08

Зависимость состава одномерных наноструктур тройных соединений III–V от шага и ширины канавок при селективной эпитаксии

© В.Г. Дубровский

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
E-mail: v.dubrovskii@spbu.ru

Поступило в Редакцию 26 июня 2026 г.
В окончательной редакции 19 августа 2026 г.
Принято к публикации 24 августа 2026 г.

Проведен теоретический анализ зависимостей состава планарных нитевидных нанокристаллов тройных соединений III–V, основанных на смешении атомов группы III, от шага и ширины литографических канавок. Показано, что в кинетическом режиме роста увеличение шага и уменьшение ширины канавок приводит к отклонениям от линейного распределения пар–кристалл $x = z$, вызванным различными диффузионными длинами адатомов группы III на поверхности маски. При уменьшении пересыщения пара наблюдается переход к более сложным нелинейным зависимостям состава от геометрии.

Ключевые слова: планарные нитевидные нанокристаллы, тройные соединения III–V, состав, моделирование.

DOI: 10.61011/PJTF.2027.01.64111.20823

Хорошо известно, что одномерные наноструктуры типа нитевидных нанокристаллов (ННК) позволяют выращивать тройные соединения III–V в сильно рассогласованных по параметру решетки системах материалов, интегрировать их с кремниевой электронной платформой и использовать преимущества, связанные с одномерным транспортом носителей заряда и направленным излучением [1]. Вертикальные ННК [1–4], однако, не всегда удобны для создания приборов с электрической накачкой в связи с проблемами изготовления верхнего контакта. Поэтому в последнее время возросло число работ, посвященных планарным III–V наномембранам [5–8] и ННК [9–17], которые выращиваются методом селективной эпитаксии (СЭ) в упорядоченных массивах литографических канавок в оксидном слое (например, SiO_x) на полупроводниковой подложке. Рост одномерных III–V наноструктур методом СЭ можно проводить и на рассогласованных подложках Si с подавлением дислокаций несоответствия при достаточно малой ширине канавок [1,9]. Моделирование состава вертикальных ННК тройных соединений III–V, выращиваемых по механизму пар–жидкость–кристалл, достаточно хорошо развито (см., например, обзоры [2–4]). Моделирование роста в механизме СЭ проводилось в основном для бинарных соединений III–V [14–17]. Поэтому целью настоящей работы является теоретическое исследование зависимости состава планарных ННК тройных соединений III–V, основанных на смешении атомов группы III, от шага и ширины литографических канавок.

Рассмотрим процесс СЭ тройного ННК $A_xB_{1-x}C$ (атомы A и B принадлежат группе III, а атомы C — группе V) из атомарных газовых потоков I_A, I_B и I_C в одномерном массиве бесконечно длинных канавок шириной W с расстоянием между центрами канавок (шагом) P. Стационарный состав тройного соединения $A_xB_{1-x}C$ полностью определяется диаграммой состава, или распределением пар–кристалл, связывающим состав твердого раствора x с составом пара z [18,19]. Состав пара равен

$$z = \frac{I_A}{I_A + I_B}. \tag{1}$$

При исследовании процесса СЭ естественно считать, что рост лимитирован диффузионными потоками адатомов группы III, в противном случае на поверхности образовывалась бы жидкость AB. Решение одномерной задачи для трех диффузионных потоков в условиях, обогащенных по группе V, проводится аналогично [19]. Кроме диффузионных потоков мы учитываем прямое попадание атомов A и B на поверхность ННК из пара. Это рассмотрение приводит к следующему результату:

$$z = \frac{x + g(x)}{c + (1 - c)x}. \tag{2}$$

Здесь c — кинетический коэффициент, зависящий от P, W и двух диффузионных длин адатомов группы III λ_A и λ_B,

$$c = \frac{1 + (2\lambda_A/W)\tanh\left[(P - W)/2\lambda_A\right]}{1 + (2\lambda_B/W)\tanh\left[(P - W)/2\lambda_B\right]}. \tag{3}$$

Функция $g(x)$ описывает отраженные потоки

$$g(x) = \Gamma x(1 - x)\left[ce^{\omega(1-x)^2} - \beta e^{\omega x^2}\right] \tag{4}$$

и содержит три параметра: псевдобинарную константу взаимодействия ω (в единицах k_BT), параметр пересы-

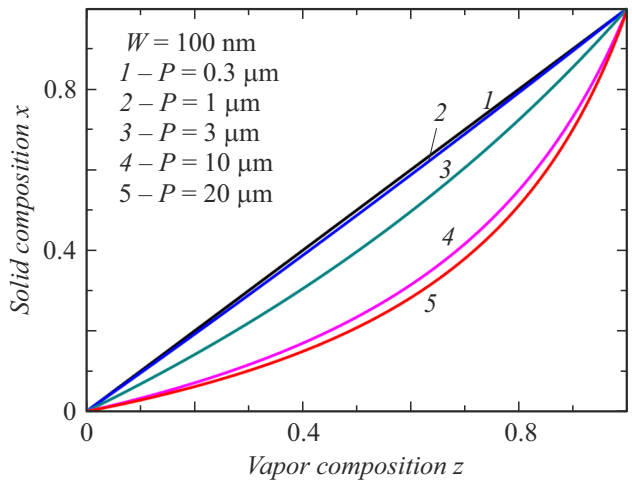


Рис. 1. Распределения пар–кристалл планарных ННК $A_xB_{1-x}C$ в кинетическом режиме при $\lambda_A = 1000\,\text{nm}$, $\lambda_B = 4000\,\text{nm}$, фиксированной толщине $W = 100\,\text{nm}$ и различных шагах P от 0.3 до $20\,\mu\text{m}$.

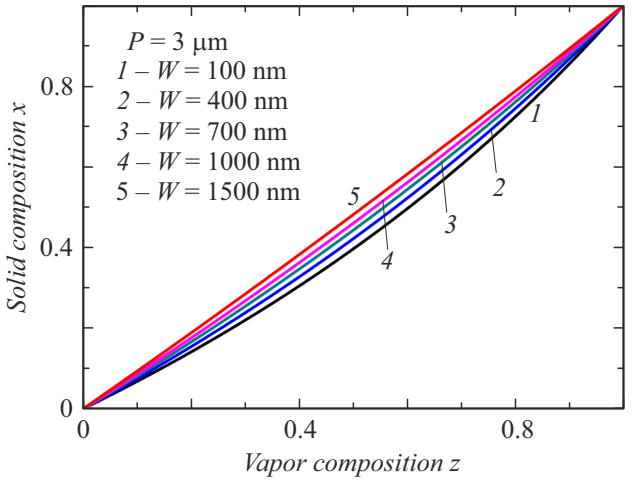


Рис. 2. Распределения пар–кристалл планарных ННК $A_xB_{1-x}C$ в кинетическом режиме при $\lambda_A = 1000\,\text{nm}$, $\lambda_B = 4000\,\text{nm}$, фиксированном шаге $P = 3\,\mu\text{m}$ и различных толщинах W от 100 до 1500 nm.

щения Γ и параметр аффинности β. Последние определяются согласно

$$\Gamma = \frac{(n_A n_C)^{eq}}{I_C(I_A + I_B)\tau_A\tau_C}, \qquad \beta = \frac{\tau_A}{\tau_B}\frac{(n_B n_C)^{eq}}{(n_A n_C)^{eq}}, \qquad (5)$$

где $(n_A n_C)^{eq}$, $(n_B n_C)^{eq}$ — равновесные активности пар AC, BC; τ_A, τ_B — времена жизни адатомов A, B на поверхности при температуре T. Очевидно, Γ уменьшается при увеличении потоков $I_A + I_B$ и I_C.

Проанализируем полученное распределение пар–кристалл. Очевидно, при высоких пересыщениях пара ($\Gamma \to 0$) влияние отраженных потоков пренебрежимо мало. В этом кинетическом режиме, часто реализующемся в сильно неравновесных условиях эпитаксиального роста наноструктур [2,4,16–19], распределение (2) сводится к однопараметрической формуле Ленгмюра–МакЛина [20]:

$$x = \frac{cz}{1 + (c-1)z}. \qquad (6)$$

Константа c описывает различия в диффузионном транспорте адатомов A и B в ННК. Согласно (3), $c \to 1$ при $(P - W)/2\lambda_k \ll 1$ и $c \to (W + 2\lambda_A)/(W + 2\lambda_B)$ при $(P - W)/2\lambda_k \gg 1$ для адатомов $k = A, B$. Таким образом, различие в диффузионных длинах λ_A и λ_B проявляется только при больших расстояниях $(P - W)/2$. При малых $(P - W)/2$ имеет место полный сбор адатомов обоих элементов A и B с поверхности, и распределение пар–кристалл принимает вид $x = z$. Это свойство иллюстрируется рис. 1 и 2 для системы с диффузионными длинами $\lambda_A = 1000\,\text{nm}$, $\lambda_B = 4000\,\text{nm}$. Поскольку диффузионная длина адатомов A в 4 раза меньше, чем адатомов B, для уединенного ННК наблюдается нелинейная зависимость с $x < z$ для всех составов. Разница

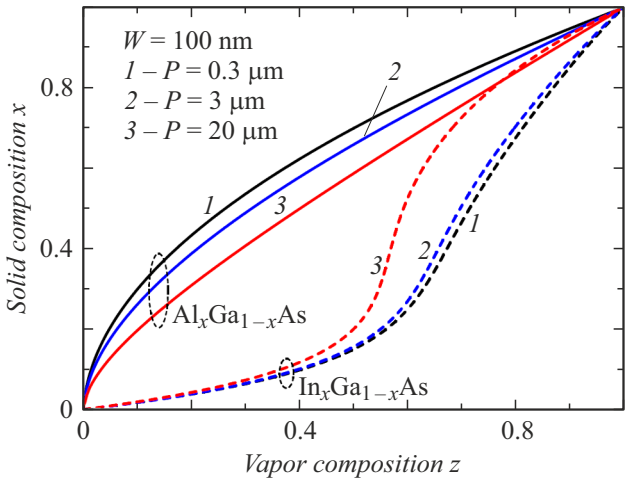


Рис. 3. Распределения пар–кристалл планарных ННК $Al_xGa_{1-x}As$ при $T = 600\,^\circ\text{C}$, $\Gamma = 0.05$ и $In_xGa_{1-x}As$ при $T = 450\,^\circ\text{C}$ и $\Gamma = 0.5$, фиксированной ширине $W = 100\,\text{nm}$ и различных шагах P от 0.3 до $20\,\mu\text{m}$.

в диффузионных длинах нивелируется при уменьшении P до значения $\sim 1\,\mu\text{m}$ (рис. 1). Зависимость от ширины канавки W при фиксированном шаге P (рис. 2) обратна зависимости от P при фиксированном значении W (рис. 1), однако она более слабая и проявляется лишь для микрокристаллов шириной порядка $1\,\mu\text{m}$.

Рассмотрим теперь более сложный режим роста при конечных пересыщениях, когда влияние функции $g(x)$ в распределении (2) является существенным. На рис. 3 изображены распределения, примерно соответствующие термодинамическим параметрам систем $Al_xGa_{1-x}As$ при $T = 600\,^\circ\text{C}$ и $In_xGa_{1-x}As$ при $T = 450\,^\circ\text{C}$ [21]. Система $Al_xGa_{1-x}As$ является решеточно-согласованной, поэтому параметр ω равен нулю. Атомы Al имеют

большую аффинность в сравнении с атомами Ga, что соответствует $\beta = 20$, но меньшую диффузионную длину ($\lambda_{Al} = 1000\,nm$, $\lambda_{Ga} = 4000\,nm$, как и на рис. 1, 2). Напротив, сильно рассогласованная система $In_xGa_{1-x}As$ характеризуется большим значением $\omega = 2.373$ при $T = 450\,^{\circ}C$, что соответствует широкой запрещенной области по составу в равновесии [2–4,18,19,21]. Аффинность атомов In меньше, чем Ga ($\beta = 0.05$), а их диффузионная длина больше, чем у Ga ($\lambda_{In} = 6000\,nm$, $\lambda_{Ga} = 2000\,nm$). На рис. 3 представлен расчет по формуле (2) при $\Gamma = 0.05$ для $Al_xGa_{1-x}As$ и $\Gamma = 0.5$ для $In_xGa_{1-x}As$. Из рисунка видно, что в близких к равновесию ростовых процессах характер кривых $x(z)$ становится более нелинейным для обеих систем материалов, в особенности для $In_xGa_{1-x}As$. При этом кривые для ННК $Al_xGa_{1-x}As$ выгнуты в другую сторону, чем на рис. 1 и 2, при тех же диффузионных длинах, что свидетельствует о доминирующем вкладе аффинности в диаграмму состава.

Таким образом, построена аналитическая модель, позволяющая рассчитывать распределения пар–кристалл в планарных ННК тройных соединений III–V, основанных на смешении атомов группы III, в зависимости от геометрических параметров P и W при СЭ. Представляют интерес экспериментальное исследование данных распределений в различных системах материалов и сравнение экспериментальных и расчетных данных. Это будет являться предметом отдельной публикации.

Финансирование работы

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда и Санкт-Петербургского научного фонда № 26-12-20010 (https://rscf.ru/project/26-12-20010).

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] G. Boras, X. Yu, H. Liu, J. Semicond., **40**, 101301 (2019). DOI: 10.1088/1674-4926/40/10/101301
[2] V.G. Dubrovskii, J. Phys. D, **50**, 453001 (2017). DOI: 10.1088/1361-6463/aa87a7
[3] M. Ghasemi, E.D. Leshchenko, J. Johansson, Nanotechnology, **32**, 072001 (2021). DOI: 10.1088/1361-6528/abc3e2
[4] E.D. Leshchenko, V.G. Dubrovskii, Nanomaterials, **13**, 1659 (2023). DOI: 10.3390/nano13101659
[5] J. Yoon, MRS Adv., **2**, 1591 (2017). DOI: 10.1557/adv.2017.139
[6] X. Yuan, D. Pan, Y. Zhou, X. Zhang, K. Peng, B. Zhao, M. Deng, J. He, J.H.H. Tan, C. Jagadish, Appl. Phys. Rev., **8**, 021302 (2021). DOI: 10.1063/5.0044706
[7] C.-Y. Chi, C.-C. Chang, S. Hu, T.-W. Yeh, S.B. Cronin, P.D. Dapkus, Nano Lett., **13**, 2506 (2013). DOI: 10.1021/nl400561j
[8] G. Tutuncuoglu, M. de la Mata, D. Deiana, H. Potts, F. Matteini, J. Arbiol, A. Fontcuberta i Morral, Nanoscale, **7**, 19453 (2015). DOI: 10.1039/C5NR04821D
[9] P. Aseev, A. Fursina, F. Boekhout, F. Krizek, J.E. Sestoft, F. Borsoi, S. Heedt, G. Wang, L. Binci, S. Martí-Sánchez, T. Swoboda, R. Koops, E. Uccelli, J. Arbiol, P. Krogstrup, L.P. Kouwenhoven, P. Caroff, Nano Lett., **19**, 218 (2019). DOI: 10.1021/acs.nanolett.8b03733
[10] J. Qu, D.V. Beznasyuk, M. Cassidy, R. Tanta, L. Yang, N.P. Holmes, M.J. Griffith, P. Krogstrup, J.M. Cairney, ACS Appl. Mater. Interfaces, **14**, 47981 (2022). DOI: 10.1021/acsami.2c09594
[11] J. Gooth, M. Borg, H. Schmid, V. Schaller, S. Wirths, K. Moselund, M. Luisier, S. Karg, H. Riel, Nano Lett., **17**, 2596 (2017). DOI: 10.1021/acs.nanolett.7b00400
[12] M. Friedl, K. Cerveny, P. Weigele, G. Tütüncüoglu, S. Marti-Sanchez, C. Huang, T. Patlatiuk, H. Potts, Z. Sun, M.O. Hill, L. Güniat, W. Kim, M. Zamani, V.G. Dubrovskii, J. Arbiol, L.J. Lauhon, D.M. Zumbühl, A. Fontcuberta i Morral, Nano Lett., **18**, 2666 (2018). DOI: 10.1021/acs.nanolett.8b00554
[13] P. Krogstrup, N.L.B. Ziino, W. Chang, S.M. Albrecht, M.H. Madsen, E. Johnson, J. Nygård, C.M. Marcus, T.S. Jespersen, Nat. Mater., **14**, 400 (2015). DOI: 10.1038/nmat4176
[14] M.E. Cachaza, A.W. Christensen, D. Beznasyuk, T. Særkjær, M.H. Madsen, R. Tanta, G. Nagda, S. Schuwalow, P. Krogstrup, Phys. Rev. Mater., **5**, 094601 (2021). DOI: 10.1021/acsami.2c09594
[15] A. Rothman, V.G. Dubrovskii, E. Joselevich, PNAS, **117**, 152 (2020). DOI: 10.1073/pnas.1911505116
[16] D. Dede, F. Glas, V. Piazza, N. Morgan, M. Friedl, L. Guniat, E. Nur Dayi, A. Balgarkashi, V.G. Dubrovskii, A. Fontcuberta i Morral, Nanotechnology, **33**, 48560 (2022). DOI: 10.1088/1361-6528/ac88d9
[17] N. Morgan, V.G. Dubrovskii, A.-K. Stief, D. Dede, M. Sanglé-Ferriere, A. Rudra, V. Piazza, A. Fontcuberta i Morral, Cryst. Growth Des., **23**, 5083 (2023). DOI: 10.1021/acs.cgd.3c00316
[18] V.G. Dubrovskii, E.D. Leshchenko, Phys. Rev. Mater., **7**, 056001 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.7.056001
[19] V.G. Dubrovskii, E.D. Leshchenko, Phys. Rev. Mater., **7**, 074603 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.7.074603
[20] D. McLean, *Grain boundaries in metals* (Oxford University Press, N.Y., 1957).
[21] V.G. Dubrovskii, Phys. Rev. Mater., **9**, 036002 (2025). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.9.036002