

Kinetické Monte Carlo (kMC) je stochastická metoda používaná k simulaci časového vývoje systému. Tento algoritmus nachází uplatnění v různých vědních oborech včetně fyziky tenkých vrstev. V této práci jsme vyvinuli modely založené na metodě kMC pro simulaci růstu a elektronických vlastností tenkých vrstev.

Nejprve jsme vyvinuli model pro simulaci růstu multiferoického perovskitu pomocí pulzní laserové depozice (PLD). Model byl ověřen pomocí údajů z literatury a poté použit k objasnění některých jevů pozorovaných při PLD růstu.

Inovativně jsme vysvětlili přenos materiálu mezi vrstvami, který je klíčový pro morfologii vrstvy, pomocí přirozených procesů založených pouze na konfiguraci ostrůvků na povrchu. Kromě toho se nám podařilo identifikovat příčinu experimentálně pozorovaného poklesu drsnosti povrchu s rostoucí frekvencí laseru.

Dále jsme použili metodu kMC ke studiu difuze polaronů s cílem hlouběji pochopit difuzi náboje v dopovaném hematitu. Použili jsme několik aproximací toho, jak mohou dopanty ovlivňovat přenos náboje, a zjistili jsme, že ovlivňují difuzi polaronů spíše globálně než v důsledku silných lokálních efektů. Náš model navíc naznačuje, že proces difuze závisí na typu polaronu. Simulovali jsme také tunelování děrových polaronů do dopovaného hematitu. I při použití obecného modelu jsme byli schopni reprodukovat měření provedená během tunelování.