

На правах рукописи



ХАЗАНОВА СОФЬЯ ВЛАДИСЛАВОВНА

**МОДЕЛИРОВАНИЕ КООПЕРАТИВНЫХ АТОМНЫХ ЯВЛЕНИЙ  
ПРИ ФОРМИРОВАНИИ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ НАНОСТРУКТУР**

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Нижний Новгород – 2007

Работа выполнена в Государственном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского»

**Научный консультант:** профессор **Михаил Игоревич Василевский**

**Официальные оппоненты:** доктор физико-математических наук,  
профессор **Геннадий Федорович Ефремов**

кандидат физико-математических наук,  
доцент **Сергей Степанович Савинский**

**Ведущая организация:** Ярославский филиал физико-технологического  
института РАН, г.Ярославль (Институт  
микроэлектроники и информатики РАН)

Защита состоится «17» октября 2007 г. в 14:00 на заседании диссертационного совета Д.212.166.01 в Нижегородском государственном университете им. Н.И. Лобачевского по адресу: 603950, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23, корп. 3 (НИФТИ)

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского

Автореферат разослан «14» сентября 2007 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета,  
д.ф.-м.н., профессор



А.И. Машин

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### Актуальность темы

Создание оптоэлектронных приборов, использующих квантово-ограниченные структуры, является весьма перспективным направлением физики полупроводников. Известно, к примеру, что лазеры на квантовых структурах очень экономны, имеют более низкий пороговый ток, чем обычные полупроводниковые лазеры, и обладают большим КПД [1]. И, что очень важно, управляя размерами структуры, можно перестраивать энергетический спектр устройства. По этой причине в последнее время все в большей степени объектами исследования становятся не массивные кристаллы, а системы с пониженной размерностью. В то же время, выращивание структур, применимых в приборостроении, требует совершенствования технологий и дальнейших исследований свойств полупроводниковых соединений.

То обстоятельство, что низко-размерные структуры именно сейчас привлекают особое внимание, вызвано интенсивным развитием технологии изготовления полупроводниковых структур, в первую очередь, молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) и газофазной эпитаксии. Известно, что методы МЛЭ и газофазной эпитаксии из паров метало-органических соединений (ГФЭМОС) позволяют выращивать монокристаллические слои толщиной всего в несколько периодов решетки. Недавний прогресс в производстве низкоразмерных структур также связан со способностью атомов к самоорганизации в виде сверхрешеток и квантовых точек, связанной с их взаимодействием между собой и с подложкой [2]. Широко используется рост самоорганизующихся квантовых точек в системах InAs/GaAs, Si/Ge, CdSe/ZnSe и некоторых других. К возможным методам роста наноструктур, использующим идеи самоорганизации, относится, например, образование кластеров и островков при субмонослойном гетерогенном осаждении. Рост полупроводниковых гетероструктур (ГС) методом МЛЭ на вицинальных подложках может быть использован для получения квантовых проволок и латеральных сверхрешеток [3].

Для получения наноструктур с желаемым энергетическим спектром носителей заряда особый интерес представляют полупроводниковые изовалентные твердые растворы, как бинарные, так и псевдобинарные ( $A_cB_{1-c}$ ,  $A_cB_{1-c}C$ ). Разработка технологических методов неразрывно связана с исследованиями свойств и возможностей твердых растворов, используемых в них. При этом необходимо учитывать тот факт, что статистическое случайное распределение компонентов твердого раствора по узлам кристаллической решетки никогда не осуществляется в реальных сплавах из-за различия электронной структуры даже химически сходных атомов и упругих искажений кристаллической решетки. Наличие определенной корреляции в заполнении узлов подрешетки с замещением, так называемого ближнего порядка, оказывает влияние на электрофизические и оптические свойства сплавов.

Рост полупроводниковых соединений с удовлетворяющими приборостроению свойствами – чрезвычайно трудоемкий и дорогостоящий процесс. Экспериментально, контроль за качеством структур и процессами, происходящими на атомном уровне, возможен с помощью таких методов как, к примеру, сканирующая туннельная микроскопия. Теоретический же подход к пониманию этих процессов в последнее

время все чаще связан с компьютерным моделированием, поскольку с помощью чисто аналитических расчетов можно решить лишь весьма ограниченное число задач. Компьютерное моделирование, несмотря на большое количество допущений, позволяет делать хорошие оценки ряда важных параметров и выявлять основные тенденции в поведении атомов в течение сложного процесса роста или послеростового отжига полупроводниковых структур. Возможность получения плавных зависимостей от таких параметров, как плотность потока атомов на поверхность, температура подложки и ее кристаллографическая ориентация, позволяет экспериментаторам экономить время и средства при изготовлении высококачественных материалов и структур. Наконец, компьютерный эксперимент – это сравнительно недорогой путь поиска новых возможностей получения наноматериалов для электронных приборов нового поколения. Таким образом, моделирование процессов атомной самоорганизации и возможностей влияния на эти процессы является необходимой частью научных исследований, и особенно в настоящее время, когда зарождаются принципиально новые концепции и технологии, такие, как наноэлектроника и квантовые методы хранения и передачи информации.

### **Цель и основные задачи работы**

Цель работы – разработка адекватных физических моделей для исследования кооперативных атомных явлений, происходящих при формировании низкоразмерных полупроводниковых структур. Рассмотрены как термодинамические, так и кинетические модели атомных распределений, возникающих в процессе роста структур на основе полупроводниковых соединений и твердых растворов.

С помощью как аналитических, так и компьютерных методов исследования решены основные задачи работы:

1. Исследование методами компьютерного моделирования термодинамики равновесных двумерных структур с различным типом ближнего порядка в рамках модели Изинга с учетом колебаний атомов.
2. Исследование возможности внешнего воздействия на термодинамику адсорбированного слоя колеблющихся атомов с различным типом ближнего порядка.
3. Исследование кинетики роста движущейся ступени на вицинальной (110) грани аналитически и средствами моделирования. Исследование кинетики растущей грани кремния с целью нахождения области параметров, подходящих для выращивания квазиодномерных структур.
4. Усовершенствование модели роста квантовых напряженных гетероструктур InGaAs/GaAs с квантовыми ямами. Изучение эффекта сегрегации в данных структурах и факторов, способных повлиять на этот эффект.
5. Расчет уровней размерного квантования в квантовых ямах с учетом сегрегации состава. Исследование влияния различных условий роста (температуры, плотности атомарного потока, угла разориентации подложки) на оптические свойства гетероструктур.

## **Научная новизна работы**

1. На основе непосредственного численного моделирования равновесного ближнего порядка и вычисления полного колебательного спектра двумерного твердого раствора замещения разработан оригинальный алгоритм учета влияния колебательных степеней свободы на его термодинамические свойства для любого типа и степени ближнего порядка. Алгоритм применим и к решеточному газу адатомов на поверхности кристалла.

2. Впервые предложен алгоритм для исследования влияния вынужденных колебаний решетки, вызванных периодическим внешним воздействием на ближний порядок в субмонослойных покрытиях (решеточный газ адатомов на поверхности кристалла) и 2D твердых растворах замещения.

3. Впервые аналитически и прямым Монте-Карло моделированием показано, что при смене механизма роста эпитаксиального слоя полупроводника (переход от зародышеобразования к движению эшелона ступеней) происходит резкое возрастание концентрации неравновесных поверхностных вакансий. Это приводит к увеличению вероятности встраивания легирующей примеси и влияет на эффект сегрегации состава при выращивании слоев твердых растворов.

## **Практическая значимость**

1. На основе простой модели показана принципиальная возможность управления размером островков на поверхности при субмонослойном осаждении пленок или отжиге полупроводниковых твердых растворов, что может быть использовано либо для создания квантово-размерных структур, либо, наоборот, для получения гомогенных образцов

2. Предложенная модель зародышеобразования на вицинальной грани позволяет дать естественное объяснение ряду экспериментальных результатов, полученных при молекулярно-лучевой эпитаксии легированных слоев Si и предсказать поведение системы в течение роста.

3. Разработанный комплекс программ, выполняющих моделирование эффекта сегрегации состава при выращивании InGaAs/GaAs гетероструктур с квантовыми ямами и расчет основного состояния экситона в квантовой яме, позволяет предсказывать свойства (положение пика фотолюминесценции и его уширение) в зависимости от параметров роста.

## **Личное участие соискателя**

Основные алгоритмы и модели были разработаны автором совместно с научным консультантом. Расчеты по моделированию равновесного ближнего порядка и кинетики роста выполнены самостоятельно. Также автором были проведены анализ полученных результатов и корректировка параметров в ходе исследований.

## **Основные положения и результаты, выносимые на защиту**

1. С помощью непосредственного моделирования равновесного ближнего порядка и вычисления полного колебательного спектра двумерного твердого раствора замещения разработан алгоритм учета влияния колебательных степеней свободы на его термодинамические свойства в рамках модели Изинга для любого типа и степени ближнего порядка.

2. Показано, что учет собственных колебаний атомов в неизотопическом приближении ( $\gamma_{AB} > \gamma_{AA}$ ) приводит к понижению температуры фазового перехода твердого раствора с ближним порядком типа упорядочения и к увеличению для случая кластерообразования.

3. Предложен алгоритм для исследования влияния вынужденных колебаний решетки на ближний порядок в субмонослойных покрытиях (решеточный газ адатомов на поверхности кристалла) и 2D сплавах. Показана возможность внешнего гармонического воздействия на фазовую стабильность растущего слоя или островков при гетерогенном осаждении.

4. Предложена модель, описывающая микроструктуру вицинальной (110) грани кремния в условиях выращивания методом молекулярно-лучевой эпитаксии. В рамках этой модели получено аналитическое выражение для функции распределения изломов шероховатой ступени на растущей грани в различные моменты роста. Аналитические результаты подтверждены методами численного моделирования.

5. Прямым Монте-Карло моделированием показано, что при смене механизма роста происходит резкое возрастание неравновесных вакансий вблизи границы движущейся ступени, что означает увеличение мест роста для введения легирующей примеси.

6. Усовершенствован алгоритм моделирования роста гетероструктур InGaAs/GaAs при МЛЭ с учетом влияния изоморфной упругой деформации растущего слоя на эффект сегрегации. Показана зависимость профилей состава гетероструктур InGaAs/GaAs от параметров роста (температура, угол отклонения подложки от сингулярной грани).

## **Апробация результатов работы.**

Основные результаты диссертационной работы докладывались на следующих конференциях: I Российская конференция по физике полупроводников (Нижний Новгород, 1993), International Conference on II-VI Compounds and Devices (Edinburg, Scotland, UK, 1995), 10-th Summer School GPG EPS (Skalsky Dvur, Czech Republic, 1995), II Российская конференция по физике полупроводников (Зеленогорск, 1996), Нижегородская конференция «Структура и свойства кристаллических и аморфных материалов» (Нижний Новгород, 1996), International Conference on Atomic-Layer-Epitaxy and Related Surface Processes (ALE-4) (Linz, Austria, 1996), Нижегородские сессии молодых ученых (Нижний Новгород, 1997, 2001), Europhysics Conference on Computational Physics (Granada, Spain, 1998), Нижегородская конференции «Структура и свойства твердых тел» (Нижний Новгород, 1999), 5 – я научная конференции по радиофизике, посв. 100-летию А. А. Андропова (Нижний Новгород,

7 мая 2001), Всероссийские семинары ННГУ по физическим и химическим основам ионной имплантации (Нижний Новгород, 2002, 2004), XI Международный симпозиум по нанофизике и наноэлектронике (Нижний Новгород, 2007).

### **Структура и объем диссертационной работы**

Диссертация состоит из введения, пяти глав, списка цитируемой литературы, включающего 95 наименований. Объем диссертации составляет 128 страниц машинописного текста, включая 48 рисунков и 1 таблицу.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** дано обоснование выбора темы диссертационной работы и ее актуальность. Сформулированы цель работы, научная новизна и практическая значимость, приведены основные положения, выносимые на защиту. Указаны структура и объем диссертации. Содержатся сведения об апробации работы.

**Первая глава** посвящена обзору основных типов квантово-размерных полупроводниковых структур и изменения основных свойств полупроводников при понижении размерности. Изложены основные методы получения низкоразмерных структур, применяемые в последние годы. Обоснована необходимость исследования полупроводниковых твердых растворов и выбор методов компьютерного моделирования. Учитывая тот факт, что рост полупроводниковых структур является стохастическим процессом, в качестве основного метода численного исследования, был выбран метод Монте-Карло моделирования [4], использующий вероятностный подход, учитывающий микрокинетику роста.

**Во второй главе** исследовано влияние атомных колебаний на фазовую стабильность двумерных твердых растворов с ближним порядком типа упорядочения или кластерообразования. Традиционно, задача бинарного сплава, так же как и решеточного газа, исследуется в рамках стандартной модели Изинга, в которой при расчете термодинамических функций учитывается только взаимное расположение атомов. Однако проведенный анализ литературных данных указывает на тот факт, что вклад колебательной энтропии в свободную энергию может быть существенным и соизмеримым с конфигурационной энтропией [5]. В то же время, ранее было показано [6], что тенденция системы к упорядочению или кластерообразованию ведет к существенной перестройке фононого спектра. Таким образом, колебания атомов в узлах решетки могут существенным образом влиять на термодинамику системы при наличии ближнего порядка в сплаве.

В работах [7, 8] проводились исследования влияния ближнего порядка на колебательную энтропию сплава. Однако, их оценки справедливы только для упорядочивающихся сплавов и лишь для температур много выше температуры Дебая. В данной работе предлагается алгоритм, позволяющий вычисление колебательной свободной энергии для любой температуры и типа и степени ближнего порядка. Поскольку учет атомных колебаний при вычислении статистической суммы - достаточно сложная задача, основное допущение состоит в том, что при решении данной задачи можно разделить конфигурационные и колебательные степени свободы. При этом учитывается тот факт, что колебательная плотность состояний - самоусредняющаяся величина, имеющая физический смысл при усреднении по статистическому ансамблю. Эта усредненная плотность состояний и использовалась при расчете колебательной свободной энергии сплавов с определенным (средним) параметром порядка.

Изучался двумерный бинарный сплав  $A_xB_{1-x}$  на квадратной решетке, описываемый следующим гамильтонианом:  $H = H_1 + H_2$ , где  $H_1$  - соответствует чисто изинговскому взаимодействию атомов-ближайших соседей, а  $H_2$  - описывает энергию колебаний решетки в гармоническом приближении. Задача сводится к нахождению эффективного параметра ближнего порядка и соответствующей



эффективной изинговской константы взаимодействия  $J^*(T) \neq E_m$ , ( $E_m$  - энергия смещения в модели Изинга), при которых минимальна сумма колебательной и конфигурационной свободной энергии. Для ее решения была предложена следующая процедура.

1) Вводился переменный параметр взаимодействия модели Изинга  $J$  (причем  $\text{sgn}(J) = \text{sgn}(E_m)$ ). Используя стандартный алгоритм Метрополиса [9], моделировался равновесный ближний порядок изинговского сплава с определенным параметром взаимодействия, для различных температур. По полученным атомным распределениям рассчитывалась конфигурационная свободная энергия (для 'чистой' модели Изинга),  $F_c(J, T)$ . Заметим, что, поскольку  $F_c(J, T)/T$  зависит только от

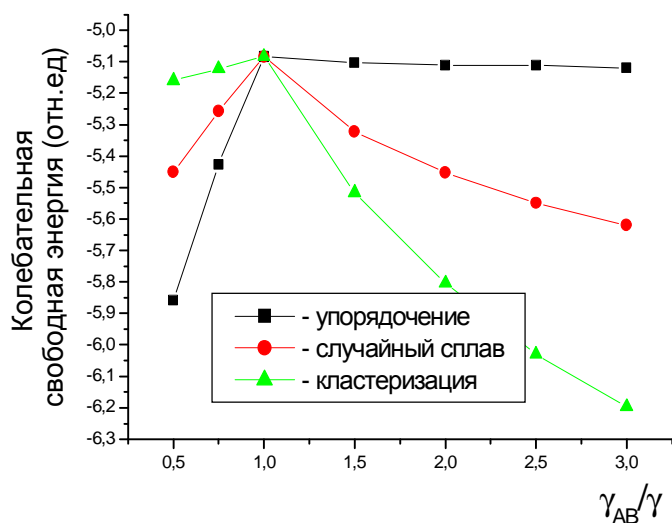


Рис.1. Колебательная свободная энергия, вычисленная для сплавов с различным типом ближнего порядка, в зависимости от соотношения силовых констант  $g_{AB}/g$ .

распределением замещающих атомов зависит от типа, степени порядка и от соотношения силовых констант (см. рис 1). Результаты расчетов подтверждают предположение, что положение минимума суммарной свободной энергии системы  $[F_c(J, T) + F_v(J, T)]$  характеризуется некоторой эффективной константой взаимодействия  $J^*(T)$  [10]. Показано, что когда смешанные связи жестче, чем связи между одинаковыми атомами, атомное упорядочение приводит к некоторому проигрышу в колебательной свободной энергии, причем этот проигрыш увеличивается с ростом соотношения  $g_{AB}/g_{AA}$ . Таким образом, колебательные степени свободы способствует кластерообразованию и подавляют упорядочение, оказывая влияние на температуру фазового перехода системы. Показано также отсутствие эффекта в изотопическом приближении.

Анализ температурной зависимости минимума суммарной свободной энергии  $(F_c + F_v)$  дает новое положение пика теплоемкости по сравнению с ситуацией без учета колебаний. Таким образом, на основании наших расчетов можно утверждать, что происходит изменение критической температуры фазового перехода порядок-беспорядок: понижение для упорядочивающегося сплава, повышение для

$(J/T)$ , достаточно расчета одной кривой для получения всего семейства зависимостей. При некоторой данной температуре  $T$ ,  $F_c(J, T)$  может рассматриваться как функция  $J$ , имеющая минимум при  $J = E_m$  для любой температуры.

2) Генерировался ансамбль, состоящий из нескольких десятков кристаллитов для каждого значения переменной порядка и температуры, и вычислялась фонная плотность состояний для каждого "образца". По усредненным спектрам плотности состояний рассчитывалась колебательная свободная энергия,  $F_v(J, T)$ .

В работе получено, что колебательная свободная энергия сплава с коррелированным

кластерообразования (для  $g_{AB} > g_{AA} = g_{BB}$ ). В случае упорядочения данный результат согласуется с выводом, сделанным в рамках теории среднего поля [8].

В **третьей главе** на основе простой модели показано, как можно повлиять на фазовое равновесие в решеточном газе, воздействуя на его колебательные степени свободы извне. В качестве примера такой системы можно представить себе поверхностную фазу - тонкий двумерный слой или субмонослойное покрытие на поверхности монокристалла. Поверхностная фаза находится в термодинамическом равновесии с объемной фазой, имея при этом собственную электронную структуру, кристаллическую решетку и свойства. Отметим, что задача о поведении решеточного газа адатомов на поверхности при субмонослойном осаждении является родственной проблеме бинарного сплава.

В качестве внешнего воздействия рассматривается некоторая сила, действующая на атомы и меняющаяся по гармоническому закону с частотой  $W$ . На практике это может быть реализовано, например, с помощью ультразвука. В данной модели считаем систему термодинамически условно равновесной, т.е. находящейся в эффективном внешнем поле, действие которого сводится к добавлению к

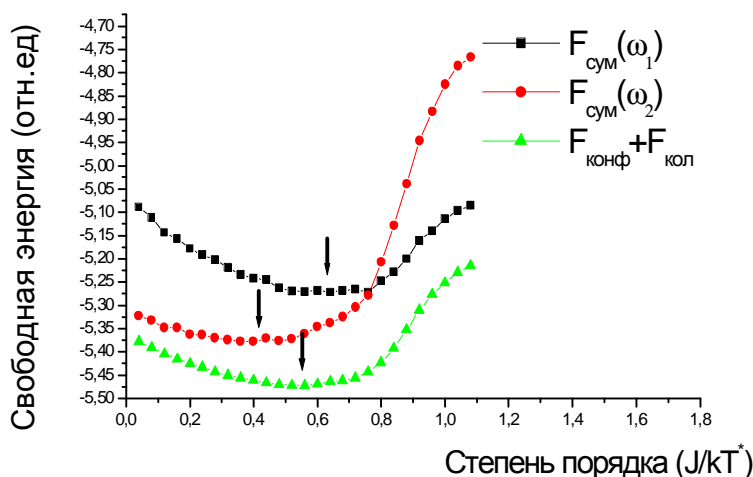


Рис.2. Суммарная свободная энергия с учетом вынуждающего воздействия при фиксированной температуре  $T^*=0,7J/k$ . Стрелками показаны положения минимумов энергии.

собственных значений динамической матрицы. Моделирование равновесного ближнего порядка с учетом собственных колебаний атомов осуществлялось с помощью методики, изложенной в предыдущей главе. Результаты расчетов показывают, что наличие внешнего колебательного возбуждения может либо усилить, либо подавить эффект, связанный с учетом только собственных колебаний атомов.

Таким образом, варьируя частоту и мощность внешнего воздействия, можно влиять на тенденцию сплава к кластерообразованию или упорядочению [11]. Это открывает принципиальную возможность управления размером островков на поверхности при эпитаксиальном осаждении пленок или отжиге полупроводниковых твердых растворов, что может быть использовано либо для создания квантово-размерных структур, либо, наоборот, для получения гомогенных образцов.

гамильтониану системы энергии вынужденных колебаний. Эта энергия зависит от восприимчивости ( $c$ ) системы к внешней силе,

$$E_{\text{вын}} = \frac{N}{2\Gamma} F_0^2 w^2 \text{Im } c(w), \quad (1)$$

где  $N$  – полное число атомов,  $F_0$  – амплитуда внешней силы,  $\Gamma$  - параметр затухания. При этом необходимо учитывать, что восприимчивость зависит от степени ближнего порядка. Она связана с фоновой функцией Грина, которая, в свою очередь определяется набором собственных векторов и

**В четвертой главе** исследуется кинетика роста слоев на вицинальной грани (110) кремния при МЛЭ. Как известно, вицинальная поверхность представляет собой последовательность террас (длиной  $L$ ) сингулярной грани, разделенных одноатомными ступенями, которые служат местами роста. Известно, что, если ступени не очень извилисты, их можно декорировать атомами другого сорта, получая при этом гетероструктуры с ограниченным в двух направлениях движением носителей тока [12]. Таким образом, актуальным становится вопрос о морфологической стабильности растущей грани. В данной работе рассматривался послойный рост на вицинальной грани (110) кремния, в случае, когда разделение между ступенями соразмерно с длиной диффузии адатомов. Поверхностная диффузия сильно анизотропна, из-за чего ступени становятся шероховатыми.

Отдельно исследована структура изолированной ступени, сформированной концами атомных цепочек, направленных вдоль [110] (рис. 3). В отсутствие десорбции, каждый адатом, прибывающий на террасу, “добегает” до ближайшей ступени и, присоединяясь к ней, вводится таким образом в кристалл. Определим излом длиной  $l$  как границу между двумя соседними цепочками, содержащими число атомов, отличное от  $l$  (см. рис 3). Для описания кинетики процессов на ступени вводятся две функции распределения, а именно,  $f_i(l)$  – вероятность того, что  $i$  – ый излом имеет длину  $l$ , и  $f_{i,i+1}(l, l')$  – вероятность того, что  $i$  – ый излом имеет длину  $l$  при условии, что  $i+1$  имеет длину  $l'$ . Рельеф ступеньки может быть изменен посредством добавления нового атома к любой из цепочек, либо из-за поперечных прыжков вдоль ступени, т.е. с одной цепочки на другую. Не учитывая взаимодействия между несоседними цепочками, несложно записать кинетическое уравнение, описывающее данные процессы. В работе получены следующие функции распределения изломов для различных моментов роста ( $t \rightarrow 0, t \rightarrow \infty$ ) [13]:

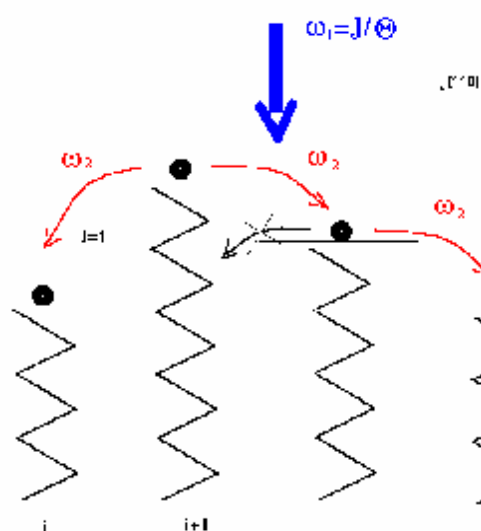


Рис. 3 Структура изолированной ступени Si. Вид сверху.

$$f(l; t) = \frac{1}{\sqrt{4pw_1t}} \exp\left[-\frac{l^2}{4w_1t}\right] \quad (2)$$

$$f(l; \infty) = \frac{w_2}{w_1} \exp\left[-2\frac{w_2}{w_1}|l|\right] \quad (3)$$

Можно утверждать, что с течением времени под влиянием диффузии вдоль ступени, ее шероховатость уменьшается. Компьютерное моделирование, использующее аналогичные параметры подтверждает аналитические выражения, и позволяет рассмотреть поведение ступени в различные моменты времени. Кроме того, моделирование позволяет выявить факторы, влияющие на стабильность ступени. Как видно из аналитики одним из факторов является наличие медленной диффузии вдоль ступени. Другим фактором, стабилизирующим ступень, является так называемый барьер Швевеля, препятствующий переходу адатомов на более низкую

ступень. Анализ немонотонного характера зависимости имеющихся экспериментальных данных по плотности центров зарождения дефектов упаковки [14] в слоях Si, выращенных на различных вицинальных подложках, от угла

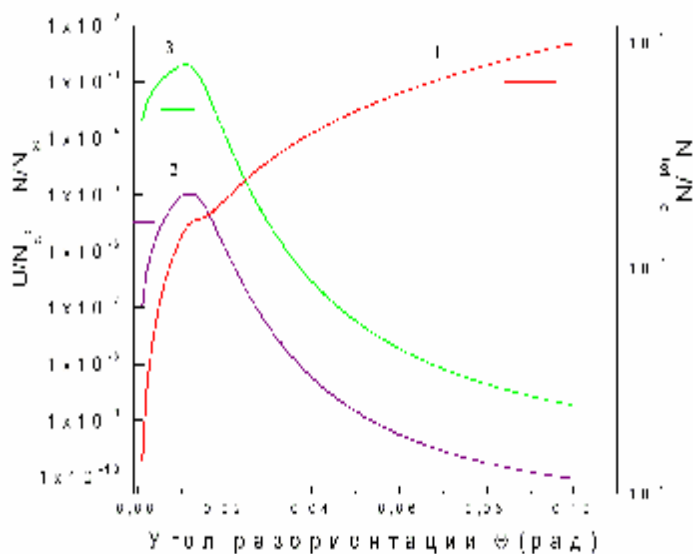


Рис.4. Концентрация мест роста (1), поверхностных вакансий (2) и зародышей (3), нормированных на плотность атомов в зависимости угла разориентации;  $T=873$  К.

концентрации поверхностных вакансий в зависимости от угла разориентации подложки. Данные зависимости подтверждают наличие критического угла разориентации подложки (рис. 4). Кроме того, проведено Монте-Карло моделирование роста, учитывающее и зародышеобразование, и движение ступеней, что позволило детально изучить микроструктуру растущей грани для всех параметров роста - температуры, угла разориентации подложки, скорости потока. Получено хорошее согласие между теорией и результатами компьютерного моделирования.

**Пятая глава** посвящена трехмерному моделированию роста гетероструктуры InGaAs/GaAs с квантовой ямой. Как известно, одной из основных проблем технологии таких структур является получение резких гетерограниц, поэтому наше внимание было направлено на изучение эффекта поверхностной сегрегации индия, которая наблюдается при низкотемпературном росте слоев InGaAs на GaAs методами как молекулярно-лучевой, так и газофазной эпитаксии [15, 16]. При теоретическом описании сегрегации чаще всего применяются модели, использующие феноменологические параметры. Эти модели не позволяют предсказать изменения в свойствах выращиваемых слоев при изменении материала или условий роста. Более привлекательными в этой связи оказываются стохастические методы, такие как Монте-Карло моделирование [17].

отклонения ( $\Theta$ ) от сингулярной грани (110) позволяет предположить, что рост слоев происходит по-разному, при  $\Theta > \Theta_{крит}$  - путем присоединения адатомов Si к концам атомных цепочек, а при  $\Theta < \Theta_{крит}$  - за счет образования и разрастания зародышей нового монослоя. Величину  $\Theta_{крит}$  можно найти из условия равенства средней длины террасы и диффузионной длины адатомов по отношению к образованию зародышей,  $\bar{L} = l$ .

Разрастание зародышей на террасах, разделенных геометрическими ступенями, приводит к появлению мест с тремя валентными связями так называемых поверхностных вакансий. Получено аналитическое выражение для концентрации зародышей на террасах и для

В настоящей работе с использованием кинетического метода Монте-Карло моделировался рост гетероэпитаксиальной структуры, представляющей собой симметричную квантовую яму  $\text{In}_c\text{Ga}_{1-c}\text{As}$  с номинальным составом  $c=0.2$ , окруженную с двух сторон слоями GaAs и выращенную в кристаллографическом направлении [001] (ось  $z$ ) или близком к нему, в случае вицинальной подложки. Нами был усовершенствован Монте-Карло алгоритм роста, позволяющий исследовать процессы поверхностной сегрегации индия с учетом изоморфной деформации нижележащих слоев.

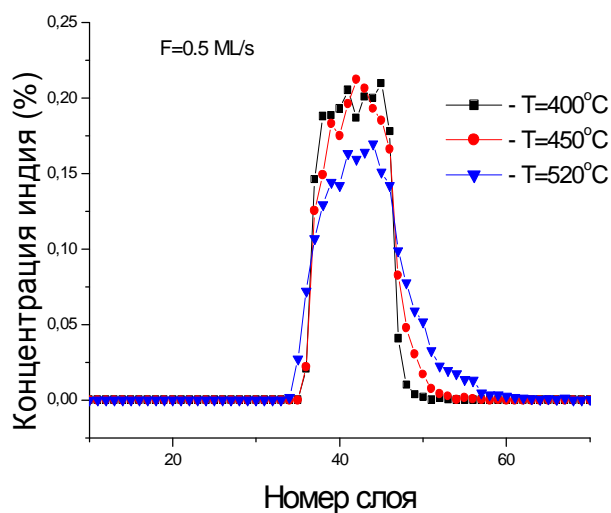


Рис.5. Профили состава в слоях, выращенных при разных температурах на подложках GaAs (001).

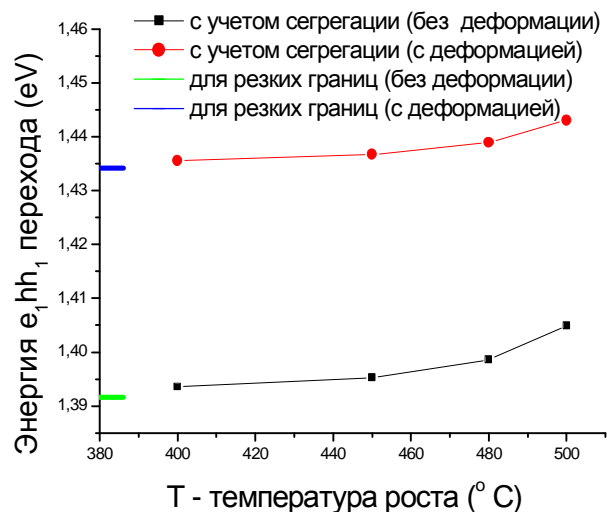


Рис.6. Зависимость энергии перехода  $e_1-hh_1$  от температуры роста в напряженной и ненапряженной структуре.

Для учета влияния данной деформации на диффузию адатомов в растущем монослое, в выражение для энергии активации вводится дополнительный член  $E_e$ . Расчеты методом функционала плотности показывают [18], что диффузионный барьер для адатома In понижается в случае деформации сжатия согласно  $E_e^{In} = e_{xx} \times 3.8eV$ , где  $e_{xx}$  - компонента тензора деформации слоя в плоскости роста. Нами также было принято, что  $E_e^{Ga} = -E_e^{In}$ . Исследовано поведение слоев, содержащих In, в зависимости от внешних параметров, таких, как температура, скорость потока и угол разориентации подложки. Рассчитанные профили состава качественно подтверждают результаты, полученные различными экспериментальными методами [16]. Показано, что на размытие профиля слоев, содержащих In, существенно влияет угол разориентации начальной ростовой грани и температура роста.

В качестве контролирующего метода, позволяющего сравнение с экспериментом, предлагается расчет квантовых уровней электронов и дырок в этих слоях, которые, как известно, очень чувствительны к профилям состава. Расчет энергии основного электрон-дырочного перехода в квантовой яме ( $e_1-hh_1$ ) проводился в рамках метода эффективной массы. Решалось одномерное уравнение Шредингера отдельно для электронов и для тяжелых дырок, с эффективной потенциальной энергией  $V_{c,v}(z)$ , определяемой разрывом зон между InAs и GaAs



( $\Delta_{c,v}$ ) и локальным составом слоя  $c(z)$ , полученным из МК моделирования. Одноосная деформация слоев приводит к увеличению ширины запрещенной зоны и снятию вырождения валентной зоны, т.е. к расщеплению подзон легких и тяжелых дырок. Были рассчитаны уровни размерного квантования только для  $k_{\parallel} = 0$ , не учитывая перемешивания легких и тяжелых дырок. При этом учитывалась упругая деформация, связанная с профилем состава. Результирующие, с учетом деформации, эффективные ограничивающие потенциалы  $V_{c,v}(z)$  для электронов и тяжелых дырок, имеют следующий вид :

$$\begin{aligned} V_c(z) &= \Delta_c c(z) + a_c Sp \dot{e}^v ; \\ V_{hh}(z) &= \Delta_v c(z) + a_v Sp \dot{e}^v - b(e_{zz} - e_{xx}) , \end{aligned} \quad (4)$$

где  $a_c$ ,  $a_v$  и  $b$  - деформационные потенциалы.

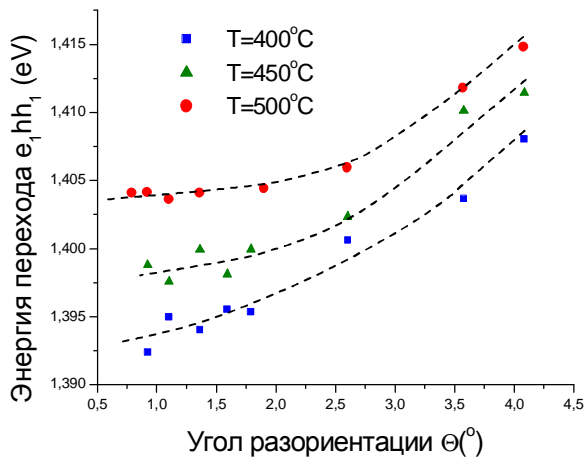


Рис. 7 Зависимость энергии  $e_{1-hh_1}$  перехода от угла разориентации для различных температур роста.

По результатам моделирования можно сделать вывод, что учет эффекта сегрегации в слоях  $In_cGa_{1-c}As$  приводит к заметному голубому сдвигу энергии перехода (рис. 6). При этом экситонный пик имеет больший сдвиг для структур (рис. 7), выращенных на vicинальных подложках, по сравнению с сингулярной гранью, что соответствует известным из литературы экспериментальным данным [19]. Сдвиг может составлять 15-20 meV для квантовой ямы с номинальной шириной 10 монослоев. Отметим также возрастающее уширение линии перехода с увеличением температуры роста, связанное с возрастанием флуктуации потенциала  $V_z(z)$  в плоскости роста.

## **В заключении** сформулированы основные результаты диссертации:

1. Перестройка фононного спектра, связанная с упорядочением, приводит к проигрышу в колебательной энергии системы, и, следовательно, к понижению эффективной обменной константы взаимодействия ( $J^*(T) < E_m$ ). Таким образом, колебания (при  $g_{AB} > g_{AA}$ ) подавляют тенденцию сплава к упорядочению и, наоборот, способствуют кластерообразованию.

2. В рамках нашей модели наблюдается изменение температуры фазового перехода как при упорядочении так и при кластерообразовании. Причем сдвиг критической температуры относительно температуры перехода в модели без учета атомных колебаний, растет с увеличением соотношения между силовыми константами. В случае упорядочения, данный результат совпадает с результатом, предсказанным теорией среднего поля и рядом экспериментальных работ.

3. Результаты расчетов показывают, что наличие внешнего колебательного возбуждения может либо усилить, либо подавить эффект, связанный с учетом только

собственных колебаний атомов. Это позволяет сделать вывод о том, что меняя частоту и мощность внешнего воздействия, можно влиять на стабильность системы при данной температуре, увеличивая или уменьшая тем самым, тенденцию к упорядочению или кластерообразованию.

4. Решение микрокинетического уравнения для изломов на шероховатой ступени показывает, что возникновение диффузии вдоль ступени стабилизирует форму ступени, делая ее менее извилистой, что может быть удобным при декорировании ступени атомами другого сорта.

5. На основе предложенной модели зародышеобразования на террасах объяснены такие экспериментальные результаты, как резко немонотонная зависимость концентрации дефектов упаковки от угла скола вицинальной грани, свидетельствующая о смене механизма роста, и выявлена область параметров, где оба механизма роста (движение ступеней и зародышеобразование) действуют одновременно.

6. На основании результатов расчетов уровней размерного квантования в InGaAs/GaAs квантовых ямах с реалистическим (т.е. полученным методом Монте-Карло моделирования) профилем состава, сделаны выводы о влиянии параметров исходной ростовой грани и процесса роста на оптические свойства структуры.

### Список цитируемой литературы

1. Гетероструктуры с квантовыми точками: получение, свойства, лазеры. Обзор / Н.Н. Леденцов, В.М. Устинов, В.А. Щукин, П.С. Копьев, Ж.И. Алферов, Д. Бимберг // ФТП – 1998. - Т.32. - № 4 - С.385-410.
2. Эффекты упорядочения наноструктур в системе Si/Ge<sub>0.3</sub>Si<sub>0.7</sub>/Ge при молекулярно пучковой эпитаксии / Г.Э. Цырлин, В.А. Егоров, Л.В. Соколов, Р. Werner // ФТП – 2002. - Т.36 - В.11. - С. 1379-1383.
3. Ag-induced zero- and one-dimensional nanostructures on vicinal Si(111) / J. Kuntze, A. Mugarza, and J. E. Ortega // Appl. Phys. Lett. - 2002. -V. 81 - N 13 – P. 997.
4. Методы роста Монте-Карло в статистической физике. / Биндер К. // Москва: Мир, 1982.
5. Vibrational entropy of ordered and disordered Ni<sub>3</sub>Al / L. Anthony, J.K. Okamoto, B. Fultz // Phys. Rev. Lett – 1993 - V.70 - №8 - P.1128-1130.
6. Vibrational properties of a 2D Ising alloy / M.I. Vasilevskiy, O.V. Baranova, S.V. Stroganova // Computer Physics Communications – 1996 – V. 97 - p. 199-204.
7. Extension of the Ising model for calculations on order-disorder phenomena in alloys by allowing for atomic vibrations / H. Bakker, C. Tuijn // J. Physic C: Solid State Phys. – 1986. - V.19 - P.5585-5589.
8. The Influence of the vibrational entropy on the specific heat of the order-disorder transition in alloys / C. Tuijn, H. Bakker // Phys. Stat. Sol. (B) – 1989 – V.155 – P. 107.
9. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. / Д.В. Хеерман // Москва: Наука, 1986.
10. The effect of vibrational degrees of freedom on the phase transition in a 2D Ising model / S.V. Stroganova, M.I. Vasilevskiy, O.V. Vikhrova // Physica A – 1999 - V.274 - P.367-373.

11. Управление фазовым равновесием в полупроводниковом твердом растворе путем воздействия на его колебательные степени свободы / С.В. Хазанова, М.И. Василевский // Вестник ННГУ, сер. Физическая – 2003 - В. 1(6) - С. 131-138.
12. MBE growth physics: application to device technology / M.A.Herman, H. Sitter // Microelectronics Journal – 1996 - V.27. - P.257-296.
13. Non-equilibrium microstructure of (110) vicinal surface of Si during MBE / M.I. Vasilevskiy, A.Yu. Andreev, V.P. Kuznetsov, S.V. Stroganova, H. Sitter // Appl. Surf. Sci. – 1997. – V.112 - P. 191-197.
14. A microkinetic model for doping of silicon layers during molecular-beam epitaxy / M.I. Vasilevskiy, A.Y. Andreev, V.P. Kuznetsov // Surf. Sci. – 1993 - V.297 - P.151-161.
15. Optical study of segregation effects on the electronic properties of molecular-beam-epitaxy grown (In,Ga)As/GaAs quantum wells / P. Disseix, J. Leymarie, A. Vasson et al // Phys. Rev. B - 1997. – V. 55 – P. 2406.
16. Сегрегация индия при выращивании квантовых ям InGaAs/GaAs в условиях газофазной эпитаксии / Ю.Н. Дроздов, Н.В. Байдусь, Б.Н. Звонков и др. /ФТП - 2003. – в. 37 – P. 203.
17. Reaction-limited island nucleation in molecular beam epitaxy of compound semiconductors / P. Kratzer and M. Scheffler // Phys. Rev. Lett. – 2002. – V.88 - № 3 – P. 036102-1 -036102-4.
18. First-principles studies of kinetics in epitaxial growth of III-V semiconductors / P. Kratzer, E. Penev, and M. Scheffler // Appl. Phys. A - 2002 – V.75 – P.79 - 88 .
19. Influence of the temperature and excitation power on the optical properties of InGaAs/GaAs quantum wells grown on vicinal GaAs(001) surfaces / S. Martini, A. A. Quivy, A. Tabata, et al // J. Appl. Phys. - 2001- V.90 - №5 - P.2280.

### **Публикации по теме диссертации**

Личное участие соискателя отражено также в 7 опубликованных научных статьях и 16 тезисах докладов конференций, в том числе в изданиях, рекомендованных ВАК:

- A.1. Баранова, О.В. Спектроскопия фононов в полупроводниковых твердых растворах замещения как метод исследования ближнего порядка / О.В. Баранова М.И. Василевский, С.В.Строганова // Известия АН. Сер. физическая – 1994. - Т.58. – В.7 - С.101-104.
- A.2. Vasilevskiy, M.I. Short-range order and micro-inhomogeneities in  $Cd_xHg_{1-x}Te$ , studied by means of FIR and Raman spectroscopies / M.I.Vasilevskiy, O.V.Baranova, Z.F.Krasil'nik, D.A.Rakhlin and S.V.Stroganova // Journal of Crystal Growth. – 1996. - Vol. 159. - P.1108-1111.
- A.3. Baranova, O.V. Vibrational properties of a 2D pseudobinary Ising alloy / O.V.Baranova, M.I.Vasilevskiy, S.V.Stroganova // Computer Physics Communications. – 1996. - Vol. 97. - P.199-204.
- A.4 Vasilevskiy, M.I. Non-equilibrium microstructure of (110) vicinal surface of Si during MBE / M.I.Vasilevskiy, A.Yu.Andreev, V.P.Kuznetsov, S.V.Stroganova, and H.Sitter // Appl. Surf. Sci. – 1997. – Vol.112. - P.191-197.



- A.5. Stroganova, S.V. The Effect of vibrational degrees of freedom on the phase transition in a 2D Ising model / S.V.Stroganova, M.I.Vasilevskiy, O.V.Vikhrova // *Physica A*. – 1999. – Vol. 274. P.367-373.
- A.6. Василевский, М.И. Влияние колебательных степеней свободы на критическое поведение твердых растворов / М.И.Василевский, С.В.Хазанова // *Вестник ННГУ.Сер. Физика твердого тела*. – 2000. -В.1(3), С.114-119.
- A.7. Хазанова, С.В. Управление фазовым равновесием в полупроводниковом твердом растворе путем воздействия на его колебательные степени свободы / С.В. Хазанова, М.И.Василевский // *Вестник ННГУ.Сер.Физика твердого тела*. – 2003. – В.1(6). - С.131-138.
- A.8. Баранова, О.В. Спектроскопия фононов в полупроводниковых твердых растворах замещения как метод исследования ближнего порядка / О.В.Баранова, М.И.Василевский, С.В.Строганова // *Тезисы докладов I Российской конференции по физике полупроводников (Нижний Новгород, 10-14 сентября 1993 г.)*. – 1993. - С.200.
- A.9. Vasilevskiy, M.I. Short-range order and microinhomogeneities in  $Cd_xHg_{1-x}Te$ , studied by means of FIR and Raman spectroscopie / M.I.Vasilevskiy, O.V.Baranova, Z.F.Krasil'nik and S.V.Stroganova // *Proc. of 7-th International Conference on II-VI Compounds and Devices (Edinburg, Scotland, UK August 13-18 1995)*. - 1995. - TH-P25.
- A.10. Baranova, O.V. Vibrational properties of a 2D pseudobinary Ising alloy/ O.V.Baranova, M.I.Vasilevskiy, S.V.Stroganova // *Proc. of 10-th Summer School GPG EPS (Skalsky Dvur, Czech Republic September 5-14 1995)*. – 1995.
- A.11. Баранова, О.В. Модельный расчет фононных спектров псевдобинарных твердых растворов с ближним порядком / О.В.Баранова, М.И.Василевский, С.В.Строганова // *Тезисы докладов 2-ой Российской конференции по физике полупроводников (Зеленогорск, 26 февраля -1марта 1996г.)*. -1996. - С.80.
- A.12. Василевский, М.И., Неравновесная структура грани кристалла выращиваемого молекулярно лучевой эпитаксией на vicинальной поверхности / М.И.Василевский, А.Ю.Андреев, В.П.Кузнецов, С.В.Строганова // *Тезисы докладов конференции: «Структура и свойства кристаллических и аморфных материалов» (Нижний Новгород 12-14 марта 1996г.)*. – 1996. - С.34.
- A.13. Василевский, М.И., Влияние атомных колебаний на фазовый переход упорядочения бинарного изинговского сплава на квадратной решетке / М.И.Василевский, С.В.Строганова // *Тезисы докладов конференции: «Структура и свойства кристаллических и аморфных материалов» (Нижний Новгород, 12-14 марта 1996)*. – 1996. - С. 89.
- A.14. Vasilevskiy, M.I., Non-equilibrium microstructure of (110) vicinal surface of Si during MBE / M.I. Vasilevskiy, A.Yu. Andreev, V.P. Kuznetsov, S.V. Stroganova and H. Sitter // *Proc. of International Conference on Atomic-Layer-Epitaxy and Related Surface Processes - ALE-4 (Johannes Kepler University, Linz, Austria, July 29 -31 1996)*. – 1996. - PSi/Ge1.
- A.15. Василевский, М.И. Учет колебательных степеней свободы в модели Изинга на квадратной решетке / М.И.Василевский, С.В.Строганова // *Тезисы докладов конференции: Вторая Нижегородская сессия молодых ученых, 21-25 апреля, г.Нижний Новгород – 1997* -
- A.16. Vasilevskiy, M.I. The Effect of vibrational degrees of freedom on the phase transition in 2D Ising model / M.I.Vasilevskiy, O.V.Vikhrova, S.V.Stroganova // *Abstr.*

Europhys. Conf on Computational Physics (Granada, Spain Sept.2-5 1998). Europhys. Conf. Abstr. Series (ed. R.M.Pick) - 1998 - Vol.22F. - P.331.

А.17. Василевский, М.И. Влияние колебательных степеней свободы на критическое поведение твердых растворов / М.И.Василевский, С.В.Хазанова // Тезисы докладов конференции «Структура и свойства твердых тел» ( Нижний Новгород 27-28 сентября 1999г.). – 1999 – С. 53-54.

А.18. Хазанова, С.В. Влияние колебаний атомов на фазовый переход порядок-беспорядок в твердых растворах / С.В.Хазанова, М.И.Василевский, О.В.Вихрова // Избранные труды открытого конкурса молодых ученых, (Нижний Новгород 7 июня 1999). - 1999. - С.103-108.

А.19. Василевский, М.И. О возможности воздействия на ближний и дальний порядок в твердых растворах используя колебательное возбуждение / М.И.Василевский, С.В.Хазанова // Тезисы докладов конференции (Шестая Нижегородская сессия молодых ученых (Нижний Новгород 26-30 апреля) – 2001. - С.90.

А.20. Василевский, М.И. Влияние колебательного возбуждения на ближний порядок в твердых растворах / М.И.Василевский, С.В.Хазанова // Труды 5 – ой научной конференции по радиофизике, посв. 100-летию А.А.Андропова (г.Нижний Новгород 7 мая 2001г) – 2001. – С. 77-78.

А.21. Василевский, М.И. Управление фазовым равновесием в полупроводниковом твердом растворе путем воздействия на его колебательные степени свободы / М.И. Василевский, С.В. Хазанова // Тезисы VI Всероссийского семинара ННГУ по физическим и химическим основам ионной имплантации, 15-17 октября 2002г., г. Нижний Новгород, с. 85.

А.22. Хазанова, С.В. МК-моделирование поверхностной сегрегации в квантовых структурах InGaAs/GaAs с учетом эффекта рассогласования решеток / С.В. Хазанова // Тезисы VII Всероссийского семинара ННГУ по физическим и химическим основам ионной имплантации (г. Нижний Новгород 26-29 октября 2004 г.) - 2004. –С.113.

А.23. Хазанова, С.В. Монте-Карло моделирование эффекта сегрегации при выращивании напряженных квантовых гетероструктур InGaAs/GaAs / С.В.Хазанова, М.И.Василевский // Тезисы XI Международного симпозиума по нанофизике и нанoeлектронике, ( г. Нижний Новгород 10-14 марта 2007 г.) – 2007 - С. 321-322.