بیستمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران
و ششمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران
۸ تا ۱۰ بهمن ماه۱۳۹۲ - دانشگاه صنعتی شیراز

شبیه سازی لایه نشانی نانوساختارهای فوتونیکی ستونی زاویه دار با روش لایه نشانی مایل

وحید فلاح حمید آبادی، نادر صبح خیز و احمد مشاعی

تهران، دانشگاه تربیت مدرس، دانشکده علوم پایه، بخش فیزیک، گروه فیزیک اتمی و مولکولی، صندوق پستی ۱۴۱۱۵-۱۷۵

چکیده – در این تحقیق، یک شبیه سازی سه بعدی لایه نشانی با روش کنار نشست برای طراحی و ساخت نانومیله ها ی نازک ارائه شده است. ابتدا با استفاده از کد رایانه ای، مراحل رشد شبیه سازی شده و سپس با استفاده از دستگاه لایه نشانی بخار نشست (*PVD*) رشد داده می شوند. هم چنین مطالعه ریخت شناسی سطح لایه نازک نقره با روش لایه نشانی مایل مورد بررسی قرار گرفته است. تاثیر انحراف زاویه اتم های ورودی بر قطر نانومیله های نازک مورد مطالعه قرار گرفته و انحراف زاویه ۴ درجه برای مطابقت با نتایج تجربی انتخاب شده است. نتیجه این پژوهش تولید نانومیله هایی با قطر کمتر از ۴۰ نانومتر است.

کلید واژه-شبیه سازی، ریخت شناسی، لایه نشانی، نانومیله.

Simulation of growth of an array oblique nanorod in the glancing angle deposition (GLAD)

Vaheed Falah Hamidabadi, Nader Sobkhiz and Ahmad Moshaii

Department of Physics, Tarbiat Modares University, P.O.Box 14115-175, Tehran, Iran

Abstract- We describe an atomic simulator for thin film deposition in three dimensions. The simulation is designed to model the glancing angle deposition with ballistic deposition. For study the growth of Ag thin film, at first we simulate with Nano Scale Model (NASCAM) code, then we fabricate nanorods by glancing angle deposition method. We have also studied the morphology of the Ag surface that fabricate with glancing angle deposition technique. The effect of adatom incident angle fluctuation in nanorods fabrication and the diameter of Ag nanorod are studied. The diameter of nanorod is calibrated by 4 degree incident atom angle fluctuation. As a result, Ag nanorods with diameter less than 40 nm have been produced.

Keywords: Simulation, Morphology, Deposition, Nanorod.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2025-07-26]

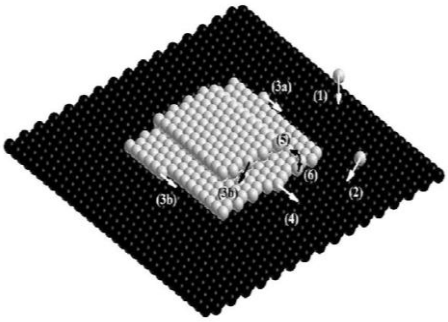
۱-مقدمه

در سال های اخیر رشد نانوساختارها با زاویه مایل یک روش جدید برای ساخت لایه های نازک متخلخل می باشد. ابداع روش لایه نشانی مایل در دهه اخیر سبب بوجود آمدن نانوساختارهایی با ویژگی های منحصر به فرد در زمینه های مغناطیسی، الکتریکی و اپتیکی شده است. در روش لایه نشانی مایل مشخصه های هندسی نانوساختارها به پارامترهای فیزیکی مهمی از جمله دمای محیط و زیرلایه، فشار و توپوگرافی سطح زیر لایه و زاویه لایه نشانی بستگی دارد [۱]. نانوساختارهای لایه نازک مجسمه ای (STF)[۱] نانوساختار های غیره ارگانیک و مواد غیره همگن هستند که با استفاده از لایه نشانی بخار نشست (PVD[۲]) قابل ساخت می باشند[۲]. از عوامل مهمی که بر رشد لایه های نازک و نانوساختارهای مجسمه ای تاثیر می گذارند می توان به میزان پخش سطحی، پدیده سایه زنی، زاویه رشد، نرخ رشد و دمای زیر لایه اشاره کرد[۴]. هم چنین اثرات مرتبط با ابعاد اتمی که باعث بوجودآمدن نانوخوشه ها در نانومیله ها می شوند باید در نظر گرفته شوند. اگر چه نمی توانیم بطور دقیق به مطالعه تک تک این اثرها بطور جداگانه در یک آزمایش تجربی بپردازیم اما یک روش جایگزین مناسب جهت کسب اطلاعات از میزان اهمیت هر کدام از این عوامل، استفاده از مدل شبیه سازی مونت کارلو برای رشد لایه های نازک است. استفاده از این روش نشان می دهد که انرژی اولیه پخش، اثر سایه زنی در طول لایه نشانی از اهم اثرات در رشد نانوساختارهای مجسمه ای هستند.

در این تحقیق، از کد NASCAM [۳]، جهت مطالعه رشد شبکه ای از نانومیله ها ی نقره مایل با روش کنار نشست استفاده شده است [۴]. هم چنین اثر میزان انحراف زاویه-ای نانوذرات برخوردکننده مایل بر قطر نانو میله های رشد یافته شبیه‌سازی شده است که نتایج نشان دهنده افزایش قطر نانومیله‌ها با افزایش میزان انحراف زاویه‌ای است. ریخت شناسی سطح برحسب اتم‌های لایه نشانی شده و زمان انجام لایه نشانی بررسی شده است.

۲-نرم افزار شبیه سازی

شبیه سازی های این پروژه با استفاده از کد NASCAM انجام شده است. در شبیه سازی که توسط کد صورت می گیرد مهم ترین پدیده هایی که در رشد لایه نازک دخیل هستند در نظر گرفته می شوند که به ترتیب می توان به پخش سطحی، اثرات سایه زنی اشاره کرد [۱].



شکل ۱- نمایی از پدیده هایی که در پخش سطحی وجود دارند. (۱) لایه نشانی-(۲) پخش سطحی-(3a) پخش در بالای لبه جزیره-(3b) پخش در کنار لبه جزیره-(۵)و (۶) بالا و پایین رفتن از جزیره.

۳-پدیده پخش سطحی

پدیده پخش از مهمترین پدیده های تاثیر گذار در رشد نانوساختار می باشد. در آن ذرات ورودی که بر روی سطح قرار می گیرند بعد از نشستن، درگیر فرآیند پخش می شوند. در این فرآیند ذره با حرکت بر روی لایه بر اساس معادله بولتزمن به کمترین انرژی ممکن دست می یابد [۴] و آنجا می نشیند البته زمان این فرآیند در حدود نانوثانیه می‌باشد. در فرآیند پخش سطحی با توجه به حرکت ذره و تعداد همسایه های اولیه و نهایی پدیده های مختلفی روی می‌دهد که در شکل ۱ مشاهده می شود [۴]. در شکل شماره ۱ انواع پخش سطحی دیده می شود که به قرار زیر است.۱- نشستن اتم‌ها ۲- پخش سطحی ۳(aوb)- پخش اتم‌ها در طول لبه جزیره ها ۴- جدا شدن از جزیره ها ۵ و۶- بالاو پایین رفتن از یک لایه. تمام پدیده هایی که در قسمت بالا لیست شده اند علاوه بر روی زیرلایه، بر روی اتم های لایه نشانی شده نیز انجام می‌شوند. مقادیر انرژی فعال‌سازی فرآیندهای پخش سطحی نقره از مقاله هایی که در این مورد وجود داشت

---

[۱] Sculpture Thin Films
[۲] Physical Vapor Deposition

[Downloaded from www.opsi.ir on 2025-07-26]

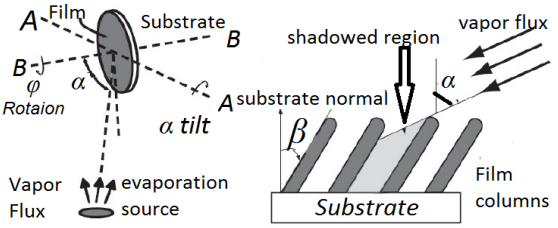
استخراج شده است [۵و۶] که مقادیر آن در جدول ۱ آمده است.

لایه نشانی نقره بر روی نقره	
نرخ رشد atoms/s cm²	3×10^{12}
دما(°k)	300
Mechanism 2,(eV)	0.4
Mechanism3a, (eV)	0.41
Mechanism 3b, (eV)	0.61
Mechanism 4, (eV)	0.99
Mechanism 5, (eV)	4.5
Mechanism 6, (eV)	4.5

جدول ۱-انرژی فعال سازی پدیده های نشان داده شده در شکل ۱

۴-پدیده سایه افکنی

پدیده سایه افکنی یکی از پدیده هایی است که نقش اساسی در رشد لایه های نازک ایفا می‌کند و در ساخت لایه نازک مجسمه ای، این عامل باعث رشد نانومیله ها می‌شود. همانطور که در شکل شماره ۲ نشان داده شده است ذراتی که با زاویه مایل به سطح نزدیک می‌شوند توسط اتم های از قبل لایه نشانی شده به دام انداخته می‌شوند اثر سایه افکنی می‌گویند. در لایه نشانی مایل زاویه ذرات ورودی بسته به شرایط لایه نشانی انتخاب می شوند و البته زاویه ای که انتخاب شده با زاویه لایه نشانی یکسان نیست این میزان انحراف با $\Delta\alpha$ نشان داده می شود که قابل تغییر بوده و میزان لحاظ شده برای آن ۴ درجه می باشد و این میزان انحراف باعث افزایش اثر سایه افکنی می شود.



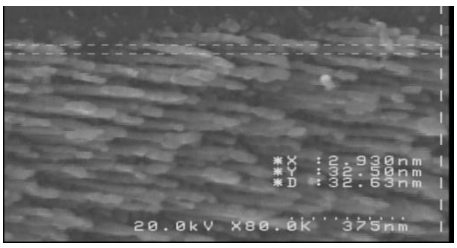
شکل۲-دستگاه لایه نشانی بخار نشست مایل(PVD)

۵-نتایج و بحث

زبری[۳] از پارامترهای مهم در ریخت شناسی[۴] سطح لایه است. برای حالت های مختلف انحراف زاویه ای با تغییرات زمانی و اتم های لایه نشانی شده بدست آمده است. از فرمول زیر برای محاسبه آن استفاده شده است.

$$W(L,t)=\sqrt{\frac{1}{L}\left(\sum_{i=1}^{l}\left[h(i,t)-\bar{h}(t)\right]^2\right)}$$

یکی از روش های ساخت لایه های نازک استفاده از روش لایه نشانی مایل[۵] می باشد که در شکل ۲ ساختار هندسی آن نشان داده شده است، α زاویه با محور x، ϕ زاویه حول محور z، که در آزمایش $\phi=0$ ،$\alpha=86^0$ انتخاب شده است ولی یک پارامتر دیگر، تغییرات زاویه α است و همواره در هنگام ساخت وجود داشته و باعث افزایش قطر نانولوله های تشکیل شده می‌شود که البته پدیده‌ای نامطلوب در ساخت نانولوله ها ی نازک می‌باشد. یکی از اهداف پروژه حاضر تولید نانولوله هایی با قطر کمتر و شکل دقیقتر می‌باشد. با تغییر $\Delta\alpha$ می‌توان در شبیه سازی و ساخت نانومیله ها به هدف نزدیک شد. در شبیه سازی انجام شده یک حجم به ابعاد $L_x\times L_y\times L_z$ ،$100\times200\times20$ با شرایط مرزی در نظر گرفته شده است. انتخاب تغییرات انحراف زاویه مناسب برای رشد نانومیله ها به گونه ای است که با نتایج تجربی سازگار باشد. ریخت شناسی نانومیله های شبیه سازی شده توسط کد با تصاویر بدست آمده از میکروسکوپ الکترونی روبشی(SEM)[۶] مطابقت داده شده است.در شبیه‌سازی انجام شده زاویه ورودی $\alpha=86^o$ انتخاب شده است.



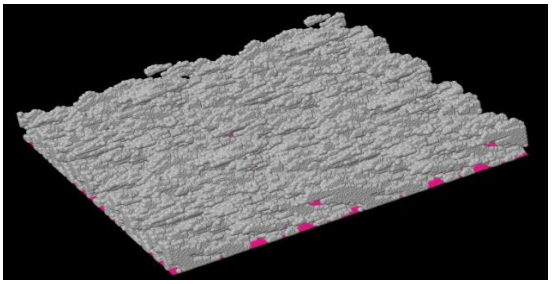
شکل ۳۰-تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) برای لایه نازک نقره، $\alpha=86^o$ و $T=300K$، نرخ رشد $0.5(\frac{nm}{s})$

---

[۳] Roughness
[۴] Morphology
[۵] Glancing Angle Deposition
[۶] Scanning Electron Microscope

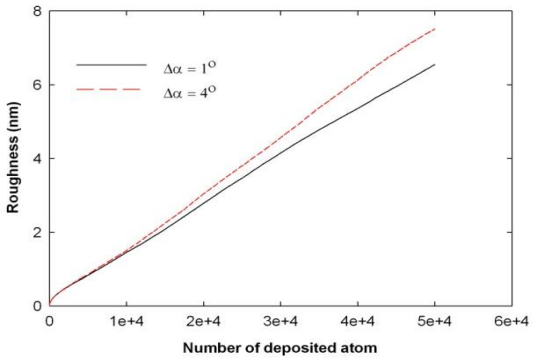
[Downloaded from www.opsi.ir on 2025-07-26]

همواره یک میزان انحراف زاویه ای، $\Delta\alpha$ در دستگاه لایه نشانی وجود دارد که زیاد بودن این عامل باعث زیاد شدن قطر نانولوله ها می‌شود که با میزان سازی[۷] انجام شده شبیه سازی و لایه نشانی $\Delta\alpha = 4^o$ در نظر گرفته شده است ودر شکل ۴ نتایج شبیه سازی نشان داده شده است.

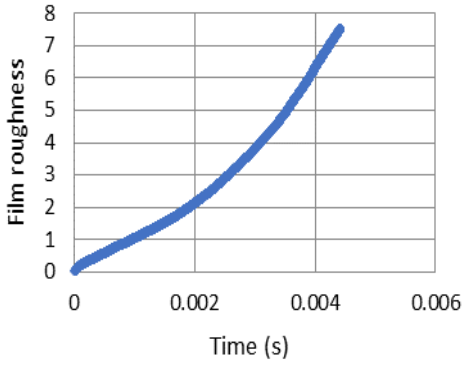


شکل ۴۰-نتایج شبیه سازی در زاویه $\alpha = 86^o$ و $\Delta\alpha = 4^o$

در مورد ریخت شناسی سطح لایه می توان گفت زبری سطح با فزایش انحراف α زیاد می شود. همان طور که در نمودار شکل ۵ دیده می شود با افزایش انحراف زاویه ای، ریخت شناسی سطح نیز افزایش می یابد. البته در نمودار شکل۵ زبری بر حسب اتم های لایه نشانی شده رسم شده است و در حالت کلی ریخت شناسی با تعداد اتم های لایه نشانی شده رابطه مستقیم دارد ولی زبری با زمان انجام لایه نشانی رابط خطی ندارد. در شکل ۶ نتایج زبری لایه بر حسب زمان لایه نشانی برای اتم های نقره در زاویه $\alpha = 86^o$ و $\Delta\alpha = 4^o$ آمده است در لایه نشانی انجام شده برای کم کردن انحراف زاویه ای ذرات فرستاده شده اصلاحاتی در دستگاه لایه نشان بخار نشست انجام شده است، از جمله می توان به افزایش فاصله منبع بخار[۸] تا زیر لایه را نام برد (نتایج در شکل ۳).



شکل۵- نمودار زبری سطح بر حسب اتم های لایه نشانی شده در $\alpha = 86^o$



شکل۶-نمودار زبری لایه نازک بر حسب تغییرات زمان در $\alpha = 86^o$ و $\Delta\alpha = 4^o$

۶-نتیجه گیری

شبیه سازی نانومیله های مایل نقره با استفاده از نرم افزار NASCAM انجام شده است. بررسی های تجربی و شبیه سازی انجام شده نشان می دهد که می توان با تعیین بازه مشخص برای انحراف زاویه ای نتایج شبیه سازی را با نتایج تجربی تطابق داد. بررسی ها نشان می‌دهد که در هر دستگاه لایه نشانی بخار نشست (PVD) یک انحراف زاویه ای ذاتی وجود دارد، می توان با تغییر ساختار هندسی دستگاه انحراف زاویه ای را کم کرده و به نانومیله هایی با قطر کمتر دست یافت. ریخت شناسی سطح لایه نازک نقره نشان می‌دهد با افزایش انحراف زاویه ای، زبری لایه افزایش می‌یابد و این افزایش با تعداد اتم های ورودی رابطه مستقیم وبا زمان لایه نشانی رابطه غیر خطی دارد.

مراجع

[1] A.-L. Barabási, H.E. Stanley, "Fractal Concepts in Surface Growth", Cambridge University Press, Cambridge, 1995.

[2] A. Lakhtakia and R. Messier, "Sculptured thin films: Nano engineered morphology and optics"

[3] S. Lucas, J.F. Colomer, C. Bittencourt, P. Moskovkin, N. Moreau, "*Surface phenomena involved in the Formation of Co nanoparticles on amorphous carbon and SiO2 deposited by magnetron sputtering*", **Applied Physics A**: Materials Science & Processing, 99 (2010) 125.

[4Jason Cheung, "Simulation of Engineered Nanostructured Thin Films", *THESIS*, Kingston, Ontario, Canada March 2009

[5]J.W.Evans, P.A. Thiel, M.C. Bartelt**, Surface Science Reports** 61(2006)61.

[6]M.z. Li, P.-W.Chung, E. Cox,C.J.Jenks, P.A. Thiel,J.W. Evans**, Physical Review B**

[۷] Calibration

[۸] Target

[Downloaded from www.opsi.ir on 2025-07-26]