

УДК 538.971

МОДИФИКАЦИЯ ФОРМЫ ВЕРТИКАЛЬНЫХ НАНОПРОВОЛОК В ПРОЦЕССЕ ОТЖИГА

© А. Г. Настовьяк^{1,2}, Н. Л. Шварц^{1,2}

¹Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН,
630090, г. Новосибирск, просп. Академика Лаврентьева, 13

²Новосибирский государственный технический университет,
630073, г. Новосибирск, просп. К. Маркса, 20
E-mail: alla@isp.nsc.ru

Выполнен численный расчёт изменения формы вертикальных нанопроволок в процессе отжига за счёт реадсорбции вещества, испаряемого с соседних проволок и подложки. Расчёт проводился в соответствии с моделью испарения из набора сферически-симметричных источников и моделью Кнудсена — Ламберта. Проанализировано влияние на форму нанопроволок аспектного отношения длины проволок к расстоянию между ними и скоростей испарения материала с боковой поверхности нанопроволок и с подложки.

Ключевые слова: нанопроволоки, отжиг, реадсорбция.

DOI: 10.15372/AUT20240207

EDN: PKFCYU

Введение. Полупроводниковые нанопроволоки (НП) являются перспективными объектами для реализации на их основе современных нанoeлектронных приборов. Одним из способов получения нанопроволок является рост по механизму пар — жидкость — кристалл (ПЖК) [1, 2]. Таким способом можно получить массивы НП диаметром несколько десятков нанометров. Однако для наблюдения квантово-размерных эффектов в НП их диаметр должен быть ещё меньше, поэтому для утонения НП был предложен их послеростовой отжиг [3–5]. Отжиг НП используется также для модификации их оптических, транспортных и микроструктурных свойств [6–8]. Авторы работы [8] не получили заметного изменения морфологии НП GaAs в результате отжига в потоке мышьяка при 680 °С, но заметили рост шероховатости поверхности НП, тогда как при отжиге НП GaN при 920 °С [5] боковые стенки НП оставались атомарно-гладкими. В [3–5] наблюдается утонение НП при одновременном уменьшении их длины за счёт испарения. Утонение НП в этих экспериментах происходило неоднородно — НП приобретали форму конуса с диаметром у основания больше, чем у вершины. По мнению авторов [3–5], декомпозиция НП начинается на границе раздела между верхней и боковыми гранями, и НП принимают форму конуса вследствие разной скорости испарения этих граней — верхняя грань (111) испаряется быстрее боковых фасеток (110). В одной из работ НП в процессе отжига приобретали бутылкообразную форму — верхний край был существенно тоньше основания, а на границе между проволокой и подложкой наблюдалось утонение [3]. Ранее подобное утонение было предсказано теоретически для процесса роста НП [9]. Процесс отжига НП GaAs был исследован в работе [10] с помощью имитационного моделирования методом Монте-Карло. Показано, что в плотных массивах НП верхние и нижние их части находятся в разных условиях: верхние части — в условиях свободного испарения, а нижние — в условиях квазиравновесия. Это и приводит к утонению верхней части НП по сравнению с нижней. Кроме того, оказалось, что в нижней части НП формируется перешеек.

Целью представленной работы является объяснение сложного профиля НП после их отжига на основе анализа результатов численного расчёта. Основное внимание уде-

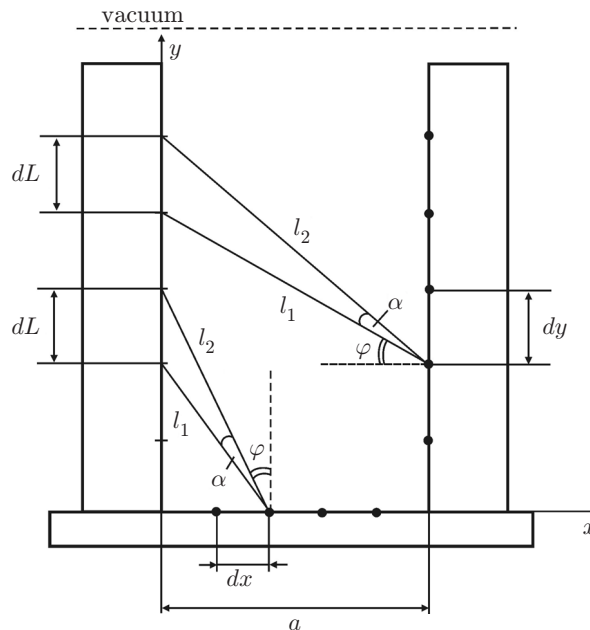


Рис. 1. Схематичное изображение испарения из набора точечных источников в рассматриваемой системе: α — угол, под которым виден фрагмент боковой поверхности dL из точечного источника испаряемого вещества; dL — длина фрагмента боковой поверхности НП, которая облучается испаряемым веществом; dx — расстояние между точечными источниками вещества на подложке; dy — расстояние между точечными источниками на боковой поверхности соседней НП; l_1, l_2 — расстояние от источника испаряемого вещества до начала и конца фрагмента dL ; φ — угол между направлением испарения и нормалью к поверхности (для модели Кнудсена — Ламберта). Точками обозначены источники испаряемого вещества

лялось влиянию реадсорбированного потока на морфологию НП, так как известно, что при росте и отжиге НП процесс реадсорбции играет важную роль [10, 11].

Методика расчёта. Процесс испарения материала при отжиге вертикальных НП исследован с помощью численного моделирования. Модель имеет общий характер и может быть распространена на широкий круг материалов НП. На рис. 1 представлена геометрия исследуемой системы. Расчёт проводился для двумерного случая. На гладкой подложке на расстоянии a друг от друга расположены две проволоки высотой L . Рассматривалось испарение с подложки и боковой стенки одной из НП (на рисунке правая НП). В дальнейшем будем называть их источниками испаряемого вещества. Часть испаряющегося материала удалялась в вакуум, часть реадсорбировалась на подложку и соседнюю НП. В качестве приёмника испаряемого вещества рассмотрена вторая НП (на рисунке слева). Процесс диффузионного переноса вещества не учитывался, поэтому профиль НП определялся тремя основными процессами: испарением материала с боковых стенок (1); реадсорбцией материала, испаряемого с подложки (2); реадсорбцией материала, испаряемого с соседней НП (3). Испарение НП будем считать равномерным вдоль всей длины, следовательно, форма НП задаётся суммой вкладов 2 и 3.

Проведён расчёт количества вещества, реадсорбированного в единицу времени на боковую стенку НП с поверхности подложки и с боковой поверхности соседней НП. Традиционно процесс испарения описывается двумя моделями: моделью Кнудсена — Ламберта и моделью изотропного испарения из точечного источника. Расчёты в данной работе

проводились в соответствии с обеими моделями. Известно, что испарение с поверхности полупроводника может происходить как из физадсорбированного, так и из хемадсорбированного состояния. В хемадсорбированном состоянии частицы образуют с поверхностью химическую связь. В этом случае преимущественным направлением десорбции будет направление, противоположное направленности связи, а если частица образует с поверхностью несколько связей, то в направлении, противоположном результирующей силе связи. Для этого случая логично предположить, что имеется выделенное направление испарения и следует описывать его моделью Кнудсена — Ламберта. В физадсорбированном состоянии частицы находятся в приповерхностном слое, не образуя направленных связей с поверхностью. Испарение из такого состояния будет корректно описывать модель испарения из сферически-симметричных источников.

Изотропное испарение из набора точечных источников. Сначала рассмотрим процесс испарения из набора изотропных сферически-симметричных точечных источников. Разобьём всю поверхность, с которой происходит испарение, на одинаковые интервалы dx (на подложке) и dy (на боковой поверхности НП) (см. рис. 1). Будем считать, что всё вещество, испаряющееся с каждого из этих интервалов, испаряется из точечного источника, расположенного на краю выбранного интервала. Испарение из них будем считать изотропным и возможным во всём доступном угле (π). Скорость испарения из одного точечного источника будем считать постоянной и обозначим за n . Тогда в единичный угол в единицу времени будет испаряться доза n/π . Разобьём всю длину НП, на которую происходит реадсорбция, на i фрагментов длиной dL . Полная доза dN_i , реадсорбированная на i -й фрагмент боковой поверхности из каждого точечного источника, будет равна: $dN_i = n/\pi\alpha$, где α — угол, под которым виден i -й фрагмент боковой поверхности dL из точечного источника испаряемого вещества. Сначала рассмотрим реадсорбцию с подложки. Скорость испарения с подложки мы считали не зависящей от координаты x . Тогда полная доза, реадсорбированная на i -й фрагмент боковой поверхности НП со всей подложки, равна $N_i^s = \frac{n}{\pi} \int_0^a \alpha(x) dx$, где a — расстояние между нанопроволоками в направлении x . А полная доза, реадсорбированная на i -й фрагмент боковой поверхности НП с соседней НП, равна, соответственно, $N_i^{NW} = \frac{n}{\pi} \int_0^L \alpha(y) dy$, где y — направление, вдоль которого ориентированы НП. Здесь верхний индекс обозначает расположение источников вещества: s — на подложке и NW — на соседней НП.

Угол α , под которым будет видна боковая поверхность НП из точечного источника, расположенного на поверхности подложки или на боковой стенке соседней проволоки, можно рассчитать по теореме косинусов. Просуммировав дозы, осаждённые на каждый i -й фрагмент НП из всех источников на подложке, можно получить распределение реадсорбированного вещества вдоль длины НП. Доза, осаждённая на каждый i -й фрагмент нанопроволоки из всех точечных источников на подложке, равна:

$$N_i^s = \frac{n}{\pi} \sum_{j=1}^J \arccos \left(\frac{(i-1)^2 dL^2 + i^2 dL^2 + 2j^2 dx^2 - dL^2}{2\sqrt{(i-1)^2 dL^2 + j^2 dx^2} \sqrt{i^2 dL^2 + j^2 dx^2}} \right),$$

где j — номер точечного источника испаряемого вещества на подложке, J — количество источников на подложке.

Аналогичным образом можно посчитать дозу вещества, реадсорбированного с боковой поверхности соседней НП. Для простоты высоту соседней НП будем рассматривать равной высоте рассматриваемой НП. Изменением формы нанопроволоки-источника в процессе

отжига пренебрегаем. Тогда доза, осаждённая на каждый i -й фрагмент dL нанопроволоки из всех точечных источников соседней НП, равна:

$$N_i^{\text{NW}} = \frac{n}{\pi} \sum_{j=0}^J \arccos \left(\frac{2a^2 + [(i-1)dL - jdy]^2 + (idL - jdy)^2 - dL^2}{2\sqrt{a^2 + [(i-1)dL - jdy]^2} \sqrt{a^2 + [idL - jdy]^2}} \right).$$

Здесь j — номер точечного источника испаряемого вещества на соседней НП, J — количество источников на боковой стенке НП.

Таким образом, можно получить распределение вдоль всей длины НП вещества, реадсорбированного как с подложки, так и с боковой поверхности соседней НП. Суммарный реадсорбированный поток даст результирующий профиль нанопроволоки.

Испарение в соответствии с моделью Кнудсена — Ламберта. По аналогии с предыдущим разделом можно рассмотреть процесс испарения в соответствии с законом Кнудсена — Ламберта. Согласно ему, испарение вещества происходит неравномерно во всех направлениях — количество испарённого вещества пропорционально косинусу угла φ между направлением испарения и нормалью к поверхности (см. рис. 1). Как и в предыдущем случае, испаряемую поверхность будем рассматривать как набор точечных источников. Скорость испарения из каждого такого источника по-прежнему n во всём возможном угле испарения π . Поскольку скорость испарения в различных направлениях определяется косинусом угла φ между этим направлением и нормалью к поверхности, то скорость испарения в единичном угле α равна $kn/\pi \cos \varphi$, где k — нормировочный коэффициент, определяющий интенсивность испарения вещества в зависимости от угла φ .

Определим нормировочный коэффициент k из соотношения $\int_0^{\pi/2} k \frac{n}{\pi} \cos \varphi d\varphi = \frac{n}{2}$. Отсюда видно, что $k = \pi/2$. Тогда полная доза dN_i , реадсорбированная на i -й фрагмент боковой поверхности, будет равна произведению количества вещества, испарившегося в единичный угол, на угол, под которым виден фрагмент боковой поверхности dL из точечного источника испаряемого вещества α : $dN_i = n/2 \cos \varphi \alpha$. Угол α определяется по теореме косинусов.

Результаты расчёта и их обсуждение.

Испарение из сферически-симметричных источников. На рис. 2 приведены результаты расчёта распределения осаждённого вещества вдоль длины НП. Для большей наглядности толщина осаждённого слоя d отложена по оси абсцисс, а высота — по оси ординат. В таком виде график даёт представление о профиле НП. Из рис. 2 видно, что чем дальше от подложки, тем меньше реадсорбционный поток вещества с подложки (кривая 1). Рeadсорбированная доза с боковой поверхности соседней НП (кривая 2) максимальна в центральной части НП и убывает в направлении верхнего и нижнего края. В области верхнего края часть испаряемого вещества уходит в вакуум, а в области нижнего края — на подложку, что приводит к уменьшению толщины проволоки в этих областях. Сумма вещества, адсорбированного на боковую поверхность НП за счёт испарения с подложки и с соседней НП, даёт результирующий профиль НП (кривая 3). Отметим, что масштабы осей абсцисс и ординат на рис. 2 заданы разными для лучшей визуализации профиля НП. На рис. 2, a приведены результаты расчёта распределения осаждённого вещества вдоль длины НП длиной 900 нм с расстоянием между проволоками 70 нм. Начиная с высоты ~ 200 нм, осаждение на боковой поверхности НП за счёт реадсорбции с подложки отсутствует. Видно, что в нижней части кристалла формируется утолщение, отделённое от основной части НП перешейком, а верхняя часть проволоки утоняется. Аналогичный результат получен ранее в процессе моделирования отжига НП GaAs на базе решёточной модели методом Монте-Карло [10]. Отметим, что геометрические параметры системы рис. 2, a соответствуют параметрам, использованным при моделировании Монте-Карло процесса отжига.

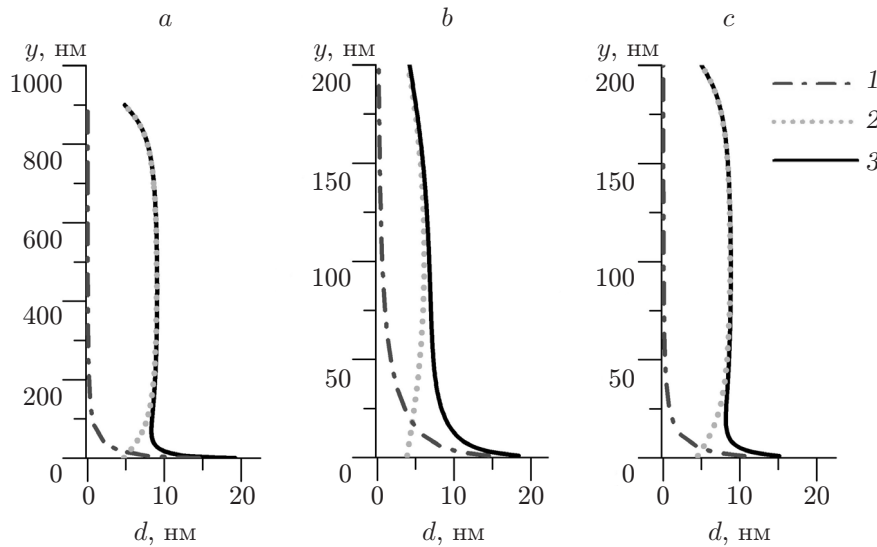


Рис. 2. Профиль НП, полученный за счёт реадсорбции испаряемого вещества: с поверхности подложки (кривая 1), с боковой поверхности соседней НП (кривая 2) и их сумма (кривая 3). Интенсивности испарения вещества с подложки и боковой поверхности НП 1,0 нм/с из каждого точечного источника, время осаждения 10 с. Длина НП 900 нм (а) и 200 нм (b, c), расстояние между НП 70 нм (a, b) и 20 нм (b, c)

Рассмотрим причины появления перешейка и зависимость его положения от различных факторов. Результирующий профиль НП можно представить как сумму двух слагаемых $f_s(y) + f_{NW}(y)$, где f_s и f_{NW} — функции, описывающие зависимость осаждённой дозы с поверхности подложки и соседней НП от вертикальной координаты y . Положение перешейка соответствует минимуму этой суммы, т. е. условию $\frac{d(f_s(y) + f_{NW}(y))}{dy} = 0$.

Поскольку функциональные зависимости $f_s(y)$ и $f_{NW}(y)$ неизвестны, то проведём численный анализ. Из рис. 2, а видно, что реадсорбция вещества, испаряемого с подложки, приводит к формированию пьедестала, а реадсорбция вещества, испаряемого с соседних НП, наоборот, к утонению НП у основания. От соотношения этих вкладов зависит результирующая форма НП. Если преобладает реадсорбция с подложки, то НП расширяется книзу. Если преобладает реадсорбция с соседней НП, то формируется перешеек, отделяющий верхнюю часть кристалла от пьедестала. Причём положение перешейка будет тем ближе к подложке, чем меньше вклад реадсорбции с подложки. На рис. 2, b представлены результаты расчёта профиля НП длиной 200 нм при том же расстоянии между проволоками, что и на рис. 2, а. Видно, что у короткой проволоки отсутствует перешеек у основания. Это объясняется тем, что для короткой проволоки возможность для испарения вещества с боковой поверхности в вакуум возрастает. Это приводит к меньшему вкладу реадсорбции с соседней НП на рассматриваемую. В результате перешеек в районе пьедестала отсутствует. На коротких нанопроволоках можно наблюдать формирование перешейка, если они будут расположены более плотно (рис. 2, c).

Анализ набора данных для НП различной длины с различной плотностью расположения показал, что наличие или отсутствие перешейка обусловлено аспектным соотношением между длиной НП L и расстоянием между НП a , что иллюстрируется на рис. 3. Здесь представлена диаграмма в координатах «длина НП — расстояние между НП», разделяющая области с формированием перешейка и без него. Перешеек наблюдается при аспектном отношении $L/a > 8,5$.

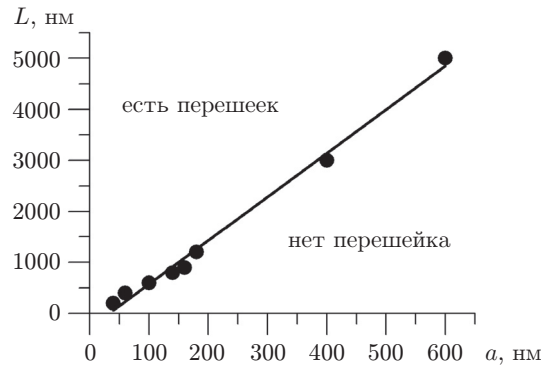


Рис. 3. Диаграмма в координатах «длина НП — расстояние между НП», разграничивающая области с перешейком и без него

Проанализируем влияние на профиль НП скоростей испарения вещества с поверхности подложки и боковой поверхности НП. Проведённые дополнительные расчёты показали, что в рассматриваемом диапазоне геометрических параметров ($L > a$) поток на единицу площади подложки за счёт реадсорбции чуть более чем в 2 раза превышает поток с боковых стенок НП. Исходя из этого, для дальнейших расчётов использовалось соотношение скоростей испарения $V_{\text{desS}}/V_{\text{desNW}} = 1-3$. Сравним профили НП, полученные при различных скоростях испарения вещества с подложки (рис. 4, а). Видно, что, чем меньше интенсивность испарения с подложки, перешеек у основания НП становится более выраженным и смещается к основанию. В предельном случае, когда испарение с подложки полностью отсутствует, форма НП будет определяться одной только реадсорбцией с соседней НП — перешеек будет располагаться у подложки. Увеличение скорости испарения с подложки, напротив, приводит к сглаживанию профиля. Всё вышесказанное иллюстрирует нижняя часть рис. 4, а, где приведены зависимости глубины и положения перешейка z от скорости испарения вещества с подложки. Глубина перешейка рассчитывается здесь как разница между минимумом и максимумом осаждённой дозы на боковой поверхности НП. Вертикальная координата перешейка линейно зависит от скорости испарения с подложки V_{desS} .

Аналогичным образом можно рассмотреть, как влияет на профиль НП скорость испарения с поверхности соседней НП при фиксированной скорости испарения с подложки. При большой скорости испарения с соседней проволоки перешеек у основания более выражен (рис. 4, б). Это иллюстрирует также зависимость глубины и положения перешейка от скорости испарения с поверхности НП (нижняя часть рис. 4, б). Из рисунка видно, что вертикальная координата перешейка обратно пропорциональна скорости испарения с соседней НП.

Для аспектного соотношения L/a , соответствующего существованию перешейка, рассмотрим влияние скоростей испарения, длины НП и расстояния между ними на вертикальную координату перешейка. На рис. 5 показана зависимость вертикальной координаты перешейка z от расстояния между НП разной длины при различных отношениях скоростей испарения с подложки V_{desS} и боковой поверхности НП V_{desNW} . Видно, что положение перешейка z пропорционально расстоянию между НП a , умноженному на отношение скоростей испарения с подложки и с поверхности НП: $z = aV_{\text{desS}}/V_{\text{desNW}}$. Верхние точки графиков по оси абсцисс соответствуют максимальному расстоянию a , при котором ещё наблюдается перешеек. При большем расстоянии утонение у основания НП отсутствует. Положение перешейка практически не зависит от длины НП и определяется плотностью расположения НП. Чем больше реадсорбционный поток с подложки по сравнению с реадсорбцией с соседней НП, тем выше оказывается перешеек, что хорошо видно по положению кривых, соответствующих разным отношениям $V_{\text{desS}}/V_{\text{desNW}}$.

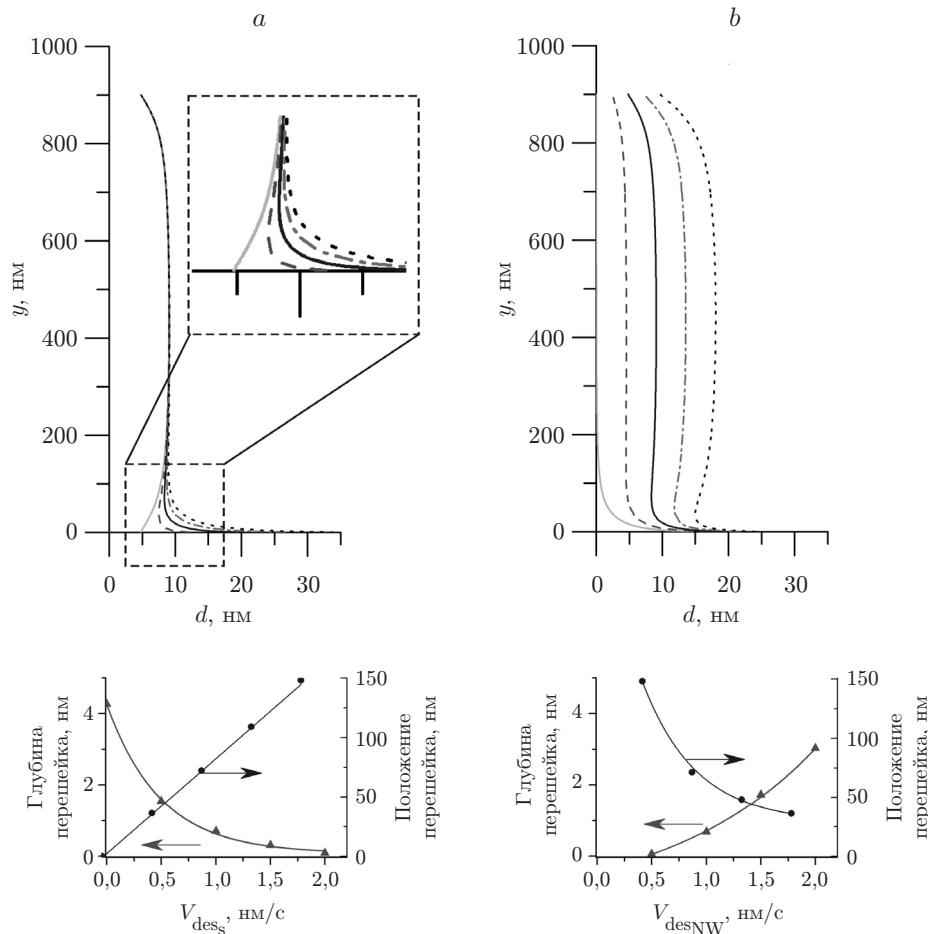


Рис. 4. Профиль НП, полученный за счёт реадсорбции испаряемого вещества: *a* — при различных скоростях испарения с подложки V_{des_s} и интенсивности испарения вещества с соседней НП $V_{des_{NW}} = 1,0$ нм/с (снизу зависимость глубины и вертикальной координаты перешейка от скорости испарения вещества с подложки); *b* — при различных скоростях испарения с соседней НП $V_{des_{NW}}$ и интенсивности испарения вещества с подложки $V_{des_s} = 1,0$ нм/с (снизу зависимость глубины и вертикальной координаты перешейка от скорости испарения вещества с соседней НП). Длина НП 900 нм, расстояние между НП 70 нм. Время осаждения 10 с; V_{des_s} и $V_{des_{NW}}$ равны: 0 — серая сплошная кривая, 0,5 нм/с — штриховая кривая, 1,0 нм/с — чёрная сплошная кривая, 1,5 нм/с — штрихпунктирная кривая, 2,0 нм/с — пунктирная кривая

Испарение по закону Кнудсена — Ламберта. В данном разделе приведён результат расчёта испарения в соответствии с законом Кнудсена — Ламберта. На рис. 6, *a* проиллюстрировано распределение вдоль НП вещества, реадсорбированного при испарении с поверхности подложки и соседней НП. Расчёт был проведён при тех же геометрических параметрах системы, что и на рис. 2, *a*. Видно, что, как и в случае сферически-симметричных источников, профиль НП имеет перешеек, однако, расположен он точно у основания НП. Такое положение перешейка связано с нулевым испаряемым потоком с подложки в направлении основания нанопроволоки. Формирование перешейка в эксперименте [3] тоже наблюдалось именно на границе с подложкой. Однако стоит отметить, что такой же результат можно получить и используя модель изотропных источников.

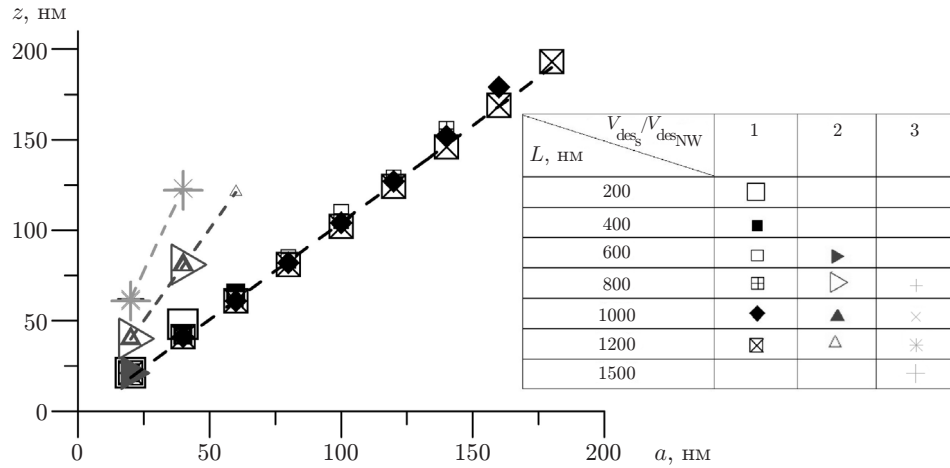


Рис. 5. Зависимость вертикальной координаты перешейка z от расстояния между НП a для НП разной длины L и различного отношения скоростей испарения с подложки и боковых стенок: $V_{des_s}/V_{des_{NW}} = 1$ (квадраты), $V_{des_s}/V_{des_{NW}} = 2$ (треугольники), $V_{des_s}/V_{des_{NW}} = 3$ (крестики)

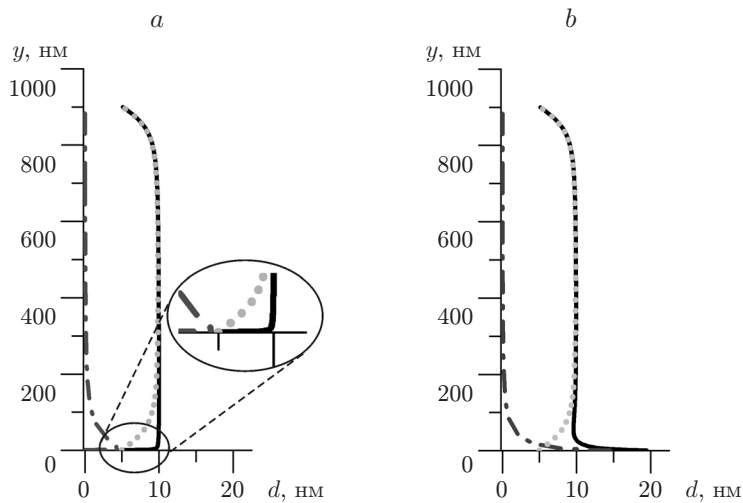


Рис. 6. Профиль НП, полученный с использованием модели Кнудсена — Ламберта (а) и в условиях комбинации моделей Кнудсена — Ламберта и сферически-симметричных источников (б). Толщина слоя, осаждённого за счёт реадсорбции испаряемого вещества с поверхности подложки, показана штрихпунктирной линией, с боковой поверхности соседней НП — пунктирной линией и их сумма — чёрной сплошной линией. Интенсивности испарения вещества из каждого точечного источника подложки и боковой поверхности НП 1,0 нм/с, время осаждения $t = 10$ с. Длина НП 900 нм, расстояние между НП 70 нм

Это будет возможно в том случае, если реадсорбционный поток с подложки отсутствует или очень мал. В связи с этим вопрос о том, какая из моделей правильнее описывает эксперимент, остаётся открытым.

Комбинация моделей. Проанализируем, какая модель лучше всего подходит для описания испарения вертикальных полупроводниковых НП. Рост НП A^3B^5 по механизму ПЖК может быть каталитическим и самокаталитическим. В случае самокаталитического роста поверхность подложки покрывают плёнкой-маской. Испарение с плёнки-маски логично описывать сферически-симметричными источниками, так как считается, что адатомы слабо связаны с плёнкой-маской. Испарение полупроводника может происходить напрямую из хемадсорбированного состояния в вакуум либо в две стадии — переход из хемадсорбированного состояния в физадсорбированное, а затем выход в вакуум. Поэтому была рассмотрена комбинация двух моделей: испарение НП было описано моделью Кнудсена — Ламберта, а испарение с поверхности подложки — моделью сферически-симметричных источников (рис. 6, *b*). Данная комбинация соответствует самокаталитическому росту НП GaAs. Видно, что перешеек имеет координату z , отличную от нуля, по сравнению с рис. 6, *a* из-за ненулевого реадсорбционного потока вещества с поверхности подложки.

Проведём сравнение полученных результатов с известными экспериментальными данными и данными других расчётов. Формирование перешейка в эксперименте [3] наблюдалось на границе с подложкой. Аналогичный результат был получен нами в расчётах либо с использованием модели Кнудсена — Ламберта, либо в отсутствии испарения с подложки. Ранее неоднородный профиль НП, формирующийся в процессе отжига вертикальной цилиндрической НП на основе GaAs, был продемонстрирован с помощью моделирования методом Монте-Карло [10]. Расчёт был проведён без учёта зависимости вероятности испарения от его направления. Нанопроволока, полученная в результате расчёта, была заострена в верхней части, а в нижней имела пьедестал, отделённый от основной части НП тонким перешейком. Формирование пьедестала у НП в модели Монте-Карло объяснялось наличием диффузионного потока вещества с подложки. Расчёты, проведённые в представленной работе, не учитывают диффузионный перенос вещества и предсказывают формирование пьедестала только за счёт испарения подложки с последующей реадсорбцией. Таким образом, появление перешейка при отжиге НП может быть связано не только с наличием диффузионного потока вещества с подложки, но и может задаваться простой суммой реадсорбционных потоков с подложки и соседних НП.

Отметим, что представленные в работе результаты получены в двумерной модели. Простые оценки показали, что в трёхмерной модели реадсорбционный поток вещества от соседних нанопроволок будет несколько меньше из-за того, что часть вещества будет попадать в промежутки между нанопроволоками, в том числе на отдалённо стоящие проволоки, находящиеся за пределами первой координационной сферы относительно проволоки-источника. Аспектное соотношение для этих проволок меньше, чем для ближайших. В итоге в трёхмерной модели больше вещества будет улетать в вакуум или на подложку. Это приведёт к тому, что перешеек будет наблюдаться при большем аспектном соотношении, чем при двумерном рассмотрении, а его вертикальная координата окажется выше. Однако при большой плотности НП отличие реадсорбционных потоков на боковые стенки нанопроволок для трёхмерной и двумерной моделей будет невелико.

Заключение. В представленной работе рассмотрено изменение формы нанопроволоки из-за реадсорбции на неё материала, испаряющегося с соседних нанопроволок и поверхности подложки. Показано, что реадсорбционный поток с соседней проволоки приводит к утолщению нанопроволоки в средней части, а с поверхности подложки — к формированию пьедестала у основания. Преобладание первого потока над вторым приводит к формированию узкого перешейка в нижней части нанопроволоки. В зависимости от назначения

НП требуется получить проволоки с различной морфологией — максимально однородные вдоль длины либо заострённые. Проведённые расчёты показывают, что заострённые НП можно получить при большом аспектном отношении длины НП и расстояния между ними, а однородные по толщине проволоки — при меньших аспектных соотношениях. Утонение или утолщение НП у основания зависит не только от аспектного соотношения, но и от отношения скоростей испарения с поверхности подложки и боковых стенок НП. Показано, что при одинаковых скоростях испарения перешеек наблюдается при аспектном отношении длины нанопроволок и расстояния между ними более 8,5. Данные результаты могут быть полезны для планирования отжига нанопроволок для получения проволоки требуемой морфологии.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке программы Министерства науки и высшего образования РФ (№ 0242-2021-0008).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Wagner R. S., Ellis W. C.** Vapor-liquid-solid mechanism of single crystal growth // *Appl. Phys. Lett.* 1964. **4**, N 5. P. 89–90.
2. **Morral A. F., Colombo C., Abstreiter G. et al.** Nucleation mechanism of gallium-assisted molecular beam epitaxy growth of gallium arsenide nanowires // *Appl. Phys. Lett.* 2008. **92**. 063112. DOI: 10.1063/1.2837191.
3. **Ilkiv I., Kirilenko D., Kotlyar K., Bouravleuv A.** Thermal decomposition of GaAs nanowires // *Nanotechnology*. 2020. **31**, N 5. 055701. DOI: 10.1088/1361-6528/ab4e27.
4. **Loitsch B., Rudolph D., Morkötter S. et al.** Tunable quantum confinement in ultrathin, optically active semiconductor nanowires via reverse-reaction growth // *Adv. Mater.* 2015. **27**, Iss. 13. P. 2195–2202.
5. **Zettler J. K., Corfdir P., Hauswald C. et al.** Observation of dielectrically confined excitons in ultrathin GaN nanowires up to room temperature // *Nano Lett.* 2016. **16**, Iss. 2. P. 973–980.
6. **Balagula R. M., Jansson M., Yukimune M. et al.** Effects of thermal annealing on localization and strain in core/multishell GaAs/GaNAs/GaAs nanowires // *Sci. Rep.* 2020. **10**. 8216. DOI: 10.1038/s41598-020-64958-6.
7. **Devkota S., Parakh M., Ramaswamy P. et al.** A study on the effects of gallium droplet consumption and post growth annealing on Te-doped GaAs nanowire properties grown by self-catalyzed molecular beam epitaxy // *Catalysts*. 2022. **12**, Iss. 5. 451. DOI: 10.3390/catal12050451.
8. **Stehr J. E., Balagula R. M., Jansson M. et al.** Effects of growth temperature and thermal annealing on optical quality of GaNAs nanowires emitting in the near-infrared spectral range // *Nanotechnology*. 2020. **31**, N 6. 065702. DOI: 10.1088/1361-6528/ab51cd.
9. **Bouravleuv A., Sibirev N., Statkute G. et al.** Influence of substrate temperature on the shape of GaAs nanowires grown by Au-assisted MOVPE // *Journ. Crystal Growth*. 2010. **312**, Iss. 10. P. 1676–1682.
10. **Nastovjak A. G., Shterental D. V., Shwartz N. L.** Simulation of GaAs nanowire annealing // *Comp. Mater. Sci.* 2023. **228**. 112310. DOI: 10.1016/j.commatsci.2023.112310.
11. **Gibson S. J., LaPierre R. R.** Model of patterned self-assisted nanowire growth // *Nanotechnology*. 2014. **25**, N 41. 415304. DOI: 10.1088/0957-4484/25/41/415304.

Поступила в редакцию 25.12.2023

После доработки 12.01.2024

Принята к публикации 12.01.2024