

## **Simulation and Study of Source temperature effect in gold Thin films growth prepared via evaporation method using COMSOL Multiphysics software**

**M.H. Ehsani<sup>1</sup>; M. Jalali Mehrabad<sup>2</sup>; A. Javadian<sup>3</sup>**

Received: 2015.11.24

Accepted: 2016.8.25

### **Abstract**

*In the present work, gold thin films growth process has been simulated by using the evaporation method. For this purpose, the COMSOL Multiphysics 5.0 simulator software was used. Three-dimensional models were constructed and geometry, mesh analysis, boundary conditions and related relations were defined and studied. Film thickness, density, heat flux and other related parameter to deposition were investigated. Using planar regression, surface equation of the gold thin films was calculated and the effect of the temperature of gold source on thickness of films was investigated. Results showed that there is a correlation between the source temperature and the thickness of gold films. Using non-linear regression, a model was represented in order to describe the dependency of film thickness on source temperature. Comparing the simulation results in this paper for thickness and curvature of gold thin films with expected behavior distribution of substrate, a promising accommodation between the simulated data and this trend was observed.*

**Keywords:** Evaporation, Thin film, Simulation.

---

<sup>1</sup> Assistant Professor, Department of Physics, Semnan University

<sup>2</sup> B.Sc, Department of Physics, Semnan University

<sup>3</sup> Lecturer in Physics, Semnan University

## شبیه‌سازی و مطالعه اثر دمای چشمه در لایه نشانی نانوفیلم‌های طلا به روش تبخیر حرارتی با استفاده از نرم‌افزار COMSOL Multiphysics

محمد حسین احسانی<sup>۱</sup>

محمود جلالی مهرآباد<sup>۲</sup>

عباس جوادیان<sup>۳</sup>

تاریخ دریافت: ۹۴/۹/۳

تاریخ تصویب: ۹۵/۶/۳

### چکیده

در این مقاله، فرآیند لایه نشانی فیلم‌های نازک طلا با روش تبخیر حرارتی شبیه‌سازی شد. بدین منظور از نرم‌افزار COMSOL Multiphysics استفاده گردید. مدل سه بعدی در محیط نرم‌افزار ایجاد و هندسه مدل، تحلیل مش‌ها، شرایط مرزی و روابط مورد نیاز معرفی گردید. مطالعه ضخامت، چگالی، شار گرما، فشار و سایر پارامترهای مرتبط با لایه نشانی

---

<sup>۱</sup> استادیار فیزیک، دانشگاه سمنان؛ [ehsani@semnan.ac.ir](mailto:ehsani@semnan.ac.ir)

<sup>۲</sup> کارشناس فیزیک، دانشگاه سمنان

<sup>۳</sup> مربی فیزیک، دانشگاه سمنان

۸ / شبیه‌سازی و مطالعه اثر دمای چشمه در لایه نشانی نانوفیلم‌های طلا به روش تبخیر حرارتی ...

صورت گرفت. با استفاده از برآزش صفحه‌ای، معادله سطوح نانو فیلم‌های طلا محاسبه و اثر دمای چشمه بر رشد فیلم‌های نازک طلا بررسی گردید. نتایج نشان دادند که بین ضخامت فیلم نازک و دمای چشمه رابطه مستقیم وجود دارد. با استفاده از برآزش غیر خطی مدلی برای وابستگی ضخامت فیلم نازک به دمای چشمه ارائه گردید. با مقایسه نتایج به دست آمده شبیه‌سازی‌ها در این مورد ضخامت و انحنای سطح فیلم‌های نازک طلا تطابق مناسبی با رفتار مورد انتظار از توزیع جرم روی زیرلایه مشاهده گردید.

**واژه‌های کلیدی:** تبخیر حرارتی، فیلم نازک، شبیه‌سازی.

## ۱. مقدمه

یکی از روش‌های مرسوم برای ساخت لایه نازک، روش تبخیر حرارتی در خلأ با استفاده از چشمه گرمایی مقاوم می‌باشد که جزء روش‌های لایه نشانی فیزیکی بخار (PVD) به شمار می‌رود. در این روش، فرآیند لایه نشانی شامل ۳ مرحله اصلی است:

(الف) تبخیر ماده مورد نظر برای لایه نشانی به کمک چشمه تبخیر.

(ب) انتقال بخار ماده از منبع به زیرلایه.

(ج) چگالش ماده روی زیرلایه.

فرآیند تبخیر ماده با اعمال جریان الکتریکی به چشمه تبخیر از طریق منبع تغذیه جریان بالا صورت می‌گیرد. محیط خلأ نیز به کمک پمپ‌های خلأ ایجاد می‌شود تا هدایت و انتقال ماده تبخیر شده به سمت زیرلایه تسهیل شود. چگالش ماده روی زیرلایه نیز از طریق بهم پیوستن اتم‌های روی زیرلایه و از طریق فرآیند بهم پیوستن جزایر رشد صورت می‌گیرد.

در این روش به کمک برخی کمیته‌ها، نظیر فشار محفظه، تغییر هندسه چشمه و زیرلایه، دمای زیرلایه و دمای چشمه و... می‌توان خواص زیرلایه را کنترل کرد. دمای چشمه تبخیر به جریان وارد شده به چشمه تبخیر که در واقع یک ماده دیرگداز از جنس

تنگستن، مولیدن، تانتالیوم و... است، بستگی دارد. این روش پیشتر در اوایل قرن بیستم به منظور ساخت آینه‌های فلزی از آلومینیوم یا نقره یا قطعات ماشین آلات مورد استفاده قرار می‌گرفت [۱].

امروزه به دلیل کاربردهای متعددی که فیلم‌های نازک در صنایع و فعالیت‌های پژوهشی دارند، آزمایش‌ها و مقالات تجربی بسیاری در این زمینه وجود دارند. در این بین فیلم‌های نازک طلا نیز به دلیل داشتن ویژگی‌های ساختاری و الکترومغناطیسی خاص، مورد توجه هستند [۲-۶].

روش‌های تجربی مطالعه فیلم‌های نازک به خصوص با عناصر گرانبهایی مانند طلا به دلیل هزینه بر بودن و طولانی بودن فرآیندها همواره قابل اجرا نیستند. از این روش‌های شبیه‌سازی لایه نشانی انواع مختلف فیلم‌های نازک اخیراً بسیار مورد توجه قرار گرفته است. روش‌های مختلفی برای شبیه‌سازی لایه نشانی فیلم‌های نازک وجود دارد که از مهم‌ترین آن‌ها می‌توان به روش‌های مونت کارلوی جنبشی (KMC)، جانشانی اتمی تعدیل یافته (MEAM)، برهمکنش‌های جانشانی اتمی (EAI)، دینامیک مولکولی (MD) و FDTD اشاره کرد [۷-۱۱].

در این پژوهش به منظور شبیه‌سازی لایه نشانی فیلم‌های نازک از نرم‌افزار COMSOL Multiphysics 5.0 استفاده شده است. نرم‌افزار COMSOL ابزاری قدرتمند در زمینه محاسبات و شبیه‌سازی‌های مرتبط با علوم مختلف از قبیل ریاضیات، فیزیک جامدات، ترمودینامیک، الکترومغناطیس، پلاسما و فیزیک شاره‌ها است و دارای کتابخانه جامعی با اطلاعات مربوط به عناصر ترکیبات مختلف می‌باشد. ضمناً روابط و معادلات مرتبط با حوزه‌های مختلف پژوهشی نیز در این نرم‌افزار موجود می‌باشد.

نویسندگان این مقاله معتقدند که فیزیکدانان تجربی باید در کنار پژوهش‌های آزمایشگاهی، با نرم‌افزارهای شبیه‌سازی رشته تخصصی خود آشنا شوند و قبل از انجام آزمایش از آن بهره‌گیرند. لذا در این کار تلاش شده است تا در راستای ترویج استفاده از این امکانات، ضمن معرفی پتانسیل‌های این نرم‌افزار، پدیده‌های کاربردی را نیز مورد مطالعه قرار دهیم. لذا سعی شده است بر پایه امکانات این مقاله، مراحل مختلف کار از قبیل

۱۰ / شبیه‌سازی و مطالعه اثر دمای چشمه در لایه نشانی نانوفیلم‌های طلا به روش تبخیر حرارتی ...

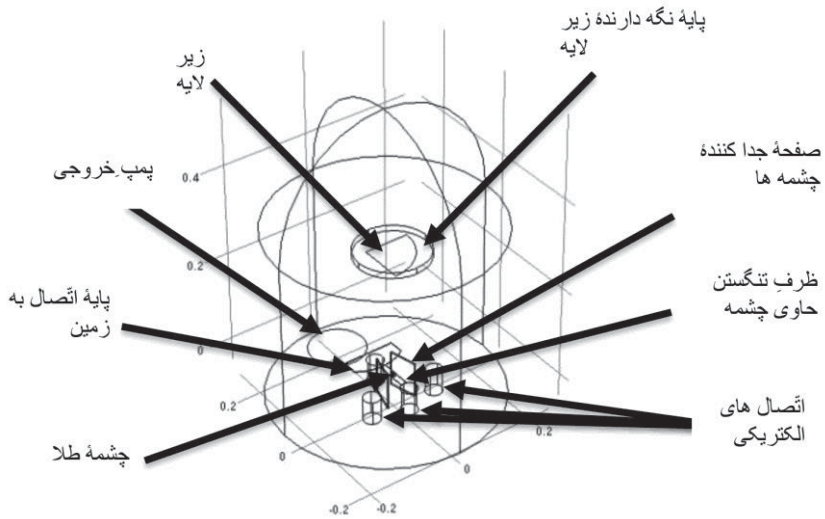
طراحی هندسه محفظه، چشمه و زیر لایه، تحلیل مش‌ها، تعریف روابط مرتبط با دما، فشار، شار و چگالی شرح داده شوند. شبیه‌سازی لایه نشانی و مطالعه فیلم‌های نازک طلا به روش تبخیر حرارتی نیز در ادامه کار مورد مطالعه قرار گرفته است. همچنین با استفاده از نتایج به دست آمده از شبیه‌سازی، به نحوه توزیع و یکنواختی سطوح در فیلم‌های نازک طلا توجه گردید. وابستگی ضخامت فیلم نازک به دمای چشمه و معادلات توصیف‌کننده آن با استفاده از برازش صفحه‌ای و غیر خطی بررسی گردید. با مقایسه نتایج شبیه‌سازی و معادلات نظری موجود، میزان خطای شبیه‌سازی برآورد گردید.

## ۲. شبیه‌سازی و حل عددی

### ۲-۱. تعریف هندسه محفظه لایه نشانی

طرح واره سیستم لایه نشانی تبخیر حرارتی در یک محیط سه‌بعدی در نرم‌افزار COMSOL در شکل ۱ ارایه شده است. قسمت‌های مختلف این سیستم در این شکل معرفی شده‌اند. ابعاد و ویژگی‌های قسمت‌های مختلف محفظه نیز در جدول ۱ ذکر گردیده‌اند. در این شبیه‌سازی، انتخاب چنین ابعاد و ویژگی‌ها برای محفظه لایه نشانی به این علت بوده که ابعاد سیستم‌های لایه نشانی تبخیر حرارتی، از جمله نمونه موجود در آزمایشگاه تحقیقاتی که نویسندگان این مقاله بدان دسترسی دارند، معمولاً مشابه ابعادی است که در این شبیه‌سازی به کار رفته‌اند. چنین انتخابی امکان مقایسه نتایج مطالعات تجربی احتمالی را با نتایج این تحقیق برای پژوهشگران فراهم می‌آورد.

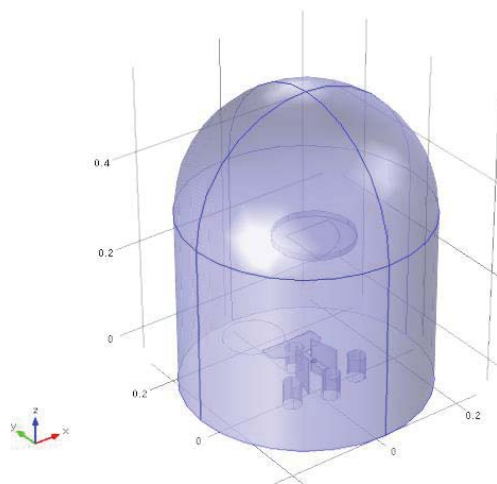
مدل سه‌بعدی ایجاد شده به همراه راستای محورهای دستگاه مختصات دکارتی در شکل ۲ نشان داده شده است. پایه‌ها و اتصالات نگه‌دارنده محفظه، پمپ خروجی و زیر لایه جهت‌سازگی در شکل نیامده است. یک نمونه کروی طلا به شعاع ۱cm (مشابه نمونه گرانولی) که بر روی یک ظرف تنگستن در قسمت پایین محفظه قرار گرفته، به عنوان چشمه تعریف شده است. یک زیر لایه به شکل یک چهارم دایره به شعاع ۱۰cm در فاصله عمودی ۳۱cm چشمه به صورت متقارن قرار داده شده است. دمای چشمه لایه نشانی قابل تنظیم و بین ۱۵۰۰ تا ۲۱۴۰K (دمای بالاتر از دمای نقطه ذوب طلا) تعریف شده است. دمای اولیه سایر سطوح برابر با دمای محیط و ۲۹۳/۱۵K است.



شکل ۱. قسمت های مختلف مدل شبیه سازی شده محفظه لایه نشانی

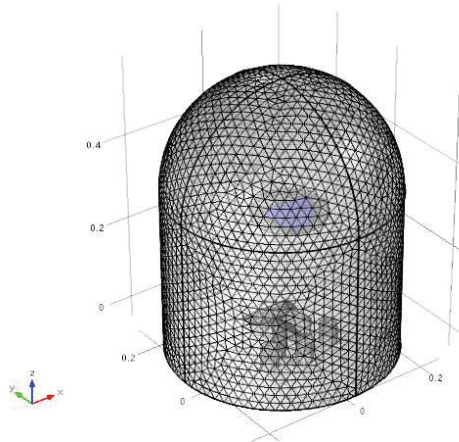
جدول ۱. ابعاد و ویژگی های چشمه، زیر لایه و محفظه

| ارتفاع محفظه | شعاع زیر لایه | فاصله چشمه تا زیر لایه | شعاع چشمه | نقطه ذوب طلا | چگالی طلا             | جرم مولی طلا        | فشار بخار طلا در محیط | دمای محیط          |
|--------------|---------------|------------------------|-----------|--------------|-----------------------|---------------------|-----------------------|--------------------|
| ۵۰ cm        | ۱۰ cm         | ۳۱ cm                  | ۱ cm      | ۱۳۳۶ K       | $۱۹.۳ \text{ g/cm}^3$ | $۱۹۷ \text{ g/mol}$ | $۲۰۴۰ \text{ K}$      | $۲۹۳/۱۵ \text{ K}$ |



شکل ۲. مدل سه بعدی محفظه

در مدل سه‌بعدی، این امکان وجود دارد که به جز محدوده چشمه و ظرف تنگستن حاوی نمونه طلا، سایر سطوح موجود در محفظه به عنوان محل لایه نشانی نیز انتخاب گردیده تا علاوه بر زیر لایه، لایه‌های تشکیل شده بر سایر نواحی محفظه نیز محاسبه گردند. به منظور پرهیز از خطاهایی از قبیل اثر لبه‌ها، اتصالات بین منبع‌ها، تماس بین سطوح همجوار و...، مش‌های مورد نیاز در تمامی سطوح ایجاد شده در مدل محاسبه و ایجاد شده‌اند (شکل ۳). مش‌های ایجاد شده به نسبت ابعاد دیواره‌ها و سطوح داخلی محفظه به گونه‌ای انتخاب شده‌اند که خطای شبیه‌سازی به حداقل ممکن برسد. در تحلیل شبکه ایجاد شده، از ترکیب یک استوانه و یک نیم کره استفاده شده است، به این صورت که استوانه و نیم کره داخل مدل سه‌بعدی محفظه قرار گرفته‌اند، که در شکل ۳ مشاهده می‌شوند (دیواره محفظه به منظور جلوگیری از ابهام پنهان شده است). ابعاد طولی المان‌های تشکیل دهنده مش‌ها به نسبت  $0/00001$  ابعاد محفظه انتخاب شده است. اگرچه کوچک انتخاب نمودن ابعاد مش‌ها باعث طولانی شدن فرآیند شبیه‌سازی می‌شود، اما در عوض حداقل رساندن اثر لبه‌ها و اتصالات بر روی نتایج شبیه‌سازی، دقت شبیه‌سازی را افزایش می‌دهد [۲۳-۲۴].



شکل ۳. نمایش مش‌های ایجاد شده

به منظور بررسی نحوه توزیع جرم و سایر پارامترهای ترمودینامیکی مرتبط با لایه نشانی در محفظه، خصوصاً روی زیرلایه، از یک محیط تحلیلگر Free Molecular Flow در

نرم افزار استفاده گردید. روابط نظری مربوط به شار بخار مولکولی (G)، فشار (p)، چگالی (n) و شار گرما (Q) در زمان لایه نشانی به روش تبخیر حرارتی به صورت زیر می باشند [1]:

$$G = -\int_{S'} \frac{J'(n \cdot r)(n' \cdot r)}{\pi r^4} dS' \quad (1)$$

که در آن G شار بخار مولکولی و J جریان بخار می باشد.

$$p = -\int_{S'} \frac{J'(n \cdot r)^2 (n' \cdot r)}{\pi r^5} \frac{Mn}{N_A} \langle C'_{3D} \rangle dS' \quad (2)$$

$$+ \frac{2JMn}{3N_A}, \langle C'_{3D} \rangle = \sqrt{\frac{9\pi RT'}{8Mn}}$$

که در آن p فشار، J جریان بخار، Mn جرم مولی،  $N_A$  عدد اتمی و T دما می باشد.

$$n = -\int_{S'} \frac{J'(n \cdot r)}{\pi r^5} \left\langle \frac{1}{C'_{3D}} \right\rangle dS' \quad (3)$$

$$+ 2 \left\langle \frac{1}{C'_{3D}} \right\rangle J, \left\langle \frac{1}{C'_{3D}} \right\rangle = \sqrt{\frac{\pi Mn}{8RT'}}$$

که در آن n چگالی، J جریان بخار Mn جرم مولی و T دما است.

$$Q = -\int_{S'} \frac{J'(n \cdot r)(n' \cdot r)}{\pi r^4} \frac{Mn}{N_A} \langle C'^2_{3D} \rangle dS' \quad (4)$$

$$- \frac{1}{2} \frac{Mn}{N_A} \langle C^2_{3D} \rangle J, \langle C'^2_{3D} \rangle = \sqrt{\frac{4RT'}{Mn}}$$

که در آن Q شار گرما، J جریان بخار، Mn جرم مولی،  $N_A$  عدد اتمی و T دما می باشد. زمان لایه نشانی در این شبیه سازی به مدت ۶۰s و طول گام های طی شده در شبیه سازی و محاسبه پارامترها ۶s ثانیه تعریف شده است. هدف نویسندگان در پژوهش، مطالعه لایه های طلا با ضخامت های بسیار پایین بوده است، و این بازه زمانی بدان علت انتخاب شده است. همچنین شایان ذکر است که طول زمانی گام های طی شده در شبیه سازی بر روی دو پارامتر دقت نتایج و زمان شبیه سازی می تواند اثر بگذارد. از این رو طول گام ها باید به گونه ای انتخاب شود که در عین حداقل بودن خطا، که با کوچک انتخاب کردن طول گام ها نتیجه مطلوب تری به دست می آید، از طولانی شدن بیش از حد زمان شبیه سازی جلوگیری شود. در این شبیه سازی نیز برای حصول این هدف، پس از چندین بار



۱۴ / شبیه‌سازی و مطالعه اثر دمای چشمه در لایه نشانی نانوفیلم‌های طلا به روش تبخیر حرارتی ...

شبیه‌سازی با گام‌های زمانی مختلف، طول گام‌ها ۶S انتخاب گردید. پارامترهای فشار، چگالی، شار گرما و ضخامت فیلم نازک تشکیل شده به منظور مطالعه تعریف شده و محاسبه گردیده‌اند. پس از بررسی تمامی پارامترها و تعاریف، مدل طراحی و راه‌اندازی شد و برای ۶۲۱۳۹ درجه آزادی محاسبات صورت گرفت.

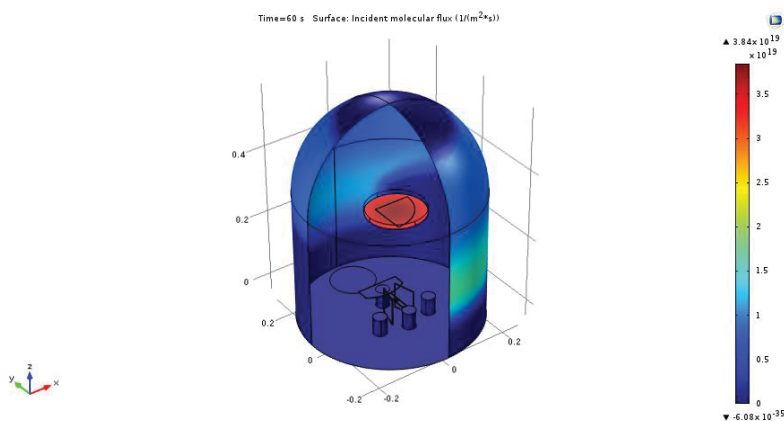
### ۳. نتایج شبیه‌سازی

شکل ۴ تصویر سه بُعدی شار فرودی اتم‌های طلا بر روی سطوح محفظه در حین لایه نشانی را نمایش می‌دهد. ضخامت نمونه لایه نشانی را می‌توان از طریق شار فرودی تعیین نمود. این وابستگی با رابطه زیر داده شده است [۱]:

$$\frac{dh_{film}}{dt} = \frac{M_n G}{N_A \rho_{film}} \quad (5)$$

که در آن Mn جرم مولی،  $N_A$  عدد اتمی، G شار بخار مولکولی و  $\rho$  چگالی فیلم نازک می‌باشد.

در این شبیه‌سازی گرچه محاسبه شار مولکول‌ها برای تعیین نرخ لایه نشانی کفایت می‌کند، اما به منظور بررسی تأثیر پدیده‌های رایج دیگر همچون باز تبخیر طلا از سطوح داغ نزدیک به چشمه، از یک برنامه وابسته به زمان استفاده شده است. البته انتخاب این برنامه وابسته به زمان منجر به طولانی شدن زمان شبیه‌سازی گردیده است.



شکل ۴- شار فرودی مولکولی ورودی از چشمه به طرف زیر لایه و دیواره‌های محفظه

رابطه بین شار، دما و فشار بخار نمونه موجود در چشمه به صورت زیر است [۱].

$$J = \alpha_v \left( \frac{N_A^2}{2\pi M_N RT} \right)^{1/2} P_{vap} \quad (۶)$$

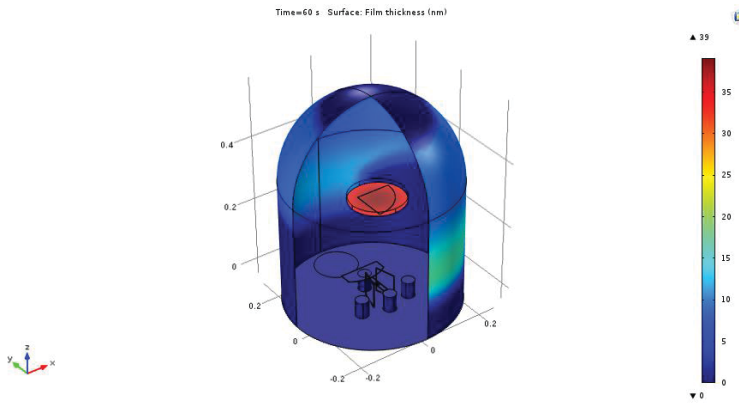
که در آن Mn جرم مولی،  $N_A$  عدد اتمی، T دما، R ثابت جهانی گازها،  $P_{vap}$  فشار بخار و  $\alpha_v$  ثابت لایه نشانی می باشد. ضخامت طلای لایه نشانی شده بر روی سطوح داخلی محفظه پس از اتمام شبیه سازی در شکل ۵ نشان داده شده است. همان گونه که مشاهده می شود در سطوح پایین محفظه به دلیل نزدیکی به چشمه با دمای بالا (۲۰۴۰K) پدیده باز تبخیر رخ می دهد و لایه های تشکیل شده در این ناحیه از ضخامت ناچیزی نسبت به سطوح بالایی محفظه برخوردار می باشند. بازه تغییرات ضخامت در کل سطوح داخلی بسته به دمای چشمه که در این حالت ۲۰۴۰K بوده است، بین صفر تا ۳۹nm متغیر است. نحوه این تغییرات در نقاط مختلف نیز در شکل ۵ مشاهده می شود.

فیلم تشکیل شده بر روی زیر لایه در شکل ۶ نشان داده شده است. زیر لایه که به صورت متقارن نسبت به چشمه طراحی شده، دارای یک توزیع ضخامت شعاعی می باشد، به گونه ای که با افزایش فاصله نسبت به مرکز آن، ضخامت فیلم از مقدار بیشینه (۳۹nm) به کمترین مقدار خود در لبه های زیر لایه (۳۴/۵nm) کاهش یافته است. این نحوه توزیع متقارن و شعاعی در واقع نتیجه نوع طراحی و قرارگیری زیر لایه نسبت به چشمه بوده است که با توجه به محاسبات و مطالعات نظری صورت گرفته در این زمینه موضوعی قابل انتظار می باشد [۱۲-۱۸]. توزیع پارامترهای چگالی، فشار و شار گرما نیز که مشابه ضخامت دارای توزیع شعاعی می باشند، در شکل های ۷ تا ۹ نشان داده شده اند. شکل ۱۰ توزیع ضخامت فیلم طلا بر روی زیر لایه را در یک نمودار سه بعدی نمایش می دهد.

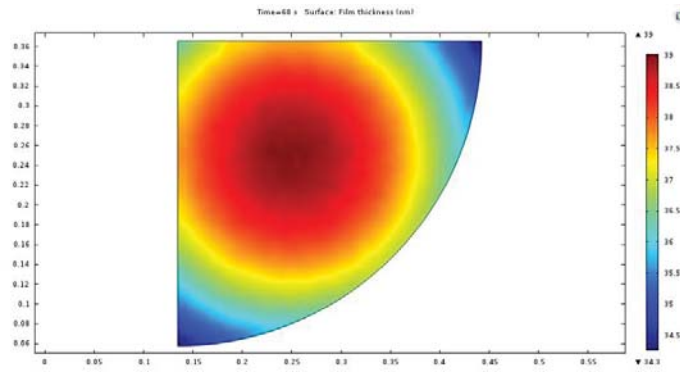
در ادامه به منظور بررسی اثر دمای چشمه بر روی ضخامت فیلم نازک تشکیل شده بر روی زیر لایه، شبیه سازی برای دماهای مختلف چشمه از ۱۵۰۰K تا ۲۱۴۰K مجدداً انجام گردید. به جز دمای چشمه و فشار بخار تعادلی طلا، که پارامتری وابسته به دما است، سایر پارامترها در حین شبیه سازی ها ثابت مانده اند [۲۲].

داده های مربوط به ضخامت فیلم بر روی زیر لایه به ازای هر دما محاسبه و در نمودار سه بعدی شکل ۱۱ نمایش داده شده اند.

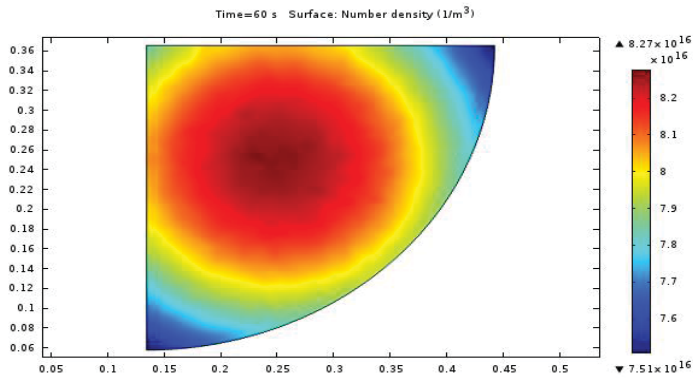
۱۶ / شبیه‌سازی و مطالعه اثر دمایی چشمه در لایه نشانی نانوفیلم‌های طلا به روش تبخیر حرارتی ...



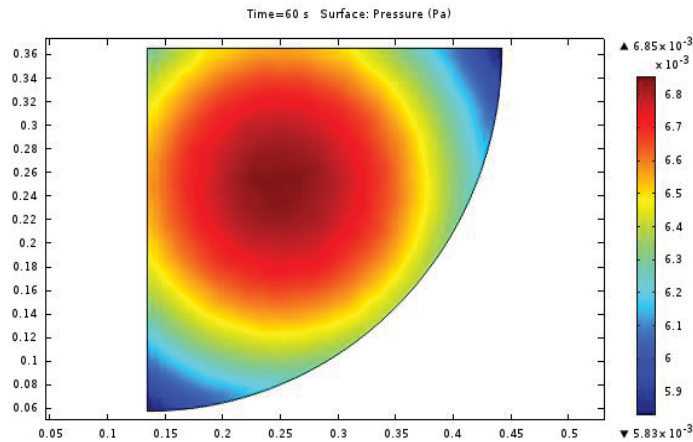
شکل ۵- ضخامت فیلم تشکیل شده بر روی سطوح محفظه پس از ۶۰s



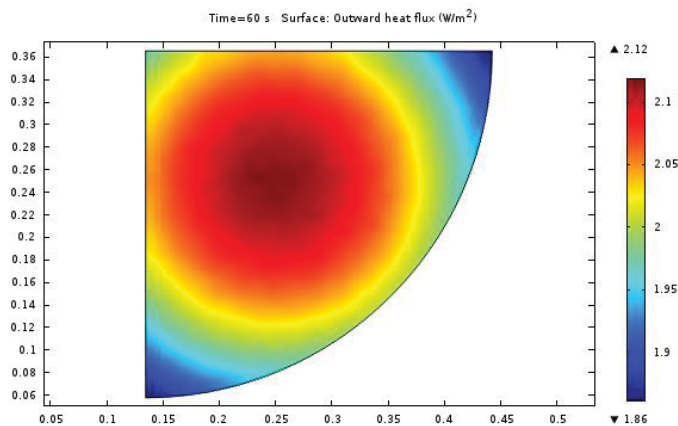
شکل ۶- توزیع ضخامت فیلم بر روی زیر لایه



شکل ۷- نحوه توزیع چگالی بر روی زیر لایه



شکل ۸- توزیع فشار در نقاط مختلف زیر لایه

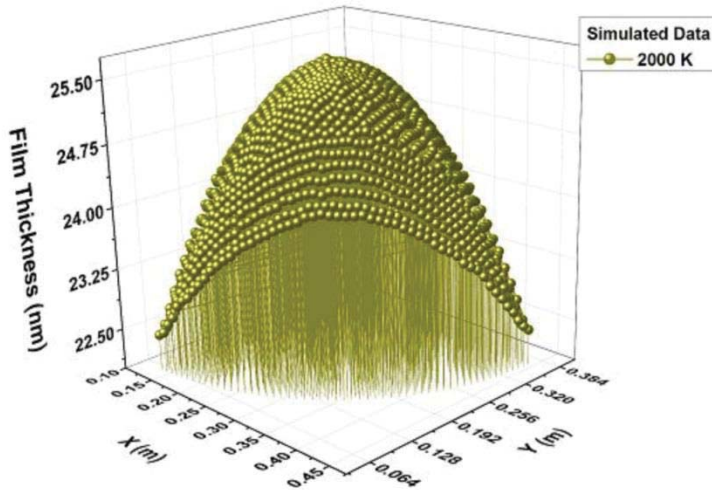


شکل ۹- شار گرمای خروجی از چشمه بر روی زیر لایه

همان‌طور که در شکل ۱۰ مشاهده می‌شود، توزیع جرم لایه بر روی زیر لایه غیر یکنواخت بوده و در نقطه‌ای از زیر لایه ماکزیمم مقدار داشته و هرچه به گوشه‌های نمونه حرکت می‌کنیم از ضخامت لایه‌ها کاسته می‌شود (اختلاف ضخامت بین وسط نمونه و انتهای نمونه حدود ۳ نانومتر است). این موضوع به عنوان رفتاری عادی در نمونه‌های لایه نشانی شده در سیستم تبخیر بوده که در مراجع و مقالات مربوط به آن اشاره شده است [۱۹-۲۱]. این رفتار توسط نویسندگان با معادلات نظری متنوعی که توصیف‌کننده

۱۸ / شبیه‌سازی و مطالعه اثر دمای چشمه در لایه نشانی نانوفیلم‌های طلا به روش تبخیر حرارتی ...

توزیع ضخامت روی زیرلایه است، ارائه گردیده است. تنوع معادلات به دلیل تغییرات ایجاد شده در هندسه چشمه و زیرلایه می‌باشد.



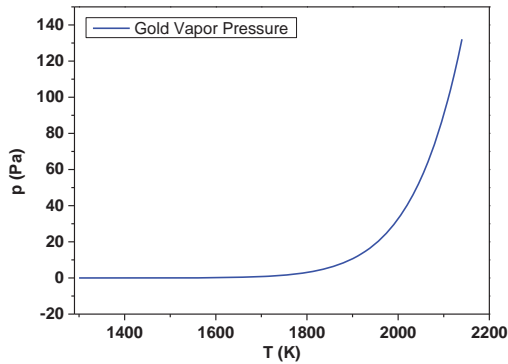
شکل ۱۰- نمودار سه بُعدی توزیع ضخامت فیلم بر روی زیر لایه

کارهای قابل توجهی هم در مورد ساخت لایه‌های نازک با یکنواختی مناسب گزارش شده که می‌توان به کنترل زیرلایه در زمان لایه نشانی، لرزاندن زیرلایه در زمان لایه نشانی، اعمال میدان مغناطیسی یا الکتریکی و... اشاره کرد [۲۳-۲۶]. بنابراین با بررسی‌های انجام شده روی معادلات نظری توزیع جرم ارائه شده توسط دیگران [۲۷-۳۱] و تشابه رفتار نتیجه شبیه‌سازی در این کار به نظر می‌رسد که معادله حاکم بر این لایه نشانی را می‌توان با یک تابع گاوسی نشان داد. دلیل این انتخاب، شعاعی بودن توزیع ضخامت فیلم بر روی زیر لایه بوده است، که به خوبی در شکل ۱۰-۶ دیده می‌شود.

تابع گاوس در دو بُعد به صورت زیر نوشته می‌شود [۳۲]:

$$z = z_0 + A \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x-x_c}{w_1}\right)^2 - \frac{1}{2}\left(\frac{y-y_c}{w_2}\right)^2\right] \quad (V)$$

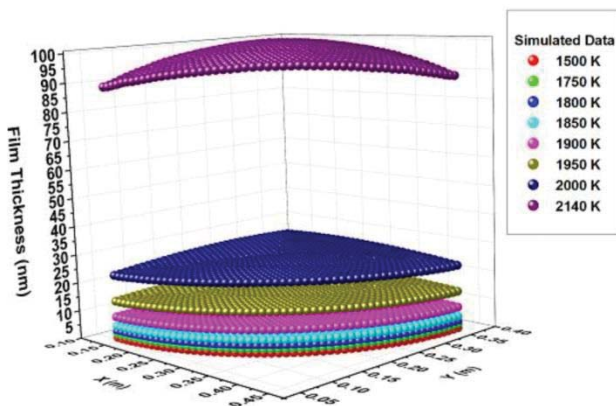
که در آن  $z_0$ ,  $A$ ,  $x_c$ ,  $y_c$  و  $w_1$  و  $w_2$  ثابت بوده و باید از طریق برازش محاسبه شوند.



شکل ۱۱- فشار بخار تعادلی طلا بر حسب دما

ضخامت لایه تشکیل شده بر روی زیرلایه در دماهای ۱۵۰۰ K تا ۲۱۴۰ K محاسبه گردیده است. در این بازه دمایی، رابطه بین دما و فشار بخار تعادلی طلا در شکل ۱۱ نشان داده شده است [۳۳].

در شبیه‌سازی‌های انجام شده، به ازای هر دما، فشار بخار با استفاده از نمودار شکل ۱۱ محاسبه و به منظور محاسبه ضخامت فیلم تشکیل شده در آن دما در شبیه‌سازی استفاده شده است. نتایج شبیه‌سازی ضخامت فیلم تشکیل شده بر روی زیرلایه در دماهای مختلف در شکل ۱۲ نشان داده شده است.



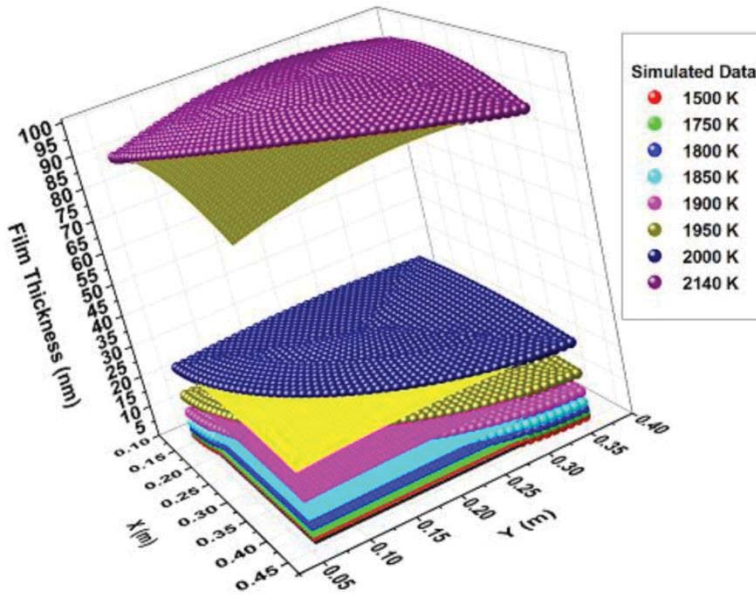
شکل ۱۲- توزیع ضخامت فیلم بر روی زیرلایه به ازای دماهای ۱۵۰۰ K تا ۲۱۴۰ K

بین داده‌های مربوط به ضخامت فیلم در دماهای مختلف چشمه و رابطه (۵) برازش صفحه‌ای صورت گرفته است. نتایج برازش برای دماهای مختلف به همراه ضرایب همبستگی و نتایج آزمون کای دو (chi-square)، که یک کمیت آماری است و نشان دهنده میزان خطای برازش بوده و هرچه مقدار آن به صفر نزدیکتر باشد، خطای رخ داده در برازش کمتر می‌باشد) در جدول ۲ نشان داده شده است.

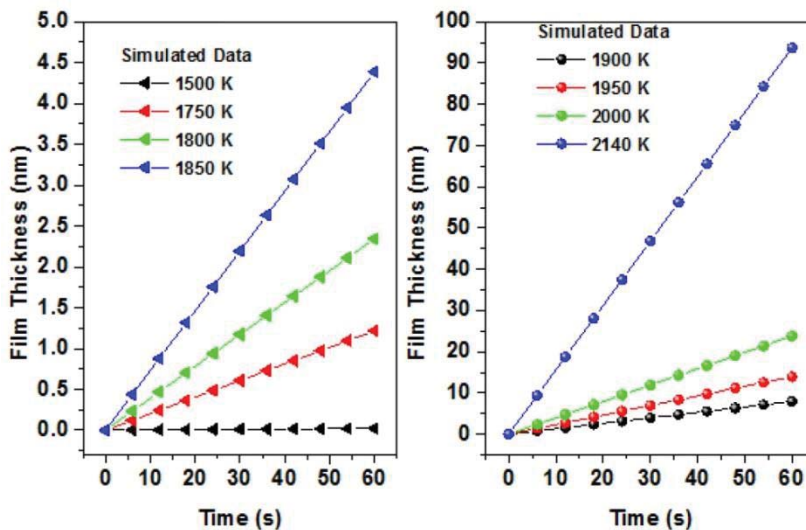
جدول ۲- نتایج برازش داده‌های مربوط به ضخامت فیلم با رابطه (۷)

| Temperature (K) | R <sup>2</sup> | Chi-Square                | Z <sub>0</sub> | A      | x <sub>c</sub> | W <sub>1</sub> | y <sub>c</sub> | W <sub>2</sub> |
|-----------------|----------------|---------------------------|----------------|--------|----------------|----------------|----------------|----------------|
| ۱۵۰۰            | ۰/۹۹۸۹۸        | ۴/۲۲۹ × ۱۰ <sup>-۱۰</sup> | ۰/۰۰۹          | ۰/۰۱۵  | ۰/۲۵۰          | ۰/۳۳۴          | ۰/۲۵۰          | ۰/۳۳۳          |
| ۱۷۵۰            | ۰/۹۹۸۹۸        | ۱/۲۲۱ × ۱۰ <sup>-۶</sup>  | ۰/۵۰۶          | ۰/۷۸۰  | ۰/۲۵۰          | ۰/۳۳۴          | ۰/۲۵۰          | ۰/۳۳۳          |
| ۱۸۰۰            | ۰/۹۹۸۹۸        | ۴/۵۳۳ × ۱۰ <sup>-۶</sup>  | ۰/۹۷۶          | ۱/۵۴۱  | ۰/۲۵۰          | ۰/۳۳۴          | ۰/۲۵۰          | ۰/۳۳۳          |
| ۱۸۵۰            | ۰/۹۹۸۹۸        | ۱/۵۸۸ × ۱۰ <sup>-۵</sup>  | ۱/۸۲۶          | ۲/۸۸۴  | ۰/۲۵۰          | ۰/۳۳۴          | ۰/۲۵۰          | ۰/۳۳۳          |
| ۱۹۰۰            | ۰/۹۹۸۹۸        | ۵/۲۰۱ × ۱۰ <sup>-۵</sup>  | ۳/۳۰۶          | ۵/۲۱۹  | ۰/۲۵۰          | ۰/۳۳۴          | ۰/۲۵۰          | ۰/۳۳۳          |
| ۱۹۵۰            | ۰/۹۹۸۹۸        | ۱/۶۰۲ × ۱۰ <sup>-۴</sup>  | ۵/۸۰۱          | ۹/۱۵۸  | ۰/۲۵۰          | ۰/۳۳۴          | ۰/۲۵۰          | ۰/۳۳۳          |
| ۲۰۰۰            | ۰/۹۹۸۹۸        | ۴/۶۶۲ × ۱۰ <sup>-۴</sup>  | ۹/۸۹۷          | ۱۵/۶۲۵ | ۰/۲۵۰          | ۰/۳۳۴          | ۰/۲۵۰          | ۰/۳۳۳          |
| ۲۱۴۰            | ۰/۹۹۸۹۸        | ۷/۲۳۱ × ۱۰ <sup>-۳</sup>  | ۳۸/۹۷۶         | ۶۱/۵۳۴ | ۰/۲۵۰          | ۰/۳۳۴          | ۰/۲۵۰          | ۰/۳۳۳          |

داده‌های شبیه‌سازی شده مربوط به ضخامت به همراه سطوح گاوسی محاسبه شده از طریق برازش صفحه‌ای در شکل ۱۳ نشان داده شده‌اند. همان‌طور که از این شکل و جدول ۲ مشاهده می‌شود، ضخامت فیلم نازک طلا به دلایلی که در بالا اشاره شد، با افزایش دمای چشمه زیاد می‌شود. دلیل این افزایش می‌تواند این موضوع باشد که متناسب با افزایش دمای چشمه، فشار بخار تعادلی طلا به مقدار چشمگیری افزایش می‌یابد؛ چنانچه به خوبی در شکل ۱۱ قابل مشاهده است. این افزایش فشار بخار باعث می‌شود تا شار بخار مولکولی طلای تبخیر شده از چشمه به سمت زیرلایه مطابق با رابطه (۶) افزایش یابد [۱]. این افزایش شار مولکولی افزایش ضخامت فیلم تشکیل شده بر روی زیرلایه را در پی دارد. برای مشاهده بهتر این موضوع نمودار ضخامت فیلم در یکی از نقاط واقع در مرکز زیر لایه بر حسب زمان برای دماهای مختلف محاسبه شده است (شکل ۱۴).



شکل ۱۳- داده‌های شبیه‌سازی شده ضخامت فیلم نازک طلا در دماهای مختلف و سطوح حاصل از برازش صفحه‌ای



شکل ۱۴- ضخامت فیلم نازک تشکیل شده در یک نقطه از مرکز زیر لایه پس از ۶۰s در دماهای مختلف



۲۲ / شبیه‌سازی و مطالعه اثر دمایی چشمه در لایه نشانی نانوفیلم‌های طلا به روش تبخیر حرارتی ...

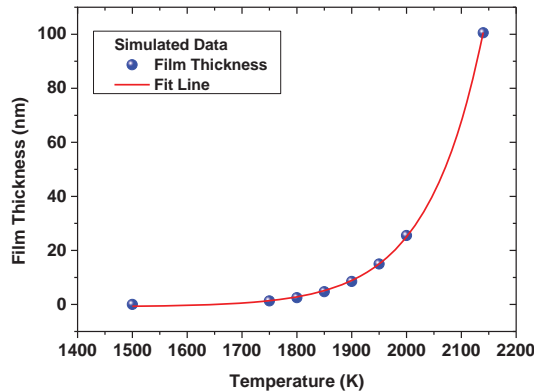
با استفاده از برازش غیر خطی، داده‌های مربوط به بیشینه ضخامت ایجاد شده بر روی زیر لایه در دماهای مختلف با رابطه زیر برازش داده شد:

$$t = Y_0 + A \exp\left(-\frac{T}{B}\right) \quad (8)$$

که در آن  $Y_0$ ،  $A$  و  $B$  ثابت بوده باید از طریق برازش محاسبه گردند. نتایج برازش صورت گرفته به همراه ضریب همبستگی برازش غیر خطی ( $R^2$ ) در جدول ۳ آمده است. همچنین شکل ۱۵ داده‌های شبیه‌سازی شده همراه با خط برازش را نشان می‌دهد. از رابطه (۸) می‌توان برای پیش‌بینی ضخامت فیلم‌های نازک طلا در دماهای مختلف چشمه استفاده نمود. البته لازم به ذکر است که چون دمایی چشمه تبخیر به شدت بر روی فشار بخار تعادلی تأثیر می‌گذارد، با توجه به شکل ۱۱ و نیز رابطه (۶)، اثر دمایی چشمه بر روی فشار بخار و در نتیجه بر روی شار مولکولی بخار ماده را نیز باید در نظر گرفت. این موضوع دقت نتایج را به مقدار قابل ملاحظه‌ای افزایش می‌دهد.

جدول ۳- نتایج برازش داده‌های شبیه‌سازی شده مربوط به ضخامت فیلم با رابطه (۸)

| مدل برازش                                   | $R^2$ | $Y_0$  | $A$                    | $B$      |
|---|-------|--------|------------------------|----------|
| $t = Y_0 + A \exp\left(-\frac{T}{B}\right)$ | ۰/۹۹۹ | -۰/۸۵۴ | $۸/۴۴۵ \times ۱۰^{-۸}$ | -۱۰۲/۳۵۸ |



شکل ۱۵- نتایج برازش غیر خطی داده‌های مربوط به بیشینه ضخامت فیلم بر حسب دما

#### ۴. نتیجه گیری

لایه نشانی فیلم‌های نازک طلا به روش تبخیر حرارتی با استفاده از نرم‌افزار Multiphysics 5.0 COMSOL شبیه‌سازی شد. اثر پدیده باز تبخیر از سطوح مجاور چشمه داغ درون محفظه لایه نشانی بررسی گردید. مشاهده شد که بین دمای چشمه با ضخامت فیلم نازک تشکیل شده بر روی زیر لایه رابطه مستقیم وجود دارد. رابطه (۸) به عنوان مدلی برای توصیف این وابستگی ضخامت به دمای چشمه از طریق برازش غیر خطی محاسبه گردید. همچنین معادله سطح فیلم نازک تشکیل شده بر روی زیر لایه در دماهای مختلف با استفاده از برازش صفحه ای محاسبه گردید. تغییرات ضخامت فیلم نازک بر حسب دما در این شبیه‌سازی به خوبی با رابطه (۶) که در بردارنده توصیف فیزیکی توزیع جرم روی فیلم است، مطابقت دارد. از مدل ارائه شده می‌توان برای توصیف و پیش بینی ضخامت فیلم‌های نازک طلا در دماهای مختلف چشمه بهره برد.

#### ۵. مراجع

- [1] M. Ohering, *Materials Science of Thin Films, Deposition and Structure*, (2002), 2nd Edition, New York, Academic Press.
- [2] K.E. Harris, V.V. Singh, A.H, King, "Grain rotation in thin films of gold". *Acta Mater*, **46** (1998) 2623-2633.
- [3] H.D. Espinosa, B.C. Prorok, "Size effects on the mechanical behavior of gold thin films". *Journal of Materials Science*, **38**. (2003) 4125 – 4128.
- [4] L. Hultman, A. Robertsson, H. T. G. Hentzell, I. Engström and P. A. Psaras. "Crystallization of amorphous silicon during thin-film gold reaction". *Journal of Applied Physics*, **62** (1987) 3647.
- [5] L. John "Janning Thin film surface orientation for liquid crystals". *Applied Physics Letters*, **21**(1972) 173.
- [6] D. Krause, C.W. Teplin, C.T. Rogers, "Optical surface second harmonic measurements of isotropic thin-film metals: Gold, silver, copper, aluminum, and tantalum". *Journal of Applied Physics*, **96** (2004) 3626.
- [7] C.H. Claassens, J.J. Terblans, M.J.H. Hoffman, H.C. Swart, "Kinetic Monte Carlo simulation of monolayer gold film growth on a graphite substrate" *Surf. Interface Anal*, **37**(2005) 1021–1026.

- [8] C.L. Kuo, P. Clancy, "MEAM molecular dynamics study of a gold thin film on a silicon substrate". *Surface Science*, **551**(2004) 39–58.
- [9] W.D. Luedtke, U. Landman,. "Metal-on-metal thin-film growth: Au/Ni(001) and Ni/Au(001)" *Physical Review B*, **44**.(1991) 5970.
- [10] H. Zheng. "Molecular Dynamic Simulation of Thin Film Growth Stress Evolution". *Theses and Dissertations*, (2011) Paper 1256.
- [11] A. Axelevitch, B. Apter, G. Golan, "Simulation and experimental investigation of optical transparency in gold island films". *Optics Express* **21** (2013)4126.
- [12] A. Musset, S. Dvorak, "Basic in Action" (1984). Chap 12, Butterworth.
- [13] S. Bosch,. "Computer-aided procedure for optimization of layer thickness uniformity in thermal evaporation physical vapor deposition chambers for lens coating". *J. Vac. Sci. Technol. A*,**10** (1992) 98.
- [14] H.A. Macleod, "Thin-Film Optical Filters". (1986), Macmillan Publishing Company, New York.
- [15] I. Fuke, V. Prabhu, S. Baek, "Computational Model for Predicting Coating Thickness in Electron Beam Physical Vapor Deposition". *J. Manufacturing Processes*, **7** (2005) 140.
- [16] J.B. Oliver, D. Talbot, "Optimization of Deposition Uniformity for Large-aperture National Ignition Facility Substrates in a Planetary Rotation System". *Appl. Opt.* **45**, (2006) 3097.
- [17] E. N. Kotlikov, V.N. Prokashv, V.A. Ivanov, A.N. Tropin, "Thickness Uniformity of Films Deposited on Rotating Substrates". *J. Opt. Technol.* **76** (2009) 100.
- [18] F. Wang, R. Crocker, R. Faber, "Large-area Uniformity in Evaporation Coating through a New Form of Substrate Motion". *Optical Interference Coatings* (2010).
- [19] D.J. Woodland, E. Mack Jr. "The Effect of Curvature of Surface on Surface Energy. Rate of Evaporation of Liquid Droplets. Thickness of Saturated Vapor Films". *J. Am. Chem. Soc.*, **55** (8), (1993)3149.
- [20] R. Schmidt, M. Parlak, A.W. Brinkman, "Control of the thickness distribution of evaporated functional electroceramic NTC thermistor thin films". *Journal of Materials Processing Technology*, **199**, (2008)412.

[21] O. Piot, A. Malaurie, J. Machet, "Experimental and theoretical studies of coating thickness distributions obtained from high rate electron beam evaporation sources". *Thin Solid Films*, 293(1997) 124.

[22] L.D. Hall "The Vapor Pressure of Gold and the Activities of Gold in Gold-Copper Solid Solutions". *J. Am. Chem. Soc.*, 73, (2)(1951) 757.

[23] F.H. Siyanaki, H.R. Dizaji, M.H. Ehsani, S. Khorramabadi, "The effect of substrate rotation rate on physical properties of cadmium telluride films prepared by a glancing angle deposition method" *Thin Solid Films* **577**(2015) 128–133.

[24] M. Panjan, "Influence of substrate rotation and target arrangement on the periodicity and uniformity of layered coatings", *Surface & Coatings Technology* **235** (2013) 32–44.

[25] A. Rauch, R.J. Mendelsberg, J.M. Sanders, A. Anders, *J. Appl. Phys.* **111** (2012) 083302.

[26] A. Anders, *Handbook of Plasma Immersion Ion Implantation and Deposition*, Wiley, 2000

[27] L. Holland; W. Steckelmacher; "the distribution of thin films condensed on surfaces by the vacuum evaporation method"; *Vacuum* **2**, (4) (1952) 346.

[28] C. C. Jaing; M. H. Cheng; J. S. Chen; C. H. Tsai; P. S. Yeh; J. S. Kao; H. Y. Hsiao; "Studying layer uniformity of sputter coatings by intensity distribution of plasma spectrum"; *Applied Surface Science* **169-170**, (2001) 649-653.

[29] J. Wang; J. Shao; K. Yi; Z. Fan; "Layer uniformity of glancing angle deposition"; *Vacuum* **78**, (2005) 107–111.

[30] M. Panjan; "Influence of substrate rotation and target arrangement on the periodicity and uniformity of layered coatings"; *Surface & Coatings Technology* **235**, (2013) 32–44.

[31] S. Todorova; D. Popov; E. Dimitrov; D. Dochev; M. Kanev; "Thickness uniformity of vacuum deposited layers"; *Vacuum* **38**, (1988) 869-872.

[32] Hagen N. Dereniak E.L. "Gaussian profile estimation in two dimensions," *Appl. Opt.* **47** (2008) 6842-6851.

[33] G.M. Sant'Anna, D.S. Roveri, H.H. Bertan, J.F. Mologni, E.S Braga, M.A.R Alves, *J. of Electrostatic.* 74 (2015) 96-101.