

# ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РОСТА НАНОВИСКЕРОВ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНО-ЛУЧЕВОЙ ЭПИТАКСИИ С УЧЕТОМ КОАЛЕСЦЕНЦИИ

К. К. Сабельфельд, Е. Г. Каблукова

*Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090, Новосибирск*

УДК 519.676, 519.245, 539.2

В работе представлена стохастическая модель роста нановискеров методом молекулярно-лучевой эпитаксии на основе механизма поверхностной диффузии, перераспределения и вероятности выживания адатомов, кроме того моделируется явление коалесценции нановискеров. Представлены результаты для двух режимов коалесценции, в первом конгломераты нановискеров состоят в основном из двух одиночных нанокристаллов, во втором — в один объединяются 4–6 одиночных нановискеров. Изучается влияние скорости зарождения новых нановискеров и распределения их радиусов на эволюцию распределения высот.

**Ключевые слова:** нановискеры, адатомы, диффузия по поверхности, вероятность выживания, многократное рассеяние, устойчивое распределение по высотам

## Введение

Современная технология выращивания нановискеров (или нанопроволок, nanowires, [7]) методами лучевой эпитаксии привлекает в настоящее время все большее внимание в связи с применениями в электронике и оптоэлектронике [1], [4]. Литература по данной тематике чрезвычайно обширна, в основном она посвящена экспериментальным работам. Также ведутся теоретические работы в рамках различных гипотез о механизмах роста. В работе [2] был предложен механизм устойчивого формирования нановискера заданного радиуса, который получил экспериментальное подтверждение. Различные диффузионные механизмы описаны в серии работ Дубровского с соавторами (см., например, [9]). В данной работе численно исследуется процесс формирования ансамбля нановискеров методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Стохастическая модель роста нановискеров на основе механизма поверхностной диффузии, перераспределения и вероятности выживания адатомов, а также описание алгоритма прямого моделирования движения атомов Ga предложена в [6]. В данной работе изучается эволюция высот ансамбля нановискеров при дополнительных предположениях. В частности, моделируется явление коалесценции нановискеров, описанное в [3]. Изучается влияние скорости зарождения и среднеквадратических отклонений распределения начальных радиусов нановискеров на изменение распределения их высот.

## 1 Алгоритм моделирования роста нановискеров с учетом перераспределения и диффузии по поверхности

Вначале опишем численную модель роста нановискеров, предложенную нами в [6], [7]. Модель строится для описания результатов экспериментов по выращиванию нанопроволок из нитрида галлия (GaN), при температуре 800° С. Потоки атомов галлия и азота подбираются так, что в реакторе всегда имеется азотонасыщенная среда, и рост определяется регулируемым потоком галлия.

Отдельный  $i$ -ый нановискер рассматривается как прямой круговой цилиндр фиксированного радиуса  $r_i(t)$  и высоты  $h_i(t)$ , с основанием на подложке. В начальный момент времени на круглой подложке задается распределение нановискеров следующим образом. Радиусы и высоты цилиндров случайны и имеют

логнормальное распределение с заданным математическим ожиданием  $\mathbf{Er}(\mathbf{E}h)$  и дисперсией  $\mathbf{Vr}(\mathbf{V}h)$ . Начальная конфигурация может выбираться из реального эксперимента, как это было сделано в [7], [6]. Характерное время, за которое формируется начальное распределение нановискеров в экспериментах [7] — 30 минут. На боковых границах подложки заданы периодические условия. В соответствии с методом эпитаксиального выращивания подложка непрерывно вращается. Задана плотность заполнения подложки  $\Delta S$ , то есть отношение суммарной площади оснований нановискеров к общей площади подложки. При фиксированном числе нановискеров на подложке  $N$  радиус подложки  $R_{sb}$  выражается через плотность заполнения  $\Delta S$  и математическое ожидание радиусов  $\mathbf{Er}$  следующим образом:  $R_{sb} = \mathbf{Er} \sqrt{N/\Delta S}$ . Чтобы определить положение центров основания цилиндров, равномерно распределенных по площади подложки, используется следующий алгоритм. Вводится детерминированная сетка, узлами которой являются центры одинаковых плотноупакованных кругов. Координаты центров таких окружностей в единичном круге для различных  $N$  имеются в [8]. Масштабированием в  $R_{sb}$  раз получаем необходимую сетку. При моделировании случайного положения нановискера сначала случайно выбирается номер свободного узла сетки  $k_{nd}$  как дискретная случайная величина с конечным числом равновероятных событий. Далее, в круге с номером  $k_{nd}$  случайно по равномерной плотности выбираются координаты центра нановискера при условии, что расстояния между нановискерами не меньше некоторого заданного предела  $\varepsilon$ :

$$\sqrt{(x_k - x_i)^2 + (y_k - y_i)^2} > R_k + R_i + \varepsilon, \quad (1)$$

для всех  $i < k$ . Если для узла сетки  $k_{nd}$  не существует такого случайного положения  $(x_k, y_k)$  и случайного радиуса  $R_k$ , при котором выполнено неравенство (1), то полагаем, что в узле сетки  $k_{nd}$  отсутствует нановискер. Величина  $\varepsilon$  пропорциональна длине диффузии атомов на подложке.

Задана длина диффузии атомов на боковой поверхности нанопроволоки  $L = \sqrt{D\tau}$ , т. е. среднее расстояние, на которое перемещается атом за среднее время своей диффузии  $\tau$  до его десорбции с поверхности и дальнейшего перерассеяния на соседних нановискерах. Для уменьшения числа параметров примем, что среднее время жизни атома на поверхности нановискера равно  $\tau = 1$ . Задан угол  $\theta$  между нормалью к подложке и направлением на источник атомов.

Алгоритм моделирования роста нановискеров основан на статистическом моделировании: строятся траектории движения атомов Ga от источника, до пересечения с ближайшим нановискером с последующими перерассеяниями. При столкновении атома с нановискером моделируется диффузия атома на поверхности цилиндра, на основе вероятностной модели, предложенной в [5], где вычислены вероятности перехода на основания цилиндра с учётом вероятности десорбции. Таким образом, не моделируя траектории диффундирующего атома на поверхности цилиндра малыми шагами, сразу моделируются события: (1) выхода атома на верхнюю поверхность цилиндра, (2) выхода на основание цилиндра, или (3) десорбции атома. Это кардинально повышает эффективность алгоритма моделирования.

В случае выхода атома на верхнюю поверхность цилиндра происходит рост нановискера на высоту, обратно пропорциональную квадрату радиуса его основания. При десорбции атома с поверхности нановискера горизонтальные координаты положения десорбции определяются полярным углом, который в силу осевой симметрии равномерно распределен на  $[0, 2\pi]$ . Новое направление движения атома при десорбции с поверхности моделируется согласно закону Ламберта о диффузном отражении от поверхности. Далее повторяется поиск ближайшего цилиндра, с которым происходит пересечение траектории атома.

Траектория движения атома обрывается в случае адсорбции на верхнем основании нановискера или в случае вылета атома за верхнюю границу моделируемого объема. Для различных моментов времени определяются распределения высот ансамбля нановискеров.

В [6], [7] нам удалось обнаружить следующее замечательное свойство распределения по высотам: для определенных параметров задачи (длина диффузии, угол наклона источника, плотность заполнения подложки) с течением времени устанавливается самосохраняющееся распределение по высотам, имеющее два пика. Первый пик — для небольших высот, порядка 100–200 нанометров, второй пик находится на правом конце (большие высоты) и движется с течением времени в сторону еще больших высот, при этом ширина второго пика практически не меняется. Отметим, что первый пик остаётся неподвижным, отражая факт того, что часть небольших нановискеров, оказавшаяся в тени, с ростом основной группы нановискеров ещё более затеняется. К тому же диффузионный поток на боковые поверхности нановискеров уже практически не достигает низких высот, что также снижает вклад в рост малых нановискеров за счёт перерассеяния. Однако данное свойство не всегда имеет место. При определённых условиях наступает уширение распределения по высотам нановискеров.

Как показано в [6], основными параметрами, влияющими на эволюцию распределений высот нановискеров во времени, являются длина диффузии, угол наклона источника атомов  $\theta$ , плотность заполнения под-

ложки. Этими параметрами определяются средние расстояния между нановискерами и степень затенения верхней части отдельного нановискера, способной адсорбировать атомы. Показано, что увеличение длины диффузии и угла  $\theta$  приводят к увеличению числа низких нановискеров, которые образуют первую моду распределения по высотам, и к увеличению полуширины второй моды. Уменьшение плотности заполнения подложки снижает влияние затенения нановискеров соседями и спектр высот остается одномодальным.

Кроме того, изменение поведения распределения высот с течением времени зависит от дисперсии распределения радиусов нановискеров. В [6] было показано, что для низких значений покрытия  $\Delta S = 0.1$  и одинаковых радиусов нановискеров распределения по высотам за счет перераспределения даже сужаются с течением времени. Это свойство пропадает начиная с некоторого “предельного” значения  $Vr$ . “Предельное” значение  $Vr$  зависит и от длины диффузии  $L$ , и от угла  $\theta$ .

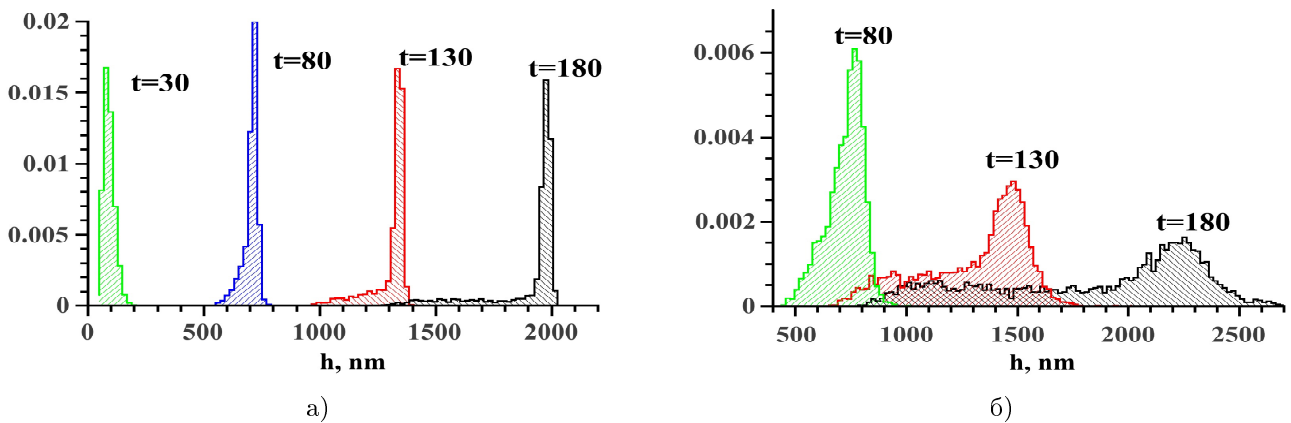


Рис. 1: Эволюция распределения высот нановискеров при  $L = 30$  нм а)  $Vr = 0.1$  б)  $Vr = 8$

Например, это видно на рис.1, где сравниваются результаты моделирования роста нановискеров для различных дисперсий распределения по радиусам. Начальные параметры задачи:  $\Delta S = 0.3$ , длина диффузии  $L = 30$  нм,  $Eh = 100$  нм и  $Vh = 600$ , здесь и далее  $\theta = 45^\circ$ , параметры распределения нановискеров по радиусам  $Er = 18$  нм, на левом рисунке  $Vr = 0.1$ , на правом —  $Vr = 8$ . На горизонтальной оси отложены высоты нановискеров в нм, на вертикальной оси — плотности распределения высот нановискеров в различные моменты времени роста. Предполагалось, что начальный момент моделирования соответствовал времени роста нановискеров в эксперименте  $t = 30$  мин. Видно, что на рис. 1а к моменту времени  $t = 80$  мин дисперсия распределения по высотам уменьшилась, с течением времени в распределении появляется малочисленный шлейф нановискеров относительно малых высот. В случае широкого распределения по радиусам распределение по высотам значительно модифицируется: большой процент нановискеров имеют относительно низкие высоты, правая мода распределения со временем медленно расширяется. Для длины диффузии  $L = 50$  даже для малых значений  $Vr = 0.1$  сужения распределения по высотам не происходит. Все численные эксперименты проведены с использованием вычислительных мощностей Сибирского суперкомпьютерного вычислительного центра ИВМиМГ СО РАН [10].

## 2 Модель коалесценции нановискеров

Исходя из экспериментальных данных и выводов работы [3] необходимо учитывать в рассматриваемой модели явление коалесценции нанопроволок. Оно обусловлено увеличением поверхностной энергии нановискеров за счет упругой энергии изгиба при слиянии двух нановискеров в один и становится энергетически выгодным, когда нанопроволоки превышают некоторую критическую длину.

При численном моделировании коалесценции используется следующий алгоритм:

0. Предварительно для каждого нановискера  $k = 1, \dots, N$  и его ближайшего соседа оценивается наименьшая высота  $h_{min}^{(k)}$ , при которой возможна их коалесценция [3]:

$$h_{min}^{(k)} = 4 \left( \frac{l_k^2}{9\gamma R_{min}^{(k)}} \frac{I_1^{(k)} I_2^{(k)}}{I_1^{(k)} + I_2^{(k)}} \right)^{1/4}, \quad (2)$$

где  $\gamma = 0.53 \cdot 10^{-2}$  нм,  $I_i^{(k)} = \pi (R_i^{(k)})^4 / 4$ ,  $i = 1, 2$ ,  $R_{min}^{(k)} = \min(R_1^{(k)}, R_2^{(k)})$ ,  $l_k$  — расстояние между нановискерами.

1. Для цилиндра с номером  $k = 1$  проверяется выполнение неравенства

$$h_{min}^{(k)} < \min(h_1^{(k)}, h_2^{(k)}), \quad (3)$$

где  $h_1^{(k)}$  и  $h_2^{(k)}$  — высота  $k$ -ого нановискера и его ближайшего соседа.

2. Если выполнено неравенство (3), то с вероятностью  $p_{coal}^{(s)}$  моделируется их объединение ( $s$  равно числу единичных нановискеров во вновь образующемся кластере). В этом случае предполагается, что образовавшийся конгломерат вновь является цилиндром с радиусом  $R^{(k)}$  и высотой  $h^{(k)}$ :

$$R^{(k)} = \sqrt{(R_1^{(k)})^2 + (R_2^{(k)})^2}, \quad h^{(k)} = \frac{h_1^{(k)} (R_1^{(k)})^2 + h_2^{(k)} (R_2^{(k)})^2}{(R^{(k)})^2}. \quad (4)$$

Центр нового нановискера  $(X^{(k)}, Y^{(k)})$  помещается в общий центр масс

$$X^{(k)} = x_1^{(k)} + P^{(k)} (x_2^{(k)} - x_1^{(k)}), \quad Y^{(k)} = y_1^{(k)} + P^{(k)} (y_2^{(k)} - y_1^{(k)}), \quad (5)$$

где

$$P^{(k)} = M_2^{(k)} / (M_1^{(k)} + M_2^{(k)}), \quad M_i^{(k)} = h_i^{(k)} (R_i^{(k)})^2, \quad i = 1, 2,$$

$(x_1^{(k)}, y_1^{(k)})$  и  $(x_2^{(k)}, y_2^{(k)})$  — координаты центров объединившихся нанокристаллов.

Если образовавшийся цилиндр имеет пересечение с соседними, то они также присоединяются к первому, образуя новый конгломерат, для которого высота, радиус и положение центра вновь пересчитываются по формулам (4), (5).

3. Для вновь образованного нановискера и нановискеров из его окрестности повторяется процедура из пункта 0.

4. Если  $k < N$ , полагаем  $k = k + 1$  и повторяем пункты 1–3.

Введем вероятность объединения нановискеров в кластер из  $N$  элементов

$$p_{coal}^{(N)} = A^{N-1},$$

где  $A$  — параметр, характеризующий среднее число одиночных нановискеров в одном конгломерате.

Повторение процедуры коалесценции происходит при увеличении средней высоты нановискеров на некоторую величину (порядка 50 нм). Следует отметить, что проверять возможность коалесценции следует не для единственного ближайшего соседа, а для всех из его ближайшей окрестности. В нашем случае — для 5–6 ближайших соседей. В этом случае пропадают искусственные ограничения на возможность коалесценции.

На рис. 2а изображена одна из реализаций случайного расположения нановискеров перед началом коалесценции и в момент, когда коалесценция нановискеров закончена, для  $\Delta S = 0.3$ ,  $A = 0.5$ , среднее число нановискеров в одном кластере равно 5–6. На рисунках 2б, 2в представлены результаты моделирования роста нановискеров с учетом коалесценции. Начальные параметры моделирования  $\theta = 45^\circ$ ,  $\Delta S = 0.3$ , длина диффузии  $L = 50$  нм,  $\mathbf{E}h(0) = 100$  нм,  $\mathbf{V}h(0) = 600$ ,  $\mathbf{E}r(0) = 12$  нм,  $\mathbf{V}r(0) = 3$ , на центральном рисунке —  $A = 0.5$ , на правом —  $A = 0.01$ , в этом случае в один кластер объединяются 2 или 3 одиночных нановискера.

Видно, что в случае  $A = 0.01$  высоты нановискеров практически равномерно распределены на широком интервале. Что плохо согласуется с экспериментом. В расчетах с параметром  $A = 0.01$  средний радиус нановискеров увеличился с 12 до 17 нм, незначительно увеличились средние расстояния между соседями. Для  $A = 0.5$  значительно возросли не только радиусы нановискеров (от 12 до 27 нм в среднем), но и расстояния между ближайшими нановискерами, что сократило эффект затенения. Этим можно объяснить различия в поведении распределения высот для различных значений параметра  $A$ . Численно полученная эволюция распределения высот нановискеров для  $A = 0.5$  качественно согласуется с экспериментальными данными, в частности, часть нановискеров замедляет свой рост из-за затенения соседними элементами ансамбля, и полуширина пика распределения высот практически не увеличивается с течением времени.

В предыдущих расчетах начальные высоты нановискеров выбирались из распределения, соответствующего некоторому экспериментально полученному распределению в момент времени роста  $t = 30$  мин [2]. Так

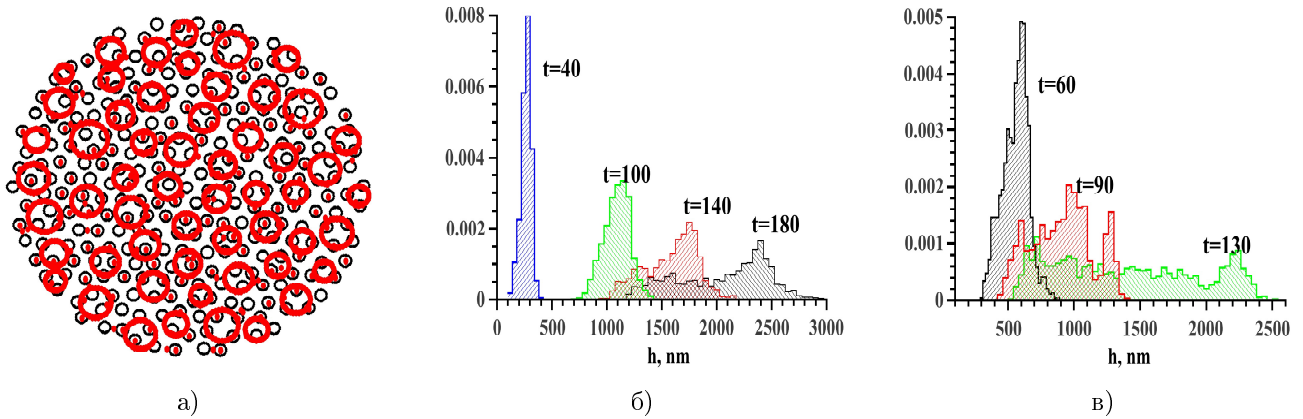


Рис. 2: а) Реализация случайного расположения нановискеров для  $\Delta S = 0.3$ ,  $A = 0.5$  черные мелкие окружности — начальное положение нановискеров, крупные окружности — положение в конечный момент времени моделирования б) Эволюция распределения высот нановискеров с учетом коалесценции  $\Delta S = 0.3$ ,  $Er(0) = 12$ ,  $Vr(0) = 3$ ,  $A = 0.5$ ,  $L = 50$  нм, в) то же, что на рисунке б) для  $A = 0.01$

как экспериментальное определение наноскопических величин сопряжено со значительными техническими трудностями и приводит к недостаточной точности определения параметров начального распределения высот и радиусов нановискеров, введем в нашу модель этап образования стабильных нановискеров. Будем считать, что вновь образованный элемент ансамбля нановискеров также является цилиндром, но его высота равна радиусу. Моменты появления новых элементов распределены в некотором временном промежутке. Такая модель позволит проанализировать влияние скорости нуклиации на эволюцию высот нановискеров.

### 3 Алгоритм “зарождения” нановискеров и тестовые расчеты

Изменим начальные условия численного эксперимента. Будем считать, что время появления нового отдельного нанокристалла — это момент времени, когда рост островка GaN от трехмерного переходит к одномерному. Моделью нановискера остается прямой круговой цилиндр, но его начальная высота совпадает с радиусом. “Зарождение” нанокристаллов будем моделировать поэтапно с заданными временными промежутками между появлением новых.

Алгоритм моделирования:

Шаг 1. В момент времени  $t = 0$  моделируется “зарождение” заданного числа нановискеров  $K_i < N$ ,  $i = 0$  в случайных точках согласно алгоритму из раздела 1. Здесь  $N$  — максимально возможное число цилиндров на подложке,  $i$  — номер временного шага.

Шаг 2. Производится рост  $K_i$  нановискеров за счет моделирования  $N_{atom}$  траекторий движения атомов Ga. Полагаем, что атом, достигший поверхности подложки адсорбируется на ней с вероятностью  $P_{ad}$ .

Шаг 3. Полагаем  $i = i + 1$ . Вычисляем объем атомов  $V_{i-1}$ , адсорбировавшихся на поверхности подложки на шаге 2. Производим “зарождение” новых нановискеров. Их число  $K_i^{(n)}$  выбирается таким образом, чтобы объем вновь образовавшихся нановискеров был не больше  $V_{i-1}$ :  $\sum_{j=1}^{K_i^{(n)}} \pi R_j^3 \leq V_{i-1}$ . Вероятность адсорбции атомов на подложке  $P_{ad}$  является параметром, ограничивающим число образующихся нанокристаллов  $K_i^{(n)}$  в единицу времени, то есть характеризует скорость зарождения нанокристаллов. Общее число нановискеров на подложке  $K_i = K_{i-1} + K_i^{(n)}$  после  $i$ -ого этапа зарождения.

Шаг 4. Для каждого нановискера  $k = 1, \dots, K_i$  и его ближайшего соседа вычисляется наименьшая высота по формуле (2), при которой возможна коалесценция. Повторяются последовательно шаги 2–4, пока  $K_i < N$ .

Так как при увеличении высоты нанокристаллов и плотности заполнения подложки  $\Delta S$  уменьшается объем атомов, адсорбирующихся на подложке, то  $K_i^{(n)}$  в среднем уменьшается с течением времени. Согласно экспериментальным данным [3], когда плотность нановискеров на подложке достигает наибольших значений  $\Delta S \approx 0.2 - 0.3$ , средняя высота ансамбля нановискеров равна примерно  $Eh \approx 100 - 150$ . Это соответствует вероятности адсорбции в рассматриваемой численной модели  $P_{ad} \approx 0.05 - 0.15$ . На рис. 3 даны распределения высот нановискеров при моделировании “зарождения” и роста нановискеров с учетом

коалесценции. Вероятность адсорбции атомов на подложке равна  $P_{ad} = 0.1$ ,  $Er(0) = 12$  нм. На рисунке а) представлена плотность распределения высот в момент времени  $t = 130$  мин для  $L = 30$  нм,  $A = 0.5$ , и различных дисперсий начального распределения радиусов-высот нанопроволок. На вставке представлена плотность распределения радиусов в момент  $t = 130$  мин — она практически одинакова для всех представленных численных экспериментов. На рисунках б) и в) представлена эволюция распределения высот нановискеров для тех же начальных данных, кроме  $Vr(0) = 3$ ,  $A = 0.3$ . На центральном рисунке длина диффузии  $L = 30$  нм, на правом —  $L = 50$  нм.

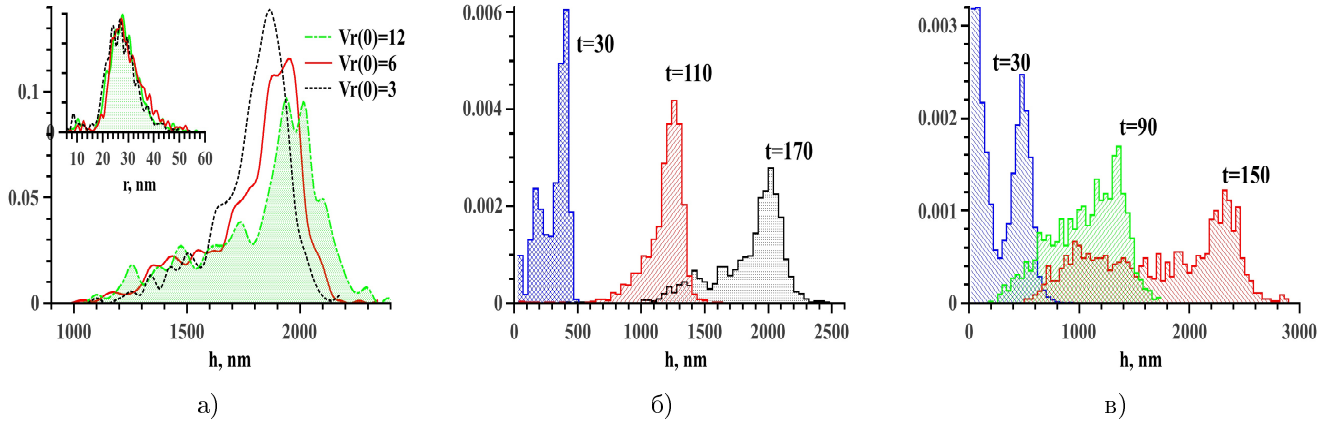


Рис. 3: а) Распределение высот и радиусов нановискеров в момент времени  $t = 130$  мин,  $A = 0.5$ ,  $L = 30$  нм. б) Эволюция распределения высот нановискеров с момента “зарождения” с учетом коалесценции  $A = 0.3$ ,  $Vr(0) = 3$ ,  $P_{ad} = 0.1$  длина диффузии  $L = 30$  нм, в) то же, что на рис. б, но  $L = 50$  нм

Для малых значений параметра  $A$  величина дисперсии распределения по радиусам значительно влияет на характер эволюции распределения высот. Это видно из рис. 4а и б, на котором представлено распределение высот нановискеров к моменту времени моделирования  $t = 130$  минут для различных значений дисперсии начального распределения радиусов  $Vr(0)$  и длин диффузии  $L = 30$  нм (левый) и  $L = 50$  нм (средний). Остальные параметры задачи —  $\Delta S = 0.3$ ,  $A = 0.01$ ,  $P_{ad} = 0.1$ ,  $Er(0) = 12$  нм. На вставке левого рисунка представлена плотность распределения радиусов в момент  $t = 130$  мин. Как видно из рис. 3а для  $A = 0.5$  различия в  $Vr(0)$  оказывают более слабое влияние на эволюцию распределения высот, чем для  $A = 0.01$ .

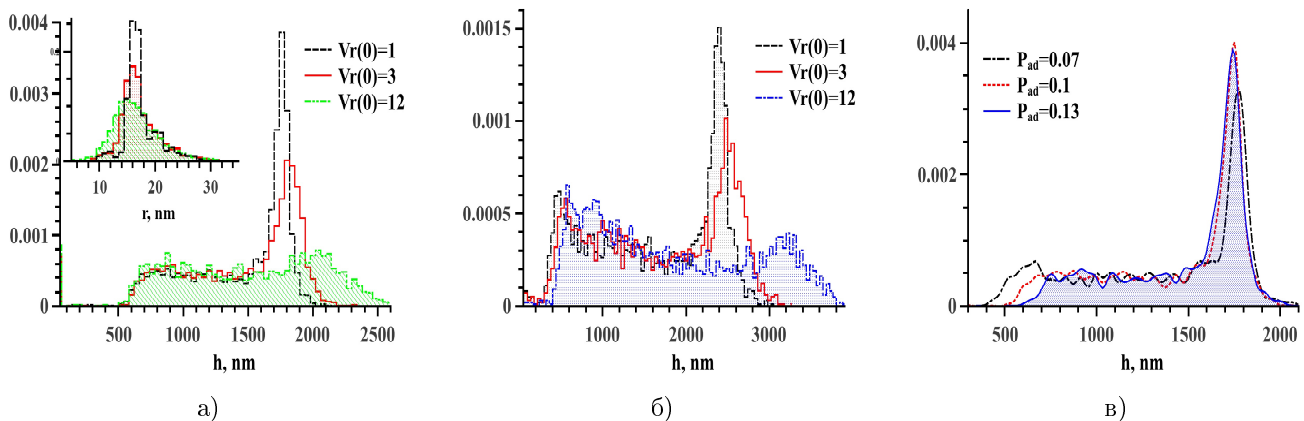


Рис. 4: Плотность распределения высот и радиусов нановискеров к моменту времени  $t = 130$  мин для параметров задачи  $\Delta S = 0.3$ ,  $A = 0.01$ , а)  $P_{ad} = 0.1$ ,  $L = 30$  нм, различные дисперсии начального распределения радиусов  $Vr(0)$ . б) то же, что на рисунке а, но  $L = 50$  нм. в)  $Vr(0) = 1$ ,  $L = 30$  нм, различные вероятности адсорбции подложкой  $P_{ad}$ .

Кроме того, длительность временного промежутка, в течении которого появляются новые нановискеры, оказывает влияние на поведение распределения высот во времени. Эта особенность представлена на рис. 4в. В данном эксперименте менялось значение вероятности адсорбции атомов Ga на подложке с  $P_{ad} = 0.07$  до  $P_{ad} = 0.13$ ,  $\Delta S = 0.3$ ,  $A = 0.01$ ,  $L = 30$  нм,  $Vr(0) = 1$ .

## Заключение

В работе представлена стохастическая модель роста нановискеров методом молекулярно - лучевой эпитаксии на основе механизма поверхностной диффузии, перераспределения и вероятности выживания адатомов, в которой учитывается явление коалесценции нановискеров.

Представлены результаты численного моделирования для двух режимов коалесценции: в первом большая часть конгломератов состоит из двух одиночных нанокристаллов, во втором в один объединяются 5 - 6 одиночных нановискеров. В первом случае численные результаты не согласуются с экспериментом, во втором имеют качественное согласие.

Предложена модификация алгоритма, в которой начальным этапом моделирования является момент образования первого стабильного нановискера. Показано, что при определенных параметрах такой модели численные результаты качественно согласуются с экспериментальными данными для обоих режимов коалесценции. Показано, что на поведение высот нановискеров для  $A = 0.01$  значительно влияет величина среднеквадратических отклонений начального распределения радиусов, в отличие от случая  $A = 0.5$ . От длительности времени “зарождения” зависят высоты наиболее низких нановискеров.

## Список литературы

- [1] S. Barth, F. Hernandez-Ramirez, D. D. Holmes, A. Romano-Rodriguez, Synthesis and applications of one-dimensional semiconductors, Prog. Mater. Sci., v. 55 (2010), p. 563.
- [2] Sergio Fernandez-Garrido, Vladimir M. Kaganer, Karl K. Sabelfeld, Tobias Gotschke, Javier Grandal, Enrique Calleja, Lutz Geelhaar, and Oliver Brandt. Self-regulated radius of spontaneously formed GaN nanowires in molecular beam epitaxy. Nano Letters, 2013, 13 (7), pp 3274–3280.
- [3] Vladimir M. Kaganer, Sergio Fernandez-Garrido, Pinar Dogan, Karl K. Sabelfeld, and Oliver Brandt. Nucleation, growth and bundling of GaN nanowires in molecular beam epitaxy: Disentangling the origin of nanowire coalescence. Nano Letters, 16 (2016), N6, 3717–3725.
- [4] J. Ristić, E. Calleja, S. Fernández-Garrido, L. Cerutti, A. Trampert, U. Jahn, K. H. Ploog. On the mechanisms of spontaneous growth of III-nitride nanocolumns by plasma-assisted molecular beam epitaxy, J. Cryst. Growth, v.310 (2008), p.4035.
- [5] Karl K. Sabelfeld. Splitting and survival probabilities in stochastic random walk methods and applications, Monte Carlo Methods Appl. 2016; 22 (1):55–72.
- [6] K.K. Sabelfeld, E.G. Kablukova. Stochastic simulation of nanowire growth in plasma-assisted molecular beam epitaxy. Computational Materials Science, 125 (2016), 284–296.
- [7] K.K. Sabelfeld, V. M. Kaganer, F. Limbach, P. Dogan, O. Brandt, L. Geelhaar, H. Riechert. Height self-equilibration during the growth of dense nanowire ensembles: Order emerging from disorder. Appl. Phys. Lett. 103, 133105 (2013)
- [8] The best known packings of equal circles in a circle <http://www.packomania.com/cgi/cgi.html>
- [9] Назаренко М.В., Сибирев Н.В., Дубровский В.Г. Самосогласованная модель роста и кристаллической структуры нитевидных нанокристаллов с учетом диффузии адатомов. Журнал технической физики 81.2 (2011): 153–156.
- [10] Сибирский суперкомпьютерный центр института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, <http://www2.sccc.ru/>

*Карл Карлович Сабельфельд — д.ф.-м.н., гл. науч.сотр. Института  
вычислительной математики и математической геофизики СО РАН;  
e-mail: karl@osmf.sccc.ru;*

*Евгения Геннадьевна Каблукова — к.ф.-м.н., науч.сотр. Института вычислительной  
математики и математической геофизики СО РАН  
e-mail: kablukova@sscc.ru.*

*Дата поступления — 17 мая 2017 г.*