

08

Теоретический анализ профилей состава в осевых гетероструктурах на основе нитевидных нанокристаллов AlGaAs

© В.Г. Дубровский¹, С.В. Микушев¹, И.В. Штром^{1,2}¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия² Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: i.shtorm@spbu.ru

Поступило в Редакцию 20 марта 2026 г.

В окончательной редакции 20 марта 2026 г.

Принято к публикации 18 апреля 2026 г.

Проведен анализ профилей состава в осевых гетероструктурах нитевидных нанокристаллов (ННК) GaAs/Al_xGa_{1-x}As/GaAs и Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As. Различие состоит в типе катализатора (Ga или Au), а также в материале, с которого начинается рост гетероструктуры (ННК GaAs или ННК Al_xGa_{1-x}As тройного состава). Рассчитаны профили состава и показано, что использование Au значительно увеличивает размытие гетероинтерфейса за счет эффекта резервуара. Данный эффект подтверждается экспериментально.

Ключевые слова: полупроводниковые нитевидные нанокристаллы AlGaAs, осевые гетероструктуры, профили состава, моделирование.

DOI: 10.61011/PJTF.2026.14.63307.20684

Нитевидные нанокристаллы (ННК) тройных полупроводниковых соединений III–V (III–V ННК) и гетероструктуры на их основе широко используются в фундаментальных исследованиях и различных устройствах оптоэлектроники, которые могут быть совмещены с кремниевой электронной платформой [1–3]. Осевые гетероструктуры $A_{x_0}B_{1-x_0}C/A_{x_s}B_{1-x_s}C/A_{x_0}B_{1-x_0}C$ в III–V ННК $A_xB_{1-x}C$ с начальным составом x_0 и стационарным составом x_s , обычно выращиваются по механизму пар–жидкость–кристалл (ПЖК). Эффект резервуара, связанный с остаточными концентрациями атомов различных элементов в капле, приводит к размытию осевых гетероинтерфейсов [4–7]. Классическая система материалов Al_xGa_{1-x}As является одной из важнейших гетероэпитаксиальных систем, на основе которой в ННК синтезируются осевые структуры GaAs/AlGaAs различного состава и кристаллической фазы [8–14]. Цель настоящей работы состоит в теоретическом исследовании профилей состава в двойных осевых гетероструктурах на основе ННК AlGaAs и анализе факторов, влияющих на ширину гетероинтерфейсов в данной системе.

Известно [6,15,16], что для расчета профилей состава при росте гетероструктуры по механизму ПЖК требуется зависимость состава ННК Al_xGa_{1-x}As x от относительной концентрации атомов Al в капле катализатора $y = \chi_{Al}/(\chi_{Al} + \chi_{Ga})$. Здесь и далее χ_k обозначают относительные атомные концентрации элементов $k = Al, Ga, As$ и Au , растворенных в жидкости, удовлетворяющие условию $\chi_{Al} + \chi_{Ga} + \chi_{As} + \chi_{Au} = 1$. При автокаталитическом росте ННК имеем $\chi_{Au} = 0$, в то время как $\chi_{As} \cong 0$ во всех случаях в связи с малой растворимостью As в жидкости при типичных ростовых температурах $\sim 500\text{--}630^\circ\text{C}$ [4,12,16,17]. Согласно результатам работы [18], распределение жидкость–кристалл $x(y)$ при

росте ПЖК имеет равновесный характер для тройных соединений III–V, основанных на смешении атомов группы III [15,16], и кинетический при смешении атомов группы V [17]. Равновесное распределение $x(y)$ для решеточно-согласованной системы Al_xGa_{1-x}As определяется формулой Ленгмюра–Мак Лина [18]:

$$x = \frac{c_l y}{1 + (c_l - 1)y}. \quad (1)$$

Коэффициент c_l , описывающий различия в коэффициентах аффинности атомов Al и Ga, зависит от значения $\chi_{tot} = \chi_{Al} + \chi_{Ga} \cong 1 - \chi_{Au}$ и температуры [18] и резко убывает при увеличении концентрации Au в капле (рис. 1). Значения $c_l \gg 1$ соответствуют хорошо известному свойству ПЖК-роста ННК AlGaAs, согласно которому концентрация атомов Al в капле много меньше концентрации атомов Ga [15,16,18,19] (рис. 1).

В предположении постоянства скорости вертикального роста ННК при переключении потоков атомов группы III состав по Al в капле y подчиняется кинетическому уравнению [19]:

$$\frac{1}{g} \frac{dy}{d\xi} = x_s - x. \quad (2)$$

Здесь x_s — стационарное значение состава по AlAs в гетероструктурной вставке, ξ — безразмерная вертикальная координата вдоль оси роста ННК, выраженная в монослоях (ML), g — геометрический параметр, определенный далее. Используя (1) в (2) и интегрируя с начальным условием $x(\xi - \xi_0) = x_0$, получаем аналитическое решение для профиля состава вдоль оси ННК

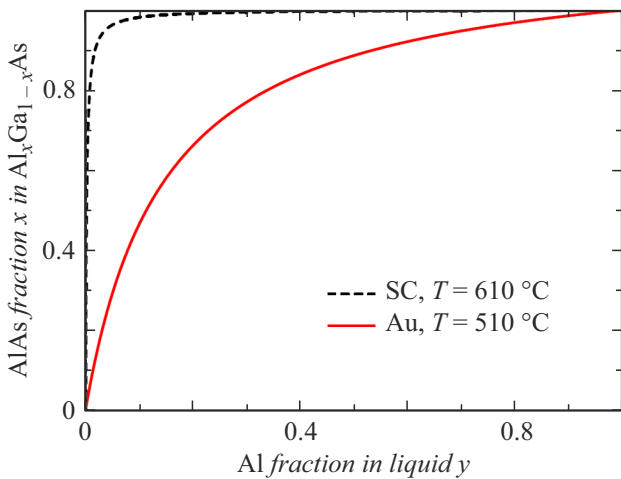


Рис. 1. Распределение жидкость–кристалл при росте ННК $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ по механизму ПЖК при автокаталитическом росте в отсутствие Au при температуре $T = 610^\circ\text{C}$ и Au-каталитическом росте при $T = 510^\circ\text{C}$ и $\chi_{\text{Au}} = 0.5$. Расчет по формуле (1) при $c_l = 497$ и 7.8 соответственно [19].

в виде

$$\frac{\xi - \xi_0}{\Delta\xi} = \frac{1}{(1 - bx_s)^2} \ln \left[\frac{(x_s - x_0)(1 - bx)}{(x_s - x)(1 - bx_0)} \right] + \frac{b(x_0 - x)}{(1 - bx_s)(1 - bx_0)(1 - bx)}. \quad (3)$$

Характерная ширина интерфейса $\Delta\xi$ для ННК радиуса R равна

$$\Delta\xi = \frac{1}{gc_l} = F \frac{1 - \chi_{\text{Au}}}{c_l}, \quad F = \frac{\Omega_S R f(\beta)}{3\Omega_L h}, \quad (4)$$

где

$$f(\beta) = \frac{(1 - \cos\beta)(2 + \cos\beta)}{(1 + \cos\beta) \sin\beta} \quad (5)$$

есть геометрическая функция контактного угла капли β на вершине ННК [7]. Величины Ω_S , Ω_L и h обозначают элементарный объем на пару III–V в твердом теле, элементарный объем в жидкости и высоту монослоя соответственно. Для системы AlGaAs эти величины хорошо известны [16]: $\Omega_S = 0.0452 \text{ nm}^3$, $\Omega_L = 0.02 \text{ nm}^3$ и $h = 0.326 \text{ nm}$. Отметим, что полученное решение описывает профиль состава в любой двойной гетероструктуре $A_{x_0}B_{1-x_0}C/A_{x_s}B_{1-x_s}C/A_{x_0}B_{1-x_0}C$ в III–V ННК с любым начальным составом x_0 и стационарным составом x_s при условии, что распределение жидкость–кристалл определяется формулой (1).

На рис. 2 представлены профили состава по AlAs в двойных осевых гетероструктурах GaAs/Al_{0.5}Ga_{0.5}As/GaAs и Al_{0.5}Ga_{0.5}As/GaAs/Al_{0.5}Ga_{0.5}As с геометрическими параметрами из таблицы, соответствующими экспериментальным данным работ [12] и [10] соответственно, с одинаковым 50% составом секций AlGaAs. Остальные

параметры в таблице рассчитаны по формулам (4) и (5). Анализ расчетных профилей состава показывает, что при одинаковом составе ширина интерфейсов слабо зависит от материала, с которого начинается рост гетероструктуры (бинарный GaAs в первом случае и ННК тройного состава Al_{0.5}Ga_{0.5}As во втором случае). Различие в температурах также не является принципиальным. Основным фактором, определяющим увеличение ширины интерфейса при данных параметрах, является наличие Au в капле. Это приводит к существенному уменьшению величины c_l от значения 497 для автокаталитических ННК до 7.8 для Au-каталитических ННК и, как следствие, к увеличению характерной ширины интерфейса от 3 до 15 ML (см. таблицу). Увеличение $\Delta\xi$ для Au-каталитических ННК наблюдается даже несмотря на то, что объем капель на их вершине существенно меньше за счет меньшего радиуса и контактного угла капли.

На рис. 3 приведено сравнение расчетных кривых и экспериментальных данных по профилям состава для автокаталитических ННК GaAs/Al_xGa_{1-x}As/GaAs при $T = 610^\circ\text{C}$ [12] и Au-каталитических ННК Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As с начальным составом $x_0 = 0.3$. Расчетные параметры соответствуют приведенным в таблице. Видно, что расчетные кривые хорошо описывают экспериментальные данные. Значительный разброс данных [12] возникает за счет низкого контраста вставок GaAs в теле ННК GaAs малого радиуса. Следует, однако, отметить, что вставки Al_xGa_{1-x}As в ННК GaAs выращивались при выключенном потоке Ga, т.е. стационарный состав вставок равен единице. Выращивание гетероструктуры до состава, равного единице, привело бы к радикальному размытию интерфейсов (штриховая линия на рис. 3), поскольку состав с высоким содержанием AlAs требует вытеснения из капли стабильных атомов Ga. Следует отметить, что получение

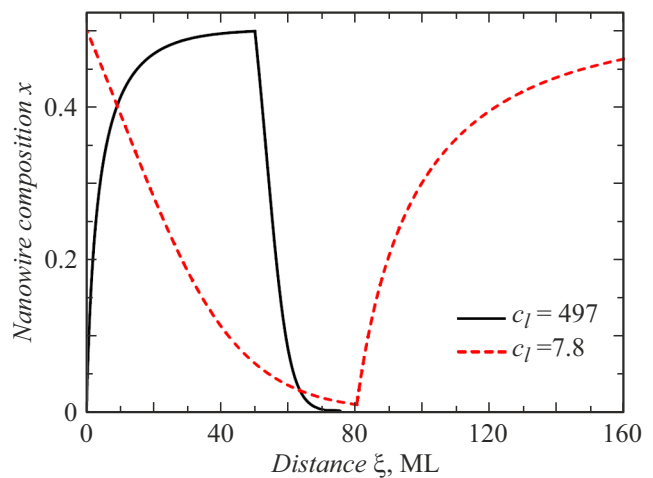


Рис. 2. Профили состава в двойных осевых гетероструктурах в ННК GaAs/Al_{0.5}Ga_{0.5}As/GaAs и Al_{0.5}Ga_{0.5}As/GaAs/Al_{0.5}Ga_{0.5}As. Расчет по формуле (3) с параметрами из таблицы.

Параметры авто- и Au-каталитических гетероструктур в ННК AlGaAs

| ННК/катализатор | T , °C | R , nm | β , deg | $f(\beta)$ | χ_{Au} | c_l | F | b | $\Delta\xi$ |
|-----------------|----------|----------|---------------|------------|-------------|-------|------|-------|-------------|
| AlGaAs/Ga | 610 | 60 | 135 | 4.28 | 0 | 497.0 | 1480 | 0.998 | 2.98 |
| AlGaAs/Au–Ga | 510 | 24 | 115 | 10.6 | 0.5 | 7.8 | 237 | 0.872 | 15.2 |

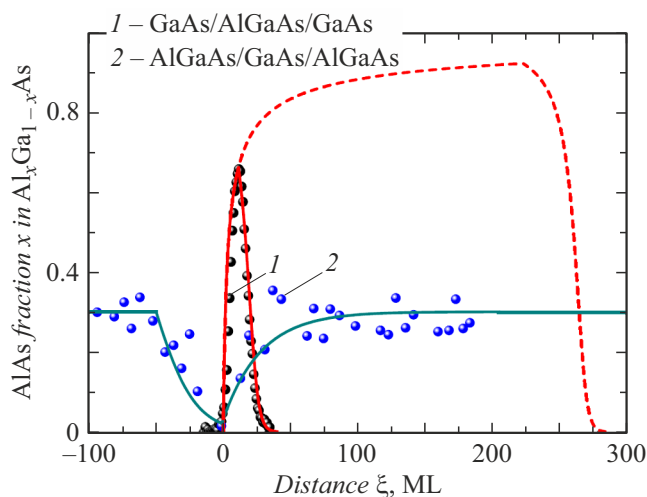


Рис. 3. Профили состава в двойных осевых гетероструктурах в автокаталитических ННК GaAs/Al_xGa_{1-x}As/GaAs [12] и Au-каталитических ННК Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As с начальным составом $x_0 = 0.3$ [10] (символы). Линии — расчет по формуле (3) с параметрами из таблицы.

барьерных слоев бинарного AlAs практически и не требуется. Еще одним отличием рассматриваемых ННК является то, что автокаталитические ННК имеют кубическую кристаллическую фазу [12], а Au-каталитические ННК — гексагональную [9–11]. Это обстоятельство не учитывается в модели и требует дополнительного анализа, который будет приведен в отдельной публикации.

Таким образом, построенная модель подходит для расчетов профилей состава осевых гетероструктур в III–V ННК с распределением жидкость–кристалл вида (1). Это соответствует малым параметрам рассогласования решеток в тройных ННК, основанных на смешении атомов группы III, и кинетическим диаграммам состава в ННК, основанных на смешении атомов элементов группы V. Полученная аналитическая формула хорошо описывает различные экспериментальные данные в системе AlGaAs. Данные результаты могут использоваться для количественного анализа и управления составом гетероструктурных ННК в широкой области систем материалов III–V.

Финансирование работы

Работа выполнена за счет исследовательского гранта СПбГУ (ID 116524353).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] P.C. McIntyre, A. Fontcuberta i Morral, *Mater. Today Nano*, **9**, 100058 (2020). DOI: 10.1016/j.mtnano.2019.100058
- [2] G. Boras, X. Yu, H. Liu, *J. Semicond.*, **40**, 101301 (2019). DOI: 10.1088/1674-4926/40/10/101301
- [3] J.K. Hyun, S. Zhang, L.J. Lauhon, *Annu. Rev. Mater. Res.*, **43**, 451 (2013). DOI: 10.1146/annurev-matsci-071312-121659
- [4] V.G. Dubrovskii, *J. Phys. D*, **50**, 453001 (2017). DOI: 10.1088/1361-6463/aa87a7
- [5] M. Ghasemi, E.D. Leshchenko, J. Johansson, *Nanotechnology*, **32**, 072001 (2020). DOI: 10.1088/1361-6528/abc3e2
- [6] E.D. Leshchenko, N.V. Sibirev, *Nanomaterials*, **14**, 1816 (2024). DOI: 10.3390/nano14221816
- [7] V.G. Dubrovskii, F. Glas, in *Fundamental properties of semiconductor nanowires*, ed. by N. Fukata, R. Rurali (Springer, Singapore, 2020), p. 3–107. DOI: 10.1007/978-981-15-9050-4_1
- [8] V.G. Dubrovskii, I.V. Shtrom, R.R. Reznik, Yu.B. Samsonenko, A.I. Khrebtov, I.P. Soshnikov, S. Rouvimov, N. Akopian, T. Kasama, G.E. Cirlin, *Cryst. Growth Des.*, **16**, 7251 (2016). DOI: 10.1021/acs.cgd.6b01412
- [9] L. Leandro, C.P. Gunnarsson, R. Reznik, K.D. Jöns, I. Shtrom, A. Khrebtov, T. Kasama, V. Zwiller, G. Cirlin, N. Akopian, *Nano Lett.*, **18**, 7217 (2018). DOI: 10.1021/acs.nanolett.8b03363
- [10] L. Leandro, J. Hastrup, R. Reznik, G. Cirlin, N. Akopian, *npj Quantum Inform.*, **6**, 93 (2020). DOI: 10.1038/s41534-020-00323-9
- [11] D. Baretin, I.V. Shtrom, R.R. Reznik, S.V. Mikushev, G.E. Cirlin, M. Auf der Maur, N. Akopian, *Nano Lett.*, **23**, 895 (2023). DOI: 10.1021/acs.nanolett.2c04184
- [12] G. Priante, F. Glas, G. Patriarche, K. Pantzas, F. Oehler, J.C. Harmand, *Nano Lett.*, **16**, 1917 (2016). DOI: 10.1021/acs.nanolett.5b05121
- [13] G. Boras, X. Yu, H. Aruni Fonseka, G. Davis, A.V. Velichko, J.A. Gott, H. Zeng, S. Wu, P. Parkinson, X. Xu, D. Mowbray, A.M. Sanchez, H. Liu, *J. Phys. Chem. C*, **125**, 14338 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpcc.1c03680
- [14] G. Boras, H. Zeng, S. Church, R. Juluri, A. Velichko, H. Deng, H. Jia, F. Alvarado, Z. Yin, C. Chen, J. Park, M. Tang, D. Mowbray, A.M. Sanchez, P. Parkinson, H. Liu, *Adv. Mater. Interfaces*, **13**, e00938 (2026). DOI: 10.1002/admi.202500938
- [15] F. Glas, *Cryst. Growth Des.*, **17**, 4785 (2017). DOI: 10.1021/acs.cgd.7b00732
- [16] V.G. Dubrovskii, A.A. Koryakin, N.V. Sibirev, *Mater. Des.*, **132**, 400 (2017). DOI: 10.1016/j.matdes.2017.07.012

- [17] J. Johansson, M. Ghasemi, Phys. Rev. Mater., **1**, 040401(R) (2017). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.1.040401
- [18] V.G. Dubrovskii, Phys. Rev. Mater., **7**, 096001 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.7.096001
- [19] V.G. Dubrovskii, Phys. Rev. Mater., **8**, 076003 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.8.076003