

Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
Московский государственный университет имени
М. В. Ломоносова

Физический факультет

Кафедра общей физики

**Компьютерное моделирование
формирования нанокластеров олова
в матрице германия**

выполнил
студент 2 курса
магистратуры
Сергей Андреевич Кудряшов

Научный руководитель:
к. ф.-м. н.
Алексей Геральдович
Сыромятников

Оглавление

Введение	3
1 Обзор литературы	4
1.1 Закон дисперсии. Изоэнергетические поверхности	4
1.2 Получение кристаллов GeSn	5
2 Методика компьютерного моделирования эволюции системы SnGe	10
2.1 Молекулярная динамика	10
2.2 Алгоритм Метрополиса	10
2.3 Кинетический метод Монте-Карло	11
3 Квантовые точки Sn в матрице Ge	14
3.1 Энергия системы атомов	14
3.2 Топология кристаллической решётки	15
3.3 Представление решётки в памяти	15
3.4 Поиск соседей в “четырёхмерном” пространстве	16
3.5 Параметры численного моделирования	18
4 Результаты моделирования	19
Заключение	29
Литература	30

Введение

В 2000 Жорес Алферов получил Нобелевскую премию за открытие гетероструктур — слоистых структур из различных полупроводников, отличающихся шириной запрещенной зоны. Интерес к исследованиям такого рода структур является одной из приоритетных задач физики полупроводников в настоящее время. Это не удивительно, так как гетеропереход, формирующийся на границе двух материалов и обладающих потенциальным профилем валентной зоны и зоны проводимости в зависимости от этих материалов, может контролироваться для решения реализуемой задачи, что позволяет использовать квантоворазмерные эффекты. Однако, экспериментальные исследования в области физики и химии на атомном уровне сталкиваются с рядом трудностей, связанных с использованием сложного оборудования, ограниченными техническими возможностями и высокими затратами. Компьютерное моделирование как метод позволяет обойти эти проблемы, предлагая эффективный инструмент для проведения научных исследований. Особую актуальность компьютерное моделирование приобретает при изучении процессов самоорганизации и роста наноструктур в полупроводниках. Изучение эволюции таких систем с добавлением примесей позволяет глубже понять механизмы формирования наноструктур и разработать новые оптоэлектронные материалы.

Данная работа посвящена исследованию эволюции системы, состоящей из кристаллической решетки германия с примесями олова. Идея моделирования мотивирована экспериментальной работой [1], в которой под действием отжига наблюдалась самоорганизация и образование наноструктур в системе из германия и олова. Особенностью получающихся кластеров стала структура расположения атомов в виде так называемой цинковой обманки, где атомы различных типов чередуются между собой. В данной работе, используя Кинетический метод Монте Карло, были исследованы взаимодействия атомов олова в германии. Была смоделирована эволюция системы и изучены свойства формирующихся наноструктур. В частности, была определена закономерность формирования кластеров олова.

Глава 1

Обзор литературы

Открытие гетероструктур привело к появлению таких важных приборов, как полупроводниковые лазеры, высокоэффективные светодиоды, солнечные панели и биполярные транзисторы на гетеропереходах. Одним из основных фокусов исследований в настоящее время является поиск так называемых гетеропереходов с прямой запрещённой зоной. В них максимум энергии валентной зоны и минимум энергии зоны проводимости находятся в одной точке обратного пространства, что приводит к тому, что при переходе электрона из валентной зоны в зону проводимости не происходит изменение импульса электрона. Такой переход более вероятен, чем переход, при котором происходит изменение импульса электрона (непрямая запрещённая зона). Подробнее в секции 1.1. Однако, существуют физические ограничения не позволяющие вырастить кристалл GeSn. Подробнее об этом в секции 1.2.

1.1. Закон дисперсии. Изоэнергетические поверхности

Валентные электроны, находящиеся на внешних оболочках атомов, играют ключевую роль в формировании физических свойств материалов. Их волновые функции “размазываются” в пространстве, что позволяет им взаимодействовать с электронами соседних атомов. При сближении атомов в твердом теле, их волновые функции перекрываются, что приводит к взаимодействию электронов и расщеплению энергетических уровней отдельных атомов на подуровни. В макроскопических телах количество подуровней становится огромным, а расстояние между ними - очень маленьким. В итоге, вместо дискретных уровней образуются непрерывные энергетические зоны.

Типы энергетических зон:

1. Валентная зона: наивысшая зона, полностью заполненная электронами при нулевой температуре.
2. Зона проводимости: разрешенная зона, где могут находиться электроны при температуре отличной от абсолютного нуля.
3. Запрещенная зона: зона между валентной зоной и зоной проводимости. Ее величина определяет тип материала.

Металлы имеют очень плотные кристаллические решетки, где расстояние между атомами меньше, чем “радиус” облака внешних электронов. Валентные электроны “коллективизируются” и могут свободно перемещаться по всему кристаллу, обеспечивая высокую проводимость. У полупроводников в основном состоянии внешние электроны локализованы. Для того чтобы стать свободными, они должны преодолеть запрещенную зону, которая имеет небольшую величину. При комнатной температуре часть электронов может перейти в зону проводимости, но их количество ограничено, что приводит к сравнительно низкой проводимости. Диэлектрики имеют большую запрещенную зону, поэтому электронам очень трудно перейти в зону проводимости. Это обуславливает их очень

высокое сопротивление. Тепловые флуктуации могут “помочь” электронам преодолеть запрещенную зону, повышая проводимость полупроводников и даже диэлектриков при высоких температурах. При приложении внешнего электрического поля электроны в зоне проводимости могут переходить на свободные подуровни, приобретая дополнительную энергию и участвуя в процессе электропроводности.

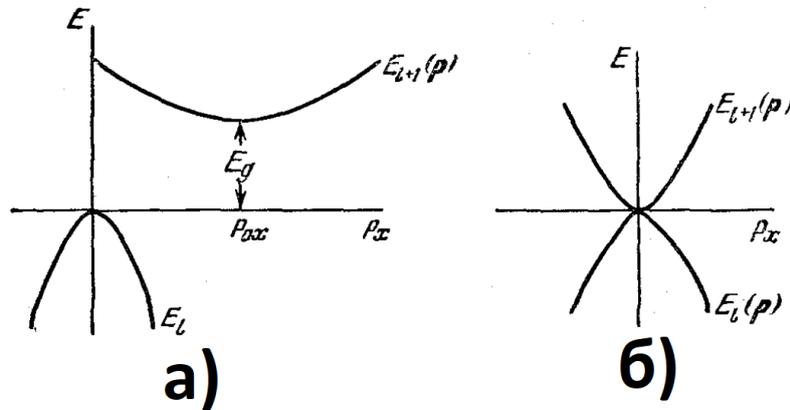


Рис. 1.1. Изоэнергитические поверхности (схематически): а) для двух непересекающихся зон б) для смыкающихся зон.

Один из способов визуализации закона дисперсии — изоэнергитические поверхности [2]. Зафиксируем значение энергии в разрешенной зоне, то есть $E(p) = const$. Это уравнение определяет поверхность в трехмерном пространстве квазиимпульсов, которую называют изоэнергитической поверхностью 1.1. Изменяя значение константы $E(p) = const$, мы получаем набор изоэнергитических поверхностей, которые вместе полностью описывают закон дисперсии. Важно отметить, что закон дисперсии в кристалле отличается от свободной частицы. Он является следствием периодичности кристаллической решетки и представляет собой зависимость частоты волны электрона от квазиимпульса. Выделяют прямозонный полупроводник и полупроводник с непрямой запрещенной зоной. При прямой запрещенной зоне, максимум энергии валентной зоны и минимум энергии зоны проводимости находятся в одной точке обратного пространства, что приводит к тому, что при переходе электрона из валентной зоны в зону проводимости не происходит изменение импульса электрона. Такой процесс является двухчастичным и поэтому более вероятен, чем трехчастичный, при котором происходит изменение импульса электрона (непрямая запрещенная зона).

Формирование энергетических зон является ключевым моментом в понимании электронных свойств твердых тел. Взаимодействие атомов и расщепление энергетических уровней определяют поведение валентных электронов и, в итоге, проводящие свойства материала. Закон дисперсии показывает, как энергия электрона в кристалле зависит от его квазиимпульса. Он описывает эту зависимость в разрешенной зоне.

1.2. Получение кристаллов GeSn

Наноструктуры, основанные на четвертой группе полупроводников, обладают огромным потенциалом для применения в электронных и фотонных устройствах, основанных на кремнии [3–7]. В частности, квантовые точки, обогащенные германием, в матрице кремния привлекают значительный интерес в качестве свет испускающих сред в светоизлучателях на основе кремния. Такие квантовые точки испускают люминесценцию

в ближнем инфракрасном диапазоне при комнатной температуре. Люминесцентные свойства таких квантовых точек могут быть улучшены, если материал из которого они изготовлены, будет представлять из себя прямозонный полупроводник. Теоретически, это может быть достигнуто, если атомы кремния заместить атомами олова. GeSn нанокристалл в кубической фазе, обогащённый оловом, может проявлять свойства полупроводника или металла в зависимости от линейных размеров системы. В маленьких нанокристаллах эффект захвата на примесные уровни приводит к люминесценции в среднем инфракрасном диапазоне длин волн. Однако, GeSn слой с высокой концентрацией олова не наблюдался из-за некоторых фундаментальных ограничений. Первое ограничение — это слабая растворимость олова в Ge или Si матрице. Второе это значительное различие в параметрах решётки между оловом и германием или кремнием, в результате чего будут появляться механические напряжения, которые в кристаллах без центра инверсии вызывают появление дополнительных пьезоэлектрических полей. Оба факта усложняют прямой рост слоя олова на поверхности германия или кремния. Несмотря на эти ограничения, кубическая фаза GeSn слоя с концентрацией олова в 30 процентов атомов может быть получена, используя не равновесный эпитаксиальный рост.

Недавние исследования показывают, что кубическая фаза GeSn нано кристалла может быть сформирована в матрице германия [1, 8]. Практическая важность такого композита связана с переходом от не прямой к прямой запрещённой зоне полупроводника. Однако, неравновесный слой будет метастабильным. Это означает, что форма и кристаллографическая фаза такого слоя может меняться. В работе исследуются подобные состояния.

В работе [1] были выбраны три температуры выше температуры солидуса, т.е. температуры, ниже которой данный материал полностью твёрдый. Три температуры выше солидуса были выбраны. Структура, которая состоит из GeSn слоя и матрицы Ge обжигалась при 260, 300 и 400 градусах. Отжиг при 260 градусах не влиял на слой GeSn. Изображения ТЭМ, полученные при 300 градусах, показывают серые и черные полосы. Эти полосы указывают на наличие локальных полей напряжения вокруг GeSn слоя. Толщина слоя снижается. Эти два факта могут быть результатом локального увеличения концентрации олова. Также, на позиции изначального слоя GeSn наблюдаются сферические частицы, обогащённые оловом. Увеличение температуры отжига ведет к увеличению плотности этих частиц. Более того, возникает второй тип частиц. Эти частицы больше. Дифракционные пятна от матрицы германия и GeSn нанокристалла совпадают. Это указывает на то, что частицы имеют алмазоподобную структуру.

На рисунке 1.4 а) показан нанокристаллический осадок размером около 10 нм в матрице Ge. На рисунке 1.4 б) приведена дифракционная картина, где внутренние отражения (тёмные стрелки) происходят из осадка GeSn, а внешние отражения (белые стрелки) - из матрицы Ge. Из-за различия в параметрах решётки видно, что как осадок, так и матрица имеют алмазоподобную структуру. Расчёты на основе параметра элементарной ячейки Ge показали, что параметр элементарной ячейки GeSn составляет $0,630 \pm 0,003$ нм, что указывает на содержание $0,75 \pm 0,05$ атомных % Sn в сплаве.

Подытоживая экспериментальные результаты, были получены следующие выводы 1.3:

- Высокая температура трансформирует изначальный слой GeSn в массив сферических частиц
- Эти частицы имеют бимодальное распределение.
- Диаметр маленьких частиц имеет сходство с толщиной изначального слоя GeSn.
- Диаметр больших частиц в несколько раз больше чем толщина изначального слоя.

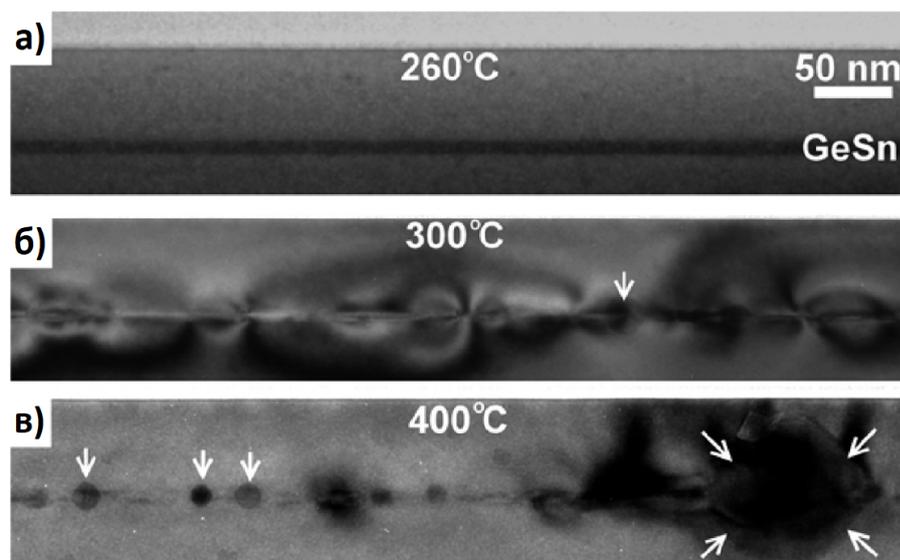


Рис. 1.2. ПЭМ-изображения поперечного сечения образцов, отожжённых в течение 1 ч при (а) 260 °С, (б) 300 °С и (в) 400 °С. Белыми стрелками указано положение осадка GeSn. На панели с четыре стрелки, направленные навстречу друг другу, указывают положение крупного осадка GeSn [1].

- Концентрация олова внутри всех частиц выше концентрации в изначальном слое.

Таким образом, в статье обсуждается синтез и свойства нанокристаллов GeSn кубической фазы, богатых Sn, встроенных в матрицу Ge. Авторы использовали комбинацию рентгеновской дифракции, просвечивающей электронной микроскопии и рамановской спектроскопии для изучения структуры и оптических свойств нанокристаллов. Они обнаружили, что нанокристаллы GeSn с высоким содержанием олова демонстрируют превосходные оптические свойства по сравнению с их аналогами в гексагональной фазе. Исследование даёт представление о потенциальных применениях нанокристаллов GeSn с кубической фазой, богатых Sn, в оптоэлектронных устройствах.

В другой работе также исследуются методы получения и свойства сплава GeSn [8]. Стабилизированные дейтерием гидриды олова позволяют синтезировать широкий спектр высоко метастабильных составов и структур при низких температурах. Полученные сплавы с идеальной эпитаксиальной структурой алмазоподобной решетки выращиваются непосредственно на подложке Si(100) и демонстрируют высокую термическую стабильность, превосходную кристалличность, а также кристаллические и оптические свойства, такие как регулируемые ширины запрещенных зон и постоянные решетки.

Эти свойства были детально изучены с использованием различных методов анализ, в числе которых: Масс-спектрометрии вторичных ионов низких энергий, просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения, дифракции рентгеновских лучей, инфракрасной спектроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния. Для объяснения структурных и спектроскопических особенностей также были использованы *ab initio* расчеты по методу теории функционала плотности.

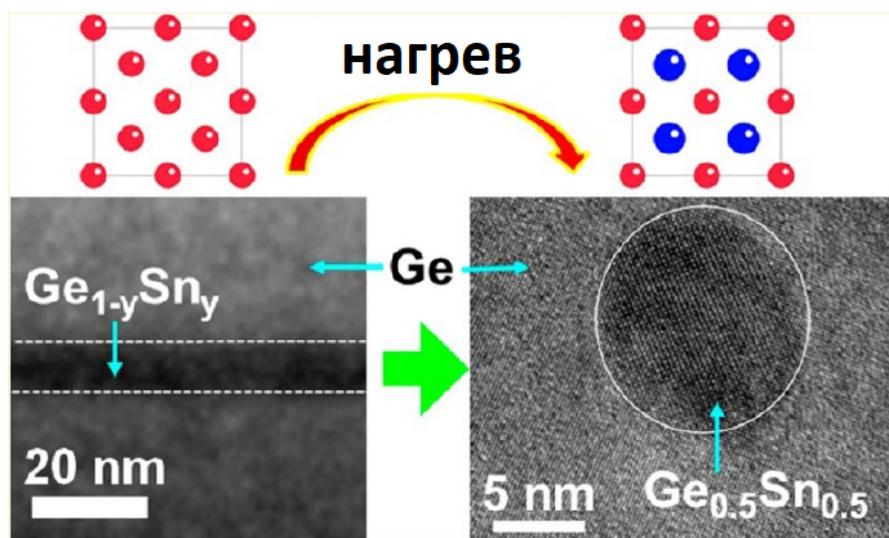


Рис. 1.3. Схематический рисунок и ТЕМ изображения синтеза нового оптоэлектронного материала - нанокристаллов GeSn, обогащённых Sn, в матрице Ge. Нанокристаллы были получены после отжига метастабильного материала Ge и плёнки GeSn, которая была встроена в матрицу Ge. Электронно-микроскопические исследования показали, что эти нанокристаллы обладают двумя типами решётки: (1) алмазоподобной кубической структурой с высокой долей Sn ($x > 0,5$) и (2) упорядоченной структурой цинковой обманки ($x = 0,5$) [1].

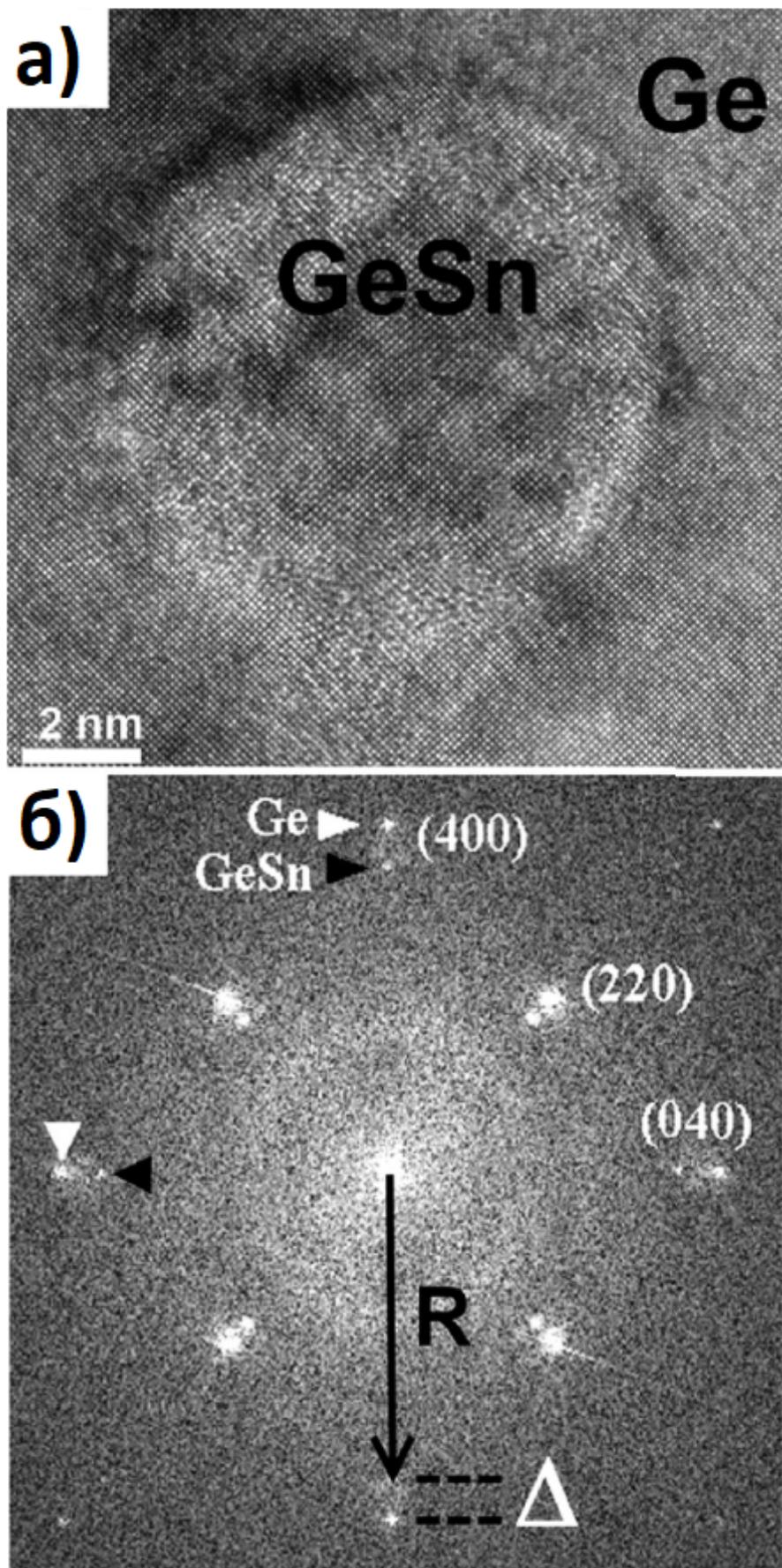


Рис. 1.4. (а) HRTEM изображение осадка GeSn. (б) Дифракционная картина, полученная кристалла, изображённого на рисунке а). Внутренние отражения (отмеченные темными стрелками) происходят от осадка, а внешние (отмеченные белыми стрелками) - от матрицы Ge. Дифракционная картина соответствует проекции [001] алмазоподобной структуры [1].

Глава 2

Методика компьютерного моделирования эволюции системы SnGe

2.1. Молекулярная динамика

Метод молекулярной динамики (МД) — это метод, при котором эволюция системы взаимодействующих атомов или частиц получается путём интегрирования их уравнений движения [9, 10]. Для описания движения атомов или частиц применяется классическая механика. Силы межатомного взаимодействия представляют как градиент потенциальной энергии системы. Методы МД были разработаны в рамках классической теоретической физики и получили широкое применение в физике, химии и биологии. Метод играет важную роль в определении структуры белка и уточнении его свойств.

Однако, классическая МД имеет границы применимости. Она не применима, когда начинают играть роль квантовые эффекты. Также необходимо, чтобы времена на которых рассматривается поведение системы, были больше, чем время релаксации исследуемых физических величин. Кроме того, его не удаётся использовать для систем с очень большим количеством частиц. Это связано с тем, что время вычислений растёт пропорционально квадрату количества частиц. Решающим недостатком метода для моделирования систем с диффузией атомов является ограничение по времени эволюции системы: для того, чтобы разрешать атомные колебания необходимо взять достаточно маленькое время интегрирования, в итоге общее время моделирования не превышает микросекунд, в то время как процессы формирования атомных структур происходят при гораздо больших временах (секунды и больше). Эта проблема получила название “проблема масштаба времени”. Заметим, что точное знание траекторий движения частиц системы на больших промежутках времени не является необходимым для получения результатов макроскопического (термодинамического) характера. Это привело к созданию другого класса методов исследования, который в более грубом приближении строит траекторию частицы, как последовательность переходов из одного состояния в другое (см. рис. 2.1).

2.2. Алгоритм Метрополиса

Алгоритм Метрополиса является одним из первых алгоритмов относящихся к методам Монте-Карло [12]. Под методами Монте-Карло понимается класс алгоритмов, которые используют случайные числа для решения задач. Первые алгоритмы были разработаны в 1940-ых и 1950-ых годах. Название методов происходит от района Монако, известного своими казино. В 1960-ых учёные начали разрабатывать алгоритм для моделирования систем, динамично развивающихся от одного состояния к другому. Задача алгоритма Метрополиса заключается в поиске наиболее энергетически выгодного состояния системы. Чтобы найти это состояние, для начального состояния системы, будем называть его первым, вычисляется потенциальная энергия E_1 , затем происходит некоторое событие

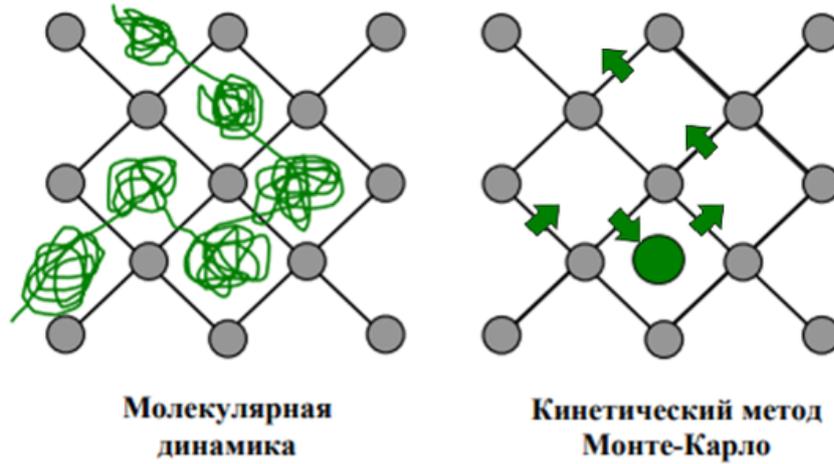


Рис. 2.1. Схема, объясняющая фундаментальное различие между молекулярной динамикой (слева) и кинетическим методом Монте-Карло (справа). [11]

(обычно это обмен местами атомов или перемещение атомов), и система переходит в новое состояние, назовем это вторым состоянием. Вычисляется энергия второго состояния E_2 . Эти энергии сравниваются, и если первая больше второй, то событие считается произошедшим и система переходит в новое состояние. Если конечная энергия больше начальной, т.е. $E_1 < E_2$, то это событие все еще может произойти за счет наличия у системы температуры. Вероятность этого определяется по формуле:

$$\exp\left(-\frac{E_2 - E_1}{kT}\right) \geq \epsilon \quad (2.1)$$

где ϵ — случайная величина равномерно распределенная на отрезке $[0, 1]$, $k = 8.617332 \cdot 10^{-2}$ мэВ/К — постоянная Больцмана, T — температура при которой происходит событие.

Если условие 2.1 не выполняется, то система остается в первом состоянии. После вычисляется энергия для следующего состояния системы и процедура повторяется. Таким образом, чем больше энергия системы на новом шаге, тем с меньшей вероятностью система перейдет в новое состояние, так система стремится к состоянию с наименьшей энергией.

Алгоритм Метрополиса подходит для поиска равновесного состояния. Равновесное состояние это такая конфигурация системы, при котором система остается в стабильном состоянии про относительно больших возмущениях. Также можно выделить метастабильные состояния при которых система остается в стабильности при относительно маленьких возмущениях. Для поиска метастабильных состояний алгоритм Метрополиса не подходит. Так как, выбор новых состояний происходит произвольным образом и возможна ситуация при которой система перейдет в состояние с наименьшей потенциальной энергией, минуя локальные минимумы. Для более точного моделирования системы используется Кинетический метод Монте-Карло.

2.3. Кинетический метод Монте-Карло

На сегодняшний день основной метод, который используется для моделирования систем с большим количеством степеней свободы, таких, как жидкости, неупорядоченные материалы, твёрдые тела, клеточные структуры, известен как кинетический метод Монте-Карло (КММК) [13, 14].

Метод рассматривает системы с нечастыми событиями. Это такие системы, эволюция в которых описывается случайными переходами из состояния в состояние с относительно

долгими временными промежутками между этими переходами. К примеру, рассмотрим идеальную объёмно-центрированную кубическую решётку с примесным атомом в центре кубической элементарной ячейки. Примесный атом может совершать прыжки из центра одной элементарной ячейки в центр другой. Предполагается, что атомом переходит из одного потенциального бассейна в другой, которые разделены потенциальным барьером. Эту систему можно назвать системой с нечастными событиями, так как время между переходами достаточно долгое, так как атому нужно преодолеть этот энергетический барьер (см. рис. 2.2).

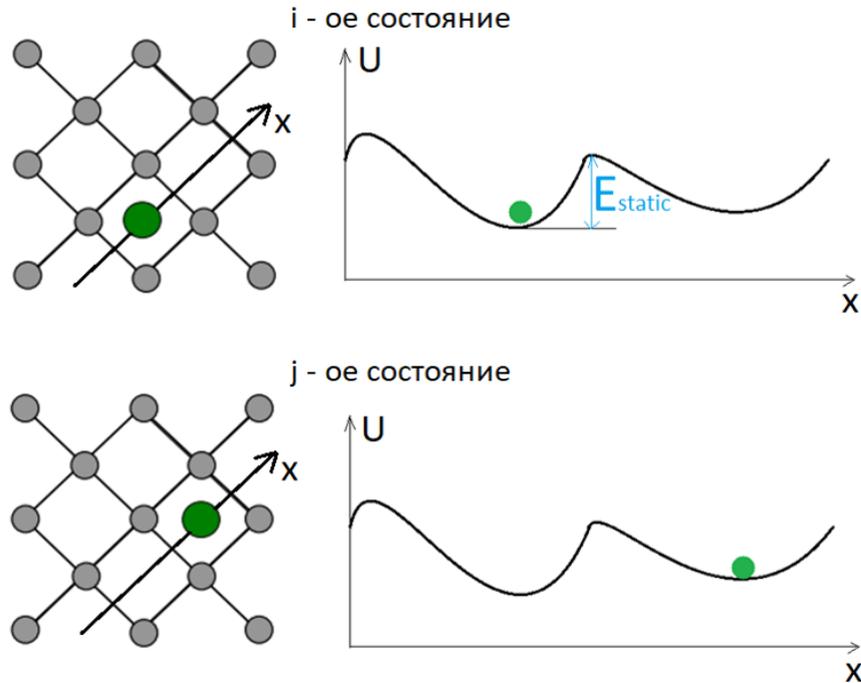


Рис. 2.2. Схематическое изображение перехода системы из одного состояния в другое. В правой части рисунка по вертикали отложена потенциальная энергия движущейся частицы, по горизонтали — координата.

Если минимизировать энергию каждого атома, то каждый из них будет занимать определённое положение в пространстве. Назовём это i -ым состоянием системы. При повышении температуры каждый атом будет колебаться около своего минимума потенциальной энергии. Теперь переместим один атом в другую потенциальную яму и получим новое состояние системы j . Для вычисления вероятности такого перехода используется теория переходного состояния [11, 15]. Вероятность ν_{ij} перехода системы из состояния i в состояние j не зависит от того в каких состояниях находилась система до этого, а определяется температурой T и величиной потенциального барьера E_{static} ,

$$\nu_{ij} = \nu_0 \exp\left(-\frac{E_{static}}{k_B T}\right), \quad (2.2)$$

где ν_{ij} — префактор, который обычно лежит в пределах $10^{12} - 10^{13} \text{ c}^{-1}$, k_B — постоянная Больцмана.

По формуле (2.2) найдём для всех возможных состояний вероятность перехода в это состояние ν_{ij} , $j \in (1, N)$, где N - количество возможных состояний. Составим таблицу, l -ый элемент которой вычисляется по формуле 2.3.

$$k_l = \sum_{j=1}^l \nu_{ij}, \quad l \in (1, N). \quad (2.3)$$

Случайное число $r \in (0, 1)$, умноженное на $k_{tot} = \sum_{j=1}^N \nu_{ij}$, указывает на один из вариантов перехода к новому состоянию (см. рис 2.3)

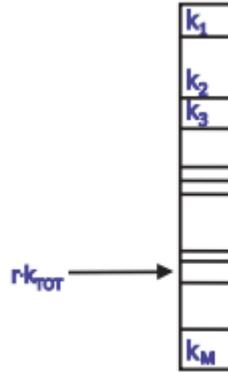


Рис. 2.3. Схематическая иллюстрация процедуры выбора пути перехода системы [13]

Чем большее значение потенциальной энергии имеет система в j -ом состоянии, тем с меньшей вероятностью она переходит в это состояние. В итоге, система стремится к состоянию с наименьшей энергией, которое и должно реализовываться в реальном эксперименте.

Для определения продолжительности перехода используются экспоненциально распределенные случайные числа 2.4.

$$t_{ij} = -\frac{1}{k_{tot}} * \ln(r), \quad r \in (0, 1] \quad (2.4)$$

где r равномерно распределенное случайное число.

Таким образом, в процессе моделирования кинетическим методом Монте-Карло система частиц движется в сторону наименьшей полной энергии по пути с наименьшими энергетическими барьерами. Это позволяет модельной системе на пути к термодинамическому равновесию проходить через правильную последовательность квазиравновесных состояний.

Глава 3

Квантовые точки Sn в матрице Ge

3.1. Энергия системы атомов

Энергия в системе атомов зависит от количества атомов и их взаимодействий в парах, тройках и т. д. Основной вклад вносят одиночные и двойные суммы атомов, поэтому другие взаимодействия можно пренебречь. В однородном изотропном пространстве парные взаимодействия зависят только от расстояния между атомами. Учитывая, что энергия парного взаимодействия быстро убывает с расстоянием, ее можно разбить на несколько энергий для разных значений аргумента.

В при разложении энергия системы атомов в ряд получим, что энергия системы зависит от числа атомов, от расстояния между парами атомов, тройками атомов и т.д.:

$$E(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \sum_{i=1}^N E_1(\vec{r}_i) + \frac{1}{2!} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N E_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j) + \frac{1}{3!} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N E_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k) + \dots \quad (3.1)$$

Наибольший вклад дают первые два слагаемых. Так что тройками атомов и так далее можно пренебречь. Также в однородном изотропном пространстве энергия пар атомов (2 слагаемое в формуле 3.1) будет зависеть только от расстояния между атомами $E_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = E_2(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$:

$$E(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \sum_{i=1}^N E_1(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N E_2(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) \quad (3.2)$$

Из-за того, что энергия быстро убывает с ростом расстояния между атомами, разумно энергию парного взаимодействия разбить на суммы произведения количества атомов на первых соседях N_1 и соответствующую энергию взаимодействия $E_{\Delta r_1}$, произведения количества атомов на вторых соседях N_2 и соответствующую энергию взаимодействия $E_{\Delta r_2}$, и так далее. Тогда получим:

$$E(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \approx NE_0 + (N_1 E_{\Delta r_1} + N_2 E_{\Delta r_2} + N_3 E_{\Delta r_3} + N_4 E_{\Delta r_4} + \dots) \quad (3.3)$$

Ограничивая рассмотрение только до четвёртых соседей, для описания энергии системы атомов необходимо задать пять пар параметров энергий $E_0, E_{\Delta r_1}, E_{\Delta r_2}, E_{\Delta r_3}, E_{\Delta r_4}$ для одного типа атомов и пять параметров для другого типа атомов. Учтём, что для кинетического метода Монте-Карло, по формуле Аррениуса 2.2, важны энергетические барьеры при переходе из одного состояния в другое E_{static} , что в данном случае является разницей энергий в начальном и конечном состоянии, то есть

$$\begin{aligned} E_{static} &= E(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) - E(\vec{r}_1^0, \dots, \vec{r}_N^0) = \\ &= NE_0 + (N_1 E_{\Delta r_1} + N_2 E_{\Delta r_2} + N_3 E_{\Delta r_3} + N_4 E_{\Delta r_4}) - \\ &\quad - (N_1^0 E_0 + (N_1^0 E_{\Delta r_1} + N_2^0 E_{\Delta r_2} + N_3^0 E_{\Delta r_3} + N_4 E_{\Delta r_4})) = \\ &= (N_1 - N_1^0) E_{\Delta r_1} + (N_2 - N_2^0) E_{\Delta r_2} + (N_3 - N_3^0) E_{\Delta r_3} + (N_4 - N_4^0) E_{\Delta r_4}, \end{aligned} \quad (3.4)$$

где величины с индексом ноль сверху означают начальное состояние, а без индекса конечное состояние системы атомов.

Таким образом, получим что для описания системы требуется задать четыре параметра энергии $E_{\Delta r_1}, E_{\Delta r_2}, E_{\Delta r_3}, E_{\Delta r_4}$, что означает соответственно энергию взаимодействия атомов на первых, вторых, третьих и четвёртых соседях.

3.2. Топология кристаллической решётки

Из-за быстрого увеличения количества соседних атомов пропорционально третьей степени расстояния и того, что энергия парного взаимодействия убывает, можно ограничиться рассмотрением только окрестности выбранного атома, чтобы получить значение энергии с необходимой точностью (метод сферического ограничения [16]). Размер этой окрестности зависит от значений энергии парных взаимодействий, полученных из квантовомеханических расчётов, а также от типа кристаллической решётки.

Представим произвольный атом в матрице германия. Окружающие его атомы отсортированы по расстоянию и классифицированы. Например, в гранецентрированной решётке алмазного типа он имеет четыре ближайших (первых) соседа по валентной связи, двенадцать вторых соседей и т. д. В таблице 3.1 приведены соответствующие количества атомов и расстояния до них.

Номер соседа	1	2	3	4	5	6
Количество	4	12	12	6	12	24
Квадрат расстояния	3/16	8/16	11/16	16/16	19/16	24/16

Таблица 3.1. Соседние атомы в гранецентрированной решётки типа алмаза. Параметр решётки принят равным единице.

На рисунке 3.1 представлено схематическое изображение атома (красным) и его ближайших соседей до четвёртого порядка для алмазной структуры. Хранение координат атомов в памяти компьютера в трёхмерном пространстве, а также поиск соседей относительно данного атома являются непростыми задачами, так как достаточно тяжело представить и визуализировать атомы такой кристаллической структуры 3.2. На рисунке 3.2 указаны элементарные ячейки кристалла и подписаны соответствующие соседи относительно атома под номером ноль.

3.3. Представление решётки в памяти

Из-за сложной структуры германия (если выбрать тройные ортогональные векторы трансляции, атомы с целочисленными координатами будут чередоваться с пустотами), для экономии памяти и упрощения алгоритма выбора соседей атома можно использовать неортогональные векторы трансляции. В случае решетки алмазного типа с двумя гранецентрированными подрешетками, все атомы в системе будут иметь целочисленные координаты в 4-мерном массиве (x', y', z', w') , где последняя координата w' может быть только 0 или 1. Преобразование в ортогональные координаты можно выполнить умножением на матрицу:

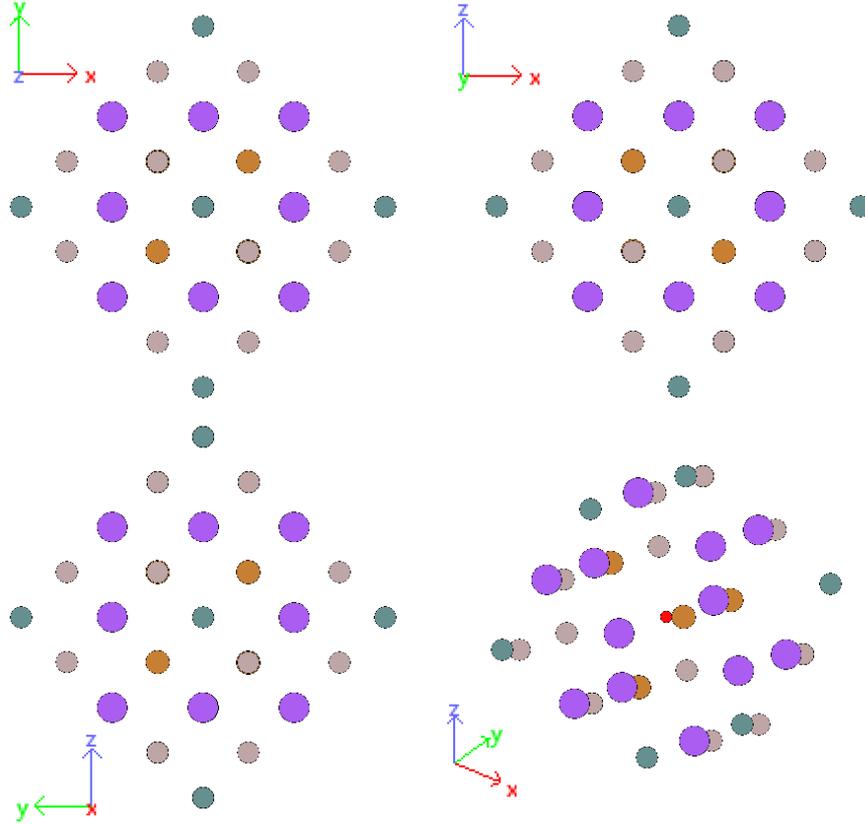


Рис. 3.1. Схематическое изображение атома (красным) и его ближайших соседей (до 4 включительно) в разных проекциях. Жёлтым цветом показаны соседи первого порядка, фиолетовым — соседи второго порядка, серым — соседи третьего порядка, зелёным — соседи четвёртого порядка

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 2 & 1 \\ 2 & 0 & 2 & 1 \\ 2 & 2 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \\ w' \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

3.4. Поиск соседей в “четырёхмерном” пространстве

Представление решётки в памяти компьютера в виде координаты в 4-мерном пространстве (x, y, z, w') облегчает поиск соседей. Координаты соседей в таком пространстве закономерны и могут быть найдены в этом пространстве. А по формуле 3.5 координаты могут быть переведены в трёхмерное декартово пространство. Для примера пусть координаты атома (x'_0, y'_0, z'_0, w'_0) .

Тогда координаты первых соседей можно найти по следующим формулам:

$$\begin{array}{l} (x_0, \quad y_0, \quad z_0, \quad (w_0 + 1) \bmod 2), \\ (x_0 - 1, \quad y_0, \quad z_0, \quad (w_0 + 1) \bmod 2), \\ (x_0, \quad y_0 - 1, \quad z_0, \quad (w_0 + 1) \bmod 2), \\ (x_0, \quad y_0, \quad z_0 - 1, \quad (w_0 + 1) \bmod 2). \end{array}$$

Координаты вторых соседей можно найти по следующим формулам:

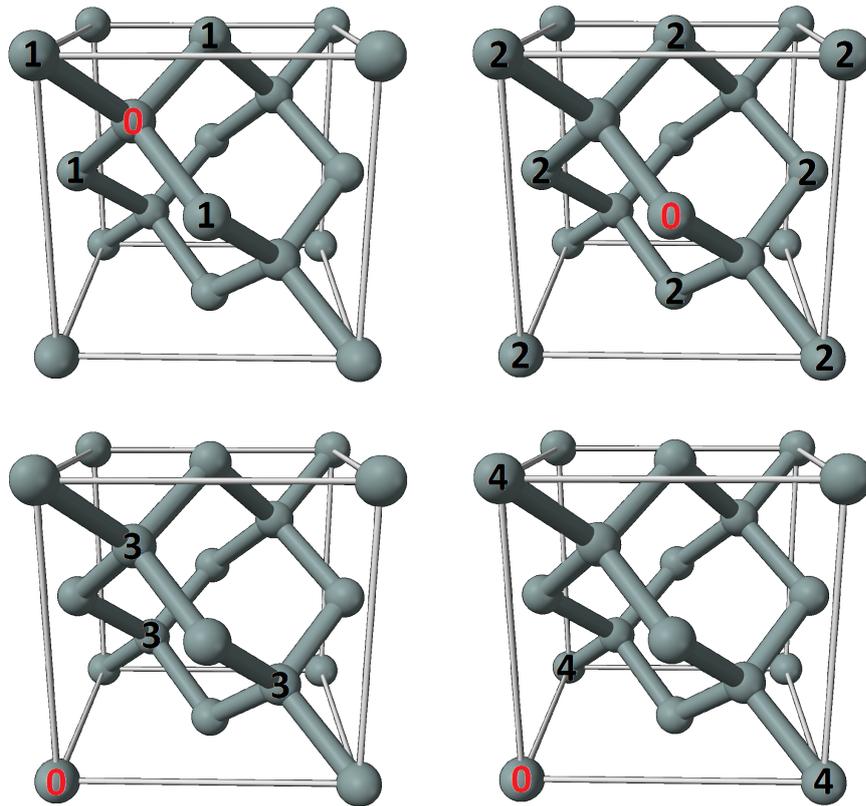


Рис. 3.2. Схематическое изображение элементарной ячейки с указанием соседей атома. Нулевым обозначен атом относительно которого ищутся соседи, номерами указаны соответствующие номеру соседи.

$$\begin{aligned}
 & (x_0 - 1, \quad y_0, \quad z_0, \quad w_0), \\
 & \quad (x_0, \quad y_0 - 1, \quad z_0, \quad w_0), \\
 & \quad (x_0, \quad y_0, \quad z_0 - 1, \quad w_0), \\
 & (x_0 + 1, \quad y_0, \quad z_0, \quad w_0), \\
 & \quad (x_0, \quad y_0 + 1, \quad z_0, \quad w_0), \\
 & \quad (x_0, \quad y_0, \quad z_0 + 1, \quad w_0), \\
 & (x_0 - 1, \quad y_0 + 1, \quad z_0, \quad w_0), \\
 & (x_0 - 1, \quad y_0, \quad z_0 + 1, \quad w_0), \\
 & (x_0 + 1, \quad y_0 - 1, \quad z_0, \quad w_0), \\
 & \quad (x_0, \quad y_0 - 1, \quad z_0 + 1, \quad w_0), \\
 & (x_0 + 1, \quad y_0, \quad z_0 - 1, \quad w_0), \\
 & \quad (x_0, \quad y_0 + 1, \quad z_0 - 1, \quad w_0).
 \end{aligned}$$

Координаты третьих соседей можно найти по формулам:

$$\begin{array}{l}
(x_0 - 1, y_0 + 1, z_0, (w_0 + 1) \bmod 2), \\
(x_0 - 1, y_0, z_0 + 1, (w_0 + 1) \bmod 2), \\
(x_0, y_0 - 1, z_0 + 1, (w_0 + 1) \bmod 2), \\
(x_0 + 1, y_0 - 1, z_0, (w_0 + 1) \bmod 2), \\
(x_0 + 1, y_0, z_0 - 1, (w_0 + 1) \bmod 2), \\
(x_0, y_0 + 1, z_0 - 1, (w_0 + 1) \bmod 2), \\
(x_0, y_0 - 1, z_0 - 1, (w_0 + 1) \bmod 2), \\
(x_0 - 1, y_0, z_0 - 1, (w_0 + 1) \bmod 2), \\
(x_0 - 1, y_0 - 1, z_0, (w_0 + 1) \bmod 2), \\
(x_0 + 1, y_0 - 1, z_0 - 1, (w_0 + 1) \bmod 2), \\
(x_0 - 1, y_0 + 1, z_0 - 1, (w_0 + 1) \bmod 2), \\
(x_0 - 1, y_0 - 1, z_0 + 1, (w_0 + 1) \bmod 2).
\end{array}$$

Координаты четвёртых соседей можно найти по следующим формулам:

$$\begin{array}{l}
(x_0 - 1, y_0 + 1, z_0 + 1, w_0), \\
(x_0 + 1, y_0 - 1, z_0 + 1, w_0), \\
(x_0 + 1, y_0 + 1, z_0 - 1, w_0), \\
(x_0 + 1, y_0 - 1, z_0 - 1, w_0), \\
(x_0 - 1, y_0 + 1, z_0 - 1, w_0), \\
(x_0 - 1, y_0 - 1, z_0 + 1, w_0).
\end{array}$$

Таким образом, представление решётки в памяти компьютера в виде координаты в 4-мерном пространстве (x, y, z, w') и использование формул, приведённых выше, позволяет вычислять координаты атомов соседей в трёхмерном пространстве.

3.5. Параметры численного моделирования

Для реализации алгоритма кинетического метода Монте Карло была написана программа на Python. Вычислительная ячейка имеет размеры $8 \times 8 \times 8 \times 2$ в “четырёхмерном” пространстве и представляет собой параллелепипед в трёхмерном декартовом пространстве с атомами расположенными в узлах алмазной решетки 3.3. В решетке могут располагаться атомы двух типов: германия и олова. Всего атомов олова 64. Движение атомов является обменом местами атома олова и атома германия и возможно только для атомов находящихся на первых соседях. Используются периодические граничные условия. В программе могут варьироваться параметры $E_{\Delta r_1}, E_{\Delta r_2}, E_{\Delta r_3}, E_{\Delta r_4}$, определяющие величины потенциальных барьеров. Температура, при которой происходит моделирование, остаётся постоянной и равна $T = 50$ К. Число шагов алгоритма КММК равно 100000.

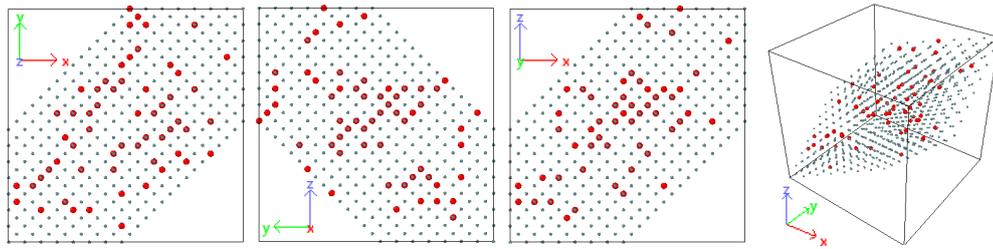


Рис. 3.3. Пример начального расположения атомов олова в матрице германия. Красным цветом отмечены атомы олова, серым — атомы германия.

Глава 4

Результаты моделирования

При моделировании были выбраны 54 набора диффузионных барьеров движения атомов олова в моделируемой системе для случайного начального распределения атомов олова и распределения в плоскости и проведено моделирование кинетическим методом Монте-Карло. Эти наборы отличаются вкладом каждого атома в диффузионный барьер 4.1. Сам диффузионный барьер рассчитывается как разность между энергией кристалла до и после перемещения атома по формуле 4.1:

$$E_{static} = (N_1 - N_1^0)E_{\Delta r_1} + (N_2 - N_2^0)E_{\Delta r_2} + (N_3 - N_3^0)E_{\Delta r_3} + (N_4 - N_4^0)E_{\Delta r_4}, \quad (4.1)$$

где $E_{\Delta r_1}, E_{\Delta r_2}, E_{\Delta r_3}, E_{\Delta r_4}$ — вклады энергии от первых, вторых, третьих и четвертых соседей соответственно.

Первые соседи $E_{\Delta r_1}$	Вторые соседи $E_{\Delta r_2}$	Третьи соседи $E_{\Delta r_3}$	Четвёртые соседи $E_{\Delta r_4}$
700	200	150	15
70	-50	-40	-15
-400	-500	-400	

Таблица 4.1. Модельные величины энергетических вкладов в полную энергию кристалла от атомов, находящихся на различном расстоянии друг от друга в матрице германия. Величины приведены в мэВ.

При моделировании использовались два различных характерных вида начальных условий. Первый представлял собой случайное расположение атомов во всей вычислительной ячейке. Второй моделирует собой результат напыления атомов олова посредством расположения их в виде тонкого слоя на расстоянии первых соседей.

Второе начальное расположение атомов обладает следующим недостатком. Ввиду высокой степени симметрии системы, часто она попадает в локальный минимум потенциальной энергии. Это выражается в том, что в расчетной ячейке постоянно повторяются одни и те же события с малым диффузионным барьером, а значит, и частотой события. Это приводит к тому, что события с большим барьером почти не происходят, так как их частота гораздо меньше. Из-за этого общая структура ячейки остаётся неизменной. При случайном расположении атомов такого не происходит, так как нет заранее упорядоченной структуры.

Для анализа системы были использованы функции радиального распределения (ФРР) для конечного расположения атомов при всех наборах энергетических барьеров. В общем случае функция радиального распределения описывает изменения плотности как функции расстояния от выбранной частицы. В данном случае ФРР представляет собой зависимость числа пар атомов от расстояния между ними, выраженное в порядке соседства между атомами, и нормированное на число пар атомов. Также для сравнения были построены ФРР для слоя атомов (первоначальное состояние) и для максимально

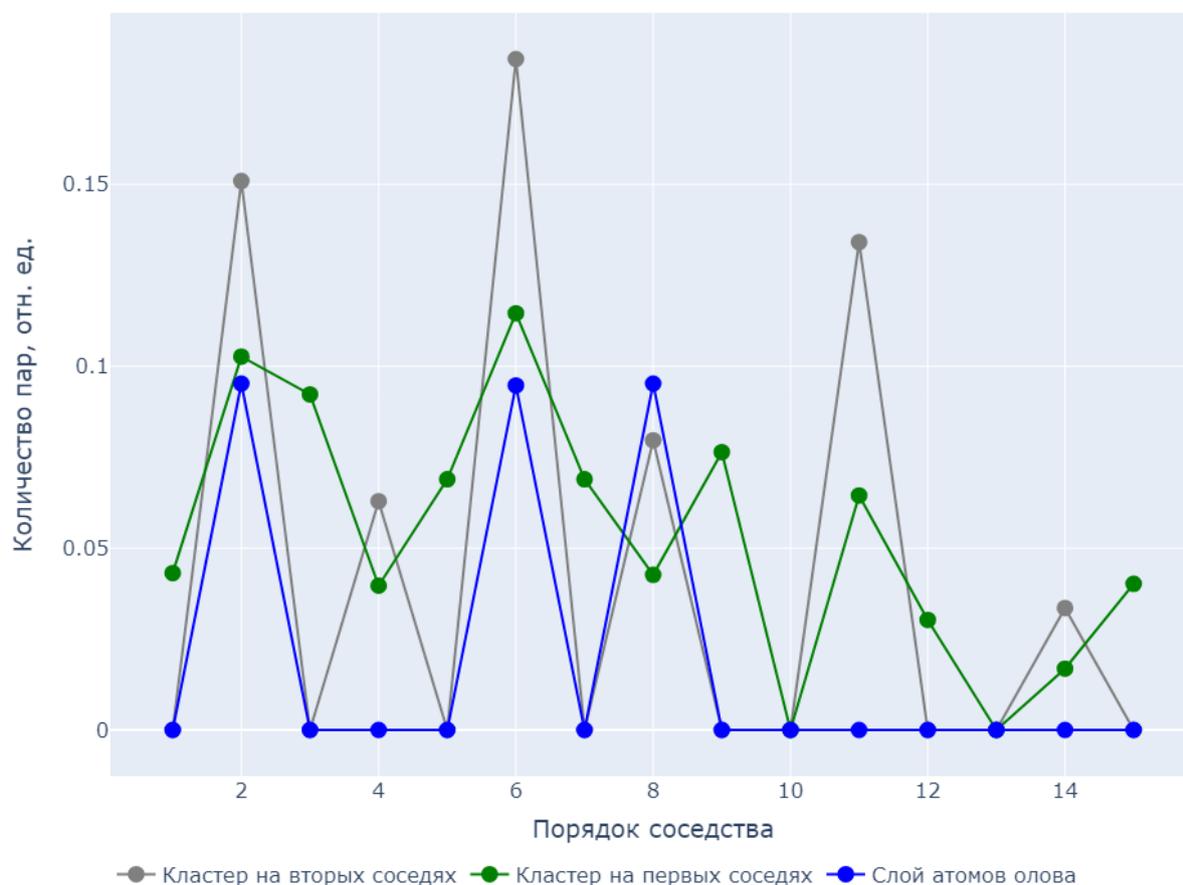


Рис. 4.1. Функция радиального распределения для различных вариантов положения атомов олова.

компактного расположения атомов на первых и на вторых соседях 4.1. Для удобства чтения графиков значения соединены линиями.

Из графика 4.1 видно, что ФРР для кластера, в котором атомы олова находятся на расстоянии вторых соседей друг от друга, имеет явные пики на определенных значениях: 2, 4, 6 и так далее. Это связано с тем, что, к примеру, если есть группа атомов и пара из них находится друг от друга на вторых соседях. Другая пара пусть тоже находится на вторых, а третья пара атомов может оказаться друг относительно друга на шестых соседях, так как количество вторых соседей у конкретного атома ограничено. Аналогичная ситуация с кластерами олова на первых соседях. Сами кластеры представлены на рисунках 4.2 и 4.6, где красным цветом отмечены атомы олова, серым — атомы германия.

В результате моделирования были получены 54 варианта поведения системы олово в матрице германия для различных наборов барьеров для начального расположения атомов олова в слое и 54 варианта для случайного распределения атомов олова. Начальное расположение атомов олова в слое на вторых соседях не дает информативных результатов по поводу формирования кластеров, так как система заранее имеет определённую структуру и на большей части наборов наблюдается, так называемое, частое событие. При этом происходит в основном одно высоко вероятное движение атома (частое событие) и система не эволюционирует от первоначального состояния.

При случайном начальном расположении наблюдается одно из следующих поведений

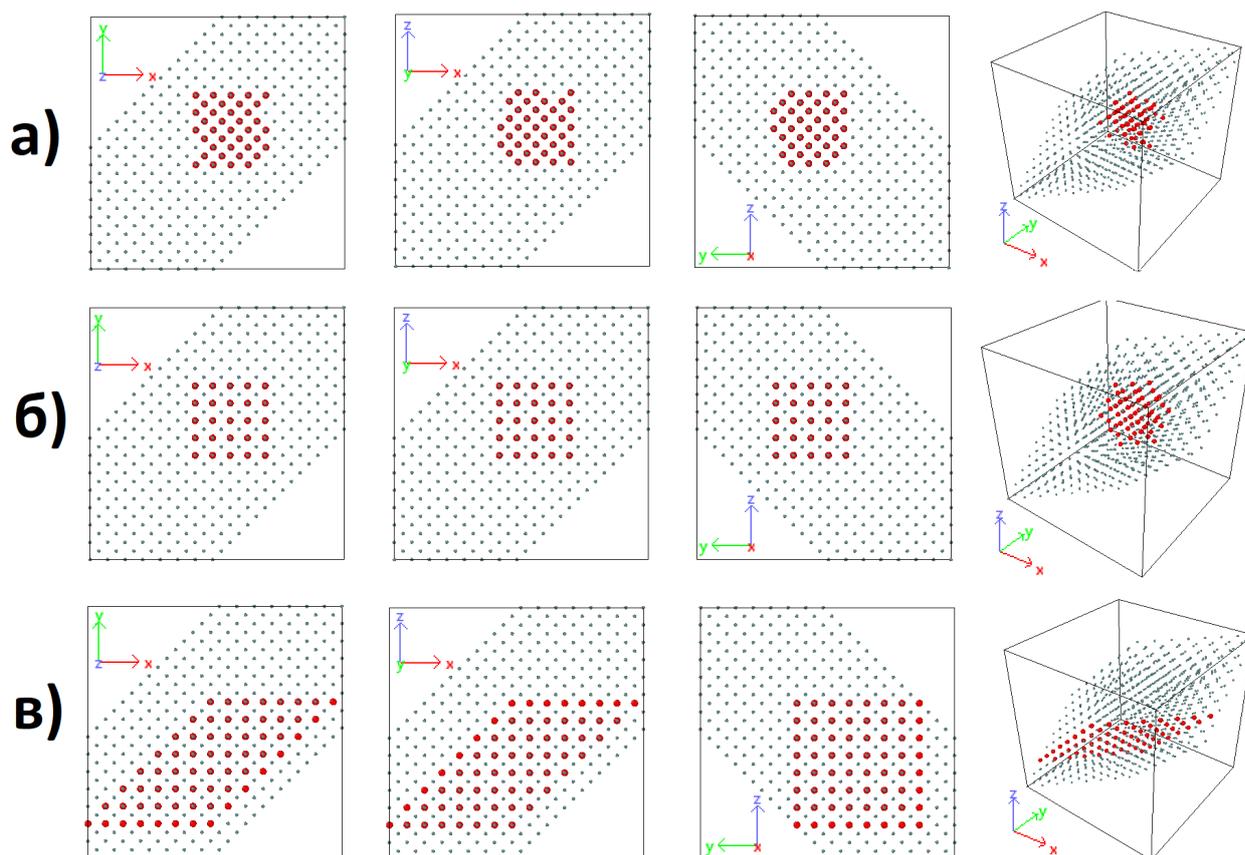


Рис. 4.2. Схематическое изображение атомов олова в матрице германия в четырех проекциях для трех случаев. а) Кластер атомов олова на первых соседях . б) Кластер атомов олова на вторых соседях. в) Атомов олова в слое. Красным отмечены атомы олова, серым — атомы германия.

системы:

1. система эволюционирует до попадания в конкретное расположение и остается в таком состоянии,
2. система эволюционирует при этом наблюдаются формирования кластеров атомов,
3. система эволюционирует без формирования кластеров.

В основном наблюдаются формирования трех видов кластеров: основанных на первых, вторых и третьих соседях. При чем у кластеров, основанных на первых соседях, наблюдаются отдельные небольшие формирования 4.2, а у кластеров, у которых атомы расположены преимущественно на вторых друг относительно друга позициях, также наблюдаются одно большое формирование 4.6. Такая же ситуация наблюдается и для третьих соседей 4.8.

Характерный вид кривых для формирования кластеров на первых соседях представлен на графике 4.3. Таким видом обладают системы с параметрами указанными в таблице 4.2. Расположение атомов после моделирования кинетическим методом Монте Карло отличаются тем, насколько компактно расположены атомы. Чем компактнее расположены атомы олова, тем выше функция радиального распределения при малых значения порядка соседства.

$E_{\Delta r_1}$, мэВ	$E_{\Delta r_2}$, мэВ	$E_{\Delta r_3}$, мэВ	$E_{\Delta r_4}$, мэВ
-400.0	-500.0	-40.0	-15.0
-400.0	-500.0	-400.0	-15.0
-400.0	-500.0	-400.0	15.0
70.0	-50.0	-40.0	15.0
70.0	-50.0	150.0	-15.0
70.0	-50.0	150.0	15.0
70.0	-500.0	-400.0	15.0
70.0	200.0	150.0	-15.0
70.0	200.0	150.0	15.0
700.0	-50.0	-40.0	-15.0
700.0	-50.0	-40.0	15.0
700.0	-50.0	150.0	-15.0
700.0	-50.0	150.0	15.0
700.0	-500.0	-40.0	15.0
700.0	-500.0	-400.0	-15.0
700.0	-500.0	-400.0	15.0
700.0	200.0	-40.0	-15.0
700.0	200.0	150.0	-15.0
700.0	200.0	150.0	15.0

Таблица 4.2. Модельные величины энергетических вкладов в полную энергию кристалла от атомов, находящихся на различном расстоянии друг от друга в матрице германия, для которых вид функции радиального распределения схож с видом ФРР для кластера атомов олова на первых соседях.

Аналогично можно выделить случаи, когда формируются кластеры на вторых соседях. Пример функции радиального распределения представлен на рисунке 4.6. Начальные параметры, при которых происходит формирование атомов таким образом представлено в таблице 4.3.

Параметры моделирования, при которых формируются кластеры на третьих соседях, указаны в таблице 4.4. Из таблицы видно, что атомы олова располагаются преимущественно на третьих соседях, когда система имеет относительно сильное притяжение для третьих соседей $E_{\Delta r_3} = -400$ мэВ.

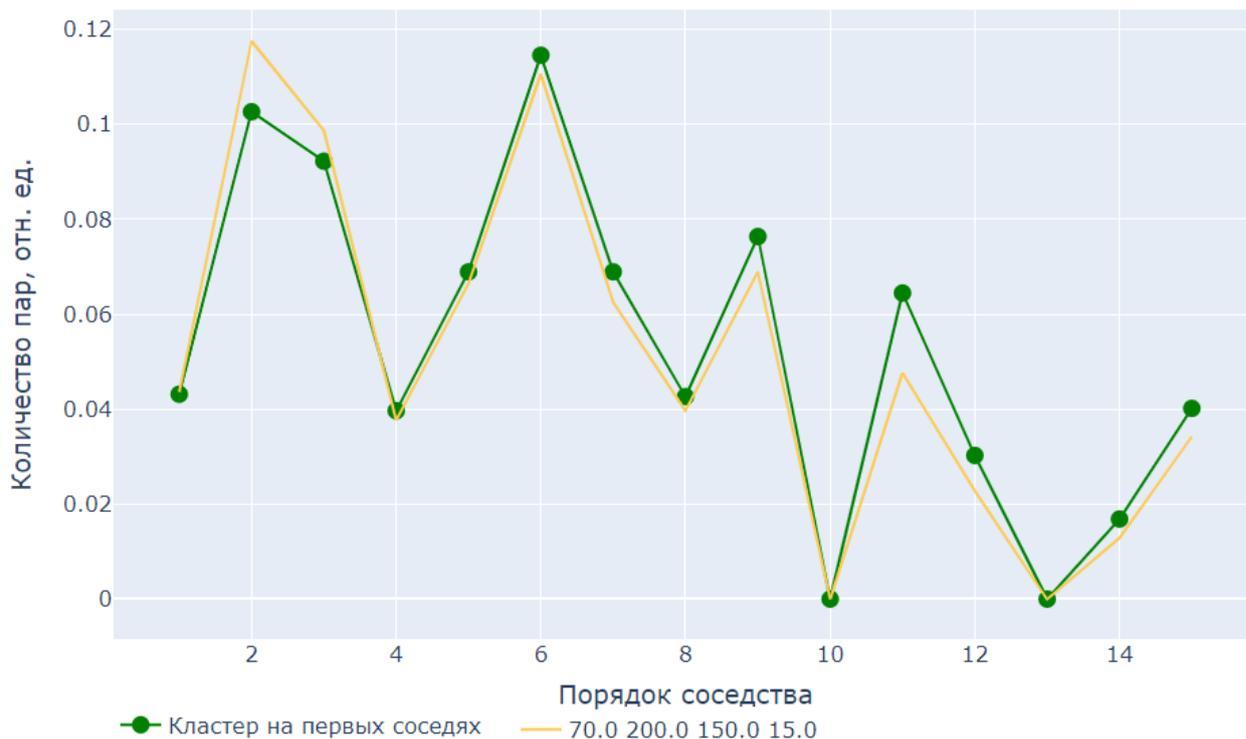


Рис. 4.3. Желтая линия — функция радиального распределения атомов олова после моделирования Кинетическим методом Монте Карло для параметров $E_{\Delta r_1} = 70$ мэВ, $E_{\Delta r_2} = 200$ мэВ, $E_{\Delta r_3} = 150$ мэВ, $E_{\Delta r_4} = 15$ мэВ. Зеленая линия — функция радиального распределения для кластера на первых соседях.

$E_{\Delta r_1}$, мэВ	$E_{\Delta r_2}$, мэВ	$E_{\Delta r_3}$, мэВ	$E_{\Delta r_4}$, мэВ
-400.0	-500.0	-40.0	15.0
-400.0	-500.0	150.0	-15.0
-400.0	-500.0	150.0	15.0
-400.0	200.0	-40.0	-15.0
-400.0	200.0	-40.0	15.0
-400.0	200.0	150.0	-15.0
-400.0	200.0	150.0	15.0
70.0	-500.0	-40.0	15.0
70.0	200.0	-40.0	-15.0
700.0	-500.0	-40.0	-15.0
700.0	-500.0	150.0	-15.0
700.0	-500.0	150.0	15.0

Таблица 4.3. Модельные величины энергетических вкладов в полную энергию кристалла от атомов, находящихся на различном расстоянии друг от друга в матрице германия, для которых вид функции радиального распределения схож с видом ФРР для кластера атомов олова на вторых соседях.

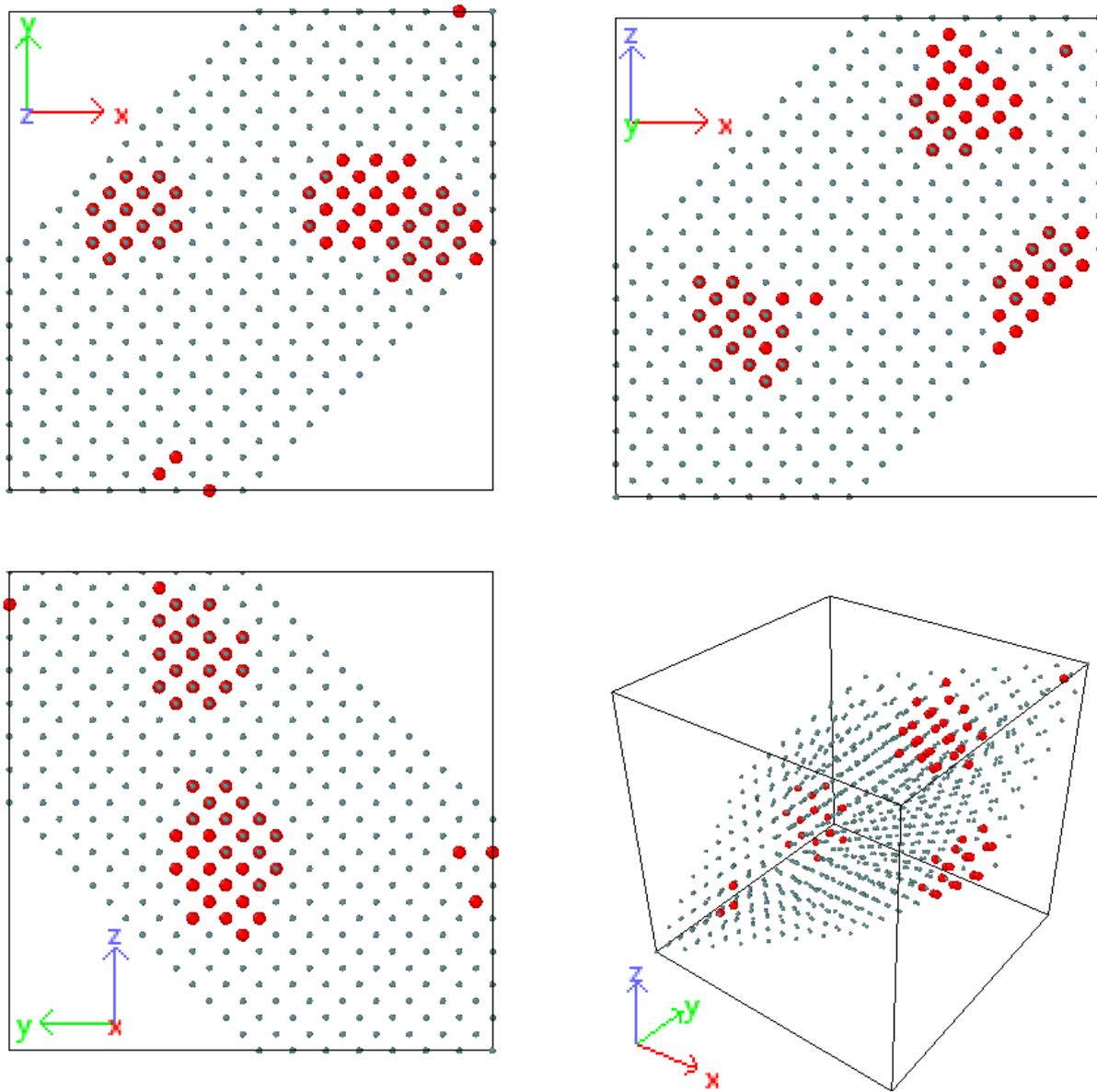


Рис. 4.4. Схематическое изображение примера формирования нескольких кластеров атомов на первых соседях после моделирования КММК при случайном начальном распределении с параметрами $E_{\Delta r_1} = 70$ мэВ, $E_{\Delta r_2} = 200$ мэВ, $E_{\Delta r_3} = 150$ мэВ, $E_{\Delta r_4} = 15$ мэВ

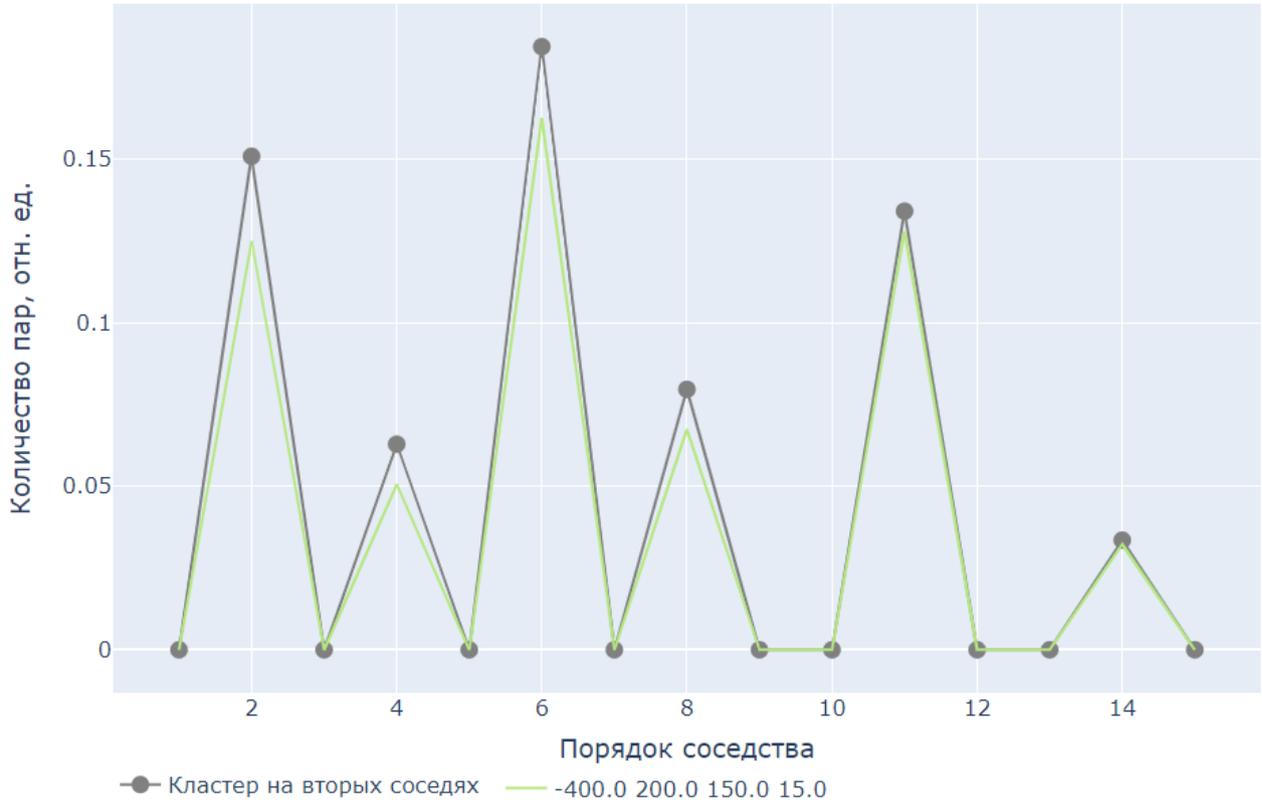


Рис. 4.5. Зеленая линия — функция радиального распределения атомов олова после моделирования Кинетическим методом Монте Карло для параметров $E_{\Delta r_1} = -400$ мэВ, $E_{\Delta r_2} = 200$ мэВ, $E_{\Delta r_3} = 150$ мэВ, $E_{\Delta r_4} = 15$ мэВ. Серая линия — функция радиального распределения для кластера на вторых соседях.

$E_{\Delta r_1}$, мэВ	$E_{\Delta r_2}$, мэВ	$E_{\Delta r_3}$, мэВ	$E_{\Delta r_4}$, мэВ
-400.0	-50.0	-400.0	15.0
-400.0	-50.0	150.0	-15.0
-400.0	-50.0	150.0	15.0
-400.0	200.0	-400.0	-15.0
-400.0	200.0	-400.0	15.0
70.0	-50.0	-400.0	-15.0
70.0	-50.0	-400.0	15.0
70.0	200.0	-400.0	-15.0
70.0	200.0	-400.0	15.0
700.0	-50.0	-400.0	-15.0
700.0	-50.0	-400.0	15.0

Таблица 4.4. Модельные величины энергетических вкладов в полную энергию кристалла от атомов, находящихся на различном расстоянии друг от друга в матрице германия, для которых вид функции радиального распределения схож с видом ФРР для кластера атомов олова на третьих соседях.

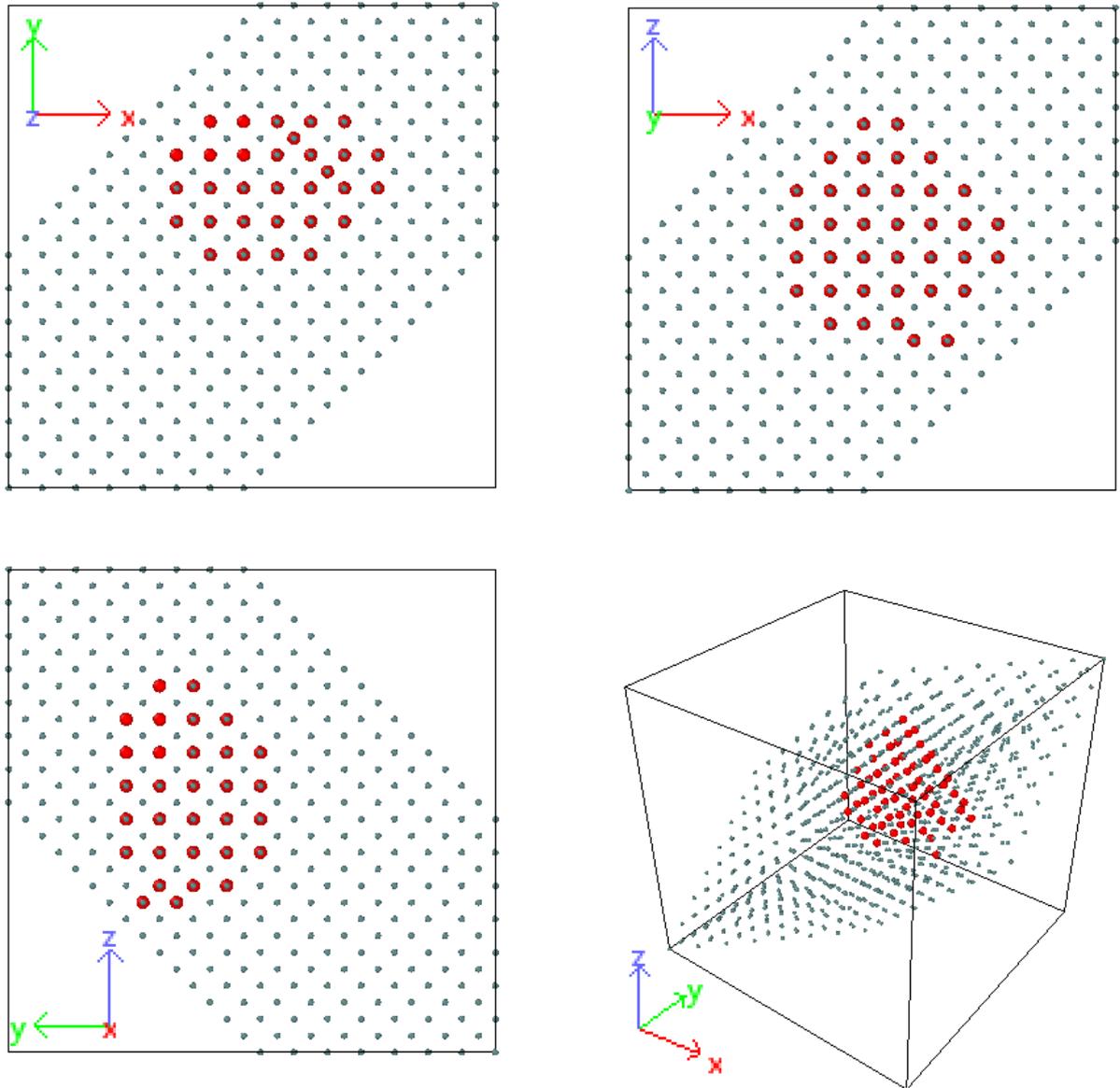


Рис. 4.6. Схематическое изображение примера формирования кластера атомов на вторых соседях после моделирования КМК при случайном начальном распределении с параметрами $E_{\Delta r_1} = -400$ мэВ, $E_{\Delta r_2} = 200$ мэВ, $E_{\Delta r_3} = 150$ мэВ, $E_{\Delta r_4} = 15$ мэВ

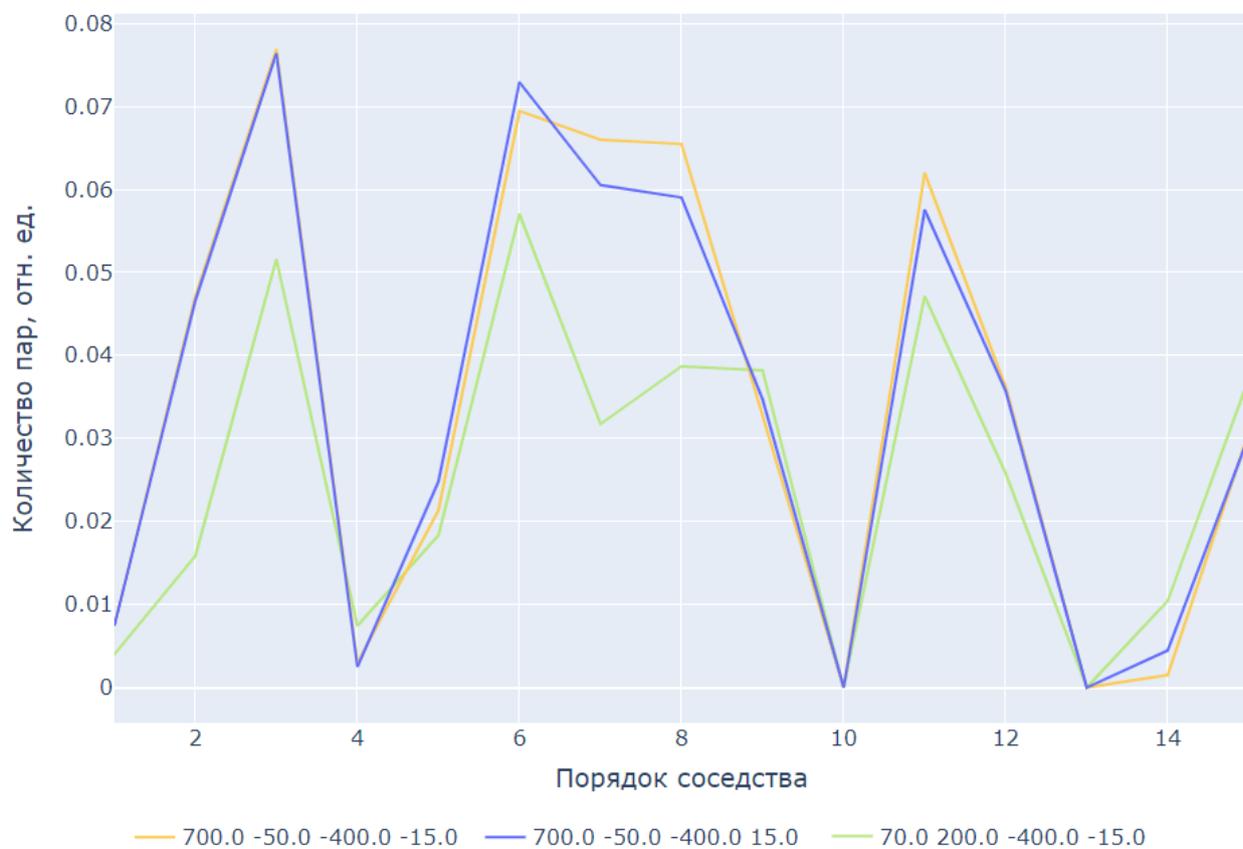


Рис. 4.7. Схематическое изображение примера формирования кластера атомов на третьих соседях после моделирования КММК при случайном начальном распределении с разными параметрами $E_{\Delta r_1}$, $E_{\Delta r_2}$, $E_{\Delta r_3}$, $E_{\Delta r_4}$

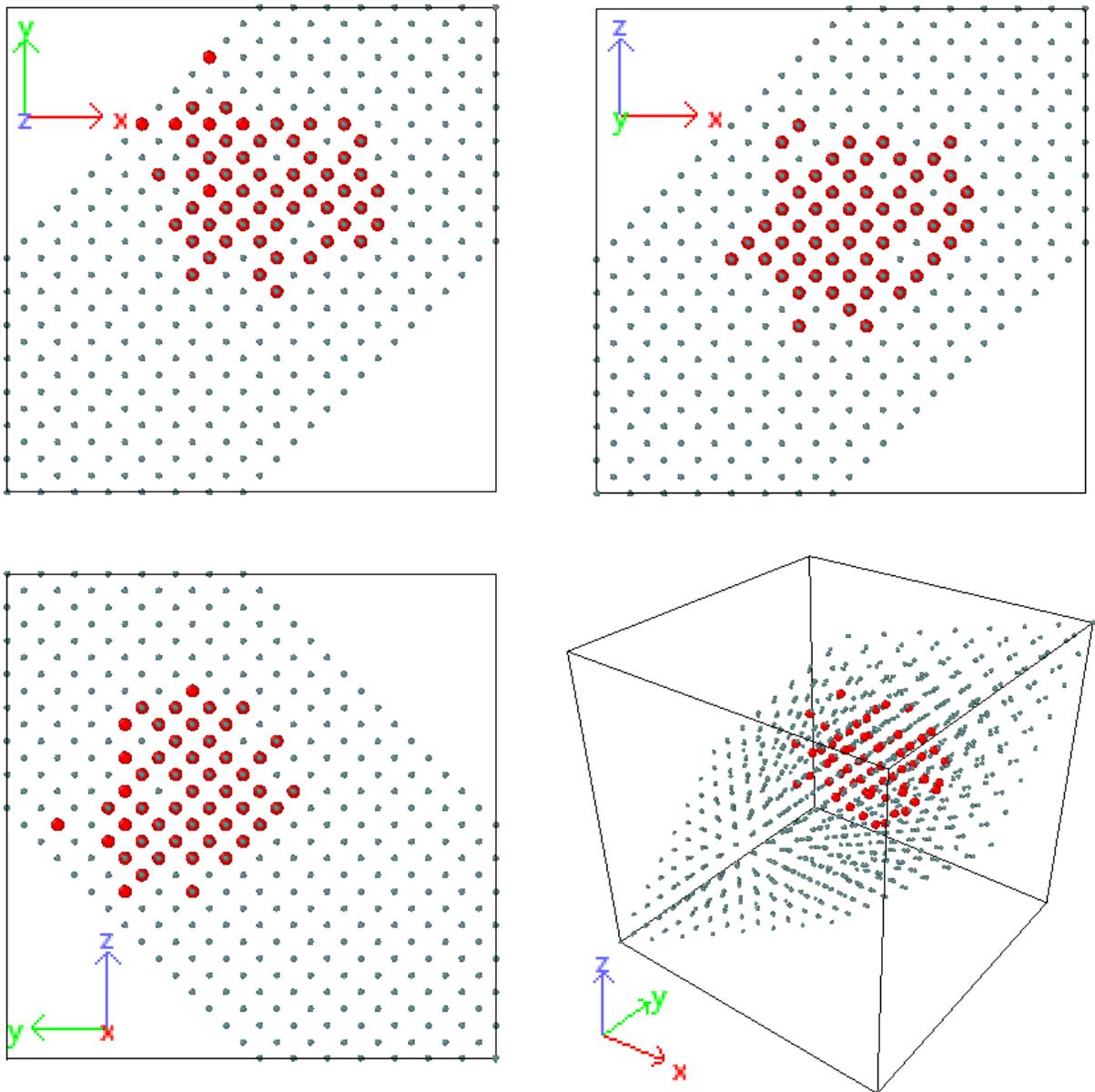


Рис. 4.8. Схематическое изображение примера формирования кластера атомов на третьих соседях после моделирования КМК при случайном начальном распределении с параметрами $E_{\Delta r_1} = 700$ мэВ, $E_{\Delta r_2} = -50$ мэВ, $E_{\Delta r_3} = -400$ мэВ, $E_{\Delta r_4} = -15$ мэВ

Заключение

В результате выполнения работы

1. На основе кинетического метода Монте-Карло разработана методика численного моделирования эволюции атомов олова в кристалле германия при различных внешних условиях.
2. Определены основные диффузионные процессы, приводящие к формированию кластеров олова, имеющих структуру цинковой обманки.
3. Определены характерные виды атомных структур, которые формируют атомы олова в кристалле германия, в зависимости от разных начальных условий и параметров взаимодействия. Найдены условия, при которых формируются кластеры на первых, вторых и третьих соседях.

Литература

- [1] A. Tonkikh, N. Zakharov, A. Suvorova, Christian Eisenschmidt, Joerg Schilling, and Peter Werner. Cubic phase Sn-rich gesn nanocrystals in a Ge matrix. *Crystal Growth and Design*, 14:1617–1622, 04 2014.
- [2] С. Г. Калашников В. Л. Бонч-Бруевич. *Физика полупроводников*, т. 672. Москва “Наука”, главная редакция физико-математической литературы, 1977.
- [3] Arne Nylandsted Kringhj, Per Larsen. Anomalous diffusion of tin in silicon. *Phys. Rev. B*, 56:6396–6399, Sep 1997.
- [4] M. F. Fyhn, J. Chevallier, A. Nylandsted Larsen, R. Feidenhans’l, and M. Seibt. α -Sn and β -Sn precipitates in annealed epitaxial $\text{Si}_{0.95}\text{Sn}_{0.05}$. *Phys. Rev. B*, 60:5770–5777, Aug 1999.
- [5] Асеев А.Л. Наноматериалы и нанотехнологии для современной полупроводниковой электроники. *Российские нанотехнологии*, 1(1–2):97—110, 2006.
- [6] Д.Н. Лобанов и др. Структурные и оптические свойства метастабильных пленок SiGe/Si с низким содержанием германия. *Физика твердого тела*, 56(10), 1896, 2014.
- [7] А. А. Тонких. *Полупроводниковые гетероструктуры с Ge/Si квантовыми точками для излучающих приборов на основе кремния*. Диссертация ...к.ф.-м.н., Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе, 2005.
- [8] Matthew L. Bauer et al. Ge–Sn semiconductors for band-gap and lattice engineering. *Applied Physics Letters*, 81:2992–2994, 2002.
- [9] Д. В. Хеерман. *Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике*. Москва “Наука”, главная редакция физико-математической литературы, 1990.
- [10] Herman J. C. Berendsen. *Molecular Dynamics Simulations: The Limits and Beyond*, page 3–36. Springer Berlin Heidelberg, 1999.
- [11] George H. Vineyard. Frequency factors and isotope effects in solid state rate processes. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 3(1–2):121–127, 1957.
- [12] Nicholas Metropolis, Arianna W. Rosenbluth, Marshall N. Rosenbluth, Augusta H. Teller, and Edward Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *The Journal of Chemical Physics*, 21(6):1087–1092, June 1953.
- [13] Arthur F. Voter. *Introduction to the kinetic Monte Carlo method*, pages 1–23. 2007.
- [14] Mie Andersen, Chiara Panosetti, and Karsten Reuter. A practical guide to surface kinetic Monte Carlo simulations. *Frontiers in Chemistry*, 7, 2019.
- [15] Peter Hänggi, Peter Talkner, and Michal Borkovec. Reaction-rate theory: fifty years after Kramers. *Rev. Mod. Phys.*, 62:251–341, 1990.
- [16] Шейхет И.И. Симкин Б.Я. *Квантово-химическая и статистическая теория растворов. Вычислительные методы и их применение.*, М.: Химия, 1989.

Список опубликованных статей и тезисов

1. А. Г. Сыромятников, С. А. Кудряшов, А. Л. Клавсюк, А. М. Салецкий. Зависимость параметров роста атомных цепочек от характера изменения температуры подложки. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, (2):44–47, 2024.
2. А. Г. Сыромятников, С. А. Кудряшов, А. М. Салецкий, А. Л. Клавсюк. Влияние процесса нагрева и охлаждения на длины одномерных атомных структур. Журнал экспериментальной и теоретической физики, 160(3):410–414, 2021.
3. Градиент температуры как способ управления ростом одномерных наноструктур на ступенчатых поверхностях / А. Г. Сыромятников, С. А. Кудряшов, А. М. Салецкий, А. Л. Клавсюк // ТЕЗИСЫ III Международной конференции Физика конденсированных состояний ФКС-2023, посвященной 60-летию ИФТТ РАН. — Москва: Российская академия наук, 2023. — С. 170.
4. Кудряшов С. А. Исследование формирования квантовых точек олова в матрице германия // Материалы Международного молодежного научного форума Ломоносов-2023 / Под ред. И. А. Алешковский, А. В. Андриянов, Е. А. Антипов, Е. И. Зимакова. — География. — Москва: ООО МАКС Пресс, 2023. — С. 881.
5. Создание упорядоченных атомных цепочек с помощью градиента температуры / А. Г. Сыромятников, С. А. Кудряшов, А. Л. Клавсюк, А. М. Салецкий // ХИМИЯ, ФИЗИКА, БИОЛОГИЯ: ПУТИ ИНТЕГРАЦИИ Сборник тезисов докладов IX Всероссийской научной молодежной школы-конференции. — Первый Московский государственный медицинский университет имени И.М. Сеченова Министерства здравоохранения Российской Федерации (Сеченовский Университет) Москва: 2022. — С. 166–167.
6. Кудряшов С. А. Формирование одномерных атомных структур серебра на поверхности платины // Материалы Международного молодежного научного форума Ломоносов-2022 / Под ред. И. А. Алешковский, А. В. Андриянов, Е. А. Антипов, Е. И. Зимакова. — Т. 39 из Гидрометеорология. — Москва: ООО МАКС Пресс, 2022. — С. 572–573.