



**MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ
FAKULTA**
Univerzita Karlova

DIPLOMOVÁ PRÁCE

Vít Gabriel

Studium depozice tenkých vrstev postupy počítačové fyziky

Katedra fyziky povrchů a plazmatu

Vedoucí diplomové práce: prof. RNDr. Rudolf Hrach, DrSc.

Studijní program: Fyzika

Studijní obor: Teoretická fyzika

Praha 2018

Prohlašuji, že jsem tuto diplomovou práci vypracoval(a) samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V dne

Podpis autora

Děkuji prof. RNDr. Rudolfu Hrachovi, DrSc. za vedení mé diplomové práce a spoustu cenných rad a připomínek při konzultacích. Děkuji i své rodině a přítelkyni za podporu nejen během tvorby této práce ale i během celého studia.

Název práce: Studium depozice tenkých vrstev postupy počítačové fyziky

Autor: Vít Gabriel

Katedra: Katedra fyziky povrchů a plazmatu

Vedoucí diplomové práce: prof. RNDr. Rudolf Hrach, DrSc., Katedra fyziky povrchů a plazmatu

Abstrakt: Tato práce je zaměřena na návrh a použití metod počítačové fyziky a metod zpracování obrazu pro studium růstu tenkých vrstev. V první části práce věnované metodě molekulární dynamiky je vytvořen model růstu. Ten je poté použit na určení konfigurací ostrůvků, které mají méně než jedenáct atomů, a popis koalescence malých ostrůvků obsahujících řádově stovky atomů. Výsledky získané pomocí metody molekulární dynamiky jsou použity pro tvorbu modelu růstu tenkých vrstev metodou Monte Carlo. Tento model je následně použit pro simulaci při použití vakuového napařování se spojitým a přerušovaným tokem částic. Následně byly získané výsledky zpracovány metodami zpracování obrazu, konkrétně pomocí rozdělení poloměrů a metody Quadrat Counts.

Klíčová slova: tenké vrstvy, Monte Carlo, molekulární dynamika

Title: Study of deposition of thin films by methods of computational physics

Author: Vít Gabriel

Department: Department of Surface and Plasma Science

Supervisor: prof. RNDr. Rudolf Hrach, DrSc., Department of Surface and Plasma Science

Abstract: This diploma thesis is focused on the design and application of computational physics and image analysis methods. These methods are then used to study early stages of thin films growth. The first section of this thesis is devoted to create molecular dynamics growth model. This model is used to determine the configurations of very small islands containing less than eleven atoms and to describe the coalescence of islands containing hundreds of atoms. The results from the molecular dynamics model are then used as input to the Monte Carlo model. The Monte Carlo model is then used to describe the continuous and pulsed vacuum evaporation methods. The obtained results from the Monte Carlo model are processed by image analysis methods, namely radii distribution and Quadrat Counts method.

Keywords: thin films, Monte Carlo, molecular dynamics

Obsah

Úvod	2
1 Tenké vrstvy	3
1.1 Růst tenkých vrstev	3
2 Počítačové modelování	5
2.1 Monte Carlo	5
2.1.1 Kinetické Monte Carlo	5
2.2 Metoda molekulární dynamiky	6
2.2.1 Verletův algoritmus	6
2.2.2 Meziatomární potenciály	7
2.2.3 Kontrola teploty	8
2.2.4 Metody urychlení simulace	9
3 Zpracování obrazu	11
3.1 Informace o jednotlivých objektech	11
3.2 Morfologické metody	11
3.2.1 Quadrat Counts	12
3.2.2 Radiální distribuční funkce	12
3.2.3 Rozdělení nejbližších sousedů	12
3.2.4 Voronoiovo dláždění	12
4 Molekulární dynamika	15
4.1 Uspořádání velmi malých ostrůvků	15
4.2 Slévání větších ostrůvků	17
5 Monte Carlo	19
5.1 Spojitá depozice částic	22
5.2 Pulzní depozice částic	32
6 Shrnutí výsledků	43
6.1 Porovnání s daty z experimentu	43
Závěr	46
Seznam použité literatury	47
Seznam obrázků	49
7 Přílohy	51

Úvod

Atomy v objemu tělesa jsou ze všech stran obklopeny dalšími atomy, které na sebe působí. V případě povrchu nebo tenké vrstvy je tato souměrnost narušena. To zapříčiňuje, že v těchto případech mohou fyzikální procesy probíhat jinak, nebo mohou vznikat procesy, které se v objemu tělesa nevyskytují. Tyto procesy, které mohou mít klasickou i kvantovou podstatu, mohou mít užitečné praktické využití například v optice (úprava povrchů čoček, zrcadel), chemii (ochranné vrstvy, výroba čidel), elektronice (elektronické prvky) a dalších odvětvích. Příprava a popis tenkých vrstev experimentálními i teoretickými metodami je příliš náročná, proto se takové systémy vyplatí zkoumat metodami počítačové fyziky.

Protože samotné výsledky získané z modelů vytvořených metodami počítačové fyziky, by nám bez dalšího zpracování příliš neřekly, je třeba použít metody zpracování obrazu. Tyto metody, jejichž zástupcem je například radiální distribuční funkce nebo metoda Quadrat Counts, nám dovolují porovnávat a interpretovat získané výsledky. Tyto metody mají využití nejen v rámci počítačové fyziky, ale i v rámci zpracování výsledků experimentů, což nám dovoluje porovnávat výsledky získané ze simulací s výsledky naměřenými v laboratoři.

1. Tenké vrstvy

1.1 Růst tenkých vrstev

Tenké vrstvy různých materiálů se nejčastěji připravují pomocí vakuového napařování nebo naprašování, kdy částice dopadají na substrát rychlostí danou teplotou zdroje částic. V závislosti na použité technologii mohou dopadat částice buď spojitě, nebo při použití pulzní depozice (laserové nebo plazmatické) s prodlevami. Pro různé technologie se liší kinetické energie (teploty) dopadajících částic a typy dopadajících částic. Zatím co při použití vakuového napařování/naprašování dopadají jednotlivé neutrální atomy s relativně malou kinetickou energií (teplotou v řádu stovek Kelvinů), při použití laserové depozice mohou dopadající částice mít teploty i několik tisíců Kelvinů. Při použití plazmatické depozice mohou být kromě neutrálních atomů nanášeny i atomy s nenulovým nábojem nebo celé klastry atomů.

Dopadající částice se mohou v závislosti na jejich teplotě a teplotě substrátu v krajních případech buď pružně odrazit nebo velmi rychle akomodovat na substrátu. Pokud je kinetická energie dopadajících částic velmi vysoká, může dojít i k porušení povrchu substrátu. V případě, který není krajní, dochází k tomu, že dopadající částice po svém dopadu po podložce migruje. Během migrace částice přechází mezi minimy periodického potenciálu, který je na povrchu substrátu. Rychlost migrace je dána vztahem

$$\tau = \tau_0 \cdot \exp\left(\frac{E_{dif}}{k_b T}\right), \quad (1.1)$$

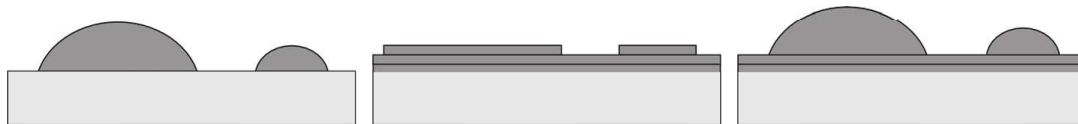
kde E_{dif} je energie potřebná k přechodu mezi dvěma sousedními minimy, $1/\tau_0$ je perioda kmitů atomů podložky ($\tau_0 \sim 10^{-13} s$), k_b je Boltzmannova konstanta, T je teplota podložky a τ je střední doba přechodu mezi sousedními minimy. Podobně lze též určit střední dobu, za jakou se částice z podložky odpaří, τ_d vztahem:

$$\tau_d = \tau_0 \cdot \exp\left(\frac{E_{des}}{k_b T}\right), \quad (1.2)$$

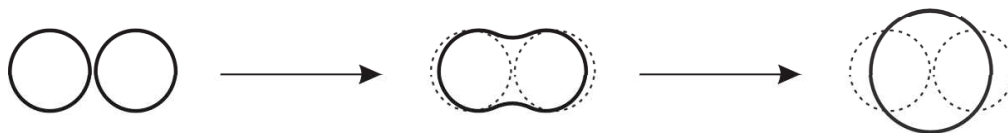
kde E_{des} je energie desorpce. Energie desorpce je běžně mnohem větší než energie difuze.

V závislosti na silách působících mezi dopadajícími atomy a podložkou mohou vznikat tři různé typy růstu zobrazené na obrázku 1.1.

- van der Merweův - růst probíhá po vrstvách, v tomto módu růstu jsou síly adsorbát - povrch a adsorbát - adsorbát přibližně stejné
- Volmerův-Weberův - probíhá ostrůvkový růst tenkých vrstev, síly adsorbát - adsorbát jsou silnější než síly adsorbát - povrch
- Stranského-Krastanovův - první naroste několik vrstev, na kterých se později začnou tvořit ostrůvky, síly adsorbát - adsorbát jsou menší než síly adsorbát - povrch



Obrázek 1.1: Módy růstu tenkých vrstev Volmerův-Weberův, van der Merweův, Stranského-Krastanovův, převzato z (Šimek, 2006)



Obrázek 1.2: Znázornění procesu koalescence, převzato z (Šimek, 2006)

Pokud se v případě Volmerova-Weberova růstu potkají migrující atomy (přesný počet závisí na použitých materiálech, v případě kovů a dielektrických podložek obvykle stačí dva), vytvoří kondenzační jádro, kolem kterého se dalším přidáváním migrujících atomů vytváří ostrůvek. Toto jádro je obvykle nepohyblivé nebo jen mnohem méně pohyblivé než jednotlivé atomy. Pokud se na povrchu nachází porucha, může dojít k takzvanému dekoračnímu jevu, kdy stačí jediný atom pro tvorbu kondenzačního jádra. Samotný růst pak lze rozdělit do čtyř fází:

- nukleace (tvorba kondenzačních jader)
- růst kondenzačních jader a vytváření větších ostrůvků
- tvorba polospojité vrstvy sléváním ostrůvků
- zaplňování kanálků

V případě setkání dvou ostrůvků dochází k takzvané koalescenci, jinak též slévání, znázorněné na obrázku 1.2. Dle (Eckertová, 1986) se během slévání oba pevné ostrůvky chovají jako kapalina. Po dokončení slévání se výsledný ostrůvek opět chová jako krystalit. V případě třírozměrného růstu se na podložce uvolní místo, kde se dříve nacházely ostrůvky. V tomto prázdném prostoru se celý proces od začátku opakuje - dochází k sekundární nukleaci.

2. Počítačové modelování

Alternativou experimentálního a teoretického přístupu k řešení fyzikálních problémů je počítačové modelování (jako podstatná technika počítačové fyziky). Po vytvoření modelu daného fyzikálního systému se pomocí simulací provádí samotný experiment. Modelovací techniky se běžně dělí do dvou kategorií:

- částicové - Monte Carlo, molekulární dynamika
- spojité - například řešení magnetohydrodynamických rovnic ve fyzice plazmatu, Navier-Stokesových rovnic ve fyzice tekutin.

Vedle toho se stále více uplatňují hybridní metody kombinující částicový a spojitý přístup, případně obě techniky částicového přístupu, a využívající výhody obou (výrazně lepší vypovídací schopnost částicových technik a mnohem vyšší efektivitu technik spojitých).

V této práci se budeme zabývat pouze částicovými metodami.

2.1 Monte Carlo

Metoda Monte Carlo je metoda stochastická. Na rozdíl od metody molekulární dynamiky metoda Monte Carlo neřeší pohybové rovnice, ale podle zadaných pravidel generuje přechod mezi jednotlivými stavy systému. Metody založené na metodě Monte Carlo lze rozdělit na rovnovážné a kinetické. Nejjednodušším příkladem rovnovážného Monte Carla je Metropolisův algoritmus (Metropolis a kol., 1953). Realizace jednoho kroku této metody je následující:

- podle nějakého daného kritéria je vybrána částice systému
- náhodně se posune danou částicí - vytvoří se nová testovací konfigurace
- spočítá se změna potenciální energie systému ΔV
- konfigurace je přijata s pravděpodobností $P = \min\{1, \exp(-\Delta V/k_b T)\}$, kde k_b je Boltzmannova konstanta a T je teplota

2.1.1 Kinetické Monte Carlo

Pokud chceme simulovat časový vývoj systému, pak nám běžný Metropolisův algoritmus ve výše uvedené podobě nestačí. Potřebujeme, aby pravděpodobnost přechodu závisela na čase nebo aby se přechod stal až po době větší, než je střední doba přechodu mezi stavy. Z tohoto požadavku nám plynou dvě běžně používané metody - Rejection Kinetic Monte Carlo (RKMC) a Rejection-free Kinetic Monte Carlo (RfKMC).

Metoda RKMC funguje na podobném principu jako Metropolisův algoritmus (tzn. vytvoříme testovací konfiguraci a s nějakou pravděpodobností ji přijmeme), ale pravděpodobnost přechodu mezi jednotlivými stavy může být závislá i na čase. Mohou se objevovat i odmítnuté konfigurace, to znamená „nemožné“ přechody.

Metoda RfKMC (někdy též Bortzův-Kalosův-Lebowitzův algoritmus (Bortz a kol., 1975)) naopak ze všech možných stavů, do kterých může systém přejít, jeden náhodně vybere a zrealizuje ho. Nemůže tedy dojít k odmítnutí nové konfigurace, protože všechny „nemožné“ přechody jsou předem vyloučeny.

Pro zjednodušení uvedeme příklad migrující částice na podložce s čtvercovou mříží. Pro jeden krok může metoda RKMC vygenerovat novou pozici na libovolném místě v prostoru. Většina těchto pozic by byla přirozeně zamítnuta, protože by byla velmi malá pravděpodobnost, že by se v nich mohla částice nacházet. Jednalo by se například o pozice, které by byly příliš daleko. Samozřejmě, že po velkém množství pokusů, by byla vygenerována vhodná nová konfigurace - částice se nachází ve vedlejším bodě krystalové mříže. Pokud bychom měřili střední počet pokusů potřebných k vygenerování přijatelné pozice, tak můžeme určit pomocí času τ z rovnice 1.1, jakému časovému kroku odpovídá jeden krok metody RKMC.

Naopak při použití metody RfKMC známe délku časového kroku. Jedná se o čas τ z rovnice 1.1. Také v našem příkladu víme, které konfigurace jsou přijatelné. Proto místo velkého množství odmítnutých konfigurací vygenerujeme okamžitě jednu přijatou. V našem příkladu bude nová konfigurace odpovídat posunu částice v jednom ze čtyř možných směrů s pravděpodobností $1/4$ pro každý z nich.

Z výše uvedeného příkladu je zřejmá výhoda metody RfKMC a to, že můžeme volit mnohem větší časový krok než v metodě RKMC. Ve složitějších případech se ale projevuje větší paměťová náročnost metody RfKMC proti metodě RKMC.

2.2 Metoda molekulární dynamiky

Molekulární dynamika je deterministická metoda založena na integraci pohybových rovnic pro N částic systému

$$m_i \cdot \mathbf{a}_i = \mathbf{f}_i, i = 1, \dots, N, \quad (2.1)$$

kde m_i je hmotnost částice, $\mathbf{a}_i = \ddot{\mathbf{r}}_i$ její zrychlení a $\mathbf{f}_i = -\nabla V$ síla na ni působící vyvolaná všemi částicemi v systému a případnou vnější silou. Částice se pohybují v potenciálu $V = V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$.

Rovnice 2.1 nám definuje soustavu N obyčejných diferenciálních rovnic. Řešení těchto rovnic je založeno na metodě konečných diferencí s časovým krokem h . Největším problémem řešení těchto rovnic je časová náročnost výpočtu sil, kdy je třeba počítat interakci všech částic navzájem.

Typickou metodou používanou pro řešení těchto rovnic je Verletův algoritmus (Verlet, 1967).

2.2.1 Verletův algoritmus

Verletův algoritmus je založený na přepisu sady rovnic 2.1 rozvojem $\mathbf{r}_i(t \pm h)$ pomocí Taylorovy řady

$$\ddot{\mathbf{r}}_i(t) = \frac{1}{h^2} (\mathbf{r}_i(t-h) - 2\mathbf{r}_i(t) + \mathbf{r}_i(t+h)) + O(h^2). \quad (2.2)$$

Dosažením rozvoje 2.2 do rovnice 2.1 a zanedbáním chyby získáme předpis pro polohu částice \mathbf{r}_i v čase $t + h$ ve tvaru

$$\mathbf{r}_i(t+h) = 2\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(t-h) + h^2 \frac{\mathbf{f}_i(t)}{m_i}. \quad (2.3)$$

Vzorec 2.3 se nazývá Verletův algoritmus. Tento algoritmus je přesný do čtvrtého řádu, stabilní, časově reverzibilní a jednoduchý na implementaci. Nevýhodou tohoto algoritmu je, že kromě počáteční podmínky v čase t_0 potřebujeme znát i počáteční podmínku v čase $t_0 - h$. Dále nám nic neříká o rychlostech jednotlivých částic, které jsou například potřeba k výpočtu teploty systému. Proto se často používá Verletův algoritmus upravený do tvaru

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_i(t+h) &= \mathbf{r}_i(t) + h\mathbf{v}_i(t) + \frac{h^2}{2} \frac{\mathbf{f}_i(t)}{m_i}, \\ \mathbf{v}_i\left(t + \frac{h}{2}\right) &= \mathbf{v}_i(t) + \frac{h}{2} \frac{\mathbf{f}_i(t)}{m_i}, \\ \mathbf{f}_i(t+h) &= -\nabla V(\mathbf{r}_i(t+h)), \\ \mathbf{v}_i(t+h) &= \mathbf{v}_i\left(t + \frac{h}{2}\right) + \frac{h}{2} \frac{\mathbf{f}_i(t+h)}{m_i}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Tento algoritmus se nazývá Verletův rychlostní algoritmus. Jeho výhodou je, že jako počáteční podmínky stačí rychlost a poloha v čase t_0 , dává nám informaci o rychlostech částic i přesto, že se síla počítá jen jednou a není třeba ukládat polohy částic ve více krocích. Má též všechny výhody běžného Verletova algoritmu.

2.2.2 Meziatomární potenciály

Pro řešení pohybových rovnic potřebujeme vědět, v jakém potenciále se částice pohybují. Nejjednodušší potenciál popisující interakci dvou neutrálních atomů nebo molekul je Lennard-Jonesův potenciál (Jones, 1924)

$$V_{LJ}(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right], \quad (2.5)$$

kde parametr ε má rozměr energie a σ rozměr délky. Pro $r_m = \sqrt[6]{2}\sigma$ nabývá potenciál minima $V(r_m) = -\varepsilon$.

Tento potenciál se skládá ze dvou částí - odpudivé, která popisuje odpuzování elektronových obalů atomů, a přitažlivé van der Waalsovy síly. Potenciál je vhodný pro popis vzácných plynů. Stejně jako všechny ostatní párové potenciály nepopisuje přesně kovy nebo polovodiče. I tak se používá, pokud se studuje probíhající proces a ne chování konkrétního materiálu.

Dalšími potenciály používanými pro simulace ve fyzice tenkých vrstev jsou například Suttonovy-Chenovy potenciály (Sutton a Chen, 1990), které byly navrženy pro popis (fcc) kovů

$$V_{SC}(r) = \varepsilon_{SC} \left[\left(\frac{a^f}{r}\right)^n - \frac{nS_f^n}{mS_f^m} \left(\frac{a^f}{r}\right)^m \right], \quad (2.6)$$

kde ε_{SC} je parametr, který má rozměr energie, a^f je mřížová konstanta (fcc) krystalu a n a m jsou přirozená čísla, pro které platí $n > m$. Funkce S_f^n je dána předpisem

$$S_f^n = \sum_j \left(\frac{a^f}{r_j} \right)^n. \quad (2.7)$$

2.2.3 Kontrola teploty

Protože při simulacích pomocí metody molekulární dynamiky dochází vlivem zaokrouhlovacích chyb k nefyzikálnímu ohřevu systému, je třeba jeho teplotu kontrolovat a korigovat. Teplotu systému T určujeme z rychlostí částic pomocí známého vzorce

$$\frac{3}{2}k_bT = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{v}_i^2, \quad (2.8)$$

kde k_b je Boltzmannova konstanta. Pro kontrolu teploty systému se používají takzvané termostaty. Nejjednodušším termostatem je Berendsenův termostat (Berendsen a kol., 1984), který přímo přeskálovává rychlosti jednotlivých částic tak, aby teplota celého systému $T(t)$ v čase t odpovídala požadované teplotě T_0

$$\mathbf{v}'(t) = \sqrt{\frac{T_0}{T(t)}} \mathbf{v}(t), \quad (2.9)$$

kde $\mathbf{v}'(t)$ je upravená rychlost v čase t . Tento termostat se hodí na ustalování systému během přípravy výpočtů. Pro samotnou simulaci není vhodný, protože okamžitě tlumí všechny tedy i fyzikální fluktuace teploty.

Vhodnějším termostatem je Nosého-Hooverův termostat (Nosé (1984), Hoover (1985)). Tento termostat pracuje s virtuálním rezervoárem. Částice systému jsou v závislosti na znaménku tlumicího koeficientu tepelné lázně η zpomalovány nebo urychlovány. Teplota systému fluktuuje kolem požadované teploty. Pohybové rovnice systému jsou ve tvaru

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{r}}_i &= \frac{\mathbf{p}_i}{m_i}, \\ \dot{\mathbf{p}}_i &= \mathbf{f}_i - \eta \mathbf{p}_i, \\ \dot{\eta} &= \frac{1}{Q} \left(\sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{m_i} - gk_bT \right), \\ Q &= gk_bT\tau^2, \end{aligned} \quad (2.10)$$

kde g je počet stupňů volnosti systému a τ je parametr Nosé-Hooverova termostatu, který říká, jak moc termostat tlumí teplotní fluktuace systému. Při použití Nosé-Hooverova termostatu rovnice 2.4 pro řešení systému 2.1 přejdou do

tvaru

$$\begin{aligned}
\mathbf{r}_i(t+h) &= \mathbf{r}_i(t) + h\mathbf{v}_i(t) + \frac{h^2}{2} \left[\frac{\mathbf{f}_i(t)}{m_i} - \eta(t)\mathbf{v}_i(t) \right], \\
\mathbf{v}_i\left(t + \frac{h}{2}\right) &= \mathbf{v}_i(t) + \frac{h}{2} \left[\frac{\mathbf{f}_i(t)}{m_i} - \eta(t)\mathbf{v}_i(t) \right], \\
\eta\left(t + \frac{h}{2}\right) &= \eta(t) + \frac{h}{2Q} \left[\sum_i m_i \mathbf{v}_i^2(t) - gk_b T \right], \\
\eta(t+h) &= \eta\left(t + \frac{h}{2}\right) + \frac{h}{2Q} \left[\sum_i m_i \mathbf{v}_i^2\left(t + \frac{h}{2}\right) - gk_b T \right], \\
\mathbf{f}_i(t+h) &= -\nabla V(\mathbf{r}_i(t+h)), \\
\mathbf{v}_i(t+h) &= \frac{2}{2 + \eta(t+h)h} \left[\mathbf{v}_i\left(t + \frac{h}{2}\right) + \frac{h}{2} \frac{\mathbf{f}_i(t+h)}{m_i} \right].
\end{aligned} \tag{2.11}$$

2.2.4 Metody urychlení simulace

Protože řešení pohybových rovnic 2.1 pouze užitím soustavy rovnic 2.11 by bylo příliš pomalé, používá se několik metod, které mohou potřebný čas několikanásobně zkrátit. Všechny níže uvedené metody mají za cíl co nejvíce zkrátit dobu výpočtu sil působících na jednotlivé atomy, protože tento výpočet zabere většinu času běhu programu. Čím více je v systému atomů, tím větší díl výpočetního času zabírá výpočet sil. To je dáno tím, že výpočet sil se s počtem atomů škáluje kvadraticky, zatímco řešení ostatních rovnic v 2.11 se škálují lineárně s počtem atomů.

Nejjednodušší metodou urychlení je využití faktu, že používané potenciály jsou párové. Proto stačí počítat interakci páru atomů (i, j) pouze jednou a pro jeden z atomů vzít výsledek s opačným znaménkem než pro druhý atom. Tímto je možné v ideálním případě zkrátit dobu výpočtu na polovinu a zároveň tím není nijak ovlivněna přesnost výpočtu.

Druhým způsobem urychlení, který neovlivňuje přesnost výpočtu, je paralelizace výpočtu sil. Tím, že se síly počítají pouze ze vzájemných poloh dvou atomů, které jsou známé před výpočtem sil, a počet atomů je známý, nemůže dojít k běžným problémům, kterými mohou paralelizované programy trpět. Mezi tyto problémy patří například přepisování dat, které aktuálně používá jiné procesorové jádro, používání neaktuálních dat, špatně rozvržená zátěž, která způsobuje, že se na jedno jádro dlouho čeká, atd. Paralelizací je možné v závislosti na počtu jader snížit dobu výpočtu i více než o řád. Další uvedené metody již budou mít vliv na přesnost výpočtu.

Protože se vzrůstající vzájemnou vzdáleností síla působící mezi atomy rychle klesá, zavádí se takzvaný cutoff potenciálu, označení r_c . Pro všechny částice, které jsou od částice i ve vzdálenosti větší než r_c , se potenciál vezme roven nule, tedy

$$V_{LJ}(r) = \begin{cases} 0, & r \geq r_c, \\ 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right], & r < r_c. \end{cases} \tag{2.12}$$

Pro Lennard-Jonesův potenciál se běžné volí $r_c = 2,5\sigma$ nebo $r_c = 3,2\sigma$. Zavedení cutoffu už do výpočtu zanáší chybu, ale ta není příliš velká, $V(2,5\sigma) \approx 0,0163\varepsilon$.

Použití cutoffu by samo o sobě velkým urychlením nebylo, protože by bylo potřeba provést časově náročný výpočet vzdálenosti dvou atomů. Dosazení do potenciálu a samotný výpočet sil není v případě Lennard-Jonesova potenciálu příliš časově náročný. Proto se zavádí seznam nejbližších sousedů. Místo toho, aby se pro každou dvojici atomů kontrolovala podmínka, jestli jsou atomy od sebe dál než r_c , zavede se pro každý atom seznam všech ostatních atomů, které jsou blíže než r_c . Tento list se pak velmi často periodicky aktualizuje. Při modelování tenkých vrstev stačí aktualizovat seznamy dopadajících atomů, protože podložka je krystal a atomy v ní mají své pevné místo. Použitím seznamu nejbližších sousedů je možné zkrátit výpočetní čas až o několik řádů. Například pro (fcc) podložku ve tvaru kvádru se stranami 30, 40 a 6 atomů stačí při volbě $r_c = 2,5\sigma$ místo počítání 7200 interakcí počítat méně než 70 pro libovolnou částici v libovolném místě krystalu. S rostoucí velikostí krystalu je úspora času významnější.

Dalším způsobem urychlení, který sice nebyl v této diplomové práci použit, ale pro úplnost ho zde uvádíme, je tabelizace potenciálů. Tato metoda se používá, pokud je samotný výpočet potenciálu časově složitý. Spočívá v tom, že se předem spočte hodnota potenciálu pro větší množství bodů (s pevným r) a pak se místo výpočtu hodnoty potenciálu jen dosadí hodnota z tabulky. Pokud by byly dva atomy od sebe ve vzdálenosti, která není tabelovaná, tak se hodnota potenciálu lineárně interpoluje ze dvou tabelovaných hodnot, kde jedna je pro nejbližší větší r a jedna pro nejbližší menší r .

3. Zpracování obrazu

Další nedílnou součástí počítačového studia tenkých vrstev jsou metody zpracování obrazu. Cílem těchto metod je zpracování a popsání výsledků získaných pomocí metod počítačové fyziky, obzvláště z metody Monte Carlo. Metody zpracování obrazu se dělí do tří hlavních skupin:

- informace o jednotlivých objektech - rozdělení poloměrů objektů
- metody založené na matematické morfologii - například radiální distribuční funkce, Voronoiovo dláždění, Quadrat Counts, ...
- metody založené na integrální transformaci - například fourierovská optika, waveletová transformace, ...

Metody založené na integrální transformaci překračují rámec diplomové práce a proto se jimi nebudeme dále zabývat.

3.1 Informace o jednotlivých objektech

Skupina metod je zastoupena hlavně rozdělením poloměrů objektů. Metoda nám dává histogram zastoupení objektů o poloměru $r + \Delta r$ a je použitelná pouze pro kruhové objekty, případně pro objekty pravidelných tvarů (eliptické, krystalinity při studiu katalýzy, atd.).

Pro nepravidelné objekty ji lze nahradit rozdělením efektivních poloměrů, které se zkonstruují tak, že pro všechny objekty spočítáme jak velký poloměr by měl kruh o stejné ploše. Následně s touto metodou pracujeme stejně jako s rozdělením poloměrů.

Další charakteristikou pro nepravidelné objekty je rozdělení tvarových faktorů, které nám říká, jak se objekty odlišují od kruhu. Obvykle se tvarový faktor FF volí tak, aby pro kruh platilo $FF = 1$ a klesal s rostoucí deformací objektu.

3.2 Morfologické metody

Morfologické metody nám dávají informaci o celém zpracovávaném obrazu a ne jen o jednotlivých objektech. Obrazem může být informace pouze o polohách středů objektů nebo vykreslené celé plochy objektů. Výsledkem získaným z morfologických metod je morfologická charakteristika nebo takzvaný příznak. Morfologická charakteristika je funkce (například radiální distribuční funkce). Příznakem je jedno číslo (například pro radiální distribuční jím může být útlum kmitů průběhu funkce). Pro metodu Quadrat Counts je morfologická charakteristika zároveň příznakem. Příznak není unikátní pro jeden daný obraz, ale i na první pohled různě vypadající obrazy mohou mít stejný příznak. Díky této vlastnosti můžeme efektivně porovnávat vlastnosti získaných obrazů.

3.2.1 Quadrat Counts

Metoda je založena na opakovaném náhodném umístování čtverce do plochy a počítání počtu středů objektů ve čtverci. Příznakem metody Quadrat Counts je jediné číslo QC , které je definováno jako podíl prvních dvou momentů počtu objektů n ve čtverci

$$QC = \frac{D[n]}{E[n]}. \quad (3.1)$$

$E[n]$ značí střední počet objektů v čtverci a $D[n] = E[n^2] - (E[n])^2$ rozptyl. Pro zcela náhodnou strukturu je $QC \approx 1$ a pro zcela uspořádanou strukturu je $QC = 0$.

3.2.2 Radiální distribuční funkce

Radiální distribuční funkce nám říká, jaká je relativní koncentrace objektů ve vzdálenost r od nějakého objektu. Výstupem z této metody je funkce $RDF(r)$ zadefinovaná

$$RDF(r) = \frac{1}{n_0} \cdot \frac{\Delta n}{2\pi r \Delta r}, \quad (3.2)$$

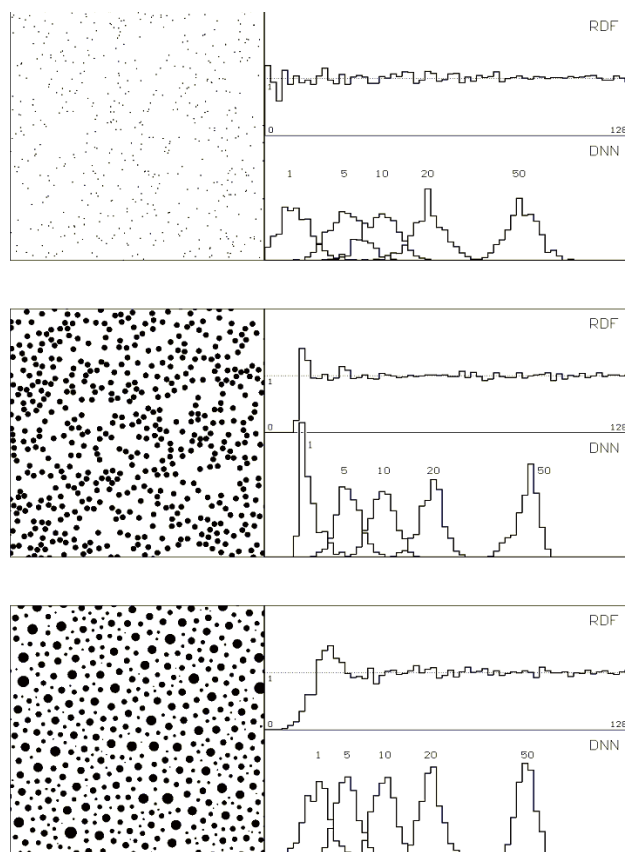
kde Δn je počet objektů nalezených v mezikruží $r + \Delta r$. n_0 je koncentrace objektů ve zkoumané ploše. Pro vyšší přesnost určení $RDF(r)$ opakujeme postup pro více objektů a hodnoty pro dané r průměrujeme. Pro náhodné rozložení objektů v ploše by měla být hodnota $RDF(r) = 1$ pro libovolné r . Průběhy radiální distribuční funkce pro různý stupeň uspořádání jsou znázorněny na obrázku 3.1.

3.2.3 Rozdělení nejbližších sousedů

Toto rozdělení získáme tak, že pro každý objekt nalezneme i . nejbližší objekt. Z takto získaných hodnot uděláme histogram. Příznakem je tedy funkce $DNN(r)$. Příklady tohoto rozdělení jsou uvedeny na obrázku 3.1.

3.2.4 Voronoiovo dláždění

Metoda pracuje s Voronoiovými buňkami. Voronoiova buňka je tvořena body v prostoru (v rovině) obklopující objekt, které jsou k danému objektu blíže než ke všem ostatním objektům. Vzdálenosti je možné počítat buď od středů objektů nebo od hranic objektů. Z této metody můžeme získat několik různých příznaků, například můžeme počítat poměr velikosti buňky vůči velikosti objektu.



Obrázek 3.1: Průběh radiální distribuční funkce a rozdělení nejbližších sousedů v závislosti na uspořádání objektů v ploše, převzato z (Hrach, 2003)

Cíle práce

- Seznámení se s problematikou růstu tenkých vrstev a jejich počítačového modelování.
- Vytvoření molekulárně dynamického a Monte Carlo modelů pro modelování růstu tenkých vrstev.
- Aplikace poznatků získaných v rámci výsledků metody molekulární dynamiky do modelu Monte Carlo.
- Vyhodnocení výsledků získaných z metody Monte Carlo aplikované na spojitou a pulzní depozici pomocí metod zpracování obrazu a porovnání s daty z experimentu.
- Vyhodnocení a diskuze výsledků.

4. Molekulární dynamika

Pomocí metody molekulární dynamiky jsme zkoumali vlastnosti raných fází růstu tenkých vrstev, které pak byly použity jako vstupní parametry pro simulace metodou Monte Carlo. Zkoumané vlastnosti byly:

- uspořádání velmi malých (obsahující tři až deset atomů) ostrůvků a zjištění s jakou pravděpodobností která uspořádání nastávají
- slévání větších ostrůvků.

Všechny molekulárně dynamické simulace byly prováděny pomocí Verletova rychlostního algoritmu 2.4 nebo Verletova rychlostního algoritmu s Nosé-Hooverovým termostatem 2.11. Délka časového kroku byla 10^{-16} s. Časový krok musí být výrazně kratší než nejrychleji probíhající jev, kterým je kmit krystalové mříže s periodou přibližně 10^{-13} s.

V obou dvou případech bylo potřeba nejprve nasimulovat a ustálit podložku, na kterou se poté nanášely atomy. Podložka je kubická plošně centrovaná krystalová mříž (fcc) v řezu (111). Pro simulaci malých ostrůvků byla velikost podložky zvolena $10 \times 10 \times 6$ atomů, pro simulace slévání $30 \times 40 \times 6$ atomů. Samotné ustálení probíhalo ve dvou fázích.

V první fázi jsme umístili atomy do přibližně mřížových bodů požadovaného substrátu a nechali systém vyvíjet. Během této části ustalování byl použit pouze základní Verletův rychlostní algoritmus 2.4 bez jakéhokoliv termostatu. Cílem této části ustalování podložky bylo, aby všechny atomy našly své rovnovážné polohy dané použitým Lennard-Jonesovým potenciálem.

Ve druhé fázi jsme pomocí Berendsenova termostatu 2.9 „zchladili“ podložku na požadovanou teplotu. Všechny simulace probíhaly za přibližně pokojové teploty $T = 300$ K. Po dosažení a ustálení systému na požadované teplotě jsme pomocí Verletova algoritmu s Nosé-Hooverovým termostatem dostali finální konfigurace atomů podložky.

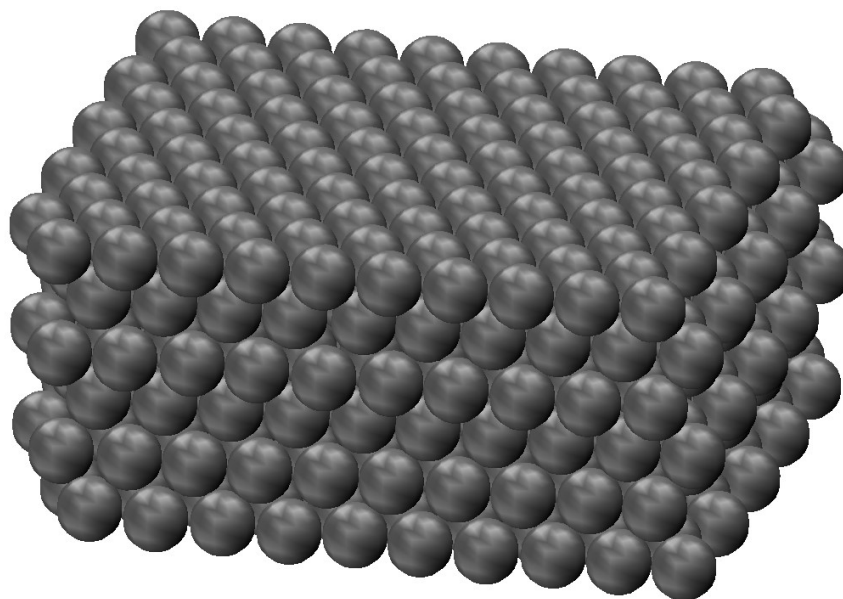
V obou případech byly použity 2D periodické okrajové podmínky v osách x a y . Jejich použitím jsme získali nekonečný povrch.

Na takto připravený substrát se poté nanášely atomy s požadovanou teplotou, která byla v našem případě 600 K. Teplota byla zvolena tak, aby přibližně odpovídala teplotě částic při použití vakuového napařování.

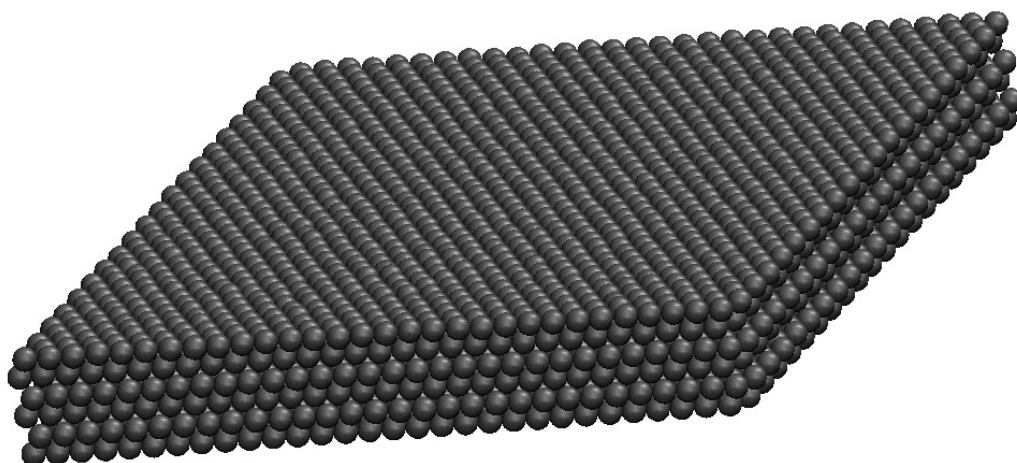
Na obrázcích 4.1 a 4.2 jsou obrázky získaných substrátů. K vykreslení těchto a dalších podobných obrázků v části práce věnované molekulární dynamice byl použit program VMD (Humphrey a kol., 1996), které byl vyvinut „Theoretical and Computational Biophysics Group in the Beckman Institute for Advanced Science and Technology at the University of Illinois at Urbana-Champaign“. Program pro růst tenkých vrstev pomocí metody molekulární dynamiky je umístěn na příloženém CD.

4.1 Uspořádání velmi malých ostrůvků

V rámci této části molekulárně dynamického části naší práce bylo určeno, jaké tvary mohou nabývat malé ostrůvky a s jakou pravděpodobností se tyto



Obrázek 4.1: Ustálená podložka s rozměry $10 \times 10 \times 6$ atomů



Obrázek 4.2: Ustálená podložka s rozměry $40 \times 30 \times 6$ atomů

tvary vyskytují a z toho jsme určili pravděpodobnosti slévání ostrůvků v závislosti na vzdálenosti. K simulaci jsme použili ustálenou menší podložku, jejíž teplota byla kontrolována Nosé-Hooverovým termostatem. Pro generování těchto malých ostrůvků nebyl z důvodu vyšší přesnosti použit cutoff potenciálu pro napařované atomy. Potenciál byl ořezán pouze pro atomy destičky mezi sebou a to pro velikost cutoffu $r_c = 2,5\sigma$. Interakce adatom - adatom a adatom - substrát byla počítána pro všechny vzdálenosti atomů.

V rámci každé simulace bylo napařeno tři až deset atomů do dopadové oblasti ve středu podložky a pro každý počet atomů byl výpočet zopakován 500krát. Z výsledků těchto simulací byly vybrány ty konfigurace, kdy výsledný ostrůvek obsahoval zadaný počet atomů. Přestože atomy dopadaly jednotlivě a jejich počáteční polohy byly zvoleny tak, aby se před dopadem neovlivňovaly (jejich vzdálenost byla v ose z větší než 3σ , v osách x a y byly polohy určeny náhodně, rychlost měly pouze ve směru osy z), mohlo se stát, že dříve napařovaný atom odmigroval z dopadové oblasti dřív, než do ní dopadly další atomy a nevytvořil se ostrůvek s požadovaným počtem atomů. V těchto případech byla celá konfigurace zahozena a dále se s ní nepočítalo.

Velikost dopadové oblasti byla zvolena tak, abychom zahozených konfigurací měli co nejméně, ale zároveň aby byla simulace vypovídající. Pokud bychom použili příliš velkou dopadovou oblast, tak bychom museli většinu výsledků zahodit. Pokud bychom použili příliš malou oblast, tak bychom obzvláště pro větší ostrůvky dostávali ve většině případů pouze jednu stále se opakující konfiguraci. Z hlediska přesnosti by bylo nejlepší mít celou podložku jako dopadovou oblast, ale to je z časových důvodů nereálný požadavek, pokud chceme získat dostatečně kvalitní statistiku.

Výsledná data jsme poté zpracovali a určili pravděpodobnosti slévání malých ostrůvků, které posloužily jako vstup do Monte Carlo modelu. Pravděpodobnost jsou uvedeny v tabulce 4.1. r v tabulce značí vzdálenost od ostrůvku.

Tabulka 4.1: Pravděpodobnosti pro metodu Monte Carlo

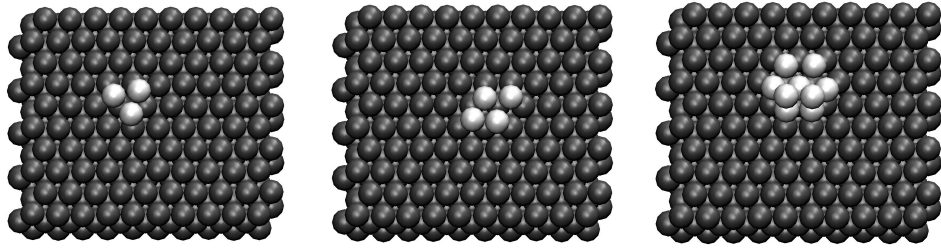
r	počet atomů v ostrůvku							
	3	4	5	6	7	8	9	10
2	0,399	0,541	0,442	0,505	0,595	0,608	0,637	0,616
3	0,032	0,074	0,116	0,171	0,215	0,211	0,364	0,289
4	0	0,002	0,005	0,003	0,008	0,021	0,029	0,040

Pro všechny počty atomů platí, že pro $r = 1$ je pravděpodobnost rovna jedné a pro $r > 4$ je pravděpodobnost nulová.

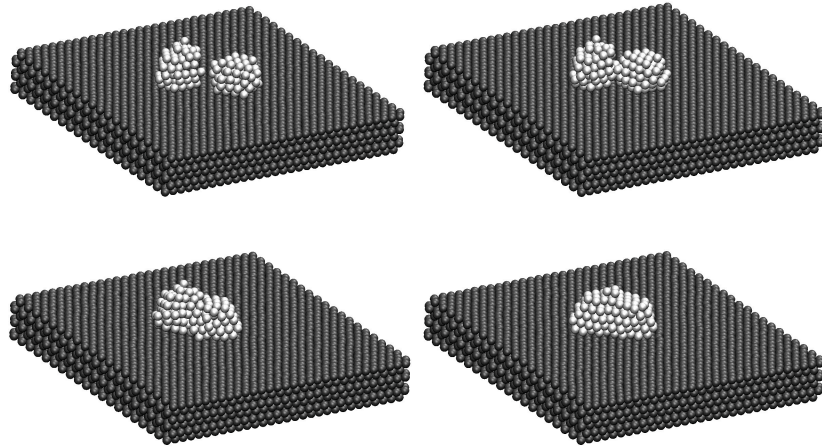
Příklady výsledných ostrůvků jsou uvedeny na obrázku 4.3.

4.2 Slévání větších ostrůvků

V této části práce byly studovány procesy probíhající při slévání větších ostrůvků během růstu tenkých vrstev. Slévající se ostrůvky měly řádově stovky atomů. K simulaci byla použita ustálená větší podložka, jejíž teplota byla kontrolována Nosé-Hooverovým termostatem. Teplota adatomů nebyla kontrolována



Obrázek 4.3: Ukázka možných výsledných útvarů pro 3, 4 a 9 atomů



Obrázek 4.4: Ukázka slévání dvou ostrůvků obsahujících 100 atomů

žádným termostatem. V tomto případě byl z důvodu úspory času použit jak cutoff potenciálu tak seznam nejbližších sousedů pro všechny atomy v systému, nejen pro atomy podložky, jak tomu bylo v předchozím oddílu. V tomto případě byla velikost cutoffu potenciálu zvolena $r_c = 3,2\sigma$.

Před simulací samotného slévání bylo třeba vytvořit ostrůvky, které se mají slít. Ostrůvky je možné tvořit dvěma možnými způsoby. Buď přímo na podložce v klidových polohách krystalové mřížky napařovaných atomů umístit celý ostrůvek výpočtem poloh, kde se budou nacházet atomy, nebo „napařit“ atomy a nechat je, ať se ustálí ve svých klidových polohách. V této práci jsme použili druhý postup.

Takto vytvořené ostrůvky jsme umístili dostatečně blízko (ve vzdálenosti menší než cutoff) od sebe a nechali je slít. Cílem bylo určit, kde se nachází střed výsledného ostrůvku. Očekávaná byla jedna ze dvou možností - buď v těžišti obou ostrůvků nebo se jeden ostrůvek nepohne a druhý se „nabalí“ kolem něj. Ukázka slítí dvou ostrůvku z nichž každý obsahuje 100 atomů je na obrázku 4.4.

Z průběhu slévání je možné určit, že výsledný ostrůvek má střed v těžišti původních dvou ostrůvků. Kvůli použitému Lennard-Jonesově potenciálu nově vzniklý ostrůvek je trochu „protaženější“ než původní ostrůvky (netvoří kulový vrchlík). Tento nedostatek není možné odstranit bez použití vhodnějšího než Lennard-Jonesova potenciálu, například Suttonova-Chenova potenciálu. Pokud by byl aplikován tento potenciál, bylo by možné měřit například i rychlost slévání nebo kontaktní úhel výsledného ostrůvku.

5. Monte Carlo

Naším cílem bylo využít data získaná ze simulací metodou molekulární dynamiky. Simulace metodou Monte Carlo jsme prováděli na šestiúhelníkové síti o rozměrech 1000×1000 adsorpčních pozic. Simulace byly ukončeny, když tloušťka vrstvy dosáhla hodnotu 5 monovrstev (5 ML). I v Monte Carlo modelu byly použity 2D periodické okrajové podmínky v osách x a y . Tím opět simulujeme nekonečný povrch krystalu. Alternativou k periodickým okrajovým podmínkám je vytvoření větší pracovní plochy a oříznutí okrajů. Tato metoda je pomalejší a navíc se velká část plochy simuluje zbytečně. Proto jsme zvolili použití periodických okrajových podmínek. Simulovali jsme dva různé typy depozice - vakuové napařování a pulzní laserovou depozici. Používáme metodu RfKMC. Jeden časový krok běhu programu je dán periodou migrace, tedy konstantou τ vypočtenou z rovnice 1.1.

Jeden krok běhu programu je rozdělen do pěti částí:

- napaření atomů
- tvorba kondenzačních jader
- růst ostrůvků
- slévání ostrůvků
- migrace volných částic

Během části programu „napaření atomů“ dojde k náhodnému rozmístění atomů na podložku. Pokud dopadne napařovaný atom na místo, kde se již nachází migrující atom, vytvoří tato dvojice okamžitě kondenzační jádro. Počet atomů umístěných na podložku v jednom časovém kroku je dán napařovací rychlostí a typem simulovaného napařování. V případě pulzní laserové depozice i vakuového napařování se během celé délky simulace pro stejné napařovací rychlosti napaří stejné množství částic. Pokročilejší alternativou programu by bylo započítání i fluktuací v toku částic. Rozdíl je v tom, že v případě pulzní laserové depozice nedochází k napařování v každém kroku běhu programu, ale k napařování dochází v několika po sobě následujících krocích, po kterých následuje prodleva, kdy k napaření nedochází. To dává čas migrujícím částicím přidat se ke stávajícím ostrůvkům dříve, než se stihnou „setkat“ a vytvořit nový ostrůvek. V rámci této práce jsme studovali závislost vlastností výsledných struktur na šířce pulzu. Dalším možným parametrem při studium pulzní depozice je opakovací frekvence nanášení částic.

Další způsob tvorby kondenzačních jader kromě napaření atomu na již existující migrující atom je, že se potkají dva migrující atomy na sousedních místech krystalové mříže. Předpokládáme, že vytvořená kondenzační jádra jsou nehybná. Tento předpoklad neplatí obecně pro všechny kombinace materiálů, ale v našem případě předpokládáme jeho platnost.

V rámci části programu věnující se růstu ostrůvků dochází k zachytávání migrujících atomů na existujících ostrůvcích. Ostrůvky dělíme do dvou kategorií - malé ostrůvky obsahující méně než jedenáct atomů a větší ostrůvky obsahující

více než deset atomů. Vzdálenost, v jaké se mohou migrující atomy přidat k existujícím ostrůvkům, závisí na kategorii ostrůvku. Dosah malých ostrůvků je reprezentován pravděpodobnostmi z tabulky 4.1 určené v rámci metody molekulární dynamiky. Velké ostrůvky uvažujeme jako polokoule (obecněji kulové vrchlíky s kontaktním úhlem zadaným experimentálními parametry), jejichž poloměr, tedy dosah, je dán pouze počtem atomů v ostrůvku. Pro ně je pravděpodobnost přidání atomu rovna jedná, pokud se migrující atom nachází blíže než dosah ostrůvku, a nule, pokud se nachází dále. Tento model lze v budoucnosti rozšířit zavedením koeficientu kondenzace dopadajících atomů v závislosti na simulovaných experimentálních podmínkách.

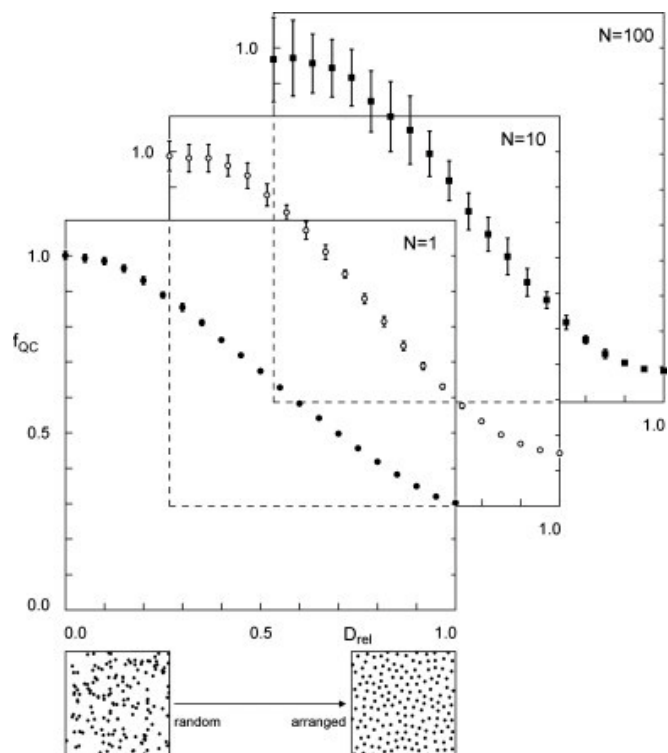
Ke slévání ostrůvků dochází v místě jejich těžiště, jak bylo zjištěno v části věnující se metodě molekulární dynamiky. Slití nastane, když součet dosahů obou ostrůvků je menší než jejich vzdálenost. Pro malé ostrůvky opět používáme tabulky 4.1 tak, že vzdálenost r je vzdálenost k hranici ostrůvku. Pro dva malé ostrůvky používáme kombinaci pravděpodobností z tabulky 4.1. Předpokládáme, že ke slití ostrůvku dojde během jednoho časového kroku programu. Tento předpoklad nás omezuje na simulaci raných fází růstu tenkých vrstev. Kdybychom chtěli simulovat růst polospojité a spojité vrstvy, nebylo by možné tento předpoklad použít.

Migrace atomů je reprezentovaná náhodnou procházkou částice po podložce. V každém kroku pro každý atom, který není součástí žádného ostrůvku, vygenerujeme náhodné číslo od nuly do pěti, které nám řekne, kterým směrem se atom v krystalové mříži pohne.

Výsledky získané pomocí metody Monte Carlo byly vyhodnoceny pomocí rozdělení poloměrů a metody Quadrat Counts. V případě metody Quadrat Counts bylo třeba zvolit velikost náhodně umístovaného čtverce. V závislosti na něm se totiž mění citlivost a chyba metody. Velikost byla zvolena tak, aby v průměru bylo ve čtverci deset ostrůvků. Průběh a chyba příznaku QC v závislosti na uspořádanosti systému pro různé průměrné počty objektů ve čtverci jsou zobrazeny na kalibračním obrázku 5.1.

Aplikací metody Monte Carlo jsme studovali vlastnosti struktur získaných pomocí spojité a pulzní depozice pro různé napařovací rychlosti. V rámci věnované spojité depozici jsme studovali vliv aplikace pravděpodobností slévání získaných z metody molekulární dynamiky. V rámci pulzní metody, kdy byly ve všech případech aplikovány pravděpodobnosti z tabulky 4.1, jsme studovali vlastnosti struktur v závislosti na době prodlevy mezi pulzy. Ve všech případech jsme porovnali vzhled výsledných struktur, průběhy celkového počtu objektů, rozdělení poloměrů a průběhy příznaku metody Quadrat Counts v závislosti na tloušťce vrstvy.

Všechny simulace byly prováděny pro tloušťky $0 \div 5$ monovrstev. Simulace pro všechny parametry napařovaných částic s i bez použití tabulky pravděpodobností byly provedeny desetkrát a výsledná rozdělení poloměrů a průběhy příznaku QC byla zprůměrována. Získané vrstvy jsou pro přehlednost znázorněny výřezem o velikosti 200×200 mřížkových bodů. Pokud nebude uvedeno jinak, histogramey zobrazující rozdělení poloměrů pro jednotlivé tloušťky vrstev jsou na ose y normovány na jednu polovinu celkového množství ostrůvků v daném časovém okamžiku. Všechny následující obrázky byly získány pomocí programu GNUplot 5.0. Program pro růst tenkých vrstev pomocí metody Monte Carlo je umístěn na



Obrázek 5.1: Průběh příznaku QC v závislosti na uspořádanosti systému a průměrném počtu objektů ve čtverci, převzato z (Hrach a kol., 2012)

přiloženém CD.

5.1 Spojitá depozice částic

Simulace s použitím tabulky pravděpodobností i bez ní byly provedeny pro napařovací rychlosti $10^5 \div 10^8$ ML/s.

Při simulacích bez použití tabulky pravděpodobností byly všechny objekty reprezentovány polokoulemi. Na obrázku 5.2 jsou zobrazeny obrázky získaných vrstev pro průměrnou tloušťku 1, 3 a 5 monovrstev.

Na obrázku 5.2 je možné vidět, jak se s měnící napařovací rychlostí už od pohledu mění vzhled výsledné struktury. Čím je napařovací rychlost vyšší, tím víc je pro každou zobrazenou tloušťku ve výřezu větší počet ostrůvků. Pro tloušťky 3 a 5 monovrstev je pro všechny napařovací rychlosti dobře viditelná sekundární nukleace. Sekundární nukleace je silnější, čím je napařovací rychlost vyšší. Tento výsledek se dal předpokládat, protože s rostoucí napařovací rychlostí roste počet migrujících částic, které nejsou součástí žádného ostrůvku, a je tedy větší šance, že se setkají a vytvoří nový ostrůvek.

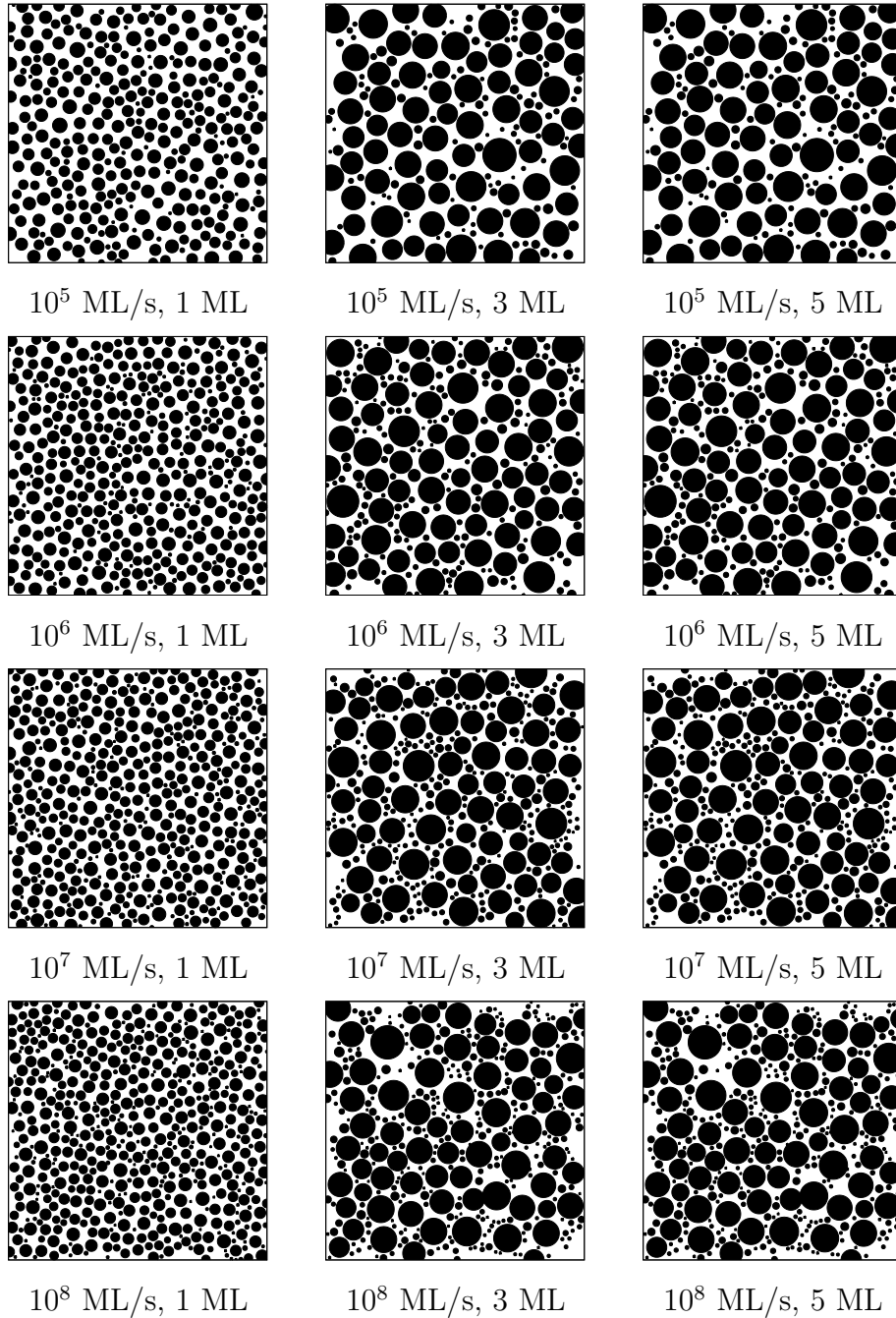
Na obrázku 5.3 je uvedena závislost počtu ostrůvků v závislosti na průměrné tloušťce vrstvy. Na první pohled je viditelné, že náš závěr o vzrůstajícím počtu ostrůvků s rostoucí napařovací rychlostí byl správný. Rostoucí počet objektů s rostoucí napařovací rychlostí je důsledkem většího množství migrujících částic. Zajímavé je, že pro dostatečně velkou průměrnou tloušťku vrstvy se průběhy téměř ustálí na konstantní hodnotě.

Průběh příznaku QC v závislosti na tloušťce vrstvy je uveden na obrázku 5.4. Z něj je možné vyvodit dva závěry. Prvním je, že pro rostoucí počet monovrstev klesá uspořádanost vytvořené struktury. Druhým závěrem je, že s rostoucí napařovací rychlostí klesá uspořádanost. Oba dva závěry je opět možné vysvětlit sekundární nukleací.

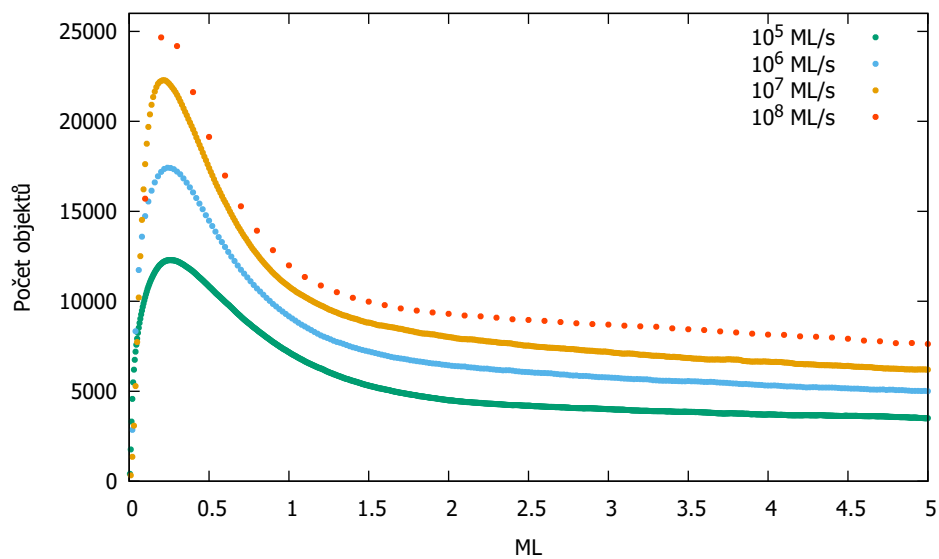
Při použití tabulky pravděpodobností slévání už nebyly nejmenší objekty reprezentovány polokoulemi, ale pravděpodobnostmi z tabulky 4.1. Na obrázku 5.5 jsou zobrazeny obrázky získaných vrstev pro průměrnou tloušťku 1, 3 a 5 monovrstev. Obrázky vypadají podobně jako obrázky struktur bez použití pravděpodobností, ale je vidět, že sekundární nukleace je kromě nejvyšší napařovací rychlosti slabší než v případě, kdy tabulka pravděpodobností nebyla použita. Další viditelný jev je, že se některé ostrůvky při vykreslování překrývají. To je způsobeno jednak tím, že ostrůvky jsou stále vykreslovány jako kruhy, i když při výpočtu tak nejsou uvažovány, a tím, že program použitý k vykreslování struktur nebere zadaný poloměr jako vnější poloměr kružnice (která je pak vyplněna), ale jako vnitřní a o zvětší ho několik pixelů tlustou čarou.

Protože vizuální porovnání je nedostatečné, porovnáme průběhy počtu objektů, příznaku QC a rozdělení poloměrů.

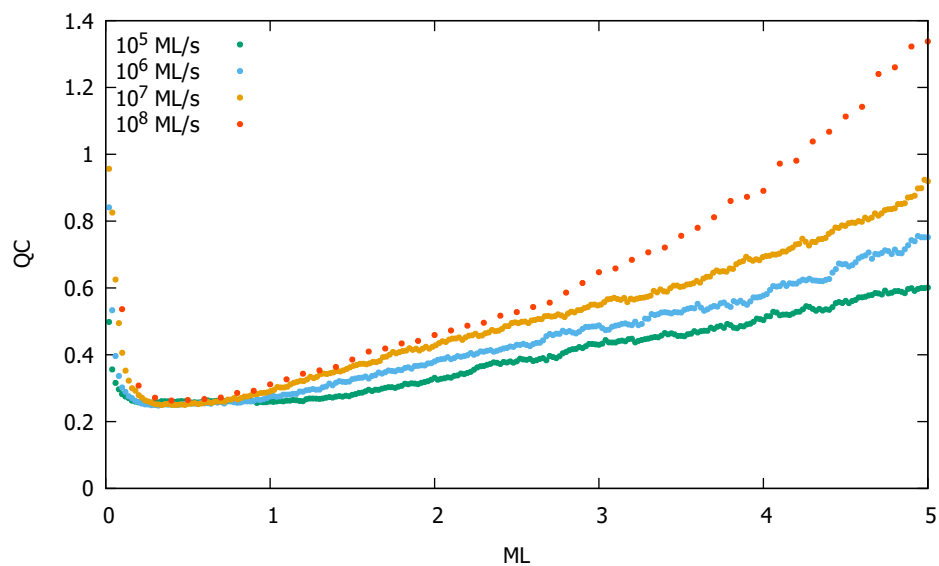
Z rozdělení počtu objektů na obrázku 5.6 je vidět, že pokud použijeme tabulku pravděpodobností, pak průběh vypadá podobně jako s ní, ale kromě nejvyšší napařovací rychlosti jsou hodnoty maxima i ustálení nižší. Další odlišností je, že průběh po dosažení maxima klesá pomaleji než v předchozím případě. Tyto vlastnosti přisuzujeme tomu, že při použití pravděpodobností se mohou slít i ostrůvky, které jsou od sebe dál, než bez použití pravděpodobností. Zároveň se ostrůvky dostatečně blízko pro slítí nemusí spojit v jednom časovém kroku, ale kvůli použití



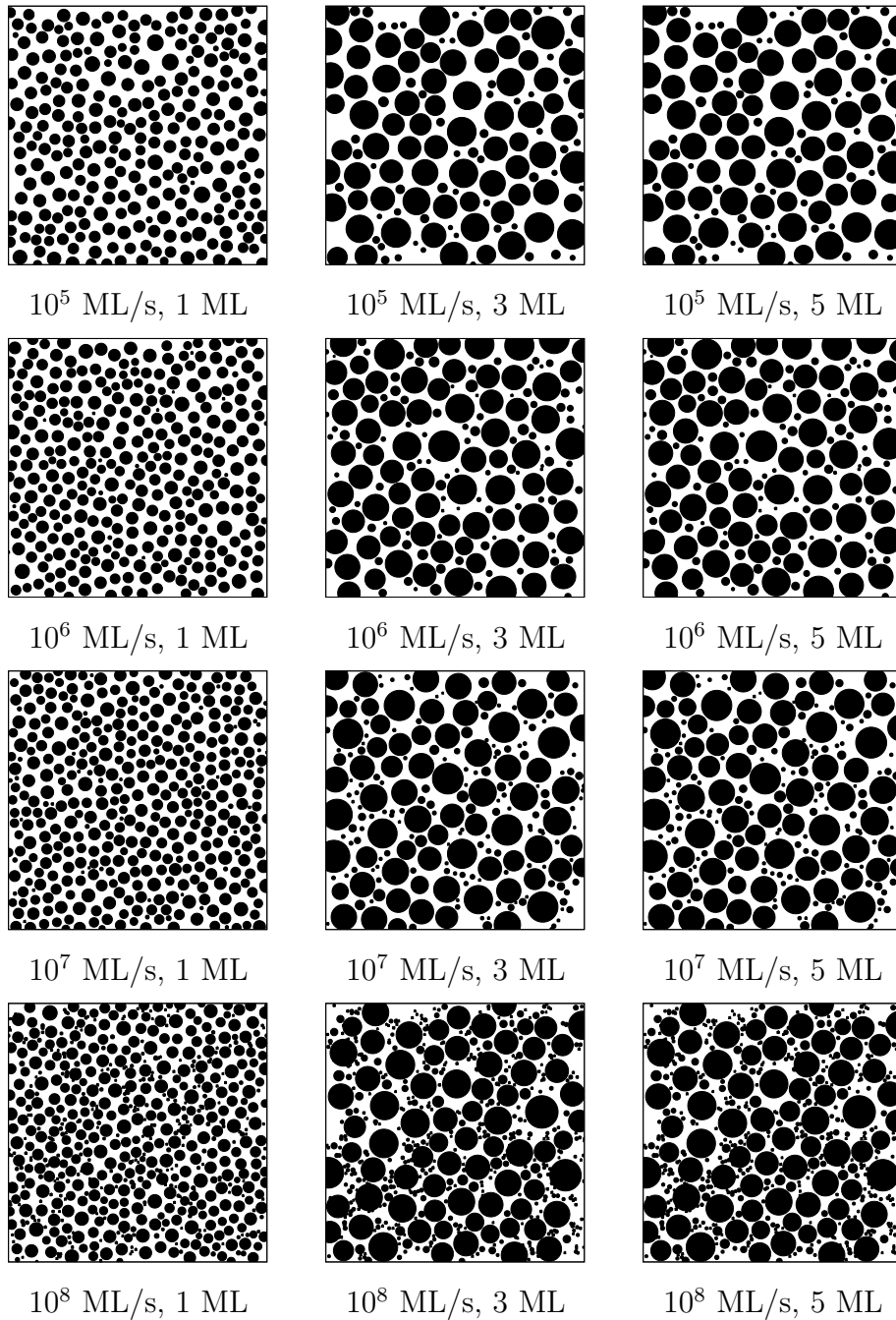
Obrázek 5.2: Ukázka vrstev pro všechny napařovací rychlosti od nejnižší po nejvyšší pro 1, 3 a 5 monovrstev bez užití tabulky pravděpodobností



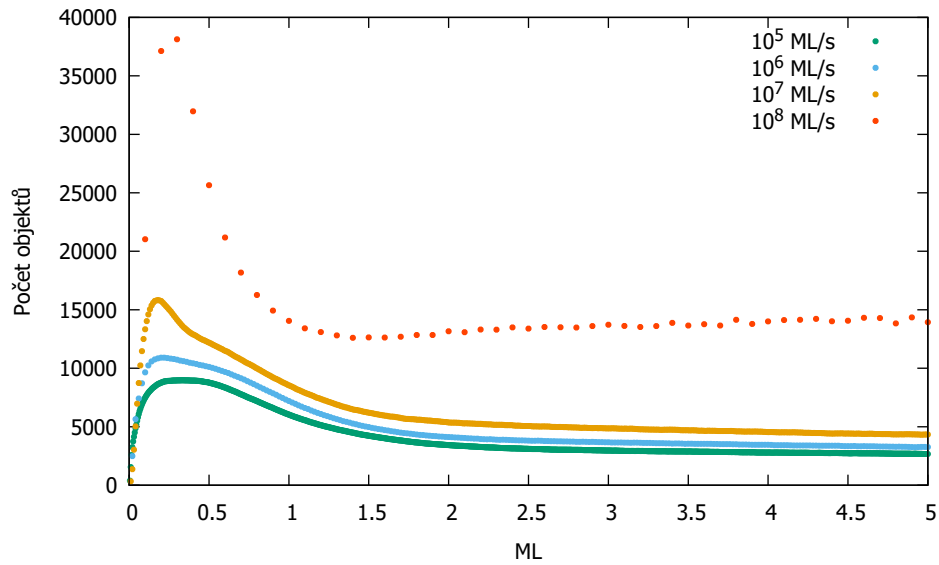
Obrázek 5.3: Rozdělení počtu ostrůvků pro všechny napařovací rychlosti v závislosti na tloušťce vrstvy bez užití tabulky pravděpodobností



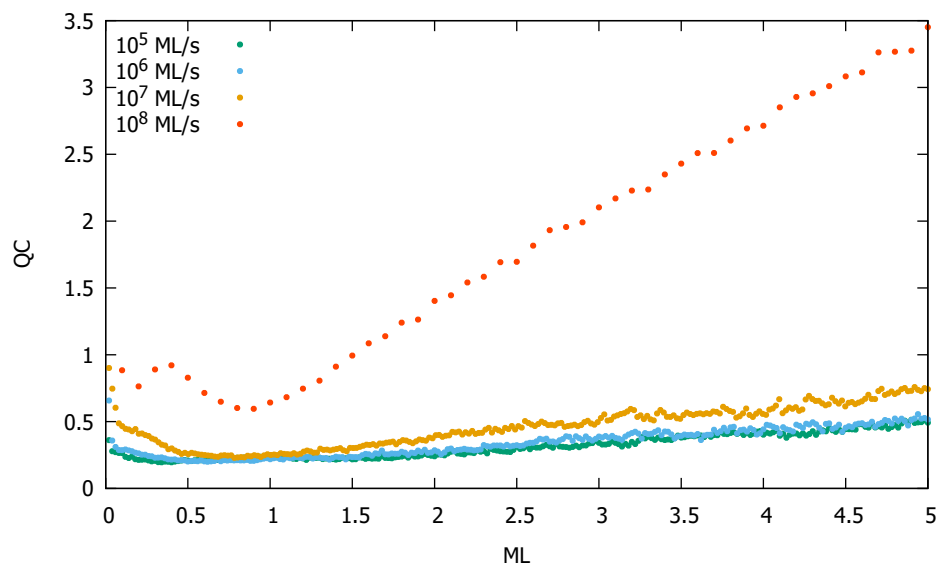
Obrázek 5.4: Průběh příznaku QC pro všechny napařovací rychlosti v závislosti na tloušťce vrstvy bez užití tabulky pravděpodobností



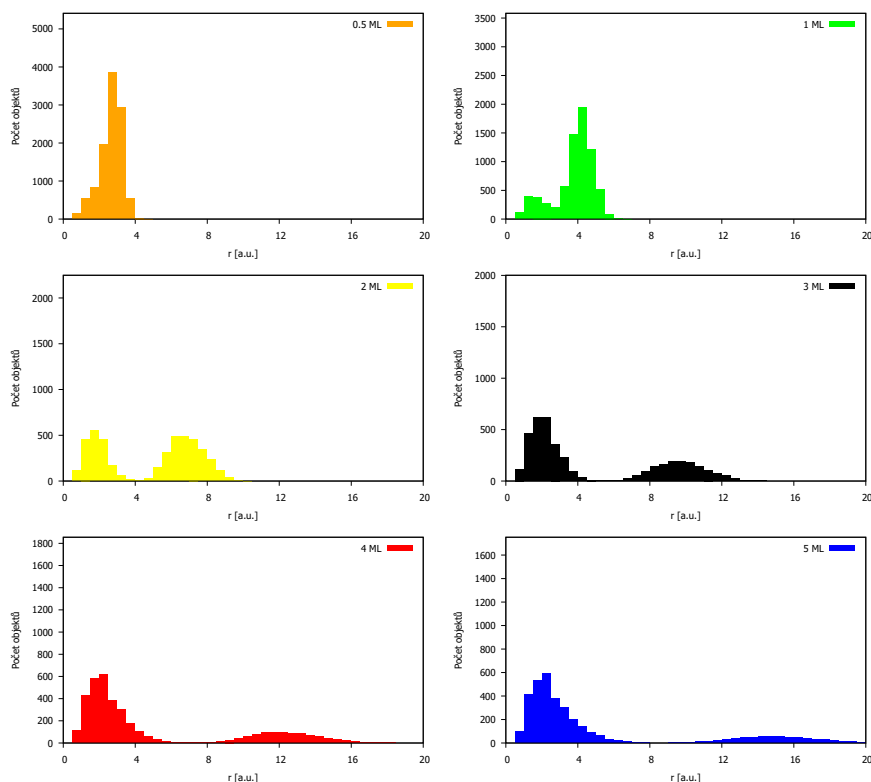
Obrázek 5.5: Ukázka vrstev pro všechny napařovací rychlosti od nejnižší po nejvyšší pro 1, 3 a 5 monovrstev s užitím tabulky pravděpodobností



Obrázek 5.6: Rozdělení počtu ostrůvků pro všechny napařovací rychlosti v závislosti na tloušťce vrstvy s užitím tabulky pravděpodobností



Obrázek 5.7: Průběh příznaku QC pro všechny napařovací rychlosti v závislosti na tloušťce vrstvy s užitím tabulky pravděpodobností



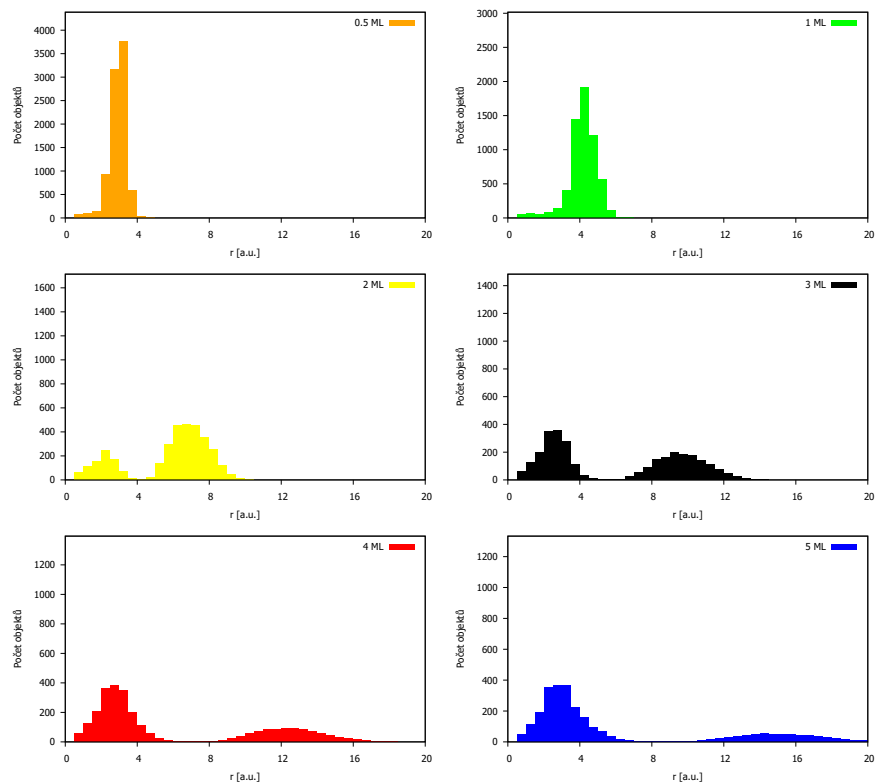
Obrázek 5.8: Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^5 ML/s bez použití tabulky pravděpodobností

pravděpodobností až později, což je důvod, proč pro nejvyšší napařovací rychlost vypadají průběhy odlišně.

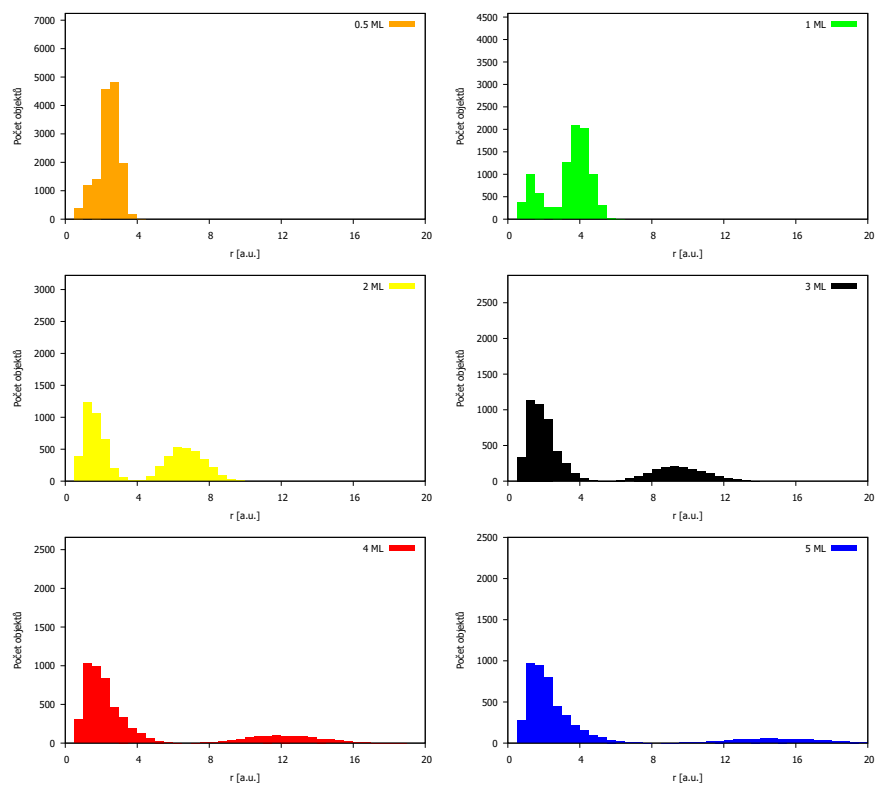
Průběh příznaku QC se na první pohled značně liší od jeho průběhu v případě, kdy nebyla použita tabulka pravděpodobností. Hlavní rozdíl, kromě toho že pro nejvyšší napařovací rychlost je velikost příznaku mnohem větší, je, že místo toho, aby body tvořily přibližně rovnou čáru, jako v předchozím případě, mají mnohem větší rozptyl kolem čáry ukazující trend růstu příznaku. Pokud uvážíme, že jediný rozdíl proti předchozímu případu je zavedení pravděpodobností slévání, pak můžeme odhadnout, že tento jev je způsoben tím, že se blízké malé ostrůvky spojují v čase „náhodně“. Dalším rozdílem proti předchozímu případu je, že ostatní tři trendy konvergují k nižší hodnotě příznaku QC pro tloušťku vrstvy 5 ML. To nám značí, že sekundární nukleace je v tomto případě slabší než v předchozím případě. V případě nejvyšší napařovací rychlosti opět hraje velkou roli, že pravděpodobnost slití nám dovoluje, aby ostrůvky, které by se při neuvažování pravděpodobností spojily, mohou zůstat neslité. Při nižších napařovacích rychlostech se tento jev tak moc neprojevuje, protože pravděpodobnost slití je docela vysoká, ale při nejvyšší napařovací rychlosti, kdy se v jednom kroku běhu programu napaří desetina monovrstvy, toto zpoždění převládne nad vyšším dosahem malých ostrůvků.

Na obrázcích 5.8 až 5.15 jsou zobrazeny rozdělení poloměrů ostrůvků pro tloušťky 0,5, 1, ..., 5 monovrstev. Rozsah osy x byl zvolen tak, aby maximum bylo polovinou celkového počtu ostrůvků v dané okamžiku.

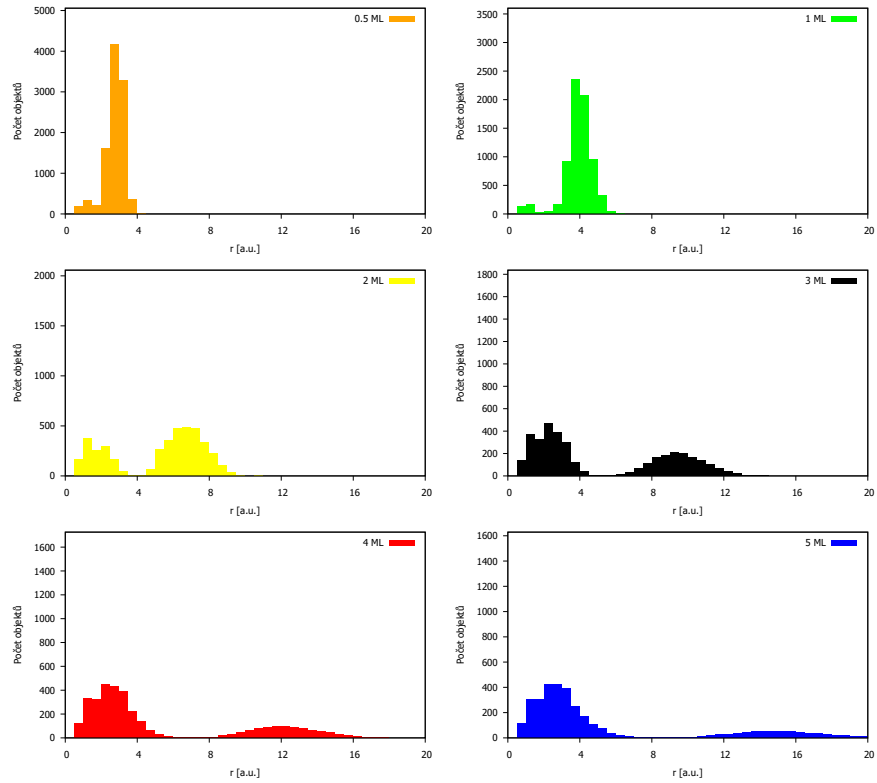
Podívejme se na histogramy odpovídající napařovací rychlosti 5 ML/s. Pro tloušťku 0,5 ML mají oba histogramy jeden velký pík. Je vidět, že v případě bez



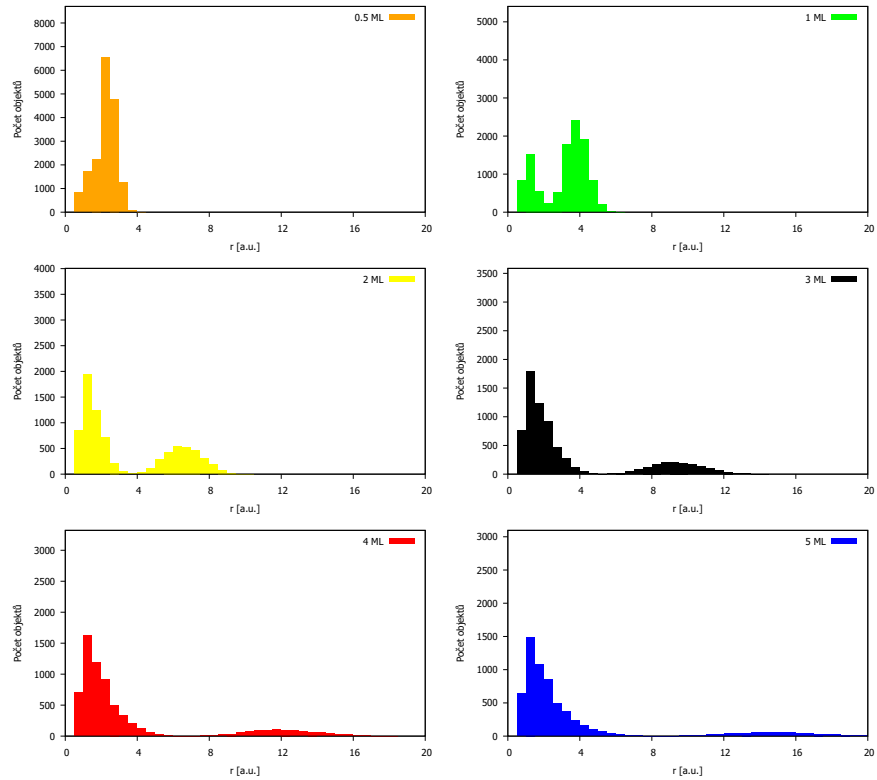
Obrázek 5.9: Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^5 ML/s s použitím tabulky pravděpodobností



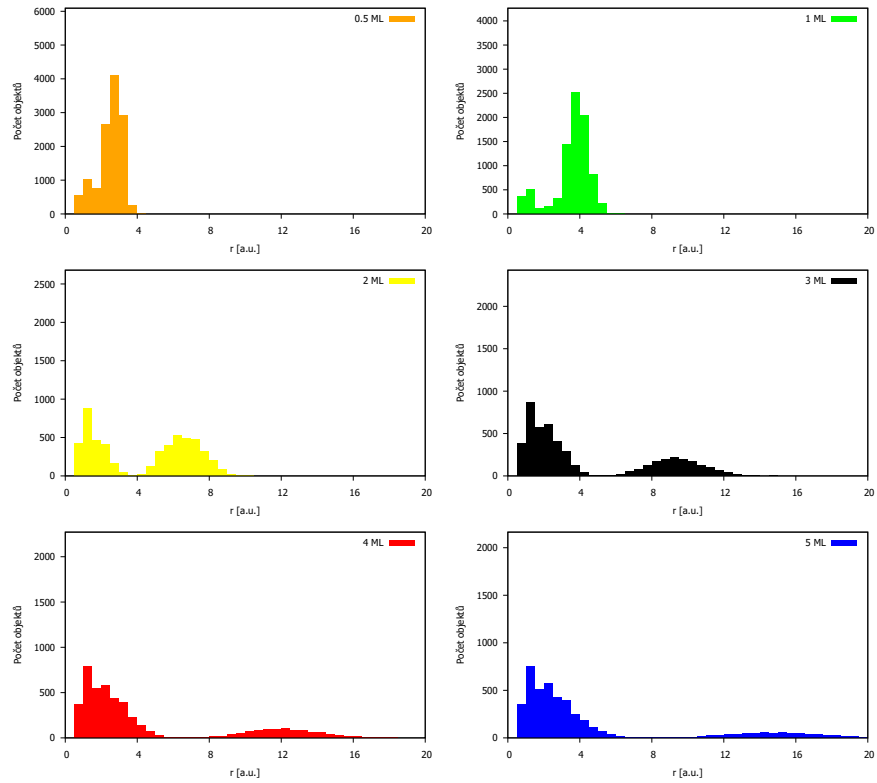
Obrázek 5.10: Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^6 ML/s bez použití tabulky pravděpodobností



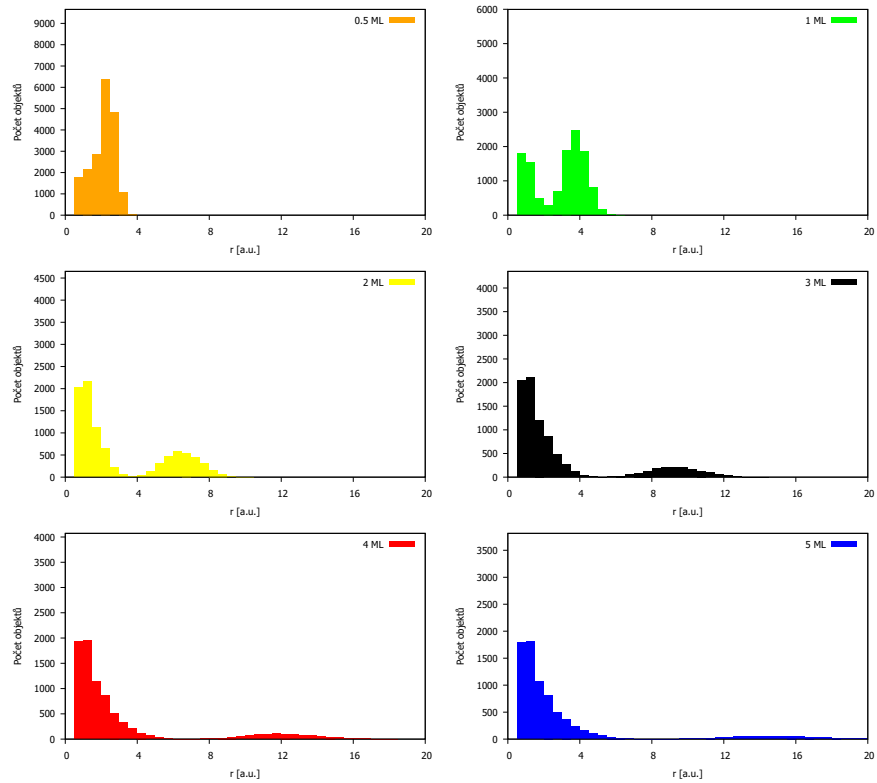
Obrázek 5.11: Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^6 ML/s s použitím tabulky pravděpodobností



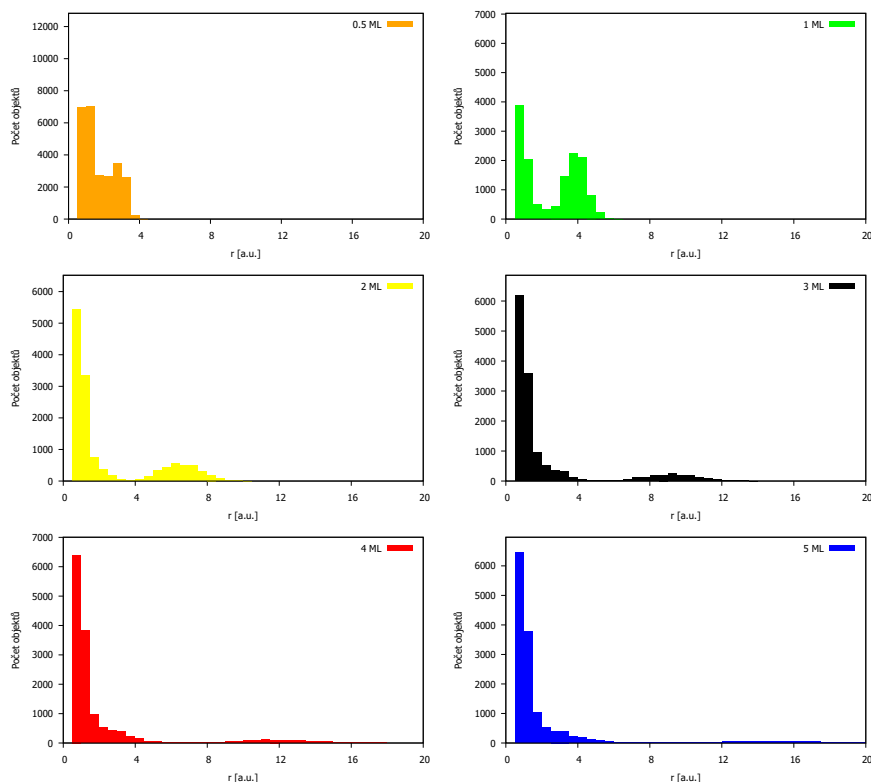
Obrázek 5.12: Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^7 ML/s bez použití tabulky pravděpodobností



Obrázek 5.13: Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^7 ML/s s použitím tabulky pravděpodobností



Obrázek 5.14: Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^8 ML/s bez použití tabulky pravděpodobností



Obrázek 5.15: Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^8 ML/s s použitím tabulky pravděpodobností

tabulky pravděpodobnosti jsou objekty v průměru menší. V případě s tabulkou nejsou téměř vůbec zastoupeny objekty s poloměrem menší než 2 a.u.. V opačném případě je těchto ostrůvků nezanedbatelné množství. Také poloha maxima je v případě bez tabulky pro větší r než v případě opačném. Pro tloušťku 1 monovrstva jsou opět objekty v průměru větší ve druhém případě. V případě bez pravděpodobností je v oblasti histogramu odpovídající malým objektům vidět malý pík, který tam ve druhém případě není. Pro tloušťku 2 monovrstvy se oba histogramy rozdělují na dvě téměř oddělené oblasti. Oblast malých poloměrů ostrůvků je v poměru k velkým ostrůvkům více zastoupena v případě nepoužití tabulky pravděpodobností. To nám říká, že v tomto případě je sekundární nukleace silnější než v případě, kdy jsme tabulku použili. Oblast velkých ostrůvků je relativně více zastoupena v případě použití tabulky, ale pokud se podíváme na měřítko osy y vidíme, že v absolutních číslech jsou obě oblasti velkých ostrůvků téměř stejné. Pro větší tloušťky vrstev vidíme stejné chování obou rozdělených oblastí. Navíc je vidět, že pro větší tloušťky vrstev i pro oblast malých ostrůvků jsou části histogramů pro větší r (přibližně $r > 4$) v obou případech velmi podobné. Z toho můžeme usuzovat, že pro tyto r nemá volba, jestli použijeme nebo nepoužijeme tabulku pravděpodobností, na rozdělení poloměrů vliv.

Stejně závěry, jaké jsme vyvodili pro napařovací rychlost 5 ML/s lze vyvodit i pro napařovací rychlosti 6 a 7 ML/s. V případech bez použití pravděpodobností je sekundární nukleace silnější, ostrůvky jsou v průměru menší a pro větší tloušťky existuje jisté r od kterého jsou oba histogramy téměř stejné.

Pro napařovací rychlost 8 ML/s ale opět převládne fakt, že v pravděpodobnostní tabulkou se blízké ostrůvky v jednom časovém kroku nemusí slít. Kvůli

tomu je sekundární nukleace mnohem silnější. Ale opět se v histogramech vyskytuje i druhý pík, který je pro oba dva případy v absolutních hodnotách přibližně stejně zastoupený.

Závěry ohledně sekundární nukleace, které jsme získali z porovnání rozdělení poloměrů jsou ve shodě se závěry, které jsme získali porovnáním průběhů příznaků QC pro oba případy.

5.2 Pulzní depozice částic

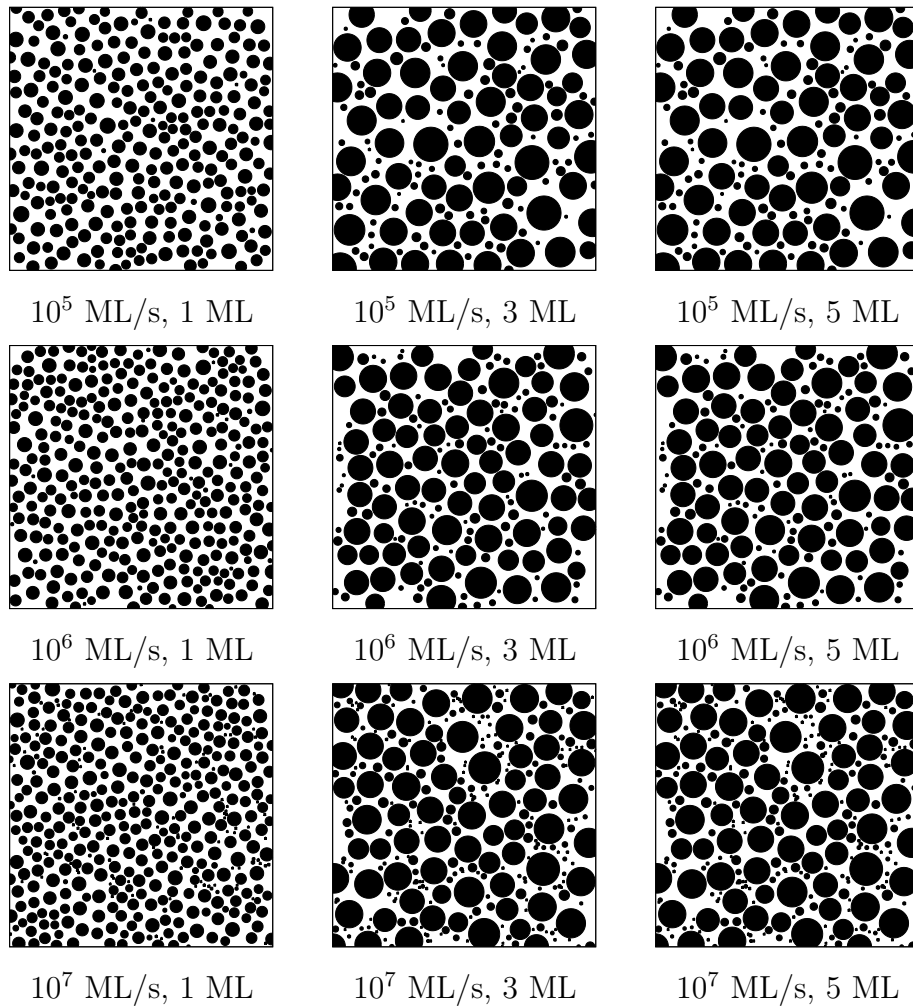
Na rozdíl od spojitě depozice není při pulzní depozici tok částic na substrát spojitý, ale je přerušovaný. Experimentálně se pulzní depozice realizuje několika způsoby, a to buď plazmatickým nebo laserovým ohřevem materiálu, který pak působí jako zdroj částic, nebo vložением překážky mezi zdroj částic a substrát. Překážkou bývá nejčastěji rotující kruhová clona s vyříznutým okénkem. Je možné studovat vliv velikosti okénka a rychlosti otáčení překážky. V této práci jsme studovali vliv velikosti okénka.

Simulace jsme prováděli pro tři různé poměry napařování a zastaveného toku částic - 1 : 10, 1 : 100, 1 : 1000. Napařovací rychlosti v této sekci značí, jaká je průměrná napařovací rychlost během celé simulace bez ohledu na poměr doby napařování vůči nenapařování. Například v případě 1 : 10 znamená napařovací rychlost 10^7 ML/s, že během jednoho kroku se napařilo tolik částic, že by při použití spojitě metody odpovídalo rychlosti 10^8 ML/s a pak se devět kroků nenapařily žádné další částice. Stejně tak je pozměněn i význam monovrstvy. V této části nám říká, jakou by měla tloušťku vrstva při spojitě napařování. V této části práce byla vždy použita tabulka pravděpodobností pro slévání ostrůvků.

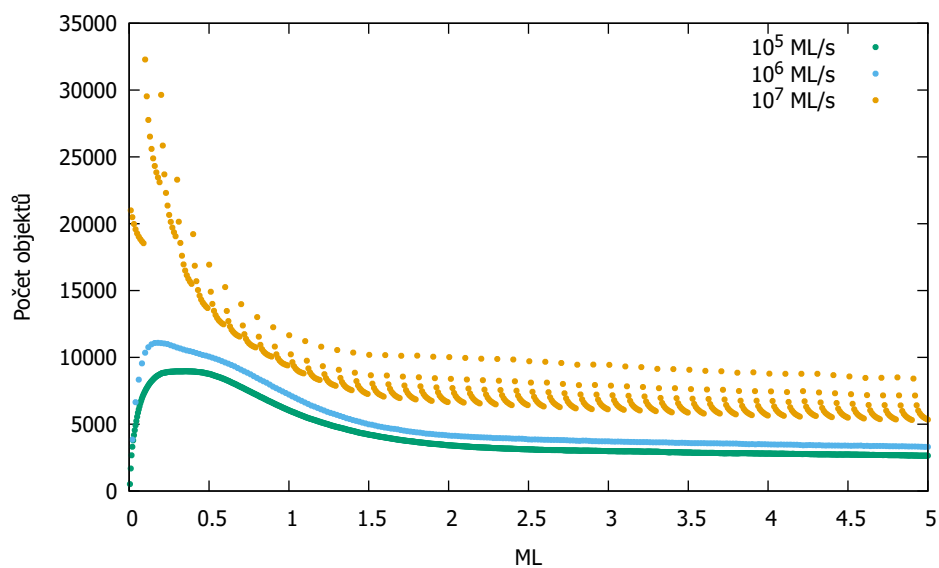
Na obrázku 5.16 jsou vykreslené výsledné struktury pro napařovací rychlosti $10^5 \div 10^7$ ML/s pro 1, 3 a 5 monovrstev v režimu 1 : 10. Případně zobrazené „překrývající“ se objekty jsou způsobeny stejnými důvody jako dříve. Opět je zřejmé, že s rostoucí napařovací rychlostí roste počet objektů a sekundární nukleace je významnější.

Na obrázku 5.17 je rozdělené počtu objektů pro pulzní metodu s poměrem 1 : 10. Pro napařovací rychlosti 10^5 a 10^6 ML/s vypadá průběh podobně jako u spojitých metod (obrázek 5.7). Pro napařovací rychlost 10^7 ML/s je průběh na první pohled odlišný. Lze snadno rozpoznat, kdy byly na podložku napařovány nové částice a vznikaly ve velkém množství nové ostrůvky a migrovalo nejvíce volných částic. Napaření bylo poté následováno poklesem počtu ostrůvků daným postupným sléváním a připojováním migrujících částic k existujícím ostrůvkům. Stejně závěry se dají učinit i z průběhu příznaku QC znázorněného na obrázku 5.18. Jde vidět, že pro nižší napařovací rychlosti se průběh příliš neliší od průběhů příznaku QC jim příslušných napařovacích rychlostí pro spojitou metodu s použitou tabulkou pravděpodobností 5.7. Pro nejvyšší napařovací rychlost v okamžiku napaření neuspořádanost (daná sekundární nukleací) prudce vzroste a pak postupným sléváním postupně klesá až do té doby, než znova dojde k napaření částic.

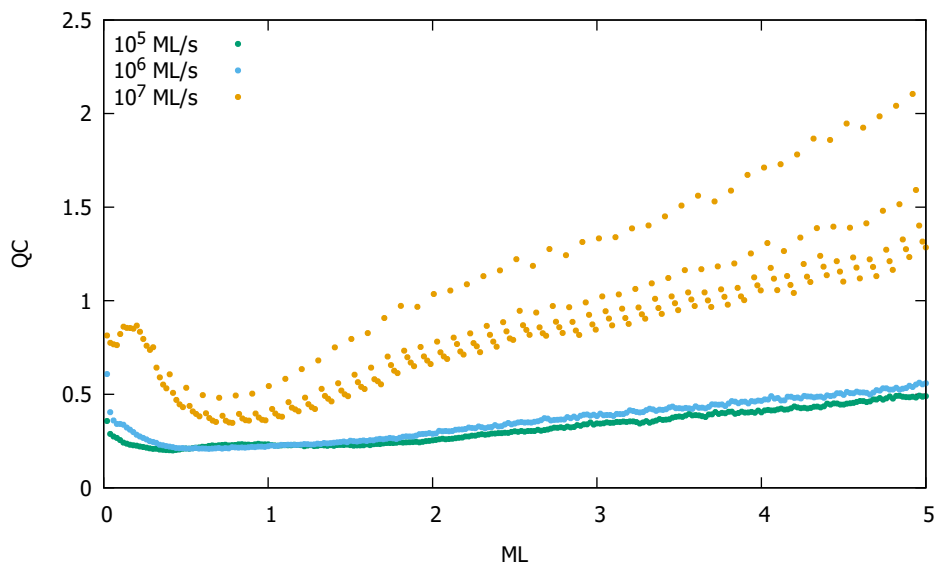
Pro poměr 1 : 100 zobrazený na obrázku 5.19 je opět vidět velmi silná sekundární nukleace pro dvě vyšší napařovací rychlosti. Pro nejnižší napařovací rychlost se sekundární nukleace příliš neprojevuje. Z průběhu počtu objektů 5.20 a příznaku QC 5.21 získáváme, že pro nejvyšší napařovací rychlost má systém dosta-



Obrázek 5.16: Ukázka vrstev pro všechny napařovací rychlosti od nejnižší po nejvyšší pro 1, 3 a 5 monovrstev pulzní metodou s poměrem 1 : 10



Obrázek 5.17: Rozdělení počtu ostrůvků pro všechny napařovací rychlosti v závislosti na tloušťce vrstvy pro pulzní metodou s poměrem 1 : 10



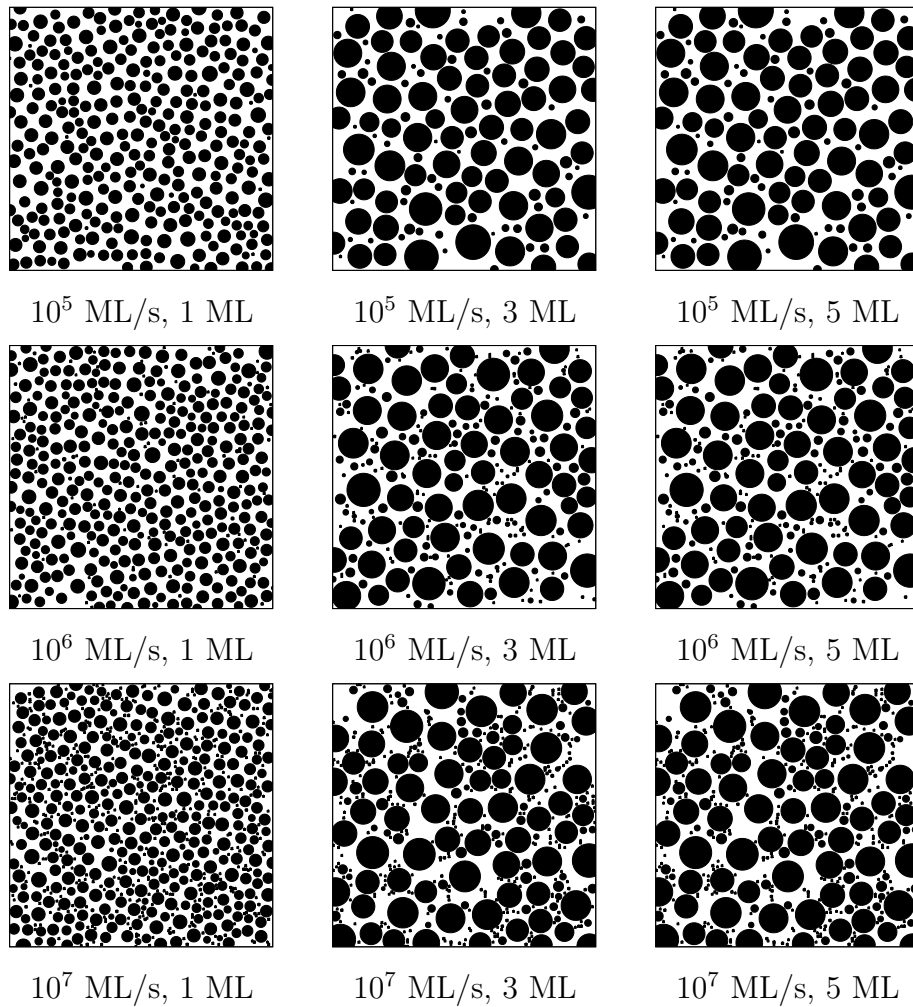
Obrázek 5.18: Průběh příznaku QC pro všechny napařovací rychlosti v závislosti na tloušťce vrstvy pro pulzní metodu s poměrem 1 : 10

tečně dlouhý čas, aby se ustálil a nedocházelo k téměř žádnému dalšímu slévání ostrůvků. Pro napařovací rychlost odpovídající 10^6 ML/s vidíme chování velmi podobné napařování v poměru 1 : 10 rychlostí 10^7 ML/s. Opět dochází k nárůstu počtu objektů (velikosti příznaku QC) a následnému poklesu bez toho, aby se systém ustálil. Pro nejnižší napařovací rychlost vypadají obě závislosti velmi podobně jako při spojitým napařování.

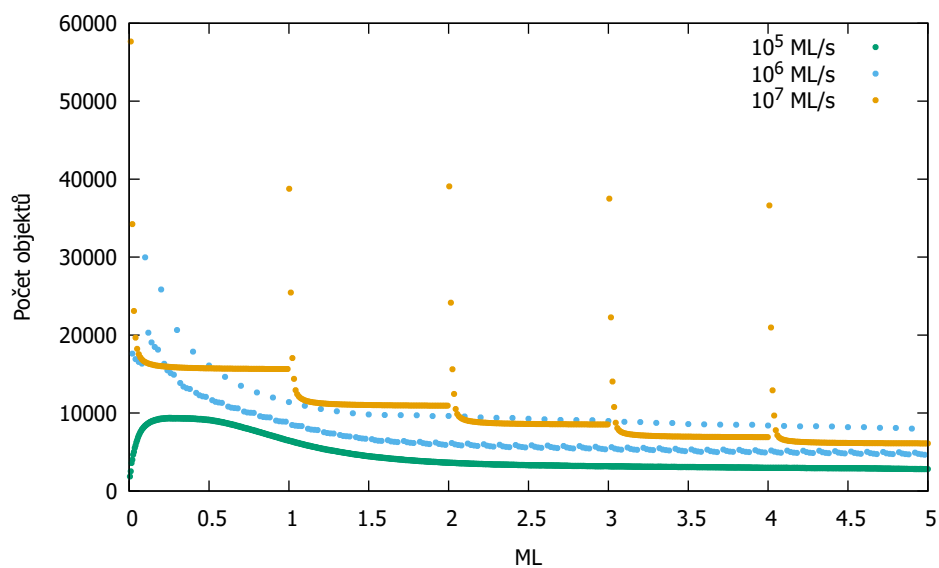
Při studiu posledního studovaného poměru doby napaření a ustálení 1 : 1000 jsme použili jen napařovací rychlosti 10^5 a 10^6 ML/s. Rychlost 10^7 ML/s by odpovídala napaření deseti monovrstev během jednoho kroku programu. Výsledné struktury zobrazené na obrázku 5.22 opět ukazují velkou míru sekundární nukleace, tentokrát i pro nejnižší napařovací rychlost. Sekundární nukleace se slabě projevuje pro vyšší napařovací rychlost i pro tloušťku vrstvy 1 ML. Průběh příznaku QC (obrázek 5.24) i počtu objektů (obrázek 5.23) vypadají podobně jako v předchozím případě pro o řád vyšší napařovací rychlost. Můžeme pozorovat skoky v okamžiku napaření částic a postupné ustalování, jehož délka závisí na použité napařovací rychlosti.

Na obrázcích 5.25 až 5.32 jsou zobrazeny rozdělení poloměrů pro všechny použité poměry napaření i napařovací rychlosti pro tloušťky vrstev 0,5 až 5 ML.

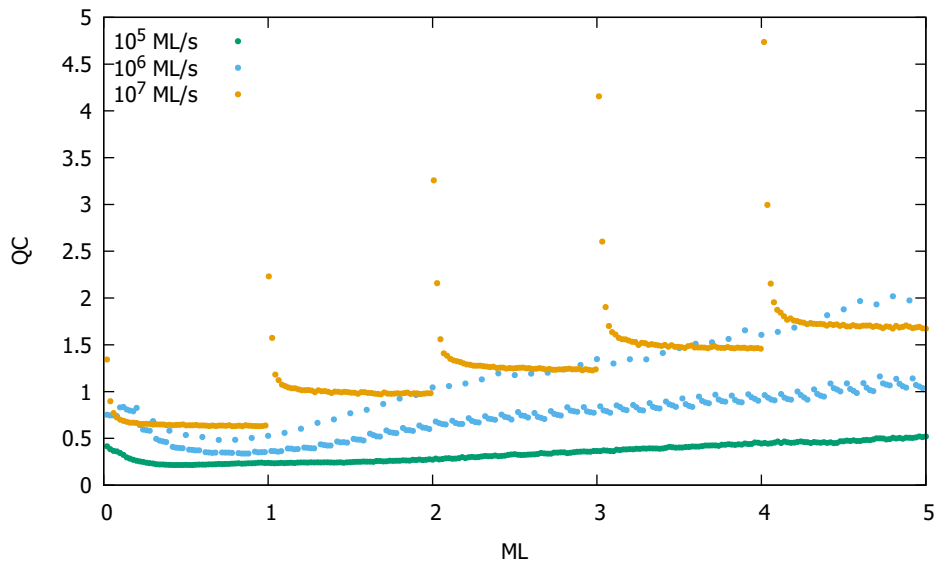
Pro poměr 1 : 10 a napařovací rychlosti 10^5 ML/s (obrázek 5.25) a 10^6 ML/s (obrázek 5.26) jsou zobrazené histogramy velmi podobné histogramům pro spojitou depozici částic s napařovací rychlostí 10^5 (5.9) a 10^6 (5.11) ML/s s použitím tabulky pravděpodobností. Toto zjištění je v souladu s pozorovanou podobností výsledků rozdělení počtu objektů a průběhu příznaku QC pro tyto případy. K sekundární nukleaci sice dochází, ale není příliš silná. Pokud pro napařovací rychlost 10^7 ML/s (5.27) porovnáme získané histogramy s histogramy získanými pro spojitou napařování částic s užitím tabulky pravděpodobností vidíme, že výsledky získané s použitím pulzního napařování odpovídají „přechodu“ mezi histogramy pro spojitou s napařovací rychlostí 10^7 (5.13) a 10^8 (5.15) ML/s. Histogramy ukazují, že v případě pulzní techniky je sekundární nukleace silnější než



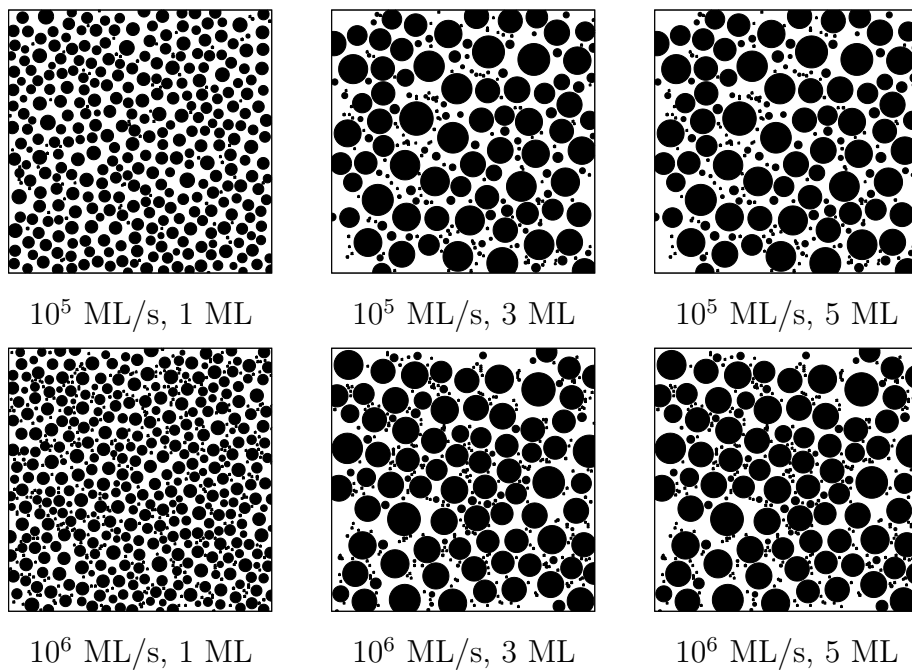
Obrázek 5.19: Ukázka vrstev pro všechny napařovací rychlosti od nejnižší po nejvyšší pro 1, 3 a 5 monovrstev pulzní metodou s poměrem 1 : 100



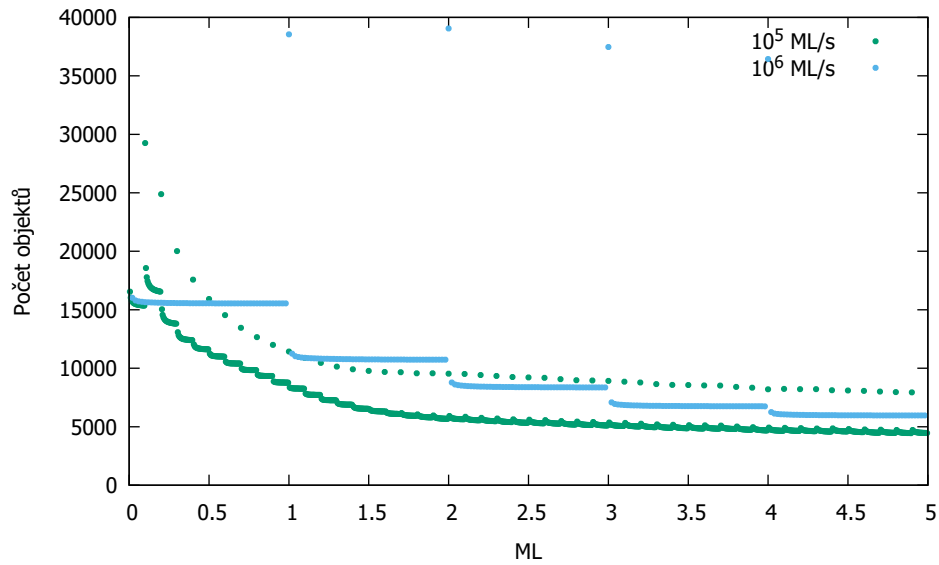
Obrázek 5.20: Rozdělení počtu ostrůvků pro všechny napařovací rychlosti v závislosti na tloušťce vrstvy pro pulzní metodou s poměrem 1 : 100



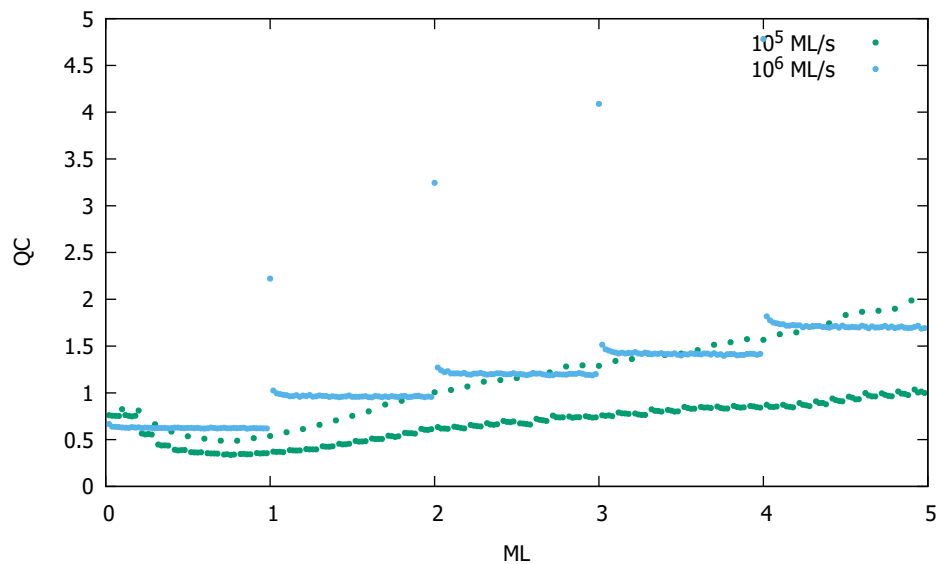
Obrázek 5.21: Průběh příznaku QC pro všechny napařovací rychlosti v závislosti na tloušťce vrstvy pro pulzní metodu s poměrem 1 : 100



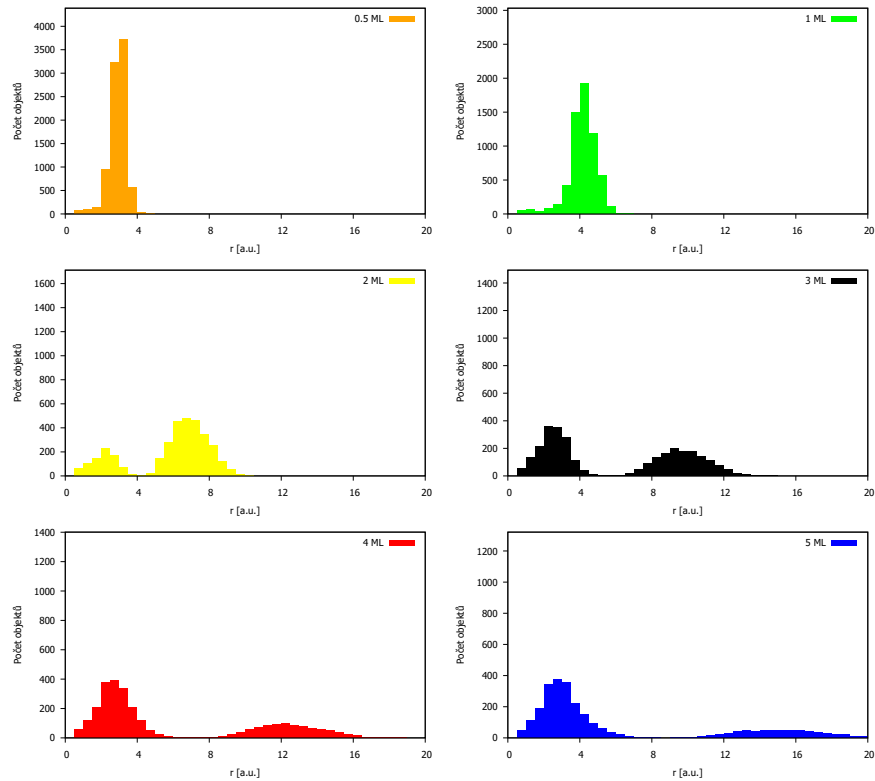
Obrázek 5.22: Ukázka vrstev pro všechny napařovací rychlosti od nejnižší po nejvyšší pro 1, 3 a 5 monovrstev pulzní metodu s poměrem 1 : 1000



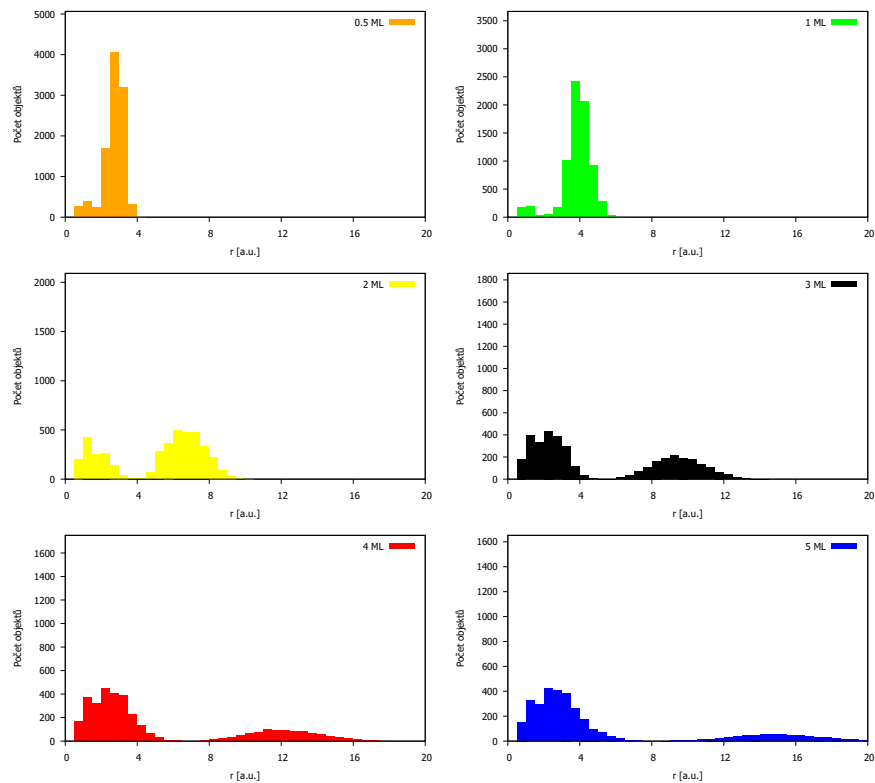
Obrázek 5.23: Rozdělení počtu ostrůvků pro všechny napařovací rychlosti v závislosti na tloušťce vrstvy pro pulzní metodu s poměrem 1 : 1000



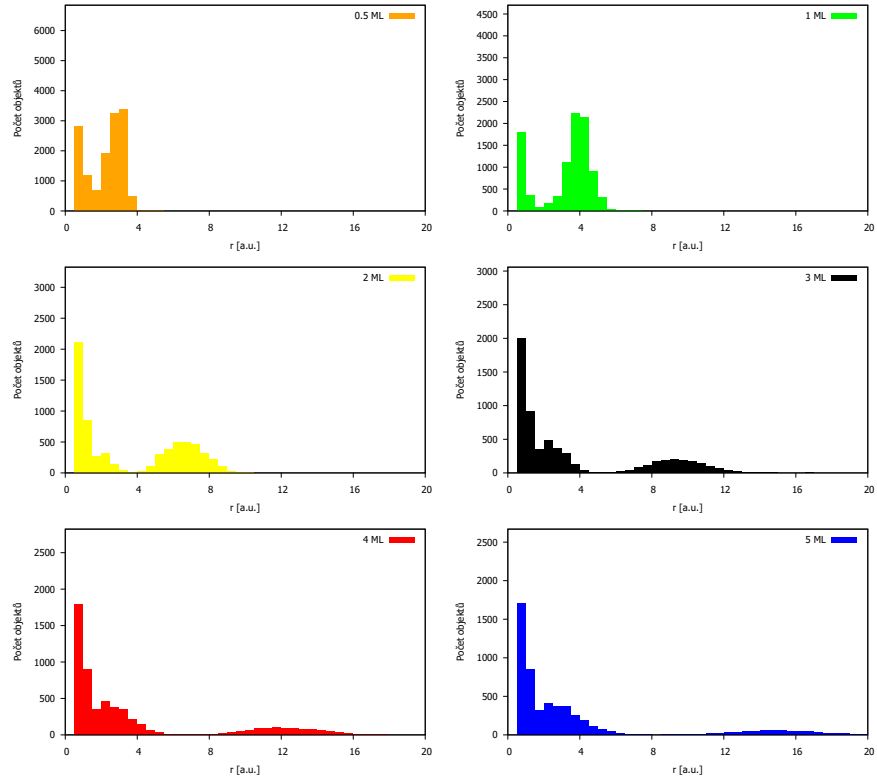
Obrázek 5.24: Průběh příznaku QC pro všechny napařovací rychlosti v závislosti na tloušťce vrstvy pro pulzní metodu s poměrem 1 : 1000



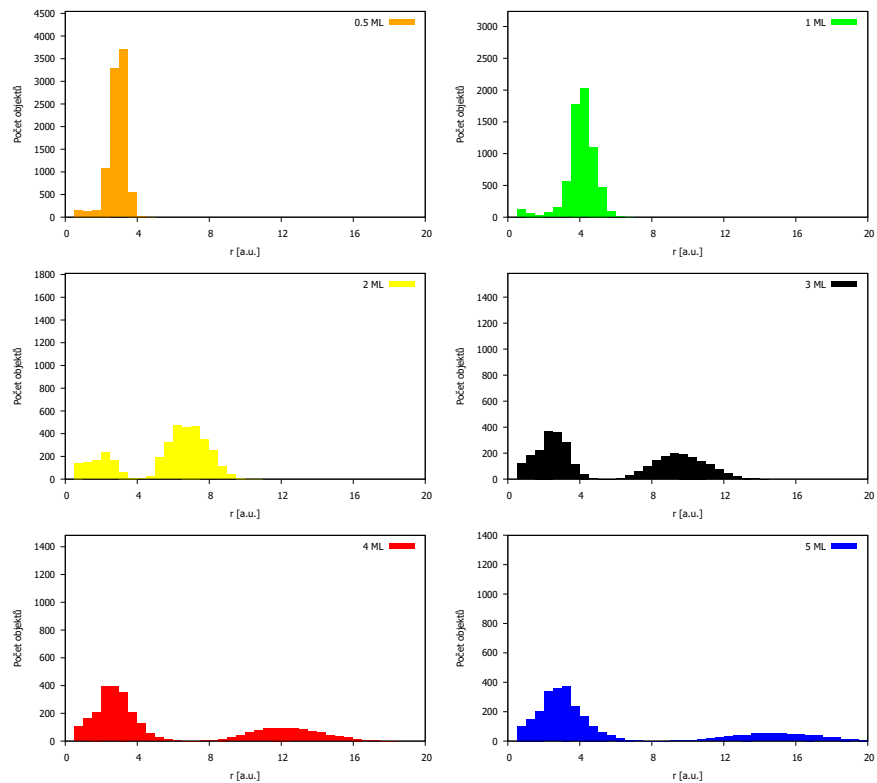
Obrázek 5.25: Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^5 ML/s pro pulzní metodu s poměrem 1 : 10



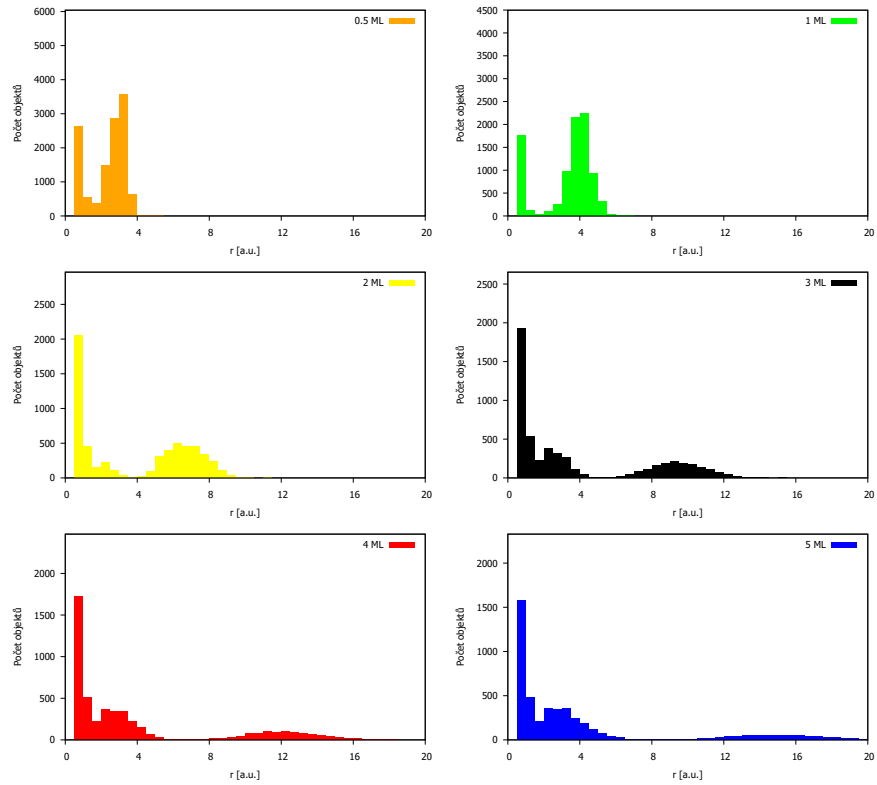
Obrázek 5.26: Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^6 ML/s pro pulzní metodu s poměrem 1 : 10



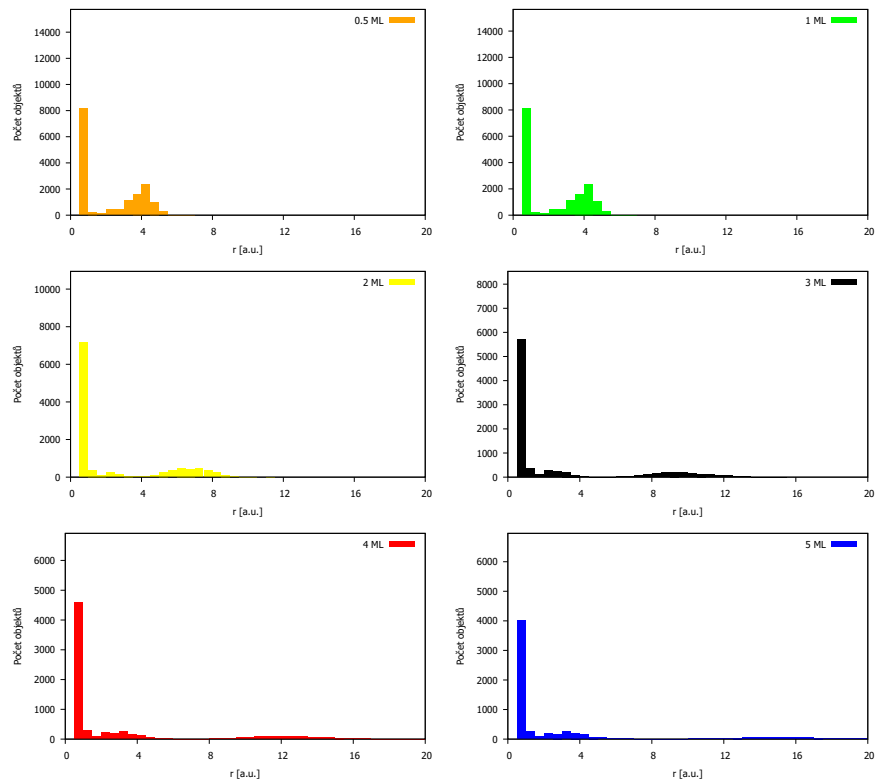
Obrázek 5.27: Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^7 ML/s pro pulzní metodu s poměrem 1 : 10



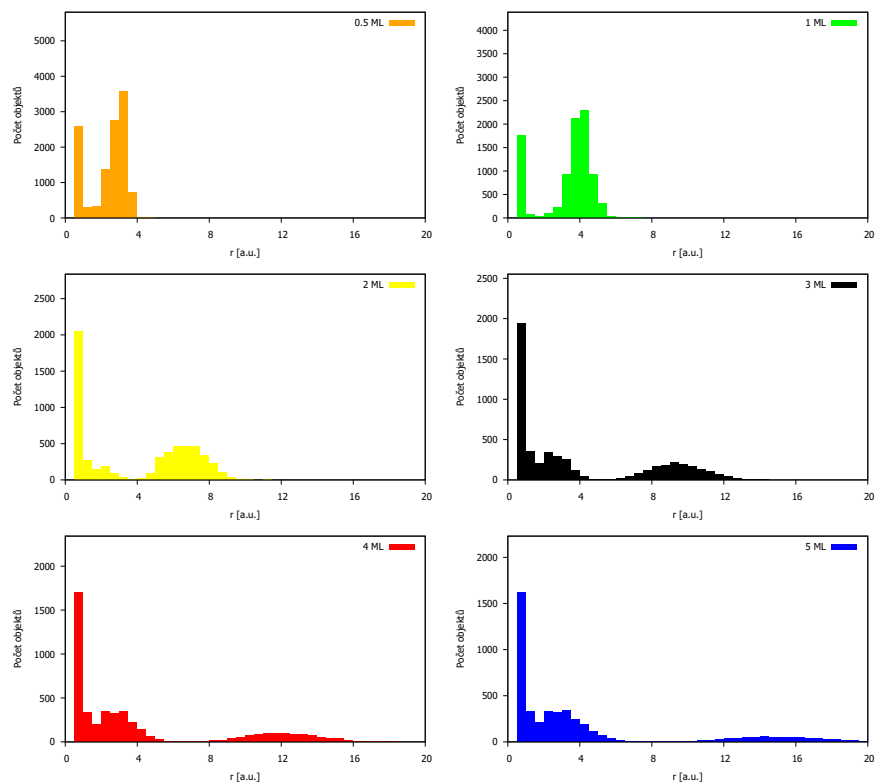
Obrázek 5.28: Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^5 ML/s pro pulzní metodu s poměrem 1 : 100



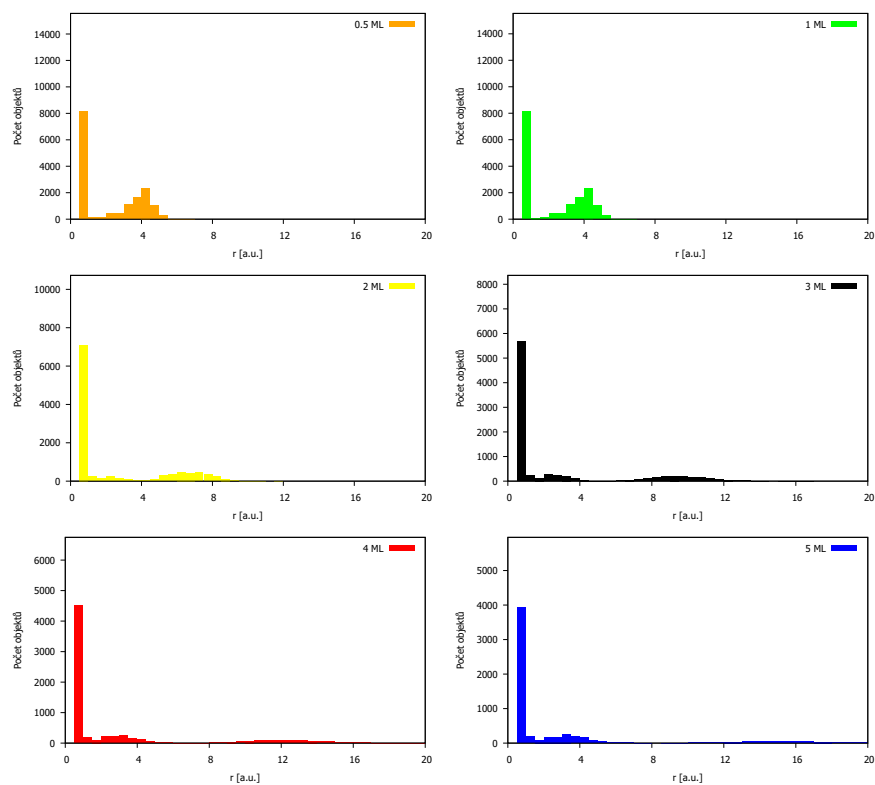
Obrázek 5.29: Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^6 ML/s pro pulzní metodu s poměrem 1 : 100



Obrázek 5.30: Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^7 ML/s pro pulzní metodu s poměrem 1 : 100



Obrázek 5.31: Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^5 ML/s pro pulzní metodu s poměrem 1 : 1000



Obrázek 5.32: Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^6 ML/s pro pulzní metodu s poměrem 1 : 1000

pro spojité napařování s rychlostí 10^7 ML/s, ale zároveň slabší než s rychlostí 10^8 ML/s. To je způsobeno tím, že k napařování dochází rychlostí 10^8 ML/s v rámci jednoho kroku programu, ale pak mají migrující atomy čas přidat se k existujícím ostrůvkům. Zároveň ale není doba bez napařování dost dlouhá, aby se k existujícím ostrůvkům přidaly všechny migrující atomy.

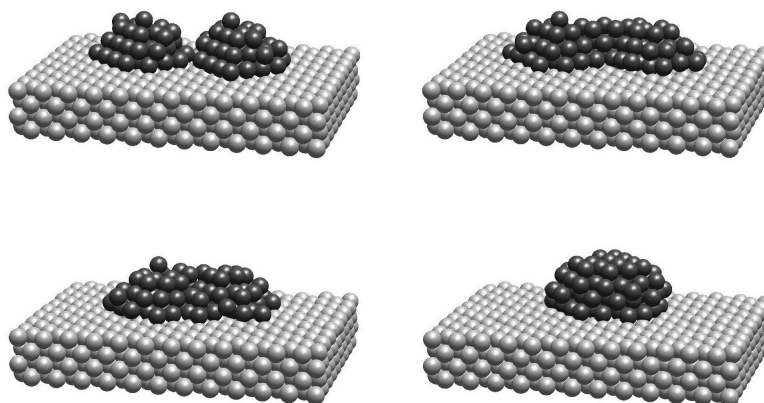
Pro poměr 1 : 100 už je výsledkům z podkapitoly věnující se spojitě depozici podobné rozdělení částic pouze pro napařovací rychlost 10^5 ML/s (5.28). I při této napařovací rychlosti dochází k sekundární nukleaci, ale ta není tak dominantní jako pro napařovací rychlosti 10^6 (5.29) a 10^7 (5.30) ML/s. Pro nižší z těchto napařovacích rychlostí jsou histogramy velmi podobné získaným histogramům pro poměr 1 : 10 s napařovací rychlostí 10^7 ML/s (5.27). Toto zjištění je v souladu se zjištěním, ke kterému jsme přišli porovnáním příznaku QC pro tyto dva případy. Pro nejvyšší napařovací rychlost 10^7 ML/s je sekundární nukleace dominantní. Maximum na ose y histogramů pro tuto napařovací rychlost je kvůli síle sekundární nukleace místo obvyklé poloviny počtu ostrůvků v daném časovém okamžiku celkový počet objektů v daném čase. I když na obrázcích výsledných struktur (5.20) byly viditelné velké objekty, jejich poměrné zastoupení je tak malé, že na histogramu jsou téměř neviditelné.

Pokud se podíváme na histogramy znázorňující rozdělení poloměrů pro poslední simulovaný poměr, vidíme, že pro napařovací rychlost odpovídající 10^5 ML/s (5.31) jsou histogramy velmi podobné histogramům pro poměr 1 : 1000 s napařovací rychlostí 10^6 ML/s (5.29). To je ve shodě s pozorováním, že průběhy příznaku QC pro oba dva tyto případy jsou téměř totožné. I pro vyšší z napařovacích rychlostí (5.32) je při porovnání s nižším poměrem a vyšší napařovací rychlostí zjevná podobnost. I v tomto případě je maximum na ose y celkový počet ostrůvků v daném čase.

6. Shrnutí výsledků

V rámci části této práce věnované metodě molekulární dynamiky jsme za použití Lennard-Jonesova potenciálu určili pravděpodobnosti slévání malých ostrůvků a polohu středu výsledného ostrůvku po spojení dvou ostrůvků.

Pokud by byl použit některý dokonalejší potenciál, například Suttonův-Chenův, bylo by možné měřit i rychlost slévání ostrůvků. Ale i při použití Suttonova-Chenova potenciálu, by ale pořád platil závěr získaný v této práci ohledně polohy středu výsledného ostrůvku. Proces koalescence s použitím tohoto potenciálu je znázorněn na obrázku 6.1



Obrázek 6.1: Ukázka slévání dvou ostrůvků za použití Suttonova-Chenova potenciálu, převzato z (Šimek, 2002)

V části věnované růstu tenkých vrstev užitím metody Monte Carlo bylo ukázáno, že pro spojitou depozici částic má aplikace pravděpodobností slévání vliv na množství malých ostrůvků, což ovlivňuje intenzitu sekundární nukleace. Pro pulzní depozici byla nalezena podobnost mezi výsledky 1 : 10 s napařovací rychlostí 10^7 ML/s, 1 : 100 s rychlostí 10^6 ML/s a 1 : 1000 s rychlostí 10^5 ML/s. Všechny tři případy odpovídají rychlému napaření množství částic odpovídajícímu rychlosti 10^8 ML/s a následnému ustálení. Obzvláště výsledky pro poslední dva případy byly téměř totožné. Z toho faktu můžeme vyvodit závěr, že při krátkém pulzu takového množství částic stačí zbývajících 99 kroků k ustálení celého systému. Protože se výsledky prvního případu lehce od zbylých dvou lišily, můžeme určit, že 9 kroků programu není dostatečně dlouhá doba k ustálení celého systému.

6.1 Porovnání s daty z experimentu

Nedílnou součástí počítačového modelování ve fyzice je porovnání výsledků s experimentálně získanými daty.

Va tabulce 6.1 a na obrázcích 6.2 a 6.3 jsou data získaná měřením růstu tenké vrstvy india. Se znalostí velikosti krystalové mříže může odhadnout, že se jedná o data o vrstvách o tloušťce 1 až 7 monovrstev. Protože nevíme přesně o jaké

tloušťky vrstev se jedná a jaká byla použita napařovací rychlosti, můžeme tyto data z experimentu porovnat pouze kvalitativně.

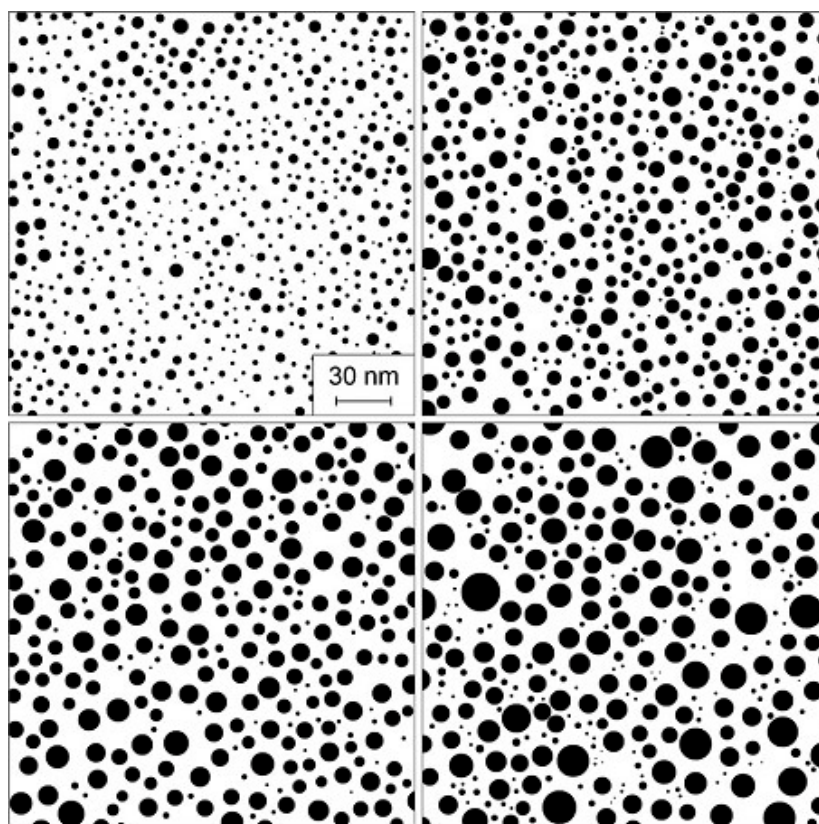
Podíváme-li se na průběh počtu objektů v závislosti na tloušťce v tabulce 6.1, vidíme, že tento průběh odpovídá získaným výsledkům z Monte Carlo modelu. V obou případech nabývá pro malé tloušťky průběh svého maxima, pak klesá a postupně se přibližně ustálí na jedné hodnotě.

Vzhledem k malému celkovému počtu objektů je příznak QC uvedený v tabulce 6.1 zneřádněn velkým šumem. Ale pokud budeme porovnávat pouze jeho průběh, pak zjistíme, že podobně jako ve výsledcích simulací hodnota příznaku QC s rostoucí tloušťkou vrstvy roste.

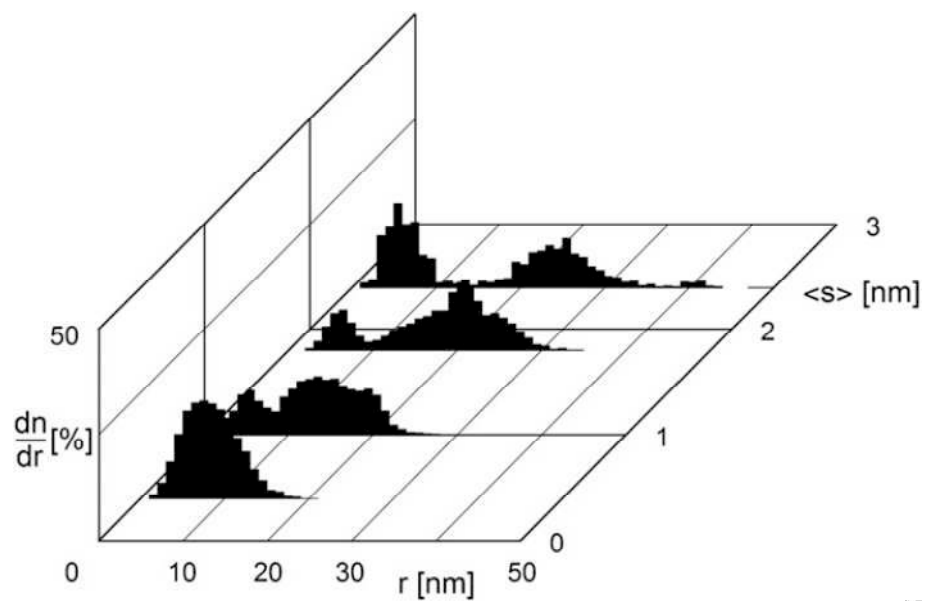
Rozdělení poloměrů objektů též vykazuje podobné chování jako v případě výsledků simulací. Pro rané fáze je pozorovatelný jeden pík, který se s rostoucí tloušťkou vrstvy postupně posouvá k hodnotám odpovídajícím větším poloměrům ostrůvků a objevuje se nový pík odpovídající sekundární nukleaci.

Vzorek č.	1	2	3	4	5	6	7	8
Tloušťka [nm]	0,4	0,7	1,0	1,3	1,8	2,1	2,4	2,8
Počet objektů	638	562	485	446	320	345	336	327
QC	0,259	0,282	0,288	0,467	0,43	0,495	0,603	0,557

Tabulka 6.1: Vrstva india, experimentální data



Obrázek 6.2: Vrstva india, experimentální data (Hrach a kol., 2013)



Obrázek 6.3: Rozdělení poloměrů ostrůvků, experimentální data (Hrach a kol., 2013)

Závěr

V rámci této práce byly navrženy a vytvořeny modely růstu tenkých vrstev pomocí metody molekulární dynamiky a Monte Carlo. Výsledky získané z metody molekulární dynamiky byly použity pro rozšíření metody Monte Carlo o pravděpodobnosti slévání malých objektů.

Jako zdroj částic v rámci obou metod byl použit tok nenabitých částic. Pokud bychom chtěli použít nabitě částice, například z plazmatu, bylo by nutné do použitého Lennard-Jonesova potenciálu zavést i dalekodosahový člen odpovídající odpudivé elektrostatické síle. Zavedením tohoto členu bychom přišli o možnost použití cutoffu potenciálu a seznamu nejbližších sousedů pro napařené částice. Další problémy by vyvstaly po dopadu částice na substrát. Pokud by bylo substrátem dielektrikum, bylo by nutné řešit jeho postupné nabíjení, viz například (Amiaud a kol., 2015). Tento problém by byl na úrovni klasického částicového modelování jen velmi těžko řešitelný. Pro jeho popis by bylo nejspíše třeba použít kombinaci existujícího částicového modelu a spojitěho modelu pro výpočet rozložení náboje. Pokud by substrátem byl kov, tak by v našem přiblížení nabitě dopadající částice o svůj náboj v okamžiku dopadu přišly. Náboj částic by v tomto případě neovlivňoval výsledky. Z důvodů výše zmíněných komplikací jsme se rozhodli použít jako zdroj neutrálních částic nejjednodušší spojitě nebo přerušované vakuové napařování. V případě plazmatické depozice může též docházet k napařování celých klastrů atomů. Tento upravený mechanismus tvorby tenkých vrstev nebyl v této práci uvažován.

Pro zlepšení získaných výsledků v rámci metody molekulární dynamiky je nutné rozšířit model o potenciály, které jsou vhodnější pro simulaci kovů, například Suttonův-Chenův potenciál. Bez této úpravy není možné měřit zejména závislost délky slévání ostrůvků na jejich velikosti, kontaktní úhel mezi ostrůvkem a podložkou a další parametry, které by byly použitelné pro metodu Monte Carlo.

Metoda Quadrat Counts pro velmi silnou sekundární nukleaci selhává. Podle literatury (Ripley, 2004) by i pro maximálně neuspořádané systémy neměla hodnota příznaku QC být větší než jedna. Tato vlastnost byla za pomoci hard-disk modelu ověřena dříve i v rámci naší bakalářské práce. Z důvodu nevhodného chování této metody způsobeného tím, že je vhodná především pro homogenní struktury, je tedy potřeba v budoucnu najít a používat jinou vhodnější metodu. Jedním z možných směrů by bylo rozdělit ostrůvky na dvě populace - „primární“ a „sekundární“ nukleaci a pro každou z nich aplikovat nějakou morfologickou metodu zvlášť. Problémem tohoto přístupu je, že při odstranění „primární“ populace zůstanou ve výsledném obrazu, který by se měl vyhodnocovat, velké díry. Další možností by bylo použití některé metody založené na integrální transformaci.

V této diplomové práci byla nastolena řada otázek, z nichž prozatím byly řešené pouze některé z nich. V budoucnu se proto chceme studované problematice nadále věnovat a tato diplomová práce včetně vytvořených programů by mohla sloužit jako výchozí bod následující práce.

Seznam použité literatury

- AMIAUD, A.-C., LEULIET, A., LOISEAUX, B., GANNE, J.-P. a NAGLE, J. (2015). Modeling of dielectric charging in capacitive structures. *Journal of Applied Physics*, **118**(17), 174103.
- BERENDSEN, H. J. C., POSTMA, J. P. M., VAN GUNSTEREN, W. F., DiNOLA, A. a HAAK, J. R. (1984). Molecular dynamics with coupling to an external bath. *The Journal of Chemical Physics*, **81**(8), 3684–3690.
- BORTZ, A., KALOS, M. a LEBOWITZ, J. (1975). A new algorithm for monte carlo simulation of ising spin systems. *Journal of Computational Physics*, **17**(1), 10 – 18.
- ECKERTOVÁ, L. (1986). *Physics of Thin Films*. Springer US, New York, 2 edition. ISBN 9780306417986.
- HOOVER, W. G. (1985). Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions. *Phys. Rev. A*, **31**, 1695–1697.
- HRACH, R. (2003). *Počítačová fyzika II*. PF UJEP Ústí nad Labem, Ústí nad Labem.
- HRACH, R., NOVOTNY, D. a HRUBY, V. (2012). Study of initial stages of thin film growth by means of atomistic computer simulation and image analysis. *Vacuum*, **86**(9), 1223–1227.
- HRACH, R., NOVOTNY, D. a HRUBY, V. (2013). Study of initial stages of thin film growth by means of computer simulation and image analysis: Advanced atomistic modelling. *Vacuum*, **90**(4), 121–128.
- HUMPHREY, W., DALKE, A. a SCHULTEN, K. (1996). Vmd: Visual molecular dynamics. *Journal of Molecular Graphics*, **14**(1), 33 – 38.
- ŠIMEK, J. (2002). Moderní metody zpracování obrazu ve fyzice. Master's thesis, Univerzita Karlova v Praze, Matematicko-fyzikální fakulta, Katedra fyziky povrchů a plazmatu.
- ŠIMEK, J. (2006). *Rozvoj metod počítačové fyziky pro fyziku plazmatu a fyziku tenkých vrstev*. PhD thesis, Univerzita Karlova v Praze, Matematicko-fyzikální fakulta, Katedra fyziky povrchů a plazmatu.
- JONES, J. E. (1924). On the determination of molecular fields. —ii. from the equation of state of a gas. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, **106**(738), 463–477.
- METROPOLIS, N., ROSENBLUTH, A. W., ROSENBLUTH, M. N., TELLER, A. H. a TELLER, E. (1953). Equation of state calculations by fast computing machines. *The Journal of Chemical Physics*, **21**(6), 1087–1092.
- NOSÉ, S. (1984). A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods. *The Journal of Chemical Physics*, **81**(1), 511–519.

- RIPLEY, B. D. (2004). *Spatial statistics*. John Wiley & Sons, New Jersey. ISBN 0471691116.
- SUTTON, A. P. a CHEN, J. (1990). Long-range finnis–sinclair potentials. *Philosophical Magazine Letters*, **61**(3), 139–146.
- VERLET, L. (1967). Computer "experiments" on classical fluids. i. thermodynamical properties of lennard-jones molecules. *Phys. Rev.*, **159**, 98–103.

Seznam obrázků

1.1	Módy růstu tenkých vrstev Volmerův-Weberův, van der Merweův, Stranského-Krastanovův, převzato z (Šimek, 2006)	4
1.2	Znázornění procesu koalescence, převzato z (Šimek, 2006)	4
3.1	Průběh radiální distribuční funkce a rozdělení nejbližších sousedů v závislosti na uspořádání objektů v ploše, převzato z (Hrach, 2003)	13
4.1	Ustálená podložka s rozměry $10 \times 10 \times 6$ atomů	16
4.2	Ustálená podložka s rozměry $40 \times 30 \times 6$ atomů	16
4.3	Ukázka možných výsledných útvarů pro 3, 4 a 9 atomů	18
4.4	Ukázka slévání dvou ostrůvků obsahujících 100 atomů	18
5.1	Průběh příznaku QC v závislosti na uspořádanosti systému a průměrném počtu objektů ve čtverci, převzato z (Hrach a kol., 2012)	21
5.2	Ukázka vrstev pro všechny napařovací rychlosti od nejnižší po nejvyšší pro 1, 3 a 5 monovrstev bez užití tabulky pravděpodobností	23
5.3	Rozdělení počtu ostrůvků pro všechny napařovací rychlosti v závislosti na tloušťce vrstvy bez užití tabulky pravděpodobností . .	24
5.4	Průběh příznaku QC pro všechny napařovací rychlosti v závislosti na tloušťce vrstvy bez užití tabulky pravděpodobností	24
5.5	Ukázka vrstev pro všechny napařovací rychlosti od nejnižší po nejvyšší pro 1, 3 a 5 monovrstev s užitím tabulky pravděpodobností .	25
5.6	Rozdělení počtu ostrůvků pro všechny napařovací rychlosti v závislosti na tloušťce vrstvy s užitím tabulky pravděpodobností . . .	26
5.7	Průběh příznaku QC pro všechny napařovací rychlosti v závislosti na tloušťce vrstvy s užitím tabulky pravděpodobností	26
5.8	Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^5 ML/s bez použití tabulky pravděpodobností	27
5.9	Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^5 ML/s s použitím tabulky pravděpodobností	28
5.10	Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^6 ML/s bez použití tabulky pravděpodobností	28
5.11	Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^6 ML/s s použitím tabulky pravděpodobností	29
5.12	Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^7 ML/s bez použití tabulky pravděpodobností	29
5.13	Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^7 ML/s s použitím tabulky pravděpodobností	30
5.14	Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^8 ML/s bez použití tabulky pravděpodobností	30
5.15	Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^8 ML/s s použitím tabulky pravděpodobností	31
5.16	Ukázka vrstev pro všechny napařovací rychlosti od nejnižší po nejvyšší pro 1, 3 a 5 monovrstev pulzní metodou s poměrem 1 : 10 .	33
5.17	Rozdělení počtu ostrůvků pro všechny napařovací rychlosti v závislosti na tloušťce vrstvy pro pulzní metodu s poměrem 1 : 10 . .	33

5.18	Průběh příznaku QC pro všechny napařovací rychlosti v závislosti na tloušťce vrstvy pro pulzní metodu s poměrem 1 : 10	34
5.19	Ukázka vrstev pro všechny napařovací rychlosti od nejnižší po nejvyšší pro 1, 3 a 5 monovrstev pulzní metodou s poměrem 1 : 100 .	35
5.20	Rozdělení počtu ostrůvků pro všechny napařovací rychlosti v závislosti na tloušťce vrstvy pro pulzní metodu s poměrem 1 : 100 .	35
5.21	Průběh příznaku QC pro všechny napařovací rychlosti v závislosti na tloušťce vrstvy pro pulzní metodu s poměrem 1 : 100	36
5.22	Ukázka vrstev pro všechny napařovací rychlosti od nejnižší po nejvyšší pro 1, 3 a 5 monovrstev pulzní metodou s poměrem 1 : 1000	36
5.23	Rozdělení počtu ostrůvků pro všechny napařovací rychlosti v závislosti na tloušťce vrstvy pro pulzní metodu s poměrem 1 : 1000 .	37
5.24	Průběh příznaku QC pro všechny napařovací rychlosti v závislosti na tloušťce vrstvy pro pulzní metodu s poměrem 1 : 1000	37
5.25	Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^5 ML/s pro pulzní metodu s poměrem 1 : 10	38
5.26	Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^6 ML/s pro pulzní metodu s poměrem 1 : 10	38
5.27	Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^7 ML/s pro pulzní metodu s poměrem 1 : 10	39
5.28	Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^5 ML/s pro pulzní metodu s poměrem 1 : 100	39
5.29	Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^6 ML/s pro pulzní metodu s poměrem 1 : 100	40
5.30	Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^7 ML/s pro pulzní metodu s poměrem 1 : 100	40
5.31	Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^5 ML/s pro pulzní metodu s poměrem 1 : 1000	41
5.32	Rozdělení poloměrů objektů pro napařovací rychlost 10^6 ML/s pro pulzní metodu s poměrem 1 : 1000	41
6.1	Ukázka slévání dvou ostrůvků za použití Suttonova-Chenova potenciálu, převzato z (Šimek, 2002)	43
6.2	Vrstva india, experimentální data (Hrach a kol., 2013)	44
6.3	Rozdělení poloměrů ostrůvků, experimentální data (Hrach a kol., 2013)	45

7. Přílohy

Na přiloženém CD jsou umístěny zdrojové kódy použitých modelů metodami molekulární dynamiky a Monte Carlo. Ke každému programu je přiložen textový soubor s pokyny pro jeho použití.