

Министерство высшего образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Выпускная квалификационная работа бакалавра / магистра
**Моделирование процесса капельной эпитаксии квантовых
колец и исследование влияния условий роста на их форму**

Направление 11.04.04 «Электроника и нанoeлектроника»
Образовательная программа «Название образовательной программы»

Выпускник: Яшин Артемий Валерьевич

Подпись: _____

Научный руководитель:

к.ф.-м.н., доцент кафедры физики конденсированных сред
ИНТЭЛ НИЯУ МИФИ, Фамилия И.О.

Подпись: _____

И.о. заместителя заведующего кафедрой:

д.ф.-м.н., профессор кафедры физики конденсированных сред
ИНТЭЛ НИЯУ МИФИ, Никитенко В.Р.

Подпись: _____

Москва

2025 г.

Содержание

Введение	2
Цель и задачи	3
Глава 1. Теоретические основы капельной эпитаксии квантовых колец	5
1.1. Капельная эпитаксия: физика и стадии роста	5
1.2. Квантовые кольца: геометрия, свойства, эффекты	6
1.3. Влияние условий роста на морфологию квантовых колец	10
1.4. Современные модели роста квантовых колец	13
1.5. Обоснование выбора подхода к моделированию	16
Глава 2. Физико-математическая модель	19
2.1. Основные уравнения диффузии и реакций	19
2.2. Распределение потока галлия из капли	21
2.3. Уравнение изменения радиуса капли	26
Глава 3. Теория и основные уравнения	29
3.1. Раздел 1	29
3.2. Раздел 2	29
Глава 4. Численные методы и алгоритмы	30
4.1. Раздел 1	30
4.2. Раздел 2	30
Глава 5. Результаты и обсуждение	32
Выводы	33
Заключение	33

Введение

Современное развитие нанотехнологий требует всё более точного контроля над структурой и формой наносистем. Особый интерес в этой области вызывают низкоразмерные квантовые структуры, такие как квантовые точки, нанонити и кольца. Среди них квантовые кольца выделяются своей замкнутой топологией и ярко выраженными квантовыми эффектами, включая эффект Ахаронова–Бома, пространственное разделение электронов и дырок, а также высокую чувствительность к внешним полям. Эти свойства делают кольцевые структуры перспективными кандидатами для использования в квантовых сенсорах, криптографии, системах хранения информации и лазерах на основе межзонных переходов [1].

Создание таких структур возможно с помощью различных подходов, включая рост по механизму Штрэнски–Крастанова, частичное осаждение и отжиг, но одним из наиболее гибких и управляемых методов является капельная эпитаксия. Эта технология была предложена Koguchi и соавторами в 1991 году [2] и позволяет формировать трёхмерные наноструктуры без необходимости напряжённого слоя. Метод заключается в осаждении капель материала группы III (например, Ga) в вакуумной камере молекулярно-лучевой эпитаксии, после чего они преобразуются в кристаллические структуры за счёт воздействия атомов группы V (например, As).

Одним из ключевых преимуществ капельной эпитаксии является широкий диапазон управляемых форм, включая симметричные точки, вытянутые кольца, чашеобразные структуры и полые оболочки. Тем не менее, такие формы получаются не всегда: результаты роста чувствительны к условиям, включая температуру подложки, величину потока мышьяка, временные интервалы подачи компонентов и характеристики самой капли (объём, радиус, контактный угол). В работе [3] показано, что незначительные изменения этих параметров приводят к различным морфологиям кольца — от замкнутого симметричного обода до слабо выраженной асимметричной структуры. Аналогичную чувствительность обнаружили и Rastelli

и соавт. [4], исследовавшие переход от квантовой точки к кольцу при частичном пассивировании и отжиге.

Формирование кольца из капли — это сложный физико-химический процесс, в котором участвуют: диффузия Ga и As по поверхности подложки, реакция между ними с образованием кристаллической решётки, десорбция мышьяка в вакуум, уменьшение радиуса капли по мере отдачи атомов Ga, а также геометрические эффекты, связанные с капельным углом и распределением давления.

Понимание этих процессов невозможно без надёжной количественной модели. Качественные гипотезы, основанные на стационарном потоке или равномерной подаче атомов, не позволяют объяснить наблюдаемое разнообразие форм. Здесь важна локальность потока атомов Ga — он сконцентрирован вблизи поверхности капли. Пространственная и временная изменчивость этого профиля напрямую влияет на геометрию кольца.

На практике такое моделирование имеет прикладное значение: оно позволяет прогнозировать форму кольца до проведения эксперимента, оптимизировать параметры роста, а также адаптировать технологию под целевые оптические и электронные свойства. Более того, численная модель может быть использована для решения обратной задачи — подбора условий роста под заданную морфологию.

Таким образом, актуальность настоящей работы определяется необходимостью построения и исследования физико-математической модели роста квантовых колец методом капельной эпитаксии, учитывающей локализованный поток атомов Ga, диффузию, реакционную кинетику, изменение формы капли и влияние внешних параметров роста.

Цель и задачи

Цель исследования заключается в разработке и реализации численной модели капельной эпитаксии квантовых колец с учётом пространственно-временной

эволюции радиуса капли и распределения концентраций атомов Ga и As, а также в анализе влияния условий роста на морфологию конечной структуры. Дополнительно целью является программная реализация модели и визуализация полученных результатов.

Для достижения указанной цели были поставлены следующие задачи:

1. Исследовать физические механизмы формирования квантовых колец в рамках капельной эпитаксии, включая диффузию, десорбцию, реакционную кинетику и геометрию капли.
2. Построить математическую модель на основе системы дифференциальных уравнений, описывающих поведение концентраций Ga и As и изменение радиуса капли во времени.
3. Разработать численный алгоритм на основе конечно-разностной схемы (схемы Эйлера) для решения системы уравнений.
4. Реализовать алгоритм в виде программы на языке Rust, включая:
 - дискретизацию сетки по времени и пространству;
 - вычисление профиля высоты кольца;
 - сохранение результатов в виде файлов концентраций, высот и радиуса.
5. Провести серию численных экспериментов для анализа влияния параметров роста (температура, флюкс мышьяка, ширина гауссова распределения, угол смачивания) на форму кольца.
6. Сравнить качественные характеристики полученных профилей с экспериментальными данными из научной литературы.

Глава 1. Теоретические основы капельной эпитаксии квантовых колец

1.1 Капельная эпитаксия: физика и стадии роста

Капельная эпитаксия является разновидностью молекулярно-лучевой эпитаксии и используется для формирования наноразмерных структур — квантовых точек, колец, а также более сложных ансамблей. Основной особенностью метода является пространственное и временное разделение подачи атомов III и V групп. Это позволяет управлять процессом образования капель, их трансформацией и последующей кристаллизацией [5, 2].

Процесс капельной эпитаксии условно делится на несколько этапов:

- 1. Формирование капли.** На предварительно подготовленную поверхность подложки (например, GaAs) осаждаются атомы элемента III группы (чаще всего — галлия) при выключенном потоке V-группы. В отсутствие аннигиляции или немедленной реакции атомы Ga собираются в жидкие капли, распределяющиеся по поверхности в зависимости от температуры, плотности потока и состояния подложки.
- 2. Кристаллизация.** После формирования капли открывается поток мышьяка, и начинается стадия кристаллизации. Атомы As взаимодействуют с жидкой каплей Ga, образуя твердую фазу GaAs. На этом этапе большое значение имеет конкуренция между двумя путями роста: прямой реакцией внутри капли и кристаллизацией на поверхности в результате диффузии атомов.
- 3. Рост структуры.** В зависимости от соотношения этих процессов, геометрии капли и внешних условий может быть реализован рост квантовой точки, кольца или их комбинации. Так, преобладание поверхностной диффузии

атомов Ga ведёт к формированию кольца, тогда как внутренняя реакция способствует образованию компактной точки.

4. **Дополнительная обработка.** При необходимости структура может быть подвергнута термическому отжигу или заращиванию покровным слоем, что изменяет её морфологию, симметрию и оптические свойства. Например, частичный отжиг может привести к перераспределению материала и трансформации точки в кольцо.

Морфология образующихся структур чувствительна к ряду технологических параметров: температуре подложки, интенсивности и длительности потока компонентов, времени экспозиции, а также к типу и ориентации подложки. Это делает капельную эпитаксию не только удобным, но и гибким инструментом для целенаправленного синтеза наноструктур с заданными свойствами [6].

Стадии капельной эпитаксии наглядно представлены на схематическом изображении, заимствованном из статьи [5] (рис. 1.1). На нём показан процесс формирования капель, возможные пути кристаллизации и типичные формы наноструктур.

Дополнительно, на рис. 1.2 представлена последовательность реальных SEM-изображений, иллюстрирующая трансформацию капли Ga во времени под действием потока As, в том числе образование двойного кольца. Эти данные наглядно подтверждают описанный выше механизм.

1.2 Квантовые кольца: геометрия, свойства, эффекты

Квантовые кольца (КК) — это наноструктуры с тороидальной симметрией и выраженным центральным отверстием, отличающиеся от квантовых точек своей геометрией и спектром состояний. Такая топология существенно влияет на свойства локализованных в кольце электронов и дырок. В отличие от точек, где части-

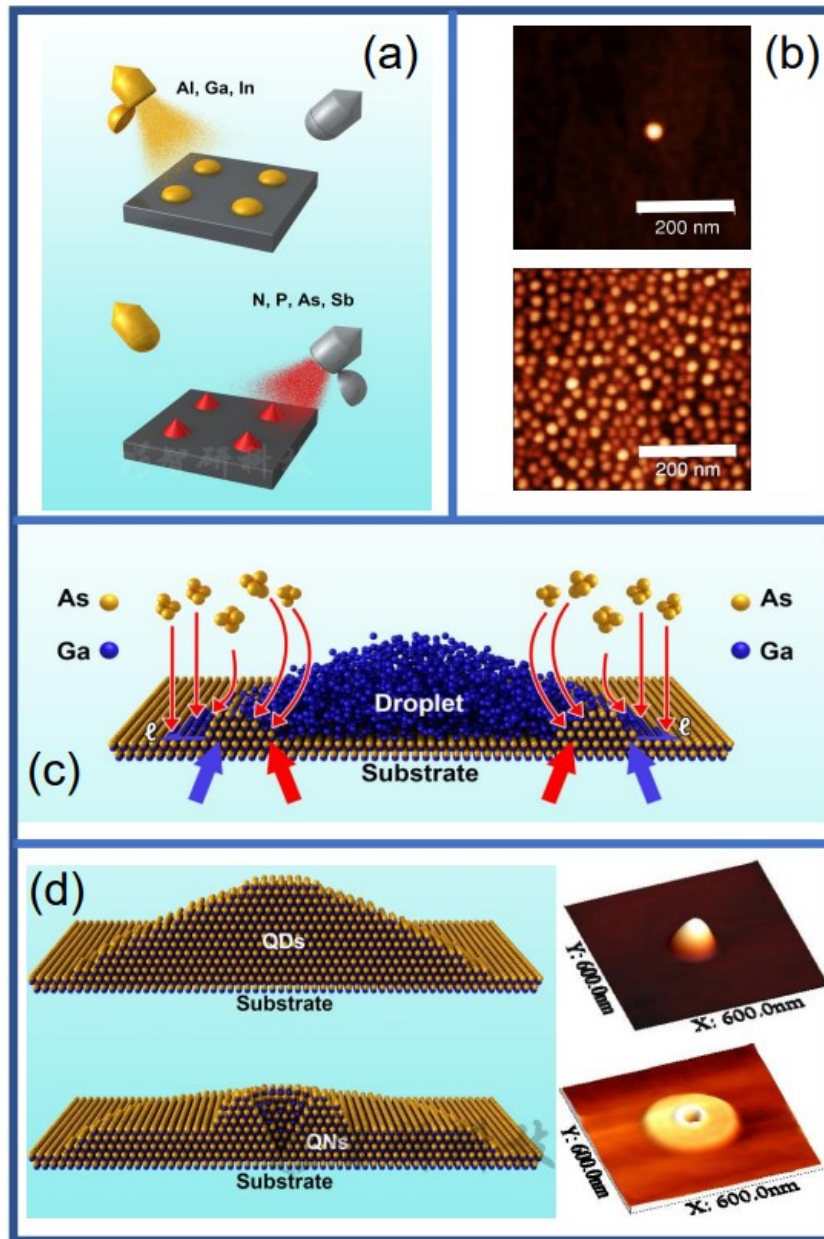


Рис. 1.1: Стадии капельной эпитаксии (воспроизведено из [5]): (а) схема последовательного осаждения атомов III и V группы, (б) AFM-изображения капель с различной плотностью, (с) два механизма роста — поглощение атомов As каплями и диффузия Ga наружу, (д) формирование квантовой точки или кольца в зависимости от доминирующего механизма.

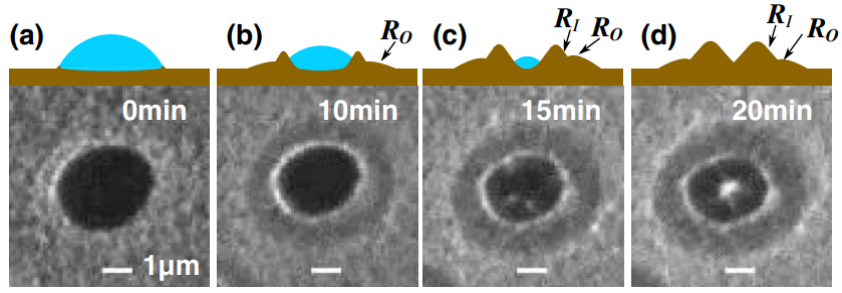


Рис. 1.2: Эволюция капли Ga и формирование квантового кольца во времени при капельной эпитаксии. Изображения получены методом МЕМ. Виден переход от капли к юбкообразной структуре и далее к двойному кольцу. Воспроизведено из [3].

цы локализируются в центре, в кольце они прижаты к периферии, что приводит к целому ряду квантовых эффектов.

Один из наиболее ярких эффектов — это эффект Ааронова–Бома, при котором энергетические уровни квантового кольца осциллируют в зависимости от магнитного потока, проходящего через его центр. Уравнение для энергии носителя в кольце радиуса r имеет вид:

$$E_M = \frac{\hbar^2}{2m^*r^2} \left(M + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2,$$

где M — магнитное квантовое число, m^* — эффективная масса, Φ — магнитный поток, $\Phi_0 = h/e$ — квант потока.

Наличие топологического отверстия также влияет на пространственное распределение плотности состояний, запрещая плотную локализацию в центре и изменяя характер волновых функций. Это приводит к специфическим оптическим переходам: изменениям в ширине линии фотолюминесценции, поляризационной анизотропии, а также чувствительности к направлению магнитного поля.

Согласно экспериментальным данным [7], кольца на основе GaAs/AlGaAs демонстрируют необычную температурную зависимость фотолюминесценции: при нагревании от 20 до 70 К интенсивность ФЛ растёт, а ширина линии уменьшается, что связывается с термоактивацией носителей и неоднородной формой кольца.

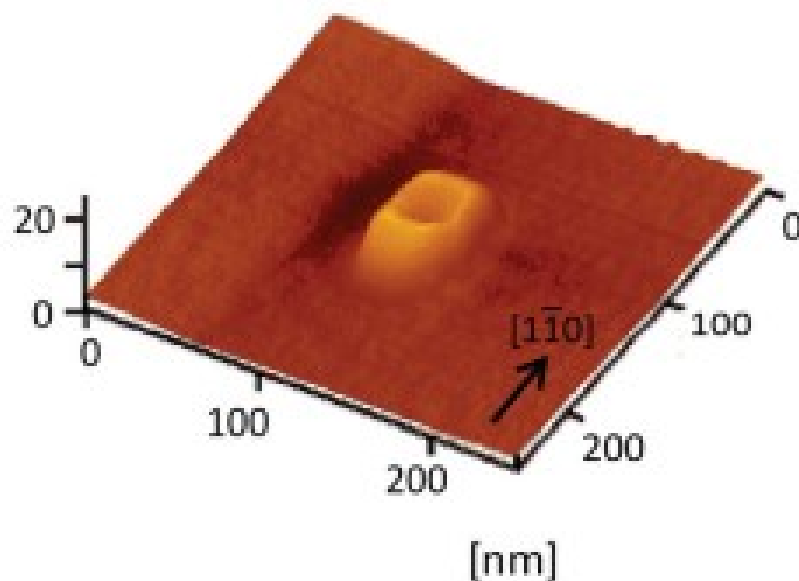


Рис. 1.3: AFM-изображения одиночного квантового кольца (вверху) и кольца с точкой в центре (внизу), полученных методом капельной эпитаксии. Воспроизведено из работы [8].

Кроме того, благодаря высокой симметрии кольцевой формы, КК демонстрируют слабо выраженную поляризацию испускаемого света, что делает их удобными для задач квантовой фотоники.

Энергетические и оптические свойства КК зависят от их геометрических параметров — внешнего и внутреннего радиусов, толщины, глубины. Геометрия, в свою очередь, может быть определена, например, методом атомно-силовой микроскопии. На рис. 1.3 представлен AFM-изображение одиночного квантового кольца, полученного в работе [8].

Квантовые кольца находят применение в квантовой криптографии, в качестве однофотонных источников, а также в схемах логических вентилей, использующих спиновые и орбитальные степени свободы. Их особые геометрические и магнитные свойства делают их также перспективными для реализации твердотельных квантовых битов.

1.3 Влияние условий роста на морфологию квантовых колец

Морфология квантовых колец, формируемых методом капельной эпитаксии, определяется множеством взаимосвязанных параметров. Помимо температуры подложки и потока мышьяка, большое значение имеют: объём капли, ориентация кристаллической подложки, режим подачи компонентов, параметры десорбции и свойства мокрого слоя. Управление этими факторами позволяет синтезировать кольца с заданной формой, размерами и симметрией.

Одним из наиболее исследованных параметров является температура подложки. При низких температурах ($T < 250\text{ }^{\circ}\text{C}$) ограниченная диффузия атомов Ga приводит к формированию компактных точек или толстостенных колец. При увеличении температуры ($T \approx 300\text{ }^{\circ}\text{C}$) диффузия усиливается, что способствует расширению кольца и образованию симметричной структуры. Однако при слишком высоких температурах ($T > 330\text{ }^{\circ}\text{C}$) доминирует десорбция мышьяка, что может привести к неравномерной кристаллизации и даже исчезновению кольца [6, 9].

Интенсивность потока мышьяка (или эффективное давление As_4) регулирует скорость кристаллизации. Высокий поток ведёт к мгновенному насыщению капли As и образованию точек. Напротив, при умеренном или ступенчатом потоке As возможно последовательное формирование двойных или концентрических колец, как показано в работах Zhou et al. [3] и Fan и Ma [10].

Схожие результаты были получены в недавней обзорной работе Fan и Ma [10], где показано, как изменяются формы GaAs наноструктур (точки, кольца, двойные кольца, углубления) при варьировании температуры и потока As. При $150\text{ }^{\circ}\text{C}$ формируются точки, при $200\text{ }^{\circ}\text{C}$ — кольца, а при $300\text{ }^{\circ}\text{C}$ наблюдаются двойные кольца и кольцевые углубления. Аналогично, при фиксированной температуре изменение потока As также приводит к трансформации форм.

Помимо температуры подложки и потока мышьяка, на морфологию квантовых колец существенное влияние оказывают и другие параметры роста. К ним

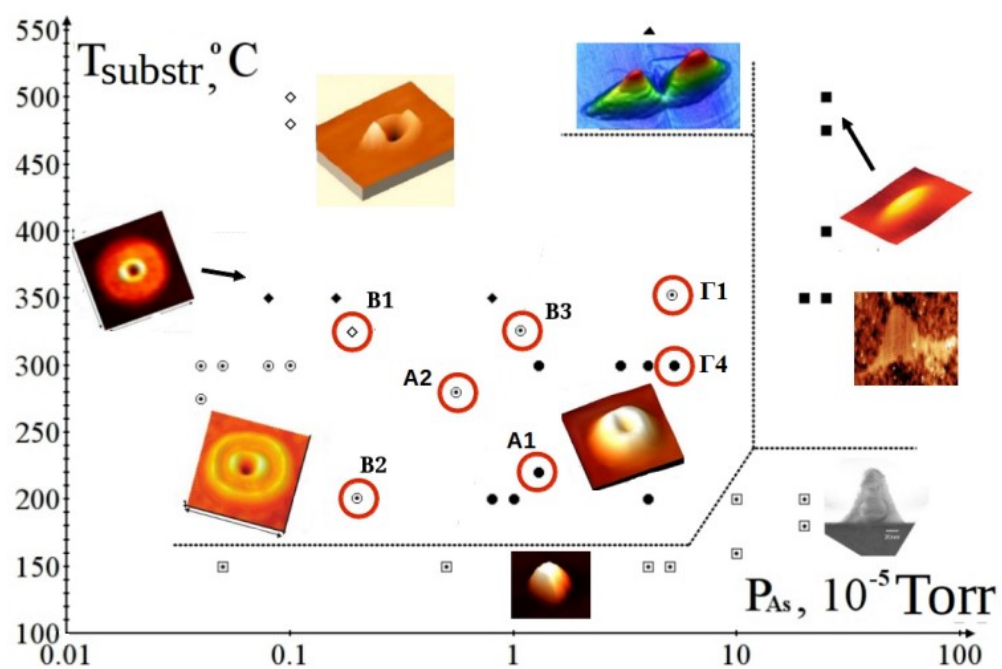


Рис. 1.4: Морфология квантовых колец GaAs/AlGaAs в зависимости от температуры подложки и давления мышьяка. Изображения структур заимствованы из работ [11, 12, 9].

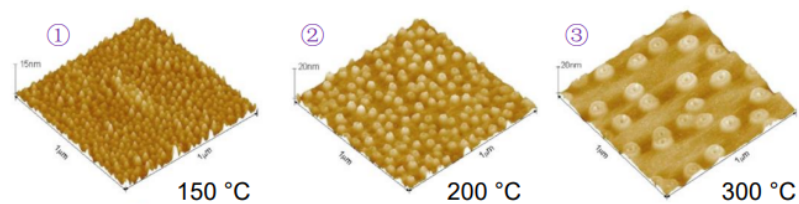


Рис. 1.5: Изменение формы квантовых колец GaAs в зависимости от температуры. Воспроизведено из [10], рис. 2(е).

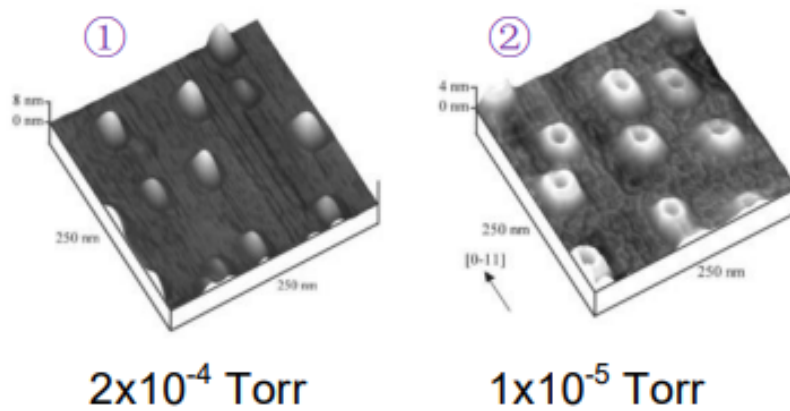


Рис. 1.6: Изменение формы квантовых колец GaAs в зависимости от давления мышьяка. Воспроизведено из [10], рис. 2(f).

относятся:

- **Объём капли Ga.** Определяет форму и ширину кольца. При малом объёме формируются узкие симметричные кольца, при увеличенном — кольца с размытыми границами или асимметрией. Существенное влияние оказывает начальный радиус и масса капли [3].
- **Ориентация подложки.** На подложках GaAs(001) и GaAs(111) наблюдаются различия в симметрии кольцевых структур. Анизотропия поверхностной энергии и направленности диффузии приводит к вытягиванию кольца вдоль кристаллографических осей [8].
- **Наличие мокрого слоя.** Если до или во время кристаллизации присутствует остаточный слой Ga или GaAs, он может «заполнять» центр кольца, делая профиль менее глубоким. В его отсутствие кольцо формируется с резкой ямой в центре [6].
- **Режим подачи мышьяка.** При непрерывной подаче формируются одиночные кольца, а при ступенчатой или импульсной — двойные и многокольцевые структуры. Режим подачи влияет на скорость кристаллизации и измене-

ние границ капли [13].

- **Десорбция мышьяка.** При повышенных температурах атомы As быстро десорбируются с поверхности до завершения реакции, что может привести к неравномерной или частично разрушенной кольцевой морфологии [10].

Таким образом, морфология квантовых колец — это результат тонкого баланса между параметрами роста, диффузией, реакцией и десорбцией. Только комплексное управление этими условиями позволяет воспроизводимо получать наноструктуры с нужной формой и функциональностью.

1.4 Современные модели роста квантовых колец

Формирование квантовых колец при капельной эпитаксии описывается с помощью различных теоретических моделей, среди которых важное место занимают численные методы, позволяющие воспроизводить как морфологию структур, так и их временную эволюцию. Ниже приведены три модели, демонстрирующие современные подходы к описанию этого процесса.

1. Модель Zhou и соавт. (2013): профиль высоты кольца и его воспроизведение численной моделью

В работе Zhou и соавт. [3] представлена численная модель, основанная на балансе потоков галлия и мышьяка, позволяющая воспроизводить профиль высоты GaAs-кольца при различных условиях роста. Модель учитывает параметры температуры, времени и потока компонентов, а также вклад внешнего кольца. На рисунке 1.7 показано сравнение между экспериментальными профилями, измеренными с помощью атомно-силовой микроскопии (слева), и результатами расчётов (справа). Хорошее соответствие демонстрирует физическую состоятельность предложенной модели.

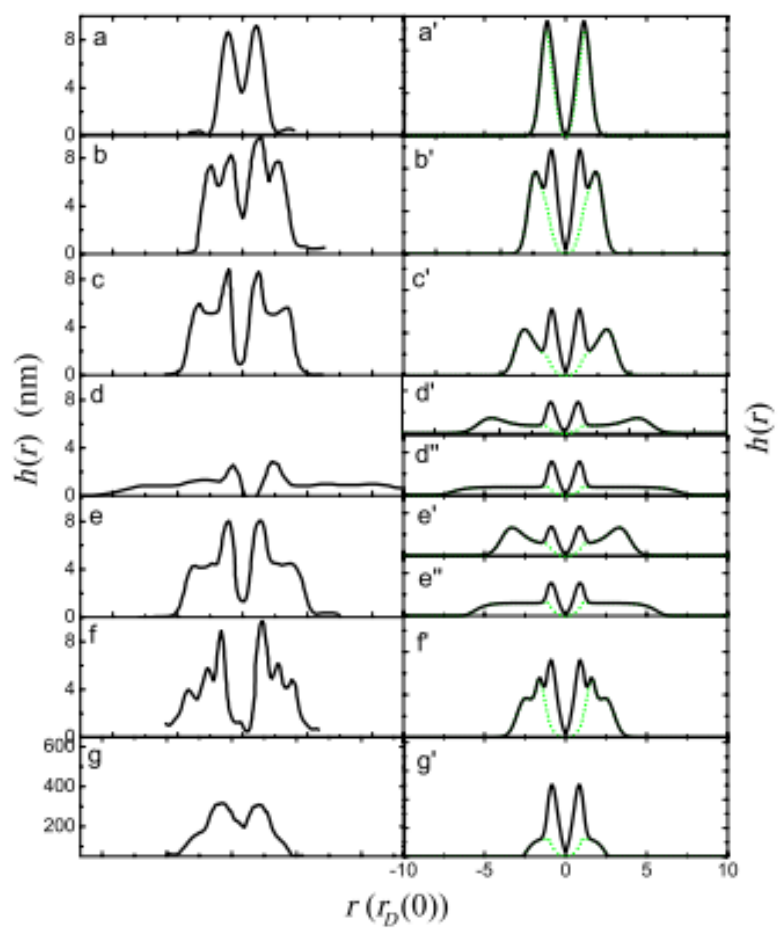


Рис. 1.7: Сравнение экспериментальных (слева) и рассчитанных (справа) профилей высоты кольцевых структур GaAs. Воспроизведено из [3], рис. 4.

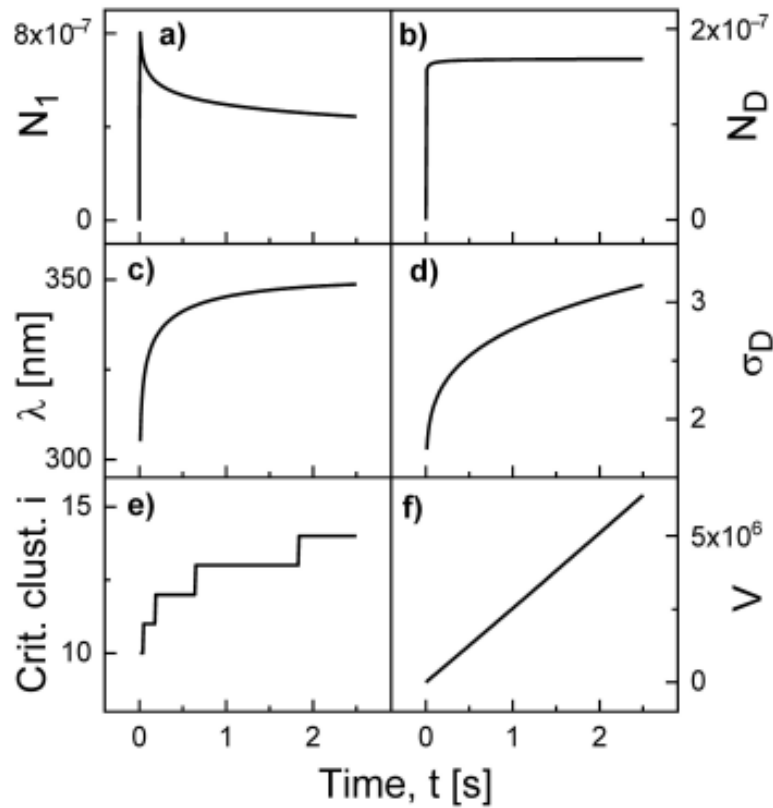


Рис. 1.8: Временная эволюция параметров нуклеации и роста капли: (a--f) — плотность мономеров, плотность капель, длина диффузии, число захвата, критический размер, объём капли. Воспроизведено из [14], рис. 2.

2. Модель Dubrovskii и соавт. (2021): эволюция капли во времени на стадии нуклеации

Dubrovskii и коллеги [14] предложили кинетическую модель образования капель при капельной эпитаксии, основанную на решении системы дифференциальных уравнений, описывающих плотность мономеров, капель, длину диффузии и объём сформировавшейся капли. На рисунке 1.8 представлена временная эволюция шести ключевых параметров: N_1 — плотность мономеров, N_D — плотность капель, λ — длина диффузии, σ_D — число захвата, i — критический размер и V — объём капли. Модель применима к описанию начальной стадии формирования кольца.

3. Модель Shwartz и соавт. (2018): Монте-Карло моделирование кольца во вре-

мени

Shwartz и соавт. [15] разработали модель на основе кинетического Монте-Карло, позволяющую отследить детальную эволюцию кольца во времени. Модель включает осаждение As, поверхностную и объемную кристаллизацию GaAs, а также перераспределение материала вдоль границы капли. На рисунке 1.9 представлены поперечные сечения (слева) и проекции сверху (справа) кольца в разные моменты времени — от $t = 2.2$ с до $t = 200$ с. Наглядно видно, как на ранней стадии происходит осаждение As внутрь капли, а затем формируется кольцевая структура по её краю.

Эти три модели дают комплексное представление о различных аспектах формирования кольцевых структур — от кинетики капли до профиля кольца и его роста во времени. В следующем разделе будет представлена реализованная в данной работе модель, объединяющая элементы этих подходов.

1.5 Обоснование выбора подхода к моделированию

Анализ современных теоретических и численных моделей формирования квантовых колец показывает, что каждая из них акцентирует внимание на отдельных аспектах процесса: диффузии компонентов, нуклеации капель, реакции в объёме или на границе капли, геометрии профиля.

В данной работе было решено сосредоточиться на описании морфологии кольца как результате пространственно-временного взаимодействия компонентов III и V групп с учётом:

- диффузии атомов Ga и As на поверхности;
- их химического взаимодействия с образованием GaAs;
- эволюции формы структуры во времени;

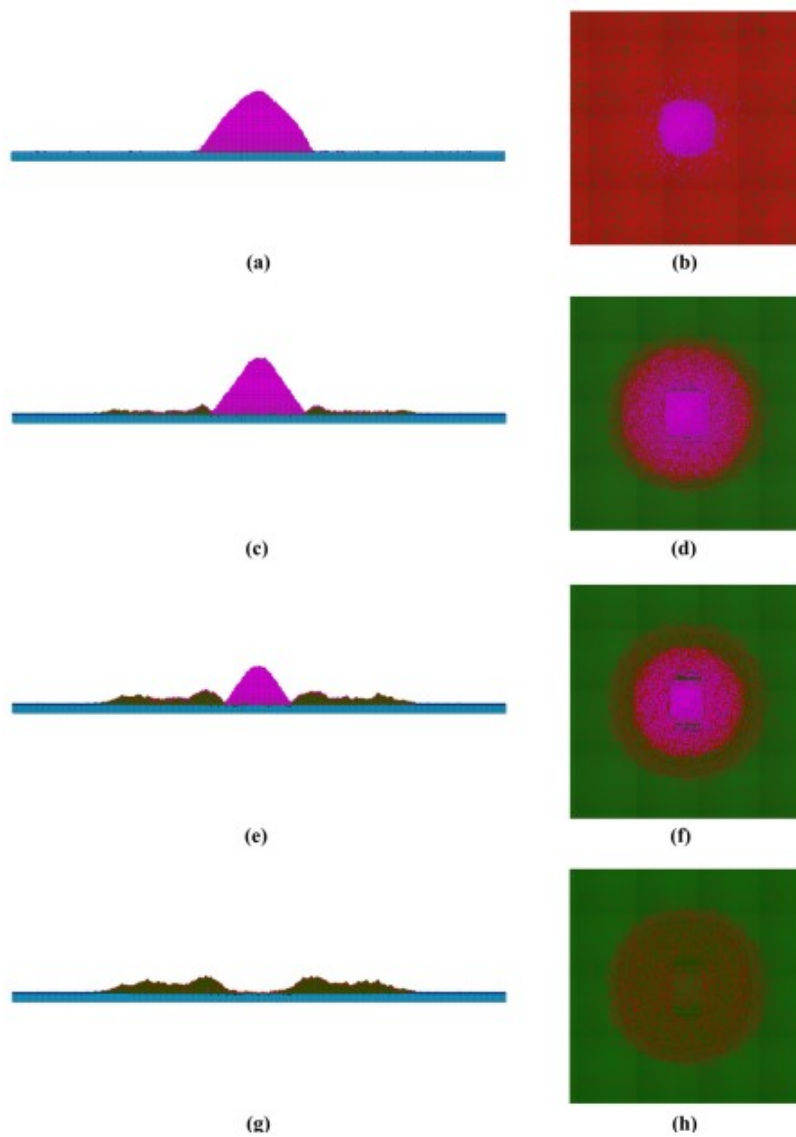


Рис. 1.9: Эволюция морфологии кольца в модели Монте-Карло. Слева — поперечные сечения, справа — вид сверху. Капля Ga обозначена фиолетовым, GaAs — коричневым. Воспроизведено из [15], рис. 4.

- изменения радиуса капли как динамического параметра.

Такой подход позволяет установить взаимосвязь между параметрами роста (температурой, интенсивностью потока, объёмом капли) и конечной формой структуры. Он опирается на физические принципы, заложенные в ранее рассмотренных моделях, и формирует основу для численной реализации, приведённой в следующей главе.

Глава 2. Физико-математическая модель

2.1 Основные уравнения диффузии и реакций

Процесс формирования кольцевой структуры при капельной эпитаксии можно описывать с помощью реакционно-диффузионной модели в предположении осевой симметрии. Подобные модели применяются в ряде современных исследований [16, 17], позволяя анализировать пространственно-временное распределение компонентов и их взаимодействие на поверхности.

Пусть $c_{Ga}(r, t)$ и $c_{As}(r, t)$ — поверхностные концентрации атомов галлия и мышьяка соответственно, зависящие от радиальной координаты r и времени t .

Для обоих компонентов учитываются диффузия, поступление вещества (для As — постоянный поток, для Ga — гауссов профиль из капли), а также реакция между ними, приводящая к образованию твёрдой фазы GaAs. Для мышьяка дополнительно учитывается десорбция с поверхности.

Такой подход описан, в частности, в работе [18], где предложена численная модель, объединяющая кинетические и диффузионные аспекты. В другом исследовании [17] показано, как изменение арсенизации и температуры влияет на соотношение между объёмами GaAs, кристаллизующегося внутри капли и по её границе.

Уравнения системы имеют следующий вид:

$$\frac{\partial C_{Ga}}{\partial t} = D_{Ga} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C_{Ga}}{\partial r} \right) + F_{Ga}(r, t) - k_r C_{Ga} C_{As} \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial C_{As}}{\partial t} = D_{As} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C_{As}}{\partial r} \right) + F_{As} - k_r C_{Ga} C_{As} - \frac{C_{As}}{\tau_{As}}, \quad (2.2)$$

где:

- D_{Ga}, D_{As} — коэффициенты поверхностной диффузии;

- ω — коэффициент реакции между атомами Ga и As;
- F_{As} — постоянный поток мышьяка;
- $F_{Ga}(r, t)$ — пространственно и временно зависимый поток галлия;
- τ_{As} — характерное время испарения мышьяка.

$$D_{Ga} = a_0^2 \nu \exp \left(-\frac{E_{Ga}}{kT} \right) \quad (2.3)$$

$$D_{As} = a_0^2 \nu \exp \left(-\frac{E_{As}}{kT} \right) \quad (2.4)$$

Время десорбции мышьяка:

$$\tau_{As} = \frac{1}{\nu} \exp \left(\frac{E_a}{kT} \right) \quad (2.5)$$

$$\nu = \frac{kT}{\pi \hbar} \quad (2.6)$$

Модель использует приближение сплошной среды, что оправдано для масштабов порядка десятков нанометров. Она позволяет изучать влияние параметров роста на морфологию кольца в рамках эффективной численной реализации.

Модель задаётся на интервале $r \in [0, R_\infty]$ с осевой симметрией. Поверхностные концентрации атомов $C_{Ga}(r, t)$ и $C_{As}(r, t)$ описываются уравнениями (??)–(2.1), и для их корректного численного решения необходимо задать начальные и граничные условия.

Начальные условия

На начальный момент времени ($t = 0$):

$$C_{Ga}(r, 0) = 0, \quad C_{As}(r, 0) = 0. \quad (2.7)$$

Граничные условия

На правой границе области ($r = R_\infty$) задаются:

$$C_{Ga}(R_\infty, t) = 0, \quad C_{As}(R_\infty, t) = F_{As}\tau_{As}. \quad (2.8)$$

2.2 Распределение потока галлия из капли

Одним из ключевых элементов модели капельной эпитаксии является описание пространственного распределения потока галлия, поступающего из жидкой капли на подложку. Корректное задание этой функции необходимо для воспроизведения морфологии кольца и скорости роста наноструктуры. Ниже приведено подробное аналитическое построение соответствующего выражения, опирающееся на решение уравнения диффузии с заданными граничными условиями.

Нам требуется дополнительная концентрация атомов Ga на границе капли в соответствии с:

$$\tilde{C}_{Ga}(r, t) = C_0 \exp\left(-\frac{(r - R_d(t))^2}{w^2}\right) \quad (2.9)$$

Это приводит к дополнительному потоку, который является нашим единственным источником атомов Ga (рис. 2.1):

$$F_{Ga}(r, t) = \frac{C_0}{\tau_{Ga}(t)} \exp\left(-\frac{(r - R_d(t))^2}{w^2}\right) \quad (2.10)$$

Чтобы найти параметр τ_{Ga} (где w — свободное постоянное значение), нам нужно учесть потерю атомов Ga. Для этого мы рассмотрим более простую модель, в которой расчёт выполняется для $r \in [R_d, R_\infty]$ и присутствует только Ga. Это

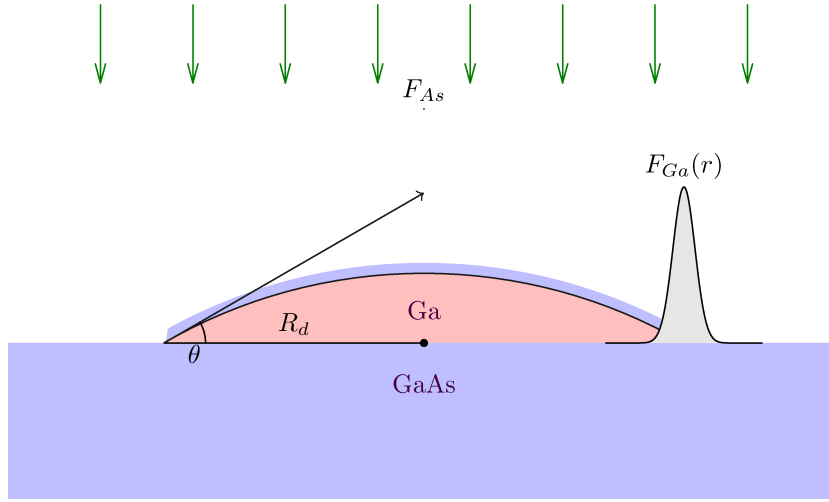


Рис. 2.1: Визуализация потоков вещества Ga

приводит к следующему уравнению:

$$\frac{\partial C_{Ga}}{\partial t} = D_{Ga} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C_{Ga}}{\partial r} \right) \quad (2.11)$$

$$C_{Ga}(R_d, t) = C_0, \quad C_{Ga}(R_\infty, t) = 0$$

Мы можем решить эту проблему путем разделения переменных или просто рассмотреть стационарное состояние:

$$\frac{\partial C_{Ga}}{\partial t} = 0$$

Тогда нам нужно решить:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C_{Ga}}{\partial r} \right) = 0$$

Мы получаем общее решение:

$$C_{Ga} = A \ln \frac{r}{R_0}$$

Где A, R_0 - неизвестные константы. Замена граничных условий приводит к:

$$A \ln \frac{R_d}{R_0} = C_0 \quad A \ln \frac{R_\infty}{R_0} = 0$$

Таким образом, мы получаем:

$$R_0 = R_\infty$$

$$A = \frac{C_0}{\ln \frac{R_d}{R_\infty}} \quad (2.12)$$

Из чего следует:

$$C_{Ga} = \frac{C_0}{\ln \frac{R_d}{R_\infty}} \ln \frac{r}{R_\infty} \quad (2.13)$$

Теперь нам нужно найти поток от границы капли:

$$J_{Ga} = -D_{Ga} \frac{\partial C_{Ga}}{\partial r} (r = R_d) \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial C_{Ga}}{\partial r} (r = R_d) = \frac{C_0}{R_d \ln \frac{R_d}{R_\infty}} \quad (2.15)$$

$$J_{Ga} = -\frac{D_{Ga} C_0}{R_d \ln \frac{R_d}{R_\infty}}$$

Поток положительный (потому что он должен двигаться от капли в направлении $r \rightarrow R_{infy}$), поэтому мы переписываем его как:

$$J_{Ga} = \frac{D_{Ga} C_0}{R_d \ln \frac{R_\infty}{R_d}} > 0 \quad (2.16)$$

Изменение числа атомов Ga:

$$\frac{dN_{Ga}}{dt} = -2\pi R_d J_{Ga} = -2\pi \frac{D_{Ga} C_0}{\ln \frac{R_\infty}{R_d}} \quad (2.17)$$

С другой стороны, в нашей первоначальной задаче мы имеем:

$$\frac{dN_{Ga}}{dt} = -2\pi \int_0^{R_\infty} F_{Ga} r dr \quad (2.18)$$

$$-\frac{dN_{Ga}}{dt} = 2\pi \frac{C_0}{\tau_{Ga}} \int_0^{R_\infty} \exp\left(-\frac{(r - R_d)^2}{w^2}\right) r dr =$$

$$u = r - R_d, \quad r = u + R_d$$

$$= 2\pi \frac{C_0}{\tau_{Ga}} \int_{-R_d}^{R_\infty - R_d} \exp\left(-\frac{u^2}{w^2}\right) u du + 2\pi \frac{C_0 R_d}{\tau_{Ga}} \int_{-R_d}^{R_\infty - R_d} \exp\left(-\frac{u^2}{w^2}\right) du \quad (2.19)$$

Благодаря симметрии:

$$\int_{-R_d}^{R_d} \exp\left(-\frac{u^2}{w^2}\right) u du = 0$$

$$\int_{-R_d}^{R_\infty - R_d} \exp\left(-\frac{u^2}{w^2}\right) u du = \int_{R_d}^{R_\infty - R_d} \exp\left(-\frac{u^2}{w^2}\right) u du$$

$$-\frac{dN_{Ga}}{dt} = \pi \frac{C_0 w^2}{\tau_{Ga}} \int_{\frac{R_d^2}{w^2}}^{\frac{(R_\infty - R_d)^2}{w^2}} \exp(-v) dv + 2\pi \frac{C_0 w R_d}{\tau_{Ga}} \int_{-\frac{R_d}{w}}^{\frac{R_\infty - R_d}{w}} \exp(-v^2) dv$$

$$-\frac{dN_{Ga}}{dt} = \pi \frac{C_0 w^2}{\tau_{Ga}} \left[\exp\left(-\frac{R_d^2}{w^2}\right) - \exp\left(-\frac{(R_\infty - R_d)^2}{w^2}\right) + \sqrt{\pi} \frac{R_d}{w} \left\{ \operatorname{erf}\left(\frac{R_\infty - R_d}{w}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{R_d}{w}\right) \right\} \right] \quad (2.20)$$

Сравнение двух потоков дает нам следующее уравнение:

$$\begin{aligned} \frac{D_{Ga}}{\ln \frac{R_\infty}{R_d}} &= \frac{1}{2} \frac{w^2}{\tau_{Ga}} \left[\exp\left(-\frac{R_d^2}{w^2}\right) - \exp\left(-\frac{(R_\infty - R_d)^2}{w^2}\right) + \sqrt{\pi} \frac{R_d}{w} \left\{ \operatorname{erf}\left(\frac{R_\infty - R_d}{w}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{R_d}{w}\right) \right\} \right] \\ \tau_{Ga} &= \frac{w^2}{2D_{Ga}} \left[\exp\left(-\frac{R_d^2}{w^2}\right) - \exp\left(-\frac{(R_\infty - R_d)^2}{w^2}\right) + \sqrt{\pi} \frac{R_d}{w} \left\{ \operatorname{erf}\left(\frac{R_\infty - R_d}{w}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{R_d}{w}\right) \right\} \right] \ln \frac{R_\infty}{R_d} \end{aligned} \quad (2.21)$$

$$\tau_{Ga} = \frac{w^2}{2D_{Ga}} \left[\exp\left(-\frac{R_d^2}{w^2}\right) + \sqrt{\pi} \frac{R_d}{w} \left\{ 1 + \operatorname{erf}\left(\frac{R_d}{w}\right) \right\} \right] \ln \frac{R_\infty}{R_d} \quad (2.22)$$

При $R_\infty \gg R_d$, то это уравнение упрощает:

$$\tau_{Ga} = \frac{w^2}{2D_{Ga}} \left[\exp\left(-\frac{R_d^2}{w^2}\right) + \sqrt{\pi} \frac{R_d}{w} \left\{ 1 + \operatorname{erf}\left(\frac{R_d}{w}\right) \right\} \right] \ln \frac{R_\infty}{R_d} \quad (2.23)$$

Когда $R_d \rightarrow 0$, то, естественно, $\tau_{Ga} \rightarrow +\infty$ и $F_{Ga} \rightarrow 0$:

$$F_{Ga}(r, t) = \frac{2D_{Ga}C_0}{w^2} \frac{\exp\left(-\frac{(r-R_d(t))^2}{w^2}\right)}{\left[\exp\left(-\frac{R_d^2}{w^2}\right) - \exp\left(-\frac{(R_\infty - R_d)^2}{w^2}\right) + \sqrt{\pi} \frac{R_d}{w} \left\{ \operatorname{erf}\left(\frac{R_\infty - R_d}{w}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{R_d}{w}\right) \right\} \right] \ln \frac{R_\infty}{R_d}} \quad (2.24)$$

Обратите внимание, что если мы переобозначим переменные:

$$x = \frac{R_d}{w}, \quad p = \frac{R_\infty}{w}$$

Тогда функция:

$$q(x, p) = \exp(-x^2) - \exp(-(p-x)^2) + \sqrt{\pi}x \{\operatorname{erf}(p-x) + \operatorname{erf}(x)\}$$

Может быть аппроксимирована к прямой линии:

$$q(x, p) \approx a(p)x + b(p)$$

Где:

$$b(p) \approx \frac{0.187}{p - 3.156}$$

$$a(p) \approx 3.545$$

Таким образом, мы получаем:

$$F_{Ga}(r, t) = \frac{2D_{Ga}C_0}{w^2} \frac{\exp\left(-\frac{(r-R_d(t))^2}{w^2}\right)}{\left[3.545\frac{R_d}{w} + \frac{0.187w}{R_\infty - 3.156w}\right] \ln \frac{R_\infty}{R_d}} \quad (2.25)$$

2.3 2.3. Уравнение изменения радиуса капли

Во время капельной эпитаксии радиус капли $r_d(t)$ уменьшается по мере расходования галлия на образование твёрдой фазы GaAs. Это связано с протеканием реакции между поверхностными атомами Ga и поступающим потоком мышьяка, что приводит к уменьшению объёма жидкой капли. Ниже приведён реализованный в программе подход к описанию эволюции $r_d(t)$, основанный на геометриче-

ских и кинетических соображениях.

Геометрический коэффициент $B(\theta)$

Объём сферической капли с фиксированным углом смачивания θ может быть выражен как:

$$V = \frac{\pi r_d^3(t)}{B(\theta)}, \quad (2.26)$$

где r_d — радиус основания капли, а $B(\theta)$ — геометрический коэффициент, зависящий от угла смачивания. Он имеет аналитический вид:

$$B(\theta) = \frac{3 \sin \theta - \sin 3\theta}{8 - 9 \cos \theta + \cos 3\theta}. \quad (2.27)$$

Этот коэффициент используется при расчёте предфактора R_0^3 в модели.

Алгоритм, реализованный в численной модели

Реализация в коде использует приближённое дискретное уравнение изменения радиуса капли на основе локальной скорости реакции компонентов Ga и As. Формула, реализованная в коде, имеет вид:

$$R_{i+1} = R_i - \frac{R_0^3}{R_i^2} \sum_{j=1}^{N_r} j \cdot C_{\text{Ga}}^{i,j} \cdot C_{\text{As}}^{i,j}, \quad (2.28)$$

где $C_{\text{Ga}}^{i,j}$ и $C_{\text{As}}^{i,j}$ — значения концентраций в j -м узле сетки на i -м временном шаге, N_r — число узлов по радиусу.

Предвычисленный коэффициент R_0^3 задаётся как:

$$R_0^3 = \frac{2\Omega_{\text{Ga}} \cdot \omega \cdot C_0 \cdot (\Delta r)^2}{B(\theta)}, \quad (2.29)$$

где:

- Ω_{Ga} — объём одного атома галлия;
- ω — коэффициент реакции между компонентами;
- C_0 — нормирующая поверхностная плотность;
- Δr — шаг пространственной сетки.

Такой метод позволяет обновлять радиус капли на каждом временном шаге напрямую, без решения дифференциальных уравнений, и эффективно включать его в общую численную схему. Выражение получено из закона сохранения массы с учётом геометрической формы капли и численной аппроксимации объёмного расхода галлия.

Глава 3. Теория и основные уравнения

3.1 Раздел 1

Ненумерованная формула:

$$\begin{pmatrix} \dot{\varphi} \\ \dot{\theta} \\ \dot{\psi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta) \cos(\psi) & -\sin(\psi) & 0 \\ \cos(\theta) \sin(\psi) & \cos(\psi) & 0 \\ -\sin(\theta) & 0 & 1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \omega_x \\ \omega_y \\ \omega_z \end{pmatrix}.$$

$$E_y(z \geq L) = A_{12} e^{i\beta z} \cdot \begin{cases} e^{sw} \cos(kw) e^{s(x-a)}, & x < a - w \\ \cos(k(x-a)), & a - w \leq x \leq a + w \\ e^{sw} \cos(kw) e^{-s(x-a)}, & x > a + w \end{cases} \quad (3.1)$$

3.2 Раздел 2

Нумерованные формулы:

$$\dot{\theta} = \frac{P - p_1 \cos(\varphi_1 - \theta) - p_2 \cos(\varphi_2 - \theta)}{\mu + \sin^2(\varphi_1 - \theta) + \sin^2(\varphi_2 - \theta)} \quad (3.2)$$

$$\dot{\varphi}_1 = p_1 - \dot{\theta} \cos(\varphi_1 - \theta) \quad (3.3)$$

$$\dot{\varphi}_2 = p_2 - \dot{\theta} \cos(\varphi_2 - \theta) \quad (3.4)$$

Тест ссылки на формулу (3.2).

Глава 4. Численные методы и алгоритмы

4.1 Раздел 1

4.2 Раздел 2

Listing 1: Программная реализация метода Рунге-Кутты

```
// From the pendulum program

fn runge_kutta(
    vars: &MyVec,
    pars: &Vec<f64>,
    rhs: &dyn Fn(&MyVec, &Vec<f64>) -> MyVec,
    dt: f64,
) -> MyVec {
    let rk_1 = rhs(vars, pars);
    let rk_2 = rhs(&vars.add(&rk_1.scale(dt / 2.0)), pars);
    let rk_3 = rhs(&vars.add(&rk_2.scale(dt / 2.0)), pars);
    let rk_4 = rhs(&vars.add(&rk_3.scale(dt)), pars);

    let vars_new = vars
        .add(&rk_1.scale(dt / 6.0))
        .add(&rk_2.scale(dt / 3.0))
        .add(&rk_3.scale(dt / 3.0))
        .add(&rk_4.scale(dt / 6.0));
    vars_new
}
```

Listing 2: Подпрограмма случайного блуждания на плоскости

```
std::random_device rd;
std::mt19937 mt(rd());
std::uniform_int_distribution<long> dist(1, 4);
std::vector<long> xn(n0, 0);
```

```

std::vector<long> yn(n0, 0);
for (long jt = 0; jt < M; jt++)
{
    for (long jn = 0; jn < n0; jn++)
    {
        switch (dist(mt))
        {
            case 1:
                xn[jn] ++;
                break;
            case 2:
                xn[jn] --;
                break;
            case 3:
                yn[jn] ++;
                break;
            case 4:
                yn[jn] --;
                break;
        }
    }
}

```


Глава 5. Результаты и обсуждение

В начало надо поместить описание использованных в расчётах материалов, моделей и параметров, а также обоснование выбора (детальный обзор параметров из литературы можно поместить в главу с теорией или даже в обзор).

Таблицы в \LaTeX делать очень неудобно. Лучше воспользоваться сторонним редактором таблиц, которые умеет их экспортировать в \LaTeX , сделать там всю структуру, а потом вставить готовый код, и в нём уже добавлять содержимое ячеек.

Тем не менее, простые таблицы делать можно, наподобие 5.1. Но лучше таблицами вообще не злоупотреблять, а где можно заменять их графиками и диаграммами.

Таблица 5.1: Условия роста образцов с квантовыми кольцами

№	X_{In} , %	T_1 , °C	T_2 , °C	P_{As_4} , 10^{-5} Торр	Тип КК	Диаметры, нм	
A1	0	220	220	1,3	Одиночное	51	
A2	0	280	280	0,55	Двойное	120	42
B1	5	250	250	5,0	Одиночное	75	
B2	10	250	250	5,0	Одиночное	76	
B3	20	250	250	5,0	Одиночное	78	
B4	20	200	200	5,0	Одиночное	63	
B1	0	325	325	0,2	Одиночное	22	
B2	0	325	220	0,2	Двойное	79	31
B3	0	325	325	1,0	Двойное	69	27

Ссылаемся на Листинг 1 здесь.

Выводы

Структура файлов, которые можно редактировать:

- `diploma.tex` --- содержит основной текст;
- `titlepage.tex` --- содержит титульный лист;
- `literature.bib` --- содержит источники для списка литературы;
- `code_highlight.tex` --- форматирование листингов (фрагментов кода).

Файл `style.tex` очень важный, его трогать и особенно удалять не надо, там задаются различные стили документа. Редактировать в случае, если знаете, что делать.

Заключение

Нужны ли отдельно и выводы, и заключение --- я не знаю. Разберёмся.

Список литературы ниже оформлен не совсем по ГОСТу, но это легко исправить. Главное, что он организован, и можно ссылаться на каждый пункт по фамилии первого автора.

Внимание!

Список литературы находится в отдельном файле `literature.bib`, в который можно добавлять новые источники в любом порядке. Они будут сами располагаться как нужно, в порядке упоминания в тексте.

Если какой-то источник не процитирован в тексте, он в список литературы добавлен не будет.

Поэтому один и тот же файл с источниками можно использовать для нескольких документов.

Список литературы

- [1] C. Jin и др. «Electronic states and Aharonov-Bohm oscillations in quantum rings». *Applied Physics Letters* том 97, номер 2, (2010), с. 023107 (цит. на с. 2).
- [2] N. Koguchi, S. Takahashi и T. Chikyow. «New MBE growth method for InSb quantum well boxes». *Japanese Journal of Applied Physics* том 30, номер 8A, (1991), с. L532—L535 (цит. на с. 2, 5).
- [3] Z. Y. Zhou и др. «Origin of Quantum Ring Formation During Droplet Epitaxy». *Physical Review Letters* том 111, номер 3, (2013), с. 036102 (цит. на с. 2, 8, 10, 12—14).
- [4] A. Rastelli, S. Kiravittaya и O. G. Schmidt. «Shape transition of self-organized InAs/GaAs quantum dots into rings by partial capping and annealing». *Applied Physics Letters* том 85, номер 22, (2004), с. 5165—5167 (цит. на с. 3).
- [5] Massimo Gurioli и др. «Droplet Epitaxy of Semiconductor Nanostructures for Quantum Photonic Devices». *arXiv preprint* (2021) (цит. на с. 5—7).
- [6] Ю. Д. Сибирмовский и др. «Особенности диффузионных процессов при капельной эпитаксии квантовых колец». *Краткие сообщения по физике ФИАН*, номер 9, (2014), с. 3—8 (цит. на с. 6, 10, 12).
- [7] Сибирмовский Ю. Д. «Механизмы формирования, оптические и электронные транспортные свойства ансамблей квантовых колец GaAs/AlGaAs». Кандидатская диссертация. НИЯУ МИФИ, 2018 (цит. на с. 8).
- [8] M. Elborg и др. «Self-assembly of vertically aligned quantum ring-dot structure by multiple droplet epitaxy». *Journal of Crystal Growth* том 468 (2017), с. 515—520 (цит. на с. 9, 12).

- [9] И. С. Васильевский и др. «Капельная эпитаксия квантовых колец в системе GaAs/AlGaAs: эксперимент и модель». *Вестник НИЯУ МИФИ* том 2 (2013), с. 267—274 (цит. на с. 10, 11).
- [10] Zheng Fan и Lei Ma. «Droplet nanofluidic transport and shape evolution for III–V nanostructures». *arXiv preprint* (2023) (цит. на с. 10—13).
- [11] T. Mano и др. «Self-assembly of concentric quantum double rings». *Nano Letters* том 5, номер 3, (2005), с. 425—428 (цит. на с. 11).
- [12] N. Koguchi и T. Mano. «Droplet epitaxy method for formation of quantum dot and ring structures». *Journal of Crystal Growth* том 278 (2005), с. 108—112 (цит. на с. 11).
- [13] Yun-Ran Wang, Im Sik Han и Mark Hopkinson. «Fabrication of quantum dot and ring arrays by direct laser interference patterning for nanophotonics». *Nanophotonics* том 12, номер 8, (2022), с. 1469—1477 (цит. на с. 13).
- [14] Ch. Heyn, J. Feddersen и V.G. Dubrovskii. «Modeling of Al and Ga Droplet Nucleation during Droplet Epitaxy or Droplet Etching». *Nanomaterials* том 11, номер 2, (2021), с. 468 (цит. на с. 15).
- [15] A. Schwartz и др. «Concentric GaAs nanorings formation by droplet epitaxy—Monte Carlo simulation». *Journal of Crystal Growth* том 497 (2018), с. 7—13 (цит. на с. 16, 17).
- [16] K. Reyes и др. «A unified model of droplet epitaxy for compound semiconductor nanostructures: experiments and theory». *Journal of Applied Physics* том 113, номер 13, (2013), с. 134302 (цит. на с. 19).
- [17] S. Bietti и др. «High-temperature droplet epitaxy of symmetric GaAs/AlGaAs quantum dots». *Scientific Reports* том 10 (2020), с. 6532 (цит. на с. 19).

- [18] К. Reyes и др. «Unified model of droplet epitaxy for compound semiconductor nanostructures: Experiments and theory». *Physical Review B* том 87, номер 16, (2013), с. 165406 (цит. на с. 19).