

ผลของกำแพงศักย์แบบ EHRlich-SCHWOEBEL ต่อระบบจำลองการปลูกฟิล์มบางแบบ WOLF-VILLAIN



นายราชัญ แรงดี

ศูนย์วิทยทรัพยากร

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชาฟิสิกส์ ภาควิชาฟิสิกส์

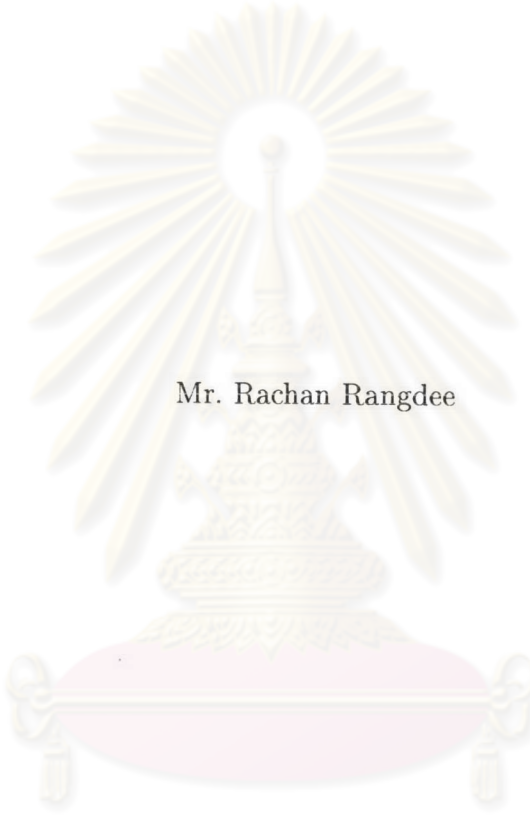
คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ปีการศึกษา 2547

ISBN 974-17-7188-6

ลิขสิทธิ์ของจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

EFFECTS OF THE EHRlich-SCHWOEBEL POTENTIAL BARRIER ON
THE WOLF-VILLAIN MODEL SIMULATIONS FOR THIN FILM GROWTH



Mr. Rachan Rangdee

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Master of Science in Physics

Department of Physics
Faculty of Science
Chulalongkorn University
Academic year 2004
ISBN 974-17-7188-6

นายราชัญ แรงค์ดี: ผลของกำแพงศักย์แบบ EHRlich-SCHWOEBEL ต่อระบบจำลองการปลูกฟิล์มบางแบบ WOLF-VILLAIN. (EFFECTS OF THE EHRlich-SCHWOEBEL POTENTIAL BARRIER ON THE WOLF-VILLAIN MODEL SIMULATIONS FOR THIN FILMS GROWTH) อ. ที่ปรึกษา: คร.ปัทมา ฉัตรภรณ์, จำนวนหน้า 62 หน้า. ISBN 974-17-7188-6.

ปัจจุบันมีการศึกษาถึงลักษณะความขรุขระของพื้นผิวฟิล์มบางที่ปลูกโดยวิธีโมเลกุลาร์บีมเอพิตอกซ์ (MBE) อย่างมากมาย แบบจำลอง Wolf-Villain (WV) ก็เป็นแบบจำลองอย่างง่ายที่ลูกเสนอนขึ้นเพื่อใช้ในการศึกษาการปลูกฟิล์มบางแบบ MBE ในอุดมคติ ในแบบจำลองนี้สมมติให้มีการปล่อยอะตอมแบบสุ่มตำแหน่งลงบนวัสดุฐานรองหนึ่งมิติ อะตอมที่ตกลงมาแล้วจะมีการแพร่อย่างทันทีทันใดภายใต้ระยะที่จำกัดที่สามารถแพร่ไปได้ และอะตอมจะพยายามแพร่ไปยังตำแหน่งที่สามารถเพิ่มจำนวนพันธะให้ได้มากที่สุด เราได้ทำการศึกษาถึงสมบัติและลักษณะทางสถิติของพื้นผิวและค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานของความสูงของฟิล์มบางที่ปลูกโดยใช้แบบจำลองนี้ พื้นผิวที่ได้มีลักษณะเป็นความขรุขระที่ไม่มีการก่อตัวของภูเขาเกิดขึ้น ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานของความสูงนี้ทำให้เราสามารถคำนวณหาค่าเอกซ์โพเนนต์ของการเติบโตคือบีตามีค่าประมาณ 0.37 และค่าเอกซ์โพเนนต์ของความขรุขระคือแอลฟามีค่าประมาณ 1.40 ซึ่งค่าเอกซ์โพเนนต์เหล่านี้สามารถช่วยให้เราบอกถึงกลุ่มสากลของแบบจำลอง WV ได้ ในทางปฏิบัติของการปลูกฟิล์มบางแบบ MBE มีกำแพงศักย์ซึ่งรู้จักกันในชื่อของกำแพงศักย์แบบ Ehrlich-Schwoebel (ES) ซึ่งกำแพงศักย์แบบ ES นี้เป็นกำแพงศักย์สำหรับอะตอมที่มีการแพร่จากตำแหน่งที่สูงกว่าลงไปยังตำแหน่งที่ต่ำกว่า ดังนั้นเราจึงสนใจทำการศึกษาถึงผลของกำแพงศักย์แบบ ES นี้ต่อแบบจำลอง WV และลักษณะพื้นผิวที่ได้จะมีลักษณะแบบมีการก่อตัวของภูเขาขึ้นบนพื้นผิว ค่าเอกซ์โพเนนต์ของการเติบโตจะเพิ่มขึ้นในขณะนี้และมีค่าบีตาค่าเข้าสู่ 0.5 ในการยืนยันผลเหล่านี้ได้ทำการศึกษาค่ากระแสการแพร่ของอนุภาคและฟังก์ชันความสัมพันธ์ โดยพบว่าค่ากระแสการแพร่ของอนุภาคแสดงทิศการแพร่ของอนุภาคไปในทิศทางขึ้นเขาและพบการแกว่งกวัดของฟังก์ชันความสัมพันธ์ซึ่งเป็นการยืนยันว่ากำแพงศักย์แบบ ES เป็นสาเหตุของการก่อตัวของภูเขาเกิดขึ้นบนพื้นผิวของฟิล์มบางในการศึกษาครั้งนี้

ภาควิชา...ฟิสิกส์.....ลายมือชื่อนิสิต.....
 สาขาวิชา...ฟิสิกส์.....ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา.....
 ปีการศึกษา...2547.....

4472382023 MAJOR PHYSICS

KEY WORDS: EHRLICH-SCHWOEBEL (ES) BARRIER / SURFACE WIDTH / PARTICLE DIFFUSION CURRENT / CORRELATION FUNCTION

RACHAN RANGDEE: EFFECTS OF THE EHRLICH-SCHWOEBEL POTENTIAL BARRIER ON THE WOLF-VILLAIN MODEL SIMULATIONS FOR THIN FILM GROWTH. THESIS ADVISOR: PATCHA CHATRAPHORN, PH.D. 62 pp. ISBN 974-17-7188-6.

Recently, there are many studies on kinetic surface roughening in Molecular Beam Epitaxy (MBE) growth. *Wolf-Villain* (WV) model is proposed as a simple limited mobility model to study ideal MBE growth. In this model, adatom is deposited at a randomly chosen site on a one dimensional substrate. The adatom then diffuses instantaneously within a finite diffusion length and it tries to maximize its coordination numbers or its bondings. We study statistical properties of the morphology and surface width (the root mean square height fluctuation) of thin films grown according to this model. The morphology is kinetically rough surface with no mound formation. The surface width gives a growth exponent $\beta \approx 0.37$ and a roughness exponent $\alpha \approx 1.40$. These exponents are used to identify the universality class of the WV model. In real MBE growth, there exists a potential barrier known as an *Ehrlich-Schwoebel* (ES) barrier. The ES barrier is a step-edge potential barrier for the adatom diffusing over a step edge from upper to lower terraces. We study the effect of the ES barrier on the WV model. It has been found that the morphology is rough with mound formation on the surface. The growth exponent in this situation increases with the value of β approaching 0.5. To confirm these results, the particle diffusion current and the correlation function are also studied. We find the uphill current and the oscillation of correlation function. These results confirm that the ES barrier is a cause of mound formation on the surface in our study.

Department Physics..... Student's signature

Field of study Physics..... Advisor's signature

Academic year 2004.....

Acknowledgements

I would like to thank my advisor, Dr.Patcha Chatraphorn, who suggested this topic and has provided guidance and ideas during this work. She also helped me many things since I joined Condensed Matter Research Group (CMRG). I also wish to thank Dr.Sojiphong Chatraphorn for the facility on high efficiency computer for my works until completed.

I would like to thank Prof.Chandan Dasgupta for useful and motivating discussion to develop my program.

I also thank all of my friends, brothers, and sisters on CMRG for their many useful discussions and suggestions on my work. Especially, Piti Panichayunon, Suwakan Piankoranee, Soontorn Chanyawadee, and Charnwit Ruangchalermwong.

I would like to thank Associate Professor Dr.Mayuree Natenapit, Dr.Chatchai Srinitiwarawong, and Dr.Burin Asavapibhop for taking times from their busy schedules to be on my thesis committee. Their comments on this thesis are also greatly appreciated.

Furthermore, I would like to thank Dr.Burin Gumjudpai for his guidance on L^AT_EX preparation and also his support, useful motivations and discussions.

I wishes to thank my friends Joy, Sueb, Pong, Au, Nil, Yot, Neng, Don, Noom, Jeab, Nim, and many friends that I cannot mention here for their helps, supports, entertainments, and encouragements.

Finally, I must be thankful to my parents and my grandmother for all of their supports, encouragements, and understanding which made me strong to get through this hard work.

This work was also supported by Naresuan University.

Table of Contents

Abstract (Thai)	iv
Abstract (English).....	v
Acknowledgements	vi
Table of Contents.....	vii
List of Tables.....	ix
List of Figures.....	x
Chapter I Introduction and Theory	1
1.1 Scaling	2
1.2 Universality Class	6
1.3 Continuum Growth Equations	8
1.4 Particle Diffusion Current	11
1.5 Correlation Function	12
1.6 Overview of the Thesis	13
Chapter II Models	16
2.1 Discrete Growth Models	16
2.1.1 Random Deposition Model	17
2.1.2 Wolf-Villain Model	19
2.2 Ehrlich-Schwoebel Barrier	19
2.3 WV Model with ES Barrier	22

Chapter III Simulation Results and Discussions	25
3.1 Morphologies and Scaling Exponents	25
3.1.1 Random Deposition Model	26
3.1.2 Wolf-Villain Model	26
3.1.3 WV-ES Model	31
3.2 Correlation Function	40
3.3 Particle Diffusion Current	45
3.4 Growth Equation	56
Chapter IV Conclusions	58
References	60
Vitae	62



ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

List of Tables

- 1.1 The theoretical asymptotic exponents in $d = 1+1$ and $d = 2+1$ dimensions 10
- 3.1 The particle diffusion current J in the discrete growth models . . . 50



ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

List of Figures

1.1	The surface width plot of the system of $L = 50$	4
1.2	The surface width W with varying substrate size L	5
1.3	The tilted substrate and the method to contributes the particle diffusion current	14
1.4	The oscillations of the height-height correlation function $G(r)$. . .	15
2.1	The flow chart of our simulation	18
2.2	The Random Deposition (RD) model	20
2.3	The diffusion rule of the Wolf-Villain (WV) model	20
2.4	The Ehrlich-Schwoebel (ES) barrier	21
2.5	The diffusion rule of the WV-ES model	24
3.1	The morphology and the surface width of the RD model	27
3.2	The growth exponent β of the WV model	28
3.3	The roughness exponent α of the WV model	29
3.4	The snapshots of the morphology created by the WV model	30
3.5	The mound evolutions of the WV-ES model in 1+1 dimensions . . .	33
3.6	The morphologies of the WV-ES model when we vary P_D from 0.0 to 1.0	34
3.7	The morphologies of the WV-ES model when $P_U = P_D$	35
3.8	The surface width of the WV model and the WV-ES model when $P_U = P_D$	36
3.9	The morphologies of the WV-ES model	37

3.10	The surface width of the system with $L = 1000$, $P_U = 1.0$ and $P_D = 0.5$	38
3.11	The surface width of the WV-ES model with varies P_D and fixed P_U	41
3.12	The $W-t$ plot for the WV-ES model	42
3.13	The roughness exponent calculation in the WV-ES model	43
3.14	The correlation function of the RD model	44
3.15	The correlation function of the WV model	46
3.16	The correlation function of the WV-ES model	47
3.17	The correlation function of the WV-ES model when $P_U = P_D$. . .	48
3.18	The correlation function of the WV-ES model when $P_U < P_D$. . .	49
3.19	The particle diffusion current of the Random Deposition (RD) model	51
3.20	The particle diffusion current of the WV model with untilt substrate	52
3.21	The particle diffusion current of the WV model with vary $\tan \theta$. . .	53
3.22	The particle diffusion current of the WV-ES model	54
3.23	The particle diffusion current of the WV-ES model when $P_U = P_D$.	55