УДК 51-73: 519.245: 538.971

Монте-карло моделирование начальных этапов роста планарных нанопроволок GaAS с использованием пленок SiOx

*Манцурова Снежана Викторовна, аспирант1, snezhana@isp.nsc.ru, +7 (383) 333-14-75*

*Шварц Наталия Львовна, к.ф.-м.н., доцент2, старший научный сотрудник1*

*nataly.shwartz@gmail.com, +7 (383) 333-14-75*

*1Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, Новосибирск, Россия*

*2Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск, Россия*

Аннотация: В работе выполнено моделирование начальных этапов самокаталитического роста GaAs нанопроволок на подложках GaAs (111)A, покрытых пленкой SiOx, методом Монте-Карло. Проанализировано влияние толщины оксида на смачиваемость галлиевыми каплями. Продемонстрировано влияние морфологии и свойств оксида на ориентацию GaAs нанопроволок.

Ключевые слова: GaAs, нанопроволоки, Монте-Карло, моделирование.

Введение

Наноструктуры GaAs служат перспективными компонентами для создания опто- и наноустройств. Одним из механизмов роста нанопроволок (НП) GaAs является механизм пар-жидкость-кристалл (ПЖК) с использованием капель галлия. Экспериментально показано, что для самокаталитического роста НП на поверхности GaAs необходимо наличие маскирующего слоя – пленки SiO2 [1]. На сегодняшний день существует большое количество работ, показывающих влияние покрытия SiOx (1 < x < 2) на ориентацию и морфологию непланарных GaAs НП, выращенных самокаталитическим способом как на кремниевой подложке [2], так и на GaAs [1]. Экспериментальные данные по самокаталитическому росту планарных НП GaAs, которые хорошо совместимы с планарной технологией создания интегральных схем, в настоящее время отсутствуют. Ранее были получены результаты по росту планарных НП GaAs на поверхности структурированной пленки-маски с помощью моделирования методом Монте-Карло [3]. Данная работа посвящена исследованию влияния морфологии и свойств пленок SiOx на начальные этапы роста планарных НП GaAs по механизму ПЖК с помощью моделирования методом Монте-Карло.

Монте-Карло моделирование

Моделирование самокаталитического роста GaAs планарных нанопроволок проводилось в программном пакете SilSim3D, основанном на кинетической решеточной Монте-Карло модели [4]. При моделировании начальных этапов роста НП рассматривалась 6-компонентная система, состоящая из мышьяка в атомарном и молекулярном виде (As, As2), галлия в твердом и жидком состоянии (Ga(s), Ga(l)), частиц слоя маски М и частиц летучего компонента Mv. Элементарные процессы модели включают в себя адсорбцию и десорбцию Ga(s) и As2, диффузию компонентов по поверхности, распад и образование As2, растворение Ga(s), диффузию As в жидком галлии, растворение слоя маски М каплей галлия с образованием летучего компонента Mv, диффузию Mv в капле Ga, кристаллизацию GaAs. Вероятность каждого элементарного процесса определяется экспоненциальной зависимостью от его энергии активации.

В работе проведено исследование влияния свойств пленки SiOx на смачиваемость каплями Ga. Варьируя энергии связи, отвечающие за смачиваемость подложки каплей, были получены контактные углы 76°, 100° и 116°, соответствующие экспериментальными значениям на пленках оксида толщиной 0.6, 1.2, 1.6 нм [2]. Пленки SiOx покрывают подложку GaAs, которая играет роль затравочного кристалла. Рост нанопроволоки начинается, когда капля протравит пленку и коснётся подложки GaAs. Рассматривались два варианта роста GaAs нанопроволок: с формированием капель на поверхности SiOx с помощью предосаждения Ga и с предварительно сформированными каплями в сквозных отверстиях в слое SiOx. Выяснено, что в случае предосаждения Ga капли самостоятельно протравливают пленку, формируя ямку и смачивая поверхность SiOx, что приводит к росту планарной нанопроволоки (Рис.1 (а)). В сквозном отверстии капля может не касаться поверхности SiOx, что приводит к росту наклонной нанопроволоки (Рис. 1 (б)). Вероятность планарного роста определяется не только свойствами и морфологией пленки SiOx, но и ростовыми условиями (температурой и скоростями осаждения Ga и As2).

Выводы

С помощью Монте-Карло моделирования проанализировано влияние свойств и начальной морфологии пленки SiOx и условий осаждения Ga и As2 на направления роста GaAs нанопроволок на подложке SiOx/GaAs(111)A. Показано, что предосаждение галлиевых капель и хорошая смачиваемость поверхности SiOx жидким галлием способствует росту планарных НП.

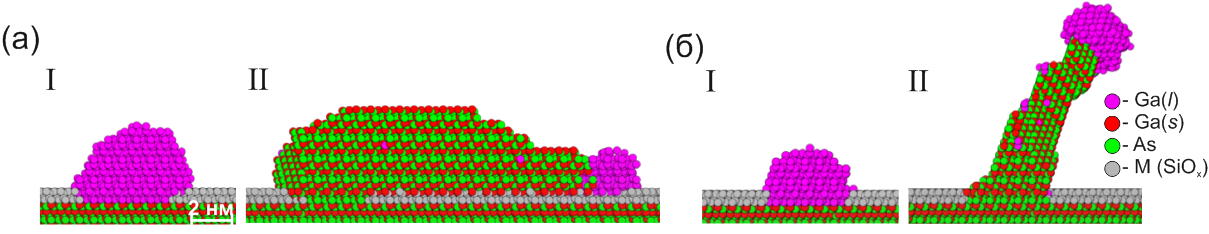


Рис. 1. Фрагменты модельных подложек при самокаталитическом росте GaAs нанопроволок со сформированой каплей в процессе предосаждения Ga (а) и с предварительно сформированной каплей в сквозном отверстии в SiOx (б): I – сечение капель перед ростом, II – сечение нанопроволок. *T*=890 K, *F(Ga)*=0.5 МС/с, *F(As2)*=5 МС/с.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект № FWGW-2022-0008).

Список использованных источников

1. Fontcuberta i Morral A. et al. Nucleation mechanism of gallium-assisted molecular beam epitaxy growth of gallium arsenide nanowires // Appl. Phys. Lett., 2008. Vol. 92, p. 063112.

2. Matteini F. et al. Wetting of Ga on SiOx and Its Impact on GaAs Nanowire Growth // Cryst. Growth Des., 2015. Vol. 15, pp. 3105-3109.

3. Spirina A. et al. Initial Stages of Planar GaAs Nanowire Growth - Monte Carlo Simulation // Semiconductors, 2019. Vol. 53, pp. 2125-2128.

4. Карпов А.Н. и др. Решеточная модель Монте-Карло для изучения процессов формирования наноструктур // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии, 2014, 15, 388.

MONTE CARLO SIMULATION OF THE INITIAL STAGES OF PLANAR GAAS NANOWIRE GROWTH ON SIOX FILMS

S.V.Mantsurova, N.L.Shwartz

Abstract: The initial stages of self-catalyzed GaAs nanowire growth on GaAs (111)A substrates coated with SiOx films was simulated by Monte Carlo. The effect of oxide thickness on the wettability by gallium droplets was analyzed. The influence of oxide morphology and properties on the orientation of the GaAs nanowires was demonstrated.

Key words: GaAs, nanowires, Monte Carlo, simulation.