



**Kauno technologijos universitetas**  
Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas

# **Nusodinamų nanostruktūrizuotų dangų paviršiaus šiurkštumo ir nanosalelių koalescencijos modeliavimas**

Baigiamasis magistro projektas

---

**Vitalijus Griščenkovas**

Projekto autorius

**prof. habil. dr. Arvidas Galdikas**

Vadovas

---

**Kaunas, 2021**



**Kauno technologijos universitetas**  
Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas

# **Nusodinamų nanostruktūrizuotų dangų paviršiaus šiurkštumo ir nanosalelių koalescencijos modeliavimas**

Baigiamasis magistro projektas  
Medžiagų mokslas (6211FX009)

---

**Vitalijus Griščenkovas**

Projekto autorius

**prof. habil. dr. Arvidas Galdikas**

Vadovas

**doc. dr. Darius Virbukas**

Recenzentas

---

**Kaunas, 2021**



**Kauno technologijos universitetas**

Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas

Vitalijus Griščenkovas

## **Nusodinamų nanostruktūrizuotų dangų paviršiaus šiurkštumo ir nanosalelių koalescencijos modeliavimas**

Akademinio sąžiningumo deklaracija

Patvirtinu, kad:

1. baigiamąjį projektą parengiau savarankiškai ir sąžiningai, nepažeisdamas kitų asmenų autoriaus ar kitų teisių, laikydamasis Lietuvos Respublikos autorių teisių ir gretutinių teisių įstatymo nuostatų, Kauno technologijos universiteto (toliau – Universitetas) intelektinės nuosavybės valdymo ir perdavimo nuostatų bei Universiteto akademinės etikos kodekse nustatytų etikos reikalavimų;
2. baigiamajame projekte visi pateikti duomenys ir tyrimų rezultatai yra teisingi ir gauti teisėtai, nei viena šio projekto dalis nėra plagijuota nuo jokių spausdintinių ar elektroninių šaltinių, visos baigiamojo projekto tekste pateiktos citatos ir nuorodos yra nurodytos literatūros sąrašė;
3. įstatymų nenumatytų piniginių sumų už baigiamąjį projektą ar jo dalis niekam nesu mokėjęs;
4. suprantu, kad išaiškėjus nesąžiningumo ar kitų asmenų teisių pažeidimo faktui, man bus taikomos akademinės nuobaudos pagal Universitete galiojančią tvarką ir būsiu pašalintas iš Universiteto, o baigiamasis projektas gali būti pateiktas Akademinės etikos ir procedūrų kontrolieriaus tarnybai nagrinėjant galimą akademinės etikos pažeidimą.

Vitalijus Griščenkovas

*Patvirtinta elektroniniu būdu*

Griščenkovas, Vitalijus. Nusodinamų nanostruktūrizuotų dangų paviršiaus šiurkštumo ir nanosalelių koalescencijos modeliavimas. Magistro baigiamasis projektas / vadovas prof. habil. dr. Arvidas Galdikas; Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas.

Studijų kryptis ir sritis (studijų krypčių grupė): Technologijos mokslai (F), Medžiagų technologijos (F03).

Reikšminiai žodžiai: salelių augimas, modeliavimas, paviršiaus šiurkštumas, nanosalelės.

Kaunas, 2021. 61 p.

### **Santrauka**

Dėl plonų dangų svarbos šiuolaikinėse aukštosiose technologijose, svarbu žinoti jų fizikinius parametrus ir mokėti juos prognozuoti. Paviršiaus šiurkštumas yra vienas iš svarbių, eksperimentiškai matuojamų parametrų, iš dalies nusakančių dangos struktūrą ir kitus su ja susijusius fizikinius parametrus. Šiurkštumo ir su juo susijusių fizikinių parametrų prognozavimas palengvina tyrėjų darbą, nes nereikia realiai auginti ir tirti medžiagų, kurios dažnai yra brangios ir sudėtingai gaunamos. Eksperimentiškai kitų autorių nustatyta kad, paviršiaus šiurkštumas netiesiškai kinta priklausomai nuo atomų energijos. Pasirinkus jau egzistuojantį paviršiaus augimo matematinį modelį, sumodeliuoti šiurkštumo priklausomybės nuo temperatūros grafikai. Ištyrus pasirinktą difuzijos parametrų sritį, nustatytos paviršiaus šiurkštumo mažėjimo ir didėjimo sritys, kintant nuo temperatūros priklausomiems difuzijos parametrams. Ištirtos pavienių monosluoknių užpildymo ypatybės kintant temperatūrai ir jos veikiamiems parametrams.

Griščenkovas, Vitalijus. Modeling of surface roughness and nanoparticle coalescence of deposited nanostructured coatings. Masters's Final Degree Project / supervisor prof. habil. dr. Arvidas Galdikas; Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Kaunas University of Technology.

Study field and area (study field group): Technology sciences (F), Technology of materials (F03).

Keywords: island growth, modeling, surface roughness, nanoisland.

Kaunas, 2021. 61 pages.

### **Summary**

Due to the importance of thin films in modern high technologies, it is important to know their physical parameters and be able to predict them. Surface roughness is one of the important, experimentally measurable, parameters that partly defines the structure of the coating and other structure related physical parameters. Predicting roughness and its associated physical parameters facilitates the work of researchers because there is no need to actually grow and study materials that are often expensive and difficult to create. Experimentally, other authors found that, surface roughness varies nonlinearly with temperature. By choosing an already existing mathematical model of surface growth, graphs of temperature dependence of roughness were modeled. After studying the selected range of diffusion parameters, the areas of decrease and increase of surface roughness with changing temperature-dependent diffusion parameters were determined. The coverage features of individual monolayers with changing temperature and its parameters were investigated.

## Turinys

<b>Paveikslų sąrašas .....</b>	<b>7</b>
<b>Santrumpų ir terminų sąrašas .....</b>	<b>9</b>
<b>Įvadas.....</b>	<b>10</b>
<b>1. Literatūros apžvalga .....</b>	<b>11</b>
1.1. Kristalinio paviršiaus augimas ir režimai. Epitaksija .....	11
1.1.1. Augimo režimai .....	11
1.1.2. Nukleacija.....	15
1.1.3. Mikrostruktūra .....	17
1.2. Paviršiaus savybių priklausomybės nuo paviršiaus šiurkštumo .....	19
1.3. Modeliavimas .....	23
1.4. Paviršiaus šiurkštumo modeliavimas .....	24
1.5. Eksperimentinės paviršiaus šiurkštumo priklausomybės nuo temperatūros .....	25
<b>2. Medžiagos ir tyrimų metodai .....</b>	<b>27</b>
2.1. Matematinis modelio aprašymas .....	27
2.2. Diferencialinių lygčių sprendimas Oilerio metodu .....	30
<b>3. Tyrimų rezultatai ir jų aptarimas.....</b>	<b>31</b>
3.1. Paviršiaus šiurkštumo skaičiavimų rezultatai.....	31
<b>Išvados .....</b>	<b>59</b>
<b>Literatūros sąrašas .....</b>	<b>60</b>

## Paveikslų sąrašas

<b>1 pav.</b> Schematinis augimo režimų atvaizdavimas [1].....	12
<b>2 pav.</b> a) Ant platinos paviršiaus užaugina aukso plėvelė ir b) ant grafito užaugintos trimatės švino salelės [2].....	13
<b>3 pav.</b> Augimo molekulinės dinamikos fazių diagrama [2].....	14
<b>4 pav.</b> Įsitempęs dvimatis sluoksnis ir atsipalaidavusi trimatė piramidinė salelė [2] .....	15
<b>5 pav.</b> Skenuojančio tunelinio mikroskopo nuotraukos ant silicio pagrindo SK režimu užaugus germaniui [2] .....	15
<b>6 pav.</b> Atomų difuzijos procesai, vykstantys epitaksinio augimo metu [2] .....	16
<b>7 pav.</b> Pagrindiniai mikrostruktūrą kontroliuojantys augimo procesai [3] .....	17
<b>8 pav.</b> Struktūrinio zoninio modelio iliustracinis atvaizdavimas [3] .....	18
<b>9 pav.</b> Amorfinės dangos savitosios varžos kreivė, kintant paviršiaus šiurkštumui [4] .....	20
<b>10 pav.</b> Fotovoltinės saulės elementų priklausomybės nuo vidutinio kvadratinio paviršiaus šiurkštumo: a) trumpinimo srovės ( $J_{sc}$ ) ir efektyvumo; b) užpildymo faktoriaus (FF) ir atvirosios grandinės įtampos ( $V_{oc}$ ) [6].....	21
<b>11 pav.</b> Sukibimo jėgos su mikroskopo galvutėmis priklausomybės nuo paviršiaus šiurkštumo aukso dangoms [8].....	22
<b>12 pav.</b> 4 bandomųjų grupių paviršiaus šiurkštumo ir paviršiaus padengimo bakterijomis palyginimas [9].....	23
<b>13 pav.</b> Klasterių dydžio kitimas nuo difuzijos ilgio [22].....	24
<b>14 pav.</b> Salelių tankio priklausomybė nuo nusodinimo laiko skirtingoms (a) atomų difuzijos atstumo reikšmėms; (b) salelių difuzijos atstumo reikšmėms [23] .....	25
<b>15 pav.</b> Pirmo sluoksnio (a) padengimo priklausomybės nuo laiko ir (b) vidutinio klasterių dydžio priklausomybės nuo laiko auksui ir variui [23] .....	25
<b>16 pav.</b> Paviršiaus šiurkštumo ( $R_q$ ) priklausomybės nuo temperatūros, kurioje buvo auginama, 5 skirtingiems nusodinimo greičiams, plonųjų samariu legiruotu cerio oksidu keramikų sluoksniams [24, 25] .....	26
<b>17 pav.</b> Kristalitų dydžio priklausomybės nuo auginimo temperatūros skirtingiems nusodinimo greičiams [26].....	26
<b>18 pav.</b> (a) Paviršiaus šiurkštumo priklausomybė nuo atomų difuzijos spindulio, kai $\beta = 20$ sant. vnt., (b) A. Galdiko gauti modeliavimo rezultatai [22] ir (c) schematinis salelių dydžio ir difuzijos ilgio priklausomybių kitimo aiškinimas [22] .....	33
<b>19 pav.</b> Paviršiaus šiurkštumo priklausomybė nuo atomų difuzijos spindulio, kai $\beta = 75$ sant. vnt.	34
<b>20 pav.</b> Paviršiaus šiurkštumo priklausomybė nuo atomų difuzijos spindulio, kai $\beta = 150$ sant. vnt. ....	34
<b>21 pav.</b> Paviršiaus šiurkštumo priklausomybė nuo atomų difuzijos spindulio, kai $\beta = 250$ sant. vnt. ....	35
<b>22 pav.</b> Salelių tankio priklausomybė nuo atomų difuzijos spindulio, kai $\beta = 20$ sant. vnt. ....	36
<b>23 pav.</b> Salelių dydžio priklausomybė nuo atomų difuzijos spindulio, kai $\beta = 20$ sant. vnt.....	36
<b>24 pav.</b> 3 monosluoksnio užpildymas nuo atomų difuzijos spindulio, kai $\beta = 20$ sant. vnt. ....	37
<b>25 pav.</b> 5 monosluoksnio užpildymas nuo atomų difuzijos spindulio, kai $\beta = 20$ sant. vnt. ....	38
<b>26 pav.</b> Monosluoksnių užpildymas nuo atomų difuzijos spindulio, kai $\beta = 20$ sant. vnt., (a) 10 monosluoksniui; (b) 15 monosluoksniui; (c) 20 monosluoksniui. ....	39

<b>27 pav.</b> Monosluoksnių užpildymas nuo atomų difuzijos spindulio, kai $\beta = 20$ sant. vnt., a) 23 monosluoksniui; b) 24 monosluoksniui; c) 25 monosluoksniui.....	41
<b>28 pav.</b> Paviršiaus šiurkštumo priklausomybė nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a) $\beta = 15$ sant. vnt. b) $\beta = 16$ sant. vnt. c) $\beta = 17$ sant. vnt. d) $\beta = 18$ sant. vnt. e) $\beta = 19$ sant. vnt.....	43
<b>29 pav.</b> Paviršiaus šiurkštumo priklausomybė nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a) $\beta = 21$ sant. vnt. b) $\beta = 22$ sant. vnt. c) $\beta = 23$ sant. vnt. d) $\beta = 24$ sant. vnt. e) $\beta = 25$ sant. vnt.....	44
<b>30 pav.</b> Salelių tankio priklausomybė nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a) $\beta = 15$ sant. vnt. b) $\beta = 16$ sant. vnt. c) $\beta = 17$ sant. vnt. d) $\beta = 18$ sant. vnt. e) $\beta = 19$ sant. vnt.....	45
<b>31 pav.</b> Salelių tankio priklausomybė nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a) $\beta = 21$ sant. vnt. b) $\beta = 22$ sant. vnt. c) $\beta = 23$ sant. vnt. d) $\beta = 24$ sant. vnt. e) $\beta = 25$ sant. vnt.....	46
<b>32 pav.</b> Salelių dydžio priklausomybė nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a) $\beta = 15$ sant. vnt. b) $\beta = 16$ sant. vnt. c) $\beta = 17$ sant. vnt. d) $\beta = 18$ sant. vnt. e) $\beta = 19$ sant. vnt.....	47
<b>33 pav.</b> Salelių dydžio priklausomybė nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a) $\beta = 21$ sant. vnt. b) $\beta = 22$ sant. vnt. c) $\beta = 23$ sant. vnt. d) $\beta = 24$ sant. vnt. e) $\beta = 25$ sant. vnt.....	48
<b>34 pav.</b> 3 monosluoksnių užpildymas nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a) $\beta = 15$ sant. vnt. b) $\beta = 16$ sant. vnt. c) $\beta = 17$ sant. vnt. d) $\beta = 18$ sant. vnt. e) $\beta = 19$ sant. vnt.....	49
<b>35 pav.</b> 3 monosluoksnių užpildymas nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a) $\beta = 21$ sant. vnt. b) $\beta = 22$ sant. vnt. c) $\beta = 23$ sant. vnt. d) $\beta = 24$ sant. vnt. e) $\beta = 25$ sant. vnt.....	50
<b>36 pav.</b> 5 monosluoksnių užpildymas nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a) $\beta = 15$ sant. vnt. b) $\beta = 16$ sant. vnt. c) $\beta = 17$ sant. vnt. d) $\beta = 18$ sant. vnt. e) $\beta = 19$ sant. vnt.....	51
<b>37 pav.</b> 5 monosluoksnių užpildymas nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a) $\beta = 21$ sant. vnt. b) $\beta = 22$ sant. vnt. c) $\beta = 23$ sant. vnt. d) $\beta = 24$ sant. vnt. e) $\beta = 25$ sant. vnt.....	52
<b>38 pav.</b> 10 monosluoksnių užpildymas nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a) $\beta = 15$ sant. vnt. b) $\beta = 16$ sant. vnt. c) $\beta = 17$ sant. vnt. d) $\beta = 18$ sant. vnt. e) $\beta = 19$ sant. vnt.....	53
<b>39 pav.</b> 10 monosluoksnių užpildymas nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a) $\beta = 21$ sant. vnt. b) $\beta = 22$ sant. vnt. c) $\beta = 23$ sant. vnt. d) $\beta = 24$ sant. vnt. e) $\beta = 25$ sant. vnt.....	54
<b>40 pav.</b> 15 monosluoksnių užpildymas nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a) $\beta = 15$ sant. vnt. b) $\beta = 16$ sant. vnt. c) $\beta = 17$ sant. vnt. d) $\beta = 18$ sant. vnt. e) $\beta = 19$ sant. vnt.....	55
<b>41 pav.</b> 15 monosluoksnių užpildymas nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a) $\beta = 21$ sant. vnt. b) $\beta = 22$ sant. vnt. c) $\beta = 23$ sant. vnt. d) $\beta = 24$ sant. vnt. e) $\beta = 25$ sant. vnt.....	56
<b>42 pav.</b> 20 monosluoksnių užpildymas nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a) $\beta = 15$ sant. vnt. b) $\beta = 16$ sant. vnt. c) $\beta = 17$ sant. vnt. d) $\beta = 18$ sant. vnt. e) $\beta = 19$ sant. vnt.....	57
<b>43 pav.</b> 20 monosluoksnių užpildymas nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a) $\beta = 21$ sant. vnt. b) $\beta = 22$ sant. vnt. c) $\beta = 23$ sant. vnt. d) $\beta = 24$ sant. vnt. e) $\beta = 25$ sant. vnt.....	58



## Santrumpų ir terminų sąrašas

### Santrumpos:

FM – Franko ir van der Mervės;

VW – Volmerio ir Vėberio;

SK – Stranskio ir Krastanovo;

$\gamma_o$  – ploto vienetui, paviršiuje tarp vakuumo ir plėvelės, tenkanti laisvoji energija;

$\gamma_i$  – ploto vienetui, paviršiuje tarp pagrindo ir plėvelės, tenkanti laisvoji energija;

$\gamma_s$  – ploto vienetui, paviršiuje tarp vakuumo ir pagrindo, tenkanti laisvoji energija;

$T_s$  – temperatūra, kurioje medžiaga nusodinama;

$T_m$  – medžiagos lydymosi temperatūra;

$R_q$  – vidutinės kvadratinės šaknies šiurkštumas;

RMS – iš anglų kalbos *root mean square*, vidutinis kvadratinis nuokrypis;

$R_a$  – vidutinis aritmetinis aukštis;

Jsc – trumpinimo srovė;

Voc – atvirosios grandinės įtampa;

FF – užpildymo faktorius;

$\lambda$  – adsorbuojamų atomų difuzijos spindulys;

$\beta$  – salelių difuzijos spindulys;

sant. vnt. – santykiniai vienetai.

## Ivadas

Kiekvienais metais vis daugiau dėmesio skiriama energetikos tobulinimui pasaulyje. Mažėjant naftos atsargoms ir besirūpinant aplinkosauga tapo svarbu tobulinti alternatyvius energijos išgavimo būdus. Vienas iš perspektyvių energijos gavimo būdų yra kuro elementai. Ši technologija išrasta jau seniai, bet dėl technologinių sunkumų dar nėra plačiai naudojama. Kuro elementuose naudojamos plonos dangos, kurių savybės yra labai svarbios. Dangų fizikinės savybės ir struktūra turi būti labai gera ir stabili elementų ilgaamžiškumui užtikrinti. Joninio laidumo dangos, naudojamos kuro elementuose, yra plačiai nagrinėjamos mokslininkų, nustatinėjamos jų savybės ir struktūros ypatumai. Vienas svarbių parametrų, apibūdinančių paviršiaus struktūrą, yra paviršiaus šiurkštumas ir kiti paviršiniai dydžiai. Paviršiaus šiurkštumas gali parodyti, kokia struktūra buvo užauginta ir kokių fizikinių savybių būtu galima tikėtis iš tiriamos dangos. Paviršiaus šiurkštumas taip pat gali stipriai veikti kitų auginamų dangų savybes jei kalbama apie daugiasluoksnes struktūras. Paviršiaus šiurkštumas yra dydis, kuris dažniausiai nustatinėjamas eksperimentiniu būdu matuojant tiriamą paviršių su sudėtinga ir brangia mokslinė įranga. Pačios joninio laidumo dangos dažnai yra sudėtingai gaunamos ir brangios, todėl ir jų auginimas yra problema. Norint sumažinti mokslinių tyrimų kainą ir paspartinti plonų struktūrų tobulinimą yra pasitelkiamas modeliavimas. Modeliuojant augimą galima iš anksto numatyti dangos struktūrą ir savybes. Norint paaiškinti, kaip gaunamos įvairios formos eksperimentinės šiurkštumo kreivės, galima pasitelkti paviršiaus augimo modeliavimą.

Tikslas - ištirti nusodinamų nanostruktūrizuotų dangų augimo ir nanosalelių koalescencijos įtaką paviršiaus šiurkštumui.

Uždaviniai:

1. nustatyti kaip kinta paviršiaus šiurkštumas, keičiantis nuo nusodinamų dalelių energijos priklausomiems parametrų;
2. atlikti kokybinį eksperimentinių šiurkštumo priklausomybių nuo temperatūros modeliavimą;
3. rasti sąlygas, kada šiurkštumo priklausomybė nuo parametrų, priklausančių nuo nusodinamų dalelių energijos, įgyja ekstremumus, pereina per minimumą ir / arba maksimumą.

## 1. Literatūros apžvalga

Kiekvieną dieną plonų dangų auginimo sritis tobulėja, padaroma vis daugiau pasiekimų ir mokslas juda pirmyn lyginant su anksčiau naudotomis žiniomis ir technologijomis naudotomis anksčiau. Vis daugiau mokslinių darbų tiria ir tobulina paviršiaus augimą. Dalis mokslininkų stengiasi patobulinti jau esamas ar anksčiau naudotas technologijas, siekdami pritaikyti jas šiuolaikiniams poreikiams, kiti orientuojasi į naujų technologijų kūrimą ir ateities galimybes. Dažnai tyrimai ir vystymas vyksta eksperimentiškai tiriant gautas medžiagas su kokia nors tyrimų įranga ir bandant suprasti, kokia jau žinoma teorija tai paaiškina. Galima daryti ir atvirkščiai, kai bandoma teoriškai aprašyti tam tikrus dėsningumus ir pritaikyti jau turimiems eksperimentiniams rezultatams. Realiai plonų dangų augimo nepavyksta aprašyti, nepasitelkiant teorinio augimo aprašymo. Kai augimo metu vykstantys procesai yra žinomi ir aiškiai suprantami, galima daryti realistiškas prielaidas apie busimų dangų savybes. Norint pasiekti trokštamus rezultatus reikia žinoti kaip juos modeliuoti, kokie procesai vyksta augimo metu, kokie parametrai yra naudojami ir kodėl, kokias dangos savybes stengiamasi sumodeliuoti ir kaip jos apibūdinamos, bei panašūs aspektai. Šie ir kiti augimo modeliavimui svarbūs aspektai aptariami toliau.

### 1.1. Kristalinio paviršiaus augimas ir režimai. Epitaksija

Ant paviršiaus augant medžiagai, plonų dangų augimas įvardijamas kai augančios medžiagos sluoksnis viršija vieną monosluoksnį [1]. Epitaksija – tai viena iš paviršiaus augimo rūšių, kur plėvelės kristalinę orientaciją nulemia pagrindo kristalinės orientacijos. Dėl šios priežasties augančios dangos struktūros, kristalitai gali užaugti tik iki gardelės ribojamo dydžio. Šio ribojimo nėra augant įprastais būdais. Kai pagrindo ir auginamos dangos kristalinės gardelės sutampa, bet skiriasi jų gardelės konstantos, dangoje susidaro įtempiai. Tokiu atveju dangos gardelės konstanta tampa šiek tiek pakitusi, lyginant su jos įprasta konstanta auginant dangą įprastiniais metodais [2].

Epitaksija gali būti skirstoma į dvi grupes pagal tai, ar auginama medžiaga sutampa su pagrindu. Jei padėklo ir auginamos dangos medžiagos sutampa, turime procesą, vadinamą homoepitaksija, o atveju, kai padėklo ir auginamos dangos medžiaga skirtingos, turėsime heteroepitaksiją. Augančios dangos augimą veikia kinetinių ir termodinaminių procesų sąveika. Dangos augimo dėsningumai aiškinami termodinaminiu požiūriu. Nagrinėjamos sąveikos ir santykinės paviršių energijos. Nepaisant to, galutinį augimo režimą nulemia greitį ribojantys, kinetinio proceso veiksniai. Dangos augimas vis tiek yra nepusiausvyrinis kinetinis procesas [1].

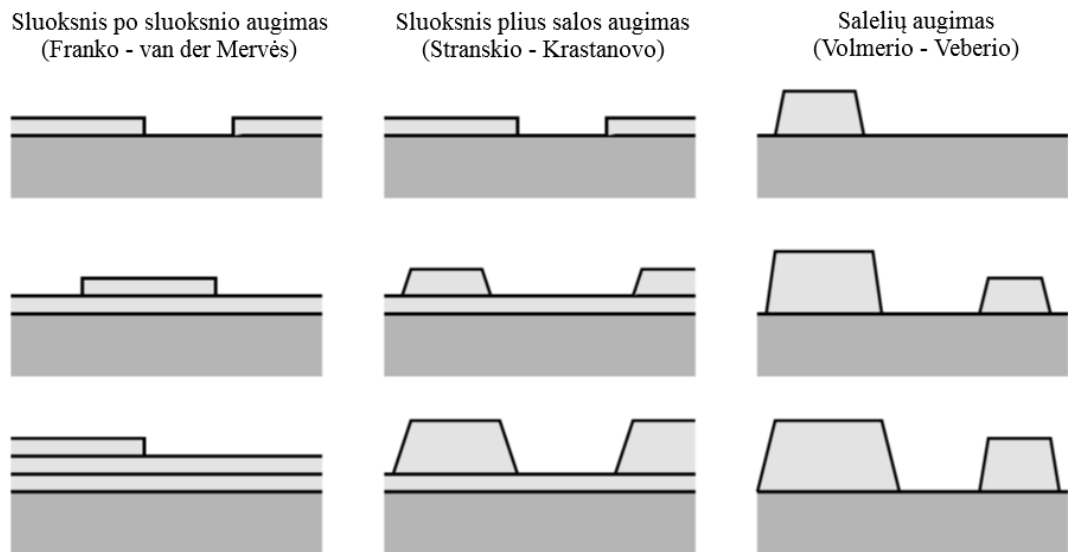
#### 1.1.1. Augimo režimai

Plonų dangų augimas skirstomas į tris pagrindinius augimo režimus:

1. Sluoksnis po sluoksnio augimas arba Franko-van der Mervės (FM) režimas. Apibūdinamas atvejis, kai dangos atomų sąveika su padėklu yra daug stipresnė nei tarp pačios augančios dangos atomų. Dėl šios priežasties, augant dangai pirmiausia pilnai prisipildo žemiausias sluoksnis ir tik po to ant jo viršaus pradeda augti aukštesnis monosluoksnis. Vyksta tik dvimatis augimas;
2. Salelių augimas arba Volmerio-Veberio (VW) režimas. Čia apibūdinamas atvejis, kai dangos atomų sąveika tarp pačios augančios dangos atomų yra daug stipresnė nei su padėklu. Tada danga auga trimatėmis salelėmis, kurios formuojasi tiesiai ant padėklo;
3. Sluoksnis plius salos augimas arba Stranskio-Krastanovo (SK) režimas. Apibūdinamas tarpinis variantas tarp pirmo ir antrojo, kur susiformuoja dvimatis sluoksnis tiesiogiai ant padėklo ir ant

šio sluoksnio pradeda augti trimatės salelės. Čia pradinio sluoksnio storis ir kilmė gali skirtis kiekvienam individualiam auginamos dangos atvejui [1].

Pirmame paveiksle schematiškai pavaizduoti anksčiau išvardinti augimo režimai.

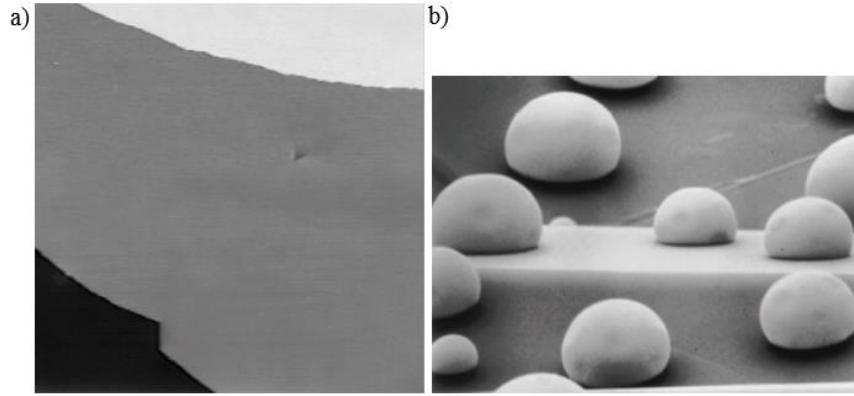


**1 pav.** Schematinis augimo režimų atvaizdavimas [1]

Nagrinėjant termodinaminius parametrus, apibrėžiančius epitaksinį augimą, padarytas trijų augimo režimų sujungimas. Makroskopiniai paviršiaus įtempiai paimti kaip pagrindas nagrinėjimui. Šie įtempiai išreiškiami per laisvasias energijas: ploto vienetui paviršiuje tarp vakuumo ir plėvelės tenkanti laisvoji energija ( $\gamma_o$ ), ploto vienetui paviršiuje tarp pagrindo ir plėvelės tenkanti laisvoji energija ( $\gamma_i$ ) bei ploto vienetui paviršiuje tarp vakuumo ir pagrindo tenkanti laisvoji energija ( $\gamma_s$ ). Nagrinėdami du padengimo atvejus galime matyti koncepciją. Kai  $\gamma_s$  yra didesnis nei  $\gamma_o$  ir  $\gamma_i$ , energija sistemoje atpalaiduojama tada, kai plėvelė visiškai padengta (FM režimas). Kai padengimas tik dalinis (VW režimas), sistema nėra stabili. Kad būtų tenkinamas FM režimas plėvelėje, sudarytoje iš  $n$  sluoksnių, turi būti tenkinama nelygė:

$$\gamma_{o(n)} + \gamma_i \leq \gamma_s. \quad (1.1)$$

Laisvosios energijos  $\gamma_o$  pokytis, priklausomai nuo dangos sluoksnių skaičiaus augančiame paviršiuje, atspindimas gardelės konstantos ir / arba struktūros pokyčio. Nuo dangos storio atsirandanti laisvosios energijos  $\gamma_i$  priklausomybė atsiranda dėl energijos pokyčio, kai susikuria sąlytis tarp pagrindo ir dangos. Šioje riboje energija atsiranda dėl gardelės konstantos ir / arba skirtingos kristalografinės struktūros bei pakitusioje kristalinėje gardelėje susikaupiančių įtempių. Lygtimi 1.1 aprašytas paprasčiausias atvejis kai vyksta homoepitaksinis FM augimas arti termodinaminės pusiausvyros. Norint atvaizduoti heteroepitaksinį FM augimą lygties sąlyga būtų tokia:  $\gamma_{o(n)} \ll \gamma_s$ . Nelygybės narys  $\gamma_s$  turi būti daug didesnis už kitoje nelygybės pusėje esantį  $\gamma_{o(n)} + \gamma_i$ , nes  $\gamma_{i(n)}$  bendru atveju yra teigiamas ir jo nepaisyti negalima. Augimas VW režimu vykėtų, kai  $\gamma_{o(n)} > \gamma_s$ .



**2 pav.** a) Ant platinos paviršiaus užaugina aukso plėvelė ir b) ant grafito užaugintos trimatės švino salelės [2]

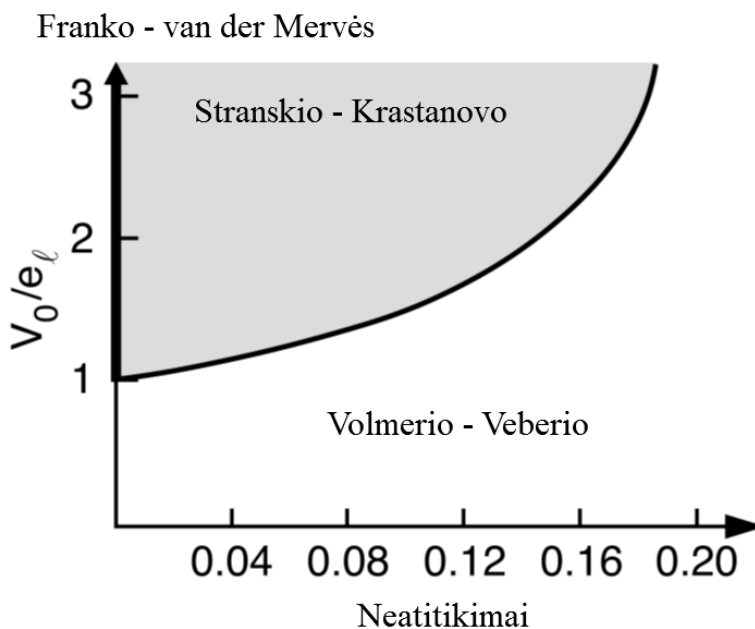
FM ir VW augimo režimais užaugintos struktūros pavaizduotos 2 paveiksle. Ant platinos (111) paviršiaus auganti aukso plėvelė sudaryta iš 25 monosluoksnių užauga visiškai lygi, kaip matoma iš skenuojančio tunelinio mikroskopo nuotraukos. Šiuo atveju aukso (111) paviršiaus laisvoji energija lygi  $\gamma_o = 1,17 \text{ J m}^{-2}$ , yra nedidelė lyginant su platinos (111) laisvąją energija, lygia  $\gamma_s = 2,30 \text{ J m}^{-2}$ . Tai pat dėl iš dalies mažo, tik 25 monosluoksnių, aukso dangos storio ant platinos, tarp jų atsirandančių įtempių energija yra ganėtinai maža. Augimas VW režimu matomas stebint švino augimą ant grafito padėklo aukštoje (1243 K) temperatūroje. Nuotrauka daryta skenuojančia elektronine mikroskopija. Čia švino paviršiaus laisvoji energija lygi  $\gamma_o = 0,60 \text{ J m}^{-2}$ , o grafito  $\gamma_s = 0,077 \text{ J m}^{-2}$ . Nuotrauką galima nagrinėti kaip pavyzdį darant prielaidą, kad esama šalia termodinaminės pusiausvyros ir švino salelių forma prilyginama lašeliams. Tada, santykis tarp švino ir grafito paviršiaus laisvųjų energijų gali būti išreiškiamas pagal drėkinimo kampą ( $\theta$ ), kuris atsiranda tarp švino ir grafito paviršių. Tai aprašoma lygtimi 1.2.

$$\cos \theta = \frac{\gamma_s - \gamma_i}{\gamma_o}. \quad (1.2)$$

Dvimačiame sluoksnyje dėl dangos ir pagrindo gardelių skirtumo susidarantys tūriniai įtempiai didėja monotoniškai, didėjant auginamos dangos storiui. Egzistuoja kritinis storis  $n_c$  kuris 1.1 lygtyje leidžia atsirasti nestabilumui, kai sistema pereina iš dvimačio augimo režimo į trimatį, lygčiai pereinant į  $\gamma_{o(n)} + \gamma_{i(n)} > \gamma_s$ . Toks aprašytas SK augimo režimas gali būti neigiamas, kai gaminamos dvimačios nuosekliai įsitempusios struktūros bei teigiamas, kai norima sukurti saviorganizuojančias kvantinių taškų matricas ar kitas įtempių nulemtas struktūras.

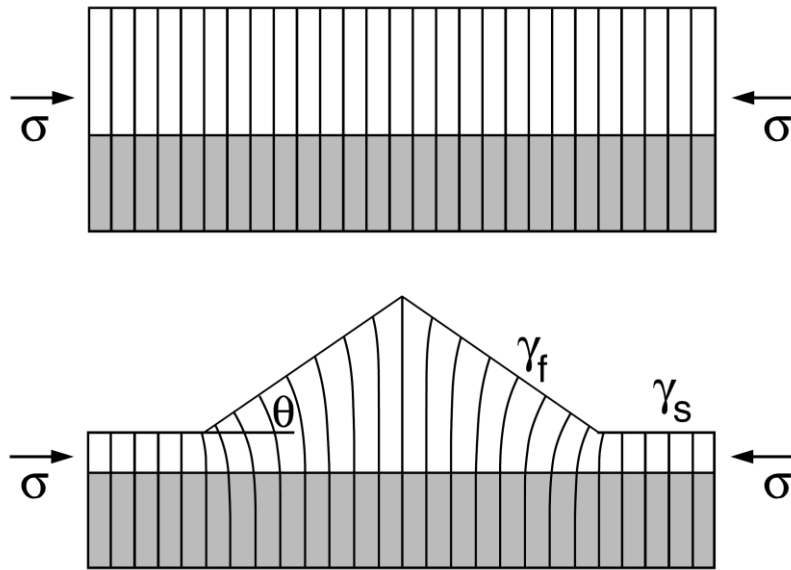
Augančios homoepitaksinės dangos pusiausvyrinė struktūra ir morfologija yra nulemta bendro sąveikos rezultato. Čia sąveika susideda iš dangos – pagrindo sąveikos ir šoninės nusėdusių atomų sąveikos, kuri apibūdina cheminio ryšio anizotropiją statmenai ir lygiagrečiai paviršiui. Išmatuoti šioms sąveikoms yra naudojami dydžiai, tokie kaip šoninė nusėdusių atomų trauka  $e_l$  ir izosterinė adsorbcijos šiluma  $V_o$ . Augimo režimus plokštumoje atvaizduoja molekulinės dinamikos modeliavimo diagrama trečiame paveiksle. Diagramoje matoma  $V_o/e_l$  priklausomybė nuo gardelės neatitikimų  $m$ , čia  $m = (a_{pl\acute{e}v} - a_{pagr})/a_{pagr}$ , kur  $a_{pl\acute{e}v}$  yra plėvelės kristalinės gardelės konstanta ir  $a_{pagr}$  yra pagrindo kristalinės gardelės konstanta. Naudojantis diagrama galima matyti, kad stabilus FM augimo režimas galimas tik stipriesiems pagrindams, kurie pavadinimą gavo dėl to, kad gali pakeisti augančios dangos gardelės konstantą į pagrindo gardelės konstantą. Konstantos kitimas

gali įvykti kai gardelės neatitikimai yra maži arba kai sąveikos potencialas pasidaro periodinis, lyginant jį su nusėdusiu dangos atomu šoninių ryšiu pastovumu ( $V_0/e_l > 1$ ). Kai šoninės sąveikos dominuoja ( $V_0/e_l < 1$ ) ir gardelių neatitikimai yra labai maži, danga auga VW augimo režimu. Esant atvejui, kai gardelės neatitikimai stabilūs, bet padidėja pagrindo įtaka, dangos augimas pereina iš VW režimo į SK režimą ir keletas dvimačių sluoksnių termodinamiškai gali stabiliai egzistuoti.



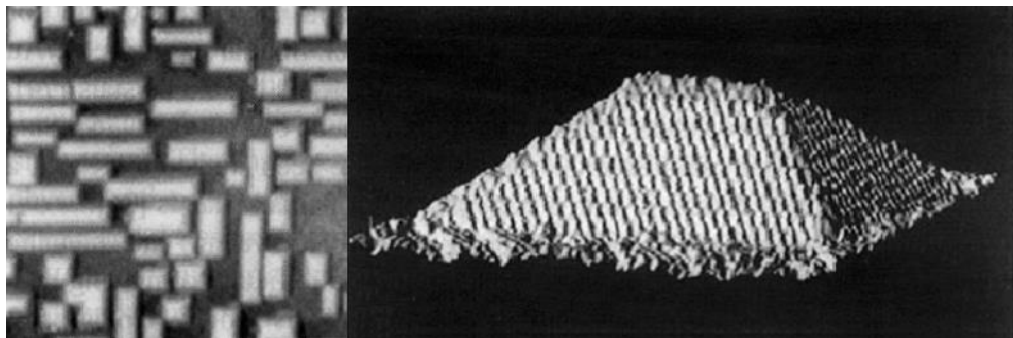
**3 pav.** Augimo molekulinės dinamikos fazių diagrama [2]

SK augimo režime galimas perėjimas iš dvimatės į trimatę morfologiją dėl dviejų priežasčių. Viena iš jų yra mažas skirtumas tarp kristalografijos, lyginant pagrindą su danga, keletą pirmųjų augančios dangos sluoksnių gali turėti labai panašią kristalografinę struktūrą, lyginant su jos įprasta tūriniu struktūra. Tokiu atveju SK režime auganti danga pasikeis į savo įprastą kristalinę struktūrą, kai bus pasiektas kritinis storis  $n_c$ , įvyks kristalografinis pasikeitimas. Storiui priartėjus prie ribos, laisvoji dviejų kristalinių struktūrų energija padidėja ir energijos balansas pasislenka trimačio augimo naudai. Kita trimačio pasikeitimo priežastis yra struktūrinių išlinkių susiformavimas ir įtempių energijos atpalaidavimas tokiu būdu. Dangos struktūriniai pasikeitimai iškilimų forma sugeba efektyviai pritaikyti savo gardelės konstantą, egzistuojant gniuždymo įtempimams, kaip pavaizduota 4 paveiksle. Kai įtempių energija yra didelė, ją subalansuoja toks paviršiaus ploto padidėjimas.



**4 pav.** Įsitempęs dvimatis sluoksnis ir atsipalaidavusi trimatė piramidinė salelė [2]

Realus pavyzdys pavaizduotas skenuojančiu elektroniniu mikroskopu darytose nuotraukose (žr. 5 pav.). Čia užfiksuotos susiformavusios piramidės formos germanio ir silicio (100) sistemos struktūros, kurios kristalinės gardelės neatitikimas yra 4,2 %. Kitu atveju, kai dvimatis sluoksnis yra tobulas, jame esantiems įtempiams atsipalaiduoti yra daug sudėtingiau nei sistemoje su tam tikrais netobulumais. Labai retai pasitaiko atveju, kai epitaksiniai sluoksniai sklandžiai pereina iš pagrindo numatytos kristalinės gardelės į sau įprastą. Tobuluose dvimačiuose sluoksniuose esančius įtempius galima atpalaiduoti į struktūrą įtraukiant kokių nors defektų, tokių kaip tūrinės dislokacijos. Kita vertus, defektų atsiradimas struktūroje riboja jos savybes ir funkcionalumą ir dažnai yra nepageidautinas. Įtempių atpalaidavimas sistemoje taip pat galimas suformavus periodines struktūras [2].



**5 pav.** Skenuojančio tunelinio mikroskopo nuotraukos ant silicio pagrindo SK režimu užaugus germaniui [2]

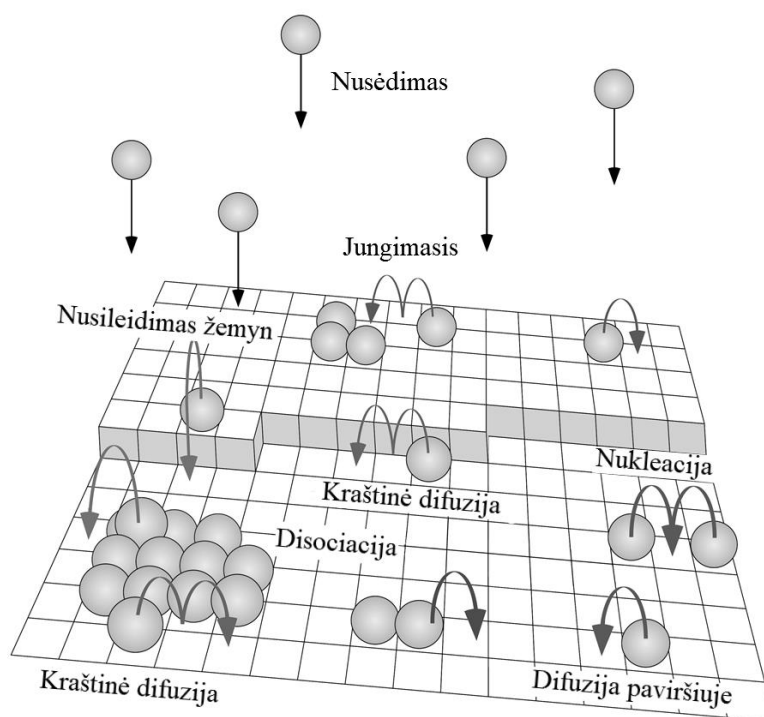
### 1.1.2. Nukleacija

Aptarti augimo režimai remiasi prielaidomis, tinkančiomis pusiausvyrosioms sistemoms. Epitaksinis dangos augimas dažniausiai vyksta toliau nuo pusiausvyros būsenos ir nusėdusiems dangos atomams judant paviršiumi sutinkami energiniai barjerai. Šie barjerai riboja judėjimą, darydami įtaką difuzijos greičiui, dėl kurio kinta augimo kinetika. Iš visų įmanomų struktūrų galimos tik kelios dėl energinių barjerų visumos. Termodinaminiai procesai augimo metu gali būti

teigiamai arba neigiamai veikiami kinetinių procesų. Kinetiniai augimo procesai gali pagelbėti, norint sukurti termodinamiškai nestabilių struktūrų, bet ir kliudyti, norint pasiekti tam tikrą morfologiją, kuri termodinaminiu požiūriu būtų pusiausvyra net ir po atkaitinimo.

Paprasčiausi atomų difuzijos procesai, vykstantys atominėje – spindulinėje epitaksijoje, pavaizduoti 6 paveiksle. Kinetinės energijos turintys atomai srautu  $F$  nusėda ant pagrindo, kuris išreiškiamas pagrindo adsorbcijos centrams tenkančiais dangos atomais per sekundę arba monosluoksniais per sekundę. Sudarant ryšį tarp nusodinto atomo ir pagrindo gaunama energija, kuri išsklaidoma po gardelę taip, kad nusodinti atomai patektų su pagrindu į šiluminę pusiausvyrą iš karto nusėdus, sąlyčio vietoje. Adsorbcijos sistemose, kur nusodinimas vyksta metalas ant metalo, gali pasitaikyti išimčių, kur dalis sąryšio energijos panaudojama difuzijai, vyksta pereinamieji šuoliai. Yra elementų kombinacijų, kur adsorbcijos energija net ir prie mažų temperatūrų gali būti naudojama pereinamiesiems apsikeitimo procesams. Atomai dažniausiai adsorbuojasi ten, kur nusėda iš garų fazės. Dažniausiai tai yra toli nuo kitų nusėdusių atomų ar klasterių ir pasikeitimo procesai nevyksta. Iš tokios atomų padėties ir prasideda difuzijos procesas.

Difuzijos procesai dalyvaujantys epitaksiniam augime yra temperatūros aktyvuoti šuoliai. Jie dažniausiai pasireiškia pavienių atomų keliavimu gretimais gardelės adsorbcijos centrais ir keletu atomų suderintu judėjimu.



**6 pav.** Atomų difuzijos procesai, vykstantys epitaksinio augimo metu [2]

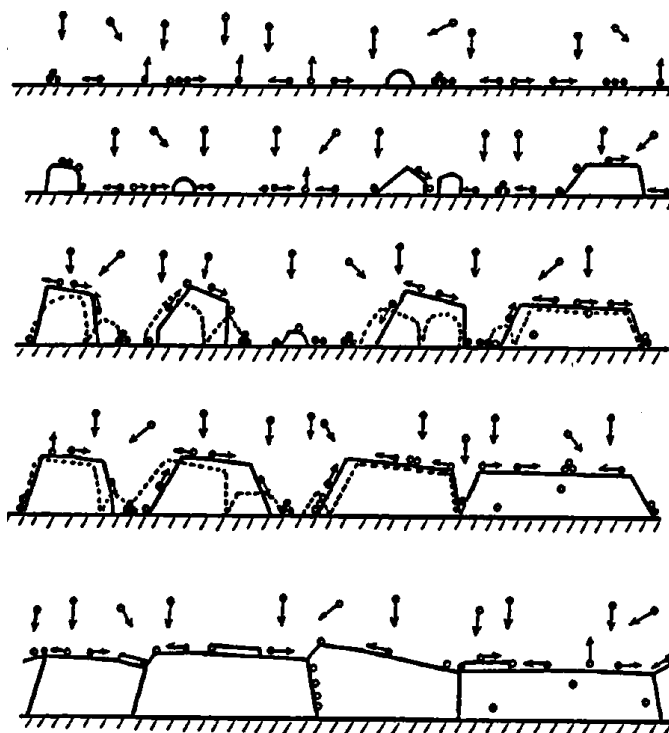
Dangos morfologijai labai svarbus vienas iš difuzijos procesų, kai ant salelės nusėdę atomai gali nušokti nuo jos žemyn ir pildyti žemesnį sluoksnį. Toks atomų šokinėjimas difuzijos būdu apsprendžia, kokia morfologija bus vyraujanti auginamoje dangoje, tai dvimatė plokščia ar trimatė morfologija. Ką atomai nusileidę ant salelės viršaus darys sąlygoja dydis, vadinamas nusileidimų dažniu. Priklausomai nuo dažnio dydžio atomai arba nušoks nuo salelės viršaus į žemesnį sluoksnį, arba nusės ant salelės paviršiaus ir formuos naują sluoksnį. Antru atveju atomai gali difunduoti link



kitų ant salelės esančių atomų ir kurti naują salelę, taip kurdami trimates struktūras ir demonstruodami kinetinį trimatį salelių augimą. Jei, vis dėl to, atomai nuo salelės viršaus nušoka pakankamai greitai ir ant jos nebūna daugiau nei vieno atomo vienu metu, vyrauja dvimatis dangos augimas, kai sluoksniai pildomas vienas po kito [2].

### 1.1.3. Mikrostruktūra

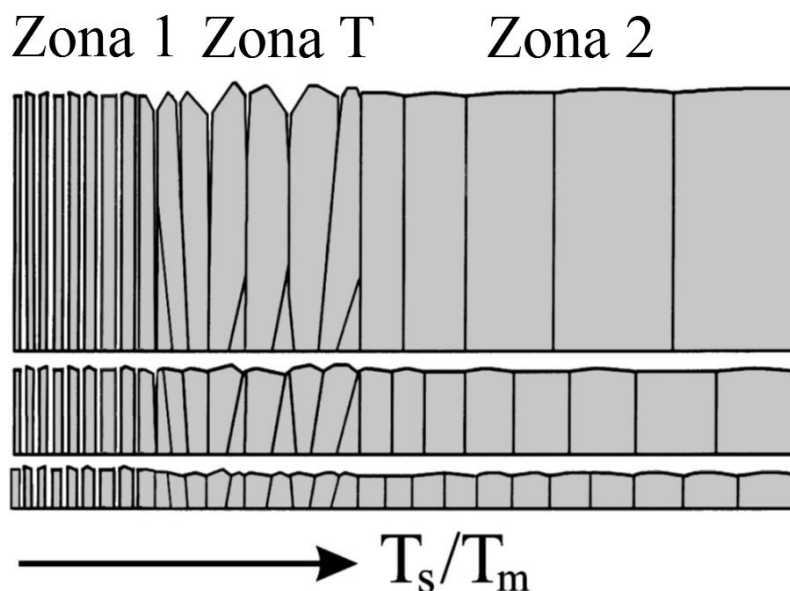
Augančios dangos mikrostruktūros kitimą kontroliuoja keletas pagrindinių procesų pavaizduotų 7 paveiksle. Šie procesai pagal tvarką yra: nukleacija, kai nusėdę atomai jungiasi į poras, salelių augimas, kai prie salelių prisijungia pavieniai adsorbuoti atomai, salelių prilipimas ir koalescencija, kai salelės jungiasi tarpusavyje ir formuoja didesnes saleles. Taip pat, kanalėlių ir polikristalinių salelių formavimasis, kai salelės auga iš keleto kristalitų ir tarp šių salelių susidaro kanalėliai, dėl jų dydžio. Bei, paskutinis, kai salelės apsjungia į ištisą sluoksnį ir vyksta šio sluoksnio augimas. Esant dideliems difuzijos greičiams sluoksnis storėja vietinės individualių grudelių epitaksijos dėka. Kristalitai gali jungtis augimo metu arba jam jau pasibaigus.



7 pav. Pagrindiniai mikrostruktūrą kontroliuojantys augimo procesai [3]

Kristalitų jungimasis į didesnius kristalitus vykstant koalescencijai dar vadinamas dangos šiurkštėjimu (angl. *coarsening*). Stipri šiurkštėjimo proceso sąlygojama jėga daro įtaką kristalitų ribų judėjimui ir paviršinių atomų difuzijai. Jei egzistuoja salelė sudaryta iš atomų su mažesne energija tenkančia vienam jos atomui, ši salelė sunaikins kitas saleles, kurių energija tenkanti vienam atomui yra didesnė. Monokristalinių salelių formavimasis mažina bendrą paviršiaus energiją, dėl to vyksta šiurkštėjimo procesas. Koalescencijos metu vykstantis šiurkštėjimas yra aktyviausias ir pagrindinis procesas, keičiantis kristalitus link tam tikrų, energetiškai palankiausių, kristalinių orientacijų. Dažniausiai pasitaikantis atvejis yra salelės su tankiausia kristaline plokštuma. Šiurkštėjimo procesas gali vykti greitai, priklausomai nuo salelių dydžio ir temperatūros proceso metu, dėl sparčios paviršinės difuzijos arba kristalo lydymosi, kur kristalas po to susikristalizuoja. Pagrindinės proceso priežastys yra paviršiaus energija, kuri atsipalaiduoja

koalescencijos metu, ir kristalitų ribų energija. Dėl sparčios koalescencijos ant pagrindo atlaisvinamas plotelis, kuriame gali iš naujo vykti nukleacijos procesas. Šiurkštėjimas vyksta lėčiau jei sąlygos netenkinamos, kai salelės labai didelės ar temperatūra pakankamai maža. Tada šiurkštėjimas vyks per kristalitų ribas ir jų judėjimą. Susiliejančių kristalitų koalescencijos metu vykstantis šiurkštėjimas vyksta kol kristalitų dydis neperžengia ribos. Kai kristalitai pasidaro per dideli ir ribos tarp jų tampa nemobilios šiurkštėjimas sustoja.



**8 pav.** Struktūrinio zoninio modelio iliustracinis atvaizdavimas [3]

Mikrostruktūros kitimą galima apibūdinti struktūriniu zoniniu modeliu kuris pavaizduotas 8 paveiksle. Jis padalintas į tris zonas pagal temperatūros santykį. Šios temperatūros yra nusodinimo temperatūra ( $T_s$ ) ir medžiagos lydymosi temperatūra ( $T_m$ ), o jų santykis ( $T_s/T_m$ ) naudojamas kaip skyriklis zonoms. Pirmą, iš trijų zonų, vaizduoja atvejį, kai nusodinimo temperatūros yra labai žemos ir į nusėdusių atomų difuziją galima nekreipti dėmesio. Pereinamojoje zonoje, vadinamoje zona T, svarbi tampa paviršinė difuzija. Toliau už T zonos esančioje, antrojoje zonoje temperatūros siekia pakankamai, kad ir tūrinė, ir paviršinė difuzijos būtų veiksmingos. Ribos tarp trijų zonų nėra griežtai nubrėžtos ir perėjimai iš vienos zonos į kitą gali vykti dideliu  $T_s/T_m$  intervalu, pamažu keičiantis struktūrai.

Dangai augant pirmojoje zonoje, jos struktūra vystosi sudaryta iš gyslelių ir porėta. Įsisotinimo nukleacijos tankis apsprendžia pradinį kristalitų dydį. Dažniausiai čia augančios kolonos nėra monokristalinės, bet sudarytos iš mažesnio dydžio lygių kristalitų arba kolonos visiškai amorfinės. Kadangi paviršiaus šiurkštumas vystosi fraktalinės geometrijos pagrindu, kur šešėliavimo, ribojamos paviršinės difuzijos ir kampinio nusodinimo srauto pasiskirstymo pagalba, gaunama porėta dangos struktūra.

Zonoje T, kur augimo temperatūra yra aukštesnė, šiurkštėjimas pasireiškia mažų salelių koalescencijos metu. Šių salelių paviršiaus ploto santykis su salelių tūriu yra didelis. Vientisose dangose kristalitų ribos pasidaro nemobilios. Vykstant šiurkštėjimui kristalitų augimo kryptis nėra pastovi, augimas vyksta beveik atsitiktine kryptimi. Dėl to susidaro danga kuri yra mažai struktūrizuota ir turi didelį kristalitų dydžio pasiskirstymą. Tai yra svarbu, nes tolimesniems kristalitų tarpusavio sąveikos procesams vykstant, jų dydis ir orientacija apspręs jų elgesį.

Nusėdusių dangos atomų difuzija, šioje augimo zonoje, reikšmingai veikia vietinį, epitaksinį, individualių kristalitų augimą. Dangos struktūra, šiuo atveju, yra aiškiai išreikšta, kolonos vystosi kaip ilgi pavieniai kristalitai.

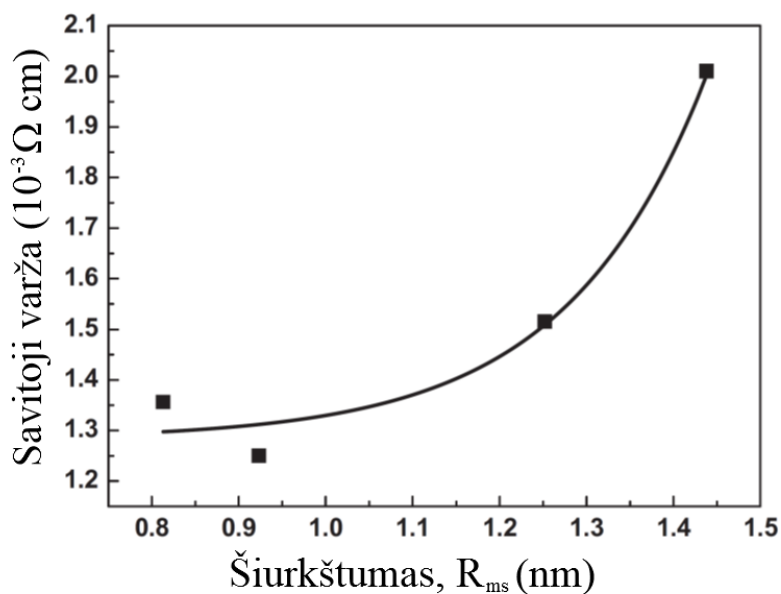
Antrojoje zonoje, kur santykis  $T_s/T_m$  dar aukštesnis, reikšminga pasidaro ir tūrinė difuzija. Kristalitų ribos čia migruoja jau nebe tik koalescencijos metu, bet ir vykstant sluoksnio storėjimui. Koalescencijos metu vykstantis kristalitų augimo orientacijos pasirinkimas daug stipresnis, nes vyksta kristalitų ribų mažėjimas, bei sąveikos ir paviršiaus energijų mažėjimai. Didesni kristalitai, kurie turi mažą sąveikos ir paviršiaus energiją, auga mažų, prastai orientuotų, kristalitų sąskaita. Stipriai struktūrizuotų kristalitų buvimas gali trikdyti įprastą kristalitų augimą [3].

## **1.2. Paviršiaus savybių priklausomybės nuo paviršiaus šiurkštumo**

Plonų dangų savybės yra labai stipriai veikiamos dangos struktūros ir morfologijos. Žinios, apie dangos struktūros kitimą augimo metu, jos augimo sąlygas ir priežastis, yra labai svarbios plonų dangų savybių tobulinimui. Žinant, kokie atominiai procesai vyksta augimo metu ir kaip jie veikia struktūrą, galima kurti naujus kontrolės ir technikos metodus ir net naujas medžiagas.

Struktūrą bent iš dalies gali atspindėti paviršiaus šiurkštumas, kuris dažniausiai yra eksperimentiškai nustatinėjamas, matuojamas prietaisais nagrinėjant realų paviršių. Paviršiaus šiurkštumo matavimai ar, bendru atveju, šiurkštumo nustatymas padeda išsiaiškinti paviršiaus struktūros pakitimus augimo metu, paviršiaus ar kitokias fizikines dangos savybes.

Mokslininkų grupė [4], tirianti kokia yra paviršiaus šiurkštumo įtaka dangų elektrinėms ir optinėms savybėms, užaugino indžio alavo oksido dangą. Bandiniai buvo auginti skirtingame argono dujų slėgyje ir tiriamos jų savybės. Nustačius, kad paruošti bandiniai yra amorfiniai, buvo tyrinėta bandinių paviršiaus struktūra. Buvo išmatuotas dangų šiurkštumas bei jų varža ir prieita prie išvados, kad indžio alavo oksido dangos varža yra tiesiogiai priklausoma nuo paviršiaus šiurkštumo. Ši priklausomybė pasireiškia dėl to, kad šiurkščioje dangoje judantys elektronai yra sklaidomi, sumažėja jų laisvojo lėkio kelias, tuo pačiu padidėjant dangos varžai. Dangos savitosios varžos priklausomybė nuo paviršiaus šiurkštumo pavaizduota 9 paveiksle. Remiantis šiais rezultatais galima daryti prielaidą, kad didelę įtaką indžio alavo oksido dangų elektrinėms savybėms daro ir dangos paviršiaus šiurkštumas.

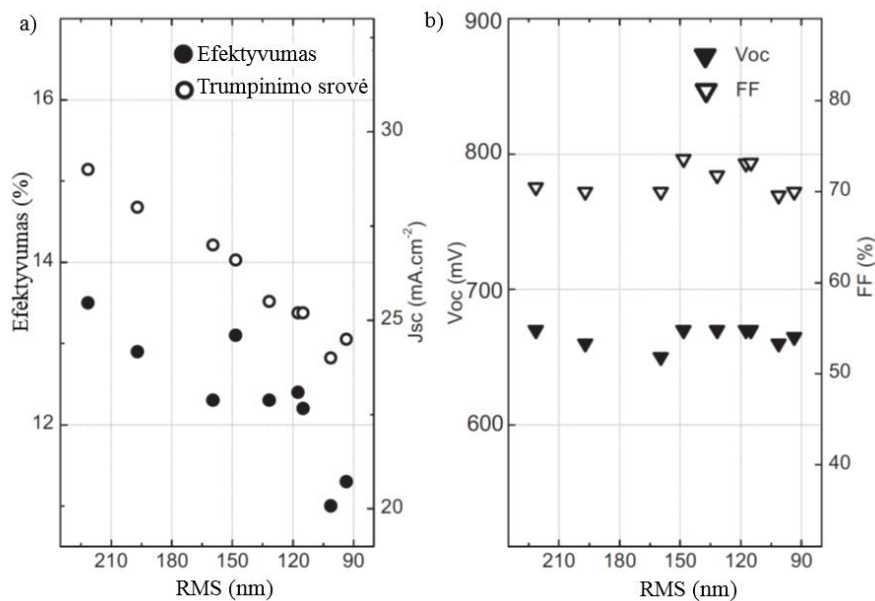


**9 pav.** Amorfinės dangos savitosios varžos kreivė, kintant paviršiaus šiurkštumui [4]

Tyrėjai [5] epitaksinio augimo būdų gavo įvairių feromagnetinių struktūrų. Buvo užauginta feromagnetinių darinių: įprastiniai elektrodai ir egzotiškesni, neseniai pasirodę, Heuslerio (vok. *Heusler*) lydiniai. Auginimui buvo pasirinkti silicio padėklai su papildomais sluoksniais. Šio tyrimo svarbiausias tikslas buvo epitaksiškai užauginti feromagnetines, kontroliuojamo paviršiaus šiurkštumo, elektrodų struktūras. Tunelinė magnetovarža (angl. *tunneling magnetoresistance*) labai stipriai priklauso nuo dangos struktūros magnetinėse tunelinėse jungtyse (angl. *magnetic tunnel junction*), todėl paviršiaus šiurkštumas buvo labai svarbus faktorius. Užaugintos skirtingos struktūros ir kristalinės orientacijos epitaksinės dangos, iš geležies, kobalto, nikelio ir jų lydinių, bei Heuslerio lydinių, ištirtos. Nustatytos dangų kristalinės orientacijos, paviršiaus šiurkštumai ir sudėtys. Sidabro arba vario ir sidabro sluoksniai buvo naudoti kaip buferiniai. Auginimas skirtingose temperatūrose buvo naudojamas norint surasti optimalias sąlygas, kur magnetinės tunelinės jungtys dirbtų tinkamai. Galutinai nustatyta, kad gaunamos dangos kurių šiurkštumas yra per didelis magnetinių tunelinių jungčių darbui, bet po atkaitinimo, šiurkštumui sumažėjus, pasiekiamos jungčių darbui tinkamos sąlygos.

Plonų dangų fotovoltinių charakteristikų priklausomybę nuo paviršiaus šiurkštumo tyrė Z. Jehl ir kolegos [6]. Buvo tirtos plonos indžio, diselenido, vario ir galio dangos. Ištyrus paviršiaus šiurkštumo ir atspindžio charakteristikas nustatyta, kad dangų optinės savybės kinta priklausomai nuo jų paviršiaus šiurkštumo. Lygiausias iš tiktų paviršių, su paviršiaus šiurkštumu  $RMS = 90 \text{ nm}$ , pasižymėjo didesniu atspindžiu. Nagrinėjant jį su šiurkščiu paviršiumi, kurio šiurkštumas siekė  $RMS = 230 \text{ nm}$ , nustatytas vidutinis 25% didesnis atspindys lygaus paviršiaus atveju, kai nagrinėjamos dangos be kitų papildomų sluoksnių sistemoje. Pridėjus papildomus sluoksnius skirtumas sumažėja iki 9%. Be optinių kito ir elektrinės fotovoltinės savybės. Saulės elemento charakteristikų, tokių kaip trumpinimo įtampa, trumpinimo srovė, užpildymo faktorius ar efektyvumas, priklausomybė nuo paviršiaus šiurkštumo pavaizduota 10 paveiksle. Panagrinėjus duomenis, iš užpildymo faktoriaus ir trumpinimo įtampos stabilių reikšmių kintant šiurkštumui, galima daryti išvadas, kad sistemos nepraranda veikimo kokybės, keičiantis šiurkštumui. Pagal trumpinimo srovės ir efektyvumo duomenis matoma, kad abu dydžiai mažėja mažėjant paviršiaus

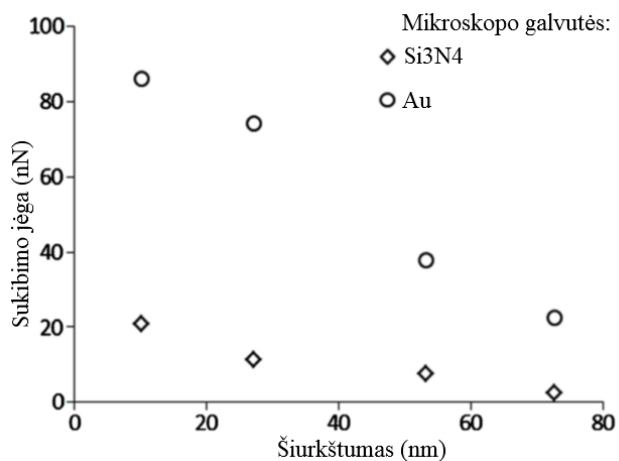
šiurkštumui. Galutinės mokslininkų išvados teigė, kad paviršiaus šiurkštumas dviejų dangų riboje yra labai svarbus dydis, norint užtikrinti aukščiausią saulės elementų efektyvumą.



**10 pav.** Fotovoltinės saulės elementų priklausomybės nuo vidutinio kvadratinio paviršiaus šiurkštumo: a) trumpinimo srovės ( $J_{sc}$ ) ir efektyvumo; b) užpildymo faktoriaus (FF) ir atvirosios grandinės įtamos ( $V_{oc}$ ) [6]

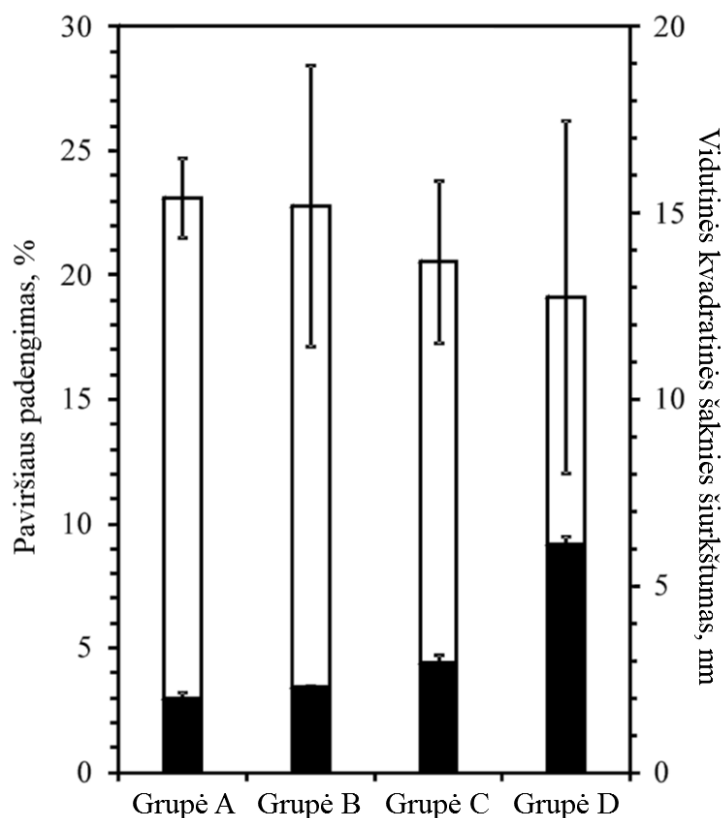
Grupė mokslininkų [7] tyrė labai plonų varinių dangų varžos priklausomybę nuo paviršiaus šiurkštumo. Epitaksiškai užauginus įvairaus storio vario dangas buvo išmatuotos jų varžos van der Pau metodu. Matavimai atlikti dviejuose temperatūrų diapazonuose: tarp skysto azoto temperatūros (79 K) ir kambario temperatūros, bei tarp skysto helio temperatūros (5 K) ir kambario temperatūros. Šiems dviem temperatūros diapazonams parinkti bandiniai kurių storiai svyravo nuo 4 iki 100 nm pirmam temperatūros diapazonui ir nuo 5 iki 500 nm antrajam. Tyrimu stengtasi paaiškinti, kodėl žemose temperatūrose ( $>30$  K) labai plonos dangos ( $>20$  nm) susiduria su didele savitosios varžos priklausomybe nuo paviršiaus šiurkštumo. Mokslininkai sukūrė matematinį modelį kuriame atsižvelgta į paviršiaus šiurkštumo parametrus, tokius kaip koreliacijos atstumas ir vidutinis kvadratinis šiurkštumas. Pritaikant modelį pademonstruota, kad išmatuotos savitosios varžos reikšmės priklauso nuo dangos šiurkštumą aprašančių parametrų ir jos storio.

F. Rusu su grupe mokslininku [8] tyrė kokia yra paviršinių efektų įtaka sukibimui mikroelektromechaninėse sistemose. Paruoštos mikroelektromechaninėse sistemose dažnai naudojamų medžiagų dangos iš platinos, aukso, aliuminio, silicio ir polikristalinio silicio. Tarp grupės darytų tyrimų buvo ir su paviršiaus šiurkštumu susijusių. Tirta sukibimo jėgos priklausomybė nuo dangos šiurkštumo. Tai buvo atliekama pasitelkiant atominių jėgų mikroskopą, matuojant, kokia jėga paviršius traukia mikroskopo galvutę, kokia sukibimo jėga pasiekama. Tyrimais nustatyta, kad dangos paviršiaus šiurkštumas stipriai veikia sukibimą tarp mikroskopo galvutės ir tiriamojo paviršiaus. Matoma, kad mažėjantis paviršiaus šiurkštumas teigiamai veikia sukibimą, mažesnės paviršiaus šiurkštumo vertės rodo stipresnį sukibimą tarp mikroskopo ir paviršiaus. Rezultatai (žr. 11 pav.) dar karta patvirtinti, naudojant kitą mikroskopo galvutę, su skaitiniais pokyčiais dėl pasikeitusios paviršiaus laisvosios energijos.



**11 pav.** Sukibimo jėgos su mikroskopo galvutėmis priklausomybės nuo paviršiaus šiurkštumo aukso dangoms [8]

Dar vienas prilipimo savybių tyrimas atliktas kitos mokslininkų grupės [9]. Jie tyrė kaip paviršiaus šiurkštumas veikia mikrobu prilipimą prie biomediciniu titano dangų. Auginant dangas skirtingais auginimo greičiais paruoštos įvairaus storio ir paviršiaus šiurkštumo dangos. Nustatytas tiriamųjų paviršių padengimas bakterijomis ir išmatuoti paviršiaus šiurkštumo parametrai, tokie kaip vidutinis kvadratinis šiurkštumas. Jis bandiniams svyravo nuo 2 iki 6,13 nm. Šiuo atveju nustatyta, kad mažėjantis paviršiaus šiurkštumas neigiamai veikia bakterijų prilipimą, jos sunkiau prilimpa prie lygaus paviršiaus. Kita vertus, kaip pavaizduota 12 paveiksle, duomenys nėra labai patikimi dėl didelių standartinių paklaidų.



**12 pav.** 4 bandomųjų grupių paviršiaus šiurkštumo ir paviršiaus padengimo bakterijomis palyginimas [9]

Ivatsubo su kolegomis [10] ištyrė geležies dangų, augintų skirtingose argono bombardavimo įtampose, paviršiaus struktūrinius skirtumus. Šiuos nedidelius struktūrinius skirtumus įvertino paviršiaus šiurkštumu. Galutinai prieita prie išvados, kad paviršiaus šiurkštumas stipriai veikia geležies dangų augimą ir jų magnetines savybes.

Kaip matyti iš šių, bei kitų, fizikinių dydžių priklausomumo nuo paviršiaus šiurkštumo pavyzdžių, paviršiaus struktūra ir ją apibūdinantis dydis paviršiaus šiurkštumas yra labai svarbus daugumoje su dangomis dirbančių technologinių sričių. Galimybė numatyti būsimas dangų savybes bei struktūrą palengvina mokslininkų darbą. Kuriant naujas, ar jau egzistuojančias su naujomis savybėmis, medžiagas. Temperatūra auginimo proceso metu yra labai svarbi dangų struktūros formavime, todėl labai svarbu tinkamai atvaizduoti temperatūros įtaką dangos augimui ir jos galutinei struktūrai, eksperimentiniais ar modeliavimo metodais.

### 1.3. Modeliavimas

Galingas įrankis, padedantis kontroliuoti ir numatyti fizikines, mechanines ir chemines medžiagų savybes, yra augimo procesų modeliai ir modeliavimas. Matematinų modelių, aprašančių plonų dangų augimą, yra daug, kurie naudoja skirtingas fizikines išraiškas ir prielaidas, bei į augimą žiūri skirtingais aspektais.

Dangos augimo apibūdinimui dažnai naudojamas sluoksnio aukštis, kaip parametras apibūdinti dangą. Šis aukštis modeliuose dažnai aprašomas kaip laiko ir koordinatės funkcija ir iš jo galima išvesti vidutinį aukštį, kaip laiko funkciją. Panaudojant šiuos parametrus galima apskaičiuoti paviršiaus šiurkštumą, kuris, taip pat, būtų funkcija nuo laiko.

Nusodintiems atomams paviršiuje pasirinkti poziciją padeda difuzija. Augimo metu vietos pasirinkimas nėra pilnai atsitiktinis, atomams patogiau būti ten kur energija arba aukštis yra mažiausi. Atomų judėjimą apsprendžianti difuzija turi sau svarbių parametrų, iš kurių modeliavime yra dažnai naudojami difuzijos ilgiai. Šie atstumai parodo kokį kelią gali nukeliauti atomas difunduodamas paviršiuje.

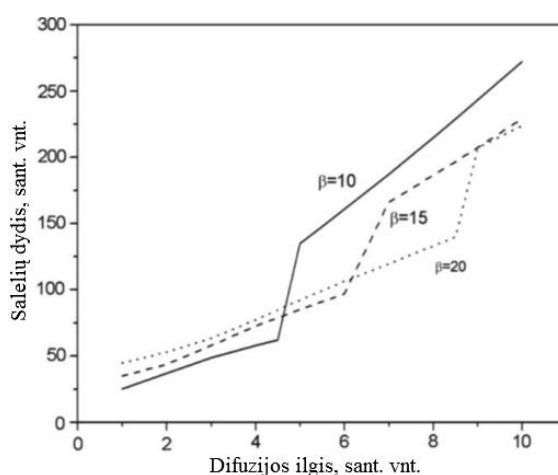
Diskretieji matematiniai modeliai gali būti skaičiuojami ir tyrinėjami kompiuterinio modeliavimo ir skaitiniais metodais. Matematiniai modeliai padeda supaprastinti realų augimą ir leidžia atvaizduoti kaip augimas vyksta tam tikromis užduotomis sąlygomis. Išskiriami keletas pagrindinių dangos augimo modelių, tokių kaip balistinis, kietas kūnas ant kieto kūno ir atsitiktinis. [11].

Epitaksinis dangos augimas gali būti apibūdinamas skirtingais modeliais. Matematiniai modeliai gali būti įvairūs, tokie kaip: salelių dinamikos, atominis, salelių ribų kinetikos ar kontinuumo. Modeliavimas pasitelkiant salelių dinamika paviršių apibūdina anizotropiškai, tolygų išilgai augimo krypties, bet su atominiais struktūros skirtumais augimo kryptimi. Monte Karlo metodas yra vienas iš paprasčiausių atominių modelių, juo simuliuojami atomų šuoliai ant padėklo paviršiaus. Dažnis, kuriuo šie šuoliai vyksta, paklūsta Arenijaus lygties formai  $e^{-E/kT}$ , kur E atitinką energijos barjerą, kurį atomas turi peršokti judėdamas iš pradinės pozicijos į galinę. Modeliuojant kontinuumo lygtimis yra naudojami priartėjimai tolydžiomis aukščio funkcijomis apibūdinti augantį paviršių. Niutono judėjimo ant energinio paviršiaus lygtys yra naudojamos modeliuojant molekulinės dinamikos principais. Tūriniai parametrai, be pozicinės priklausomybės, naudojami apibūdinant greičio lygtis [12].

Monte Karlo metodu epitaksinį augimą apibūdina Fornari ir kolegos [13]. Tuo pačiu metodu, naudojant trikampe pagrindo gardelę, fraktališkai modeliuoja Helin ir kiti [14]. Sidabro augimą Monte Karlo metodu su papildomomis augimo sąlygomis pateikia Evansas [15]. Ciklinį atominių sluoksnių nusodinimo augimą apibūdina Puurunenas [16]. Epitaksinį augimą fazės lauko modeliu aprašo Yangas ir kiti [17]. Keletu skirtingu modeliu vienos dimensijos augimą modeliuoja Kocánas [18]. Gardelės kinetinį Monte Karlo modelį anizotropiniam augimui apibūdinti naudoja Gómezas ir kiti [19]. Rahmanas nagrinėja kinetinį Monte Karlo metodą su klasterių difuzija [20]. Kinetinėmis lygtimis ir plokštuminėmis difuzijos zonomis modeliuoja Politi [21].

#### 1.4. Paviršiaus šiurkštumo modeliavimas

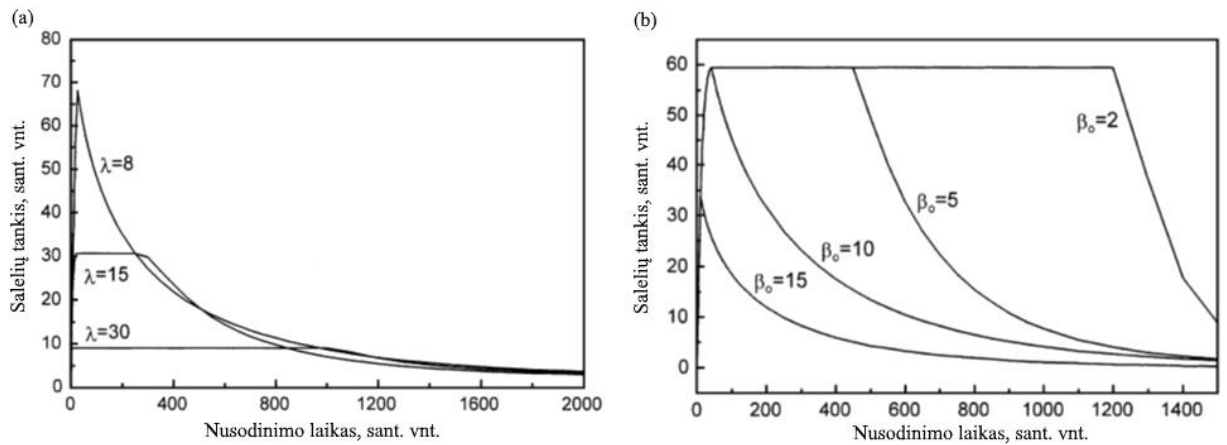
Paviršiaus struktūros kitimą ir su juo susijusi paviršiaus šiurkštumą modeliavo A. Galdikas [22]. Naudojantis matematinio modeliu gauti rezultatai apie paviršiaus šiurkštumo kitimą ir klasterių dydžio kitimą (žr. 13 pav.). Nustatyta, kad klasterių dydis auga, didėjant difuzijos ilgiui.



13 pav. Klasterių dydžio kitimas nuo difuzijos ilgio [22]

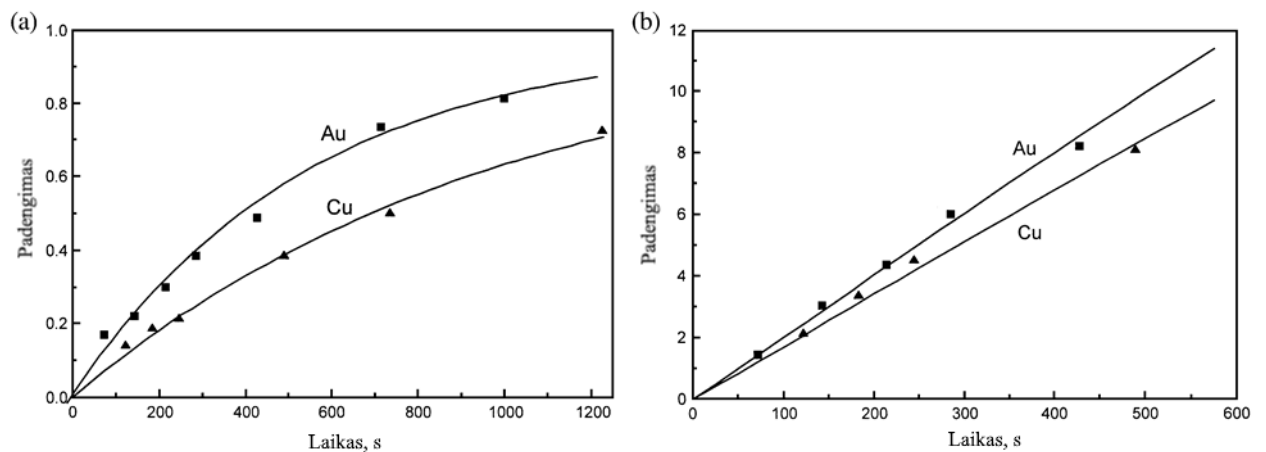
Kitame tyrime [23] A. Galdikas nustatė salelių tankio kitimą nuo nusodinimo laiko (žr. 14 pav.). Čia matomas salelių tankio kitimas laike, labai staigus kilimas pradinėse augimo stadijose pereinantis į tolydų mažėjimą, mažoms atomų difuzijos ilgio reikšmėms. Didesnėms atomų difuzijos ilgio reikšmėms salelių tankio didėjimas nėra toks žymus, tankis nepasiekia didelių reikšmių. Salelių difuzijos reikšmėms salelių tankis kinta panašiai, čia juda taškas nuo kurio prasideda tankio mažėjimas (žr. 14.b pav.)





14 pav. Salelių tankio priklausomybė nuo nusodinimo laiko skirtingoms (a) atomų difuzijos atstumo reikšmėms; (b) salelių difuzijos atstumo reikšmėms [23]

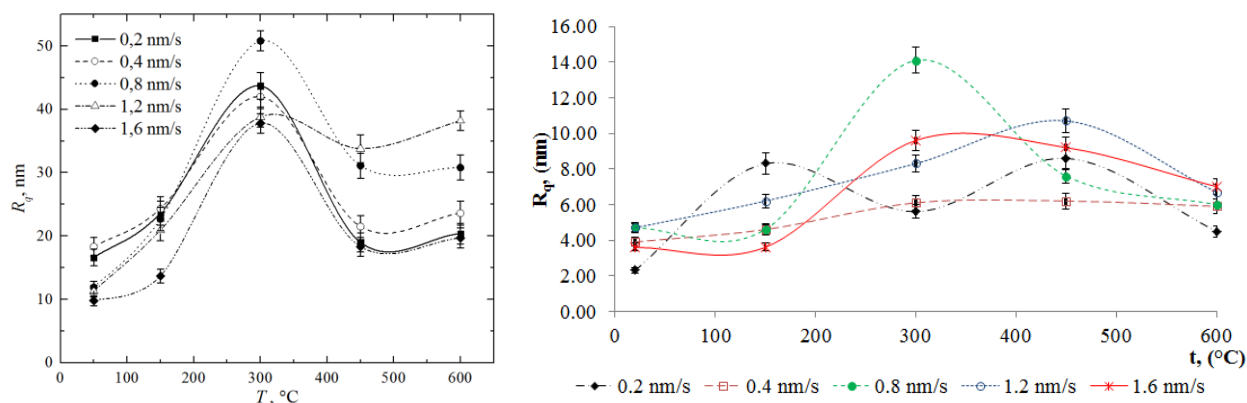
Taip pat tame pačiame darbe nustatytos pirmo sluoksnio padengimo bei salelių didumo priklausomybės nuo laiko (žr. 15 pav.). Nustatytas skirtingas padengimo didėjimas aukso ir vario augimui, bei salelių dydžio augimas laikui bėgant.



15 pav. Pirmo sluoksnio (a) padengimo priklausomybės nuo laiko ir (b) vidutinio klasterių dydžio priklausomybės nuo laiko aukso ir vario [23]

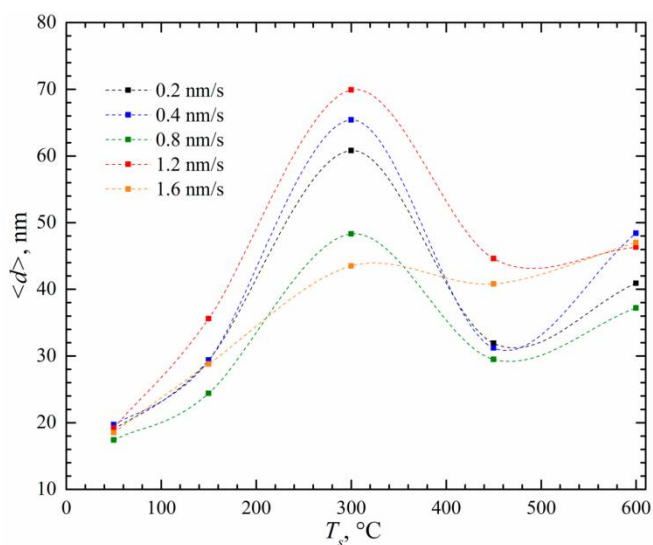
### 1.5. Eksperimentinės paviršiaus šiurkštumo priklausomybės nuo temperatūros

Kaip galima tikėtis, paviršiaus šiurkštumo kitimas keičiantis auginimo temperatūrai matuojamas eksperimentiškai. Sriubas [24, 25] nustatė paviršiaus šiurkštumo kitimą priklausomai nuo padėklo, ant kurio auginama, temperatūros samariu legiruoto cerio oksido dangoms ant  $\text{SiO}_2$  padėklo (žr. 16 pav.).



**16 pav.** Paviršiaus šiurkštumo ( $R_q$ ) priklausomybės nuo temperatūros, kurioje buvo auginama, 5 skirtingiems nusodinimo greičiams, plonųjų samariu legiruotu cerio oksidu keramikų sluoksniams [24, 25]

Dangos struktūra be paviršiaus šiurkštumo gali būti apibūdinama ir kitais paviršiniaisiais parametrais. Kristalitų dydis yra vienas iš parametru, galinčių pasakyti, kas vyksta paviršiuje ir bent iš dalies apibūdinti kokia yra dangos vidinė struktūra. Kristalitų dydis taip pat kinta netiesiškai, kintant auginimo sąlygoms, tokioms kaip temperatūra. Kitimą išmatavo Sriubas [26], tirdamas skandžiu ir aliuminiu legiruotas cirkonio keramikas (žr. 17 pav.).



**17 pav.** Kristalitų dydžio priklausomybės nuo auginimo temperatūros skirtingiems nusodinimo greičiams [26]

Daugybė netiesinio paviršiaus struktūros kitimo nuo atomų energijos pavyzdžių užduoda daug klausimų apie struktūrų augimą. Norint išsiaiškinti, koku būdu pasiekiamos tokios reikšmės, galima pasitelkti ne tik eksperimentinius, bet ir modeliavimo rezultatus.

## 2. Medžiagos ir tyrimų metodai

Paviršiaus mikrostruktūros ypatybes galima nagrinėti ir realiai neturint paties bandinio. Tam pasitelkiamas modeliavimas. Paviršiaus augimą ir iš to atsirandančias savybes galima modeliuoti skirtingais būdais ir priemonėmis. Šiame darbe pasirinktas toliau aprašytas matematinis paviršiaus augimo modelis. Atsižvelgiant į tai, kad modelis yra paremtas diferencialinių lygčių sistema ir bus skaičiuojamas pasitelkiant kompiuterį, diferencialinėms lygtims spręsti pasitelktas matematinis metodas pateiktas 2.2. poskyryje.

### 2.1. Matematinis modelio aprašymas

Matematinis nanostruktūrų augimo ant paviršiaus kinetikos modelis sukurtas A. Galdiko [23] pasirinktas kaip šio darbo pagrindas.

Link paviršiaus judant atomams dalis jų nusėda ant paviršiaus, ta dalis yra proporcinga paviršiaus plotui kuris yra atviras ir yra lygi  $i_0(1 - \varphi^{(1)})$ , kur  $\varphi^{(1)} = S_{cov}/S$  yra pirmo sluoksnio padengimas ( $0 \leq \varphi^{(1)} \leq 1$ ), o  $S_{cov}$  yra jau padengtas plotas ir  $S$  yra paviršiaus plotas. Santykinis atomų atkeliaujančių į paviršių srautas ( $s^{-1}$ ) lygus  $i_0 = I_0/C$ , kur  $I_0$  yra atomų atkeliaujančių į paviršių srautas ( $cm^{-2}s^{-1}$ ) ir  $C$  yra paviršinių atomų koncentracija. Prilipimo koeficientas  $\alpha_{A0}$  aprašo tikimybę atomui prilipti ir pasilikti adsorbuotoje būsenoje ant padėklo. Pirmo monosluoksnio padengimo kitimą nuo laiko apibūdina lygtis:

$$\frac{d\varphi^{(1)}}{dt} = i_0\alpha_{A0}(1 - \varphi^{(1)}). \quad (2.1)$$

Norint įvertinti augančios dangos morfologiją kai pasireiškia sluoksnis-plius-sala būseną, pirmo sluoksnio padengimas apibūdinamas kaip padengimas adsorbuotais atomais  $\varphi_S^{(1)}$  ir salelėmis  $\varphi_C^{(1)}$  (kai du ar daugiau atomų susilieja). Tada bendras pirmo sluoksnio padengimas lygus  $\varphi_S^{(1)} + \varphi_C^{(1)} = \varphi^{(1)}$ . Padengimas salelėmis didėja dviem atvejais: 1) kai prie ant paviršiuje jau esančio atomo prilimpa kitas atkeliaujantis atomas su prilipimo tikimybe  $\alpha_{AA}$  ir/arba 2) kai prie paviršiuje esančios salos krašto prilimpa atkeliaujantis atomas su prilipimo tikimybe  $\alpha_{AC}$ .

Atomai kurie adsorbuojasi ant paviršiaus gali judėti, atstumą apibrėžia difuzijos spindulys  $\tilde{\lambda}$ , kuris savo atžvilgiu daro įtaką salelių augimui. Kai atomas į paviršių nukrenta nuo salos krašto atstumu mažesniu nei difuzijos spindulys, jis prisijungs prie šios salos. Plotas aplink  $N$  salų išreiškiamas taip:

$$S_C^* = N \left( \pi(r + \tilde{\lambda})^2 - \pi r^2 \right) = N\pi\tilde{\lambda}^2 + 2\pi\tilde{\lambda}\sqrt{NS_C/\pi}, \quad (2.2)$$

čia  $r = \sqrt{S_{C,1}/\pi}$  yra salos spindulys (darant prielaidą, kad salų forma yra apskritimas), o  $S_C = NS_{C,1}$  yra salomis padengtas paviršiaus plotas.

Lygtį padalinus iš viso paviršiaus ploto  $S = N_a\pi a^2$  (kur  $N_a$  yra ant gryno padėklo paviršiaus esančių atomų skaičius, o  $a$  apytiksliai lygu gardelės parametrai) gaunamas bedimensis plotas  $\varphi_C^* = S_C^*/S$  kuris gali būti išreikštas taip:

$$\varphi_C^* = \left( N\pi\tilde{\lambda}^2 + 2\pi\tilde{\lambda}\sqrt{NS_C/\pi} \right) \frac{1}{N_a\pi a^2} = n\lambda^2 + 2\lambda\sqrt{n\varphi_C}, \quad (2.3)$$

čia  $n = N/N_a$  yra santykinis salų tankis, o  $\lambda = \tilde{\lambda}/a$  yra  $a$  vienetais išreikštas adsorbuojamų atomų difuzijos spindulys. Labai panašiai gaunamas ir charakteringasis plotas aplink pavienius atomus, adsorbuotus ant paviršiaus, kuris įgauna tokią formą:

$$\varphi_S^* = n_S \lambda^2 + 2\lambda \sqrt{n_S \varphi_S}, \quad (2.4)$$

čia  $n_S$  yra santykinis ant paviršiaus adsorbuotų pavienių atomų tankis paviršiuje [23], kuris yra išreiškiamas kaip  $n_S = \varphi_S S_a$ , čia  $S_a$  yra supaprastintas atomo plotas ant paviršiaus.

Atomai kurie atkeliauja į  $\varphi_S$  ir  $\varphi_S^*$  prilimpa prie jau esančių ir suformuoja saleles su tikimybe  $\alpha_{AA}$ . Tai gali būti aprašyta lygtimi:  $nucl = \alpha_{AA} i_0 (\varphi_S + \varphi_S^*)$ . Tada salų skaičius didėja ir laikui bėgant gali būti išreikštas kaip  $dN_c/dt = nucl/2\varphi_a$ , kur  $\varphi_a$  yra bedimensis vieno atomo plotas. Jis padaugintas iš dviejų nes du atomai sulipdami kartu suformuoja vieną salą. Kadangi  $\varphi_a = S_a/S$  bei  $N_a = S/S_a$ , kur  $S_a$  yra plotas ant paviršiaus kurį užima vienas atomas, tada  $N_a = 1/\varphi_a$ , iš kurio  $dN_c/dt = (nucl/2)N_a$  ir  $(dn/dt)_n = 0,5\alpha_{AA}i_0(\varphi_S + \varphi_S^*)$ .

Iki šiol augimas nagrinėtas neįtraukiant koalescencijos efekto. Koalescenciją galima įvesti darant prielaidą, kad salelės jungsis tarpusavyje, kai bus tenkinama sąlyga  $\varphi_C + \varphi_\beta \geq 1$ , kur  $\varphi_\beta$  yra dimensijos neturintis plotas apie saleles. Šio skritulio ploto spindulys  $\beta$  atspindi nagrinėjamos salos judrumą ant dangos paviršiaus. Plotas  $\varphi_\beta$  randamas tokiu pat principu, kaip anksčiau nagrinėti  $\varphi_S^*$  ar  $\varphi_C^*$ , ir atrodo taip:

$$\varphi_\beta = n\beta^2 + 2\beta\sqrt{n\varphi_C}. \quad (2.5)$$

Sąlyga aprašanti koalescenciją yra  $(dn/dt)_C = \alpha_{col} C_{col} (1 - \varphi_C - \varphi_\beta)$ , kur  $C_{col}$  yra normalizacijos daugiklis, galintis įgyti vieną iš dviejų verčių pagal formulę:

$$C_{col} = \begin{cases} 0, & \varphi_C + \varphi_\beta < 1 \\ 1, & \varphi_C + \varphi_\beta \geq 1 \end{cases}, \quad (2.6)$$

ir  $\alpha_{col}$  yra koalescencijos dažninė tikimybė su matavimo vienetais  $s^{-1}$ .

Vykstant atomų nusodinimui padengtas paviršiaus plotas didėja  $(\varphi_S + \varphi_C) \rightarrow 1$ , tuo pačiu mažėja plotai  $\varphi_S^*$  ir  $\varphi_C^*$ . Norint, kad  $\varphi_L \leq 1$  sąlyga būtų išpildoma, kur  $\varphi_L = \varphi_S + a(t)\varphi_S^* + \varphi_C + a(t)\varphi_C^*$ , į lygtį įvedamas normalizacijos daugiklis  $a(t)$ . Jis būna lygus vienam, kol pasiekama riba  $\varphi_L < 1$  ir  $\varphi_L$  perkopus 1 užrašoma taip:

$$a(t) = \begin{cases} 1, & \varphi_L < 1 \\ \frac{1 - \varphi_S(t) - \varphi_C(t)}{\varphi_S^*(t) + \varphi_C^*(t)}, & \varphi_L \geq 1 \end{cases}. \quad (2.7)$$

Iš to seka, kad galutinė salelių tankio kinetikos lygtis įgauną tokį pavidalą:

$$\frac{dn}{dt} = \frac{1}{2}\alpha_{AA}i_0(\varphi_S + a(t)\varphi_S^*) + \alpha_{col}C_{col}(1 - \varphi_C - \varphi_\beta), \quad (2.8)$$

ir galutinė lygtis, aprašanti padengimą pavieniais atomais, atrodo taip:

$$\frac{d\varphi_S}{dt} = \alpha_{A0}i_0(1 - \varphi_L) + \alpha_{AA}i_0(\varphi_S + a(t)\varphi_S^*). \quad (2.9)$$

Aprašinėjant aukštesnius monosluoksnius, kur  $K > 1$ , įvedamas difuzijos spindulys  $\lambda_T^{(K)}$ , priklausantis  $K$ -tajam monosluoksniui. Šio spindulio reikia aprašant plotą  $\varphi_\lambda^{(K)}$ , kuris yra panašios reikšmės kaip plotas  $\varphi_C^*$  ir atrodo taip [22]:

$$\varphi_\lambda^{(K)} = 2\lambda_T^{(K-1)} \sqrt{n\varphi^{(K-1)} + n(\lambda_T^{(K-1)})^2}. \quad (2.10)$$

Tuo atveju, kai turime pirmą sluoksnį arba  $K=1$ , lygtis nenaudojama ir vietoj jos turime:  $\varphi_\lambda^{(1)} = \varphi_C^* = n\lambda^2 + 2\lambda\sqrt{n\varphi_C}$

Kai  $\varphi_\lambda^{(K)} \leq \varphi^{(K-1)} - \varphi^{(K)}$  adsorbuojamas dangos atomas nusės ant apatinio monosluoksniu ( $K-1$ ) ir tokiu būdu pildys  $K$ -tąjį monosluoksnį. Kitu atveju, kai  $\varphi_\lambda^{(K)} > \varphi^{(K-1)} - \varphi^{(K)}$ , adsorbuojamas dangos atomas nusės ant dar žemesnio monosluoksniu ( $K-2$ ) ir pildys ( $K-1$ )-ąjį monosluoksnį [23].  $K$ -tąjį monosluoksnį aprašanti lygtis atrodo taip [22]:

$$\frac{d\varphi^{(K)}}{dt} = A^{(K)}\alpha_{AT}i_0(\varphi^{(K-1)} - \varphi^{(K)}) + B^{(K)}\alpha_{AT}i_0(\varphi^{(K)} - \varphi^{(K+1)})(\varphi^{(K-1)} - \varphi^{(K)}) \quad (2.11)$$

Lygtyje pateikti koeficientai  $A^{(K)}$  ir  $B^{(K)}$  egzistuoja iš sąlygos  $\varphi_\lambda^{(K)} \leq 1$  ir aprašomi taip:

$$A^{(K)} = \begin{cases} 0, & \varphi^{(K-1)} - \varphi^{(K)} < \varphi_\lambda^{(K)} \\ 1, & \varphi^{(K-1)} - \varphi^{(K)} \geq \varphi_\lambda^{(K)} \end{cases}, \quad K = 2, 3, \dots, N, \quad (2.12)$$

$$B^{(K)} = \begin{cases} 0, & \varphi^{(K)} - \varphi^{(K+1)} \geq \varphi_\lambda^{(K)} \\ 1, & \varphi^{(K)} - \varphi^{(K+1)} < \varphi_\lambda^{(K)} \end{cases}, \quad K = 1, 2, \dots, N, \quad (2.13)$$

Pagal aukščiau pateiktą formulę pirmojo monosluoksniu padengimas salomis atrodo [23]:

$$\frac{d\varphi_C}{dt} = 2\alpha_{AA}i_0(\varphi_S + a(t)\varphi_S^*) + a(t)\alpha_{AC}i_0\varphi_C^* + B^{(1)}\alpha_{AC}i_0(1 - \varphi^{(1)})(\varphi^{(1)} - \varphi^{(2)}). \quad (2.14)$$

Apjungus lygtis į sistemą gaunama galutinė dangos augimo kinetikos lygčių sistema, kuri atrodo taip:

$$\begin{cases} \frac{d\varphi_S}{dt} = \alpha_{A0}i_0(1 - \varphi_L) + \alpha_{AA}i_0(\varphi_S + a(t)\varphi_S^*) \\ \frac{d\varphi_C}{dt} = 2\alpha_{AA}i_0(\varphi_S + a(t)\varphi_S^*) + a(t)\alpha_{AC}i_0\varphi_C^* + B^{(1)}\alpha_{AC}i_0(1 - \varphi^{(1)})(\varphi^{(1)} - \varphi^{(2)}) \\ \frac{d\varphi^{(K)}}{dt} = A^{(K)}\alpha_{AT}i_0(\varphi^{(K-1)} - \varphi^{(K)}) + B^{(K)}\alpha_{AT}i_0(\varphi^{(K)} - \varphi^{(K+1)})(\varphi^{(K-1)} - \varphi^{(K)}), \\ K = 2, 3, \dots, N \\ \frac{dn}{dt} = \frac{1}{2}\alpha_{AA}i_0(\varphi_S + a(t)\varphi_S^*) + \alpha_{col}C_{col}(1 - \varphi_C - \varphi_\beta) \end{cases} \quad (2.15)$$

Šiurkštumas, dėl paprastumo, pasirenkamas kaip skirtumas tarp viršutinio ir apatinio sluoksniu numerių  $K$ . Čia viršutinis sluoksnis yra aukščiausias sluoksnis, su užpildymu, kuris nėra didesnis

nei 5 %, o apatinis sluoksnis yra žemiausias sluoksnis, kuris turi užpildymą ne didesnį už 95%. Sluoksnių skirtumas žymimas  $\Delta h$  ir išreiškiamas formule:

$$\Delta h = K_{\varphi_{5\%}} - K_{\varphi_{95\%}}. \quad (2.16)$$

## 2.2. Diferencialinių lygčių sprendimas Oilerio metodu

Diferencialių lygčių, kurių pradinės sąlygos yra žinomos, apytiksliam sprendimui yra sukurta daugybė metodų, iš kurių lengviausiai naudojamas ir suprantamas yra Oilerio metodas. Šis metodas apibūdinamas naudojant vadinamąjį tinklėlį ir šio tinklelio funkcijas.

Nuo tiriamosios funkcijos laiko pradinio momento ( $t = 0$ ) atidedama ašis, kuri padalijama į intervalus. Šių intervalų ilgis  $k > 0$  ir gaunamas tinklelis. Galiniai šių intervalų taškai  $t_n = nk$ , kur  $n = 0, 1, 2, \dots$ , vadinami tinklelio taškais. Teoriniame tinklelyje apibūdinama funkcija  $g_n = g(nk)$ . Diferencialinėms lygtims, kurių pradinės sąlygos yra žinomos, Oilerio metodas išvedamas pakankamai nesudėtingai:

$$\begin{aligned} \frac{dy}{dt} &= f(y, t), \\ y(0) &= y_0. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Tada skleidžiant Teiloro eilute gaunama:

$$\begin{aligned} y(t_n) &= y(t_n) + k \frac{dy}{dt}(t_n) + \frac{k^2}{2} \frac{d^2y}{dt^2}(t_n) + \mathcal{O}(k^3) = \\ &= y(t_n) + kf(y(t_n), t_n) + \frac{k^2}{2} \frac{d^2y}{dt^2}(t_n) + \mathcal{O}(k^3) \end{aligned} \quad (2.18)$$

Iš gautos lygties imami nariai, kurių eilė lygi arba didesnė  $\mathcal{O}(k^2)$  ir gaunamas Oilerio metodo apibrėžimas, kuris bendram atvejui atrodo taip:

$$\begin{aligned} v_{n+1} &= v_n + kf(v_n, t_n), \quad t_n = nk, \\ v_0 &= y_0. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Pagal lygtį galima spręsti, kad sekantis narys randamas gan paprastai. Žinodami  $v_n$  reikšmę tam tikrai  $n$  reikšmei galime rasti  $v_{n+1}$  ir tai taip toliau, rekurentiškai. Aukščiau užrašytomis lygtimis (2.19) apibūdinama tinklelio funkcija  $v_n, n = 0, 1, 2, \dots$ , kuri akivaizdžiai priklauso nuo to koks žingsnis  $k$  buvo pasirinktas. Skaičiuojant Oilerio metodu skirtumas tarp realios funkcijos reikšmės skaičiuojamame taške ir apskaičiuotos šiuo metodu tame taške artėja į nulį, kai žingsnis  $k$  artėja į nulį. Kai atliekami realūs skaičiavimai, nulinis ar labai artimas nuliui žingsnis negali būti naudojamas, todėl visada atsiranda didesnės ar mažesnės paklaidos [27]. Tam tikras paklaidų nustatymas yra įmanomas priartėjimais, bet reikalauja daug laiko ir pastangų, todėl dažniausiai nėra naudojamas. Jei žingsnis pasirenkamas pakankamai mažas galima laikyti, kad ir paklaidos yra nykstantos.

### 3. Tyrimų rezultatai ir jų aptarimas

Užsibrėžti tikslai ir uždaviniai gali būti įvykdyti, pasirinkus matematinį modelį paviršiaus augimui aprašyti ir jį išnagrinėjus. Pasitelkus programavimą ir matematinius metodus, matematinis augimo modelis gali būti realizuojamas skaitmeniniais metodais. Keičiant modelyje esančias fizikines konstantas galima rasti įvairių paviršiaus augimo būsenų ir jas nagrinėjant modeliuoti realiai stebimus eksperimentinius rezultatus.

#### 3.1. Paviršiaus šiurkštumo skaičiavimų rezultatai

Pirmiausia, buvo pasirinktos dangos augimo sąlygos, pagal jau nagrinėtų variacijų rezultatus. Atsižvelgiant į tai, kad temperatūra didžiausią įtaką darys paviršiniams atomų ir salų difuzijos parametrams, pasirinkti pagrindiniai moduluojami parametrai. Tai difuzijos ilgiai  $\lambda$  ir  $\beta$ , kurie pagal apibrėžimą yra temperatūros funkcijos. Difuzijos ilgių priklausomybė nuo temperatūros gali būti ne vienodo mastelio. Daroma prielaida, kad atomų difuzijos spindulys  $\lambda$  yra daug jautresnis temperatūros pokyčiams. Tada, tam tikrame temperatūrų diapazone galima laikyti salelių difuzijos spindulį  $\beta$  pastoviu dydžiu ir keisti tik  $\lambda$  reikšmes.

Svarbiausios dangos augimo sąlygos pateiktos lentelėje. Iš lentelėje pateiktų dydžių 3 nėra aprašyti matematinėje formuluotėje ir atsiranda, tik modeliuojant augimą. Laikas  $t$  reikalingas modeliavimui Oilerio metodu, jis yra programos veikimo ir skaičiavimų pabaigos matas. Šis dydis yra svarbus ir gali keisti rezultatus, jei laikas bus per mažas. Augimas gali būti dar tik prasidėjęs ir neteikti daug naudingos informacijos. Jei laikas per didelis gali būti jau seniai nusistovėjusi augimo pusiausvyra ir švaistomi skaičiavimo resursai, bei gali būti pasiektas sluoksnių skaičiaus apribojimas ar žemesnių sluoksnių įtaka. Kitas parametras  $N$ , sluoksnių skaičius, turi būti kiek reikia didelis ir tuo pačiu kiek įmanoma mažiausias. Naudojant per didelį sluoksnių skaičių, kaip ir laiko atveju, bus švaistomi resursai ir skaičiavimai pasidarys be priežasties ilgi. Esant per mažam sluoksnių skaičiui gali būti pasiekta viršutinė riba, kur pats aukščiausias sluoksnis bus naudojamas galutiniams šiurkštumo skaičiavimams, ir rezultatai bus iškreipti. Paskutinis iš trejų parametų, žingsnis, atitinka žingsnį, naudojamą Oilerio metodu sprendžiant diferencialines lygtis. Jo dydis turi būti pakankamai mažas, kad skaičiavimo paklaidos išliktų mažos, bet kuo didesnis, kad skaičiavimas vyktų sparčiau. Neskaičiuojant paklaidų priimama, kad žingsnis parinktas tinkamas ir paklaidos yra labai mažos.

**Lentelė.** Skaičiavimams naudotos matematinio modelio charakteristikos

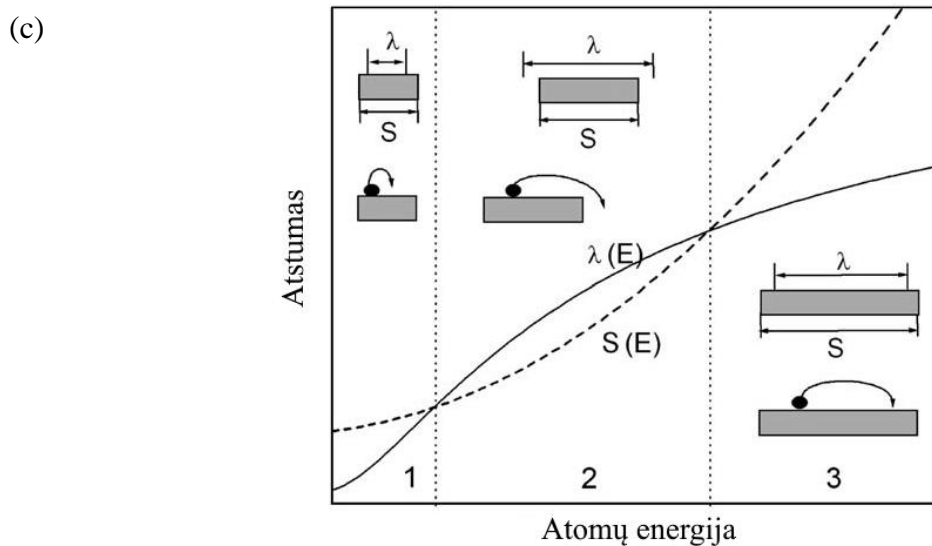
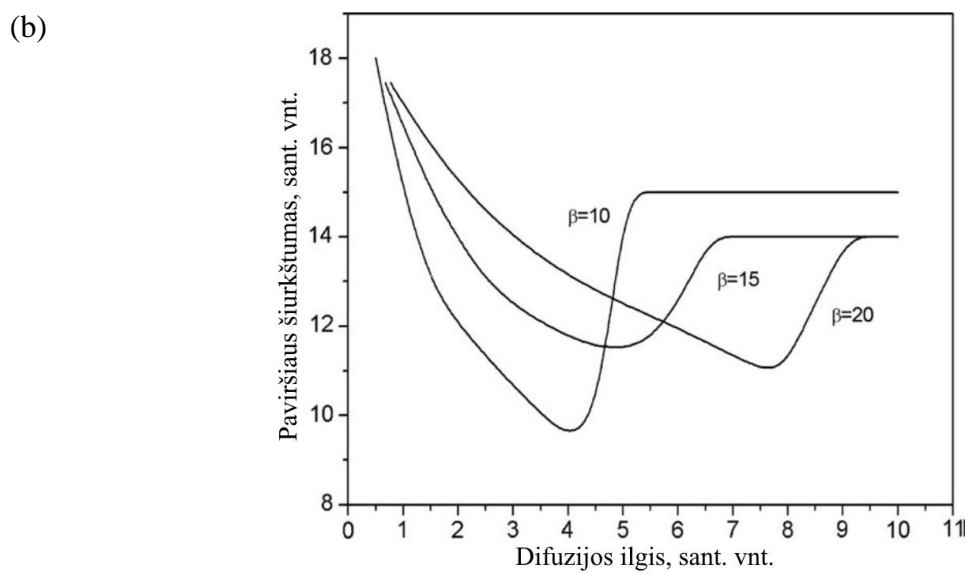
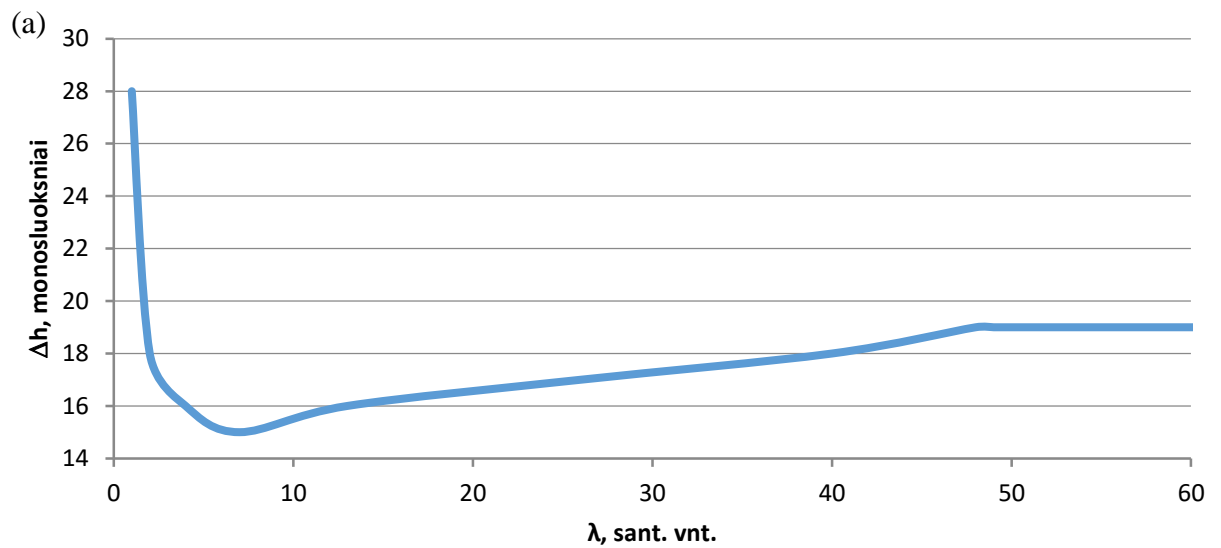
Žymėjimas	Paaiškinimas	Reikšmė
t	Laikas arba žingsnių skaičius	250000
N	Skaičiavimuose naudotų sluoksnių skaičius	400
i0	Krentančių atomų srautas	0.05
alphaAA	Prilipimo tikimybė tarp atomo ir atomo	0.001
alphaAC	Prilipimo tikimybė tarp atomo ir klasterio (salelės)	0.1
alphaA0	Atomo prilipimo prie pagrindo tikimybė	0.1
alphaAT	Atomo prilipimo ant klasterio (salelės) viršaus tikimybė	1
alphaCol	Koalescencijos tikimybė	0.1
lam	Atomų difuzijos spindulys	1-200
beta	Klasterių (salelių) difuzijos spindulys	keičiama

lamT	Atomų difuzijos spindulys ant salelių viršaus	=lam
zingsnis	Vienos skaičiavimo iteracijos žingsnis	0.01

Pirmajam skaičiavimui parinktos keletą skirtingų  $\beta$  reikšmių tarp 20 ir 250 santykinų vienetų. Skaičiuojamas parametras čia parinktas paviršiaus šiurkštumas, išreikštas kaip monosluoksnių skirtumas  $\Delta h$ . Jis apskaičiuojamas iš aukščiausio sluoksnio, kurio užpildymas siekia bent 5 %, numerio atėmus žemiausio sluoksnio, kurio užpildymas nėra didesnis už 95%, numerį. Šis dydis išreiškiamas kaip funkcija, priklausanti nuo atomų difuzijos spindulio  $\lambda$ , kuri, savo ruožtu, yra atomų energijos funkcija. Tokiu būdu atvaizduojama paviršiaus šiurkštumo priklausomybė nuo temperatūros intervale, kuriame  $\lambda$  kinta žymiai, o  $\beta$  pakankamai mažai, kad būtų galima laikyti ją pastovia. Atomų difuzijos spindulio reikšmės atskiriems grafikams pateiktos skirtingos, dėl atsirandančio reikšmingo intervalo, už kurio nusistovi pusiausvyra. Naudojant vienodą  $\lambda$  reikšmių mastelį visiems atvejams nebūtų galima pastebėti vyraujančio dėsningumo.

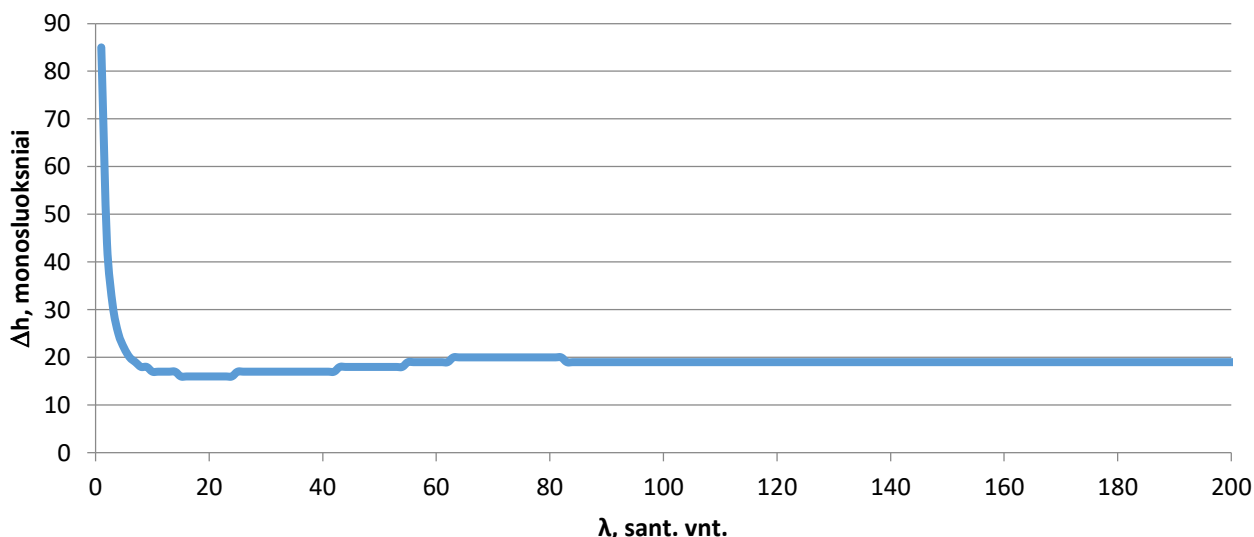
18.a paveiksle pavaizduotas paviršiaus šiurkštumo kitimas, kai  $\beta$  lygus 20 santykinų vienetų. Ši reikšmė atitinka kituose tyrimuose tuo pačiu matematiniu modeliu naudojamas reikšmes [15]. Paveiksle matomas, kad  $\lambda$  intervale nuo 1 iki 7 sant. vnt. vyksta paviršiaus šiurkštumo mažėjimas nuo 28 monosluoksnių iki 15 minimumo taške (maždaug 7 sant. vnt.). Toliau didėjant  $\lambda$  reikšmėms šiurkštumas didėja iki tol kol pasiekiamas stabili būseną, kur, didėjant difuzijos spinduliui, šiurkštumas beveik visiškai nebekinta. Stabilus šiurkštumas pasiekiamas prie apie 60 sant. vnt. ir yra daug mažesnis nei pradiniam taške esanti reikšmė. Nemonotoninis paviršiaus šiurkštumo kitimas gali būti paaiškinamas naudojantis 18.c pav. pavaizduota salelių dydžio ir atomų difuzijos atstumo priklausomybe nuo energijos. Jei atomų difuzijos atstumo ar salelių dydžio priklausomybės nuo atomų energijos kinta netiesiškai, šios kreivės gali susikirsti kelis kartus. Taip susidaro 3 skirtingi regionai, kur salelių dydis yra didesnis už atomų difuzijos spindulį, arba atvirkščiai, atomų difuzijos spindulys didesnis už salelių dydį. Kai atomų difuzijos spindulys yra didesnis už salelių dydį atomai nukrenta nuo salelės žemyn ir užpildo žemesnius sluoksnius, mažindami paviršiaus šiurkštumą. Kai salelių dydis didesnis atomai pasilieka ant salelės viršaus ir šiurkštumas didėja [22]. 18.c pav. atveju 1 ir 3 regionai turės didesnę šiurkštumą nei 2 regionas. Tokia pati priklausomybė stebima ir 18.a pav. atveju.





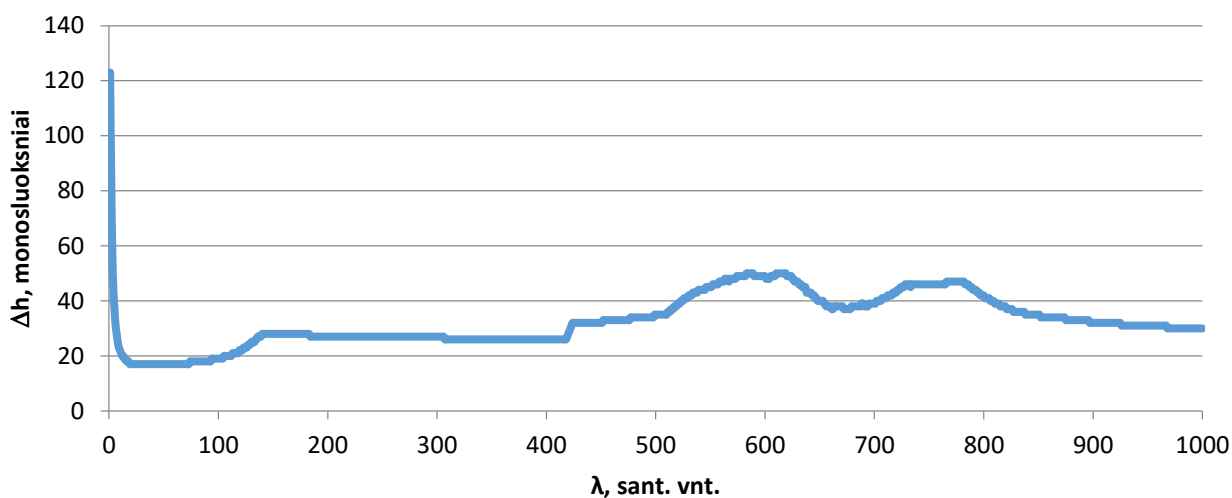
**18 pav.** (a) Paviršiaus šiurkštumo priklausomybė nuo atomų difuzijos spindulio, kai  $\beta = 20$  sant. vnt., (b) A. Galdiko gauti modeliavimo rezultatai [22] ir (c) schematinis salelių dydžio ir difuzijos ilgio priklausomybių kitimo aiškinimas [22]

Be 18.a paveiksle pavaizduoto grafiko atlikta ir daugiau skaičiavimų, norint nustatyti, kurios difuzijos spindulio reikšmės yra optimaliausios. Pasirinkus  $\beta$  reikšmių, aukštesnių nei 18.a paveiksle, padaryti skaičiavimai ir gauti dar trys šiurkštumo priklausomybės nuo atomų difuzijos spindulio grafikai (žr. 19, 20 ir 21 pav.). Trims grafikams parinktos  $\beta$  reikšmės yra 75, 150 ir 250 sant. vnt. ir atsižvelgiant į tai parinktos  $\lambda$  iki 1000 sant. vnt. antram ir trečiam variantui, bei 200 sant. vnt. pirmajam. Kaip ir 18.a paveikslo atveju, visuose grafikuose matomas staigus paviršiaus šiurkštumo kritimas nuo pradinių  $\lambda$  reikšmių su minimumo tašku ar sritimi iš karto už jo. Pirmu atveju matomas labai panašus elgesys kaip  $\beta = 20$  atveju, tik čia šiurkštumo kylimas, lyginant su pradiniu kritimu, yra daug mažesnis.



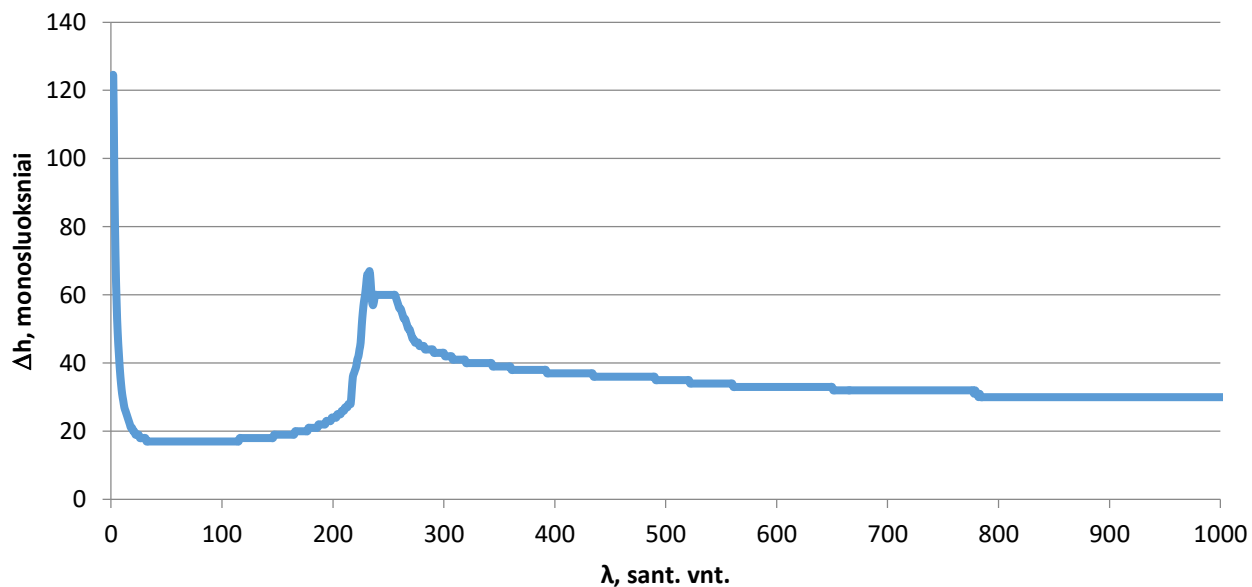
**19 pav.** Paviršiaus šiurkštumo priklausomybė nuo atomų difuzijos spindulio, kai  $\beta = 75$  sant. vnt.

Antru atveju (žr. 20 pav.) po nedidelio, apie 40 sant. vnt., minimumo regiono prasideda šiurkštumo kilimas iki apie 150 sant. vnt. kur jis trumpam sustoja iki 400 santykinių vienetų. Toliau šiame grafike matomi keletas paviršiaus šiurkštumo kitimų, kurie neturi aiškios formos.



**20 pav.** Paviršiaus šiurkštumo priklausomybė nuo atomų difuzijos spindulio, kai  $\beta = 150$  sant. vnt.

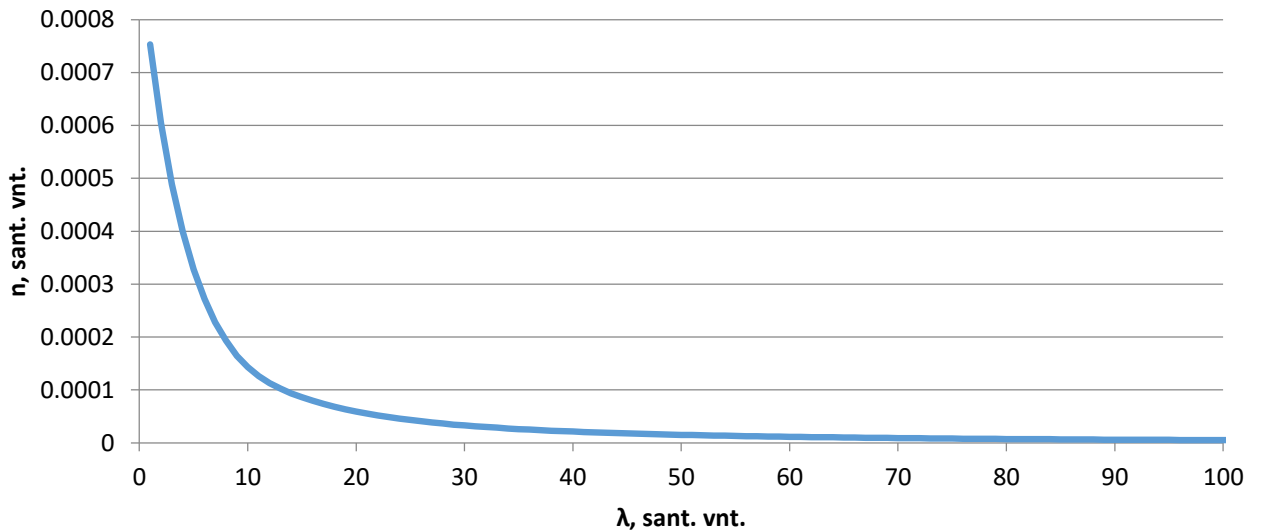
Trečiajame grafike (žr. 21 pav.) matoma didesnė minimumo sritis, apie 100 sant. vnt. pločio, po kurios seka įprastas šiurkštumo augimas, apie 80 sant. vnt. pločio. Po jo, ties 210 sant. vnt. šiurkštumas staiga išauga iki 66 monosluoksnių, lyginant su 17 minimumo srityje. Pasiekęs vietinį maksimumo tašką šiurkštumas vėl nukrinta ir šie kiek pakyla regione nuo 230 iki 250 sant. vnt., po kurio stebimas kritimas link pastovios vertės siekiančios 30 monosluoksnių.



**21 pav.** Paviršiaus šiurkštumo priklausomybė nuo atomų difuzijos spindulio, kai  $\beta = 250$  sant. vnt.

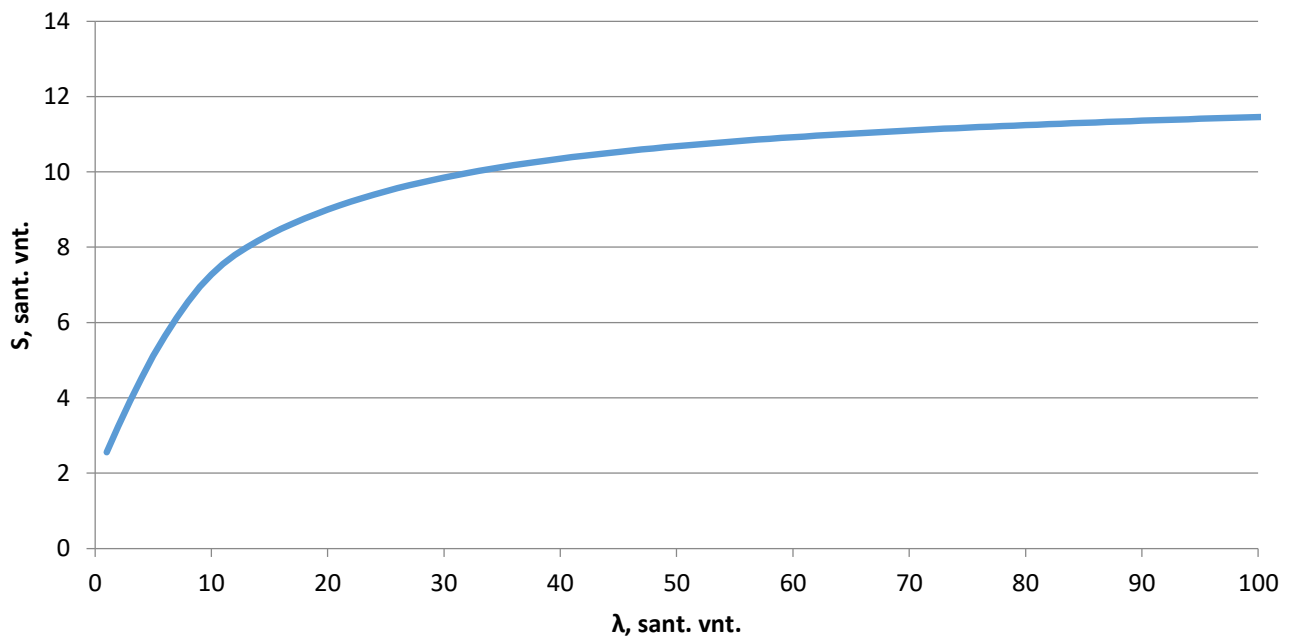
Iš nubraižytų keturių grafikų pirmas ir antras grafikai, su žemomis  $\beta$  reikšmėmis, geriausiai sutampa su kitų autorių darbais. Atsižvelgus į tai, kad pirmasis naudoja  $\beta$  reikšmę identišką kaip kituose darbuose, bei antro grafiko mažas šiurkštumo kilimas, buvo pasirinkta plačiau panagrinėti būtent pirmąjį grafiką pavaizduotą 18.a paveiksle.

Šiam paviršiaus šiurkštumo kitimo atvejui nustatytos salelių tankio  $n$  ir salelių dydžio  $S$  priklausomybės. Jos pavaizduotos 22 paveiksle. Salelių tankio priklausomybė nuo atomų difuzijos spindulio 22 grafike matoma tikėtina salelių tankio priklausomybė. Prie mažų atomų difuzijos reikšmių atomai rečiau susitinka tarpusavyje ar su jau egzistuojančiomis salelėmis ir susiformuoja daugybė mažų salelių. Didelis mažų salelių skaičius reiškia aukštą salelių tankį. Temperatūrai ir atomų difuzijos spinduliui didėjant, atomai gali pasieti daugiau ir tolimesnių salelių bei pavienių atomų, todėl atomai dažniau prilimpa prie jau egzistuojančios salelės ir jų skaičius nedidėja. Didesnių pavienių salelių buvimas mažina salelių tankį. Pasiekus pakankamai dideles atomų difuzijos reikšmes visi arba beveik visi atomai prisijungia prie kokios nors salelės ir bendras salelių tankis išlieka labai mažas. Tai galima matyti grafike, kur prie aukštų atomų difuzijos reikšmių salelių tankis beveik nebekinta, lieka labai mažas. Artėjama į situaciją kur ant paviršiaus yra viena salelė prie kurios prisijungia visi pavieniai atomai, o tankis artėja į nulį.



**22 pav.** Salelių tankio priklausomybė nuo atomų difuzijos spindulio, kai  $\beta = 20$  sant. vnt.

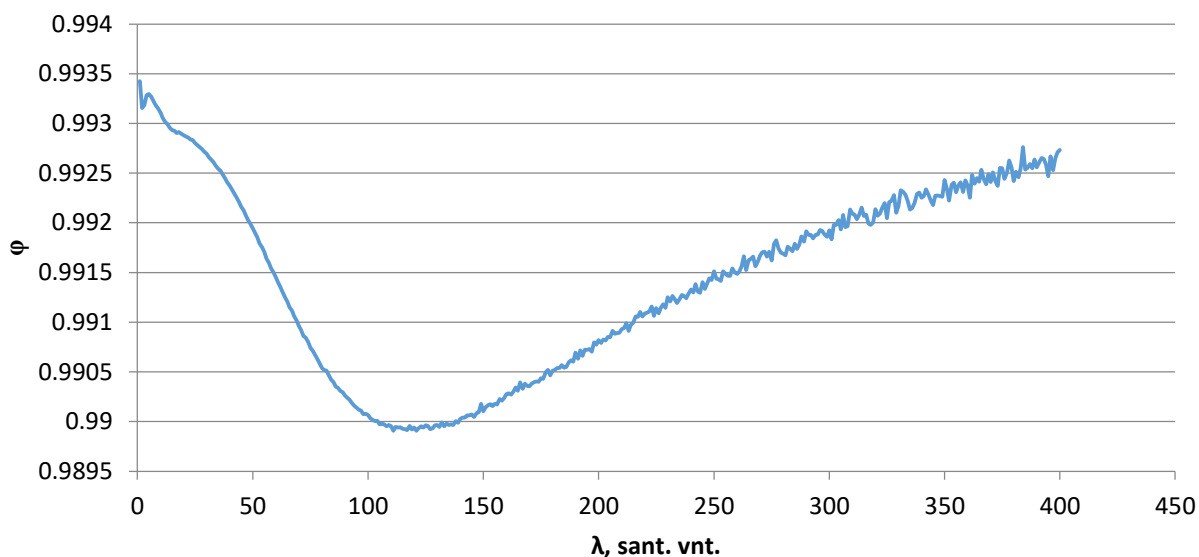
Salelių dydžio priklausomybė nuo atomų difuzijos spindulio (žr. 23 pav.) taip pat demonstruoja tikėtiną priklausomybę. Prie mažos atomų difuzijos salelės formuojasi mažos nes savo difuzijos spindulyje sutinka mažai atomų ir salelių. Didėjant atomų difuzijos spinduliui salelių dydis auga, lėtėjančiu augimu. Kaip ir tankio atveju, artėjama prie tam tikros didžiausios vertės, kur salelės dydis apima visą nagrinėjamą paviršių.



**23 pav.** Salelių dydžio priklausomybė nuo atomų difuzijos spindulio, kai  $\beta = 20$  sant. vnt.

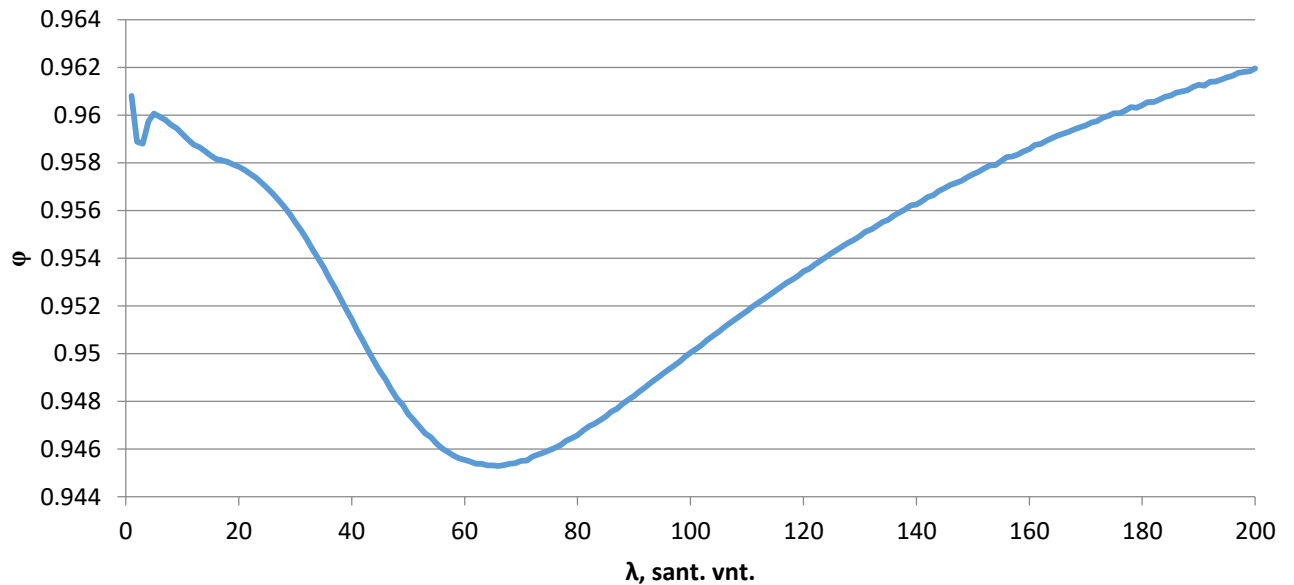
Norint giliau išnagrinėti paviršiaus šiurkštumo kitimą tuo atveju, kai  $\beta = 20$ , išnagrinėti individualių paviršių sudarančių sluoksnių užpildymai. Atsižvelgiant į tai, kad šiurkštumas skaičiuojamas suradus žemiausią sluoksnį su ne didesniu nei 95% užpildymu ir aukščiausią sluoksnį su ne mažesniu nei 5% užpildymu, iš visų skaičiuotų sluoksnių svarbiausi yra bet kokioms  $\lambda$  reikšmėms į

intervalą patenkantys arba šalia jo esantys sluoksniai. Kadangi pirmas ir antras sluoksniai skaičiuojamu laiko momentu jau yra pilnai užpildyti jie neatvaizduojami grafiškai. Žemiausias atvaizduojamas sluoksnis yra trečias (žr. 24 pav.). Iš šio grafiko matomas užpildymo kitimas plačiame  $\lambda$  intervale. Užpildymas mažėja nuo 3 iki 115 santykinų vienetų ir didėja srityje nuo 115 iki skaičiavimo pabaigos, 400 santykinų vienetų. Šis kitimas prasilenkia su šiurkštumo duomenimis nes ir pati žemiausia užpildymo vertė nepatenka į skaičiavimų diapazoną. Visos vertės yra tarp 98,9% ir 99,35% užpildymo, kas yra daug daugiau nei 95%.



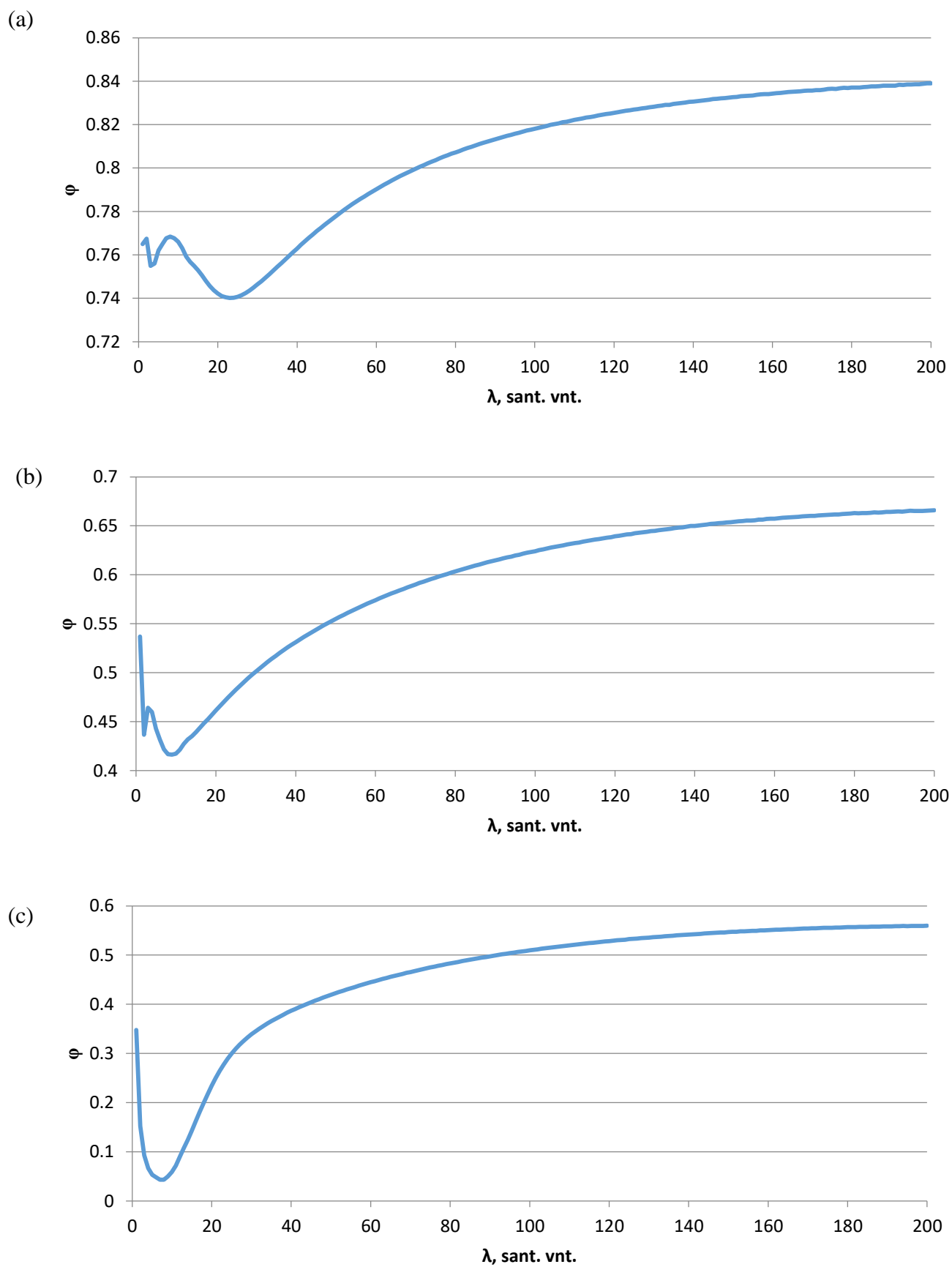
**24 pav.** 3 monosluoksnio užpildymas nuo atomų difuzijos spindulio, kai  $\beta = 20$  sant. vnt.

Sekanti užpildymo priklausomybė nuo  $\lambda$  pavaizduota 25 paveiksle. Čia pateikiamas 5 sluoksnio užpildymas, kuris jau patenka į nagrinėjamą užpildymų diapazoną. Kaip ir pirmu atveju, matomas užpildymo mažėjimas tarp 3 ir 61 santykinų vienetų, bei kilimas nuo to paties taško iki maksimalaus čia pateikiamo, 200 santykinų vienetų. Šiuo atveju žemiausias užpildymo taškas nusileidžia žemiau nei 95% riba ir dalis  $\lambda$  reikšmių jau įtraukiamos į šiurkštumo skaičiavimus. Tada taškai nuo 44 iki 99 santykinų vienetų kaip žemiausią skaičiavimo sluoksnį turi 5 monosluoksnį, o taškai nuo 1 iki 43 ir nuo 100 iki 200 santykinų vienetų žemiausių sluoksniu laikys 6 monosluoksnį. Šis grafikas atspindi visas žemiausio sluoksnio pasirinkimo vertes dėl to, kad 4 sluoksnis, kaip ir 3, neturi nei vienos reikšmės mažesnės nei 0,95 ir 6 sluoksnis neturi nei vienos reikšmės didesnės nei 0,95. Pagal šiuos rezultatus galima matyti tai, kad žemiausio monosluoksnio pozicija yra labai ribota, visame nagrinėjamame  $\lambda$  diapazone reikšmė skiriasi tik per vieną monosluoksnį. Žemiausi augančios dangos sluoksniai užsipildo gana tolygiai pakankamai plačiose  $\lambda$  ribose. Tada pasidaro aišku, kad daugiausiai įtakos šiuo atveju paviršiaus šiurkštumui turi viršutiniai sluoksniai ir nevienodas jų užpildymas.



**25 pav.** 5 monosluoksnio užpildymas nuo atomų difuzijos spindulio, kai  $\beta = 20$  sant. vnt.

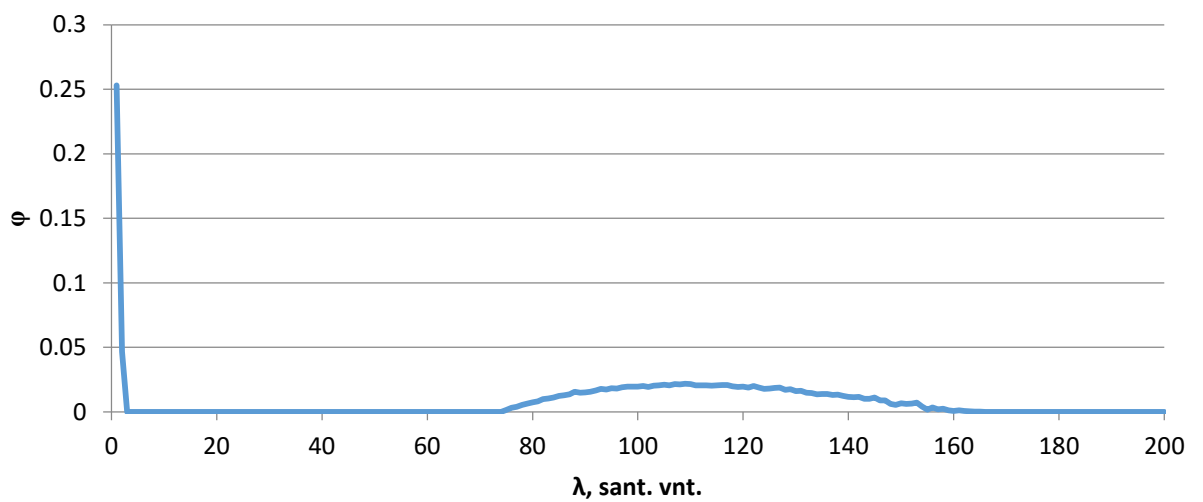
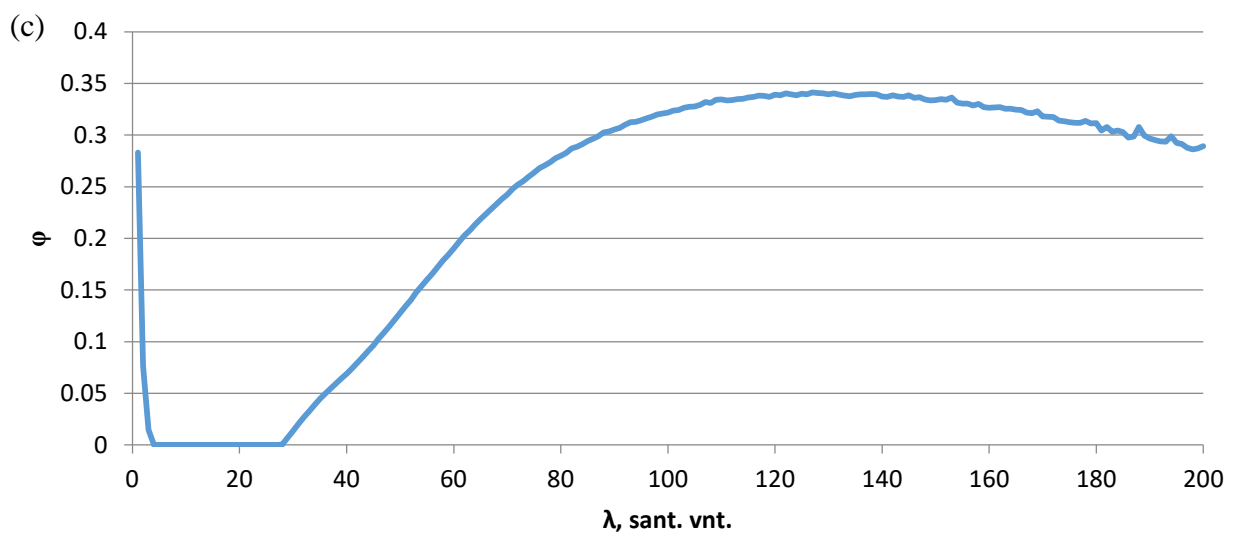
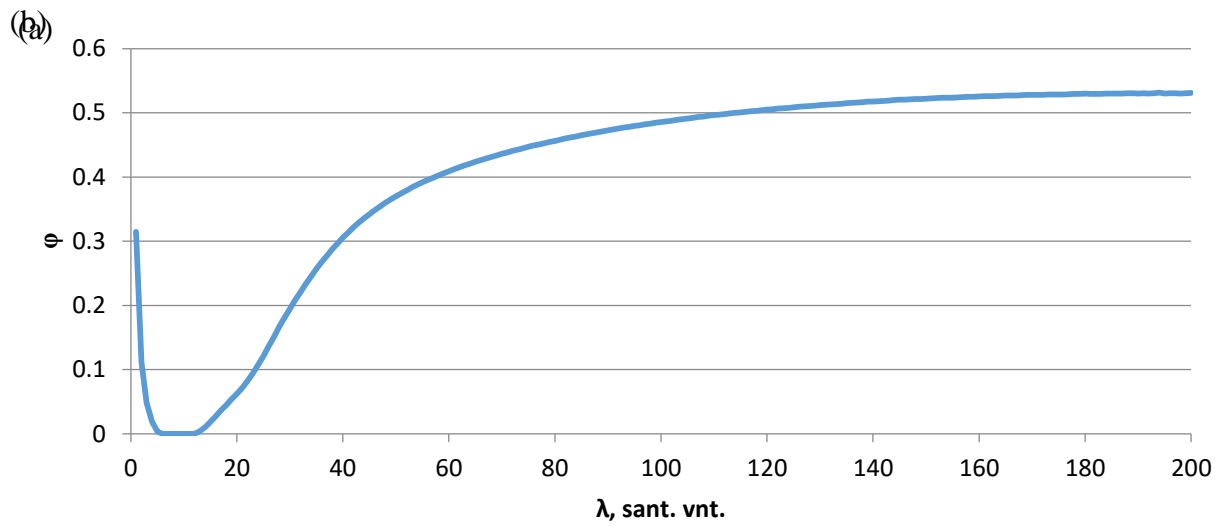
Kaip vyksta pavienių sluoksnių užpildymo kitimas, srityje tarp žemiausio šiurkštumo skaičiavimams naudoto ir aukščiausio naudoto, pavaizduota 26 paveiksle. Čia pateikti trijų monosluoksnių užpildymo priklausomybės nuo  $\lambda$  grafikai. Trys pavaizduoti grafikai demonstruoja nuoseklų užpildymo kitimą. Lyginant 20 paveikslo duomenis su 26.a paveikslu matomas minimumo taško judėjimas į mažesnių atomų difuzijos ilgių sritį. Toks pat judėjimas pastebimas ir lyginant 8a ir 26.b paveikslus, bei 26.b ir 26.c paveikslus, tik daug mažesniu masteliu. Paskutiniu atveju, tarp 15 ir 20 monosluoksnių pasislinkimas siekia tik 1 santykinį vienetą. Galima daryti prielaidą, kad 8.c paveiksle pavaizduotas minimumo taškas yra pati nepalankiausia sąlyga aukštesnių sluoksnių užpildymui, nagrinėjamosiose sąlygose, kur  $\beta = 20$  santykinį vienetų. Be minimumo pasislinkimo atsiranda ir dar vienas akivaizdus pakitimas. Sluoksnio užpildymas mažėja su kiekvienu sluoksniu, kylant aukštyn. Keičiantis sluoksnio skaičiui taip pat pastebimas sluoksnio užpildymo diapazono platėjimas, 25 paveiksle diapazonas nesiekia nei 1,8% sluoksnio užpildymo, o 26.c paveiksle diapazonas daugiau nei 50% sluoksnio užpildymo. Aukštesnių sluoksnių užpildymas daug labiau veikiamas atomų difuzijos atstumo pokyčio. Atomai, dėl mažesnio žemesnio sluoksnio užpildymo turi mažesnę plotą ant kurio gali vykti difuzija todėl procesai kaip atomo nušokimas į žemesnį sluoksnį yra sustiprinami prie tos pačios  $\lambda$  vertės.



**26 pav.** Monosluoksnių užpildymas nuo atomų difuzijos spindulio, kai  $\beta = 20$  sant. vnt., (a) 10 monosluoksniui; (b) 15 monosluoksniui; (c) 20 monosluoksniui.

Aukščiausi sluoksniai su pastebimu užpildymu yra 23, 24 ir 25, neskaitant taško  $\lambda = 1$ , kuris yra pastebimas iki 38 sluoksnio. Aukštesni sluoksniai neturi žymaus užpildymo reikšmių, jos artimos 0. Be to, kad sluoksniai beveik tušti, sluoksniai aukštesni nei 24 nebepatenka į anksčiau aptartą 5% užpildymo sąlygą. Nagrinėjant 23, 24 ir 25 sluoksnius (žr. 27 pav.) galima nustatyti daugumos taškų viršutines ribas šiurkštumo skaičiavimams. Iš 27.a galima matyti, kad šiame sluoksnyje jau atsiranda sritis, maždaug tarp 5 ir 13 santykinų vienetų, kur užpildymas yra nykstamai mažas. Šiame grafike taip pat matomas užpildymo lėtėjimas ir galimas sustojimas prie aukščiausių  $\lambda$  reikšmių. Pakitimas prie aukštų  $\lambda$  reikšmių puikiai matomas sekančiame grafike (žr. 27.b pav.), kur pasiekus apie 130 santykinų vienetų sluoksnių užpildymas pradeda mažėti. Pagal tokį sluoksnių užpildymo kitimą 24 monosluoksnyje galima daryti prielaidą, kad ir kitiems sluoksniams galioja tokio tipo kitimas prie aukštesnių  $\lambda$  reikšmių, kurių skaičiavimai neapėmė kitiems sluoksniams. Čia matoma didesnė, 24 santykinų vienetų pločio, neužpildyta sritis. Mažas užpildymas puikiai pastebimas 9.c paveiksle, kur visos 25 sluoksnio vertės, išskyrus  $\lambda = 1$ , nesiekia 5% užpildymo. Dėl šios priežasties dauguma taškų, nuo 36 iki 200 santykinų vienetų, kaip aukščiausių sluoksnį šiurkštumui skaičiuoti laikys 24 monosluoksnį. Toks staigus užpildymo pakitimas tarp dviejų sluoksnių iššaukia viršutinės šiurkštumo ribos pastovumą aukštose  $\lambda$  reikšmėse. Atsižvelgiant į aukščiau aptartą pastovumą apatinės šiurkštumo ribos pastovumą šioje srityje, galutinis šiurkštumas esant aukštomis  $\lambda$  vertėms pasidaro labai mažai arba visiškai nekintantis dydis.



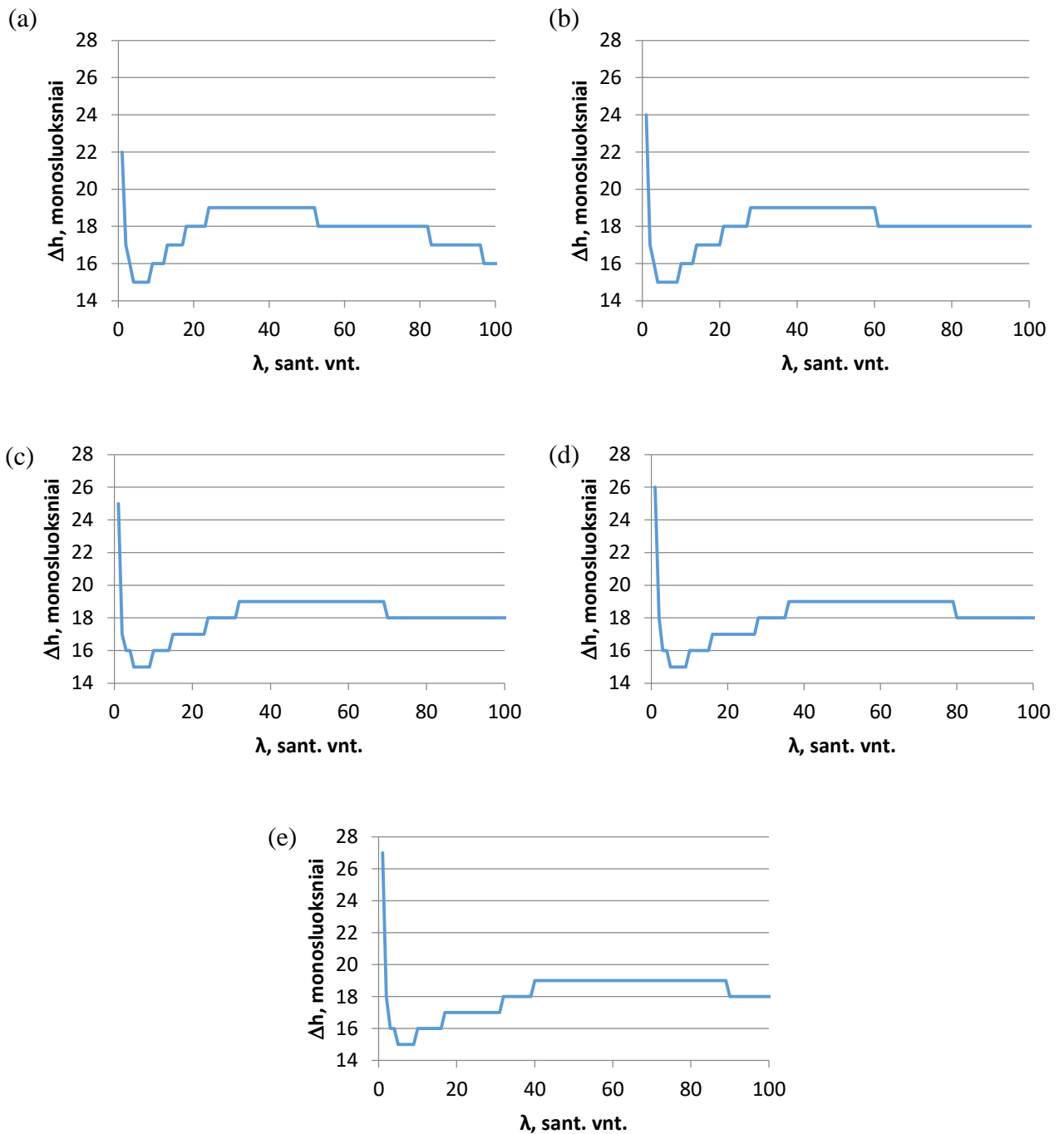


**27 pav.** Monosluoksnių užpildymas nuo atomų difuzijos spindulio, kai  $\beta = 20$  sant. vnt., a) 23 monosluoksniui; b) 24 monosluoksniui; c) 25 monosluoksniui

Tolimesniam šiurkštumo priklausomybės nuo atomų difuzijos ilgio  $\lambda$  tyrimui pasirinkta panagrinėti kitas  $\beta$  vertes esančias šalia aptartos  $\beta = 20$ . Išsamesniam pokyčių nagrinėjimui pasirinkta paimti po 5 vertes didėjimo ir mažėjimo kryptimis nuo nagrinėto  $\beta = 20$ . Tada nagrinėjama  $\beta$  sritis apima vertes nuo 15 iki 25 santykinių vienetų.

Pirmoji dalis grafikų pateikti 28 paveiksle. Čia nagrinėjami paviršiaus šiurkštumo grafikai kurių  $\beta$  vertės mažesnės už 20 santykinių vienetų, tiksliau tarp 15 ir 19 santykinių vienetų. Šiuose grafikuose iš karto matomas vienas išskirtinumas lyginant su 1 paveikslu. Paviršiaus šiurkštumas prie aukštesnių  $\lambda$  verčių vėl pradeda mažėti. Geriausiai tai matoma 10.a paveiksle, kur padidėjus atomų difuzijos spinduliui per 50 santykinių vienetų, šiurkštumas sumažėja per 3 monosluoksnius. Toks paviršiaus šiurkštumo mažėjimas slopsta, didėjant salelių difuzijos spinduliui  $\beta$  ir pasiekus 18.a paveiksle pavaizduotas sąlygas. Mažėjimas vos pastebimas, siekia 1 monosluoksnį, pasiekus labai aukštas  $\lambda$  vertes, todėl galima laikyti, kad šiurkštumas nebekinta. Taip pat, reikėtų pabrėžti, kad labai didelės  $\lambda$  vertės neturi daug fizikinės prasmės tuo atveju, kai  $\beta$  laikoma nekintančia. Dėl šios priežasties daugumos grafikų vertės neperžengia kelių šimtų santykinių vienetų, kur jau būtų galima diskutuoti dėl rezultatų prasmingumo.

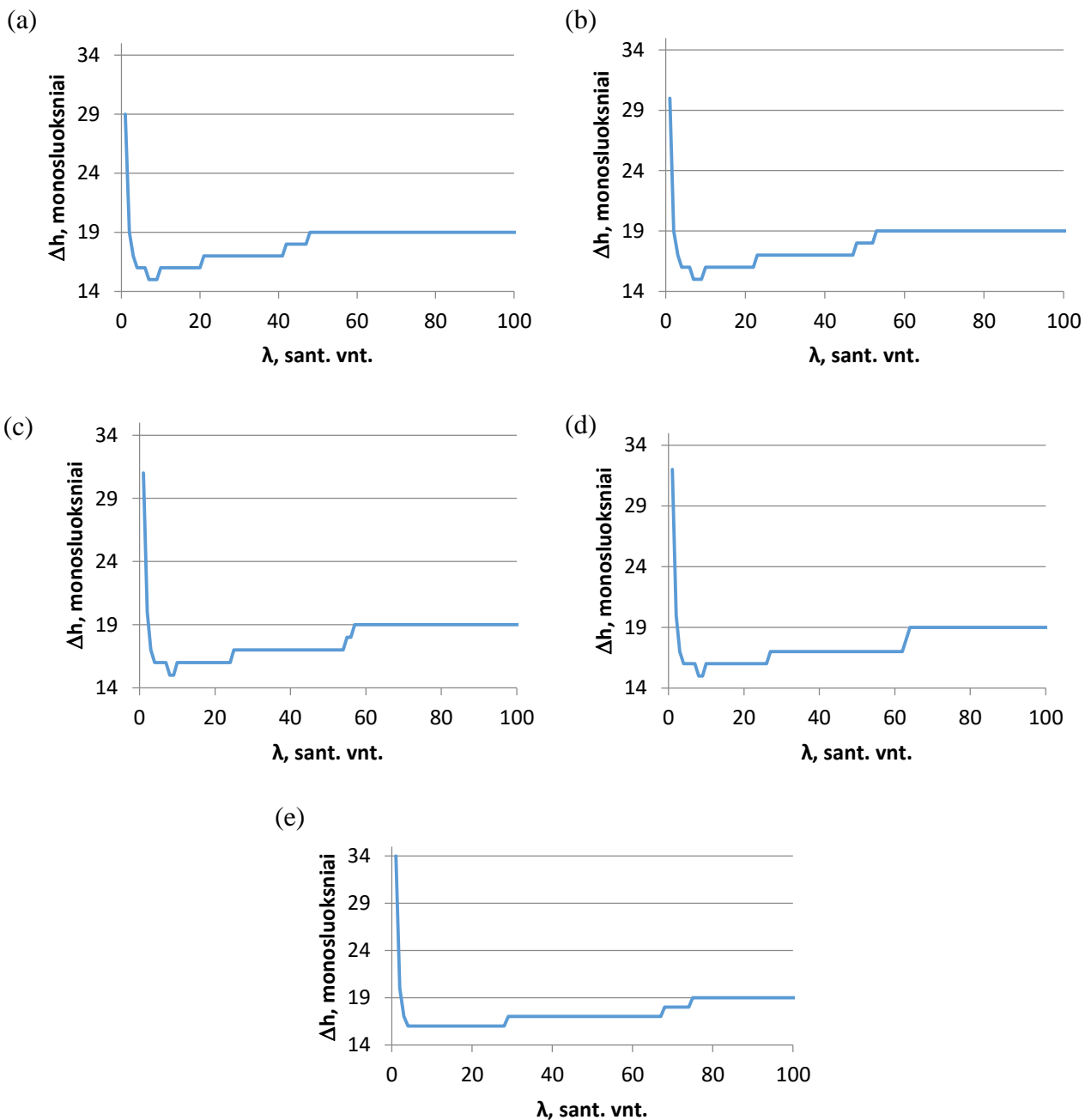
Nagrinėjant mažesnes  $\beta$  vertes (žr. 28 pav.) taip pat matomas šiurkštumo didėjimo srities plėtėjimas ir pasislinkimas. Didėjant  $\beta$  vertėms šiurkštumo didėjimo srities galas pasislenka nuo maždaug 25 santykinių vienetų 28.a paveiksle iki maždaug 42 santykinių vienetų 28.e paveiksle. Minimumo sritis šiame  $\beta$  diapazone nejuda, išlaikoma keleto santykinių vienetų sritis aplink  $\lambda = 15$ . Prie mažų  $\lambda$  reikšmių taip pat pastebimas paviršiaus šiurkštumo kitimas ties  $\lambda = 1$ , didėjant  $\beta$  reikšmėms šiurkštumas šiame taške didėja nuo 22 santykinių vienetų 28.a paveiksle iki 26 santykinių vienetų 28.c paveiksle.



**28 pav.** Paviršiaus šiurkštumo priklausomybė nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a)  $\beta = 15$  sant. vnt. b)  $\beta = 16$  sant. vnt. c)  $\beta = 17$  sant. vnt. d)  $\beta = 18$  sant. vnt. e)  $\beta = 19$  sant. vnt.

Aukštesnių  $\beta$  verčių grafikai pavaizduoti 29 paveiksle demonstruoja paviršiaus šiurkštumo kitimą kai  $\beta$  yra tarp 21 ir 25 santykinų vienetų. Šiuose grafikuose nesimato pakartotinio paviršiaus šiurkštumo mažėjimo, kaip ir  $\beta = 20$  atveju. Kritimas labai mažas ir tik prie aukštų  $\lambda$  reikšmių. Kaip ir 28 paveikslo atveju, pratęsimas augimo pabaigos pasislinkimas link didesnių  $\lambda$  verčių, 29.e paveiksle tai vyksta pasiekus arti 80 santykinų vienetų. Pirmojo taško, kai  $\lambda = 1$ , šiurkštumas ir toliau didėja, didėjant  $\beta$  reikšmėms iki 34 monosluoksnų, kai  $\beta = 25$  santykiniai vienetai (žr. 29.e pav.). Didėjant  $\beta$  reikšmėms pastebimas minimumo srities mažėjimas, kraštiniai šios srities taškai

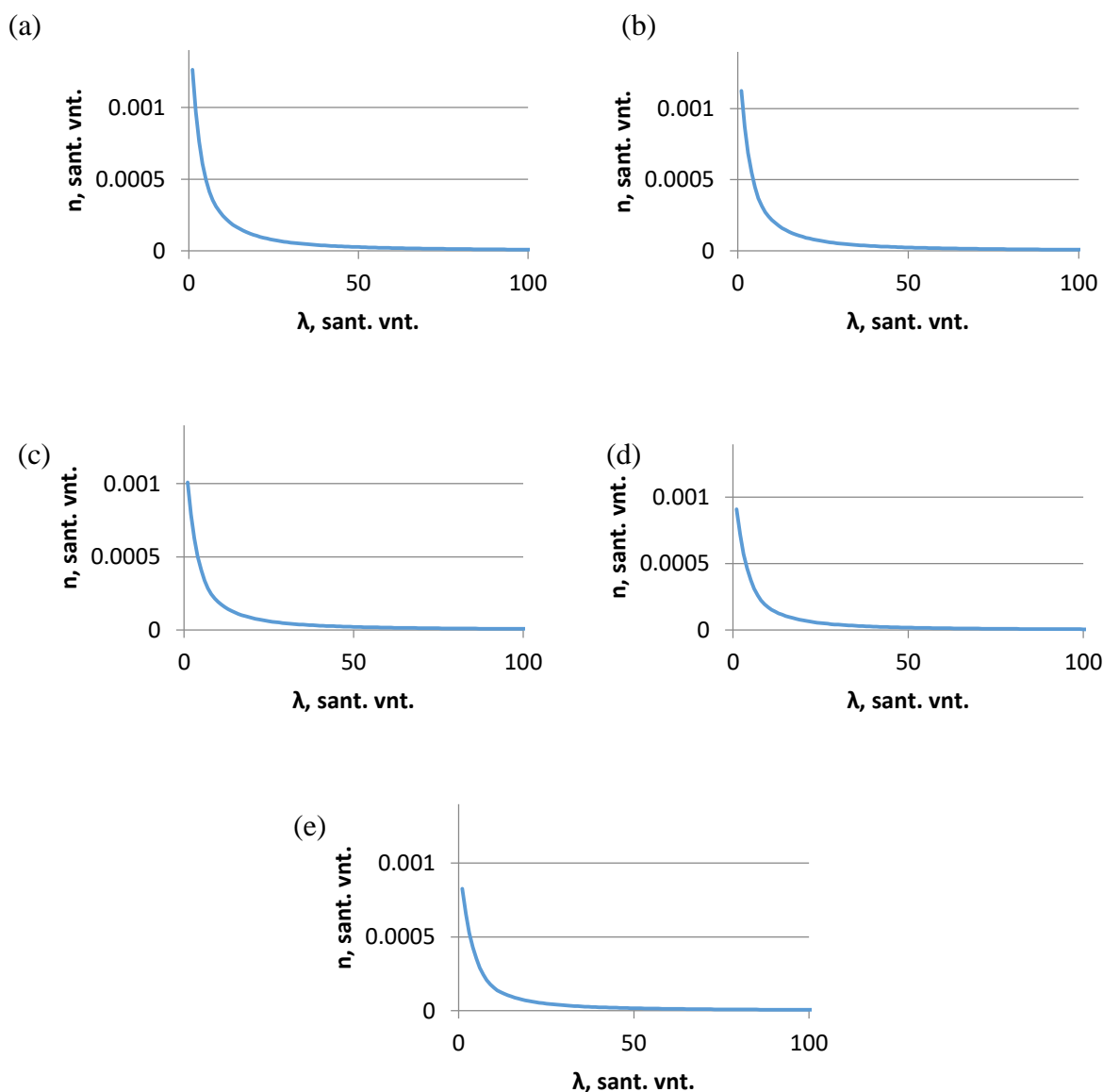
pakyla per vieną monosluoksnį ir 29.e paveikslo atveju visa sritis jau pakyla į 16 monosluoksnių aukštį, nors prieš tai visi grafikai (žr. 28 ir 29 pav.) minimumą turėjo ties 15 monosluoksnių. Minimumo srities plokštėjimas ir judėjimas link didesnių  $\lambda$  verčių nėra pageidautinas, todėl dar kartą patvirtinama, kad 18.a paveiksle atvaizduotas atvejis yra pakankamai optimalus paviršiaus šiurkštumo kitimo atžvilgiu.



**29 pav.** Paviršiaus šiurkštumo priklausomybė nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a)  $\beta = 21$  sant. vnt. b)  $\beta = 22$  sant. vnt. c)  $\beta = 23$  sant. vnt. d)  $\beta = 24$  sant. vnt. e)  $\beta = 25$  sant. vnt.

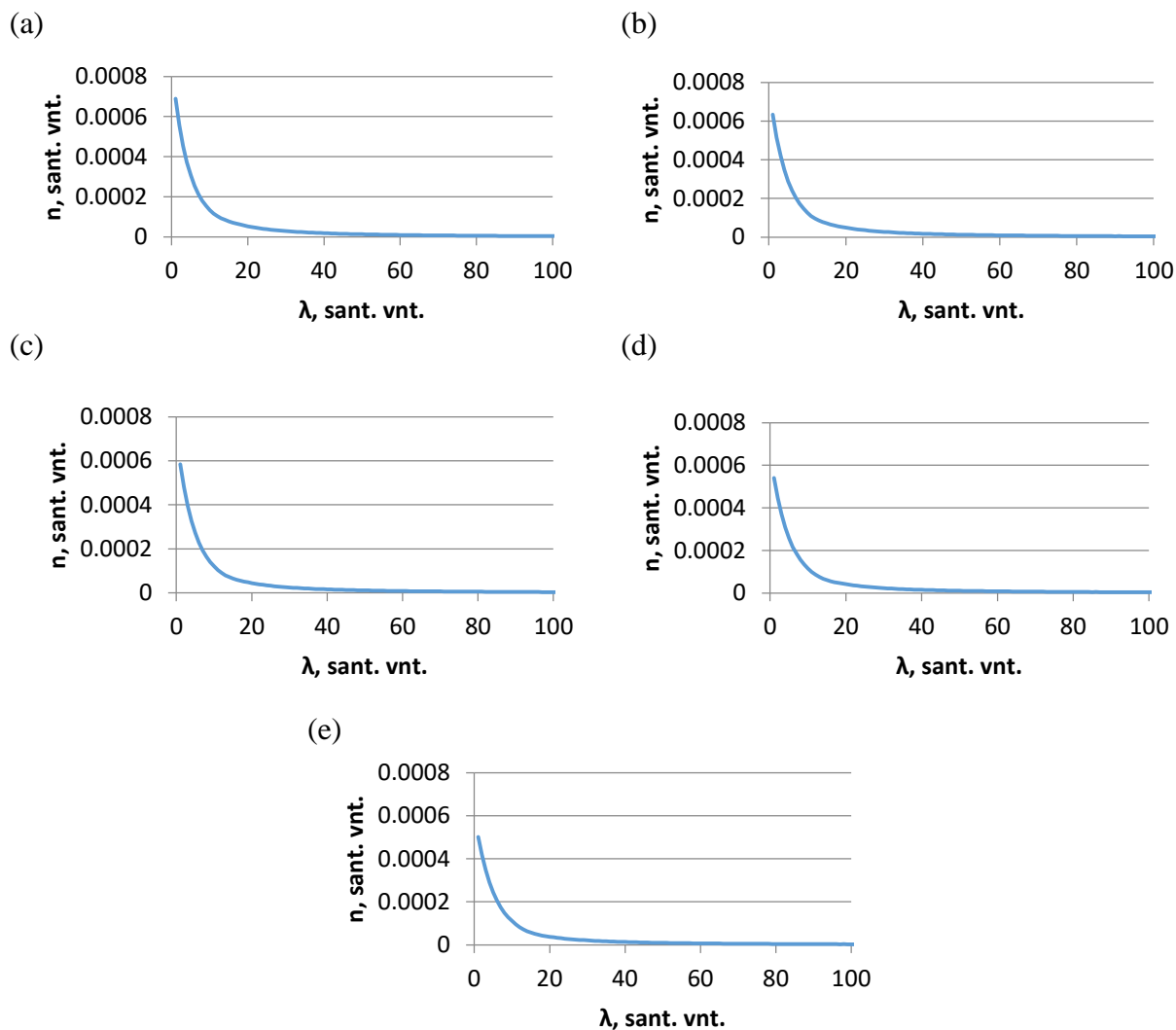
Srities aplink  $\beta = 20$  grafikai toliau nagrinėjami tokiu pat principu kaip  $\beta = 20$  atveju (žr. 20 - 22 pav.). Pirmiausia lyginami skirtingų  $\beta$  reikšmių salelių tankiai, dalinant grafikus per puse, 5 taškai, kurie yra žemiau nei  $\beta = 20$  ir 5 taškai, kurie yra aukščiau.

Pirmoji dalis grafikų pateikti 30 paveiksle. Čia matomas salelių tankio mažėjimas mažesnių  $\lambda$  reikšmių srityje, mažėjant salelių difuzijos ilgiui  $\beta$ . Pradinio taško, kur  $\lambda = 1$ , tankis sumažėjo nuo 0,00126 santykinų vienetų iki 0,00083 santykinų vienetų, atitinkamai, kai  $\beta = 15$  ir 19 santykinų vienetų (žr. 30.a ir 30.e pav.)



**30 pav.** Salelių tankio priklausomybė nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a)  $\beta = 15$  sant. vnt. b)  $\beta = 16$  sant. vnt. c)  $\beta = 17$  sant. vnt. d)  $\beta = 18$  sant. vnt. e)  $\beta = 19$  sant. vnt.

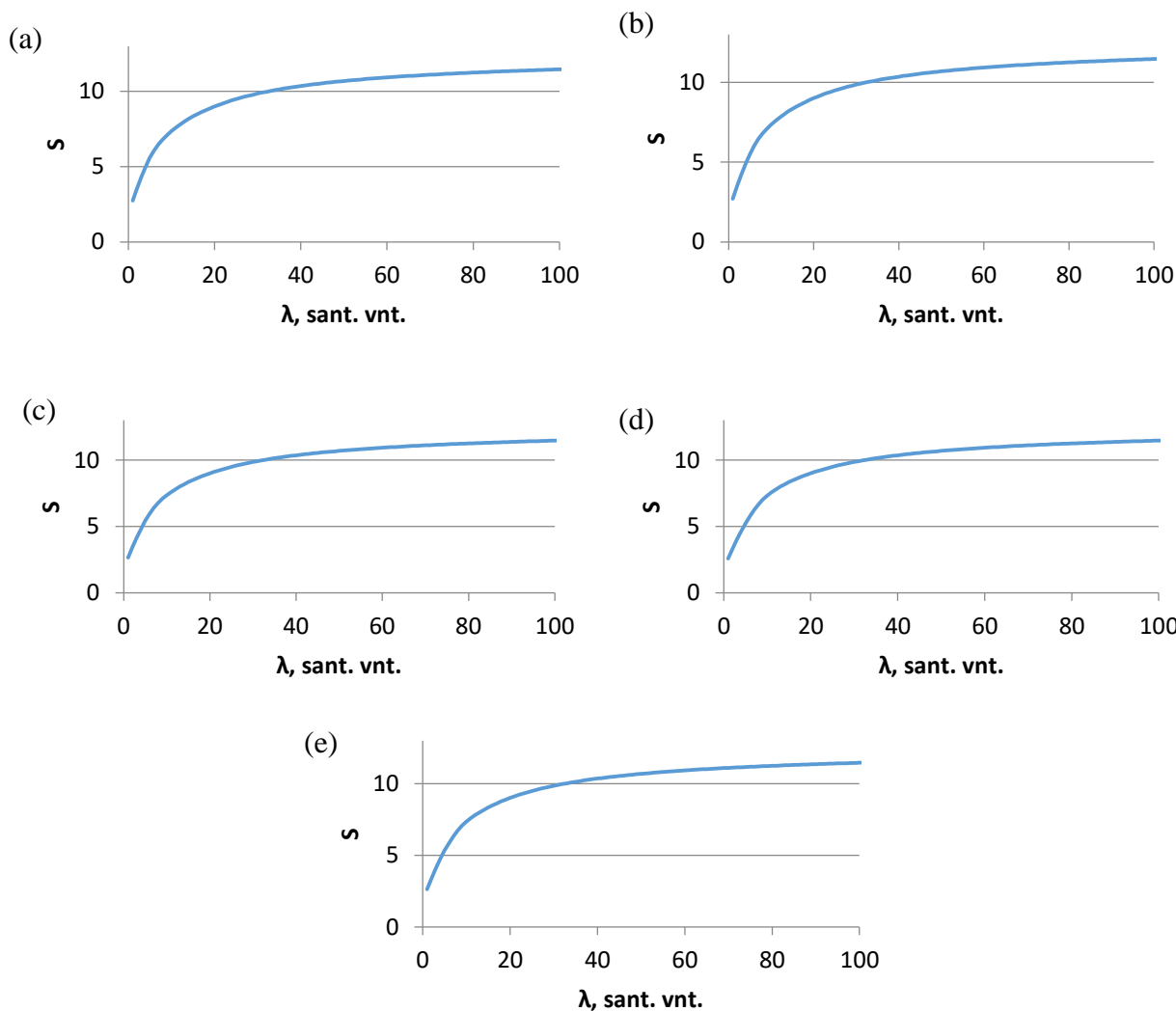
Antroji dalis salelių tankio grafikų, nuo  $\beta = 21$  iki  $\beta = 25$ , pavaizduota 31 paveiksle. Čia, kaip ir 30 paveikslo atveju, matomas pirmojo taško, kur  $\lambda = 1$ , salelių tankio mažėjimas, didėjant salelių difuzijos spinduliui  $\beta$ . Kitimas antru atveju per pusę mažesnis, nuo 0,00069 santykinų vienetų iki 0,0005 santykinų vienetų kai  $\beta$  atitinkamai 21 ir 25 santykiniai vienetai. Bendras salelių tankio sumažėjimas per visą nagrinėjamą  $\beta$  ruožą yra 0,00076 santykiniai vienetai.



**31 pav.** Salelių tankio priklausomybė nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a)  $\beta = 21$  sant. vnt. b)  $\beta = 22$  sant. vnt. c)  $\beta = 23$  sant. vnt. d)  $\beta = 24$  sant. vnt. e)  $\beta = 25$  sant. vnt.

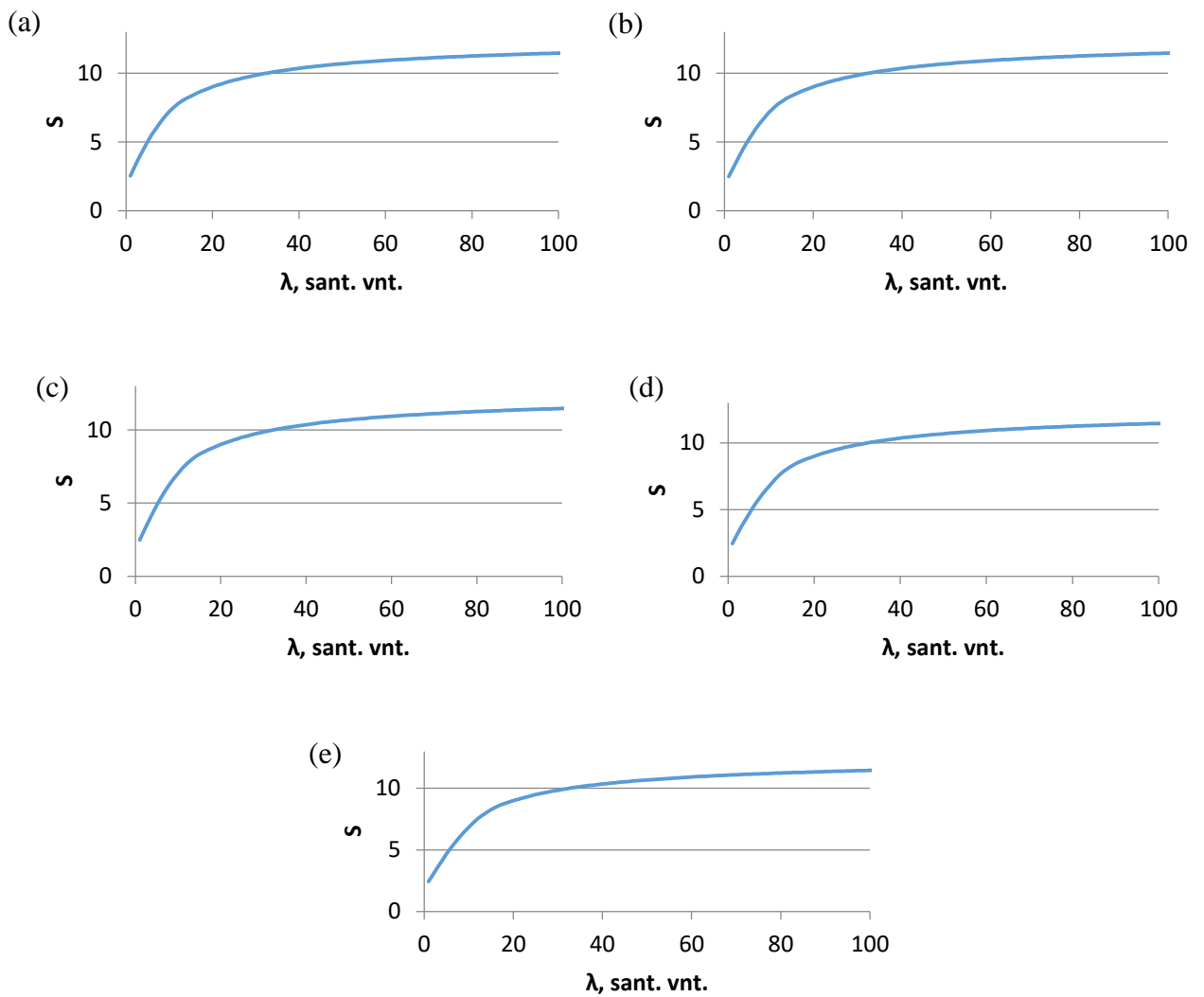
Sekantis žingsnis nagrinėjant pokyčius  $\beta$  srityje yra salelių dydžio kitimo palyginimas. Salelių dydžio palyginimas pateiktas 32 ir 33 paveiksle, nagrinėjant  $\beta$  sritis nuo 15 iki 19 ir nuo 21 iki 25 santykinių vienetų.

Pirmoji dalis, iki 19 santykinių vienetų, atvaizduota 32 paveiksle demonstruoja labai nedidelį salelių dydžio mažėjimą. Lyginant  $\beta = 15$  su  $\beta = 19$  ties  $\lambda = 100$  turime 11,45378178 ir 11,45377285 santykinių vienetų, atitinkamai 15 ir 19 atveju, bei 2,740847538 ir 2,587991204 ties  $\lambda = 1$ , atitinkamai 15 ir 19 atveju.



**32 pav.** Salelių dydžio priklausomybė nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a)  $\beta = 15$  sant. vnt. b)  $\beta = 16$  sant. vnt. c)  $\beta = 17$  sant. vnt. d)  $\beta = 18$  sant. vnt. e)  $\beta = 19$  sant. vnt.

Antra dalis salelių dydžio priklausomybės nuo atomų difuzijos spindulio pavaizduota 33 paveiksle demonstruoja tolimesnę salelių dydžio kitimo eigą. Vėl pastebimas salelių dydžio mažėjimas, didėjant  $\beta$ . Salelių dydis kinta nuo 2,527601746 iki 2,431005605 santykinųjų vienetų, kai  $\lambda = 1$  ir nuo 11,45378297 iki 11,45378322, kai  $\lambda = 100$ , atitinkamai difuzijos atstumams  $\beta = 21$  ir  $\beta = 25$  santykinųjų vienetų. Didėjimas šiuo atveju nėra reguliarus. Kiekvieną grafiką lyginant atskirai matomas mažėjimas iš 33.b į 33.c, nors kiti grafikai, lyginant šalia esančius, rodo salelių dydžio didėjimą. Bendras salelių dydžio mažėjimas  $\beta$  pakitus per 10 santykinųjų vienetų siekia 0,213245792 santykinųjų vienetų, kai  $\lambda = 1$  ir bendras padidėjimas per 0,00000144 santykinųjų vienetų, kai  $\lambda = 100$ . Labai minimalus salelių dydžio didėjimas lyginant nagrinėjamą  $\beta$  diapazoną prie aukštų  $\lambda$  verčių gali būti interpretuojamas kaip vertės stabilumas su paklaidų iššaukiamomis fliktuacijomis.

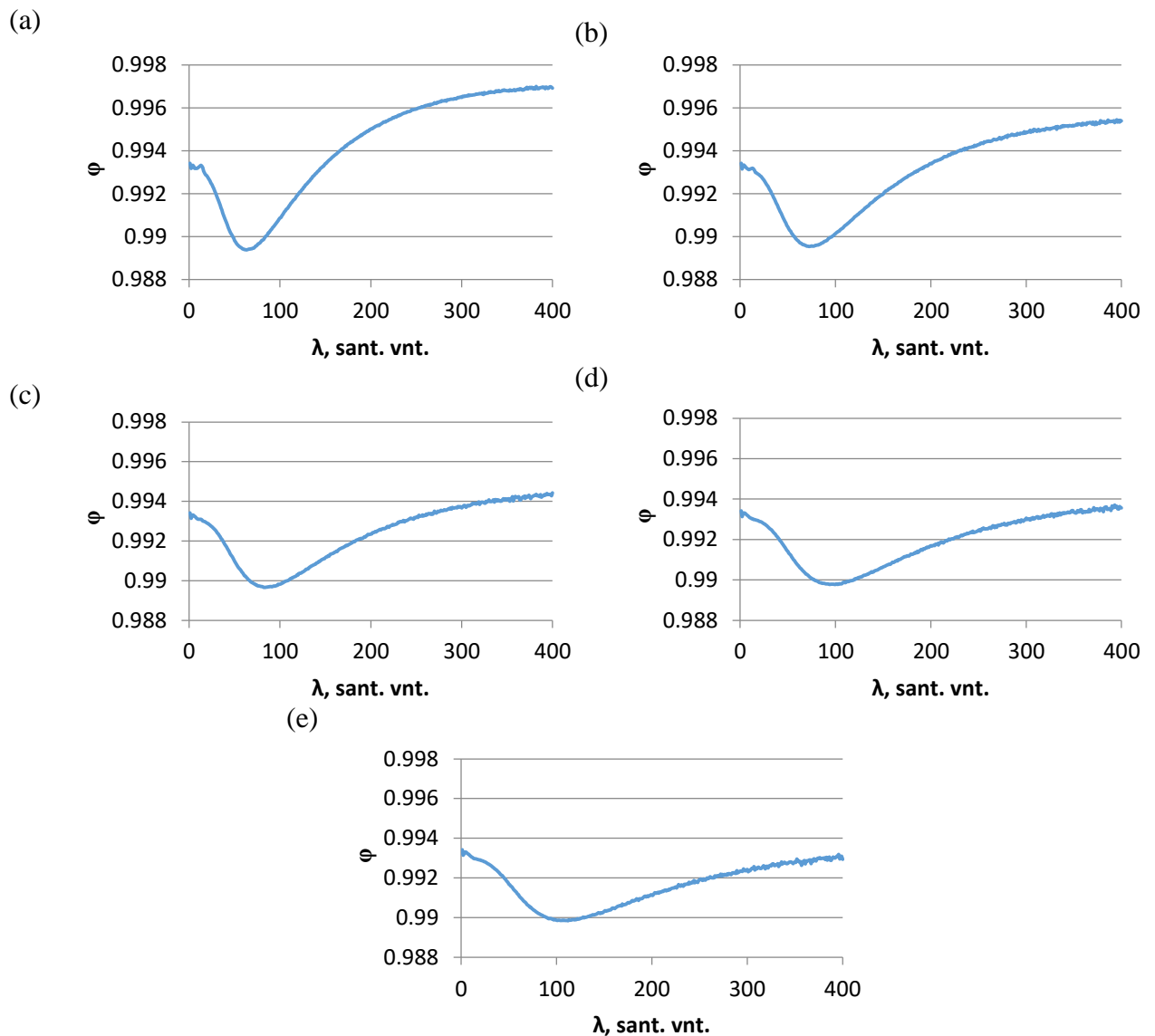


**33 pav.** Salelių dydžio priklausomybė nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a)  $\beta = 21$  sant. vnt. b)  $\beta = 22$  sant. vnt. c)  $\beta = 23$  sant. vnt. d)  $\beta = 24$  sant. vnt. e)  $\beta = 25$  sant. vnt.

Sekantis žingsnis, nagrinėjant pasirinktą  $\beta$  diapazoną, yra individualių sluoksnių užpildymo palyginimas tarp skirtingų  $\beta$  reikšmių. Užpildymo nagrinėjimui pasirinkti sluoksniai 3, 5, 10, 15 ir 20 sutampa su anksčiau pateiktais  $\beta = 20$  sluoksniais, neskaitant 23, 24 ir 25, kurie pateikti tik  $\beta = 20$  atvejui. Kaip ir su kitais atvejais, 10 grafikų, atitinkančių  $\beta$  vertes nuo 15 iki 19 santykinų vienetų ir nuo 21 iki 25 santykinų vienetų, padalinti į dvi dalis. Pirmoji mažesnių nei 20 santykinų vienetų ir antroji didesnių nei 20 santykinų vienetų salelių difuzijos spindulio.

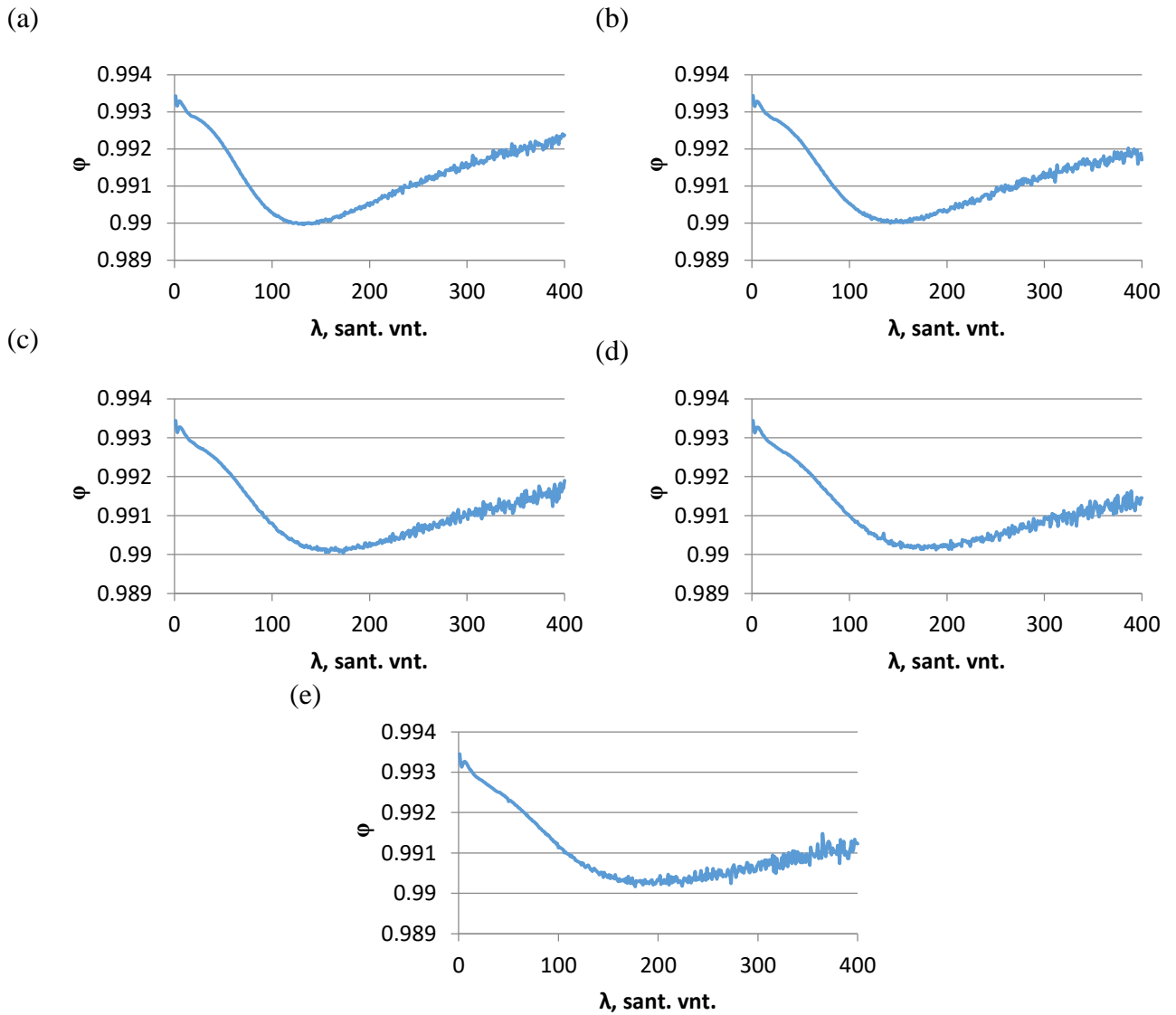
Pirmoji dalis 3 sluoksnio užpildymo atvaizduota 34 paveiksle. Čia matomas užpildymo mažėjimas didėjant difuzijos ilgiui  $\beta$  prie aukštų  $\lambda$  reikšmių. Mažėjimas nuo 0,996915268 vieneto dalių iki 0,992943716 prie  $\lambda = 400$  santykinų vienetų, kai  $\beta$  atitinkamai lygu 15 ir 19 santykinų vienetų. Šis mažėjimas yra lėtėjančiai augančios kreivės gale, todėl gali būti dalinai iškreiptas dėl nevienodo pasiekto kreivės taško. Atvirkščias kitimas pastebimas lyginant užpildomo kreivių minimumo taškus. Čia matomas augimas, didėjant  $\beta$  reikšmėms. Taip pat, minimumo taškas slenkasi į aukštesnių  $\lambda$  verčių pusę, didėjant  $\beta$  reikšmėms. Prie mažų verčių skirtumas tarp grafikų labai minimalus. Čia užpildymas beveik nekinta, keičiantis  $\beta$  reikšmėms.





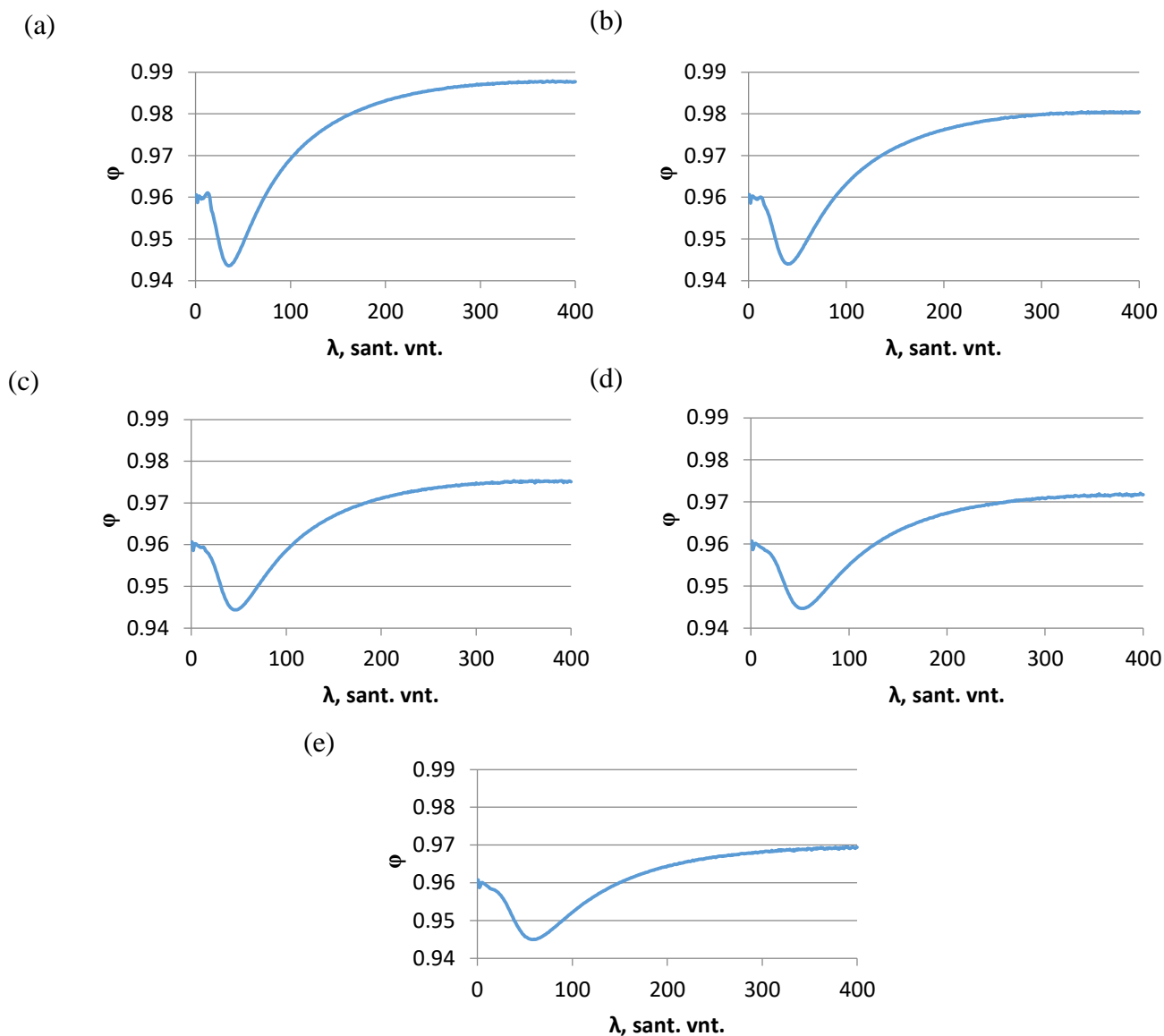
**34 pav.** 3 monosluoksnio užpildymas nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a)  $\beta = 15$  sant. vnt. b)  $\beta = 16$  sant. vnt. c)  $\beta = 17$  sant. vnt. d)  $\beta = 18$  sant. vnt. e)  $\beta = 19$  sant. vnt.

Antra 3 sluoksnio užpildymo sritis pavaizduota 35 paveiksle. Čia, kaip ir 34 paveiksle išlaikomas užpildymo mažėjimas, didėjant  $\beta$  reikšmėms prie didelių  $\lambda$  reikšmių. Skirtingai nei 34 paveiksle, čia jau nuo pirmo grafiko (žr. 35.a pav.) matomas tam tikros užpildymo reikšmių fluktuacijos, ypač prie didelių  $\lambda$  reikšmių. Nekreipiant dėmesio į jas, išlaikomas užpildymo augimas, didėjant  $\lambda$  reikšmėms už minimumo taško. Čia, aiškiau nei 34 paveikslo atveju, matomas užpildymo kreivės plokštėjimas, minimumo taškui slenkant į didesnių  $\lambda$  reikšmių pusę. Užpildymo reikšmės iki minimumo taško didėjant  $\beta$  beveik nekinta, kaip ir 34 paveikslo atveju.



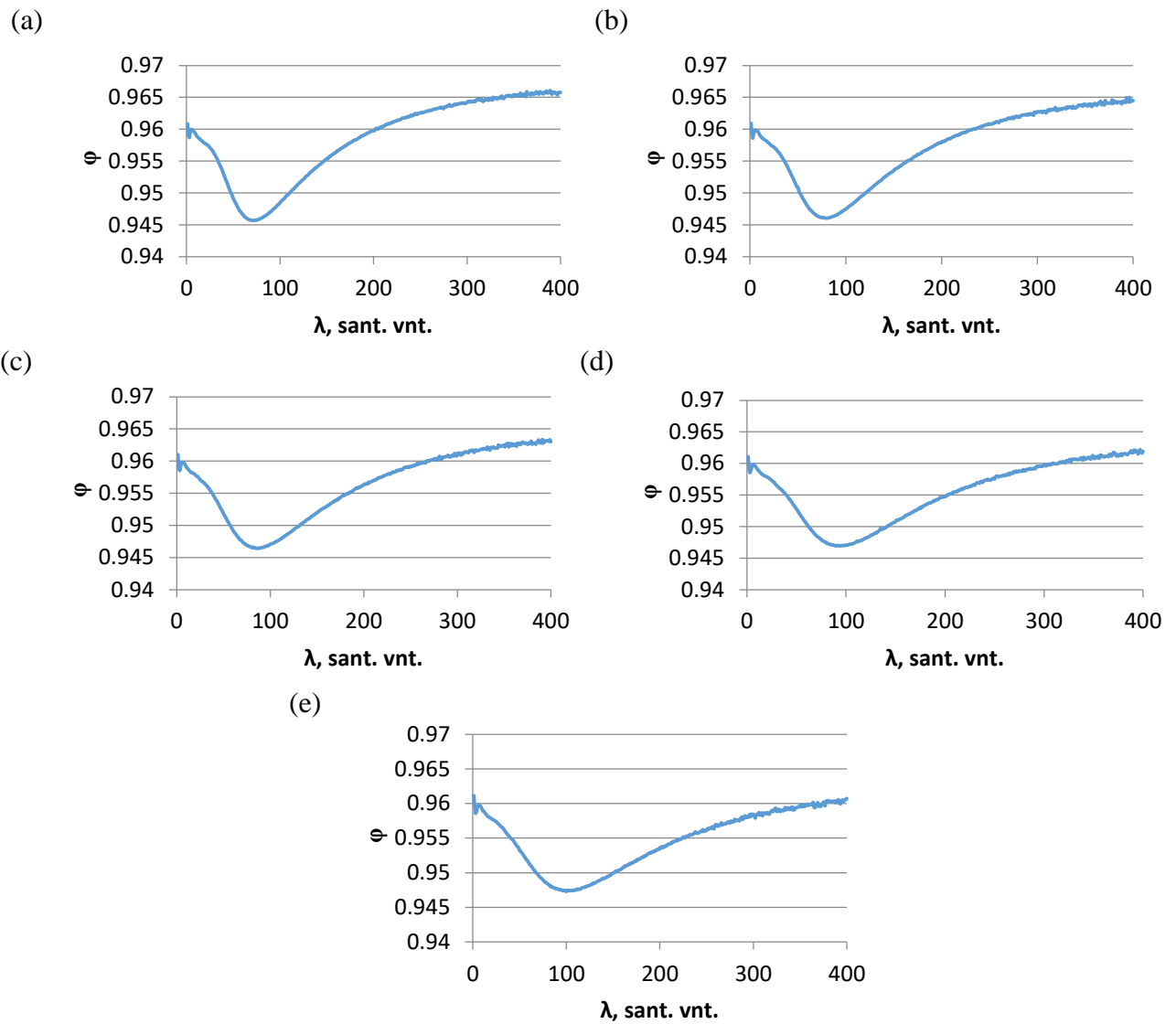
**35 pav.** 3 monosluoksnio užpildymas nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a)  $\beta = 21$  sant. vnt. b)  $\beta = 22$  sant. vnt. c)  $\beta = 23$  sant. vnt. d)  $\beta = 24$  sant. vnt. e)  $\beta = 25$  sant. vnt.

Nagrinėjant 5 sluoksnio užpildymą (žr. 36 pav.) matomas lėtėjantis užpildymo mažėjimas prie aukštų  $\lambda$  reikšmių. Lyginant 36.a ir 36.b grafikus matomas užpildymo sumažėjimas per apie 0,007 vieneto dalis, o lyginant 36.d ir 36.e grafikus mažėjimas siekia vos 0,002 vieneto dalies. Čia taip pat pastebimas minimumo taškas ir jo slinkimasis į didesnių  $\lambda$  reikšmių sritį kai didėja  $\beta$ . Sritis apie minimumą taip pat pastebimai praplatėja ir nežymiai padidėja jos užpildymas didėjant  $\beta$  reikšmėms. Pradinių  $\lambda$  reikšmių užpildymas, kaip ir 34 ir 35 paveikslų atveju, lieka pakankamai stabilus didėjant  $\beta$  reikšmėms.



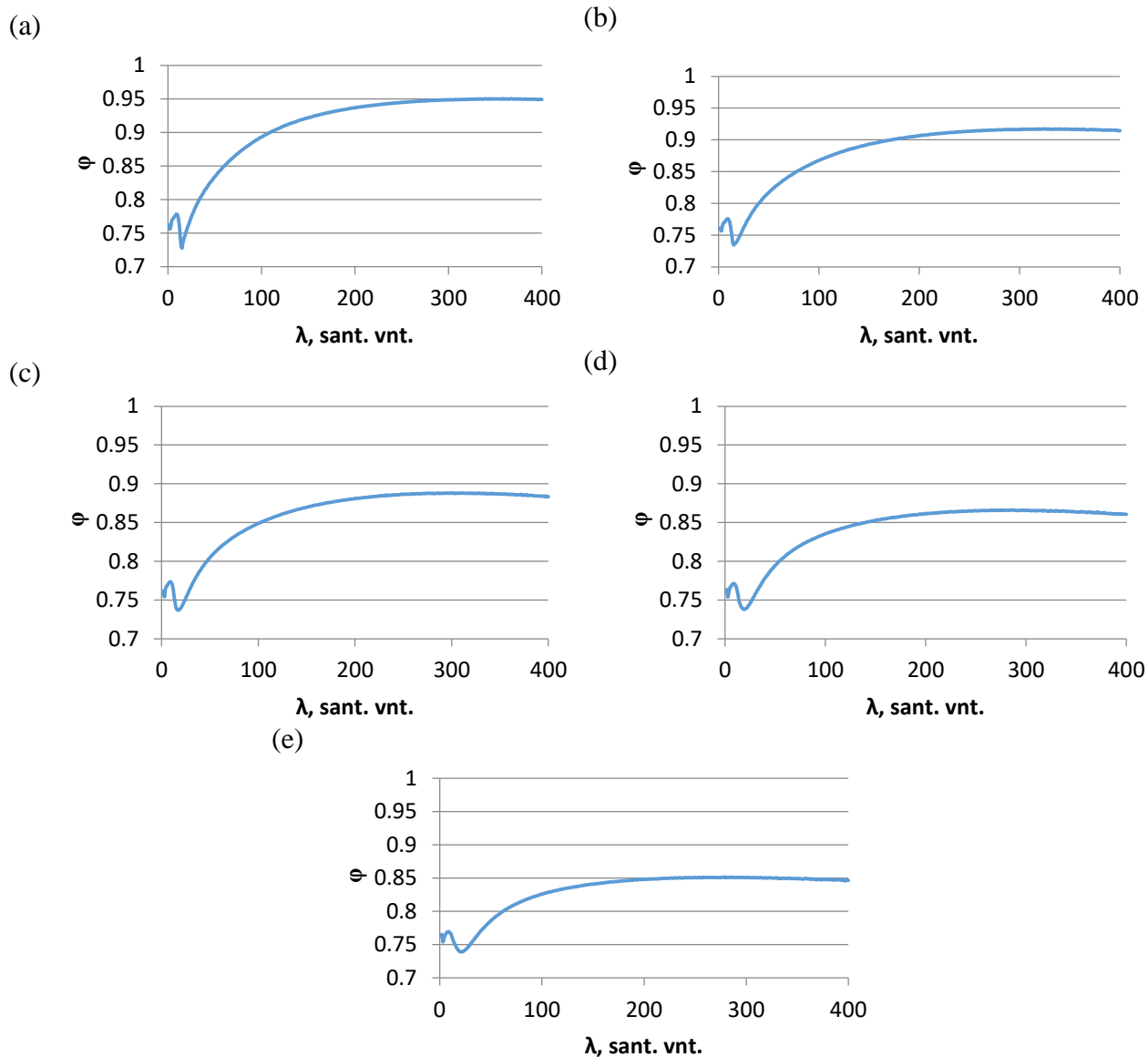
**36 pav.** 5 monosluoksnio užpildymas nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a)  $\beta = 15$  sant. vnt. b)  $\beta = 16$  sant. vnt. c)  $\beta = 17$  sant. vnt. d)  $\beta = 18$  sant. vnt. e)  $\beta = 19$  sant. vnt.

Antrojoje 5 sluoksnio užpildymo dalyje (žr. 37 pav.) matomas tolesnis minimumo taško judėjimas ir srities apie jį plėtimasis, plokštėjant kreivei ir didėjant minimumo taško užpildymui. Čia, kaip ir 35 paveikslo atveju, pradeda matytis nedidelės sluoksnio užpildymo fliuktuacijos prie aukštų  $\lambda$  reikšmių. 37.e paveiksle užpildymas pirmame ir paskutiniame tiriamos  $\lambda$  srities taške pasidaro apylygis, užpildymas nebepakyla aukščiau pradinio taško, kaip buvo kituose šio sluoksnio užpildymo grafikuose.



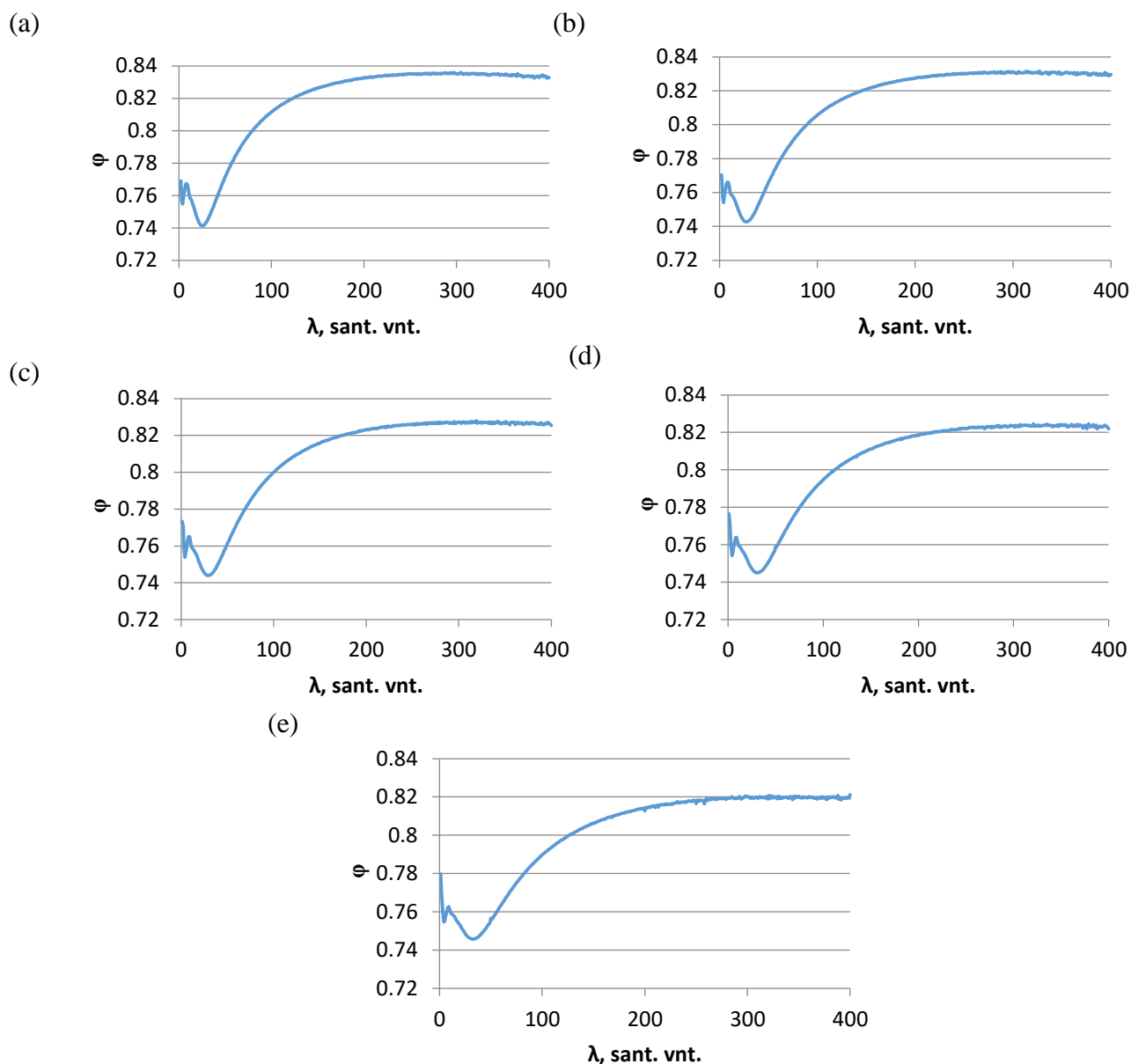
**37 pav.** 5 monosluoksnio užpildymas nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a)  $\beta = 21$  sant. vnt. b)  $\beta = 22$  sant. vnt. c)  $\beta = 23$  sant. vnt. d)  $\beta = 24$  sant. vnt. e)  $\beta = 25$  sant. vnt.

Pirmojoje 10 sluoksnio užpildymo dalyje (žr. 38 pav.) ir toliau matomas lėtėjantis užpildymo mažėjimas augant  $\beta$  reikšmėms. Čia jau pradeda matytis užpildymo mažėjimas, kai prie aukštų  $\lambda$  verčių pasiekiamas maksimumo taškas ir pereinama prie užpildymo mažėjimo. Dėl kreivės plokštėjimo, didėjant  $\beta$  reikšmėms, mažėjimas geriausiai matomas 38.d paveiksle. Čia vis dar matomas, nors ir minimalus, minimumo taško judėjimas link aukštesnių  $\lambda$  verčių ir užpildymo didėjimas, didėjant  $\beta$  vertėms. Kitaip nei ankstesniais atvejais, prie mažų  $\lambda$  reikšmių matomas nedidelis augimas pereinantis į mažėjimą. Šis augimas slopsta, didėjant  $\beta$  reikšmėms.



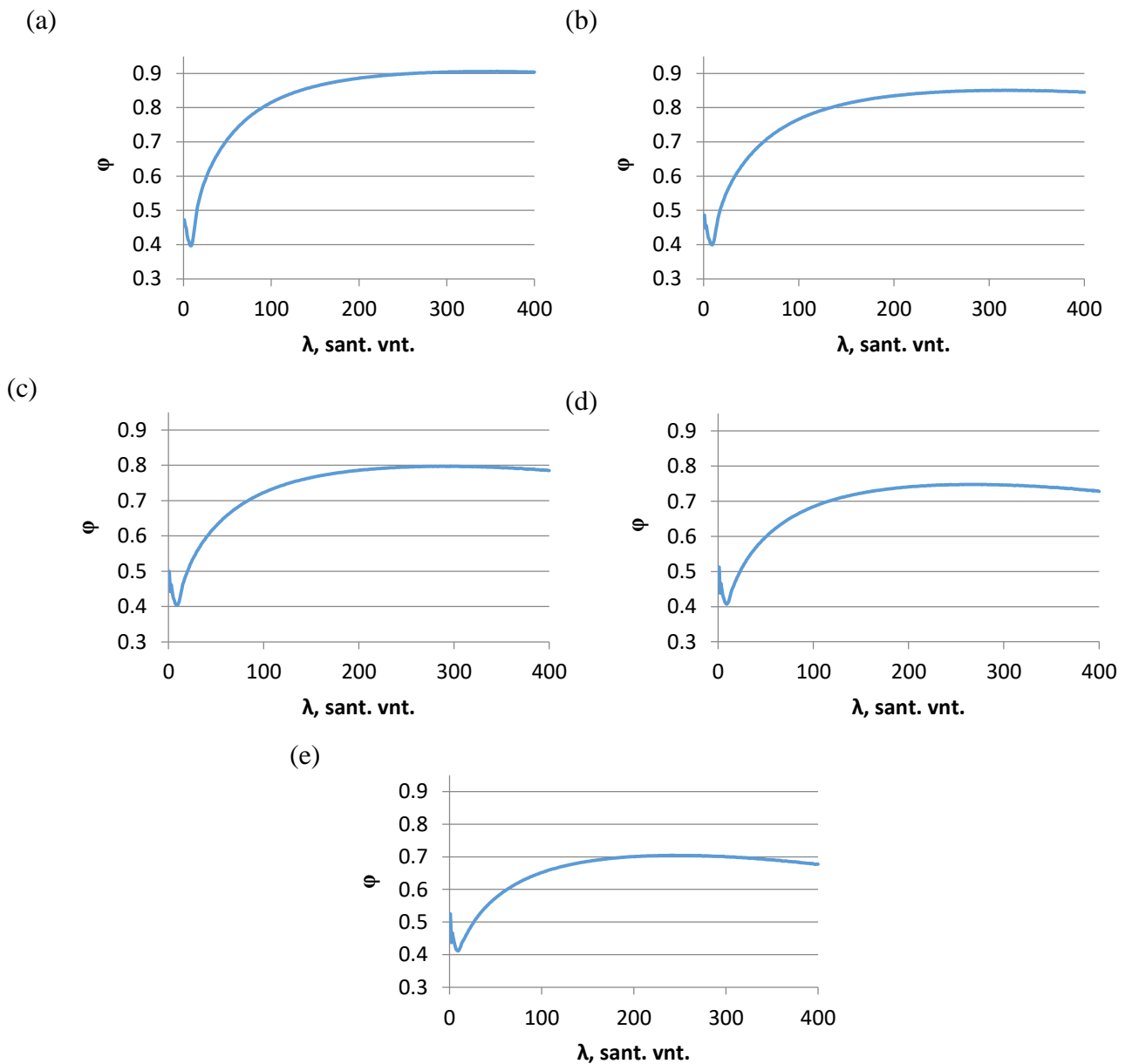
**38 pav.** 10 monosluoksnio užpildymas nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a)  $\beta = 15$  sant. vnt. b)  $\beta = 16$  sant. vnt. c)  $\beta = 17$  sant. vnt. d)  $\beta = 18$  sant. vnt. e)  $\beta = 19$  sant. vnt.

Antroji dalis 10 sluoksnio užpildymo grafikų (žr. 39 pav.) tęsia slopstančio mažėjimo dėsningumą. Čia užpildymo mažėjimas prie aukštų  $\lambda$  verčių daug sunkiau pastebimas, mažėjant kreivės amplitudei. Šiuo atveju taip pat pastebimas kitimas žemose  $\lambda$  vertėse, kai  $\lambda = 1$  užpildymas pradeda didėti, didėjant  $\beta$  reikšmėms, tai pastebimai nepasireiškė ankstesniuose sluoksniuose ar grafikuose. Pirmo taško pokytis lyginant 39.a ir 39.e paveikslus siekia 0,012300670 vieneto dalių užpildymui pakilus nuo 0,767534126 iki 0,779834796, kai  $\lambda = 1$ , atitinkamai  $\beta = 21$  ir  $\beta = 25$  santykinų vienetų.



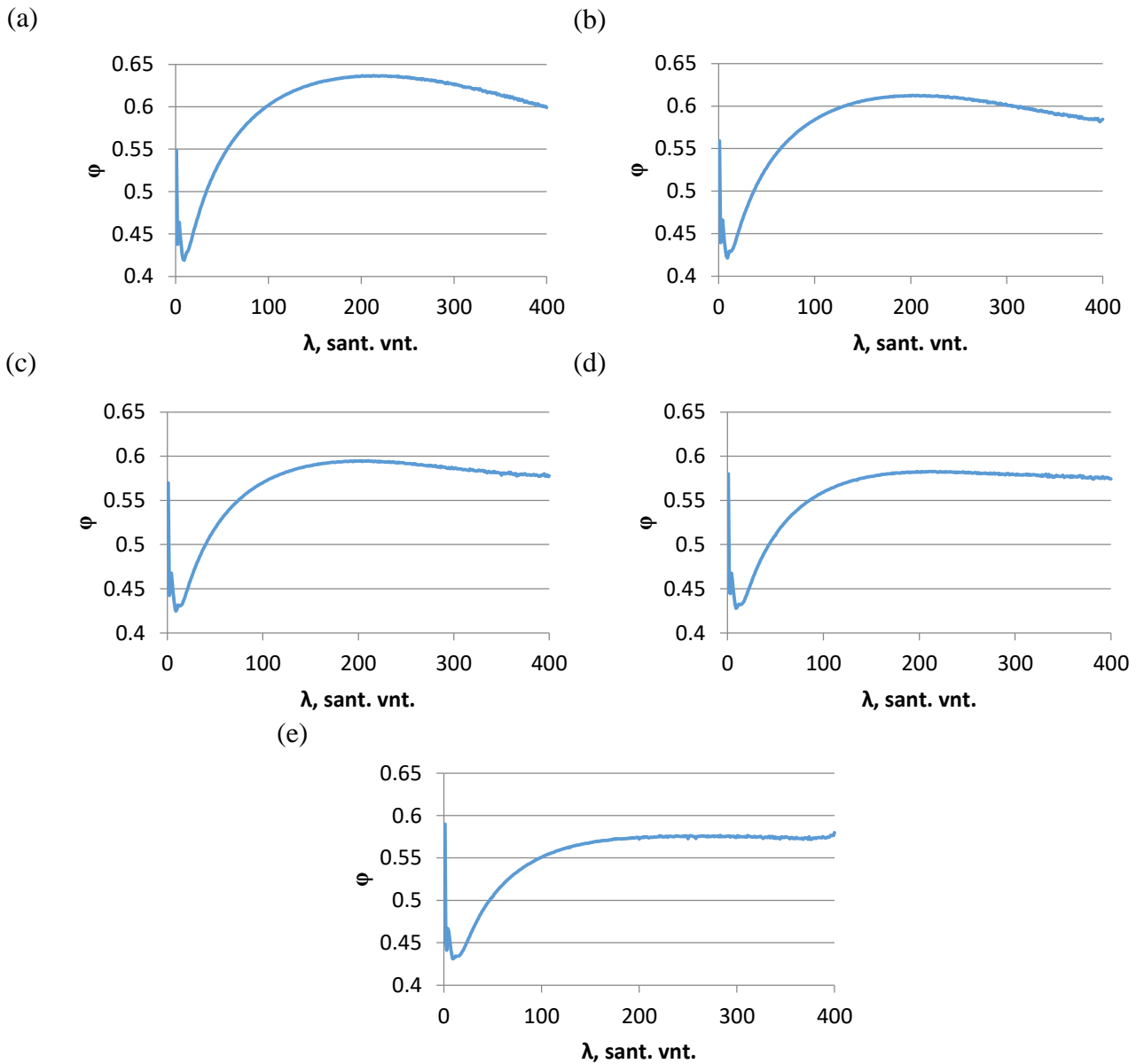
**39 pav.** 10 monosluoksnio užpildymas nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a)  $\beta = 21$  sant. vnt. b)  $\beta = 22$  sant. vnt. c)  $\beta = 23$  sant. vnt. d)  $\beta = 24$  sant. vnt. e)  $\beta = 25$  sant. vnt.

15 sluoksnio užpildymas srityje nuo  $\beta = 15$  iki  $\beta = 19$  pavaizduotas 40 paveiksle. Čia nebematomas šiurkštumo didėjimas prie mažų  $\lambda$  reikšmių, nors pirmasis taškas vis dar kyla į viršų, didėjant  $\beta$  reikšmėms. Užpildymas padidėja nuo 0,472787274 iki 0,524845817 vieneto dalies, kai  $\lambda = 1$ , atitinkamai grafikams  $\beta = 15$  ir  $\beta = 19$  santykinių vienetų. Kaip ir 38 paveikslo atveju, čia matomas užpildymo mažėjimas prie didelių  $\lambda$  verčių, kuris aiškiausiai pastebimas 40.e paveiksle. Prie didelių  $\lambda$  verčių taip pat matomas, visiems sluoksniams būdingas, lėtėjantis užpildymo mažėjimas, didėjant  $\beta$  reikšmėms.



**40 pav.** 15 monosluoksnio užpildymas nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a)  $\beta = 15$  sant. vnt. b)  $\beta = 16$  sant. vnt. c)  $\beta = 17$  sant. vnt. d)  $\beta = 18$  sant. vnt. e)  $\beta = 19$  sant. vnt.

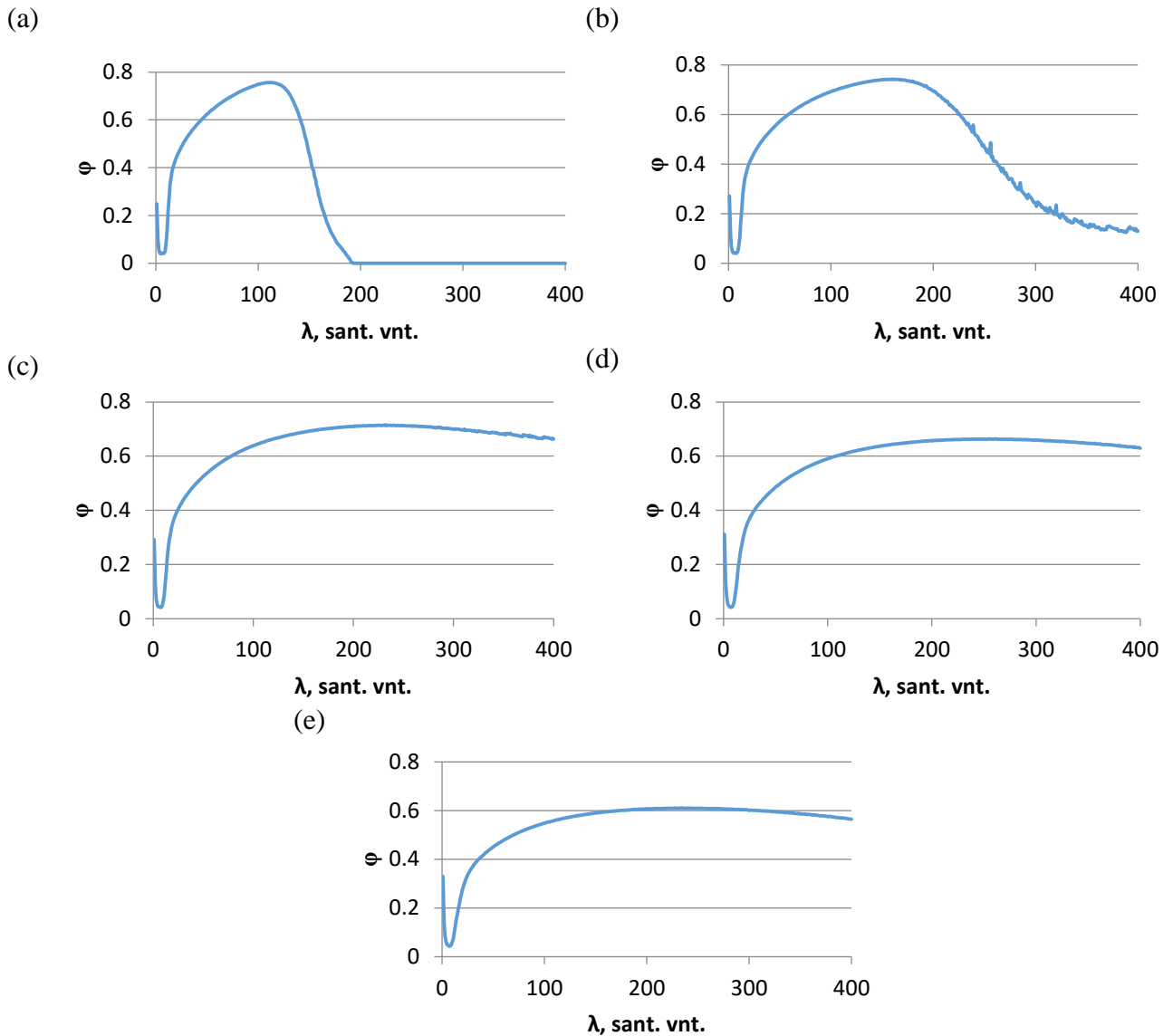
Antroji 15 sluoksnio užpildymo dalis (žr. 41 pav.) toliau demonstruoja pirmo taško augimą, čia jis aiškiai pastebimas. 41.e paveiksle taško, kur  $\lambda = 1$ , užpildymas pirmą kartą perkopia visus kitos kreivės taškus, pasiekiamas 0,589781701 vieneto dalies užpildymas. Lyginant 40.a ir 41.e grafikų taškus, kur  $\lambda = 1$ , gaunamas užpildymo padidėjimas per 0,116994427 vieneto dalies,  $\beta$  išaugus nuo 15 iki 25 santykinųjų vienetų. Nuo 41.d paveikslo matomas užpildymo mažėjimo slopimas prie aukštų  $\lambda$  reikšmių, 41.e paveiksle užpildymas beveik nebekinta jau pasiekus  $\lambda = 200$  santykinųjų vienetų.



**41 pav.** 15 monosluoksnio užpildymas nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a)  $\beta = 21$  sant. vnt. b)  $\beta = 22$  sant. vnt. c)  $\beta = 23$  sant. vnt. d)  $\beta = 24$  sant. vnt. e)  $\beta = 25$  sant. vnt.

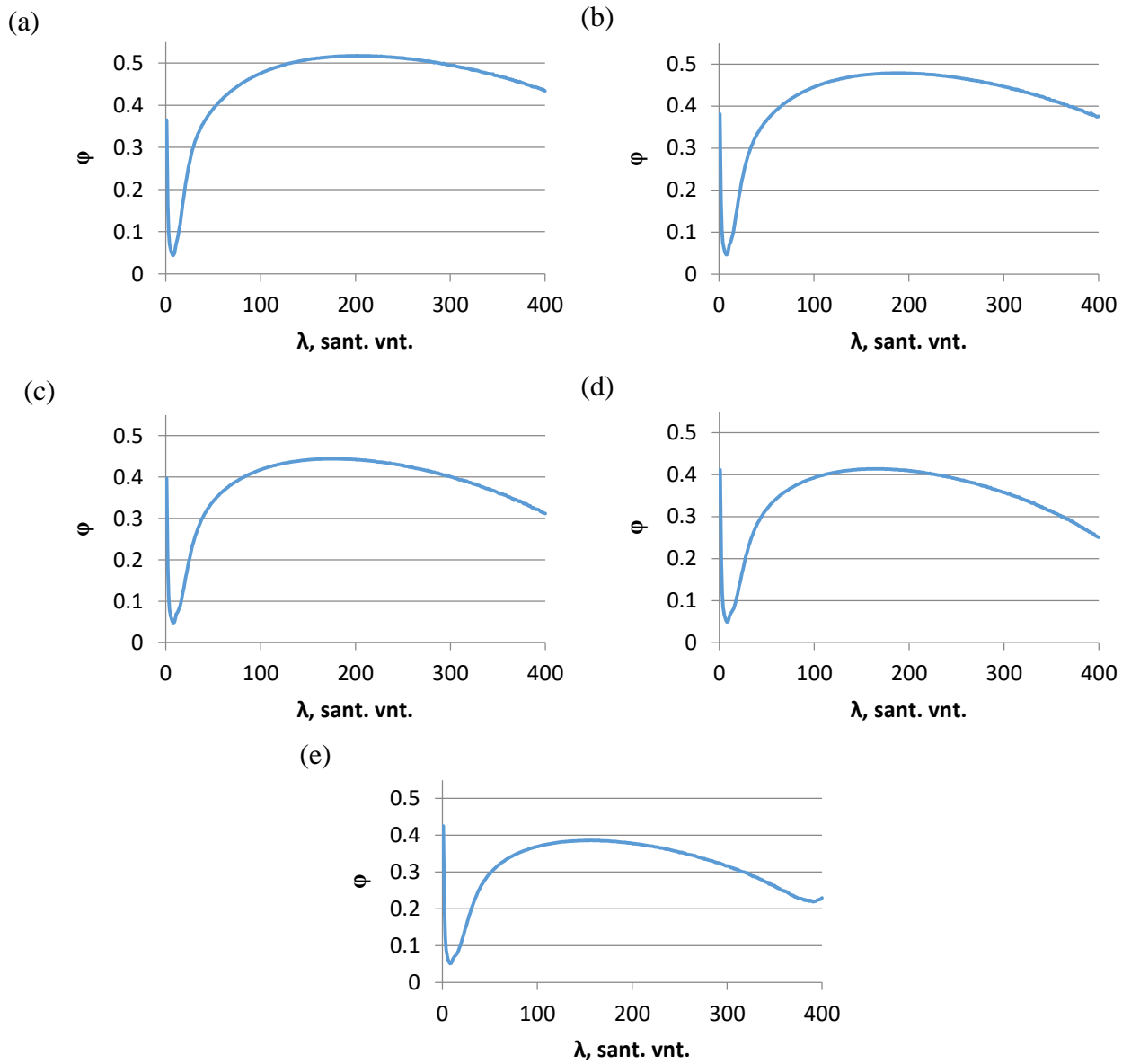
Paskutinis, pasirinktam  $\beta$  ruožui, nagrinėjamas sluoksnis yra 20, nuo kurio jau galima pastebėti visiškai tuščių  $\lambda$  ir  $\beta$  kombinacijų sričių. Pirmi penki grafikai pateikti 42 paveiksle. Čia iš karto pastebimas išskirtinis grafikas 42.a, kur nuo 200 santykinių vienetų užpildymas yra nulinis. Panašus mažėjimas pastebimas ir 42.b paveiksle, nors čia užpildymas nenukrenta žemiau 0,1 vieneto dalies prie aukštų  $\lambda$  reikšmių. Lyginant 42.c, d ir e paveikslus matoma tik mažėjimo pradžia prie aukštų  $\lambda$  reikšmių. Pasireiškia bendras užpildymo mažėjimas, didėjant  $\beta$ , lyginant  $\beta$  nuo 17 iki 19. Pirmo taško užpildymas nedaug padidėja, didėjant  $\beta$  reikšmėms, nuo 0,248911791 iki 0,329741049 vieneto dalies atitinkamai  $\beta = 15$  ir  $\beta = 19$  grafikams.





**42 pav.** 20 monosluksnio užpildymas nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a)  $\beta = 15$  sant. vnt. b)  $\beta = 16$  sant. vnt. c)  $\beta = 17$  sant. vnt. d)  $\beta = 18$  sant. vnt. e)  $\beta = 19$  sant. vnt.

Paskutinė nagrinėjamų grafikų grupė pavaizduota 43 paveiksle. Čia pateikiama 20 sluksnio užpildymo nuo atomų difuzijos ilgio  $\lambda$  priklausomybė, kai  $\beta = 21 - 25$  santykinių vienetų. Visuose 43 paveikslo grafikuose matomas užpildymo mažėjimas prie aukštų  $\lambda$  reikšmių. Maksimumo taškas ties apie 200 santykinių vienetų juda link mažesnių  $\lambda$  reikšmių, didėjant  $\beta$  reikšmėms. Kaip ir anksčiau pastebimas užpildymo mažėjimas didėjant  $\beta$  reikšmėms prie aukštų  $\lambda$  reikšmių, tuo pat metu didėjant užpildymui pirmajame grafikų taške. 43.d paveiksle pirmas taškas ir maksimumas, ties 150 santykinių vienetų tampa beveik lygūs, o 43.e paveiksle pirmas taškas savo užpildymu perkopia maksimumo tašką ir visus kitus šios kreivės taškus. Paskutiniame grafike (žr. 43.e pav.) galima pastebėti nedidelį užpildymo padidėjimą, didėjant  $\lambda$  reikšmėms šalia 400 santykinių vienetų, galimai užpildymas vėl kyla prie dar aukštesnių  $\lambda$  verčių. Kilimas pačioje grafiko pabaigoje nepastebimas jokiam kitame sluksnyje ar prie kitos  $\beta$  reikšmės.



**43 pav.** 20 monosluoksnio užpildymas nuo atomų difuzijos spindulio, kai: a)  $\beta = 21$  sant. vnt. b)  $\beta = 22$  sant. vnt. c)  $\beta = 23$  sant. vnt. d)  $\beta = 24$  sant. vnt. e)  $\beta = 25$  sant. vnt.

## Išvados

1. Esant  $\beta = 20$ , šiurkštumo priklausomybėje nuo difuzijos ilgio susidaro eksperimentiniuose rezultatuose stebimas minimumas, kuris susidaro dėl salelių dydžio kitimo, kintant difuzijos ilgiui.
2. Ties  $\beta = 20$  salelių tankis mažėja, didėjant atomų difuzijos ilgiui ir atomų energijai, bei salelių dydis lėtėjančiai didėja didėjant atomų difuzijos ilgiui ir atomų energijai.
3. Sluoksnių užpildymas mažėja prie mažų atomų difuzijos ilgio reikšmių, kuris pasiekęs minimumą pradeda didėti prie aukštų atomų difuzijos ilgio reikšmių. Didėjant sluoksnių numeriui minimumo taškas slenka link mažesnių atomų difuzijos ilgio reikšmių, mažėjant užpildymui. Bendras monoslukšnių užpildymas mažėja ir plokštėja, didėjant sluoksnių skaičiui.
4. Srityje aplink  $\beta = 20$  tašką, intervale nuo 15 iki 25 santykinų vienetų, maksimalios paviršiaus šiurkštumo reikšmės didėja, didėjant salelių difuzijos spinduliui, ir kreivės plokštėja prie aukštesnių atomų difuzijos ilgio reikšmių. Salelių tankis mažėja, didėjant salelių difuzijos ilgiui, kuris labiausiai pastebimas prie mažų atomų difuzijos ilgio reikšmių. Salelių dydis mažėja, didėjant salelių difuzijos ilgiui prie mažų atomų difuzijos ilgio reikšmių. Sluoksnių užpildymas mažėja, didėjant salelių difuzijos ilgiui prie didelių atomų difuzijos ilgio reikšmių.

## Literatūros sąrašas

1. OURA, K. LIFSHITS, V. G. SARANIN, A. A. ZOTOV, A. V. KATAYAMA, M. Surface Science - An Introduction. . Springer, Berlin, Heidelberg, 2004. ISBN 9783662051795.
2. BRUNE, H. Epitaxial Growth of Thin Films. In *Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA*, 2014. p. 421–492. ISBN 9783527411573.
3. PETROV, I. BARNA, P. B. HULTMAN, L. GREENE, J. E. Microstructural evolution during film growth. In *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films* [interaktyvus]. 2003. Vol. 21, no. 5, p. S117–S128. Prieiga per internetą: <<http://avs.scitation.org/doi/10.1116/1.1601610>>.
4. TANG, W. CHAO, Y. WENG, X. DENG, L. XU, K. Optical Property and the Relationship between Resistivity and Surface Roughness of Indium Tin Oxide Thin Films. In *Physics Procedia* [interaktyvus]. 2012. Vol. 32, p. 680–686. Prieiga per internetą: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.phpro.2012.03.618>>.
5. YANG, J. J. JI, C. X. YANG, Y. XIANG, H. CHANG, Y. A. Epitaxial growth and surface roughness control of ferromagnetic thin films on Si by sputter deposition. In *Journal of Electronic Materials* . 2008. Vol. 37, no. 3, p. 355–360. .
6. JEHL, Z. BOUTTEMY, M. LINCOT, D. GUILLEMOLES, J. F. GERARD, I. ETCHEBERRY, A. VOORWINDEN, G. POWALLA, M. NAGHAVI, N. Insights on the influence of surface roughness on photovoltaic properties of state of the art copper indium gallium diselenide thin films solar cells. In *Journal of Applied Physics* . 2012. Vol. 111, no. 11.
7. TIMALSINA, Y. P. HORNING, A. SPIVEY, R. F. LEWIS, K. M. KUAN, T. S. WANG, G. C. LU, T. M. Effects of nanoscale surface roughness on the resistivity of ultrathin epitaxial copper films. In *Nanotechnology* . 2015. Vol. 26, no. 7.
8. RUSU, F. PUSTAN, M. BÎRLEANU, C. MÜLLER, R. VOICU, R. BARACU, A. Analysis of the surface effects on adhesion in MEMS structures. In *Applied Surface Science* [interaktyvus]. 2015. Vol. 358, p. 634–640. Prieiga per internetą: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.apsusc.2015.09.052>>.
9. LÜDECKE, C. BOSSERT, J. ROTH, M. JANDT, K. D. Physical vapor deposited titanium thin films for biomedical applications: Reproducibility of nanoscale surface roughness and microbial adhesion properties. In *Applied Surface Science* [interaktyvus]. 2013. Vol. 280, p. 578–589. Prieiga per internetą: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.apsusc.2013.05.030>>.
10. IWATSUBO, S. TAKAHASHI, T. NAO, M. Effect of surface roughness on magnetic properties of Fe films deposited by dual ion beam sputtering. In *Thin Solid Films* [interaktyvus]. 1999. Vol. 343–344, p. 67–70. Prieiga per internetą: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0040609098017052>>.
11. FORGERINI, F.L. MARCHIORI, R. A brief review of mathematical models of thin film growth and surfaces. A possible route to avoid defects in stents. In *Biomatter* . 2014. Vol. 4, p. e28871.
12. CAFLISCH, R. Multiscale modeling for epitaxial growth. In *Proceedings of the International Congress of Mathematicians*, Madrid, August 22–30. 2006. p. 1419–1432..
13. FORNARI, C. I. FORNARI, G. O. RAPPL, P. H. DE ABRAMOF, E. S. TRAVELHO, J. DOS Monte Carlo Simulation of Epitaxial Growth. In *Epitaxy* [interaktyvus]. Rijeka: IntechOpen,

2018. ISBN 978-953-51-3890-7 Prieiga per internetą: <<https://doi.org/10.5772/intechopen.70220>>.
14. HELIN, W. ZULI, L. KAILUN, Y. Monte Carlo simulation of thin-film growth on a surface with a triangular lattice. In *Vacuum* . 1999. Vol. 52, no. 4, p. 435–440.
  15. EVANS, J. W. THIEL, P. A. LI, M. Kinetic Monte Carlo simulation of epitaxial thin film growth: Formation of submonolayer islands and multilayer mounds. In *AIP Conference Proceedings* . 2007. Vol. 916, p. 191–211. .
  16. PUURUNEN, R. L. VANDERVORST, W. Island growth as a growth mode in atomic layer deposition: A phenomenological model. In *Journal of Applied Physics* . 2004. Vol. 96, no. 12, p. 7686–7695.
  17. YANG, W. FENG, L. WANG, J. HAO, Y. Phase Field Modeling of Multilayer Epitaxial Growth. In *Advanced Materials Research* . 2012. Vol. 557–559, p. 2396–2400.
  18. KOCÁN, P. SOBOTÍK, P. OŠT’ÁDAL, I. SETVÍN, M. HAVIAR, S. Modeling growth of one-dimensional islands: Influence of reactive defects. In *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics* . 2009. Vol. 80, no. 6, p. 1–7.
  19. ANTONIO GÓMEZ, S. DE PINA, C. M. MARTIN-BRAGADO, I. Lattice kinetic modeling of the anisotropic growth of two-dimensional islands on barite (001) surface. In *Crystal Growth and Design* . 2013. Vol. 13, no. 7, p. 2840–2845.
  20. RAHMAN, T. S. GOSH, C. TRUSHIN, O. KARA, A. KARIM, A. Atomistic studies of thin film growth. In *Nanomodeling* . 2004. Vol. 5509, p. 14.
  21. POLITI, S. TOMELLINI, M. Kinetics of island growth in the framework of “planar diffusion zones” and “3D nucleation and growth” models for electrodeposition. In *Journal of Solid State Electrochemistry* . 2018. Vol. 22, no. 10, p. 3085–3098.
  22. GALDIKAS, A. Non-monotonous dependence of surface roughness on factors influencing energy of adatoms during thin island film growth. In *Surface Science* . 2006. Vol. 600, no. 13, p. 2705–2710.
  23. GALDIKAS, A. Thin film deposition onto the rough surface: Phenomenological investigations. In *Thin Solid Films* . 2002. Vol. 418, no. 2, p. 112–118.
  24. SRIUBAS, M. Samariu legiruoto cerio oksido plonųjų sluoksnių formavimas ir tyrimas: daktaro disertacija. Kaunas: Kauno technologijos universitetas. Prieiga per eLABa – nacionalinė Lietuvos akademinė elektroninė biblioteka, 2018.
  25. SRIUBAS, M. LAUKAITIS, G. The influence of the technological parameters on the ionic conductivity of samarium doped ceria thin films. In *Medžiagotyra* . 2015. Vol. 21, no. 1, p. 105–110.
  26. SRIUBAS, M. KAINBAYEV, N. VIRBUKAS, D. BOČKUTĖ, K. RUTKŪNIENĖ, Ž. LAUKAITIS, G. Structure and conductivity studies of scandia and alumina doped zirconia thin films. In *Coatings*, 2019, Vol. 9, no 5: 317.
  27. KREISS, H.O. ORTIZ, O.E. Introduction to Numerical Methods for Time Dependent Differential Equations. 1. Ed. John Wiley & Sons, Incorporated, 2014. ISBN 9781118838952.