

元胞方法与蒙特卡洛方法相结合的薄膜生长过程模拟

阮聪 孙晓民 宋亦旭

Cellular method combined with Monte Carlo method to simulate the thin film growth processes

Ruan Cong Sun Xiao-Min Song Yi-Xu

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 038201 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.038201

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.038201>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I3>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

结合实际刻蚀数据的离子刻蚀产额优化建模方法

[An optimization method for ion etching yield modeling combined with factual etching data](#)

物理学报.2014, 63(24): 248201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.248201>

基于刻蚀速率匹配的离子刻蚀产额优化建模方法

[An optimization method for ion etching yield modeling based on etching velocity matching](#)

物理学报.2014, 63(4): 048201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.048201>

基于压缩表示的离子刻蚀仿真三维表面演化方法

[A 3D profile evolution method of ion etching simulation based on compression representation](#)

物理学报.2013, 62(20): 208201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.208201>

基于三维元胞模型的刻蚀工艺表面演化方法

[A three-dimensional surface evolution algorithm based on cellular model for etching process](#)

物理学报.2013, 62(10): 108201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.108201>

染料敏化太阳能电池内部光路折转对电子传输特性的影响

[Effect of light path folding on the properties of electron transport in dyesensitized solar cell](#)

物理学报.2012, 61(16): 168201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.168201>

元胞方法与蒙特卡洛方法相结合的薄膜生长过程模拟*

阮聪 孙晓民 宋亦旭[†]

(清华大学计算机科学与技术系, 智能技术与系统国家重点实验室, 清华大学信息科学与技术国家实验室, 北京 100084)

(2014年7月22日收到; 2014年9月17日收到修改稿)

利用仿真方法从原子尺度研究薄膜生长过程是当前薄膜研究领域的热点. 目前, 仿真方法主要在纳米尺度模型实现, 时空需求很大. 针对这一问题, 本文提出元胞和蒙特卡洛相结合的模拟方法, 实现对微米尺度模型薄膜生长过程的模拟. 利用元胞方法来实现模型表示以及演化计算, 从而降低对内存空间的要求, 提高计算效率, 并使用蒙特卡洛方法计算粒子的扩散概率. 通过对氮化硅薄膜生长过程进行具体研究, 将模拟结果与实际实验结果和分子动力学演化结果进行表面形貌和成分的比较, 验证了该方法的有效性.

关键词: 薄膜生长, 元胞方法, 蒙特卡洛方法

PACS: 82.20.Wt, 81.16.-c, 81.15.Aa

DOI: 10.7498/aps.64.038201

1 引言

薄膜具有独特的物理化学性质, 在现代工业中有着十分广泛而重要的用途. 从原子尺度理解薄膜生长过程是当前薄膜研究领域的热点, 但是其微观机理至今没有被研究透彻. 基于计算机模拟的方法是研究薄膜生长过程的一个重要手段^[1]. 目前比较成熟的计算机模拟方法主要包括蒙特卡洛方法、分子动力学方法和元胞法^[2]. Zhang等通过蒙特卡洛方法对薄膜生长初期进行仿真, 获得了薄膜的表面形貌特征和基底温度等外部因素对其的影响^[3]. Lu等利用分子动力学方法对等离子体溅射沉积进行了具体研究, 对比实际物理实验获得了一致的结果^[4]. 分子动力学方法和蒙特卡洛方法都能较好地描述薄膜微观生长过程, 但是它们都仍然局限于对小尺度模型的模拟; 而元胞法通过统计粒子的行为来描述粒子在表面的等效作用^[5], 能模拟从微观到宏观的一系列现象, 可以弥补分子动力学和蒙特卡洛方法模拟尺度小的缺陷.

基于此, 本文提出元胞和蒙特卡洛相结合的仿真方法, 用于对薄膜生长过程的模拟. 为了进行较大尺度模型的仿真, 元胞法被使用到该生长过程模拟之中. 利用元胞进行模型表示, 使得演化过程中空间需求相对较低, 又由于元胞在模型中规则排列, 通过一定的策略可以使模型表示优化, 从而进一步压缩仿真所需的内存空间. 同时由于元胞法的演化主要依靠演化规则进行, 而演化规则的计算与分子动力学方法、蒙特卡洛方法的计算相比, 代价较低, 从而也使得元胞法计算效率较高. 但是由于元胞法模拟对于规则的依赖过大, 在对粒子扩散的模拟中难以计算模型表面邻域粒子对运动粒子的影响, 而蒙特卡洛方法在这方面存在特有的优势, 通过势函数的计算可以获得运动粒子各方向运动概率, 从而判定其运动方向. 因此, 本文使用元胞和蒙特卡洛相结合的仿真方法来模拟薄膜生长过程, 并通过对氮化硅薄膜生长过程的具体研究, 比较实际实验结果以及分子动力学演化结果, 来验证该方法的有效性.

* 国家科技重大专项 (批准号: 2011ZX2403-002) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: songyixu@163.com

2 薄膜生长过程的模拟

薄膜生长过程模拟的结构框图如图 1 所示. 根据用户输入的模型信息和粒子信息, 分别构建表面演化模型和粒子运动模型. 模型信息包括模型的尺寸、基底的类型, 而粒子信息则包括各粒子种类、数量和能量. 当粒子运动到演化模型表面时, 通过 MC 解析模块进行蒙特卡洛模拟 (MC 解析模块是根据用户输入的相关参数信息构建的), 判断粒子与表面演化模型发生作用所产生的事件类型, 并通过表面事件处理模块对该事件进行处理, 从而完成演化过程并输出演化结果.

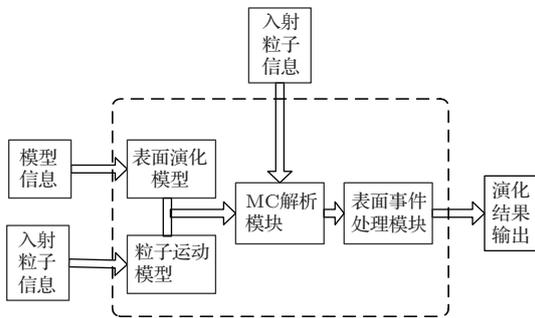


图 1 薄膜生长过程模拟的结构框图

2.1 模型表示

2.1.1 表面演化模型

在薄膜生长过程中, 粒子不断与基底表面发生作用从而推进基底演化. 当基底尺寸较大时, 如达到微米级, 此时基底存在着海量的原子. 例如, 对于长宽高均为 $1 \mu\text{m}$ 的硅基底而言, 其中存在的原子数约为 5.02×10^{10} , 此时如果仍按照传统元胞方法来模拟这些原子在基底表面的各种作用, 必然要消耗大量的计算时间, 同时空间需求也将变得极其巨大, 这对整个过程的仿真, 代价是不能承受的.

由于在元胞模型中各个元胞之间是规则排列的, 同时除了基底表面原子, 其他原子并不参与实际反应, 在以元胞模型表示的体系演化过程中也只考虑表面粒子的作用. 因此在空间存储方面, 本文提出基于元胞的表面演化模型, 只需要记录下表面元胞信息而不是所有的元胞信息, 使得在不影响计算效率的前提下大大节省空间需求.

在表面演化模型中, 首先将整个基底演化模型进行等体积网格划分, 从而生成逻辑意义上的元胞序列; 然后, 记录基底表面各个元胞中原子的编号,

从而在原子和元胞之间形成对应关系, 为演化计算提供支持.

图 2 是二维表面演化模型的示意图. 我们按照顺序来记录元胞的信息. 首先, 通过记录表面有限层数的原子信息和其所在的元胞编号来表示表面原子, 如黑点所示, 然后根据晶体构型生成相应坐标得到非表面原子, 如灰色格子所示, 剩余的白色格子为空元胞. 在表示结束之后, 采取文献 [6] 所述的类似方法, 将三维模型使用二维数组表示, 数组的每一项为一个链表, 而每一个链表项记录空元胞的开始位置以及深度, 从而实现全体空元胞的表示. 通过这样处理, 可以快速地得到模型中的粒子信息, 又因为只记录基底表面情况, 从而使得空间需求大大降低.

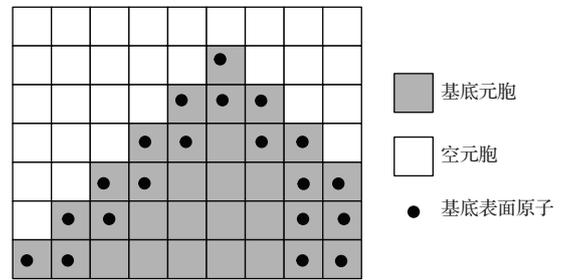


图 2 二维表面演化模型示意图

2.1.2 粒子运动模型

为简化模型, 本文不考虑粒子之间的碰撞, 并假设粒子在运动到基底表面之前进行的运动均为直线运动, 为精确求取粒子运动到表面元胞的位置, 当前常用的计算运动路径的方法是固定步长法. 如图 3(a) 所示. 该方法使粒子运动距离每次增加如虚线所示的有限的一段步长, 然后查询其所处位置是否为表面元胞, 从而判断粒子是否运动到基底表面, 经过多步计算粒子运动到箭头所示位置, 从而判断该处元胞为粒子接触到的元胞.

固定步长法虽然实现简单, 但是为了保证计算的正确性, 所设置的步长一般远小于元胞尺寸, 导致计算代价偏大, 而且由于每次增加相同长度的运动步长, 致使粒子最后可能运动到表面元胞内部, 因而在粒子运动停止之后需要修正其最后位置. 图中粒子运动到箭头位置后应修正其位置为虚线与撞击到的元胞之间的交点位置上.

针对固定步长法的不足, 我们提出变步长法, 如图 3(b) 所示, 每次粒子运动到轨迹与元胞边界交点即图中小圆点所示位置时, 判断该元胞是否为

表面元胞,若是则停止运动,否则继续运动.由于每次运动的步长很可能不同,需要取最近到达的元胞边界.粒子单次运动时间计算方法为

$$r = \min\{T_x, T_y, T_z\} = \min\left\{\frac{D_x}{V_x}, \frac{D_y}{V_y}, \frac{D_z}{V_z}\right\}, \quad (1)$$

其中 D_x, D_y, D_z 分别表示粒子到达三个方向元胞边界的距离, V_x, V_y, V_z 分别表示粒子三个方向的运动速度.

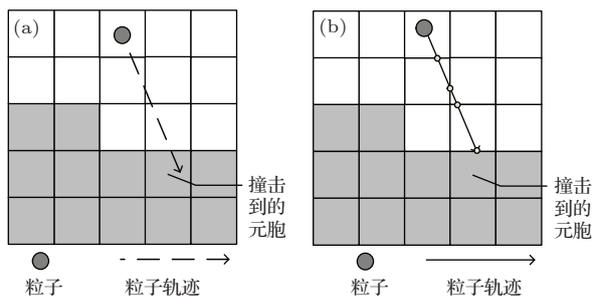


图3 粒子运动路径计算方法示意图 (a) 固定步长法; (b) 变步长法

相比固定步长法,变步长法一方面计算效率得到了提高,另一方面,计算准确性也得到了更好的保证,同时在最后得到粒子坐标时也不存在固定步长法所需的修正计算.

2.2 演化计算

2.2.1 MC 解析模块

依据已有的文献[7]信息,中性粒子在运动到基底表面之后与基底表面的作用形式主要有反应、扩散、散射三种.其中,反应是指两种物质之间发生化学反应生成新的物质,扩散指中性粒子沿着基底表面继续运动,而散射是指中性粒子不沿着基底表面继续运动,而是以一个随机的角度反弹到未被物质占据的空间中.三种事件的发生的概率与中性粒子种类和被其接触到的表面粒子种类相关.

MC 解析模块就是利用蒙特卡罗方法来确定中性粒子在运动到基底表面后发生的事件的.首先,定义相应的反应概率矩阵 R 、扩散概率矩阵 D 和散射概率矩阵 S , 矩阵 R 中的 R_{ij} 项表示第 i 种中性粒子遇到第 j 种表面物质之后的发生反应的概率, 矩阵 D 中的 D_{ij} 项表示第 i 种中性粒子遇到第 j 种表面物质之后发生扩散的概率, 矩阵 S 中的 S_{ij} 项表示第 i 种中性粒子遇到第 j 种表面物质之后发生散射的概率.然后生成一个 $[0, 1]$ 之间的随

机数,用于确定粒子运动到基底表面后发生的事件类型.其示意图如图4所示.

通过上述步骤的计算,判定粒子在该位置发生作用的事件类型,然后对其可能发生的三种事件按照本文下述的对应处理方式进行处理.

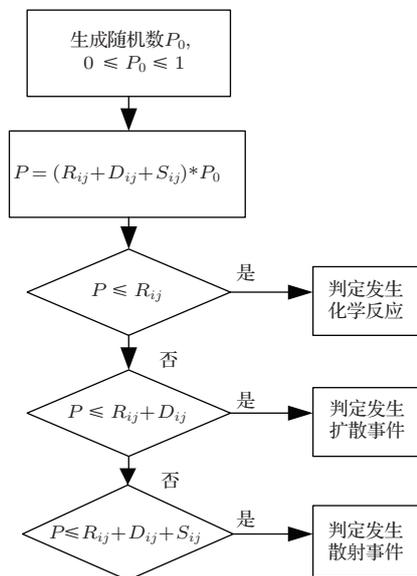


图4 MC 解析模块示意图

2.2.2 化学反应过程处理

粒子在薄膜表面发生大量理化反应,仿真方法要根据不同的反应物和产物来模拟实现不同的理化过程.在反应过程中,反应物质可分为终止态物质和中间态物质.终止态物质意味着反应气体在遇到该物质后发生反应,但是不破坏该位置物质,而在其上会生长一种新物质.中间态物质则意味着反应气体遇到该物质后发生反应来破坏该物质,并在其所处位置生成一种或者多种产物[8].由于反应机理的不明确,在粒子表面发生的具体化学反应无法精确确定.本文具体针对氮化硅薄膜生长过程进行研究,并假设反应气体是氨气(NH_3)和硅烷(SiH_4)的混合气体.根据 NH_3, SiH_4 反应机理并通过实际实验过程归纳总结主要的表面化学反应,我们得到如表1所示的反应表,从而使得利用元胞方法模拟化学反应成为可能[9,10].

表1左两列表示表面粒子的类型编号和种类,总共有16种可能的表面物质,带(*)号表示的是终止态物质,右两列的前两行表示中性粒子类型,存在 NH_3 和 SiH_4 两种,其对应物质编号分别为16和17,右两列的第三行以下内容表示的是粒子和表面粒子发生反应生成的产物类型,这些产物可以从左

侧两列表面粒子类型中查到. 可见, 该反应是一个循环迭代过程, 通过该过程可以得到一个Si生长过程的模拟, 也就是说在Si表面长出Si和Si_xN_y的薄膜.

表1 Si与NH₃, SiH₄反应表

编号	表面粒子	中性粒子	
		NH ₃ (编号:16)	SiH ₄ (编号:17)
1	Si(*)	SiNH	Si ₂
2	SiNH	SiN ₂	Si ₂ NH
3	Si ₂	Si ₂ NH	Si ₃
4	SiN ₂	SiN ₃ H	Si ₂ N ₂
5	Si ₂ NH	Si ₂ N ₂	Si ₃ NH
6	Si ₃	Si ₃ NH	Si
7	SiN ₃ H	SiN ₄	Si ₂ N ₃ H
8	Si ₂ N ₂	Si ₂ N ₃ H	Si ₃ N ₂
9	Si ₃ NH	Si ₃ N ₂	Si + SiNH
10	SiN ₄	SiN ₄	Si ₂ N ₄
11	Si ₂ N ₃ H	Si ₂ N ₄	Si ₃ N ₃ H
12	Si ₃ N ₂	Si ₃ N ₃ H	Si+SiN ₂
13	Si ₂ N ₄	Si ₂ N ₄	Si ₃ N ₄
14	Si ₃ N ₃ H	Si ₃ N ₄	Si+SiN ₃ H
15	Si ₃ N ₄ (*)	SiNH	Si ₂

2.2.3 扩散事件处理

在扩散事件中, 一个重难点是如何确定扩散的方向. 在本文中, 使用势函数结合蒙特卡洛方法来确定粒子的扩散方向. 当粒子运动到基底表面之后, 它各个方向的扩散概率与它的邻域环境有关, 例如图5所示, 当粒子运动到图中黑色圆球所示位置时, 箭头所指的两个位置即为该粒子可能扩散到的位置.

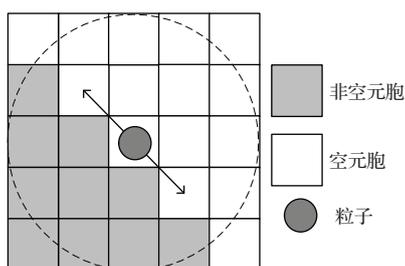


图5 二维模型粒子扩散示意图

考虑到一定邻域范围内粒子的分布情况, 通过势函数计算, 就可以获得该粒子各个方向扩散的概率, 然后通过蒙特卡洛方法从而移动粒子位置. 在这里, 我们需要确定粒子可能扩散到的邻域位置. 二维模型中需要查询的邻域位置有8个, 而三维模型中需要查询的邻域位置有26个, 这些位置必须是空且非悬浮的位置(悬浮指的是当前元胞上下左

右前后均为空元胞).

同时, 如何快速查找截断半径范围内邻域原子集合对整个演化也非常重要. 如图5中虚线表示的圆形内区域即为截断半径范围, 由于直接查找这个范围内的原子集合通常需要遍历整个基底模型, 代价极大, 而将其范围扩大到其外切正方形区域内时(三维模型对应的是正方体区域), 计算代价将大幅度降低, 此时只需要直接把这个方形区域作为该粒子的邻域即可.

在获得粒子可能的扩散位置之后, 我们就需要通过势函数计算其各个方向的扩散概率. 势函数是描述系统内原子之间相互作用的数学形式, 通过势函数计算可以获得粒子在系统中的势能. 通过获得各个不同位置的势能差就可以得到粒子迁移到该位置的概率^[11], 其计算如共式为

$$f_i = \frac{kT}{h} \exp\left(-\frac{\Delta E_i}{kT}\right), \quad (2)$$

这里, 假设可能扩散到的位置有n个, 其编号i的范围为从第1至第n, ΔE_i 表示粒子迁移到第i个扩散位置时的势能差, f_i 是粒子迁移到第i个扩散位置的概率, h 是普朗克常数, k 是玻尔兹曼常数, T 是温度.

最后, 利用蒙特卡洛方法判定粒子迁移位置并移动粒子. 判定粒子迁移位置的方法与2.2.1中关于MC解析模块的方法类似, 首先随机生成一个在 $[0, \sum f_i]$ 之间的数, 通过判定其所在区间来判定粒子迁移的位置, 然后更新粒子坐标信息及元胞状态.

2.2.4 散射事件处理

当粒子在基底表面发生散射作用时, 散射角度的计算关系到粒子下一步的运动方向, 并直接影响沉积过程. 为了表示粒子在表面元胞的反弹作用, 本文采用的处理方式是在接触到的元胞的表面进行散射.

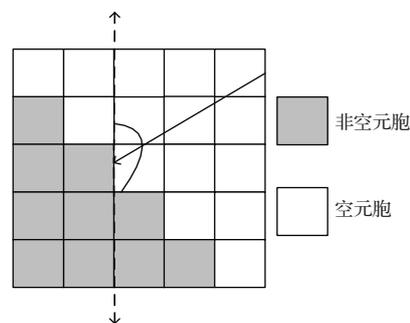


图6 粒子散射示意图

如图 6 所示, 当粒子按图中实线箭头方向运动到非空元胞右表面时, 假设此时发生散射作用, 那么散射角度的选择将是以前表面为镜面, 随机生成一个角度作为粒子的散射角度, 其范围在图中两虚线之间(虚线平行于表面), 从而使得粒子继续运动. 当粒子运动到其他面时的处理方式与此类似.

3 实验结果和讨论

3.1 与实际实验结果对比

本文提出的方法用于氮化硅薄膜生长过程的探究. 当总的中性粒子数为 50000, 氨气与硅烷的比例为 10 比 11, 扩散概率设置为 0.8, 反应概率和散射概率均为 0.1, 基底温度分别为 150°C 和 350°C 时, 仿真结果如图 7 所示, 图 7(a) 和 (b) 分别是基底温度为 150°C 和 350°C 时的仿真演化结果, 可以看到基底表面生长出一层物质, 通过与在原子力显

微镜下 (AFM) 的相应结果图 8 进行对比 [12], 发现两者在形貌上是符合的.

另外, 引入表面粗糙度的概念研究表面的平整情况, 其计算公式如公式为 [13]

$$W = \sqrt{\sum_{i=1}^m (h_i - \bar{h})^2 / L}, \quad (3)$$

其中, W 为表面粗糙度, m 为表面粒子数, h_i 为第 i 个粒子所在位置高度, \bar{h} 为薄膜平均高度, L 为基底边长. 计算两种情况下薄膜表面粗糙度, 并与文献 [12] 的结果进行对比, 如表 2 所示. 可以看到, 薄膜的表面粗糙度随着基底温度的升高而降低, 实际实验和演化仿真结果是一致的 [14].

表 2 表面粗糙度的对比

方法	基底温度	
	150°C	350°C
实验	1.88 nm	0.89 nm
仿真	169 nm	1.05 nm

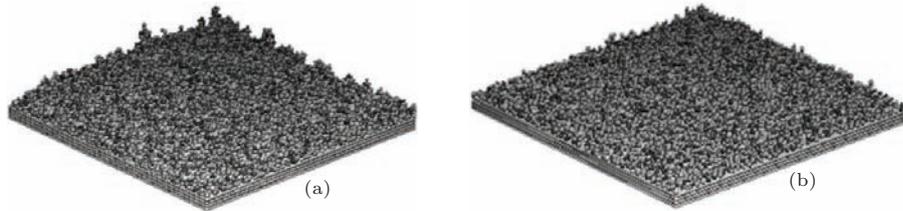


图 7 氮化硅薄膜生长情况仿真演化结果 (a) 基底温度为 150°C 时的演化结果; (b) 基底温度为 350°C 时的演化结果

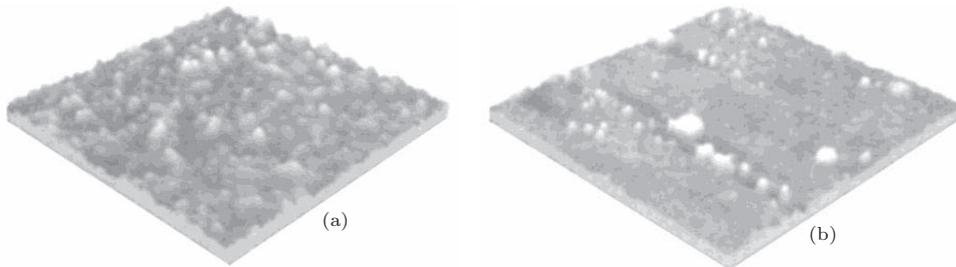


图 8 氮化硅薄膜生长情况实际实验结果 [12] (a) 基底温度为 150°C 时的实验结果; (b) 基底温度为 350°C 时的实验结果

3.2 与分子动力学仿真结果对比

依照文献 [15] 的方法使用分子动力学方法模拟氮化硅薄膜的生长过程, 该方法将氮化硅薄膜的实际生长过程处理为氨气和硅烷分子不断在硅基底循环沉积的过程. 将我们的仿真结果与分子动力学仿真结果进行对比, 比较分析两者表面成分情况, 绘制如图 9 所示的表面硅氮比与中性粒子数量

的关系曲线, 对比发现, 薄膜表面的硅氮比随着中性粒子与表面的作用不断下降, 最后趋于稳定, 两者存在很大的相似性, 从而验证了该仿真方法的有效性.

3.3 并行计算性能分析

扩散概率计算是模拟过程中计算代价最大的部分, 其实现是通过势函数计算得到的, 势函数计

算极大地降低了仿真程序的性能,因此如何加速扩散概率计算就成了仿真的一个关键所在.并行计算不失为一个好的解决方案,将部分关键耗时计算分解成多个子任务,分配给不同的处理器,各个处理器之间相互协同完成该部分计算,从而达到加速演化的目的^[16].

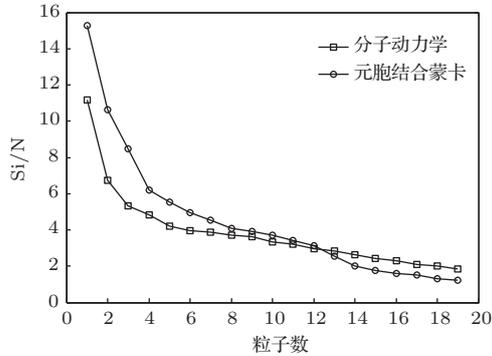


图9 表面硅氮比与中性粒子数量的关系曲线

在沉积仿真实验条件不变的情况下,对程序实施并行,测试不同CPU核数并行加速情况,并做如图10所示的并行加速比与CPU核数关系曲线.

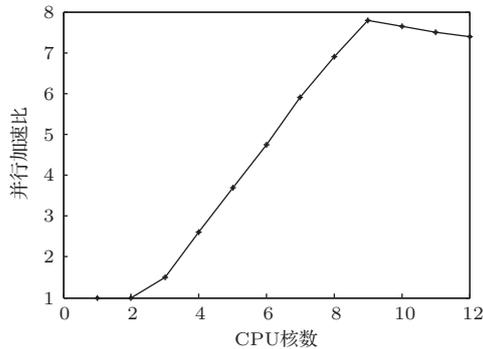


图10 并行加速比与CPU核数关系曲线

从10图可以看到,曲线基本上符合先增后减的变化趋势,当CPU核数达到9时,并行加速比达到峰值.分析其原因,由于在三维模型的演化过程中,邻域内可扩散的位置的数量基本上都是8个左右,这样可以并行加速计算的势函数也就基本8个左右,当CPU核数小于9时,随着核数的增加,计算性能得到提升,而当核数大于9时,计算性能提升达到上限,而由于通信代价随之增加,计算性能随之下降,所以得到图10所示的曲线.

4 结 论

本文基于元胞方法进行模型表示和演化计算,

使用蒙特卡洛方法判定粒子的扩散迁移位置,进行了薄膜生长过程的仿真;针对微米尺度模型仿真时空需求巨大的问题,提出了基于元胞的表面演化模型,引入势函数进行粒子扩散迁移概率的计算并使用并行方法进行势函数的计算加速.本方法能够对微米尺度的模型进行快速仿真,通过与实际实验结果以及分子动力学演化结果进行表面形貌和成分的比较,验证了该方法的有效性.

参考文献

- [1] Wu Z Q, Wang B 2001 *Film Growth* (Beijing: Science Press) pp354–416 (in Chinese) [吴自勤, 王兵 2001 薄膜生长 (北京: 科学出版社) 第354—416页]
- [2] Shan Y C 2006 *Ph. D. Dissertation* (Harbin: Harbin Institute of Technology) (in Chinese) [单英春 2006 博士学位论文 (哈尔滨: 哈尔滨工业大学)]
- [3] Zhang P F, Zheng X P, He D Y, Li L 2007 *Sci. China, Ser. G* **37** 1 (in Chinese) [张佩峰, 郑小平, 贺德衍, 李廉 2007 中国科学:G辑 **37** 1]
- [4] Lu X, Brault P, Bauchire J M, Thomann A L, Bedra L 2014 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **47** 224004
- [5] Vogl P, Hansen U, Fiorentini V 2002 *Comput. Mater. Sci.* **24** 58
- [6] Yang H J, Song Y X, Zheng S L, Jia P F 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 208201 (in Chinese) [杨宏军, 宋亦旭, 郑树琳, 贾培发 2013 物理学报 **62** 208201]
- [7] Chiaramonte L, Colombo R, Fazio G 2012 *Comput. Mater. Sci.* **54** 227
- [8] Coltrin M E, Ho P, Moffat H K, Buss R J 2000 *Thin Solid Films* **365** 251
- [9] Smith D L, Alimonda A S, Chen C C, Ready S E, Wacker B 1990 *J. Electrochem. Soc.* **137** 614
- [10] Yacoubi K, Pantel C A, Scheid E, Couderc J P 1999 *J. Electrochem. Soc.* **146** 3009
- [11] Zhu G, Lu G W, Li Y F, Lan J H, Zhang J, Zheng Q B, Huang Q S, Sun X, Xia H R 2006 *J. Synth. Cryst.* **35** 1 (in Chinese) [朱阁, 卢贵武, 李英峰, 蓝慧慧, 张军, 郑庆彬, 黄乔松, 孙洵, 夏海瑞 2006 人工晶体学报 **35** 1]
- [12] Zhang G Y, Wu A M, Qin F W, Gong F Q, Jiang X 2009 *Semicond. Optoelectron.* **04** 558 (in Chinese) [张广英, 吴爱民, 秦福文, 公发全, 姜辛 2009 半导体光电 **04** 558]
- [13] Jiang Z Z, Zheng Z 2008 *Mater. Rev.* **08** 228 (in Chinese) [蒋志勇, 郑忠 2008 材料导报 **08** 228]
- [14] Song X, Hao F, Liu Y M, Yang Y Z, Yin Z H 2014 *Chin. Phys. B* **23** 016802
- [15] Deng X D, Song Y X, Li J C, Pu Y K 2014 *J. Appl. Phys.* **115** 054902
- [16] Du Z H, Li S L, Chen Y, Liu P 2001 *Parallel Programming Technology for High Performance Computing* (Beijing: Tsinghua University Press) pp62–68 (in Chinese) [都志辉, 李三立, 陈渝, 刘鹏 2001 高性能计算并行编程技术 (北京: 清华大学出版社) 第62—68页]

Cellular method combined with Monte Carlo method to simulate the thin film growth processes^{*}

Ruan Cong Sun Xiao-Min Song Yi-Xu[†]

(State Key Laboratory on Intelligent Technology and Systems, Tsinghua National Laboratory for Information Science and Technology, Department of Computer Science and Technology, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

(Received 22 July 2014; revised manuscript received 17 September 2014)

Abstract

Study on simulation method for the thin film growth processes on atomic scale is currently a hot research field. The simulation method mainly aiming at nanometer scale model demands huge computational cost and memory cost. In order to solve the problem, a cellular method combined with Monte Carlo method is presented in this article to simulate the growth processes of thin film on micron scale. Based on cellular method for model representation and evolutionary computation, we greatly reduce the memory requirements and improve the efficiency of computation, and the Monte Carlo method is used to determine the particle migration. Moreover, specific research on the growth process of silicon nitride thin film is implemented, and the simulation results are compared with the experimental data and the molecular dynamics simulation results of the surface morphology and composition, so as to verify the effectiveness of this method.

Keywords: thin film growth, cellular method, Monte Carlo method

PACS: 82.20.Wt, 81.16.-c, 81.15.Aa

DOI: [10.7498/aps.64.038201](https://doi.org/10.7498/aps.64.038201)

^{*} Project supported by the National Science and Technology Major Project of the Ministry of Science and Technology of China (Grant No. 2011ZX2403-002).

[†] Corresponding author. E-mail: songyixu@163.com