

# Влияние свойств структурированной поверхности подложки на морфологию планарных нанопроволок GaAs (моделирование Монте-Карло)

© С.В. Манцурова<sup>1,2</sup>, А.А. Спирина<sup>1</sup>, Н.Л. Шварц<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Институт физики полупроводников им. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук, 630090 Новосибирск, Россия

<sup>2</sup> Новосибирский государственный технический университет, 630087 Новосибирск, Россия

E-mail: snezhana@isp.nsc.ru

Поступила в Редакцию 5 декабря 2024 г.

В окончательной редакции 6 декабря 2024 г.

Принята к публикации 6 декабря 2024 г.

Исследовано моделирование методом Монте-Карло самокаталитического роста планарных нанопроволок GaAs по механизму пар-жидкость-кристалл на подложках GaAs, покрытых структурированной пленкой-маской. Под структурированной пленкой-маской подразумевается слой со свойствами оксида кремния с заранее заданной геометрией в виде канавок разной глубины, ширины и скважности. Проведен анализ влияния свойств структурированной пленки-маски на характер роста и морфологию планарных нанопроволок GaAs. Выявлен диапазон интенсивностей потоков галлия и мышьяка, в котором наблюдался стабильный рост планарных нанопроволок GaAs. Найдены условия перехода от роста по механизму пар-жидкость-кристалл к росту планарной нанопроволоки без капли, что позволяет получить бездефектные нанопроволоки по всей длине канавки.

**Ключевые слова:** планарные нанопроволоки, GaAs, структурированная поверхность, моделирование, Монте-Карло.

DOI: 10.61011/FTP.2024.11.59484.20S

## 1. Введение

Интерес к планарным нанопроволокам (ПНП) обусловлен их совместимостью со стандартной планарной технологией создания нанoeлектронных устройств [1–3]. К настоящему времени уже созданы полевые транзисторы на базе ПНП GaAs [4,5]. В работе [6] сообщается о росте ПНП GaAs на подложках GaAs, легированных примесями *p*- и *n*-типа, демонстрирующих транзисторные характеристики. В работе [7] приводятся данные о росте ПНП с радиальными гетеропереходами ZnSe/ZnTe на сапфировых подложках, демонстрирующие выпрямляющие характеристики и фотолюминесценцию при освещении. В последнее время развивается применение матриц ПНП в качестве основы для квантовых компьютеров [8].

Одним из способов формирования нанопроволок (НП) является механизм пар-жидкость-кристалл (ПЖК) с использованием капель-катализаторов. В качестве катализатора роста полупроводниковых НП по механизму ПЖК в основном используют золото [2,4,6]. Однако атомы Au могут встраиваться в растущий кристалл, что приводит к ухудшению характеристик оптоэлектронных приборов на основе таких НП [9]. Поэтому был предложен самокаталитический рост НП  $A^{III}B^V$ , где в качестве катализатора роста используется металл, входящий в состав растущей проволоки [10]. При оптимизации условий роста вертикальных НП наблюдали появление ПНП, что

связывали с неудачными режимами роста [11]. В настоящее время требуется специальный поиск условий формирования ПНП  $A^{III}B^V$ . Возможные направления роста ПНП задаются кристаллографической ориентацией поверхности подложки [12], при этом выбор среди возможных направлений роста определяется поступлением осаждаемого вещества в каплюкатализатора [13]. А именно существует неопределенность в выборе направления роста ПНП вдоль подложки. Это является проблемой, поскольку изготовление ряда приборов на основе ПНП предполагает наличие направленного массива таких кристаллов. Управлять направлением роста ПНП можно с помощью заранее заданной геометрии поверхности подложки, т.е. с помощью роста ПНП на структурированных поверхностях [14].

Для интеграции ПНП на основе  $A^{III}B^V$  в кремниевую технологию требуется уйти от проблемы рассогласования постоянных решеток большинства полупроводников  $A^{III}B^V$  и Si. Эту проблему можно решить, организовав рост ПНП GaAs на диэлектрической структурированной маске на подложке Si [15]. На сегодняшний день при самокаталитическом росте вертикальных НП GaAs в качестве пленки-маски используют слои диоксида кремния. В ряде работ показано влияние толщины оксида кремния на ориентацию и морфологию НП GaAs, выращенных как на кремниевой подложке [16,17], так и на GaAs [10]. Величина контактного угла капель Ga на поверхности подложки, зависящая от смачиваемо-

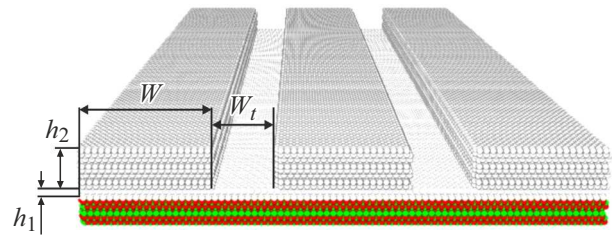
сти поверхности, определяет характер последующего роста нанокристаллов: планарный или непланарный. Экспериментально было показано, что на смачиваемость поверхности каплей галлия влияет состав слоя  $\text{SiO}_x$  и поверхностная шероховатость, которые зависят от толщины пленки-маски [16]. Толщина оксида влияет не только на контактный угол капли с поверхностью, но и на плотность капель. Тонкие пленки оксида кремния демонстрируют большую шероховатость, что должно приводить к уменьшению диффузионной длины адатомов Ga по поверхности  $\text{SiO}_x$  и, следовательно, к увеличению плотности капель. На пленках  $\text{SiO}_2$  плотность капель уменьшается (по сравнению с  $\text{SiO}_x$ ) за счет активной десорбции адатомов галлия с поверхности [18]. Однако работы, посвященные исследованию влияния толщины оксида кремния на рост НП, были сосредоточены на вертикальном росте. Данных по самокаталитическому росту ПНП  $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$  по механизму ПЖК в открытой печати практически нет, что, по-видимому, связано с высокими требованиями к свойствам поверхности подложек и узким диапазоном ростовых условий для формирования таких структур. Зависимость состава и морфологии поверхности оксида кремния от его толщины может позволить использовать структурированные слои оксида для организации роста ПНП.

В настоящее время используются различные экспериментальные методики роста полупроводниковых НП и доступно множество методов для контроля их морфологии и структуры. Однако для полного понимания процессов, приводящих к той или иной морфологии НП, необходимо теоретическое рассмотрение деталей роста таких структур. Так, с помощью двумерной аналитической модели рассматривались причины планарного и непланарного роста НП GaAs на графитовых нанопластинках, частично покрывающих термически окисленную подложку Si(111) [15]. Теоретическое рассмотрение кинетических характеристик роста ПНП ZnSe и ZnTe на сапфировых подложках показало, что рост ПНП определяется поверхностной диффузией материала по подложке, в отличие от роста вертикальных НП, когда определяющей является поверхностная диффузия по боковой поверхности НП [19].

Подходящим методом для теоретического рассмотрения кинетики и деталей роста ПНП является моделирование методом Монте-Карло. Данная работа направлена на поиск оптимальных условий самокаталитического роста однонаправленного массива ПНП GaAs на подложках, покрытых структурированным слоем оксида кремния, с помощью моделирования методом Монте-Карло.

## 2. Модель Монте-Карло

Моделирование самокаталитического роста ПНП GaAs проводилось с помощью программного комплекса SilSim3D, основанного на трехмерной кинетической ре-



**Рис. 1.** Схематическое изображение модельной подложки:  $W_t$  — ширина,  $h_2$  — глубина канавок,  $W$  — расстояние между ними,  $h_1$  — толщина тонкого слоя на дне канавки. Ga(s) показан красным, As — зеленым, нижний слой пленки-маски — белым, верхний слой пленки-маски — светло-серым. Далее для рисунков используются аналогичные обозначения. (Цветная версия рисунка представлена в электронной версии статьи).

шеточной модели Монте-Карло [20]. Ранее с помощью SilSim3D мы рассматривали самокаталитический рост НП GaAs на сингулярных и вицинальных подложках, равномерно покрытых тонкой пленкой-маской со сквозными цилиндрическими отверстиями, в которых помещались капли галлия [13,21]. Настоящая работа является продолжением этих работ. В качестве материала подложки был выбран GaAs, но покрытый структурированной пленкой-маской без сквозных отверстий. Основное внимание уделяется исследованию влияния свойств и геометрии структурированного слоя на морфологию ПНП GaAs. Схематическое изображение модельной подложки показано на рис. 1. Структурированная пленка-маска состояла из чередования толстых и тонких слоев с разными свойствами. При моделировании рассматривались структурированные пленки-маски с постоянными значениями ширины канавок  $W_t = 4$  нм и толщины тонкого слоя маски  $h_1 = 0.6$  нм, варьируемыми значениями расстояния между канавками  $W$  и глубины канавок  $h_2$ . Ширина канавок  $W_t$  определяет максимальный диаметр ПНП, а выбранное значение толщины маски на дне канавки  $h_1$  соответствует толщине слоя оксида кремния, обеспечивающего хорошую смачиваемость поверхности каплей галлия. Глубина канавок  $h_2$  варьировалась в диапазоне 1–4 нм. Моделирование показало, что слабая смачиваемость материала  $M_2$  каплей Ga приводит к независимости морфологии ПНП от высоты канавки.

В модель Монте-Карло заложены следующие представления, происходящие при самокаталитическом росте ПНП GaAs на подложке покрытой структурированной пленкой-маской. В модели учтено, что свойства пленки-маски изменяются с ее толщиной аналогично слою оксида кремния [16]. Свойства тонкого слоя пленки-маски на дне канавок по отношению к диффузии галлия отличаются от свойств толстого слоя. Диффузия адатомов по поверхности толстого слоя гораздо выше, чем по поверхности тонкого слоя на дне канавок. Диффузионные характеристики тонкого слоя пленки-

маски уменьшались как за счет изменения химического состава пленки, так и за счет микрошероховатости поверхности. Поэтому при осаждении галлия капли формируются на дне канавок. Сформированные галлиевые капли взаимодействуют с пленкой-маской, растворяя ее с образованием летучего компонента, после чего капли оказываются в контакте с подложкой GaAs. Только после этого возможно образование нанокристаллов GaAs на границе раздела капля-подложка и последующий рост НП в процессе осаждения галлия и мышьяка. В данном случае капля Ga является катализатором роста, а подложка GaAs под каплей играет роль затравочного кристалла.

При моделировании самокаталитического роста ПНП GaAs с использованием структурированных пленок рассматривалась 7-компонентная система, состоящая из мышьяка в атомарном и молекулярном виде ( $As$ ,  $As_2$ ), галлия в твердом и жидком состоянии ( $Ga(s)$ ,  $Ga(l)$ ), частиц тонкого ( $M_1$ ) и толстого ( $M_2$ ) слоя пленки-маски, а также частиц летучего компонента пленки-маски ( $M_v$ ). Известно, что при взаимодействии Ga с  $SiO_2$  происходит образование летучих компонентов, таких как  $Ga_2O$  и  $SiO$  [22]. С целью упрощения задачи в модель был введен только один тип компонента, отвечающий за образующиеся летучие соединения. В модели учтены следующие элементарные события: адсорбция  $Ga(s)$  и  $As_2$ ; диффузия компонентов по поверхности; распад и образование  $As_2$  посредством обратимой реакции  $As + As \leftrightarrow As_2$ ; растворение материала пленки-маски каплями галлия с образованием летучего компонента ( $M_i + Ga(l) \rightarrow M_v + Ga(l)$ , где  $i = 1, 2$ ) и его диффузия сквозь каплю ( $M_v + Ga(l) \rightarrow Ga(l) + M_v$ ); растворение GaAs и диффузия As в жидком галлии через реакции  $Ga(s) + Ga(l) \rightarrow Ga(l) + Ga(l)$  и  $As + Ga(l) \rightarrow Ga(l) + As$ ; кристаллизация GaAs при взаимодействии жидкого галлия с мышьяком ( $Ga(l) + As \rightarrow Ga(s) + As$ ); десорбция Ga,  $As_2$  и летучего компонента  $M_v$ . Каждому событию соответствуют определенные энергии активации.

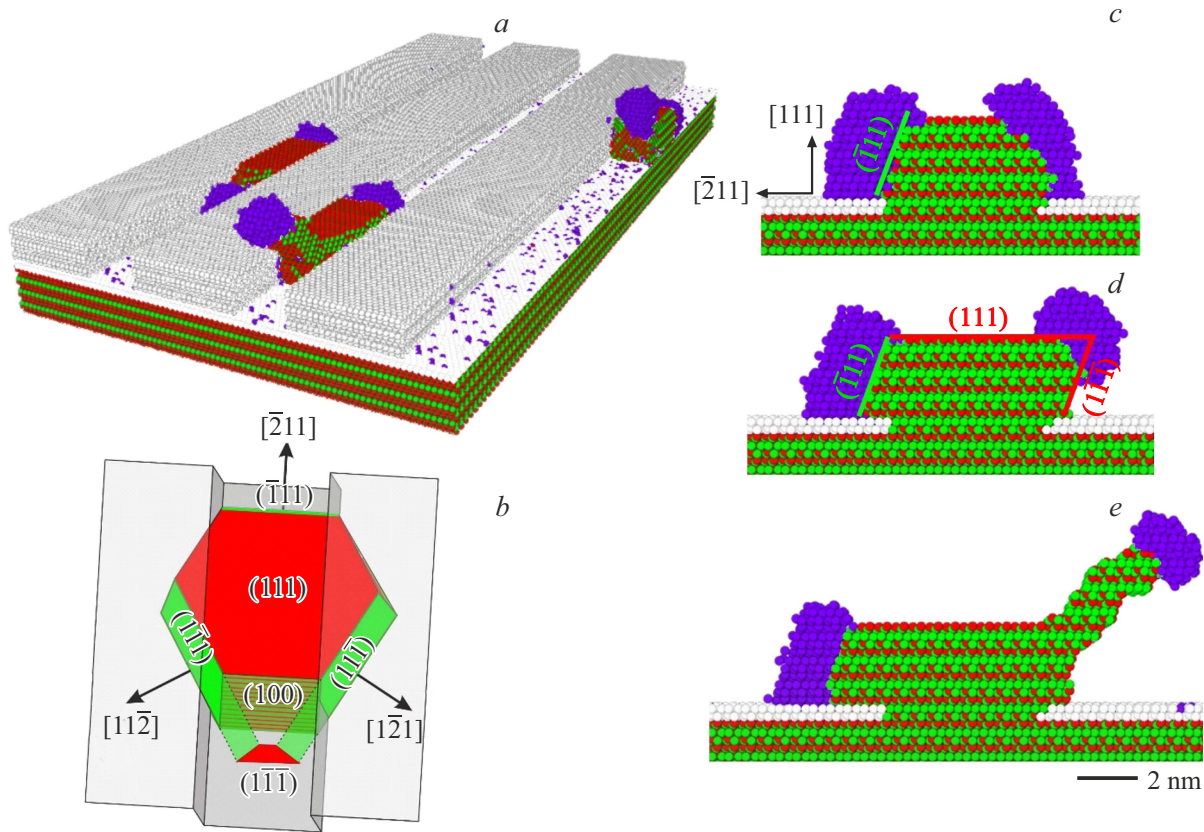
В модели учтено изменение свойств пленки-маски с ее толщиной. Для согласования модельной и экспериментальной [16] зависимостей плотности капель Ga от толщины оксида кремния свойства тонкой  $M_1$  и толстой  $M_2$  пленки-маски были разными. Различия заключаются в разных энергиях связи жидкого галлия с частицами пленки-маски  $M_1$  и  $M_2$  в конфигурациях, отвечающих за смачивание поверхности каплями. Варьируя энергии связи жидкого галлия с поверхностью пленки-маски вдоль периметра капли, можно менять контактный угол капли на поверхности. Были получены контактные углы 76, 100 и 116°, соответствующие экспериментальным значениям контактных углов капель галлия на пленках оксида кремния толщиной 0,6, 1,2, 1,6 нм [16]. Энергия связи атомов галлия с материалом  $M_1$ , определяющая диффузию адатомов Ga по тонкому слою пленки-маски, выбиралась равной  $E(Ga - M_1) = 0.8$  эВ, а поверхность этого слоя задавалась шероховатой с целью увеличения

плотности капель. Такими свойствами обладают тонкие пленки термического оксида  $SiO_x$ , по составу близкие к  $x = 1$  [16]. Так как на материале  $M_2$  (толстый слой со свойствами  $SiO_2$ ) плотность капель должна быть значительно ниже, чем на  $M_1$ , энергия связи атомов галлия с пленкой уменьшалась до  $E(Ga - M_2) = 0.3$  эВ. Принимая во внимание более активную десорбцию Ga с поверхности толстой пленки [18], барьер на десорбцию с поверхности материала  $M_2$  уменьшался по сравнению с материалом  $M_1$ .

Данных о скорости травления пленок  $SiO_x$  жидким галлием в литературе найти не удалось, поэтому энергия активации реакции растворения пленки-маски является варьируемым параметром. Расчеты, результаты которых представлены далее, проводились при энергии активации растворения, равной 1.4 и 2 эВ для материалов  $M_1$  и  $M_2$  соответственно. Энергетические параметры модели, отвечающие за растворение GaAs в капле галлия и определяющие поверхностное натяжение, выбирались такими же, как в работе [23].

### 3. Результаты моделирования

Моделирование роста ПНП GaAs проводилось при температуре 890 К. Эта температура является оптимальной для роста ПНП на подложках GaAs(111)A [24]. При моделировании рассматривался вариант роста ПНП с предосаждением Ga-капель. В этом случае на подложку, покрытую структурированной пленкой-маской, предварительно осаждался галлий с целью формирования капель в канавках, а поток мышьяка для роста ПНП включался после того, как капли протравят под собой пленку. В этом случае можно добиваться необходимой плотности капель в канавках независимо от ростовых условий, обеспечивающих стабильный рост ПНП. Плотность капель в канавках определяется свойствами поверхности тонкого слоя пленки-маски, расстоянием между канавками, температурой подложки и скоростью осаждения галлия. Максимальное расстояние между каплями в модели ограничивается длиной канавки, которое было взято равным 70 нм. В настоящей работе все расчеты проводились при одной температуре — 890 К. С увеличением интенсивности потока галлия  $F_{Ga}$  уменьшается расстояние между каплями из-за уменьшения диффузионной длины  $\lambda_{Ga}$ . Для оценки влияния  $F_{Ga}$  на длину диффузии галлия по структурированной поверхности пленки-маски предварительно были проведены оценки  $\lambda_{Ga}$  на неструктурированной поверхности пленки  $M_1$ : при  $F_{Ga} = 1$  МС/с —  $\lambda_{Ga} \sim 25$  нм, а при  $F_{Ga} = 1.2$  МС/с —  $\lambda_{Ga} \sim 20$  нм. В нашем случае интенсивность потока  $F$  измеряется в МС/с. На поверхности с ориентацией (111) 1 монослой (МС) характеризует количество поверхностных атомов и соответствует  $7.8 \cdot 10^{14}$  атом/см<sup>2</sup>. При осаждении галлия на структурированную подложку на плотность капель в канавках влияет дополнительный приток галлия с поверхности

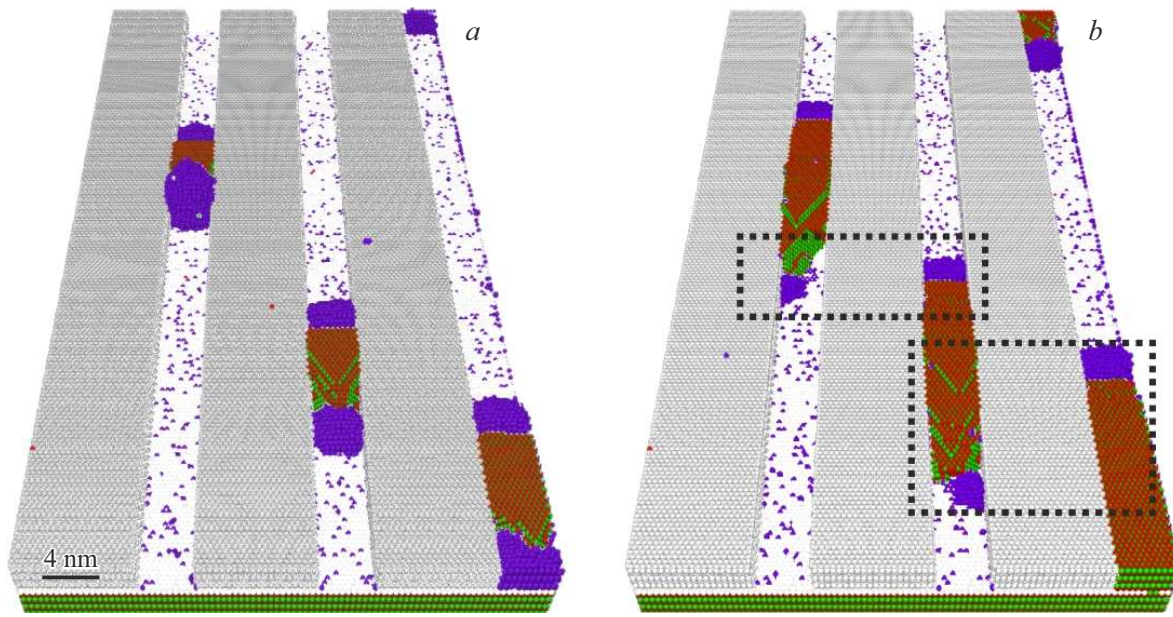


**Рис. 2.** Кинетика срыва роста НПП. Структурированная подложка с НП GaAs в трех канавках при  $W = 8$  нм (a); схематическое изображение кристалла под каплей в канавке (b); сечения НП во второй канавке в моменты времени  $t = 0.11$  с (c), 0.15 с (d), 0.2 с (e) после начала осаждения Ga и As<sub>2</sub> при  $F_{Ga} = 1.1$  МС/с,  $F_{As_2} = 11$  МС/с,  $T = 890$  К. Фасетки (111)А отмечены красным цветом, а (111)В — зеленым. Ga(I) обозначен фиолетовым цветом.

толстого слоя  $M_2$  между канавками. Получено, что плотность капель в канавке при фиксированном потоке Ga увеличивается с ростом ширины толстого слоя между канавками  $W$ . Так, при  $F_{Ga} = 1$  МС/с для  $W = 8$  нм в канавке образуется по одной капле, а для  $W = 32$  нм — по 2 капли. Это означает, что при изменении геометрии, т.е. изменении периодичности в структуре поверхности пленки-маски (разных  $W$ ) требуется варьировать интенсивность потока Ga для получения одинаковой плотности капель в канавках. Интенсивности потоков Ga для получения одной капли в каждой канавке при предосаждении составляют  $F_{Ga} = 1.1, 0.6, 0.4$  МС/с для толстых слоев между канавками шириной  $W = 8, 32, 68$  нм соответственно. Следует отметить, что уменьшение расстояния между канавками может привести к тому, что капли будут зарождаться не в каждой канавке. Этап предосаждения Ga позволяет не только обеспечить заданную плотность капель, но и получить капли заданного размера за счет длительности предосаждения. При оптимальном выборе интенсивности потока и длительности осаждения капли Ga не только заполнят всю ширину канавки, но и успеют протравить тонкий слой пленки-маски на ее дне. Только после контакта

капли с кристаллической подложкой начинается рост нанокристаллов при включении потока As<sub>2</sub>.

Стабильный рост НПП зависит не только от оптимального соотношения потоков галлия и мышьяка, но и от их абсолютных значений. При неоптимальном выборе интенсивностей потоков галлия и мышьяка наблюдается срыв планарного роста НП на наклонный. На рис. 2, a изображена модельная подложка, на которой одна НП растет планарно, а остальные две срываются с планарного роста на наклонный. Рассмотрим подробнее механизм срыва планарного роста НП. На начальных этапах роста под каплей формируется кристалл, форма которого обусловлена кристаллографией нижележащей подложки. Схематическое изображение кристалла под каплей на поверхности подложки GaAs(111)А изображено на рис. 2, b. На структурированной пленке-маске рост кристалла возможен не во всех допустимых кристаллографией направлениях из-за [Вограничений стенками канавки, которые обозначены серым цветом на рис. 2, b. Поэтому кристалл под каплей разрастается в противоположные стороны, разрывая каплю на две части. На рис. 2, c–e представлены сечения НП в разные моменты времени вдоль направления  $[\bar{2}11]$ .



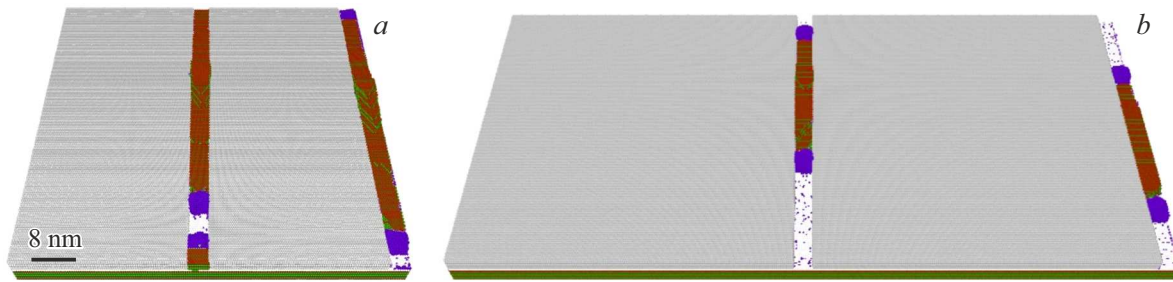
**Рис. 3.** Вид модельной подложки с  $W = 8$  нм при разной длительности осаждения мышьяка и галлия:  $t = 0.3$  с (a),  $t = 0.8$  с (b); предосаждение капель проводилось при  $F_{\text{Ga}} = 1.1$  МС/с; рост ПНП — при  $F_{\text{Ga}} = 0.6$  МС/с,  $F_{\text{As}_2} = 6$  МС/с.

На начальных этапах роста в сечении кристалл под каплями приобретает вид, изображенный на рис. 2, с. Левая сторона кристалла представляет собой фасетку  $(\bar{1}11)\text{В}$ , а правая сторона является пересечением двух фасеток  $(1\bar{1}\bar{1})\text{В}$  и  $(11\bar{1})\text{В}$ . Разрастание левой фасетки  $(\bar{1}11)\text{В}$  (рис. 2, d и e) смещает каплю в направлении  $[\bar{2}11]$ , обеспечивая рост планарной НП. Свободное разрастание двух оставшихся фасеток  $(111)\text{В}$  невозможно из-за ограничения стенками канавки в пленке-маске. Эти фасетки постепенно разрастаются только в области канавки. Со временем со стороны подложки возникает дополнительная фасетка  $(1\bar{1}\bar{1})\text{А}$ , ограничивающая рост фасеток  $(1\bar{1}\bar{1})\text{В}$  и  $(11\bar{1})\text{В}$  в направлении  $[2\bar{1}\bar{1}]$  (рис. 2, b и d). Так как рост кристалла определяется фасетками  $(111)\text{В}$ , с правой стороны кристалла происходит отрыв капли от пленки-маски (рис. 2, d) и, как следствие, рост наклонной НП (рис. 2, e). Следует отметить, что при аналогичных условиях осаждения, но на подложках GaAs(001), наблюдается более стабильный рост ПНП в канавке из-за полной симметрии фасеток нанокристалла под каплей.

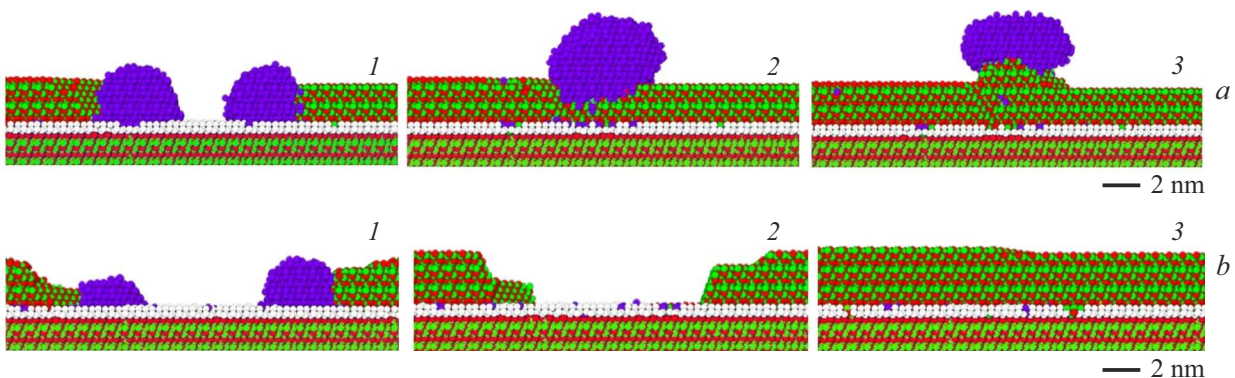
Для предотвращения срыва планарного роста на подложке GaAs(111)А требуется уменьшить скорость разрастания кристалла под каплей таким образом, чтобы капля продолжала смачивать поверхность оксидной пленки с обеих сторон кристалла. Для этого необходимо правильно подобрать интенсивности потоков  $F_{\text{Ga}}$  и  $F_{\text{As}_2}$ . Скорость роста кристалла определяется скоростью поступления мышьяка. Если соотношение  $F_{\text{As}_2}/F_{\text{Ga}}$  слишком велико, то это приводит к высокой скорости роста кристалла и большой вероятности срыва планарного роста НП. Кроме того, избыточное количество мышьяка

по сравнению с галлием может привести к уменьшению размера Ga-капли и ее исчезновению. Если соотношение  $F_{\text{As}_2}/F_{\text{Ga}}$  мало, то рост кристалла сопровождается увеличением размера Ga-капли. Моделирование позволило определить оптимальное соотношение потоков Ga и As<sub>2</sub> для стабильного роста ПНП на структурированной поверхности. Для всех вариантов рассматриваемых структурированных поверхностей оптимальное соотношение потоков  $F_{\text{As}_2}/F_{\text{Ga}}$  равно 10. Уменьшение абсолютных значений потоков с сохранением их соотношения увеличивает стабильность роста ПНП, т.е. уменьшает вероятность срыва планарного роста НП.

На стабильность роста ПНП влияет и расстояние между канавками. Если расстояние между канавками мало, то в процессе роста наблюдался эффект изменения размера капель в соседних канавках при их сближении. На рис. 3 показано, как изменяются размеры исходно одинаковых капель галлия при их движении в процессе роста. Видно, что нижняя капля из первой канавки уменьшилась по сравнению с верхней каплей во второй канавке, а нижняя капля из второй канавки уменьшилась по сравнению с каплей из третьей (области взаимодействия между собой капель выделены пунктиром). Это объясняется достаточно малым расстоянием между канавками ( $W = 8$  нм) по сравнению с удвоенной диффузионной длиной мышьяка по поверхности слоя  $M_2$ , что приводит к конкуренции капель за мышьяк. Оценки длины диффузии As<sub>2</sub> до испарения при температуре 890 К по поверхности верхнего слоя пленки-маски дали значение  $\sim 10$  нм. Следует отметить, что при выбранной температуре роста в рассматриваемом диапазоне потоков длина диффузии галлия по слою маски  $M_2$  между



**Рис. 4.** 3D вид модельных подложек с разными расстояниями между канавками со стабильным ростом ПНП в течение 2 с: *a* —  $W = 32$  нм, предосаждение при  $F_{\text{Ga}} = 0.6$  МС/с; рост ПНП —  $F_{\text{Ga}} = 0.5$  МС/с,  $F_{\text{As}_2} = 5$  МС/с; *b* —  $W = 68$  нм: предосаждение при  $F_{\text{Ga}} = 0.4$  МС/с; рост ПНП —  $F_{\text{Ga}} = 0.2$  МС/с,  $F_{\text{As}_2} = 2$  МС/с.



**Рис. 5.** Фрагменты сечений модельной поверхности с двумя ПНП, растущими в противоположных направлениях. *a* — слияние капель при ПЖК росте ПНП с последующим формированием дополнительной вертикальной НП ( $F_{\text{Ga}} = 0.5$  МС/с,  $F_{\text{As}_2} = 5$  МС/с). *b* — формирование бездефектной ПНП при смене режима роста — переход от ПЖК к селективному росту (1 —  $F_{\text{Ga}} = 0.5$  МС/с,  $F_{\text{As}_2} = 5$  МС/с, 2 —  $F_{\text{As}_2} = 5$  МС/с, 3 —  $F_{\text{Ga}} = 0.3$  МС/с,  $F_{\text{As}_2} = 20$  МС/с).

канавками намного превышает максимальное модельное значение  $W$ . Это означает, что за изменение размеров близко расположенных капель отвечает разная скорость роста кристаллов под каплями, определяемая притоком мышьяка. Обмен атомами из соседних канавок наблюдался и экспериментально при селективном росте нанобортиков GaAs на структурированной поверхности [25].

Уйти от эффекта изменения размера капель возможно путем увеличения расстояния между канавками. Когда  $W$  превысит удвоенную длину диффузии мышьяка до испарения, диффузионного сбора мышьяка с поверхности будет хватать для роста ПНП из обеих конкурирующих капель. Моделирование проводилось для набора значений  $W$  от 8 до 68 нм. На рис. 4 показан стабильный рост ПНП на структурированных подложках с  $W = 32$  и 68 нм. Стоит отметить, что при любой ширине толстого слоя маски между канавками для стабильного роста ПНП необходимо менять условия роста по сравнению с условиями предосаждения. Для разных расстояний между канавками соотношение потоков Ga и As<sub>2</sub> одинаковое, а абсолютные значения отличаются.

Так как в одной канавке может зародиться несколько капель, а рост ПНП из каждой капли происходит в

противоположных направлениях, то при смыкании двух противоположно движущихся капель происходит срыв планарного роста — наблюдается вертикальный рост (рис. 5, *a*). Избежать появления непланарной НП на поверхности ПНП возможно с помощью изменения ростовых условий для поглощения капель галлия и доразривания ПНП без капель. Для этого, не дожидаясь слияния капель, отключался поток галлия при сохранении потока мышьяка (рис. 5, *b*–1). После исчезновения капель ростовые условия снова менялись. Для предотвращения повторного формирования Ga-капель дальнейший рост GaAs осуществлялся при завышенном соотношении потоков Ga и As<sub>2</sub>:  $F_{\text{Ga}} = 0.3$  МС/с,  $F_{\text{As}_2} = 20$  МС/с. Таким образом, на завершающей стадии роста мы переходили от ПЖК роста к росту ПНП в отсутствие капли. В отличие от стандартного селективного роста в данном случае НП продолжает расти на поверхности пленки-маски.

#### 4. Заключение

В работе проанализированы условия самокаталитического роста планарных нанопроволок GaAs на под-

ложках GaAs, покрытых структурированной пленкой-маской с помощью моделирования методом Монте-Карло. Исследовалось влияние характеристик пленки-маски по свойствам, приближенным к слоям оксида кремния, и геометрии структурированной поверхности на характер роста и морфологию ПНП GaAs. Учет влияния толщины оксида кремния на смачиваемость его поверхности каплями галлия показал возможность использовать структурированные слои оксида кремния для организации планарного роста НП. Морфология структурированной пленки представляла собой чередование тонких и толстых слоев  $\text{SiO}_x$ , формирующих систему параллельных канавок. Тонкий слой, определяющий свойства дна канавки, соответствовал  $x$ , близкому к 1, а толстый слой, задающий свойства боковых стенок и террас между канавками, соответствовал  $x = 2$ . Показано, что расстояние между канавками структурированного слоя влияет на диффузионный сбор мышьяка в капли, приводя к разной скорости роста ПНП в соседних канавках. Для устойчивого роста ПНП расстояние между канавками должно превышать удвоенную длину диффузии мышьяка по верхнему слою пленки-маски. При заданной температуре выявлен диапазон интенсивностей потоков галлия и мышьяка, в котором наблюдался стабильный рост ПНП GaAs. При оптимальном соотношении интенсивностей потоков галлия и мышьяка  $F_{\text{As}_2}/F_{\text{Ga}} = 10$  для устойчивого роста ПНП требуется корректировка их абсолютных значений при изменении расстояния между канавками. Переход от ПЖК роста к росту ПНП без капли позволил получить бездефектные нанопроволоки по всей длине канавки.

### Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ.

### Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] Y. Sun, T. Dong, L. Yu, J. Xu, K. Chen. *Adv. Mater.*, **32** (27), 1903945 (2020).
- [2] S.A. Fortuna, J. Wen, I.S. Chun, X. Li. *Nano Lett.*, **8** (12), 4421 (2008).
- [3] S.A. Fortuna, X.Li. *IEEE Electron Dev. Lett.*, **30** (6), 593 (2009).
- [4] C. Zhang, X. Li. *Solid State Electron.*, **93**, 40 (2014).
- [5] X. Miao, C. Zhang, X. Li. *Nano Lett.*, **13** (6), 2548 (2013).
- [6] B.R. Borodin, P.A. Alekseev, V. Khayrudinov, E. Ubyivovk, Y. Berdnikov, N. Sibirev, H. Lipsanen. *Cryst. Eng. Commun.*, **25** (9), 1374 (2023).
- [7] E. Oksenberg, S. Marti-Sanchez, R. Popovitz-Biro, J. Arbiol, E. Joselevich. *ACS Nano*, **11** (6), 6155 (2017).
- [8] P. Aseev, A. Fursina, F. Boekhout, F. Krizek, J.E. Sestoft, F. Borsoi, S. Heedt, G. Wang, L. Binci, S. Marti-Sanchez, T. Swoboda, R. Koops, E. Uccelli, J. Arbiol, P. Krogstrup, L.P. Kouwenhoven, P. Caroff. *Nano Lett.*, **19** (1), 218 (2019).
- [9] S. Breuer, C. Pfuller, T. Flissikowski, O. Brandt, H. T. Grahm, L. Geelhaar, H. Riechert. *Nano Lett.*, **11** (3), 1276 (2011).
- [10] A. Fontcuberta i Morral, C. Colombo, G. Abstreiter, J. Arbiol, J.R. Morante. *Appl. Phys. Lett.*, **92** (6), 063112 (2008).
- [11] F. Bastiman, H. Küpers, C. Somaschini, L. Geelhaar. *Nanotechnology*, **27** (9), 095601 (2016).
- [12] R.S. Dowdy, D.A. Walko, X.Li. *Nanotechnology*, **24** (3), 035304 (2013).
- [13] A.A. Spirina, N.L. Shwartz. *J. Cryst. Growth*, **632**, 127631 (2024).
- [14] R.Ben-Zvi, H. Burrows, M. Schvartzman, O. Bitton, I. Pinkas, I. Kaplan-Ashiri, O. Brontvein, E. Joselevich. *ACS Nano*, **13** (5), 5572 (2019).
- [15] Y. Berdnikov, N. Sibirev, V. Khayrudinov, A. Alaferdov, S. Moshkalev, E. Ubyivovk, H. Lipsanen, A. Bouravleuv. *CrystEngComm*, **21** (41), 6165 (2019).
- [16] F. Matteini, G. Tütüncüoğlu, H. Potts, F. Jabeen, A. Fontcuberta i Morral. *Cryst. Growth Des.*, **15** (7), 3105 (2015).
- [17] F. Matteini, G. Tütüncüoğlu, D. Mikulik, J. Vukajlovic-Plestina, H. Potts, J.B. Leran, W.C. Carter, A. Fontcuberta i Morral. *Crys. Growth Des.*, **16** (10), 5781 (2016).
- [18] M. Heiß, E. Riedlberger, D. Spirkoska, M. Bichler, G. Abstreiter, A. Fontcuberta i Morral. *J. Cryst. Growth*, **310** (6), 1049 (2008).
- [19] A. Rothman, V.G. Dubrovskii, E. Joselevich. *Proc. Natl. Acad. Sci. (PNAS)*, **117** (1), 152 (2020).
- [20] А.Н. Карпов, А.В. Зверев, А.Г. Настовьяк, С.В. Усенков, Н.Л. Шварц. *Вычислит. методы и программ.*, **15** (3), 388 (2014).
- [21] A.A. Spirina, I.G. Neizvestny, N.L. Shwartz. *Semiconductors*, **53**, 2125 (2019).
- [22] L. Fouquat, M. Vettori, C. Botella, A. Benamrouche, J. Penuelas, G. Grenet. *J. Cryst. Growth*, **514**, 83 (2019).
- [23] A.A. Spirina, V.L. Alperovich, N.L. Shwartz. *Appl. Surf. Sci.*, **540**, 148281 (2021).
- [24] А.А. Спирина, Н.Л. Шварц. *ФТП*, **54** (2), 160 (2020).
- [25] N. Morgan, V.G. Dubrovskii, A.K. Stief, D. Dede, M. Sanglé-Ferrière, A. Rudra, V. Piazza, A. Fontcuberta i Morral. *Cryst. Growth Des.*, **23** (7), 5083 (2023).

Редактор Г.А. Оганесян

## **Influence of structured substrate surface properties on the GaAs planar nanowire morphology (Monte Carlo simulation)**

*S.V. Mantsurova<sup>1,2</sup>, A.A. Spirina<sup>1</sup>, N.L. Shwartz<sup>1,2</sup>*

<sup>1</sup> Rzhanov Institute of Semiconductor Physics Siberian Branch Russian Academy of Sciences, 630090 Novosibirsk, Russia

<sup>2</sup> Novosibirsk State Technical University, 630087 Novosibirsk, Russia

**Abstract** Monte Carlo modeling of the self-catalytic growth of planar GaAs nanowires by the vapor-liquid-crystal mechanism on GaAs substrates coated with a structured mask film has been studied. A structured film-mask is defined as a layer with the silicon oxide properties and with geometry in the form of grooves of different depths, widths, and distances between them. The influence of the film-mask properties and the structured surface geometry on the GaAs planar nanowire morphology was analyzed. A range of flux intensities for stable GaAs planar nanowires growth at the chosen temperature was found. The conditions for transition from vapor-liquid-solid growth to selective growth (without a drop) of planar nanowire were found, which makes it possible to obtain defect-free nanowires along the groove.