

УДК 53.03

**АНАЛИЗ ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ РОСТА НИТЕВИДНЫХ  
НАНОКРИСТАЛЛОВ**Д.А. Лушников<sup>1</sup>Научный руководитель: к.ф.-м.н. М.А. Шипуля<sup>2</sup>Научный консультант: профессор, д.ф.-м.н. Ю.Ю. Эрвье<sup>3</sup><sup>1</sup>Томский университет систем управления и радиоэлектроники,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 40, 634050

<sup>2</sup>Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

<sup>3</sup>Национальный исследовательский Томский государственный университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050

E-mail: [den.lushnikoff@yandex.ru](mailto:den.lushnikoff@yandex.ru)**ANALYSIS OF PHENOMENOLOGICAL MODELS OF THE GROWTH OF NANOWIRES**D.A. Lushnikov<sup>1</sup>Scientific Supervisor: Ph.D. M.A. Shipulya<sup>2</sup>Scientific Consultant: Prof., Dr. Yu.Yu. Hervieu<sup>3</sup><sup>1</sup>Tomsk State University of Control Systems and Radioelectronics, Russia, Tomsk, Lenin str., 40, 634050<sup>2</sup>Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050<sup>3</sup>Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050E-mail: [den.lushnikoff@yandex.ru](mailto:den.lushnikoff@yandex.ru)

***Abstract.** In this paper, the analysis of the most well-known models of the growth of nanowires is carried out. The main types of analytical dependence of the average growth rate on the effect of self-shadowing of crystals in the ensemble for the most popular models of the growth process are revealed.*

**Введение.** Нитевидные нанокристаллы (ННК) были впервые получены уже более чем полвека назад. В настоящее время ННК получили очень широкое применение в качестве конструктивных элементов в различных электронных приборах. Основным способом получения ННК является метод осаждения из газовой фазы [1]. Имеется большое число феноменологических моделей, описывающих физические процессы, происходящие на различных стадиях роста ННК при использовании данного метода. В большинстве моделей, например, модель [2], кинетика роста ННК описывается без учета эффекта затенения поверхности данного ННК соседними ННК, что справедливо лишь в случае достаточно разреженного массива ННК. Кроме того, не учитывается затенение отдельным ННК поверхности подложки вокруг данного ННК (эффект самозатенения [3]). В работах [3-5] представлены модели, описывающие изменение средней скорости роста кристаллов в ансамбле с течением времени.

**Экспериментальная часть.** Целевой функцией для указанных моделей являются средние значения высоты  $h(t)$  кристаллов в зависимости от времени. Следует отметить, что в работах [2-5]

используются различные приближения, терминология и обозначения параметров моделей. Таким образом, сравнение, анализ и приведение к общему виду указанных моделей представляет интерес с точки зрения описания физики роста нитевидных нанокристаллов на различных стадиях этого процесса.

**Результаты.** Для проведения анализа удобно представить выражения для целевой функции каждой из указанных моделей роста в виде таблицы 1. Общими параметрами для всех моделей являются:  $J$  – плотность потока адатомов на подложку,  $\alpha$  – угол падения адатомов относительно подложки,  $\beta$  – угол смачивания капли катализатора на вершине ННК,  $\bar{r}$  – средний радиус ННК в ансамбле,  $\lambda_f$  – средняя длина свободного пробега атомов по боковой поверхности ННК. В модели 1 (источник [3]) для учета зависимости от формы капли катализатора используется параметр  $\chi = 2 / (1 - \cos(\beta))$ , а также  $S$  – площадь подложки и  $N$  – количество ННК в ансамбле. Модель 2 (источник [4]) подразумевает использование метода Монте-Карло для вероятностного описания ростового процесса. В данном случае в явном виде выделены три различных вклада в среднюю скорость роста ННК в ансамбле. В частности, коэффициент перекрытия  $\gamma$  определяет вклад от эффекта затенения в массиве ННК, расположенном на подложке:  $p(h, \alpha, t) = 2\pi \sum_k \left( \lambda_f r(z_k) / \bar{r}^2 \right) \left( \theta(\bar{h} - z_k - \bar{l} \cot(\alpha)) - \theta(h(t) - z_k - \lambda_f) \right)$ , где  $\bar{r}$  – средний радиус,  $\bar{h}$  – средняя высота, а  $\bar{l}$  – среднее расстояние между ННК в ансамбле,  $z_k$  – высота столкновения адатома из потока с  $k$ -ым ННК, имеющим радиус в точке столкновения равный  $r(z_k)$ . Вклад в рост от атомов, диффундирующих по боковой поверхности, определяется величиной  $f(h, \alpha, t) = \kappa \theta(h(t) - \bar{h} + \bar{l} \cot(\alpha))$ , где  $\kappa$  определяет коэффициент прилипания адатома к боковой поверхности. В данных вкладах используется обозначение  $\theta(x)$  для тета-функции Хевисайда. Второе слагаемое в скобках модели 2 определяет вклад в рост от атомов, диффундирующих по подложке и поднявшихся к моменту времени  $t$  на высоту  $z(h, \alpha, t) = \min(\lambda_f, \max(h(t) - \bar{h} + \bar{l} \cot(\alpha)))$ . В работе [5] с целью выделения влияния указанного выше эффекта затенения ННК в ансамбле, рассматриваются два предельных случая. Модель 3 соответствует двум различным предельным случаям расположения ННК в массиве. В первом случае предполагается достаточно редкое расположение (большое значение  $\bar{l}$  для второй модели и малое значение отношения  $N / S$  для первой), а во втором – наоборот, более плотное. При этом первый вклад в среднюю скорость роста в обоих случаях остается неизменным и определяет зависимость концентрации адатомов от направления потока. Для аналитического описания зависимости средней скорости роста от времени в каждом из данных случаев используется величина  $\Omega_s$ , которая характеризует объем ННК. В первом случае  $f(\alpha) = \sqrt{2J^{-1} D_f n_m \sin(\alpha) / \bar{r}^2}$ , где в явном виде выделены максимальная концентрация  $n_m$  и коэффициент диффузии  $D_f = (\lambda_f^2 / 2\tau)$  адатомов по боковой поверхности. При этом параметр  $\tau$  определяет среднее время жизни адатома на боковой поверхности, по истечении которого он либо переходит в вершину ННК и дает вклад в рост, либо покидает боковую поверхность и продолжает свое

движение по подложке или боковой поверхности другого ННК. Во втором случае зависимость от диффузии по боковой поверхности пропадает, и величина второго вклада дается выражением  $f(\alpha) = 2 \cos(\alpha) / Nr^2$ . Таким образом, сравнение и анализ рассмотренных моделей возможно провести, используя указанные предельные случаи.

Таблица 1

Сравнение основных моделей роста ННК

№	Функциональная зависимость
1	$\frac{d}{dt} h(t) = J \left[ \chi + \frac{2\lambda_f}{r} \tan\left(\frac{\alpha}{\pi}\right) \tanh\left(\frac{h(t)}{\lambda_f}\right) + \left( \frac{S}{\pi r^2 N} - \chi - \frac{2h(t)}{r} \tan\left(\frac{\alpha}{\pi}\right) \right) \cosh^{-1}\left(\frac{h(t)}{\lambda_f}\right) \right]$
2	$\frac{d}{dt} h(t) = J \left[ f(h, \alpha, t) + 2 \left( z(h, \alpha, t) / \bar{r} \right) \cot(\alpha) + \gamma p(h, \alpha, t) \right]$
3	$\frac{d}{dt} h(t) = \frac{1}{2} J \Omega_s (1 + \cos(\alpha) + f(\alpha))$

**Закключение.** В результате проведенного анализа были выявлены 3 наиболее популярных модели, описывающих физические эффекты во время ростового процесса ансамбля ННК. Модель 1 описывает процесс без учета затенения ННК от соседних ННК, однако учитывает эффект самозатенения и зависимость от формы капли катализатора на вершине ННК. Модель 2 в явном виде выделяет вклад в скорость роста от коэффициента затенения ННК в ансамбле. Модель 3 рассматривает эффект затенения в виде одного из своих предельных случаев.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wagner R.S., Ellis, W.C. Vapor-liquid-solid mechanism of single crystal growth // Applied Physics Letters. – 1964. – V. 4. – P. 89.
2. Dubrovskii, V.G., Hervieu, Yu.Yu. Diffusion-induced growth of nanowires: Generalized boundary conditions and self-consistent kinetic equation // J. Cryst. Growth. – 2014. – V. 401. – P.431.
3. Dubrovskii V.G. Reconsideration of nanowire growth theory at low temperatures // Nanomaterials. – 2012. – V. 11. – P. 2378.
4. Sabelfeld K.K., Kablukova E.G. A stochastic model of the nanowires growth by molecular beam epitaxy // Sibirskii Zhurnal Vychislitel'noi Matematiki. – 2017. – V. 20, № 2. – P. 181 – 199.
5. Sibirev N.V., Tchernycheva M., Timofeeva M., Harmand J.C., Cirilin G.E., Dubrovskii V.G Influence of shadow effect on the growth and shape of InAs nanowires // Applied Physics Letters. – 2012. – V. 111. – P. 104317.