

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИИ АТОМОВ ИНДИЯ И СЕРЕБРА НА ПОВЕРХНОСТИ КРЕМНИЯ МЕТОДОМ КИНЕТИЧЕСКОГО МОНТЕ-КАРЛО

Продан Д.В.

Сколковский институт науки и технологий, РФ, 121205, Москва,
Большой б-р, д 30, стр. 1, +7-495-280-1481, dmitrii.prodan@skoltech.ru

Технологии выращивания кристаллических структур имеют большое значение при создании современных материалов и наноприборов. Моделирование подобных процессов осложняется стохастической природой движения отдельных атомов при относительно больших пространственных и временных масштабах процесса. Для теоретического описания таких систем традиционно используется метод кинетического Монте-Карло [1].

В рамках данного теоретического исследования рассматривается осаждение атомов металла на поверхность кристаллического кремния. Используя результаты работ по изучению осаждения атомов одного металла [2], автором разработана модель одновременного осаждения двух металлов: индия и серебра.

В модели учитываются такие процессы, как осаждение атомов, диффузия по поверхности, кластеризация атомов с соседними атомами металлов и С-дефектами кремния – образование и рост «островов» – и отделение атомов от островов. Осаждение происходит с постоянной скоростью. Остальные процессы происходят случайно, вероятность событий определяется соответствующим энергетическим барьером, который может быть получен в рамках теории функционала плотности. Исследуются как качественная картина, так и количественные характеристики: плотность островов, средний размер и распределение по размерам. Плотность островов определяется по формуле:

$$N_{isl} = \frac{\theta}{\bar{s}}, \quad (1)$$

где \bar{s} – средний размер островов (количество атомов), θ – степень покрытия поверхности.

Используя разработанный формализм, проведено детальное теоретическое исследование морфологии и динамики роста образующихся атомарных структур при разных температурах. Описаны особенности динамики плотности и среднего размера островов по мере осаждения при разных температурах от 150 до 500К. Проведено сравнение с экспериментальными данными [3].

Литература

1. Sickafus K.E., Kotomin E.A., Uberuaga B.P., Radiation Effects in Solids. - Springer Dordrecht, 2007. 592 стр.
2. Albia J.R., Albao M.A., Non-Arrhenius temperature dependence of the island density of one-dimensional Al chains on Si(100): A kinetic Monte Carlo study // *J. Vac. Sci. Technol. A* том 33, номер 2, год 2015. Стр. 021404.
3. Sobotik Anisotropic alloying: Formation of atomic scale trellis on the Si(100)-(2 × 1) surface // *Surf. Sci.* том 677, год 2018. Стр. 8-11.