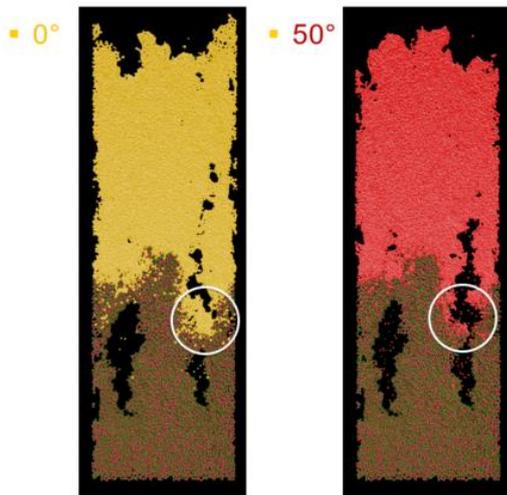


## Atomistische Dünnschichtwachstumssimulation in der Anwendung

Marco Jupé und Holger Badorreck<sup>1</sup>

Laserzentrum Hannover e.V. Hollerithallee 8, 30419 Hannover

[M.Jupe@LZH.de](mailto:M.Jupe@LZH.de)



Simulationen von Zick-Zack Struktur mittels klassischer Molekulardynamik

Die Entwicklung der Technik ist zunehmend an digitale Lösungen gebunden. Auch in Wissenschaft und Produktion werden immer mehr computergestützte Verfahren eingesetzt. Getrieben wird diese Entwicklung im Wesentlichen durch die verfügbare Hardware und die immer ausgereifere Software. Auf der Hardwareseite können große Rechen- und Speicherkapazitäten mittlerweile problemlos angemietet werden, Begriffe wie Cloud-Storage oder Cloud-Computing sind auch dem Laien geläufig. Auch im Bereich der Softwareentwicklung vollzieht sich derzeit ein Wandel. Computer sollen mehr und mehr manuelle Eingriffe ersetzen können. Computer müssen in der Lage sein, flexibel auf neue oder gelernte Situationen zu reagieren. Solche Bedingungen werden mit Hilfe von maschinellen Lernverfahren oder

neuronalen Netzen realisiert. Schon heute scheinen solche computerisierten Lösungen den menschlichen Fähigkeiten überlegen zu sein. Tatsächlich handelt es sich aber immer um Probleme, die eine begrenzte Komplexität aufweisen und bei denen die Maschinen lernfähig sind. Diese Ansätze sind vielversprechend, wenn eine ausreichend große Datenbasis vorhanden ist und diese in geeigneter Weise erweitert werden kann. Im Bereich der atomistischen Simulation trifft dies auf eine vergleichsweise große Anzahl von Problemen zu. Besonders reizvoll erscheinen Machine Learning Potentiale in der Wachstumssimulation, da sich die Umgebung der Atome ständig ändert. In der Tat gibt es bereits erste Machine Learning Potentiale, deren Leistungsfähigkeit derzeit untersucht wird. Es deutet sich jedoch an, dass nach wie vor die klassischen Potentiale nötig sind, um die Strukturen und die internen Kräfte korrekt in einer angemessenen Simulationsdauer zu beschreiben. Dieser Beitrag konzentriert sich schwerpunktmäßig auf die klassischen Potentiale. Hier wird das Konzept der virtuellen Beschichtung vorgestellt. Das Hauptaugenmerk liegt auf der Darstellung der physikalischen Parameter und der aus der atomistischen Simulation gewonnenen Parameter. Insbesondere die Struktureigenschaften erlauben eine Bewertung, die die experimentellen Analysen sinnvoll ergänzen und teilweise darüber hinausgehen. Dies bezieht sich insbesondere auf die Grenzflächeneigenschaften. Unabhängig von der Beschichtungsmethode stellen die Analysen der Grenzflächen eine große Herausforderung dar. Anhand von Sputterschichten in quantisierenden Nanolaminaten und GLAD-Schichten werden die Simulationen und experimentellen Daten vorgestellt und es wird gezeigt, in welchen Fällen die numerische Simulation Vorteile hat und in welchen Beispielen die experimentellen Daten derzeit noch unverzichtbar sind.