

Р.Л. Політанський<sup>1</sup>, В.І. Горбулик<sup>1</sup>, І.Т. Когут<sup>2</sup>, М.В. Вістак<sup>3</sup>

## Моделювання процесів росту на поверхні кристалів

Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, м. Чернівці [r.politansky@chnu.edu.ua](mailto:r.politansky@chnu.edu.ua),  
Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника, м. Івано-Франківськ,  
Львівський національний медичний університет імені Данила Галицького, м. Львів

У статті розглядаються моделі процесів росту плівок та інших структур на поверхнях кристалів, які мають подібну кристалічну структуру із незначним параметром невідповідності ґраток речовин, із яких утворені плівка та кристалічна підкладка. Проведений огляд методів моделювання, що оснований на аналітичних співвідношеннях та обчислювальних алгоритмах. Розглянуто ряд методів моделювання найбільш типових процесів: формування поверхні у вигляді пірамідальних утворень (так звані голчасті кристали), двовимірний із початковими острівцями росту та тривимірний нерівномірний процеси росту. Для моделювання процесу росту голчастих кристалів запропоновано використовувати метод, що оснований на гаусовій статистиці приростів висоти поверхні. Розглянуто також модель тривимірного росту кристалічної поверхні, яка використовує ітераційний алгоритм Фосса, і яка дає можливість дослідити процеси ступінчатого, нерівномірного росту кристалів. На противагу ступінчатому росту розглянуто модель субмоноатомного росту плівки, що основана на методі Монте-Карло. Для субмоноатомного росту плівки застосовано псевдовипадкові послідовності, які моделюють початкове розміщення острівців зародження наступного шару на кристалічній поверхні. Визначені обчислювальні характеристики цього методу, а саме залежність числа ітерацій, необхідних для заповнення поверхні цілком, від коефіцієнту початкового заповнення поверхні.

**Ключові слова:** метод Монте-Карло, ріст кристалів, аналітичні методи.

Подано до редакції 9.02.2022; прийнято до друку 25.06.2022.

### Вступ

Розвиток математичних моделей, що описують процеси росту тонких плівок та голкоподібних кристалів на гладких, попередньо оброблених поверхнях, розпочався у середині минулого століття. Зусилля багатьох дослідників були спрямовані як на пошук аналітичних розв'язків, так і на підвищення ефективності застосування складних обчислювальних методів. Основою аналітичних методів є такі розділи математики, як теорія детермінованих точкових процесів та теорія стохастичних матриць [1]. Поєднання усіх вищеперерахованих методів формує теорію ґраток, яка є одним із сучасних наукових напрямів математичної та статистичної фізики [2]. Продуктивність цього підходу можна підтвердити

рядом задач, для яких було знайдено точні аналітичні розв'язки: шести-вершинна модель [3] та детерміновані точкові процеси [4]. Класифікація задач та методів їх вирішення, які є предметом сучасної статистичної механіки, приведена на рис.1.

Найбільш поширеними алгоритмами, що стали основою обчислювальних методів, є метод Монте-Карло та молекулярної динаміки [5, 6].

Одним із найбільш загальних поділів методів моделювання процесів росту плівки є поділ на дискретні та неперервні методи. Метод молекулярної динаміки є неперервним методом. Це означає, що речовини, які приймають участь у процесі росту плівки розглядають як деяку розподілену в об'ємі масу. Такий метод є зручним, коли одна із речовин знаходиться у рідкому (розчин або розплав) стані [7].

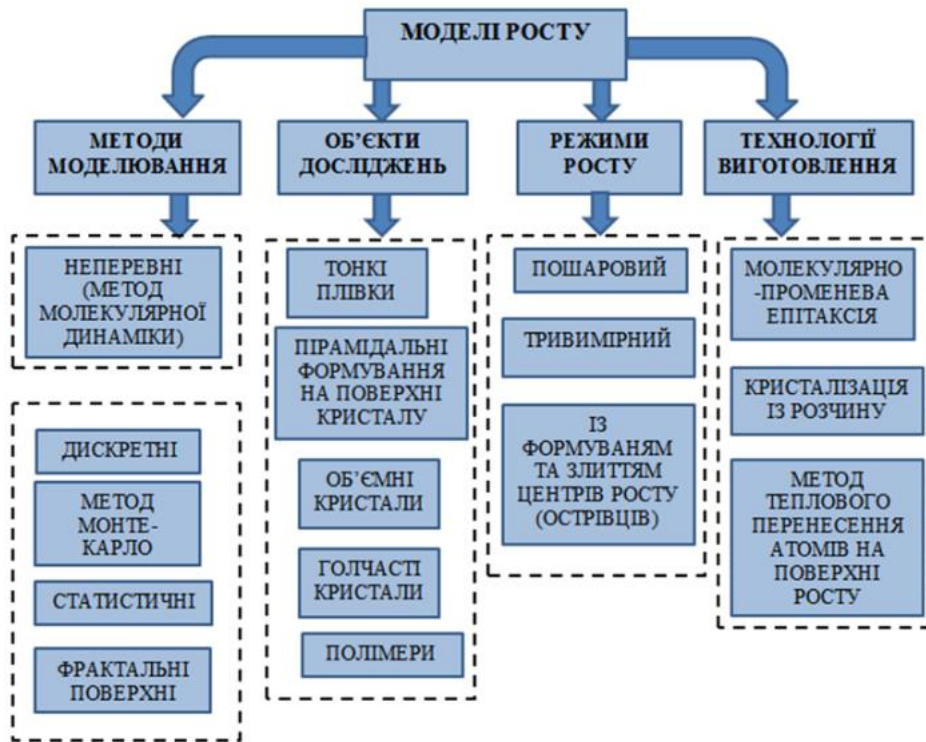


Рис. 1. Задачі моделювання росту тонких плівок та методи їх вирішення.

Окрім відомого методу Монте-Карло, до дискретних методів моделювання росту поверхні можемо віднести методи побудови фрактальних поверхонь, одним із яких є метод Фосса [8], який ми використовуємо.

Теоретичні та експериментальні дослідження закономірностей росту поверхні показують, що процес росту є самоподібним як у часовому, так і просторовому масштабах. Тобто збільшення площі поверхні та її висоти відбуваються узгоджено за певним масштабним співвідношенням. Виявляється, що є кілька чисельних співвідношень між показниками росту поверхні вздовж, та у перпендикулярному напрямках, вони характеризують деякі конкретні режими росту, їх називають універсальними класами.

До найбільш відомих статистичних моделей росту відносим такі як детермінований точковий процес та шести-вершинна модель. Сучасні та найбільш узагальнені теоретичні уявлення про процеси росту кристалічних і/або полімерних структур використовують поняття ренормалізаційної групи [9]. Ренормалізаційна група дає найбільш загальні засоби дослідження значної групи явищ фізики та хімії, наприклад процесів росту кристалів, і, зокрема, росту тонких плівок на поверхні кристалу.

## I. Основна частина

Для моделювання росту голкоподібних кристалів можна застосувати одновимірні моделі, що основані на аналітичному вираженні залежності висоти «голки» від часу. Ці моделі можуть продовжити і доповнити відомі моделі росту голкоподібних

кристалів. Однією із таких є модель, яка основана на ефекті Гібса-Томсона, і яка дає можливість правильно визначати швидкість росту кристалу та його критичний діаметр [10].

Моделювання субмоноатомного росту, який можна вважати двовимірним, здійснювалося на основі методу Монте-Карло. Початковою умовою методу є заданий розподіл центрів росту на поверхні кристалу, з подальшим визначенням кількості зайнятих вузлів ґратки, що найближчі до заданого. Нами побудовані поверхні росту субмоноатомного шару для різних ступенів заповнення поверхні росту початковими острівцями росту. Основним результатом досліджень є залежність швидкості заповнення поверхні від кількості початкових острівців росту.

Моделювання тривимірного процесу росту поверхні виконувалося методом Фосса, основою якого є ітераційне додавання статистично незалежних приростів для кожної точки двовимірної поверхні, що моделює початкову поверхню кристалу.

1. Модель одновимірного росту, що основана на детермінованому точковому процесі (моделювання росту голкоподібної поверхні)

Найменш складною моделлю тривимірного росту поверхні плівки є модель у якій атоми, що досягають поверхні кристалу, «прилипають» до неї і далі не переміщуються. Статистичні особливості процесу росту залежать від технологічних параметрів процесу: швидкості надходження атомів та розподілом цієї характеристики в залежності від координат поверхні кристалу, але загальний вигляд залежності висоти плівки від часу [11] визначається виразом (1):

$$h(t) = c_1^{-1} \cdot t + \xi \cdot c_2 \cdot c_1^{-\frac{3}{2}} \cdot t^{\frac{1}{2}}, \quad (1)$$

де  $c_1$  та  $c_2$  – числові константи,  $\xi$  – це випадкова величина із гаусовим розподілом.

Отже, процес росту, що описаний виразом (1) має 4 параметри: коефіцієнти  $c_1$  і  $c_2$  та математичне сподівання  $m_\xi$  і дисперсію  $\sigma_\xi$  випадкової величини  $\xi$ .

Три-вимірна поверхня, що змодельована за співвідношенням (1), приведена на рис.2.

Три-вимірна поверхня, що змодельована за співвідношенням (1), приведена на рис.2. Як видно із форми утвореної поверхні, ця модель дає можливість описувати ріст голкоподібних кристалів, або інших утворень на поверхні, поперечний переріз яких є нехтувано малими порівняно із висотою. Цей режим має місце, якщо енергій атомів, що захоплені верхніми шарами, недостатньо для переходу на сусідні шари кристалічної структури, і тому заповнення нижчих атомних шарів (тобто переходу до двовимірного режиму росту кристалічної плівки) не відбувається. Порівнюючи зображення на рис. 2, бачимо, що шляхом відповідного вибору значень параметрів моделі можна моделювати як ріст поверхні із пірамідоподібними утвореннями із невеликою майже однаковою висотою (рис. 2а), так і ріст більш складних утворень (рис.2б).

Формування структур із голкоподібними кристалами, що мають характерний розмір поперечного перерізу порядку нм<sup>2</sup>, має широке застосування у сучасних наукоємних технологіях. Кристали із голкоподібними, або пірамідальними утвореннями на поверхні із того ж матеріалу, що і матеріал підкладки, мають невисокий коефіцієнт відбивання у широкому діапазоні сонячного випромінювання, що робить їх привабливими з точки зору застосування у виробництві сонячних елементів [12], виготовленні фотонних кристалів [13] та біосенсорів [14, 15]. Такі структури можна використовувати у широкому діапазоні температур для виробництва елементів сенсорів на основі нанорозмірних полі-кремнієвих плівок [16], локальних 3-вимірних інтегральних кремній-на-ізоляторі структур [17], оскільки такі плівки можуть

бути стійкими до руйнування якщо застосувати захисне покриття.

## II. Моделювання механізму тривимірного (нерівномірного) росту поверхні

Найбільш складним і найменш дослідженим процесом росту є ступінчатий, нерівномірний ріст кристалу, оскільки до нього можна застосовувати лише тривимірні моделі росту. Саме тривимірний механізм стає все більш важливим з точки зору розвитку нано-технологій, оскільки з'являються можливості контролювати положення кожного окремого атома із точністю декілька нанометрів.

Розглянемо метод формування фрактальної поверхні, оснований на ітераційному алгоритмі Фосса [8]. Алгоритм Фосса формує фрактальний рельєф поетапно, подрібнюючи елементарні комірки сітки на кожному кроці алгоритму. Як відомо із теорії, фрактали поділяються на рівні. У алгоритмі Фосса поверхня кожного наступного рівня містить усі точки поверхні попереднього рівня та деяку нову множину точок. При цьому кожні чотири точки поверхні попереднього рівня утворюють додаткові п'ять точок наступного рівня: чотири точки на середині сторін, що утворюють комірку попереднього рівня та одну точку на перетині діагоналей, так як це показано на рис.3.

Кожній точці ґратки на початковій площині відповідає одна точка фрактальної поверхні, що формується на наступному кроці ітерації. На початку алгоритму кожна із чотирьох точок початкової ґратки визначає одну точку фрактальної поверхні, причому значенню висоти присвоюється деяке випадкове число із послідовності, що має гаусовий розподіл. Висота точок фрактальної поверхні наступного рівня визначається, як середнє значення висот точок попереднього рівня, що знаходяться на однім ребрі з цією точкою. Для точки, що знаходиться у центрі комірки висота визначається, як середнє значення висок усіх чотирьох точок попереднього рівня. Далі до знайдених величин

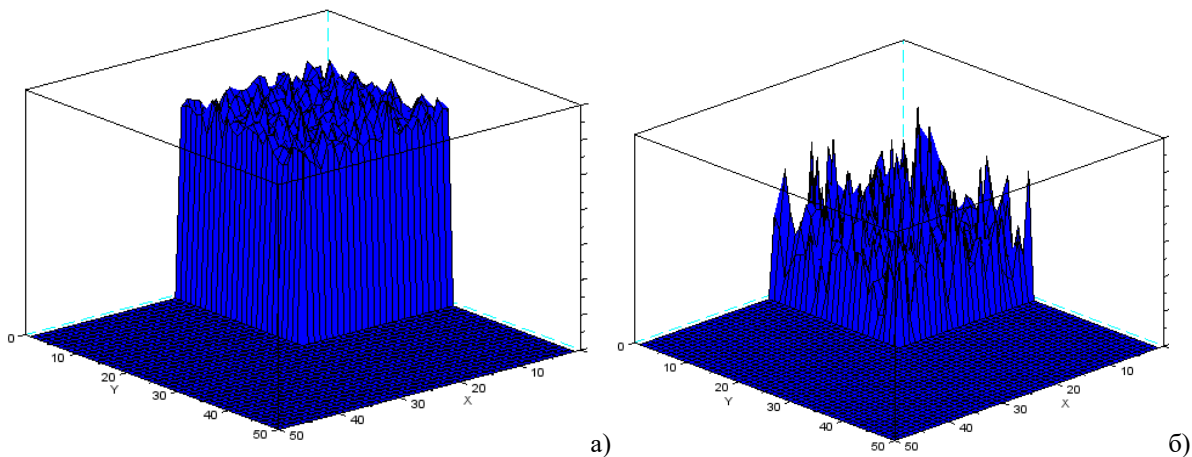
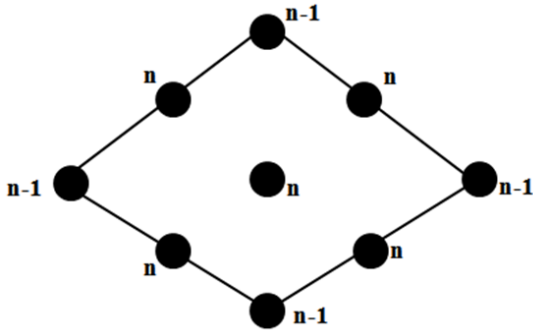


Рис.2. Режими одновимірного росту для різних значень параметрів моделі: а)  $c_1 = 0.1$ ,  $c_2 = 8$ ,  $m_\xi = 0.1$ ,  $\sigma_\xi = 0.01$ , б)  $c_1 = 0.1$ ,  $c_2 = 16$ ,  $m_\xi = 0.1$ ,  $\sigma_\xi = 0.08$ .

додається деяке випадкове число із ряду випадкових чисел із гаусовим розподілом, дисперсія цього ряду пов'язана із дисперсією ряду, що використовувався на попередньому рівні, співвідношенням (2):

$$\sigma_n^2 = (1/2)^{2 \cdot H} \cdot \sigma_{n-1}^2, \quad (2)$$

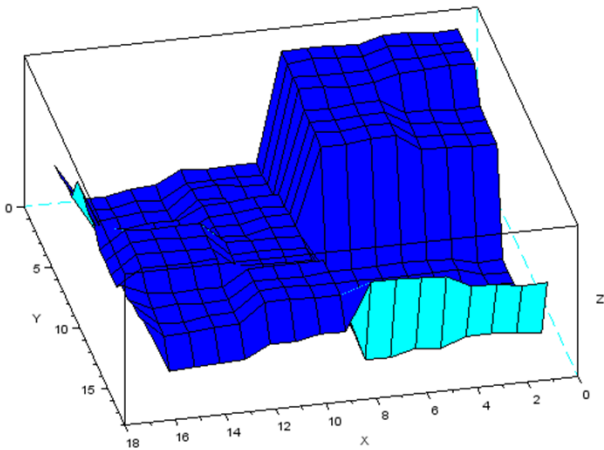
де  $H$  – показник Херста, або параметр самоподібності сформованого фрактального ряду,  $n$  – номер ітерації,  $\sigma_n^2$  та  $\sigma_{n-1}^2$  – квадрати дисперсій на послідовних кроках ітерації.



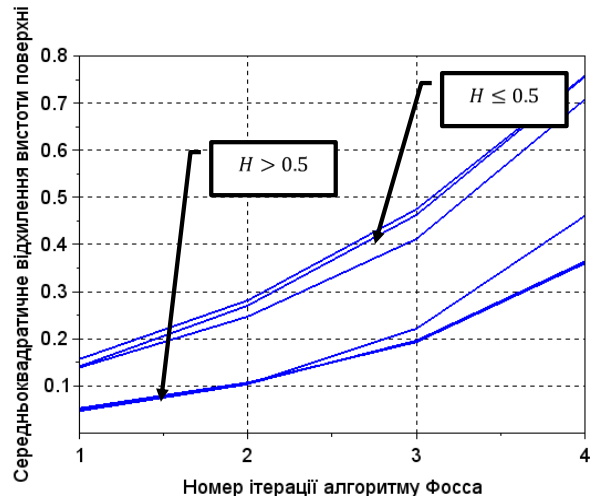
**Рис.3.** Схема формування точок фракталу (одна комірка),  $n$  означає номер рівня фракталу якому належать утворені точки.

На рис.4 зображений приклад фрактальної поверхні, побудованої за алгоритмом Фосса на четвертому кроці ітерації із показником Херста  $H = 0.1$  та початковою дисперсією  $\sigma_1^2 = 0.1$ .

Самоподібність методу Фосса має сенс у тому, що зберігається деяка відповідність між дисперсіями випадкових коливань висоти вузлових точок на кожному кроці алгоритму (співвідношення 2). Про це можна зробити висновок із графіків зростання середньоквадратичного відхилення висоти поверхні, побудованої для різних показників Херста, які приведені на рис.5.



**Рис.4.** Фрактальна поверхня побудована на четвертому кроці ітерації алгоритму Фосса із показником Херста  $H = 0.1$  та початковою дисперсією  $\sigma_1^2 = 0.1$ .



**Рис.5.** Графіки зростання середньоквадратичного відхилення.

Із приведених графіків видно, що процес росту поверхні значно відрізняється для двох різних множин значень показників Херста:  $H \leq 0.5$  і  $H > 0.5$ , причому для другої множини значень показників Херста ріст поверхні є менш інтенсивним. В межах однієї групи показників Херста процеси росту є практично мало відрізняються один від одного, а незначна розбіжність середньоквадратичного відхилення може бути пояснена різними статистичними вибірками для процесів росту поверхонь.

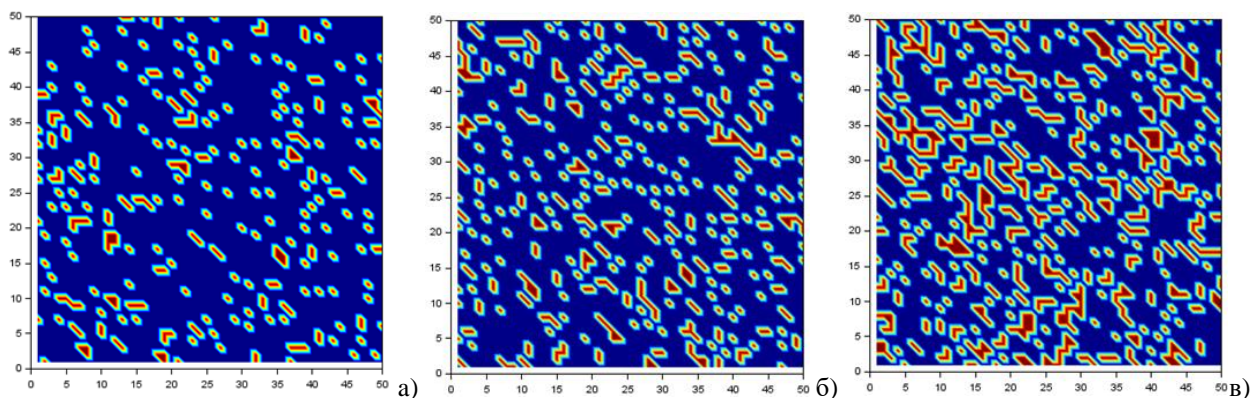
### III. Моделювання двовимірного росту

Моделювання процесів росту субмоноатомних плівок є важливим задачею, а її вирішення може суттєво покращити технологічні процеси вирощування плівок у напівпровідниковому виробництві. Найбільш поширеним методом моделювання росту субмоноатомних плівок є метод Монте-Карло основою якого є імовірність заповнення атомом напленої речовини вільного вузла [18]:

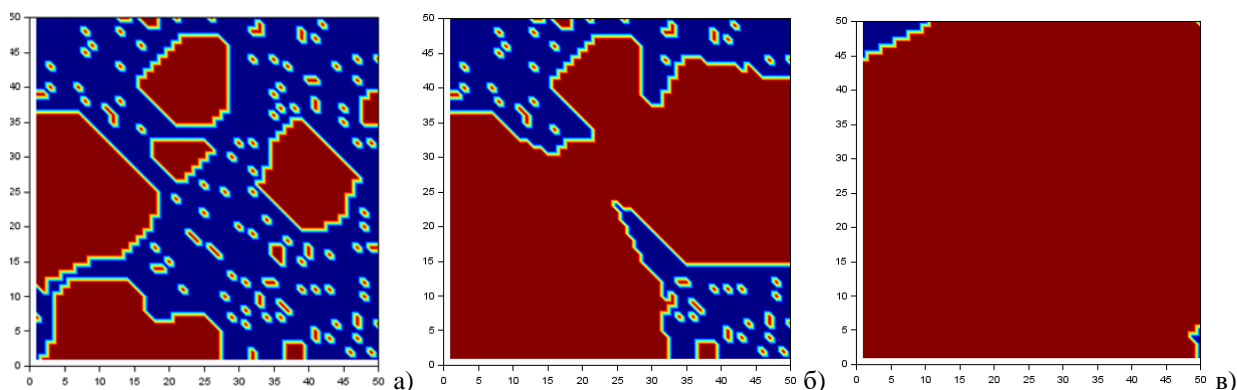
$$P_i \sim \exp\left(-\frac{E_{A(i)}}{k_B T}\right), \quad (3)$$

де  $P_i$  – імовірність заповнення вільного вузла субмоноатомного шару  $i$ ;  $E_{A(i)}$  – енергія активації процесу;  $k_B$  – стала Больцмана;  $T$  – температура підкладки.

Нами розроблено та реалізовано алгоритм, що моделює механізм двовимірного субмоноатомного росту кристалічної плівки простої кубічної структури із використанням острівного механізму, де критерієм заповнення вузла є кількість найближчих заповнених вузлів. Початковою умовою роботи алгоритму є наявність острівців росту із заповненими вузлами субмоноатомного шару плівки. Такі острівці росту можуть формуватися на стадії попереднього циклу обробки поверхні шляхом введення речовин, які є каталізаторами процесу росту, або обробкою поверхні методом іонної імплантації.



**Рис.6.** Початкове формування острівців росту на поверхні кристалу (12%, 18% 25% на рис а, б та в відповідно).



**Рис.7.** Двовимірний процес заповнення верхнього шару плівки для різних початкових умов формування: 11% -- (а) – 34-ий, (б) – 68-ий, (в) – 104-ий крок ітерації.

На початку роботи алгоритму на матриці розмірністю  $50 \times 50$ , що моделює поверхню на якій росте плівка, задаємо випадковим чином острівці росту. Відносна частка острівців у загальній кількості елементів матриці є додатковим параметром моделювання. На рис. 6 показано стан поверхні із відносними частками острівців росту: 12%, 18% та 25%, які розміщені випадковим чином на поверхні кристалу.

Умова заповнення шару плівки у деякому вузлу визначається кількістю заповнених вузлів, що є найближчими до заданого. Якщо кількість заповнених вузлів перевищує, або рівна половині усіх найближчих до даного, то формується верхній шар. Для кутових елементів матриці це означає що верхній шар має бути сформований більш ніж у одному вузлі, для граничних вузлів вздовж грані кристалу – більш ніж у двох, а у вузлах що не знаходяться на краю поверхні кристалу – більш ніж у чотирьох.

На рис. 7 показано заповнення поверхні кристалу на різних стадіях росту плівки: 33% , 66% та майже 100% заповнення поверхні для початкового значення коефіцієнта заповнення поверхні що становить 12%.

Для поверхні з початковим заповненням 12% ці фази відповідають 18-ій, 41-ій та 77-ій ітераціям виконання алгоритму.

У нашій моделі швидкість формування плівки

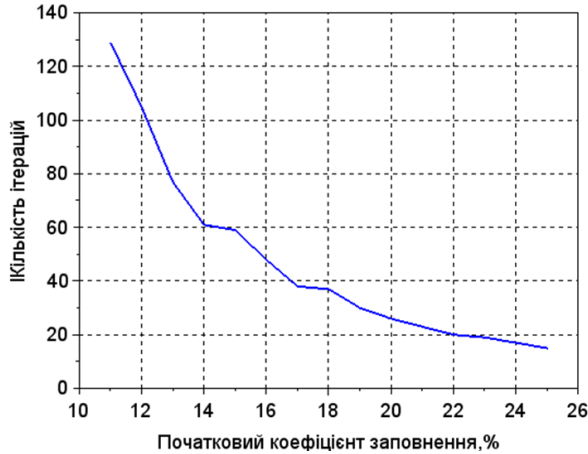
очевидно залежить від початкового коефіцієнту заповнення поверхні острівцями росту. Графік цієї залежності приведений на рис.8.

Аналіз розробленого алгоритму показує, що зменшення частки початкового заповнення призводить до того, що на поверхні більше немає вузлів, що відповідають умовам формування нового шару, хоча значна частина поверхні залишається при цьому не вкритою новим шаром. Фактично при цьому почнеється ріст наступного шару, тобто можливо відбудеться перехід до тривимірного процесу росту плівки, що може бути небажаним ефектом. Тобто, при малих коефіцієнтах заповнення початкової поверхні росту існують конфігурації початкових острівців, при яких спостерігається якісний двовимірний ріст плівки. Визначення усіх можливих початкових конфігурацій, сприятливих для двовимірного росту, є задачею, що вимагає значних затрат обчислювальної потужності. Приведемо оцінки складності для параметрів задачі, які ми використали, для моделювання двовимірного росту. Матриця, що визначає початкову поверхню, має розмірність  $50 \times 50$ . Формування нового шару не відбувається, якщо коефіцієнт заповнення менший ніж 10%, тобто це 250 вузлів початкової поверхні. Таким чином, кількість різних способів розміщення острівців росту  $N$  визначається за формулою (4):

$$N = C_{2500}^{250} = \frac{2500!}{250! \cdot 2250!} \approx \frac{2500^{2500} \cdot \sqrt{5000 \cdot \pi}}{250^{250} \cdot 2250^{2250} \cdot \sqrt{500 \cdot \pi} \cdot \sqrt{4500 \cdot \pi}} = \frac{2500^{2500}}{250^{250} \cdot 2250^{2250} \cdot \sqrt{450 \cdot \pi}} \quad (4)$$

або:

$$\ln(N) = 2500 \cdot \ln(2500) - 250 \cdot \ln(250) - 2250 \cdot \ln(2250) - \ln(\sqrt{(450 \cdot \pi)}) \approx 130, \quad \text{отже } N = e^{130}.$$



**Рис.8.** Графік залежності кількості циклів необхідних для побудови одного шару від початкового коефіцієнту заповнення поверхні

Для початкового заповнення поверхні кристалу острівцями на рівні 11% серед 40 варіантів випадкового початкового розміщення острівців були визначені 36 розміщень острівців, що призводять до повного заповнення поверхні другим шаром протягом 69, 77, 83, 88, 93, 98, 105, 110, 120, 130 та 145 ітерацій.

Очевидно, що вибір початкового розміщення острівців має науково-практичне значення. Шляхом проведення чисельного експерименту ми визначили кілька початкових конфігурації для низьких коефіцієнтів заповнення площі кристалу осередками росту другого шару плівки.

## Обговорення результатів і висновки

Нами розглянуто основні механізми формування кристалічних плівок на плоскій поверхні: двовимірний, тривимірний та ріст гольчатих кристалів. Для режиму тривимірного росту розглянуто алгоритм Фосса. Одновимірну статистику

приростів висоти кристалу, що очевидно залежить від двох факторів – швидкості надходження адсорбованих атомів та швидкості випаровування, можна застосувати для моделювання процесів росту гольчатих кристалів, що є важливим для застосування у конструюванні сучасних матеріалів для нанoeлектроніки.

Нами також запропонований алгоритм побудови поверхні кристалу, що моделює процес двовимірного росту, або росту плівки у вигляді субмоноатомного шару. Для роботи алгоритму потрібно задати початкові осередки формування нової поверхні, які можуть бути пов'язані з технологічними особливостями нанесення плівок у вигляді каталізаторів процесу кристалізації, наприклад, локальному введенні домішок або попередньому обробленню поверхні. Проаналізовано найбільш вагому характеристику алгоритму – початковий коефіцієнт заповнення поверхні острівцями росту, та визначений кількісний вплив цього коефіцієнту на швидкість росту поверхні, яка визначається кількістю ітерацій необхідних для переходу від початкового стану до повністю сформованої субмоноатомної плівки. Статистика росту протягом кожної ітерації визначалася за кількістю найближчих вузлів, у яких осаджені адсорбовані атоми. Розроблений нами алгоритм потенційно може бути використаний для моделювання процесів переходу від двовимірного до тривимірного механізмів росту плівки на поверхні кристалу.

**Політанський Р.Л.** - д.т.н., професор кафедри радіотехніки та інформаційної безпеки;  
**Горбулик В.І.** - к.т.н., доцент кафедри радіотехніки та інформаційної безпеки;  
**Когут І.Т.** - д.т.н., професор, завідувач кафедри комп'ютерної інженерії та електроніки;  
**Вістак М.В.** - д.т.н., професор кафедри біофізики.

- [1] Tracy, Craig & Widom, Harold. On orthogonal and symplectic matrix ensembles. Communications in Mathematical Physics 177, 727 (1996); <https://doi.org/10.1007/BF02099545>.
- [2] Tetsuo Deguchi, Introduction to solvable lattice models in statistical and mathematical physics (2003); <https://doi.org/10.1201/9781420034615.ch5>.
- [3] Andrea Levi, & Miroslav Kotrla Theory and Simulation of Crystal Growth. Journal of Physics Condensed Matter 9, 299 (1996); <https://doi.org/10.1088/0953-8984/9/2/001>.
- [4] O. Kallenberg, Foundations of Modern Probability, Second Edition, Springer (2002).
- [5] Marcus Turowski, & Marco Jupé, & Henrik Ehlers, & Thomas Melzig, & Andreas Pflug, & Detlev Ristau, Simulation in thin film technology. Conference: Proc. SPIE, Optical Systems Design 2015: Advances in Optical Thin Films 9627 (2015); <https://doi.org/10.1117/12.2191693>.
- [6] S.Piana, & J. Gale Three-dimensional kinetic Monte Carlo simulation of crystal growth from solution. Journal of Crystal Growth 294, 46 (2006); <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2006.05.020>.

- [7] Asmae, Elalami, "Three-dimensional numerical simulation of crystal growth using TSM under g-jitter conditions" Theses and dissertations. Paper 776 (2008).
- [8] R.F. Foss *Fundamental Algorithms in Computer Graphics*. Berlin: Springer Verlag, 805–835 (1985).
- [9] Mark Bowick, & Alex Travesset *The Statistical Mechanics of Membranes*. Physics Reports 344 (2000); [https://doi.org/10.1016/S0370-1573\(00\)00128-9](https://doi.org/10.1016/S0370-1573(00)00128-9).
- [10] A.O. Druzhynin, et al. Analysis of growth kinetics of silicon nanowires, *Nanosystems, nanomaterials, nanotechnologies* 9(4), 933-940 (2011).
- [11] Alexei Borodin, & Vadim Gorin *Lectures on integrable probability*, (2012).
- [12] R.L. Politanskyi, M.V. Vistak, G.I. Barylo and A.S. Andrushchak, Simulation of anti-reflecting dielectric films by the interference matrix method, *Optical Materials* 102, 109782 (2020).
- [13] Brendan Kayes & Michael Filler & Morgan Putnam & Michael Kelzenberg & Nathan Lewis & Harry Atwater. Growth of vertically aligned Si wire arrays over large areas with Au and Cu catalysts. *Applied Physics Letters* 91 (2007); <https://doi.org/10.1063/1.2779236>.
- [14] M. Vistak, Z. Mykytyuk, F. Vezyr, V. Polishchuk, Cholesteric-nematic mixture as a sensitive medium of optical sensor for amino acids. *Molecular Crystals and Liquid Crystals* 672(1), 67 (2018).
- [15] O.Sushynskyi, M. Vistak, Z. Gotra, F. Andriy, Z. Mikityuk, Silicon dioxide nanoporous structure with liquid crystal for optical. *Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering* 9127, 91271F (2014).
- [16] A. Druzhinin, I. Ostrovskii, Yu. Khoverko, K. Rogacki, I. Kogut, V. Golota *Nanoscale polysilicon in sensors of physical values at cryogenic temperatures*, *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* 29, 8364 (2018); <https://doi.org/10.1007/s10854-018-8847-0>.
- [17] I.T. Kogut, V.I. Holota, A.A. Druzhinin, V.V. Dovhij, The device-technological simulation of local 3D SOI-structures. *Journal of Nano Research* 39, 228 (2016); <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/JNanoR.39>.
- [18] M. Masin, M. Kortla *Pulsed Deposition vs. Continuous Growth: Monte Carlo Study of Submonolayer Regime*, *E-J. Surf. Sci. Nanotech* 8, 65 (2010).

R.L. Politanskyi<sup>1</sup>, V.I. Gorbulyk<sup>1</sup>, I.T. Kogut<sup>2</sup>, M.V. Vistak<sup>3</sup>

## Modeling of growth process on the surface of crystals

*Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University, Ukraine, Chernivtsi, [r.politansky@chnu.edu.ua](mailto:r.politansky@chnu.edu.ua),  
Vasyl Stefanyk Precarpathian National University, Ukraine, Ivano-Frankivsk,  
Danylo Halytsky Lviv National Medical University, Ukraine, Lviv*

The article is devoted to modelling the growth of thin films on the surfaces of crystals having a similar crystal structure with a small parameter of mismatch of the lattice of substances from which the film and the crystal substrate are formed. A review of modelling methods based on both analytical expressions and computational methods is made. A number of methods for modelling the most typical processes: surface formation in the form of pyramidal formations (so-called needle crystals), two-dimensional with initial islands of growth and three-dimensional uneven growth processes. To model the process of growth of needle crystals, it is proposed to use a method based on Gaussian statistics of surface height increments. The model of three-dimensional growth of the crystal surface, which uses the iterative algorithm of Foss, and which makes it possible to investigate the processes of stepped, uneven growth of crystals, is also considered. In contrast to stepwise growth, a model of submonolayer growth of a film based on the Monte Carlo method is considered. For submonolayer growth of the film, pseudo-random sequences are used, which simulate the initial arrangement of the nuclei of the nucleus of the next layer on the crystal surface. The computational characteristics of this method are determined, namely the dependence of the number of iterations on the initial surface filling coefficient

**Keywords:** Monte Carlo method, crystal growth, analytical methods.