

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

ФІЗИКА, ЕЛЕКТРОНІКА,
ЕЛЕКТРОТЕХНІКА

ФЕЕ :: 2018

**МАТЕРІАЛИ
та програма**

НАУКОВО-ТЕХНІЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ

(Суми, 05–09 лютого 2018 року)



Суми
Сумський державний університет
2018

Моделювання росту наносистем металів кінетичним методом Монте-Карло

Крячок С.Л., студент

Сумський державний університет, м. Суми

Комп'ютерне моделювання є важливим інструментом для дослідження механізмів росту тонких плівок на атомарному рівні.

В цій роботі проводиться комп'ютерна імітація росту плівок металів для пояснення впливу технологічних параметрів експерименту (температура підкладки, швидкість осадження та споріднені параметри) на формування отриманих структур поблизу рівноваги. Для цього використовується програмний код NASCAM (NAAnoSCAleModeling) [1], який базується на кінетичному методі Монте-Карло (КМК). В основу методу покладена пропорційність ймовірності процесів їх швидкості. NASCAM дозволяє отримувати комп'ютерну модель структур, отриманих в реальних експериментах, а також знаходити їх деякі кількісні характеристики, такі як густину, пористість, шорсткість поверхні та ін.

Для моделювання росту плівок NASCAM використовує такі основні елементарні процеси ("події"):

- вільна дифузія атомів на підкладці;
- відрив атому від острівця;
- стрибок атому вгору і вниз між моноатомними шарами;
- випаровування з підкладки.

Головною перевагою КМК є те, що цей метод не враховує коливальний рух атомів і тому може бути використаний для моделювання еволюції системи протягом більш тривалого періоду часу порівняно з методом молекулярної динаміки, для якої поки що можливі тільки короткі проміжки часу, близько 10^{-9} с. Залежно від кількості атомів в системі поряд з деякими іншими параметрами, такими як температура та властивості атомів, емпіричний час при використанні КМК може складати навіть сотні та тисячі секунд.

Керівник: Космінська Ю.О., доцент

1. S. Lucas, P. Moskovkin, *Thin Solid Films* **518**, 5355 (2010).