

Univerzita Jana Evangelisty Purkyně
v Ústí nad Labem
Katedra fyziky



PŘÍRODOVĚDECKÁ FAKULTA
UNIVERZITY J. E. PURKYNĚ
V ÚSTÍ NAD LABEM

2D depozice nepřímou metodou

Vypracoval: Bc. Lukáš Michalec

Ročník: 2.

Studijní program: Fyzika

Studijní obor: Počítačové modelování ve vědě a technice

ÚSTÍ NAD LABEM 2014

Contents

1	Zadání	3
2	Model	3
2.1	Algoritmus simulace	3
2.2	Kontrola pokrytí	4
2.3	Výpočet nového poloměru	4
2.4	Výpočet středu nového ostrůvku při slití	4
3	Výsledky	5
3.1	Struktura $T_a=1, T_b=1$	7
3.2	Struktura $T_a=1, T_b=2$	8
3.3	Struktura $T_a=2, T_b=1$	9
3.4	Struktura $T_a=2, T_b=2$	10

1 Zadání

Pomocí metody Monte Carlo simulujte dvojrozměrný růst tenké vrstvy.

- Uvažujte periodické okrajové podmínky, rozměr podložky cca 1000×1000 bodů.
- Adsorbované atomy se po podložce náhodně pohybují v diskretní mříži.
- Shluky atomů (ostrůvky) jsou reprezentovány kružnicí o poloměru odpovídajícím poloměru kapky složené z počtu atomů tvořících daný shluk. Souřadnice středu těchto kružnic jsou reprezentovány reálnými čísly. Shluky atomů se po podložce již nepohybují.
- Uvažujte slévání ostrůvků (okamžité). Po slítí ostrůvků se vytvoří výsledný shluk se středem v těžišti předchozích.
- Čas setrvání adsorbovaného atomu v aktuální pozici generujte podle vztahu $t_a^i = t_a \ln(\gamma)$ simulace teploty podložky ($t_a = 1, t_a = 2$), kde t_a je střední doba setrvání atomu v aktuální pozici a γ je náhodné číslo z intervalu (0;1).
- Obdobně generujte dobu t_d^i mezi dvěma pokusy o adsorpci nové částice na podložku – rychlost depozice ($t_d = 1, t_d = 2$).
- Simulaci ukončete po dosažení pokrytí cca 60 %.
 - Analýza modelové vrstvy – čtyři struktury.
 - Rozdělení poloměrů ostrůvků.
 - Závislost počtu ostrůvků na počtu adsorbovaných částic, resp. čase.
 - Závislost stupně pokrytí na čase.
 - Obrázek pro každou strukturu.

2 Model

2.1 Algoritmus simulace

- Hledání nejmenšího času.
- Provedení akce, která má nejmenší čas.
 - **Depozice částice** - vytvoření nové částice a přiřazení nového depozičního času a času pro pohyb dané částice.
 - **Posun částice** - posunutí částice o 1 v náhodném směru. Kontrola kolize s jinou částicí nebo ostrůvkem. Po kolizi s částicí vytvoření nového ostrůvku. Po kolizi s ostrůvkem, zvětšení poloměru ostrůvku a kontrola, jestli zvětšený ostrůvek nekoliduje s jiným ostrůvkem/částicí.
- Kontrola pokrytí.

2.2 Kontrola pokrytí

Pokrytí podložky se počítá z následujícího vztahu:

$$\rho = \frac{n}{S} \quad (1)$$

kde n je počet částic a S je plocha podložky.

2.3 Výpočet nového poloměru

$$r_n = \sqrt{\frac{\pi * r_s^2 + S_1}{\pi}} \quad (2)$$

kde r_n je nový poloměr, r_s je starý poloměr, S_1 je přidaný obsah ke starému obsahu.

2.4 Výpočet středu nového ostrůvku při slítí

Při kolizi dvou ostrůvku se vypočítá jejich nová souřadnice z jejich těžiště a oba obsahy se sečtou:

$$\begin{aligned} x_n &= \frac{S_1 x_1 + S_2 x_2}{S_1 + S_2} \\ y_n &= \frac{S_1 y_1 + S_2 y_2}{S_1 + S_2} \end{aligned} \quad (3)$$

kde x_n, y_n jsou souřadnice nového ostrůvku, x_1, y_1, S_1 jsou souřadnice a plocha prvního ostrůvku a x_2, y_2, S_2 jsou souřadnice a plocha druhého ostrůvku.

3 Výsledky

Rozdělení poloměrů ostrůvků vypadá následovně: Závislosti počtů ostrůvku na adsorbo-

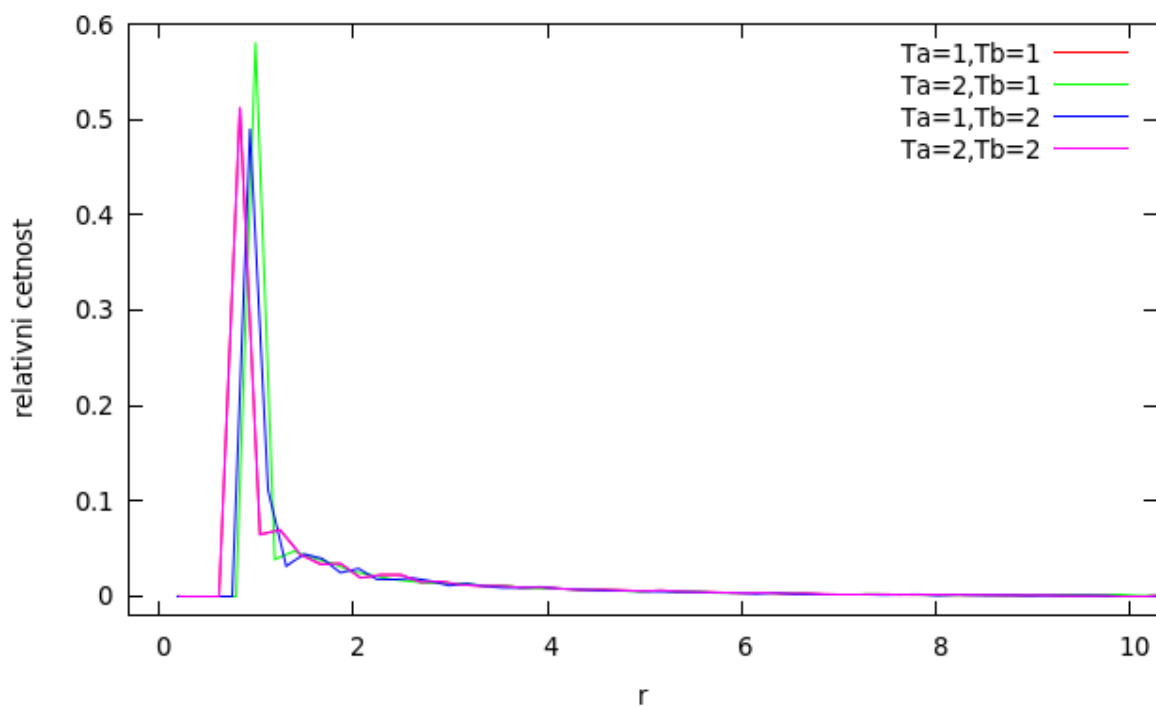


Figure 1: Relativní četnost poloměrů.

vaných částic: Závislost stupně pokrytí:

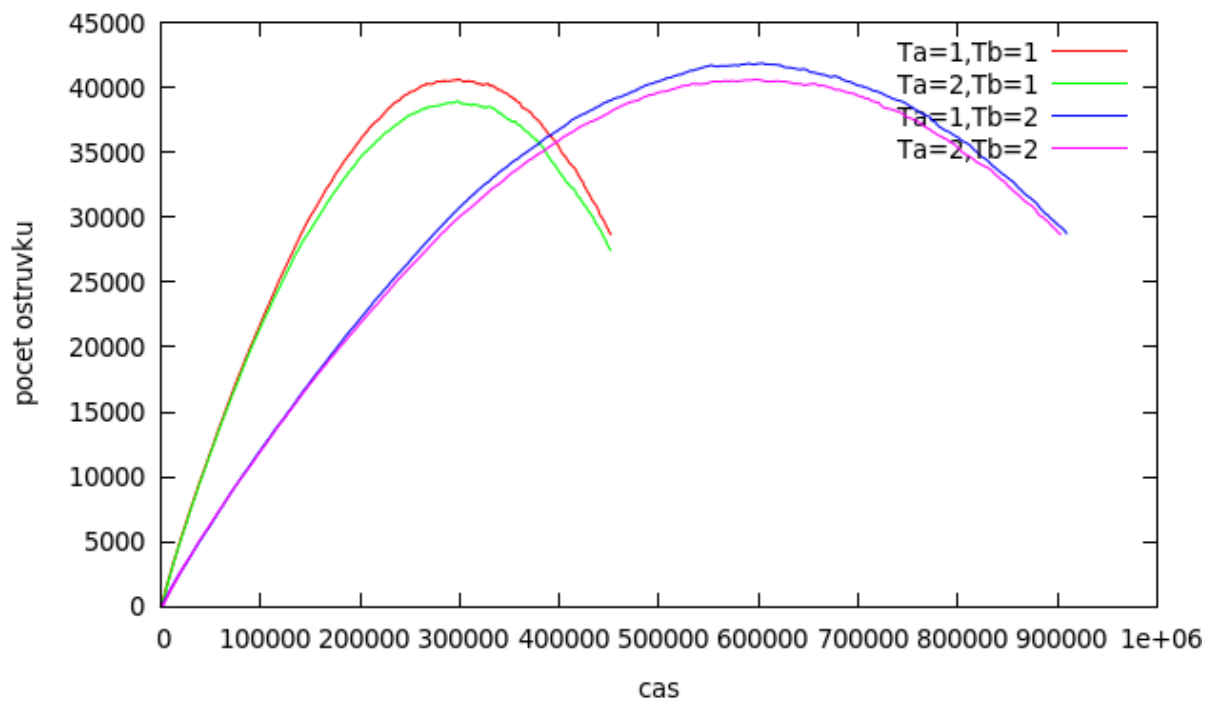


Figure 2: Počet ostrůvků v čase.

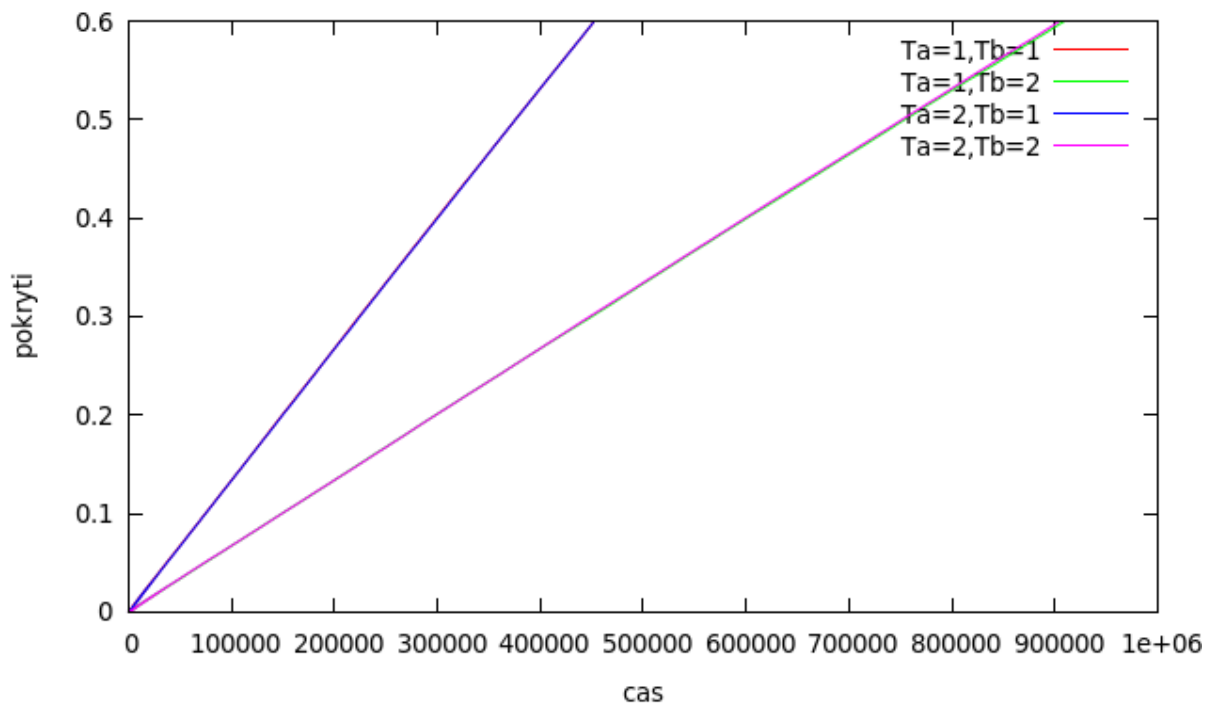


Figure 3: Závislost stupně pokrytí

3.1 Struktura $T_a=1$, $T_b=1$

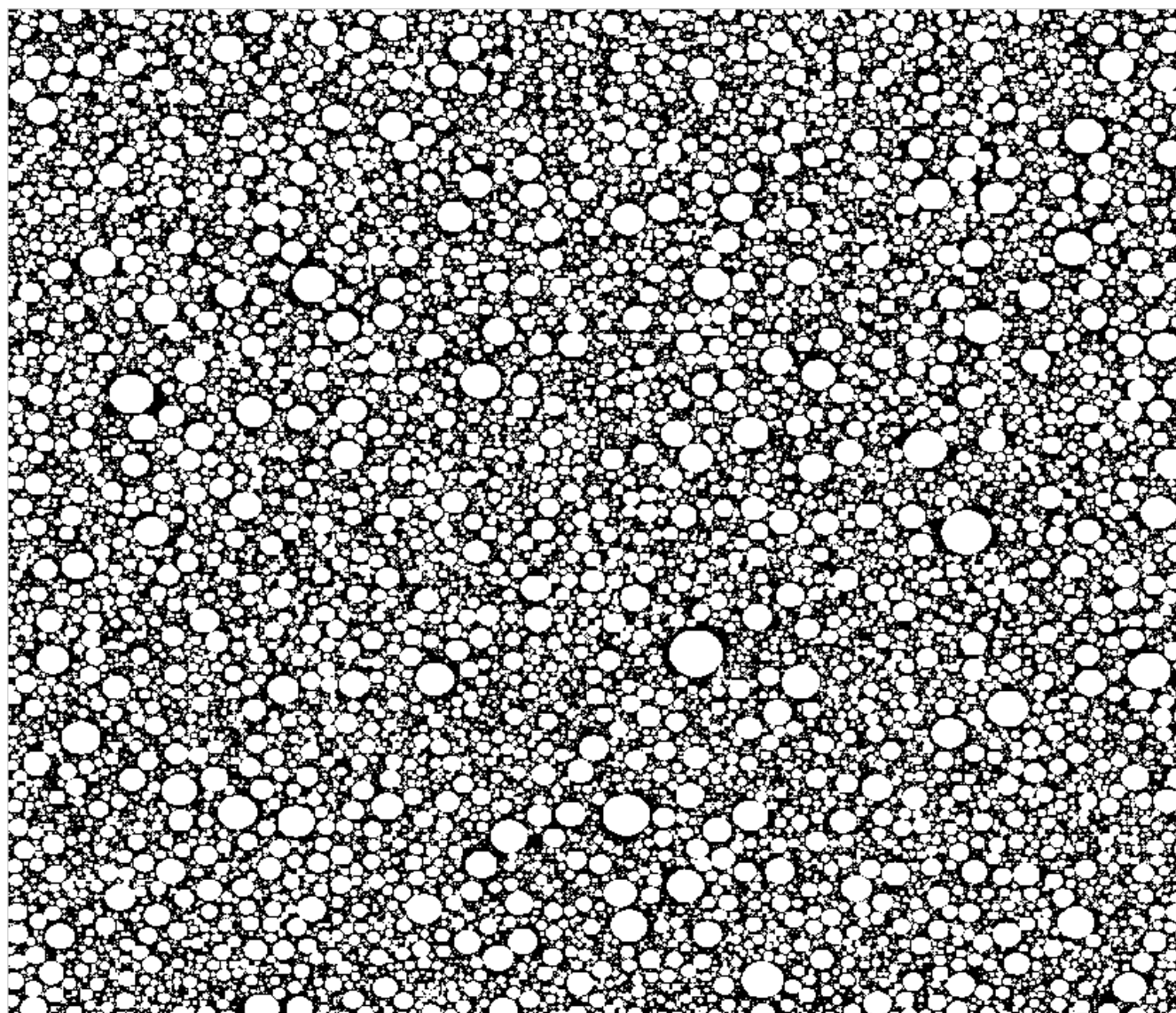


Figure 4:

3.2 Struktura $T_a=1$, $T_b=2$

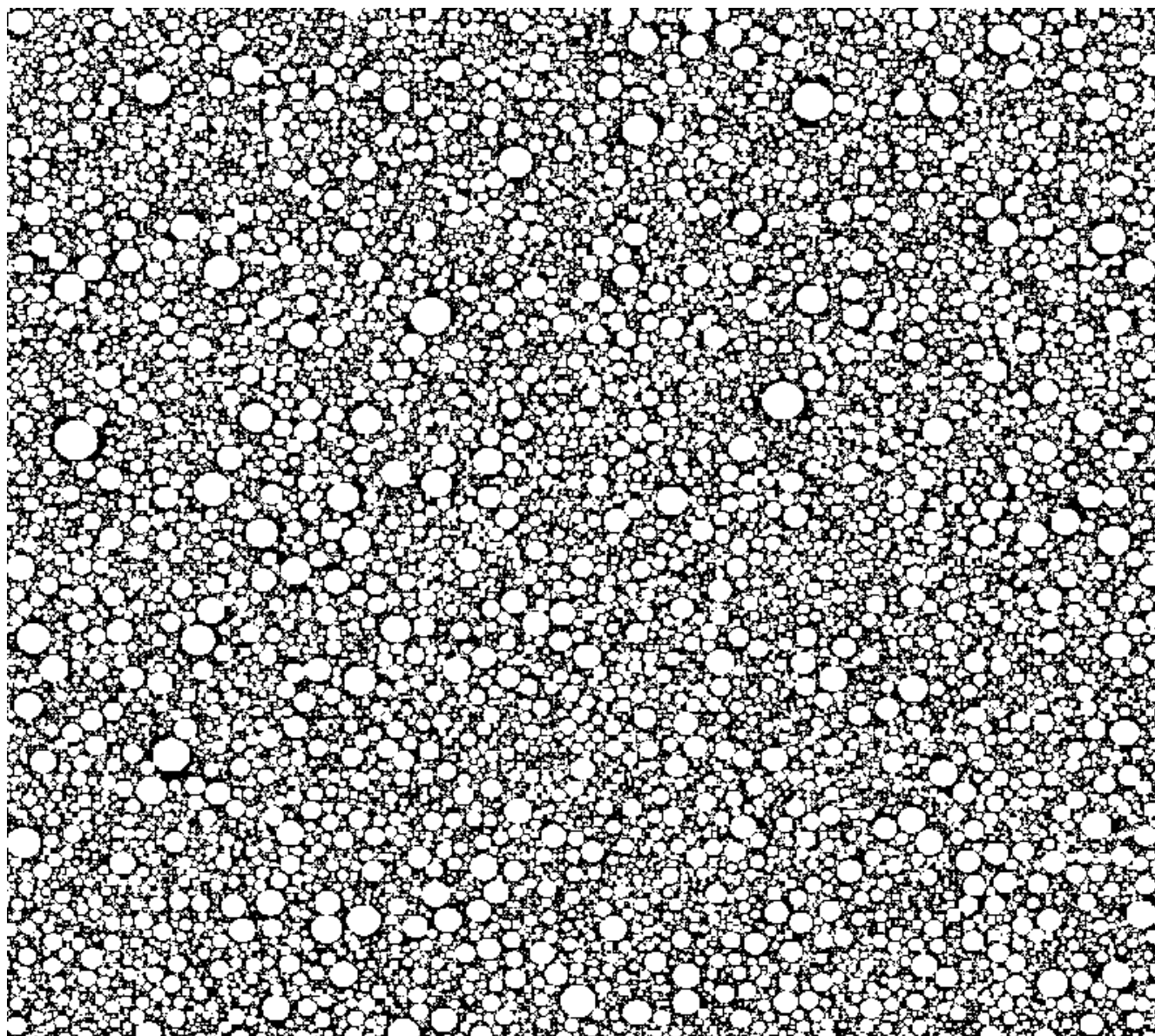


Figure 5:

3.3 Struktura $T_a=2$, $T_b=1$

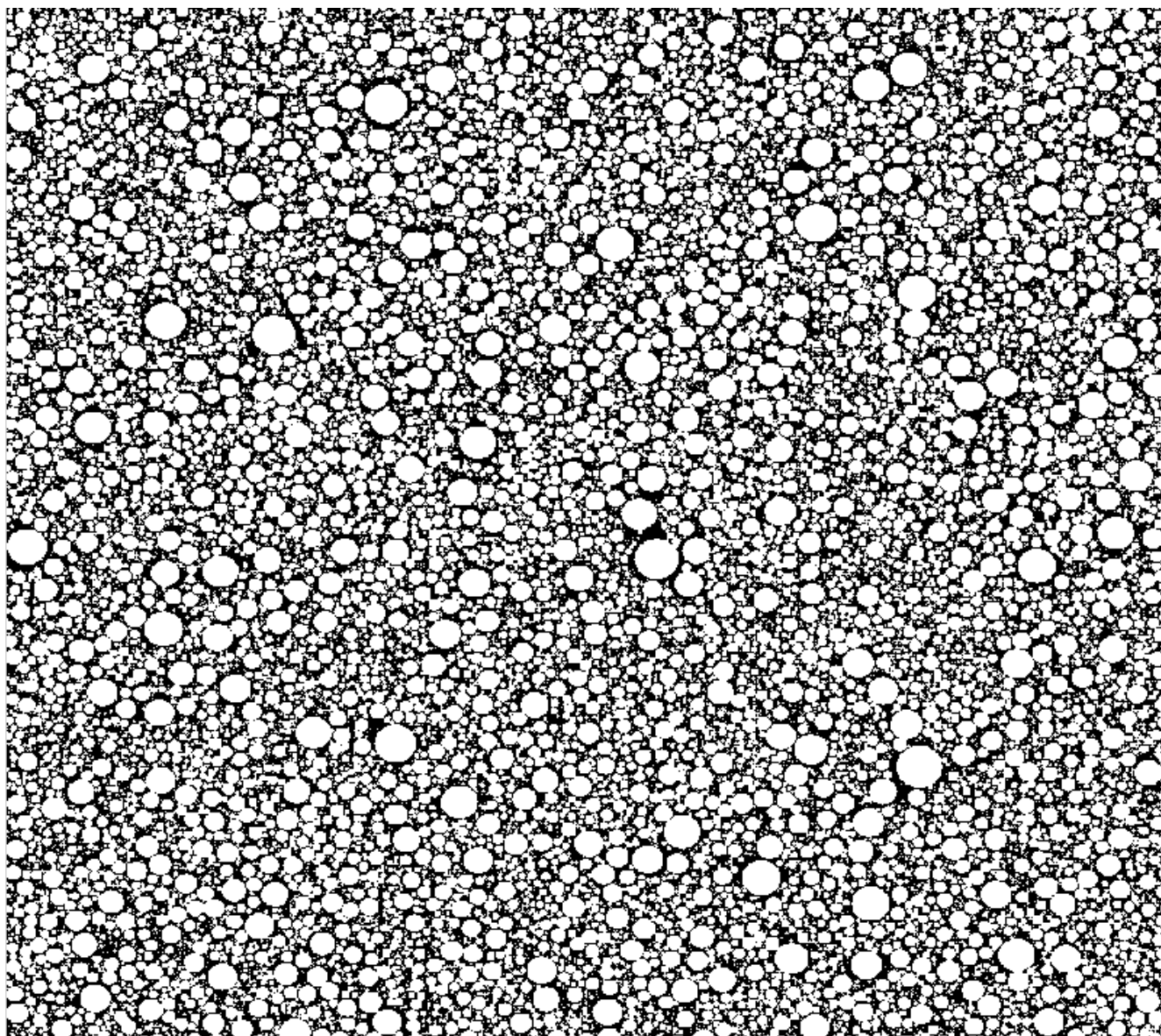


Figure 6:

3.4 Struktura Ta=2, Tb=2

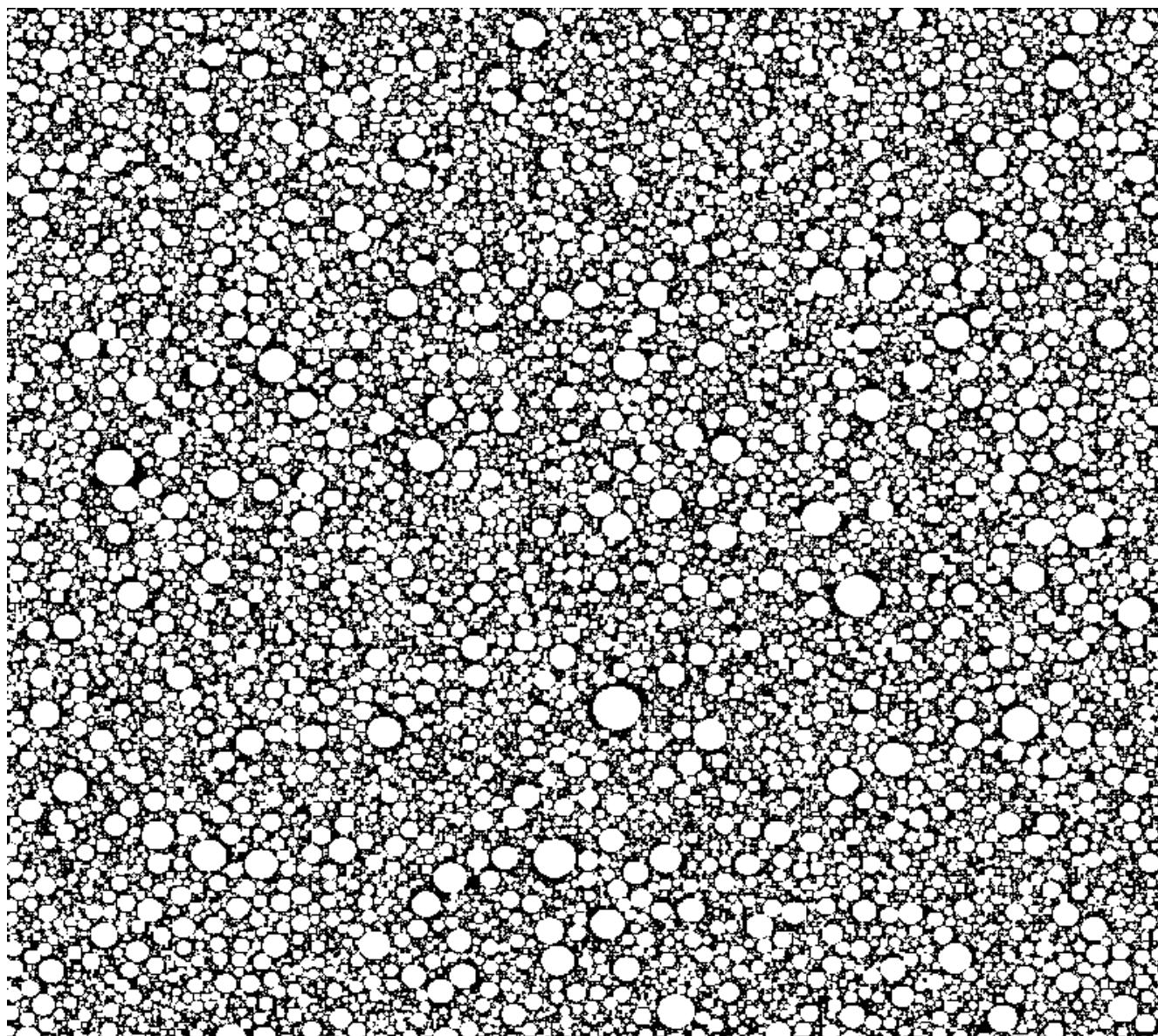


Figure 7: