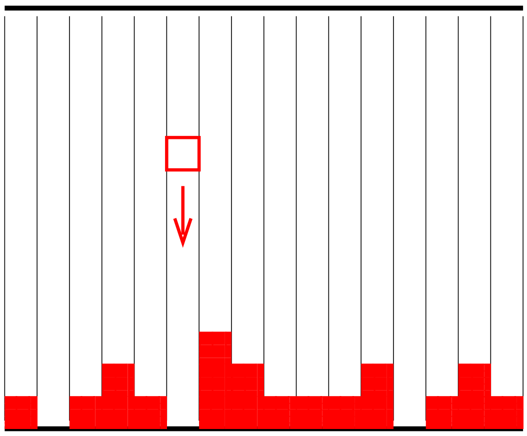
Une Introduction aux Modèles de Dépots

Un premier modèle



. modèle discret

. p dépot par site et par unité de temps

$h_i(t+\Delta t) = h_i(t) + p\Delta t$

. après N pas de temps et $t = N\Delta t$

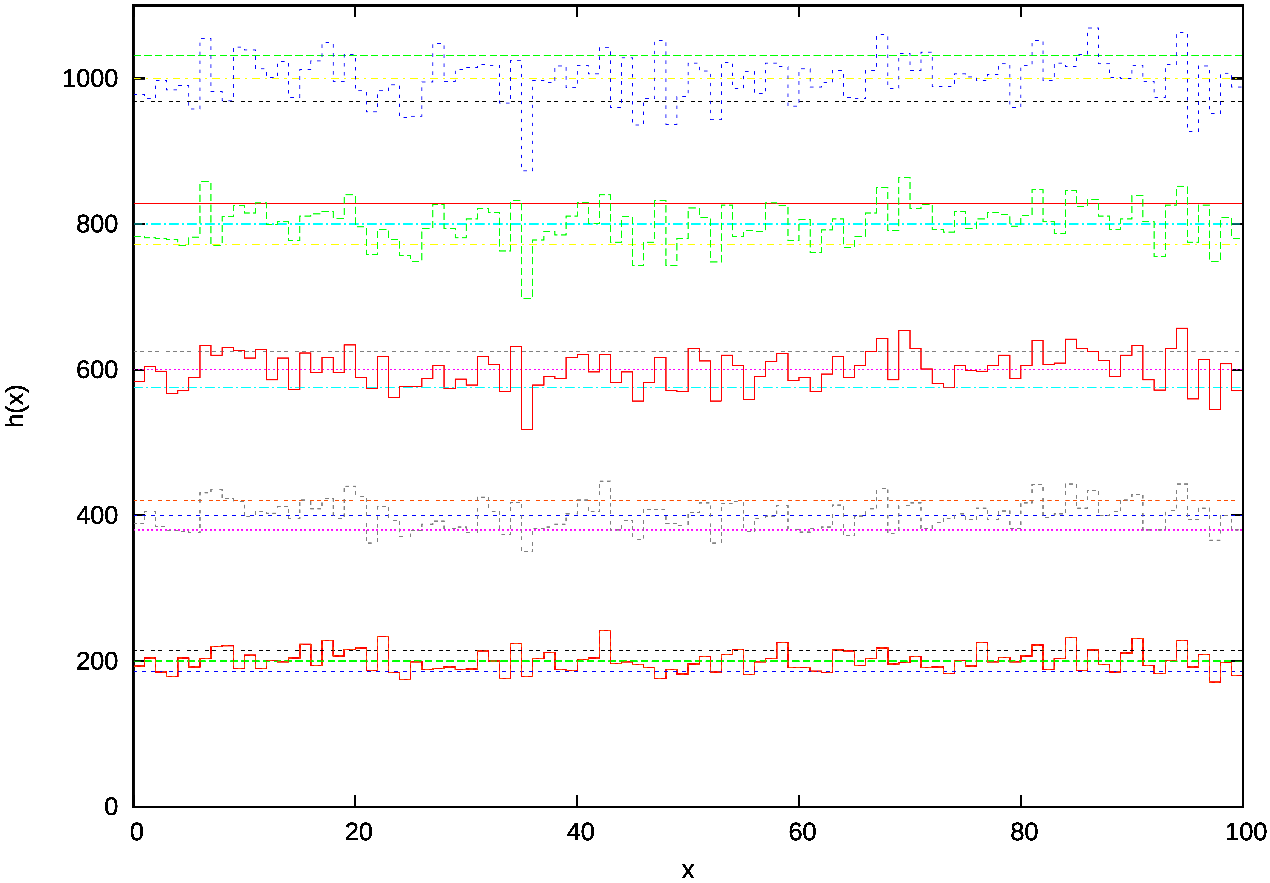
$< h_i(t) >= pt$

$< [h_i(t)- < h_i(t) >]^2 >= p(1-p)t$

. Dans la limite continue

$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = p + \eta(x,t)$$

Remarque: Les atomes se superposent sans laisser de cavités

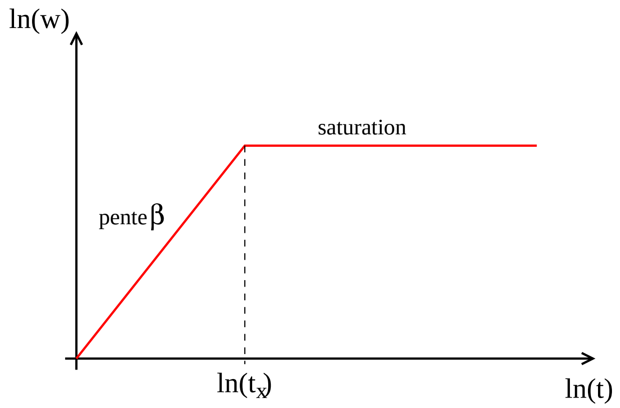


Modèle discret : dépôt aléatoire avec 2000 atomes déposés entre chaque courbe sur un système de longueur 100. Les droites horizontales sont tracées pour $h(x) = 200 * i$ (moyenne pour le tracé i) et $h(x) = 200 * i \pm \sqrt{200 * i}$.

Caractérisation de la croissance

. hauteur moyenne : dépend du flux

. rugosité w : écart type de la hauteur



loi d'échelle :

. $w \sim t^{\beta}$ pour t petit,

. $w \sim L^{\alpha}$ pour t grand.

$$w(L,t) \sim L^{\alpha} f(t/L^{z})$$

avec $z = \dfrac{\alpha}{\beta}$

Modèles Continus

$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = \text{termes de relaxation} + \text{flux moyen} + \text{bruit}$$

$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = F(h,x,t) + \eta(x,t)$$

Contraintes : invariance par

. translation temporelle	$t \to t + t_0 \Rightarrow$	$\frac{\partial^n}{\partial x^n}$
. translation horizontale	$x \to x + x_0 \Rightarrow$	$\frac{\partial^n}{\partial x^n}$
. translation verticale	$x \to x + h_0 \Rightarrow$	$\nabla^n h$
. inversion de l'axe vertical	$h \to -h \Rightarrow$	$(\nabla^n h)^{2p+1}$
. inversion de l'axe horizontal	$x \to -x \Rightarrow$	$\nabla^{2n} h$

L'équation la plus simple compatible avec ces symétries est celle d'Edward-Wilkinson :

$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \eta(x,t) \qquad \text{(EW)}$$

Exposants et arguments d'échelle

La loi d'échelle suppose : $w \sim t^\beta, \quad w \sim L^\alpha, \quad t_x \sim L^z.$

On cherche une loi d'échelle entre h (w) et x (L) et entre t et x (L).

On pose : $t = a^\delta \bar{t}, \quad x = a^\mu \bar{x}, \quad h = a^\gamma \bar{h}$

dans (E-W) :
$$a^{\gamma-\delta} \frac{\partial \bar{h}}{\partial \bar{t}} = a^{\gamma-2\mu} \nu \nabla^2 \bar{h} + a^{-\frac{d\mu-\delta}{2}} \bar{\eta}$$

avec d la dimension de x (du substrat). Cette équation est invariante si :

$$\gamma - \delta = \gamma - 2\mu = -\frac{d\mu - \delta}{2}$$

d'où

$$\delta = 2\mu \quad \text{et} \quad \gamma = \frac{2-d}{4}\delta$$

soit

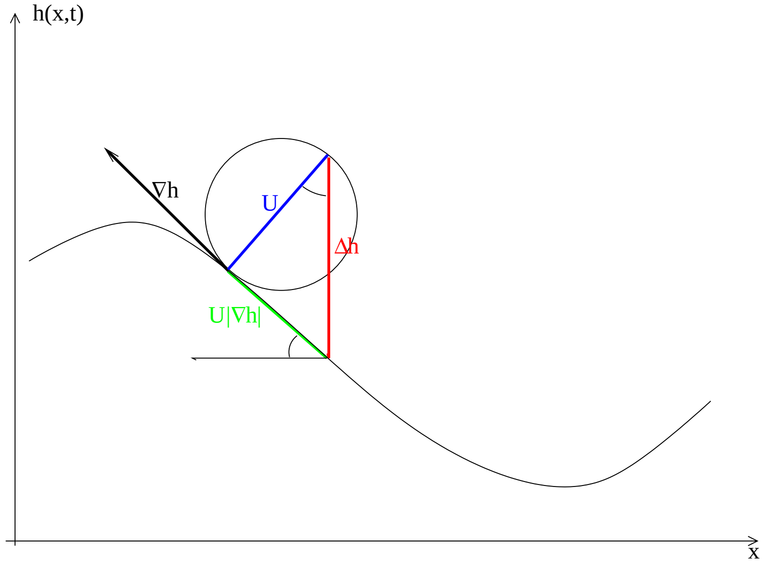
$$z = \frac{\delta}{\mu} = 2, \quad \alpha = \frac{\gamma}{\mu} = 1 - \frac{d}{2} \quad \text{et} \quad \beta = \frac{\gamma}{\delta} = \frac{2-d}{4}$$

$$\text{Pour} \quad d = 1 : \quad z = 2, \quad \alpha = \frac{1}{2} \quad \text{et} \quad \beta = \frac{1}{4}$$

Kardar-Parisi-Zhang

$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} |\nabla h|^2 + \eta(x,t) \tag{KPZ}$$

Argument physique :



$$\Delta h = [U^2 + (U\,|\nabla h|)^2)]^{1/2} = U + \frac{U}{2}|\nabla h|^2 + \ldots$$

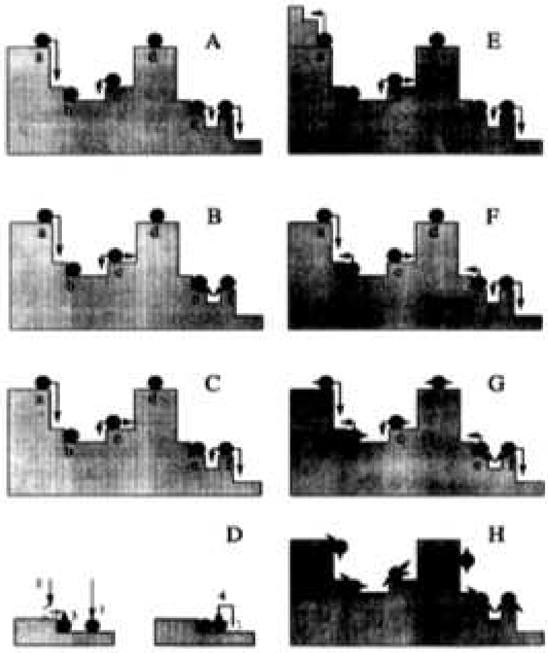
avec $U = F\,\Delta t$ hauteur d'atomes déposés pendant Δt :

$$\Delta h = (F + \frac{F}{2}|\nabla h|^2)\Delta t$$

Exposants et arguments d'échelle (d=1) :

$$z = \frac{3}{2}, \quad \alpha = \frac{1}{2} \quad \text{et} \quad \beta = \frac{1}{3}$$

Méthodes de Monte Carlo



A. Family Model : dépôt et saut inconditionnel vers le site voisin le plus bas.

B. Wolf-Villain Model : dépôt et saut vers le site voisin qui maximise le nombre de liens.

C. Das Sarma-Tamborenea Model : dépôt et saut vers 1 site qui augmente le nombre de lien. La particule déposée est bloquée si elle possède un voisin.

D. extension du DS Model

E. Lai-Das Sarma Model : dépôt et saut vers le site voisin qui augmente les liens et diminue le saut.

F. Kim-Das Sarma Model : dépôt et saut dans le sens de la courbure locale ...

G. Stochastic Model : dépôt ou saut suivant un paramètre (température).

H. Ballistic Deposition Model.

$\rightarrow$ calcul des exposants α, β, z pour chacun de ces modèles.

Stochastic Solid On Solid Method

. dépot avec un flux F

. relaxation de l'atome i de la surface avec un taux $R_i = K\, exp(-E_i/kT)$, E_i dépend du nombre de voisins de i.

Algorithme

1. liste des évènements possibles
2. calcul des probabilités des évènements
3. choix d'un évènement (dépot ou déplacement)

   3.a. dépot : choix d'un site

   3.b. relaxation : choix d'un atome pouvant subir le déplacement
4. go to 1