

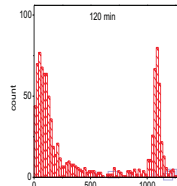
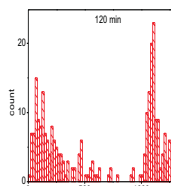
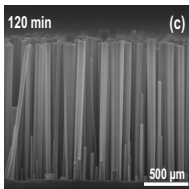
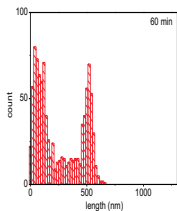
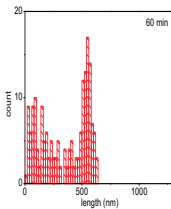
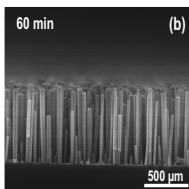
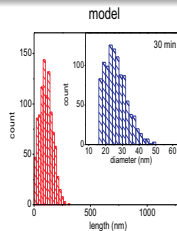
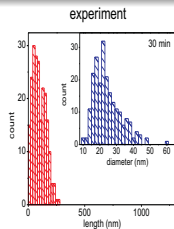
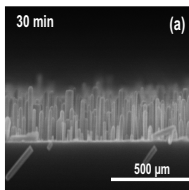
Стохастическое моделирование роста
нановискеров
Stochastic simulation of nanowire growth

К.К. Сабельфельд, Е.Г. Каблукова

Семинар Г.А. Михайлова
06.10.2016, Новосибирск

- Введение
- Феноменологическая модель
- Феномен выравнивания по высоте
- Прямое моделирование
- Результаты моделирования
- Выводы и обсуждение
- Литература

Синтезирование нановискеров (нанопроводников, нанопроволок) методом пучковой молекулярной эпитаксии открыло новые возможности создания инновационных опто-электронных элементов и инициировало фундаментальные исследования в области формирования наноструктур - нуклеации, коаллесценции и роста кристаллов различной размерности и структуры. Экспериментальные исследования трудоемки, дороги, процесс экспериментов по отслеживанию спонтанного роста занимает много времени. Цель данной технологии - научиться выращивать ансамбли нановискеров заданной структуры. Параметры - распределения по высотам, радиусам, при заданных плотностях и покрытии.



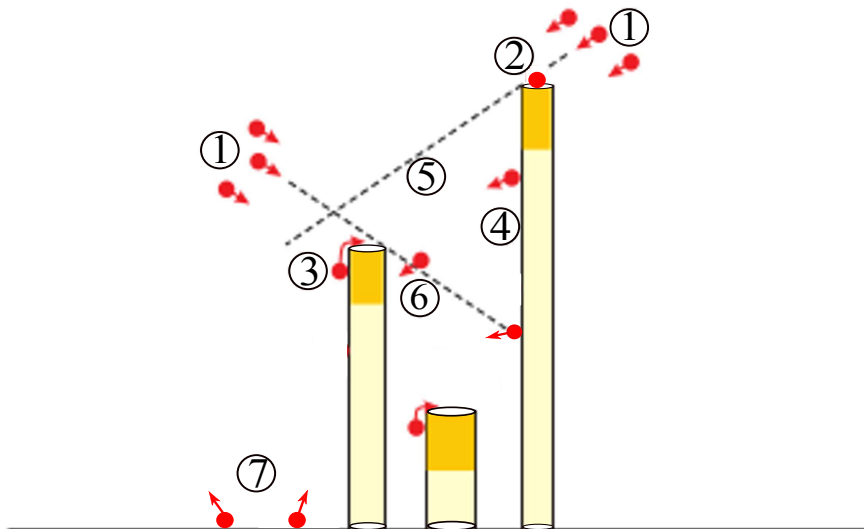


Рис. 1

Феноменологическая модель была предложена нами в ([1] Appl.Phys.Lett, 2013).

Поток атомов галлия Ga падает под углом с вертикалью θ на подложку. Атомы падают как на верхнюю, так и на боковую поверхность нановискера, который представляет собой цилиндр заданной высоты и радиуса. Подложка вращается с определенной скоростью, поэтому считаем, что поток имеет равномерное распределение по азимутальному углу. Рост семейства нановискеров описывается системой стохастических дифференциальных уравнений :

$$\frac{dh}{dt} = F \left[f(h) + \frac{2Z_d(h) \operatorname{tg} \theta}{r} \right] + \beta F \frac{Lp(h)}{r^2} . \quad (1)$$

Здесь $h(t)$ - высота нановискера, позиции нановискеров моделируются случайно и равномерно на подложке, Радиусы и длины выбираются логнормально распределенными, в соответствии с экспериментальными данными из [1].

В уравнении Eq.(1) F - падающий под углом θ поток атомов, $L = \sqrt{(D\tau)}$ - длина диффузии атомов на поверхности нановискера, r - радиус нановискера, l - расстояние между нановисекерами на подложке, $p(h)$ - функция, экспоненциально спадающая с уменьшением высоты h ,

$$f(h) = \Theta(h - \eta + l \operatorname{ctg} \theta),$$

Θ - функция Хевисайда, и

$$Z(h) = \min(L, \max(h - \eta + l \operatorname{ctg} \theta, 0))$$

где η случайная высота соседнего нановискера.

Пусть Γ - общая граница - поверхность некоторого объема, где происходит диффузия частиц, Поверхность состоит из разных частей Γ_i ($i = 1, \dots, N$).

Рассматриваем точечный источник в точке \mathbf{r}' . Концентрация диффундирующих частиц описывается уравнением

$$D\Delta G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \tau^{-1} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') , \quad (2)$$

где D - коэффициент диффузии, τ - время жизни частицы.

Нас интересует поток частиц на поверхность Γ_1

$$I(\mathbf{r}) = -D \int_{\Gamma_1} \frac{\partial G(\xi, r)}{\partial \nu_\xi} d\sigma(\xi) . \quad (3)$$

Теорема взаимности. Пусть на всех поверхностях (включая и Γ_k), заданы граничные условия Робена:

$$-\frac{\partial G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial \nu_i} = S_i G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad \text{for } \mathbf{r} \in \Gamma_i (i = 1, 2, \dots, N). \quad (4)$$

Тогда для каждой поверхности, Γ_k ($k = 1, 2, \dots$), поток частиц

$$I(\mathbf{r}) = -D \int_{\Gamma_k} \frac{\partial G(\xi, \mathbf{r})}{\partial \nu_k} d\sigma \quad (5)$$

как функция от \mathbf{r} , $I(\mathbf{r}) \equiv F(\mathbf{r})$, является решением следующей краевой задачи для однородного уравнения

$$D\Delta F(\mathbf{r}) - \tau^{-1} F(\mathbf{r}) = 0, \quad (6)$$

с измененными граничными условиями лишь на поверхности Γ_k :

$$-\frac{\partial F(\mathbf{r})}{\partial \nu_k} = S_k (F(\mathbf{r}) - 1) \quad \text{for } \mathbf{r} \in \Gamma_k \quad (7)$$

Траектории атомов: в вакууме атомы летят по прямой, попадая на верхнюю поверхность нановискера, поглощаются и дают вклад в его рост. При попадании на боковую поверхность атомы диффундируют с заданным коэффициентом диффузии, могут при этом (1) достичь верхней поверхности, (2) десорбировать, отразиться по Ламберту, и пересечь поверхность одного из окружающих его нановискров, (3) достичь подложки, и также испытать диффузионное отражение.

Процесс диффузии моделируется в соответствии с теоремой взаимности, то есть атом, попадая на поверхность i -го нановискера на высоте $z < h_i$, не отслеживается в своем движении, а переходит на верхнюю поверхность нановискера, или на подложку, либо десорбирует в соответствии с вероятностями

Вероятность перехода на верхнюю поверхность нановискера с вкладом в его рост

$$p_{up} = \frac{\sinh(\lambda z)}{\sinh(\lambda h_i(t))}, \quad \lambda = 1/L,$$

вероятность перехода на нижнюю границу нановискера и поглощения (или отражения) на подложке

$$p_{down} = \frac{\sinh(\lambda(h_i(t) - z))}{\sinh(\lambda h_i(t))},$$

и вероятностью десорбции $p_{des} = 1 - p_{up} - p_{down}$.

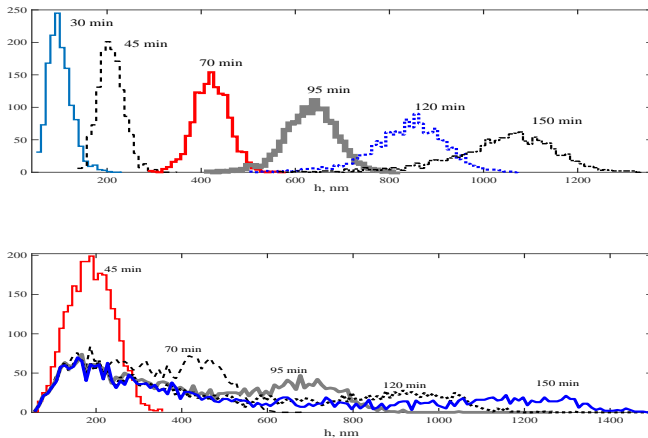


Рис. : Эволюция распределения по высотам, при моделировании без учета перерасеяния атомов; $\cos \theta = 0.7$: $S = 0.1$, $L = 40$ nm (верхний рисунок) $S = 0.5$, $L = 40$ nm (нижний рисунок). Средний радиус начального распределения $r = 25$ nm.

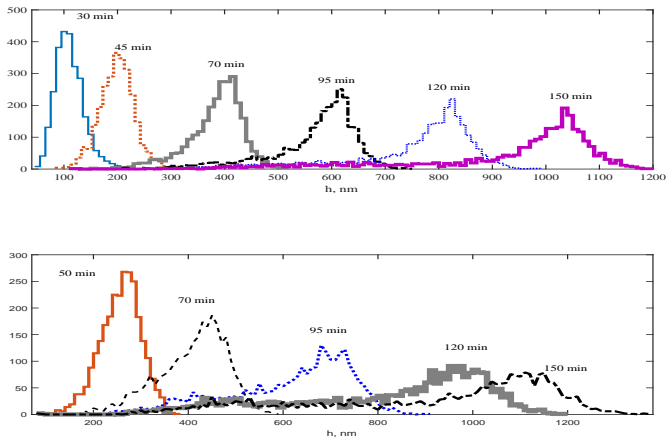


Рис. : Эволюция распределения по высотам, при моделировании с учетом перерасеяния атомов; $S = 0.5$, $\cos \theta = 0.8$, для различных длин диффузии: $L = 30 \text{ nm}$, (верхний рисунок) и $L = 50 \text{ nm}$ (нижний рисунок)

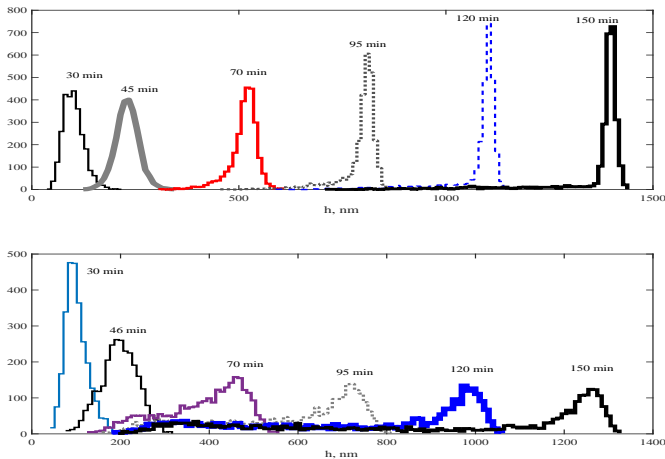


Рис. : Эффект выравнивания по высоте, $r = 25$ nm, для $L = 40$, $\cos \theta = 0.7$, и различных констант покрытия S : $S = 0.3$ (верхний рисунок), $S = 0.5$ (нижний рисунок).

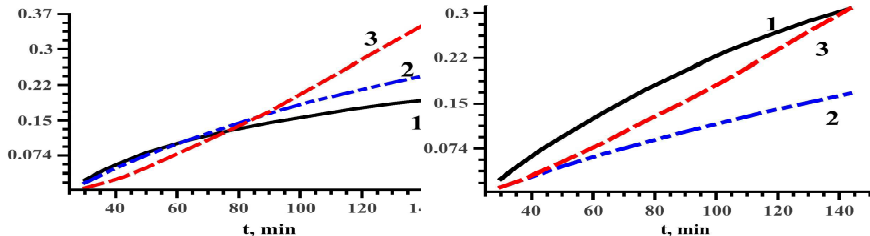


Рис. : Относительные вклады в рост нановискеров: 1 - прямой вклад от источника, 2 - диффузионный вклад потока атомов, попадающих на верхнюю поверхность в процессе диффузии по поверхности, до первой десорбции, 3 - вклад атомов, как прямой, так и диффузионный, подвергшихся перерассеянию после десорбции; $L = 80$ nm (левый рисунок), и $L = 30$ nm, (правый рисунок). Прочие параметры: $S = 0.5$, $\cos \theta = 0.7$.

1. K.K. Sabelfeld, V. M. Kaganer, F. Limbach, P. Dogan, O. Brandt, L. Geelhaar, H. Riechert, Height self-equilibration during the growth of dense nanowire ensembles: Order emerging from disorder, Appl. Phys. Lett. 103 (2013) 133105.

2. S. Fernandez-Garrido, V.M. Kaganer, K.K. Sabelfeld, T. Gotschke, J. Grandal, E. Calleja, L. Geelhaar, O. Brandt, Self-regulated radius of spontaneously formed GaN nanowires in molecular beam epitaxy, Nano Letters 13(7) (2013) 3274–3280.

V. M. Kaganer, S. Fernandez-Garrido, P. Dogan, K. K. Sabelfeld, O. Brandt, Nucleation, growth and bundling of GaN nanowires in molecular beam epitaxy: Disentangling the origin of nanowire coalescence, Nano Letters 16 (2016) 3717-3725.

3. K.K. Sabelfeld and N.A. Simonov. Stochastic methods for boundary value problems. Numerics for high-dimensional PDEs and applications. Walter de Gruyter, Berlin–New York, 2016, 228 pp.

Спасибо !

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ N 14-11-00083