

## شبیه سازی رشد نانوساختارهای الماسی تحت زاویه مایل در هسته بندی مربعی و

### مثلثی با پتانسیل ترسوف و بررسی ناهمواری سطح آنها

رضا ثابت داریانی و معصومه خورانی

گروه فیزیک، دانشگاه الزهرا (س)

( دریافت مقاله ۹۴/۰۸/۰۶ - پذیرش مقاله : ۹۵/۰۷/۱۲ )

#### چکیده

رشد نانوساختارها را در شبکه الماسی تحت زاویه مایل با روش مونت کارلو و تولید اعداد تصادفی شبیه سازی نمودیم. مرحله هسته بندی به دو صورت مربعی و مثلثی انجام شد. در مرحله هسته بندی، برهم کنش ذرات ابتدا مطابق پتانسیل لنارد جونز و سپس پتانسیل سه ذره ای ترسوف انتخاب گردید. همچنین ساختار شبکه در رشد حجمی نیز الماسی در نظر گرفته شد. با تغییر پتانسیل از لنارد جونز به ترسوف مقادیر ناهمواری سطح در هر دو هسته بندی مربعی و مثلثی کاهش یافت. اثر زاویه فرودی بر روی رشد به وسیله تراکم بسته بندی و ناهمواری سطح بررسی گردید. نتایج امان نشان داد با افزایش زاویه فرود، تراکم بسته بندی کاهش و مقدار ناهمواری سطح افزایش یافت.

واژه‌های کلیدی: شبیه سازی، فرود مایل، شبکه الماسی، نانوساختارها، ناهمواری سطح.

## Simulation of Diamond Nanostructures Growth under Oblique Angle at Square and Triangular nucleation with Tersoff Potential and study of their Surface Roughness

R. S. Dariani and M. Khorani

Department of Physics, Alzahra University

(Received 28 October 2015, accepted 03 October 2016)

#### Abstract

Nanostructures growth for a diamond lattice under oblique angle by Monte-Carlo method and random number generation are simulated. Nucleation stage have done by two kinds; square and triangular. At nucleation stage, interactions between particles have chosen at first Lennard-Jones and then Tersoff. With variation potential from Lennard-Jones to Tersoff, surface roughness decreases for both square and triangular nucleation. Oblique angle effect on growth is studied by packing density and surface roughness. Our results showed that with increasing incident angle, packing density decreases and surface roughness increases.

**Keywords:** Simulation, Incident angle, Diamond lattice, Nanostructures, Surface roughness.

**E-mail of corresponding author:** dariani@alzahra.ac.ir.

## مقدمه

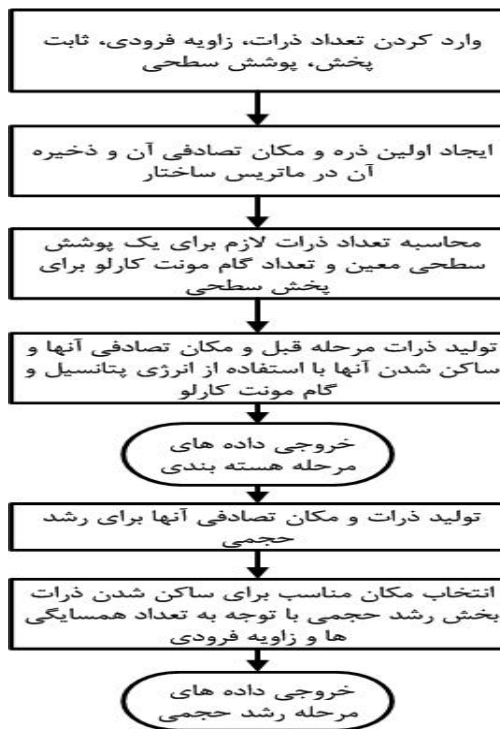
گازهای رسوبی بستگی دارد. تغییر زاویه فرود و همچنین چرخش و عدم چرخش زیرلایه در روش GLAD که در آن با چرخش زیرلایه حول دو محور یکی در راستای سطح زیرلایه و عمود بر شار ذرات فرودی و دیگری عمود بر سطح زیرلایه انجام می‌گیرد. به این ترتیب که چرخش حول محور اول، زاویه ذرات فرودی را کنترل می‌کند و چرخش زیرلایه حول محور دوم با سرعتی معین تأثیر در تغییر ساختار خواهد داشت که منجر به تشکیل ساختارهای متفاوتی از جمله زیگ-زاگ<sup>۳</sup>، مارپیچ<sup>۴</sup>، ستونی<sup>۵</sup>، خمیده<sup>۶</sup> می‌شود [۷]. این تنوع تفاوت در ساختار فیزیکی باعث تفاوت در خواص آنها نیز می‌گردد. برای اینکه ساختار را برای کاربرد خاصی بهینه کنیم، لازم است بتوانیم اثرات شرایط رانش در ساختار رشد یافته را پیش‌بینی کنیم. اثر زاویه فرودی در این شبیه سازی بر روی رشد فیلم نازک با کمیتی به نام تراکم بسته بندی که برابر است با نسبت حجم قسمت اشغال شده ساختار به حجم کل آن، بررسی می‌شود. رشد شامل دو مرحله است: یکی تشکیل جزایر دو بعدی روی سطح زیرلایه (مرحله هسته بندی) که به صورت تصادفی تشکیل می‌گردند و سپس ایجاد ساختارهای ستونی (مرحله رشد حجمی) است. همچنین از آنجایی که دستگاه‌های اصلی، میکروبردازشگرها و حافظه‌ها از سیلیکان ساخته می‌شوند ساخت دستگاه‌های اپتوالکترونیکی بر پایه سیلیکان موثرترین روش برای مجتمع کردن سیستم‌های اپتیکی - الکترونیکی است. علاوه بر این، تکنولوژی سیلیکان خواص قابل توجهی دارد از جمله این که بزرگترین و اصلی‌ترین تکنولوژی قابل دسترس تا به امروز بوده است. از لحاظ پیچیدگی به خوبی می‌تواند ساختاری در حد نانومتر و ساختاری بزرگ در مقیاس گیگا داشته باشد. با تکنولوژی سیلیکان می‌توان هر نوع هندسه‌ای را ساخت

شبیه سازی کامپیوتری از تحقیقات گسترده علم مواد که در توسعه و پردازش مواد جدید است پشتیبانی می‌کند. یک شبیه سازی کامپیوتری اقدام به تفسیر مشاهدات تجربی می‌کند و تئوری و تجربه را به هم پیوند می‌دهد [۱]. حدود بیش از ۲۰ سال پیش، رابرتس به این موضوع اشاره نمود که روش محاسباتی در دسته سوم فیزیک قرار می‌گیرد و مکمل فیزیک تئوری و تجربی است. فیزیک محاسباتی، شبیه سازی کامپیوتری و آزمایش کامپیوتری نیز نام‌هایی است که اغلب به این دسته سوم اطلاق می‌شود [۲]. روش‌های محاسباتی به دو گروه تقسیم می‌شوند بر حسب این که دارای یک روش مشخصی باشند مانند روش دینامیک مولکولی و یا دارای یک روش تصادفی باشند مانند روش مونت کارلو [۳]. روش تصادفی مونت کارلو، کاربردهای زیادی دارد از جمله مطالعه مدهای رشد لایه‌های نازک [۴]. معمولاً لایه‌های نازک ضخامتی کمتر از یک میکرومتر دارند و از جمله روش‌های تهیه آن‌ها روش لایه نشانی زاویه مایل<sup>۱</sup> براساس روش رانش بخار فیزیکی (PVD)<sup>۲</sup> است. در این روش، مسیر ذرات فرودی مستقیم و تحت زاویه مشخص  $\alpha$  است. دو پدیده مهم، خود سایه اندازی و محدودیت در تحرک پذیری ذرات فرودی، باعث ایجاد ساختارهایی می‌شوند که به صورت ستون‌هایی مجزا هستند. اندازه و چگالی این نانوستون‌های متخلخل تابعی از زاویه ورودی  $\alpha$  است [۶-۵]. در طول فرآیندهای رشد فیلم نازک، خصوصیات مختلف نانو ساختارها به پارامترهای مختلفی مثل دمای زیر لایه، زاویه فرودی، اثر سایه اندازی، مهاجرت اتم‌ها روی سطح زیرلایه (پخش سطحی)، نرخ لایه نشانی، زبری، ماده زیر لایه و

4- Helical  
5- Pillars  
6- Chevron

1 - Oblique Angle Deposition  
2 - Physical Vapor Deposition  
3- Zig-zag

آن 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 لنارد-جونز<sup>۱</sup> محاسبه می شود که این پتانسیل اولین بار در سال ۱۹۵۷ توسط وود و پارکر<sup>۲</sup> در شبیه سازی مونت کارلو استفاده شد. مرحله هسته بندی دو بعدی است و بر روی زیرلایه ای که کاملاً صاف و هموار فرض شده است انجام می گیرد.



شکل ۱. فلوچارت الگوریتم مدل شبیه سازی.

فرود ذرات بر روی این زیرلایه و ساکن شدن آن ها طبق گام مونت کارلو، با توجه به احتمالی است که به وسیله پتانسیل به دست می آید. رابطه استفاده شده در این برنامه، برای به

برای مثال کاواک اپتیکی، ساختار سه بعدی، نانوساختارها. از آنجایی که عنصر سیلیکان دارای ساختار الماسی است، به همین دلیل در این مقاله در بخش رشد حجمی شبکه الماسی را شبیه سازی نمودیم. این شبیه سازی بخصوص در فناوری نانو از اهمیت بسزایی برخوردار است.

### شرح الگوریتم مدل

در این کار، از برنامه شبیه سازی که قبلاً در این گروه کد نویسی شده و در حال تکمیل است استفاده شده است [۸]. ابتدا برنامه به زبان  $C^{++}$  کد نویسی شده بود اما به دلیل زمان زیاد اجرای برنامه و همچنین محدودیت در تعریف ماتریس ها، کد برنامه به زبان فرترن ۹۰ تبدیل شد. به این ترتیب، زمان اجرای آن کاهش یافت و از یک ساعت به پانزده دقیقه رسید. الگوریتم مدل که طبق آن برنامه نوشته شده است به شرح زیر است: سیستم در نظر گرفته شده دارای ابعاد  $300 \times 300 \times 300$  است. فیزیک مدل، بر اساس شبیه سازی مونت کارلو و تولید اعداد تصادفی است. 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 و صاف فرض شده است. در این صفحه به دلیل داشتن مرز و محدود بودن آن، 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. اگر ذره پس از پایان گام مونت کارلو بایستد تبدیل به یک مونومر (تک ذره) می شود. اما اگر قبل از اتمام

دست آوردن تعداد گام های مونت کارلو به صورت زیر است [۹-۱۰]:

(۱)

$$D = \frac{2a}{\sqrt{3}} d$$

فلوچارت مدل شرح داده شده در شکل ۱ نشان داده شده است.

برای در نظر گرفتن محاسبه خطا و گزارش خطا هر شکل ده بار تکرار گردید.

#### مرحله هسته بندی

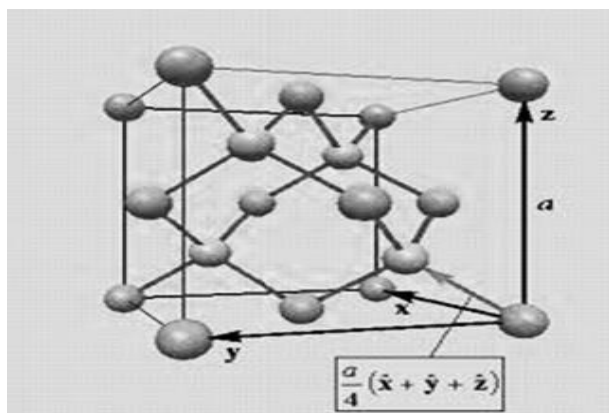
قبل از رشد حجمی، مرحله هسته بندی است. مرحله هسته بندی دو بعدی است و بر روی زیرلایه ای که کاملاً صاف و هموار فرض شده است انجام می گیرد. فرود ذرات بر روی این زیرلایه و ساکن شدن آن ها طبق گام مونت کارلو با توجه به احتمالی است که به وسیله پتانسیل به دست می آید. در این مقاله دو نوع پتانسیل در نظر گرفته شد، ابتدا پتانسیل لنارد - جونز که یک پتانسیل دوزره ای است و سپس پتانسیل سه ذره ای ترسرف را انتخاب نمودیم. در مدت زمانی که ذرات در حالت جذب فیزیکی روی سطح زیرلایه در حال پخش هستند به ذره دیگری برخورد و با تعداد کمی از ذرات یک هسته تشکیل می دهند. هسته های کوچک، نسبت سطح به حجم کوچکی دارند در نتیجه احتمال بازتبخیر زیادی خواهند داشت. وقتی اندازه هسته ها افزایش یابد احتمال بازتبخیر از سطح کاهش می یابد و هسته ها در حالت اندازه بحرانی تمایل بیشتری به روی سطح ماندن دارند. یکی از پدیده های مهم در مرحله هسته بندی بهم چسبیدن ذرات (انعقاد) و تشکیل جزایر می باشد. با پوشیده شدن سطح با هسته های بحرانی بزرگ، لایه نازک زیرین تشکیل می گردد. در دو بعد هسته

بندی ذرات را می توان به دو صورت در نظر گرفت: الف) هسته بندی مربعی<sup>۲</sup> ب) هسته بندی مثلثی<sup>۳</sup>

در هسته بندی مربعی، برای یک نقطه  $(i, j)$ ، همسایه های در نظر گرفته شده به صورت  $(i \pm 1, j)$  و  $(i, j \pm 1)$  است یعنی یک نقطه دارای ۴ همسایه است و شرایط مرزی دوره ای این شبکه به صورت  $(i \pm 1) \bmod L, j$  و  $i, (j \pm 1) \bmod L$  است که  $L$  بعد شبکه است و  $\bmod L$  اشاره به باقی مانده تقسیم دارد یعنی باقی مانده تقسیم بر  $L$ . این تضمین می کند که مکان های خاصی در مرزهای شبکه وجود ندارد و همه نقاط تحت شرایط مرزی دوره ای یکسان هستند.

بعد از شبکه مربعی، معمولترین شبکه که در شبیه سازی مونت کارلو استفاده می شود شبکه مثلثی است. در ابتدا ممکن است که به نظر برسد که شبکه مثلثی باید سخت تر باشد اما ثابت شده است که یک روش ساده وجود دارد که آن را به آسانی به شبکه مربعی تبدیل می کند. اگر نزدیکترین همسایه در طول مسیر مورب هر مربع در شبکه مربعی اضافه شود در این صورت یک شبکه با توپولوژی منظم مثلثی به دست می آید. بنابراین می توان یک شبکه مثلثی را با همان روشی که یک شبکه مربعی را نشان می دهند، نمایش داد. تنها چیزی که تغییر می کند نقاطی هستند که که نزدیکترین همسایه های مورب را نشان می دهد. در یک هسته بندی مثلثی برای یک نقطه  $(i, j)$ ، همسایه های در نظر گرفته شده به صورت  $(i \pm 1, j)$ ،  $(i, j \pm 1)$ ،  $(i - 1, j - 1)$  و  $(i + 1, j + 1)$  است یعنی یک نقطه دارای ۶ همسایه است و  $(i - 1, j - 1)$  و  $(i + 1, j + 1)$  دو همسایه جدید هستند. اگر از شرایط مرزی دوره ای استفاده کنیم در این صورت لازم است که در تمام این مختصات  $\bmod$

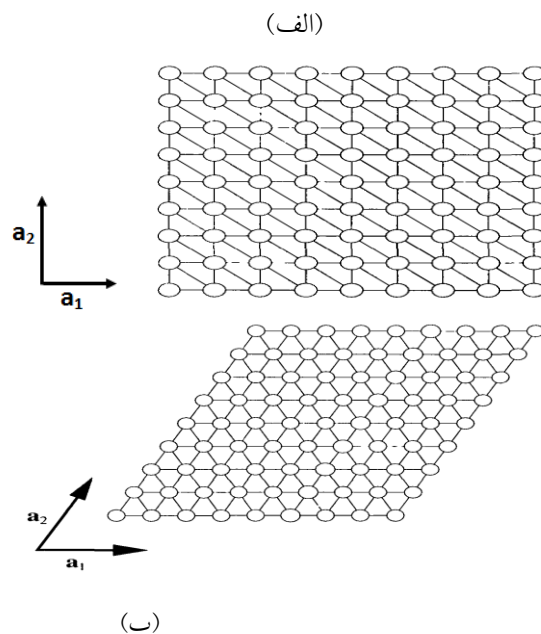
ساختار رشد می یابد. همچنین طبق فلوجارت، در این مرحله، نشست ذرات و مختصات آنها طبق زاویه فرودی ذرات و ساختار شبکه است. تفاوت ساختارها در تعداد نزدیکترین همسایگی ها و محل آنها است. در شبکه الماسی تعداد نزدیکترین همسایگی های اول ۴ تا است که مختصات این تعداد در برنامه وارد شده و رشد انجام می شود. برای به دست آوردن مختصات نزدیکترین همسایه ها، دستگاه مختصاتی مطابق شکل ۳ در نظر گرفته شد.



شکل ۳. نمایش نزدیکترین همسایه ها در دستگاه مختصات [۱۰].

همانطور که در شکل ۳ نشان داده شده است نزدیکترین همسایه در مختصات  $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$  است که با در نظر گرفتن سه مکعب دیگر، تعداد همسایگی ها ۴ تا است. مختصات سه نقطه دیگر به صورت زیر هستند:  $(\frac{-1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ ،  $(\frac{1}{4}, \frac{-1}{4}, \frac{1}{4})$  و  $(\frac{-1}{4}, \frac{-1}{4}, \frac{-1}{4})$ . پس از اجرای برنامه، مختصات ذرات نشانده شده در پوشه هایی ذخیره شد و با استفاده از نرم افزار VMD Versi on ۹.۱ این ساختار ترسیم گردید. VMD یک بسته نرم افزاری برای تجسم سه بعدی، مدل سازی و تجزیه و تحلیل سیستم های مولکولی است و به این ترتیب به عنوان یک ابزار قدرتمند، مورد استفاده در پژوهش های علمی است.

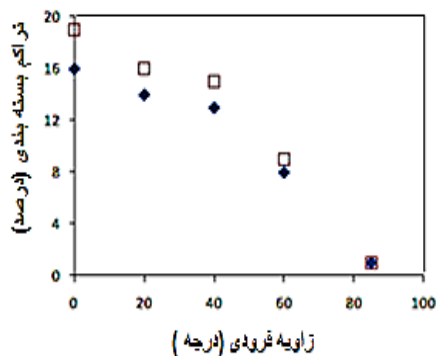
$L_2$  محاسبه شود که  $L_1$  بعد شبکه است. این دو هسته بندی در شکل ۲ نمایش داده شده اند.



شکل ۲. هسته بندی دو بعدی: (الف) مربعی، (ب) مثلثی [۱۱].

### شبکه الماسی و رشد حجمی ساختار الماسی

در شبکه فضایی الماسی هر اتم دارای چهار همسایه اول و دوازده همسایه دوم است. ساختار الماسی نسبتاً توخالی است. همچنین ساختار الماسی مثالی از پیوند کووالانت است که در ستون چهار جدول تناوبی عناصر یافت می شود. کربن، سیلیکان، ژرمانیم و قلع در ساختار الماسی متبلور می شوند. با توجه به این که بیشتر صنعت نیمه هادی و صنعت اپتوالکترونیک بر پایه تکنولوژی Si است و این عنصر دارای ساختار الماسی است، به همین دلیل در این مقاله شبکه الماسی را شبیه سازی نمودیم. پس از مرحله هسته بندی، رشد حجمی را داریم. مدل رشد در این مرحله رونشست 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



شکل ۵. تراکم بسته بندی در شبکه الماسی بر حسب زاویه در دو هسته بندی مربعی و مثلثی.

شکل ستون های رشد یافته نیز ابتدا در هسته بندی مربعی و سپس در هسته بندی مثلثی برای سه زاویه به صورت شکل ۶ است.

همانطور که مشاهده می شود با تغییر هسته بندی از مربعی به مثلثی مقدار تراکم بسته بندی افزایش یافته و تخلخل ستون ها کاهش می یابد. ستون ها در راستای شار ذرات ورودی مایل رشد کرده اند. با افزایش زاویه، ستون های کمتر و با فضای خالی بیشتری به دست آمده است. که این تفاوت به میزان سایه اندازی ساختار وابسته است. یعنی در زاویه های بالاتر میزان سایه اندازی بیشتر و میزان تخلخل افزایش می یابد.

رابطه زاویه فرود  $\alpha$  و زاویه ستون های  $\beta$  طبق معادله (۲) برای زاویه های کوچکتر از ۶۰ درجه و معادله (۳) برای زاویه های بزرگتر از ۶۰ است [۱۲]:

(۲)

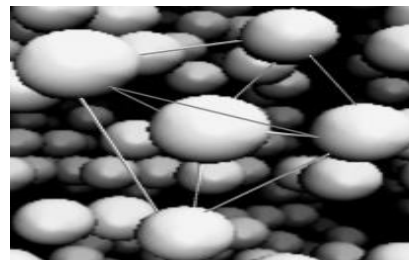
$$2 \tan \beta = \tan \alpha$$

(۳)

$$\beta = \alpha - \sin^{-1} \left[ \frac{1 - \cos \alpha}{2} \right]$$

شکل ۴ ساختار ترسیم شده امان با این نرم افزار را نشان

می دهد:



شکل ۴. نمایش هرم تشکیل شده در شبکه الماسی [۱۰].

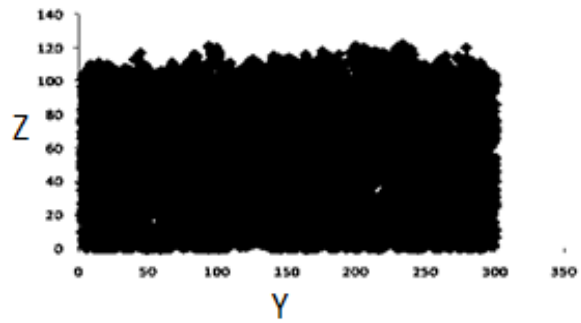
نتایج شبیه سازی با پتانسیل لnard - جونز در هر دو هسته بندی مربعی و مثلثی

هسته بندی دو بعدی در رشد حجمی شبکه الماسی در دو شکل مربعی و مثلثی با استفاده از پتانسیل لnard - جونز در نظر گرفته شد و مقادیر تراکم بسته بندی آنها برای چند زاویه فرودی در جدول زیر گزارش شده است.

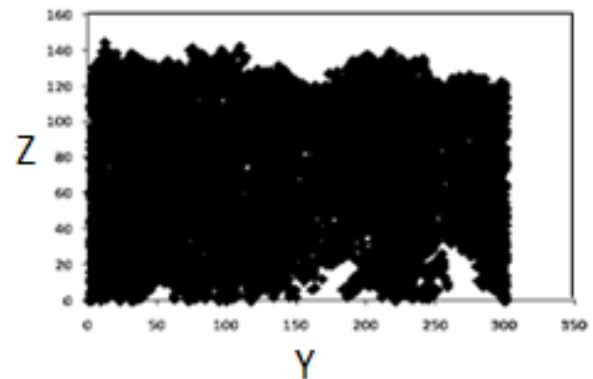
جدول ۱. مقادیر تراکم بسته بندی چند زاویه با پتانسیل لnard - جونز در دو هسته بندی مربعی و مثلثی.

$\alpha^\circ$	Square	Tri angular
۰	۱۶٪	۲۰٪
۲۰	۱۴٪	۱۶٪
۴۰	۱۳٪	۱۵٪
۶۰	۸٪	۹٪
۸۵	۱٪	۱٪

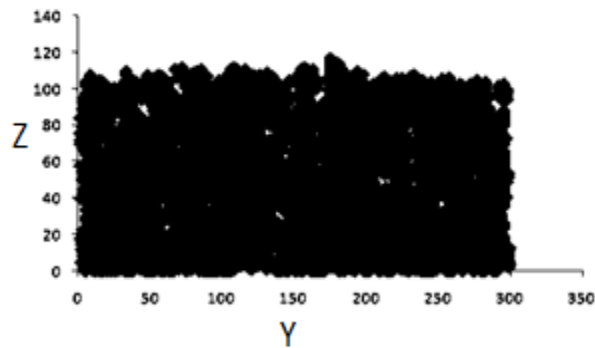
روابط بالا روابط تجربی هستند و شکل ستون های به دست آمده در این بخش، درستی این روابط را تایید می کنند.



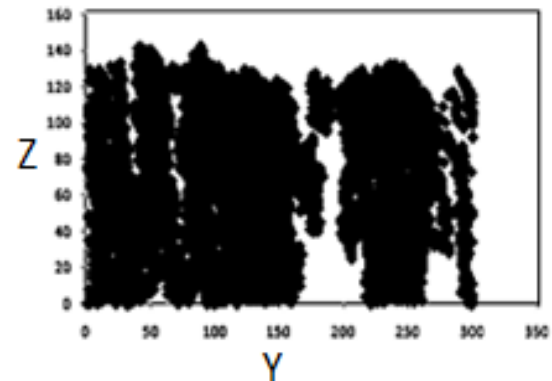
(الف)



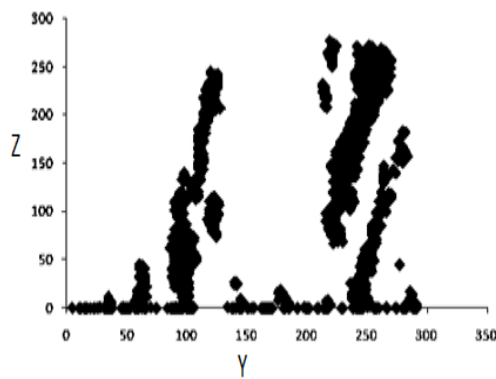
(الف)



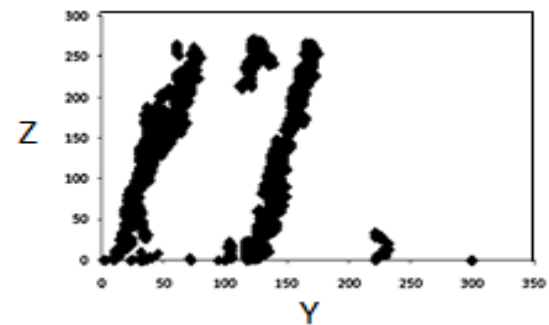
(ب)



(ب)



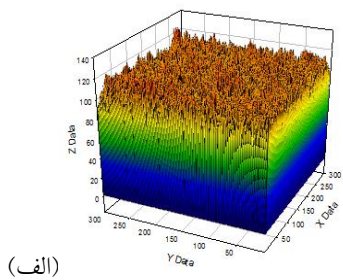
(ج)



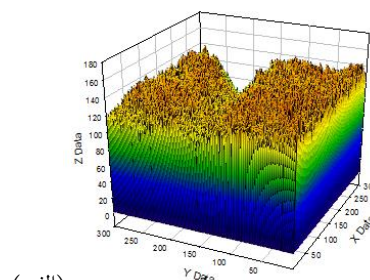
(ج)

شکل ۷. نمایش ستون های رشد یافته در شبکه الماسی در هسته بندی مثلثی: (الف) زاویه ۰ درجه، (ب) زاویه ۴۰ درجه، (ج) زاویه ۸۵ درجه. هر سطحی از یک سری ذره تشکیل شده شده در نظر بگیرید. هر مکان سطح ارتفاع معینی دارد. به طور کلی سطح رشد یافته سطحی ناهموار است. محاسبه ناهمواری سطح یکی از

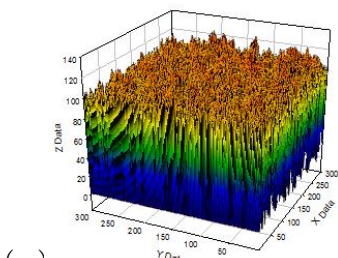
شکل ۶. نمایش ستون های رشد یافته در شبکه الماسی در هسته بندی مربعی: (الف) زاویه ۰ درجه، (ب) زاویه ۴۰ درجه، (ج) زاویه ۸۵ درجه.



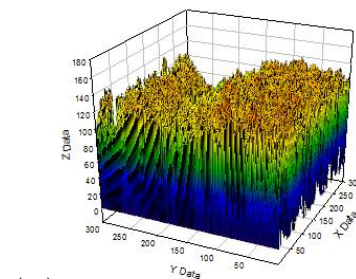
(الف)



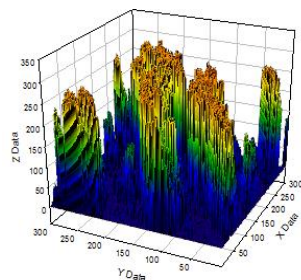
(الف)



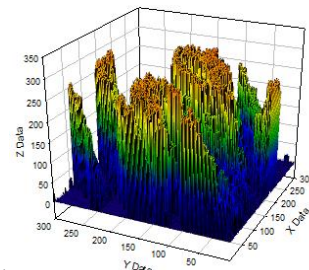
(ب)



(ب)



(ج)



(ج)

شکل ۹. شکل های سه بعدی ناهمواری سطح برای هسته بندی مثلثی:  
(الف) زاویه ۰ درجه، (ب) زاویه ۴۰ درجه، (ج) زاویه ۸۵ درجه.

شکل ۸. شکل های سه بعدی ناهمواری سطح برای هسته بندی مربعی:  
(الف) زاویه ۰ درجه، (ب) زاویه ۴۰ درجه، (ج) زاویه ۸۵ درجه.

همانطور که مشاهده می شود با افزایش زاویه فرودی ناهمواری و تخلخل افزایش می یابد. نمودار زیر تغییرات این مدل شبیه سازی بر پایه روش مونت کارلو است به همین علت زمان محاسبه نمی شود و به طور کلی متغیر  $t$  قابل صرف نظر است. در این قسمت شکل های سه بعدی ناهمواری سطح با کمک نرم افزار  $Si\ gnapl\ ot$  ۱۰.۰ در زوایای ۰، ۴۰ و ۸۵ درجه برای دو هسته بندی مربعی و مثلثی رسم شده است و در پایان کمیت ناهمواری فصل مشترک بر حسب تغییرات زاویه ورودی بررسی می گردد.

کمیت های مهم برای یک مدل شبیه سازی است. با استفاده از رابطه زیر می توان این ناهمواری را به دست آورد [۱۳]:

$$\bar{h}(t) = \frac{1}{L \times L} \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L h(i, j, t)$$

(۴)

$$W(L, t) = \sqrt{\frac{1}{L \times L} \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L (h(i, j, t) - \bar{h}(t))^2}$$

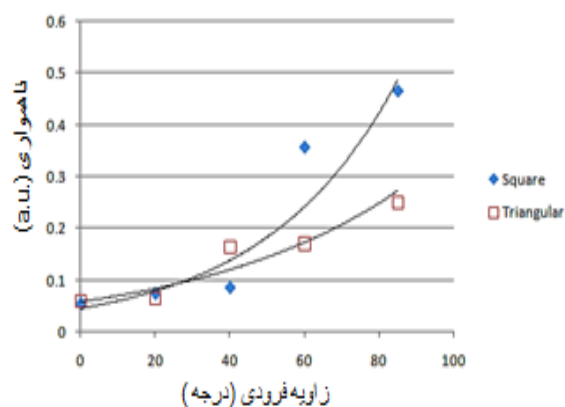
(۵)



جدول ۲. مقادیر تراکم بسته بندی چند زاویه با پتانسیل ترسف در دو هسته بندی مربعی و مثلثی.

$\alpha^\circ$	Square	Tri angular
۰	۱۹٪	۲۰٪
۲۰	۱۷٪	۱۶٪
۴۰	۱۵٪	۱۵٪
۶۰	۹٪	۹٪
۸۵	۱٪	۱٪

ناهمواری با زاویه فرودی را نشان می دهد. این نمودارها از رابطه (۵) برای مدل شبیه سازی به دست آمده است.

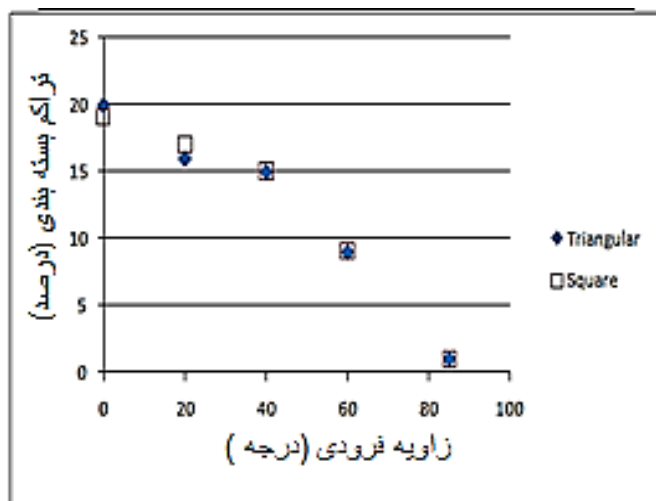


شکل ۱۰. ناهمواری بر حسب زاویه فرودی در هر دو هسته بندی و با پتانسیل لنارد - جونز.

با توجه به شکل ها و نمودارهای به دست آمده، می توان نتیجه گیری نمود که ناهمواری با تغییر هسته بندی از مربعی به مثلثی کاهش یافته و سطح هموارتری به دست آمده است.

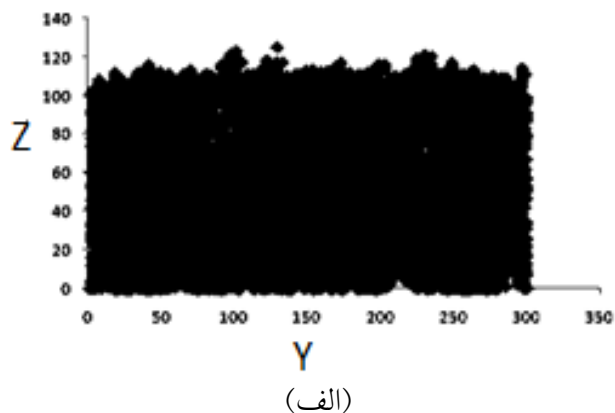
نتایج شبیه سازی با پتانسیل ترسف و در هر دو هسته بندی مربعی و مثلثی

پتانسیل لنارد - جونز برای بلورهای گازهای بی اثر خنثی و فلزات fcc مناسب است و نمی تواند توصیف کاملی از نیم رساناها که به طور عمده دارای شبکه الماسی هستند ارائه دهد. به همین دلیل در این قسمت، در بخش هسته بندی پتانسیل لنارد جونز را تغییر داده و پتانسیل ترسف را قرار دادیم که برای نیم رساناها استفاده می شود و کمیت های اندازه گیری شده در قسمت های قبل را مجدد با در نظر گرفتن این پتانسیل محاسبه نمودیم. در ابتدا مقادیر تراکم بسته بندی آنها برای چند زاویه فرودی در جدول زیر گزارش شده است.

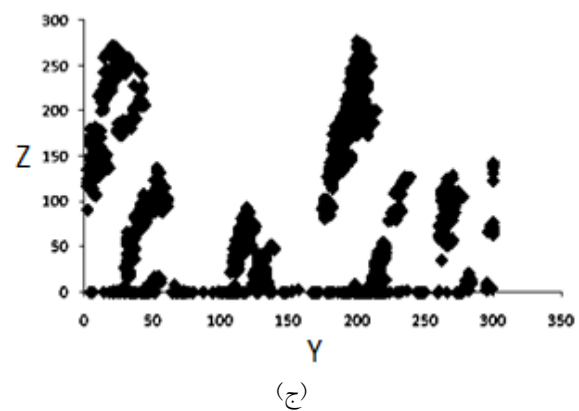
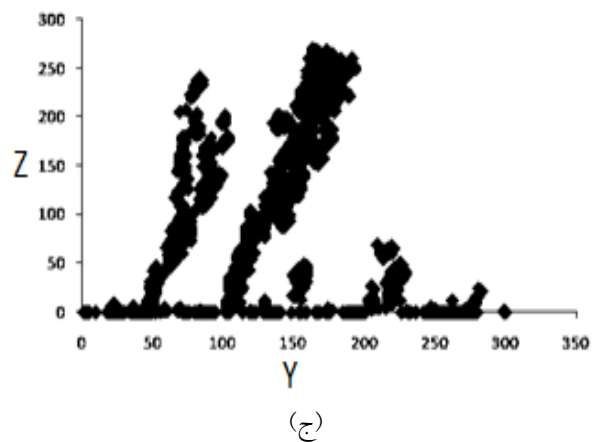
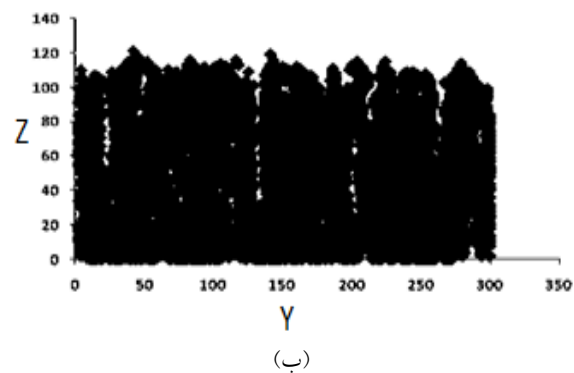
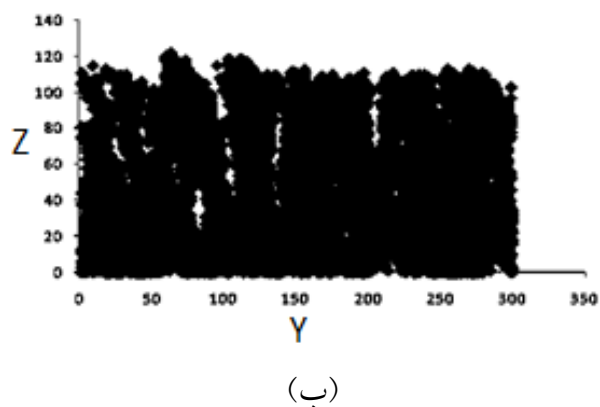
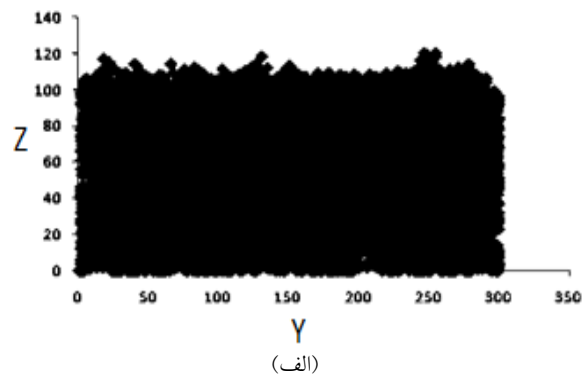


شکل ۱۱. تراکم بسته بندی در شبکه الماسی بر حسب زاویه با پتانسیل ترسف در دو هسته بندی مربعی و مثلثی.

شکل ستون های رشد یافته نیز به صورت شکل های ۱۲ و ۱۳ است. در این قسمت نیز مشاهده می شود که ستون ها در راستای شار ذرات ورودی مایل رشد کرده اند. با افزایش زاویه، ستون های کمتر و با فضای خالی بیشتری به دست آمده است، این تفاوت به میزان سایه اندازی ساختار وابسته است یعنی در زاویه های بالاتر میزان سایه اندازی بیشتر و



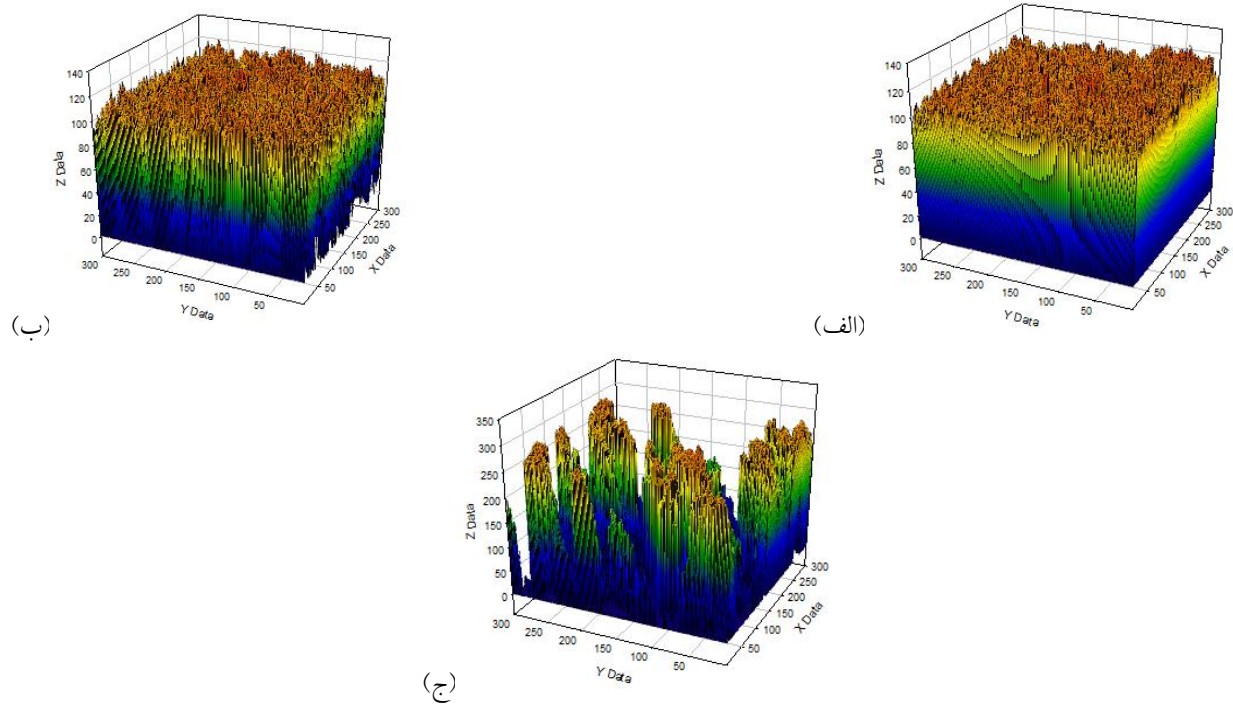
میزان تخلخل افزایش می یابد. رابطه زاویه فرود  $\alpha$  و زاویه ستون های  $\beta$  طبق معادله (۲) برای زاویه های کوچکتر از ۶۰ درجه و معادله (۳) برای زاویه های بزرگتر از ۶۰ است و ستون های به دست آمده در این بخش نیز درستی این روابط تجربی را تایید می کنند [۱۲].



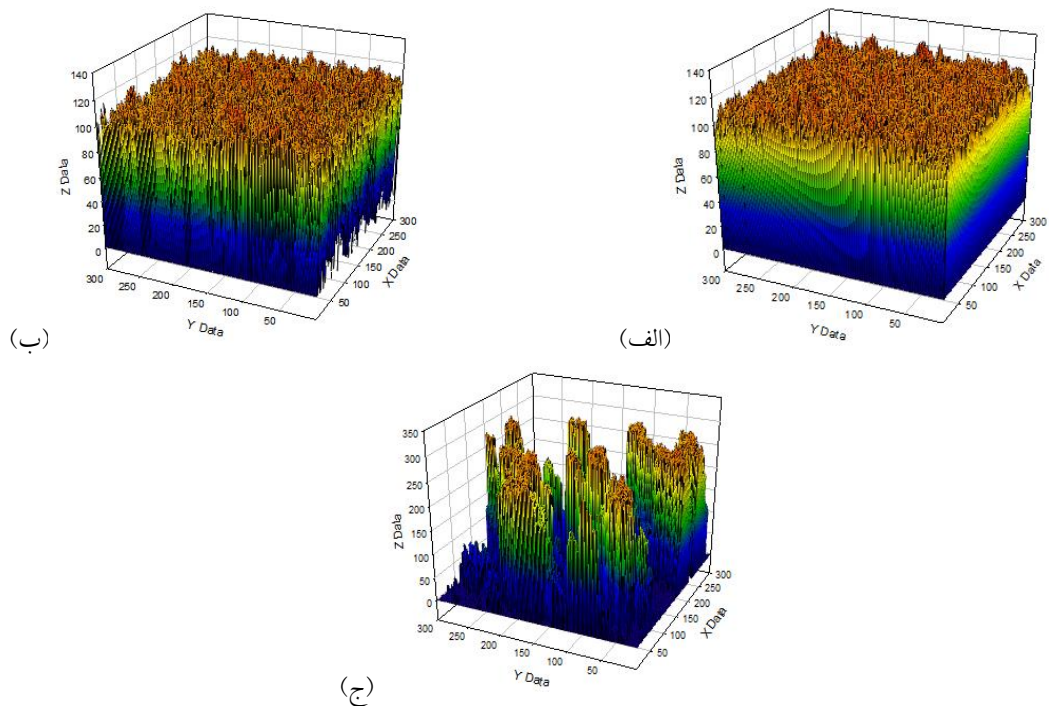
شکل ۱۳. نمایش ستون های رشد یافته در شبکه الماسی در هسته بندی مثلثی: (الف) زاویه ۰ درجه، (ب) زاویه ۴۰ درجه، (ج) زاویه ۸۵ درجه.

شکل ۱۲. نمایش ستون های رشد یافته در شبکه الماسی در هسته بندی مربعی: (الف) زاویه ۰ درجه، (ب) زاویه ۴۰ درجه، (ج) زاویه ۸۵ درجه.

شکل های سه بعدی ناهمواری سطح با کمک نرم افزار Si gnapl ot ۱۰.۰ در زوایای ۰، ۴۰ و ۸۵ درجه برای دو



شکل ۱۴. شکل های سه بعدی ناهمواری سطح برای هسته بندی مربعی: (الف) زاویه ۰ درجه، (ب) زاویه ۴۰ درجه، (ج) زاویه ۸۵ درجه.



شکل ۱۵. شکل های سه بعدی ناهمواری سطح برای هسته بندی مربعی: (الف) زاویه ۰ درجه، (ب) زاویه ۴۰ درجه، (ج) زاویه ۸۵ درجه.

در نظر گرفتیم. سپس در بخش رشد حجمی، ساختار را از SC به الماسی تغییر دادیم و تغییرات تراکم بسته بندی و ناهمواری را بر حسب زاویه فرود بررسی نمودیم. نتایج امان نشان داد که با افزایش زاویه فرود مقدار تراکم بسته بندی کاهش و میزان ناهمواری افزایش می یابد. سپس از مدل پتانسیل ترسوف در هسته بندی استفاده شد و همین نتایج با مقادیر متفاوت به دست آمد. پتانسیل ترسوف یک پتانسیل سه ذره ای است که شکل واقعی تری از بر هم کنش ذرات را نشان می دهد. از طرفی پتانسیل لnard-Jone - جونز برای بلورهای گازهای بی اثر خنثی و فلزات FCC مناسب است و نمی تواند توصیف کاملی از نیم رساناها که به طور عمده دارای شبکه الماسی هستند ارائه دهد. به همین دلیل این پتانسیل را به کار بردیم و نتایج نشان می دهند که با تغییر پتانسیل از لnard - جونز به ترسوف مقادیر ناهمواری در هر دو هسته بندی مربعی و مثلثی کاهش یافت.

#### قدردانی

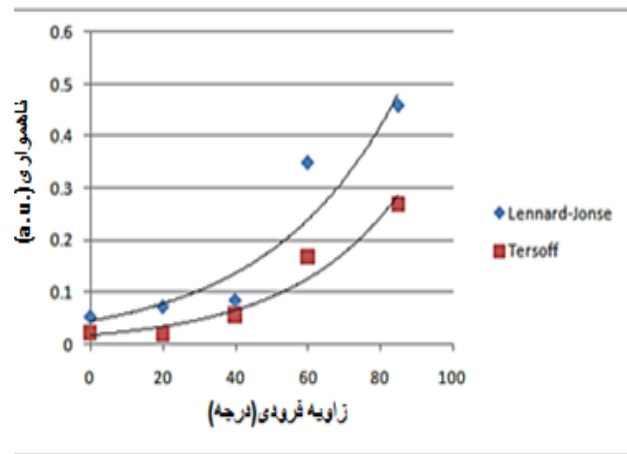
این کار توسط دانشگاه الزهرا حمایت مالی شده است.

#### مراجع

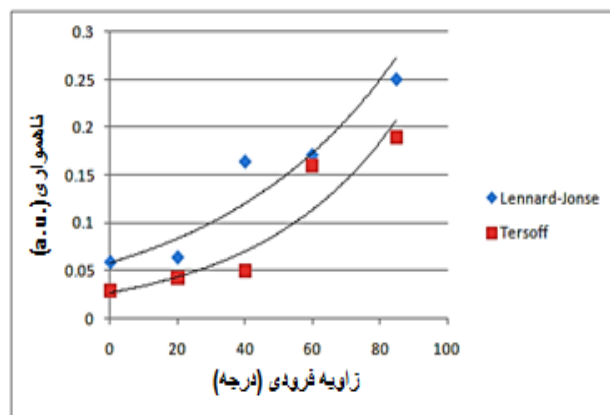
1. A. Fantoni, M. Vieira, and R. Mortins, *Simulation of hydrogenated amorphous and microcrystalline silicon optoelectronic devices*, Mathematics and Computers in Simulation 49 (1999) 381-401.
2. P. K. Mackeown and D. J. Newman, *Computational techniques in physics*, Adam Hilger, Bristol, 1987.
3. D. W. Heermann, *Introduction to the computer simulation methods of theoretical physics*, Springer - Verlag, Heidelberg, 2(1990).
4. S. Ozawa and Y. Sasajima, *Vacuum*, 41 (1990) 1109-1110.
5. H. Huang, G. H. Gilmer, T. D. de la Rubia, *J. Appl. Phys.* 84(7) (1998) 3636-3649.

هسته بندی مربعی و مثلثی به صورت شکل ۱۴ و ۱۵ است.

نمودارهای زیر نشان می دهد که با تغییر پتانسیل از لnard - جونز به ترسوف مقادیر ناهمواری در هسته بندی مربعی و مثلثی کاهش یافت.



شکل ۱۶. تغییرات ناهمواری بر حسب زاویه فرودی با دو پتانسیل لnard - جونز و ترسوف در هسته بندی مربعی.



شکل ۱۷. تغییرات ناهمواری بر حسب زاویه فرودی با دو پتانسیل لnard - جونز و ترسوف در هسته بندی مثلثی.

#### نتیجه گیری

در این مقاله، در ابتدا شبیه سازی در دو بعد و هسته بندی ذرات را به دو صورت مربعی و مثلثی و با پتانسیل لnard جونز

6. L. Dong, R. W. Smith, and D. J. Srolovitz, *J. Appl. Phys.* 80(10) (1996) 5682-5690.
7. K. Robbi, G. Beydaghyan, T. Brown, C. Dean, J. Adams, and C. Buzea, *Review of Scientific Instruments* 75(4) (2004) 1089-1097.
8. R. S. Dariani, S. Minaeifard, and M. Rajabi, *Simulating and modeling of three dimensional columnar growth nanosacle structure*, *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*, 14(11-12) (2012) 890-898.
9. K. Robbie, *Glancing Angle Deposition*, Ph.D. Thesis, Alberta University, Canada, 1998.
10. L. L. Maissel and R. Gang, *Handbook of Thin Film Technology*, McGraw-Hill Book Company, 1983.
11. M. E. J. Newman and G. T. Barakema, *Monte Carlo methods in statistical physics*, Oxford university press, 335-342 (1991).
12. M. Suzuki and Y. Taga, *Numerical study of effective surface area of obliquely deposited thin film*, *J. Appl. Phys.* 90(11) (2001) 5599-5605.
13. A. L. Barabasi and H. E. Stanley, *Fractal Concepts in Surface Growth*, Cambridge University Press, 1995.