

УДК 621.315.592.2

РАСЧЕТНАЯ ОЦЕНКА АДСОРБЦИОННО-ДЕСОРБЦИОННОГО ПОВЕДЕНИЯ ПРОДУКТОВ ПИРОЛИЗА ПРИ ПОЛУЧЕНИИ $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$ В УСЛОВИЯХ МОС-ГИДРИДНОЙ ЭПИТАКСИИ

© 2022 г. А. Д. Максимов¹*, М. А. Давыдкин¹, Т. А. Багаев^{2,3}, А. Ю. Андреев², И. В. Яроцкая², М. А. Ладугин², А. А. Мармалюк²

¹МИРЭА – Российский технологический университет, пр. Вернадского, 78, Москва, 119454 Россия

²АО “НИИ “Полюс” им. М.Ф. Стельмаха”, ул. Введенского, 3, к. 1, Москва, 117342 Россия

³Российский университет дружбы народов, ул. Миклухо-Маклая, 6, Москва, 117198 Россия

*e-mail: maksimov_a@mirea.ru

Поступила в редакцию 27.10.2021 г.

После доработки 27.01.2022 г.

Принята к публикации 04.02.2022 г.

Методом расчета функционала электронной плотности определены потенциалы адсорбции и десорбции продуктов пиролиза с подложкой в процессе роста $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}/\text{GaAs}$ в условиях МОС-гидридной эпитаксии. На основании полученных данных произведена симуляция поведения продуктов пиролиза на поверхности роста с учетом адсорбции, десорбции и диффузии кинетическим методом Монте-Карло. Результаты расчетной оценки хорошо согласуются с экспериментальными данными. Представленный алгоритм расчета может быть использован для исследования адсорбционно-десорбционного поведения материалов других систем.

Ключевые слова: МОС-гидридная эпитаксия, GaAsP , теория функционала плотности, адсорбция, десорбция

DOI: 10.31857/S0002337X2204011X

ВВЕДЕНИЕ

Твердые растворы $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$ широко применяются в качестве материала активной области квантоворазмерных полупроводниковых лазеров, излучающих в ближнем инфракрасном диапазоне спектра [1–6]. Одним из основных методов промышленного производства гетероструктур для таких лазеров является МОС-гидридная эпитаксия. В качестве источников элементов V группы Периодической системы при выращивании твердых растворов $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$ данным методом применяются арсин и фосфин. Из-за значительного различия температур полного разложения этих соединений (~500°C для арсина и ~900°C для фосфина [7]), а также из-за того, что рост эпитаксиальных слоев в методе МОС-гидридной эпитаксии проводится при температурах 600–800°C, возникают трудности управления составом материала активной области $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$, необходимого для точного контроля длины волны излучения [8–10].

В работе [11] предложена модель расчета состава твердого раствора $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$, учитывающая

кинетику разложения гидридов и адсорбционно-десорбционное взаимодействие продуктов пиролиза с поверхностью роста. Эта методика показала хорошее соответствие расчета результатам проведенных экспериментов в широком диапазоне параметров роста (температура в реакторе, парциальные давления компонентов и общее давление в реакторе). Однако в данной модели для учета адсорбционно-десорбционного поведения продуктов пиролиза с поверхностью роста применялась экспериментальная температурная зависимость отношения константы адсорбции к константе десорбции, полученная в работе [12]. Применение таких экспериментальных зависимостей значительно ограничивает гибкость модели в силу того, что они получены при конкретных условиях роста. Кроме того, подобные зависимости получены для ограниченного набора материалов.

В настоящей работе поставлена задача определения потенциалов адсорбции и десорбции продуктов пиролиза в условиях роста. Для расчетов выбрана гетеросистема $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$ на подложке GaAs, так как поведение продуктов пиролиза

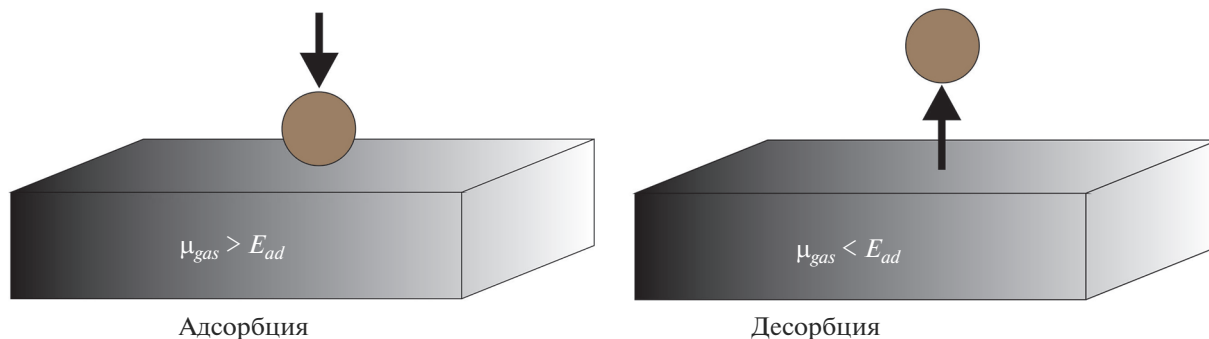


Рис. 1. Схематическое изображение модели исследования адсорбционно-десорбционного поведения компонентов на поверхности роста.

фосфина и арсина при совместном осаждении досконально не изучено. На основании полученных результатов проведена симуляция поведения продуктов пиролиза на поверхности роста с учетом адсорбции, десорбции и диффузии по кинетическому методу Монте-Карло (КМК).

ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ

В основу расчета была положена работа [13], в которой использовался неэмпирический подход, основанный на нахождении свободной энергии компонентов в газовой фазе. Полагается, что частица, падающая на подложку, будет адсорбироваться, если ее химический потенциал в газовой фазе (μ_{gas}) больше энергии ее адсорбции на поверхность. И наоборот, если ее потенциал в газовой фазе будет меньше, чем энергия адсорбции, то частица будет десорбироваться с поверхности. Схематически данная модель показана на рис. 1.

Для нахождения энергии адсорбции компонентов газовой фазы на поверхность роста необходимо построить и рассчитать основное состояние (с минимумом свободной энергии) двух систем: поверхность с атомом в газовой фазе и поверхность с адсорбированным на ней атомом. По разнице энергий между двумя системами можно оценить энергию адсорбции компонента на поверхности:

$$E_{ad} = \sum E_{prod} - \sum E_{react}, \quad (1)$$

где E_{ad} – энергия адсорбции, $\sum E_{react}$ – сумма энергий свободной частицы и поверхности по отдельности, $\sum E_{prod}$ – энергия системы поверхности с адсорбированным атомом.

Химический потенциал компонента в газовой фазе определяется по уравнению

$$\mu_{gas} = -kT \ln \left(\frac{gkT}{p} \times f_{trans} f_{rot} f_{vibr} \right), \quad (2)$$

где

$$f_{trans} = \left(\frac{2\pi MkT}{h^2} \right)^{3/2}, \quad (3)$$

$$f_{rot} = \left(\frac{1}{\pi\sigma} \right) \left[\frac{8\pi^3 (I_A I_B \dots)^{1/n} kT}{h^2} \right]^{n/2}, \quad (4)$$

$$f_{vibr} = \prod_i^{3N-3-n} \left[1 - \exp \left(\frac{-h\nu_i}{kT} \right) \right]^{-1}. \quad (5)$$

Здесь f_{trans} , f_{rot} , f_{vibr} – суммы состояний поступательного, вращательного и колебательного движений молекул соответственно, k – постоянная Больцмана, T – температура, g – фактор вырождения энергетических электронных уровней [11], p – парциальное давление, M – масса частицы, h – постоянная Планка, σ – фактор симметрии, I_j – момент инерции по одной степени свободы, n – количество вращательных степеней свободы, N – количество атомов в частице, i – количество колебательных степеней свободы, ν_i – частота колебаний молекулы. Момент инерции равен

$$I_j = \sum m_i r^2, \quad (6)$$

где m – масса атома, r – радиус вращения молекулы вокруг оси.

Как видно из уравнений (1)–(6), неизвестными являются ν_i и r . Для их нахождения в данной работе используются квантово-химические вычисления по теории “Функционала электронной плотности” (Density Functional Theory – DFT) [14]. В основе метода лежит определение функции электронов в системе не через решение уравнения Шредингера с определением волновой функции, а через нахождение функции электронной плотности этой системы. Методы теории функционала плотности имеют высокую вычислительную способность при незначительном снижении точности по сравнению с неэмпирическими и полуэмпирическими методами вычислений. При этом DFT идеально подходит для больших неперiodических и перио-

дических (кристаллических) систем [15]. Согласно DFT, радиус вращения вокруг оси может быть получен как результат оптимизации молекулы, заключающейся в определении геометрической формы молекулы, соответствующей основному энергетическому состоянию. Частота колебаний рассчитывается по результатам вибрационного анализа молекулы.

На основе рассчитанных таким образом потенциалов молекул в газовой фазе и энергий адсорбции можно произвести симуляцию поведения продуктов пиролиза на поверхности роста с учетом адсорбции, десорбции и диффузии с помощью КМК [16]. Согласно данной методике, изменение вероятности $P_i(\tau)$ системы находиться в состоянии i (адсорбированное, десорбированное состояние, диффузия) в момент времени τ зависит только от вероятностей перехода из текущего состояния i в любое другое состояние j , k_{ij} и от вероятностей перехода в состояние i из любого другого состояния j , k_{ji} . С точки зрения химической кинетики, эти вероятности прыжков выражаются как константы скорости элементарных процессов с размерностью $[c^{-1}]$. Таким образом, общее изменение $P_i(\tau)$ регулируется уравнением баланса (основное уравнение Маркова), которое содержит только следующие константы скорости:

$$\frac{dP_i(t)}{dt} = -\sum_{j \neq i} k_{ij} P_i(t) + \sum_{j \neq i} k_{ji} P_j(t). \quad (7)$$

С математической точки зрения уравнение представляет собой систему связанных дифференциальных уравнений скорости. В случае поверхностных явлений константы скорости k_{ij} и k_{ji} можно рассчитать с помощью теории переходных состояний (ТПС), применяя уравнение Эйринга–Поляни [17]

$$k_{ij}^{\text{ТПС}} = k_0 \frac{k_B T}{h} \exp\left(-\frac{\Delta E_{ij}}{k_B T}\right), \quad (8)$$

где ΔE_{ij} – активационный барьер процесса. Коэффициент $k_0 \frac{k_B T}{h}$ можно рассчитать, полагая $k_0 \approx 1-10$, что применимо, когда колебательные свойства переходного состояния не сильно отличаются от свойств исходного состояния. Таким образом, неизвестными остаются только активационные барьеры процессов адсорбции, десорбции и диффузии. Они получены с помощью уравнения Бренстеда–Эванса–Поляни [18]

$$\Delta E \approx c_1(E_{\text{к.с}} - E_{\text{н.с}}) - c_2, \quad (9)$$

где c_1 и c_2 – константы, а $E_{\text{к.с}}$ и $E_{\text{н.с}}$ – энергии конечного и начального состояний соответственно. Последние получены по результатам вычислений

первой части этой работы и детально рассмотрены при обсуждении результатов. Параметры c_1 и c_2 определены линейной аппроксимацией из первых принципов [19]. Коэффициент поверхностной диффузии определен как [14]

$$D = \frac{\langle \text{СКК}(\tau) - \text{СКК}_0 \rangle}{2d\tau}, \quad (10)$$

где СКК – среднеквадратичное смещение в ходе симуляции, τ – время моделирования, а d – размерность диффузии (в данном случае 2). Усреднение $\langle \rangle$ проводится по всем атомам.

Расчеты по методу DFT проведены в программе Cr2k [20], написанной на языке *Fortran 2008*. Симуляция КМК проведена при помощи кода, написанного на языке программирования Python. Детали симуляции изложены при обсуждении результатов.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Экспериментальные образцы изготовлены на установке МОС-гидридной эпитаксии горизонтального типа в атмосфере высокочистого водорода при пониженном давлении. Для роста использовались подложки n -GaAs(Si) с кристаллографической ориентацией (100), разориентированные на 10° к направлению $\langle 111 \rangle$, с концентрацией основных носителей заряда на уровне $(1-3) \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Активная область GaAs_xP_{1-x}, расположенная между барьерными слоями AlGaAs, во всех случаях имела толщину 100 Å. Измерение толщин активной области проводилось на просвечивающем электронном микроскопе Jeol JEM-2100F с предельным разрешением не хуже 2 Å. Состав квантовой ямы GaAs_xP_{1-x} рассчитывался из измерения спектра фотолюминесценции при комнатной температуре. Однако следует указать, что GaAs_xP_{1-x} являлся материалом квантовой ямы. Очевидно, что в этом случае яма будет напряженной и упругие напряжения могут влиять на поверхностные процессы [21], что в предлагаемой модели не учитывается.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА

Ранее определено [11], что основными компонентами в реакторе МОС-гидридной эпитаксии при получении GaAs_xP_{1-x} являются тетрамеры и неразложившиеся гидриды мышьяка и фосфора. Концентрация димеров при типичных температурах роста гораздо ниже, а мономера и сложных соединений вида As_xP_y – пренебрежимо мала [22]. Выбор базисных наборов функций для расчетов был проведен на основе оптимизации геометрии

Таблица 1. Энергия поверхности, рассчитанная методом DFT и энергии адсорбции компонентов

| Молекула | Энергия молекулы в свободном состоянии*, а.е. | Энергия системы "поверхность + адмолекула", а.е. | E_{ad}^{**} , а.е. | E_{ad}^{**} , эВ |
|------------------|---|--|----------------------|--------------------|
| As ₂ | -25.11 | -4182.29 | -0.043 | -1.17 |
| As ₄ | -12.49 | -4169.69 | -0.075 | -2.04 |
| AsH ₃ | -7.97 | -4165.11 | -0.011 | -0.30 |
| P ₂ | -26.22 | -4183.38 | -0.033 | -0.90 |
| P ₄ | -13.05 | -4170.24 | -0.064 | -1.73 |
| PH ₃ | -8.27 | -4165.42 | -0.022 | -0.59 |

Примечание. Полная энергия системы -4157.13 а.е.

* В газовой фазе.

** Рассчитаны по разности энергий.

ячейки арсенида галлия из 8 атомов. Выбраны базисы DZVP-MOLOPT-SR-GTH- $q(N)$, а функции псевдопотенциалов - GTH-BLYP- $q(N)$. Для про-

ведения расчетов по методу DFT построена модель поверхности GaAs размером 3×3 элементарных ячейки и толщиной в одну ячейку.

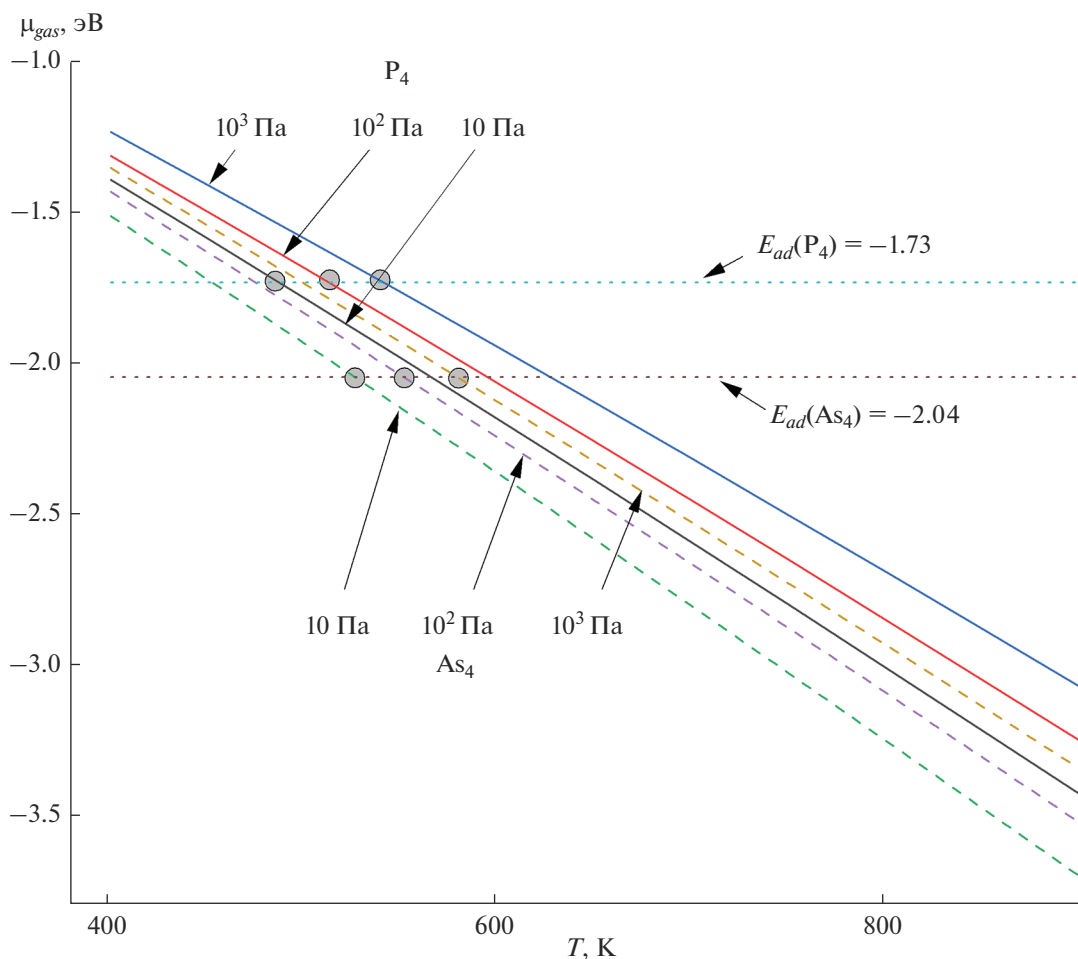


Рис. 2. Температурные зависимости потенциала тетрамеров мышьяка и фосфора в газовой фазе при разных значениях парциального давления.

Таблица 2. Результаты вибрационного анализа

| Молекула | $\nu, \text{см}^{-1}$ | |
|------------------|-----------------------|-------------|
| | настоящая работа | данные [13] |
| As ₂ | 417 | 446 |
| P ₂ | 777 | 792 |
| As ₄ | 343 | — |
| P ₄ | 602 | — |
| AsH ₃ | 2313 | — |
| PH ₃ | 2456 | — |

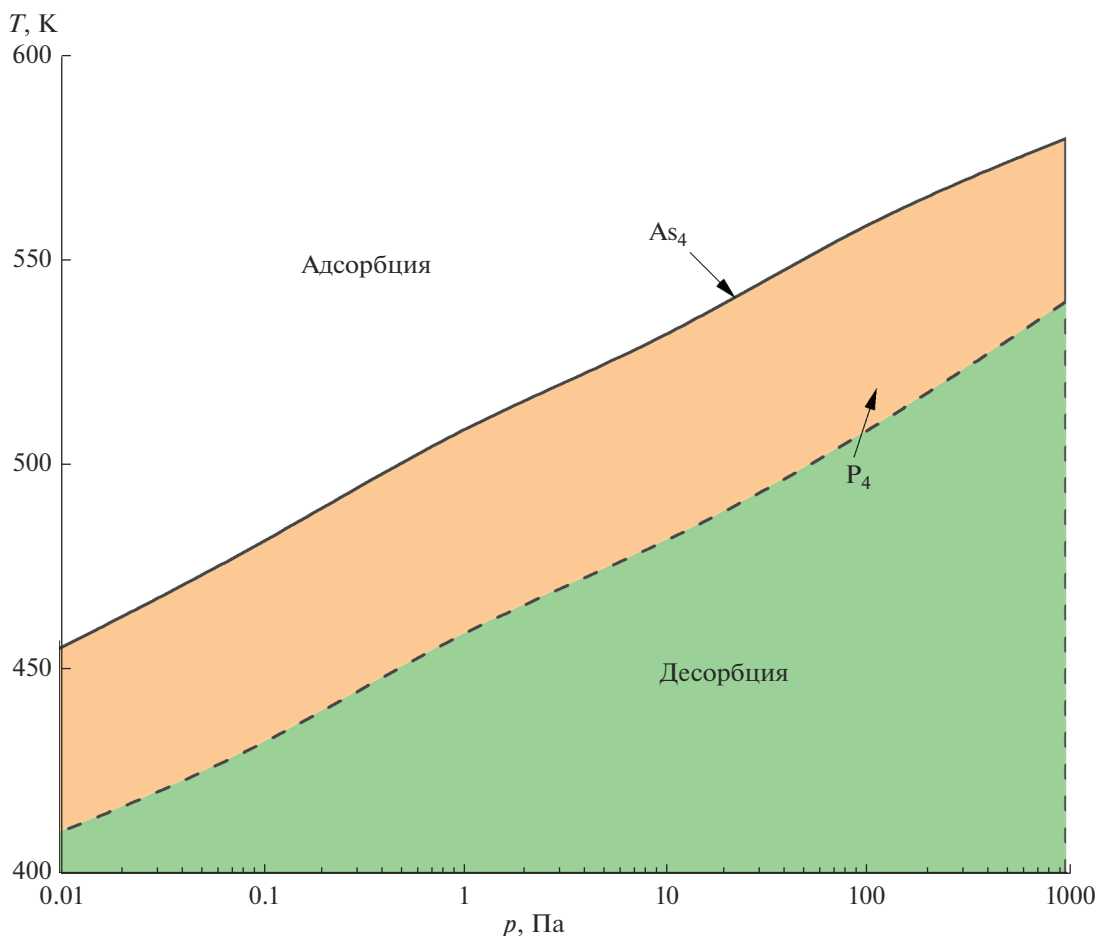
Молекулы реагентов и продуктов пиролиза, для которых было определено основное состояние методом геометрической оптимизации, были размещены на поверхности арсенида галлия ориентации (100). Выбранная ориентация поверхности типична при проведении роста по методу МОС-гидридной эпитаксии. При этом моделировалась нереконструированная поверхность, так как при типичных температурах роста ($t \geq 500^\circ\text{C}$)

и предварительном отжиге в атмосфере газа-носителя локально упорядоченная структура поверхности разрушается [23]. Результаты расчетов энергий систем “молекула в газовой фазе”, “поверхность” и “адсорбированная молекула + поверхность”, а также рассчитанные по ним энергии адсорбции (в атомных единицах – единицах Хартри, и в электронвольтах) представлены в табл. 1.

Для нахождения частотных характеристик молекул (ν_i) проведен вибрационный анализ. Результаты вычислений и литературные данные представлены в табл. 2. Видно, что используемый в настоящей работе подход применим для определения частот колебаний молекул.

По данным табл. 2 с использованием выражения (2) построены зависимости потенциала тетрамеров мышьяка и фосфора в газовой фазе от температуры при разных значениях парциального давления (10, 10², 10³ Па) (рис. 2).

На рис. 2 горизонтальная линия показывает рассчитанный потенциал адсорбции (табл. 2). Из хода зависимостей видно, что тетрамер фосфора при равенстве парциальных давлений проявляет

**Рис. 3.** Диаграмма состояния равновесия адсорбции–десорбции для тетрамеров мышьяка и фосфора.

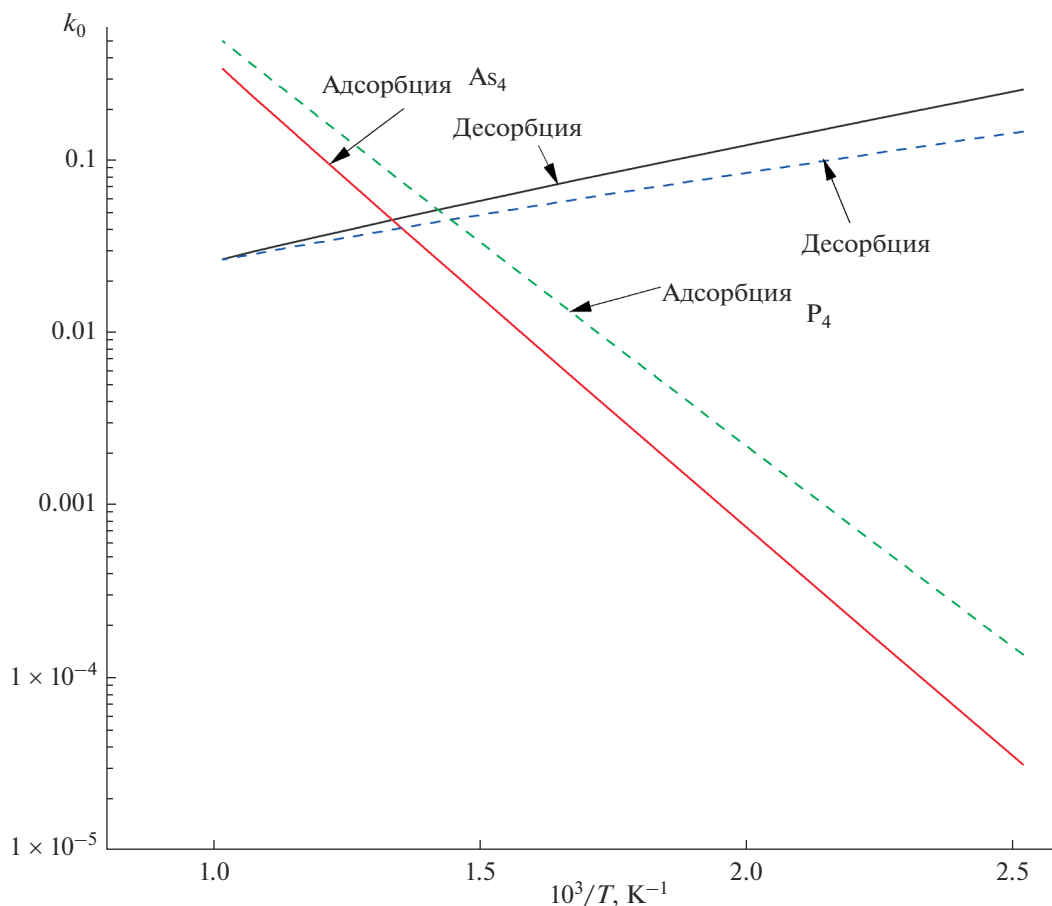


Рис. 4. Температурные зависимости констант скорости адсорбции и десорбции для тетрамеров мышьяка и фосфора при парциальном давлении 10 Па: пунктиром обозначены данные для P_4 , сплошной линией – для As_4 .

большую склонность к десорбции. Это хорошо согласуется с экспериментом [23]. В точках пересечения с линией потенциала в газовой фазе (выделены окружностями) наблюдается равновесие адсорбции–десорбции. Таким образом построена фазовая диаграмма состояния равновесия адсорбции–десорбции для тетрамеров мышьяка и фосфора (рис. 3).

Для симуляции КМК активационные барьеры определены по уравнению (9) следующим образом:

$$\Delta\mu_{ad} = E_{ad} - \mu_{gas},$$

$$\Delta\mu_d = E_d - \Delta\mu_{ad},$$

где значения E_{ad} получены по методу DFT (табл. 2), значение μ_{gas} рассчитано по уравнению (2), а $E_d = -E_{ad}$. Значение активационного барьера диффузии принято равным 0.4 эВ [13]. Пример полученной зависимости констант скорости адсорбции и десорбции для тетрамеров фосфора и мышьяка при парциальном давлении 10 Па без учета коэффициента $k_0 \frac{k_B T}{h}$ представлен на рис. 4. Видно, что

интенсивность адсорбции убывает с ростом температуры значительно быстрее роста интенсивности десорбции, которая является активационным процессом.

Адсорбция симулировалась по КМК для 10000 частиц, изначально расположенных в газовой фазе. При этом в цепи Маркова (выражение (8)) учитывались также темпы десорбции и диффузии. Аналогично, симуляция десорбции проведена для 10000 частиц, изначально находящихся в адсорбированном состоянии. Результаты симуляции для As_4 и P_4 представлены на рис. 5.

Из результатов симуляции видно, что при равной температуре для достижения одинакового количества адсорбированных атомов тетрамеров мышьяка и фосфора необходимо не менее чем десятикратное увеличение парциального давления последнего. При этом адсорбированные молекулы фосфора значительно легче десорбируются, что также требует порядка десятикратного повышения парциального давления для получения требуемых концентраций тетрамеров на поверхности. Это хорошо согласуется с практическим

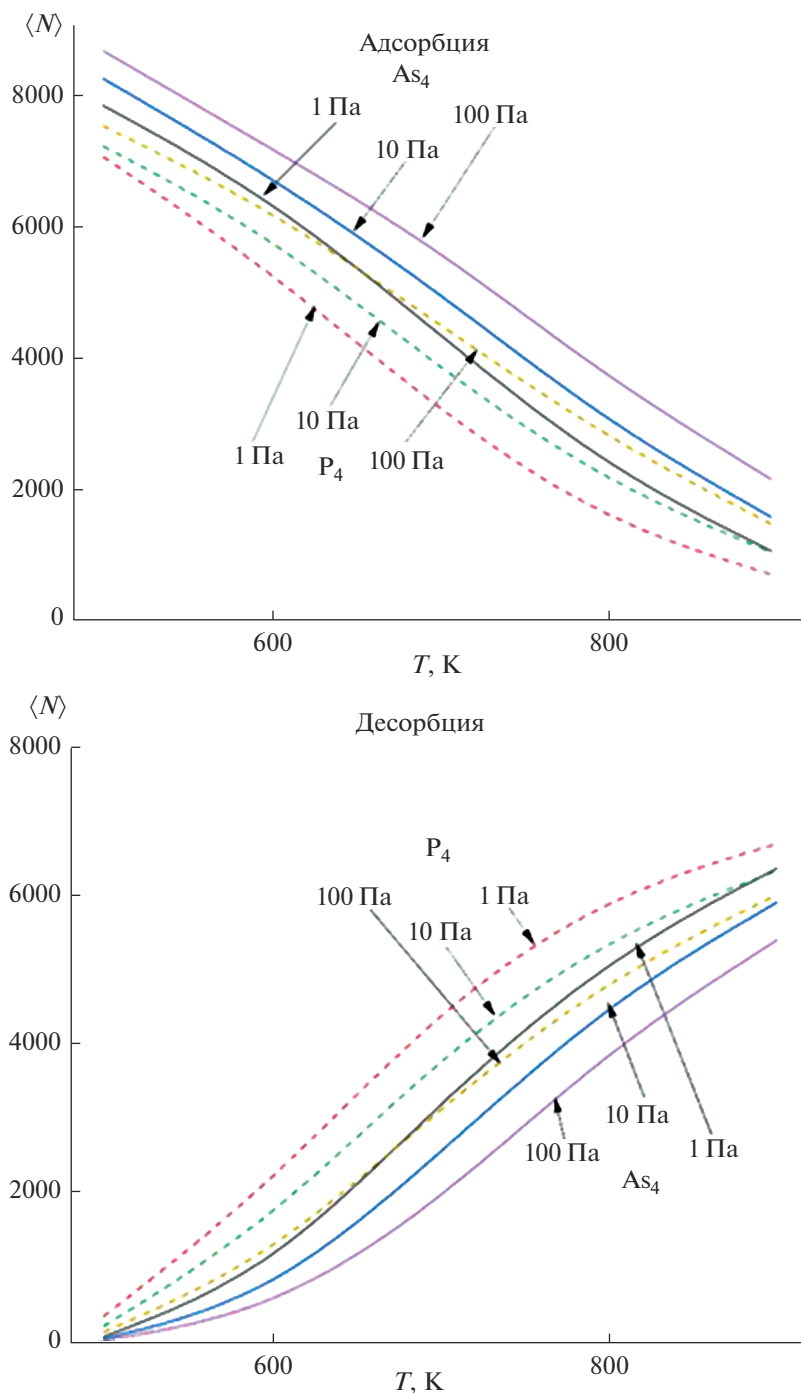


Рис. 5. Результаты симуляции адсорбционно-десорбционного поведения As_4 и P_4 на поверхности GaAs(100).

опытом [24, 25]. Исходя из того, что количество молекул на поверхности есть произведение результатов адсорбции и десорбции (в долях от общего количества), результаты симуляции можно представить в виде кривой Аррениуса, которая позволяет оценить энергию активации процесса осаждения. Это уравнение Аррениуса, полученное из первых принципов, применено вместо эм-

пирической зависимости в расчетной методике работы [11] по определению состава твердого раствора $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$, получаемого в условиях МОС-гидридной эпитаксии. Результаты представлены на рис. 6.

Из данных рис. 6 видно, что применение результатов симуляции адсорбции и десорбции для расчета состава твердых растворов $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$ по-

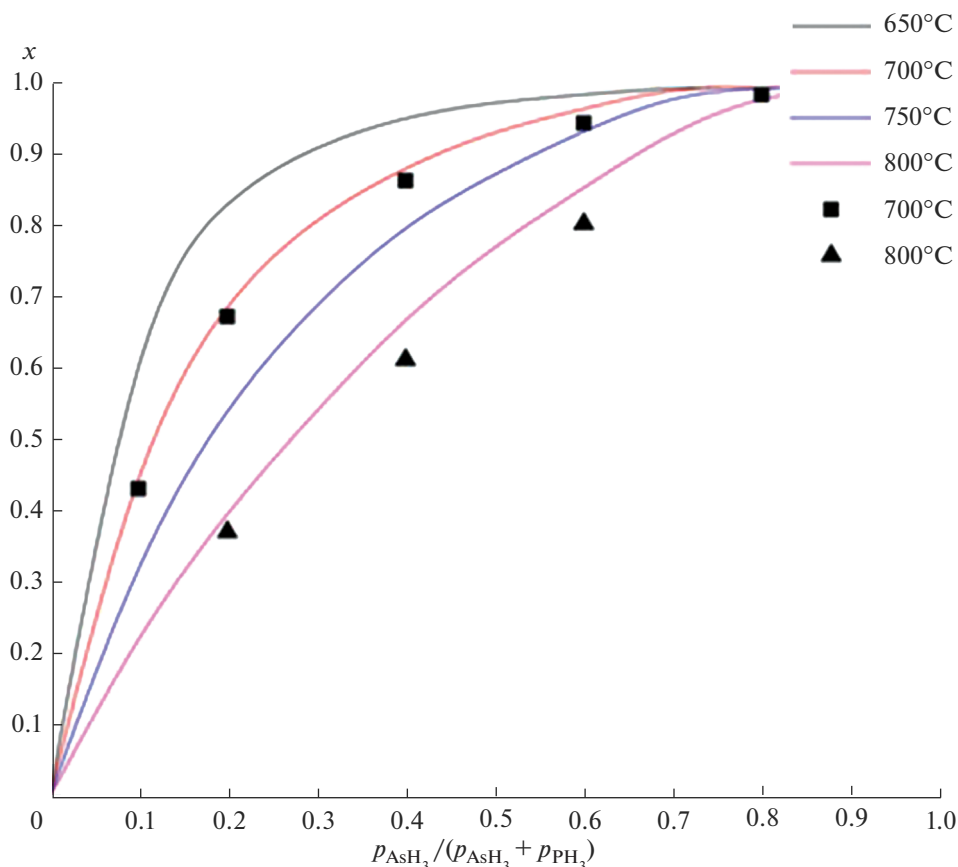


Рис. 6. Зависимости изопериодного с GaAs состава твердого раствора $GaAs_xP_{1-x}$ от исходного отношения фосфина и арсина при температурах роста от 650 до 800°C: линиями обозначены результаты расчета, экспериментальные данные представлены маркерами.

казывает высокую точность. Относительная погрешность не превышает 10%.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом DFT определены потенциалы адсорбции и десорбции продуктов пиролиза с подложкой в процессе роста $GaAs_xP_{1-x}/GaAs$ в условиях МОС-гидридной эпитаксии. Проведена симуляция поведения продуктов пиролиза на поверхности роста с учетом адсорбции, десорбции и диффузии кинетическим методом Монте-Карло. Рассчитан состав твердых растворов $GaAs_xP_{1-x}$ для заданных потоков источников мышьяка и фосфора, значений температуры и давления парогазовой смеси с учетом результатов симуляции. Относительная погрешность при определении состава не превышает 10%. Предложенный алгоритм применим для расчета составов и в других многокомпонентных системах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Crump P., Dong W., Grimshaw M., Wang J., Patterson S., Wise D., DeFranza M., Elim S., Zhang S., Bougher M., Patterson J., Das S., Bell J., Farmer J., DeVito M., Martinsen R. 100-W+ Diode Laser Bars Show > 71% Power Conversion from 790-nm to 1000-nm and Have Clear Route to >85% // Proc. SPIE. 2007. V. 6456. P. 64560M-1-11. <https://doi.org/10.1117/12.704496>
2. Wang Y., Yang Y., Qin L., Wang C., Yao D., Liu Y., Wang L. 808nm High-Power High-Efficiency GaAsP/GaInP Laser Bars // Proc. SPIE—Int. Soc. Opt. Eng. 2008. V. 7135. P. 71350N-1-8. <https://doi.org/10.1117/12.803301>
3. Li P., Jiang K., Zhang X., Tang Q., Xia W., Li S., Ren Z., Xu X. 20.8W TM Polarized GaAsP Laser Diodes of 808nm Wavelength // Proc. SPIE. 2013. V. 8605. P. 860510-1-5. <https://doi.org/10.1117/12.2002983>
4. Безотосный В.В., Васильева В.В., Винокуров Д.А., Капитонов В.А., Крохин О.Н., Лешко А.Ю., Лютецкий А.В., Мурашова А.В., Налет Т.А., Николаев Д.Н., Пухтин Н.А., Попов Ю.М., Слипченко С.О., Стан-

- кевич А.Л., Фетисова Н.В., Шамахов В.В., Тарасов И.С. Мощные лазерные диоды с длиной волны излучения 808 нм на основе различных типов асимметричных гетероструктур со сверхшироким волноводом // Физика и техника полупроводников. 2008. Т. 42. № 3. С. 357–360.
5. Дегтярева Н.С., Кондаков С.А., Микаелян Г.Т., Горлачук П.В., Ладугин М.А., Мармалюк А.А., Рябоштан Ю.Л., Яроцкая И.В. Непрерывные мощные лазерные линейки спектрального диапазона 750–790 нм // Квантовая электроника. 2013. Т. 43. № 6. С. 509–511.
 6. Levy M., Berk Y., Karni Y. Effect of Compressive and Tensile Strain on the Performance of 808 nm QW High Power Laser Diodes // Proc. SPIE. 2006. V. 6104. P. 93–104.
<https://doi.org/10.1117/12.645815>
 7. Stringfellow G.B. Organometallic Vapor-Phase Epitaxy. Theory and Practice. Cambridge: Academic Press, 1999. P. 572.
 8. Fukui T., Kobayashi N. Vapor-Solid Distribution Relation in MOCVD $\text{GaAs}_x\text{P}_{1-x}$ and $\text{InAs}_x\text{P}_{1-x}$ // J. Cryst. Growth. 1985. V. 71. № 1. P. 9–11.
 9. Zhong L., Ma X., Wang S., Liu S. 808 nm GaAsP/GaN Laser Diode Arrays Grown by MOCVD Using AsH_3 and TBP // IEEE 2008 International Nano-Optoelectronics Workshop (i-Now). Tokyo, 2008. V. 12. P. 237–238.
 10. Chen D., Cheng G., Hicks R.F., Noori A.M., Hayashi S.L., Goorsky M.S., Kanjolia R., Odedra R. Metalorganic Vapor-Phase Epitaxy of III/V Phosphides with Tertiarybutylphosphine and Tertiarybutylarsine // J. Cryst. Growth. 2004. V. 270. P. 322–328.
 11. Максимов А.Д., Эйстрих-Геллер В.Ю., Мармалюк А.А., Ладугин М.А., Багаев Т.А., Горлачук П.В., Яроцкая И.В. Модель расчета состава твердых растворов GaAsP в условиях МОС-гидридной эпитаксии // Неорг. материалы. 2017. Т. 53. № 4. С. 362–368.
<https://doi.org/10.7868/S0002337X17040121>
 12. Samuelson L., Omling P., Grimmeiss H.G. Alloying Mechanisms in MOVPE $\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$ // J. Cryst. Growth. 1983. V. 61. P. 425–426.
 13. Kangawa Y., Akiyama T., Ito T., Shiraishi K., Nakayama T. Surface Stability and Growth Kinetics of Compound Semiconductors: An Ab Initio-Based Approach // Materials. 2013. V. 6. P. 3309–3360.
 14. Blinder S.M. Chapter 14 – Density Functional Theory. Introduction to Quantum Mechanics (Second edition). Amsterdam: Elsevier, 2021. P. 235–244.
 15. Hasnip P.J., Refson K., Prober M.I.J., Yates J.R., Clark S.J., Pickard C.J. Density Functional Theory in the Solid State // Philos. Trans. R. Soc. A. 2014. V. 372. P. 20130270.
 16. Andersen M., Panosetti C., Reuter K. A Practical Guide to Surface Kinetic Monte Carlo Simulations. // Front. Chem. 2019. V. 7. P. 202–223.
 17. Laidler K.J. Chemical Kinetics. N.Y.: Harper & Row, 1987. P. 272.
 18. Nørskov J.K., Bligaard T., Logadottir A., Bahn S., Hansen L.B. et al. Universality in Heterogeneous Catalysis // J. Catal. 2002. V. 209. № 2. P. 275–278.
 19. Michaelides A., Liu Z.-P., Zhang C.J., Alavi A., King D.A., Hu P. Identification of General Linear Relationships between Activation Energies and Enthalpy Changes for Dissociation Reactions at Surfaces // J. Am. Chem. Soc. 2003. V. 125. P. 3704–3705.
 20. Kühne I.T.D., Iannuzzi M., Del Ben M., Rybkin V.V., Seewald P. CP2K: An Electronic Structure and Molecular Dynamics Software Package – Quickstep: Efficient and Accurate Electronic Structure Calculations // J. Chem. Phys. 2020. V. 152. № 19. P. 194103-1-48.
 21. Светогоров В.Н., Акчурун Р.Х., Мармалюк А.А., Ладугин М.А., Яроцкая И.В. Расчет упругонапряженной гетероструктуры $\text{Al}_x\text{Ga}_y\text{In}_{1-x-y}\text{As}/\text{InP}$ с квантовыми ямами для эффективных лазерных излучателей // Рос. технол. журн. 2018. Т. 6. № 2. С. 46–54.
 22. Jordan A.S., Robertson A. Copyrolysis of AsH_3 and PH_3 in the Epitaxial Growth of Ternary and Quaternary III–V Alloys // J. Cryst. Growth. 1994. V. 137. P. 224–230.
 23. Kobayashi Y., Kobayashi N. Chemical-Bonding Structure of InP Surface in MOVPE Studied by Surface Photo-Absorption // J. Electron. Mater. 1996. V. 25. P. 691–624.
 24. Smeets E.T.J.M., Cox A.M.W. Influence of Alkyl Substituents of Oms and Operating Pressure on the Quality of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ Heterostructures Grown by OMVPE // J. Cryst. Growth. 1986. V. 77. № 1–3. P. 347–353.
 25. Biefeld R.M. The Preparation of $\text{InAs}_{1-x}\text{Sb}_x$ alloys and strained-layer superlattices by MOCVD // J. Cryst. Growth. 1986. V. 77. № 1–3. P. 392–399.