

Поверхностная энергия и кристаллическая структура нитевидных нанокристаллов полупроводниковых соединений III–V

© Н.В. Сибирёв¹, М.А. Тимофеева², А.Д. Большаков¹, М.В. Назаренко¹, В.Г. Дубровский^{1,3}

¹ Санкт-Петербургский физико-технологический научно-образовательный центр РАН,
Санкт-Петербург, Россия

² Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,
Санкт-Петербург, Россия

³ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: nicksibirev@yandex.ru

(Поступила в Редакцию 9 ноября 2009 г.)

Предложена теоретическая модель расчета поверхностной энергии кристаллов в приближении ближайших соседей. Рассчитана поверхностная энергия для различных граней кристаллов полупроводников III–V с кубической и гексагональной структурами. На основе полученных данных рассмотрен эффект образования гексагональной вюрцитной фазы в нитевидных нанокристаллах полупроводниковых соединений III–V. Приведены оценки для критического радиуса фазового перехода в нитевидных нанокристаллах III–V.

Работа выполнена при финансовой поддержке различными грантами РФФИ, Президиума РАН, Президиума СПбНЦ РАН и Федерального агентства по науке и инновациям.

1. Введение

Нитевидные нанокристаллы (ННК) представляют собой анизотропные непланарные нанообъекты, перпендикулярные поверхности подложки, с типичным перечным размером 10–100 нм и длиной до десятков μm [1]. Отличие физических свойств ННК от объемных материалов связано с размерными эффектами, влияющими на форму, кристаллическую и энергетическую структуру ННК. Уникальные морфологические, структурные, оптические и транспортные свойства определяют перспективность ННК для применений в различных устройствах нанофотоники [2] и наноэлектроники [3]. Фундаментальные исследования процессов роста и физических свойств одномерных ННК также представляют большой интерес [1]. Полупроводниковые ННК выращивают методами молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ), газофазной эпитаксии (ГФЭ) или иными эпитаксиальными методами на поверхностях, активированных металлическими каплями катализатора роста (например, Au) [1,4,5]. Общепризнанным механизмом формирования ННК считается рост по трехфазной схеме пар–жидкость–кристалл (ПЖК) [4–13]. При росте по схеме ПЖК полупроводниковый материал (например, Si или GaAs) осаждается на поверхность из газообразной среды (парогазовой смеси или молекулярных пучков), поступает в жидкую каплю пересыщенного раствора полупроводника и катализатора (Au–Si, Au–GaAs) и затем кристаллизуется на поверхности раздела жидкость–кристалл под каплей. Кинетические механизмы роста по схеме ПЖК зависят от конкретной ростовой технологии, размеров капель и условий осаждения. В частности, при выращивании методом МПЭ ННК соединений III–V основной вклад в скорость роста дают адатомы, ми-

трирующие в каплю с боковой поверхности, а также с поверхности подложки [6,8,10–14].

Хорошо известно, что все полупроводниковые соединения III–V, кроме нитридных, в объемной форме имеют стабильную кубическую кристаллическую решетку типа цинковой обманки. Образование гексагональной вюрцитной фазы при обычных условиях практически невозможно. Например, в случае GaAs разность энергий образования гексагональной и кубической фаз по разным оценкам составляет величину от 8.3 [15] до 12.4 meV на атом [16]. Одним из наиболее удивительных эффектов, происходящих при росте ННК III–V, является их преимущественное формирование в гексагональной вюрцитной фазе (эффект обычно наблюдается для достаточно тонких ННК радиусом несколько десятков нм [7]). Формирование гексагональной структуры обнаружено экспериментально для большинства ННК III–V (GaAs, InAs, GaP, InP и др.) при различных ростовых технологиях (как при каталитическом росте на частицах Au, так и в отсутствие катализатора) на подложках III–V и Si(111) [1,17–22].

Согласно имеющимся теоретическим представлениям [1,11,15,16,18,21,22], обсуждаемый эффект объясняется конкуренцией поверхностного и объемного вкладов в энергию образования ННК и спецификой механизмов двумерного роста на вершине ННК. Определяющую роль играет нуклеация на тройной линии существования твердой, жидкой и газообразной фаз [22,23]. Для достаточно тонких ННК выигрыш в поверхностной энергии зародыша на границе с паром приводит к уменьшению активационного барьера нуклеации гексагональной фазы в ННК, что делает образование вюрцита энергетически выгодным. Необходимым параметром для определения критического радиуса перехода между политипами в ННК III–V и соответствующей

оптимизации условий эпитаксиального роста для контроля кристаллической структуры является поверхностная энергия боковых граней ННК в кубической и гексагональной фазах. Экспериментальные данные по значениям указанных энергий для гексагональной фазы фактически отсутствуют, что объясняется объективными трудностями создания стабильных кристаллов с решеткой вюрцита и их измерений. Поэтому построение теоретических моделей поверхностной энергии различных граней ННК III–V является весьма актуальной задачей. В настоящей работе рассматривается макроскопическая модель поверхностной энергии, приводятся численные оценки поверхностных энергий для различных граней, а также характерные значения критического радиуса, ниже которого следует ожидать преимущественное формирование гексагональной вюрцитной фазы ННК III–V.

2. Расчеты поверхностной энергии

Рассматриваемая модель основана на представлениях об идеальной кристаллической решетке [24,25]. Упрощенный вариант модели использовался ранее в работе [17]. Рассмотрим поверхность кристалла, возникающую при его разделении на две части плоским сечением, параллельным одной из кристаллических граней. Отношение энергии, затраченной на такое разделение, к площади с образовавшейся поверхностью равно значению удельной поверхностной энергии для данной грани [24]

$$\gamma_{hkl} = \frac{\varphi_{hkl}}{S_{hkl}}. \quad (1)$$

Здесь φ_{hkl} — энергия разделения для сечения, лежащего в плоскости с кристаллографическими индексами (hkl) , S_{hkl} — площадь образованной поверхности. Для оценки энергии φ_{hkl} воспользуемся приближением ближайших соседей [17]: будем считать, что энергия, затраченная на отрыв атомов, равна энергии оборванных связей на новой поверхности. Реконструкция поверхности при этом не учитывается. Предполагаем, что существенны только связи с первыми и вторыми ближайшими соседями, лежащими в первой и второй координационных

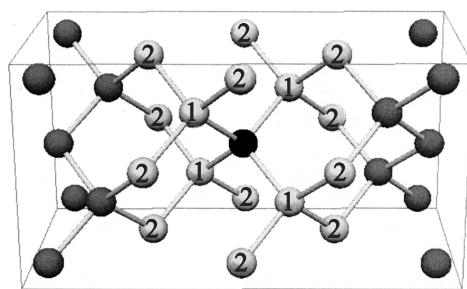


Рис. 1. Гранецентрированная кубическая решетка: соседи первого и второго порядка для центрального атома (показанного черным шаром) отмечены соответствующими цифрами, остальные атомы выделены темно-серым цветом.

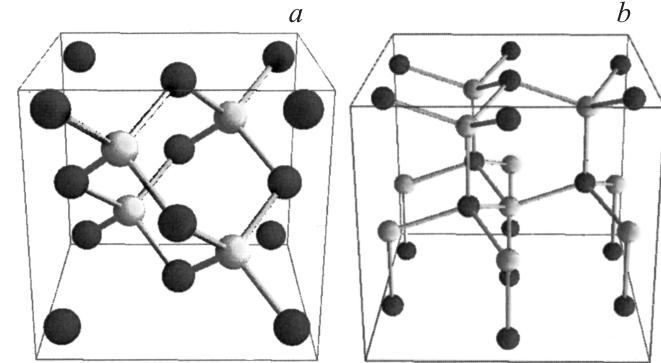


Рис. 2. Гранецентрированная кубическая (CUB) решетка типа цинковой обманки (a) и гексагональная (HEX) решетка вюрцита (b).

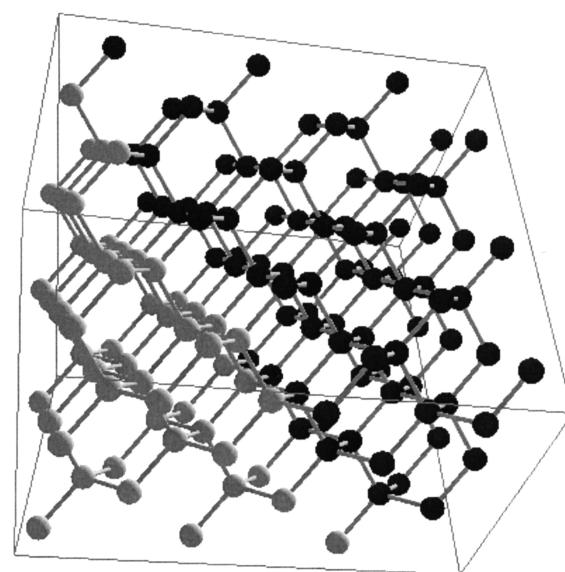


Рис. 3. Рассеченная кубическая решетка, срез (211).

сферах соответственно (рис. 1). В рамках указанных выше приближений нетрудно записать выражение для энергии обрыва связей, проходящих через данную плоскость поверхности, в виде

$$\varphi_{hkl} = n_1\varphi_1 + n_2\varphi_2. \quad (2)$$

Здесь n_1 и n_2 — число первых и вторых соседей, а φ_1 и φ_2 — соответствующие энергии взаимодействия между первыми и вторыми ближайшими соседями. Таким образом, для расчета поверхностной энергии грани по формулам (1), (2) необходимо знать число оборванных связей между соседями первого и второго порядка, приходящееся на единицу площади грани.

Подсчет числа оборванных связей для атома, лежащего на поверхности заданной ориентации, производится следующим образом. Все атомы, принадлежащие данной грани, получаются путем трансляции элементарной пространственной ячейки. Как видно из рис. 2, поверх-

Таблица 1. Расчет числа оборванных связей

Тип кристаллической решетки	Грань	Количество оборванных связей	
		Соседи первого порядка	Соседи второго порядка
CUB	(100)	0.75	1
	(110)	0.53	3.18
	(111)	0.43	2.60
	(211)	0.61	3.06
	(221)	0.50	3.00
	(301)	0.71	3.32
	(311)	0.68	3.17
	(501)	0.74	3.24
HEX	(1120)	0.53	3.18
	(1100)	0.46	2.76
	(1101)	0.61	3.25
	(1102)	0.63	3.15
	(0001)	0.43	2.60

ностные атомы могут занимать различное положение в элементарной ячейке. Число оборванных связей для атомов с одинаковым расположением относительно элементарной ячейки одинаково. Поэтому возможно использовать рассечение решетки на две части, одна из которых представляет оставшиеся в кристалле атомы, а вторая — атомы, „отрезанные“ в результате образования грани (hkl) или $(hklz)$.

Рассечение кубического кристалла гранью (211) показано на рис. 3. На полученном срезе (211) (рис. 4, a) находятся атомы, имеющие разное положение в элементарной ячейке. Поэтому грань разбивается на непересекающиеся множества атомов с одинаковым расположением в ячейке. Пример такого множества изображен на рис. 4, b. Подсчет числа оборванных связей производится для каждого множества отдельно. Полная энергия равна, очевидно, сумме поверхностных энергий всех множеств. Для определения площади, приходящейся на атом, строится ячейка Вигнера–Зейца для соответствующего множества атомов на грани [26]. При подсчете числа оборванных связей необходимо учитывать не только ато-

мы, непосредственно принадлежащие рассматриваемой грани, но и атомы в соседних плоскостях. Нами производились расчеты для всех плоскостей с нескомпенсированными связями. Количество плоскостей, дающих вклад в поверхностную энергию, зависит от индексов Миллера плоскости (hkl) и увеличивается с ростом h , k и l . Таким образом, подсчет числа оборванных связей усложняется в случае высокоиндексных граней, для которых требуется учет большего числа внутренних атомных плоскостей. В табл. 1 представлены результаты расчетов числа оборванных связей на единицу площади a^2 (a — постоянная кубической решетки), проведенных по изложенной выше методике для различных граней кубического и гексагонального кристаллов.

Для расчета поверхностной энергии по формулам (1), (2) необходимо также знать значения энергий связи между первыми и вторыми соседями φ_1 и φ_2 . Если энергия взаимодействия φ зависит только от расстояния между атомами r , то можно использовать линейную аппроксимацию $\varphi(r)$, построенную по значениям поверхностной энергии любых двух плоскостей с известным расстоянием между ними. Для определения величин φ_1 и φ_2 мы использовали данные работ [27,28] по поверхностным энергиям граней (100), (110) и (111) кубических кристаллов. Так как расстояния между первыми и вторыми ближайшими соседями для кубической и гексагональной решеток совпадают, энергии φ_1 и φ_2 для обеих фаз считались одинаковыми. Результаты расчетов поверхностных энергий по изложенной методике представлены в табл. 2. Расчеты производились для кубических и гексагональных кристаллов полупроводниковых соединений III–V (арсенидов, фосфидов и антимонидов) с гранями, перпендикулярными поверхности подложки (111). Данные грани соответствуют вертикальным ННК, растущим в направлении (111). Результаты расчета для первых соседей в случае граней (211) и (1100) совпадают с полученными ранее [17]. Видно, что расчетные значения достаточно хорошо соответствуют известным экспериментальным данным для кубической решетки [27,28].

3. Критические радиусы перехода между политипами в ННК III–V

Критические радиусы фазового перехода R_c от кубической (выше R_c) к гексагональной (ниже R_c) структуре ННК III–V рассчитывались на основе самосогласованной модели роста ННК, подробно изложенной в [29]. В стационарном режиме роста (при постоянном радиусе ННК R и пересыщении жидкого раствора в капле ξ) указанные величины связаны между собой условием материального баланса в капле [30]. Это позволяет определить пересыщение ξ и скорость роста ННК как функции радиуса при известных энергетических константах рассматриваемой системы материалов и условиях осаждения. Иллюстрация ростовой модели ННК

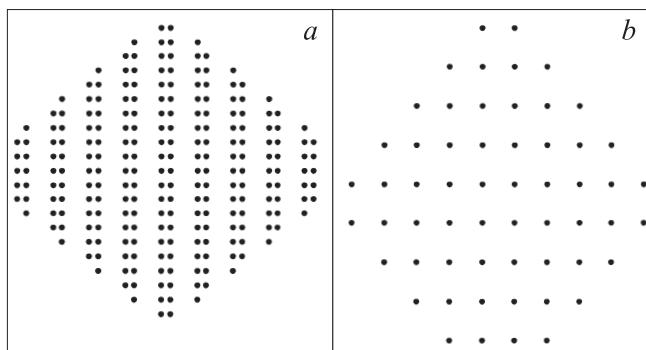


Рис. 4. a) Срез (211) кубического кристалла. b) Грань (211) с атомами, принадлежащими одному множеству.

Таблица 2. Поверхностные энергии кристаллов III–V

Материал	Решетка	Грань	Количество оборванных связей		Поверхностная энергия, J/m ²	
			первого порядка	второго порядка	эксперимент [27,28]	расчетное значение
GaAs	CUB	(100)	0.75	1	2.2	2.11
		(110)	0.53	3.18	1.5	1.543
		(111)	0.43	2.60	1.3	1.27
		(211)	0.61	3.06		1.79
		HEX	(2110)	0.53	3.18	1.543
		(1100)	0.46	2.76		1.3
	InAs	CUB	(100)	0.75	1	1.4
		(110)	0.53	3.18	1	1.06
		(111)	0.43	2.60	0.84	0.86
		(211)	0.61	3.06		1.19
		HEX	(2110)	0.53	3.18	1.06
AlAs	CUB	(100)	0.75	1	2.6	2.55
		(110)	0.53	3.18	1.8	1.86
		(111)	0.43	2.60	1.5	1.51
		(211)	0.61	3.06		2.11
		HEX	(2110)	0.53	3.18	1.86
		(1100)	0.46	2.76		1.6
	GaP	CUB	(100)	0.75	1	2.9
		(110)	0.53	3.18	2	2.06
		(111)	0.43	2.60	1.7	1.69
		(211)	0.61	3.06		2.36
		HEX	(2110)	0.53	3.18	2.06
InP	CUB	(100)	0.75	1	1.9	1.87
		(110)	0.53	3.18	1.3	1.38
		(111)	0.43	2.60	1.1	1.12
		(211)	0.61	3.06		1.56
		HEX	(2110)	0.53	3.18	1.38
		(1100)	0.46	2.76		1.19
	AlP	CUB	(100)	0.75	1	3.4
		(110)	0.53	3.18	2.4	2.44
		(111)	0.43	2.60	2	1.99
		(211)	0.61	3.06		2.79
		HEX	(2110)	0.53	3.18	2.44
AlSb	CUB	(100)	0.75	1	1.90	1.87
		(110)	0.53	3.18	1.30	1.38
		(111)	0.43	2.60	1.10	1.38
		(211)	0.61	3.06		1.56
		HEX	(2110)	0.53	3.18	1.38
		(1100)	0.46	2.76		1.19
	GaSb	CUB	(100)	0.75	1	1.60
		(110)	0.53	3.18	1.10	1.12
		(111)	0.43	2.60	0.91	0.91
		(211)	0.61	3.06		1.29
		HEX	(2110)	0.53	3.18	1.12
InSb	CUB	(100)	0.75	1	1.10	1.12
		(110)	0.53	3.18	0.75	0.85
		(111)	0.43	2.60	0.60	0.69
		(211)	0.61	3.06		0.95
		HEX	(2110)	0.53	3.18	0.85
		(1100)	0.46	2.76		0.73

приведена на рис. 5. Уравнение для ξ , полученное в [29] в случае адсорбционно-стимулированного роста, имеет вид

$$\frac{V_{\text{mono}}(\xi)}{1 + V_{\text{mono}}(\xi)/V_{\text{poly}}(\xi)} = \varepsilon \left[\Phi + 1 - (\xi + 1) \exp \left(\frac{R_{GT}}{R} \right) \right]. \quad (3)$$

Левая часть (3) равна приведенной скорости вертикального роста ННК G за счет двумерной нуклеации с учетом моноцентрических и полицеентрических актов нуклеации [30]. Скорость моноцентрического роста равна

$$V_{\text{mono}} = \frac{h}{\Omega_s} Z \left[2\sqrt{3}(R - \sqrt{3}r_*/2)^2 \exp(-F_C) + 6r_*(R - \sqrt{3}r_*/4) \exp(-F_{TL}) \right]. \quad (4)$$

Здесь $F(\xi) = a/\Delta\mu(\xi)$ — активационный барьер нуклеации в тепловых единицах, принимающий различные значения при нуклеации в центре границы раздела жидкость–кристалл (C) и на тройной линии (TL) [11,22]. Безразмерная величина $a = (3\sqrt{3}\Gamma^2\Omega_s h)/(k_B T)^2$ связана с эффективной поверхностной энергией зародыша $\Gamma = (1-x)\gamma_{sl} + x(\gamma_{wv} - \gamma_{lv} \sin\beta)$, γ_{sl} — поверхностная энергия на границе кристалл (s)–жидкость (l), γ_{wv} — поверхностная энергия боковых граней ННК (w) на границе с паром (v), зависящая от кристаллической фазы ННК (γ_{CUB} или γ_{HEX}), γ_{lv} — поверхностная энергия на латеральной границе жидкость (l)–ННК, x — доля периметра ННК на тройной линии ($x = 1/3$ для зародыша треугольной формы), β — контактный угол капли (рис. 5), k_B — постоянная Больцмана, T — температура поверхности, R — радиус окружности, вписанной в правильный шестиугольник (горизонтальный срез ННК). Разность химических потенциалов полупроводникового материала в жидкой фазе и в ННК (в единицах $k_B T$) есть

$$\Delta\mu(\xi) = \ln(\xi + 1) - \psi/k_B T - (\delta - 1)R_{GT}/R,$$

где ψ — разность объемных энергий образования гексагонального и кубического кристалла в расчете на пару из атома III и атома V группы [11,15–17], $\delta = \Omega_s/\Omega_l$ — отношение элементарных объемов в твердой (s) и жидкой (l) фазе, $R_{GT} = (2\gamma_{lv}\Omega_l \sin\beta)/(k_B T)$ — характерный радиус Гиббса–Томсона [11,29]. Предэкспоненциальные множители в (4) учитывают, что нуклеация в позиции TL возможна только в пределах площади кольца критического радиуса, а нуклеация в позиции C — на площади вершины ННК, за вычетом данного кольца. Критический радиус определяется выражением $r_*(\xi) = (2\sqrt{3}\Gamma\Omega_s)/[k_B T\Delta\mu(\xi)]$. Неравновесный фактор Зельдовича [18] равен $Z(\xi) = (\xi + 1) \ln^{1/2}(\xi + 1)/\sqrt{\pi}$. Скорость вертикального роста при полицеентрической нуклеации имеет вид [29]

$$V_{\text{poly}} = \left(\frac{Z\xi^2}{4\sqrt{3}} \right)^{1/3} \exp(-F_C/3), \quad (5)$$

где учитывается только нуклеация в положении C .

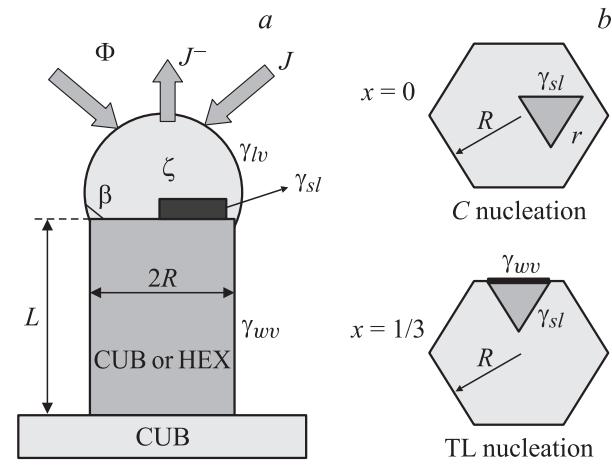


Рис. 5. Иллюстрация модели роста ННК. *a* — адсорбционный рост, *b* — двумерная нуклеация на вершине ННК в положениях *C* и *TL*. Определения параметров приведены в тексте.

Правая часть уравнения (3) представляет собой скорость роста, рассчитанную на основе уравнения баланса адсорбционных и десорбционных процессов на поверхности капли с учетом эффекта Гиббса–Томсона [11], увеличивающего скорость десорбции из капли при уменьшении R . Величина $\Phi = \exp(\Delta\mu_v) - 1$ есть пересыщение пара, $\Delta\mu_v$ — разность химических потенциалов пара и твердого тела в кубической фазе в единицах $k_B T$. Кинетический параметр ε определяется согласно [29]:

$$\varepsilon = \frac{\pi}{\sqrt{3}} \frac{(1 - \cos\beta)}{\sin^2\beta} \chi_l t_g J_{eq} \frac{\Omega_s}{h}, \quad (6)$$

где χ_l — эффективность пиролиза у поверхности капли в случае ГФЭ из металлогорганических соединений, t_g — микроскопическое время латерального роста зародыша, J_{eq} — равновесное значение потока из газовой фазы. Поскольку $(J_{eq}\Omega_s)/h$ есть равновесная скорость осаждения в монослоях в секунду (обычно величина менее 10^{-1} s^{-1} [18]), а время t_g лежит в пределах 10^{-7} – 10^{-4} s [18], значение величины ε должно быть очень мало.

Рассчитывая пересыщение ξ и скорость роста G как функцию радиуса R при заданных значениях ε , Φ , поверхностных энергий и энергетических констант материала отдельно для фаз цинковой обманки и вюрциита, из равенства $G_{\text{CUB}}(R) = G_{\text{HEX}}(R)$ можно определить кинетический радиус фазового перехода R_c , соответствующий 50% перемешиванию фаз. Гексагональная фаза доминирует при $R < R_c$, а кубическая фаза — при $R > R_c$. Для исследования критического радиуса перехода в случае GaAs–ННК данные вычисления проводились при различных значениях технологически контролируемого параметра Φ . Величина ε варьировалась в пределах от 10^{-8} до 10^{-4} при сохранении типичных значений скорости роста ННК $\sim 10 \text{ nm/s}$ (случай ГФЭ GaAs из паров TMGa и AsH₃ в атмосфере водорода

на поверхности GaAs(111)B, активированной Au, при $T = 460^\circ\text{C}$ [29]). Поверхностные энергии GaAs-ННК и значение ψ приведены в табл. 3. Типичный график $R_c(\Phi)$, полученный при $\epsilon = 10^{-6}$, представлен на рис. 6, где также приведена зависимость $\zeta_c(\Phi)$, соответствующая критическому радиусу. Видно, что при увеличении пересыщения пара критический радиус сначала возрастает, что означает переход к росту преимущественно в гексагональной фазе и является известным результатом [11,22]. Максимум зависимости $R_c(\Phi)$ достигается при $\Phi \cong 100$, что соответствует 300 meV при $T = 460^\circ\text{C}$. Максимальный критический радиус составляет 43 nm, что достаточно хорошо соответствует известным экспериментальным данным [21] и в несколько раз превосходит равновесный радиус перехода [15,17]. При $\Phi > 100$ зависимость $R_c(\Phi)$ становится убывающей; критический радиус уменьшается до 9 nm при $\Phi \cong 10^6$ и $\zeta_c \cong 100$ (соответствующее значение $\Delta\mu_f^\infty \cong 300$ meV). Убывание критического радиуса при больших пересыщениях пара и соответствующий обратный переход к устойчивой кубической фазе, насколько нам известно, получены впервые. Экспериментальные исследования кристаллической структуры ННК при высоких пересыщениях будут предметом отдельного сообщения.

В табл. 3 приведены результаты расчетов максимального критического радиуса перехода для различных полупроводниковых соединений III-V при типичных ростовых температурах [1,7,10,12,14,18-21,31]. В табл. 3 указаны расчетные величины поверхностных энергий, определенные с учетом результатов табл. 2. Значения разности объемных энергий образования вюрцита и цинковой обманки кристаллов взяты из работы [17]. Расчеты показывают, что антимонидные ННК (InSb, GaSb) имеют низкие значения критического радиуса (менее 10 nm) и, по-видимому, в большинстве случаев

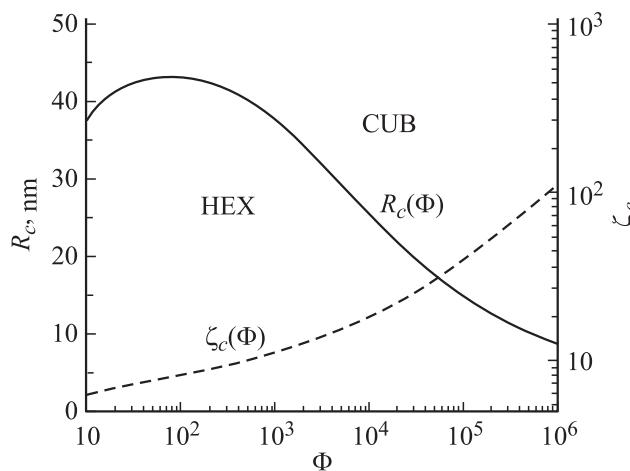


Рис. 6. Критический радиус перехода $R_c(\Phi)$ (сплошная кривая), разделяющий фазовую плоскость (R_c , Φ) на области преимущественного формирования кубической (CUB) и гексагональной (HEX) фазы. Штриховая кривая отвечает критическому пересыщению ζ_c .

Таблица 3. Результаты расчетов максимального критического радиуса

Материал	γ_{sl}	γ_{lv}	γ_{CUB}	γ_{HEX}	Ω , nm ³	ψ , meV	T , °C	R_c , nm
GaAs	0.5	1	1.79	1.3	0.0191	24	450	45.5
							500	38.8
							550	33.7
							600	29.7
InAs	0.4	1	1.19	0.91	0.0261	10.6	380	86.5
							400	73.2
							420	62.6
GaP	0.7	1	2.36	1.79	0.0191	18.3	450	8
							500	6.9
							550	6.8
							600	6.7
InP	0.28	1	1.56	1.19	0.0261	7	380	73.4
							400	69.4
							420	65.8
GaSb	0.3	1	1.12	0.97	0.0191	19.8	450	8.6
							500	8.2
							550	7.9
							600	7.7
InSb	0.3	1	0.95	0.73	0.0261	16.4	380	5.2
							400	5.2
							420	5.2

образуются в кубической фазе. Значения R_c для GaAs при типичных ростовых температурах 450–600°C составляют 30–45 nm, а для InAs при $T = 380$ –430°C — 63–87 nm, т. е. InAs-ННК являются более вюрцитными, чем GaAs. Данное заключение подтверждается экспериментальными данными работ [19,21,22]. Для фосфидных ННК влияние элемента III группы максимально: GaP-ННК имеют критический радиус перехода менее 10 nm (так что их формирование в гексагональной фазе мало вероятно), а для InP-ННК значения R_c составляют 66–73 nm, т. е. близки к InAs.

4. Заключение

В работе построена модель поверхностной энергии, основанная на анализе числа оборванных связей в приближении ближайших и вторых соседей при рассечении кристалла соответствующей гранью. Несмотря на простоту, модель достаточно универсальна и удобна для проведения расчетов в конкретных системах. Проведенные оценки показали, что отношение поверхностных энергий для некоторых эквивалентных граней полупроводников III-V в гексагональной и кубической фазах достигает 70%. Это означает, что фазовый переход между политипами в ННК III-V, растущих в направлении $\langle 111 \rangle$, приводит к большому (до 30%) выигрышу в поверхностной энергии. На основе кине-

тической модели роста ННК и полученных данных по поверхностным энергиям проведены оценки критического радиуса для различных сценариев перехода между политипами. В частности, для GaAs-ННК полученное значение $R_c = 45$ nm на порядок больше равновесного критического радиуса ($R_c = 5.6$ nm [15]), что соответствует экспериментальным данным [21,22]. Показано, что значение критического радиуса немонотонно зависит от пересыщения газообразной среды и что кубическая фаза может доминировать для очень высоких пересыщений. Дальнейшее развитие самосогласованной модели роста и кристаллической структуры полупроводниковых ННК требует учета диффузионных вкладов в скорость роста [6,8,10,12,13,31], что будет являться предметом отдельного сообщения.

Список литературы

- [1] В.Г. Дубровский, Г.Э. Цырлин, В.М. Устинов. ФТП **43**, 1585 (2009).
- [2] Y. Cui, C.M. Lieber. Science **91**, 851 (2001).
- [3] B.J. Ohlsson, M.T. Bjork, A.I. Persson, C. Thelander, L.R. Wallenberg, M.H. Magnusson, K. Deppert, L. Samuelson. Physica E **13**, 1126 (2002).
- [4] R.S. Wagner, W.C. Ellis. Appl. Phys. Lett. **4**, 89 (1964).
- [5] Е.И. Гиваргизов. Рост нитевидных и пластинчатых кристаллов из пара. Наука, М. (1977). 304 с.
- [6] В.Г. Дубровский, Н.В. Сибирёв, Р.А. Сурис, Г.Э. Цырлин, В.М. Устинов, V. Tchernycheva, J.C. Harmand. ФТП **40**, 1103 (2006).
- [7] M. Moewe, L.C. Chuang, V.G. Dubrovskii, C. Chang-Hasnain. J. Appl. Phys. **104**, 044313 (2008).
- [8] Г.Э. Цырлин, В.Г. Дубровский, Н.В. Сибирёв, И.П. Сошников, Ю.Б. Самсоненко, А.А. Тонких, В.М. Устинов. ФТП **39**, 587 (2005).
- [9] J. Johansson, C.P.T. Svensson, T. Mårtensson, L. Samuelson, W. Seifert. J. Phys. Chem. B **109**, 13 567 (2005).
- [10] V.G. Dubrovskii, G.E. Cirlin, I.P. Soshnikov, A.A. Tonkikh, N.V. Sibirev, Yu.B. Samsonenko, V.M. Ustinov. Phys. Rev. B **71**, 205325 (2005).
- [11] V.G. Dubrovskii, N.V. Sibirev, J.C. Harmand, F. Glas. Phys. Rev. B **78**, 235301 (2008).
- [12] L.E. Fröberg, W. Seifert, J. Johansson. Phys. Rev. B **76**, 153401 (2007).
- [13] V.G. Dubrovskii, I.P. Soshnikov, N.V. Sibirev, G.E. Cirlin, V.M. Ustinov. J. Cryst. Growth **289**, 31 (2006).
- [14] T. Takebe, M. Fujii, T. Yamamoto, K. Fujita, T. Waranabe. J. Appl. Phys. **81**, 7273 (1997).
- [15] T. Akiyama, K. Sano, K. Nakamura, T. Ito. Jpn. J. Appl. Phys. **45**, L 275 (2006).
- [16] C.-Y. Yeh, Z.W. Lu, S. Froyen, A. Zunger. Phys. Rev. B **46**, 10 086 (1992).
- [17] V.G. Dubrovskii, N.V. Sibirev. Phys. Rev. B **77**, 035414 (2008).
- [18] В.Г. Дубровский. Теория формирования эпитаксиальныхnanoструктур. Физматлит, М. (2009). 352 с.
- [19] M. Tchernycheva, L. Travers, G. Patriarche, F. Glas, J.C. Harmand, G.E. Cirlin, V.G. Dubrovskii. J. Appl. Phys. **102**, 094313 (2007).
- [20] A.I. Persson, M.W. Larsson, S. Stengstrom, B.J. Ohlsson, L. Samuelson, L.R. Wallenberg. Nature Mater. **3**, 677 (2004).
- [21] И.П. Сошников, Г.Э. Цырлин, А.А. Тонких, Ю.Б. Самсоненко, В.Г. Дубровский, В.М. Устинов, О.М. Горбенко, D. Litvinov, D. Gerthsen. ФТП **47**, 2121 (2005).
- [22] F. Glas, J.C. Harmand, J. Patriarche. Phys. Rev. Lett. **99**, 146101 (2007).
- [23] J. Johansson, L.S. Karlsson, K.A. Dick, J. Bolinsson, B.A. Wacaser, K. Deppert, L. Samuelson. Cryst. Growth Design **9**, 766 (2009).
- [24] В.Н. Портнов, Е.В. Чупрунов. Возникновение и рост кристаллов. Физматлит, М. (2006). 328 с.
- [25] М.П. Шаскольская. Кристаллография. Высш. шк., М. (1984). 376 с.
- [26] А.С. Давыдов. Теория твердого тела. Наука, М. (1976). 640 с.
- [27] J.W. Cahn, R.E. Hanneman. Surf. Sci. **1**, 387 (1964).
- [28] A.A. Stekolnikov, F. Bechstedt. Phys. Rev. B **72**, 125326 (2005).
- [29] V.G. Dubrovskii, H. Huang, X. Ren, N.V. Sibirev, M.V. Nazarenko, A.D. Bolshakov, X. Ye, Q. Wang, Y. Huang, X. Zhang, J. Guo, Y. Yang. Phys. Rev. B. In press.
- [30] V.G. Dubrovskii, N.V. Sibirev. Phys. Rev. E **70**, 031604 (2004).
- [31] V.G. Dubrovskii, N.V. Sibirev, R.A. Suris, G.E. Cirlin, J.C. Harmand, V.M. Ustinov. Surf. Sci. **601**, 4395 (2007).