

جامعة قاصدي مرياح ورقلة

كلية الرياضيات وعلوم المادة

قسم الفيزياء



مذكرة

ماستر أكاديمي

مجال: علوم المادة

فرع: فيزياء

تخصص : فيزياء الإشعاعات، كاشف وبصريات إلكترونية

من إعداد : فايزة ساكري

بعنوان :

حساب توزيع سرعات الأيونات بإستعمال محاكاة مونتج كارلو عند التصادم مع الهدف في

تقنية الرش المهبطي في نظام كهربائي مستمر DC

نوقشت يوم: 2015/05/27

أمام لجنة المناقشة المكونة من:

رئيسا	جامعة ورقلة	أستاذ تعليم عال	عيادي كمال الدين
ممتحنا	جامعة ورقلة	أستاذة محاضرة(ب)	باباخني أم الخير
ممتحنا	جامعة ورقلة	أستاذ مساعد (أ)	بن زاهي يوسف
مشرف	جامعة ورقلة	أستاذ تعليم عال	فتحي خلفاوي

الموسم الجامعي: 2015/2014

الإهداء

إلى

أبويَّ الكريمين

أختي العزيزة

الأهل والأحباء

كل صديقاتي

كل من علمني حرفاً

أهدي ثمرة هذا الجهد

فايزة ساكري

# تشكرات

أتقدم أولاً وآخرًا بالشكر لله عز وجل الذي بنعمته تتم الصالحات، فله الحمد حتى يرضى وله الحمد إذا رضي وله الحمد بعد الرضا.

أتقدم بالامتنان إلى أستاذي خلفاوي فتحي، أستاذ تعليم عال بجامعة ورقلة، على منحي أفضل فرصة علمية بأن يكون مؤطرًا لي، وتحملني من ذلك عبئًا كبيرًا، وصبرًا طويلًا في مختلف مراحل إعداد هذه المذكرة.

كما لا أنسى شكري الجزيل لأعضاء لجنة المناقشة الأساتذة الأجلاء:

عيادي كمال الدين أستاذ تعليم عالي بجامعة ورقلة على تقبله رئاسة لجنة المناقشة.

بابا حني أم الخير أستاذ محاضر (ب) بجامعة ورقلة على تقبلها مناقشة هذه المذكرة.

أقدم تشكراتي العميقة للأستاذة غولي أنيسة على الجهد المبذول الذي قدمته من أجل المساعدة في الترجمة.

كما لا أنسى أن أنتقدم بالشكر الجزيل إلى كل الزميلات "راضية، زينب، نور، سعيدة، حليلة، يمينة، يسمينة، سليمة، كنزة"

أشكر كل القائمين على مخبر فيزياء الإشعاع والبلازما وفيزياء السطوح (LRPPS) على توفيرهم لنا كل الإمكانيات والظروف المتاحة لديهم.

و كل من ساهم ومدّ لنا يد العون في إنجاز هذا العمل المتواضع.

## فهرس المحتويات

i.....	الإهداء
ii.....	التشكرات

v.....	قائمة الأشكال.
vi.....	قائمة الجداول
1.....	مقدمة عامة

## الفصل الأول: عموميات حول تفاعل بلازما – سطح

3.....	I. البلازما
3.....	1.I. تعريف البلازما
3.....	2.I. بعض المقادير المهمة في البلازما
3.....	1.2.I. درجة التأين
3.....	2.2.I. تردد البلازما
5.....	3.2.I. كثافة الجسيمات ودوال التوزيع
6.....	4.2.I. طول دوباي
6.....	5.2.I. كمون البلازما والكمون العائم
6.....	6.2.I. نصف قطر الكرة الإلكترونية
6.....	7.2.I. نصف قطر الكرة الأيونية
7.....	8.2.I. المقطع الفعال $\sigma_{AB}$
7.....	9.2.I. متوسط المسار الحر
7.....	3.I. تصنيف البلازما
8.....	II. الرش المهبطي
9.....	1.II. مبدأ الرش المهبطي
11.....	2.II. أنواع الرش المهبطي
11.....	1.2.II. الرش المهبطي المستمر
12.....	2.2.II. الرش المهبطي المتناوب
12.....	3.2.II. الرش المهبطي للصمام الثلاثي
12.....	4.2.II. الرش المهبطي المغنطروني
12.....	III. كمونات التفاعل
13.....	1. III. مجموعات كمونات التفاعل
13.....	1.1.III. كمون كلوني (Potentiel Coulombiens) بفعل الشاشة

14.....	3.III أنواع كمونات الشاشة
17.....	4.III كمونات التجاذب
18.....	5.III الكمونات المشتركة
18.....	6.III كمونات تجريبية

### الفصل الثاني : المحاكاة العددية بطريقة مونتى كارلو

21.....	I مقدمة
21.....	II الوصف المادي للغرفة
21.....	1.II الظروف المادية في الغرفة
22.....	III الظاهرة الفيزيائية
23.....	IV الكمون المختار للتفاعل
24.....	V خلية المحاكاة العددية المقترحة
25.....	VI طريقة مونتى كارلو
26.....	VII برنامج محاكاة مونتى كارلو لتفاعل ( بلازما - سطح )

### الفصل الثالث : النتائج العددية ومناقشتها

31.....	I مقدمة
31.....	II توزيع السرعات
31.....	1. II توزيع السرعات لأيونات التسارع بالقرب من سطح الهدف
31.....	1.1. II توزيع سرعات الأيونات على بعد $5\text{\AA}$ من سطح الهدف
33.....	2.1. II توزيع سرعات الأيونات على بعد $0.5\text{\AA}$ من سطح الهدف
34.....	III توزيع سرعات ذرات السيليسيوم المقتلعة
36.....	IV مردود الرش
38.....	V معدل الأيونات المنعكسة ومعدل الأيونات الممتصة
41.....	الخلاصة العامة و الآفاق



## قائمة الأشكال والجداول

### قائمة الأشكال:

الفصل الأول	
8	شكل 1.1: نموذج مرئي يظهر أمثلة عن أنواع البلازما
9	شكل 2.1: مخطط تصنيف طرق توزيع الطبقات الرقيقة
10	شكل 3.1: رسم تخطيطي لمبدأ الرش المهبطي
11	شكل 4.1: رسم تخطيطي للرش المهبطي المستمر DC
13	شكل 5.1: كمون اولر
الفصل الثاني	
23	الشكل 1.2: يمثل نموذج من خلية السليسيوم si للمستوي (100)
23	الشكل 2.2: يبين السطح 1X2 (100) للسليسيوم وهو السطح الأكثر استقرار في الديناميك الحرارية
24	الشكل 3.2: كمون موليبير
24	الشكل 4.2 : خلية المحاكاة العددية لهذه الدراسة
29-28	الشكل 5.2: رسم تخطيطي يوضح خطوات المحاكاة بطريقة مونتي كارلو
الفصل الثالث	
31	الشكل 1.3: توزيع السرعات $F$ على بعد $5\text{Å}$ من سطح الهدف بدلالة $(w = Vi/V_0)$
32	الشكل 2.3: توزيع السرعات $F$ على بعد $5\text{Å}$ من سطح الهدف بدلالة $(w = Vi/V_0)$ عند التغيير في الجهد المطبق
33	الشكل 3.3: توزيع السرعات $F$ على بعد $0.5\text{Å}$ من سطح الهدف بدلالة $(w = 1000V)$
33	الشكل 4.3: توزيع السرعات $F$ على بعد $0.5\text{Å}$ من سطح الهدف بدلالة $(w)$ عند التغيير في الجهد المطبق
34	الشكل 5.3: توزيع السرعات $F$ لذرات السليسيوم المقترعة بدلالة $(w = 1000V)$
36	الشكل 6.3: توزيع السرعات $F$ لذرات السليسيوم المقترعة بدلالة $(w)$ عند التغيير في قيمة الجهد المطبق
37	الشكل 7.3: تغيرات السرعة المتوسطة للأيون عند الموضع $h_1$ عند التغيير في الجهد الكهربائي المطبق

37	الشكل 8.3: تغيرات السرعة المتوسطة للأيون عند الموضع $h_1$ و $h_0$ وذرات $S_i$ المقتلعة بدلالة الجهد الكهربائي المطبق
38	الشكل 9.3: الدائرة النسبية لنسبة الامتصاص والانعكاس عند تطبيق جهد $V= 1000\text{Volt}$

### قائمة الجداول:

<b>الفصل الأول</b>	
19	الجدول 1.1 يوضح معاملات الكمون لـ Stillinger-Weber
<b>الفصل الثالث</b>	
32	الجدول 1.3: يوضح تغيرات سرعة الأيون عند التغير في الجهد المطبق على بعد $5\text{\AA}$ من سطح الهدف
34	الجدول 2.3: يوضح تغيرات سرعة الأيون عند التغير في الجهد المطبق على بعد $0.5\text{\AA}$ من سطح الهدف
35	الجدول 3.3: يوضح تغيرات سرعة ذرات السيليسيوم عند التغير في الجهد المطبق
36	الجدول 4.3: يوضح تغير المردود عند التغير في الجهد الكهربائي المطبق
38	الجدول 5.3: يوضح تغيرات نسبة الامتصاص والانعكاس لأيون الأروغون عند التغير في الجهد المطبق



مقدمة عامة

## مقدمة عامة

تعددت استخدامات الطبقات الرقيقة في مختلف المجالات الصناعية، حيث تستخدم في صنع الخلايا الشمسية و الشاشات المسطحة و غير ذلك، و اتضح أن لها عدة طرق لتوضعها نذكر منها :

التوضع الكيميائي للطور البخاري (CVD : Chemical Vapor Deposition)

التوضع الفيزيائي للطور البخاري (PVD : Physical Vapor Deposition)

و أكثر الطرق شيوعا لتوضع الطبقات الرقيقة هي طريقة الرش المهبطي وهذا لسرعة توضعها و مردودها الكبير، و تعتمد أساسا على عملية التفريغ الكهربائي للغاز [1].

تقنيات المحاكاة الذرية مثل الديناميك الجزيئية (DM) ومونتي كارلو (MC) وتقريب التصادم الثنائي (BCA) لها إمكانية معتبرة في فهم ظاهرة تفاعل بلازما- سطح [2].

في عملنا هذا سنقوم بتحديد التوزيعات السرعات لأيونات  $A_r^+$  المستخدمة لتوضع طبقات السيليسيوم بطريقة الرش المهبطي، بمصدر جهد مستمر (DC). وقد انجزنا هذا العمل في ثلاث فصول :

الفصل الأول: نتطرق فيه لدراسة موجزة عن البلازما بشكل عام. تعريفها وبعض المفاهيم الفيزيائية لخصائصها كدرجة التأين، درجة الحرارة الإلكترونية، طول دوباي، وتردد التصادم، ثم نتطرق لطرق توضع الطبقات الرقيقة حيث سنتكلم بشكل مفصل عن طريقة الرش المهبطي بتطبيق تيار كهربائي مستمر. وستتطرق ايضا لذكر جميع أنواع كمونات التفاعل المتعلقة بتفاعل بلازما سطح.

الفصل الثاني: قدم في هذا الفصل شرح لتقنية المحاكاة العددية المعتمدة لدراسة هذه الظاهرة وهي محاكاة بطريقة مونتي كارلو.

الفصل الثالث : في هذا الفصل تعرض نتائج برنامج المحاكاة والتي حصلنا عليها من خلال ادخال قيم عشوائية لمواضع الأيونات في ثلاث أبعاد وبرنامج المحاكاة بدوره يحسب مواضع الأيونات عند مراحل مختلفة عند اتجاه الأيون نحو الهدف وكذلك يحسب في كل موضع الطاقة الكامنة والحركية والكلية. كل هذه المقادير تمكننا من احصاء السرعات في مراحل مختلفة. ثم نختم هذا البحث بمناقشة هذه النتائج.

## الفصل الأول:

عموميات حول تفاعل بلازما - سطح

## الفصل الأول: عموميات حول تفاعل بلازما - سطح

### I. البلازما:

#### 1.I. تعريف البلازما:

البلازما حالة رابعة للمادة، وهي عبارة عن وسط غازي متأين يحوي عددا كبيرا وكافيا من الجسيمات المشحونة سلبيا ( إلكترونات و أيونات سالبة) والجسيمات المشحونة إيجابياً (أيونات موجبة) والجسيمات المحايدة، هذا الوسط يجب نفسه إلكتروستاتيكية عند مسافة صغيرة [3].

#### 2.I. بعض المقادير المهمة في البلازما

##### 1.2.I. درجة التأين:

تمثل درجة التأين إحدى المعايير لتصنيف البلازما. ونعرف بأنها النسبة بين كثافة الجسيمات المشحونة (إلكترونات، أيونات) والكثافة الكلية للبلازما. تصاغ رياضيا بالمعادلة الآتية [3]:

$$\alpha = \frac{n_{e,i}}{n_{e,i} + n_N} \quad (1.1)$$

$n_{e,i}$  تمثل الكثافة العددية للجسيمات المشحونة (إلكترونات و أيونات).

$n_N$  تمثل الكثافة العددية للجسيمات المحايدة .

في الغازات ضعيفة التأين ( البلازما الباردة) تتراوح درجة التأين بين  $10^{-6}$  و  $10^{-4}$  وتحقق

$$\alpha < \alpha_0 \quad (2.1)$$

$\alpha_0$  تمثل القيمة الحرجة لدرجة التأين، بحيث تظهر أفعال البلازما.

#### 2.2.I. تردد البلازما:

إن للتفاعلات الجماعية دورا مهما في وجود اهتزازات في البلازما، فعند انزياح جسيماتها المشحونة سلباً (الإلكترونات مثلاً) من وضع توازنهما، تصبح الشحنة الموجبة هي الغالبة مما يؤدي إلى نشوء حقل كهربائي داخلي يحاول إعادة

هذه الجسيمات المشحونة إلى وضع توازنها، ولكن هذه الجسيمات تتجاوز هذا الوضع ، فيؤدي ذلك إلى حدوث اهتزازات في البلازما بتردد  $\omega_{pe}$  ، يدعى التردد الإلكتروني للبلازما يعطى بالعلاقة [4][5]:

$$\omega_{pe} = \sqrt{\frac{n_e e^2}{\epsilon_0 m_e}} \quad (3.1)$$

حيث:  $m_e$  كتلة الإلكترون.

$\epsilon_0$  السماحية.

$n_e$  : كثافة الإلكترونات.

أما في حالة انزياح جسيماتها المشحونة إيجابا (الأيونات مثلاً) من وضع توازنها، فيحدث نفس الشيء لكن بتردد  $\omega_{pi}$  يدعى التردد الأيوني للبلازما يعطى بالعلاقة:

$$\omega_{pi} = \sqrt{\frac{n_i Z^2 e^2}{\epsilon_0 m_i}} \quad (4.1)$$

حيث:  $m_i$  كتلة الأيون.

$n_i$  : كثافة الأيونات.

التردد الإلكتروني والأيوني المطبق من طرف المولد  $f$  يعطى بالعلاقة [6]:

$$f_{pe,i} = \frac{\omega_{pe,i}}{2\pi} \quad (5.1)$$

$$f_{pe} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{e^2 n_e}{\epsilon_0 m_e}} \quad (6.1)$$

$$f_{pi} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{e^2 n_i}{\epsilon_0 m_i}} \quad (7.1)$$

بتطبيق عددي نجد :

$$f_{pe} = 9000 \sqrt{n_e} \quad (8.1)$$

بحيث التردد  $f_{pe}$  ب Hz وكثافة الشحنة الإلكترونية  $n_e$  ب  $cm^{-3}$

بالمقارنة بين تردد البلازما والتردد المطبق من طرف المولد  $f$  نميز ثلاثة أنواع للبلازما [3].

- بلازما الترددات المنخفضة:  $f < f_i < f_{pe}$   
الإلكترونات والأيونات تتصرف وفق الحقل المطبق.
- بلازما ذات التردد المذياعي:  $f_{pi} < f < f_{pe}$   
الأيونات تنحبس داخل البلازما أما الإلكترونات فتتصرف وفق للحقل المطبق.  $1MHz \sim 0.5GHz$
- بلازما الترددات المرتفعة:  $f_{pi} < f_{pe} < f$   
الإلكترونات والأيونات لا تتصرف وفق الحقل المطبق.  $500MHz \sim GHz$

### 3.2.I. كثافة الجسيمات ودوال التوزيع:

كثافة البلازما  $N$  تمثل عدد الجسيمات في وحدة الحجم لكل صنف ( أيونات، إلكترونات، جسيمات حيادية)، ويخضع توزيعها لعبارات إحصائية تدعى دوال التوزيع التي تصف عدد الجسيمات في اللحظة  $t$  والموضع بين  $r$  و  $r+dr$ ، حيث:  $f$  دالة في الزمن والموضع والسرعة.

$$f \equiv f(t, r, v) \quad (9.1)$$

في الفيزياء الإحصاء نميز ثلاث دوال لتوزيع الجسيمات. توزيع فيرمي ديراك- توزيع بوز- انشتاين - توزيع ماكسويل بولتزمان [3].

إذا كان الغاز في حالة توازن ترموديناميكي وطاقة التفاعل بين الجسيمات مهملة أمام الطاقة الحركية فإن الجسيمات تخضع لتوزيع ماكسويل بولتزمان، التي تعبر عن التصادمات أثناء الحركة العشوائية وتكتب دالة توزيع السرعات في هذه الحالة كما يلي [7]:

$$f_m = \left( \frac{m}{2\pi K_B T} \right)^{3/2} \exp \left( \frac{-mv^2}{2K_B T} \right) \quad (10.1)$$

حيث:  $K_B$  ثابت بولتزمان،  $T$  درجة الحرارة،  $m$  كتلة الجسيم.

ويحقق هذا التوزيع في كامل الحجم الذي يشغله العلاقة الآتية:

$$\int_{R^3} f(v) dV = 1 \quad (11.1)$$

### 4.2.I. طول دوپاي:

يحدد طول دوپاي من الحقل الكهربائي الكولوني ناتج من الجسيمات الحيدية المشحونة من قبل مجموعة من الجسيمات المعاكسة في الحجم المحيط بها، ويعطى بالعلاقة الآتي [8]:

$$\lambda_D = \left( \frac{2\epsilon_0 K_B T_e}{n_e e^2} \right)^{1/2} \quad (12.1)$$

### 5.2.I. كمون البلازما والكمون العائم:

إن حيدية البلازما تؤدي إلى انعدام الحقل الكهربائي، مما يجعل الكمون الكهروستاتيكي لحوامل الشحنة ثابتا في قلب البلازما يسمى هذا الكمون بكمون البلازما.

أما جدران الغرفة المحيطة بالبلازما فيكون الكمون عندها موجبا، وبسبب الحركة الكبيرة للإلكترونات فإن عدد الإلكترونات الواردة للجدران يكون أكبر من عدد الأيونات، بتالي تشحن بكمون سالب بالنسبة لكمون البلازما، يسمى الكمون العائم. وهو كمون جاذب للأيونات، حيث تشكل بالقرب من الجدران منطقة الغمد الأيوني [3].

### 6.2.I. نصف قطر الكرة الإلكترونية:

وهو يميز البعد المتوسط بين إلكترونين، ويستخرج من [9]:

$$\frac{4}{3} \pi r_e^3 n_e = 1 \Rightarrow r_e = \sqrt[3]{\frac{3}{4\pi n_e}} \quad (13.1)$$

حيث:  $n_e$  الكثافة الإلكترونية.

### 7.2.I. نصف قطر الكرة الأيونية:

وهو يميز البعد المتوسط بين أيونين، ويستخرج من [10]:

$$\frac{4}{3} \pi r_i^3 n_i = 1 \Rightarrow r_i = \sqrt[3]{\frac{3}{4\pi n_i}} \quad (14.1)$$

حيث:  $n_i$  الكثافة الأيونية.

### 8.2.I. المقطع الفعال $\sigma_{AB}$ :

يمكن التعبير عن مدى تصادم جسيمين بمقدار المقطع الفعال للتصادم، وفي حالة تصادم جسيمين A و B يبلغ قطرها  $r_A$  و  $r_B$  على التوالي فإن المقطع الفعال حسب النظرية الحركية يساوي مساحة دائرة نصف قطرها  $(r_A + r_B)$  (القطر الفعال) [11]:

$$\sigma_{AB} = \pi(r_A + r_B)^2 \quad (15.1)$$

### 9.2.I. متوسط المسار الحر:

نعتبر حركة الإلكترون تمر بأهداف الذرات المفترضة ثابتة ويرمز للمسار الحر ب  $\lambda$  ويعطى بالعلاقة الآتية [12]:

$$\lambda = \frac{1}{n_g \sigma} \quad (16.1)$$

حيث:  $n_g$  : هي كثافة الغاز و  $\sigma$  : المقطع الفعال

### 3.I. تصنيف البلازما:

من خلال المقادير السابقة نستطيع تمييز وتصنيف أنواع البلازما. ( الشكل 1.1) نقترح تصنيف أشكال البلازما من خلال الوظيفة الحرارية للإلكترونات، ومن كثافة الجسيمات المشحونة. هذه التصنيفات تسمح بتعيين ثلاثة أنواع للبلازما : بلازما الحارة، بلازما الحرارية، بلازما الباردة [13].

✓ البلازما الحارة:

درجة حرارة هذا النوع من البلازما تكون من رتبة بعض آلاف الدرجات. معدل تأين هذه البلازما يكون يقارب 100%. نجد هذا النوع من البلازما في مجال الانصهار الحراري-النووي.

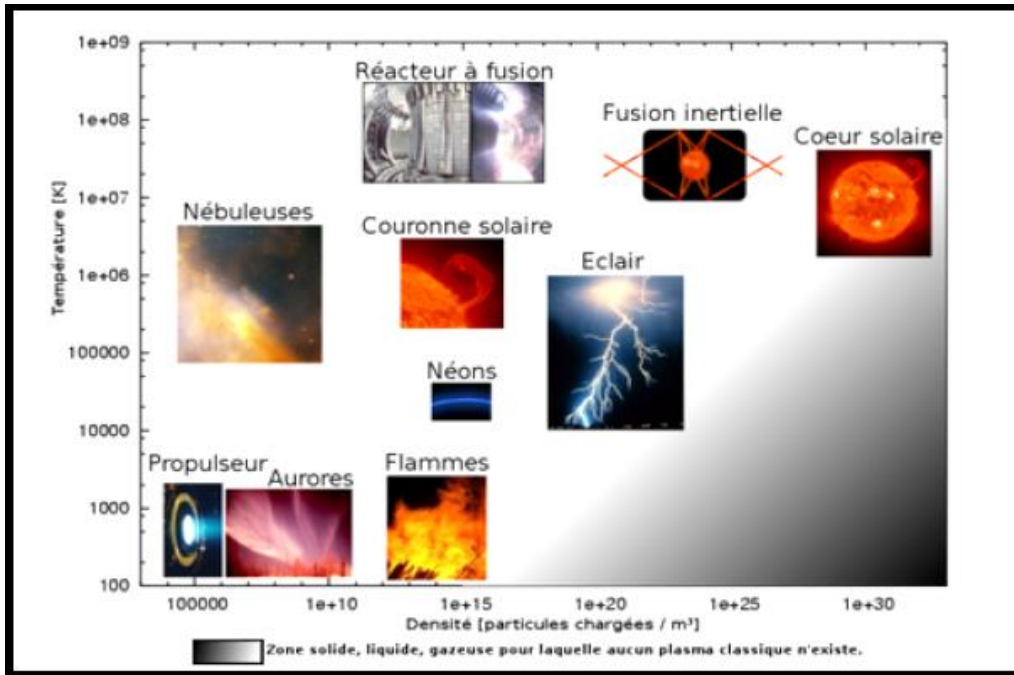


✓ البلازما الحرارية:

هذه البلازما تتميز بدرجة حرارة مساوية لكل الأنواع ( إلكترونات - أيونات - الجزيئات ) من بضعة آلاف الدرجات، من خلال كثافة طاقة عالية ومعدل تأين أقل من 100% . تطبيقاتها تتمثل في أقواس اللحام الكهربائية، وتوضع المواد ومعالجة السطوح

✓ البلازما الباردة:

في هذا النوع من البلازما درجة حرارة الأيونات قريبة من درجة حرارة الغرفة. وتكون أقل بكثير من الإلكترونات ( $10^4 - 10^5 K$ ) بالإضافة إلى ذلك ، كثافة الطاقة ومعدل التأين تكون أقل منها في حالة البلازما الحرارية. هذه البلازما تستخدم في الصناعة من أجل معالجة السطح، إزالة التلوث و الإضاءة .



شكل 1.1: نموذج مرئي يظهر أمثلة عن أنواع البلازما [5]

## II. الرش المهبطي:

يوجد عدة طرق لتوضع الطبقات الرقيقة وهي تنقسم إلى قسمين رئيسيين:

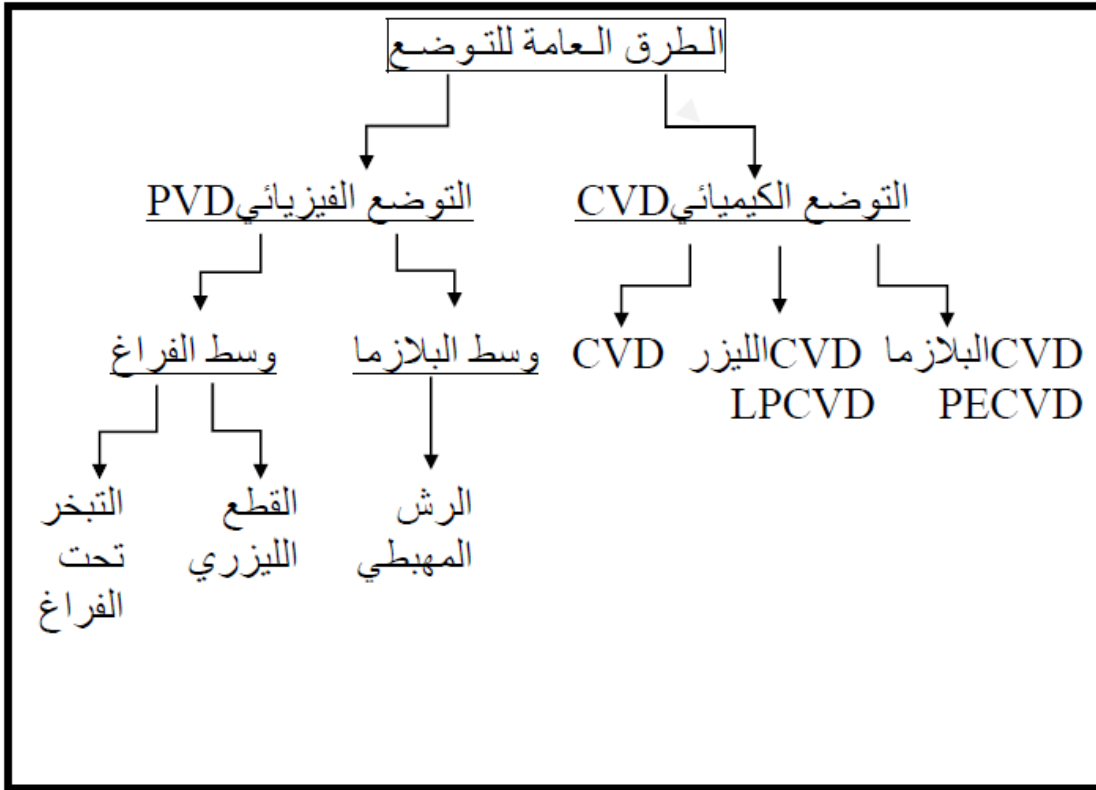
1- التوضع الكيميائي للأبخرة (Chemical Vapor Deposition) CVD

2- التوضع الفيزيائي للأبخرة (Physical Vapor Deposition) PVD

تتكون الطبقة الرقيقة في طرق التوضع الكيميائي CVD نتيجة تفاعلات كيميائية بين مكونات الغاز ووسط ركيزة تتوضع عليها الطبقة الرقيقة. تحت درجة حرارة كافية للتفاعل.

في طرق التوضع الفيزيائي PVD تتوضع الطبقة نتيجة تكاثف أبخرة المادة المراد ترسيبها والتي تسمى بالهدف ويتم ذلك بإحدى العمليتين : التبخير - الرش. [14]

المخطط أدناه يلخص أهم هذه الطرق وفقا لهاتين التقنيتين [3]

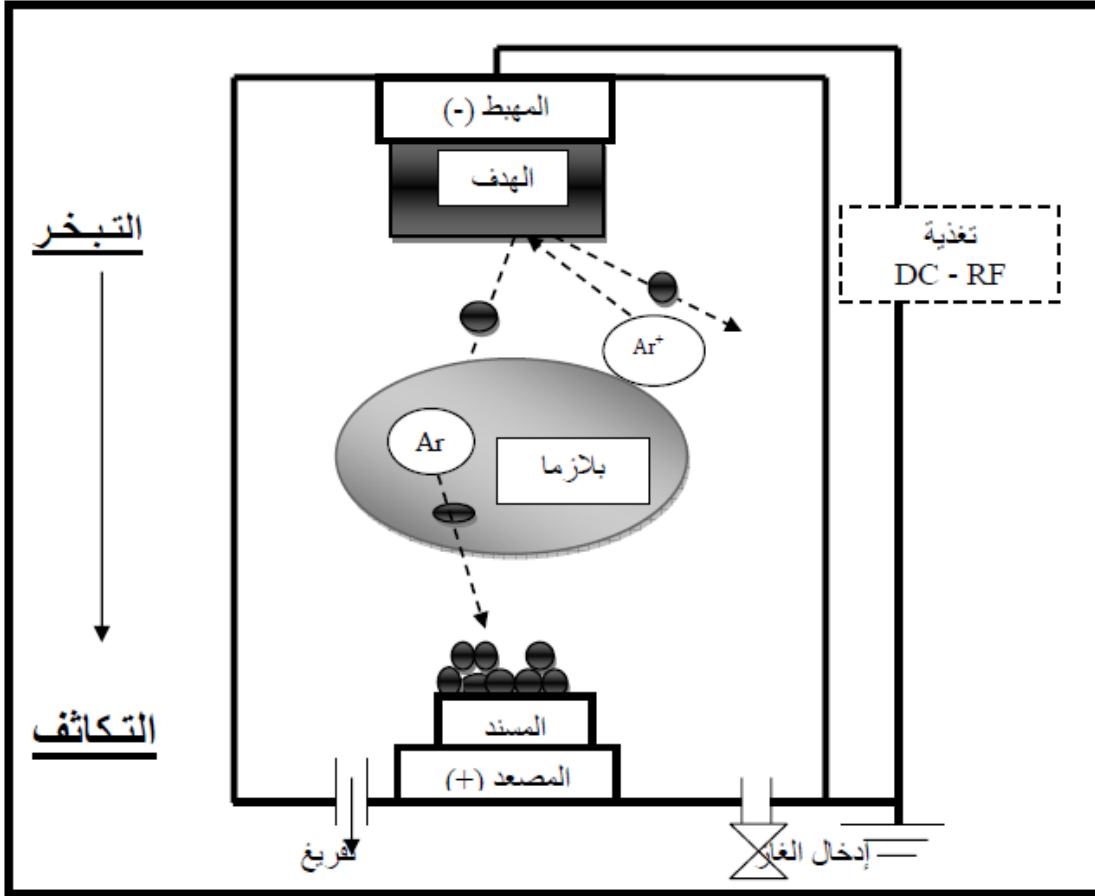


شكل 2.1: مخطط تصنيف طرق توضع الطبقات الرقيقة [3]

## 1.II. مبدأ الرش المهبطي:

اكتشفت ظاهرة الرش في سنة 1852 م من طرف Grove ، حيث رأى نشوء طبقة من المعدن المكون للقطين الكهربيين على جدران الأنبوب المفرغ ، ولأسباب تكنولوجية لم تستعمل لإنتاج الطبقات الرقيقة إلا بعد عام 1950 م [14] .

وتعتمد طريقة الرش المهبطي على اقتلاع الذرات من الهدف عن طريق تحويل كمية الحركة، وتتم هذه الظاهرة بواسطة أيونات  $(Ar^+)$  ناتجة عن تفريغ كهربائي، عملية التفريغ تتم داخل غاز  $(Ar^+)$  بواسطة قطبين، حيث يربط المهبط بالهدف والمصعد بالمسند [14].



شكل 3.1 : رسم تخطيطي لمبدأ الرش المهبطي [3]

تتميز ظاهرة الرش بمردود  $S$ ، ويعرف على أنه النسبة بين عدد الذرات المقتلعة  $N_p$  إلى عدد الأيونات الصادمة  $N^+$ .

ويعطى بالعلاقة الآتية [15]:

$$S = \frac{N_p}{N^+} \left( \frac{\text{عدد الذرات المقتلعة}}{\text{عدد الذرات الصادمة}} \right) \quad (17.1)$$

يتعلق هذا المردود بالمعاملات الآتية:

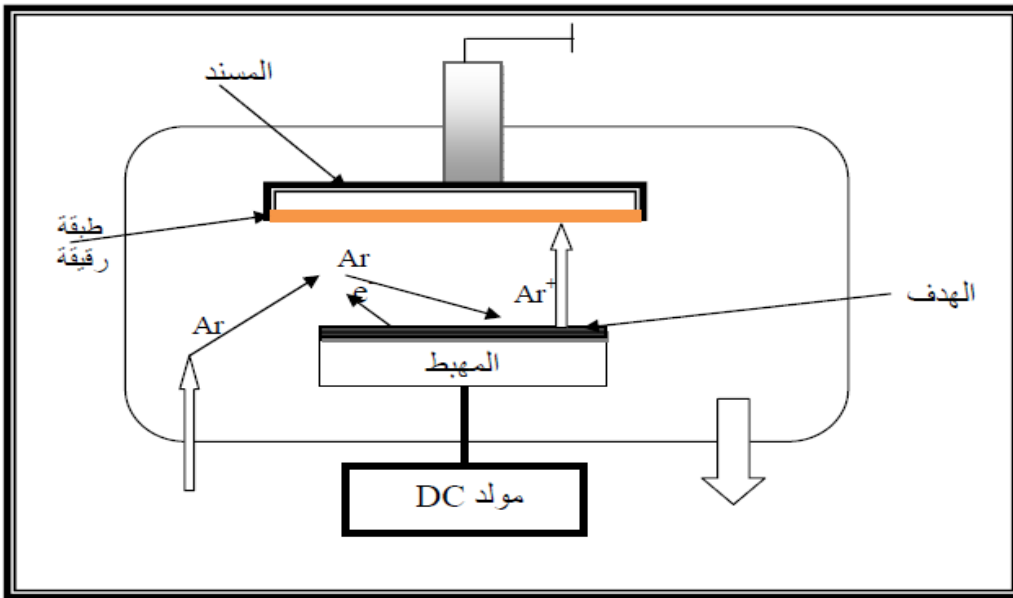
- ✓ طبيعة الهدف (المادة وحالة السطح)،
- ✓ طبيعة الأيونات الصادمة ( أيونات غاز نادر أو غاز فعال)،
- ✓ طاقة الأيونات الواردة،
- ✓ زاوية الورد.

## 2.II. أنواع الرش المهبطي:

يوجد عدة أنواع للرش المهبطي نذكرها:

### 1.2.II. الرش المهبطي المستمر:

الرش المهبطي المستمر يسمح فقط بتوضع المواد الناقلة أو نصف ناقلة ، حيث يتم تطبيق جهد سالب ومستمر على المهبط، مما يولد تفريغا كهربائيا (تأين الغاز) وظهور أيونات طاوقية ذات طاقة حركية عالية ، تتجه نحوى المهبط لإقتلاع ذراته وترسبها على المسند، مشكلة طبقة رقيقة [3].



شكل 4.1: رسم تخطيطي للرش المهبطي المستمر DC [3]

## II.2.2. الرش المهبطي المتناوب:

ظاهرة الرش المستمر غير صالحة عندما تكون مادة الهدف عازلة لأن الشحنات القادمة مع الأيونات لا يمكنها الانفصال. لذلك عند توضع مادة عازلة يمكن استخدام ، إما هدف نصف ناقل أو ناقل مع غاز فعال كيميائياً وتعرف هذه العملية بالرش المتفاعل، أو يمكن التخلص من ظاهرة التصاق الشحنات بالهدف العازل تماماً بتعويض مصدر الجهد المستمر بمصدر جهد متناوب، هذا الاستقطاب المتناوب للهدف يجعله تارة جاذب للأيونات خلال نصف الاهتزازة السالبة، إلى أن يشحن بكمون موجب مما يؤدي إلى توقف عملية جذب الأيونات وبالتالي عملية الرش ويجعله جاذب للإلكترونات تارة أخرى خلال نصف الاهتزازة الموجبة إلى أن تتعادل مع الشحنات الموجبة المتوضعة سابقاً على سطح الهدف [6].

## II.3.2. الرش المهبطي للصمام الثلاثي:

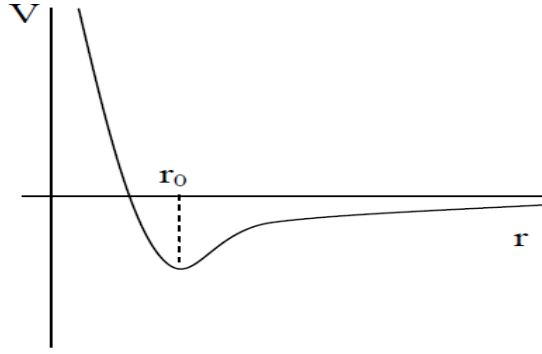
لتسهيل عملية إنتاج إلكترونات إضافية في البلازما يمكن استعمال سلك ساخن يلعب دور مصعد ثان يطبق عليه استقطاب سالب بالنسبة للبلازما، و يتم إخراج الإلكترونات الصادرة حرارياً للحفاظ على الضغط الضعيف بحصر سلك الرش بفرق جهد يتراوح في (10 و 50 فولط) [2].

## II.4.2. الرش المهبطي المغنطروني:

هو تطبيق مجال مغناطيسي موازي لسطح الهدف الذي يسمح بحصر مسارات الإلكترونات بجوار الهدف، و ب الآتي زيادة معدل تأين و سرعة التوضع [16].

## III. كمونات التفاعل:

التفاعلات المتبادلة بين الذرات في المواد يمكن حسابها ، عندما نعرف الشكل التحليلي لكمون التفاعل بينها حيث  $r_0$  هي مسافة التوازن بين الذرات ، وطاقة تجاذب الكمونات تضم الجزء الغالب، إذا كان  $r_0 < r$ ، وذلك بسبب الترابط الكيميائي ، وعندما تكون  $r_0 > r$  يكون هذا الجزء هو الغالب نظراً للتفاعل بين الطبقات العميقة (انظر الشكل 5.1) [2]:



شكل 5.1: كمون اولر

الطريقة الأكثر استعمالا لدراسة البنية البلورية تتركز على إهمال طاقة التجاذب وهو يعطي تقييم جد ضعيف للطاقة.

منحنى الكمون مساوي للفرع الغالب الذي عبارته التحليلية تكون بصفة عامة بالشكل الآتي :

$$U(r) = u_0 \exp\left(-\delta r / \rho\right) \quad (18.1)$$

حيث:  $\delta r$  هو الانحراف عن مسافة التوازن بين الذرات  $u_0$  في الشبكة البلورية المثالية.

$\rho$  و  $u_0$  : هي ثوابت مميزة للمادة .

هذا التقارب يقيد صلاحية الحسابات، إذا كانت الذرات المجاورة لديها عيوب نقطية تكون أكثر قرب من الوحدات

الأخرى، هذا في الشبكة المثالية. تصبح قوة التجاذب كبيرة عندما تكون طاقات النظام منخفضة جدا [17].

هذه الاعتبارات سمحت لنا بالوصول إلى تصنيف الكمونات المتفاعلة إلى عدة مجموعات .

### III.1.1. مجموعات كمونات التفاعل:

الكمونات المذكورة في هذا الفصل هي لتفاعلات الثنائية.

#### III.1.1.1. كمون كلوني (Potentiel Coulombiens) بفعل الشاشة:

هذه المجموعة تحتل مكانة مهمة جدا لأنه يتضمن أساسا على تواترات الكمونات المستعملة في المحاكاة العددية. و

يصف Tomas Fermi تفاعل Coulombiens كما هو موضع بالشكل الآتي [17]:

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi\left(\frac{r}{a}\right) \quad (19.1)$$

حيث  $Z_1 Z_2$  : هي الاعداد الذرية لذرتي التفاعل و  $e$  : هي شحنة الالكترون و  $r$  : هي المسافة بين الذرات

$\Phi(r)$  : وظيفة حجب الشاشة ، وتعطى بالتقريب الآتي:

$$\Phi\left(\frac{r}{a}\right) = \sum_{i=1}^n c_i \exp\left(-d_i \frac{r}{a}\right) ; \sum_{i=1}^n c_i = \Phi(0) = 1$$

$d_i$  و  $c_i$  هي ثوابت تحدد أنواع مختلفة من الكمونات.

و طول الشاشة يعتمد على  $Z_1$  و  $Z_2$  وتعبّر عليها بالشكل الآتي:

$$a = \left[ \frac{9\pi^2}{128} \right] a_B Z_{12}^{-\frac{1}{3}} = 0.8853 a_B Z_{12}^{-\frac{1}{3}}$$

حيث  $B$  : هي نصف قطر بور و  $Z_{12} = (Z_1^x + Z_2^x)^y$

في نموذج  $xy = 1$  Tomas-Fermi  $x = \frac{1}{2}$  ,  $y = 2$  Firzov ومنه يصبح طول الشاشة بالشكل

الآتي:

$$a_f = 0.88534 a_B \left( Z_1^{\frac{1}{2}} + Z_2^{\frac{1}{2}} \right)^{-\frac{2}{3}}$$

Lindhard يقترح  $x = \frac{2}{3}$  ,  $y = \frac{3}{2}$  :

$$a_{LS} = 0.88534 a_B \left( Z_1^{\frac{2}{3}} + Z_2^{\frac{2}{3}} \right)^{-\frac{1}{2}}$$

Robinson اقترح أن طول الشاشة في التفاعلات المتجانسة  $(Z_1 = Z_2)$  :  $a_R = 0.075 A^\circ$

### 2.III. أنواع كمونات الشاشة:

✓ **كمون Bohr**: وهو الأسهل ويستعمل للفصل بين الذرات على نطاق واسع ويعبر عليه بالعلاقة الآتية:

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \exp\left(\frac{-r}{a}\right) \quad (20.1)$$

من أجل  $a = \lambda_D$  يصبح الكمون كمون دوباي

✓ **كمون Molière**: له استخدام واسع في مجال المحاكاة العددية لدراسة تباطؤ الجسيمات السريعة وانتشار الصدمات في الشبكة... الخ ، و يتألف من ثلاث حدود، الثاني والثالث يكون أكبر من الأول. طول الشاشة الذي تم اختياره لهذا الكمون يكون غالبا من Firsov، ومع ذلك فان استخدام طول أو آخر ليس أكثر أهمية لتصحيحات المجالات تحت الطاقة الكمونية. هذا النوع من الكمون يكون صالح لتحديد التفاعلات المتجانسة أو غير المتجانسة حسب العلاقة الآتية:

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \left[ 0.35 e^{-0.3 \frac{r}{a_F}} + 0.55 e^{-1.2 \frac{r}{a_F}} + 0.1 e^{-6.0 \frac{r}{a_F}} \right] \quad (21.1)$$

✓ **كمون Kr-C** : أسسه Wilson يأخذ اعتبارات Günther المثبتة التي تستطيع ان تكون كمون جيد لأنه يتوافق مع كمون Molière ، في حالة طول الشاشة ل Firsov ( $a_F$ ) ، ومع Ziegler ، Biersak و Littmark تختصر ZBL إذا طول الشاشة يكون خاص عند  $ZBL(a_U)$ . شكل الكمون يكون كالتالي :

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \left[ 0.190945 e^{-0.278544 \frac{r}{a}} + 0.473674 e^{-0.637174 \frac{r}{a}} + 0.3353812 e^{-1.919249 \frac{r}{a}} \right] \quad (22.1)$$

اختيار طول شاشة معين ( $a_F, a_L, a_U$ ) او غيرها له اهمية كبيرة وخاصة في تصحيح المجالات تحت الطاقات الكمونية .

✓ **كمون ZBL**: يتميز بطول خاص لشاشة المعرفة ب:

$$a_u = 0.88534 a_B (Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})^{-1}$$

يعبر عليه بالشكل الآتي:

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \left[ 0.01018 e^{-0.2062 \frac{r}{a_U}} + 0.28022 e^{-0.4029 \frac{r}{a_U}} + 0.50986 e^{-0.94229 \frac{r}{a_U}} + 0.18175 e^{-3.1998 \frac{r}{a_U}} \right] \quad (23.1)$$



✓ كمون **Lenz et Jensen** : يطرح عبارتين لوظيفة الشاشة الواحدة مثبت من الكمونات المشار لها سابقا

شكلها كما يلي:

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \left[ 0.01018 e^{-0.206 \frac{r}{a}} + 0.2433 e^{-0.3876 \frac{r}{a}} + 0.7466 e^{-1.038 \frac{r}{a}} \right] \quad (24.1)$$

والشكل التحليلي الأخر:

$$\Phi(r) = [1 + y + 0.3344y^2 + 0.485y^3 + 0.002647y^4]e^{-y}; y = \sqrt{9.76x}; x = \frac{r}{a_{LS}}$$

❖ **Birsack et Ziegler** : باستخدام نموذج إحصائي

$$U(r) = (U_c + U_k) + (U_{ex} + U_{corr}) = Z^{7/3} U_1 + Z^{5/3} U_2 = \frac{Z^2 e^2}{r} (\Phi_1 - Z^{-2/3} \Phi_2)$$

$$\Phi(r) = \exp(-Ar + Br^{3/2} - Cr^2)$$

✓ كمون **Born-Mayer**: نموذج الكمونات للتناظر غير المحمي هو الأكثر الاستعمال من خلال معايير

التي لها قيم محددة لمختلف المواد ومن جهة أخرى نجد لنفس العنصر قيم كثيرة لـ  $(a_{BM} و A_{BM})$

$a_{BM} A_{BM}$  الذي يترك لك الاختيار الكافي على نطاق واسع [17]. هذا الكمون يكون صالح فقط للمسافات

الكبيرة ما بين الذرات.

عجز هذا الكمون لمسافة قصيرة يترك لنا البديل عند Molière في ترتيب المسافة الجد قريبة المجاورة عبارته:

$$U(r) = A_{BM} \exp\left(\frac{-r}{a_{BM}}\right) \quad (25.1)$$

للحصول على معاملات الكمون لـ Born-Mayer في حالة تفاعل غير متجانس يمكن تطبيق العلاقات :

$$A_{12} = \sqrt{A_{11} A_{22}} \quad , a_{12} = \frac{2a_{11} a_{22}}{a_{11} + a_{22}} \quad **$$

حيث  $a_{ij}, A_{ij}, a_{ii}$  هي المعايير الطاقوية واطوال الشاشات في حالة التفاعلات غير المتجانسة على التوالي.

تعتبر العبارة الأخير \*\* صالحة لكل كمونات وظيفية الشاشة كما في الشكل الآتي:

$$\Phi\left(\frac{r}{a}\right) = \sum_{i=1}^n c_i \exp\left(-d_i \frac{r}{a}\right) ; \sum_{i=1}^n c_i = \Phi(0) = 1$$

### III.3. كمونات التجاذب:

كما ذكرنا سابقا تصبح هذه الكمونات أساسية لأنها متعلقة بنظام ضعيف الطاقة و واسع التقسيمات بين الذرات،

كمونات التجاذب المتذبذبة المستعملة هي [2]:

✓ كمون Morse:

$$U(r) = D \exp[-2a(r - r_0)] - 2D \exp[-a(r - r_0)] \quad (26.1)$$

حيث  $r_0$  : مسافة التوازن الحراري (كمون الحد الأدنى ) ،  $D$  [ev] عمق البئر ،  $a$  [A<sup>-1</sup>] مسافة الانحراف عندما

يكون الكمون مساوي لصفر.

✓ كمون Lennard et Jones: يستعمل أحيانا في المحاكاة العددية ويأخذ الشكل الآتي:

$$U(r) = \lambda_n r^{-n} - \lambda_m r^{-m} \quad (27.1)$$

هذا متعلق بقوة Van Der Waals، بين جزء الغاز الخامل  $m = 6, n = 12$ ، وب الآتي نطلق عليه اسما

12 - 6. الكمون 4 - 10 الذي يكون دالة ل  $z$  ودوري وفقا ل  $x, y$  ويستخدم من اجل تحديد تفاعل غاز-

سطح عبارتها من الشكل الآتي:

$$U(z) = U_0(x, y) \left[ \left(\frac{1}{r}\right)^{10} - \left(\frac{1}{r}\right)^4 \right] \quad (28.1)$$

بصفة عامة حاجز الكمون  $U_0$  يكون من رتب 0.3 الى 1 Kcal/mol . والتغير الزمني له يكون حسب  $x, y$

ويكون بدون نتائج  $U_0 \gg KT$ .

### 4.III. الكمونات المشتركة:

نعلم بأن كمونات التجاذب ليست كلها صالحة لدراسة جميع المواد ، في هذا الصدد يحاول الحصول على الكمونات المناسبة ، باشتراك كمونات مختلفة العائلات كمثال : كمون Born-Mayer-Morse et Molière- Morse للنحاس [17].

### 5.III. كمونات تجريبية:

وهي مشتقة من جزء الطاقة الكلية لشبكة وفقا للثوابت المرنة والطاقة المتناسكة. Lam ورفقائه أسسوا نموذج تجريبي باعتمادهم على نموذج نظري مطور من طرف Dagens مرتبط بالمعادن النبيلة  $Cu, Ag, Au$  من الشكل الآتي [2].

$$U(r) = [1 - \exp(-a(r - n)^2)] \left[ C_0 + \frac{C_1 \cos x}{r^2} + \frac{S_1}{r^5} \sin x \right] + \sum_{i=0}^3 \frac{B_i \exp(-\beta r^2)}{r^{3-i}} + D \exp(-\gamma r) \quad (29.1)$$

كمثال اخر عن الكمون التجريبي يكون من *Weber* و *Stillinger* . هذا يكون كمون أصلي لوجهين من السليسيوم البلوري والسائل. وهو ينقسم إلى مخرجين:

❖ الكمون الذي يأخذ التفاعلات الثنائية شكله:

$$U(r) = \varepsilon A \left[ B \left( \frac{r}{\sigma} \right)^{-p} - 1 \right] \exp \left( \frac{1}{\frac{r}{\sigma} - a} \right) r < a \quad (30.1)$$

❖ الكمون الذي يأخذ التفاعلات الثلاثية شكله:

$$U(r_{ij}, r_{ik}) = \varepsilon \lambda \exp \left[ \frac{\gamma}{\frac{r_{ij}}{\sigma} - a} + \frac{\gamma}{\frac{r_{ik}}{\sigma} - a} \right] \left( \cos \theta_{ijk} + \frac{1}{3} \right)^2 H \left( a - \frac{r_{ik}}{\sigma} \right)$$

Heaviside دالة لـ  $H(X)$

$$H(X) = \begin{cases} 1 & \text{if } x \geq 0 \\ 0 & \text{if } x < 0 \end{cases}$$

معايير الكمون SW موضحة في الجدول الآتي:

المعامل	$\varepsilon(\text{eV})$	A	B	$\sigma(\text{A}^\circ)$	p	a	$\lambda$	$\gamma$
القيمة	2.16826	7.049556277	0.6022245584	2.0951	4	1.8	21	1.2

الجدول 1.1 يوضح معاملات الكمون لـ Stillingner-Weber [2]

الفصل الثاني:

المحاكاة العددية بطريقة

مونتي كارلو

## الفصل الثاني: المحاكاة العددية بطريقة مونت كارلو

### I. مقدمة:

المحاكاة عبارة على جسر بين التجارب والنظريات فالمحاكاة تمدنا بالمعلومات في المستوى الميكروسكوبي وهذا يساعد على فهم الخصائص الميكروسكوبية كما أنها تسمح من خلال التجارب الفكرية بأشياء يستحيل تنفيذها واقعا ولكن نتائجها تزيد من فهمنا للظاهرة بحيث يمكن تحقيقها.

هناك نوعان من التقنيات الرئيسية المستخدمة في مجال المحاكاة في الفيزياء الإحصائية للمواد المكثفة هي، الديناميك الجزيئية (DM) وطريقة مونت كارلو (MC). وتستند هذه المحاكاة على الوصف الجزيئي. من حيث المواقع وكميات من حركة مجموعة من الجزيئات التي تشكل النظام. [2]

في هذا الفصل سوف نحكي ظاهرة ترسب الطبقات الرقيقة من قبل الرش المهبطي، وهو قذف الهدف المتكون من السيليسيوم المتبلور بواسطة البلازما الباردة المتكونة من أيونات الأرجون . ولهذا الغاية فإننا نتعرف أولا على ظروف وبعض الثوابت المادية لغرفة الترسيب ووصف هذه الظاهرة الفيزيائية. نحدد النموذج الرياضي الذي يصف هذه العملية ويحدد طريقة المحاكاة المعتمدة لدراسة تطور هذه الظاهرة.

### II. الوصف المادي للغرفة:

#### II.1. الظروف المادية في الغرفة:

تتكون غرفة الرش من هدف من السيليسيوم ووسط من البلازما متكونة من الأرجون و الهيدروجين.

❖ الهدف:

للسيليسيوم تركيبية بلورية ماسية، هذه الصفة البلورية تعطي شبكة متماثلة ودورية تسمح بالتعرف على احداثيات الذرات في المصفوفة، مع العلم أن تراص البلورات في هذه الحالة هو من نوع AABBC. هذا النوع من التراص يمثل شبكة الماس متكونا من شبكتين CFC متداخلتين.

- المسافة بين لبوسي المكثفة هي  $h=2\text{cm}$
- درجة الحرارة تساوي تقريبا درجة حرارة الغرفة. يتم تبريد الهدف عن طريق دائرة المياه المغلقة لتصريف الحرارة الناتجة عن قصف الأيون.

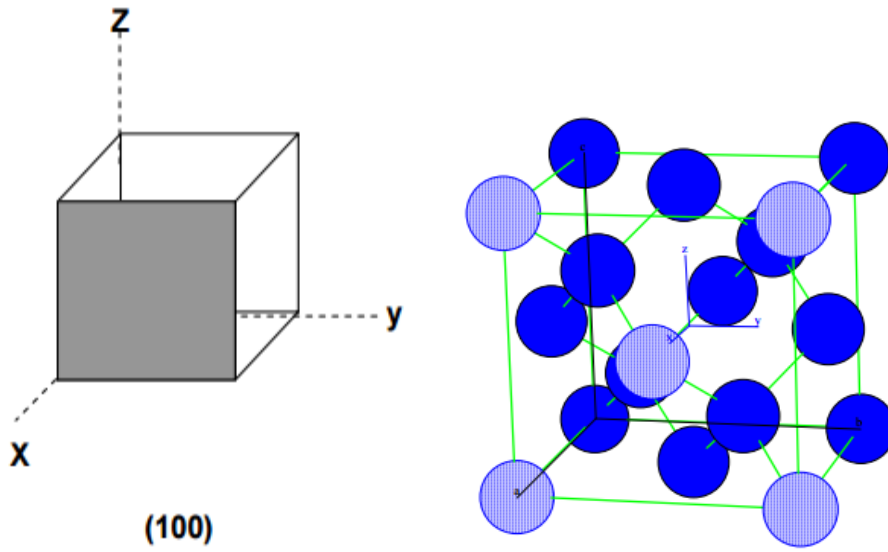
❖ البلازما:

- البلازما تتأين بواسطة التفريغ الكهربائي، تم التفريغ من قبل تيار كهربائي مستمر (DC). والجهد المطبق ما بين 0.5 و 1.5 KV. وتستخدم هذه الطاقة الكهربائية ليس فقط للتأين ولكن أيضا يمكن تسريع الأيونات باتجاه الهدف.
- يتم تشكيل البلازما من نوعين الهيدروجين والأرغون ويستخدم الهيدروجين لتحسين خصائص الفيلم المرسبة والأرغون هو عنصر أساسي للرش والضغط في الرش يتراوح ما بين 7 و 50 ميلي بار. وهو يعمل على معدل ترسيب الرش المهبطي. في دراستنا نهتم فقط بأيونات الأرغون التي ستقصف الهدف.

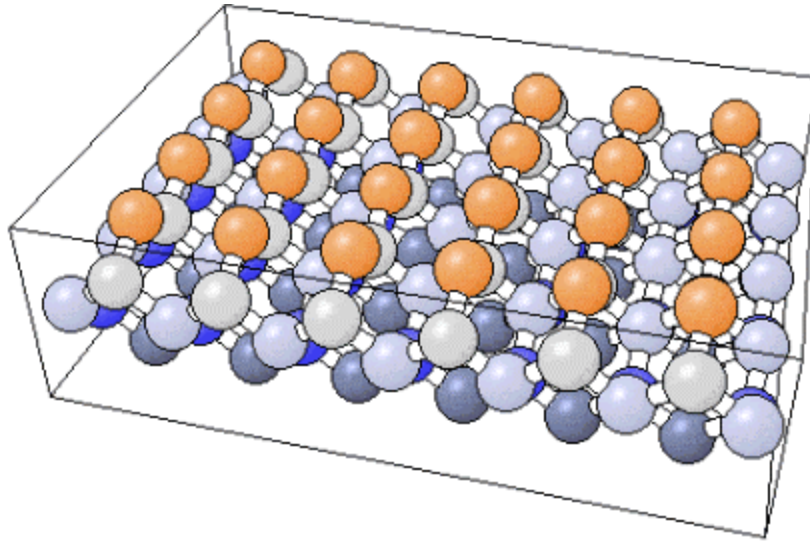
III. الظاهرة الفيزيائية:

المقصود بما الاصطدامات الثنائية بين أيونات الارغون ( $A_r^+$ ) للبلازما الباردة والذرات المكونة لهدف السيليسيوم المتبلور.

نوع البلازما المعتبرة هي خارج التوازن الترموديناميكي ذو الكثافة الضعيفة (ضغطه من رتبة الملي بار) بارد ( $T_{\text{Macroscopique}} \approx T_a$ ) مكونة من عنصرين الارغون ( $Ar$ ) والهيدروجين ( $H$ ). الارغون يعمل على قصف الهدف والهيدروجين يحسن مميزات الطبقات الرقيقة. الهدف المعتبر في هذه الدراسة هو من السيليسيوم وحيد البلورة. نأخذ المستوي (100) في هذه الدراسة. (أنظر الشكلين (2.1) (2.2)).



شكل 1.2: يمثل نموذج من خلية السليسيوم si للمستوي (100)



الشكل 2.2 : يبين السطح 1X2 (100) للسليسيوم وهو السطح الأكثر استقراراً في الديناميك الحرارية

#### IV. الكمون المختار للتفاعل:

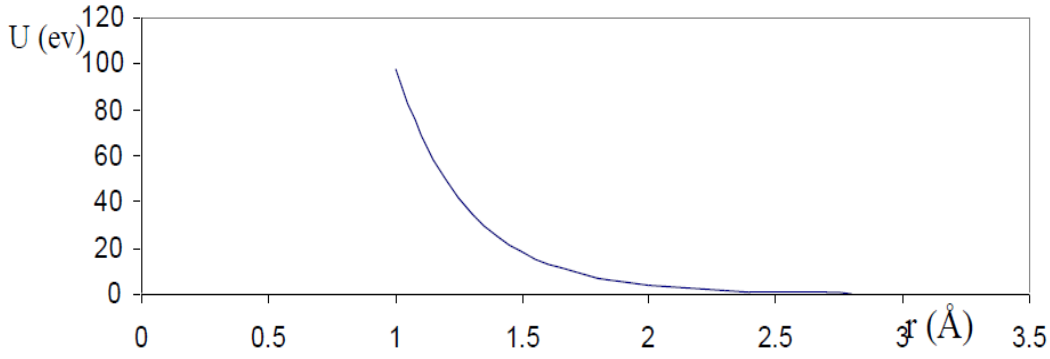
الاصطدام بين الايون المتفاعل ( $Ar^+$ ) وذرة الاولية للهدف ( $Si$ ) (التفاعل غير متجانس). نستعمل

كمون Molière - Firsov. (الشكل 3.2) هو من نوع التنافر ويأخذ الشكل:

$$U(r) = \frac{A}{r} \left[ 0.35e^{-0.3\frac{r}{B}} + 0.55e^{-1.2\frac{r}{B}} + 0.1e^{-6\frac{r}{B}} \right], r < r_c \quad (1.2)$$



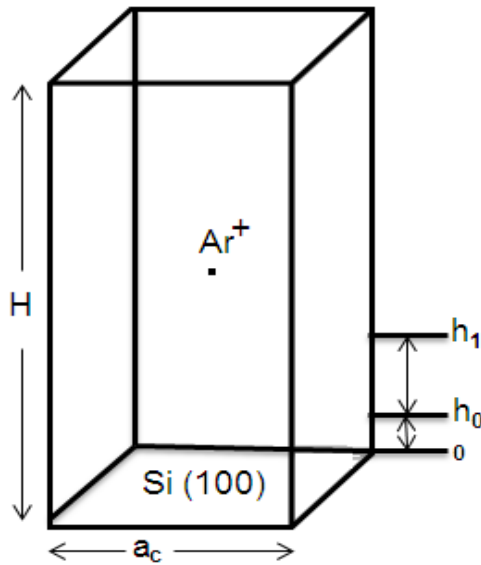
حيث  $r_c$  هي نصف قطر الانكباح ، و  $A$  و  $B$  هما ثابتان يتعلقان بنوع المادة. في حالة التفاعل بين السليسيوم والأرغون  $B = 0.1172A^\circ$  ،  $A = 3628.8 \text{ eV}/\text{\AA}$



شكل 3.2 : كمون موليير [2]

### V. خلية المحاكاة العددية المقترحة:

لخلية المحاكاة المعتمدة في هذه الدراسة موضحة في الشكل 4.2، وهي عبارة عن متوازي مستطيلات قاعدته مكونة من ذرات السليسيوم وعلى مستوى الحجم يوجد أيونات الأرغون.



الشكل 4.2: خلية المحاكاة العددية لهذه الدراسة

$h_1$  بعد قبل تأثير كمون موليير ويساوي  $5\text{\AA}$

$h_0$  أقرب بعد من سطح السيلسيوم

H البعد بين المصعد والمهبط

$a_c$  المسافة بين ذرات السيلسيوم

المواضع الأولية لأيونات البلازما تكون عشوائية . ويمكن الحصول على الإحداثيات الأولية لهذه الأيونات (x,y,z) باستخدام مولد RAN ( عدد عشوائي محدد بين 0 و 1). الإحداثيات تكون كالاتي:

$$x_i(0) = a_c \text{RAN} \quad (2.2)$$

$$y_i(0) = a_c \text{RAN} \quad (3.2)$$

$$z_i(0) = (H - h_1) \text{RAN} \quad (4.2)$$

وفي هذه الدراسة السرعات الابتدائية معدومة وهذا راجع لإهمال الطاقة الحركية الحرارية

$$v_{iz}(0) = 0 \quad , \quad v_{iy}(0) = 0 \quad , \quad v_{ix}(0) = 0$$

## VI. طريقة مونت كارلو:

طريقة مونت كارلو هي طريقة لحل المشاكل المختلفة في الرياضيات الحسابية عن طريق بناء عملية عشوائية لكل مشكلة تكون لها متغيرات تساوي الكميات المطلوبة في المشكلة. ويتم تحديد المجاهيل تقريباً عن طريق عمل ملاحظات على العملية العشوائية وحساب الخصائص الإحصائية والتي تتساوى تقريباً مع المتغيرات المطلوبة [18]. و تتم معالجة المشاكل الفيزيائية الإحصائية بطريقة مونت كارلو على ثلاث مراحل [19]:

(1) تعريف الظاهرة الفيزيائية

(2) تعريف النموذج الرياضي

(3) اعداد نموذج المحاكاة

- اعداد نموذج من اجل حالة بسيطة للتحقق من صحة النموذج

- تعميم النموذج من اجل حالات معقدة

- حساب وتحليل النتائج

و هناك عدة برامج لمحاكاة الأنظمة الجزيئية بطريقة مونتى كارلو ،قد تختلف في تفاصيلها ولكن كلها تعتمد على مبدأ الاحتمالات و عادة ما تكون هذه البرامج طويلة نوعا ما ،تهدف هذه البرامج إلى إيجاد خصائص التوازن للعديد من الأنظمة الجزيئية بطريقة عددية ،وتعتبر خوارزمية Nicolas Metropolis أول خوارزمية بطريقة مونتى كارلو استخدمت فيها الأعداد العشوائية وذلك سنة 1953.

## VII . برنامج محاكاة مونتى كارلو لتفاعل ( بلازما - سطح ):

في هذه المذكرة تم إنجاز برنامج عددي بلغة الفورتران (77) لمحاكاة مونتى كارلو لتفاعل ( بلازما-سطح) ،وقد أجرينا المحاكاة على سطح (100) للسيلسيوم. وهذه الدراسة تهدف إلى بناء نموذج يدرس حساب توزيع السرعات للأيونات المتجهة بإتجاه الهدف. والخطوات المتبعة في هذا البرنامج موضحة كالآتي:

أولاً : نحدد عدد ذرات بلورة السيلكون ذات الشكل المكعب وعدد أيونات الأرجون والجهد المطبق. ودرجة الحرارة التي نجري عندها المحاكاة مهملة والسبب موضح في العلاقات الآتية:

$$\Delta E_c = E_{cf} - E_{ci} = \int |Eq_i| dz = q_i \int |E| dz$$

$$\Delta E_c = q \|E\| (z_0 - h) \quad (5.2)$$

$$E_{cthe} = \frac{3}{2} K_B T \quad (6.2)$$

حيث  $\Delta E_c$ : الطاقة الحركية الناتجة عن الحقل الكهربائي ، و  $E_{cthe}$ : الطاقة الحرارية.  $E$  طاقة الجهد المطبق و  $q$  شحنة الأيون و  $T$  درجة الحرارة تساوي  $T = 27^\circ C$  و  $H$  هو البعد بين المصعد و المهبط و  $z_0$  الموضع العشوائي الابتدائي في البعد  $Z$  .

عند مقارنة الطاقة الحركية الناتجة عن الحقل الكهربائي بالطاقة الحرارية وجدنا أن  $\Delta E_c \gg E_{cthe}$  و لذلك أهملنا الطاقة الحركية الحرارية في هذه الدراسة.

ثانياً : نحدد المواضع العشوائية الابتدائية لأيون الأرجون في ثلاثة أبعاد  $X, Y, Z$ .

ثالثاً : يحسب البرنامج الطاقة الناتجة عن الجهد المطبق والطاقة الحركية لأيون الأرجون والسرعات القادم بها الأيون في ثلاث أبعاد  $X, Y, Z$  على بعد  $5\text{\AA}$  من السطح ( قبل تأثير كمون موليير )، واحصاء سرعات الأيونات عند هذا البعد.

رابعاً : قمنا بتحديد مواضع عشوائية  $I_i$  لأيون الأرجون بالقرب من سطح الهدف بين الموضع الحالي  $r_f$  و  $0.5\text{\AA}$ . البعد  $0.5$  هو عبارة على قيمة تقريبية لنصف قطر أيون الأرجون وذلك لتأكيد وصول الأيون لسطح الهدف.

خامساً : حساب كمون موليير المحدد لهذا التفاعل ( بلازما - سطح). وحساب هذا الكمون قمنا بوضع الشروط اللازمة لتحديد المسافة الأقرب بين أيون الأرجون وذرة السيليسيوم.

سادساً : حساب الطاقة الحركية النهائية لأيون الأرجون وهي تحسب بالعلاقة الآتية:

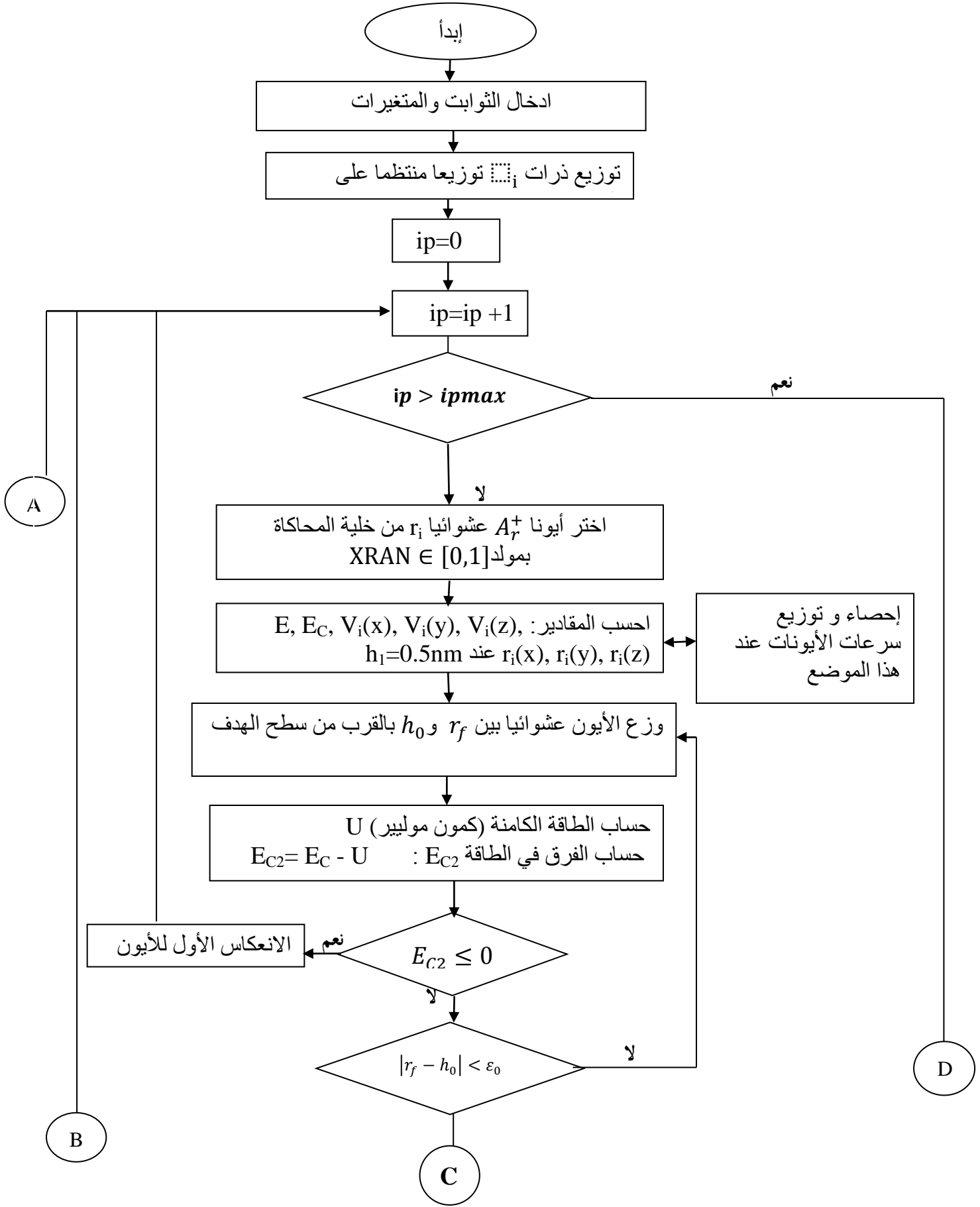
$$E_{C_2} = \Delta E_c - E_p \quad (7.2)$$

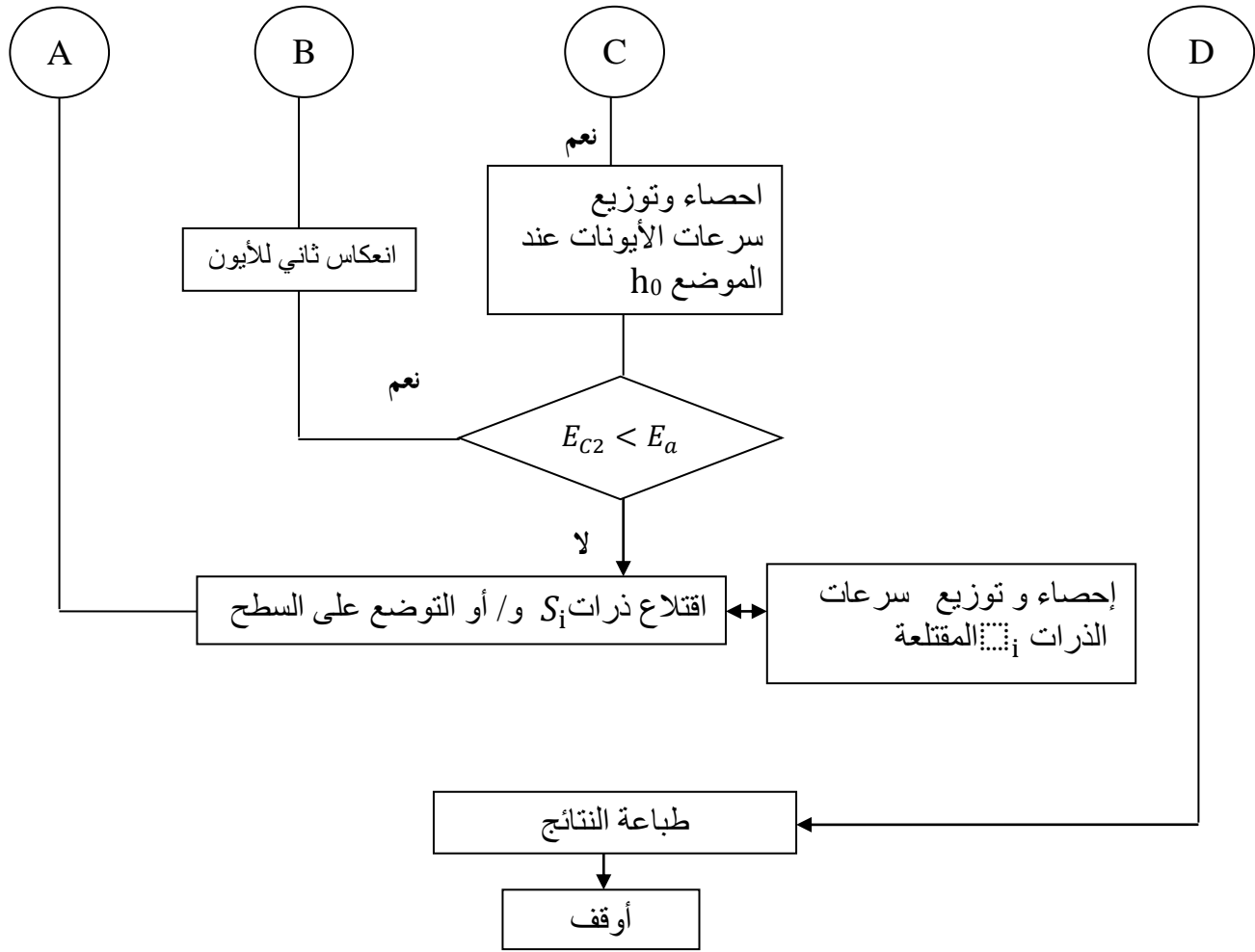
حيث  $E_p$ : هي الطاقة الناتجة عن كمون موليير

سابعاً: إذا كانت  $C_2$  سالبة فإن الأيون ينعكس. أما إذا كانت موجبة نقوم بدراسة البعد  $|r_f - 0.5|$  إذا كان أكبر من 0 فإنه يعيد اختيار أيون عشوائي  $I_i$  بين  $r_f$  و  $0.5$

ثامناً: إذا كان البعد  $|r_f - 0.5|$  أقل من  $\epsilon_0$  هنا قارنا الطاقة الحركية بطاقة الربط لذرة السيليسيوم. وحساب نسبة الأيونات التي لها طاقة كافية لاقتلاع ذرات السيليسيوم، والتي لها طاقة أقل فإنها ستنعكس.

بتكرار الخطوات من 2-8 نحصل على حالات مختلفة لمسارات وسرعات الأيونات والذرات المقتلعة، ومن هذه المعطيات يمكن حساب توزيع السرعات للأيونات في مختلف المواضع خلال تنقله باتجاه الهدف وأيضاً حساب توزيع السرعات للذرات المقتلعة. وهذه الخطوات ملخصة في (الشكل 5.2) :





الشكل 5.2: رسم تخطيطي يوضح خطوات المحاكاة بطريقة مونت كارلو

الفصل الثالث:  
النتائج العددية ومناقشتها

## الفصل الثالث: النتائج العددية ومناقشتها

### I. مقدمة :

قمنا بدراسة قصف هدف السليكون بأيونات الأرجون من البلازما الباردة، لإنتاج تيار من جسيمات الرش المستخدمة في ترسيب الطبقات الرقيقة. أدى إلى مجموعة من النتائج تم الحصول على هذه النتائج عن طريق تغير في جهد المولد الكهربائي. وقد استخدمنا في هذه الدراسة نوع السطح (100) للهدف.

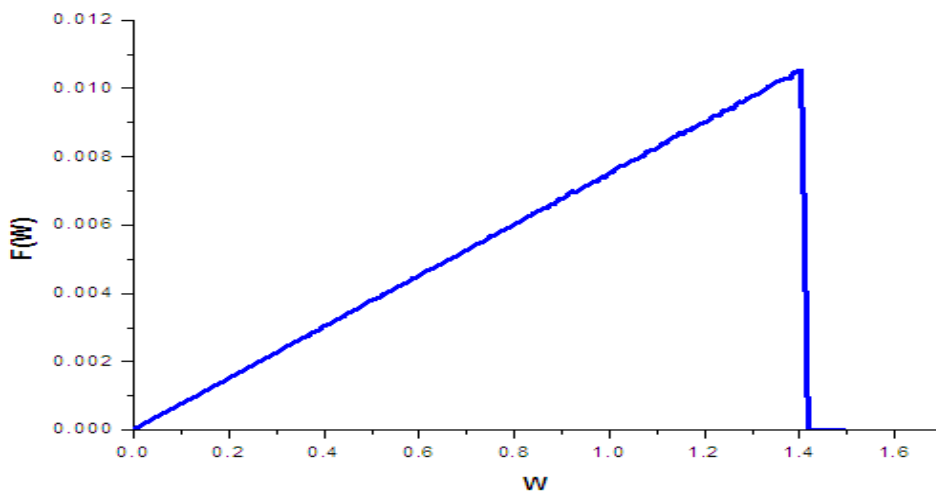
### II. توزيع السرعات:

من خلال البرنامج الذي صممناه يمكن حساب توزيع السرعات لأيونات المسرعة بإتجاه الهدف. توزيع السرعات للذرات المقذوفة وتوزيع السرعات لأيون الحادث في مرحلتين من المسار. النتائج المتحصل عليها موضحة فيما يلي:

#### II.1. توزيع السرعات لأيونات التسارع بالقرب من سطح الهدف:

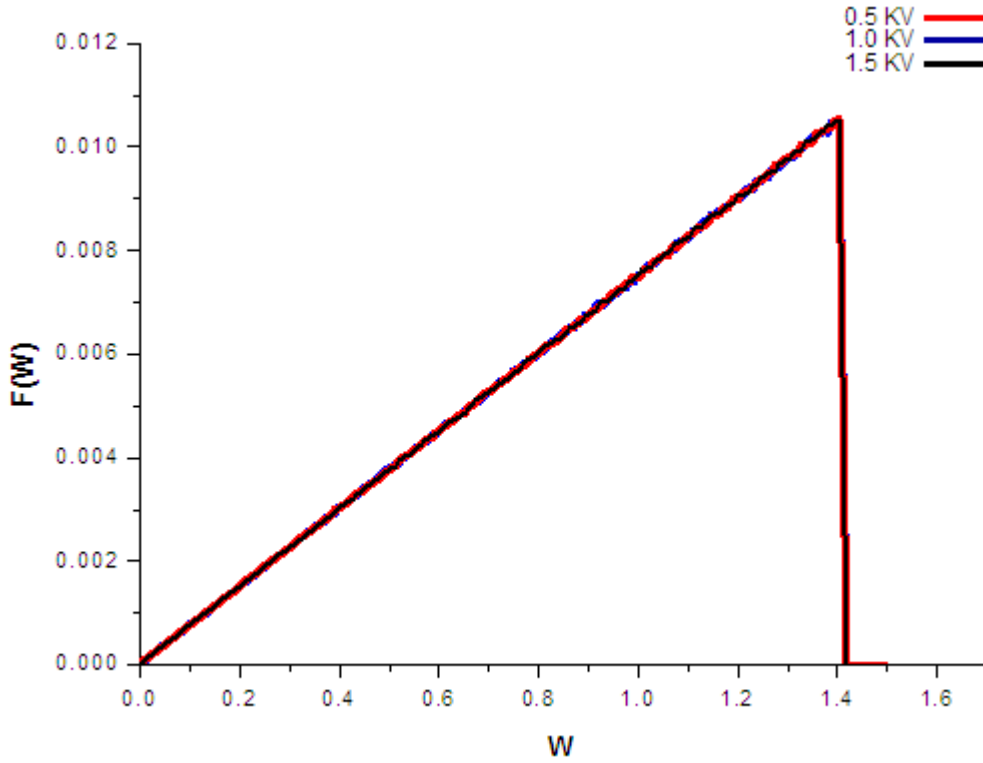
الطريقة العشوائية لمونتي كارلو، وكذلك مولد الرقم العشوائي يستخدم لرصد الحركة أيون التسارع، يمكنها حساب توزيع سرعات الجسيمات الحادثة. ولها دقة مقبولة لإجراء الإحصاء (الشكل 1.1) وهو لا ينتمي إلى مجموعة الأشكال الطبيعية (gaussienne أو maxwellienne) ويمكن أن ننسب هذا إلى عدم التوازن الحراري لهذا الوسط.

#### II.1.1. توزيع سرعات الأيونات على بعد 5Å من سطح الهدف



الشكل 1.3: توزيع السرعات  $F$  على بعد 5Å من سطح الهدف بدلالة ( $w = Vi/V_0$ )





الشكل 2.3: توزيع السرعات  $F$  على بعد  $5\text{\AA}$  من سطح الهدف بدلالة  $(w = Vi/V_0)$  عند التغيير في

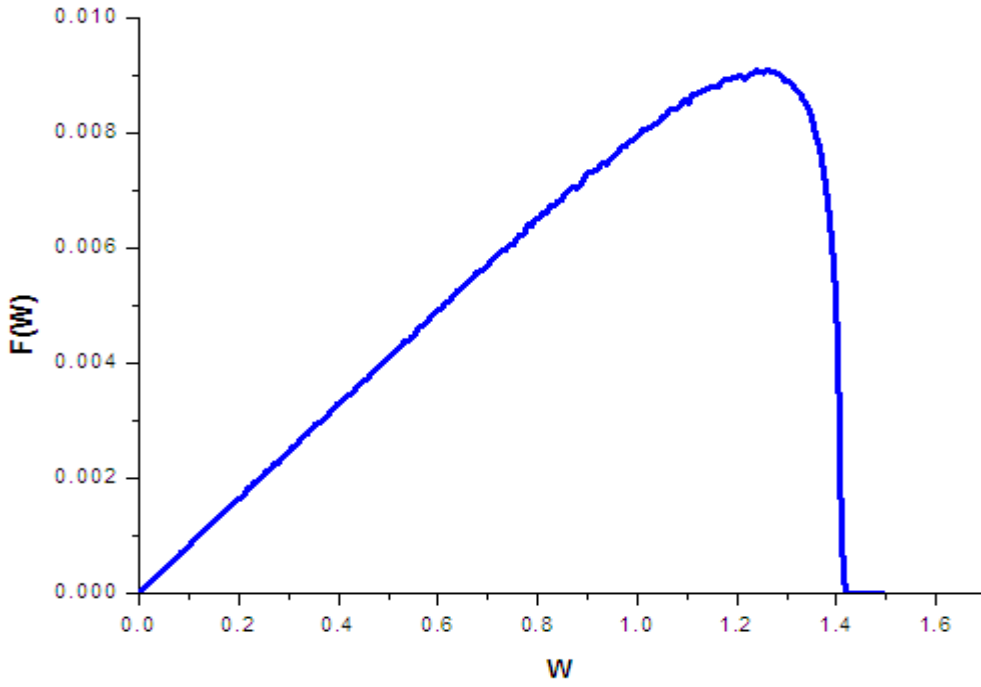
الجهد المطبق

V (kV)	$V_{moy}(km/s)$	$V_{max}(km/s)$
	عدد الأيونات = $10^7$	
0.5	32.38	49.15
1.0	46.75	69.51
1.5	56.31	85.14

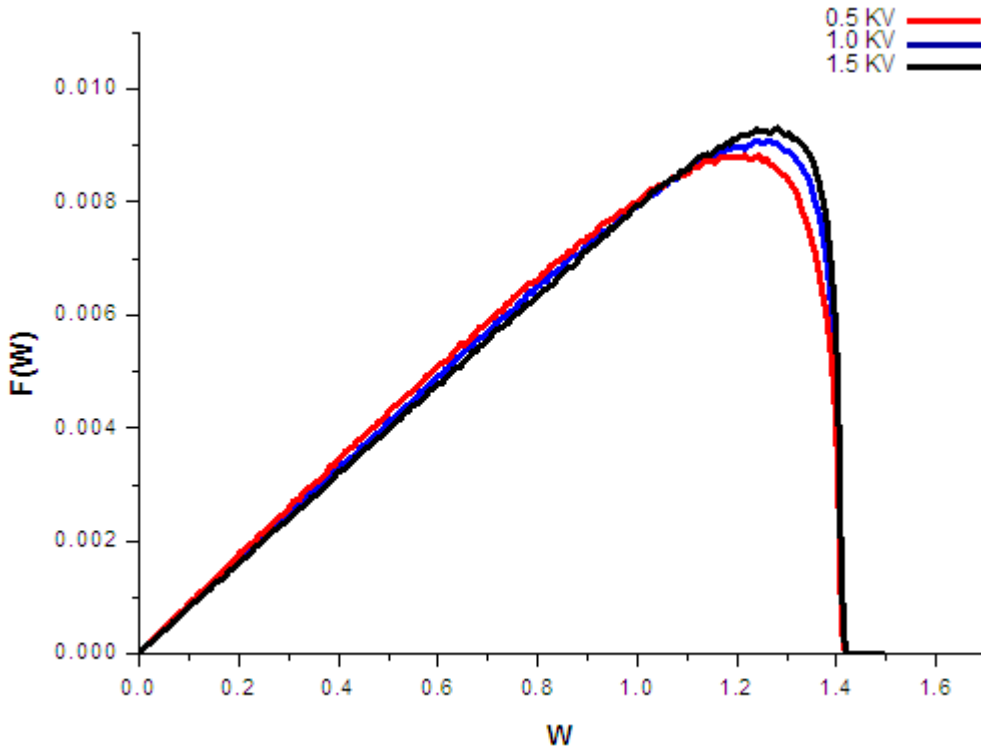
الجدول 1.3: يوضح تغيرات سرعة الأيون عند التغيير في الجهد المطبق على بعد  $5\text{\AA}$  من سطح الهدف

نلاحظ ان تغيير الجهد المطبق لا يؤثر على توزيع السرعات ومنحنيات نسب توزيع السرعات تقريبية  $F(w)$ .

2.1.II. توزيع سرعة الايونات على بعد  $0.5 \text{ \AA}$  من سطح الهدف



الشكل 3.3: توزيع السرعات  $F$  على بعد  $0.5 \text{ \AA}$  من سطح الهدف بدلالة  $w$  عند  $V = 1000V$



الشكل 4.3: توزيع السرعات  $F$  على بعد  $0.5 \text{ \AA}$  من سطح الهدف بدلالة  $w$  عند التغيير في الجهد المطبق

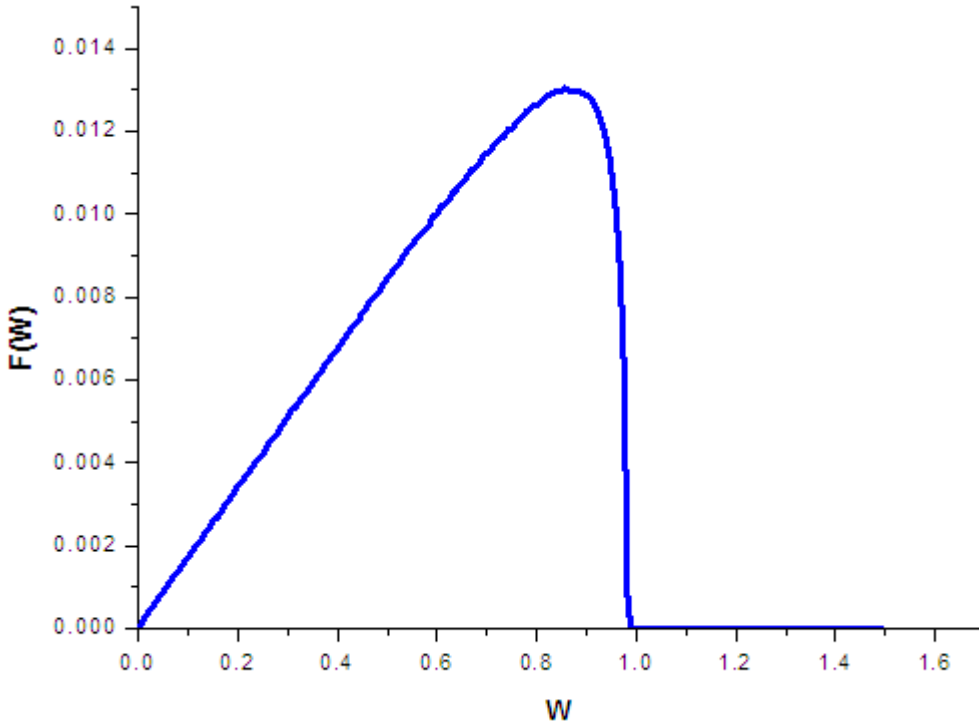
V (kV)	$V_{moy}(km/s)$	$V_{max}(km/s)$
	عدد الأيونات = $10^7$	
0.5	31.43	49.11
1.0	45.24	69.49
1.5	54.95	85.11

الجدول 2.3 : يوضح تغيرات سرعة الأيون عند التغير في الجهد المطبق على بعد  $0.5\text{\AA}$  من سطح الهدف

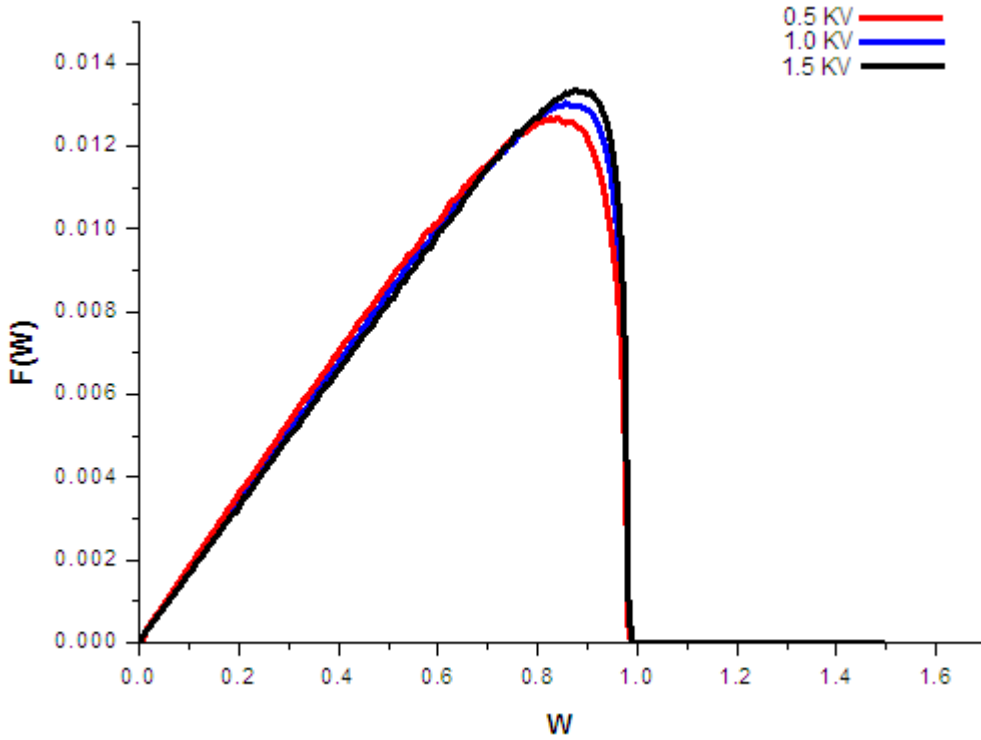
نلاحظ ان المنحنيات تحافظ على شكلها العام عند التغير في قيمة الجهد فقط تنزاح بمقدار صغير.

### III . توزيع سرعات ذرات السيليسيوم المقتلعة:

الذرات المقتلعة بسبب قصف ايونات الارغون لها توزيع سرعات موضح في الشكل الآتي :



الشكل 5.3: توزيع السرعات  $F$  لذرات السيليسيوم المقتلعة بدلالة  $V = 1000V (w)$



الشكل 6.3 : توزيع السرعات  $F$  لذرات السليسيوم المقتلعة بدلالة  $(W)$  عند التغيير في قيمة الجهد المطبق

V (kV)	$V_{moy}(km/s)$	$V_{max}(km/s)$
	عدد الأيونات = $10^7$	
0.5	21.95	34.20
1.0	31.28	48.38
1.5	38.64	59.26

الجدول 3.3 : يوضح تغيرات سرعة ذرات السليسيوم عند التغيير في الجهد المطبق

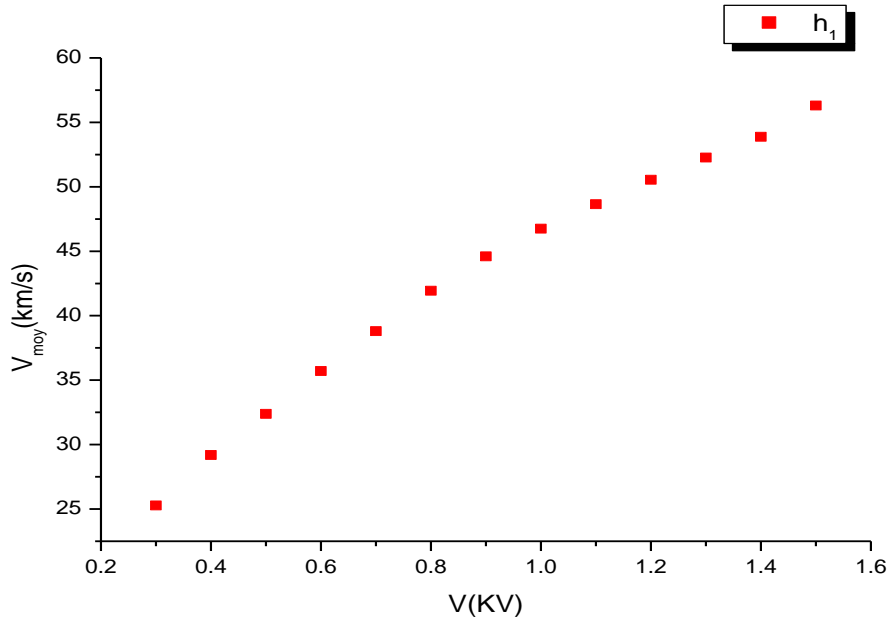
نلاحظ أن عند تغيير في قيمة الجهد المطبق التأثير يصبح بصفة طفيفة لكن منحنى التوزيع يحتفظ على شكله. ونلاحظ أن كلما زادت قيمة الجهد المطبق تزداد سرعة ايونات الارغون ومعدل قصف الهدف، وبالتالي تزداد سرعة وعدد ذرات السليسيوم المقتلعة.

IV . مردود الرش :

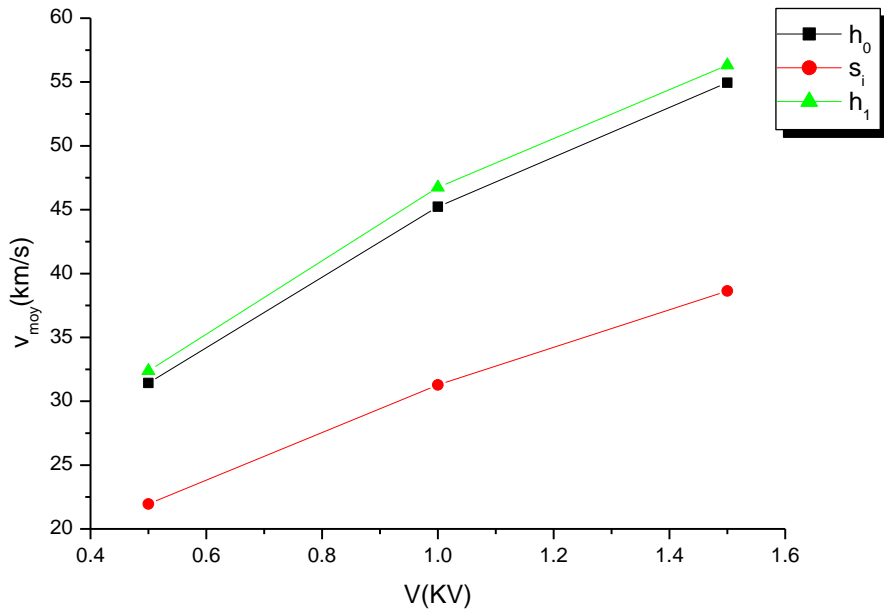
النتائج المتحصل عليها (الجدول 4.3) تبين ان كلما زاد الجهد  $V$  زاد مردود الرش. ونلاحظ أيضا أن كلما زاد الجهد تزداد سرعة وطاقة الأيونات الحادثة.

V (kV)	Vmoy (km/s)	Vmax (km/s)	Emoy (eV)	$\Gamma$ (atomes ( $s_i$ )/ion)
0.3	25.27	38.07	148.83	0.78
0.4	29.19	43.96	199.73	0.82
0.5	32.38	49.15	249.90	0.85
0.6	35.71	53.84	297.67	0.87
0.7	38.80	58.16	347.91	0.88
0.8	41.94	62.17	399.39	0.90
0.9	44.60	65.94	445.65	0.91
1.0	46.75	69.51	499.75	0.92
1.1	48.65	72.90	548.11	0.93
1.2	50.55	76.15	595.21	0.935
1.3	52.27	79.26	642.76	0.94
1.4	53.88	82.15	695.80	0.944
1.5	56.30	85.14	749.64	0.948

الجدول 4.3 : يوضح تغير المردود عند التغير في الجهد الكهربائي المطبق



الشكل 7.3: تغيرات السرعة المتوسطة للأيون عند الموضع  $h_1$  عند التغير في الجهد الكهربائي المطبق



الشكل 8.3: تغيرات السرعة المتوسطة للأيون عند الموضع  $h_0$  و  $h_1$  وذرات  $s_i$  المتقلعة بدلالة الجهد الكهربائي المطبق

المطبق

- نلاحظ أن السرعة المتوسطة لأيون الأرجون وذرات السليسيوم المقتلعة تزداد بشكل بطيء عند الزيادة في الجهد الكهربائي المطبق.

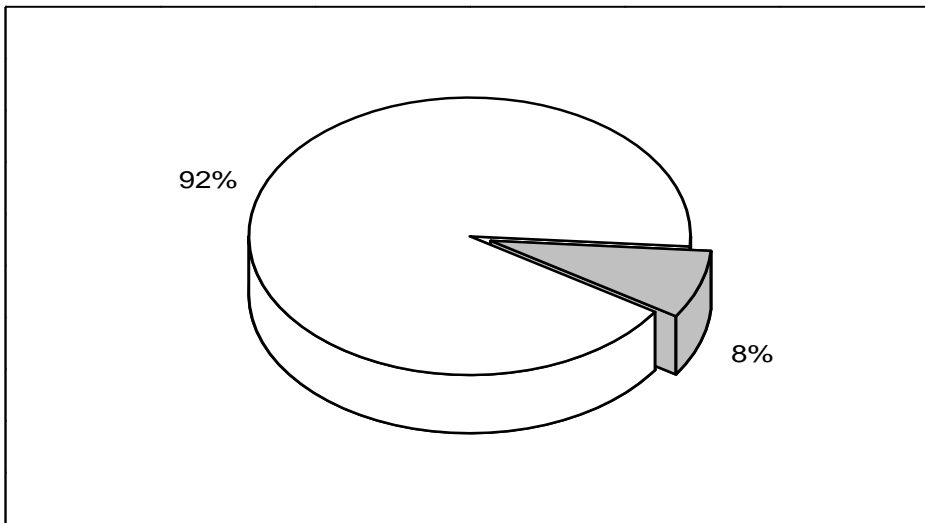
- نلاحظ أن السرعة المتوسطة لذرات السليسيوم المقتلعة أقل من سرعة أيونات الأرجون.

### V . معدل الأيونات المنعكسة ومعدل الأيونات الممتصة:

يوضح الجدول أن نسبة ايونات الارغون المنعكسة منخفضة جدا مقارنة بنسبة الايونات الممتصة ،ونلاحظ أنا كلما زاد الجهد المطبق زادت نسبة الامتصاص وتنقص نسبة الانعكاس لأيون الأرجون.

V (kV)	معدل الأيونات (%)	
	المنعكسة	الممتصة
0.3	0.22	0.78
0.5	0.15	0.85
1.0	0.08	0.92
1.5	0.05	0.95

الجدول 5.3 : يوضح تغيرات نسبة الامتصاص والانعكاس لأيون الأرجون عند التغير في الجهد المطبق



شكل 9.3 : الدائرة النسبية لنسبة الامتصاص والانعكاس عند تطبيق جهد  $V = 1000\text{Volt}$

**ملاحظة:**

في هذا العمل اعتبرنا أن الوسط مثالي أي أن الأيون خلال تنقله بإتجاه الهدف لا يتعرض لأي اصطدام وبالتالي نجد أن نسبة الأيونات الممتصة أكبر بكثير من نسبة الأيونات المنعكسة.



الخلاصة العامة  
والآفاق

### الخلاصة العامة والآفاق

استخدمت البلازما منذ عدة سنوات في تعديل الخواص الفيزيائية للسطوح والمواد. يتم حاليا عرض الكثير من الأساليب في البحوث العلمية لنمذجة ظواهر تفاعل بلازما - سطح. من بين هذه الأساليب المستخدمة الديناميك الجزئية وطريقة مونت كارلو.

الهدف من عملنا هو دراسة عن طريق المحاكاة العددية لتفاعل بين أيونات الأرجون وسطح الهدف المتكون من السيليسيوم في غرفة الرش خلال عملية ترسب الطبقات الرقيقة وسطح الهدف المختار في هذه الدراسة (100). ونحن هنا صممنا نموذج بطريقة مونت كارلو لإحصاء وتوزيع السرعات على بعدين من سطح الهدف بحيث كان البعد الاول  $5\text{\AA}$  في هذا البعد لا يكون تأثير كمون موليير والبعد الثاني  $0.5\text{\AA}$ . وأيضا تم حساب احصاء سرعات ذرات السيليسيوم المقتلعة. وقمنا بتغير الجهد المطبق حيث لا حضنا أن منحنى التوزيع في البعد الأول لا يتأثر ومنحنى التوزيع في البعد الثاني ومنحنى توزيع الذرات المقتلعة يتغير بشكل طفيف عند تغير في الجهد المطبق. ونسبة الأيونات المنعكسة اقل بكثير من نسبة الأيونات الممتصة والسرعة المتوسطة والسرعة الاكثر احتمال تساوي على التوالي 46.75 و  $69.51\text{ km/s}$  من اجل جهد  $V = 1KV$ .

وباستغلال بعض النتائج التي تم الحصول عليها يمكن العمل على نماذج اخرى وإجراء مقارنات مع التجارب.

اختبار وتحسين هذا النموذج يبقى دائما الهدف المراد تحقيقه ويمكن أن يتم ذلك من خلال:

- التغيير في التوجه البلوري لسطح الهدف
- الأخذ بعين الاعتبار التصادم بين الأيونات
- دراسة التصادمات المتسلسلة داخل الهدف
- الأخذ بعين الاعتبار حركة جميع الجسيمات في كل تصادم.
- الأخذ بعين الاعتبار تصحيحات بولتزمان
- تغيير في زاوية سقوط الجسيمات على سطح الهدف

## قائمة المراجع

- [1] A. Moustaghfir ; "Élaboration et caractérisation de couches minces d'oxyde de zinc. Application à la photoprotection du polycarbonate " ; Thèse de Doctorat; Université de Blaise Pascal 2004.
- [2] Y. Benzahi ; "Simulation numérique par la dynamique moléculaire de l'interaction de plasma-surface lors de déposition sur couches minces" ; Mémoire de Magister, Université de Ouargla 2003.
- [3] عبيد سعيدة ، " دراسة في ثلاثة ابعاد للمقادير الكهربائية في جهاز الرش المهبطي المغنطوني باستعمال طريقة الهجوم المنتهية" ، رسالة ماجستير ، جامعة قاصدي مرباح ، 2012 ورقة.
- [4] وليد مصطفى صهيوني، " مقدمة في فيزياء البلازما" ، يونيو 2006، سلطنة عمان.
- [5] سهيلة عسكري، " حساب دوال توزيع مشتقات الحقول الموضعية وتطبيق على طيف الهليوم" ، رسالة ماجستير، المركز الجامعي بالوادي ، 2011.
- [6] ز.بله، " الدراسة التشخيصية بالمحاكاة العددية لمسبار كهربائي ساكن في رش مهبطي" ، ماجستير، جامعة قاصدي مرباح ، 2007 ورقة.
- [7] L. R. Jean, "Introduction `a la Physique des Plasmas" ; cours de Master Physique Appliquée et Mécanique, Université Paris-Sud (2011).
- [8] B. Oussama "Traitement de surfaces de films de polyimide par une décharge à barrière diélectrique" Mémoire de magister, Université de Mentouri Constantine (2009).
- [9] إسماعيل شبحي، " حساب دوال توزيع الحقل الكهربائي الموضعي ومشتقاتها داخلا لبلازما باستخدام المحاكاة العددية مونتي كارلو تطبيق على طيف الهليوم" ، رسالة دكتوراه دولة ، جامعة منتوري ، 2005 قسنطينة.

[10] قريشة سليمة ، "مساهمة في دراسة توزيعات المشتقات الفضائية للحقول الكهربائية الموضوعية في البلازما" ، رسالة ماجستير ، جامعة قاصدي مرباح ، 2008 ورقة.

[11] ب . يافورسكي، أ.ديتلاف، ترجمة الدكتور فريد يوسف متي ، "المرجع في الفيزياء - الجزء الأول"، دار مير- موسكو، بيروت (1992).

[12] H. BAHOUH "Contribution à la modélisation d'une décharge continue d'un gaz moléculaire " Mémoire de magister, Université de Mentouri Constantine (2010).

[13] R.ABD JELIL"Modélisation de la relation entre les parametres du procédé plasma et les caractéristiques de la qualité du matériau textile par apprentissage de données physiques " docteur de l'université de LILLE 1,2010.

[14] إدريس سليمان، "مساهمة في دراسة طبقات رقيقة معدنية من مركب التيتان مرسبة على مساند فولاذية"، جامعة قاصدي مرباح ورقة

[15] F. O. Hassani ; "couches minces d'oxydes spinelles et nano composites spinelles-CuO A propriétés semi-conductrice destinées A la réalisation de capteurs de gaz " ; Thèse de doctorat, Université de Toulouse (2009).

[16]. C. Manasterski ; "la Pulvérisation cathodique industrielle" ; Presses Polytechniques et Universitaires Romandos 2005.

[17] SROLOVITZ (D.J.), VOLKERT (C.A.), FIUES (M.J.), KEE (R.J.)- Modeling and simulation of thin-film processing. Materials Research Society Symposium Proceedings Volume 389.

[18] Sobol. I. M. (1974) "The Monte Carlo Method"; Translated by: R. Messer, J. Stone and P. Fortini; Chicago : University of Chicago Press.

[19] F. Khelifaoui ; Cours Méthodes et Simulations Numériques; Chapitre II.(2006–2007).

### المخلص :

معرفة حركة ومسار أيونات البلازما والذرات المقتلعة من هدف داخل غرفة الرش المهبطي، له أهمية قصوى في فهم الظواهر المتعلقة بتحضير الطبقات الرقيقة. إذ يتعلق الأمر، من جهة بمواضع الأيونات والسرعات القادمة بها ومن جهة أخرى بسرعات الذرات المقتلعة من سطح الهدف. المحاكاة العددية باستعمال طريقة مونتني كارلو لها إمكانية معتبرة في فهم ظاهرة تفاعل بلازما-سطح. هذه المذكرة تعرض نموذج للمحاكاة العددية لمونتني كارلو لتفاعل بلازما الأرجون مع سطح الهدف المتشكل من السيلسيوم، وذلك أثناء تحضير الطبقات الرقيقة بالرش المهبطي بتطبيق تيار كهربائي مستمر. باستعمال كمون موليير تمت دراسة تفاعل أيون الأرجون مع سطح الهدف السيلسيوم. تحصلنا على احصاء و توزيع السرعات للأيونات البعيدة من سطح الهدف والقريبة من سطح الهدف واحصاء وتوزيع ذرات السيلسيوم المقتلعة ، مردود الرش ، نسبة الأيونات الممتصة والمنعكسة.

**الكلمات الدالة :** الرش المهبطي \* تفاعل بلازما- سطح \* المحاكاة العددية \* مونتني كارلو \* كمون موليير

### Résumé :

La connaissance des trajectoires et des vitesses des ions du plasma et des atomes arrachés de la cible à l'intérieur de la chambre de pulvérisation cathodique présente une importance primordial dans la compréhension des phénomènes liés à la préparation de couches minces. La simulation numérique par la méthode de Monte Carlo présente des potentiels considérables dans la compréhension du phénomène de l'interaction plasma – surface en calculant les distributions des vitesses des ions incidents et des atomes arrachés de la surface de la cible

Ce mémoire présente une modélisation, par la simulation numérique par la Méthode de Monte Carlo, de l'interaction d'un plasma d'argon avec la surface 100 d'une cible composé de silicium lors de la préparation de couches minces par pulvérisation cathodique. L'application est réalisée dans un courant électrique continu de tension 1000 V. Le potentiel de Molière est utilisé pour tenir compte de l'interaction des ions d'argon avec la surface cible du silicium.

Nous avons calculé la distribution des vitesses ions près de la surface de la cible, la distribution des vitesses à la surface, la distribution des vitesses des atomes de silicium arrachés et la statistique des ions absorbés et réfléchis.

**Mots clés :** Pulvérisation cathodique, Interaction plasma-surface, Simulation numérique, Monte Carlo, Potentiel Molière.

### Summary :

Knowledge of trajectories and velocities of ions of the plasma ions and injected atoms from silicon target in sputtering process is of importance to understanding the phenomenon related to the preparation of thin layers. Numerical simulation using the Monte Carlo method has considerable potential in understanding the phenomenon of plasma-surface interaction. It calculates velocity distributions of the incident ions and the injected atoms.

This memory is numerical simulation of the Monte Carlo model of the interaction of argon plasma with a target of silicon surface. The process is realized during the preparation of thin layers with sputtering on continuous electrical current. Moliere potential is used to take account of the interaction of argon ion with the silicon surface. We have calculated velocity distributions of the ions far from the target surface and near surface target and Statistics and the velocity distribution of injected atoms. We calculated the proportion of absorbed and reflected ions.

**Key words:** Sputtering, plasma-surface interaction, Monte Carlo numerical simulation, Moliere potential, velocity distributions.