شبیه سازی مدل یک بعدی باریکه مولکولی خالص (MBE) برای رشد لایه نازک

دریایی، ابراهیم[۱] ؛ سوسنی، شیما[۱]

[۱] گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه نیشابور ، نیشابور

چکیده

در این مقاله ما مکانیزم رشد لایه نازک روش باریکه مولکولی خالص (MBE) را بر اساس مدل داس سرما و تامبورنی مطالعه کردیم. پهنای سطح و تابع همبستگی ارتفاع- ارتفاع به منظور دست یابی به رفتار مقیاسی دینامیکی این مدل محاسبه گردید. نتایج ما نشان می دهد که دو رژیم متفاوت برای تحول زمانی پهنای فصل مشترک وجود دارد. این دو رژیم مشخص به رفتار های خطی و غیر خطی مدل MBE مرتبط می شود.

Simulation of one-dimensional molecular beam epitaxy (MBE) Model for thin film growth

Daryaei, Ebrahim[1]; Sousani, Shima[1]

[1] *Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, University of Neyshabur, Neyshabur*

Abstract

In this paper, we study the thin film growth mechanism of the discrete Molecular Beam Epitaxy (MBE) based on Das Sarma and Tamborenea (DT) model. Surface width and height-height correlation function are calculated to estimate the dynamic scaling behaviors in this model. Our results demonstrate that there are two different regimes for the temporal evolution of the interface width. These distinct regimes are related to linear and non-linear behaviors of MBE growth model.

PACS No.82, 81, 68, 89

مقدمه

امروزه مطالعه و بررسی رشد لایه های نازک به دلیل اهمیتی که در پیشرفت فنّاوری دارند یکی از مسائل مهم برای فیزیکدانان تجربی و نظری محسوب می شود. برای درک بهتر از پیچیدگی فرآیند رشد لایه های نازک می توان از رویکرد فیزیک آماری بهره گرفت[1,2]. لایه های نازک به دلیل دو ویژگی مهم که شامل ضخامت زیرمیکرونی و بزرگی فوق العاده نسبت سطح به حجم آنها است، در فناوری های نوین اهمیت فراوانی دارند. [3].

روش لایه نشانی باریکه مولکولی[۱](MBE) یکی از مهمترین روش لایه نشانی است که در خلاء بالا رخ می دهد. ویژگی مهم این روش نرخ لایه نشانی (کمتر از ۳۰۰۰ نانومتر در ساعت) است که سبب رشد لایه های نازک با بالاترین درجه خلوص می شود[4,5]. تاکنون مدل های شبیه سازی مختلفی برای این روش رشد ارائه شده است که یکی از مهم ترین آنها مدل ارائه شده توسط داس سرما و تامبورنی[۲][1,6] DT می باشد. در این مدل شبیه سازی، همانطور که در شکل ۱ (الف) دیده می شود یک موقعیت تصادفی بر روی سطح جهت رشد انتخاب می شود و یک اتم یا مولکول بر روی سطح قرار داده می شود چنانچه اتم مورد نظر فقط یک پیوند با اتم زیرین داشته باشد و همچنین در صورت امکان داشتن پیوند بیشتر در سایت های مجاور، می تواند بر روی سطح به سایت های مجاور پخش شود. فرآیند رشد به این صورت است که در ابتدا سطح کاملاً یکنواخت است و با گذشت زمان و نشست اتم ها بر روی سطح، از حالت یکنواختی خارج شده و سطح ناهمواری به وجود می آید. شکل ۱ (ب) مورفولوژی سطح تولید شده توسط این مدل را پس از تعداد تک لایه های مختلف نشان می دهد.

در دو دهه اخیر مطالعه گسترده ای بر روی این مدل انجام شده است در تازه ترین مقاله ژی-پنگ و همکارانش [7] این مدل را شبیه سازی کرده اند و با روش تکنیک حذف نویز تلاش کرده اند حد

[۱] Molecular Beam Epitaxy

[۲] Das Sarma and Tamborenea

ترمودینامیک این مدل را به دست آورند. روش تقریبی حذف نویز فقط قادر است یک جواب تقریبی برای زمان های طولانی به دست آورند همچنین گاهی نتایج این تقریب از واقعیت به دور است. در این مقاله ما قصد داریم با شبیه سازی این مدل در مقیاس بزرگ و بدون اعمال روش های تقریبی، رژیم های مختلف حاکم بر فرآیند رشد را به دست آوریم برای این منظور شبیه سازی های در سیستم های با اندازه بزرگتر و در زمان رشد طولانی تر (تا 10^8 تک لایه) انجام گرفته است.

کمیت های آماری رشد لایه نازک:

به منظور کمی کردن فرآیند رشد، سطح در حال رشدی با اندازه L را در نظر بگیرید اگر ارتفاع ستون iام در زمان tرا برابر $h(i,t)$ در نظر بگیریم، در این صورت میانگین ارتفاع به صورت زیر خواهد شد:

$$\bar{h}(t)=\frac{1}{L}\sum_{i=1}^{L}h(i,t) \qquad (۱)$$

که اگر نرخ لایه نشانی یکنواخت باشد، انتظار می رود که به صورت خطی نسبت به زمان افزایش یابد ($\bar{h}(t)\approx t$).پهنای فصل مشترک W(L,t) که میزان ناهمواری سطح را توصیف می کند، به صورت تابعی از زمان اندازه گیری می شود:

$$W(L,t)=\sqrt{\frac{1}{L}\sum_{i=1}^{L}[h(i,t)-\bar{h}(t)]^2} \qquad (۲)$$

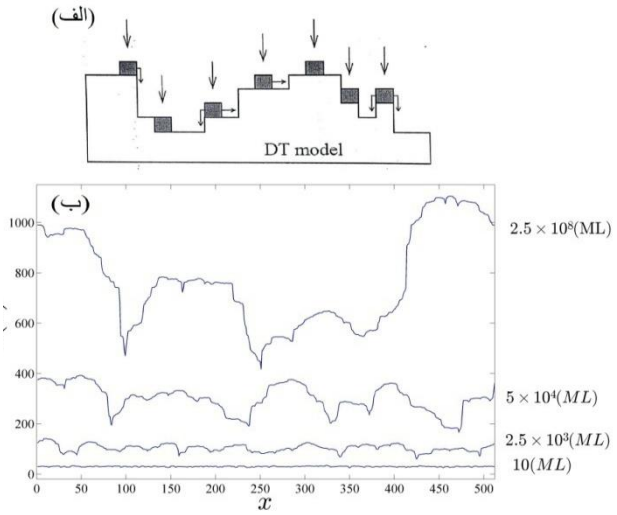
سیر تکامل رشد در دو ناحیه زمانی انجام می شود. در نمودار تغییر پهنای فصل مشترک نسب به زمان، در زمان t_xکه زمان اشباع است منحنی به دو قسمت مجزا تقسیم می شود:

در ابتدا ناهمواری به صورت تابع توانی نسبت به زمان افزایش می یابد:

$$W(L,t)\approx t^{\beta} \qquad (۳)$$

در این رابطه βنمای رشد نامیده می شود که حرکت وابسته به زمان رشد را توصیف می کند. پهنای فصل مشترک به صورت نامحدود ادامه ندارد بلکه بعد از رسیدن به زمان t_x به مقدار اشباع می رسد:

$$W_{sat}(L,t)\approx L^{\alpha} \qquad (٤)$$



شکل ۱: (الف) تصویر شماتیک مدل لایه نشانی MBE مدل داس سرما-تامبورنی. (ب) مورفولوژی سطح مدل داس سرما-تامبورنی در یک بعد پس از ۱۰، ۲۵۰۰، ۵۰۰۰۰ و ۲۵۰ میلیون لایه.

در این رابطه نمای زبری است که ناهمواری فصل مشترک اشباع شده را توصیف می کند. منظور از اشباع شدن زمانی است که لایه نشانی با گذشت زمان تغییر محسوسی نمی کند. زمان t_x به سایز شبکه به صورت $t_x\approx L^Z$ تغییر می کند. نماهای β ، α و Zمستقل از یکدیگر نیستند. با برابر قرار دادن دو معادله ۳و٤ نمای دینامیکیz طبق رابطه $z=\alpha/\beta$ به دست می آید [۱].

یکی از کمیت های مهم در سیستم های تصادفی، تابع همبستگی[۳] است که آن برای سطح رشد یافته به صورت زیر قابل تعریف می باشد [۱]:

$$C_L(r,t)=\frac{1}{L}\sum_{i=1}^{L}[h(i+r,t)-h(i,t)]^2 \qquad (۵)$$

رفتار تابع همبستگی برای زمان های اشباع می تواند دربرگیرنده اطلاعاتی از نمای زبری باشد به طوری که به ازای $r<<\zeta$ (که در آن ζطول همبستگی است)، رفتار تابع همبستگی به صورت $C\approx r^{2\alpha}$ خواهد بود. افزایش تابع همبستگی با فاصله r به معنی افزایش پهنای فصل مشترک می باشد و به ازای فاصله های بزرگتر

[۳] Correlation Function

از طول همبستگی –که به نوعی مشخص کننده اندازه متوسط قله ها و دره ها بر روی سطح می باشد– این تابع مقدار ثابتی خواهد داشت.

مدل لایه نشانی MBE

در مدل MBE تعداد میانگین جهش ها (جابجایی ذرات بر روی سطح) در مدت زمان واحد به صورت تصاعدی به دما بستگی دارد که طبق قانون آرهنیوس[٤] به صورت زیر به دست می آید:

$$R = R_0 \exp(-\frac{E_a}{k_B T}) \qquad (٦)$$

که در این رابطه E_a معرف انرژی معینی است که باعث جدا شدن اتم از سطح می شود. و طبق رابطه $E_a = E_0 + nE_b$ به دست می آید. E_0 انرژی فعال سازی یک اتم آزاد بدون قید و E_b انرژی پیوند و n تعداد نزدیک ترین همسایه های مرزی اتم جابجا شده می باشد. در اینجا $R_0 = \frac{2k_B T}{h}$ تابعی از دما و ثابت های پلانک و بولتزمن است. در مدل MBE علاوه بر آهنگ جهش، آهنگ نشست اتمی R_D داریم که تعداد اتم هایی که در واحد زمان بر روی سطح می نشینند را مشخص می کند. در این مدل لایه نشانی آهنگ نشست اتمی که برابر یک اتم بر ثانیه بر مکان می باشد، و آهنگ جهش از اهمیت ویژه ای بر خوردار هستند[6,1].

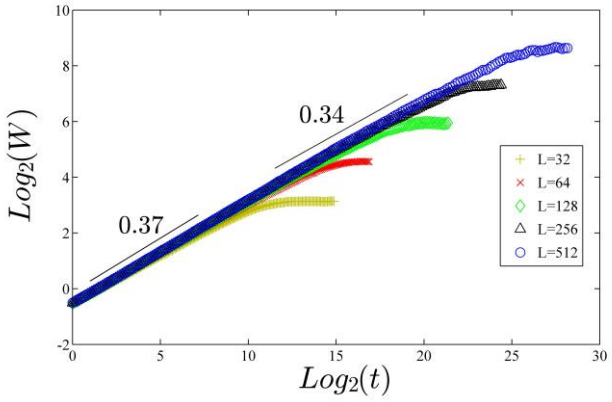
پژوهش های تئوری نشان دادند [8,9] که رفتار پیوسته مدل های رشد را با در نظر گرفتن جریان پخش سطحی اتم ها را به کمک معادله غیر خطی زیر می توان توصیف کرد[10,11]:

$$\frac{\partial h(x,t)}{\partial t} = -\kappa\nabla^4 h + \lambda\nabla^2(\nabla h)^2 + \eta(x,t) \qquad (7)$$

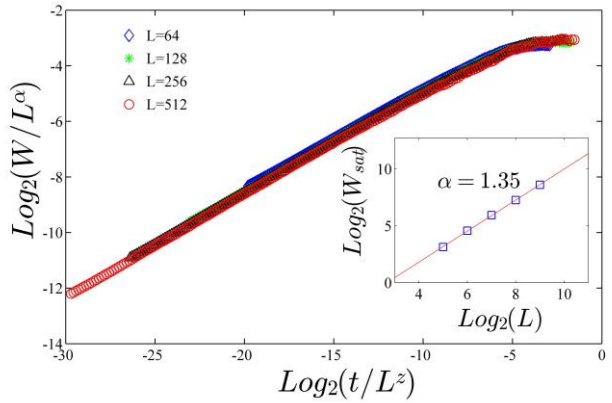
عبارت اول در سمت راست تساوی انتشار سطح را توسط ضریب انتشار κ توصیف می کند،و جزء غیر خطی $\lambda\nabla^2(\nabla h)^2$ رشد جانبی را توصیف می کند. و آخرین عبارت $\eta(x,t)$ یک متغیر تصادفی گاوسی است.

نتایج شبیه سازی

سطح زبر ایجاد شده توسط این مدل شبیه سازی در شکل ۱ (ب) نشان داده شده است، با گذشت زمان و افزایش مونولایه ها میزان زبری سطح نیز افزایش می یابد به طوری که با تعداد مونولایه های



شکل ۲: نمودار منحنی تغییرات لگاریتمی زمانی پهنای فصل مشترک مدل DT برای سایزهای مختلف شبکه در یک بعد. همانطور که مشاهده می شود منحنی از سه قسمت تشکیل شده است. قسمت اول منحنی از تئوری خطی مدل MBE و قسمت دوم از تئوری غیر خطی مدل MBE پیروی می کند.

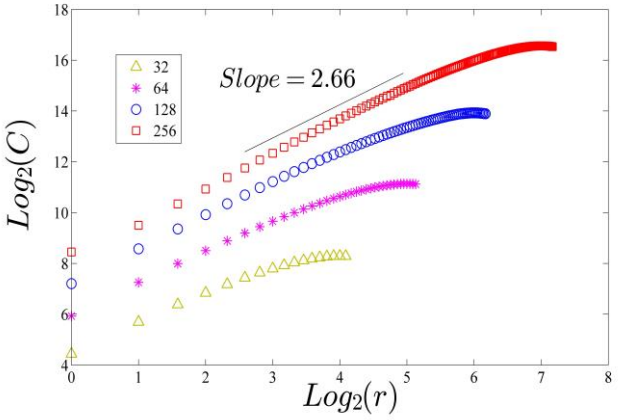


شکل۳: نمودار انطباق منحنی های تغییرات زمانی پهنای فصل مشترک مدل DT در راستای قائم و افقی در یک بعد که در آن α و z به ترتیب ۱/۳۵ و ۳/۳هستند. نمودار داخل: تغییرات لگاریتمی زبری اشباع بر حسب سایز شبکه را نشان می دهد که شیب خط مماس بر نمودار برابر ۱/۳۵ ±۰/۰۳ است.

بیشتر، اختلاف ارتفاع قله و دره حتی از سایز شبکه هم بیشتر شده است که این نشان دهنده زبری فوق العاده سطح است. همانطور که در شکل ۲ دیده می شود، برای سایزهای مختلف نمودار لگاریتمی تغییرات زمانی پهنای فصل مشترک رسم شده است. منحنی ها از سه قسمت تشکیل شده اند: قسمت اول منحنی که از تئوری خطی

[٤] Arrhenius

مدل MBE پیروی می کند دارای شیب ۰/۳۷ ±۰/۰۱۵ می باشد، قسمت دوم نیز که از تئوری غیر خطی مدل MBE پیروی می کند دارای



شکل ٤ : نمودار تغییرات لگاریتم (بر پایه ۲)همبستگی بر حسب لگاریتم فاصله. شیب خط مماس بر نمودار سایز ۲۵٦ برابر ۲/٦٦ ±۰/۰۸ است که نمای زبری به دست آمده برابر با ۱/۳۳ ±۰/۰٤ است.

شیب ۰/۳٤ ±۰/۰۱۳ که بیانگر نمای رشد می باشد و مقدار β را به ما می دهد. در قسمت سوم هم سیستم به اشباع رسیده است. رفتار سیستم در زمان های رشد طولانی نشان دهنده این نکته است که در این زمان ها، رشد جانبی نسبت به رشد در راستای قائم غالب تر است که منجر به رفتار غیر خطی می شود.

و به کمک رسم نمودار لگاریتمی تغییرات زبری اشباع بر حسب سایز شبکه برای سایزهای مختلف می توانیم نمای زبری را محاسبه کنیم، که شیب این نمودار مقدار α را نشان می دهد. با داشتن مقدار این دو پارامتر و به کمک معادله ۵ می توانیم مقدار Z را به دست آوریم. شکل ۳ انطباق نمودارها برای سایزهای مختلف به کمک پارامترهای به دست آمده را نشان می دهد.

روش دیگری که می توان مقدار نمای زبری را محاسبه کرد، اندازه گیری شیب نمودار لگاریتمی تغییرات تابع همبستگی بر حسب فاصله است که این نمودار در شکل ٤ نشان داده شده است. نمای زبری به دست آمده از تابع همبستگی با مقدار به دست آمده از روش پهنای فصل مشترک همخوانی بسیار خوبی دارد.

نتیجه گیری

هدف از این تحقیق بررسی مدل یک بعدی لایه نشانی MBE و به دست آوردن نماهای بحرانی است. ابتدا تلاش کردیم مدل یک بعدی این روش را شبیه سازی کنیم و سپس به کمک روش های مختلفی همچون اندازه گیری شیب نمودار لگاریتمی تغییرات زبری اشباع بر حسب سایز شبکه، و اندازه گیری شیب نمودار لگاریتمی تغییرات بیشترین مقدار همبستگی بر حسب سایز شبکه، مقدار α را به دست آوردیم. همچنین نتایج به دست آمده از پهنای فصل مشترک که به صورت سراسری[۵] از نمونه ها گرفته می شود، با نتایج به دست آمده از تابع همبستگی که به صورت محلی[٦] گرفته می شود تطابق دارد. نتایج بدست آمده نشان داد که در زمان های اولیه رشد، اتم ها به صورت رفتار خطی بر روی سطح پخش می شوند ولی در زمان های طولانی رفتار غیرخطی نقش برجسته ای دارد. در این روش شبیه سازی بدون اعمال تکنیک های مختلف توانستیم نتایج دقیقی را به دست آوریم، در صورتی که ژی پنگ با اعمال تکنیک کاهش اختلال نتایج متفاوتی را به دست آورده است[۷] که این نتایج فقط برای عامل کاهش اختلال کوچک درست می باشد و هر چه این عامل بزرگ تر می شود نتایج متفاوتی به دست می آید که دقیق نیستند.

مرجع‌ها

[1] A. L.Barabasi and H. E. Stanly; "*Fractal concept in surface growth*", (1995)
[2] M. Kardar, G. Parisi, and Y. C. Zhang, *Physical Review Letters* **56**, no. 9 (1986), 889.
[3] Y. R. Reddy, "*An Introduction to Thin Film*", (2010).
[4] A. Wagnendristel, Y. Wang. "*An Introduction of Physics and Technology of Thin Film"*, (1994).
[5] Fuhrmann, B., Leipner, H. S., Hoeche, H. R., Schubert, L., Werner, P., & Gösele, U., *Nano letters*, **5**(12), 2524, (2005).
[6] Sarma, S. D., & Tamborenea, P. *Physical review letters*, **66**(3), 325**.** (1991).
[7] Xun, Z. P., Zhang, Z., Wu, L., Xia, H., Hao, D. P., Yang, Y., & Tang, G. *EPL (Europhysics Letters)*, **111**(6), 60012, (2015).
[8] Huang Z. F. and Gu B. L. *Phys.Rev.E*, **54,** 5935, (1994).
[9] Perdota M. and KotrlaM. , *Phys.Rev.E*, ***54***, 3933 (1996).
[10] VillianJ., J. Phys.I, (1991)19.
[11] Lai, Z. W., & Sarma, S. D., *Physical review letters*, **66**(18), 2348. (1991).

[۵] Global

[٦] Local