

## ستنز کنترل شده میکروساختارهای دوبعدی منظم در پلاسماهای فعال با چگالی بالا

زهرا مروی و غلامرضا فروتن

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه صنعتی سهند، تبریز

( دریافت مقاله : ۸۹/۳/۸ - پذیرش مقاله : ۹۰/۱/۲۹ )

### چکیده

هدف از این کار، بررسی دینامیک یون‌ها، الکترون‌ها و نانوذرات باردار درون غلاف پلاسما غباری، به منظور تعیین شرایط مناسب جهت نهشت کنترل شده و گزینشی ذرات پلاسما روی سطح یک زیرلایه طرح‌دار شامل آرایه‌ای از میکروساختارهای منظم است. روش مورد استفاده در این مطالعه، شبیه‌سازی عددی معادلات سیالی توصیف کننده دینامیک ذرات پلاسما درون غلاف پلاسمایی است. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد، با افزایش چگالی الکترونی میزان کانونی‌کنندگی میدان الکتریکی نانوساختار بیشتر می‌شود، لذا نانوساختارهای با نسبت نمود بالا تولید می‌شود. افزایش دمای الکترونی باعث کاهش بار نانوذرات و در نتیجه کاهش شار آن‌ها بر روی نانوساختار می‌شود. با افزایش چگالی تعداد و عدد ماخ نانوذرات، شار فرودی بر روی نانوساختارها و به تبع آن آهنگ رشد آن‌ها افزایش می‌یابد. به علاوه شار فرودی با افزایش ارتفاع و دوره تناوب میکرو طرح رشد پیدا می‌کند. از یافته‌های حاضر می‌توان نتیجه گرفت که برای رسیدن به آهنگ نهشت بالا و نانوساختارهایی با نسبت نمود بزرگ، باید از یک پلاسما چگال با دمای پایین و نانوذرات با سرعت فرودی بالا و میکرو طرح با دوره تناوب نسبتاً بزرگ استفاده نمود.

واژه های کلیدی: غلاف پلاسمایی، نانوذرات غبار، شبیه‌سازی سیالی، نهشت گزینشی، نانوتیوب‌های کربنی، پلاسماهای فعال، میکروساختارهای منظم.

## Controlled synthesis of ordered two-dimensional microstructures in reactive high-density plasmas

Z. Marvi and Gh. Foroutan

Department of Physics, Faculty of Science, Sahand University of Technology, Tabriz, Iran

### Abstract

This work's aim is to investigate the dynamics of ions, electrons, and charged nanoparticles inside the dusty plasma sheath, in order to determine the appropriate conditions for the controlled and site selective deposition of plasma particles on a pre-patterned substrate of ordered microstructures. The approach used in this study, is the numerical simulation of the fluid equations, describing the dynamics of plasma particles inside the plasma sheath. The results obtained, show that the focusing effect of the electric field of nanostructures increases with the increasing of the electron number density, leading to the growth of high aspect ratio nanostructures. Increase in the electron temperature, results in the decreasing of the charge of nanoparticles, and consequently in the decreasing of the incident flux on the nanostructures. The enhancement of the number density and Mach number of the nanoparticles, leads to the enhancement of the flux on nanostructures and as a result their growth rate increases. Moreover, the incident flux grows with the increasing of the height and period of micro-pattern. From the present findings it can be concluded that to achieve high deposition rates and nanostructures with a large aspect ratio one should employ a high density, low temperature plasma, large impinging velocity of nanoparticles, and a micro pattern with a relatively large period.

**Keywords:** : Plasma Sheath, Dust Nanoparticles, Fluid Simulation, Site Selective Deposition, Carbon Nanotubes, Active Plasmas, Ordered Microstructures.

E-mail of corresponding author: zmarvi9518@gmail.com

## مقدمه

پیشرفت‌های اخیر در علم نانو، اهمیت نانوساختارهای صفر، یک و چند بعدی را هم از نقطه نظر تحقیقات بنیادی فیزیک و هم از لحاظ کاربردهای صنعتی به اثبات رسانده است. به عنوان مثال، نانوتیوب‌ها برای ذخیره هیدروژن و کاربردهای اپتیکی، میکروالکترونی و پزشکی، نانودیواره‌ها و نانونوارها در کاربردهای موج بر، نانومیل‌ها به عنوان سنسورهای گازی، تنها نمونه‌هایی از کاربردهای بسیار وسیع نانوساختارها در صنعت به شمار می‌آیند. در میان نانوساختارهای مختلف، نانو تیوب‌های کربنی منظم به علت مشخصات مکانیکی، اپتیکی و حرارتی ویژه، از اهمیت بالایی برخوردار هستند. امروزه نانوتیوب‌های کربنی به راحتی با استفاده از تکنیک نهشت بخار شیمیایی تقویت شده پلاسمایی (PECVD) در محیط پلاسمایی رشد داده می‌شوند. نانوتیوب‌های رشد داده شده با این روش دارای نسبت نمود بالایی بوده و انجام فرآیند پوشش‌دهی بر روی آن‌ها در محیط پلاسمایی امکان‌پذیر است.

روش PECVD دارای مزیت‌های زیادی نسبت به سایر روش‌های تولید نانوتیوب‌های کربنی است [۱-۷]. به عنوان مثال در روش نهشت بخار شیمیایی (CVD)، معمولاً لازم است که زیر لایه را به اندازه کافی گرم کرد تا شرایط ذوب کاتالیزور فلزی فراهم شده و تبدیل به نانوذرات کوچکتر شود که این امر در زیرلایه‌ها یا مواد حساس به دما باعث بروز مشکلات اساسی شده و ممکن است حتی منجر به ذوب بسیاری از قطعات و اتصالات الکترونیکی در صنعت میکروالکترونیک شود. اما در روش PECVD، تجزیه ماده خام به طور عمده به وسیله برخوردهای الکترون‌های پر انرژی تولید شده در پلاسمای سرد غیر تعادلی انجام می‌شود. اغلب در این روش از یک سطح زیرلایه طرح دار برای رشد نانوتیوب‌های به طور عمودی تراز شده استفاده می‌شود. از طرف دیگر، نانوتیوب‌هایی که با استفاده از روش‌هایی مانند CVD رشد داده می‌شوند، در بیش تر موارد نامنظم و در جهت‌های تصادفی نسبت به زیرلایه جامد قرار می‌گیرند. در حالی که برای استفاده از نانوساختارها در توسعه گسیلنده‌های

الکترونی و ساخت نمایشگرها، این ساختارها باید دارای قابلیت‌های ویژه‌ای باشند و باید به صورت عمودی روی زیر لایه‌های جامد رشد داده شوند. نانوتیوب‌هایی که در محیط پلاسمایی کم دما به روش PECVD رشد داده می‌شوند، به طور عمودی روی سطح تراز می‌شوند که عامل آن وجود میدان الکتریکی قائم درون غلاف پلاسمایی است. همچنین روش PECVD به علت امکان کنترل فضایی شار یون‌ها و رادیکال‌ها، فرآیندهای بعد از ساخت همانند لایه نشانی بر روی نانوساختارها و اچینگ غیرهمسانگرد آن‌ها را به راحتی امکان‌پذیر می‌سازد. در این‌جا ذکر این نکته قابل توجه است که اچینگ پلاسمایی تنها روش باصرفه اقتصادی و کارایی بالا، جهت اچینگ غیرهمسانگرد در صنعت میکروالکترونیک است. در چند سال اخیر مطالعات تجربی و عددی متعددی روی تولید و رشد نانوساختارهای کربنی به کمک محیط پلاسمایی انجام شده است [۸-۱۴]. در اغلب کارهای عددی پیشین، اثرات ناشی از بار فضایی نانوذرات، نیروی‌های کششی وارد بر آن‌ها، برخوردهای بین ذرات پلاسما با خنثی‌ها و یونیزاسیون روی ساختار غلاف بررسی نشده است، [۱۵ و ۱۶]. در حالی که در بسیاری از شرایط واقعی که چگالی و سرعت یون‌ها در داخل غلاف قابل ملاحظه است نیروی کشش یونی نقش مهمی در دینامیک ذرات غبار ایفا می‌کند. از طرفی دیگر با توجه به این‌که بار الکتریکی متوسط هر نانوذره بین ۱۰۳ تا ۱۰۴ برابر بار الکترون است، حضور نانوذرات باردار توزیع بار فضایی و همچنین آرایش میدان الکتریکی داخل پلاسما و غلاف پلاسمایی را به شدت تحت تأثیر قرار می‌دهد. همچنین در پلاسماهای با فشار بالا، نمی‌توان از اثرات یونیزاسیون و برخوردها بر روی حالت تخلیه الکتریکی صرف نظر کرد. هدف از این مطالعه شبیه سازی نهشت کنترل شده و انتخابی شار یون‌ها و نانوذرات باردار روی سطح یک زیرلایه شامل آرایه‌ای از نانوتیوب‌ها در یک پلاسمای القایی جفت شده (ICP) در دمای پایین و چگالی بالا است. روش مورد استفاده برای این کار، حل عددی معادلات سیالی توصیف کننده دینامیک الکترون‌ها، یون‌ها و نانوذرات است. این معادلات شامل معادلات پیوستگی و ممتوم برای این سه گونه،

عددی را ارایه نموده و این نتایج را با نتایج کارهای تجربی انجام یافته در این زمینه مقایسه می نماید. در نهایت در بخش ۴ نتایج به دست آمده جمع بندی شده و به طور اجمالی مورد بحث قرار می گیرد. همچنین پیشنهادهایی برای توسعه آتی این کار ارایه می شوند.

### تئوری و مدل شبیه سازی

برای شبیه سازی رشد نانو تیوب ها در محیط پلاسمایی از یک مدل دو بعدی (صفحه  $x-z$ ) استفاده می کنیم، بنحوی که طول سیستم در راستای  $y$  نامتناهی فرض می شود. مرز غلاف و پلاسما در  $z=0$  و سطح زیرلایه در  $z=L$  واقع شده است. زیرلایه شامل یک آرایه دوبعدی پیش ساخته از نانو تیوب هایی به ارتفاع  $s$ ، عرض  $w$  و دوره تناوب  $d$  می باشد، که فاصله داخلی بین نانو تیوب ها با  $b$  نمایش داده می شود. سطح زیرلایه و نانو تیوب ها به یک پتانسیل منفی بایاس شده است، (شکل ۱).

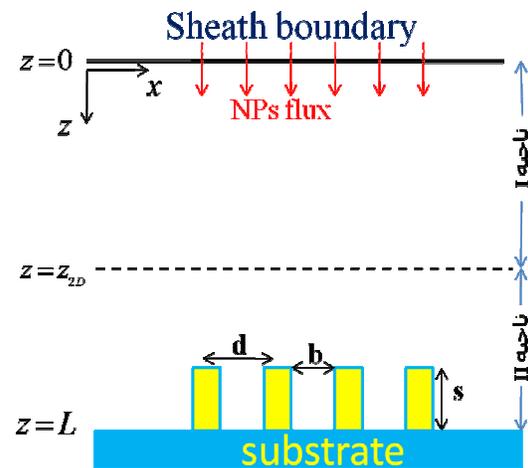
محدوده شبیه سازی به دو ناحیه تقسیم می شود: یک ناحیه یک بعدی که شامل فاصله بین لبه غلاف تا نزدیکی نانو ساختارها است. یعنی ناحیه ای که در آن اثر میدان عرضی ناشی از نانو ساختارها بسیار ناچیز است. ناحیه دوم که در آن تاثیر میدان الکتریکی سطح نانو ساختار روی دینامیک ذرات قابل توجه است و برای توصیف حرکت یون ها و ذرات غبار و محاسبه شارهای میکروسکوپیکی بر روی سطح زیرلایه، معادلات سیالی باید به شکل دوبعدی در این ناحیه حل شوند. تعیین این شرایط به طور آزمایشگاهی با ایجاد اختلاف پتانسیل  $4V$  بین سطح زیرلایه و لبه بالایی شبکه دو بعدی ( $z_{2D}$ )، به آسانی میسر می شود [۱۵]. در این حالت مرز بین ناحیه I و II ( $z = z_{2D}$ ) تقریباً چند صد میکرومتر بالاتر از سطح زیرلایه قرار می گیرد. بنابراین برای صحت و دقت مدل چند شبکه ای به کار برده شده در شبیه سازی، لازم است تا نامساوی  $d, s \ll L - z_{2D}$  در مورد ابعاد غلاف و آرایه میکروساختار برقرار باشد. پارامترهای پلاسما و آرایه میکروساختار به کار برده شده در شبیه سازی در جدول (۱) خلاصه شده است.

معادلات باردار شدن ذرات غبار و معادله پواسون برای محاسبه میدان الکتریکی است. برای حل این مجموعه معادلات، از ترکیب روش های رونگ کوتای مرتبه چهارم و مک کورمک استفاده می شود. روش رونگ کوتا معمولاً برای حل دستگاه معادلات دیفرانسیلی با مشتقات معمولی استفاده می شود و دلیل انتخاب آن سادگی و سرعت بالای این روش است. از طرف دیگر روش مک کورمک یک روش بسیار ساده برای حل دوبعدی معادلات سیالی در سیالات فراصوتی است. در مطالعه حاضر، ساختار میدان الکتریکی در نزدیکی سطح میکروساختار دارای وابستگی فضایی دوبعدی است، و از آن جایی که یون ها و نانو ذرات با چندین برابر سرعت صوت وارد غلاف پلاسمایی می شوند، روش مک کورمک بهترین و شناخته شده ترین روش برای حل معادلات سیالی پلاسما در این شرایط است. برای وضوح بیشتر نتایج عددی ابعاد نانو تیوب ها در این شبیه سازی در محدوده میکرومتر انتخاب شده است و نتایج به دست آمده به صورت رضایت بخشی در ابعاد نانو هم معتبر است. معادلات سیالی برای نانو ذرات باردار شامل اثرات نیروهای الکتریکی، گرانش، کشش یونی و ترموفورتیک است. در معادلات الکترون ها و یون ها اثرات یونیزاسیون، برخورد با اتم های خنثی و گرادیان فشار در نظر گرفته شده و بار نانو ذرات به صورت خودسازگار در معادله پواسون منظور می شود. بعد از حل معادلات به روش عددی، اثر تغییر پارامترهای تخلیه الکتریکی و خصوصیات میکروساختار روی نهشت گزینشی نانو تیوب ها بررسی می شوند. پلاسماهای مورد بررسی برای تولید نانو ساختارهای کربنی کریستالیزه، مخلوطی از  $H_2$ ،  $CH_4$  و گاز بی اثر آرگون است [۱۷]. از این رو، در این شبیه سازی پلاسما شامل یون های مثبت  $Ar^+$ ، به عنوان گونه تعیین کننده ساختار غلاف، و یون  $CH_3^+$ ، به عنوان گونه ای که در فرآیند رشد شرکت می کند، می باشد.

این مقاله شامل چهار بخش است. در بخش ۲، تئوری غلاف پلاسمایی، معادلات حاکم بر دینامیک گونه های مختلف ذرات پلاسما، و روش عددی مورد استفاده برای حل این معادلات، توضیح داده می شود. بخش ۳، نتایج حاصل از شبیه سازی

ذرات در طی عبور از پیش غلاف کسب می کنند وابسته است زیرا برای رسیدن این ذرات به نزدیکی نانوساختارها لازم است که انرژی آن ها در لبه غلاف به حدی باشد که بتوانند به نقطه تغییر علامت بار برسند. در غیر این صورت قبل از رسیدن به این نقطه، توسط میدان الکتریکی ناشی از پتانسیل منفی زیرلایه برگشت داده می شوند. به همین دلیل از مقادیر بزرگی از سرعت نرمالیزه نانوذرات در لبه غلاف به عنوان شرط مرزی برای حل معادلات استفاده می شود. این تغییر علامت بار نانوذرات در نقطه ای درون غلاف رخ می دهد، که بار حاصل از مجموع جریان های یونی و الکترونی صفر است. شرط مرزی برای حل معادلات استفاده می شود. این تغییر علامت بار نانو ذرات در نقطه ای درون غلاف رخ می دهد، که بار حاصل از مجموع جریان های یونی و الکترونی صفر است. در معادلات سیالی یون و الکترون، اثرات یونیزاسیون و برخورد ذرات پلاسما با خنثی ها در نظر گرفته می شوند، ولی از جملات مربوط به برخورد ذرات پلاسما با یکدیگر صرف نظر می شود. نیروی کل وارد بر نانو ذرات غبار تولید شده در پلاسما، شامل نیروی های الکترواستاتیکی، کشش یونی، کشش خنثی ها و ترموفورتیک است.

چون سرعت حرارتی الکترون ها بسیار بیشتر از یون ها است، تعداد الکترون هایی که بر روی نانوذرات جمع می شوند بسیار بیشتر از یون ها است، لذا در توده پلاسما در حالت عادی بار نانوذرات منفی است. ولی در غلاف پلاسمایی به علت کمبود الکترون و چگالی بالای یون ها، نانوذرات می توانند در حین حرکت از لبه غلاف به سمت زیرلایه تغییر علامت دهند و بارشان مثبت گردد. در مرجع [۱۵] نشان داده شده است که شار فرودی نانوذرات بر روی زیرلایه به مقدار انرژی که این



شکل ۱. هندسه شبیه سازی

جدول ۱. پارامترهای استفاده شده در شبیه سازی [۱۵]

پارامتر	نماد	مقدار
چگالی الکترونی	$n_{e0}$	$10^9 - 10^{10} \text{ cm}^{-3}$
جرم یونی و خنثی ها	$m_i \approx m_n$	39 amu(Ar)
دمای الکترونی	$T_e$	1 eV
چگالی خنثی ها	$n_n$	$10^{15} \text{ cm}^{-3}$
شعاع نانوذرات	$r_d$	20 nm
پتانسیل زیرلایه	$\phi_s$	-8 to -11 V
ارتفاع میکروساختار	$s$	1 - 4 $\mu\text{m}$
فاصله میانی نانوتیوب ها	$b$	30 - 60 $\mu\text{m}$
پریود میکرو طرح	$d$	50 - 120 $\mu\text{m}$
طول زیرلایه	$l$	750 $\mu\text{m}$

تفاوت که برای آنها گرادیان فشاری در نظر گرفته نمی شود و جملات مربوط به چشمه و چاهک نانوذرات صفر می باشند. پتانسیل الکترواستاتیکی در نواحی نزدیک زیرلایه  $(z_{2D} < z < L)$ ، از حل عددی معادله پواسون دو بعدی همراه با معادلات فوق به دست می آید:

$$\frac{\partial E_z}{\partial z} + \frac{\partial E_x}{\partial x} = 4\pi e \left[ -n_e(x, z) + fn_i(x, z) + (1-f) \frac{Q_d}{Q_{d0}} n_d(x, z) \right] \quad (10)$$

در معادلات بالا  $n_j$ ،  $m_j$  و  $V_j$ ، به ترتیب جرم، چگالی تعداد و سرعت برداری ذره نوع  $j$  ام است،  $E_x$  و  $E_z$  به ترتیب مؤلفه  $x$  و  $z$  میدان الکتریکی غلاف،  $f$  نسبت چگالی یونی به الکترونی در لبه غلاف، و  $Q_d$  بار ذرات غبار می باشد.  $v_{jn}$  و  $v_l$  نیز به ترتیب فرکانس یونیزاسیون و فرکانس برخورد ذرات پلاسما با خشی ها می باشند. در معادله ممتوم ذرات غبار، نیروی های کشش یونی  $(F_{di})$ ، کشش خشی  $(F_{dn})$  و ترموفورتیک  $(F_{th})$ ، تنها در راستای  $z$  بر ذرات وارد می شوند، که اولی به سمت زیرلایه و دو نیروی دیگر به سوی لبه غلاف به نانوذرات وارد می شوند [۲۱].

معادلات بالا به وسیله روابط زیر بهنجار می شوند [۱۹]:

$$Z = z / \lambda_{De}, \quad Q = eq_{np} / r_{np} T_e, \quad \Phi = \frac{e\phi}{T_e} \quad (11)$$

$$u_{np} = v_{np} / c_{ds}, \quad u_{i,e} = v_{i,e} / c_{is}, \quad N_j = n_j / n_{0j},$$

$$\bar{v}_{en} = \frac{m_e v_{en}}{m_i \omega_{pi}}, \quad \bar{v}_{in} = \frac{v_{in}}{\omega_{pi}}, \quad \bar{v}_l = \frac{v_l}{\omega_{pi}},$$

برای حل معادلات از شرایط مرزی زیر در لبه غلاف بهره می گیریم:

$$u_{npz} = 4.5, \quad u_{iz} = 1.5, \quad u_{ez} = 0.001,$$

$$u_{npx} = u_{ix} = u_{ex} = 0.0, \quad u_{npy} = u_{iy} = u_{ey} = 0.0, \quad (12)$$

از تئوری حرکت مداری محدود برای محاسبه بار جمع شده در سطح نانوذرات کروی استفاده می شود [۱۸]. بدین ترتیب شکل کلی معادلات حاکم برای حالت ایستا به صورت زیر است [۱۹ و ۲۰]:

$$\nabla \cdot (n_d \mathbf{V}_d) = 0, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot (n_j \mathbf{V}_j) = \gamma_{in} n_n n_e, \quad j = i, e \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} (n_d v_{dx}^2) + \frac{\partial}{\partial z} (n_d v_{dx} v_{dz}) = \frac{Q_d}{m_d} E_x, \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} (n_d v_{dx} v_{dz}) + \frac{\partial}{\partial z} (n_d v_{dz}^2) =$$

$$\frac{Q_d}{m_d} E_z + m_d g + F_{di} + F_{dn} + F_{th},$$

$$\frac{\partial}{\partial x} (n_i v_{ix}^2) + \frac{\partial}{\partial z} (n_i v_{iz} v_{ix}) = \frac{e}{m_i} E_x - \frac{\partial P_i}{\partial x} - n_i v_{in} v_{ix}, \quad (5)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} (n_i v_{iz} v_{ix}) + \frac{\partial}{\partial z} (n_i v_{iz}^2) = \frac{e}{m_i} E_z - \frac{\partial P_i}{\partial z} - n_i v_{in} v_{iz}, \quad (6)$$

$$0 = -\frac{e}{m_e} E_x - \frac{\partial P_e}{\partial x} - n_e v_{en} v_{ex}, \quad (7)$$

$$0 = -\frac{e}{m_e} E_z - \frac{\partial P_e}{\partial z} - n_e v_{en} v_{ez}. \quad (8)$$

که در آن  $n_j$  چگالی تعداد،  $v_{jz}$  و  $v_{jx}$  مؤلفه های  $z$  و  $x$  سرعت جریان مربوط به ذره گونه  $j$  ام می باشند. در روابط (۴) و (۵)  $p_j$  بیانگر فشار سیال ذره نوع  $j$  ام است که از معادله حالت گاز ایده آل به صورت زیر پیروی می کند:

$$P_j = n_j T_j, \quad j = i, e, \quad (9)$$

که در آن  $T_j$  دمای ذره نوع  $j$  ام (یون و الکترون) است و برحسب واحد انرژی بیان می شود. معادلات مربوط به نانوذرات مانند معادلات یون ها و الکترون ها می باشند، با این

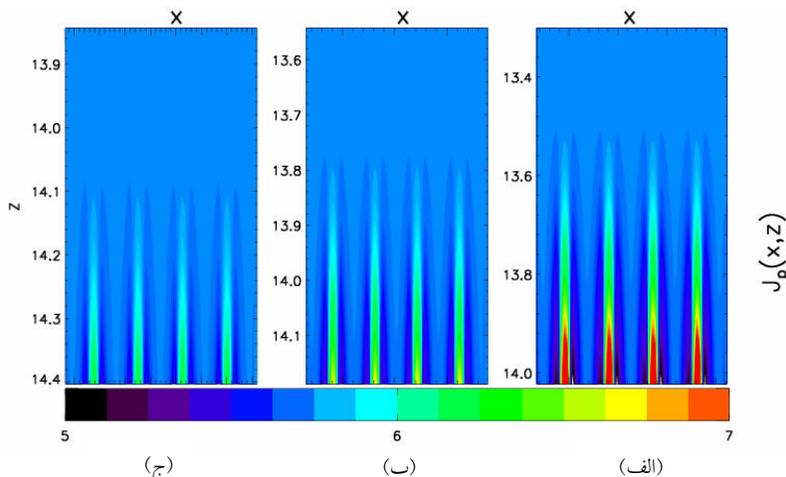
نانوساختار روی تمام نقاط شبکه دوبعدی محاسبه شده و در حل معادلات دوبعدی به روش مک کورمک وارد می‌گردد. به این ترتیب کمیت‌های غلاف شامل پتانسیل غلاف، شارهای یونی و نانوذرات برحسب فاصله بهنجار شده از لبه غلاف ( $Z$ ) و در امتداد آرایه نانوتیوب‌ها ( $X$ ) به صورت خودسازگار و وابسته به هم به دست می‌آیند.

### تحلیل نتایج شبیه‌سازی

در این شبیه‌سازی از یک پلاسمای آرگون با چگالی الکترونی  $n_{e0} = 5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$  استفاده شده است. بنابراین با توجه به شرط شبه خنثی بودن پلاسما و نسبت چگالی یونی به الکترونی  $f = 1.7$ ، چگالی تعداد نانوذرات از مرتبه  $10^7 \text{ cm}^{-3}$  می‌باشد، که شرایط لازم را برای بهره‌گیری از رهیافت سیالی مهیا می‌کند. فرکانس‌های بهنجار یونیزاسیون، برخورد یون-خنثی و الکترون-خنثی به ترتیب برابر با  $v_{e1} = 0.01$ ،  $v_{in} = 0.01$  و  $v_{en} = 0.002$  می‌باشند. شکل‌گیری و نهشت نانوذرات بر روی سطح میکروساختار واقع در زیرلایه، به شدت وابسته به پارامترهای تخلیه الکتریکی پلاسمایی مانند چگالی اولیه و دمای الکترونی، و پارامترهای ذرات غبار از قبیل نسبت چگالی یونی به الکترونی و سرعت نانوذرات غبار در مرز غلاف با پلاسما، است. ما نخست تأثیرات ناشی از تغییر این پارامترها را روی نهشت نانوذرات مورد بررسی قرار می‌دهیم.

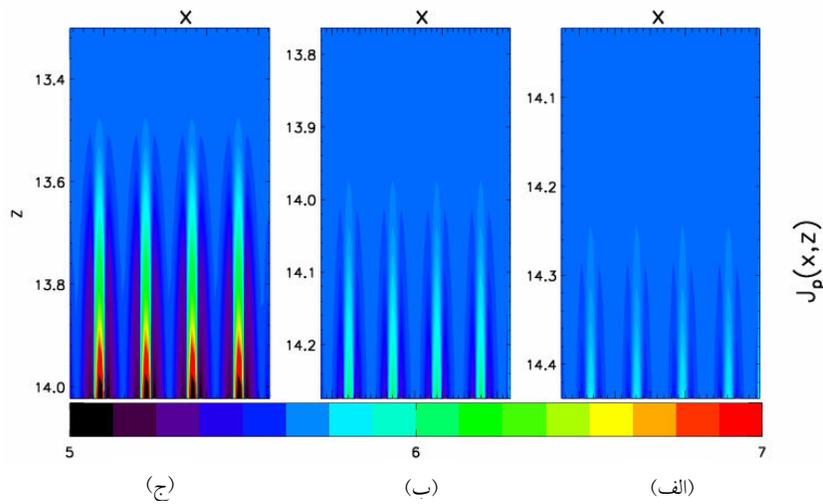
$$N_{np,i,e} = 1, \quad \Phi = 0.0, \quad \Phi_s = -11 \text{ V}, \quad d\Phi/dZ = \bar{v}_{in}.$$

برای شبیه‌سازی پلاسما در ناحیه ۱، ابتدا فرم یک بعدی معادلات (۸-۱) را به کمک معادلات (۱۱) بهنجار می‌کنیم [۱۹]. سپس معادلات حاصل را با در نظر گرفتن شرایط مرزی (۱۲)، به روش رونگ-کوتای مرتبه چهارم حل می‌کنیم. در ناحیه ۲، شکل دوبعدی معادلات به روش پیش بینی و تصحیح مکرومک حل می‌شوند [۲۰]. در این روش عددی، مقادیر روی یک مرز افقی (در اینجا لبه غلاف) معلوم می‌باشند و با جداسازی معادلات در دو مرحله پیش‌بینی و تصحیح، مقادیر در گام بعدی در راستای عمود به دست می‌آیند. شرطی برای مقادیر کمیت‌ها روی زیرلایه (انتهای ناحیه شبیه‌سازی) در نظر گرفته می‌شود و حل تا جایی پیش می‌رود که مقادیر به دست آمده این شرط را ارضا کنند. از حل معادله لاپلاس دوبعدی به روش تکرار SOR اثر میدان نانوساختار در نزدیکی سطح زیرلایه (ناحیه ۲)، به دست می‌آید. در این روش برای مرزهای عمودی ناحیه دوبعدی ( $X = X_{max}$  و  $X = 0$ ) از مقادیر پتانسیل مربوط به حل یک بعدی معادله پواسون استفاده می‌کنیم. همچنین برای مرزهای افقی شامل لبه غلاف و زیرلایه، به ترتیب مقادیر اولیه پتانسیل در لبه غلاف و پتانسیل روی سطح نانوساختار را در نظر می‌گیریم. با در نظر گرفتن این مقادیر برای مرزها و مقادیر حدسی اولیه برای نقاط داخل شبکه دوبعدی، با اجرای الگوریتم تکرار روی معادله لاپلاس، مقادیر پتانسیل ناشی از



شکل ۲. پربند شار فرودی ذرات پلاسما روی سطح نانوتیوب‌ها به ازای سه مقدار مختلف چگالی الکترونی پلاسما:

(الف)  $n_{e0} = 5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ ، (ب)  $n_{e0} = 4 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$  و (ج)  $n_{e0} = 3 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ .



شکل ۳. تغییرات شار فرودی ذرات غبار روی سطح میکروساختار به ازای سه مقدار مختلف دمای الکترونی: (الف) 3 eV، (ب) 2 eV، و (ج) 1 eV.

توسط نانوتیوب‌ها می‌گردد. بر طبق رابطه شبه خنثائیت، افزایش نسبت چگالی یونی به الکترونی، بیانگر افزایش چگالی نانوذرات (غبار) در لبه غلاف است. افزایش چگالی تعداد غبار باعث می‌شود که تعداد الکترون‌های جذب شده توسط هر ذره غبار کاهش یافته و بنابراین بار منفی ذره کاهش پیدا کند. با کاهش بار منفی غبار، این ذرات سریع‌تر تغییر علامت داده و توسط میدان ناشی از سطح نانوتیوب‌ها منحرف می‌شوند. این امر موجب نهشت مؤثرتر نانوذرات بر روی سطح نانوتیوب‌ها می‌شود.

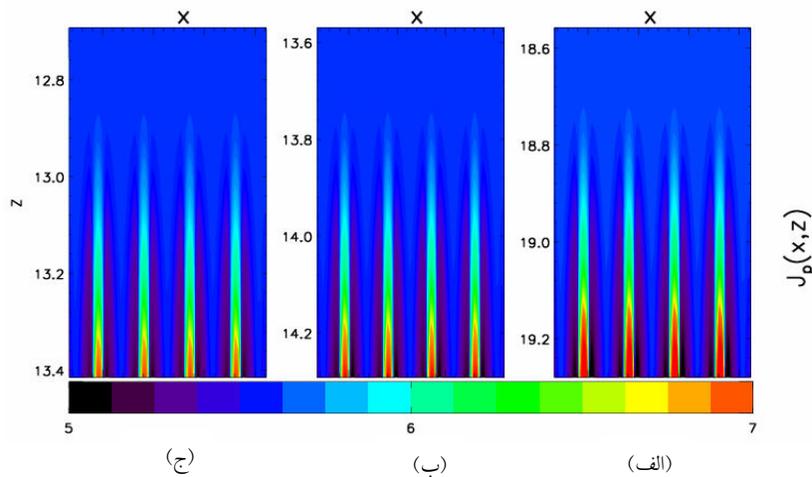
اکنون اثر سرعت نانوذرات در لبه غلاف یا عدد ماخ نانوذرات را بر روی رشد نانوساختارها مطالعه می‌کنیم. شکل ۵ شار فرودی بر روی زیرلایه را به ازای اعداد ماخ مختلف نشان می‌دهد. در این شکل به وضوح مشاهده می‌شود، وقتی ذرات انرژی بیشتری در پیش غلاف کسب می‌کنند پهنای غلاف کاهش می‌یابد، و تمرکز شار فرودی بر روی سطح نانوساختارها در هر ارتفاعی بیشتر می‌شود. جالب است که به ازای یک تغییر کوچک در پهنای غلاف، انحراف ذرات از مسیر اولیه زیاد است (شکل ۵-الف)). برای توجیه این نتایج می‌توان گفت که افزایش سرعت اولیه نانوذرات موجب افزایش بار مثبت نانوذرات غبار در نزدیکی زیرلایه می‌شود، علاوه بر این، چگالی تعداد ذرات غبار رسیده به دیواره نیز افزایش می‌یابد. این دو اثر با هم منجر به افزایش شار نانو

فرآیند رشد سریع‌تر صورت می‌گیرد. این نتیجه با مشاهدات تجربی مرجع [۲۲] در مورد رشد نانومخروط‌های کربنی تک کریستالی در محیط پلاسمایی سازگاری کامل دارد.

در شکل ۳، تأثیر دمای الکترونی بر نهشت ذرات پلاسما نشان داده شده است. همان‌طور که می‌بینیم افزایش دمای الکترونی سبب کاهش قابل توجهی در نهشت ذرات غبار روی سطح نانوتیوب‌ها شده است. با افزایش دمای الکترونی بار کل ذرات غبار کاهش می‌یابد و در نتیجه انحراف آنها توسط میدان الکتریکی نانوتیوب‌ها کاهش پیدا می‌کند، بنابراین شار ذرات پلاسما روی سطح نانوتیوب‌ها کاهش می‌یابد.

از طرفی دیگر ثابت شده است که در رشد نانوساختارها به وسیله پلاسما، تخلیه‌های القایی که دارای چگالی پلاسما بالا و دما و فشار کم هستند بر تخلیه‌های خازنی که دارای چگالی کم و دما و فشار بالا می‌باشند، برتری دارند [۲۳ و ۲۴]، بنابراین نتیجه ارائه شده در بالا در مورد کاهش شار نهشت یافته با افزایش دمای الکترونی، مطابقت کیفی خوبی با یافته‌های آزمایشگاهی در زمینه نانساخت پلاسمایی دارد.

در پلاسماهای غباری یکی از پارامترهای مؤثر در فرآیند رشد میکروساختارها، نسبت چگالی یونی به الکترونی در لبه غلاف ( $f = n_{i0}/n_{e0}$ ) است. شکل ۴ تأثیر این پارامتر را روی نهشت نانوذرات نشان می‌دهد. به وضوح دیده می‌شود که افزایش پارامتر  $f$  منجر به کانونی شدن مؤثرتر شار فرودی



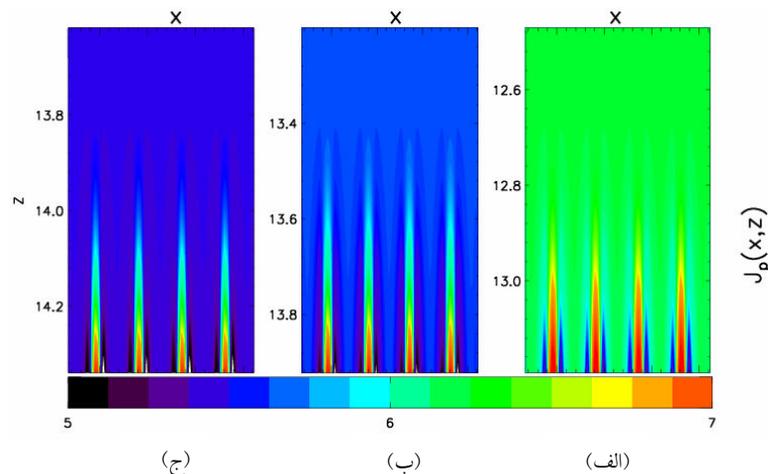
شکل ۴. تغییرات شار فرودی ذرات غبار روی سطح میکروساختار به ازای سه مقدار مختلف دمای الکترونی: (الف)  $3\text{ eV}$ ، (ب)  $2\text{ eV}$ ، و (ج)  $1\text{ eV}$ .

شکل ۶ تأثیر ارتفاع نانوتیوب‌ها را بر شار فرودی روی سطح آنها نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که با افزایش ارتفاع، شار بیشتری روی نانوتیوب‌ها نهشت می‌یابد. در واقع با افزایش ارتفاع نانوتیوب‌ها، چگالی بار سطحی نانوتیوب‌ها افزایش یافته و میدان الکتریکی ناشی از آنها قوی‌تر می‌شود. در نتیجه انحراف شار نانو ذرات توسط سطح نانوتیوب‌ها بهتر صورت می‌گیرد.

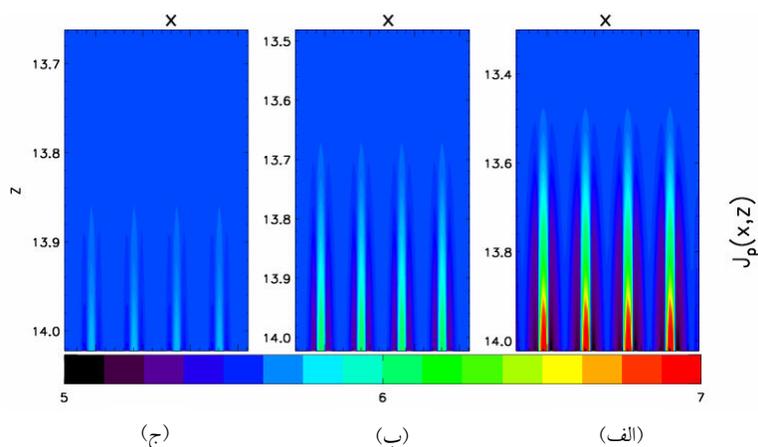
دوره تناوب آرایه نانوتیوب‌ها یکی دیگر از پارامترهای مؤثری است که روی توزیع شار میکروسکوپیکی نانو ذرات تأثیرگذار است.

ذرات و انحراف بیشتر آن‌ها به سمت نانوساختارها شده و در نتیجه شار نهشت یافته روی سطح نانوتیوب‌ها افزایش می‌یابد. نتایج فوق با نتایج عددی و تجربی گزارش شده در مرجع [۱۷] کاملاً هم‌خوانی دارد.

رشد نانوتیوب‌های کربنی عمودی تراز شده بر روی زیرلایه رسانا، علاوه بر پارامترهای پلاسما و نانوذرات که در بالا مورد بررسی قرار گرفت، به خصوصیات آرایه‌ای که نانوتیوب‌ها روی آن رشد داده می‌شوند نیز وابسته است. این ویژگی‌ها شامل ارتفاع و دوره تناوب در یک آرایه از پیش تعیین شده می‌باشند. در ادامه تأثیر این پارامترها را مورد مطالعه قرار می‌دهیم.



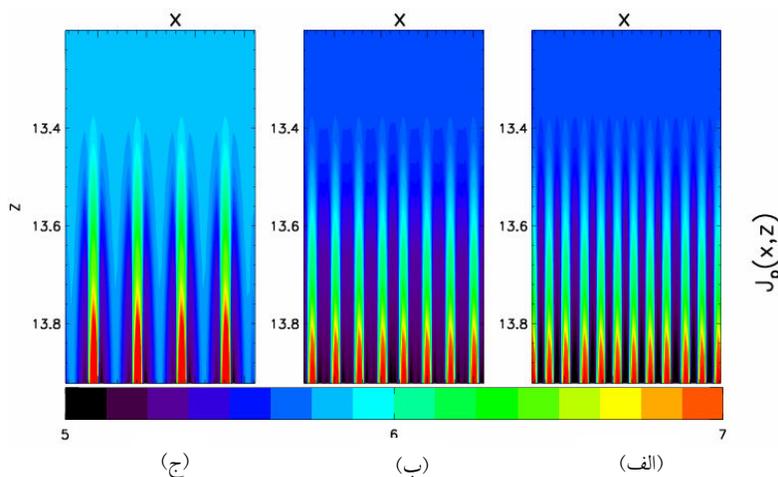
شکل ۵. پربند تغییرات شار فرودی ذرات پلاسما به ازای سه مقدار مختلف سرعت اولیه بهنجار شده نانو ذرات غبار در لبه غلاف: (الف)  $M_d = 5.5$ ، (ب)  $M_d = 5.0$  و (ج)  $M_d = 4.5$ .



شکل ۶. پربند شار ذرات روی سطح میکروساختار برای سه ارتفاع مختلف نانوتیوب‌ها: (الف)  $s = 4 \mu\text{m}$ ، (ب)  $s = 3 \mu\text{m}$  و (ج)  $s = 2 \mu\text{m}$ .

می‌آیند در حالی که این پتانسیل در مرجع [۱۵] از روابط تحلیلی تقریبی محاسبه می‌شود. دوم این که در این کار بار نانوذرات به صورت خودسازگار در معادله پواسون وارد می‌شود در حالی که در مرجع [۱۵] از نقش نانوذرات در تولید میدان الکتریکی غلاف صرف نظر می‌شود. در نهایت این که در کار حاضر اثر جمع آوری ذرات پلاسما به وسیله ذرات غبار، به عنوان یک جمله چاهک در معادلات پیوستگی یونها و الکترون‌ها وارد می‌شود، ولی در مرجع [۱۵] از این اثر نیز صرف نظر شده است. بنابراین مطالعه ارایه شده در این جا نسبت به مرجع [۱۵] دارای سازگاری بیشتری بوده به موقعیت فیزیکی آزمایشگاهی نزدیکتر است.

از شکل ۷ مشاهده می‌شود که با افزایش دوره تناوب (شکل ۷-ج)، هم‌پوشانی میدان ناشی از هر نانوتیوب کاهش یافته و گرادیان عرضی حاصل از هر یک از آنها افزایش می‌یابد، بنابراین توانایی هر نانوتیوب در متمرکز کردن شار ذرات بر روی سطح خود افزایش پیدا می‌کند، که این امر موجب تسریع در رشد نانوتیوب‌ها خواهد شد. نتایج یاد شده در بالا سازگاری کیفی خوبی با نتایج عددی مرجع [۱۵] دارد. اما نتایج ما از چندین جهت بر نتایج مرجع [۱۵] برتری دارد. نخست این که در این جا پتانسیل مربوط به غلاف الکتریکی چه در ناحیه یک‌بعدی و چه در ناحیه دوبعدی به صورت خودسازگار از حل عددی معادلات سیالی پلاسما به دست



شکل ۷. پربند تغییرات شار فرودی بر روی سطح نانوتیوب‌ها برای سه دوره تناوب مختلف: (الف)  $d = 50 \mu\text{m}$ ، (ب)  $d = 80 \mu\text{m}$  و (ج)  $d = 120 \mu\text{m}$ . ولتاژ زیرلایه  $-11\text{V}$  می باشد.

## نتیجه گیری

در این کار با استفاده از شبیه‌سازی سیالی خودسازگار دوبعدی، اثرات ناشی از تغییرات پارامترهای پلاسما، مشخصات نانوذرات، و خصوصیات هندسی میکرو طرح بر فرآیند نهشت پلاسمایی نانوتیوب‌ها مورد بررسی قرار گرفتند. ویژگی کار انجام یافته در مقایسه با سایر تحقیقات صورت گرفته در این زمینه، در نظر گرفتن اثر نانوذرات در ساختار غلاف، بررسی دینامیک حرکت یون‌ها و نانوذرات در حضور نیروهای مختلف حاکم بر تخلیه الکتریکی و بررسی فرآیند رشد با لحاظ کردن اثر یونیزاسیون و برخوردهای ذرات پلاسما با اتم‌های خنثی است. نتایج به دست آمده نشان می‌دهند که برای بهینه‌سازی فرآیند رشد نانوساختارها در یک محیط پلاسمایی باید از یک پلاسما با چگالی بالا و دمای پایین و نانوذرات غبار با سرعت فرودی بالا و همچنین هندسه میکرو طرح با دوره تناوب نسبتاً بزرگ استفاده نمود، تا شار فرودی مطلوب با انرژی برخوردی مناسب بر روی زیرلایه طرح‌دار حاصل شود. نکات حاصل از این مطالعه را می‌توان به صورت زیر جمع‌بندی کرد:

۱- مولفه افقی میدان الکتریکی، عمود بر سطح نانوتیوب‌ها، منجر به کانونی شدن شار نانوذرات بر روی میکرو طرح می‌شود، که این اثر منجر به تولید نانوساختارهای با نسبت نمود بالا می‌گردد.

۲- در پلاسمایی با چگالی الکترونی بالا، ذرات غبار بار الکتریکی بیشتری کسب می‌کنند. بنابراین چگالی‌های الکترونی بالا برای دستیابی به کانونی شدگی مؤثر و در نتیجه آهنگ رشد بالا بسیار مطلوب می‌باشند. از طرفی دیگر، افزایش دمای الکترونی باعث کاهش شار فرودی پلاسما و نانوذرات می‌شود. این اثرات دلیل انتخاب راکتورهای جفت شده القایی برای نانوساخت پلاسمایی است، چون این راکتورها پلاسماهایی با چگالی بالا، دمای پایین و غلاف‌هایی با ضخامت کم تولید می‌کنند که برای تولید نانوساختارها مناسب است.

۳- افزایش عدد ماخ و چگالی تعداد ذرات غبار موجب افزایش شار فرودی ذرات پلاسما و نانوذرات و در نتیجه

نهشت مؤثرتر بر روی میکرو طرح می‌شود. بنابراین برای رسیدن به آهنگ‌های رشد بالا باید این ذرات قبل از رسیدن به لبه غلاف توسط اختلاف پتانسیل مناسبی در توده اصلی پلاسما شتاب داده شوند که برای این کار می‌توان از اعمال یک میدان خارجی بین مرکز پلاسما و لبه غلاف استفاده کرد.

۴- با افزایش ارتفاع نانوتیوب‌ها، چگالی بار سطحی نانوتیوب‌ها افزایش یافته و شار بیشتری روی آن‌ها نهشت می‌کند.

۵- با افزایش دوره تناوب آرایه نانوتیوب‌ها، کانونی شدن شار ذرات توسط هر نانوتیوب بهتر صورت می‌گیرد و نانوتیوب‌هایی با نسبت نمود بالا تولید می‌شوند که برای کاربردهای نشر الکترونی در صفحات نمایشگر تخت از اهمیت بالایی برخوردار است.

لازم به تأکید است که نتایج به دست آمده در این کار کاملاً کلی بوده و قابل کاربرد برای گستره وسیعی از فرآیندهای نانوساخت پلاسمایی دمای پایین، فرآوری مواد و فرآیندهای اصلاح سطح می‌باشند. به عنوان پیشنهاد برای مطالعات آتی، می‌توان به جای شبیه‌سازی غلاف پلاسمایی به شبیه‌سازی کل تخلیه الکتریکی پرداخت که هم شامل غلاف پلاسمایی و هم توده اصلی پلاسماست. اگرچه این کار به توان محاسباتی زیادی نیاز دارد ولی نتایج به دست آمده از این روش بسیار بیشتر به نتایج واقعی آزمایشگاهی نزدیک خواهد بود. از طرفی دیگر، در یک مطالعه کاملاً خودسازگار باید فرآیندهای شیمیایی ذرات پلاسما و رادیکال‌های آزاد در محیط پلاسمایی و بر روی سطح در نظر گرفته شوند. این امر برای رسیدن به تخلیه الکتریکی به حالت پایدار از اهمیت بالایی برخوردار است و چگالی گونه‌های مختلف را در داخل پلاسما تعیین می‌کند که برای محاسبه شار فرودی بر روی میکرو طرح ضروری است.

منابع

1. A. Stacey, I. Aharonovich, S. Praver, and J. E. Butler, *Controlled synthesis of high quality micro/nano-diamonds by microwave plasma chemical vapor deposition*, Diamond Relat. Mater. 18, No.1(2009)51-55.
2. K. Ostrikov, S. Xu, S. Y. Huang, and I. Levchenko, *Nanoscale surface and interface engineering: Why plasma aided*, Surface and Coatings Technology, 202, No.22-23(2008)5314-5318.
3. S. Y. Huang, K. Ostrikov, and S. Xu, *Plasma-enabled growth of ultralong straight, helical, and branched silica photonic nanowires*, Journal of Applied Physics, 104, No.3 (2008)033301-1 – 033301-7.
4. K. Ostrikov, I. Levchenko, S. Xu, S. Y. Huang, Q. J. cheng, J. D. Long, and M. Xu, *Self-assembled low-dimensional nanomaterials via low-temperature plasma processing*, Thin Solid Films, 516, No.16 (2008)6609-6615.
5. A. A. El Mel, E. Gautron, C. H. Choi, B. Angleraud, A. Granier and P. Y. Tessier, *Titanium carbide/carbon composite nanofibers prepared by plasma process*, Nanotechnology, 21, No.43(2010)435603.
6. J. Zheng, R. Yang, L. Xie, J. Qu, Y. Liu and X. Li, *plasma assisted approaches in inorganic nanostructure fabrication*, Advanced Materials, 22, No.13(2010)1451.
7. X. Liwei, W. Jianhua, M. Weidong, W. Jun, and L. Changlin, *Preparation of nano-crystalline diamond films on poly-crystalline diamond thick films by microwave plasma enhanced chemical vapor deposition*, Plasma Science and Technology, 12, No.3(2010)310.
8. K. Ostrikov, *Surface science of plasma exposed surfaces: A challenge for applied plasma science*, Vacuum, 83, No.1(2009)4-10.
9. I. Levchenko, and K. Ostrikov, *Plasma/ion-controlled metal saturation: Enabling simultaneous growth of carbon nanotube/nanocone arrays*, Applied Physics Letters, 92, No.6(2008)063108-1–063108-3.
10. I. Levchenko, K. Ostrikov, D. Mariotti, and A. B. Murphy, *Plasma-controlled metal catalyst saturation and the initial stage of carbon nanostructure array growth*, Journal of Applied Physics, 104, No.7(2008)073308-1 – 073308-8.
11. M. Wolter, I. levchenko, H. Kersten, and K. ostrikov, *hydrogen in plasma nanofabrication: selective control of nanostructure heating and passivation*, Applied Physics Letters, 96, No.13(2010)133105.
12. T. Mizutan, H. Ohnaka, Y. Okigawa, S. kishimoto, and Y. Ohno, *a study of preferential growth of carbon nanotubes with semiconducting behavior growth by plasma enhanced chemical vapor deposition*, Journal of Applied Physics, 105, No.7(2009)073705.
13. M. Mao, and A. Bogaerts, *Investigation the plasma chemistry for the synthesis of carbon nanotubes in inductively coupled plasma enhanced CVD systems: the effect of different gas mixtures*, Journal of Physics D: Applied Physics, 43, No.20(2010)205201.
14. S. Vizireanu, S. D. Stoica, C. Luculescu, L. C. Nistor, B. Mitu, and G. Dinescu, *Plasma techniques for nanostructured carbon materials synthesis. A case study: Carbon nanowall growth by low pressure expanding RF plasma*, Plasma Sources Science and Technology, 19, No.3 (2010)034016.
15. P. P. Rutkevych, K. Ostrikov, and S. Xu; *Two-dimensional simulation of nanoparticle deposition from high-density plasmas on micro structured surface*; Physics of Plasma, 14, No. 4(2007)043502-1 – 043502-9.
16. E. Tam, I. Levchenko, K. Ostrikov, M. Keidar, and S. Xru; *Ion-assisted functional monolayer coating of nanorod arrays in hydrogen plasmas*; Physics of Plasmas, 14, No. 3 (2007)033503-1 – 033503-9.
17. K. Ostrikov and S. Xu, *Plasma Nanoscience: From Basic Concepts and Applications of Deterministic Nanofabrication*, Wiley, Weinheim, (2008).
18. G. Foroutan, H. Mehdipour, and H. zahed, *Simulation study of the magnetized sheath of a dusty plasma*, Physics of Plasmas, 16, No.1 (2009) 103703.
19. H. Mehdipour, and G. Foroutan, *The magnetized sheath of a dusty plasma with nanosize dust grains*, Physics of Plasmas, 17, No.8 (2010) 083704-1 – 083704-11.
20. J. D. Anderson, Jr. *Computational Fluid Dynamics*, McGrew-Hill (1995) 226-229.

21. P. P. Rutkevych Levchenko, K. Ostrikov, S. Xu, and S. V. Vladimirov, *Thermophoretic control of building units in the plasma-assisted deposition of nanostructured carbon films*, Journal of Applied Physics, 96 No.8 (2004) 4421 – 4428.
22. I. Levchenko, K. Ostrikov, J. D. Long, and S. Xu, *Plasma assisted self-sharpening of platelet-structured single-crystalline carbon nanocones*, Applied Physics Letters, 91, No.11 (2007) 113115-1–113115-3.
23. S. Xu, K. Ostrikov, J. D. Long, and S. Y. Huang, *Integrated plasma-aided nanofabrication facility: Operation, parameters, and assembly of quantum structures and functional nanomaterials*, Vacuum, 80, No.6 (2006) 621-630.
24. K. Ostrikov, and A. B. Murphy, *plasma-aided nanofabrication: Where is the cutting edge?*, Journal of Physics D: Applied Physics, 40 No.8 (2007) 2223-2241.