

Název práce: Počítačové simulace charakteristik desorpce kovů z povrchu Si(111)

Autor: Adam Sikora

Katedra: Katedra fyziky povrchů a plazmatu

Vedoucí bakalářské práce: RNDr. Pavel Kocán, Ph.D.

Abstrakt: V případě desorpce některých kovů (Pb, In, Ga) z povrchů Si(111) a Ga(111) byl pomocí integrálních technik překvapivě pozorován nultý řád desorpce. Teoretické vysvětlení nultého řádu zde dosud chybí, neboť se zdá, že podmínky obvykle vedoucí k desorpci nultého řádu - vysoká difuzivita, existence 2D plynné fáze atd. - zde nemohou být splněny. Cílem práce bude vyvinutí kinetického Monte Carlo počítačového kódu pro simulaci atomárních procesů na povrchu Si(111). Vyvinutý kód bude následně použit k zkoumání desorpčních spekter za různých podmínek a taky k nalezení parametrů, které dovolují právě desorpci nultého řádu.

Klíčová slova: kinetické Monte Carlo, tepelně programovaná desorpce, desorpce nultého řádu, Si(111)