

0.1. Манцурова С.В., Шварц Н.Л. Движение капель золота по поверхностям Si(011) и Si(311): Монте-Карло моделирование

Капли золота широко используются в качестве катализаторов роста кремниевых нанопроволок по механизму пар-жидкость-кристалл [1]. Экспериментально было обнаружено движение золотых капель при осаждении золота на поверхность кремния с ориентациями (011) и (311) [2]. Капли на таких поверхностях движутся в двух противоположных направлениях [-110] и [1-10]. Целью данной работы является исследование формирования капель Au на поверхностях Si (011) и (311) и анализ критерия выбора определенного направления движения капель на атомарном уровне с помощью Монте-Карло моделирования. Рассмотрено осаждение золота на поверхности кремния с ориентациями (011) и (311) при температуре 800 К и скорости осаждения золота $6.5 \cdot 10^{-3}$ МС/с. Показано, что причиной направленного движения является стремление к достижению равновесной концентрации кремния при осаждении золота и асимметрия ямки травления под каплей. Ямки травления ограничиваются наиболее стабильными фасетками {111}. На поверхности Si(011) ямка травления зеркально симметрична относительно двух плоскостей и имеет удлиненную форму. На поверхности Si(311) пирамидальная ямка травления симметрична относительно одной плоскости. Симметрия ямок травления приводит к равной вероятности движения капель в двух противоположных направлениях. Причинами выбора одного из направлений могут быть либо дефекты, нарушающие зеркальную симметрию, либо изменение смачиваемости одного из краев ямки за счет уменьшения поверхностного натяжения капель в процессе растворения подложки. Разная форма ямок травления под каплями на поверхностях Si (311) и Si(011) приводит к разной скорости движения капель. Показано, что на поверхности с ориентацией (311) скорость движения капель ниже, чем на (011).

Список литературы

- [1] Wagner R. et al. Vapor-liquid-solid mechanism of single crystal growth // Appl. Phys. Lett. 1964. Vol. 4. N. 5. P. 89-90.
- [2] Curiotto S. et al. Surface-dependent scenarios for dissolution-driven motion of growing droplets // Sci. Rep. 2017. Vol. 7. N. 1. P. 902.