

مدل سازی ریاضی و شبیه سازی فرآیند لایه نشانی اکسید روی در پلاسمای Ar/O₂

محسن شکیب^۱ مریم شکیب^۲

۱- استادیار- دانشکده مهندسی برق و کامپیوتر- دانشگاه صنعتی جندی شاپور دزفول- دزفول- ایران
m.shakiba@jstu.ac.ir

۲- استادیار- دانشکده مهندسی برق و کامپیوتر- دانشگاه صنعتی جندی شاپور دزفول- دزفول- ایران
shakiba@jstu.ac.ir

چکیده: نظر به کاربرد گسترده لایه های نازک اکسید روی در ساخت حسگرها و سلول های خورشیدی نسل دوم و سوم، هدف از این تحقیق، تحلیل و شبیه سازی فرآیند لایه نشانی اکسید روی در سامانه کندوپاش مگنترونی مستقیم است. در این راستا، ابتدا مدل ریاضی ارائه شده برای فرآیند لایه نشانی در نرم افزار RSD2013، مورد مطالعه و بررسی قرار گرفته و پس از آن نتایج حاصل از شبیه سازی فرآیند لایه نشانی اکسید روی با استفاده از تارگت روی، در پلاسمای Ar/O₂، تجزیه و تحلیل شده اند. همچنین، با توجه به تأثیر مشخصه های پلاسمای بر فرآیند لایه نشانی، از نرم افزار XPDP1 به منظور شبیه سازی پلاسمای سامانه کندوپاش استفاده شده است. معادلات دیفرانسیلی وابسته به زمان استفاده شده در RSD2013، بسیاری از پدیده های فیزیکی از جمله جذب شیمیایی گاز واکنشی از طریق تارگت و زیرلایه، لانه گزینی مستقیم و ضربه ای ذرات گاز واکنشی در تارگت، تشکیل ترکیبات کامپوند در نواحی زیر سطح تارگت، رسوب ذرات اسپاتر شده از تارگت روی سطح زیرلایه و بازگشت کسری از آن ذرات به سمت تارگت، و نیز رسوب مجدد ذرات اسپاتر شده روی سطح تارگت را در بر دارد. نتایج حاصل از شبیه سازی، در بهبود کیفیت اکسید روی لایه نشانی شده در سامانه های عملی کندوپاش واکنشی مؤثر خواهد بود.

واژه های کلیدی: مدل سازی ریاضی لایه نشانی اکسید روی، سامانه کندوپاش مگنترونی مستقیم، نرم افزار RSD2013، پلاسمای Ar/O₂، نرم افزار XPDP1

نوع مقاله: پژوهشی

DOI: 10.29252/jiaeee.18.4.127

تاریخ ارسال مقاله: ۱۳۹۸/۰۵/۱۱

تاریخ پذیرش مشروط مقاله: ۱۳۹۹/۰۶/۱۱

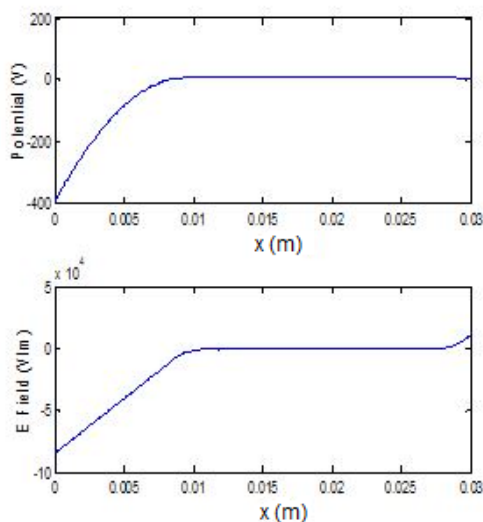
تاریخ پذیرش مقاله: ۱۳۹۹/۰۸/۰۳

نام نویسنده ی مسئول: دکتر مریم شکیب

نشانی نویسنده ی مسئول: ایران - دزفول - دانشگاه صنعتی جندی شاپور دزفول - دانشکده مهندسی برق و کامپیوتر

۱- مقدمه

نشان می‌دهد. در این شکل، خصوصیات الکتریکی پلاسمای آرگون اعم از توزیع پتانسیل و میدان الکتریکی در فضای پلاسمایی میان دو الکترود ترسیم شده است. مجموعه این منحنی‌ها، شبیه‌سازی تخلیه آرگون در فشار ۰/۵ mbar و ولتاژ کاتد ۴۰۰۷- را در شرایطی که فاصله الکترودها ۳cm است، نشان می‌دهد. همچنین میدان مغناطیسی در مجاورت کاتد و عمود بر میدان الکتریکی با بزرگی $B=0/01$ T در نظر گرفته شده است. همان‌گونه که منحنی پتانسیل نشان می‌دهد، میدان الکتریکی در نواحی غلاف، در نزدیکی الکترودها، بزرگ بوده و در ناحیه بدنه پلازما برابر با صفر است. طبق این منحنی، وجود گرادیان زیادی از پتانسیل در نواحی غلاف، بالاخص غلاف ناحیه کاتد (سمت چپ منحنی)، امکان شتاب گرفتن یون‌ها به سمت کاتد و برخورد با هدف Zn را فراهم خواهد ساخت. بدیهی است که وجود میدان‌های الکتریکی قوی‌تر، افزایش نرخ کندوپاش ماده هدف و به دنبال آن افزایش نرخ لایه‌نشانی را در پی خواهد داشت.

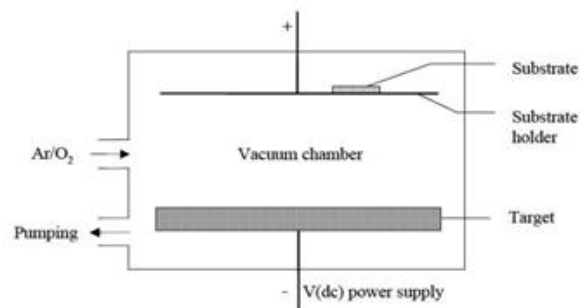


شکل (۲): خصوصیات الکتریکی پلاسمای آرگون در فضای الکترودها (a) توزیع پتانسیل در پلازما، (b) توزیع میدان الکتریکی در پلازما. شبیه‌سازی با استفاده از نرم‌افزار XPDP1، تحت شرایط ۰/۵

$$B=0/01T \text{ و } V=-400v, P=0/5$$

در خلال فرآیند کندوپاش، علاوه بر اتم‌های ماده هدف، احتمال کنده شدن الکترون‌های ثانویه که نقش کلیدی در خودنگهداری پلازما را دارند نیز وجود دارد [۱۰،۱۱]. شکل ۳، چگالی الکترون‌ها و یون‌های ایجاد شده در فضای پلازما ناشی از میدان الکتریکی میان الکترودها را نشان می‌دهد. همان‌گونه که انتظار می‌رود، چگالی الکترون‌ها و یون‌ها کم و بیش در بخش بدنه پلازما مقادیری نزدیک به هم داشته، در حالی که نواحی غلاف از الکترون‌ها تخلیه است و در نتیجه بار فضایی مثبت بر اثر حضور یون‌ها منتج خواهد شد.

فرآیند کندوپاش، تبخیر فیزیکی اتم‌های ماده هدف است که بر اثر بمباران ذرات پر انرژی و انتقال اندازه حرکت به اتم‌های ماده هدف انجام می‌شود. ذرات پر انرژی معمولاً یون‌های یک ماده گازی هستند که به دلیل قرار گرفتن در یک میدان الکتریکی تولید شده‌اند. از این نقطه نظر، فرآیند لایه‌نشانی به کمک سامانه کندوپاش، رسوب ذرات کنده شده از سطح ماده هدف^۱، روی سطح زیرلایه است. پیکربندی ساده‌ای از یک سامانه کندوپاش مستقیم در شکل ۱ نشان داده شده است. در این پیکربندی، ماده هدف در کاتد و زیرلایه در آند قرار دارند. با ورود گاز بی اثر مانند آرگون به محفظه، در فضای میان الکترودهای آند و کاتد، الکترون‌هایی که در این میدان الکتریکی قوی شتاب گرفته‌اند، با برخورد به اتم‌های گازی، فرآیند یونیزاسیون را آغاز و تسریع می‌کنند که این امر، روشن شدن پلازما، یا به عبارت دیگر، تولید تخلیه تابناک را در فضای میان الکترودها به دنبال خواهد داشت. فرآیندهای برخوردی^۱ میان ذرات در پلازما، حتی در موارد نسبتاً ساده مانند تخلیه آرگون خالص که از سه ذره اصلی (الکترون‌ها، ذرات خنثی و یون‌ها) تشکیل شده است، فرآیندهایی پیچیده هستند [۱-۳]. بنابراین به جای توصیف پلازما به کمک ابزار تحلیلی، گاه استفاده از تکنیک‌های شبیه‌سازی کامپیوتری برای به دست آوردن اطلاعات لازم در مورد خصوصیات پلازما بسیار مفید است. اساساً دو روش محاسباتی برای مواجهه با چنین مسائلی مورد استفاده قرار می‌گیرد. روش جریانی^۲، که در آن یون‌ها و الکترون‌ها از منظر جریانی از ذرات مورد بررسی قرار می‌گیرند و نه ذرات منحصر به فرد. در روش دوم که اصطلاحاً ذره در



شکل (۱): پیکربندی سیستم کندوپاش

سلول^۳ (PIC) گفته می‌شود، فرض بر این است که پلازما را می‌توان با مجموعه‌ای از ابرذرات کامپیوتری شبیه‌سازی کرد به طوری که هر یک از این ابرذرات دارای جرم و باری معادل با تعداد زیادی از ذرات هستند. از سوی دیگر برای مدل کردن برخوردهای میان ذرات مختلف از الگوریتم مونت کارلو^۴ (MCC) استفاده می‌شود [۴-۶]. در این مقاله، شبیه‌سازی پلاسمای رسوب به کمک نرم‌افزار XPDP1 انجام شده و بر اساس مدل‌های PIC برای حرکت ذرات و MCC برای مکانیزم‌های برخوردی طراحی شده است [۷-۹]. شکل ۲ نتایج حاصل از شبیه‌سازی پلاسمای آرگون با استفاده از نرم‌افزار شبیه‌ساز پلاسمای XPDP1^۵ را

حاصل از شبیه‌سازی فرآیند رسوب اکسید روی (ZnO) در پلاسمای Ar/O₂ ارائه شده است. در بخش نهایی، مهمترین نتایج حاصل از این تحقیق به منظور کنترل دقیق فرآیند لایه‌نشانی در سامانه‌های عملی بیان شده و پیشنهادهای در جهت ارتقاء نرم‌افزار مورد مطالعه ارائه شده است.

۲- تقسیمات مدل‌سازی ریاضی سیستم کندوپاش واکنشی مستقیم

الگوریتم ارائه شده در نرم‌افزار RSD2013، فرآیند کندوپاش واکنشی مگنترونی را در حالت جریان مستقیم (اعمال ولتاژ DC به کاتد سیستم) مدل‌سازی می‌کند [۲۱-۲۸]. در این مدل‌سازی، سیستم کندوپاش به سه بخش اصلی^۳ تقسیم شده است: محفظه خلاء، تارگت و زیرلایه که در آن تارگت و زیرلایه به سلول‌های سطحی متعددی تقسیم می‌شوند. در این نرم‌افزار، معادلات دیفرانسیلی معمولی مرتبه اول وابسته به زمان (ODEs)، برای سه بخش اصلی سیستم (محفظه خلاء، تارگت و زیرلایه) حل می‌شوند [۲۱]. نظر به اینکه ناحیه زیر سطح^{۱۱} تارگت، با تقسیم شدن به چندین حجم یا سلول، به صورت سه-بعدی تجزیه می‌شود، معادلات (ODEs) مذکور، به معادلات دیفرانسیلی جزئی مرتبه اول^{۱۱} (PDEs)، در زمان و مکان^{۱۲}، کوپل شده‌اند. معادلات PDEs و ODEs نحوه ارتباط کمیت‌های تعیین شده در هر یک از زیر بخش‌های اصلی سیستم (محفظه خلاء، تارگت و زیرلایه) را بیان می‌کنند [۲۱، ۲۲].

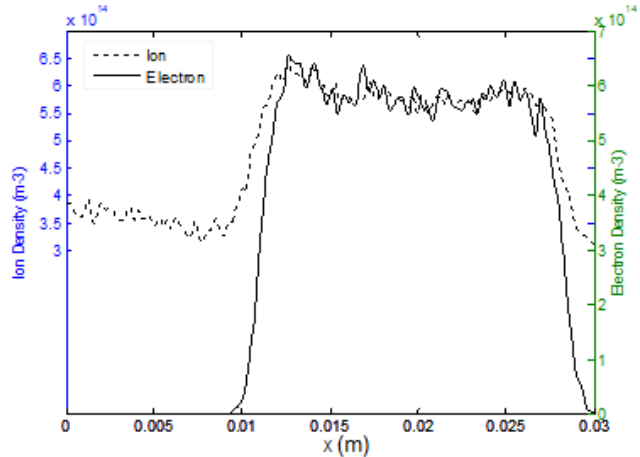
۱-۲- مدل‌سازی محفظه خلاء

محفظه خلاء به عنوان یک بخش اصلی سیستم، حاوی گاز خنثی یونیزه شده آرگون و گاز واکنشی اکسیژن و سیستم پمپاژ به منظور ایجاد خلاء است. سیستم پمپاژ شامل یک فلومتر بوده که به کمک آن نرخ خروج گاز از محفظه (سرعت پمپاژ گاز بر حسب cm^3s^{-1}) تعیین می‌گردد. این گازها به کمک متغیرهای حالتشان، از جمله دما T ، حجم V ، تعداد ذرات n و فشار P توصیف می‌شوند. با توجه به استفاده از فشار پایین در سامانه کندوپاش (0.01-1Pa)، می‌توان این گازها را به عنوان گاز ایده‌آل، در نظر گرفت (قانون گاز ایده‌آل):

$$PV = nk_B T \quad (1)$$

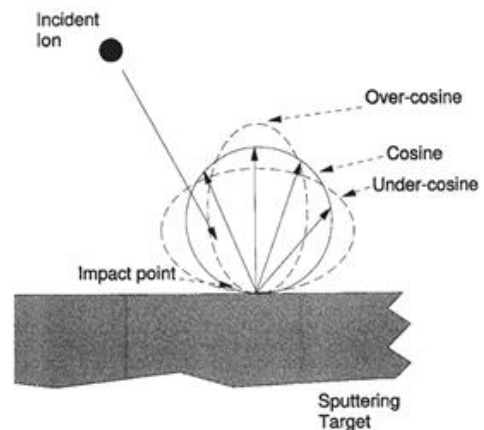
برای یک گاز بی‌اثر، مقدار فشار (P_i) و تعداد ذرات آن (n_i) ثابت و در حالت ایستا بوده، درحالی‌که برای یک گاز واکنشی، تعداد ذرات (n_r) و در نتیجه میزان فشار آن (P_r) وابسته به زمان است. از این منظر، رابطه (۱) را با در نظر گرفتن وابستگی زمانی، به صورت ذیل می‌توان بازنویسی نمود:

$$\frac{dP_r}{dt} = \frac{k_B T}{V} \frac{dn_r}{dt} \quad (2)$$



شکل (۳): توزیع چگالی الکترون‌ها و یون‌ها در فضای میان الکترودها. شبیه‌سازی با استفاده از نرم‌افزار XPDPI تحت شرایط $B=0.01T$ و $V=-400v$ ، $P=0.5$ mbar

شکل ۴، توزیع زاویه گسیل در سطح ماده هدف را نشان می‌دهد. توزیع زاویه گسیل^۶ برای اتم‌های پراکنده شده غالباً به شکل توزیع کسینوسی فرض می‌شود [۱۲].



شکل (۴): توزیع زاویه گسیل هدف مس با یون‌های آرگون

در عمل، گاهی توزیع زاویه گسیل از حالت کسینوسی خارج شده و به صورت توزیع زیرکسینوسی^۷ یا فراکسینوسی^۸ است. بر خلاف توزیع زیرکسینوسی، توزیع فراکسینوسی دارای قله بلندتری در زاویه انحراف کمتر است. به طور کلی، به ازای انرژی کمتر یونی، توزیع زاویه گسیل، شکل زیرکسینوسی داشته، و در انرژی‌های بیشتر، قله بلندتری ایجاد می‌شود [۱۳-۱۷].

در این مقاله، هدف، مطالعه مدل‌های ریاضی ارائه شده برای فرآیند لایه‌نشانی در سامانه کندوپاش واکنشی است [۱۷-۲۰]. در این راستا از جمله دقیق‌ترین الگوریتم‌های ارائه شده تاکنون، مدل‌سازی ریاضی است که در نرم‌افزار RSD2013 ارائه شده است [۲۱، ۲۲]. بخش دوم این تحقیق به تشریح و بررسی نقاط ضعف و قدرت مدل‌سازی اجزای اساسی سیستم کندوپاش واکنشی در RSD2013، اعم از مدل‌سازی محفظه خلاء، تارگت و زیرلایه تخصیص یافته است. در بخش سوم، استراتژی حل معادلات دیفرانسیلی بیان شده و در بخش چهارم نتایج

گاز واکنشی و اتم‌های تارگت برقرار است) پیوند برقرار می‌کنند. برای بخش‌های θ_c و θ_r ، ضریب استوکیومتری (Z) یکسانی در نظر گرفته شده است. در ادامه، یک ذره واکنش دهنده، به شکل MR_2 تعریف می‌شود که در آن M یک اتم فلز (یک اتم از تارگت) و R یک اتم گاز واکنشی است. در واقع یک ذره واکنش دهنده^{۱۹} با توجه به نحوه تشکیل آن، می‌تواند یک ذره با جذب شیمیایی و یا یک ذره کامپوند (که در فرآیند لانه‌گزینی تشکیل می‌شود) باشد. از سوی دیگر یک ذره فلزی^{۲۰} M ، یک اتم فلزی (از تارگت) است که با ذرات گاز واکنشی پیوند برقرار نکرده است. در ادامه، ذرات واکنش‌دهنده MR_2 و ذرات فلزی M (ذرات تارگت)، همگی "ذره"^{۲۱} نامیده می‌شوند. همچنین ذرات گاز واکنشی که با دیگر ذرات پیوندی ندارند^{۲۲} R ، "اتم واکنشی"^{۲۳} خوانده می‌شوند. تمایز میان θ_c و θ_r دارای اهمیت است. زیرا به عنوان مثال، بازده گسیل الکترون^{۲۴} از سطح تارگت، زمانی که اکسیژن به صورت شیمیایی در سطح Zn جذب شود و یا از طریق لانه‌گزینی اکسیژن روی سطح Zn، یک ترکیب کامپوند تشکیل گردد، مقادیر مختلفی خواهد داشت [۳۱].

در این مدل، از مقدار وزن‌دهی شده درصد ذرات فلزی در هر یک از سلول‌های سطح تارگت (θ_m^i) (فرآیند وزن‌دهی از طریق جریان یونی محلی اعمال شده به این سلول‌ها (I^i) انجام می‌شود)، به منظور تعیین مقدار متوسط درصد فلزی در کل تارگت، استفاده شده است. مقدار متوسط حاصل، روی کل سطح تارگت طبق رابطه (۷) قابل محاسبه است:

$$\bar{\theta}_m = \frac{1}{I_{tot}} \sum_i I^i \theta_m^i \quad (7)$$

که در آن I_{tot} ، مقدار جریان یونی کل است که به سمت تارگت جریان دارد و I^i ، جریان یونی محلی اعمال شده به هر یک از سلول‌های سطح تارگت است (سلول‌های سطحی با اندیس i مشخص می‌شوند). فرآیندهای مدل‌سازی شده برای یک سلول سطحی تارگت به شرح ذیل هستند:

- (۱) کندوپاش سطح از طریق بمباران یونی، که در نتیجه آن ماده از سطح سلول کنده شده و لایه زیرین سطح سلول آشکار می‌گردد.
- (۲) جذب شیمیایی گاز واکنشی توسط ذرات فلزی سطح سلول و تبدیل آن‌ها به ذرات واکنش دهنده (MR_2).
- (۳) بازگشت ذرات اسپاتر شده، به سطح تارگت و رسوب مجدد آن‌ها روی سطح آن و به طور مؤثر انتقال این ذرات به ناحیه زیرین سطح سلول تارگت.
- (۴) لانه‌گزینی ضربه‌ای اتم‌های گاز واکنشی (R) در ناحیه زیرین سطح و ایجاد پیوند با ذرات فلزی تارگت (MR_2) (تشکیل ذرات کامپوند). در چنین شرایطی با توجه به ایجاد پیوند ضعیف، امکان تبدیل MR_2 به یک ذره فلزی (M) و آزاد شدن اتم واکنشی (R) وجود خواهد داشت.

رابطه (۲) بیان‌کننده تغییر فشار گاز واکنشی در حین ورود یا خروج ذرات گاز از محفظه است. جریان ذرات Q_r ($Q_r = dn_r/dt$) به صورت ذیل خواهد بود:

$$Q_r = Q_{in} - Q_p - Q_s - Q_t \quad (3)$$

که در آن Q_{in} جریان ورودی گاز واکنشی به درون محفظه است و به کمک فلومتر^{۲۳} کنترل می‌شود. به سه طریق، ذرات گاز واکنشی محفظه کاهش می‌یابند: استفاده از پمپ‌های تخلیه (Q_p)، واکنش با سطح زیرلایه (Q_s) و واکنش با تارگت (Q_t). جریان گاز^{۱۴} واکنشی به سمت زیرلایه و تارگت (Q_i و Q_s) تابع شرایطی مانند فشار گاز هستند، که در ادامه بدین موضوع پرداخته می‌شود. جریان گاز به سمت پمپ تخلیه، بر اساس سرعت عملکرد پمپ K و شرایط گاز، طبق رابطه (۴) تعریف می‌گردد [۲۸]:

$$Q_p = \frac{P_r S}{k_B T} \quad (4)$$

شار ذرات گاز واکنشی^{۱۵} (F)، به سمت تارگت و زیرلایه، با فرض ایده‌آل بودن آن، متناسب با فشار این گاز خواهد بود. این وابستگی در رابطه (۵) نشان داده شده است:

$$F = \frac{P_r}{\sqrt{2\pi m_r k_B T}} \quad (5)$$

که در آن m_r جرم یک ذره از گاز واکنشی است. در پلاسماهای مگنترونی، همواره بخشی از ذرات گاز واکنشی و گاز بی‌اثر یونیزه می‌شوند. این درصد از یونیزاسیون را می‌توان به کمک انواع مختلفی از مدل‌های ارائه شده برای پلاسما محاسبه نمود [۲۹]. در مدل استفاده شده برای پلاسما در مرجع [۳۰]، که در نرم‌افزار RSD2013 نیز استفاده شده، فرض بر این است که تعداد یون‌های گاز واکنشی (f)، با توجه به رابطه (۱)، متناسب با فشار گاز واکنشی است:

$$f = \frac{P_r}{P_i + P_r} \quad (6)$$

بدیهی است، میزان یون‌های گاز واکنشی که تارگت را بمباران می‌کنند، متناسب با f خواهد بود.

۲-۲- مدل‌سازی ماده هدف

در مدل‌سازی این جزء سیستم، تارگت، به عنوان یکی از مرزهای محفظه خلاء در کاتد قرار دارد. در این مدل‌سازی، سطح تارگت و ناحیه زیرسطح آن، به شکل سه بعدی توصیف می‌شوند. در این راستا، سطح تارگت به چندین سلول تقسیم بندی می‌شود. در هر یک از این سلول‌ها، انواع مختلف ذرات به سه شکل: میزان درصد ذرات فلزی^{۱۶} (با فرض این‌که تارگت یک فلز است) θ_m ، میزان درصد ذرات با جذب شیمیایی^{۱۷} θ_c و میزان درصد ذرات کامپوند^{۱۸} θ_r توصیف می‌شوند. درصد فلزی θ_m ، بخشی از سطح سلول است که تحت واکنش قرار نگرفته است. درحالی‌که θ_c و θ_r بخش‌های واکنش دهنده سطح سلولند که در آن‌ها اتم‌های فلز (تارگت) با اتم‌های گاز واکنشی به ترتیب از طریق جذب شیمیایی و یا از طریق لانه‌گزینی مستقیم و ضربه‌ای (فرض شده که در ذرات کامپوند، پیوند فیزیکی میان ذرات

برای استخراج این معادلات، مشابه آنچه برای یک سلول تارگت گفته شد، در نظر گرفتن درصد ذرات مختلف در سلول است [۲۲، ۲۱]. این معادلات در ذیل ارائه شده‌اند.

$$n_{0,s} \frac{d\theta_s}{dt} = F_{r,s}(1-\theta_s) - F_{m,s}\theta_s + F \frac{2}{z} \alpha_s(1-\theta_s) \quad (8)$$

که در آن $F_{r,s}$ و $F_{m,s}$ به ترتیب نماینده چگالی فلوی ذرات فلزی و کامپوند رسوب یافته روی سطح زیرلایه هستند. توصیف $F_{r,s}$ و $F_{m,s}$ در روابط ذیل ارائه شده است:

$$F_{m,s} = \varepsilon_s \frac{I_{tot}}{A_s} Y_m \overline{\theta_m} \quad (9)$$

$$F_{r,s} = \varepsilon_s \frac{I_{tot}}{A_s} (Y_r \overline{\theta_r} + Y_c \overline{\theta_c}) \quad (10)$$

که در آن A_s ، مساحت یک سلول زیرلایه و ε_s اشاره به درصد ذرات اسپاتر شده‌ای دارد که بر روی سطح یک سلول رسوب یافته‌اند. همچنین، متوسط درصد ذرات θ_r ، θ_m ، θ_c و θ_s پیش از این، در رابطه (۷) تعریف شده است. مجموع درصد ذرات در سلول‌های مختلف، ε_s ، برابر با کل مقدار ماده رسوب یافته E_s بر زیرلایه خواهد بود.

از آنجایی که میزان کندوپاش و لایه‌گزینی برای سلول زیرلایه در مقایسه با سلول تارگت بسیار ناچیز است، میزان تغییر درصد ذرات کامپوند در θ_s کمتر در نظر گرفته خواهد شد. میزان درصد ذرات (θ_s) سطح با تبدیل ذرات فلزی به ذرات کامپوند، از طریق فلوی ذرات کامپوند که به سمت زیرلایه در حرکتند، افزایش خواهد یافت (اولین جمله در رابطه (۸)). از سوی دیگر، میزان درصد ذرات (θ_s) سطح با تبدیل ذرات کامپوند به ذرات فلزی، از طریق ذرات فلزی که به سمت زیرلایه در حرکتند، کاهش می‌یابد (دومین جمله در رابطه (۸)). در سومین جمله رابطه (۸) میزان درصد ذرات (θ_s) سطح از طریق جذب شیمیایی گاز واکنشی (یعنی R_2) با ذرات فلزی روی زیرلایه، افزایش خواهد یافت. چنین واکنشی ذرات فلزی را به ذرات کامپوند تبدیل خواهد نمود. میزان تمایل به جذب شیمیایی α_s توسط ضریب α_s که احتمال چسبندگی روی زیرلایه برای یک گاز واکنشی دواتمی (R_2) را نشان می‌دهد، تعریف می‌شود.

مشابه آنچه برای سلول تارگت گفته شد، میزان مصرف گاز واکنشی توسط یک سلول زیرلایه q_s ، طبق رابطه زیر توصیف می‌شود:

$$q_s = \alpha_s F(1-\theta_s) A_s \quad (11)$$

این میزان مصرف گاز، انحصاراً از طریق فرآیند جذب شیمیایی که به طور مؤثری مولکول‌های گاز شیمیایی را به درون لایه رسوب یافته هدایت می‌کند، تعیین می‌شود. به عبارت دیگر، میزان مصرف گاز، به میزان در دسترس بودن ذرات فلزی θ_s ، احتمال چسبندگی α_s و فلوی گاز واکنشی F وابسته است. مجموع فلوی دریافتی از طریق تک‌تک سلول‌ها (q_s) ، برابر با کل فلوی مصرفی (Q_s) ، از طریق زیرلایه خواهد بود.

(۵) لایه‌گزینی مستقیم یون‌های گاز واکنشی (R) به درون ناحیه زیرسطح که همان‌گونه که قبلاً گفته شد، به آن‌ها عبارت "اتم‌های واکنشی" اطلاق می‌گردد.

لایه‌گزینی اتم‌های گاز واکنشی در ناحیه زیرین سطح سلول با در نظر گرفتن یک پروفیل عمق برای هر یک از سلول‌های سطحی تارگت، توصیف می‌گردد. این پروفیل عمق، با تقسیم بندی ناحیه لایه‌گزینی در بخش زیرین سطح سلول (یا در کل حجم سلول)، در نظر گرفته می‌شود. ناحیه تقسیم بندی شده مذکور، بسته به میزان انرژی و نوع مکانیزم لایه‌گزینی یون واکنشی، معمولاً تا حدود چندین نانومتر زیر سطح سلول گسترش می‌یابد [۳۲].

در هر یک از سلول‌های تارگت میزان غلظت اتم‌های واکنشی لایه-گزینی شده θ_s ، ذرات فلزی و ذرات کامپوند θ_c با توجه به عواملی که عبارتند از واکنش میان اتم‌های تارگت و اتم‌های واکنشی و همچنین لایه‌گزینی مکرر اتم‌های واکنشی مرتباً تغییر می‌کند. در این میان، درحالی که فرآیند کندوپاش، با کندن سطح تارگت، ماده زیرین آن را آشکار می‌سازد، فرآیند رسوب مجدد، ماده سطحی را به ناحیه زیرین سطح منتقل خواهد نمود.

۲-۳- مدل‌سازی زیرلایه

زیرلایه، یکی دیگر از مرزهای محفظه خلاء محسوب می‌گردد. به استثنای تارگت، زیرلایه شامل تمامی سطوحی است که ذرات کندوپاش شده روی آن رسوب می‌کنند. در مدل ارائه شده، توصیف زیرلایه حداکثر در دو بعد انجام شده و تغییر و تحولات در سطح مورد بررسی قرار گرفته است. تحلیل در دو بعد، به منظور بررسی پروفیل رسوب غیر یکنواخت مواد اسپاتر شده اتخاذ شده است. در مدل‌سازی زیرلایه، سطح آن به مجموعه‌ای از سلول‌ها تقسیم‌بندی شده است. وضعیت هر یک از سلول‌های سطحی از طریق میزان درصد ذرات محلی θ_s که در واقع میزان درصد ذرات کامپوند را نشان می‌دهند، مشخص می‌شود. در این میان، مقدار $1-\theta_s$ ، درصد ذرات فلزی را نمایش می‌دهد. وضعیت سطح یک سلول زیرلایه، از طریق فرآیندهای اشاره شده در ذیل تغییر می‌کند:

(۱) جذب شیمیایی گاز واکنشی از طریق ذرات فلزی و تبدیل آن‌ها به ذرات کامپوند.

(۲) رسوب ذرات فلزی و کامپوند و انتقال ماده زمینه به بخش‌های عمیق‌تر زیرلایه.

بر اساس این ساده‌سازی، فرض شده است که برهم‌کنش دیگری علاوه بر رسوب و جذب شیمیایی میان پلاسما و دیواره‌ها وجود ندارد. همچنین، برخلاف توضیحات ارائه شده برای تارگت، در زیرلایه تمایزی میان ذرات کامپوند و ذرات با جذب شیمیایی در نظر گرفته نمی‌شود و مجموعاً به ذرات رسوب یافته، ذرات کامپوند گفته می‌شود [۳۴].

مشخصات یک سلول زیرلایه، به کمک معادلات ODE مربوطه و با توجه به تغییرات زمانی میزان درصد θ_s تعیین می‌شود. ایده مورد نظر

۳- حل معادلات دیفرانسیلی سیستم

الگوریتم زمان-وابسته‌ای^{۳۲} که در بخش دوم مقاله مورد بررسی قرار گرفت، بخشی از توانایی‌های نرم‌افزار RSD2013 را نمایش می‌دهد [۳۶،۳۵]. نرم‌افزار RSD2013 قابلیت‌های مختلفی در شبیه‌سازی کندوپاش واکنشی را داراست. از جمله‌ی آن‌ها می‌توان به تعیین روش حل معادلات، اعم از حل مسأله در حالت پایدار و یا حل آن به شکل وابسته به زمان اشاره نمود. همچنین پروفیل جریان یونی^{۳۳} اعمال شده به تارگت و نیز پروفیل رسوب^{۳۴} برای زیرلایه را می‌توان مشخص نمود. علاوه‌براین، در صورتی که فرآیند رسوب مجدد برای تارگت، در شبیه‌سازی لحاظ گردد، تعیین پروفیل رسوب مجدد^{۳۵} (اعم از پروفیل یکنواخت یا گوسی شکل) روی تارگت نیز قابل اعمال است. در این نرم‌افزار امکان حل معادلات به شکل ایستا (وضعیت پایدار)، و یا حل معادلات با وابستگی زمانی متغیرها، امکان پذیر است. مهمترین تفاوت میان حل معادلات در وضعیت پایدار و حل آن‌ها به شکل وابسته به زمان، به ترتیب مربوط به کنترل سیستم برپایه فشار^{۳۶} و کنترل سیستم بر پایه فلوی گاز واکنشی^{۳۷} است.

در مدل وابسته به زمان، تعداد $3N+M$ معادله ODEs به شکل کوپل شده با تعداد $2N$ معادله PDEs حل می‌شوند. در این مدل، N نماینده تعداد سلول‌های سطح تارگت و M نماینده تعداد سلول‌های زیرلایه است. این تعداد معادلات به کمک روش تفاضل محدود گسسته شده و سپس با استفاده از روش عددی رانگ-کوتا مرتبه چهارم^{۳۸} حل می‌شوند. همچنین به منظور پایداری شرایط سیستم، گام مکانی Δx باید در رابطه زیر صدق کند:

$$|v_{s,ex}| \Delta t \leq \Delta x \quad (12)$$

که در آن Δt گام زمانی شبیه‌سازی و $|v_{s,ex}|$ قدر مطلق حداکثر مقدار v_s است. طبق این رابطه، تعیین گام زمانی (معمولاً کمتر از 1ms)، مقدار گام مکانی را مشخص می‌کند. هدف از شبیه‌سازی سیستم کندوپاش مگنترونی واکنشی به کمک RSD2013، بررسی و مطالعه رفتار این سیستم، در فرآیند رسوب ZnO در پلاسمای Ar/O₂ است. چراکه این امر در بهبود کیفیت ZnO لایه‌نشانی شده در سامانه‌های عملی کندوپاش واکنشی مثر ثمر خواهد بود.

در ادامه، به منظور شبیه‌سازی سیستم، اثر پدیده‌های فیزیکی غالب در فرآیند رسوب، مورد بررسی قرار گرفته‌اند. در اولین شبیه‌سازی (A)، مدل وابسته به زمان این نرم‌افزار در شرایطی که تارگت و زیرلایه هر دو به شکل تک سلولی فرض شده‌اند، حل شده است. در این مورد، هیچ‌یک از پدیده‌های رسوب مجدد^{۳۶} و یا اعمال پروفیل جریان و رسوب گوسی (به ترتیب) به تارگت و زیرلایه، در نظر گرفته نشده است. در دومین مرحله (شبیه‌سازی B) بر خلاف شبیه‌سازی A، توصیف تارگت به صورت چند-سلولی فرض شده است. در این مورد، ناحیه کندوپاش، به کمک ۱۰۰ سلول دایروی هم‌مرکز که در فواصل مساوی نسبت به هم قرار دارند، تقسیم‌بندی شده است. مساحت این سلول‌ها در تارگت به صورت $\pi \Delta r^2 (2i-1)$ مقیاس‌بندی^{۴۰} شده که در

آن Δr (۰,۰۲ cm) برابر با اختلاف شعاع این سلول‌های هم‌مرکز و i اندیس تک‌تک این سلول‌ها از مرکز به سمت لبه تارگت است. در این میان، پروفیل جریان شعاعی اعمال شده به تارگت، به شکل گوسی، با مقدار میانگین^{۴۱} $1/0.3$ cm و میزان انحراف^{۴۲} 0.28 cm تعریف شده است.

برای سومین شبیه‌سازی (C)، علاوه بر تارگت، زیرلایه نیز به شکل چند-سلولی مدل شده و پروفیل فلوی ذرات رسوب یافته روی سطح آن نیز گوسی فرض شده است.

در این ابزار از الگوریتم مونت‌کارلو به منظور شبیه‌سازی حرکت ذرات پراکنده شده، استفاده می‌شود. همچنین برای پروفیل فرسایش سطح تارگت از طریق فرآیند کندوپاش، لازم است مکان شروع حرکت ذرات در مسیر پراکندگی آن‌ها، تعریف گردد که این شرایط نیز به کمک الگوریتم مونت‌کارلو مشخص می‌شوند. بدین منظور، برای شرایط اولیه مذکور، توزیعی گوسی مشابه با آنچه برای پروفیل جریان تعریف شد، در نظر گرفته می‌شود.

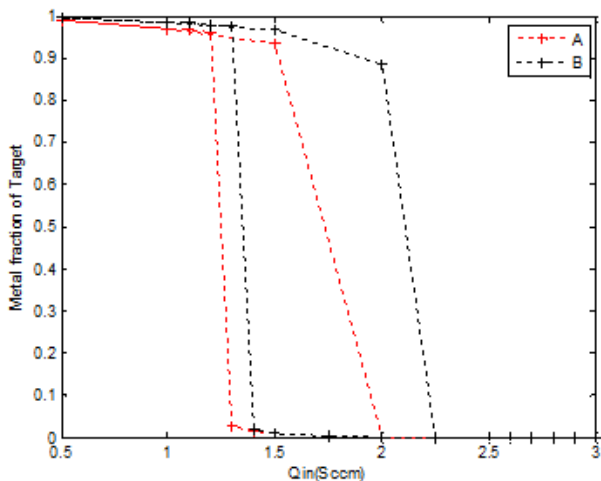
پروفیل لانه‌گزینی اتم‌های واکنشی در عمق تارگت، $p(x)$ ، به شکل گوسی در نظر گرفته شده که مقدار متوسط و میزان انحراف معیار آن بر اساس بمباران تارگت Zn با اتم‌های اکسیژن محاسبه شده است [۲۱].

۴- نتایج حاصل از شبیه‌سازی فرآیند رسوب

Ar/O₂ در پلاسمای ZnO

در تمامی طراحی‌های انجام شده برای شبیه‌سازی سیستم، از جمله پدیده‌های قابل توجه، این است که برای تمامی پارامترهای مورد بررسی از جمله فشار سیستم و یا متوسط درصد فلزی تارگت و زیرلایه، رفتار هیستریزیسی مشاهده می‌شود. در این شبیه‌سازی‌ها، فلوی گاز واکنشی اکسیژن به شکل تدریجی از ۰,۵sccm تا ۵sccm افزایش یافته و مجدداً تا ۰,۵sccm کاهش می‌یابد. در ورود گاز واکنشی، هر گام افزایشی، برابر با ۰,۲۵sccm در نظر گرفته شده که به منظور افزایش دقت، این مقدار در نواحی نزدیک به نقاط بحرانی (نقاط شکست منحنی هیستریزیس) به ۰,۰۵sccm کاهش می‌یابد. در شکل ۵، تغییر فشار گاز واکنشی در محفظه بر حسب فلوی ورودی گاز، در سه شرایط مختلف A، B و C نشان داده شده است. شبیه‌سازی A در شرایطی انجام شده، که تارگت و زیرلایه به شکل تک-سلولی^{۴۳} فرض شده‌اند و اثر رسوب مجدد روی تارگت در نظر گرفته نشده و فرض بر این است که پروفیل جریان یونی به سمت تارگت و زیرلایه، شکلی یکنواخت دارند. شبیه‌سازی B با این تفاوت انجام شده که در آن توصیف تارگت به شکل چند-سلولی^{۴۴} بوده و در آن پروفیل جریان یونی اعمال شده به سطح تارگت، دارای توزیع گوسی است. شبیه‌سازی C از B به واسطه اعمال یک پروفیل جریان یونی گوسی به سطح زیرلایه، و تقسیم‌بندی چند-سلولی زیرلایه متمایز می‌گردد. همان‌طور که در شکل ۵ نشان داده شده است، در شرایط مختلف شبیه‌سازی

ترکیبات اکسید تبدیل می‌شوند. این نواحی شامل مناطق مرکزی و لبه‌های تارگت هستند. در این میان مناطقی که تحت تأثیر چگالی جریان بیشتری (یعنی ناحیه حلقوی درونی تارگت) هستند، با توجه به نرخ کندوپاش بیشتر سطح و حکاری آن، برای مدت زمان طولانی‌تر در وضعیت فلزی باقی خواهند ماند. به صورت مشابه در مسیر بازگشتی منحنی هیستریزس از وضعیت اکسید شده به وضعیت فلزی، ناحیه حلقوی درونی تارگت، با سرعت بیشتری به وضعیت فلزی باز خواهد گشت. در واقع به دلیل وجود اکسیداسیون غیریکنواخت سطح تارگت و عدم واکنش سریع فلز واقع در ناحیه حلقوی درونی تارگت، سیستم برای مدت زمان بیشتری در وضعیت فلزی^{۴۶} قرار می‌گیرد (نسبت به حالتی که در آن جریان یونی به شکل یکنواخت به سطح تارگت اعمال می‌شود). چنین امری توجه کننده تغییر مکان اولین نقطه بحرانی هیستریزس است. همچنین در مسیر برگشت با توجه به این که، نرخ کندوپاش در ناحیه مذکور بیش از مقدار متوسط است، سطح تارگت با سرعت بیشتری به وضعیت فلزی باز خواهد گشت. این پدیده توجیهی برای تغییر مکان دومین نقطه بحرانی نمودار است. علاوه بر این تغییر وضعیت تارگت برای دومین نقطه بحرانی نسبت به اولین نقطه بحرانی به صورت ناگهانی و با شیب تیزتری انجام می‌شود. در سامانه عملی کندوپاش و در فرآیند لایه‌نشانی ZnO، شکل ۶ این نکته را یادآوری می‌کند که اگر در انتهای فرآیند رسوب یک نمونه، پلاسمای Ar/O_2 خاموش گردد، سطح تارگت دارای ترکیبات اکسیدی خواهد بود و برای این که در رسوب نمونه بعدی علاوه بر اعمال فلوی اکسیژن، منبع دیگری برای تولید ترکیبات اکسیدی در پلاسمای وجود نداشته باشد، پیش از شروع فرآیند رسوب بعدی، سطح تارگت باید حکاری شود.

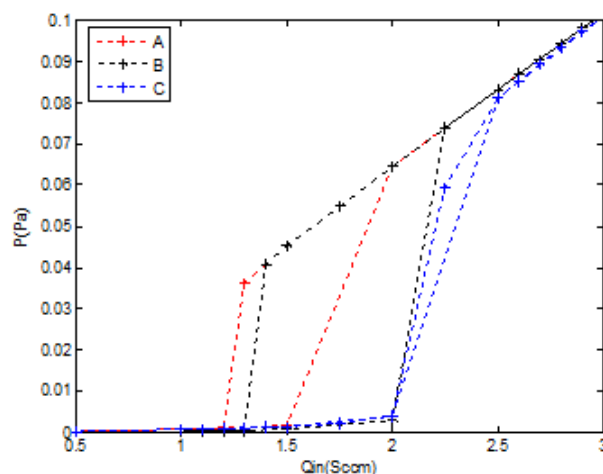


شکل (۶): متوسط درصد فلزی سطح تارگت به شکل تابعی از فلوی گاز واکنشی اکسیژن

۴-۲- شبیه‌سازی تأثیر پروفیل رسوب گوسی بر وضعیت زیرلایه

شبیه‌سازی C از B به واسطه اعمال یک پروفیل جریان یونی گوسی شکل به سطح زیرلایه، و تقسیم‌بندی چند-سلولی زیرلایه متمایز می‌-

(A, B و C)، فشار محفظه نسبت به فلوی ورودی گاز واکنشی، رفتاری هیستریزس دارد. رفتار هیستریزس مشاهده شده به دلیل مصرف گاز واکنشی از طریق تارگت و زیرلایه است. در این میان، تغییر محل نقاط بحرانی هر یک از نمودارهای هیستریزس، به شدت تحت تأثیر نوع پروفیل جریان یونی است که به سمت تارگت و زیرلایه در حرکت‌اند. علاوه بر این، نحوه مش‌بندی سطح تارگت و زیرلایه نیز تعیین‌کننده محل نقاط بحرانی و عرض منحنی‌های هیستریزس در شکل مذکور است.



شکل (۵): فشار گاز واکنشی بر حسب فلوی ورودی گاز اکسیژن

۴-۱- شبیه‌سازی تأثیر پروفیل جریان یونی گوسی بر وضعیت تارگت

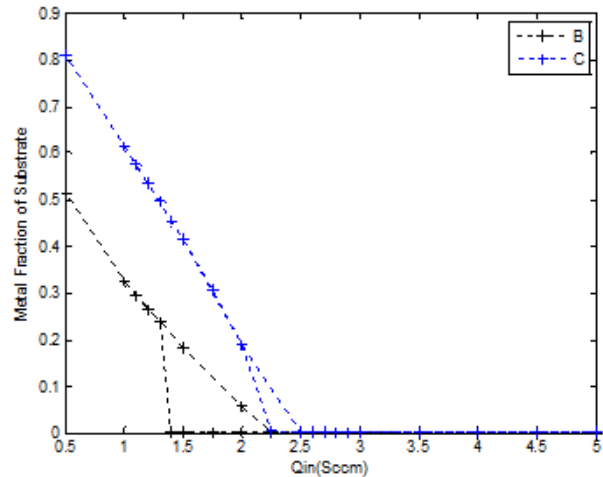
در شبیه‌سازی A، تارگت و زیرلایه به شکل تک-سلولی فرض شده‌اند و اثر رسوب مجدد روی تارگت در نظر گرفته نشده و فرض بر این است که پروفیل جریان یونی به سمت تارگت و زیرلایه، شکلی یکنواخت دارد. شبیه‌سازی B با این تفاوت انجام شده که در آن توصیف تارگت به شکل چند-سلولی بوده و در آن پروفیل جریان یونی اعمال شده به سطح تارگت، دارای توزیع گوسی است. شکل ۶ وضعیت سطح تارگت را از نقطه نظر میزان متوسط درصد فلزی (رابطه (۷))، به شکل تابعی از فلوی گاز واکنشی، نشان می‌دهد [۳۷، ۳۸]. به شکل غیر منتظره‌ای، مشابه با آنچه برای فشار جزئی گاز واکنشی مشاهده شد، برای این پارامتر نیز رفتاری هیستریزس مشاهده می‌شود. رفتار هیستریزس تارگت مستقیماً مرتبط با ولتاژ تخلیه سیستم است. تغییر هیستریزسی ولتاژ تخلیه، به دلیل تغییر بازده الکترون ثانویه^{۴۵} در سطح تارگت است [۳۹-۴۱]. تغییر مکان اولین و دومین نقطه بحرانی به سمت فلوی بیشتر گاز واکنشی در شبیه‌سازی B را می‌توان به دلیل اعمال جریان یونی به سطح تارگت، با پروفیلی غیر یکنواخت دانست. چنین پروفیل جریانی، اکسیداسیون تدریجی سطح تارگت را به همراه خواهد داشت. مطابق این شکل، با افزایش فلوی گاز واکنشی، نواحی از تارگت که تحت تأثیر چگالی جریان کمتری قرار دارند، زودتر از دیگر نقاط به

این نرم‌افزار، عدم محاسبه دقیق درصد یونیزاسیون ذرات گاز واکنشی و گاز بی‌اثر در پلاسمای میان‌الکترودها است. در مدل استفاده شده برای پلازما در این نرم‌افزار، درصد یونیزاسیون، با تقریب، متناسب با فشار گاز در محفظه محاسبه می‌شود. از جمله پیشنهادات ارائه شده در این زمینه، افزایش دقت در محاسبه درصد یونیزاسیون گازهای واکنشی و بی‌اثر به کمک نرم‌افزار XPDPI است. نرم‌افزار XPDPI، که نرم‌افزار تخصصی جهت شبیه‌سازی پلاسمای کندوپاش است، یونیزاسیون گازهای واکنشی و بی‌اثر در پلازما را مبتنی بر الگوریتم مونت‌کارلو و با دقت بالایی محاسبه می‌کند. بنابراین می‌توان میزان درصد یونیزاسیون بدست آمده از XPDPI را به عنوان داده‌های ورودی RSD2013 قرار داد و بدین ترتیب پروفیل جریان یونی که به سمت زیرلایه و یا تارگت در حرکتند را با دقت بیشتری محاسبه نمود. همچنین علیرغم این که در RSD2013، پروفیل جریان یونی به سمت زیرلایه و تارگت فقط به دو صورت یکنواخت و گوسی قابل شبیه‌سازی است، XPDPI قابلیت شبیه‌سازی پروفیل‌های یونی انعطاف‌پذیرتری را داراست. از سوی دیگر، نتایج شبیه‌سازی فرآیند کندوپاش واکنشی Zn در پلاسمای Ar/O₂ نشان داد، که به منظور رسوب لایه نازک ZnO، در انتهای فرآیند، به جای تخلیه گاز واکنشی از سیستم، باید پلاسمای Ar/O₂ را خاموش کرد. زیرا در صورتی که در حضور پلازما، گاز واکنشی اکسیژن از محفظه تخلیه گردد، درصد اتم‌های روی فاقد اکسیژن در زیرلایه به سرعت افزایش خواهد یافت و در آنالیز خواص سطحی لایه نازک ZnO، اکسیژن نقش کم‌رنگ‌تری خواهد داشت. همچنین، طبق نتایج بدست آمده، مشاهده گردید که در صورتی که در انتهای فرآیند رسوب یک نمونه، پلاسمای Ar/O₂ خاموش گردد، سطح تارگت Zn نیز دارای ترکیبات اکسیدی است و برای این که در رسوب نمونه دیگر، علاوه بر اعمال فلوی اکسیژن، منبع دیگری برای تولید ترکیبات اکسیدی در پلازما وجود نداشته باشد، باید پیش از شروع فرآیند رسوب بعدی، سطح تارگت حکاری گردد.

مراجع

- [1] W. D. Davis and T. A. Vanderslice, "Ion energies at the cathode of a glow discharge", Phys. Rev., vol. 131, 1963, pp. 219-1963.
- [2] K. Rickards, "Energies of particles at the cathode of a glow discharge", Vacuum, vol. 34, 1984, pp. 559-562.
- [3] Z. Wronski, "Ion energy distributions in a special glow-discharge source", Vacuum, vol. 36, 1986, pp. 329-335.
- [4] G. A. Hebner, J. T. Verdeyen, and M. J. Kushner, "An experiment study of a parallel-plate radio-frequency discharge: Measurements of the radiation temperature and electron density", J. Appl. Phys., vol. 63, 1988, pp. 2226-2236.
- [5] G. G. Lister, "Low-pressure gas discharge modeling", J. Phys. D, vol. 25, 1992, pp. 1649-1680.
- [6] J. P. Verboncoeur, M. V. Alves, V. Vahedi, and C. K. Birdsall, "Simultaneous Potential and Circuit Solution for 1D Bounded Plasma Particle Simulation Code", J. Comput. Phys., vol. 104, 1993, pp. 321-328.

گردد. همانطور که در بخش قبل نیز بدان اشاره شد، در شبیه‌سازی B، توصیف تارگت به شکل چند-سلولی بوده و در آن پروفیل جریان یونی اعمال شده به سطح تارگت، دارای توزیع گوسی است. اما در آن، زیرلایه تک سلولی و پروفیل جریان یونی گوسی به سمت زیرلایه نیز یکنواخت فرض شده بود. با بررسی وضعیت زیرلایه به کمک شاخص درصد فلزی آن، در مقایسه با وضعیت تارگت، رفتاری هیستریزیس اما با عرض کوچک‌تر قابل مشاهده است.



شکل (۷): رفتار هیستریزیس متوسط درصد فلزی زیرلایه بر حسب فلوی گاز واکنشی، برای شبیه‌سازی B و C

متوسط تغییرات وضعیت تارگت و زیرلایه در شکل ۷ برای شبیه‌سازی‌های B و C نشان داده شده است. مطابق این شکل، متوسط درصد فلزی زمانی که پروفیل رسوب به شکل گوسی در نظر گرفته شده و سطح زیرلایه به شکل چند-سلولی تقسیم‌بندی شده است (شبیه‌سازی C) نسبت به حالتی که پروفیل رسوب یکنواخت بوده و زیرلایه تک-سلولی در نظر گرفته شده (شبیه‌سازی B)، کاهش یافته است. در واقع پروفیل رسوب غیریکنواخت دلیلی برای توجیه این اثر است. در این مورد نیز، مناطقی از سطح زیرلایه که در معرض فلوی کمتری از ذرات فلزی اسپاتر شده هستند، به سرعت با اکسیژن واکنش داده و میزان درصد ذرات فلزی زیرلایه را کاهش می‌دهند. در سامانه عملی کندوپاش و در فرآیند رسوب نمونه‌های ZnO، شکل ۷ این نکته را یادآوری می‌کند که برای رسوب لایه نازک ZnO، در انتهای فرآیند به جای تخلیه گاز واکنشی از سیستم، باید پلاسمای Ar/O₂ را خاموش نمود. زیرا مطابق این شکل در صورتی که با وجود پلازما، گاز واکنشی از محفظه تخلیه گردد، درصد Zn فاقد اکسیژن در سطح لایه نازک به سرعت افزایش خواهد یافت و در آنالیز خواص سطحی لایه نازک ZnO، اکسیژن نقش کم‌رنگی خواهد داشت.

۵- نتیجه‌گیری

در این مقاله، مدل‌سازی ریاضی فرآیند کندوپاش Zn در RSD2013 به تفصیل مورد مطالعه قرار گرفته است. از جمله مهمترین نقاط ضعف

- compound thin films", Surf. Coat. Technol., vol. 135, 2000, pp. 48-59.
- [24] D. Depla, S. Mahieu, R. De Gryse, "Magnetron sputter deposition: Linking discharge voltage with target properties", Thin Solid Films, vol. 517, March 2009, pp. 2825-2839.
- [25] D. Depla, X. Y. Li, S. Mahieu, K. V. Aeken, W. P. Leroy, J. Haemers and A. Bogaerts, "Rotating cylindrical magnetron sputtering: Simulation of the reactive process" Journal of Applied Physics, vol. 107, June 2010, pp. 113307.
- [26] S. Berg, H. O. Blom, T. Larsson and Nender, "Modeling of reactive sputtering of compound materials", J. Vac. Sci. Technol. A, vol. 5, 1987, pp. 202-207.
- [27] K. Strijckmans, W. P. Leroy, R. D. Gryse and D. Depla, "Modeling reactive magnetron sputtering: Fixing the parameter set", Surf. Coat. Technol., vol. 206, 2012, pp. 3666-3675.
- [28] K. Strijckmans and D. Depla, "A time-dependent model for reactive sputter Deposition", J. Phys. D: Appl. Phys., vol. 47, 2014, p. 235302(13).
- [29] A. Bogaerts, E. Bultinck, I. Kolev, L. Schwaederle, K.V. Aeken, G. Buyle and D. Depla, "Computer modelling of magnetron discharges", J. Phys. D: Appl. Phys., vol. 42, 2009, p. 194018.
- [30] E. Bultinck, "Numerical simulation of a magnetron discharge utilized for the reactive sputter deposition of titanium nitride and oxide layers", Ph.D Thesis, University of Antwerp, 2009.
- [31] D. Depla, and R. D. Gryse, "Influence of oxygen addition on the target voltage during reactive sputtering of aluminum", Plasma Sources Sci. Technol., vol. 10, 2001, p. 547.
- [32] D. Depla, S. Heirwegh, S. Mahieu, J. Haemers and R. D. Gryse, "Understanding the discharge voltage behavior during reactive sputtering of oxides", J. Appl. Phys., vol. 101, 2007, p. 013301.
- [33] W. Vandervorst, T. Janssens, C. Huyghebaert and B. Berghmans, "The fate of the (reactive) primary ion: Sputtering and desorption", Appl. Surf. Sci., vol. 255, 2008, pp. 1206-1214.
- [34] W. P. Leroy, S. Mahieu, R. Persoons and D. Depla, "Quantification of the incorporation coefficient of a reactive gas on a metallic film during magnetron sputtering: The method and results", Thin Solid Films, vol. 518, 2009, pp. 1527-1531.
- [35] K. Strijckmans, D. Depla, "Modeling target erosion during reactive sputtering", Applied Surface Science, March 2015, pp. 1-14.
- [36] www.wxwidgets.org
- [37] D. Depla and R. D. Gryse, "Cross section for removing chemisorbed oxygen from an aluminum target by sputtering", J. Vac. Sci. Technol. A, vol. 20, 2002, pp. 521-525.
- [38] D. Depla, J. Haemers and R. D. Gryse, "Discharge voltage measurements during reactive sputtering of oxides", Thin Solid Films, vol. 515, 2006, pp. 468-471.
- [39] A. Kosarian, M. Shakiba, E. Farshidi, "Role of Hydrogen Treatment on Microstructural and Opto-electrical Properties of Amorphous ITO Thin Films Deposited by Reactive Gas-timing DC Magnetron Sputtering", J Mater Sci: Mater Electron, vol 28, April 2017, pp.10525-10534, DOI 10.1007/s10854-017-6826-5.
- [40] M. Shakiba, A. Kosarian & E. Farshidi, "Effects of processing parameters on crystalline structure and optoelectronic behavior of DC sputtered ITO thin film", J [7] V.Vahedi, R. W. Stewart, and M. A. Lieberman, "Analytic model of the ion angular distribution in a collisional sheath", J. Vac. Sci. Technol. A, vol. 11, 1993, pp. 1275-1282.
- [8] V. Vahedi and M. Suranda, "A Monte Carlo Collision model for the particle-in-cell method: applications to argon and oxygen discharges", Comput. Phys. Comm., vol. 87, 1995, pp.179-198.
- [9] C. K. Birdsall and A. B. Langdon, "Plasma Physics via Computer Simulations", Bristol Philadelphia, New York, Adam Hilger, Philadelphia, IOP, 1991.
- [10] Plasma Theory and Simulation Group at University of California, Berkeley. Xpdpl v.3.5 plasma simulation software
- [11] K. S. Mogensen, "Deposition of TiN Coating Using Pulsed DC PACVD- Plasma Investigation and Coating Characterization", Ph.D. Thesis, University of Aarhus, Institute of Physics and Astronomy, 1997.
- [12] Mattox DM, "Handbook of physical vapor deposition (PVD) processing", William Andrew, United States of America, April 2010.
- [13] Klaus Ellmer, "Magnetron sputtering of transparent conductive zinc oxide: relation between the sputtering parameters and the electronic properties", Journal of Physics D: Applied Physics, Volume 33, Number 4, 2000.
- [14] D Depla, S Heirwegh, S Mahieu and R De Gryse, "Towards a more complete model for reactive magnetron sputtering", Journal of Physics D: Applied Physics, Volume 40, Number 7, 2007.
- [15] Tuan Anh Pham, Yuan Ping, Giulia Galli, "Modelling heterogeneous interfaces for solar water splitting", Nature Materials volume 16, 2017, pp. 401-408.
- [16] V P Parkhutik, V I Shershulsky, "Theoretical modelling of porous oxide growth on aluminium", Journal of Physics D: Applied Physics, Volume 25, Number 8, 1992.
- [17] A.M.K.Dagamseh, B.Vet, P.Šutta, M.Zeman, "Modelling and optimization of a-Si:H solar cells with ZnO:Al back reflector", Volume 94, Issue 12, 2010, pp. 2119-2123.
- [۱۸] محمدجواد کیانی، مسلم زارع، "طراحی و ساخت حسگر اکسید قلع با حساسیت بالا به روش سل ژل و تکنیک لایه نشانی چرخشی"، مجله مهندسی برق و الکترونیک ایران، جلد ۱۱، شماره ۲، صفحات ۴۳-۴۸، تهران، ۱۳۹۳.
- [۱۹] محمدجواد کیانی، علیرضا صالحی، "لایه نشانی نازک سنسور گازی مبتنی بر نیمه هادی اکسید قلع با روش غوطه وری"، مجله مهندسی برق و الکترونیک ایران، جلد ۱۳، شماره ۴، صفحات ۶۵-۷۰، تهران، ۱۳۹۵.
- [۲۰] شه روز نصیریان، محمد مهدی شکروی، "مطالعه ی اثر رطوبت بر خصوصیات حسگری گاز دی اکسید کربن نانوسیم های اکسید روی حمایت شده بوسیله ی شبکه ی پلی وینیل الکل در دمای اتاق"، مجله مهندسی برق و الکترونیک ایران، جلد ۱۶ شماره ۲ صفحات ۱-۷، تهران، ۱۳۹۸.
- [21] K Strijckmans and D Depla, "A time-dependent model for reactive sputter Deposition", J. Phys. D: Appl. Phys., vol. 47, 2014, pp. 235302(13).
- [۲۲] مریم شکیبا، " بررسی و تنظیم شرایط رسوب لایه نازک ITO در سلول خورشیدی سیلیکن آمورف"، رساله دکتری، دانشگاه شهید چمران اهواز، بهمن ۱۳۹۵.
- [23] I. Safi, "A novel reactive magnetron sputtering technique for producing insulating oxides of metal alloys and other

Mater Sci: Mater Electron, vol 28, September 2016, pp. 787–797, DOI 10.1007/s10854-016-5591-1.

- [41] A. Kosarian, M. Shakiba, E. Farshidi, “Role of sputtering power on the microstructural and electro-optical properties of ITO thin films deposited using DC sputtering technique”, IEEJ Transaction on Electrical and Electronic Engineering, vol 13, September 2017, pp. 27–31, DOI 10.1002/tee.22494.

-
- 1 collisional processes
 - 2 fluid approach
 - 3 particle-in-cell
 - 4 monte-carlo collision
 - 5 X-Windows Plasma Device Planar
 - 6 Angular emission distribution
 - 7 Under-Cosine
 - 8 Over-Cosine
 - 9 three entities
 - 10 subsurface region
 - 11 first-order partial differential equations
 - 12 one space coordinate
 - 13 mass flow controller
 - 14 The gas flow
 - 15 The flux of reactive gas particles
 - 16 metal fraction
 - 17 chemisorbed fraction
 - 18 compound fraction
 - 19 a reacted particle
 - 20 a metal particle
 - 21 particle
 - 22 unbounded reactive species
 - 23 reactive atom
 - 24 electron emission yield
 - 25 implanted reactive atoms
 - 26 compound particle
 - 27 averaged particle fractions
 - 28 the affinity for chemisorption
 - 29 availability of metal particle
 - 30 sticking probability
 - 31 flux of reactive gas
 - 32 time-dependent
 - 33 ion current profile
 - 34 deposition profile
 - 35 redeposition profile
 - 36 pressure-controlled
 - 37 flow-controlled
 - 38 4th order explicit Runge-Kutta algorithm
 - 39 Redeposition
 - 40 Scale
 - 41 Mean
 - 42 Deviation
 - 43 one-cell
 - 44 multi-cell
 - 45 secondary electron yield
 - 46 metal regime

