

Теоретическое и экспериментальное исследование поверхностных процессов при молекулярно-лучевой эпитаксии нитрида галлия

© И.А. Бобровникова[¶], И.В. Ивонин, В.А. Новиков, В.В. Преображенский⁺

Томский государственный университет,
634050 Томск, Россия

⁺ Институт физики полупроводников Сибирского отделения Российской академии наук,
630090 Новосибирск, Россия

(Получена 20 мая 2008 г. Принята к печати 30 мая 2008 г.)

С помощью метода атомно-силовой микроскопии проведены экспериментальные исследования влияния условий роста на структуру поверхности эпитаксиальных слоев GaN, выращенных молекулярно-лучевой эпитаксией. Получены количественные значения плотности, высоты и ширины центров роста в зависимости от условий эпитаксии, выполнены оценки средней длины диффузионного пробега частиц, лимитирующих скорость роста GaN, рассчитаны энергии активации и коэффициенты поверхностной диффузии для этих частиц. Проведены расчеты равновесного состава адсорбционных слоев на поверхности (0001) GaN в широком диапазоне температур осаждения и давлений галлия и азота с учетом следующих компонентов: атомы галлия, атомы азота и молекулы NH. На основании сопоставления экспериментальных данных по структуре поверхности GaN и расчетных данных по составу адсорбционных слоев на поверхности роста сделано предположение о том, что во всем диапазоне условий молекулярно-лучевой эпитаксии рост слоев GaN лимитируется доставкой галлия.

PACS: 68.35.Dv, 68.37.Ps, 68.47.Fg, 68.55.Ln

1. Введение

В современной твердотельной электронике широко используются нитриды элементов III группы таблицы Д.И. Менделеева, представляющие собой широкозонные полупроводники с прямыми оптическими переходами. Благодаря своим уникальным свойствам эти соединения могут применяться для изготовления оптоэлектронных приборов, работающих в сине-зеленом и ультрафиолетовом диапазоне, а также при высоких температурах, частотах и в агрессивных средах [1–4]. Особенно важные применения находят эпитаксиальные пленки нитридов. Однако большое рассогласование параметров решетки эпитаксиального слоя с параметрами материалов используемых подложек (сапфир, кремний, SiC) часто создает сложности при получении эпитаксиальных пленок таких соединений. В связи с этим большое значение приобретают исследования структуры поверхности роста, начальных стадий роста, поверхностных процессов в адсорбционном слое и механизмов роста при эпитаксии нитридов элементов III группы.

Задачей данной работы было выяснение механизма и лимитирующих стадий роста нитрида галлия при молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ). Для решения задачи проведено экспериментальное исследование поверхности эпитаксиальных слоев GaN с помощью атомно-силовой микроскопии, а также сделан расчет состава адсорбционных слоев на поверхности роста при молекулярно-лучевой эпитаксии GaN на подложках (0001) GaN. Такой подход использовался нами ранее при

изучении механизмов роста и легирования, поверхностных процессов при росте соединений III–V в различных системах: хлоридной, МОС-гидридной и молекулярно-лучевой эпитаксии [5,6].

2. Методика эксперимента

Эпитаксиальные слои нитрида галлия выращивались в установке молекулярно-лучевой эпитаксии „Катунь“ (ИФП СО РАН, г. Новосибирск) на подложках из сапфира (Al₂O₃) кристаллографической ориентации (0001).

Переменные параметры технологического процесса — плотность потока азота и температура. Азот в зону роста подавался в форме NH₃. Плотность потока азота варьировалась за счет изменения концентрации NH₃ в инертном газе от 0.5 до 24%, температура подложки (*T*) изменялась от 830 до 910°С. Поток галлия оставался постоянным во время роста пленок (давление $P_{\text{Ga}} = 10^{-3}$, 10^{-4} Па). Время роста во всех экспериментах составляло 1 ч, толщина слоев — от 1.5 до 2.5 мкм, интегральная скорость роста слоев практически не зависела от температуры эпитаксии. Изучение поверхности эпитаксиальных слоев GaN проводилось методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) на приборе Solver H 47 (фирма НТ МДТ, г. Зеленоград). По цифровым изображениям поверхностей определялись размеры, форма и плотность островков роста. Эти измерения проводились с помощью специализированной программы обработки данных АСМ, которая позволяет представить объект как в двумерном, так и в трехмерном изображении. Возможности программы управления позволяют проводить измерения

[¶] E-mail: bia@mail.tsu.ru

расстояний в плоскости и в пространстве, изменение масштаба во всех трех направлениях, производить вращение в любом направлении.

3. Результаты эксперимента

3.1. Влияние температуры

Как показали эксперименты, на поверхности образцов GaN наблюдаются островки роста овальной формы субмикронных размеров, объединяющиеся в конгломераты. Температурная зависимость плотности островков роста (N_d) представлена на рис. 1, *a*. Видно, что зависимость имеет вид кривой с максимумом при $T \approx 1160$ К (890°C). Поскольку нам не известно, на каком этапе развития островков проводится наблюдение ростовой поверхности, считать количественные результаты определения высоты и ширины островков роста абсолютными было бы не совсем верно. Мы предполагаем, что на протяжении всего времени роста островка сохраняется постоянным отношение высоты h к ширине L холмика.

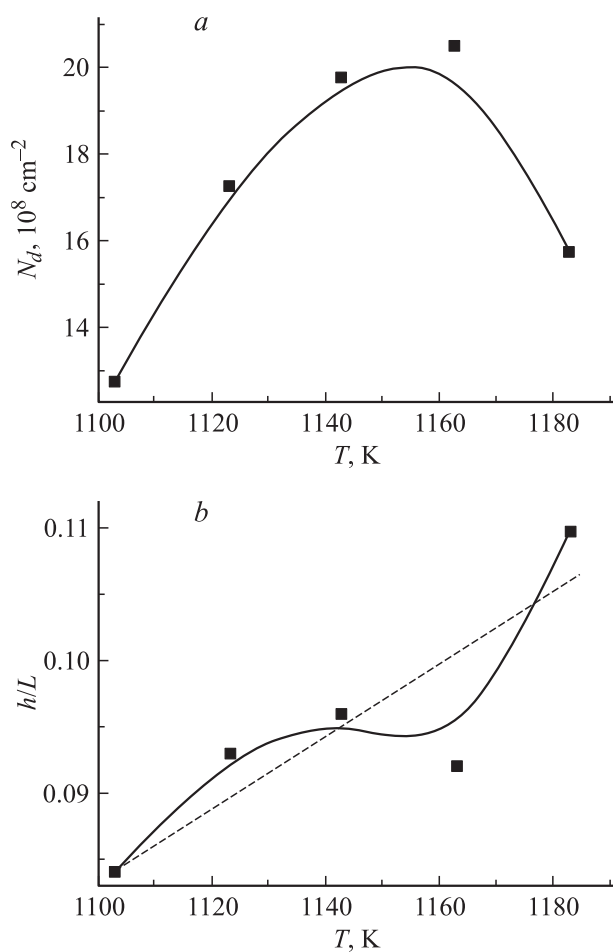


Рис. 1. Зависимости плотности островков роста N_d на поверхности GaN (*a*) и отношения высоты к ширине островков h/L (*b*) от температуры роста T при $P_{\text{Ga}} = 10^{-3}$ Па, $P_{\text{NH}_3} = 10^{-4}$ Па.

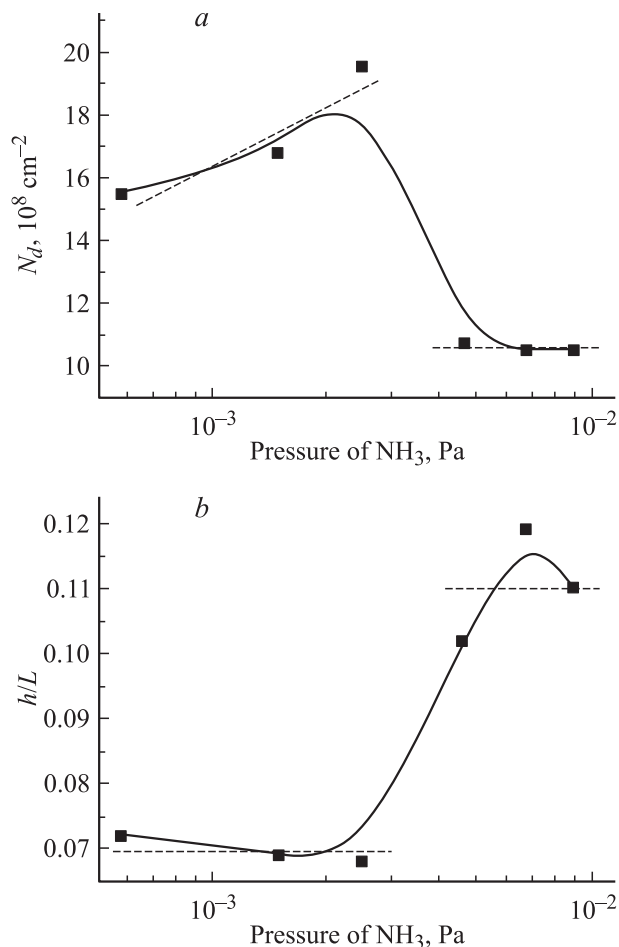


Рис. 2. Зависимости плотности островков N_d на поверхности GaN (*a*) и отношения высоты к ширине островков h/L (*b*) от давления NH_3 .

Как показали оценки, это отношение возрастает с увеличением температуры роста (рис. 1, *b*). Можно сделать вывод, что с ростом температуры осаждения островки становятся вытянутыми в направлении по нормали к поверхности, т.е. изменяется соотношение скоростей нормального и латерального роста островков.

3.2. Влияние плотности потока азота

Зависимости плотности островков роста N_d и отношения высоты к ширине островков h/L от давления NH_3 представлены на рис. 2, *a, b*.

Видно, что зависимость на рис. 2, *a* можно условно разделить на две части: сначала при увеличении концентрации (давления) азота происходит некоторое увеличение плотности островков, затем происходит резкий спад их плотности, а при дальнейшем увеличении давления NH_3 ($P_{\text{NH}_3} > 5 \cdot 10^{-3}$ Па) плотность островков не изменяется.

Зависимость h/L от давления аммиака имеет более сложный характер (рис. 2, *b*). Эту зависимость также можно разбить на две части: при увеличении давления

NH_3 до $2 \cdot 10^{-3}$ Па наблюдается слабое уменьшение отношения высоты к ширине островка. При увеличении давления аммиака от $P_{\text{NH}_3} = 2 \cdot 10^{-3}$ до $5 \cdot 10^{-3}$ Па наблюдается резкое увеличение h/L . Можно предположить, что при дальнейшем увеличении потока азота отношение h/L остается постоянным.

Таким образом, проведенные исследования показали, что плотность островков (центров) роста на стационарной ростовой поверхности (0001) GaN, а также соотношение нормальной и латеральной скоростей их роста существенным образом зависят от условий осаждения: температуры и плотности потока азота (давления NH_3 в системе).

Данные рис. 1, *b* свидетельствуют о постоянном увеличении отношения высоты островка к его ширине с ростом температуры, что можно интерпретировать как увеличение нормальной скорости его роста по сравнению с латеральной скоростью. Однако интегральная скорость роста слоя при этом остается постоянной. Так как между нормальной скоростью роста островков и интегральной скоростью роста слоя есть прямая связь, следует полагать, что в действительности происходит уменьшение скорости бокового разрастания островка.

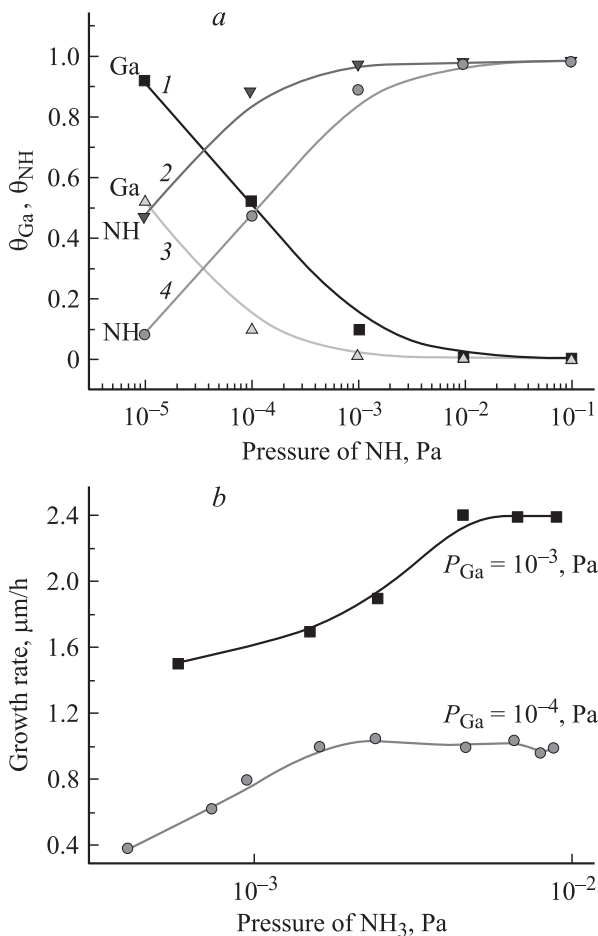


Рис. 3. Зависимости состава адсорбционного слоя на поверхности (0001) GaN (*a*) и скорости роста слоев GaN (*b*) от давления азота. $T = 870^\circ\text{C}$. *a*: $P_{\text{Ga}} = 10^{-3}$ Па (1, 4), 10^{-4} Па (2, 3).

Из зависимостей, представленных на рис. 2, *a, b*, следует, что существуют две области с различающимися условиями зарождения и развития центров роста на GaN. При малых концентрациях аммиака в потоке плотность центров определяется его подачей: растет с увеличением концентрации NH_3 . При этом отношение h/L практически постоянно, а интегральная скорость роста (рис. 3, *b*) увеличивается. Следовательно, увеличиваются одновременно как нормальная, так и латеральная скорости роста островка.

При увеличении давления аммиака интегральная скорость роста слоя и отношение h/L стабилизируются (на высоком уровне), при этом плотность центров падает и не зависит от концентрации аммиака (тоже стабильна). Можно полагать, что наблюдаемые процессы связаны с изменениями концентрации ростовых компонентов в адсорбционном слое на поверхности GaN.

3.3. Элементарные параметры поверхностных процессов

Элементарные параметры поверхностной диффузии мы оценивали по изображениям структуры поверхности с использованием методики [7]. При оценке средней длины поверхностной диффузии (λ_s) компонентов, лимитирующих рост слоя, λ_s считали равной половине расстояния между центрами роста, поскольку каждый островок образует вокруг себя область стока материала. Из оценок λ_s рассчитывали коэффициенты (D_s) и энергии активации (E_s) поверхностной диффузии по стандартным формулам. Оценки сделаны как для галлия, так и для азота, поскольку можно ожидать, что в различных условиях эксперимента (температура, давление компонентов) скорость роста слоя может лимитироваться поверхностной доставкой либо галлия, либо азота. Получены следующие величины параметров поверхностной диффузии: для диффузии атомов Ga на поверхности (0001) GaN $\lambda_s = 115$ нм, $E_s = 0.22$ эВ, $D_s = 4 \cdot 10^{-9}$ м²/с; для диффузии атомов N на поверхности (0001) GaN $\lambda_s = 115$ нм, $E_s = 2.3$ эВ, $D_s = 2.6 \cdot 10^{-18}$ м²/с.

Значения энергии активации поверхностной диффузии, полученные из плотности центров роста, близки к соответствующим значениям для диффузии атомов галлия и азота на поверхности GaN, известным из литературы [1].

4. Расчет состава адсорбционных слоев на поверхности (0001) GaN

В настоящее время существуют различные методы расчета состава адсорбционных слоев начиная от методов *ab initio* до примитивных расчетов в рамках модели Ленгмюра. С учетом сложности и многокомпонентности ростовой системы нами использовался кристаллохимический вариант расчета.

Впервые расчеты состава адсорбционных слоев (адслоев) в рамках модели ленгмюровской адсорбции с использованием кристаллохимических представлений были проведены в [8] для системы Si–H на поверхности Si(111). Была предложена термодинамическая модель формирования адсорбционного слоя, предусматривающая, что: 1) адсорбция газовых компонентов протекает на идеальной, лишенной стоков, поверхности кристалла выбранной ориентации за счет образования химических связей с атомами крайнего кристаллического слоя; 2) в результате протекания адсорбционно-десорбционных процессов между адсорбционным слоем и газовой фазой устанавливается равновесие; 3) взаимодействие между компонентами адсорбционного слоя носит электростатический характер, а возможность образования химических связей не рассматривается; 4) газовая фаза над поверхностью может быть описана моделью идеального газа. В рамках такой модели, используя уравнение адсорбции, описав для каждого сорта газовых молекул конфигурацию адсорбционного состояния на выбранной кристаллической поверхности и задав парциальные давления в газовой фазе, можно связать равновесные давления компонентов над поверхностью с долей занятых ими центров адсорбции и определить плотность вакантных мест.

В данной работе проведен расчет равновесного состава адсорбционных слоев на поверхности (0001) GaN при молекулярно-лучевой эпитаксии GaN из потоков галлия и аммиака. Расчет проводился в широком диапазоне температур (750–1000°C) и давлений ростовых компонентов ($P_{\text{Ga}} = 10^{-5} - 10^{-3}$ Па, $P_{\text{NH}_3} = 10^{-8} - 10^{-3}$ Па) по программе, составленной на языке C++ [9].

Методика и результаты расчета состава адсорбционных слоев при молекулярно-лучевой эпитаксии нитрида галлия подробно изложены в [10]. При молекулярно-лучевой эпитаксии GaN из потоков галлия и аммиака следует рассматривать присутствие в адсорбционном слое следующих компонентов: атомы галлия, атомы азота и радикалы NH_x [3,11,12]. В данной работе мы ограничились учетом следующих компонентов адсорбционного слоя: атомы галлия, атомы азота и молекулы NH. Расчет более сложных случаев, учитывающих одновременное присутствие в адслое атомов галлия, азота и всех радикалов NH_x , предполагается провести в дальнейших работах.

Выбор конфигураций адсорбции для компонентов Ga, N и NH осуществлялся в рамках кристаллохимического подхода. В рассматриваемых в данной работе условиях соединение GaN кристаллизуется в структуре вюрцита (гексагональная модификация цинковой обманки ZnS). Структура грани (0001) GaN аналогична структуре грани (111) сфалерита, т.е. эта грань формируется атомами Ga или N, имеющими по одной оборванной связи, направленной перпендикулярно поверхности.

В работе [3] при исследовании поверхностных свойств нитридов показано, что при температурах $> 700^\circ\text{C}$ поверхность (0001) GaN стабилизирована атомами галлия

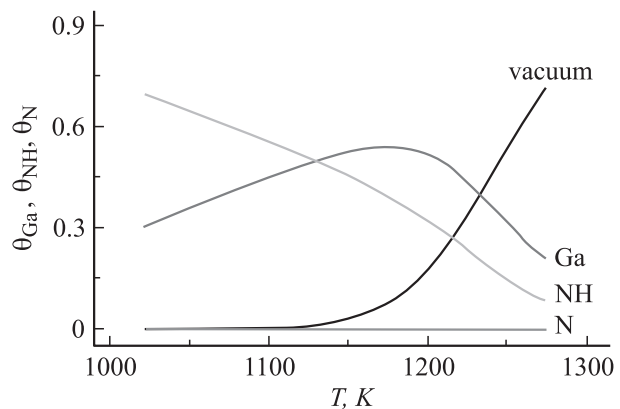


Рис. 4. Зависимость состава адсорбционного слоя на поверхности (0001) GaN от температуры роста. $P_{\text{Ga}} = 10^{-3}$ Па, $P_{\text{NH}_3} = 10^{-4}$ Па.

и не реконструирована. Эту модель нереконструированной поверхности мы использовали в расчетах.

Проведенные ранее квантово-механические расчеты хемосорбции атомов кремния на (111) Si [13] и аналогичные расчеты для атомов галлия на поверхности (111)A GaAs показали, что наиболее выгодной в этих случаях является трехцентровая адсорбция атомов. С учетом этих данных мы предполагали, что основной формой адсорбции атомов Ga на грани (0001) GaN является трехцентровая адсорбция. Для атомов N и молекул NH рассматривали одноцентровую адсорбцию. Расчет энергии связи Ga–N, проведенный в соответствии с [14], дал величину 336 кДж/моль, которая удовлетворительно согласуется со значением энергии связи Ga–N ~ 340 кДж/моль, полученным в [12] из экспериментов по исследованию поверхности (0001) GaN методом ультрафиолетовой фотоэмиссионной спектроскопии. Необходимые для расчетов силовые постоянные валентных колебаний брали из соответствующей спектроскопической литературы [15–21].

На рис. 4 приведены температурные зависимости степеней покрытия поверхности (0001) GaN различными компонентами, рассчитанные для экспериментальных условий, соответствующих рис. 2. Можно видеть, что с увеличением температуры от 750 до 1000°C (1020–1270 K) степень покрытия поверхности атомами галлия (θ_{Ga}) изменяется по кривой с максимумом. Степень покрытия поверхности атомами азота (θ_{N}) слабо зависит от температуры, а степень покрытия поверхности молекулами NH (θ_{NH}) уменьшается с ростом температуры, что особенно заметно для низких давлений азота в газовой фазе [10].

Анализ результатов расчета состава адслоев на поверхности (0001) GaN [9] показал, что во всем рассматриваемом диапазоне условий азот присутствует в адслое в основном в виде молекул NH. Доля атомарного азота θ_{N} намного меньше. Диапазон условий, благоприятных для роста слоя GaN, когда степени

покрытия поверхности (0001) GaN атомами галлия и молекулами NH имеют сопоставимые величины, достаточно широк: $P_{\text{Ga}} = 10^{-4} - 10^{-3}$ Па, $P_{\text{NH}} = 10^{-6} - 10^{-4}$ Па, $P_{\text{Ga}} \approx (1 - 100)P_{\text{ΣN}}$, $T = 800 - 950^\circ\text{C}$. Большая часть этого диапазона давлений соответствует избытку галлия в газовой фазе. По-видимому, учет всех радикалов NH_x будет сдвигать диапазон давлений, благоприятных для роста слоя, в сторону азотсодержащих компонентов. Полученные результаты позволяют полагать, что рост GaN в рассматриваемых условиях осуществляется за счет диссоциации NH_3 на NH_x и водород, который затем десорбируется с поверхности, что совпадает с литературными данными по диссоциативной адсорбции NH_3 при росте нитрида галлия в процессе МЛЭ [3,12].

Зависимости степени покрытия поверхности (0001) GaN атомами галлия и молекулами NH от давления азота в газовой фазе приведены на рис. 3, а для давлений галлия в системе $P_{\text{Ga}} = 10^{-3}$ и 10^{-4} Па и температуры осаждения 870°C . Видно, что степень покрытия поверхности атомами Ga растет с понижением давления азота. Азотные компоненты преобладают в адслое при давлениях $P_{\text{NH}} > 10^{-4}$ Па, а доля атомов Ga в адслое при этих условиях уменьшается. С понижением давления азота θ_{NH} уменьшается, а θ_{Ga} возрастает. Характер зависимостей степени покрытия поверхности галлиевыми и азотными компонентами остается неизменным при изменении давления галлия в системе.

Отметим, что рассчитанные нами зависимости состава адсорбционных слоев на поверхности от температуры и давлений галлия и азота при МЛЭ GaN [10] хорошо согласуются с имеющимися в литературе данными [3].

5. Обсуждение результатов

При экспериментальном исследовании поверхности эпитаксиальных слоев нитрида галлия, выращенного методом МЛЭ, установлено, что основным элементом поверхностного рельефа являются островки, плотность и размеры которых зависят от условий роста. Измерения температурной зависимости геометрических параметров островков показывают, что отношение высоты в центре островка к его ширине увеличивается с температурой (рис. 1, б). При этом для h/L характерны два участка относительной независимости от концентрации азота (рис. 2, б).

Скорость роста слоя в диапазоне $830 - 910^\circ\text{C}$ практически не зависит от температуры. Изменение потока NH_3 вначале приводит к увеличению скорости роста, которая достигает своего максимального значения и затем остается постоянной (рис. 3, б).

Сопоставление результатов расчета состава адсорбционных слоев с экспериментальными данными по исследованию структуры поверхности эпитаксиальных слоев GaN методом атомно-силовой микроскопии позволило обнаружить ряд корреляций между зависимостями состава адслоев, скорости роста и параметров поверх-

ностной структуры слоев GaN от температуры роста и давления компонентов галлия и азота в газовой фазе. Такое сопоставление расчетных и экспериментальных данных возможно, так как в эксперименте мы наблюдаем ростовую поверхность слоя GaN толщиной > 1 мкм и влияние материала подложки на процессы роста отсутствует.

5.1. Влияние температуры

Сопоставление температурных зависимостей плотности центров роста N_d (рис. 1, а) и расчетных степеней покрытия поверхности различными компонентами (рис. 4) показывает, что зависимости $N_d(T)$ и $\theta_{\text{Ga}}(T)$ имеют вид кривых с максимумом, причем положение максимумов на оси температур практически совпадает. Можно предполагать, что образование центров роста на поверхности GaN лимитируется доставкой галлия.

Из температурных зависимостей геометрических параметров островков (рис. 1, б) следует, что скорость бокового разрастания островка уменьшается с ростом температуры осаждения. Так как интегральная скорость роста слоя (нормальная скорость роста островка) определяется потоком галлия, то уменьшение латеральной скорости роста может быть обусловлено уменьшением поверхностной концентрации азотсодержащего компонента, что подтверждается расчетными данными по температурной зависимости степени покрытия поверхности азотными компонентами (рис. 4).

5.2. Центры роста

Наблюдается корреляция между экспериментальными зависимостями плотности центров роста от давления аммиака $N_d(P_{\text{NH}_3})$ (рис. 2, а) и расчетными зависимостями степени покрытия поверхности молекулами NH от давления NH $\theta_{\text{NH}}(P_{\text{NH}})$ (рис. 3, а): плотность центров роста сначала увеличивается с ростом потока NH_3 , а затем резко падает, что связано с выходом зависимости $\theta_{\text{NH}}(P_{\text{NH}})$ на насыщение. Степень покрытия поверхности галлием при этом резко снижается (рис. 3, а). Интегральная скорость роста V сначала растет, а затем выходит на насыщение (рис. 3, б). Особые точки (точки перегиба) на кривых $N_d(P_{\text{NH}_3})$ и $V(P_{\text{NH}_3})$, отсчитываемые по шкале давлений NH_3 , совпадают.

Отсюда следует, что резкое падение плотности центров роста связано с уменьшением поверхностной концентрации галлия (рис. 3, а), определяющей число центров зарождения новых слоев на сингулярной грани (0001) GaN.

5.3. Скорость роста

Наблюдается качественное соответствие экспериментальных зависимостей скорости роста слоев $V(P_{\text{NH}_3})$ (рис. 3, б) и расчетных $\theta_{\text{NH}}(P_{\text{NH}})$ (рис. 3, а): те и другие имеют вид кривых с насыщением. Увеличение давления

галлия сдвигает выход на насыщение как экспериментальных, так и расчетных зависимостей в область больших давлений азотсодержащих компонентов. Несовпадение точек выхода на насыщение при сопоставлении эксперимента и расчета легко устраняется, если учесть, что при выбранной ростовой температуре лишь малая часть (2.5–3%) NH_3 распадается на составляющие NH_x , участвующие в процессе роста [1,22].

Таким образом, можно было бы полагать, что при малых давлениях NH_3 рост слоев лимитируется доставкой азота, вероятно, в форме NH . Этих молекул на поверхности существенно меньше, чем атомов галлия (рис. 3, а). Затем по мере увеличения плотности потока NH_3 галлий вытесняется из адсорбционного слоя, степень покрытия атомами галлия уменьшается и выходит на некоторый постоянный уровень. В этом случае уже недостаток галлия становится фактором, лимитирующим скорость роста. Однако, как показали оценки, сделанные на основании изучения структуры поверхности, коэффициент поверхностной диффузии D_s для атомов азота имеет очень малую величину (для молекул NH он еще меньше), что должно приводить к очень малым плотностям поверхностных потоков азота, не способным обеспечить наблюдаемые скорости роста. В то же время значения E_s и D_s для галлия вполне укладываются в разумные пределы. В связи с этим можно предположить иной вариант развития поверхностных процессов при варьировании давления аммиака. Во всем диапазоне давлений P_{NH_3} рост слоев GaN лимитируется доставкой галлия. Увеличение давления аммиака в области малых давлений P_{NH_3} приводит к увеличению степени покрытия поверхности азотными компонентами и к большей вероятности встречи легко диффундирующего галлия с малоподвижными молекулами NH . Соответственно увеличивается и скорость роста.

6. Заключение

С помощью метода атомно-силовой микроскопии проведены экспериментальные исследования влияния условий роста на структуру поверхности эпитаксиальных слоев GaN, выращенных молекулярно-лучевой эпитаксией.

Получены значения плотности, высоты и ширины центров роста в зависимости от условий эпитаксии, выполнены оценки средней длины диффузионного пробега частиц, лимитирующих скорость роста GaN, рассчитаны энергии активации поверхностной диффузии и коэффициенты поверхностной диффузии для этих частиц.

Проведены расчеты равновесного состава адсорбционных слоев GaN на поверхности (0001) GaN в широком диапазоне температур осаждения и давлений галлия и азота с учетом следующих компонентов: атомы галлия, атомы азота и молекулы NH .

На основании сопоставления экспериментальных данных по структуре поверхности GaN и расчетных данных

по составу адсорбционных слоев сделано предположение о том, что во всем диапазоне условий молекулярно-лучевой эпитаксии рост слоев GaN лимитируется доставкой галлия.

Таким образом, сочетание расчетных и *ex situ* экспериментальных методов исследования состава адсорбционных слоев и рельефа ростовых поверхностей эпитаксиальных слоев позволяет получить важную информацию о механизме роста, лимитирующих стадиях и элементарных стадиях поверхностных процессов (адсорбция, поверхностная диффузия), происходящих на фронте кристаллизации при эпитаксии полупроводниковых соединений, в частности при молекулярно-лучевой эпитаксии нитрида галлия.

Авторы выражают благодарность своим коллегам Л.Г. Лаврентьевой, С.В. Субачу, Б.В. Семягину, М.А. Путьято, Д.Н. Щеглову за плодотворное сотрудничество.

Список литературы

- [1] С.А. Кукушкин, В.Н. Бессолов, А.В. Осипов, А.В. Лукьянов. ФТТ, **43** (12), 2135 (2001).
- [2] В.Н. Бессолов, Ю.В. Жилев, Е.В. Коненкова. Письма ЖТФ, **27** (23), 66 (2001).
- [3] S.Yu. Karpov, R.A. Talalaev, Yu. Makarov, J. Massies, V. Damilano. Surf. Sci., **450**, 191 (2000).
- [4] R. Shechar, K.F. Jensen. Surf. Sci., **381**, 161 (1997).
- [5] И.А. Бобровникова, И.В. Ивонин. Изв. вузов. Физика, **46** (6), 44 (2003).
- [6] Л.Г. Лаврентьева, И.А. Бобровникова, М.Д. Вилисова. Изв. вузов. Материалы электронной техники, № 4, 35 (1998).
- [7] И.В. Ивонин. В кн.: *Проблемы роста полупроводниковых кристаллов и пленок* [Деп. ВИНТИ (естеств. и точн. науки), 1986, № 4 (102), ч. 1, № 158–80].
- [8] А.А. Чернов, Н.С. Папков. Кристаллография, **22** (1), 35 (1977).
- [9] И.А. Бобровникова, С.В. Субач. Ред. журн. „Изв. вузов. Физика“ [Деп. ВИНТИ 25.12.2002. № 2245-В 2002].
- [10] И.А. Бобровникова, С.В. Субач, В.А. Новиков, Т.А. Шилова. Изв. вузов. Физика (Томск, 2006) [Деп. ВИНТИ. Рег. № 1101-В2006, 24.08.2006].
- [11] J. Fritsch, O.F. SanKey, J.V. Page. Surf. Sci., **427–428**, 298 (1999).
- [12] V.M. Bermudez. Chem. Phys. Lett., **317**, 290 (2000).
- [13] М.П. Рузайкин, А.Б. Свечников, О.Г. Либединец. Поверхность. Физика, химия, механика, № 8, 17 (1987).
- [14] Л. Полинг. *Общая химия* (М., Мир, 1964).
- [15] К.П. Хьюбер, Г. Герцберг. *Константы двухатомных молекул* (М., Мир, 1984) т. 1, 2.
- [16] К. Кольрауш. *Спектры комбинационного рассеяния* (М., ИЛ, 1952).
- [17] Молекулярные постоянные неорганических соединений (Л., Химия, 1979).
- [18] Г. Герцберг. *Спектры и строение двухатомных молекул* (М., ИЛ, 1949).
- [19] Т. Коттрелл. *Прочность химических связей* (М., ИЛ, 1956).

- [20] Г. Герцберг. *Электронные спектры и строение многоатомных молекул* (М., Мир, 1969).
- [21] *Handbook of Chemistry and Physics, 76th edition* (Florida, CRC Press Inc., 1995–1996).
- [22] Landolt-Borstein. Numerical data and functional relationships in science and technology, **17**, 220 (1984).

Редактор Л.В. Шаронова

Theoretical and experimental study of surface processes in molecular-beam epitaxy of GaN

I.A. Bobrovnikova, I.V. Ivonin, V.A. Novikov, V.V. Preobrazhenskii⁺

Tomsk State University,
634050 Tomsk, Russia

⁺ Institute of Semiconductor Physics,
Russian Academy of Sciences, Siberian Branch,
630090 Novosibirsk, Russia

Abstract Effect of growth conditions on the surface structure of GaN layers grown by molecular beam epitaxy is studied using atomic-force microscopy. Numerical values of the growth center density, height, and width are obtained as a function of the growth conditions. A mean diffusion length is estimated, surface diffusion activation energies and coefficients are calculated for the particles limiting the GaN growth rate. An equilibrium composition of the adsorption layers on the (0001) GaN surface is calculated in a wide range of growth temperatures and gallium and nitrogen pressures. The following components are taken into account: gallium and nitrogen atoms and NH molecules. On the basis of the comparison of experimental data on the GaN surface structure with the calculation data on the adsorption layer composition on the growth surface, it is assumed that the growth of GaN layers is limited by the gallium supply for the whole range of the epitaxy conditions.