

Министерство образования и науки РФ
Алтайский государственный университет

Л. В. Фомина, Ю. В. Земцова,
Н. В. Комаровских, С. А. Безносюк

**ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ
НАНОСТРУКТУРНЫХ МАТЕРИАЛОВ
ЭЛЕКТРОНИКИ И СПИНТРОНИКИ
НА ОСНОВЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ
СОЕДИНЕНИЙ A^{III}B^V**

Монография



Барнаул

Издательство
Алтайского государственного
университета
2013

УДК 544.03

ББК 24.5

Ф 762

Рецензенты:

доктор физ.-мат. наук, профессор **В. В. Поляков**,
доктор физ.-мат. наук, профессор **В. А. Плотников**

Фомина, Л. В.

Ф762 Физическая химия наноструктурных материалов электроники и спинтроники на основе полупроводниковых соединений $A^{III}B^V$ [Текст] : монография / Л. В. Фомина, Ю. В. Земцова, Н. В. Комаровских, С. А. Безносюк. — Барнаул : Изд-во Алт. ун-та, 2013. — 170 с.

ISBN 978-5-7904-1382-7

Изложены результаты экспериментальных и теоретических исследований в области физической химии гетероструктурных наносистем на основе полупроводниковых соединений $A^{III}B^V$. Обобщены способы химической халькогенной пассивации поверхности соединений $A^{III}B^V$ в водных растворах, применяемых перед электрохимическим формированием диодных гетеропереходов полупроводник $A^{III}B^V$ -металл. Рассмотрены теория и результаты расчета методами термодинамики и квантовой химии фазовых равновесий нанослоевых гетероструктур, формирующихся на границах контактов полупроводников GaAs, GaP с водными растворами при халькогенной пассивации и с металлами в диодных переходах. Изложен ряд вопросов физической химии наноструктурных материалов электроники на основе GaN, касающихся механизмов и закономерностей релаксации нанопленок GaN на подложках SiC и GaAs. Проанализированы результаты теоретического исследования устойчивости гетероструктур магнитных полупроводниковых соединений спинтроники на основе нанокристаллов арсенида галлия и его изоэлектронных аналогов типа $A^{II}B^IVC^V_2$, легированных марганцем.

Монография адресована специалистам в области физической химии, материаловедения, нанoeлектроники и спинтроники, компьютерного моделирования наноматериалов, а также студентам, магистрантам и аспирантам соответствующих специальностей.

УДК 544.03

ББК 24.5

*Настоящее издание опубликовано в плане реализации
Программы стратегического развития
Алтайского государственного университета*

ISBN 978-5-7904-1382-7

© Фомина Л. В., Земцова Ю. В.,
Комаровских Н. В., Безносюк С. А., 2013
© Оформление. Издательство
Алтайского государственного
университета, 2013

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	3
Глава 1	
Полупроводниковые соединения типа $A^{III}B^V$ — базовые материалы электроники	8
1.1. Физико-химическая характеристика полупроводниковых соединений типа $A^{III}B^V$	10
1.2. Процессы, протекающие на поверхности полупроводников типа $A^{III}B^V$, контактирующей с окружающей средой	18
Глава 2	
Гетерограницы и гетероструктуры на основе полупроводников $A^{III}B^V$	30
2.1. Состояние поверхности полупроводника и электрофизические характеристики контакта металл-полупроводник	31
2.2. Халькогенидная пассивация поверхности полупроводников типа $A^{III}B^V$	35
2.3. Термодинамика процесса халькогенной пассивации полупроводников типа $A^{III}B^V$	40
2.4. Физико-химические характеристики выпрямляющих контактов металл-полупроводник $A^{III}B^V$ n -типа с промежуточными нанослоями оксидов и халькогенидов	47
2.4.1. Влияние предварительной подготовки поверхности полупроводника на параметры выпрямляющих контактов Ni-GaAs n -типа	48
2.4.2. Влияние предварительной обработки поверхности арсенида галлия на электрофизические параметры контактов Ir-GaAs n -типа	56
2.4.3. Сравнительная характеристика иридиевых контактов с арсенидом галлия n -типа, сформированных при сульфидной и селенитной предварительных подготовках поверхности полупроводника	65
2.4.4. Влияние предварительной обработки поверхности фосфида галлия на электрофизические параметры контактов Ni-GaP n -типа	67
2.5. Моделирование гетероперехода металл-полупроводник	71
2.5.1. Модели строения границы раздела арсенид галлия — металл VIII группы с промежуточными слоями оксидов и халькогенидов	71

2.5.2. Квантово-топологические модели строения нанослоевых границ раздела Me-GaAs(P)	72
2.5.3. Физико-химическая модель электрофизических параметров барьера Шоттки для нанослоевых когерентных границ раздела Ir-GaAs.....	80
2.6. Физико-химические особенности формирования гетероструктур нитрид галлия — подложка	83
2.6.1. Кристаллохимические аспекты гетероэпитаксиального роста пленок нитрида галлия	83
2.6.2. Физико-химические закономерности эпитаксиального роста пленок GaN на подложках	85

Глава 3

Моделирование релаксации наноструктур на основе полупроводниковых соединений типа A^{III}B^V методом молекулярной механики.....	95
3.1. Теоретические подходы к расчету физико-химических характеристик наноструктур материалов на основе соединений типа A ^{III} B ^V	95
3.2. Расчет энергии гетероструктур наносистем методом не-локального функционала плотности.....	100
3.3. Компьютерное моделирование релаксации контактов GaP-(S, Se)-Ni.....	104
3.3.1. Анализ результатов компьютерного моделирования релаксации гетероструктуры наноконтакта GaP-S-Ni	105
3.3.2. Анализ результатов компьютерного моделирования релаксации гетероструктуры наноконтакта GaP-Se-Ni.....	109

Глава 4

Моделирование наноструктурных материалов на основе полупроводниковых соединений A^{III}B^V методами компьютерной нанотехнологии.....	114
4.1. Моделирование внутренней энергии гетероструктур наносистем полупроводников на основе соединений A ^{III} B ^V	115
4.2. Применение термодинамического подхода к расчету устойчивости гетероструктурных наносистем поверхности полупроводников	118
4.3. Физико-химические механизмы и закономерности релаксации свободных нанопленок GaN.....	119
4.4. Физико-химические механизмы и закономерности релаксации нанопленок GaN на подложках SiC и GaAs	123
4.4.1. Моделирование нанопленок GaN на подложке SiC	123
4.4.2. Моделирование нанопленок GaN на подложке GaAs.....	125

Глава 5**Компьютерное моделирование устойчивости нанослоев
арсенида галлия и его изоэлектронных аналогов,**

легированных марганцем	135
5.1. Гетероструктуры магнитных полупроводников.....	135
5.1.1. Разбавленные магнитные полупроводники.....	135
5.1.2. Высокотемпературные ферромагнитные полупроводники .	138
5.2. Компьютерное моделирование нанослоевых гетеро- структур $A^{III}B^V$, допированных марганцем.....	141
5.2.1. Анализ результатов компьютерных экспериментов.....	147
5.3. Компьютерное моделирование нанослоев $A^{II}B^{IV}C^V_2$, леги- рованных марганцем, на примере $ZnSnAs_2$	155
5.4. Компьютерное моделирование нанокинетики фемтосе- кундного процессинга нанослоев GaAs, легированных марганцем.....	156
Заключение	165

Научное издание

**Лариса Валерьевна Фомина,
Юлия Владимировна Земцова,
Нина Валерьевна Комаровских,
Сергей Александрович Безносюк**

**ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ НАНОСТРУКТУРНЫХ
МАТЕРИАЛОВ ЭЛЕКТРОНИКИ И СПИНТРОНИКИ
НА ОСНОВЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ
СОЕДИНЕНИЙ $A^{III}B^V$**

Монография

Редактор: Л. А. Печенёва
Подготовка оригинал-макета:
Е. М. Федяева, О. В. Майер

Издательская лицензия ЛР 020261 от 14.01.1997 г.
Подписано в печать 09.08.2013. Форма 60x84/16.
Бумага офсетная. Печать трафаретная.
Усл.-печ. л. 10,0. Тираж 100 экз. Заказ 193.

Типография Алтайского государственного университета
656049 Барнаул, ул. Димитрова, 66