

# Kinetic Monte Carlo法の基礎

東京大学大学院工学系研究科  
機械工学専攻  
泉 聡志

## 基礎

- 拡散定数 $D$ の粒子 $i$ の拡散過程で粒子 $i$ が $\delta$ の距離(格子間距離)をジャンプする事象が起こる速度(三次元)

$$R_i = \frac{6D}{\delta^2}$$

- すべての粒子の中から粒子 $i$ の拡散ジャンプが起こる場合の時間間隔→ポアソン分布に従う

$$\Delta t = \frac{1}{\sum_i R_i} \ln \chi \quad : \chi \text{ は一様乱数}$$

- $R_i$ は拡散過程だけでなく、例えば、インプラメンテーションなどによる粒子の供給、粒子のトラップや消滅についても定義でき、同様に扱える。

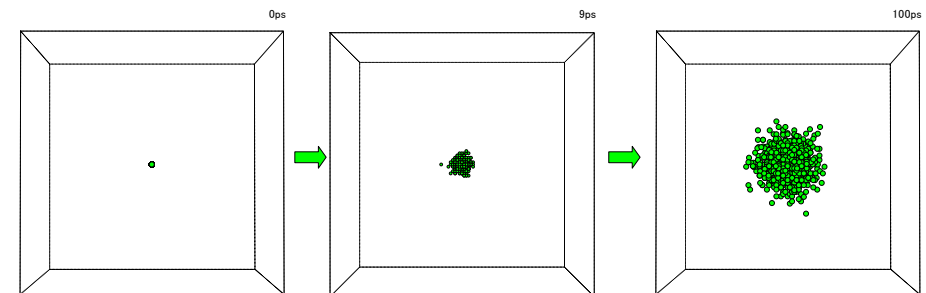
## 正攻法のアルゴリズム

- Kinetic Monte Carlo法(以後kMC)で、最も一般的な正攻法のアルゴリズム

1. 初期配置を作成
2. 事象を乱数により選択(拡散・供給・トラップ・消滅など)
3. 事象を起こす原子を乱数により選択
4. 選択した原子に事象を起こす
5. 自発的に起こる事象(トラップ・消滅など)を起こす
6.  $\Delta t$ を乱数により計算して、時間を $\Delta t$ 進め、2.へ戻る

## 適用例(三次元拡散)

- 拡散方程式を解かずにプロファイルが得られる。

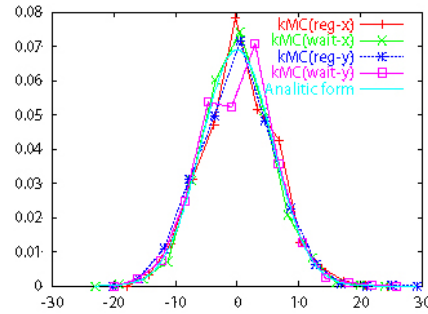


反応拡散方程式が簡単に解ける！！

PVWIN

## 適用例 (拡散プロファイル)

- 1次元random walk simulationの粒子位置の確率密度分布。
- 初期は位置0にすべての粒子を配置している。kMCステップは100,000で粒子数は1000個。



## プログラムの注意

### ■ 物理量の無次元化

- 距離  $\delta^* = \frac{\delta}{\delta_0}$   $\delta_0 = 1.0 \times 10^{-8}$  cm
- 時間  $t^* = \frac{t}{t_0}$   $t_0 = \delta_0^2 / D_0$  s
- 拡散係数  $D^* = \frac{D}{D_0}$   $D_0 = 1.0 \times 10^{-6}$  cm<sup>2</sup>/s

これにより、数値計算上は、基本距離は1、拡散係数は6となっている。

- 乱数にはメルセンヌツイスターを使っている。
- PostにはPVWINを使用している。

JOURNAL OF APPLIED PHYSICS  
VOLUME 84, NUMBER 7  
1 OCTOBER 1998

**An atomistic simulator for thin film deposition in three dimensions**

Hanchen Huang<sup>1</sup>  
Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, California 94550

George H. Gilmer<sup>2</sup>  
Bell Laboratories, Lucent Technologies, Murray Hill, New Jersey 07974

Tomas Diaz de la Rubia<sup>1</sup>  
Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, California 94550

(Received 5 March 1998; accepted for publication 19 June 1998)

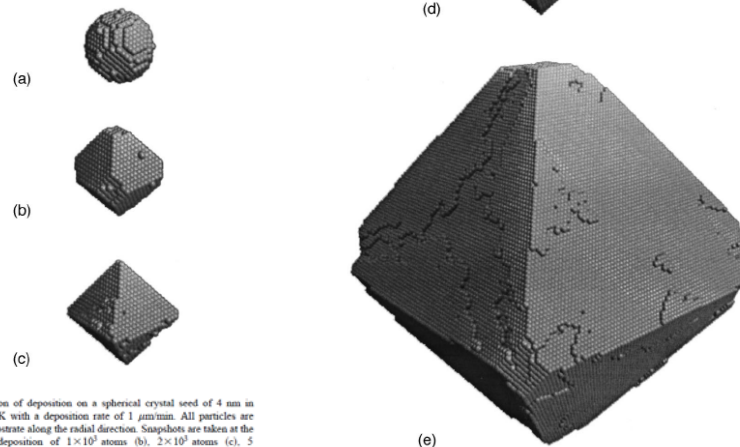


FIG. 7. Simulation of deposition on a spherical crystal seed of 4 nm in diameter at 200 K with a deposition rate of 1  $\mu\text{m}/\text{min}$ . All particles are injected to the substrate along the radial direction. Snapshots are taken at the start (a), after deposition of  $1 \times 10^5$  atoms (b),  $2 \times 10^5$  atoms (c),  $5 \times 10^5$  atoms (d), and  $5 \times 10^6$  atoms (e).

## 適用例 (Vクラスタの生成)

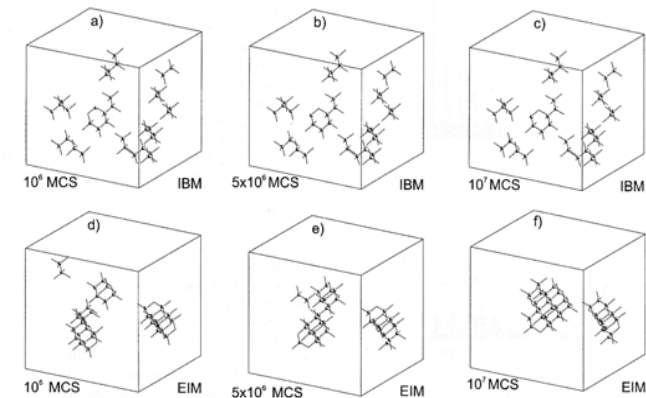


Fig. 3. Snapshots of V clusters obtained by the IBM (a-b-c) and the EIM (d-e-f) after  $10^6$ ,  $5 \times 10^6$  and  $10^7$  Monte Carlo steps (MCS).