## محاكاة الحاسوب لطوبوغرافية الاغشية الرقيقة

# د. عبد الحليم خضير علي قسم الفيزياء – كلية العلوم/ الجامعة المستنصرية

#### ملخص البحث:

استخدم نموذج مماثل الى نموذج ايزنك لسبائك ثنائية التركيب AB . النموذج المستخدم شبيكة مربعة بهيأة غشاء رقيق يحتوي على  $10^{-3}$  ذرة ويتراوح تركيز الفراغات من  $10^{-4}$  الى  $10^{-4}$  .  $10^{-4}$  .  $10^{-4}$  المرتب AB . ميكانكية انتشار الذرات في االسبيكة اساسها الفراغات ، حيث سمح للفراغات القفز الى اقرب المواقع المجاورة للطبقات الاحادية الطور . اظهرت محاكاة الحاسوب التحولات الطورية للغشاء الرقيق مع وجود عدة ميكانكيات تسبب الحالة الغير مرتبة وهي: عيوب نقاط الاستبدال للغشاء الرقيق مع وجود عدة ميكانكيات تسبب الحالة الغير مرتبة وهي عيوب المحاديث المحادود Sustitution points defect ليست من نوع واحد segregations ، المايكرودومين antiphase boundaries ، والحدود اللاطوري antiphase boundaries . ركزت الدراسة على استقرارية الاغشية الناتجة واعتمادها على درجة الحرارة وتركيز الفراغات . اظهرت نتائج محاكاة الحاسوب تراكيب جديدة مرتبة تشكلت من تحلل الطبقات الاحادية في داخل الغشاءالرقيق الثنائي التركيب AB .

## Computer simulation of topological monophase layers in thin flims

#### Dr. Abdul halim kh. Ali

#### **Abstract:**

A model corresponding to Ising model for binary alloys was used, which was a square lattice in the form of a thin film, containing 10000 atoms with a concentration of vacancies (  $3 \times 10^{-3}$  to  $10^{-4}$ ), where a monophase layers from A or B atoms has been adopted in an ordered AB thin film. The dynamics of atomic diffusion depends mainly on the vacancies in the thin film. Vacancies had been allowed to jump to the nearest –neighbor sites of monophase layers. Computer simulations

showed the phase transformations in thin films and the existence of several mechanisms causing disordering which are: Sustitution point defects, clusters, segregations, microdomains, antiphase order and antiphase boundary. This study focused on the stability of the resulted thin films and its dependance on the temperature and the concentrations of vacancies. The computer simulation results showed that a new ordered thin film AB.

#### مقدمة البحث:

ان التفسير النظري لمشكلة استقرارية الاغشية الرقيقية تجريبيا كان من اهم المشاكل البحثية في هذا القرن ، ولاسيما فيما يتعلق بالحاجة الى صنع الرقائق الكترونية لشبه موصلة حجمها قريب من النانومتر.

فالتحولات الطورية في الاغشية الرقيقة المنشطة حراريا لايمكن رؤيتها في التجارب العملية الحقيقية . فالمجهر الالكتروني والمجهر الايوني لا يعطي سوى الصورة النهائية للنتيجة. ايضا التجارب العملية الحقيقية تزودنا بنتائج معقدة وصعبة التحليل لوجود عدة عوامل متداخلة ومتبادلة التأثير حيث لايمكن فصل أي عامل من بقية العوامل الاخرى. ونحن نعرف ان استقرارية اي غشاء رقيق تعتمد على تلك العوامل وكيفية السيطرة عليها. هذه المشكلة جلبت انتباه كثير من الباحثين لدراستها لذلك هناك دراسات بطرق نظرية[١-٣] ودراسات بأستخدام الحاسوب[٤-٧]. التجربة بأستخدام الحاسوب تزودنا بمعلومات كاملة وحقائق مباشرة وغير مباشرة في زمن قصير عن التجربة العملية الحقيقية قبل أجرائها وبذلك توفر علينا الوقت اضافة الى ذلك تقليل الكلفة، والوصول الى افضل النتائج وهذا هدف البحث. البحث يتناول ادخال(غرس) طبقات ذرية احادية الطور في شبيكة مربعة ثنائية التركيب AB.

## النموذج المستخدم:

الحركة فراغا جديدا يستطيع استقبال ذرة جديدة مجاورة لها. وميكانيكية الانتشار التبادلي الخطي لذرتين متجاورتين غير مسموح بها. بينما الانتشار بواسطة الفراغات البينية يحتاج الى وجود فراغات بينية بين ذرات الشبيكة. فالذرات يمكن لها التحرك بكل سهولة بين هذه الفراغات ولكنها تحتاج الى طاقة تتشيط Activation energy. وعند لحظة بدأ التجربة يسمح النموذج بوجود الثوابت الغير مساوية للصفر متمثلة في التفاعل مابين الذرات على امتداد المحورين الكروين بينما يبقي على تفاعل الذرة مع الفراغ مساويا الى الصفر. وزمن العد ليس زمنا حقيقيا ويعتمد على عدد مرات القفز للذرات في فراغات الشبيكة  $t_n = n$ . وهنا يحصل توزيع جديد لذرات الشبيكة لذا يستوجب استخدام معادلة التوزيع لماكسويل الاحصائية :

$$Q = \exp(-E_v / \kappa T) \qquad -----(1)$$

حيث K ثابت بولتومان و  $E_v$  طاقة التنشيط و  $E_v$  درجة الحرارة المطلقة. وايضا يتوقف زمن القفز على معامل الاحتمالية p ، وهو ان يكون للذرة قدرا كافيا من الطاقة لكي تنتقل فعلا من موضع الى اخرى . فاذا كان لدينا p ذرات فان احتمالية قفز اية ذرة منها من موقعها الاصلي على الاحداثي الكروي p p الاحداثي الكروي الملاقة النالية :

$$Q = \sum_{k=1}^{4} \sum_{l=1}^{2} p_{kl}$$
 ----(2)

حيث  $p_{kl}$  احتمالية قفز الذرة k. وفي هذه فان احتمالية قفز الذرة في الفراغ وصولا الى ابعد نقطة في الشبيكة يعتمد على مقدار الطاقة التي تمتلكها الذرة ودرجة حرارة المادة.

وتحتاج الذرة k على المحور l الى اكتساب طاقة قليلة  $E_{k1}$  تمكنها من شغل فراغ مجاور لها. بينما تحتاج الذرة k الى اكتساب طاقة اكثر  $E_{max}$  لاشغال فراغ تحيطه دائريا k ذرات . وبما ان معادلة التوزيع لماكسويل تحسب لنا احصائيا معدل توزيع الذرات ، فاننا نتحتاج ايضا الى معدل الطاقة لتلك الذرات. ومعدل الطاقة  $D_{K1}$  تحسب من خلال المعادلة التالية :

$$D_{k1} = E_{k1} + (E_{max} - (1-b)E_{k1})b - - - - - - - - (3)$$

حيث b متغير يصف تأثير درجة الحرارة على عمليات الترتيب وقيمته 0 < b < 1 .

$$b = 1 - \exp(-\chi T)$$
 (4)

حيث  $\chi$  ثابت تجريبي للنموذج يؤخذ من خلال التجارب العملية الحقيقية وتتراوح قيمته من  $\chi$  الله  $\chi$  . 1. ومن المعطيات السابقة نستطيع كتابة احتمالية قفز ذرة ما في فراغ بصيغة اخرى.

$$A = \sum_{k=1}^{4} \sum_{l=1}^{2} (E_{max} - (1-b)D_{kl})$$

فعند درجات الحرارة المنخفضة تصبح b قريبة من الصفر ، عندئذ تكون  $D_{KI}$  قريبة من الطاقة  $E_{KI}$  . ان احتمالية قفز ذرات في فراغ يعتمد على الطاقة التي تكتسبها تلك الذرات ، وهذه الطاقة هي طاقة حرارية تعمل على تلدين السبيكة الثنائية التركيب التي هي بهيأة فلم (غشاء )رقيق . عند هذه الحالة يبدأ المتغير b من الاقتراب من الواحد وبذالك تصبح الاحتمالية  $p_{KI}$  مساوية الى القيمة التالية :

تعتبرالمعادلات (١ الى  $^{\circ}$ ) من اهم المعادلات الرياضية التي اعتمد عليها النموذج المستخدم في البحث وتفاصيل تلك المعادلات في المراجع [10-10].

## تقنية تحضير النماذج نظريا:

تتركز الطريقة على انشاءطبقة رقيقة من ذرات احادية الطور في شبيكة بلورية ثنائية التركيب AB مرتبة دوريا والتي هي بهيأة غشاء رقيق. ان وجود الذرات الاحادية والفراغات في الشبيكة البلورية الانفة الذكر يؤدي الى انهاء الحالة المثالية لتلك الشبيكة وتتحول الشبيكة من الحالة المرتبة الى الحالة الغير مرتبة. هذه الفوضى التي حصلت في داخل الشبيكة تسبب في اضطراب في طاقة النظام البلوري(عدم الاتزان) ، حيث تتحرر طاقة (طاقة المتحررة) تستنفذ من قبل الفراغات في عملية الانتشار وبذلك يحصل أعادة في توزيع ذرات الغشاء الرقيق.علما ان تغير تركيز الفراغات في الانظمة الحقيقة يؤثر في زمن العد[١٥]. ان التراكيب المتزنة والناتجة من عملية الانتشارتلك تكون قريبة من تراكيب \$\tag{A3B2}.

## وتتظمن الخطوات التالية:

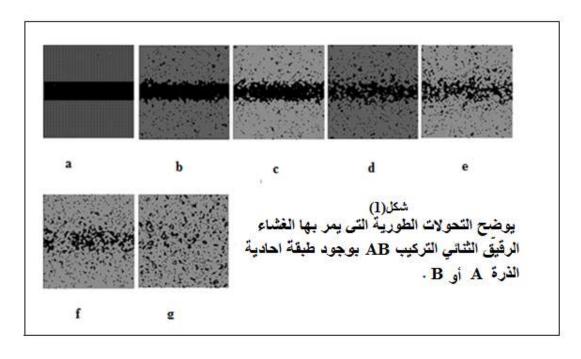
1.وضع 19 طبقة من ذرات احادية الطور A في منتصف الشبيكة المربعة الثنائية التركيب AB بهيأة شريط واحد، كما هو موضح في الشكل(a.1).

وضع ٩طبقات و ١٠ طبقات من ذرات احادبة الطور A، بالقرب من الزوايا الرأسية للشبيكة AB
بهيئة شريطين متوازيين، كما هو موضح في الشكل(a.٣).

 $^{\circ}$ . وضع 9 طبقات و 1 ، طبقات من ذرات احادبة الطور A بهيأة شريطين متعامدمين يقسم الشبيكة الى اربعة اجزاء متساوية، كما هو وضح في الشكل  $(a.\circ)$ .

ولدرجة الحرارة تأثير كبير على حركة الفراغات في الشبيكة لذا تم اختيار مدى لدرجات الحرارة المدرجة الحرارة المناسبة لتجربة هي ١٠٠١/٣ (١٠٠٠) وهذا الاختيار يعطي تأثير اقوى فراغ تكون درجة الحرارة المناسبة للتجربة هي ١٠٠١/٣ (١٠٠٠) وهذا الاختيار يعطي تأثير اقوى لفراغ تكون درجة الحرارة المناسبة للتجربة هي المدرك، ويجب ان نؤكد ان عدد الذرات في الشبيكة بما فيها لعامل الطاقة (طاقة النفاعل مابين الذرات). ويجب ان نؤكد ان عدد الذرات في الشبيكة بما فيها من الطبقات الاحادية الذرة يبقى ثابتا (١٠٠٠٠ ذرة) اثناء التجربة. من خلال تجربة محاكاة الحاسوب تمكنا من التدقيق عن الواجهة التي تهاجراليها الفراغات وتنفيذها لعمليات الخلل للطبقات الاحادية الذرة كذلك سمحت التجربة بأستكشاف انماط ناشئة كنتيجة اعادة تتظيم الذرات مع اختيار وتتبع ملامح اصغر التفاصيل لهذه العملية. ويوضح اللون الأبيض في الاشكال التالية التركيب الثنائي المرتب AB بينما اللون الاسود الطور الاحادي الذرة. تتسبب هجرة الفراغات في الشبيكة الشبيكة الشائية التركيب الذرة واقتطاع اجزاء منه وابتعادها الى عمق الشبيكة الثنائية التركيب AB ، وفيما يلي المراحل التي تمر بها الأغشية الرقيقة المتكونة من انتشار الطبقة الذرية الاحادية في وفيما يلي المراحل التي تمر بها الأغشية الرقيقة المتكونة من انتشار الطبقة الذرية الاحادية في الشبيكة الثنائية التركيب AB.

## النتائج والحسابات النظرية:



#### المرحلة الاولى:

يوضح الشكل (b.1) المرحلة الاولى لعملية الانتشار، حيث تتسبب حركة الفراغات في الشبيكة الى ظهور عيوب نقاط عيوب الأستبدال substitution points defect ، نتيجة لاحتلال ذرات الطبقة الاحادية مواقع بينية في الشبيكة الثنائية التركيب AB. اظهرت الصورلمحاكاة الحاسوب أن تواجد الفراغات لا ينحصر في الشبيكة الثنائية التركيب AB ، بل يمتد تواجدها في المناطق القريبة من حدود الذرات الاحادية الطور مما تتسبب اقتطاع اجزاء منه .

## المرحلة الثانية:

يظهر في الشكل(c.1)، بوضوح عملية التدمير التي حدثت بحدود الطبقة الأحادية الذرة مع ملاحظة تواجد اجزاء صغيرة من الشبيكة AB داخل حدود الطبقة الاحادية الذرة مكونة تراكيب تعرف بالمايكرودومين Microdomian ولهذه التراكيب اهمية في ظهور الترتيب القصيرالمدى Short-range order. ونظرا لتواجد المايكرودومين داخل الدومين الكبير المتمثل في التركيب AB ظهر لنا مصطلح مايعرف Anti-phase order.

#### المرحلة الثالثة:

يستمر توغل الفراغات داخل الطبقة الآحادية الذرة ، حيث تتسبب في اقتطاع اجزاء منه وابتعادها الى مناطق ابعد في الشبيكة الثنائية التركيب AB. وتتميزهذه المرحلة في زيادة عدد وحجم المايكرودومين مع حصول تآكل في حدود Anti-phase order ، مع ظهورتجمعات ذرية فاذا كانت من نفس النوع من الذرات ( A او B ) تعرف Clusters ، وكما موضح في الشكل (d.1).

#### المرحلة الرابعة:

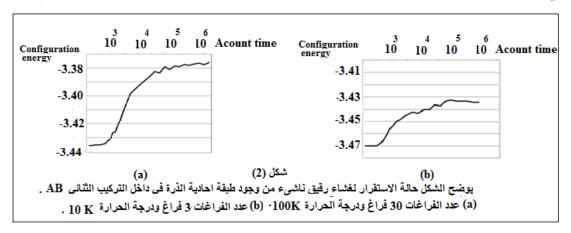
نلاحظ في الشكل (e.1) انه بفعل ميكانكية الفراغ يستمر اقتطاع اجزاء من الطبقة الاحادية الذرة وابتعادها وتوغل تلك الاجزاءالى داخل الشبيكة AB، وايضا لوحظ تقطع الاجزاء الاكبرالى اصغر . وما يميزهذه المرحلة هو انخفاض في عدد وحجم المايكرودومين الذي يترافق مع التناقص في الطبقة الآحادية الذرة مقارنة مع الحالة السابقة.

#### المرجلة الخامسة:

في هذه المرحلة تتحول الطبقة الاحادية الذرة الى قطع متناثرة مختلفة الاحجام ، وبفعل ميكانيكية الفراغ تسحق هذه القطع الى قطع اصغر بحيث يصبح حجمها يماثل حجم الجسيمات. وما يميز هذه المرحلة هو تلاشيء المايكرودومين مع زيادة في عدد عيوب نقاط الأستبدال ، كما مبين في الشكل (f.1).

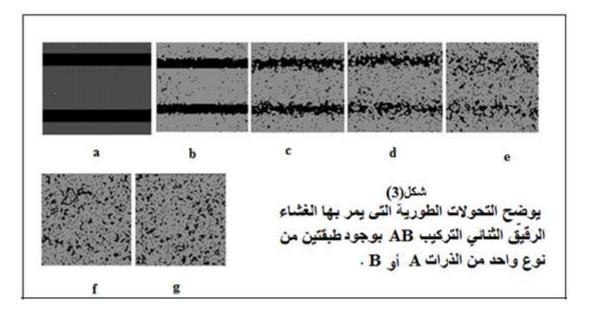
#### المرجلة السادسة:

تتسب عملية السحق للأجزاء الصغيرة للطبقة الاحادية الذرة الى ظهورمجاميع Cluster ومجاميع Segregtions ، بالاضافة الى تواجد اعداد كبيرة من عيوب نقاط الأستبدال Sustitution points defect كما هو واضح في شكل(g.1). تترتب تلك المجاميع بطاقة ترتيب اكثر من الطاقة التي تمتلكها الفراغات مما يعيق من حركتها ، ونتيجة لذلك يقلل من حركة الفراغات في الغشاء الرقيق وهذا يؤدي الى حالة الاستقرار للغشاء الرقيق وكما هو موضح في الشكل(a.2). وحسب نظرية الاضطراب[16] فان مجموع التراكيب اعلاه يعطي حجم البلورة.علما ان عدد وحجم تلك التراكيب يعتمد على كبر الطبقة الأحادية ودرجة الحرارة. ان تواجد تلك التراكيب في حالة الاتزان تؤكد على عدم وجود تركيب المايكرودومين .



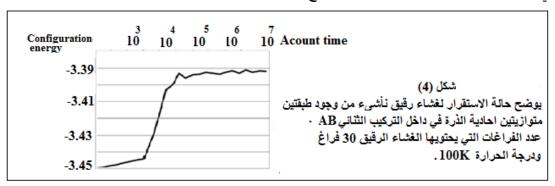
يوضح الشكل (b.۲) حالة استقرار اخرى للغشاء الرقيق لكن عند درجة حرارة الم ، وعدد الفراغات التي يحتويها الغشاء الرقيق هي قراغ. وتؤكد العلاقة البيانية حصول عملية انتشار محدودة لذرات الغشاء الرقيق بالرغم من انخفاض درجة الحرارة وقلة تركيز الفراغات. ان للذرات المترتبة في الطور الاحادي التي بمثابة (Clusters) تمتلك طاقة ترتيب اعلى من الطاقة التي تمتلكها الفراغات في الفلم الرقيق ذي الطور AB، ولهذا ينحصر بقائها عند حدود منطقة الطور AB لذلك نلحظ انخفاض في عملية الانتشار وهذا يرفع من استقرارية الغشاءالرقيق.

من خلال ملاحظة حالة اخرى للغشاء الرقيق تمثلت بوجود طبقتين متوازيتين من الذرات الاحادية الطور من النوع A في الفلم الرقيق الثنائي التركيب AB . كما هو مبين في شكل (٣).

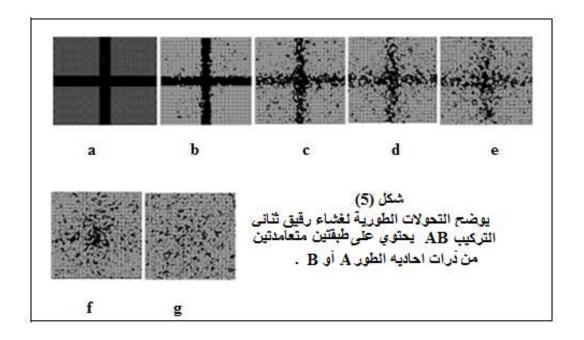


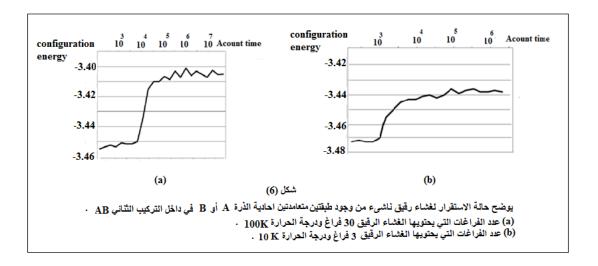
ان وجود الطبقتين يجعل النظام اقل استقرارا مقارنة بالحالة السابقة نظرا لوجود عدد اكبر من الحدود الطورية الاحادية الذرة A لذلك ينهار النظام بسرعة . وان عملية انهيار الغشاء الرقيق بوجود الطبقتين الاحادية الذرة مشابهة الى مراحل انهيارالغشاء الرقيق بوجود الطبقة الاحادية الذرة .

ويوضح الشكل(٤) حالة استقرار الغشاء الرقيق الناشىء من وجود طبقتين متوازيتين احادية الذرة في داخل الشبيكة الثنائية التركيب AB، مع وجود ٣٠ فراغا وعند درجة الحرارة ١٠٠ K.



اما المراحل التي يمر بها غشاء رقيق ثنائي التركيب AB يحتوي على طبقتين متعامدتين من الذرات الاحادية الطور من النوع A ، كما موضح في الشكل( $^{\circ}$ ).

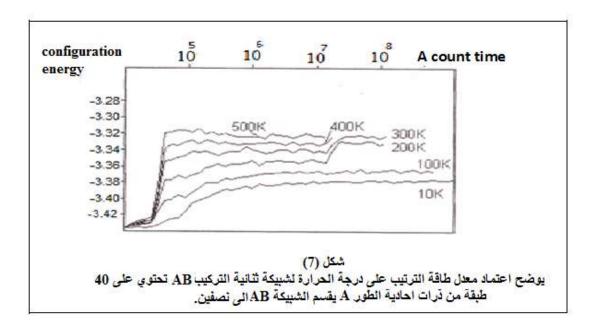




لاحظنا ان الصور التي اظهرها البرنامج في الا شكال (١و و٥) لاتعطي معلومات كاملة عن التطور الذي حصل لتوزيع الذرات ومع ذلك سمح لنا بمتابعة المراحل التي تتهار فيها التراكيب الذرية الاحادية الطور الذرية الاحادية الطور على شكل طبقتين متعامدتين في الغشاء الرقيق الثنائي التركيب AB اسرع من الحالات السابقة بالرغم ان لهم نفس العدد من الذرات الاحادية الطور. حيث تساهم الزيادة في طول الحدود في توطين الفراغات في داخل خلايا الشبيكة وتقتصر حركتها على طول الحدود مما يسهل من تغير هيكلية الحدود. ان البنية المنهارة من تركيب الاحادي الطورفي المرحلة الخامسة ،كما موضح في الشكل(٥.٥) تظهر قطع كبيرة من الذرات الاحادية الطور عند مركز تقاطع الشرائط الاحادية الذرات ، وهذه تحتاج الى فترة طويلة لتفتيتها وهي بمثابة تراكيب مستقرة. من خلال محاكاة

الحاسوب وجدنا ان الغشاء الذي يحتوي على طبقة واحدة هو اكثر التراكيب استقرارا لان معدل طاقة ترتيبه عند حالة الاستقرار تصل الى(7,7)وهي طاقة بوحدات نسبية اي نسبة الى طاقة الترتيب المثالية للغشاء AB، بينما لوحظ ان الغشاء الرقيق الذي يحتوي على طبقتين متعامدتين من الذرات الاحادية الطور يبدأ بالانهيارلحظة بدأ عملية الانتشار، ومعدل طاقة ترتيب الغشاء الرقيق الناتج عند حالة الاستقرار تصل الى(7,8) في حين معدل طاقة ترتيب الغشاء الرقيق الناتج من وجود طبقتين (بوضع افقي) من ذرات احادية الطور (7,70).

ويوضح الشكل(٧) اعتماد طاقة الترتيب عند حالات الاستقرار على درجة الحرارة ، حيث احتوى الغشاء الرقيق على ٤٠ طبقة من ذرات احادية الطور.



ان النتائج التي تم التوصل اليها قريبة الى نتائج الباحثين Fabrico ويث حيث تمكنوا من التحكم بالعوامل المؤثرة في نمو واستقرارية الاغشية الرقيقة ، فقد وجدوا منحنيات الاستقرارية للاغشية الرقيقة من خلال العلاقة بيانية بين طاقة الترتيب ودرجة الحرارة [17] وهي مماثلة الى العلاقة البيانية التي تم التوصل اليها في هذا البحث.

#### الاستنتاجات:

اظهرت نتائج محاكاة الحاسوب مراحل نمو وحجم التراكيب الدقيقة التي تميز معالم بنية واستقرار الغشاء الناشىء من غرس الغشاء الرقيق المثالي AB ، بتراكيب احادية الذرة. التحولات (المراحل) الطورية للغشاء الرقيق اوجدت عدة ميكانكيات تسبب في انهاء الحالة المرتبة التي كان فيها الغشاء عند بداية التجربة (عيوب نقاط الاستبدال Sustitution points defect ،

تجمع من ذرات من نوع واحد clusters ، تجمع ذرات ليس من نفس النوع antiphase ، المايكرودومين domains ، الدومين microdomains ، الدومين order ، والحدود اللاطورية

ويتسبب ظهور تلك الميكانكيات في انخفاض تدريجي لمدى الترتيب البعيد Long –range .shrot – range order للغشاء الرقيق مع زيادة في نمو الترتيب قصير المدى order.

#### المراجع

- [1]Martin P. L. & Williams, (Long range order in Ni <sub>3</sub>Mo based ternary alloys –I.Isothermal aging response), J. C., *Acta metall.*, **32**, P.1681-1993(1984).
- [2] Green H.S., Hurst C.A., (Order-disorder phenomena), Sydney: Interchange, p. 363 (1964).
- [3] Cahn U., (Short- and long-range order of f.c.c. solid solutions), Phys. Status splidy B. 29, P. 529-533(1975).
- [4]Martin P. L. & Williams, (Long range order in Ni ₃Mo based ternary alloys –I.Isothermal aging response-II.Coherent phase salvii), J. C., Acta metall., 32 ,P.1695-1702(1984).
- [5]Cahn R. W.,( Thermal analysis of blends with polyamide 6 and  $\gamma$  irradiated polyethylenes), *Acta metall.*, **8**, P.261-272(1995).
- [6] Kenneth A. Jackson, (Computer modeling of atomic scale crystal growth processes), J. of crystal growth, V. 198-199, part 1, P. 1-9 (1999).
- [7] Hadi S. & Mehram G., (A computer model for the growth of thin films in a structure zone model, Nanotechnology), V.15, No.3, P.675 (2003).
- [8] Jacques Kotze, (Introduction to Monto Carlo methods for an Ising model of a Ferromagnet), Cond.-mat. Stat-mech, 3Mar., P.1-27(2008).
- [9]Helmut M., (Diffusion in solids: fundamentals, methods, materials, diffusion controlled processes) (Book), Springer Science & Business media (2007).
- [10] Zeman Dj. ,(Prentcebe teoria tverdogo tela.), Mer,P.472(1971).

- [11] Krivoglaz M. A., & Smirnov A. A., (Teoria uporiadochivaiushikhsia splavov), M. Phizmatgiz, P. 338 (1958).
- [12] Matveeva H. & M., Kozlov E. V., (Uporiadochennine fazi v metallicheskikh), M. Nauk, P. 248(1989).
- [13] Vaks V. G., (Kineticheskie iavlenia v uporiadochiaiushiksia splavakh, Sorovovskii obrazovatelnii zhurnal), V.8, P. 105-115 (1997).
- [14] V.I. Veronova, A. Katsnelson, & P.S. Dazaev, (Fiz. metall, metalloved), V. 24, P.171(1967).
- [15] Eduard V. and Antoni P., (Vacancy-driven ordering in a two-dimensional binary alloy), Phys. Rev., B 47, 2557 (1993).
- [16] F. Aquilante, P.Å. Malmqvist, T. B. Pedersen, A. Ghosh, &B. O Roos, (Cholesky decomposition based multiconfigurational second order perturbation theory (CD-CASPT2)),J. Chem. Theory Comput.,V. 4,
  - P. 694-702(2008).
- [17] Fabricio L Forgerini & Roberto Marchiori, (A brief review of mathematical models of thin film growth and surfaces), V.4, P.28871(2014).