# تاثیرات شکل زیر لایه بر روی مدلهای آماری رشد سطح

**سکینه حسین آبادی[۱]، محمد علی رجب پور[۲]، محمد صادق موحد[۳]، سید مهدی واعظ علایی[۴]، امیر علی مسعودی[۵]**

**چکیده**: نانو ذرات دی اکسید تیتانیوم به روش سل- ژل (محلولی- ژله ای) و در فازهای آناتاز و روتایل آماده شده و سپس در درون یک سامانه تخلیه قوس الکتریکی حاوی نیتروژن قرار گرفتند. نمونه‌های زیادی که با تغییر فشار گاز نیتروژن درون سامانه، شدت جریان و نوع الکترود تخلیه قوسی تهیه گردید، با استفاده از طیف سنجی پس‌پراکندگی میکرو رامان، پراش اشعه X و میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) بررسی شده و آلایش نیتروژن در درون ساختار ماده عامل جابجایی مدهای حساس به رامان شناخته شده‌اند.

**واژه های کلیدی:** پراش اشعه ایکس، دی اکسید تیتانیم، طیف سنجی رامان، فوتوکاتالیست، میکروسکوپ الکترونی روبشی

## ۱. مقدمه

فرآیندهای رشد سطح، بخصوص انباشت لایه‌های نازک از دیدگاه‌های بسیار متنوعی در فیزیک سامانه های پیچیده و آماری مورد بررسی قرار گرفته‌اند. اخیرا مطالعه فرآیندهای رشد و سطوح ناهموار ناشی از این فرآیندها از دیدگاه فراکتالی و آنالیز مقیاس بندی توجه بسیاری از محققین را به خود جلب کرده است[۱-۷] در واقع بسیاری از سطوح ناهموار ناشی از فرایندهای رشد غیر تعادلی را می‌توان فراکتال‌های خودمتشابه دانست که این خودمتشابهی هم در مقیاس‌های زمانی و هم در مقیاس‌های فضایی وجود دارد. دیدگاه مقیاس‌بندی سطوح خودمتشابه اولین بار توسط Family و Vicsek مطرح شد و سپس ابزاری مفید برای تحلیل ناهمواری های خود متشابه گردید[۴-۱۱] .

تاکنون معادلات آماری متعددی برای توصیف پدیده رشد سطوح ناهموار ارائه شده است که از جمله معروف ترین این معادلات، معادله ادوارد ویلکینسون (EW)[۲] است که رشد سطح ناهموار را ناشی از انباشت تصادفی ذرات و کشش سطحی بین ذرات و سطح[۳] می داند و معادله زیر را ارایه می‌کند [۴-۶]:

$$\frac{\partial h(\vec{r},t)}{\partial t} = \nu\nabla^2 h(\vec{r},t) + \eta(\vec{r},t) \qquad (۱)$$

$h = h(\vec{r},t)$ ارتفاع سطح در مکان $\vec{r}$ و در زمان $t$، $\nu$ بیانگر کشش سطحی و $\eta$ نوفه گاوسی با میانگین صفر است. در حال حاضر معادله KPZ که به صورت زیر نوشته می‌شود، مهمترین معادله آماری در زمینه مطالعه رشد سطوح است[۵]:

$$\frac{\partial h(\vec{r},t)}{\partial t} = \nu\nabla^2 h(\vec{r},t) + \frac{\lambda}{2}(\nabla h(\vec{r},t))^2 + \eta(\vec{r},t) \qquad (۲)$$

---

۱) ۱-(مربی)، دانشکده علوم دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران شرق hosseinabadi.s@gmail.com ۲- (استادیار)، دانشکده فیزیک نظری INFN دانشگاه تورینو ایتالیا ۳- (استادیار)، دانشکده فیزیک دانشگاه شهید بهشتی تهران ۴- (استادیار)، دانشکده فیزیک دانشگاه تهران ۵- (دانشیار)، گروه فیزیک دانشکده علوم، دانشگاه الزهرا تهران

[2]. Edward-Wilkinson
[3]. RDSR

که رشد عرضی را به معادله EW افزوده است.
در این معادله، $\lambda$ پارامتر جفت شدگی و تعیین کننده سرعت رشد عرضی سطح است. در حالت کلی زبری سطحی با طول $L$ و بُعد فضایی $d$ را به صورت زیر بیان می‌کنیم [۵]:

$$W(L^d,t)=\left[\frac{1}{L^d}\sum_{\vec{r}}\left[h(\vec{r},t)-\bar{h}(t)\right]^2\right]^{1/2} \quad (۳)$$

که در آن $\bar{h}(t)$ میانگین ارتفاع روی سطحی به طول $L$ در زمان $t$ است. رابطه مقیاس بندی سطح برای زمان های کوتاه و برای $d=1$، بصورت $W(L,t)\approx t^{\beta}$ است که $\beta$ نمای رشد نامیده می‌شود. برای زمان های طولانی، حالتی پایا حاصل می‌شود و ناهمواری اشباع می‌شود $W_{sat}(L,t)\approx L^{\alpha}$، که $\alpha$ نمای زبری است. استفاده از معادلات آماری در فهم پدیده رشد، منجر به فعالیت های متعددی در زمینه های آنالیز عددی، تئوری و شبیه سازی رشد شبکه‌ای شده است. در بعد فضایی $d=1$، می توان نماهای مقیاس بندی را بطور دقیق محاسبه و تعیین کرد. اما در ابعاد بالاتر، تعیین این نماهای مقیاس‌بندی از طریق روش‌های عددی حاصل می شود.

مدل های شبکه‌ای گسسته متعددی برای رشد سطوح ناهموار ارایه شده اند که می توان آنها را با این معادلات توصیف کرد. از جمله این مدل ها عبارتند از: انباشت تصادفی با کشش سطحی (RDSR) که در کلاس جهانی معادله (EW) قرار می‌گیرد یا مدل رشد پرتابی، جامد روی جامد (SOS)، جامد روی جامد محدود شده (RSOS)، تک پله‌ای، مدل ادن و ... که در کلاس جهانی معادله KPZ می گنجند [۴-۹].

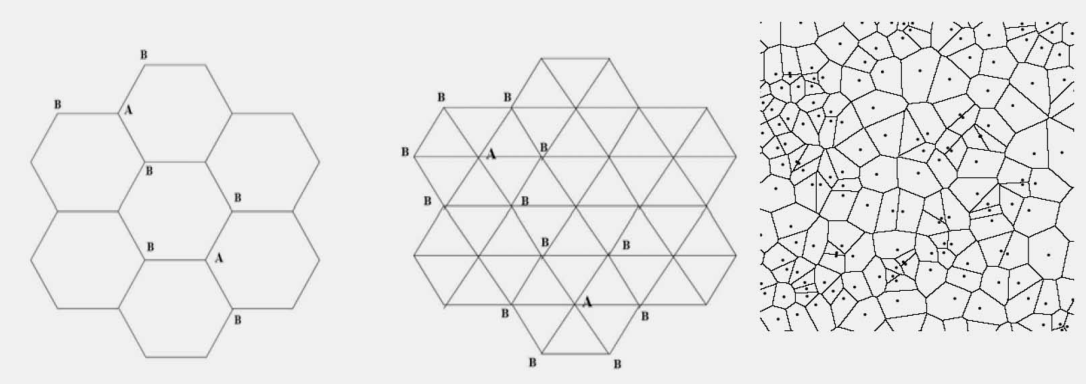
تاکنون مدل های شبکه ای فوق بر روی ساده ترین زیرلایه‌ها، یعنی زیر لایه با سلول شبکه ای مربعی شبیه سازی شده اند و خواص آماری و کلاس جهانی آنها مورد بررسی قرار گرفته است. در این مقاله، این مدلهای شبکه ای را بر روی زیرلایه‌های منظم مربعی، مثلثی[۴]، لانه زنبوری[۵] و زیرلایه های نا منظم به شکل شبکه ووررونو[۶] (شکل ۱) رشد داده و تاثیر شکل زیر لایه را بر روی نماهای مقیاس بندی این مدلها یا کلاس جهانی آنها مورد بررسی قرار داده ایم.

## ۲. شبکه نامنظم Voronoi

شبکه یا بافت Voronoi نوعی شبکه متشکل از چند ضلعی های تصادفی است که سطح را پوشش می دهند. این نوع شبکه ها و بافتها را می توان در موارد متعددی مشاهده نمود؛ به عنوان مثال ترکهای ایجاد شده در یک زمین رسی کویری، مرز میان شهرها و ایالتها، بافتهای سلولی روی پوست بدن نمونه هایی از این بافتها هستند. همچنین این شبکه ها کاربردهای بسیار متنوعی دارند که از جمله این کاربردها در زمینه گرافیک رایانه ای، تحلیل تصاویر، تئوری بازیهای رایانه ای، مدلسازی ساختار اتمی و حل مسائل سیگنال های بی سیم می‌باشد[۱۱-۱۴].

برای تولید این شبکه ها، مجموعه ای از نقاط با تابع توزیعی خاص بر روی رویه ای ( در اینجا سطحی تخت و دو بعدی ) قرار می گیرند، سپس نزدیکترین نقاط همسایه به یکدیگر متصل می شوند. اگر عمود منصف های این اضلاع رسم شوند، همدیگر را در نقاط یا رئوس شبکه Voronoi قطع می کنند و تشکیل چند ضلعی هایی را می دهند که چندضلعی های Voronoi نامیده می شوند[۱۲].

[4] Hexagonal
[5] Honeycomb
[6] Voronoi



**شکل ۱. (به ترتیب از چپ به راست): شبکه های منظم ( لانه زنبوری، مثلثی) و شبکه نامنظم و تصادفی Voronoi**

## ۳. شبیه سازی مدل رشد جامد روی جامد محدود شده (RSOS)

در میان مدلهای گسسته رشد سطح متعلق به کلاس جهانی KPZ، مدل RSOS رشد یافته روی زیر لایه مربعی در دو بعد، کمترین انحراف نماهای مقیاس بندی را نسبت به معادله KPZ دارد. بنابراین برای بررسی تاثیرات شکل زیر لایه این مدل مناسبترین مدل می باشد. قوانین رشد مدل RSOS در حالت کلی به صورت زیر است:

- مکانی بنام مکان $\vec{r}$ با مختصات $(n_x, n_y)$ بر روی سطح با مساحت $L^2$ بطور تصادفی انتخاب می شود. حال اگر اختلاف ارتفاع میان این مکان با همسایگان مجاورش کوچک تر یا مساوی یک باشد، ارتفاع مکان مورد نظر افزایش می‌یابد.

- در غیر اینصورت هیچ عملی انجام نمی‌شود.

حال با این قواعد رشد، مدل RSOS را در دو بُعد بر روی زیرلایه های منظم مختلف با اندازه $L \times L$ ( $L$ تعداد سلولها ( مربعی، مثلثی و لانه زنبوری) در یک راستا می باشد) و زیر لایه زنبوری) در یک راستا می باشد) و زیر لایه نامنظم Voronoi شبیه‌سازی کرده ایم. بازه زمانی $\Delta t$ در این شبیه‌سازی معادل تعداد ذرات لازم برای پر کردن سطح بطور میانگین در نظر گرفته شده است و شرایط مرزی دوره‌ای ضمن نشست ذرات اعمال گردیده است. در هر زیرلایه ذرات روی رئوس شبکه می‌نشینند؛ تعداد نزدیکترین همسایگان، در زیرلایه مربعی به ازای هر ذره پس از انباشت، ۴ تا، در زیرلایه لانه زنبوری، ۳ تا (هر مکان A دارای ۳ تا نزدیکترین همسایه B است) و در مورد شبکه مثلثی ۶ تا (هر مکان A دارای تا نزدیکترین همسایه B است) می باشد (شکل ۱).

نمودار لگاریتمی زبری $W(t)$ بر حسب زمان برای زیرلایه‌های مختلف در شکل (۲- الف) نشان داده شده است. همان گونه که در شکل مشخص است شیب این نمودار که معرف نمای مقیاس بندی رشد $\beta$ است برای هر سه زیرلایه یکسان بوده ($\beta = 0.24 \pm 0.01$) ولی زبری سطح با افزایش تعداد نزدیکترین همسایگان کاهش می‌یابد. برای بررسی حالت تعادل و پایای این مدل رشد، لازم است تا نمای زبری $\alpha$ را در زمان های طولانی انباشت، تعیین کنیم. این نما از طریق محاسبه تابع ساختار $S(l)$ در فاصله جدایی کوچک ($l = |\vec{r} - \vec{r}'|$ ) تعیین می شود که در مورد سطوح همگن و همسانگرد داریم [۵]:

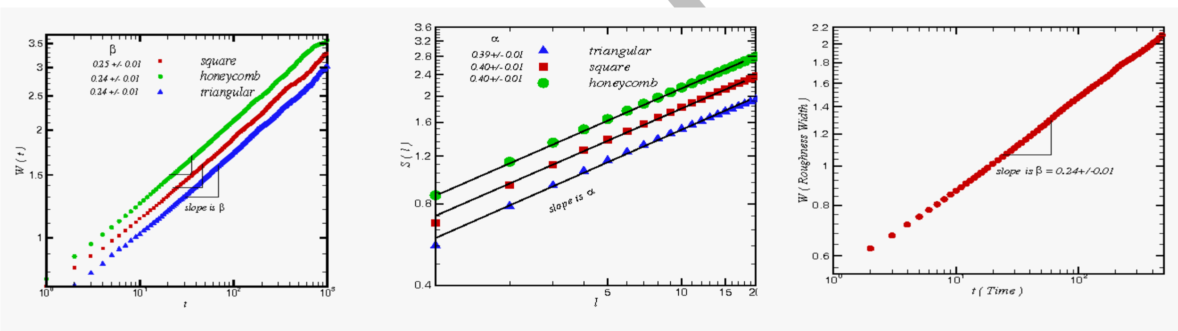
$$S(l) = <[h(\vec{r}) - h(\vec{r}')]^2>^{1/2} \approx l^{2\alpha}$$

شکل (۲- ب) منحنی لگاریتمی تابع ساختار $S(l)$ را بر حسب $l$ نشان می دهد. همان گونه که در شکل نیز مشخص است، شیب ($\alpha$) هر سه منحنی با یکدیگر مساوی و برابر با $0.40 \pm 0.01$ است.

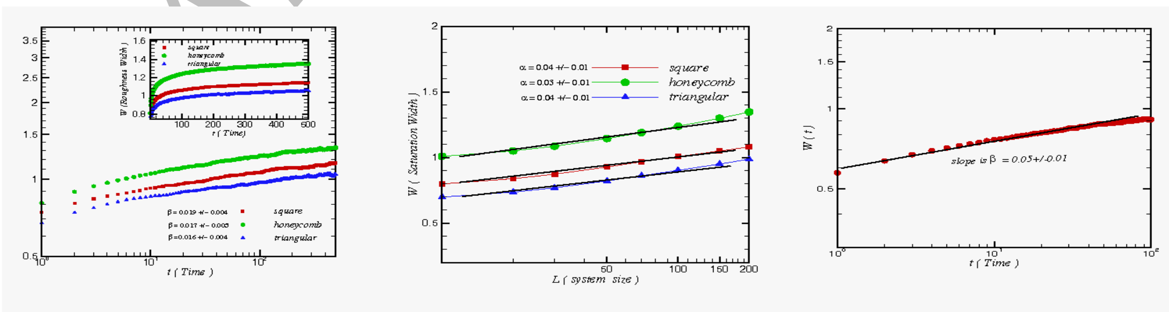
با توجه به یکسان بودن مقادیر نمای رشد $\beta$ و نمای زبری $\alpha$ برای مدل RSOS بر روی زیرلایه های منظم متفاوت، می توان گفت که جهانی بودن این مدل و تعلق آن به کلاس جهانی KPZ مستقل از نوع شبکه زیرلایه منظم است. حال این مدل را بر روی زیر لایه نامنظم Voronoi با ۵۰۰۰ نقطه تصادفی (معادل با ۵۰۰۰ سلول یا چند ضلعی و ۹۹۸۱ راس) شبیه‌سازی می کنیم. نمودار لگاریتمی زبری $W(t)$ بر حسب زمان به صورت شکل (۲- ج) می باشد. شیب این نمودار معرف نمای مقیاس بندی رشد $\beta = 0.24 \pm 0.01$ است. این مقدار با مقدار نمای رشد این مدل بر روی شبکه های منظم برابراست.

## ۴- شبیه سازی مدل انباشت تصادفی با کشش سطحی( RDSR)

در این مدل ذره یک مکان را بطور تصادفی برای انباشت انتخاب می کند. سپس اگر ارتفاع نزدیکترین همسایگان مجاورش از ارتفاع مکان انتخاب شده کمتر باشد، ذره یکی از این مکانها را تصادفی انتخاب کرده و روی سطح حرکت کرده یا پخش می شود. برای جزئیات بیشتر این مدل به مرجع [ ۵] رجوع شود. رشد این مدل بر روی زیر لایه مربعی در دو بعد دارای نمای مقیاس بندی رشد $\alpha = \beta \approx 0$ است. این مدل را بر روی زیرلایه های منظم و نامنظم شبیه‌سازی نمودیم و دریافتیم این نماهای مقیاس‌بندی، مستقل از شکل زیرلایه است (شکل ۳).




**شکل ۲: مدل رشد RSOS : الف: منحنی لگاریتمی ناهمواری بر حسب زمان، ب: منحنی لگاریتمی تابع ساختار بر حسب فاصله جدایی، ج: منحنی لگاریتمی ناهمواری بر حسب زمان برای شبکه نامنظم (خطوط پر نماینده برازش توانی هستند) .**




**شکل ۳: مدل رشد (RDSR) : الف: منحنی لگاریتمی ناهمواری بر حسب زمان، ب: منحنی لگاریتمی تابع ساختار بر حسب فاصله جدایی، ج: منحنی لگاریتمی ناهمواری بر حسب زمان برای شبکه نامنظم (خطوط پر نماینده برازش لگاریتمی هستند) .**

## ۵. نتیجه گیری

دراین مقاله پس از شبیه‌سازی مدلهای رشد RSOS و RDSR (که به ترتیب متعلق به کلاس های جهانی KPZ وEW هستند) بر روی زیرلایه های منظم مربعی، مثلثی و لانه زنبوری و نامنظم به صورت شبکه Voronoi، دریافتیم که تغییر شکل زیرلایه، کلاس جهانی (نماهای رشد و زبری) مدل رشد را تغییر نمی‌دهد و تاثیر آن فقط بر روی عرض ناهمواری مدل مورد نظر است.

## مراجع


[1] Chein Chih-Chun, Pang Ning-Ning, *Phys. Rev. E* 70, 2004, pp. 021602.

[2] Reis F. D. A. Aarao, *Phys. Rev. E* 69, 2004, pp. 021610.

[3] Reis F. D. A. Aarao, *Physica A* 316, 2002, pp. 250-258.

[4] Family F, *J. Phys. A* 19 (1996) L441.

[5] Barabasi A. L, Stanly H. E, *Fractal Consepts in Surface Growth*, Cambridge Universty press, 1995.

[6] Duke Charles B and Plummer E. Ward, *Frontiers in Surface and Interface Science*, Elsevier, 2002.

[7] Horowitz M and Albano E. V, *Eur. Phys. J. B* 31, 2003, pp. 563-569.

[8] Feders J, *Fractals*, Plenum Press, New York, 1988.

[9] Halpin-Healy T and Zhang Y.-C, *Phys. Rep.* 244, 1995, pp. 215

[10] Yup Kim, S. Y. Yoon and Hyunggyu Park, *Phys. Rev E* 66, 2002, pp. 40602.

[11] Kolakowska A, Novotny M. A and Verma P. S, *Phys. Rev. E* 73, 2006, pp. 011603. Becker, Ziy M, *rXiv*: 0906.4360, Vol. 3, 2009.

[12] Dyer Ramsay, Zhang Hao, Eurographics Symposium on Geometry Processing, 2007.

[13] Krishna K, Thathachar M. A. L, *IEEE NETWORKS* 11, No. 6, 2000