

Méthodes de Monte Carlo et Croissance Cristalline

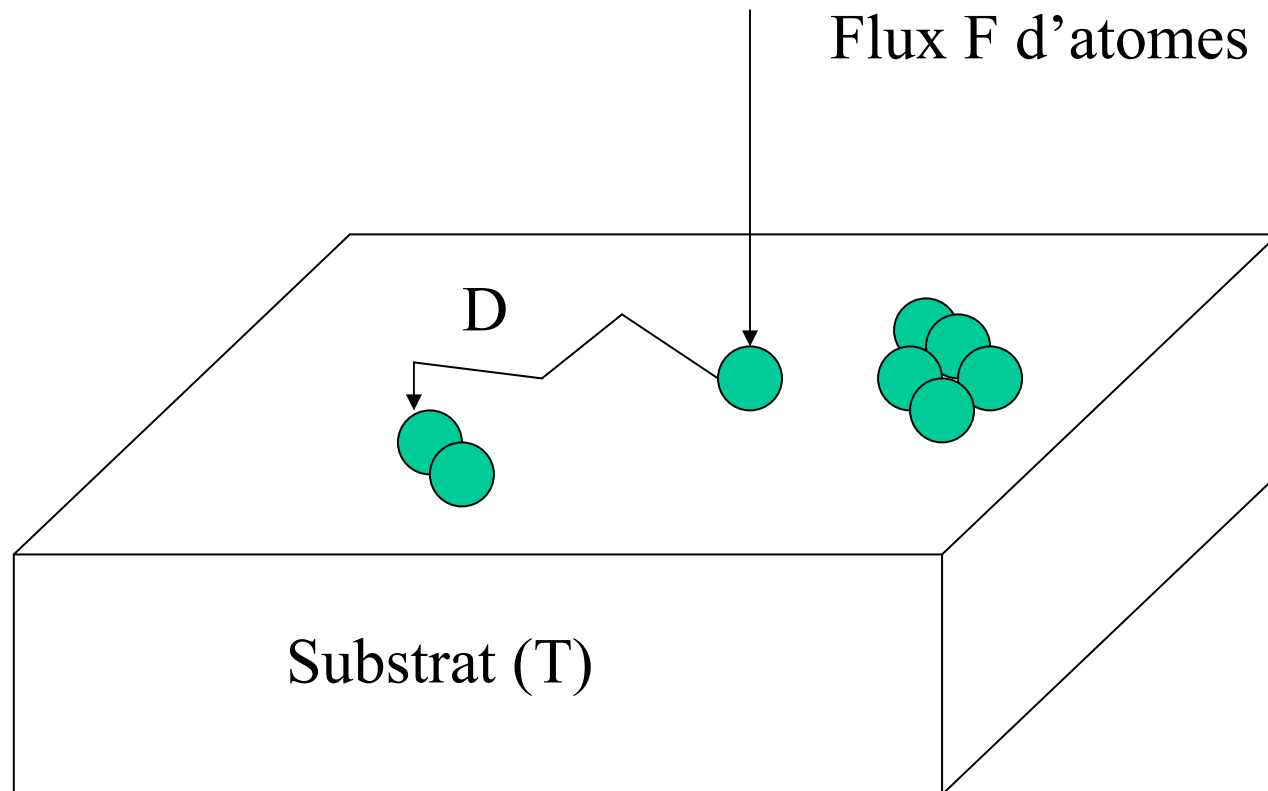


Philippe Peyla

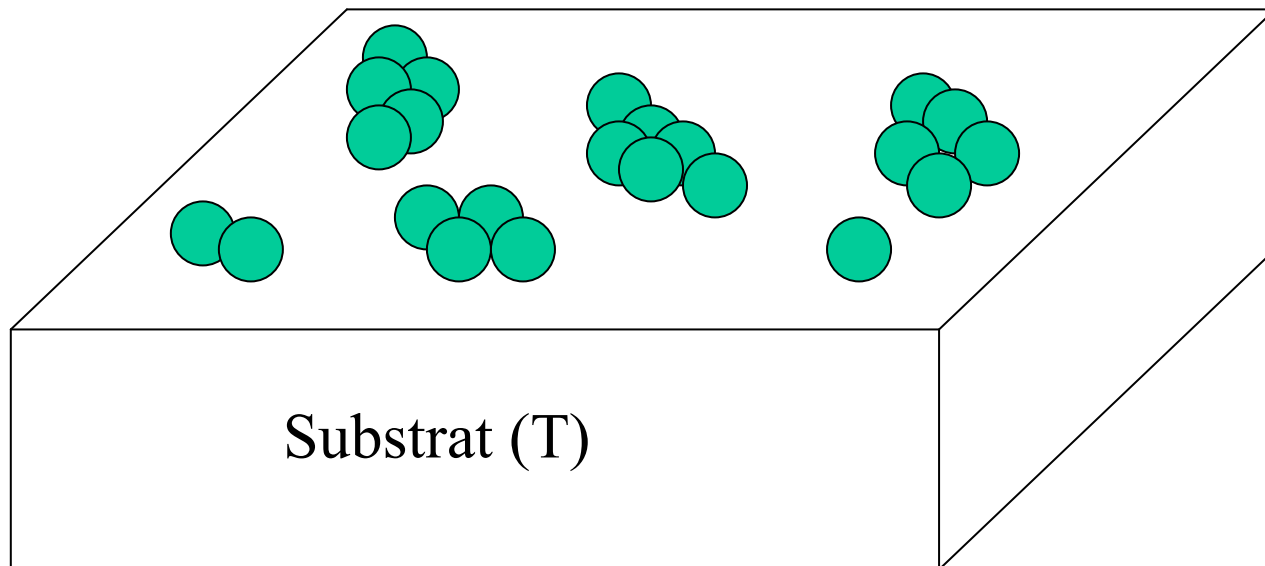
LPM2C - LSP

Université Joseph Fourier

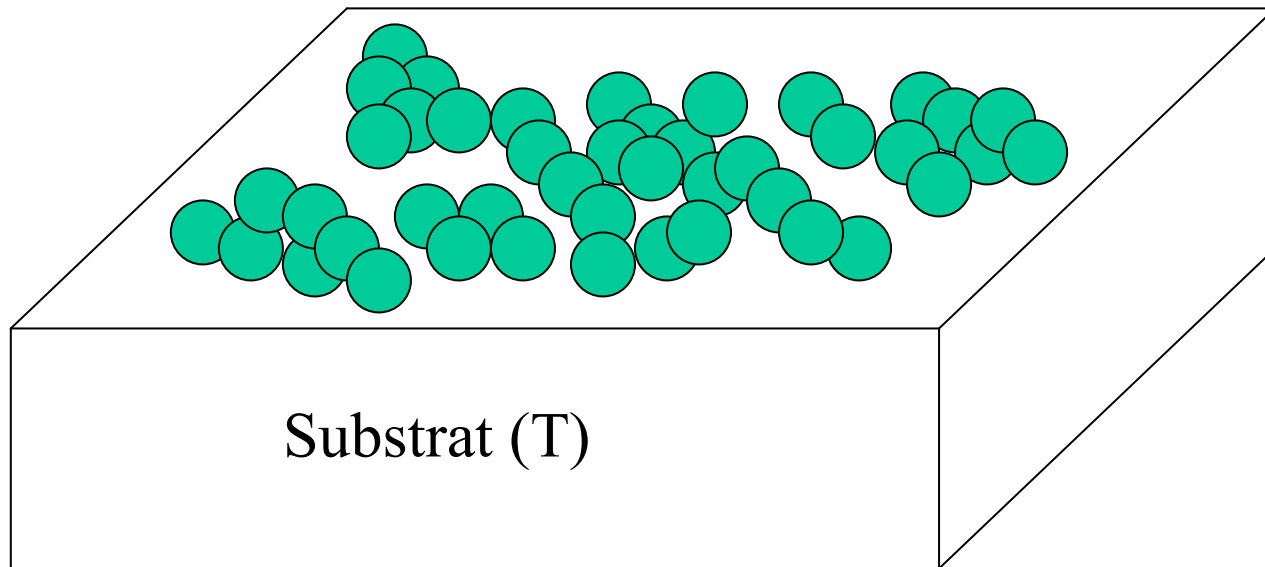
Epitaxie par jets moléculaires



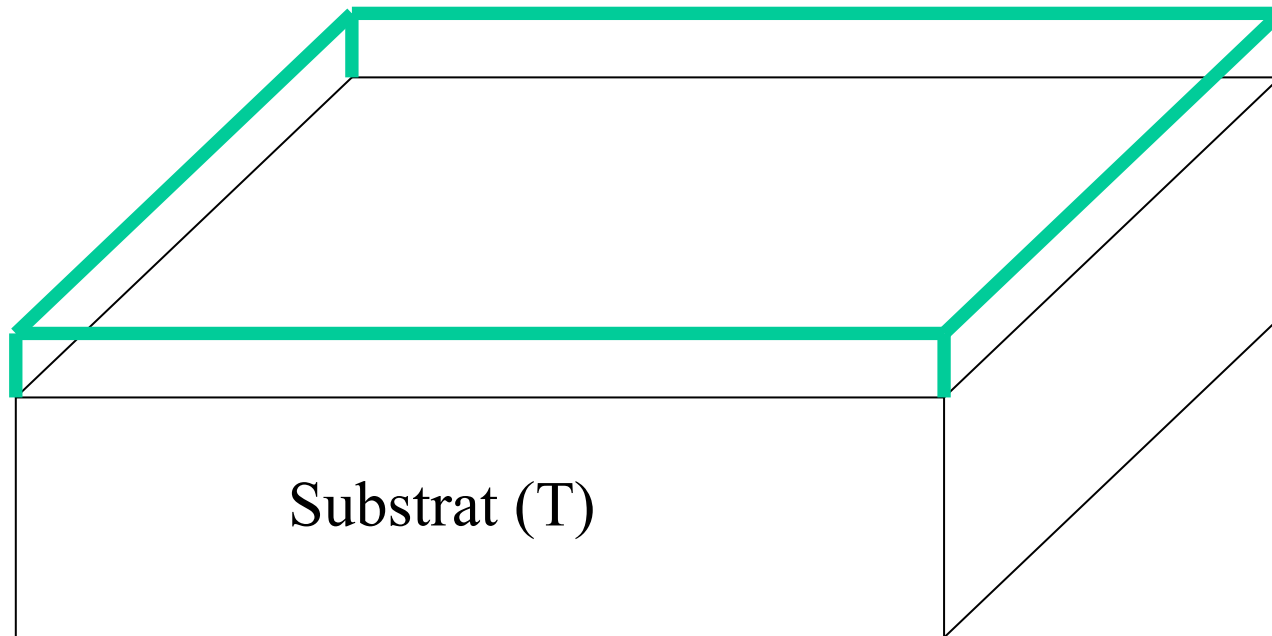
Epitaxie par jets moléculaires



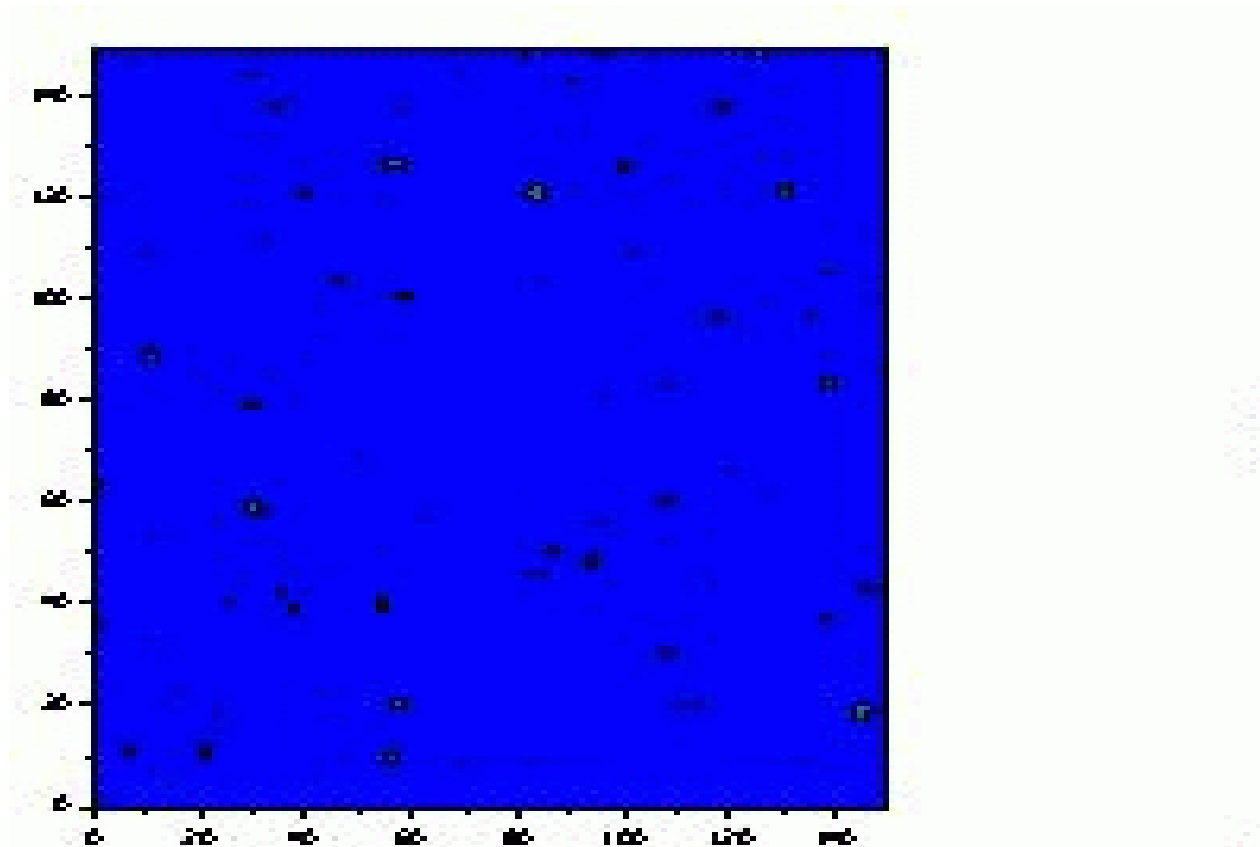
Epitaxie par jets moléculaires



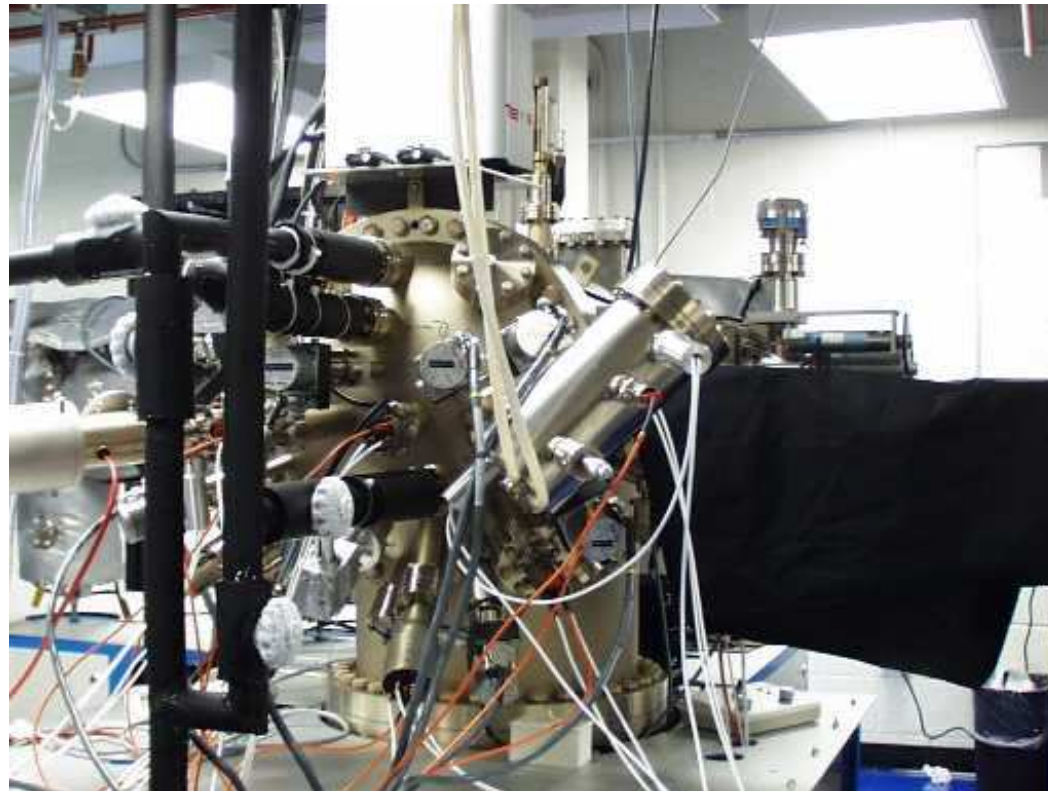
Epitaxie par jets moléculaires



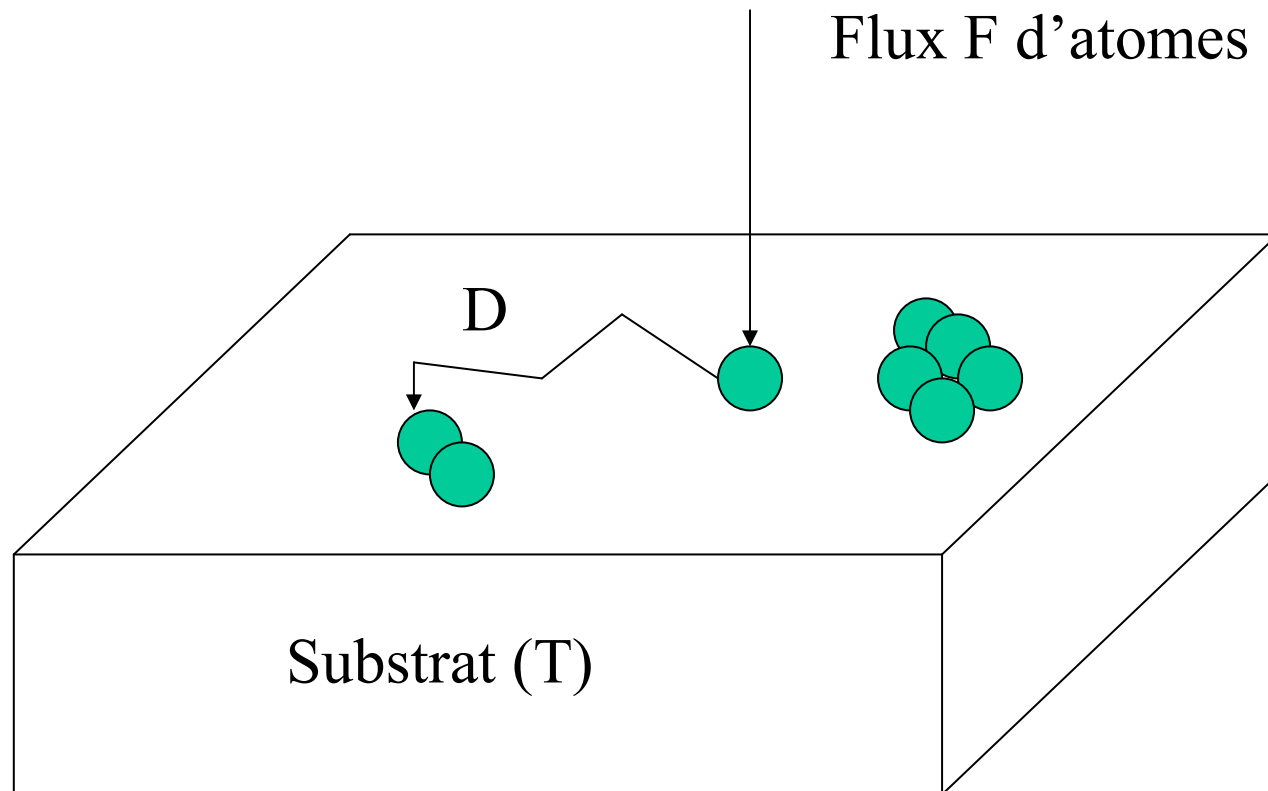
Epitaxie par jets moléculaires



Epitaxie par jets moléculaires



Epitaxie par jets moléculaires



Phénomène à l'équilibre

Si le flux F d'atomes incidents est très faible

$$(F/D \ll 1):$$

Le système a le temps d'atteindre
l'équilibre thermodynamique

Phénomène hors équilibre

Si le flux F d'atomes incidents est très grand

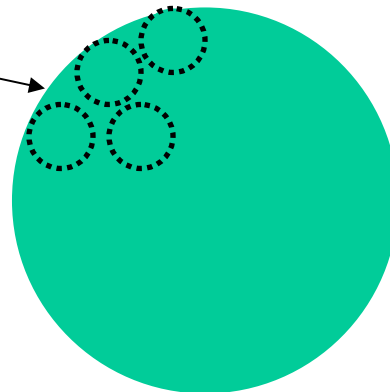
$$(F/D \gg 1):$$

Le système n'a pas le temps d'atteindre
l'équilibre thermodynamique

Phénomène à l'équilibre

Si le flux F d'atomes incidents est très faible
($F/D \ll 1$):

Tension de ligne
minimum
(i.e. nbre de liaisons
chimiques non-
satisfaites)



Haute Température

Un seul îlot circulaire

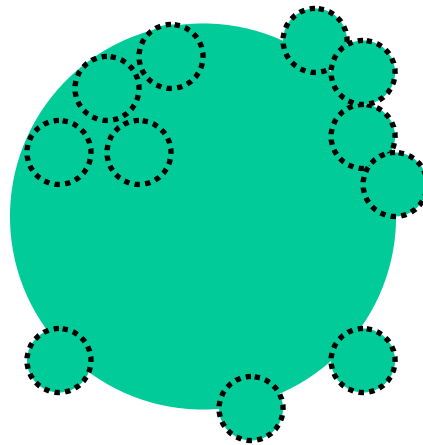
Phénomène à l'équilibre

Si le flux F d'atomes incidents est très faible
($F/D \ll 1$):

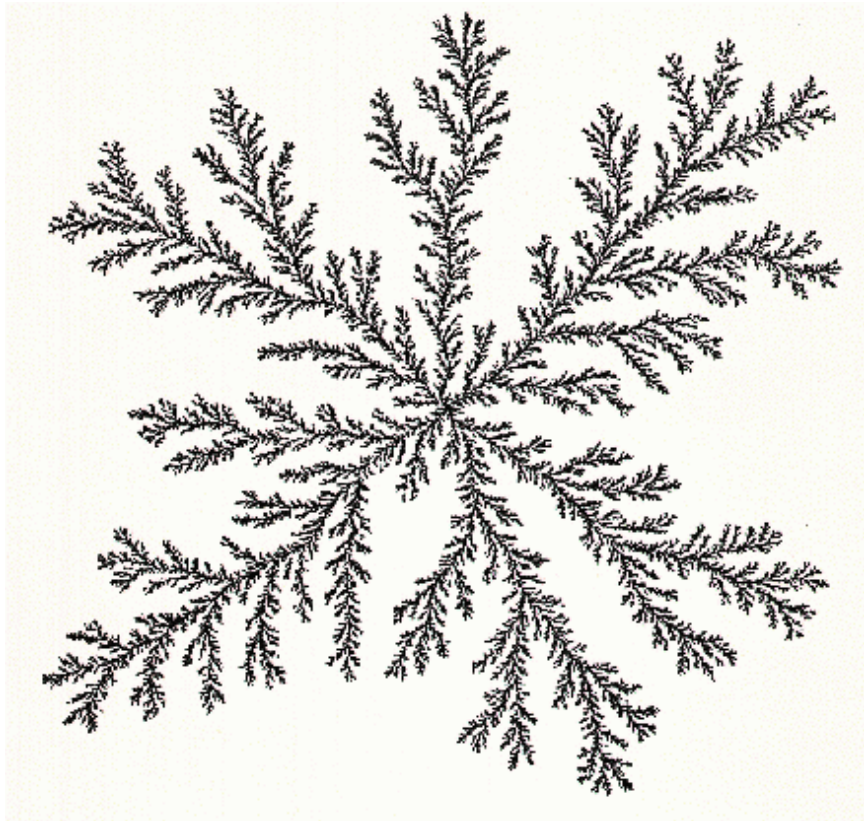
$$D = D_0 \exp(-E_D(N_v)/k_B T)$$

$$E_D(N_v > 1) \gg k_B T$$

Diffusion limitée par
agrégation



Diffusion limitée par agrégation

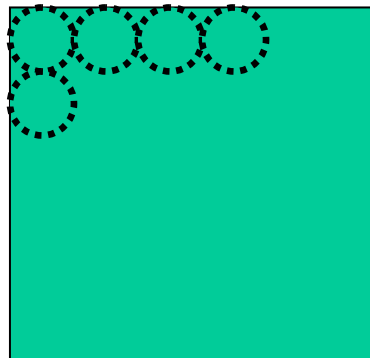


Avec 10^8 atomes

Phénomène à l'équilibre

Si le flux F d'atomes incidents est très faible
($F/D \ll 1$):

Tension de ligne
minimum
(i.e. nbre de liaisons
chimiques non-
satisfaites)



Réseau carré

Un seul îlot carré

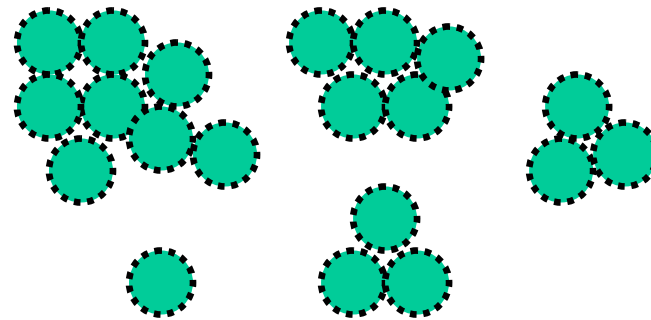
Phénomène **hors** équilibre

Le flux d'atomes incidents est suffisamment important pour créer plusieurs îlots

$(F/D > 1)$:

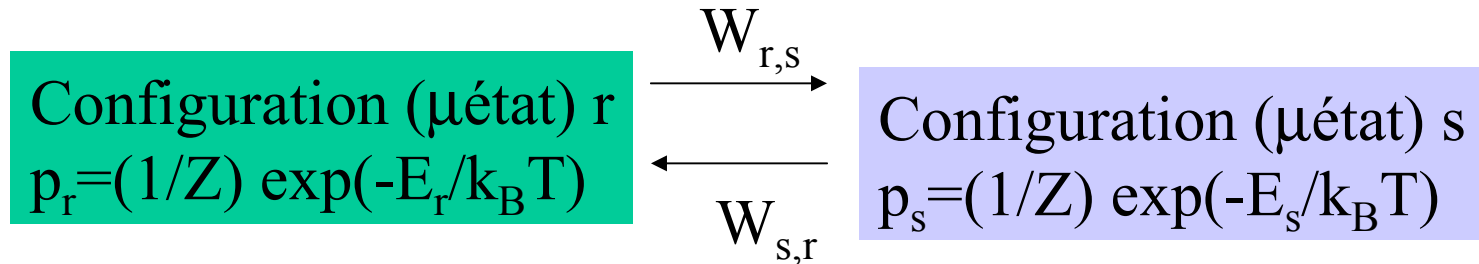
Plusieurs îlots de formes quelconques

$$N = [F/D]^\alpha$$



Situation d'équilibre

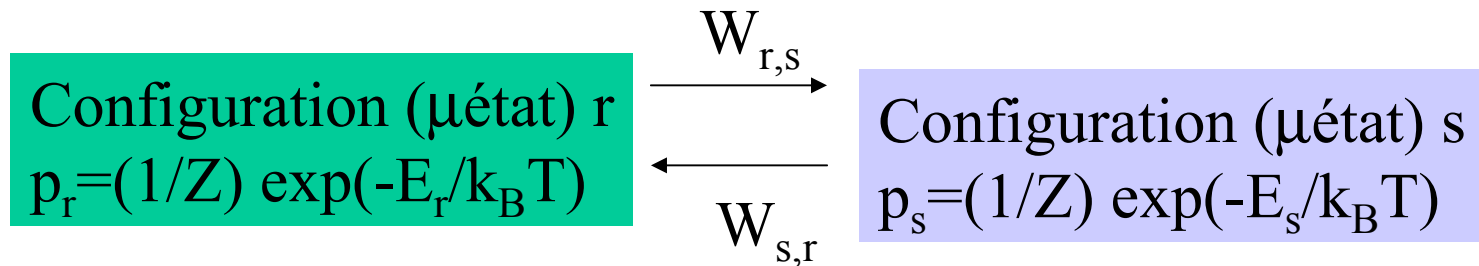
Bilan détaillé



Variation d'entropie :

$$dS/dt = k_B \sum_r \sum_s [p_r W_{r,s} - p_s W_{s,r}] \log P_r$$

Bilan détaillé



Variation d'entropie :

$$dS/dt = k_B \sum_r \sum_s [p_r W_{r,s} - p_s W_{s,r}] \log P_r = 0$$

A l'équilibre thermodynamique

Bilan détaillé

$$p_r W_{r,s} - p_s W_{s,r} = 0$$

Bilan détaillé

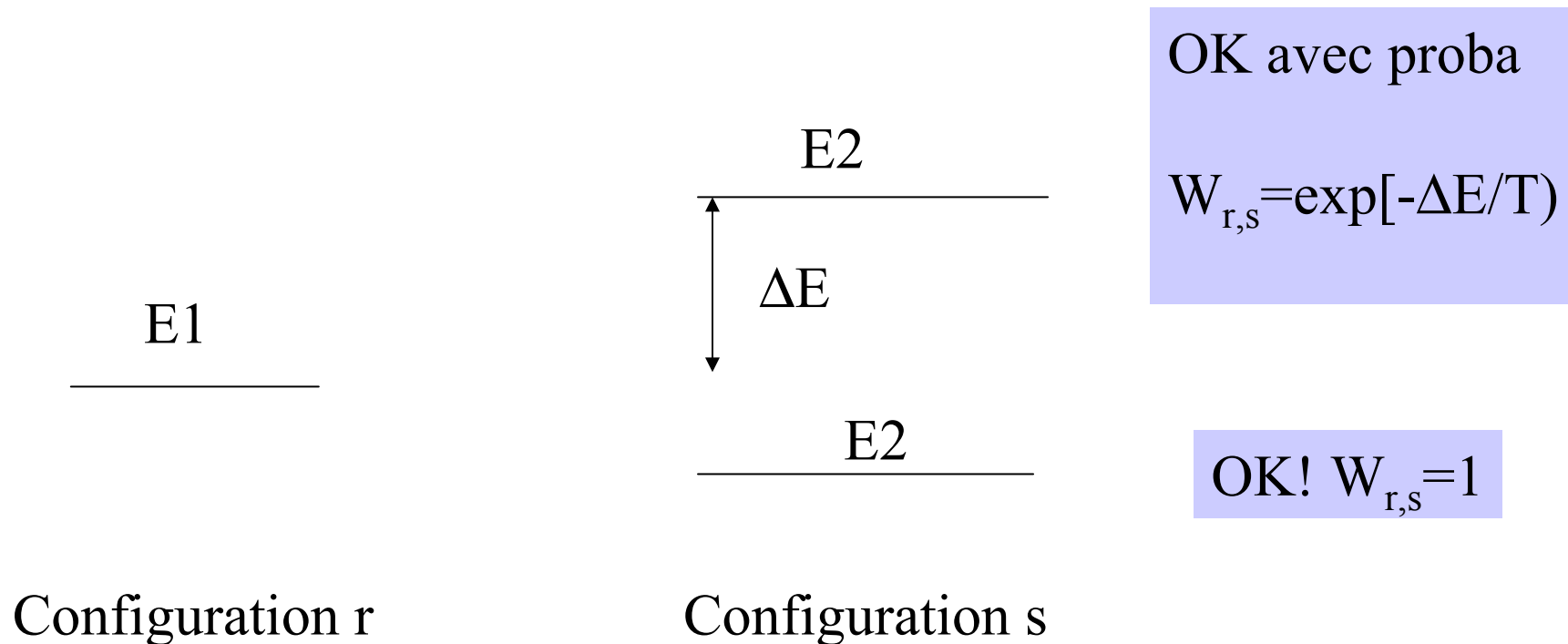
$$p_r W_{r,s} - p_s W_{s,r} = 0$$

$$W_{r,s}/W_{s,r} = p_s/p_r = \exp[-(E_s - E_r)/k_B T]$$

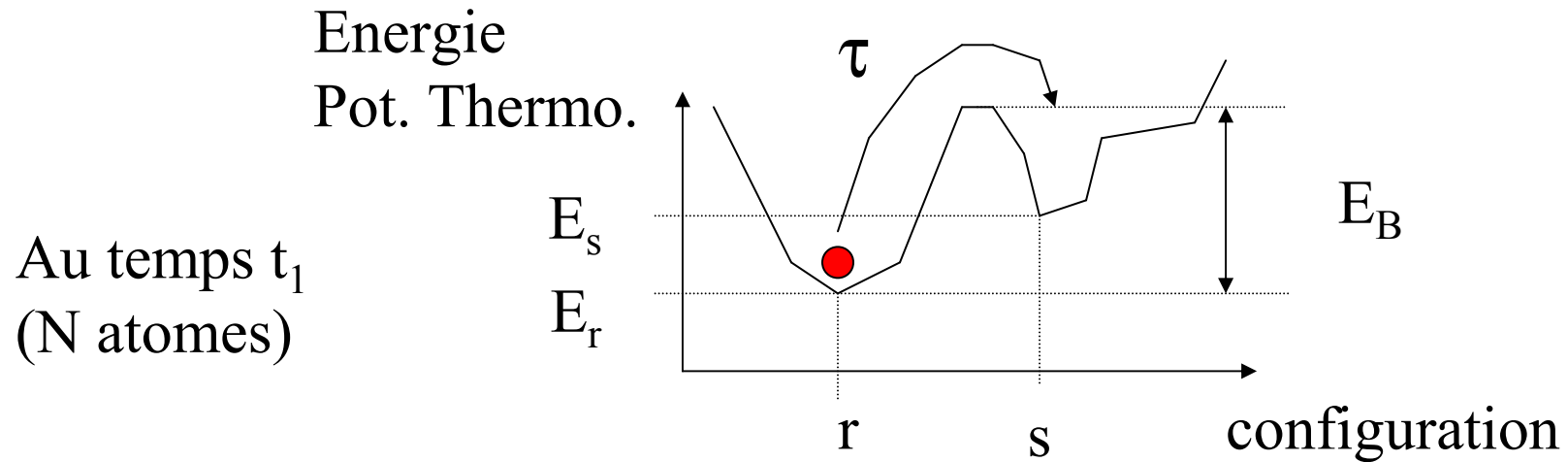
Systemes dont on recherche l'équilibre :

Méthode Monte Carlo de Metropolis

[J. of the Am. Stat. Assoc., 44, 335 (1949)]



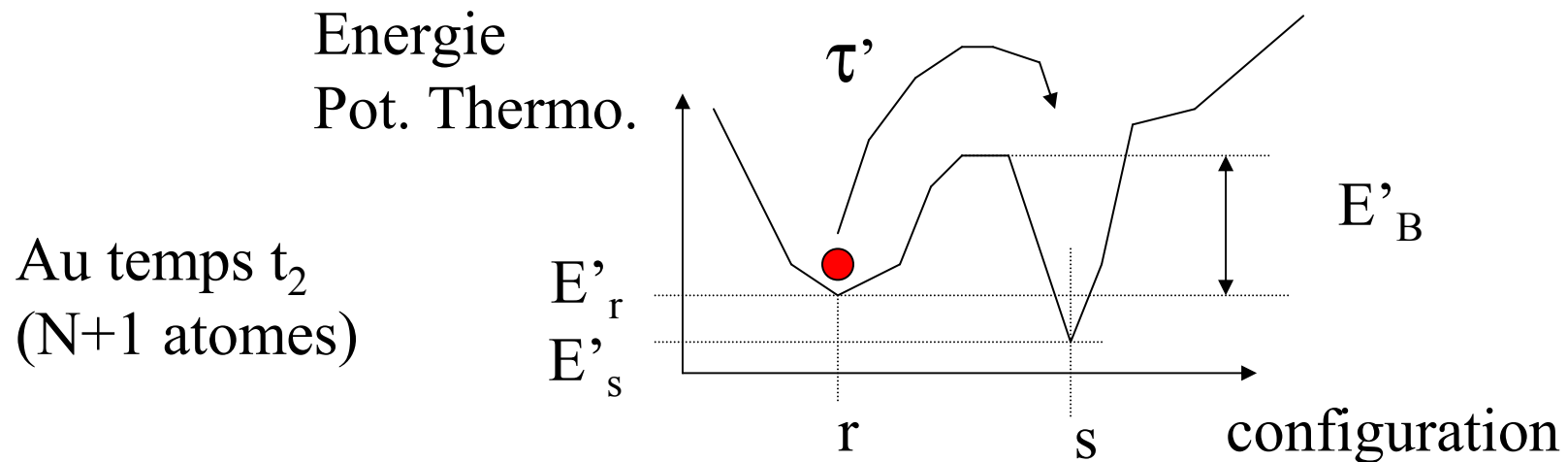
Systeme hors de l'équilibre



Temps d'échappement d'Eyring- Kramers

$$\tau^{-1} = \omega_0 \exp[-E_B/k_B T]$$

Systeme hors de l'équilibre



Temps d'échappement d'Eyring- Kramers

$$\tau'^{-1} = \omega_0 \exp[-E'_B/k_B T]$$

Monte-Carlo cinétique

Méthode Bortz-Kalos-Lebowitz

J. of comp. Phys. 17, 10 (1975)

Événement :

- arrivée d'atome,
- un pas de diffusion,
- ...

Probabilité pour qu'il y ait événement entre 0 et t : $p(t)$

Probabilité pour qu'il n'y ait pas événement entre 0 et t : $q(t)$

Monte-Carlo cinétique

Méthode Bortz-Kalos-Lebowitz

(J. of comp. Phys. 17, 10 (1975))

Pour un seul type d'événement de fréquence f .

Indépendance statistique : $q(t+dt) = q(t) q(dt)$

Monte-Carlo cinétique

Méthode Bortz-Kalos-Lebowitz

(J. of comp. Phys. 17, 10 (1975))

Pour un seul type d'événement de fréquence f .

Indépendance statistique : $q(t+dt) = q(t) q(dt)$

$$dq/dt = [q(t+dt) - q(t)]/dt = q(t) [q(dt) - 1]/dt$$

Monte-Carlo cinétique

Méthode Bortz-Kalos-Lebowitz

(J. of comp. Phys. 17, 10 (1975))

Pour un seul type d'événement de fréquence f .

Indépendance statistique : $q(t+dt) = q(t) q(dt)$

$$dq/dt = [q(t+dt) - q(t)]/dt = q(t) [q(dt) - 1]/dt$$

Si f est la fréquence de l'événement $p(dt) = f dt$

$$dq/dt = q(t) (-f)$$

Monte-Carlo cinétique

Méthode Bortz-Kalos-Lebowitz

(J. of comp. Phys. 17, 10 (1975))

Pour un seul type d'événement de fréquence f .

Indépendance statistique : $q(t+dt) = q(t) q(dt)$

$$dq/dt = [q(t+dt) - q(t)]/dt = q(t) [q(dt) - 1]/dt$$

Si f est la fréquence de l'événement $p(dt) = f dt$

$$dq/dt = q(t) (-f)$$

$$q(t) = \exp(-f t) \quad [q(t=0) = 1]$$

Monte-Carlo cinétique

Méthode BKL

Pour plusieurs type d'événements de fréquence f_1, f_2, \dots, f_M

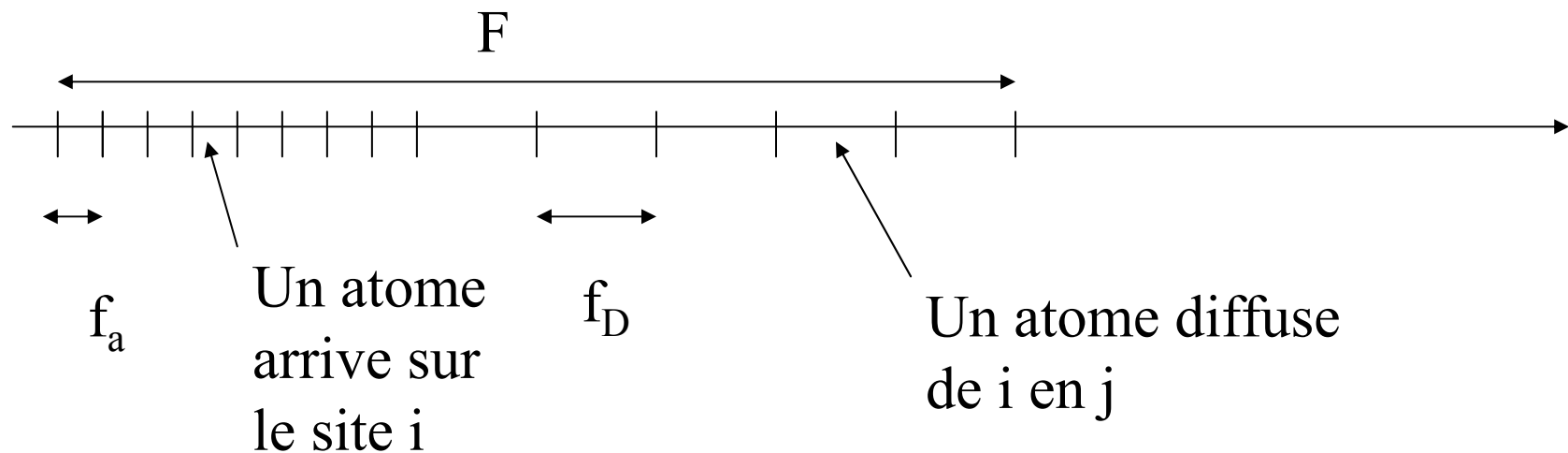
$$F = f_1 + f_2 + \dots + f_M$$

Evénements statistiquement indépendant :

$$q(t) = \exp(-F t) \quad [q(t=0) = 1]$$

Monte-Carlo cinétique

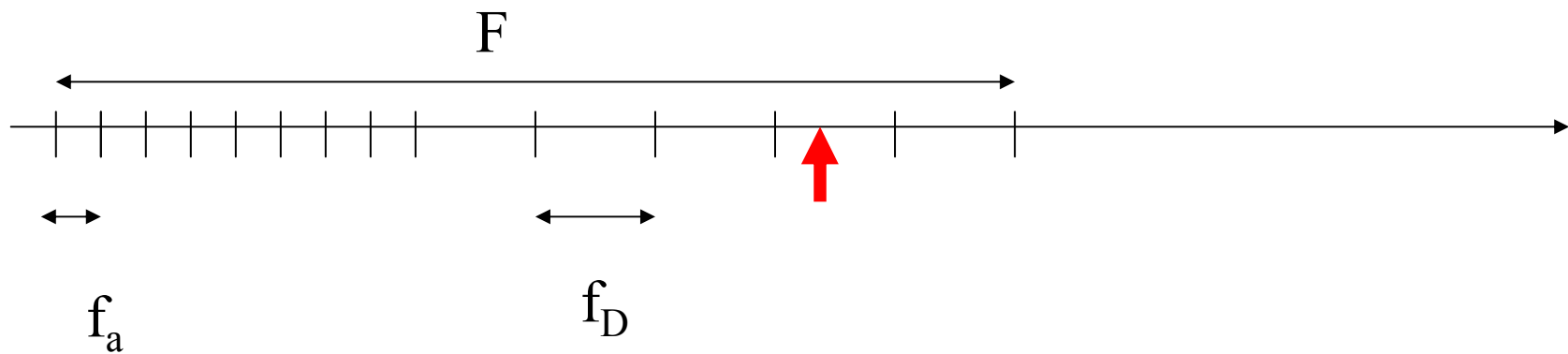
Méthode BKL



On choisit au hasard un nombre entre 0 et 1: c'est $q(t)$
 $\Rightarrow t = -\ln[q]/F$ temps où un événement va se produire

Monte-Carlo cinétique

Méthode BKL

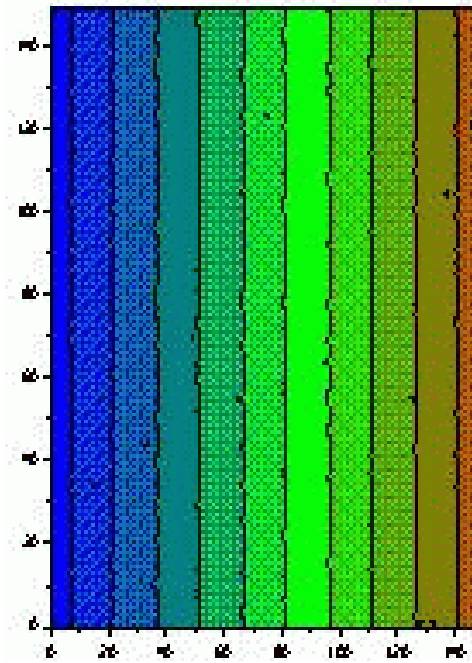
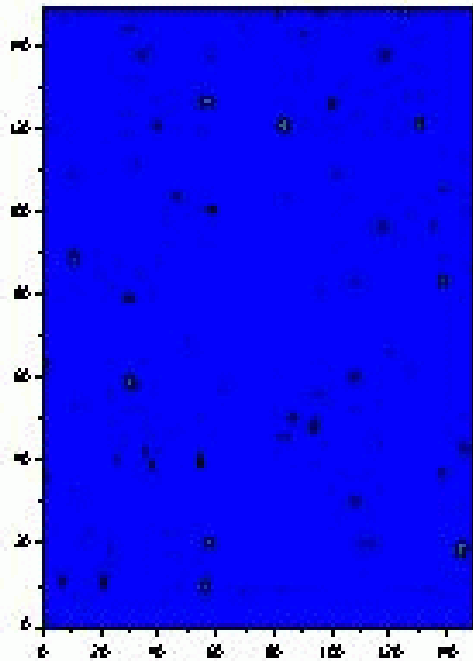


On choisit au hasard un nombre entre 0 et 1: c'est $q(t)$
 $\Rightarrow t = -\ln[q]/F$ temps ou un événement va se produire

On choisit au hasard un nombre entre 0 et F :
C'est l'événement qui se produit

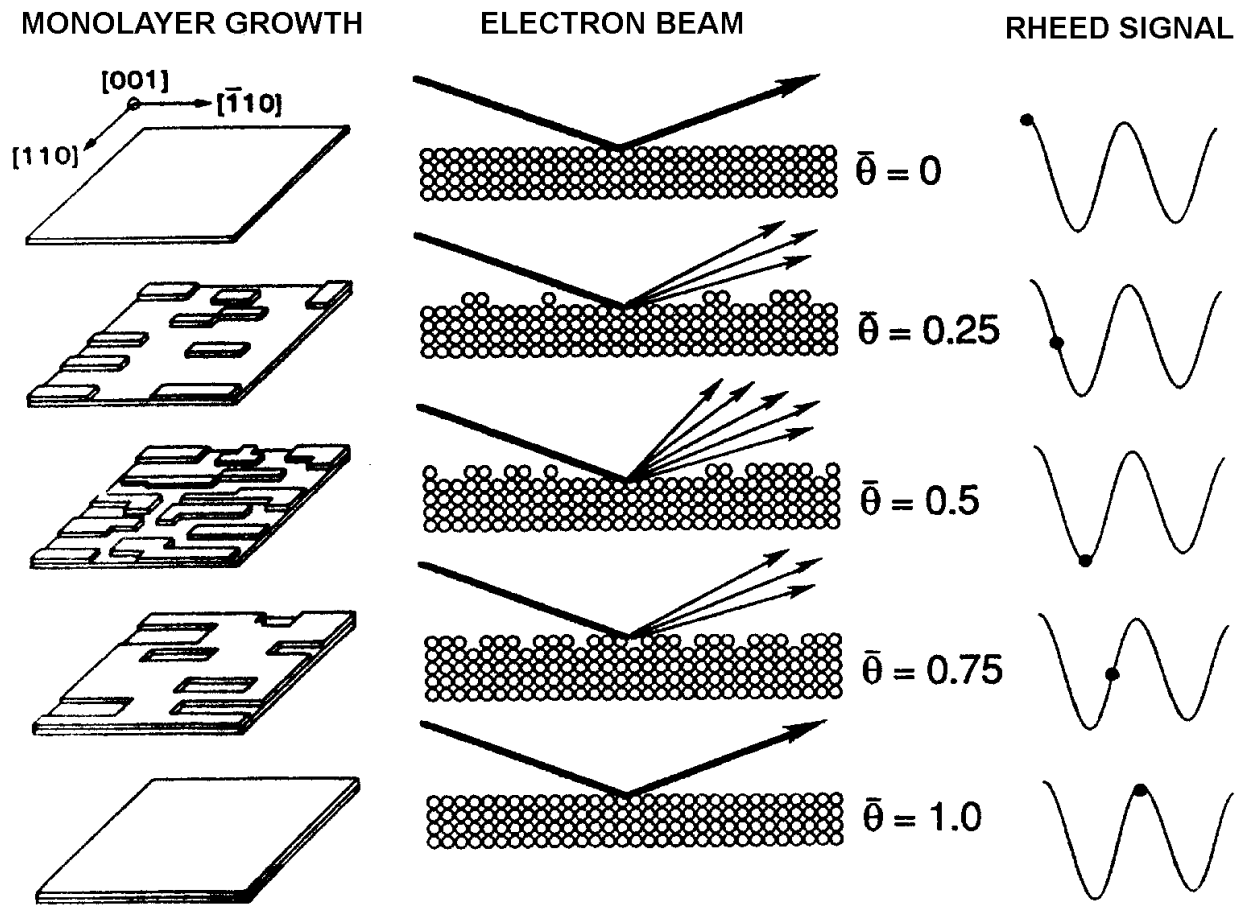
Monte-Carlo cinétique

Méthode BKL

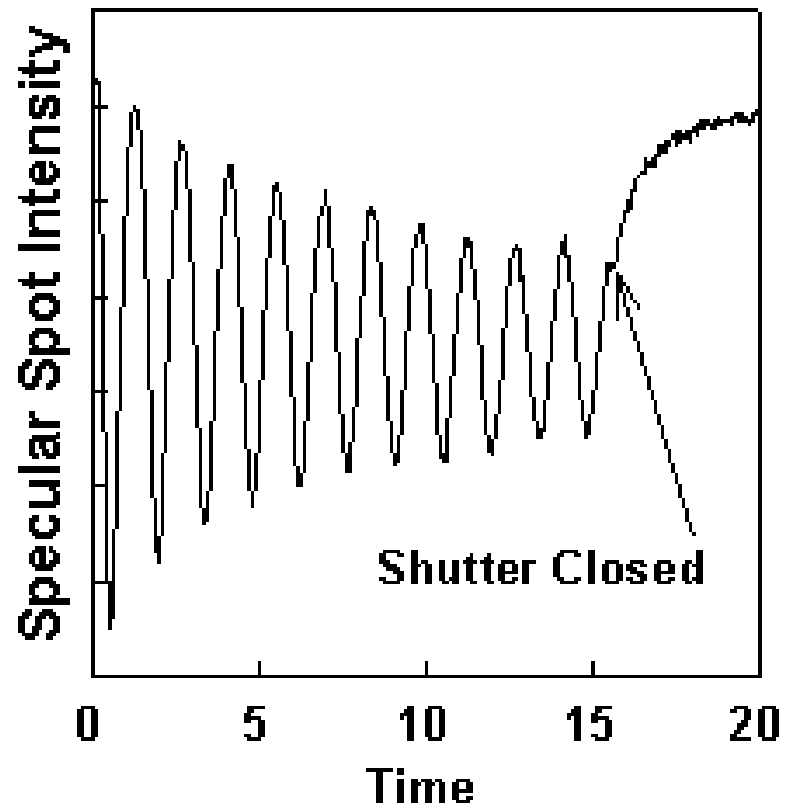


Monte-Carlo cinétique

Méthode BKL



Monte-Carlo cinétique RHEED Simulé



Dmitri Vvedensky et al
Phys. Rev. B 46, 6815 (1992)

Monte-Carlo cinétique

Méthode BKL

On peut utiliser la méthode BKL à l'équilibre thermodynamique

- Avantage : On choisit quand l'événement se produit
- Inconvénient : Il faut faire un catalogue de tous les événements Possibles à chaque nouveau temps.

(Difficile dans le cas des interactions longues portées)