

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ XV РОССИЙСКОЙ НАУЧНОЙ СТУДЕНЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ

18–20 мая 2016 г., г. Томск, Россия

Томск
Издательский Дом Томского государственного университета
2016

Кинетика образования и движения ступеней на боковых гранях нитевидного нанокристалла при наличии барьера Эрлиха–Швёбеля

К.А. Кузнецов

Национальный исследовательский Томский государственный университет,
634050, г. Томск, Россия
E-mail: chif993@mail.ru

Kinetics of formation and propagation of steps on the side-walls of nanowires: the role of the Ehrlich-Schwoebel barrier

K.A. Kuznetsov

National Research Tomsk State University, 634050, Tomsk, Russia
E-mail: chif993@mail.ru

Полупроводниковые нитевидные нанокристаллы (ННК) представляют большой интерес в качестве функциональных элементов современной наноэлектроники и нанопотоники [1, 2]. Синтез ННК с контролируемыми свойствами требует глубокого понимания процессов образования и роста ННК. Одной из актуальных проблем является разработка согласованных моделей аксиального и латерального роста ННК, позволяющих выявить основные факторы, определяющие форму ННК.

Известно, что наличие потенциального барьера для присоединения адатомов к ступени с верхней террасы (барьер Эрлиха–Швёбеля [3, 4]) играет важную роль в развитии рельефа поверхности при росте кристалла [5]. Для исследования влияния барьера Эрлиха–Швёбеля на кинетику образования и движения ступеней на боковой поверхности ННК проведено соответствующее обобщение аналитической модели латерального роста ННК, предложенной в работе [6]. С использованием обобщенных аналитических выражений для скоростей перемещения ступеней, скорости аксиального роста ННК и концентрации адатомов вблизи основания ННК проведено численное моделирование роста ННК.

Численное моделирование проводилось путем интегрирования уравнений для скоростей перемещения ступеней и для скорости удлинения ННК. При выборе параметров моделирования использовались экспериментальные значения, соответствующие росту ННК InP в системе молекулярно-пучковой эпитаксии с участием металлоорганических соединений [7]. Основными варьируемыми параметрами модели являлись величина барьера Эрлиха–Швёбеля, E_{ES} , и пересыщение на ступени относительно вершины ННК, σ_t . Зависимость высоты ННК от времени и траектории ступеней на боковой поверхности ННК при различных E_{ES} и σ_t представлена на рис. 1.

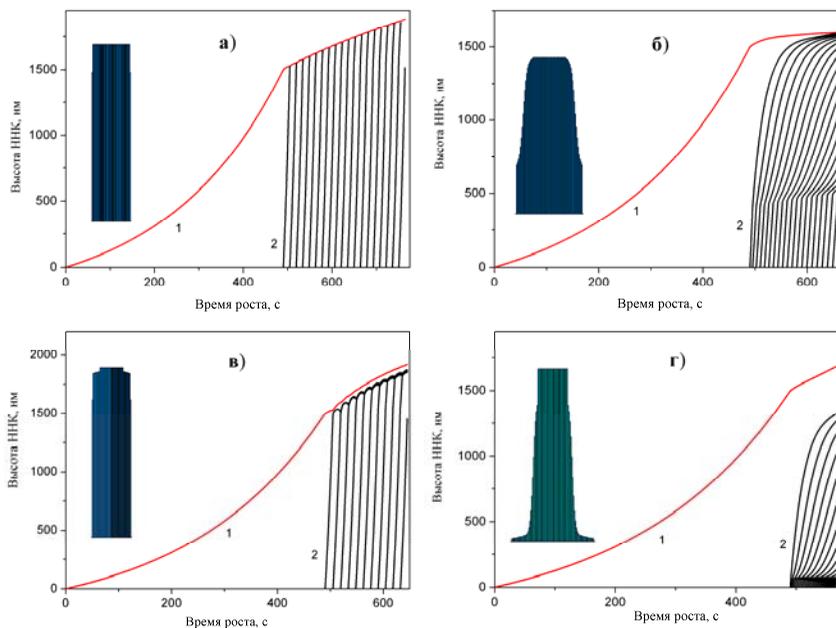


Рис. 1. Зависимость высоты ННК от времени (кривые 1) и траектории ступеней на боковой поверхности ННК (кривые 2): $a - \sigma_t = 0,01, E_{ES} = 0$; $б - \sigma_t = 0,01, E_{ES} = 0,5$;

$$в - \sigma_t = 0,08, E_{ES} = 0; г - \sigma_t = 0,25, E_{ES} = 0,55$$

В соответствии с выводами из работы [6] при слабом стоке на вершине ННК (при малом σ_t) и в отсутствии барьера Эрлиха–Швёбеля ступени сливаются с вершиной. При этом ННК растет с сохранением цилиндрической формы (рис.1, *a*). Наличие барьера Эрлиха–Швёбеля приводит к увеличению концентрации адатомов за фронтом движущейся ступени и, следовательно, к ускоренному образованию новых ступеней у основания ННК. Поэтому при достаточно большом E_{ES} частота образования ступеней превосходит частоту их слияния с вершиной ННК. В результате ННК принимает куполообразную форму (рис. 1, *б*).

При наличии сильного стока на вершине ННК (достаточно большом σ_t) ступени не сливаются с вершиной, а образуют эшелон, движущийся в направлении вершины (рис. 1, *в*). Данный эффект обусловлен торможением ступени, приближающейся к вершине ННК, из-за увеличивающегося

обменного потока атомов между ступенью и вершиной [6]. Ускоренное образование ступеней при наличии барьера Эрлиха–Швёбеля приводит к формированию эшелона ступеней на большем расстоянии от вершины, чем в отсутствие барьера. Это способствует отрыву ведущей ступени от эшелона из-за более интенсивного встраивания адатомов в ступень с нижней террасы. В результате при достаточно больших σ_i и E_{ES} формируются ННК с большой плотностью ступеней у основания, с относительно регулярно расположенными ступенями в средней части боковой поверхности и с отсутствием ступеней у вершины. Похожие по форме ННК наблюдались при росте ННК InP [7].

Литература

1. Дубровский В.Г., Цырлин Г.Э., Устинов В.М. Полупроводниковые нитевидные нанокристаллы: синтез, свойства, применения // ФТП. 2009. Т. 43, № 12. С. 1585–1628.
2. Yang P., Yan R., Fardy M. Semiconductor Nanowire: What's Next? // Nano Lett. 2010. V. 10. P. 1529–1536.
3. Ehrlich G., Hudda F.G. Atomic view of surface self-diffusion: tungsten on tungsten // J. Chem. Phys. 1966. V. 44. P. 1039–1049.
4. Schwoebel R.L., Shipsey E.J. Step motion on crystal surface // J. Appl. Phys. 1966. V. 37. P. 3682–3686.
5. Markov I.V. Crystal growth for beginners, Fundamentals of Nucleation, Crystal Growth and Epitaxy. Singapore : World Scientific, 2003.
6. Filimonov S.N., Hervieu Yu.Yu. Model of step propagation and step bunching at the sidewalls of nanowires // J. Cryst. Growth. 2015. V. 427. P. 60–66.
7. Greenberg Y., Kelrich A., Calahorra Y., Cohen S., Ritter D. Tapering and crystal structure of indium phosphide nanowires grown by selective area vapor liquid solid epitaxy // J. Cryst. Growth. 2014. V. 389. P. 103–107.