

شبیه سازی اثرات نوع آرایش و چگالی جریان در رشد سیلیکان متخلخل به روش اصلاح شده انبوهش پخش محدود

سکینه مینائی فرد و رضا ثابت داریانی

گروه فیزیک، دانشگاه الزهراء(س)

چکیده

هدف از این مقاله وارد کردن اصلاحاتی به مدل انبوهش پخش محدود می باشد که بتواند اثرات نوع آرایش و چگالی جریان را در شکل ساختارهای بدست آمده طی رشد سیلیکان متخلخل شبیه سازی کند. برای تأثیر نوع آرایش، ضریب چسبندگی و برای تأثیر چگالی جریان، پارامتر میدان متوسط را به مدل انبوهش پخش محدود اعمال کردیم. نتایج شبیه سازی نشان می دهند که پارامتر ضریب چسبندگی در کنترل ضخامت خلل مؤثر است در حالیکه پارامتر میدان متوسط ویژگی درختی یا میله ای بودن خلل را کنترل می کند. نتایج آن بر روی شبیه سازی رشد سیلیکان متخلخل، نشان داد اصلاحات اعمال شده با تأثیر این دو پارامتر در شکل ساختارهای شبیه سازی شده با نتایج نمونه های تجربی بدست آمده توافق و سازگاری دارند.

کلمات کلیدی: سیلیکان متخلخل، انبوهش پخش محدود، شبیه سازی، ضریب چسبندگی، میدان متوسط

Simulation of doping type and current density effects on porous silicon growth by modified limited diffusion aggregation method

S. Minaeifard and R. S. Dariani

Department of Physics, Alzahra University

Abstract

In this paper we improve the limited diffusion aggregation model to study and simulate effects of doping type and current density on the structure of porous silicon.

For doping type effects, sticking coefficient and for current density effect, a mean field parameter was applied to the limited diffusion aggregation model. The results of our simulation show that sticking coefficient influences pore thickness, while mean field parameter controls the tree or rod characteristic, of pores. These theoretical findings are in agreement with experimental observations.

Keywords: Porous silicon, Limited diffusion aggregation, Simulation, Sticking coefficient, Mean field

E-mail of corresponding authors: sabetdariani@gmail.com, dariani@alzahra.ac.ir

مقدمه

سیلیکان با عدد اتمی ۱۴ که در گروه چهارم جدول تناوبی قرار دارد و دارای انرژی گاف کوچک 1.12 eV در دمای اتاق و غیر مستقیم است یکی از اصلی ترین مواد در کاربردهای الکترونیکی می باشد و نیمه رسانای دیگری وجود ندارد که بتواند با این شرایط جایگزین آن شود. با این وجود، این عنصر به دلیل غیر مستقیم بودن گاف انرژی دارای خواص ضعیف اپتیکی است و جایگاهی در کاربردهای اپتیکی ندارد. اما روشهایی برای رسیدن به باز ترکیب بین نواری همراه تابش مرئی در سیلیکان وجود دارد که یکی از این روشها آندیزاسیون^۱ الکتروشیمیایی ویفر سیلیکلن و ایجاد تخلخلهای نانومتری در آن است. به این ترتیب ساختار سیلیکان به حدی کوچک می گردد که اثرات کوانتومی در ساختار نواری آن بدست می آید. به این ساختار متخلخل بوجودآمده، سیلیکان متخلخل^۲ گویند[۱].

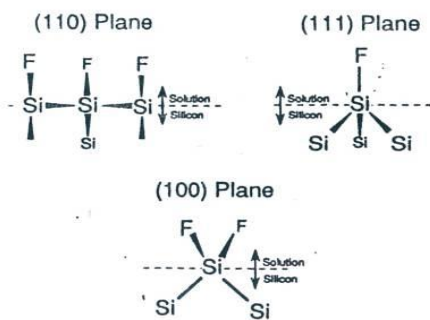
به این ترتیب طی یک فرآیند خوردگی حفره هایی استوانه ای در ویفر سیلیکان بوجودآمده و ستونهایی از سیلیکان با قطر در حد نانومتر برجای می مانند. این ساختار دارای خواص متفاوت از توده^۳ سیلیکان است [۲]. خواص الکترونی و ساختاری سیلیکان متخلخل ارتباط مستقیم با شرایط آندیزاسیون دارد. این شرایط عبارتند از: چگالی جریان، غلظت الکترو لیت، زمان خوردگی، حضور یا عدم حضور نور در حین خوردگی، نوع آلیش و مقاومت ویژه سیلیکان [۳].

نکته قابل توجه در مورد این خلل بوجودآمده در ویفر سیلیکان عبارت از این است که شکل این خلل با جهت های بلور شناسی رابطه دارد. چانگ در سال ۱۹۸۸ بوسیله عکسبرداری عرضی^۴ و همچنین پراش الکترون نشان داد که هم در سیلیکان نوع n و هم در سیلیکان نوع p شکل

گیری خلل فقط در جهت صفحات $\langle 100 \rangle$ به شکل درختی و شاخه شاخه دارد. یعنی کانالهایی که در اثر خوردگی بوجود می آیند در جهت این صفحات شکل درختی و شاخه شاخه بخود می گیرند و این ساختار را در جهات دیگر بلور شناسی نمی توانیم ببینیم [۴]. مهمترین دلیل رشد شاخه ها در جهت صفحات $\langle 100 \rangle$ جهت گیری پیوندهای سطحی در این صفحات است. به عبارتی تنها در صفحه (100) سیلیکان با دو پیوند متقارن در سطحی که در معرض خوردگی است، ظاهر می شود و هر دو پیوند در خوردگی شرکت می کنند و این موضوع باعث پیشرفت خوردگی در طول صفحه (100) می شود (شکل ۱)[۲].

در این تحقیق سعی شده توسط یکی از مدل های رشد آماری به نام انبوهش پنخس محدود^۵ (DLA) نحوه رشد ساختار درختی سیلیکان متخلخل را شبیه سازی نموده و با تغییر در پارامتر طول پنخس و اعمال اصلاحاتی^۶ در مدل رشد از جمله وارد کردن پارامتر ضریب چسبندگی^۷ و پارامتر میدان متوسط^۸، تغییر شکل ساختار درختی در اثر تغییر نوع آلیش و تغییر چگالی جریان را مدل سازی کنیم.

Surface Bond Orientations



شکل ۱. جهت پیوند برای ۳ تا از صفحات بلوری که عبارتند از: (100) و (110) و (111)[۲]

⁵ Diffusion Limited Aggregation
⁶ Modification
⁷ Sticking coefficient
⁸ Mean-field Parameter

¹ Anodization
² Porous silicon
³ Bulk
⁴ TEM

نظریه

۱- پدیده پخش

چنانچه سیستمی چند ذره ای در اثر اعمال اختلالهایی از حالت تعادل خارج شود ولی این انحرافها با اختلال وارده رابطه خطی داشته باشد، گفته می شود سیستم نزدیک به تعادل است. پدیده پخش یکی از پدیده های نزدیک به تعادل است که در توجیه بسیاری از پدیده هایی که در سیستم های چند ذره ای رخ می دهد مورد استفاده قرار می گیرد [۶].

در توجیه مکانیزم شکل گیری سیلیکان متخلخل پیشنهادات و مدل های متفاوتی مطرح شده است. یکی از این مدلها که توسط اسمیت و همکارانش [۲] در توجیه این مطلب ارایه شد، مدل پخش محدود^۱ است. در این مدل که شکل گیری خلل براساس پخش گونه های فعال الکتریکی مثل الکترون و حفره در سطح سیلیکان توجیه شده از ولگشت^۲ در توجیه توجیه شکل گیری سیلیکان متخلخل استفاده شده است.

۲- ساختارهای فراکتالی و مدل های رشد آماری (انبوهی)

بطور کلی پروسه های پخش محدود به دلیل طبیعت غیر تعادلی باعث بوجود آمدن اشیاء مرکب و شاخه ای می شوند که به این ساختارها انبوه^۳ با خواص فراکتالی گفته می شود [۵]. فراکتالها اشکال پیچیده هندسی هستند که از بهم پیوستن بی نهایت ذره کوچک و یکسان تشکیل شده اند و به شدت پاره پاره و بی قاعده بوده و نمی توان آنها را در قالب هندسه اقلیدسی بررسی کرد. این ساختارها بوسیله خواصشان از جمله بُعد^۴، تعریف می شوند. لازم به تذکر است این ساختارها دارای ابعاد کسری و غیر صحیح هستند.

یک کلاس مهم از پدیده ها که طی آن این ساختارهای فراکتالی تولید می شوند، انبوهش^۵ ذرات مشابه یا

فرآیندهای انبوهی هستند. فرآیندهای انبوهی از جمله پدیده های دور از تعادل در فیزیک آماری می باشند [۶]. انبوهش زمانی رخ می دهد که ذره های یکسان، مطابق قاعده معینی بهم پیوسته و ساختاری را تشکیل دهند. این فرآیندها دارای رفتاری متنوع در فضا و زمان می باشند و با نظریه های تحلیلی متعارف نمی توان آنها را توصیف کرد. انبوهش تقریباً همیشه به ساختارهای شاخه شاخه با هندسه فراکتالی منجر می شود.

بررسی اینگونه پدیده ها و ساختارهای حاصل از آنها به دلیل دارا بودن فاکتورهای زیاد، کار بسیار سخت و گاهی غیر ممکن است. به همین دلیل برای بررسی آنها از روشهای تقریبی با استفاده از کامپیوتر استفاده می شود. در روشهای تقریبی با کاهش دادن قابل توجه فاکتورهای شناسایی، کار بررسی این پدیده ها و ساختارهای حاصل از آنها به مراتب آسان تر و قابل انجام تر می شود. برای این منظور مدل های رشد آماری زیادی مطرح شده که چنین ساختارهایی را ساخته و مورد بررسی قرار می دهند. تذکر این نکته در اینجا بجاست که مدل های رشد آماری، بر اساس نوع ویژگی هایی که از اضافه شدن یک ذره به انبوه در حال رشد را مشخص می کند، به دو دسته تقسیم می شوند [۶]:

۱- مدل جایگزیده^۶

در این مدلها پیوستن یک ذره به انبوه در حال رشد فقط به شرایط محل ذره در لحظه ای که در حال اتصال به انبوه است وابسته می باشد.

۲- مدل غیر جایگزیده^۷

شرایط و ساختار کل انبوه در حال پیوستن ذره در یک نقطه بخصوص مؤثر است. یکی از این مدل های انبوهی که در این تحقیق از آن بهره برده ایم مدل انبوهش پخش محدود یا DLA است.

¹ Diffusion-limited

² Random-Walk

³ Aggregate

⁴ Dimension

⁵ Aggregation

⁶ Local Model

⁷ Non-local Model

۳- مدل رشد DLA

مدل DLA جزو مدل‌های انبوهشی است که از بهم پیوستن ذرات یکسان ساختار شاخه ای بدست می دهد و از آنجایی که هدف ما در این تحقیق شبیه سازی ساختار درختی بوجود آمده در سیلیکان متخلخل است، از این مدل استفاده کرده ایم . مدل رشد DLA جزو مدل‌های غیر جایگزیده است و کمیات کنترل کننده این مدل در هر نقطه از فضا از تمام نقاط سیستم (دورو نزدیک) اثر می پذیرد [۷].

مراحل رشد در این مدل به این شکل است : ابتدا ذره اولیه در یک نقطه از شبکه گذارده می شود . ذره دیگری از دور رها می شود که اجازه دارد بصورت تصادفی روی نقاط شبکه گام زده تا به یکی از اولین همسایه های ذره اولیه برسد. این ذره در این نقطه متوقف شده و دیگر از این نقطه جدا نمی شود و در ضمن ذره دیگری هم نمی تواند به این نقطه وارد شود. به همین ترتیب ذرات بعدی از دور رها می شوند و همین سیر را طی می کنند، تا بالاخره کلاسترهای^۱ بزرگی به این روش ساخته می شوند. اما باید توجه کرد در ولگشت ذره متحرک تا متصل شدن آن به کلاستر در حال رشد نقش اصلی را توزیع احتمال، که کمیته غیر جایگزیده است، ایفا می کند [۸].

این مدل اولین بار توسط ویتن و ساندر [۷] در سال ۱۹۸۱ ارائه شد و از آن در نشان دادن پدیده های گونا گونی مثل شکست دی الکتریک^۲ [۹]، انبوهش کلوئیدی^۳ [۱۰]، مواد متخلخل^۴ [۱۱]، بسیاری از پروسه هایی که رشد دانه ای^۵ دارند [۱۲ و ۱۳]، و موارد دیگر استفاده شده است.

معادله حرکت:

در این مدل، احتمال اینکه یک نقطه لبه ای واقع در محل

\bar{x} توسط یک ذره که در گام n ام از ولگشت اشغال شود، گرایان کمیت $u(\bar{x}, k)$ است. بنابراین $u(\bar{x}, k)$ احتمال قرارگرفتن ذره متحرک در گام k ام در مکان \bar{x} است (در آنسامبلی از ولگشت هایی با n گام).

احتمال $u(\bar{x}, k)$ متناسب است با تعداد ولگشتهایی است که بعد از k گام به مکان \bar{x} منتهی می شوند ($Z_k(x)$).

$$u(x, k) = \frac{1}{C^k} Z_k(x) \quad (1)$$

$Z_k(x)$ در رابطه زیر صدق می کند:

$$Z_{k+1}(\bar{x}) = \sum_{\bar{l}=1}^C Z_k(\bar{x} + \bar{l}) \quad (2)$$

که C تعداد نزدیکترین همسایه های نقطه \bar{x} و \bar{l} بردار هایی است که \bar{x} را به همسایه های اول خود منتقل می کند. معادله (۲) معادله پخش گسسته ای برای $u(\bar{x}, k)$ بصورت زیر بدست می دهد:

$$u(\bar{x}, k+1) - u(\bar{x}, k) = \frac{1}{C} \sum_{\bar{l}=1}^C [u(\bar{x} + \bar{l}, k) - u(\bar{x}, k)] \quad (3)$$

براحتی می توان دید که معادله ۳ شکل گسسته معادله پخش (معادله ۴) است.

$$\eta \nabla^2 u = \frac{\partial u}{\partial t} \quad (4)$$

در این معادله η ثابت پخش است. از لحظه ای که ذره متحرک به یکی از نقاط لبه ای وارد شد و در آنجا ساکن شد بایز برای آن نقطه $u = 0$ قرار دهیم (سمت راست معادله ۲). احتمال آنکه یک نقطه لبه ای ذره متحرکی را در گام $k+1$ ام جذب کند، همانطور که در بالا گفته شد برابر است با

$$v(\bar{x}, k+1) = \frac{1}{C} \sum_{\bar{l}} \bar{u}(\bar{x} + \bar{l}, k) \quad (5)$$

از آنجایی که ذره از لحظه رها شدن تا رسیدن به نقطه لبه ای که در آن ساکن خواهد شد، به علت داشتن حرکت تصادفی مسافت زیادی را می پیماید، پس رشد به اندازه ای کند است که می توان از وابستگی زمانی در معادله حرکت چشم پوشی کرد. به این ترتیب معادله ۴ به معادله لاپلاس تبدیل می شود [۶]:

- 1 Clusters
- 2 Dielectric Breakdown
- 3 Colloidal Aggregation
- 4 Porous Media
- 5 Dendritic Growth
- 6 Perimeter Site

ساکن می شوند. در این تحقیق شبکه دو بعدی و مربعی در نظر گرفته شد. در ضمن مدل DLA دارای خاصیت **universality** بوده یعنی نسبت به نوع شبکه ناورداست [۸]. پس چنانچه شبکه از نوعی غیر از مربعی هم انتخاب شود همین نتیجه بدست خواهد آمد. بعد از تعریف شبکه نوبت به مشخص کردن نقاط شروع رشد می رسد. تعدادی از نقاط را بصورت تصادفی با ذره پر می کنیم. این نقاط، نقاط شروع رشد شاخه ها در ساختار درختی خواهد بود. در این مرحله ذره متحرک تصادفی را در فاصله طول پخش از سطر اول نقاط شبکه رها می کنیم.

قسمت دوم: مرحله حرکت تصادفی

در این مرحله احتمال حضور ذره $u_{i,j}$ را برای تمام نقاط شبکه محاسبه می کنیم. به این ترتیب که در حین ولگشت ذره متحرک، قبل از هر گام، احتمال $u_{i,j}$ را برای ۴ همسایه اول نقطه ای که ذره در آن واقع شده، از معادله (۹) بدست می آوریم. ذره در مقایسه این ۴ احتمال به نقطه ای گام می زند که احتمال بزرگتری داشته باشد. در واقع ذره با این کار به سمت نوک شاخه های در حال رشد سوق داده می شود و این امر باعث می شود که رشد در نوک شاخه های پیشرونده انجام شود و ذرات به بیرونی ترین نقاط لبه ای بچسبند و به نقاط درونی تر هرچند در دسترس باشند متمایل نشوند. به این پدیده خاصیت استتار و یا **screening** گفته می شود [۸].

قسمت سوم: مرحله تشخیص نقاط لبه ای و چسبیدن به

کلاستر

بعد از هرگام که ذره برمی دارد یک بار کنترل می شود که نقطه ای که در آن هست نقطه لبه ای است یا خیر. نقاط لبه ای اولین همسایه های خالی سطح بیرونی کلاستر در حال رشد هستند که به آنها ن قاط فعال^۱ نیز گفته می شود. چنانچه نقطه لبه ای بود به آن نقطه متصل می شود. در غیر

$$\nabla^2 u = 0 \quad (6)$$

بعبارت دیگر، چشم پوشی از $\frac{\partial u}{\partial t}$ یعنی طرف چپ معادله گسسته پخش (معادله ۳) صفر شود. به این ترتیب معادله حرکت در مدل فوق بصورت زیر خواهد شد:

$$\frac{1}{C} \sum_{l=1}^C [u(\bar{x} + \bar{l}, k) - u(\bar{x}, k)] = 0 \quad (7)$$

در این تحقیق شبیه سازی در شبکه مربعی انجام گرفته است، پس $C = 4$ خواهد بود.

$$\frac{1}{4} (u_{i,j+1} + u_{i,j-1} + u_{i+1,j} + u_{i-1,j} - 4u_{i,j}) = 0 \quad (8)$$

به عبارتی احتمال حضور ذره در هر نقطه برحسب احتمال همسایه هایش بصورت زیر بیان می شود.

$$u_{i,j} = \frac{1}{4} (u_{i,j+1} + u_{i,j-1} + u_{i+1,j} + u_{i-1,j}) \quad (9)$$

شرایط مرزی:

مدل DLA یک مدل برگشت ناپذیر است، یعنی وقتی ذره در نقطه ای ساکن شد از آن جدا نشده و ذره دیگری هم نمی تواند به آن نقطه وارد شود. پس احتمال اینکه ذره متحرک بتواند به نقاطی که قبلاً ذره ای در آن ساکن شده (نقاط روی کلاستر) برود صفر است. پس در نقاط مرزی کلاستر $u = 0$ است.

اما در نقاط دور از کلاستر هیچ ذره ای در نقاط شبکه نیست پس احتمال رفتن ذره متحرک به آن نقاط $u = 1$ است. توجه به این نکته نیز ضروری است که در مدل DLA احتمال u در نقاط دور از کلاستر در حال رشد یکنواخت است و فقط وقتی به سطح کلاستر نزدیک می شویم این احتمال تغییر می کند بنابراین کافیت احتمال ها را در نزدیکی سطح، یعنی درون دایره محیط بر انبوهه و سطح آن محاسبه کنیم [۸].

الگوریتم رشد در مدل DLA قسمت اول: مرحله تولد

ذره متحرک تصادفی

از آنجایی که رشد روی شبکه انجام می گیرد، در شروع شبکه ای تعریف می کنیم که ذرات متحرک تصادفی روی این نقاط شبکه گام می زنند و در نهایت روی این نقاط

¹ Active points

به وارد کردن تغییراتی در مدل هستیم. اولین اصلاحی که به مدل DLA وارد کردیم در نظر گرفتن ضریب چسبندگی برای نقاط لبه ایست. به این ترتیب که به هر نقطه لبه ای که قابلیت جذب یک ذره متحرک را دارد یک ضریب P_i ، که تابعی از نزدیکترین همسایه های اشغال شده آن نقطه است، نسبت می-دهیم [۱۵و۱۴].

$$P_i = S^{3-n_i} \quad (10)$$

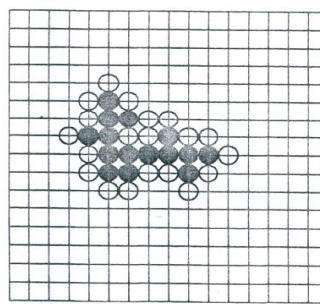
در این رابطه S ضریب چسبندگی است که عددی مثبت و کوچکتر از یک است. n_i نیز تعداد اولین همسایه های اشغال شده نقطه مذکور است.

به این ترتیب هر نقطه لبه ای با یک احتمال می تواند ذره متحرک تصادفی را جذب کند. کوچکتر شدن ضریب چسبندگی (S) باعث کلفت تر شدن شاخه های در حال رشد می شود.

تغییر بعدی که در این راستا به مدل اعمال شد تغییر دادن پارامتر طول پخش (L) است. L فاصله مکانی که ذره متحرک تصادفی در آن متولد شده تا دورترین ذره متصل شده به ساختار در حال رشد است. با کوچکتر کردن این پارامتر شاخه های در حال رشد به هم نزدیکتر و فاصله بین تخلخل های پیش رونده کمتر می شود. یعنی اتفاقی که در آندیزاسیون ویفر سیلیکان نوع p رخ می دهد.

در شکل ۳- b ساختار حاصل از سیلیکان نوع n متشکل از ۱۲۹۳۶ ذره را ملاحظه می کنید که با استفاده از مدل DLA استاندارد و بدون اعمال اصلاحات به مدل، شبیه سازی کرده ایم و مشخصات نمونه تجربی مشابه آن نیز در شکل ۳- a ارایه شده است. در شکل ۴- b با اعمال تغییرات و اصلاحاتی به مدل که در بالا ذکر شد، این پدیده را برای سیلیکان نوع p متشکل از ۳۳۰۵۷ ذره شبیه سازی کرده ایم و مشخصات نمونه تجربی آن نیز در شکل ۴- a ارایه شده است. همانطور که ملاحظه می شود این پارامتر با نمونه واقعی بدست آمده توافق قابل قبولی دارد.

این صورت به ولگشت خود ادامه می دهد تا بالاخره به یک نقطه لبه ای رسیده و به آن متصل شود (شکل ۲). بعد از قرار گرفتن ذره متحرک در نقطه لبه ای دوباره ذره جدیدی رها شده و کار ادامه پیدا می کند. تذکر: چنانچه ذره متحرک حین ولگشت به جای نزدیک شدن به کلاستر از آن دور شود و از منطقه فعالی که قبلاً در برنامه معلوم کرده ایم خارج شود، ذره را نابود فرض می کنیم و ذره دیگری را از فاصله ای که قبلاً توضیح داده شده رها می کنیم. این کار برای کوتاه شدن مدت اجرای برنامه انجام می شود.



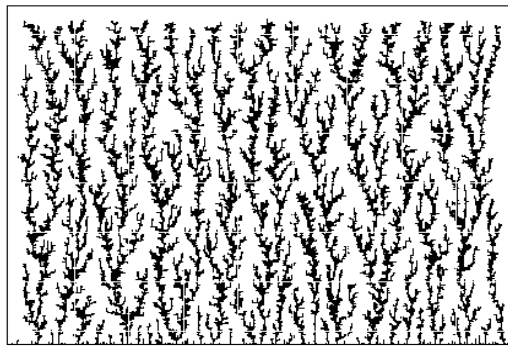
شکل ۲. در این شکل کلاستر در حال رشدی را می بینید. دایره های توپر نشاندهنده نقاط کلاستر و دایره های توخالی نشاندهنده نقاط لبه ای هستند

نتایج:

تصویرهای SEM مربوط به ساختار نمونه های سیلیکان متخلخل که تحت شرایط آندیزاسیون متفاوتی ساخته شده اند، نشان می دهند که شکل و ابعاد ساختار شاخه ای این نمونه ها یکسان نیستند. به عبارتی تغییر در شرایط آندیزاسیون باعث تغییر در شکل و ابعاد ساختار درختی نمونه ها می گردد [۱۶].

۱- اثر نوع آلاینده

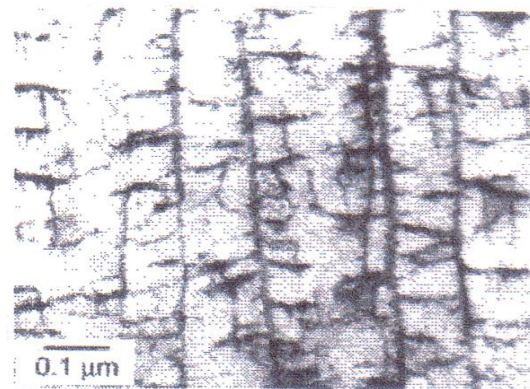
چنانچه ویفر از سیلیکان نوع n انتخاب شود شاخه های این ساختار درختی نازکتر و با تراکم کمتری رشد می کنند (شکل ۳- a). اما اگر ویفر از سیلیکان نوع p باشد، شاخه ها کلفت تر و درهم تنیده تر رشد می کنند (شکل ۴- a). برای نشان دادن این تغییرات در ساختارهای کامپیوتری مجبور



400 Lattice Units

(b-۴)

شکل (b-۴): ساختار کامپیوتری شبیه سازی شده PS به روش DLA حاصل از سیلیکان نوع p، متشکل از ۳۳۰۵۷ ذره، طول پخش برابر $L=2$ ، ضریب چسبندگی $S=0.3$



(a-۳)

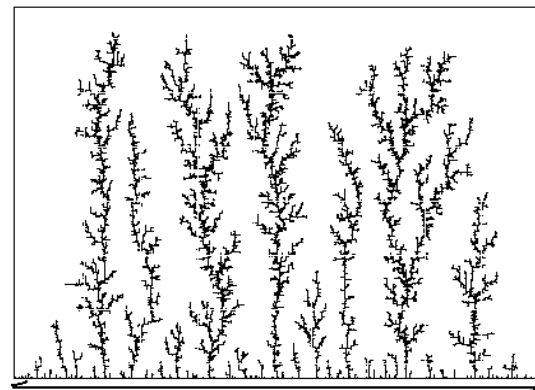
شکل (a-۳): سیلیکان متخلخل ساخته شده از سیلیکان نوع n، شدت جریان 10 mA/cm^2 ، غلظت الکترولیت ۴۹٪ (HE) جهت جریان از پایین صفحه به سمت بالاست [۳]

۲- اثر چگالی جریان

یکی دیگر از شرایط آندیزاسیون که اثر عمده ای روی شکل گیری خلل طی فرآیند متخلخل سازی دارد، چگالی جریان است. با توجه به اینکه شکل گیری شاخه ها و پیشروی آنها در تمام شرایط در جهت جریان است ولی افزایش چگالی جریان باعث می شود خلل شکل میله ای به خود گرفته و کمتر شاخه شاخه شوند ولی با کاهش شدت جریان یکباره قطر خلل کم شده و ساختار شاخه شاخه می شود [۲].

برای وارد کردن این تغییر در ساختارهای شبیه سازی شده، اصلاح دیگری به مدل DLA اعمال کردیم و آن وارد کردن اثر میدان متوسط است. به این مفهوم که وقتی ذره متحرک به یک نقطه لبه ای رسید و تمام شرایط برای چسبیدن مهیا شد، ذره در آن نقطه ساکن نشود بلکه آن نقطه به عنوان نقطه لبه ای که یکبار ملاقات شده ثبت می شود. وقتی یک نقطه لبه ای تعداد ملاقات هایش با ذره متحرک تصادفی به تعداد M (پارامتر میدان متوسط^۱) رسید توسط ذره متحرک اشغال می شود [۱۴].

اعمال اثر میدان متوسط باعث میله ای شدن شاخه های در حال رشد می شود. هر چقدر پارامتر M بزرگتر باشد شاخه ها بصورت میله های مستقیم تری رشد می کنند و با کم



400 Lattice Units

(b-۳)

شکل (b-۳): ساختار کامپیوتری شبیه سازی شده PS به روش DLA حاصل از ویفر سیلیکان نوع n، متشکل از ۱۲۹۳۶ ذره، طول پخش برابر $L=1$ ، پارامتر ضریب چسبندگی $S=0.25$



(a-۴)

شکل (a-۴): سیلیکان متخلخل ساخته شده از سیلیکان نوع p+، کانالهایی کوچک در حد ۵ تا ۱۰ نانومتر، شدت جریان 10 mA/cm^2 ، غلظت الکترولیت ۴۹٪ (HE)، جهت جریان از پایین صفحه به سمت بالاست [۳]

¹ Mean-Field Parameter

تذکو این نکته در اینجا بجاست که اعداد مربوط به ضریب چسبندگی (S)، پارامتر میدان متوسط (M) و پارامتر طول پخش (L) با آزمون و خطا وبا استفاده از روش تکرار بدست آمده است.

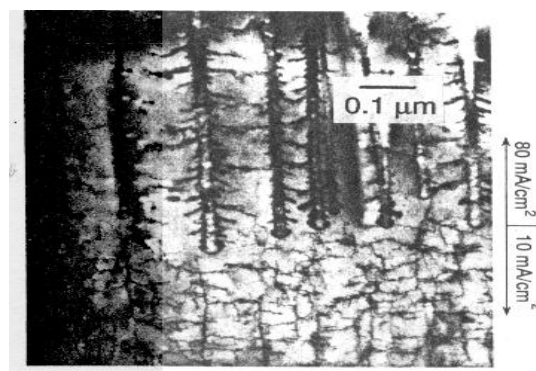
نتیجه گیری

اصلاحات اعمال شده به مدل پخش محدود، شامل وارد کردن ضریب چسبندگی برای نشان دادن ت اثرنوع آلاینش در شکل ساختارهای بدست آمده طی رشد سیلیکان متخلخل و همچنین وارد کردن پارامتر میدان متوسط برای نشان دادن تأثیر چگالی جریان در شکل ستونها در این مقاله ارائه گردیده است.

پارامتر ضریب چسبندگی (S) که عددی کوچکتر از یک می باشد، هرچقدر به یک نزدیکتر باشد شاخه ها نازکتر و تراکم آنها کمتر می شود. مانند ساختارهایی که از متخلخل سازی ویفر سیلیکان نوع n بدست می آیند. کوچکتر شدن S شاخه ها را کلفت تر و تراکم آنها را بیشتر می سازد و اشکال بدست آمده شبیه به ساختارهایی می شود که از متخلخل سازی ویفر سیلیکان نوع p بدست می آیند (شکل ۳ و ۴). اما حضور پارامتر میدان متوسط M در مدل باعث تغییر شکل ستونها می شود به این ترتیب که بزرگتر شدن M مانند بالابردن چگالی جریان در طی متخلخل سازی باعث میله ای تر شدن ستونها می گردد و کوچکتر شدن یا حذف این پارامتر ستونها را شاخه ای تر می سازد، مانند وقتی که چگالی جریان را حین متخلخل سازی کمتر کنیم (شکل ۵).

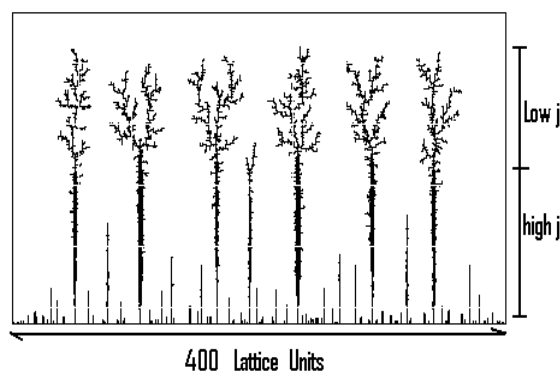
نتایج شبیه سازی بدست آمده با شکل ساختار نمونه های تجربی ساخته شده توافق خوبی را نشان می دهد. بدین ترتیب می توان با اعمال این اصلاحات و همچنین اصلاحات دیگری که قابل اعمال به مدل DLA می باشد، تأثیر سایر پارامترهای آندیزاسیون رادر رشد سیلیکان متخلخل شبیه سازی کرد.

شدن M ساختار درختی شاخه ای تر می شود. در شکل ۵- b با استفاده از این اصلاح در مدل پدیده میله ای شدن شاخه ها در اثر زیاد شدن جریان را نشان داده ایم. این شکل از دو ناحیه تشکیل شده است. در ناحیه ای که با علامت $high j$ مشخص شده است، پارامتر میدان متوسط $M=50$ و ضریب چسبندگی $S=0.25$ در نظر گرفته شده است. اما در ناحیه دوم که با علامت $low j$ مشخص شده پارامتر میدان متوسط و ضریب چسبندگی $M=0$ و $S=1$ فرض شده است. ساختار مذکور از 8150 ذره تشکیل شده است. در شکل ۵- a نمونه تجربی آن ارائه گردیده است.



(۵- a)

شکل (۵- a): عکس از سطح مقطع (TEM) سیلیکان متخلخل نوع n که شکل خلل را بصورت تابعی از جریان نشان می دهد. نوع آلاینش زیرلایه فسفر و غلظت آلاینش $1/17$ در سانتی- مترمکعب است. غلظت الکترولیست (HF) $0.49/1$ است [۳]



(۵- b)

شکل (۵- b): ساختار کامپیوتری شبیه سازی شده از سیلیکان متخلخل به روش DLA . متشکل از 8150 ذره، پارامتر میدان متوسط در ناحیه $high j$ $M=50$ و ضریب چسبندگی $S=0.25$ در ناحیه $low j$ $M=0$ و $S=1$ ، این شکل کامپیوتری تغییر شکل در اثر تغییر جریان طی آندیزاسیون را شبیه سازی کرده است

منابع

1. L. T. Canham, *Silicon quantum wire array fabrication by electrochemical and dissolution of wafers*, Appl. Phys. Lett., 57(10)(1990)1046-1048.
 2. R. L. Smith and S. D. Collins, *Porous silicon formation mechanisms*, J. Appl. Phys., 71(8)(1992)R1-R22.
 3. R. T. Collins, P. M. Fauchet and M. A. Tichler, *Porous silicon: From luminescence to LEDs*, Physics Today 50 (1997)24-30.
 4. S. F. Chuang, S. D. Collins and R. L. Smith, *Preferential propagation of pores during the formation of porous silicon: a transmission electron microscopy*, Appl. Phys. Lett., 55(7)(1989)675-677.
 5. B. B. Mandelbrot, *Fractals, Form, Chance and Dimension*, USA (1977).
 6. T. Vicsek, *Fractal Growth Phenomena*, Budapest, Hungary, (1992).
 7. T. A. Witten and L. M. Sander, *Diffusion-limited aggregation, a Kinetic Critical Phenomena*, Phys. Rev. Lett., 47(19)(1981)1400-1403.
 8. T. A. Witten and L. M. Sander, *Diffusion-limited aggregation*, Phys. Rev. B, 27(9)(1983) 5686-5697.
 9. L. Niemeyer, L. Pietronero, H. J. Wiesman, Phys. Rev. Lett., 52(12)(1984)1033-1036.
 10. M. Kolb, R. Botet, R. Jullien, Phys. Rev. Lett., 51(13)(1983)1123-1126.
 11. J. Nittman, G. Daccord, H. E. Stanley, Nature, 314(6007)(1985)141-145.
 12. T. Vicsek, *Pattern Formation in Diffusion-Limited Aggregation*, Phys. Rev. Lett., 53(24)(1984)2281-2284.
 13. T. Vicsek, *Formation of Solification in Patterns in Aggregation Models*, Phys. Rev. A, 32(5)(1985)3084-3089.
 14. K. C. Chiu, F. S. Lee, S. J. Tu, S. M. Young, W. Y. Hsu, C. F. Chen, C. S. Ro, *A study in Mont Carlo Simulation of Modified DLA*, Chinese journal of physics, 30(1)(1992)143-155.
 15. P. Meakin, *Diffusion-Controlled cluster formation in 2-6-dimesional space*, Phys. Rev. A, 27(3)(1983) 1495-1507.
۱۶. سکینه مینائی فرد و رضا ثابت داریانی، شبیه سازی سیلیکان متخلخل به روش DLA، سیزدهمین گردهمایی فیزیک ماده چگال، مرکز تحصیلات تکمیلی در علوم پایه- زنجان (۱۳۸۶) ۳۲۷.