Abstract

Project Code : MRG5580245

Project Title : Graph Theoretic Approach to Modeling Growth of Thin Films under Molecular Beam Epitaxy Technique

Investigator : Asst. Prof. Surachate Limkumnerd, Ph.D. Chulalongkorn University

E-mail Address : surachate.l@chula.ac.th

Project Period : July 2012 – July 2014

Interests in thin-film fabrication for industrial applications have driven both theoretical and computational aspects of modeling its growth. One of the earliest attempts toward understanding the morphological structure of a film's surface is through a class of solid-on-solid limited-mobility growth models such as Family, Wolf-Villain or Das Sarma-Tamborenea models which have produced fascinating surface roughening behaviors. These models however restrict the motion of an incidence atom to be within the neighborhood of its landing site which renders them inapt for simulating long-distance surface diffusion such as that observed in thin film growth using molecular-beam epitaxy (MBE) technique. Naive extension of these models by repeatedly applying the local diffusion rules for each hop to simulate large diffusion length can be computationally very costly when certain statistical aspects are demanded. We present a graph theoretic approach to simulating long-range diffusion-attachment growth model. Using Markovian assumption and given a local diffusion bias, we derive the transition probabilities for a random walker to traverse from one lattice site to the others after a large, possibly infinite, number of steps. Only computation with linear-time complexity is required for the surface morphology calculation without other probabilistic measures. The formalism is applied, as illustrations, to simulate surface growth on a two-dimensional flat substrate and around a screw dislocation under the modified Wolf-Villain diffusion rule. A rectangular spiral ridge is observed in the latter case with a smooth front feature similar to that obtained from simulations using the well-known multiple registration technique. An algorithm for computing the inverse of a class of sub-stochastic matrices is derived as a corollary.

Keywords : random walk, molecular-beam epitaxy, Markov process, graph theory

บทคัดย่อ

รหัสโครงการ : MRG5580245

ชื่อโครงการ : การจำลองการปลูกฟิล์มบางแบบโมเลกุลาร์บีมเอพิแทกซีด้วยทฤษฎีกราฟ

ชื่อนักวิจัย : ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. สุรเชษฐ์ หลิมกำเนิด จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

E-mail Address : surachate.l@chula.ac.th

ระยะเวลาโครงการ : กรกฎาคม 2555 – กรกฎาคม 2557

ความสนใจเกี่ยวกับการผลิตฟิล์มบางเพื่องานประยุกต์ด้านอุตสาหกรรมเป็นตัวผลักดันงานวิจัยด้านทฤษฎีและด้านจำลองการปลูกฟิล์มบางในหลายปีที่ผ่านมา ความพยายามแรกในการทำความเข้าใจโครงสร้างของพื้นผิวฟิล์มกระทำผ่านแบบจำลองที่จำกัดระยะการเคลื่อนที่ของอะตอม เช่น แบบจำลองของแฟมิลี, วูล์ฟ-วิลเลน, และดาสซามา-ทามโบรินี ซึ่งให้โครงสร้างผลึกที่มีความขรุขระที่น่าสนใจเชิงสถิติ อย่างไรก็ตาม แบบจำลองเหล่านี้จำกัดระยะการเคลื่อนที่ของอะตอมให้อยู่เพียงตำแหน่งของพื้นผิวรอบจุดที่อะตอมตกเท่านั้น ทำให้แบบจำลองเหล่านี้ไม่สามารถแสดงลักษณะการเติบโตของผิวฟิล์มที่อะตอมสามารถเคลื่อนที่เป็นระยะทางไกลเช่นที่พบในการปลูกฟิล์มด้วยเทคนิคโมเลกุลาร์บีมเอพิแทกซีได้ ความพยายามในการขยายผลของงานจำลองแบบเดิมด้วยการทำการเคลื่อนที่ซ้ำหลาย ๆ ครั้งส่งผลให้เกิดความสิ้นเปลืองทรัพยากรในการคำนวณเป็นอย่างมาก อีกทั้งยังไม่สามารถให้ผลลัพธ์ที่มีคุณค่าทางสถิติเท่าที่ควร ในงานวิจัยชิ้นนี้ ผู้วิจัยได้ใช้ทฤษฎีกราฟในการจำลองการปลูกฟิล์มที่มีระยะการเคลื่อนที่ของอะตอมไกล ผู้วิจัยเริ่มจากสมมติฐานมาร์คอฟและกฎการเคลื่อนที่ของอะตอมระยะใกล้ในการคำนวณเมทริกซ์การส่งผ่านซึ่งให้ค่าความน่าจะเป็นที่อะตอมจะเคลื่อนที่ไปยังจุดที่สนใจบนผิวฟิล์มหากจำนวนก้าวกระโดดมีค่าสูง เราพบว่าอัลกอริทึมสำหรับคำนวณการเติบโตของผิวฟิล์มตามเวลามีความยุ่งยากที่แปรผันกับจำนวนตำแหน่งของอะตอมที่เป็นไปได้บนผิวฟิล์มเท่านั้น เราได้ใช้อัลกอริทึมใหม่นี้ในการจำลองการเติบโตของฟิล์มผิวเรียบในสองมิติ และการเติบโตของผิวฟิล์มรอบดิสโลเคชันแบบเกลียวภายใต้เงื่อนไขการแพร่แบบวูล์ฟ-วิลเลน เราพบลักษณะของเกลียวบันไดวนรูปสี่เหลี่ยมแบบเดียวกันกับที่พบในผลการจำลองแบบอื่นที่สิ้นเปลืองทรัพยากรในการคำนวณกว่า นอกจากนี้เรายังค้นพบการคำนวณเมทริกซ์ผกผันของเมทริกซ์จำพวกซับสโตแคสติคแบบหนึ่งอีกด้วย

คำหลัก : การเคลื่อนที่แบบสุ่ม, โมเลกุลาร์บีมเอพิแทกซี, กระบวนการมาร์คอฟ, ทฤษฎีกราฟ