

Стохастическое моделирование процесса зародышеобразования нанопроволок на подложке из кремния

Научный руководитель – Сабельфельд Карл Карлович

Еремеев Георгий Владимирович

Аспирант

Новосибирский государственный университет, Механико-математический факультет,
Новосибирск, Россия
E-mail: ksacck@gmail.com

GaN-нанопроволоки — полупроводниковый материал, использующийся в приборах наноэлектроники и нанофотоники. GaN-нанопроволоки получают методом пучковой эпитаксии, где при высоком вакууме путём постепенного осаждения атомов галлия и азота на подложке из кремния (либо титана) формируются островки-зародыши, на которых впоследствии вырастают сами нанопроволоки. В настоящее время, несмотря на то, что существуют экспериментальные методы получения нанопроволок, механизм их образования еще не вполне изучен [1].

В этом докладе рассматриваются модели и алгоритмы моделирования процесса зарождения устойчивых кластеров из галлия и азота. На подложке частицы, состоящие из различного числа пар (GaN) диффузионно двигаются, сталкиваются, и могут либо объединяться в кластеры большего размера, либо распадаться на более мелкие кластеры и атомы. Рассматриваются различные режимы процесса:

- когда устойчивый размер кластера задан заранее, и кластеры, достигшие устойчивого размера, не распадаются на части. Кластеры, достигшие устойчивого размера, выводятся из системы
- когда устойчивый размер кластера задан заранее, и кластеры, достигшие устойчивого размера, не распадаются на части. Кластеры, достигшие устойчивого размера, не выводятся из системы
- устойчивый размер кластера не задан заранее, т. е. кластер любого размера имеет шанс расти дальше или распадаться

Моделирование данного процесса осуществляется с помощью метода мажорантной частоты для уравнений Смолуховского [2]. Соответствующая модель выписана в виде системы уравнений агрегации-деагрегации Смолуховского.

Данная работа выполнена при поддержке гранта РФФИ, проект № 14-11-00083

Источники и литература

- 1) Fernandez-Garrido S., Kaganer V. M., Sabelfeld K. K. et al. Self-Regulated Radius of Spontaneously Formed GaN Nanowires // Nano Letters, 2013, Vol. 13, №7, pp 3274-3280
- 2) Sabelfeld K., Levykin A., Privalova T. A Fast Stratified Sampling Simulation of Coagulation Processes // Monte Carlo Methods and Applications, 2007, Vol. 13, №1, pp 71-88