جهت تهیه فایل WORD این مقاله به سایت DaneshResan.com مراجعه نمایید و عنوان مقاله را جستجو کنید
بیش از ۲ میلیون مقاله فارسی در این سایت موجود میباشد

Archive of SID

بررسی نظری کنترل تابع کار فلزات توسط لایه نشانی

پیامی شبستر، محمود[۱] ؛ زارع دهنوی، ناصر[۱و۲و۳]

[۱] بخش فیزیک نظری و ریاضیات، مرکز تحقیقات هسته ای، سازمان انرژی اتمی ایران
[۲] گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران مرکز
[۳] گروه فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد علوم و تحقیقات

چکیده

در این مقاله، با استفاده از نظریه تابعی چگالی و روش ابتدا به ساکن، تابع کار سطح (۱۰۰) آلومینیوم محاسبه شده و سپس تغییرات تابع کار را در اثر نشاندن لایه های اتم طلا بر زیرلایه آلومینیوم بررسی کرده ایم. نتیجه محاسبات نشان می دهد که با نشاندن حداقل چهار لایه اتمی، تابع کار طلا را خواهیم داشت. بنابراین اگر تعداد لایه ها را یکی یکی افزایش دهیم، تابع کار به تدریج از مقدار ۴/۲۷ الکترون ولت به ۵/۴۷ الکترون ولت تغییر می یابد.

Theoretical investigation of the control of work function of metals by atomic layer deposition

Payami Shabestar, Mahmoud[1]; Zare Dehnavi, Naser[1,2,3]

[1]*Center for Theoretical Physics and Mathematics, Atomic Energy Organization of Iran, P. O. Box 11365-8486, Tehran*
[2]*Physics Department, Islamic Azad University, Branch of Central Tehran, Tehran*
[3] *Physics Department, Islamic Azad University, Branch of Sciences and Research, Tehran*

Abstract

In this work, employing the density functional theory and ab initio method, we have calculated the work function of the Al (100) surface and investigated the variation of the work function as a result of Au atomic layer deposition. Our results show that by deposition of at least four atomic layers, the work function of Au sets in. Hence, if the atomic layers are added one by one, the work function gradually changes from 4.27 eV to 5.47 eV.

PACS No.: 7100

مقدمه

در چند دهه اخیر، فیزیک سطوح و فصل مشترکها از اهمیت فزاینده ای برخوردار شده است. علت توسعه این شاخه را می توان در فناوری نیمه هادیها، مواد جدید، کاتالیستها، لایه نشانی مولکولی و غیره جستجو نمود. خواص الکتریکی و اپتیکی نانو ساختارهای مبتنی بر نیمه هادیهای متفاوت، توسط فصل مشترکها تعیین می شود. برای درک میکروسکوپی فرایند رشد، لازم است که فرایندهای سطحی در مقیاس اتمی مورد بررسی قرار گیرد.

امروزه، نظریه تابعی چگالی [۲و۱] به عنوان یک رهیافت قوی برای این گونه محاسبات ساختار الکترونی به کار می رود. ما در این بررسی از روش ابتدا به ساکن استفاده کرده ایم. برای این کار بسته نرم افزاری Wien2k [۳] را به کار برده ایم که بر اساس نظریه تابعی چگالی و امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل FP-LAPW محاسبات را انجام می دهد. برای انجام محاسبات سطح، لازم است که یک ابرسلول بسازیم که شامل تعداد کافی لایه اتمی و تعداد کافی لایه خلا باشد. برای محاسبات، ابتدا

جهت تهیه فایل WORD این مقاله به سایت DaneshResan.com مراجعه نمایید و عنوان مقاله را جستجو کنید
بیش از ۲ میلیون مقاله فارسی در این سایت موجود میباشد

Archive of SID

Al و Au را به تنهایی شبیه سازی کرده و سپس با استفاده از نتایج حاصل از آن و نتایج حاصل از شبیه سازی Au/Al(100) تغییرات تابع کار را به دست آوریم. از آنجا که الکترونها از لایه سطحی به بیرون نشت می کنند، لایه های سطحی دچار واهلش می شوند و بنابراین فاصله لایه های سطحی متفاوت از فواصل عمقی می شود. ما در این محاسباتمان از واهلش سطحی صرفنظر کرده ایم. محاسبات نشان می دهد که با افزودن حداقل چهار لایه اتمی Au بر زیر لایه Al می توان به تابع کار فلز طلا دست یافت.

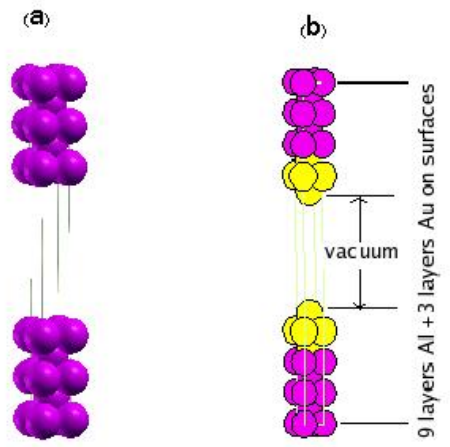
روشها و جزئیات محاسبات

در اینجا تمام محاسبات مبتنی بر نظریه تابعی چگالی و تقریب گرادیانی تعمیم یافته (GGA) برای تابعی تبادلی-همبستگی می باشد. ابتدا محاسبات را برای سطح Al(100) انجام می دهیم. بدین منظور از یک ابرسلول استفاده می کنیم که دارای ۹ لایه اتم Al و ۷ لایه خلا می باشد. علت در نظر گرفتن حداقل ۹ لایه اتمی آنست که در محاسبات جداگانه دیده ایم که در لایه های میانی این ابر سلول واهلش وجود نخواهد داشت و مثل عمق فلز رفتار می کند. علت در نظر گرفتن ۷ لایه خلا نیز به خاطر آنست که اتمهای لایه های بیرونی دو ابرسلول مجاور در راستای عمود بر سطح با هم برهمکنش نداشته باشند. شعاع کره های مافین-تین برای Al و Au برابر ۲,۰ بوهر در نظر گرفته شده است. برای امواج تخت خارج از کره مافین-تین، $RK_{\max} = 7.0$ و برای پتانسیل خارج از کره مافین-تین، $G_{\max} = 14.0$ واحد اتمی در نظر گرفته شده است. در داخل کره مافین-تین، برای بسط توابع موج از هارمونیکهای کروی با $l_{\max} = 10$ و برای بسط پتانسیل از هارمونیکهای کروی با $l_{\max} = 4$ استفاده شده است. انرژی جداسازی اوربیتالهای مغزه و والانس برای Al و Au به تنهایی، و برای Al در حضور Au برابر $-8.0Ry$ در نظر گرفته شده است.

قبل از اینکه محاسبات مربوط به سطح را انجام دهیم، ابتدا لازم است که با استفاده از محاسبات حجمی، ثابتهای تعادلی بلورهای آلومینیوم و طلا را به دست آوریم. نتیجه محاسبات به ازای تعداد ۲۰۰۰۰ نقطه k در ناحیه اول بریلوئن منجر به مقادیر ٤,٠٤ آنگستروم برای آلومینیوم و ٤,١٣ آنگستروم برای طلا شد. با توجه به اینکه ناهمخوانی دو ثابت شبکه بسیار کوچک می باشد، در لایه نشانی برای طلا نیز ثابت شبکه را برابر ثابت شبکه زیرلایه یعنی ٤,٠٤ آنگستروم در نظر می گیریم.

جهت انجام محاسبات سطح (١٠٠)، ابتدا یک ابر سلول با ساختار P می سازیم که در آن $a = b = 2.86$ آنگستروم و $c = 16.6 + 2.02(N-1)$ آنگستروم است. در اینجا، N برابر تعداد لایه های اتمی و ١٦,١٦ آنگستروم ضخامت خلا است.

در شکل 1(a) ، ابر سلول مناسب برای محاسبه سطح (١٠٠) آلومینیوم نشان داده شده است. شکل 1(b)، ابر سلول مناسب برای سه لایه طلای نشانده شده بر روی سطح (١٠٠) آلومینیوم می باشد.



شکل ۱ : (a)- ابرسلول مربوط به سطح (١٠٠) آلومینیوم، (b)- ابرسلول مربوط به سطح (١٠٠) آلومینیوم که ۳ لایه طلا بر روی آن نشانده شده است.

برای محاسبه تابع کار، یعنی حداقل انرژی لازم برای کندن یک الکترون از سطح (١٠٠)، لازم است که مقدار پتانسیل الکترواستاتیک در بینهایت، $\varphi(+\infty)$، و همچنین انرژی فرمی، E_F، را داشته باشیم. نقطه وسط خلا جایی است که بیشترین فاصله از سطح را دارد و بنابراین معادل نقطه $+\infty$ است. تابع کار توسط رابطه

جهت تهیه فایل WORD این مقاله به سایت DaneshResan.com مراجعه نمایید و عنوان مقاله را جستجو کنید
بیش از ۲ میلیون مقاله فارسی در این سایت موجود میباشد

Archive of SID

$$\Phi = \varphi(+\infty) - E_F \qquad (1)$$

داده می شود.

برای محاسبه خواص سطح بایستی از تعداد مناسبی نقطه k در ناحیه بریلوئن استفاده کنیم به طوری که اگر تعداد آن را زیادتر کنیم تاثیر محسوسی در نتایج محاسبات مشاهده نشود. محاسبات نشان داد که مش بندی $42\times42\times3$ دارای شرط فوق است و به ازای آن تابع کار آلومینیوم برابر ٤,٢٧ الکترون ولت و تابع کار طلا برابر ٥,٢١ الکترون ولت می شود. در جدول ١، مقادیر تابع کار محاسبه شده آلومینیوم و مقادیر تجربی مقایسه شده اند.

جدول١ : تابع کار بر حسب الکترون ولت برای سطح (١٠٠) آلومینیوم.

کار حاضر[GGA]	GGA[4]	تجربی[5]	تجربی[6]
٤,٢٧	٤,٢٤	٤,٤١±٠,٠٣	٤,٢٠±٠,٠٣

حال برای اینکه اثر لایه نشانی طلا بر روی آلومینیوم را بررسی کنیم، به ترتیب چهار ابرسلول مختلف را در نظر می گیریم که هر کدام یک لایه اتمی طلا بیشتر از قبلی داشته باشد. مثلا در شکل 1(b) موردی که سه لایه اتمی طلا نشانده شده، نشان داده شده است. برای هرکدام از این ابرسلولها جداگانه محاسبات خودسازگار را انجام داده و تابع کار را در هر مورد به دست آورده ایم. مقادیر به دست آمده برای تابع کار به ازای تعداد لایه ها نشان می دهد که با افزایش تعداد لایه ها به سرعت به تابع کار طلا می رسیم.

در جدول ٢، مقادیر تابع کار به ازای تعداد لایه های اتمی درج شده است.

جدول٢ : تابع کار بر حسب الکترون ولت برای آلومینیوم با لایه های طلا

تعداد لایه	٠	١	٢	٣	٤
تابع کار	٤,٢٧	٤,٩٩	٤,٩٩	٥,١٩	٥,٤٨

نتیجه گیری

در این کار، ما با استفاده از بسته محاسباتی Wien2k، که محاسبات ابتدا به ساکن بر اساس نظریه تابعی چگالی انجام می دهد، تابع کار سطح (١٠٠) آلومینیوم را محاسبه کرده و سپس با نشاندن لایه های طلا بر روی آن نشان داده ایم که با حداقل چهار لایه طلا می توان تابع کار را به حد تابع کار طلا رساند. به این ترتیب نشان داده ایم که می توان با کنترل تعداد لایه های نشانده شده، مقدار تابع کار را کنترل نمود. محاسبات واقعی تر که در آن واهلش لایه های سطحی و واهلش اتمهای نزدیک فصل مشترک در نظر گرفته شده باشد در حال انجام می باشد.

مرجع‌ها

[1]- P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. 136, B864 (1964).
[2]- W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. 140, A1133 (1965).
[3]- P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka, and J. Luitz, ***Wien 2k***, *An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties* (Karlheinz Schwarz, Techn. Universität Wien, Austria), 2001. ISBN 3-9501031-1-2.
[4]- J. L. F. Da Silva, Phys. Rev. B **71**, 195416 (2005).
[5]- J. K. Grepstad, P. O. Gartland, and B. J. Slagsvold, Surf. Sci. **57**, 348 (1976).
[6]- R. M. Eastment and C. H. B. Mee, J. Phys. F: Met. Phys. **3**, 1738 (1973).