

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ



Национальный исследовательский
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

**Сборник материалов
XVI Российской научной
студенческой конференции**

Томск, 17–20 апреля 2018 г.



ТОМСК
«Издательство НТЛ»
2018

Секция 2

ФИЗИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ

Компьютерное моделирование эшелонирования вицинальных ступеней при кристаллизации из молекулярного пучка

А.О. Алексеев

Томский государственный университет, г. Томск

Проблематика развития неустойчивости вицинальных ступеней при росте кристаллических пленок крайне важна в полупроводниковых технологиях. Понимание закономерностей эшелонирования ступеней помогает выбрать необходимые режимы роста и оптимизировать процесс получения поверхности с заданной морфологией. Аналитическое описание движения ступеней возможно лишь в некоторых частных случаях, таких, как одиночная ступень и система эквидистантных ступеней. В общем случае, исследование динамики ступеней возможно с использованием численных методов и компьютерного моделирования методом Монте-Карло. Дополнительным преимуществом компьютерного моделирования является возможность наглядно представить и оценить процессы, протекающие на кристаллической поверхности.

Статистический метод Монте-Карло [1] прекрасно подходит для моделирования роста кристаллической пленки в силу простоты реализации при рассмотрении диффузии адатомов на кристаллической поверхности. Зная частоты элементарных процессов [2], получаемые из физических соображений, легко вычисляются вероятности актов диффузии, адсорбции и десорбции атомов. Тем самым моделируется случайное блуждание адатома на террасах поверхности, что позволяет моделировать ступенчато-слоевой рост пленки.

В данной работе представлены результаты компьютерного моделирования движения вицинальных ступеней при росте и сублимации кристаллической пленки. Динамика движений ступеней при росте проиллюстрирована на рис. 1 – 3 при разных значениях барьера Эрлиха – Швёбеля ΔE_{ES} , диффузионном барьере $E_{diff} = 0,5$ эВ, температуре подложки 500 К и скорости роста один монослой в секунду.

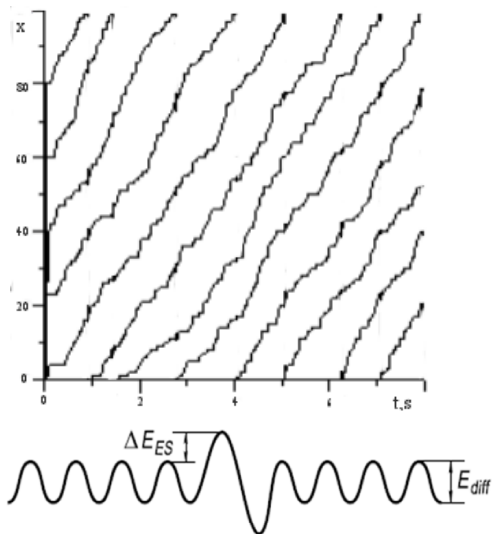


Рис.1. Динамика вицинальных ступеней в случае прямого барьера Эрлиха – Швёбеля 0,2 эВ

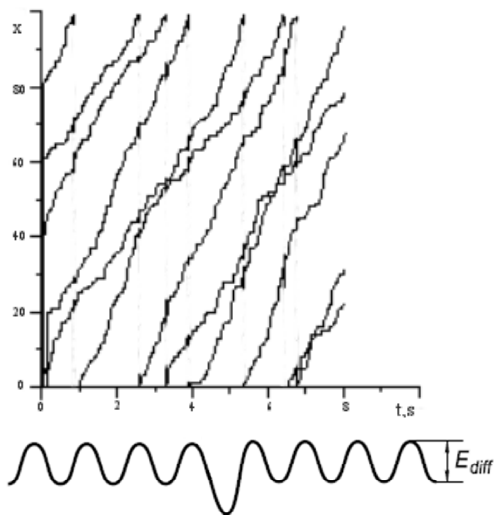


Рис. 2. Динамика вицинальных ступеней в отсутствие барьера Эрлиха – Швёбеля

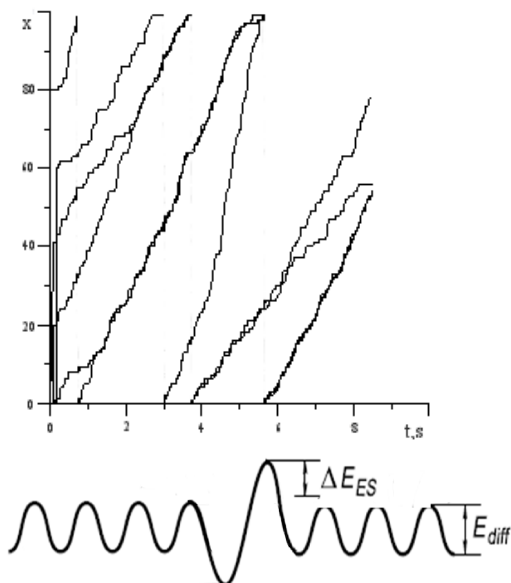


Рис. 3. Динамика вицинальных ступеней в случае обратного барьера Эрлиха – Швёбеля 0,2 эВ

Результаты моделирования демонстрируют переход от устойчивого к неустойчивому росту при нарушении симметрии встраивания адатомов в ступени роста со стороны верхней и нижней террасы, а именно: рост при наличии обратного барьера Эрлиха – Швёбеля, т.е. затрудненном встраивании адатомов в ступень со стороны нижней террасы, приводит к эшелонированию ступеней.

С использованием предложенной модели проанализирована возможность развития неустойчивости вицинальных ступеней на поверхности карбида кремния при росте графена методом термической сублимации SiC.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Соболь И.М.* Метод Монте-Карло. – М.: Наука, 1985, 80 с.
2. *Chatterjee A., Vlaches D.G.* An overview of spatial microscopic and accelerated kinetic Monte-Carlo methods // *J. Computer-Aided Mater.* – 2007. – V. 14. – P. 253–308.

Alexeev A.O. Computer simulations of the step bunching on vicinal surfaces in molecular beam epitaxy

Алексеев Александр Олегович, студент; lucky.king.ru@gmail.com