

УДК 621.315.592

## Молекулярно-лучевая эпитаксия твердого раствора $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$ : феноменологическое описание зависимости $x$ от условий роста на подложке GaAs(001)

© М.А. Путьято, Е.А. Емельянов<sup>¶</sup>, М.О. Петрушков, А.В. Васев, Б.Р. Семягин, В.В. Преображенский

Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук, 630090 Новосибирск, Россия

<sup>¶</sup> E-mail: e2a@isp.nsc.ru

Получена в Редакцию 14 октября 2022 г.

В окончательной редакции 31 января 2023 г.

Принята к публикации 23 февраля 2023 г.

С применением феноменологической модели описаны экспериментальные зависимости доли фосфора в твердом растворе  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$  от условий его выращивания методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложках GaAs(001) из потоков молекул  $\text{As}_2$  и  $\text{P}_2$ . Модель построена на основе устоявшихся представлений о процессе молекулярно-лучевой эпитаксии соединений  $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ . Отношение коэффициентов встраивания атомов мышьяка и фосфора рассматривалось как функция температуры подложки, плотности потоков молекул V группы и атомов Ga. Найдены эмпирические выражения, описывающие поведение отношения коэффициентов встраивания мышьяка и фосфора в зависимости от указанных параметров роста. Выражения позволяют оценивать величины потоков молекул V группы, обеспечивающие получение слоев  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$  с требуемым  $x$  при заданных значениях температуры подложки и плотности потока атомов Ga.

**Ключевые слова:** молекулярно-лучевая эпитаксия,  $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ , твердые растворы,  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$ , феноменологическая модель.

DOI: 10.21883/FTP.2023.02.55326.4225

### 1. Введение

Твердые растворы  $(\text{A}^{\text{III}}\text{P}_x\text{As}_{1-x})$  обладают уникальным сочетанием свойств, которые позволяют решать широкий круг задач зонной инженерии [1]. Например, изменяя  $x$  и  $y$  в  $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{P}_x\text{As}_{1-x}$ , можно независимо управлять шириной запрещенной зоны и постоянной кристаллической решетки этого материала. В согласованной системе  $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{P}_x\text{As}_{1-x}/\text{GaAs}$  ширина запрещенной зоны четверного раствора варьируется от 1.42 до 1.90 эВ, а в случае  $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{P}_x\text{As}_{1-x}/\text{InP}$  от 0.70 до 1.35 эВ. Почти во всем диапазоне составов соединения  $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{P}_x\text{As}_{1-x}$  является прямозонным полупроводником, что позволяет его использовать в структурах оптоэлектронных приборов. Также представляют интерес гетеросистемы, несогласованные по постоянной решетки, такие, например, как  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}/\text{GaAs}$ . На основе напряженных сверхрешеток  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}/\text{GaAs}$  создаются фотокатоды, генерирующие поток спин-поляризованных электронов. Степень поляризации электронов в таких приборах достигает 92% при квантовом выходе  $\sim 0.5\%$  [2]. Напряженные сверхрешетки формируются на релаксированных буферных слоях  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$ , выращенных на подложках GaAs.

Структуры, содержащие слои  $(\text{A}^{\text{III}}\text{P}_x\text{As}_{1-x})$ , выращивают различными способами, в том числе и методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ). При МЛЭ твердых растворов  $(\text{A}^{\text{III}}\text{P}_x\text{As}_{1-x})$  состав в катионной подрешетке эпитаксиального слоя однозначно задает-

ся плотностями потоков атомов элементов III группы. Состав же в подрешетке V группы сложным образом зависит от температуры подложки ( $T_s$ ), величины и соотношения потоков молекул элементов V и атомов III групп ( $J_V$  и  $J_{\text{III}}$ ), состава и состояния поверхности твердого раствора в процессе эпитаксии, молекулярной формы элементов V группы в потоке; кристаллографической ориентации поверхности подложки [3–7]. При разработке технологии выращивания гетероструктур, содержащих слои твердых растворов  $(\text{A}^{\text{III}}\text{P}_x\text{As}_{1-x})$ , возникает задача по подбору значений плотностей потоков молекул мышьяка и фосфора, обеспечивающих заданное значение  $x$  в выбранных условиях эпитаксии. Для ее решения выращивают тестовые образцы, определяют состав полученных пленок и при необходимости корректируют отношение потоков. Но такой подход требует значительных затрат времени и материалов. Тем не менее он актуален, что обусловлено следующими основными причинами. Во-первых, он надежен. Во-вторых, предложенные в литературе методы *in situ* контроля доли фосфора (мышьяка) имеют ограничения по условиям эпитаксии [8–10]. В-третьих, отсутствует методика, позволяющая *a priori* оценивать значения плотностей потоков молекул V группы для получения требуемого значения  $x$  в широком диапазоне ростовых условий. Создание такой методики является непростой задачей.

В литературе, посвященной проблемам выращивания методом МЛЭ твердых растворов  $(\text{A}^{\text{III}}\text{P}_x\text{As}_{1-x})$ , имеет-

ся обширный экспериментальный материал. Но сравнительный анализ результатов исследований, проведенных разными авторами, затруднен из-за отсутствия единых подходов как к измерению плотности молекулярных потоков элементов V группы и  $T_s$ , так и к представлению результатов этих измерений. Кроме того, в литературе встречаются противоречивые данные о характере влияния  $T_s$  на состав твердого раствора  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$  при МЛЭ. В работе [11] показано, что с ростом  $T_s$  доля фосфора в твердом растворе  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$  снижается. По данным других работ температура подложки либо не влияет на состав твердого раствора [12], либо доля фосфора увеличивается с ростом  $T_s$  [13]. В силу методической несогласованности и фрагментарности массива консолидированных экспериментальных данных не представляется возможным составить непротиворечивую картину влияния условий роста на состав твердых растворов  $(\text{A}^{\text{III}})\text{P}_x\text{As}_{1-x}$  при МЛЭ. Этим, в частности, обусловлена ограниченность существующих относительно простых стационарных кинетических моделей роста твердых растворов  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$  по диапазону условий роста. Ранее нами в работе [14] на базе полученных экспериментальных данных была предложена более сложная модель, учитывающая нестационарные процессы, протекающие на поверхности при двумерно-слоевом режиме роста. Экспериментальные данные охватывают широкий диапазон условий эпитаксии и получены в рамках единого методологического подхода к определению и контролю параметров роста. Модель удовлетворительно описывает как собственные экспериментальные данные из работы [14], так и позволяет разрешить присутствующие в литературных источниках противоречия по влиянию температуры. Но данная модель в значительной мере представляет интерес как инструмент анализа процессов и механизмов роста при МЛЭ твердых растворов  $(\text{A}^{\text{III}})\text{P}_x\text{As}_{1-x}$ . Для решения прикладных задач желательно иметь более простую модель. С этой точки зрения привлекательным представляется феноменологический подход, который не требует детального рассмотрения механизмов наблюдаемых экспериментальных зависимостей и привлечения дополнительных предположений. Но адекватность данного подхода к задаче по описанию зависимости  $x$  от параметров МЛЭ в широком диапазоне их значений неочевидна. Она требует подтверждения на примере типичного представителя твердых растворов  $(\text{A}^{\text{III}})\text{P}_x\text{As}_{1-x}$ . В данной работе реализован феноменологический анализ экспериментальных зависимостей доли фосфора в твердом растворе  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$  от условий МЛЭ на подложках GaAs(001) с использованием потоков молекул  $\text{As}_2$  и  $\text{P}_2$ . Анализ выполнен на базе экспериментальных данных, представленных как в работе [14], так и полученных в рамках данной работы.

## 2. Эксперимент

Образцы с твердым раствором  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$  выращены на подложках GaAs, отклоненных от грани (001) в направлении [110] на  $0.1^\circ$ . Параметры условий роста менялись в диапазонах:  $T_s$  от 400 до  $600^\circ\text{C}$ ;  $V_g$  от 0.25 до 2.5 мкм в час; отношение  $2J_{\text{As}_2}/J_{\text{Ga}}$  от 0.5 до 10; отношение  $2J_{\text{P}_2}/J_{\text{Ga}}$  от 1 до 16. Использовались потоки молекул  $\text{As}_2$  и  $\text{P}_2$ . Области условий выращивания образцов не пересекаются с областями существования межфазовых переходов между поверхностными структурами (ПС) на фазовых диаграммах, описывающих состояния поверхности в процессе роста. Как отмечалось выше,  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$  несогласован по постоянной решетки с GaAs. Чем больше значение  $x$ , тем больше рассогласование. При достижении растущей пленкой  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$  критической толщины начинается процесс ее пластической релаксации с введением дислокаций несоответствия. В нашем случае все пленки твердых растворов имели толщину, превышающую критическое значение, что обусловило их релаксацию в пределах от 3 до 80% в зависимости от состава и толщины. Условия выращивания образцов подробно описаны в работе [14].

В модельных расчетах использовались значения потоков молекул V группы, вычисленные по ионным токам ионизационного манометрического преобразователя, вводимого при измерениях в прямые потоки на позицию подложки. Среднее относительное отклонение от исходно установленного значения потоков для обоих элементов составляет  $\delta_j \approx \pm 5.5\%$ .

Дрейф плотности молекулярных потоков элементов V группы в процессе роста приводит к некоторой неоднородности состава твердого раствора по толщине эпитаксиальных пленок. Выращенные образцы исследовались методом рентгеноструктурного анализа, что позволяло достаточно точно определить средний по толщине пленки состав твердого раствора.

## 3. Описание модели

Модель основана на общепризнанных и экспериментально обоснованных представлениях о процессе МЛЭ соединений  $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ . При описании баланса процессов массопереноса при МЛЭ соединений  $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$  использовано понятие коэффициентов встраивания атомов ( $S$ ). Коэффициент  $S$  определен как отношение количества атомов, встроившихся в кристаллическую решетку эпитаксиальной пленки за некоторый промежуток времени, к количеству атомов, поступивших на поверхность в той или иной молекулярной форме за этот же промежуток времени. Коэффициент встраивания атомов III группы в типичных условиях эпитаксии равен 1. Поэтому состав твердых растворов в катионной подрешетке однозначно задается соотношением потоков атомов металлов. Другая картина наблюдается при получении твердых растворов замещения по V группе. Коэффициенты встраива-

ния молекул элементов V группы меньше 1, зависят от условий роста и существенно различаются между собой. Поэтому описание поведения состава твердого раствора с замещением в анионной подрешетке от условий роста носит сложный характер.

При МЛЭ твердых растворов  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$  из потоков молекул  $\text{As}_2$  и  $\text{P}_2$  доля фосфора  $x$  связана с плотностью потоков элементов V группы равенством

$$x = \frac{J_{\text{P}_2} \times S_{\text{P}_2}}{J_{\text{P}_2} \times S_{\text{P}_2} + J_{\text{As}_2} \times S_{\text{As}_2}} = \frac{1}{1 + \frac{J_{\text{As}_2}}{J_{\text{P}_2}} \times R_s}, \quad (1)$$

где  $J_{\text{As}_2}$  и  $J_{\text{P}_2}$  — плотности потоков молекул  $\text{As}_2$  и  $\text{P}_2$ , а  $S_{\text{As}_2}$  и  $S_{\text{P}_2}$  — коэффициенты встраивания атомов мышьяка и фосфора при использовании молекул  $\text{As}_2$  и  $\text{P}_2$ , а  $R_s = S_{\text{As}_2}/S_{\text{P}_2}$ . Для оценки состава твердого раствора при заданном значении  $J_{\text{As}_2}/J_{\text{P}_2}$  с помощью выражения (1) необходимо знать значение  $R_s$ .

Параметр  $R_s$  сложным образом зависит от  $T_s$ ,  $J_{\text{As}_2}$ ,  $J_{\text{P}_2}$ , плотности потока атомов галлия ( $J_{\text{Ga}}$ ) и других параметров роста, в том числе и от состояния поверхности твердого раствора в процессе эпитаксии. Состояние поверхности характеризуется ПС и ее дефектами, а также концентрацией мест хемосорбции молекул элементов V группы, обусловленных встроившимися атомами галлия. Важно подчеркнуть, что состояние поверхности определяется  $T_s$ ,  $J_{\text{As}_2}$ ,  $J_{\text{P}_2}$  и  $J_{\text{Ga}}$ , и, в частности, отношением потоков молекул V и атомов III групп ( $J_{\text{V}}/J_{\text{Ga}}$ ). Поэтому в рамках феноменологического подхода параметр  $R_s$  рассматривался как функция  $T_s$ ,  $X = 2J_{\text{P}_2}/J_{\text{Ga}}$  и  $Y = 2J_{\text{As}_2}/J_{\text{Ga}}$  (при прочих равных условиях):  $R_s = R(X, Y, T_s)$ .

#### 4. Аппроксимационный анализ экспериментальных зависимостей $R_s$ от условий роста

Был выполнен анализ поведения  $R_s$  как функции условий роста без рассмотрения возможных внутренних механизмов анализируемых закономерностей. В процессе анализа подбирались наиболее простые функции, удовлетворительно аппроксимирующие экспериментальные зависимости. Аппроксимирующие функции определялись с применением пакета программ численного анализа данных и научной графики Origin. На основе выбранных функций получены выражения, позволяющие вычислять  $R_s$  по известным значениям  $J_{\text{As}_2}$ ,  $J_{\text{P}_2}$ ,  $J_{\text{Ga}}$  и  $T_s$ . Начальные значения коэффициентов аппроксимирующих функций, полученные средствами Origin, в дальнейшем были уточнены путем минимизации расхождения расчетных и экспериментальных данных в программной среде пакета математических программ MathCAD.

В работах [3,4,12] было показано, что составом твердого раствора  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$  можно эффективно управлять, варьируя  $J_{\text{As}_2}$  при прочих неизменных условиях

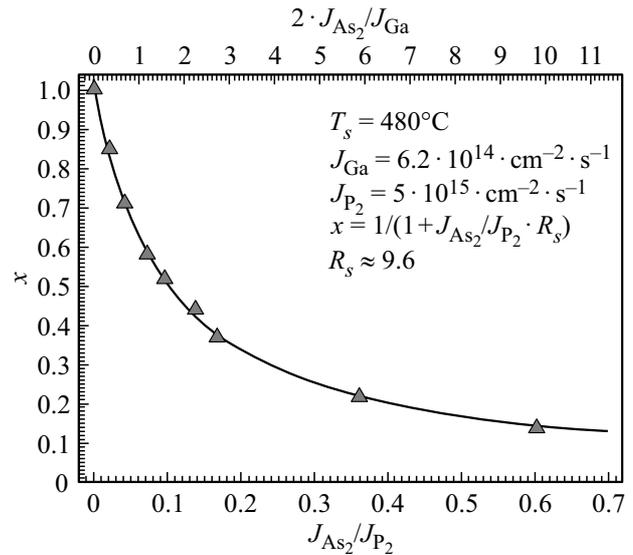


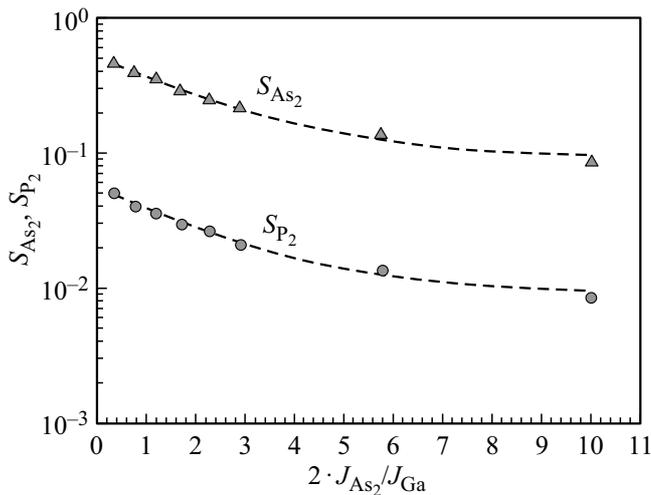
Рис. 1. Зависимость доли фосфора в твердом растворе  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$  от отношения  $J_{\text{As}_2}/J_{\text{P}_2}$ . Треугольники — экспериментальные данные, сплошная линия — результат аппроксимации с использованием выражения (1).

роста. С технологической точки зрения такой подход представляется удобным. В рамках данного подхода нами были выращены две структуры со ступенчатым изменением доли фосфора в слоях твердого раствора  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$ . Температура роста составляла  $480^\circ\text{C}$ , а  $J_{\text{Ga}} = 6.14 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ . Чтобы избежать влияния эффектов, обусловленных перестройкой ПС при снижении  $J_{\text{As}_2}$ , было использовано отношение  $2J_{\text{P}_2}/J_{\text{Ga}} \approx 16$ . Состав слоев определялся методом послышной оже-спектроскопии. На рис. 1 представлена зависимость доли фосфора в твердом растворе  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$  от отношения  $J_{\text{As}_2}/J_{\text{P}_2}$ . Экспериментальные значения  $x$  (треугольники) удовлетворительно описываются с помощью выражения (1) при  $R_s = 9.6$  (сплошная линия).

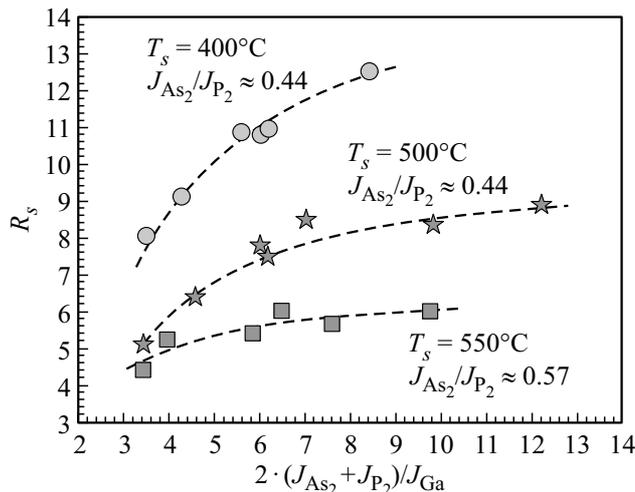
На рис. 2 представлены зависимости коэффициентов встраивания  $S_{\text{As}_2}$  и  $S_{\text{P}_2}$  от  $2J_{\text{As}_2}/J_{\text{Ga}}$ . Пунктирные линии — результат аппроксимации экспериментальных данных, проведенной с помощью функции вида:  $y = a + b \exp(-x/c)$ . Данная функция позволяет удовлетворительно описать экспериментальные данные монотонной кривой. Следует отметить, что здесь и далее выбор аппроксимирующих функций осуществлялся не из предположений о механизмах взаимодействия атомов и молекул с поверхностью, а из соображений их простоты и точности интерполяции данных.

Как следует из представленных зависимостей рис. 2, коэффициенты встраивания мышьяка и фосфора уменьшаются почти эквидистантно. Это приводит к тому, что изменение отношения  $2J_{\text{As}_2}/J_{\text{Ga}}$  от 0.32 до 10 приводит к изменению  $R_s$  всего от 9.2 до 10.2.

С целью уточнения характера функциональной связи между  $R_s$  и  $J_{\text{V}}/J_{\text{III}}$  рассмотрены три серии образцов с



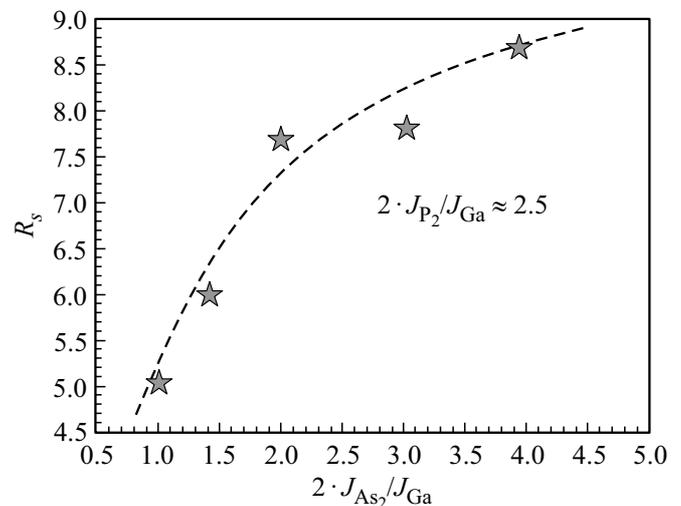
**Рис. 2.** Экспериментальная зависимость  $S_{As_2}$  (треугольники) и  $S_{P_2}$  (кружки) от  $2J_{As_2}/J_{Ga}$  при МЛЭ твердого раствора  $GaP_xAs_{1-x}$ . Пунктирные линии — результат аппроксимации с помощью функции вида:  $a + b \exp(-x/c)$ .



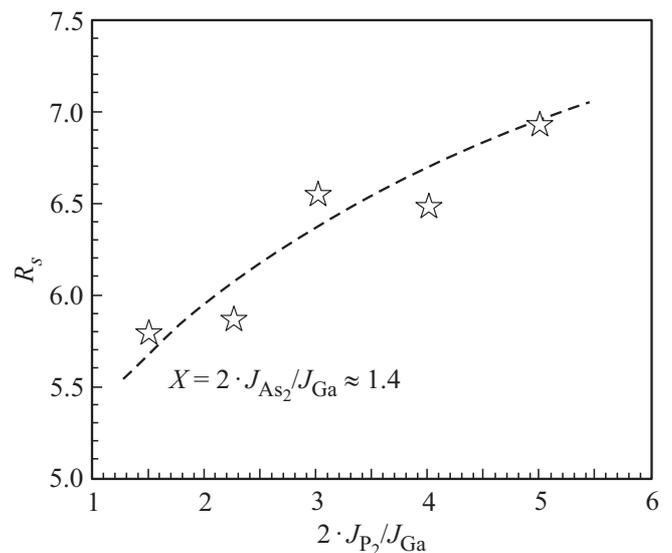
**Рис. 3.** Экспериментальные зависимости  $R_s$  от  $2(J_{As_2} + J_{P_2})/J_{Ga}$  при МЛЭ твердого раствора  $GaP_xAs_{1-x}$  при разных значениях  $T_s$ . Пунктирные линии — результат аппроксимации с помощью функции вида:  $a + b \exp(-x/c)$ .

одиночными слоями  $GaP_xAs_{1-x}$  из работы [14]. Пленки выращивались при  $T_s$ , равной 550, 500 и 400°C. Плотность потока галлия во всех случаях составляла  $6.26 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ . Внутри каждой серии потоки молекул  $As_2$  и  $P_2$  менялись от образца к образцу таким образом, чтобы отношение  $J_{As_2}/J_{P_2}$  оставалось неизменным. На рис. 3 приведены зависимости  $R_s$  от  $2(J_{As_2} + J_{P_2})/J_{Ga}$ . Как следует из рассмотрения представленных графиков, снижение  $2(J_{As_2} + J_{P_2})/J_{Ga}$  ведет к уменьшению значения  $R_s$ . При этом зависимость  $R_s$  от  $2(J_{As_2} + J_{P_2})/J_{Ga}$  усиливается. С понижением  $T_s$  влияние отношения  $2(J_{As_2} + J_{P_2})/J_{Ga}$  на  $R_s$  растет.

Для выяснения характера и степени влияния отношений  $2J_{As_2}/J_{Ga}$  и  $2J_{P_2}/J_{Ga}$  на  $R_s$  нами были выращены две серии пленок  $GaP_xAs_{1-x}$  [14]. Первая серия была получена при  $2J_{P_2}/J_{Ga} = \text{const}$  и разных значениях отношения  $2J_{As_2}/J_{Ga}$ , а вторая — при  $2J_{As_2}/J_{Ga} = \text{const}$ , но при варьировании значения отношения  $2J_{P_2}/J_{Ga}$ . Все образцы выращивались при  $J_{Ga} = 6.26 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$  и  $T_s = 500^\circ\text{C}$ . На рис. 4 и 5 приведены полученные зависимости  $R_s$  от  $2J_{As_2}/J_{Ga}$  и  $2J_{P_2}/J_{Ga}$  соответственно. По мере снижения как  $2J_{P_2}/J_{Ga}$ , так и  $2J_{As_2}/J_{Ga}$  отношение  $R_s$  уменьшается. При этом влияние  $2J_{P_2}/J_{Ga}$  и  $2J_{As_2}/J_{Ga}$  на  $R_s$  возрастает. Из представленных зависимостей рис. 4 и 5 следует, что в области значений



**Рис. 4.** Зависимость  $S_{As_2}/S_{P_2}$  от  $2J_{As_2}/J_{Ga}$  при МЛЭ твердого раствора  $GaP_xAs_{1-x}$ .  $2J_{P_2}/J_{Ga} \approx 2.5$ ,  $J_{Ga} = 6.26 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ ,  $T_s = 500^\circ\text{C}$ .



**Рис. 5.** Зависимость  $S_{As_2}/S_{P_2}$  от  $2J_{P_2}/J_{Ga}$  при МЛЭ твердого раствора  $GaP_xAs_{1-x}$ .  $2J_{As_2}/J_{Ga} \approx 1.4$ ,  $J_{Ga} = 6.26 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ ,  $T_s = 500^\circ\text{C}$ .

отношений  $2J_{\text{P}_2}/J_{\text{Ga}}$  и  $2J_{\text{As}_2}/J_{\text{Ga}}$  от 1 до 2.5 изменение  $2J_{\text{As}_2}/J_{\text{Ga}}$  оказывает значительно большее воздействие на  $R_s$  по сравнению с  $2J_{\text{P}_2}/J_{\text{Ga}}$ .

Сравнительный анализ зависимостей, приведенных на рис. 3, 4 и 5, показал, что при  $T_s = 500^\circ\text{C}$  и  $J_{\text{Ga}} \approx 6.26 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$  поведение отношения  $R_s$  удовлетворительно описывается выражением:

$$R_{s500^\circ\text{C}} = a - b \exp\left(-\frac{2J_{\text{As}_2}}{J_{\text{Ga}}c}\right),$$

$$a = 9.40 + 0.03 \frac{2J_{\text{P}_2}}{J_{\text{Ga}}},$$

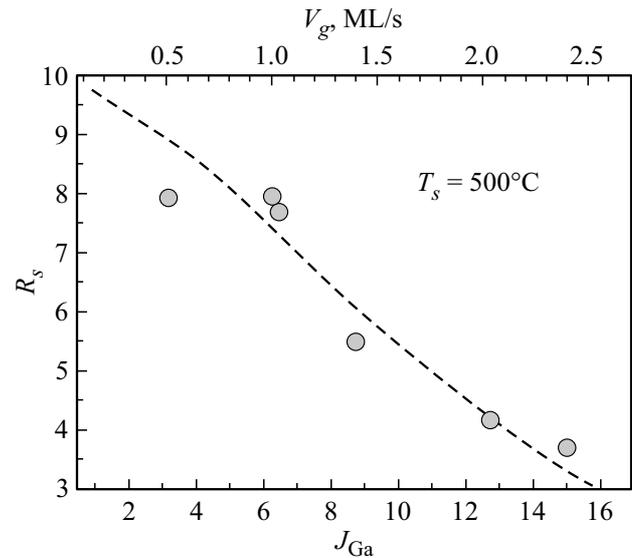
$$b = 1.50 + 14.00 \exp\left(-\frac{2J_{\text{P}_2}}{4.21J_{\text{Ga}}}\right),$$

$$c = 0.98 + 0.08 \frac{2J_{\text{P}_2}}{J_{\text{Ga}}}. \quad (2)$$

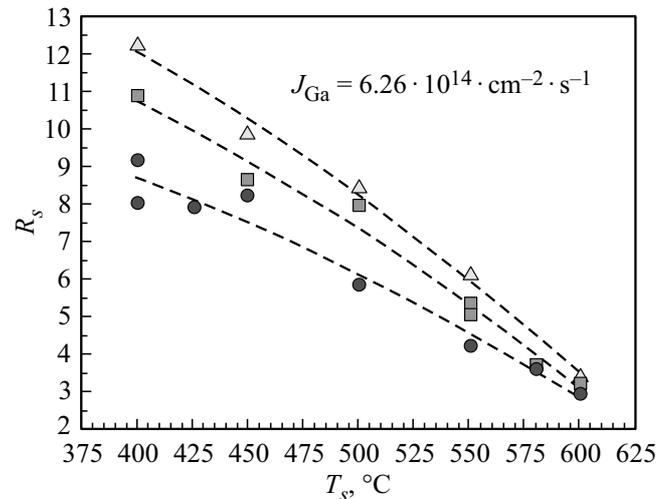
Изложенное выше позволяет предполагать, что снижение  $J_{\text{Ga}}$  в рамках одной поверхностной структуры должно приводить к росту  $R_s$ , так как при этом растут отношения  $2J_{\text{As}_2}/J_{\text{Ga}}$  и  $2J_{\text{P}_2}/J_{\text{Ga}}$ . Литературных данных по влиянию величины  $J_{\text{Ga}}$  на состав  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$  при МЛЭ из твердотельных источников найдено не было. С целью определения характера зависимости состава твердого раствора от  $J_{\text{Ga}}$  был выращен ряд образцов при  $T_s = 500^\circ\text{C}$  и  $J_{\text{As}_2}/J_{\text{P}_2} \approx 0.53$  [14]. Плотность потока галлия изменялась от  $1.5 \cdot 10^{14}$  до  $1.5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ . На рис. 6 представлены экспериментальные данные по зависимости  $R_s$  от  $J_{\text{Ga}}$  (кружки) и зависимость  $R_s$  от  $J_{\text{Ga}}$ , построенная в приближении (2) (пунктирная линия).

В рассмотренном диапазоне значений  $J_{\text{Ga}}$  экспериментальные значения  $R_s$  изменяются немонотонно. Точка изменения характера зависимости соответствует плотности потока галлия  $\approx 4.5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ . Уменьшение отношения  $R_s$  при понижении плотности потока галлия ниже некоторого порога выглядит неожиданным. Использование приближения (2) в области низких скоростей роста дает неудовлетворительный результат при оценке значения  $R_s$  (см. пунктирную линию на рис. 6). Следует отметить, что модель, представленная в работе [14], поведение  $R_s$  в данной области значений скорости роста описывает адекватно.

При анализе литературных данных о влиянии температуры роста на состав твердого раствора  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$  возникает проблема согласования между собой результатов измерения  $T_s$ , приведенных в работах разных авторов. Во многих случаях решить эту задачу с желаемой степенью достоверности не удается. Поэтому мы провели эксперименты [14], направленные на уточнение характера влияния температуры роста на встраивание мышьяка и фосфора при МЛЭ твердого раствора  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$ . С этой целью была выращена серия образцов с одиночными слоями твердого раствора  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$  при разных значениях  $T_s$



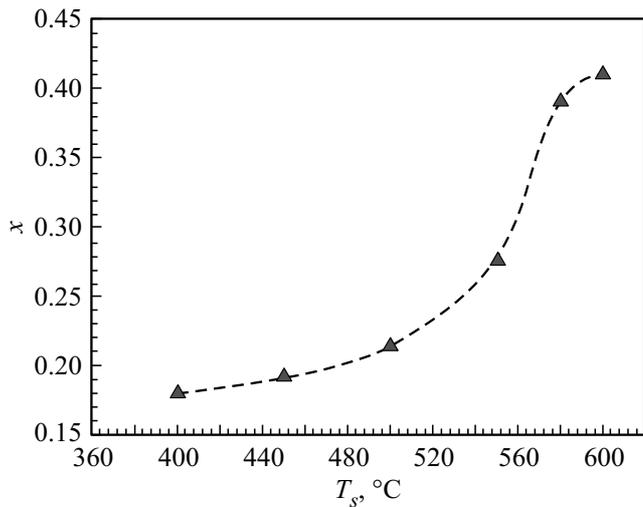
**Рис. 6.** Зависимость  $R_s$  от  $J_{\text{Ga}}$  (и скорости роста  $V_g$ , соответствующей плотности потока  $J_{\text{Ga}}$ ) при МЛЭ твердого раствора  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$ . Кружки — экспериментальные данные. Пунктир — зависимость  $R_s$  от  $J_{\text{Ga}}$ , построенная в приближении (2) при  $J_{\text{As}_2}/J_{\text{P}_2} = 0.63$  и  $J_{\text{P}_2} = 1.9 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ .



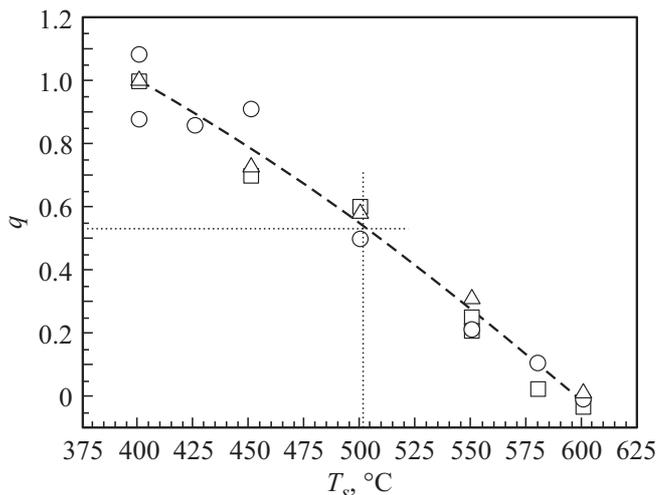
**Рис. 7.** Зависимость отношения  $R_s$  от  $T_s$  при МЛЭ твердого раствора  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$ . Кружки — данные, полученные при  $2J_{\text{As}_2}/J_{\text{Ga}} \approx 1.35$ . Квадраты —  $2J_{\text{As}_2}/J_{\text{Ga}} \approx 1.6$ . Треугольники —  $2J_{\text{As}_2}/J_{\text{Ga}} \approx 2.2$ .

из диапазона от  $400$  до  $600^\circ\text{C}$ . Плотность потока галлия составляла  $6.26 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ . Полученные данные были разбиты на три группы, отличающиеся средним значением отношения  $2J_{\text{As}_2}/J_{\text{Ga}}$ . Отношение  $J_{\text{As}_2}/J_{\text{P}_2}$  внутри каждой группы изменялось незначительно. На рис. 7 приведены полученные зависимости отношения  $R_s$  от  $T_s$ .

Символами обозначены экспериментальные данные (кружки, квадраты и треугольники). Аппроксимирующие функции представляют собой полиномы второй



**Рис. 8.** Зависимость доли фосфора  $x$  в твердом растворе  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$  от  $T_s$ . Данные получены при  $J_{\text{Ga}} = 6.26 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ ,  $J_{\text{As}_2}/J_{\text{Ga}} \approx 1.6$  и  $J_{\text{As}_2}/J_{\text{P}_2} \approx 0.44$ . Пунктирная линия нанесена для облегчения восприятия рисунка.



**Рис. 9.** Зависимость  $q$  (см. выражение (3)) от  $T_s$ . Кружки — значения, рассчитанные на основе экспериментальных данных при  $2J_{\text{As}_2}/J_{\text{Ga}} \approx 1.35$ . Треугольники —  $2J_{\text{As}_2}/J_{\text{Ga}} \approx 2.2$ . Квадраты —  $2J_{\text{As}_2}/J_{\text{Ga}} \approx 1.6$ .

степени. Из рассмотрения представленных зависимостей следует, что с повышением  $T_s$  относительная эффективность встраивания мышьяка падает. По мере снижения  $2J_{\text{As}_2}/J_{\text{Ga}}$  температурная зависимость  $R_s$  становится слабее.

На рис. 8 представлена зависимость доли фосфора  $x$  в твердом растворе  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$  от  $T_s$  из работы [14]. Как следует из рассмотрения зависимости, в области низких значений  $T_s$  параметр  $x$  относительно слабо изменяется с повышением температуры роста. При  $500 < T_s < 580^\circ\text{C}$  температура роста оказывает существенное влияние на долю фосфора в твердом

растворе. В области  $T_s > 580^\circ\text{C}$  влияние температуры подложки на состав твердого раствора  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$  снова ослабевает.

Представленные температурные зависимости  $x$  и  $R_s$  от температуры находятся в качественном согласии с результатами работы [13], но формально противоречат результатам статьи [11], в которых рост температуры подложки приводит к росту отношения  $S_{\text{As}_4}/S_{\text{P}_4}$  (при эпитаксии твердого раствора  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$  из потоков  $\text{As}_4$  и  $\text{P}_4$ ). Данное расхождение рассмотрено в разд. Обсуждение.

Полученные данные позволили построить эмпирическое выражение для оценки влияния  $T_s$  на состав твердого раствора  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$ , если известно значение  $R_s$  при  $500^\circ\text{C}$  (см. выражение (2)). Для этого был проведен анализ зависимостей  $R_s$  от  $T_s$  (рис. 7), который показал, что значения параметра  $q$ , описываемого выражением вида

$$q = \frac{R_s - R_{s600^\circ\text{C}}}{R_{s400^\circ\text{C}} - R_{s600^\circ\text{C}}}, \quad (3)$$

совпадают с хорошей точностью для всех зависимостей, полученных в диапазоне значений  $2J_{\text{As}_2}/J_{\text{Ga}}$  от 1.35 до 2.2 (см. рис. 9). При  $T_s = 500^\circ\text{C}$   $q_{500^\circ\text{C}} \approx 0.53$ . Значение  $R_{s600^\circ\text{C}}$  можно принять равным 3.25 для всех зависимостей  $R_s$  от  $T_s$  из диапазона значений  $2J_{\text{As}_2}/J_{\text{Ga}}$  от 1.35 до 2.2 (см. рис. 7).

Если известно значение  $R_{s500^\circ\text{C}}$ , можно найти значение  $R_{s400^\circ\text{C}}$ :

$$R_{s400^\circ\text{C}} = \frac{R_{s500^\circ\text{C}} - R_{s600^\circ\text{C}}}{q_{500^\circ\text{C}}} + R_{s600^\circ\text{C}}. \quad (4)$$

Если известны  $R_{s400^\circ\text{C}}$ ,  $R_{s600^\circ\text{C}}$  и  $q$ , то из равенства (3) можно найти значение  $R_s$  для любой температуры из диапазона от  $400$  до  $600^\circ\text{C}$ . Выражение для расчета  $q$  имеет вид:

$$q = 1.73 + 6.78 \cdot 10^{-4} T_s - 5.96 \cdot 10^{-6} T_s^2. \quad (5)$$

Следует подчеркнуть, что выражения (2)–(5) по своему виду и структуре не отражают физической природы связи отношения  $R_s$  с условиями роста, но позволяют с помощью выражения (1), имеющего очевидный физический смысл, проводить оценочные расчеты состава твердого раствора  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$  по известным значениям  $J_{\text{As}_2}$ ,  $J_{\text{P}_2}$ ,  $J_{\text{Ga}}$  и  $T_s$ . Это облегчает задачу экспериментального подбора потоков мышьяка и фосфора для получения заданной доли фосфора  $x$ .

## 5. Численное описание экспериментальных данных

Описание экспериментальных зависимостей доли фосфора в твердом растворе  $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$  от условий МЛЭ с помощью выражения (1) и с учетом выражений (2)–(5) была осуществлена с применением пакета математических программ MathCAD. Валидация выполнена путем

сравнения расчетных  $x_c$  и экспериментальных  $x_e$  значений доли фосфора в твердом растворе. Начальные значения коэффициентов аппроксимирующих функций, полученные средствами Origin, уточнялись путем минимизации несоответствия между  $x_c$  и  $x_e$ .

### 5.1. Критерии оценки достоверности модели

Количественным критерием оценки достоверности модели по температурной зависимости являлись  $\delta_{DT}$  — средние арифметические значения модулей относительных отклонений  $x_c$  от  $x_e$  для ряда диапазонов  $T_s$ :

$$\delta_{DT} = \frac{1}{p} \sum_{j=1}^p \left| \frac{x_{cj} - x_{ej}}{x_{ej}} \right|, \quad (6)$$

где  $p$  — количество образцов в диапазоне  $DT$ .

Для уточнения оценки достоверности модели по группам с фиксированной  $T_s$  рассчитывалось  $\delta_T$  — среднее арифметическое значение модулей относительного отклонения  $x_c$  от  $x_e$ :

$$\delta_T = \frac{1}{h} \sum_{j=1}^h \left| \frac{x_{cj} - x_{ej}}{x_{ej}} \right|, \quad (7)$$

где  $h$  — число образцов в соответствующей температурной группе.

Для скоростной зависимости оценивалось значение  $\delta_{DV}$ :

$$\delta_{DV} = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \left| \frac{x_{cj} - x_{ej}}{x_{ej}} \right|, \quad (8)$$

где  $m$  — число образцов в диапазоне  $DV$ .

Для групп образцов с одинаковой скоростью роста

$$\delta_V = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k \left| \frac{x_{cj} - x_{ej}}{x_{ej}} \right|, \quad (9)$$

где  $k$  — число образцов в конкретной скоростной группе.

### 5.2. Случайные ошибки определения значений параметров роста

Даже в случае полной достоверности модели значения  $x_c$  будут иметь расхождение с  $x_e$ . Это обусловлено, в том числе, погрешностями определения значений плотности молекулярных потоков и  $T_s$ . Влиянием погрешности определения  $J_{\text{Ga}}$  можно пренебречь, так как методика измерения скорости роста и точность поддержания плотности потока дают погрешность  $\leq 1\%$  [15,16]. Методики определения плотности потока молекул V группы и  $T_s$  менее точные [17,18]. В этой связи проведена оценка возможного отклонения  $x_c$  от  $x_e$  из-за неточностей определения плотностей потоков молекул V группы и  $T_s$ . С этой целью вычислялись модельные значения

доли фосфора  $x_{c0}$ ,  $x_{c1}$  и  $x_{c2}$  при номинальных значениях плотностей ( $J_{0\text{As}_2}$  и  $J_{0\text{P}_2}$ ) и диагонально смещенных значениях ( $J_{\text{maxAs}_2} = J_{0\text{As}_2}(1 + 0.055)$  и  $J_{\text{minP}_2} = J_{0\text{P}_2}(1 - 0.055)$ ), а также ( $J_{\text{minAs}_2} = J_{0\text{As}_2}(1 - 0.055)$  и  $J_{\text{maxP}_2} = J_{0\text{P}_2}(1 + 0.055)$ ) соответственно. При вычислении  $x_{c0}$  температура подложки принималась равной  $T_{s0}$  (номинальное значение). При вычислении  $x_{c1}$  и  $x_{c2}$  к  $T_{s0}$  прибавлялся или вычитался модуль абсолютной погрешности измерения  $T_s$  ( $\pm 2.5^\circ$ ) таким образом, чтобы разности  $x_{c1} - x_{c0}$  и  $x_{c2} - x_{c0}$  имели наибольшее абсолютное значение. Далее вычислялись величины:

$$\delta_{c1} = \frac{1}{l} \sum_{j=1}^l \left| \frac{x_{c1j} - x_{c0j}}{x_{c0j}} \right|, \quad (10)$$

$$\delta_{c2} = \frac{1}{l} \sum_{j=1}^l \left| \frac{x_{c2j} - x_{c0j}}{x_{c0j}} \right|, \quad (11)$$

где  $l$  — количество пар значений  $J_{0\text{As}_2}$  и  $J_{0\text{P}_2}$ . Для  $J_{0\text{As}_2}$ ,  $J_{0\text{P}_2}$  и  $T_{s0}$  использовались значения из массива экспериментальных данных. Наибольшее значение  $\delta_{\text{max}}$  из пары  $\delta_{c1}$  и  $\delta_{c2}$  выбиралось в качестве возможного наибольшего относительного отклонения  $x_c$  от  $x_e$ .

### 5.3. Результаты вычислений

Как уже отмечалось выше, количественным критерием оценки достоверности модели являлись  $\delta_{DT}$  — средние арифметические значения модулей относительных

**Таблица 1.** Отклонение  $x_c$  от  $x_e$  для диапазонов  $T_s$ .  $V_g \sim 1 \text{ MC/c}$

Диапазон $T_s$ $DT$ , $^\circ\text{C}$	Отклонение $x_c$ от $x_e$ $\delta_{DT} = \frac{1}{p} \sum_{j=1}^p \left  \frac{x_{cj} - x_{ej}}{x_{ej}} \right $	$\delta_{\text{max}}$
400–450	0.053	0.109
450–500	0.058	
500–550	0.058	
580–600	0.047	

**Таблица 2.** Отклонение  $x_c$  от  $x_e$  для фиксированных значений  $T_s$ .  $V_g \sim 1 \text{ MC/c}$

$T_s$ , $^\circ\text{C}$	Отклонение $x_c$ от $x_e$ $\delta_T = \frac{1}{h} \sum_{j=1}^h \left  \frac{x_{cj} - x_{ej}}{x_{ej}} \right $	$\delta_{\text{max}}$
400	0.052	0.109
410	0.077	
450	0.039	
500	0.062	
550	0.050	
580	0.055	
600	0.039	

**Таблица 3.** Отклонение  $x_c$  от  $x_e$  для диапазонов  $V_g$  для  $T_s$  из промежутка от 500 до 510°C

Диапазон $V_g$ , МС/с	Отклонение $x_c$ от $x_e$ $\delta_{DV} = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \left  \frac{x_{cj} - x_{ej}}{x_{ej}} \right $	$\delta_{\max}$
0.25–2.20	0.081	0.109
0.25–1.00	<b>0.121</b>	
1.00–2.20	0.050	

**Таблица 4.** Отклонение  $x_c$  от  $x_e$  для фиксированных значений  $V_g$  для  $T_s$  из промежутка от 500 до 510°C

$V_g$ , МС/с	Отклонение $x_c$ от $x_e$ $\delta_V = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k \left  \frac{x_{cj} - x_{ej}}{x_{ej}} \right $	$\delta_{\max}$
0.25	<b>0.211</b>	0.109
0.50	0.087	
0.98	0.066	
1.01	0.045	
1.38	0.065	
1.98	0.084	
2.20	0.010	

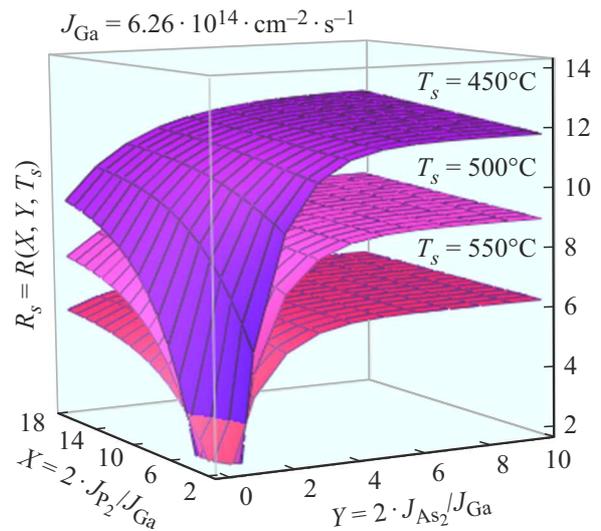
отклонений  $x_c$  от  $x_e$ . В табл. 1 представлены данные  $\delta_{DT}$  для нескольких диапазонов  $T_s$ , а в табл. 2 — данные  $\delta_T$  для фиксированных значений  $T_s$ . Образцы выращены при скорости роста  $\sim 1$  МС/с. Серым цветом выделены значения  $\delta_{DT}$  и  $\delta_T$ , превышающие  $\delta_{\max}$ .

В табл. 3 представлены значения  $\delta_{DV}$  для разных диапазонов  $V_g$ , а в табл. 4 показаны отклонения для фиксированных значений  $V_g$  при  $T_s \sim 500$ –510°C. Серым цветом выделены ячейки со значениями отклонений  $x_c$  от  $x_e$  больше значения  $\delta_{\max}$ .

Представленные в таблицах данные позволяют заключить, что комплекс выражений (2)–(5), удовлетворительно описывает поведение  $R_s$  в зависимости от температуры подложки и плотности потоков молекул  $As_2$  и  $P_2$  почти во всем диапазоне рассмотренных условий роста. Выявленные ограничения обсуждаются далее.

## 6. Обсуждение

Феноменологический подход позволил представить дискретный и фрагментированный массив экспериментальных данных в виде сплошной сложной функции, построенной на основе более простых функций, имеющих монотонное поведение во всем рассмотренном диапазоне независимых переменных (параметров роста). На рис. 10 изображена трехмерная зависимость  $R_s$  от  $Y = 2J_{As_2}/J_{Ga}$  и  $X = 2J_{P_2}/J_{Ga}$ , построенная в приближении (2)–(5) для разных значений  $T_s$ . Двумерные зависимости  $R_s$  от  $2J_{As_2}/J_{Ga}$  и  $2J_{P_2}/J_{Ga}$ , обозначенные

**Рис. 10.** Зависимости  $R_s$  от  $2J_{As_2}/J_{Ga}$  и  $2J_{P_2}/J_{Ga}$ , построенные с использованием выражений (2)–(5) для разных значений  $T_s$ .

на рис. 4 и 5 пунктиром, соответствуют линиям пересечения поверхности  $R(X, Y, T_s)$  при  $T_s = 500^\circ\text{C}$  с плоскостями, параллельными координатным плоскостям  $OYZ$  и  $OXZ$ . Из рассмотрения рис. 3–5 следует, что  $R_s$  растет как с ростом  $2J_{As_2}/J_{Ga}$ , так и с ростом  $2J_{P_2}/J_{Ga}$ . Изменение  $2J_{As_2}/J_{Ga}$  оказывает более существенное влияние на  $R_s$ , чем изменение  $2J_{P_2}/J_{Ga}$ , что качественно соотносится с данными работы [12]. Существует область значений  $2J_{As_2}/J_{Ga}$  и  $2J_{P_2}/J_{Ga}$ , в которой  $R_s$  слабо зависит от величины и соотношения молекулярных потоков. При  $R_s = 500^\circ\text{C}$  такой эффект наблюдается, когда  $2J_{As_2}/J_{Ga} > 6$ .

Из физического смысла выражения (1), с учетом монотонности функций, определяющих поведение  $R_s = R(X, Y, T_s)$ , вытекает следующее утверждение. В рамках данного варианта реализации феноменологического подхода состав твердого раствора отражает наличие некоторого, усредненного по поверхности, установившегося баланса процессов массопереноса.

Как уже отмечалось выше, наши экспериментальные данные по влиянию  $T_s$  на  $x$  качественно согласуются с результатами работы [13], но расходятся с выводами [11], в которых рост температуры подложки приводил к снижению  $x$  при эпитаксии твердого раствора  $GaP_xAs_{1-x}$  из потоков  $As_4$  и  $P_4$ . Это может быть обусловлено низкой скоростью роста, при которой выращивались слои в работе [11]. Согласно модели, предложенной в работе [14], в формировании состава твердого раствора принимают участие неустановившиеся обменные процессы в хемосорбированном анионном слое (десорбция/адсорбция) на поверхности террас. Обменные процессы ведут к изменению анионного состава поверхности террас, сложившегося в областях роста, локализованных в изломах ступеней. Длительность течения неустановившихся процессов лимитирована временем формирования одного

монослоя. Чем ниже скорость роста, тем значительно изменяется состав вне областей роста. В свою очередь константы скорости обменных процессов экспоненциально зависят от температуры подложки. При этом энергия активации десорбции хемосорбированных димеров фосфора выше энергии активации десорбции хемосорбированных димеров мышьяка. С повышением  $T_s$  разница между константами скорости десорбции димеров фосфора и мышьяка уменьшается, что находит свое отражение в  $S$ -образной форме зависимости рис. 8. При скорости роста  $\sim 1$  монослой в секунду этот эффект значимо проявляется при  $T_s \gtrsim 520^\circ\text{C}$ . Со снижением скорости роста  $S$ -образная зависимость смещается в область более низких значений  $T_s$ . Возможны сочетания констант скорости обменных процессов и времени формирования 1 монослоя, при которых  $R_s$  будет расти с повышением  $T_s$ .

Полученные выражения достаточно хорошо описывают поведение состава твердого раствора почти во всем диапазоне значений параметров роста. Но существует область значений независимых переменных, в которой поведение  $R_s$  не может быть описана монотонными функциями при учетном количестве независимых переменных. А именно в области роста  $< 0.5$  монослоя в секунду. Это позволяет предположить, что существует еще один неучтенный фактор, влияющий на процесс формирования состава твердого раствора. Таким фактором может быть скорость роста. Возможное влияние скорости роста обсуждается в работе [14].

Отметим, что степень релаксации выращенных пленок  $GaP_xAs_{1-x}$  изменялась в широком диапазоне в зависимости от их состава и толщины. Тем не менее удалось описать поведение доли фосфора  $x$  в зависимости от условий роста с достаточно хорошей точностью.

## 7. Заключение

С применением феноменологической модели выполнено описание экспериментальных зависимостей доли фосфора в пленках  $GaP_xAs_{1-x}$  от условий их выращивания методом МЛЭ на подложках GaAs(001) из потоков молекул  $As_2$  и  $P_2$ . Используются экспериментальные данные, охватывающие широкий диапазон условий эпитаксии. Предложены эмпирические выражения, описывающие поведение отношения коэффициентов встраивания мышьяка и фосфора из молекул  $As_2$  и  $P_2$  в зависимости от условий роста. Эмпирические выражения позволяют проводить оценку значений молекулярных потоков элементов V группы, обеспечивающих получение требуемого значения  $x$  для частично релаксированных пленок твердых растворов  $GaP_xAs_{1-x}$  при заданных значениях температуры подложки и плотности потока атомов галлия. Предложенные в работе подходы представляют интерес с точки зрения их применения для описания экспериментальных зависимостей состава в подрешетке

V группы от условий выращивания методом МЛЭ всего спектра твердых растворов  $(A^{III})P_xAs_{1-x}$ .

## Финансирование работы

Работа выполнена в рамках гранта № 075-15-2020-797 (13.1902.21.0024).

## Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] I. Vurgaftmana, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan. *J. Appl. Phys.*, **89** (11), 5815 (2001).
- [2] T. Nishitani, T. Nakanishi, M. Yamamoto, S. Okumi, F. Furuta, M. Miyamoto, M. Kuwahara, N. Yamamoto, K. Naniwa. *J. Appl. Phys.*, **97**, 094907 (2005).
- [3] M. Naganuma, K. Takahashi. *Phys. Status Solidi A*, **31**, 187 (1975).
- [4] K. Tateishi, M. Naganuma, K. Takahashi. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **15** (5), 785 (1976).
- [5] Y. Tatsuoka, H. Kamimoto, Y. Kitano, T. Kitada, S. Shimomura, S. Hiyamizu. *J. Vac. Sci. Technol. B*, **17** (3), 1155 (1999).
- [6] Y. Tatsuoka, H. Kamimoto, T. Kitada, S. Shimomura, S. Hiyamizu. *J. Vac. Sci. Technol. B*, **18** (3), 1549 (2000).
- [7] Y. Tatsuoka, M. Uemura, T. Kitada, S. Shimomura, S. Hiyamizu. *J. Cryst. Growth*, **227–228**, 266 (2001).
- [8] H.Q. Hou, B.W. Liang, T.P. Chin, C.W. Tu. *Appl. Phys. Lett.*, **59** (3), 292 (1991).
- [9] T.P. Chin, B.W. Liang, H.Q. Hou, M.C. Ho, C.E. Chang, C.W. Tu. *Appl. Phys. Lett.*, **58** (3), 254 (1991).
- [10] H.Q. Hou, C.W. Tu. *Appl. Phys. Lett.*, **60**, 1872 (1992).
- [11] S. Gonda, Y. Matsushima. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **47** (9), 4198 (1976).
- [12] C.T. Foxon, B.A. Joyce, M.T. Norris. *J. Cryst. Growth*, **49**, 132 (1980).
- [13] B.W. Liang, C.W. Tu. *J. Appl. Phys.*, **74** (1), 255 (1993).
- [14] Е.А. Емельянов, М.А. Путьято, Б.Р. Семягин, Д.Ф. Феклин, В.В. Преображенский. *ФТП*, **49** (2), 163 (2015).
- [15] J.J. Harris, B.A. Joyce, P.J. Dobson. *Surf. Sci.*, **103**, 90 (1981).
- [16] C.E.C. Wood. *Surf. Sci.*, **108**, 441 (1981).
- [17] В.В. Преображенский, В.П. Мигаль, Д.И. Лубышев. *Поверхность. Физика, химия, механика*, **9**, 156 (1989).
- [18] В.В. Преображенский, М.А. Путьято, Б.Р. Семягин. *ФТП*, **36** (8), 897 (2002).

Редактор А.Н. Смирнов

**GaP<sub>x</sub>As<sub>1-x</sub> solid solution growth  
by molecular beam epitaxy:  
phenomenological description of the  $x$   
dependence from growth conditions  
on GaAs(001) substrate**

*M.A. Putyato, E.A. Emelyanov, M.O. Petrushkov,  
A.V. Vasev, B.R. Semyagin, V.V. Preobrazhenskii*

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

**Abstract** The experimental dependences of the GaP<sub>x</sub>As<sub>1-x</sub> solid solution phosphorus proportion on growth conditions by molecular beam epitaxy from As<sub>2</sub> and P<sub>2</sub> molecules on GaAs(001) substrate were described using the phenomenological model. The model was built on the well-established ideas about the III–V compounds MBE growth. The ratio of the arsenic and phosphorus atoms incorporation coefficients was considered as a function of the substrate temperature and molecular flux density. Empirical expressions were found that describe the behavior of the arsenic and phosphorus incorporation coefficients ratio depending on the indicated growth parameters. This makes it possible to estimate the V group molecule flux values to obtain the required  $x$  in a GaP<sub>x</sub>As<sub>1-x</sub> solid solution at the given substrate temperature and the gallium atoms flow density.