遠距離二次元 DP モデル

2014/05/27 田平 好文

1, DP による表面形状の自律的加工



Reference: M.Naruse et al, A stochastic modeling of morphology formation by optical near-field processes, Appl Phys B(2011) **105** 186

DPP によって電荷が表面に蓄積され、Ag 微粒子との間にクーロン力が発生する。その結果、 クーロン力によって Ag 微粒子が反発されたり、別の方向にそれていったりする(ドリフト 過程)。

2, 遠距離二次元 DP モデル

```
まず、従来の二次元のモデルについて説明する。
足紋の一般式 Q_p = \sum_{i=\{-1,0,1\}, j=\{-1,0,1\}} S^{(i,j)}
下図の場合
S^{(1,1)} = 6
S^{(1,-1)} = 4
S^{(0,-1)} = 4
S^{(-1,-1)} = 4
S^{(-1,1)} = 3
Q_p = 6 + 4 + 4 + 4 + 3 = 21
Q_p < Zの場合、Pに堆積
Q_p \ge Zの場合、反発され堆積しない。 Z:しきい値
```

	3		6	
		Ρ		
	4	4	4	

- 次に、下図のように P にすでにクラスターが堆積している場合
- $Q_p < Z$ の場合、Pの近隣のマスに堆積(ドリフト過程)
- $Q_p \geq Z$ の場合、反発され堆積しない。



L×Lの二次元正方格子のモデルを考える。 $\Lambda_L = \{1, 2, \cdots, L\}^2$ Ag 微粒子が落下する site: $\vec{P} = (p_x, p_y) \in \Lambda_L$ $p_x, p_y \in \{1, 2, \cdots, L\}$ サイクル数: t $\in \{0, 1, 2, \cdots, T\}$

実際のモデルでは L=64, T=10000 としている。

Ag 微粒子に占有されたセルの数: $S_{\vec{p}}^{(i,j)}$ 例: $S_{\vec{p}}^{(1,1)} = 6$, $S_{\vec{p}}^{(1,-1)} = 4$, $S_{\vec{p}}^{(-1,1)} = 3$

3			6	6	
3	3		6	6	6
		\vec{P}		6	
	4	4	4		
		4			

ドリフト過程や反発はクーロン力により起こる。クーロン力をもとに、反発力を定義する。

上下左右それぞれの方向から受ける力

上方から受ける力:
$$f_u = \sum_{j=1}^{+\infty} \sum_{i=-1,0,1} \frac{S_p^{(i,j)}}{j^2}$$

下方から受ける力: $f_d = \sum_{j=-1}^{-\infty} \sum_{i=-1,0,1} \frac{S_p^{(i,j)}}{j^2}$
左方から受ける力: $f_l = \sum_{i=-1}^{-\infty} \sum_{j=-1,0,1} \frac{S_p^{(i,j)}}{i^2}$
右方から受ける力: $f_r = \sum_{i=1}^{+\infty} \sum_{j=-1,0,1} \frac{S_p^{(i,j)}}{i^2}$
理論上は無限遠方まで足し合わせるが、このモデルでは 20 マス先までとしている。
例: $f_r = \sum_{i=1}^{+\infty} \sum_{j=-1,0,1} \frac{S_p^{(i,j)}}{i^2} = \frac{4+0+6}{1^2} + \frac{0+6+6}{2^2} + \frac{0+0+6}{3^2} = 13.66666 \cdots$

			6		
3	3		6	6	6
		\vec{P}		6	
	4	4	4		
		4	V	V	V

Pに着地する条件

 $f_u < z_s \rightarrow f_d < z_s \rightarrow f_l < z_s \rightarrow f_r < z_s$ $f_u + f_d + f_l + f_r < z$ ドリフトする条件 $f_u \ge z_s \pm c f_d \ge z_s \pm c f_l \ge z_s \pm c f_d \ge z_s$ $f_u + f_d + f_l + f_r < z$ 反発する条件 $f_u + f_d + f_l + f_r \ge z$

ドリフトする方向を、上下左右の反発力によって決める。 $|f_l - f_r| > |f_u - f_a|$ の場合 $f_l > f_r$:右方向へドリフト $f_r > f_l$:左方向へドリフト

 $|f_u - f_d| > |f_l - f_r|$ の場合 $f_u > f_d$:下方向へドリフト $f_d > f_u$:上方向へドリフト

上図の場合

$$\begin{split} |f_u - f_d| &= \left|\frac{21}{2} - 13\right| = 2.5\\ |f_l - f_r| &= \left|\frac{31}{4} - \frac{41}{3}\right| = 5.91666 \dots\\ |f_l - f_r| &> |f_u - f_d|, \ f_r > f_l なので、左方向へドリフトする。 \end{split}$$

今回のモデルでは、以下の値を設定している。

L = 64

T = 10000

Z = 25

 $z_{s} = 12$

3. 表面形状



Fig.3a 遠距離二次元モデルの表面形状



Fig.3b クラスターサイズとその数の関係

Fig.3b は 100 回試行を行い、その平均をとった。 Fig.3a は 100 回の試行のうちの任意に選んだ 1 つの表面形状。



Reference: M.Naruse et al, A stochastic modeling of morphology formation by optical near-field processes, Appl Phys B(2011) **105** 187

実際の現象の寸法とその数の関係を示したヒストグラムは、塊の寸法の増加とともに指数 関数的に減少し、下矢印で示すようにある寸法において極大値をとる特徴がある。 遠距離二次元モデルも同じように寸法5で極大値をとっている。



次に、異方的な初期条件を与えたときの表面形状について調べる。 初期条件: t = 0で、縦 $10 \times$ 横 64 のサイズのクラスターが堆積している。

Fig.3c 縦 10×横 64 の初期条件を与えたときの遠距離二次元モデルの表面形状

Ξ. ---- ----1 - ----

Fig.3d 縦 10×横 64 の初期条件を与えたときの従来の二次元モデルの表面形状 (従来のモデルのしきい値 Z = 20)

このように、異方的な初期条件を与えると二次元遠距離モデルと従来のモデルの表面形状に違いがあることがわかる。

行ごとのクラスターサイズの平均のグラフで比較する。



Fig.3e 従来のモデルと遠距離モデルの行ごとのクラスターサイズの平均



Fig.3f 遠距離モデルの行ごとのクラスターサイズの平均

従来のモデルは初期条件で与えた大きな塊からの距離とクラスターサイズに相関はないが、 遠距離モデルは距離が遠くなるにつれて、クラスターサイズが大きくなっていることがわ かる。

- 4. 今後の課題
- ・しきい値を変えた場合に、表面形状にどのような違いがでてくるのか。
- ・モデルのスケールをさらに大きくできるか。→プログラミングの改良が必要?
- ・Fig.3f はどのような関数なのか
- ・条件分岐