовыми точками: получение, свойства, лазеры // Физика и техника полупроводников. – 1998. – Т. 32, № 4. – С. 385-410.
12. *Ohtake A., Ozeki M.* In situ observation of surface processes in InAs/GaAs(001) heteroepitaxy: The role of As on the growth mode // Appl. Phys. Lett. – 2001. – Vol. 78. – P. 431.
13. *Riel B.J., Hinzer K., Moisa S., Fraser J., Finnie P., Piercy P., Fafard S., Wasilewski Z.R.* InAs/GaAs(100) self-assembled quantum dots: arsenic pressure and capping effects // J. Cryst. Growth. – 2002. – Vol. 236. – P. 145-154.
14. *Morgan C.G., Kratzer P., Scheffler M.* Arsenic Dimer Dynamics during MBE Growth: Theoretical Evidence for a Novel Chemisorption State of As₂ Molecules on GaAs Surfaces // Phys. Rev. Lett. – 1999. – Vol. 82, 24. – P. 4886-4889.
15. *Shchukin V., Scholl E., Kratzer P.* Thermodynamics and Kinetics of Quantum Dot Growth // Semiconductor Nanostructures / ed. Bimberg D. – Berlin: Springer Berlin Heidelberg, 2008.
16. *Daweritz L., Ploog K.* Contribution of reflection high-energy electron diffraction to nanometre tailoring of surfaces and interfaces by molecular beam epitaxy // Semicond. Sci. Tech. – 1994. – Vol. 9, № 2. – P. 123-136.
17. *Frenkel J.* Theorie der Adsorption und verwandter Erscheinungen // Zeitschrift für Physik. – 1924. – Vol. 26, № 1. – P. 117-138.
18. *Лойко Н.* Введение в молекулярно-лучевую эпитаксию. – М.: ФИРАН, 1999. – 28 с.
19. *Дубровский В.Г.* Теоретические основы технологии полупроводниковых приборов. – СПб., 2006. – 347 с.
20. *Джейкок М., Парфит Д.* Химия поверхности раздела фаз. – М.: Мир, 1984. – 269 с.
21. *Хирс Д., Паунд Г.* Испарение и конденсация. – М.: Металлургия, 1966. – 288 с.
22. *Kashchiev D.* Nucleation: Basic Theory with Applications. – Oxford: Butterworth Heinemann, 2000. – 529 p.
23. *Куни Ф.М., Гринин А.П.* Время установления стационарного режима гомогенной нуклеации // Коллоидный журнал. – 1984. – Т. 46. – С. 23.

24. *Kuni F. M.* The Kinetics of Condensation under the Dynamical Conditions: preprint No. 84-148.E. – Kiev: Institute of Theoretical Physics, 1984.
25. *Дубровский В.Г., Мусихин Ю.Г., Цырлин Г.Э., Егоров В.А., Поляков Н.К., Самсоненко Ю.Б., Тонких А.А., Крыжановская Н.В., Берт Н.А., Устинов В.М.* Зависимость структурных и оптических свойств ансамблей квантовых точек в системе InAs/GaAs от температуры поверхности и скорости роста // *Физика и техника полупроводников.* – 2004. – Т. 38, № 3. – С. 342-348.
26. *Справочник по специальным функциям / Под ред. Абрамовиц М.А., Стиган И.* – М.: Наука, 1979.

REFERENCES

1. *Cheng L., Ploog K.* Molekulyarno-luchevaya epitaksiya i geterostruktury [Molecular beam epitaxy and heterostructures]. Moscow: Mir, 1989, 582 p.
2. *Ageev O.A., Kolomiytsev A.S., Mikhaylichenko A.V., Smirnov V.A., Ptashnik V.V., Solodovnik M.S., Fedotov A.A., Zamburg E.G., Klimin V.S., Il'in O.I., Gromov A.L., Rukomoykin A.V.* Poluchenie nanorazmernykh struktur na osnove nanotekhnologicheskogo kompleksa NANOFAB NTK-9 [Nanoscale structures' production based on modular nanotechnology platform NANOFAB], *Izvestiya YuFU. Tekhnicheskie nauki* [Izvestiya SFedU. Engineering Sciences], 2011, No. 1 (117), pp. 109-116.
3. *Ageev O.A., Varzarev Yu.N., Solodovnik M.S., Rukomoykin A.V.* Poluchenie i issledovanie HEMT-struktur na osnove GaAs dlya SVCh-polevykh tranzistorov na nanotekhnologicheskom komplekse NANOFAB NTK-9 [Obtaining and investigation of hemt-structure based on gaas for ultra high frequency field effect transistors at nanotechnological system NANOFAB NTF-9], *Izvestiya YuFU. Tekhnicheskie nauki* [Izvestiya SFedU. Engineering Sciences], 2011, No. 4 (117), pp. 13-21.
4. *Ageev O.A., Konoplev B.G., Rubashkina M.V., Rukomoykin A.V., Smirnov V.A., Solodovnik M.S.* Issledovanie vliyaniya geometricheskikh parametrov na modul' Yunga orientirovannykh nitevidnykh nanokristallov GaAs metodom atomno-silovoy mikroskopii [Investigation of the influence of geometrical parameters on the young's modulus of the oriented filamentary of GaAs nanocrystals by atomic force microscopy], *Rossiyskie nanotekhnologii* [Russian Nanotechnology], 2013, No. 1-2, Vol. 8, pp. 20-25.
5. *Ageev O.A., Smirnov V.A., Solodovnik M.S., Avilov V.I.* Issledovanie rezhimov lokal'nogo anodnogo okisleniya epitaksial'nykh struktur arsenida galliya [The study of the local anodic oxidation of epitaxial gallium arsenide], *Izvestiya YuFU. Tekhnicheskie nauki* [Izvestiya SFedU. Engineering Sciences], 2011, No. 4 (117), pp. 8-13.
6. *Dubrovskiy V.G., Tsyrlin G.E.* Kinetika rosta tonkikh plenok pri zarodyshevom mekhanizme formirovaniya sloev [The kinetics of growth of thin films during embryonic formation mechanism of layers], *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Semiconductor Physics and Technology], 2005, Vol. 39, No. 11, pp. 1312-1319.
7. *Dubrovskiy V.G., Sibirev N.V., Tsyrlin G.E., Ustinov V.M.* Teoriya formirovaniya mnogosloynnykh tonkikh plenok na poverkhnosti tverdogo tela [The theory of the formation of multilayer thin films on a solid surface], *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Semiconductor Physics and Technology], 2006, Vol. 40, No. 3, pp. 257-263.
8. *Kukushkin S.A., Osipov A.V.* Protsessy kondensatsii tonkikh plenok [The processes of condensation of thin films], *Uspekhi fizicheskikh nauk* [Advances in Physical Sciences], 1998, Vol. 168, No. 10, pp. 1083-1116.
9. *Joyce B.A., Vvedensky D.D., Bell G.R., Belk J.G., Itoh M., Jones T.S.* Nucleation and growth mechanisms during MBE of III-V compounds, *Mat. Sci. Eng. B.*, 1999, Vol. 67, pp. 7-16.
10. *LaBella V. P., Bullock D. W., Ding Z., Emery C., Harter W. G., Thibado P. M.* Monte Carlo derived diffusion parameters for Ga on the GaAs(001)-(2×4) surface: A molecular beam epitaxy-scanning tunneling microscopy study, *J. Vac. Sci. Tech. A.*, 2000, Vol. 18, No. 4, pp. 1526-1531.
11. *Ledentsov N.N., Ustinov V.M., Shchukin V.A., Kop'ev P.S., Alferov Zh.I., Bimberg D.* Geterostruktury s kvantovymi tochkami: poluchenie, svoystva, lazery [Heterostructures with quantum dots: synthesis, properties, lasers], *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Semiconductor Physics and Technology], 1998, Vol. 32, No. 4, pp. 385-410.

12. Ohtake A., Ozeki M. In situ observation of surface processes in InAs/GaAs(001) heteroepitaxy: The role of As on the growth mode, *Appl. Phys. Lett.*, 2001, Vol. 78, pp. 431.
13. Riel B.J., Hinzer K., Moisa S., Fraser J., Finnie P., Piercy P., Fafard S., Wasilewski Z.R. InAs/GaAs(100) self-assembled quantum dots: arsenic pressure and capping effects, *J. Cryst. Growth*, 2002, Vol. 236, pp. 145-154.
14. Morgan C.G., Kratzer P., Scheffler M. Arsenic Dimer Dynamics during MBE Growth: Theoretical Evidence for a Novel Chemisorption State of As₂ Molecules on GaAs Surfaces, *Phys. Rev. Lett.*, 1999, Vol. 82, 24, pp. 4886-4889.
15. Shchukin V., Scholl E., Kratzer P. Thermodynamics and Kinetics of Quantum Dot Growth, *Semiconductor Nanostructures / ed. Bimberg D.* Berlin: Springer Berlin Heidelberg, 2008.
16. Daweritz L., Ploog K. Contribution of reflection high-energy electron diffraction to nanometre tailoring of surfaces and interfaces by molecular beam epitaxy, *Semicond. Sci. Tech.*, 1994, Vol. 9, No. 2, pp. 123-136.
17. Frenkel J. Theorie der Adsorption und verwandter Erscheinungen, *Zeitschrift für Physik*, 1924, Vol. 26, No. 1, pp. 117-138.
18. Loyko N. Vvedenie v molekulyarno-luchevuyu epitaksiyu [Introduction to molecular beam epitaxy]. Moscow: FIRAN, 1999, 28 p.
19. Dubrovskiy V.G. Teoreticheskie osnovy tekhnologii poluprovodnikovyykh priborov [Theoretical bases of technology of semiconductor devices]. St. Petersburg, 2006, 347 p.
20. Dzheykok M., Parfit D. Khimiya poverkhnosti razdela faz [The chemistry of the interface]. Moscow: Mir, 1984, 269 p.
21. Khirs D., Paund G. Isparenie i kondensatsiya [Evaporation and condensation]. Moscow: Metallurgiya, 1966, 288 p.
22. Kashchiev D. Nucleation: Basic Theory with Applications. Oxford: Butterworth Heinemann, 2000, 529 p.
23. Kuni F.M., Grinin A.P. Vremya ustanovleniya statsionarnogo rezhima gomogennoy nukleatsii [The time to establish steady-state homogeneous nucleation], *Kolloidnyy zhurnal* [Colloid Journal], 1984, Vol. 46, pp. 23.
24. Kuni F. M. The Kinetics of Condensation under the Dynamical Conditions: preprint No. 84-148.E. Kiev: Institute of Theoretical Physics, 1984.
25. Dubrovskiy V.G., Musikhin Yu.G., Tsyrlin G.E., Egorov V.A., Polyakov N.K., Samsonenko Yu.B., Tonkikh A.A., Kryzhanovskaya N.V., Bert N.A., Ustinov V.M. Zavisimost' strukturnykh i opticheskikh svoystv ansambley kvantovykh toчек v sisteme InAs/GaAs ot temperatury poverkhnosti i skorosti rosta [Dependence of structural and optical properties of ensembles of quantum dots in the system InAs/GaAs surface temperature and growth rate], *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* [Semiconductor physics and technology], 2004, Vol. 38, No. 3, pp. 342-348.
26. Spravochnik po spetsial'nym funktsiyam [Handbook of special functions], Pod red. Abramovits M.A., Stigan I. Moscow: Nauka, 1979.

Статью рекомендовал к опубликованию д.ф.-м.н., профессор А.А. Лаврентьев.

Балакирев Сергей Вячеславович – Южный федеральный университет; e-mail: s.v.balakirev1991@gmail.com; 347928, г. Таганрог, ул. Шевченко, 2, корп. Е; тел.: +79604642791; кафедра нанотехнологий и микросистемной техники; аспирант.

Блинов Юрий Фёдорович – e-mail: s.v.balakirev1991@gmail.com; тел.: +78634371611; кафедра нанотехнологий и микросистемной техники; к.т.н.; доцент.

Солодовник Максим Сергеевич – e-mail: solodovnikms@sfedu.ru; кафедра нанотехнологий и микросистемной техники; ассистент; к.т.н.

Balakirev Sergey Vyacheslavovich – Southern Federal University; e-mail: s.v.balakirev1991@gmail.com; 2, Shevchenko street, build. E, Taganrog, 347928, Russia; phone: +79604642791; the department of nanotechnologies and microsystems; postgraduate student.

Blinov Yuriy Fedorovich – e-mail: yfblinov@sfedu.ru; phone: +78634371611; the department of nanotechnologies and microsystems; cand. of eng. sc.; associate professor.

Solodovnik Maxim Sergeevich – e-mail: solodovnikms@sfedu.ru; the department of nanotechnologies and microsystems; cand. of eng. sc.; assistant.