

01; 11

© 1993

О ПОВЕДЕНИИ RSOS МОДЕЛЕЙ В ДВУМЕРНОМ СЛУЧАЕ

А.Р. К е с с е л ь, М.Х. Б р е н е р м а н,
А. М а р г о л и н а

1. В последние годы появилось большое число работ (см., например, [1-5]), посвященных стохастическим моделям роста (Restricted Solid On Solid Models). В них имитируется ситуация накопления частиц в наборах ячеек, моделирующих шероховатую поверхность. Эти модели описывают эволюцию функции $h(\vec{i}, t)$ заполнения ячеек решетки, где \vec{i} - узел решетки. Физически это соответствует изменению формы поверхности при напылении, ионной эмиссии, ионной имплантации, химическом осаждении, травлении и других процессах. Основными параметрами таких моделей являются шероховатость $\omega(t) = \langle h^2 - \langle h \rangle^2 \rangle^{1/2}$, максимальная $h_{max}(t)$ и минимальная $h_{min}(t)$ толщина поверхности (осреднение ведется по ансамблю \vec{i}).

Можно утверждать, что любая RSOS модель однозначно определяется заданием пары законов - законом высевания и законом прилипания. Такая классификация оказывается не только эффективной для методологического упорядочения многочисленных и разнообразных моделей роста, но, как показано ниже, позволит сделать по крайней мере один нетривиальный вывод об их свойствах. В имеющихся к настоящему моменту исследованиях моделей роста на одномерной решетке в основном использовался равномерный (некоррелированный) закон высевания частиц. В сочетании с различными условиями прилипания он дает начало различным моделям роста (Random deposition [1], Ballistic deposition [2], Levy flight [3], Eden model [4], Kim-Kosterlitz model [5]). Коррелированное высевание на одномерной решетке исследовалось в единственной работе [3]. В качестве алгоритма высевания использовался следующий: источник частиц в равноотстоящие моменты времени испускает частицы на расстоянии:

$$\delta x = \alpha R^{-1/f} \quad (1)$$

от предыдущего испускания. Это соответствует распределению $P_r(\delta x < y) = R^{-1/f}$. Здесь R - равномерно распределенное на $[0, L]$ случайное число, α принимает с равной вероятностью значения ± 1 , $f < 1$ - параметр распределения, и для δx предполагаются периодические граничные условия, связанные с конечной длиной решетки. Согласно некоторым гипотезам [6], шероховатость ведет себя по законам скейлинга:

$$\omega(t, L) \sim t^\beta, \quad t \ll L, \quad (2a)$$

$$\omega(t, L) \sim L^\chi, \quad t \gg L \quad (26)$$

(здесь L — количество ячеек в решетке).

При этом предполагается, что высеянная в ячейку i в момент t частица прилипает к месту попадания только в том случае, если

$$|h(i, t) - h(i \pm 1, t)| \leq N, \quad (3)$$

где N — фиксированное число. В работе [3] приводятся результаты обширного численного эксперимента по проверке закона (2) при выполнении условий (1), (3) при $N = 1$. Оказалось, что в ряде случаев найденные значения β и χ заметно отличаются от предсказанных теоретически.

Насколько нам известно, подобные исследования плоских моделей (а именно они соответствуют реализуемым в эксперименте ситуациям) не проводились. О результатах численных экспериментов на одной из плоских моделей сообщается в данной работе.

2. Для выбора закона высеивания в моделях роста представляется важной следующая

Л е м м а. Итоговое распределение высеянных с периодическими граничными условиями частиц по узлам конечной решетки не зависит от выбора закона случайного блуждания источника и является равномерным.

Выражение типа (1) является переходной функцией случайного блуждания источника частиц. Положение источника на k -м шаге есть

$$x_k = \left\{ \sum \delta x_i \right\}_L, \quad (4)$$

где $\{A\}_L = A - L[A/L]$ есть дробная часть числа A по модулю L , $[A/L]$ — целая часть числа A/L . Согласно центральной предельной теореме [7], выражение (4) обладает эргодическими свойствами: при больших k последовательность величин x_k равномерно распределена по узлам решетки. Для решеток с размером L асимптотические условия реализуются при $k \gg L$. Таким образом, если вместо (1) выбрать любое симметричное непрерывное распределение, то частицы в эргодической области окажутся равномерно распределенными по решетке. Поэтому при численном моделировании процесса роста вместо (1) естественно брать $\delta x = dR$, что соответствует простому случайному блужданию. Лемма оказывается справедливой и для блужданий по многомерным решеткам.

Нами был проведен численный эксперимент по проверке зависимости (2a) при условии (3) с $N = 1$; при этом выбирались распределения для δx , отличные от (1), в частности:

- распределение Максвелла:

$$Pr(\delta x < y) = 4\pi(m/2\pi kT)^{3/2} \int_0^y v^2 \exp(-mv^2/2kT) dv,$$

- предельное броуновское распределение:

$$Pr(\delta x < y) = (a/\sqrt{2\pi}) \int_0^y t^{3/2} \exp(-a/2t) dt,$$

- показательное распределение:

$$Pr(\delta x < y) = \int_0^y \lambda \exp(-\lambda t) dt.$$

Результаты полностью совпали между собой и дают одну и ту же зависимость $\omega(t)$ с $\beta = 1/3$. Типичный профиль получающейся на малых временах поверхности показан на рис. 1.

3. Рассмотрим плоскую квадратную решетку размера $n \times n$ и зададим на ней двумерное случайное блуждание источника частиц с периодическими граничными условиями с помощью пары:

$$\delta x = \alpha R, \quad \delta y = \alpha' R', \quad (5)$$

где α, α' принимают с равной вероятностью значения $0, \pm 1$ при выполнении условия $|\alpha'| + |\alpha| = 1$, а R и R' независимые целые случайные числа в интервале $(1, n)$.

Зададим закон прилипания k -й частицы в точке высевания с координатами (x_i, x_j) :

$$|h(x_i, y_j, k-1) + 1 - h(x_i \pm 1, y_j \pm 1)| \leq 1, \quad (6)$$

где x_i, y_j задаются формулами типа (4). Условие (6) означает, что частица прилипает в точке высевания x_i, y_j только в том случае, если в результате прилипания величина $h(x_i, y_j, k)$ не будет превосходить заполнения окружающих ячеек больше, чем на единицу. В противном случае частица совершает простое симметричное случайное блуждание с отражением от границ решетки до тех пор, пока условие (6) не выполнится.

Типичный профиль получающейся при описанном процессе поверхности показан на рис. 2. Результаты численного эксперимента на образцах размером $50 \times 50, 100 \times 100, 150 \times 150, 250 \times 250$ представлены на рис. 3. Время t в зависимости $\omega(t)$ можно отождествить с количеством напыленных частиц и писать $\omega(k)$. На рис. 3 представлены графики зависимости $\ln \omega$ от $\ln k$. На

Рис. 1. Типичный профиль напыляемой поверхности в одномерном случае.

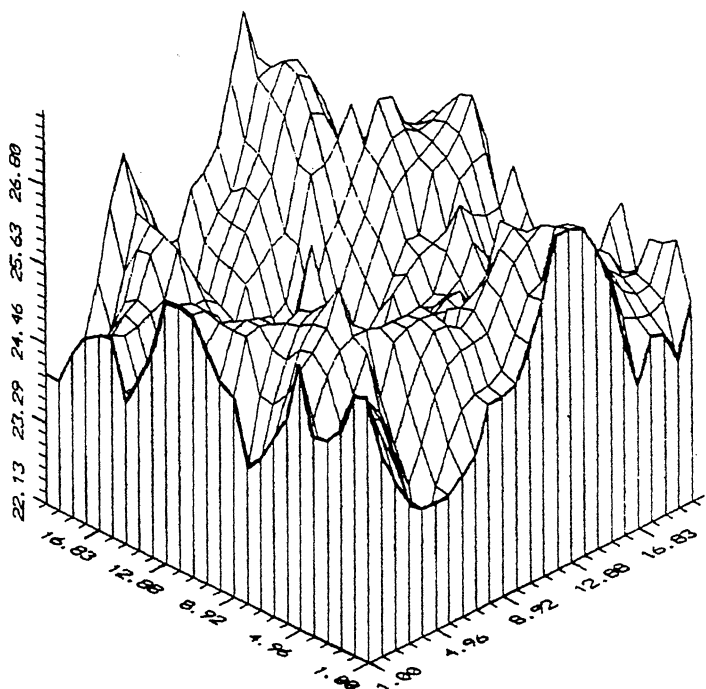


Рис. 2. Типичный профиль напыляемой поверхности в двумерном случае.

всех графиках, имеющих одинаковую форму, просматривается такая точка k_0 , что $\beta = \beta_0 = 1/3$ при $\kappa < k_0$ и $\beta = \beta_1 = 0.19$ при $\kappa > k_0$. Точка κ_0 зависит от размеров образца, но при этом $\ln \omega(k_0) = 6$ остается постоянной вне зависимости от размеров образца. Это позволяет предполагать наличие точно такого же поведения $\omega(\kappa)$ на бесконечной решетке. Наличие точки t_0 позволяет предполагать явление типа фазового перехода, когда адсорбентные свойства поверхности скачком меняются при достижении определенной степени шероховатости.

Более объективной характеристикой процесса роста нам представляется не количество напыленных частиц, а количество на-

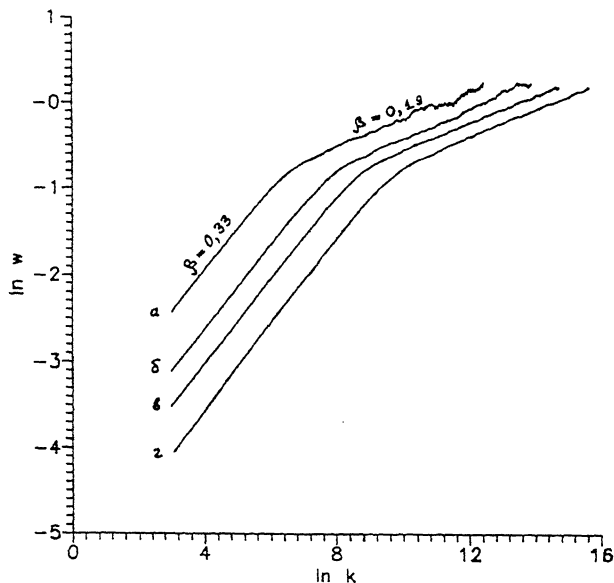


Рис. 3. Зависимость $\ln \omega$ от $\ln k$ на решетках размером а) 50×50 , б) 100×100 , в) 150×150 , г) 250×250 .

пыленных слоев вещества $k' = [k/n]$, где n - размер образца. В новой переменной все графики $\omega(k/n)$ (которые получаются один из другого сдвигом вдоль оси $\ln k$) точно ложатся друг на друга, и мы можем говорить, что функция $\omega(k')$ является характеристикой процесса роста на бесконечной решетке. Таким образом, первая зависимость в (2) подтверждается, а вторая, видимо, имеет место при $\chi = 0$.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] M a r g o l i n a A. In: On Growth and form: Fractal and Non-Fractal Patterns in Physics / Ed. by H.E. Stanley, N. Ostrowsky. Martinus Nijhoff, 1986.
- [2] M e a k i n P., J u l l i e n R. // Europhysics Lett. 1989. V. 9. P. 71.
- [3] M a r g o l i n a A., W a r r i n e r H.E. // J. Stat. Phys. 1990. V. 60, N 5/6.
- [4] Z a b o l i t s k y J.G., S t a u f f e r D. // Phys. Rev. 1986. A. 34. P. 1523.
- [5] K i m J.M., K o s t e r l i t z J.M. // Phys. Rev. Lett. 1989. V. 62. P. 2289.

[6] F a m i l y F., V i s s e c T. // J. Phys. A. 1985.
V. 18. P. L75.

[7] М а р д и а К. Статистический анализ угловых наблюдений.
М.: Наука, 1978. 240 с.

Казанский физико-технический
институт КНЦ РАН

Поступило в Редакцию
3 февраля 1993 г.