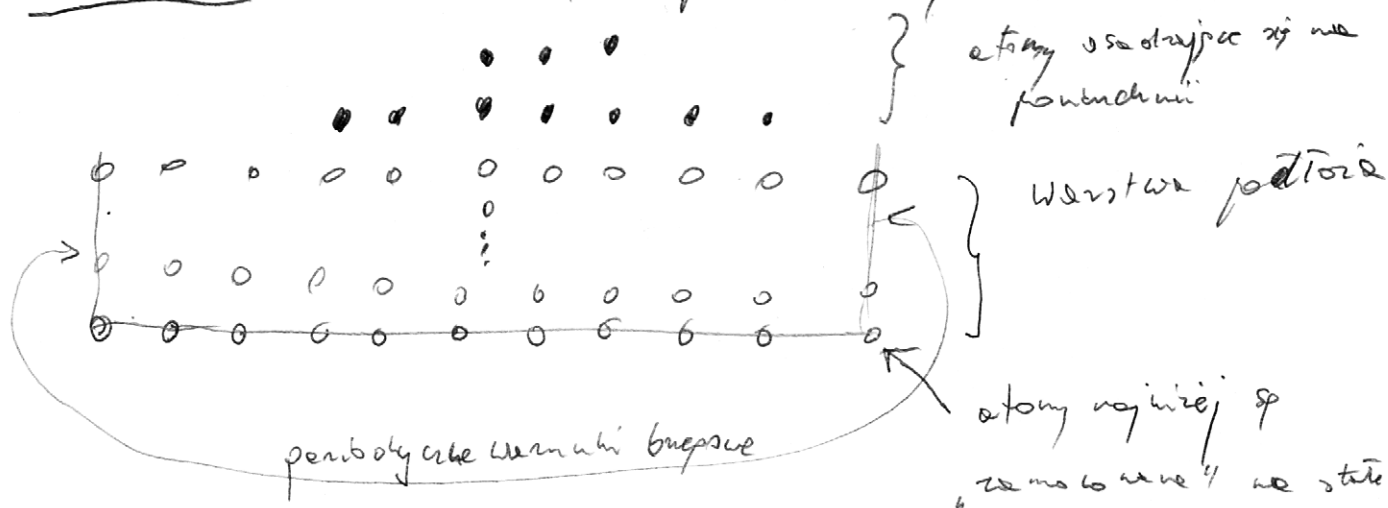


# Wzrost epitaksyjny symulowany KMC

- Geometria:  $1+1 \Rightarrow$  układ jednowymiarowy + wzrost



- procesy fizyczne:

- osadzenie nowych atomów na powierzchni  
opisywane przez tempo (rate)  $\boxed{v_{dep}}$
- dyfuzja atomów na powierzchni (hopping rate)  
opisywane przez tempo dyfuzji / przeniesienia  $\boxed{v_i}$
- desorpcja - atomy uciekają z powierzchni  
ten aspekt pominiemy

$$v_{dep} = \frac{(K+1)(2K+1)}{6} F$$

$F$  - tempo deflacji  $\rightarrow$   
wtedy monoliter na  
jednostkę czasu

$K$  - rodzaj dyfuzji, czyli niekierunkowe przeniesienie atomu  
o sąsiednich atomach w sposób przemienny

$$v_i = v_0 \exp \left[ \frac{-\epsilon_n + \Delta W + E}{k_B T} \right]$$

$\epsilon$  - energia potencjalnego wprawy  
 $n$  - liczba najbliższych sąsiadów

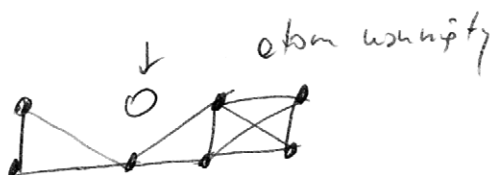
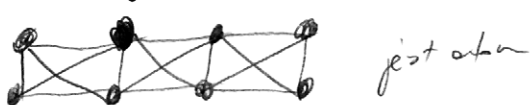
$k_B$  - stała Boltzmanna  
 $T$  - temperatura

$v_0$  - Amplituda dyfuzji  
 $\left[ \frac{v_0}{s} \right]$

$E$  - parametr dopasowania do wyników eksperymentalnych

$$\Delta W = W(\text{jest atom}) - W(\text{bez atomu}) \leftarrow \text{zmiana energii sprężystości w kryształ po usunięciu atomu i-tygo}$$

$$= W_1 - W_0$$



- Energia sprężystości całego kryształu to suma oddziaływań pomiędzy najbliższymi sąsiadami

$$W = \frac{1}{2} \sum_{i,j} w_{ij} \quad w_{ij} = w_{ij}^{xx} + w_{ij}^{xy} + w_{ij}^{yy}$$

$(i,j) \rightarrow$  położenie w sieci krystalicznej

$w_{ij} = \dots$  to wzmag  $(7)(8) \rightarrow$  Schutze, Swendsen

J. Mech. Solids 57(2009), 527

Uwaga: aby obliczyć  $\Delta W$ , należy znaleźć  $W_1$  i  $W_0$  a to oznacza że po usunięciu atomu  $(i,j)$  zmienią się wszystkie położenia sąsiadów atomów. Aby policzyć  $W_0$  korzystamy z przybliżenia

$$\Delta W < \tilde{\Delta W} \approx C n^{1/2} e_p \quad C_n = \begin{cases} 1.5 & n=3 \\ 2.4 & n=4 \\ 3.5 & n=5 \end{cases}$$

$$e_p = w_{ij}$$

Takie przybliżenie pozwala uniknąć DRASOJONOWEJ RELAKSACJI. Przybliżenie nie jest dobitne, ale dość dobre modyfikujący tempo dyfuzji atomu

$$\hat{n}_i = n_0 \exp \left[ -\frac{\gamma n + \tilde{\Delta W} + E}{k_B T} \right]$$

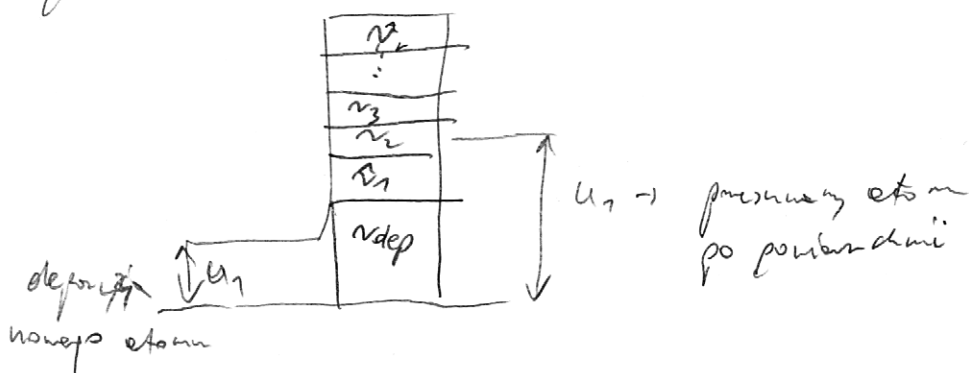
Algoritm

czas startowy:  $t=0$

- ① Okresowy przybliżone tempo rozprzeczania JAKIEGOKOLWIEK procesu

$$R = v_{dep} + \frac{1}{L} \hat{v}_L \quad \left[ \frac{1}{\text{sekunda}} \right]$$

- ② losujemy liczbę  $U_1 \sim U(0, R)$   
i sprawdzamy typ procesu



- ③ a) deparycja atomu: • wybicie na tym losowe miejsce na powierzchni i lokalizujemy tam nowy (wolny) atom
- dokonujemy relaksacji sieci (lokalnej lub globalnej)

- b) dyfuzja atomu na powierzchni:

- okresowy  $\hat{v}_L$  wartości przybliżone
- usuwamy atom który przeszedł dyfuzję i obliczamy  $W_0$  licząc  $\Delta W = W_1 - W_0 \rightarrow v_L$  (wartości absolutne)

- losujemy  $U_2 \sim U(0, 1)$

jeżeli  $U_2 < \frac{v_L}{\hat{v}_L}$

to proces dyfuzji rzeczywisty, przesunęły atom o losową wartość maksymalną  $\neq k$  parę i relaksujemy sieć

jeżeli  $U_2 > \frac{v_L}{\hat{v}_L}$

to proces dyfuzji nie jest rzeczywisty

proces chemiczny

④ wyliczamy promiennie ze osi czasu

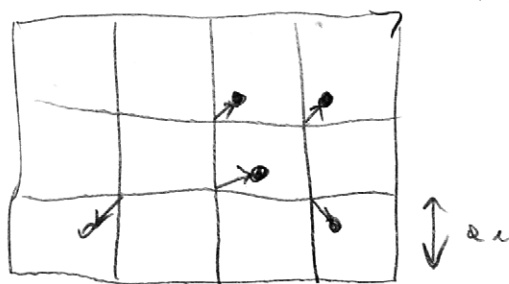
$$t \leftarrow t + \Delta t \quad \Delta t = \frac{1}{\hat{R}}$$

$$\hat{R} \sim 10^{13} \text{ s} \Rightarrow \Delta t \sim 10^{-13} \text{ s}$$

⑤ Wracamy do pkt ①

⑥ koniec jest  $t > t_{\max}$

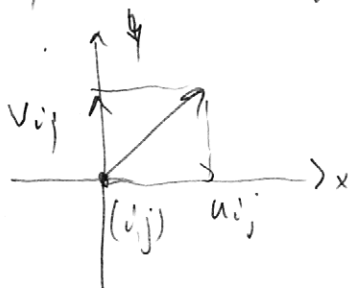
Model jest dość prosty i należy go ulepszyć.  
Atomy znajdując się w potencjalnych bliskich potencjalnych węzłach  
pewnej hipotetycznej sieci krystalicznej o składowych  $a_x, a_y$



- state  $a_x$  i  $a_y$  są określone przez stałą sieci materii (S) i stałą sieci materii (G)

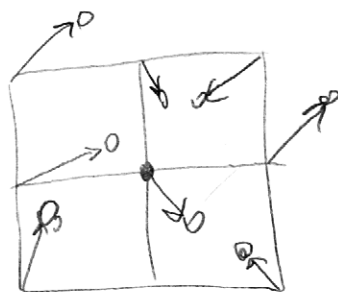
$\leftrightarrow a_x$

- wyliczenie atomu z potencjalnie węzłowego  $(i,j)$  odpowiadające promiennie

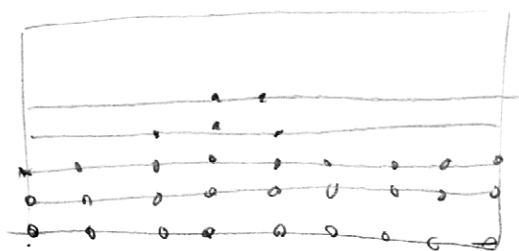


$$\Rightarrow (u_{ij}, v_{ij})$$

promiennie powodzą zmianę energii odolat, nie ma (sprężystości)  
zwiększającymi sprężystości



- minimalny węzłów



$(i,j)$   $(1,1)$   $(2,1)$  ...

para  $(i,j)$  przypisany do elementu  $\mathcal{L}$   
 $(i,j) \rightarrow \mathcal{L}$

- tworzy wektor prędy dla  $N$  elementów w sieci

$$\vec{U} = \underbrace{[u_1, u_2, \dots, u_N]}_{\text{prędy w "x"}}$$

$\underbrace{[v_1, v_2, \dots, v_N]}_{\text{prędy w "y"}}$

- przy pomocy  $\vec{U}$  możemy określić energię sprężystości  $W$

$$W = \frac{1}{2} \vec{U}^T A \vec{U} - \vec{F} \cdot \vec{U} + \vec{D} \geq 0$$

energia mechaniczna

- Sieć zrealizowana to taka, która ma najniższą energię

Sprężystość :

$W_{min} \Rightarrow$

$$\frac{\partial W}{\partial \vec{U}} = 0$$

$$\Rightarrow A \vec{U} = \vec{F}$$

układ równań

- jeśli napiszemy  $A \vec{U} = \vec{F}$  to znajdziemy sprężystość wektor prędy  $\vec{U}$  (jest on składową obciążenia  $\vec{F}$ )

- rozwiązanie układu równań : a) skonstruować macierz  $A$  i wektor  $\vec{F} \rightarrow$  rozwiązanie LU (algebraicznie)

do rozwiązania

- b) metoda iteracyjna  $\rightarrow$

Gauss-Seidel lub sprężystość produkcyjna (GS) (CG)

• Konstrukcja:  $A, \vec{F}$

$$W = \frac{1}{2} \sum_{i,j} w_{ij} \quad \left[ (i,j) \rightarrow l \right] \quad W = \frac{1}{2} \sum_k w_k \quad \leftarrow \text{po redukcji}$$

$$W_{ij} = w_{ij}^{xx} + w_{ij}^{yy} + 2w_{ij}^{xy}$$

$\frac{\partial W}{\partial u_{ij}} \Rightarrow$  trzeba rozłożyć każdy element w sumę

$$\frac{\partial W}{\partial u_{ij}} = \frac{\partial w_{ij}^{xx}}{\partial u_{ij}} + \underbrace{\frac{\partial w_{ij}^{yy}}{\partial u_{ij}}}_{\text{brak od } d_i} + \frac{\partial w_{ij}^{xy}}{\partial u_{ij}}$$

$$w_{ij}^{xx} = \frac{k_c}{2} \left[ \delta_{ij,1,0} (u_{i+1,j} - u_{ij} - d_1)^2 + \delta_{ij,-1,0} (u_{i-1,j} - u_{ij} + d_1)^2 \right] \\ + \frac{k_D}{4} \left[ \delta_{ij,1,1} (u_{i+1,j+1} - u_{ij} - d_1)^2 + \delta_{ij,-1,-1} (u_{i-1,j-1} - u_{ij} + d_1)^2 \right. \\ \left. + \delta_{ij,1,-1} (u_{i+1,j-1} - u_{ij} - d_1)^2 + \delta_{ij,-1,1} (u_{i-1,j+1} - u_{ij} + d_1)^2 \right]$$

$$\frac{\partial w_{ij}^{xx}}{\partial u_{ij}} = \frac{k_c}{2} \cdot 2 \left[ \delta_{ij,1,0} (u_{i+1,j} - u_{ij} - d_1)(-1) + \delta_{ij,-1,0} (u_{i-1,j} - u_{ij} + d_1)(-1) \right] \\ + \frac{k_D}{4} \cdot 2 \left[ \delta_{ij,1,1} (u_{i+1,j+1} - u_{ij} - d_1)(-1) + \delta_{ij,-1,-1} (u_{i-1,j-1} - u_{ij} + d_1)(-1) \right. \\ \left. + \delta_{ij,1,-1} (u_{i+1,j-1} - u_{ij} - d_1)(-1) + \delta_{ij,-1,1} (u_{i-1,j+1} - u_{ij} + d_1)(-1) \right] \\ = 0$$

$$k_c \delta_{ij,1,0} \cdot u_{i+1,j} + k_c \cdot \delta_{ij,-1,0} u_{i-1,j} + 2k_D \delta_{ij,1,1} u_{i+1,j+1} + \delta_{ij,-1,-1} u_{i-1,j-1} \cdot 2k_D \\ + 2k_D \delta_{ij,1,-1} u_{i+1,j-1} + 2k_D \delta_{ij,-1,1} u_{i-1,j+1} + \\ - u_{ij} \left[ k_c \delta_{ij,1,0} + k_c \delta_{ij,-1,0} + 2k_D \delta_{ij,1,1} + 2k_D \delta_{ij,-1,-1} + 2k_D \delta_{ij,1,-1} + 2k_D \delta_{ij,-1,1} \right] \\ = k_c \cdot d_1 \delta_{ij,1,0} - k_c d_1 \delta_{ij,-1,0} + 2k_D \delta_{ij,1,1} d_1 - 2k_D \delta_{ij,-1,-1} d_1 \\ + 2k_D \delta_{ij,1,-1} d_1 - 2k_D \delta_{ij,-1,1} d_1$$

(6)

jeśli wprowadzimy oznaczenia:

$$(i+1, j) \rightarrow l_1 \quad (i-1, j) \rightarrow l_2 \quad (i, j+1) \rightarrow l_3 \quad (i, j-1) \rightarrow l_4 \quad \text{itd}$$

to dostaniemy równanie

$$a_{l_1, l_1} u_{l_1} + a_{l_1, l_2} u_{l_2} + a_{l_1, l_3} u_{l_3} + \dots + a_{l_1, l_n} u_{l_n} = b_{l_1}^u$$

ponieważ ~~nie~~ należy jedynki:

$$\left| \frac{\partial w_{ij}^{xy}}{\partial u_{ij}} \right| = 0$$

co da

$$a_{l_1, l_1+N} v_{l_1} + a_{l_1, l_2+N} v_{l_2} + a_{l_1, l_3+N} v_{l_3} + \dots = b_{l_1}^v$$

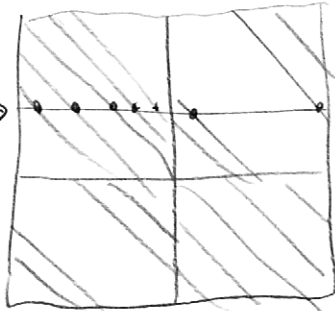
co daje nam układ

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial w_{ij}^{xx}}{\partial u_{ij}} & \frac{\partial w_{ij}^{xy}}{\partial u_{ij}} \\ \frac{\partial w_{ij}^{yx}}{\partial u_{ij}} & \frac{\partial w_{ij}^{yy}}{\partial u_{ij}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b^u \\ b^v \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow A \vec{u} = \vec{F} = \vec{b}$$

macierz moduł

$(i,j) \rightarrow l \rightarrow$



$A =$

← w każdym bloku jest tyle przekątnych ile pozostaje elementów zależnych od  $u_{i \pm 1, j \pm 1}$  lub  $v_{i \pm 1, j \pm 1}$  w danym równaniu

$$a_{ij, \pm 1, \pm 1} = \begin{cases} 1 & \text{jeśli jest sprzecz w połączeniu } (i \pm 1, j \pm 1) \\ 0 & \text{gdy nie ma atomu w połączeniu} \end{cases}$$

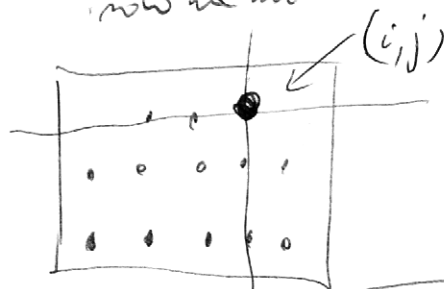
- relacje sieci lokalne



→ jeśli przesuwamy jeden atom to spowoduje to zmiany ustalenia atomów w lokalnym otoczeniu → wówczas relacje są komplementarne najbliższych atomów → prościej traktujemy jako ustalone warunki brzegowe (Dirichleta)

→ numeracja (indeksacja) przeprowadzamy tylko dla lokalnego otoczenia → możemy ustalić błąd minimalny

→ zamiast przeprowadzić relacje poprzez krążowanie wektory ułtów A → możemy rozwiązać lokalnie równanie metodą Gauss-Seidla lub metodą relacji



$$\frac{\partial w_{ij}^{xx}}{\partial u_{ij}} + \frac{\partial w_{ij}^{xy}}{\partial u_{ij}} = 0$$

$\Rightarrow u_{ij}^{new} =$  zależność od sprzecznych wartości

i podobnie

$$\frac{\partial w_{ij}^{yx}}{\partial v_{ij}} + \frac{\partial w_{ij}^{yy}}{\partial v_{ij}} = 0$$

$\Rightarrow v_{ij}^{new} =$  zależność od sprzecznych wartości

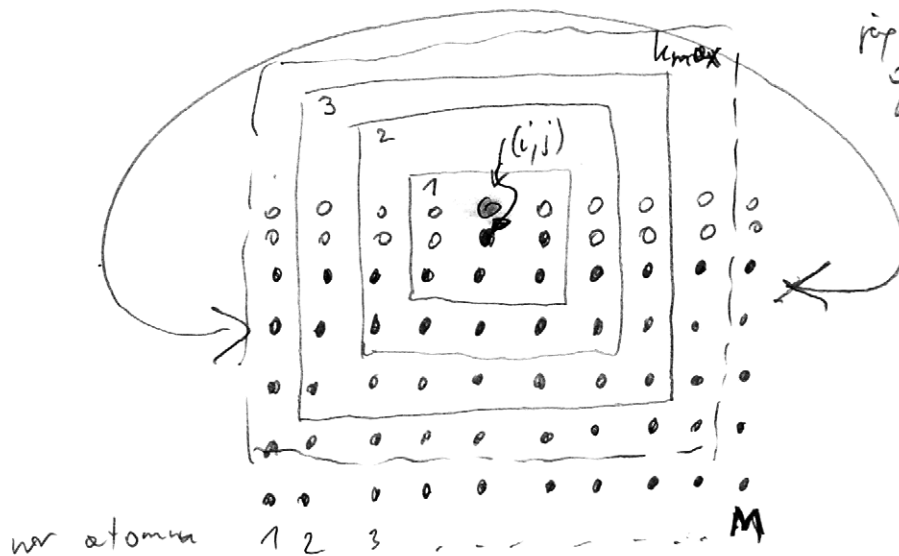
Gauss-Seidel lubSOR:  
( $w \leq 1$ ) ( $w > 1$ )

$$u_{ij}^{new} = (1-w) u_{ij}^{old} + w \cdot u_{ij}^{new}$$

$$v_{ij}^{new} = (1-w) v_{ij}^{old} + w \cdot v_{ij}^{new}$$



- optymalizacja  $\rightarrow$  expanding box, wykonujemy 2-5 iteracji GS  
wewnętrzne po czym zwiększamy  
poza rozmiar i powtarzamy  
proces



```
for (k=1; k <= kmax; k++) {
  for (it=1; it <= IT_max; it++) {
```

```
    for (i=(i0-k); i <= (i0+k); i++) {
```

```
      for (j=(j0-k); j <= (j0+k); j++) {
```

periodyczne  
warunki  
brzegowe  
w kierunku  $x$

```
      if (i < 1)  $\tilde{i} = M - i$ 
      else if (i > M)  $\tilde{i} = (i - M)$ 
      else  $\tilde{i} = i$ 
```

$\tilde{i}$   $\leftarrow$  najbliższy indeks nie dalej atomu

licząc:  $u_{i,j}^{\text{new}} = \dots$

$v_{i,j}^{\text{new}} = \dots$

}

}

}

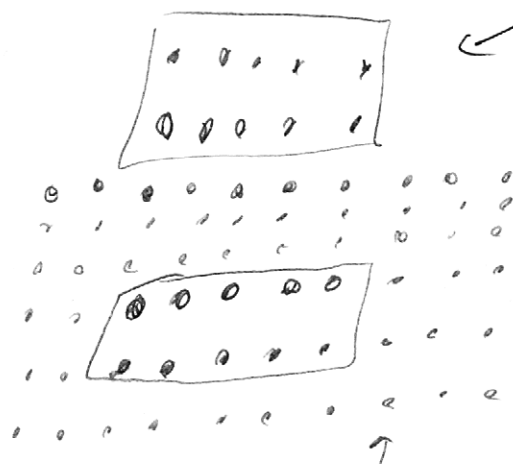
# Zadanie do wykonania

- ① Zarejestrować się z programem i jego obrotu
- ② Wykonać kilka symulacji testowych w celu sprawdzenia poprawności jego działania
- ③ Wprowadzić możliwości rozbudowy lokalnego otoczenia metodą Gauss-Seidel (sprawdzenie poprawności implementacji)  
→ wykonać kilka symulacji sprawdzających poprawność obliczeń

- ④ Przeprowadzić symulacje testowe dla różnych zestawów parametrów:  $T$  (temperature)  
 $F$  (tempo dyfuzji atomów Ge)

- ⑤ Określić warunki w których dochodzi do wzrostu strącania Karsztowa i innych (Volume)

- ⑥ Sprawdzić możliwość powstania struktury pionowej  
→ wskazać parametry w subtelach i wartościach kolejno  
warunki obserwacji wzrost powstania



czy na powierzchni utworzy się podobna struktura?

- ⑦ Symulacja struktury zapętlonej: ① napylanie Ge  
② napylanie Si  
③ napylanie Ge