

شبیه سازی دینامیک مولکولی تشکیل لایه نازک فلزی در روش باریکه نانو خوشه یونیده ICB

کاوس میرعباس زاده^۱، پیمان نایی^۲، شهریار سرآمد^۱، اسماعیل زمین پیمان^۱

^۱دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تقاطع خیابان حافظ سمیه، تهران

^۲گروه فیزیک دانشکده فنی مهندسی دانشگاه آزاد واحد ساوه، ساوه

چکیده:

در این مقاله به کمک شبیه سازی دینامیک مولکولی MD شاخصه های برخورد یک نانو خوشه نیکل با اندازه ها و انرژی های مختلف که در روش لایه نشانی باریکه نانو خوشه های یونیده ICB استفاده می شود، مورد بررسی قرار گرفت. انرژی خوشه ها $1-20 \text{ eV/atom}$ و تعداد اتمهای خوشه ها، ۱۴، ۴۷، ۱۸، ۵۵، ۸۷ و ۱۷۷ انتخاب شدند. در این تحقیق وابستگی سایز خوشه به حداکثر دمای زیر لایه در لحظه برخورد نانو خوشه به سطح و زمان رسیدن به دما مورد بررسی قرار گرفت. همچنین وابستگی سایز و انرژی خوشه ها به تعداد اتمهای جابجا شده در زیر لایه، اتمهای پراکنش شده و اتمهای نفوذ یافته در زیر لایه بررسی شد. هر یک از این پارامترها نقش کلیدی در نوع لایه بوجود آمده دارند.

Molecular Dynamic Simulation Thin Film Formation in ICB

K.Mirabbaszadeh¹; P.Nayebi²; Sh.Saramad¹; E.Zaminpeyma¹

¹ Physics Department, AmirKabir university of Technology, Iran

² Physics Department, Islamic Azad University, Saveh branch, Saveh

Abstract

On the atomic scale, Molecular Dynamic (MD) Simulations of the impact of a single cluster onto the surface have been carried out. The impact of a Ni Nanocluster on a Ni (100) substrate was studied for impact energies of 1-20 eV/atom. We investigated the cluster size dependence of the maximum substrate temperature T_{max} and of the time t_{max} within which this temperature is reached. Time, cluster size and cluster energy dependence of the number of disordered atoms in the substrate was observed. We also investigated the energy and cluster size dependence of the number of the substrate sputtering and implantation atoms.

لایه های نازک فلزی، عایق و نیمه رسانا دارد که در صنایع قطعات میکروالکترونیک، اپتیک، اپتوالکترونیک و مواد مغناطیسی مورد استفاده قرار می گیرد. (۳)

استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی (MD) یکی از گزینه های مناسب برای بررسی تشکیل لایه و مطالعه برخورد یک خوشه اتمی به سطح می باشد. (۴-۵)

۲. روش شبیه سازی

به کمک مکانیک کوانتومی شبیه سازی سیستمی متشکل از چند صد اتم متصور است. اما می توان به جای حل معادله شرودینگر از یک تقریب برهم کنش کلاسیکی بین اتمها استفاده کرده و معادله نیوتن را حل نمود. (۶)

۱. مقدمه

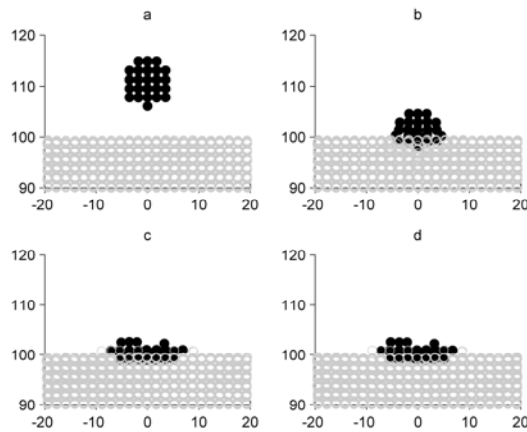
روشهای زیادی برای تولید لایه نازک از انباشت اتمها و مولکولها روی یک سطح وجود دارند. در تکنیک های متداول سطح زیر لایه تا چند صد کلونین بالاتر از دمای اتاق گرم می شود اما می توان بجای گرم کردن زیر لایه از روشهای دیگری برای بالا بردن انرژی اتمها استفاده کرد. در روش لایه نشانی باریکه نانو خوشه های یونیده (ICBD)، خوشه های اتمی تولید شده در یک نازل، یونیزه شده و سپس با اعمال ولتاژ بالا در حدود چند کیلو ولت، به سمت زیر لایه شتاب داده می شوند. (۱)

لایه های تولیدی با این روش دارای کیفیت بالاتر در دمای زیر لایه کمتر می باشند. (۲) این تکنیک کاربردهای زیادی در ساخت

استفاده شد. فاصله خوشه ها از سطح برای تمام حالت ها 4 \AA ، دمای زیر لایه 70 K ، زمان مورد نظر برای شبیه سازی 6 ps با زمان هر step برابر 0.001 ps انتخاب شد. همچنین برای آماده سازی سیستم 50000 پیکو ثانیه برنامه اجرا شده و سپس کد اصلی اجرا شد.

۳. انجام شبیه سازی

برهم کنش خوشه نیکل با 47 اتم و انرژی های 5 eV/atom با زیر لایه نیکل (100) بر حسب زمان در شکل (۲) نشان داده شده است.



شکل ۲: برهم کنش خوشه نیکل با 47 اتم و انرژی های 5 eV/atom با زیر لایه نیکل (100) بر حسب زمان در زمانهای 0.25 ، 3 و 6 پیکوثانیه

تصاویر برخورد اتمهای خوشه به سطح نشان می دهد که با شروع برخورد اتمهای خوشه سطح را مورد فشار قرار می دهد و در نتیجه ساختار کریستالی لایه در نزدیکی سطح و خوشه بهم می خورد. با گذشت زمان اتمهای خوشه شکسته شده و به عمق لایه نفوذ می کند. شکل (۳) تعداد اتمهای نفوذ یافته خوشه با انرژی 5 eV/atom در زیر لایه را نشان می دهد. با افزایش سایز خوشه ها تعداد اتمهای نفوذی نیز به صورت خطی افزایش می یابد.

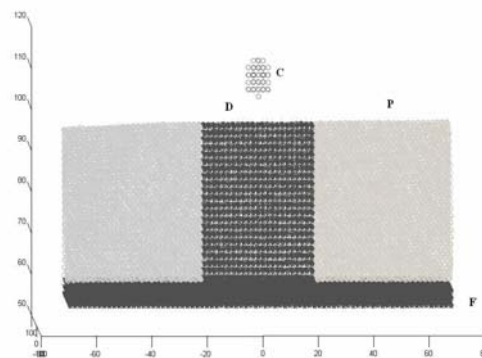
برای شبیه سازی دینامیک مولکولی MD از کد LAMMPS استفاده شد. این کد توسط آزمایشگاه ملی SANDIA نوشته شده است. در کد LAMMPS از الگوریتم ولت (Verlet) برای حل معادله حرکت نیوتن استفاده می شود.

در این مقاله از شبیه سازی MD در سه بعد و از پتانسیل روش کاشت اتمی (EAM) برای بررسی برهم کنش نانو خوشه های نیکل که به سطح نیکل (100) برخورد می کند، استفاده شد. از این پتانسیل قبلا برای فلزاتی مانند طلا، مس، نقره و پلاتین استفاده شده است. (۷) در این پتانسیل انرژی کل اتم i به صورت زیر می باشد.

$$E_i = F_\alpha \left(\sum_{j \neq i} \rho_\alpha(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{\alpha\beta}(r_{ij}) \quad (1)$$

که در آن F انرژی کاشت (embedding) و تابعی از چگالی الکترون ρ می باشد. Φ پتانسیل برهم کنش، α و β انواع اتمهای I و J می باشد.

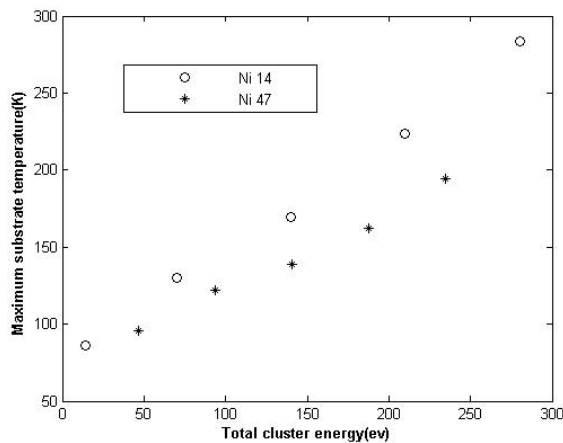
در این کار فرض بر اینستکه در اثر برخورد یک نانو خوشه، تنها محدوده کوچکی از سطح تحت تاثیر قرار می گیرد که به آن ناحیه برخورد گفته می شود (D). دیواره ای که در همسایگی آن قرار دارد قسمت کریستالی نامگذاری کرده ایم. (P) این دو قسمت لایه ای از سطح را تشکیل می دهند که تحت تاثیر برخورد می باشد و قسمت های زیرین را ناحیه ثابت فرض کرده ایم (F). شکل (۱) نواحی مختلف مدل را نشان می دهد.



شکل ۱: نواحی مختلف مدل ارایه شده

به منظور بررسی برخورد، از خوشه های اتمی نیکل با ساختار شبکه ای fcc با اندازه های 14 ، 18 ، 47 ، 55 ، 87 و 177 اتمی

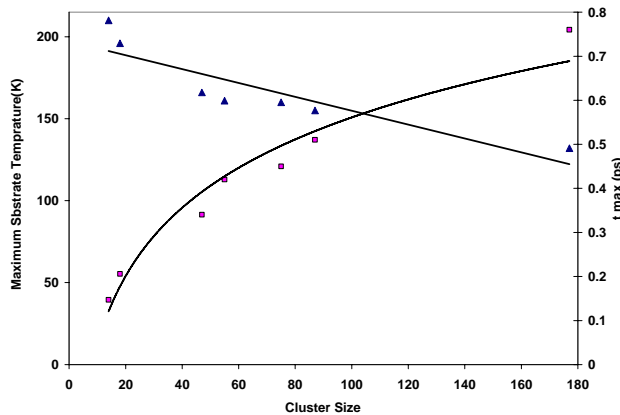
افزایش می یابد اما میزان این انرژی برای خوشه های ۱۴ تا ۴۷ بیشتر از ۴۷ تا ۱۴ می باشد.



شکل ۵: ماکزیمم دمای زیر لایه را به صورت تابعی از انرژی کل خوشه

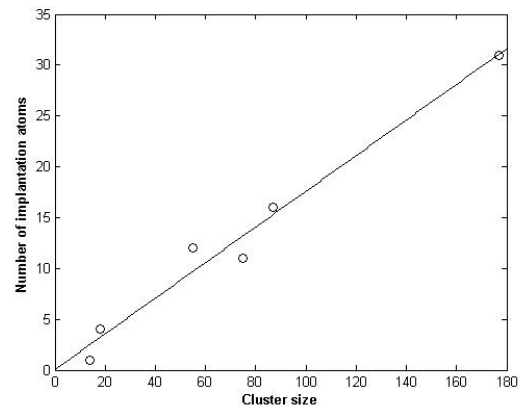
شکل (۶) ماکزیمم دمای زیر لایه و زمان رسیدن به این دما (tmax) در انرژی کل ۱۹۵eV را نشان می دهد. با افزایش سایز خوشه ، انرژی در واحد اتم و سرعت خوشه کاهش می یابد. مشخص شده که اندازه حرکت خوشه متناسب با جذر تعداد

اتمهای خوشه \sqrt{n} می باشد.



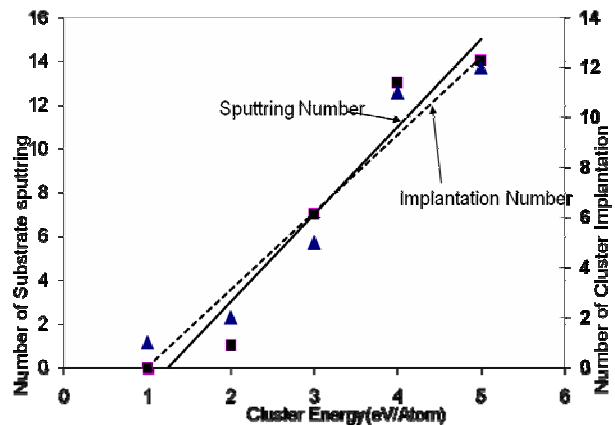
شکل ۶: وابستگی ماکزیمم دمای زیر لایه و زمان رسیدن به این دما به سایز خوشه در انرژی کل ۱۹۵eV

چون سرعت خوشه کاهش می یابد زمان برخورد tmax افزایش می یابد. وابستگی tmax به n در شکل (۶) را می توان به صورت رابطه زیر بیان کرد:



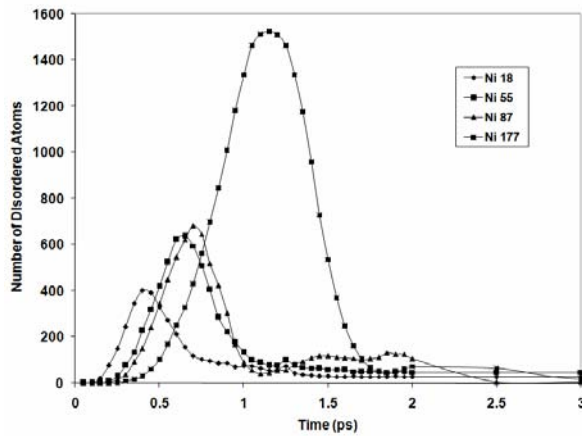
شکل ۳: تعداد اتمهای نفوذ یافته خوشه با انرژی ۵eV/atom در زیر لایه

همچنین در شکل (۴) تعداد اتمهای نفوذ کرده خوشه ۴۷ تا ۱۴ به زیر لایه (Implantation) و تعداد اتمهایی پراکنش شده (Sputtering) از اتمهای زیرلایه را برحسب انرژی های مختلف هر اتم نشان می دهد. با افزایش انرژی، تعداد این اتمها افزایش می یابد.



شکل (۴) تعداد اتمهای نفوذ کرده خوشه ۴۷ تا ۱۴ به زیر لایه و تعداد اتمهای پراکنش شده از اتمهای زیرلایه را برحسب انرژی های ۱، ۲، ۳، ۴، ۵ eV

برخورد خوشه ها با سطح را می توان از جنبه دیگری مورد بررسی قرار داد. در شکل (۵) ماکزیمم دمای زیر لایه (Tmax) را به صورت تابعی از انرژی کل خوشه برای دو خوشه ۱۴ و ۴۷ تا ۱۴ نشان داده شده است. با افزایش انرژی کل، Tmax



شکل ۸: وابستگی تعداد اتمهای جابجا شده در زیر لایه Ndis را به سایز خوشه و زمان برای انرژی کل ۱۹۵ eV

۴. خلاصه و نتیجه گیری:

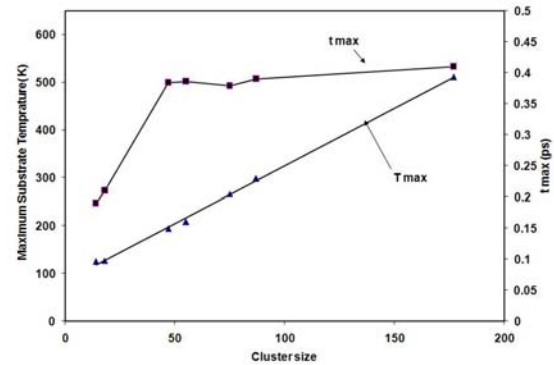
در این پروژه، برهم کنش خوشه های نیکل با زیر لایه نیکل به کمک شبیه سازی دینامیک مولکولی بررسی شد. بدین منظور خوشه هایی با انرژی و سایز مختلف در نظر گرفته شد. نتایج شبیه سازی وابستگی پدیده های رخ داده در تشکیل لایه مانند پراکنش، نفوذ و جابجایی اتمها را به سایز و انرژی خوشه ها نشان می دهد. همچنین مشخص شد که برای بدست آمدن یک لایه اپی تکسی، بهتر است در انرژی کل ثابت، تعداد اتمهای خوشه زیاد باشد.

مراجع

- [1] H. Haberland, J. Vac. Sci. and Technol. 1994, A12, 2925
- [2] P.M. Echenique, J.R. Manson, Phys. Rev. Lett. 1990, 64, 1413
- [3] I. Yamada and G.H. Takaoka, Jpn. J. Appl. Phys. 1993, 32, 2121.
- [4] R. Smith, C. Nock, S. Kenny, J.J. Belbruno, M. Di Vece, S. Palomba, R.E. Palmer, Phys. Rev. B, 2006, 73, 125429.
- [5] K. Meinander, K. Nordlund, J. Keinonen, Nucl. Instrum. Meth. B, 2006, 242, 161.
- [6] H. Haberland et al., J. Vac. Sci. and Technol. A, 1994, 12, 2925.
- [7] Daw, Baskes, Phys Rev Lett, 50, 1285 (1983). Daw, Baskes, Phys Rev B, 1984, 29, 6443.

$$t_{\max} = 0.2254 \log(n) - 0.4721 \quad (2)$$

شکل (۷) ماکزیمم دمای زیر لایه Tmax و زمان رسیدن به این دما tmax را بصورت تابعی از سایز خوشه در انرژی ۵eV/atom را نشان می دهند.



شکل ۷: ماکزیمم دمای زیر لایه Tmax و زمان رسیدن به دما، بصورت تابعی از سایز خوشه در انرژی ۵eV/atom

با توجه به شکل، این دما متناسب با انرژی کل و از اینرو متناسب با n، تعداد اتمهای تشکیل دهنده خوشه، می باشد. شکل (۸) وابستگی تعداد اتمهای جابجا شده در زیر لایه (Ndis) را بر حسب زمان برای انرژی کل ۱۹۵ eV، برای خوشه های ۱۸، ۵۵، ۸۷ و ۱۷۷ اتمی نشان می دهد. مطابق شکل مشاهده می شود که بعد از برخورد خوشه با زیر لایه، اتمهای زیر لایه ساختار کریستالی بودن خود را از دست می دهند و دچار بی نظمی هایی در محل برخورد خوشه می شوند.