

# تأثیر هسته بندی در رشد حجمی نانو ساختارها در سه شبکه SC، FCC و الماسی تحت زاویه مایل

معصومه خورانی، رضا ثابت داریانی<sup>۱</sup>

<sup>۱</sup> دانشگاه الزهراء

## چکیده

رشد نانو ساختارها را در سه شبکه SC، FCC و الماسی تحت زاویه مایل با روش مونت کارلو و تولید اعداد تصادفی شبیه سازی نمودیم. مرحله هسته بندی در هر سه شبکه به صورت SC انجام شد و معیار رشد حجمی نیز تعداد نزدیکترین همسایگی ها بود. تغییرات تراکم بسته بندی با زاویه فرودی در هر سه شبکه اندازه گیری شد. نتایج نشان می دهد که مقدار تراکم بسته بندی در هر سه شبکه با افزایش زاویه فرودی کاهش می یابد اما در هر زاویه فرودی مقدار این کمیت، در شبکه SC به علت یکسان بودن بخش هسته بندی و حجمی نسبت به دو شبکه FCC و الماسی بیشتر است.

## مقدمه

حدود بیش از ۲۰ سال پیش، رابرتس به این موضوع اشاره نمود که روش محاسباتی در دسته سوم فیزیک قرار می گیرد و مکمل فیزیک تئوری و تجربی است و فیزیک محاسباتی، شبیه سازی کامپیوتری و آزمایش کامپیوتری نیز نام هایی است که اغلب به این دسته سوم اطلاق می شود [۱]. روش های محاسباتی به دو گروه تقسیم می شوند بر حسب این که دارای یک روش مشخصی باشند مانند روش دینامیک مولکولی و یا دارای یک روش تصادفی باشند مانند روش مونت کارلو [۲]. روش تصادفی مونت کارلو کاربردهای زیادی دارد از جمله مطالعه مدهای رشد لایه های نازک [۳]. معمولاً لایه های نازک ضخامتی کمتر از یک میکرومتر دارند و از جمله روش های تهیه آن ها روش نشست بخار فیزیکی (PVD) است. یکی از روش های نشست بخار فیزیکی، نشست زاویه مایل (OAD) است که در این روش، مسیر ذرات فرودی مستقیم و تحت زاویه مشخص  $\alpha$  می باشد. دو پدیده مهم، خود سایه اندازی و محدودیت در تحرک پذیری ذرات فرودی، باعث ایجاد ساختارهایی می شوند که به صورت ستون هایی مجزا هستند و اندازه و چگالی این نانوستون های متخلخل تابعی از زاویه ورودی  $\alpha$  است [۴ و ۵]. رشد شامل دو مرحله می باشد، یکی تشکیل جزایر دو بعدی روی سطح زیرلایه (مرحله هسته بندی) که به صورت تصادفی تشکیل می گردند و سپس ایجاد ساختارهای ستونی (مرحله رشد حجمی) است.

## الگوریتم مدل

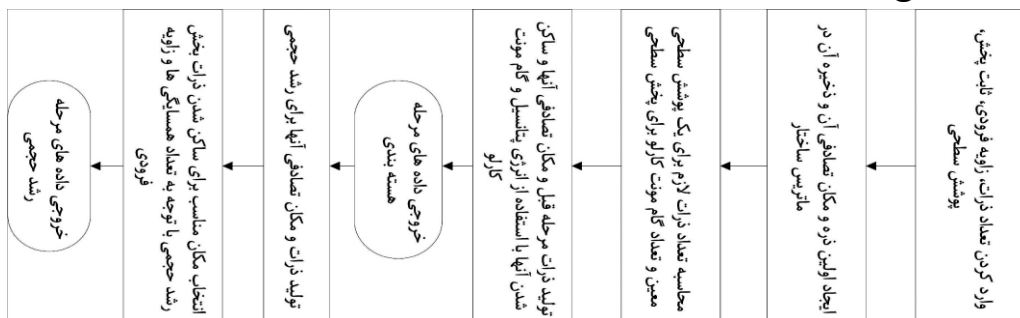
به دلیل کاهش زمان اجرای برنامه شبیه سازی، زبان فرترن ۹۰ انتخاب شده است. سیستم در نظر گرفته شده دارای ابعاد  $300 \times 300 \times 300$  است. فیزیک مدل ارائه شده در این مقاله، بر اساس شبیه سازی مونت کارلو و تولید اعداد تصادفی می باشد. در این سیستم سه بعدی و مکعبی شکل، رشد در راستای محور Z صورت می گیرد و صفحه X-Y در ارتفاع صفر همان سطح زیرلایه محسوب می شود و تا زمانی که ذره ای روی آن فرود نیامده باشد کاملاً هموار فرض شده است. در این صفحه به دلیل داشتن مرز و محدود بودن، شرایط مرزی دوره ای اعمال شده است تا اثرات مرزها از بین رود. تولید ذرات به صورت تصادفی است و از ارتفاع h به سمت زیر لایه فرستاده می شوند. پس از فرود ذرات با زاویه  $\alpha$  بر روی سطح زیرلایه، پدیده پخش سطحی اتفاق می افتد به این ترتیب که ذرات با گام های تصادفی که "گام مونت کارلو" نامیده می شود شروع به پخش می کنند تا به اولین همسایگی خود برسند یا تعداد گام

های تعریف شده به پایان برسد [۶ و ۷]. رابطه استفاده شده در این برنامه، برای به دست آوردن تعداد گام های مونت کارلو به صورت زیر است [۸]:

$$D = \frac{\gamma a}{\sqrt{r}} d \quad (1)$$

$d$  ثابت طول پخش می باشد و مقدار آن در برنامه ثابت فرض شده است،  $a$  ثابت شبکه و  $D$  گام مونت کارلو برای یک ذره است. اگر ذره پس از پایان  $D$  گام بایستد تبدیل به یک مونومر (تک ذره) می شود. اما اگر قبل از اتمام  $D$  گام به ذره دیگری برخورد کند تشکیل جزیره می دهد و ساکن خواهد شد. در مرحله هسته بندی توصیف شده، پوشش سطحی معینی (نسبت تعداد خانه های پر به کل خانه ها) تعریف می شود و بر هم کنش ذرات با یکدیگر با پتانسیل لnard-جونز محاسبه می شود که این پتانسیل اولین بار در سال ۱۹۵۷ توسط وود و پارکر در شبیه سازی مونت کارلو استفاده شد [۶]. پس از مرحله هسته بندی، مرحله رشد حجمی صورت می گیرد. مدل رشد در این مرحله روشست بالستیک (BD) است که در این مدل ذره با زاویه مایل وارد فضای خلا موجود شده و با دیدن اولین همسایگی به آن می چسبد و این گونه ساختار رشد می یابد.

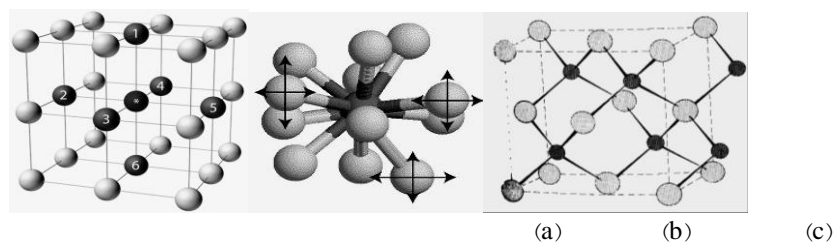
مدل محاسباتی شرح داده شده به صورت فلوجارت برای هر سه شبکه در شکل زیر نشان داده شده است:



شکل ۱: فلوجارت الگوریتم مدل شبیه سازی

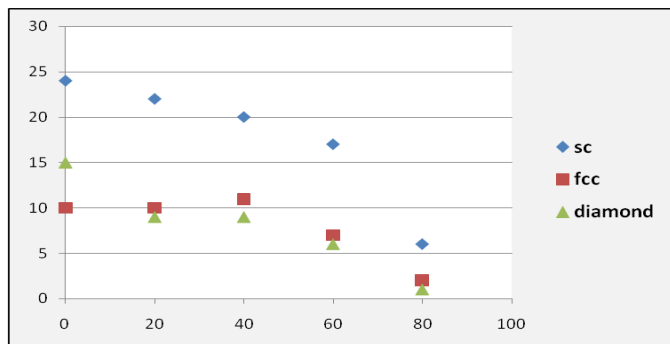
## بحث و بررسی نتایج

در این مقاله سه شبکه مکعبی ساده (sc)، مکعبی مرکز وجهی (fcc) و الماسی (diamond) شبیه سازی و بررسی شده اند. مرحله هسته بندی در هر سه برنامه شبیه سازی شده یکی و به صورت SC بوده و تنها تفاوت موجود در بخش رشد حجمی ساختار است. یکسان در نظر گرفتن بخش هسته بندی برای تاثیر این اثر در رشد حجمی است به همین دلیل مشابه ساختار یکی از شبکه ها در نظر گرفته شد. معیار شبیه سازی قسمت حجمی ساختار تعداد نزدیکترین همسایگی ها می باشد که در شبکه مکعبی ساده ۶ تا، مکعبی مرکز وجهی ۱۲ تا و الماسی ۴ تا فرض شده است. در شکل زیر این تعداد همسایگی ها برای هر سه شبکه نشان داده شده است:



شکل ۲: نمایش نزدیکترین همسایگی ها در سه شبکه (a) sc، (b) fcc و (c) الماسی

تراکم بسته بندی کمیته است که در این سه شبکه آن را مورد بحث قرار داده ایم. تعریف این کمیت به صورت نسبت حجم قسمت جامد ساختار به حجم کل آن است. تغییرات تراکم بسته بندی با زاویه  $\alpha$  در هر سه شبکه در جدول و شکل زیر نشان داده شده است:



شکل ۳: تراکم بسته بندی بر حسب زاویه  $\alpha$

$\alpha$	sc	fcc	diamond
۰	۲۴٪	۱۰٪	۱۵٪
۲۰	۲۲٪	۱۰٪	۹٪
۴۰	۲۰٪	۱۱٪	۹٪
۶۰	۱۷٪	۷٪	۶٪
۸۰	۶٪	۲٪	۱٪

جدول ۱: مقادیر تراکم بسته بندی پنج زاویه

همانطور که مشاهده می شود در هر سه شبکه با افزایش زاویه فرودی تراکم بسته بندی کاهش می یابد به این دلیل که در هر سه با افزایش زاویه نانوستون های متخلخل و اثر سایه اندازی خواهیم داشت اما به علت یکی بودن بخش بسته بندی و حجمی در شبکه SC، با افزایش زاویه فرودی تخلخل کمتری در نانو ستون ها ایجاد می شود و در نتیجه مقدار تراکم بسته بندی در هر زاویه فرودی در این شبکه نسبت به دو شبکه دیگر بیشتر است.

### نتیجه گیری

در این مقاله با روش تصادفی مونت کارلو و تحت زاویه مایل سه شبکه sc، fcc و الماسی شبیه سازی شد. مرحله بسته بندی در هر سه شبکه یکسان و به صورت SC و رشد حجمی نیز با توجه به تعداد نزدیکترین همسایگی های اول انجام شد. نتایج جدول و نمودار نشان می دهد که مقدار تراکم بسته بندی با افزایش زاویه فرودی به علت رشد نانوستون های متخلخل و پدیده سایه اندازی در هر سه شبکه کاهش می یابد اما مقادیر این کمیت در هر زاویه فرودی به دلیل یکی بودن بخش بسته بندی و حجمی در شبکه SC، نسبت به دو شبکه fcc و الماسی بیشتر است. از همکاری صمیمانه علمی خانم صبا خدیویان تشکر می نمایم.

### مرجع ها

- [۱] P. K. Mackeown and D. J. Newman, "Computational techniques in physics", Adam Hilger, Bristol, ۱۹۸۷.
- [۲] D. W. Heermann, "Introduction to the computer simulation methods of theoretical physics", Springer – Verlag, Heidelberg, ۲<sup>nd</sup> edn., ۱۹۹۰.
- [۳] S. Ozawa and Y. Sasajima, Vacuum, ۴۱ (۱۹۹۰) ۱۱۰۹.
- [۴] H. Huang, G. H. Gilmer, T. D. de la Rubia, J. Appl. Phys, ۸۴, No.۷ (۱۹۹۸) ۳۶۳۶.
- [۵] L. Dong, R. W. Smith, and D. J. Srolovitz, J. Appl. Phys. ۸۰, No. ۱۰ (۱۹۹۶) ۵۶۸۲.
- [۶] نیک عمل، مهدی؛ واعظ، امین الله؛ لهراسبی، امیر؛ "آشنایی با روش های شبیه سازی در فیزیک"، موسسه انتشارات علمی دانشگاه شریف؛ سال (۱۳۸۶) صفحه ۹۱ تا ۱۴۰.
- [۷] T. Karabacak, G-C. Wang, and T-M Lu, J. Vac. Sci. Technol. A ۲۲, No. ۴ (۲۰۰۴) ۱۷۷۸.
- [۸] R. S. Dariani, S. Minaeifard, and M. Rajabi, Journal of Optoelectronics and Advanced Materials, ۱۴, No. ۱۱-۱۲ (۲۰۱۲) ۸۹۰.