

II-O-1.28

MÔ PHỎNG SỰ PHÁT TRIỂN MÀNG CÓ CẤU TRÚC PEROVSKITE BẰNG PHƯƠNG PHÁP ĐỘNG HỌC MONTE CARLO

Phạm Thanh Tâm, Lê Vũ Tuấn Hùng

Khoa Vật lý - Vật lý Kỹ thuật, Trường ĐH Khoa học Tự nhiên - ĐHQG Tp.HCM

Tóm tắt

Chúng tôi sử dụng phương pháp động học Monte Carlo để mô phỏng 3 chiều quá trình hình thành và phát triển màng của một số hợp chất có cấu trúc Perovskite (ABO_3). Các quá trình được xét đến là: lắng đọng, khuếch tán, tái bốc bay. Chúng tôi cũng xét đến ảnh hưởng về kích thước và liên kết của các nguyên tử. Trong quá trình mô phỏng, chúng tôi đã sử dụng thế Born–Mayer–Huggins (BMH) để tính tương tác của các nguyên tử. Kết quả cho biết sự ảnh hưởng của các yếu tố: năng lượng tới của hạt, thời gian lắng đọng và nhiệt độ của đế đối với sự hình và phát triển cấu trúc Perovskite của màng.

Từ khóa: cấu trúc perovskite, mô phỏng động học Monte Carlo, sự phát triển màng, thế Born–Mayer–Huggins.

KINETIC MONTE CARLO SIMULATION OF THE GROWTH OF THIN FILM WITH PEROVSKITE-TYPE STRUCTURES

Pham Thanh Tam, Le Vu Tuan Hung

Faculty of Physics - Engineering Physics, University of Science - VNU HCMC

Abstract

We proposed kinetic Monte Carlo approach to simulate the three-dimensional growth of thin film with perovskite-type structures (ABO_3). Monte Carlo events consist of deposition, diffusion and sputtering event of molecules. We considered effects of size and the bonding of adatoms. The activation energy was considered from the interactions between the ions, which were calculated by Born–Mayer–Huggins (BMH) potential. The results provide effects of factors incident kinetic energy, deposition rate and substrate temperature on the evolution of the morphology about thin film.

Key words: perovskite structure, Kinetic Monte Carlo simulation, thin film growth, Born–Mayer–Huggins potential.