

**0.1. Кудрич С.В., Спирина А.А., Шварц Н.Л.
Моделирование методом Монте-Карло
формирования и движения капель золота
по поверхности кремния**

На основе кремния возможно получение нанопроволок – перспективных элементов для создания приборов опто- и нанoeлектроники [1]. Одним из механизмов роста нанопроволок является механизм пар-жидкость-кристалл с использованием золотых капель-катализаторов. Поэтому важным является исследование процессов формирования и движения капель золота по поверхности кремния. Экспериментально показано, что в процессе осаждения золота при высоких температурах капли золота направленно движутся по поверхности Si(111) [2]. Целью данной работы является исследование механизма формирования и движения капель золота по поверхности кремния на атомарном уровне с помощью моделирования методом Монте-Карло. Рассматривалось осаждение золота на поверхность кремния с ориентацией (111) и (100) в диапазоне температур 700–900 К. Показано, что капли золота зарождаются преимущественно на ступенях вицинальной поверхности. Границы раздела капля-подложка различны для подложек с ориентациями Si(111) и Si(100). На поверхности Si(111) граница раздела атомарно гладкая, а на Si(100) граница раздела пирамидальной формы, ограниченная фасетками 111. Латеральное движение капель золота наблюдается только на вицинальной поверхности Si(111). Движение капель направлено перпендикулярно или под углом 60° относительно ступеней. Научный руководитель — Спирина А. А.

Список литературы

- [1] Shalabny A., Buonocore F., Celino M. et al. Semiconductivity Transition in Silicon Nanowires by Hole Transport Layer // Nano Letters 20 (11). 8369-837. 2020.
- [2] Curiotto S, Leroy F., Cheynis F. et al. Surface-dependent scenarios for dissolution-driven motion of growing droplets // Sci Rep 7: 902. 2017.