



# 逢甲大學學生報告 ePaper

報告題名：

## 以電腦模式模擬結構區域 模型中薄膜的成長

A computer model for the growth of  
thin films in a structure zone model

作者：陳俞仲

系級：電機碩一

學號：m9802536

開課老師：田春林

課程名稱：薄膜技術

開課系所：電機所光電組

開課學年：98      學年度 第 二 學期



## 摘要

本研究提出一種利用原子彈道的簡單二維模型來探討薄膜的生長情況。在這個模型內，原子會筆直的撞擊已沉積的原子，並且會先生長成柱狀結構。而早在1977年時Dirks和Leamy提出了撞擊原子的鬆散遷移準則，原子會先遷移至最近的孔隙內，此孔隙是由另外兩個原子所形成的。而本研究所提出的模型，其鬆散準則主要是與已沉積原子的幾何位置有關。例如，欲沉積的原子，其鬆散遷移位置可能會緊黏著三、二或一顆原子，而這些緊黏的原子則是已經先沉積的原子。同時，本研究最主要的探討對於薄膜沉積的影響，包含了，基板溫度、沉積速率、入射角度、自我遮蔽效應與基板粗糙度，而基板種類也探討了非晶基板的影響。而本研究的結果與文獻上金屬薄膜沉積的結構區域模型(structure zone model (SZM))有非常好的一致性與品質。

**關鍵字：**金屬薄膜、結構區域模型、薄膜沉積

# 目錄

摘要.....	1
目錄.....	2
圖目錄.....	3
表目錄.....	4
第一章 緒論.....	5
1-1 研究動機.....	5
1-2 研究目的.....	5
1-3 研究方法.....	6
第二章 基本理論.....	7
2-1 電腦模型理論探討.....	7
2-2 自我遮蔽效應(self-shadowing effect)[16].....	11
2-3 表面擴散[19].....	12
2-4 結構區域模型(Structure Zone Model).....	13
第三章 結果與討論.....	16
3-1 典型的薄膜長成結果.....	16
3-2 垂直入射光滑基板的沉積模擬.....	17
3-2-1 沉積速率固定時，改變基板溫度.....	17
3-2-2 基板溫度固定時，改變沉積速率.....	18
3-3 垂直入射粗糙面與非晶面的沉積模擬.....	20
3-3-1 典型的粗糙面薄膜生長情形.....	20
3-3-2 不同沉積速率在粗糙面上薄膜生長情形.....	21
3-3-3 不同沉積速率在非晶面上薄膜生長情形.....	22
3-4 斜向入射平滑基板表面的薄膜生長.....	23
第四章 結論.....	26
參考文獻.....	27

## 圖目錄

圖 2- 1 原子沉積捕捉長度與可能沉積位置.....	8
圖 2- 2 原子擴散示意圖.....	11
圖 2- 3 沉積角度和柱狀傾斜角度關係示意圖.....	12
圖 2- 4 原子表面擴散示意圖.....	13
圖 2- 5 氣壓與溫度對薄膜長成之模型.....	14
圖 3- 1 典型薄膜長成過程.....	16
圖 3- 2 固定沉積速率情況下，改變基板溫度時薄膜長成情形.....	17
圖 3- 3 固定基板溫度時，不同的沉積速率所相對應的薄膜長成情形.....	18
圖 3- 4 不同的基板溫度與沉積速率下，擴散原子數與堆積密度曲線圖.....	20
圖 3- 5 粗糙表面的薄膜長成情形.....	21
圖 3- 6 固定溫度下，不同沉積速率在粗糙基板上的薄膜長成情形.....	22
圖 3- 7 固定溫度下，不同沉積速率在非晶基板上的薄膜長成情形.....	23
圖 3- 8 不同入射角度，在基板溫度 400 K 時，薄膜沉積情形.....	24
圖 3- 9 不同入射角度，在基板溫度 850 K 時，薄膜沉積情形.....	25



## 表目錄

表 2- 1 鍍膜參數對膜質的影響..... 15



# 第一章 緒論

## 1-1 研究動機

近年來薄膜技術蓬勃發展，應用上更是相當廣泛，而薄膜的製成技術主要有物理氣相沉積(PVD)、化學氣相沉積(CVD)與分子束磊晶法(MBE)，在微小結構上的研究顯得各為重要。因此，電腦模型來模擬薄膜生長的情況更是吸引了許多研究者的注意。電腦模擬可以代替理論方程式的解析結果，也使其他人可以更容易的瞭解薄膜的生長機制。而由於部分的參數研究在實際實驗上是相當困難的，故利用電腦模型來模擬各種參數下，薄膜長成情形是有必要的[1-9]。

## 1-2 研究目的

通常原子模型都是用來模擬 2D 薄膜微結構與其形態的。部分的 3D 原子沉積模型可以模擬各種不同的部分固體成分薄膜[9]。但是，這些數據都是相當不容易得到的，且模型內的架構調整部分都是經過人為的。而本文中，利用結構區域模型(SZM)中所有的區域進行薄膜沉積成長的模擬，好處是，只需要透過原子沉積的幾何狀況，就能利用簡單的模型來模擬其鬆弛與遷移現象，不需通過複雜的電腦模型運算模擬，故本研究所著重的是利用簡單的電腦模型來進行結構區域模型的模擬。

## 1-3 研究方法

本文利用 C++軟體來進行電腦模型的模擬分析。首先，必須先設定好欲沉積原子的基板模型，探討的基板模型包含光滑、粗糙與非晶表面。第二步，計算原子捕捉長度與原子適合的沉積區域。第三步，先隨機建立生長位置後，再重覆第二步的動作計算其捕捉長度。第四步，尋找適合捕捉長度的聚集點並且開始進行擴散模擬程序，最後結束模擬。而本文中探討對薄膜生長的影響參數，包含了基板溫度、沉積速率、表面粗糙度、入射角度、自我遮蔽效應與表面擴散，其中粗糙度方面也進行了非晶態基板的研究。

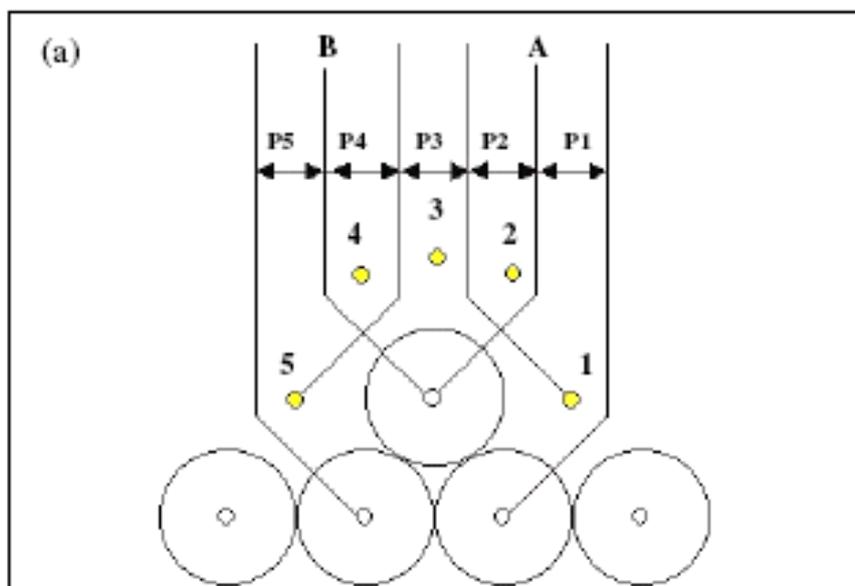


## 第二章 基本理論

### 2-1 電腦模型理論探討

Muller[1,2]與 Dirks 和 Leamy[10]利用較低的原子遷移率改進 Henderson 等人[3]的對薄膜生長的電腦模型模擬，是以 2D 的方法進行模擬。此模擬方式是假設一原子進行直線運動，並以 $\alpha$ 的角度入射到薄膜基板。並且在入射原子撞擊基板的瞬間會產生鬆弛現象，會沉積在最鄰近的孔隙內，且此孔隙是由至少兩個原子所組成的，會產生六方晶體的 2D 模型。

本文所使用的 2D 模型，可以用來表示 3D 晶格結構中的一個面向。而原子入射與沉積的方向如圖 1-1 所示，共有 1-5 個位置。



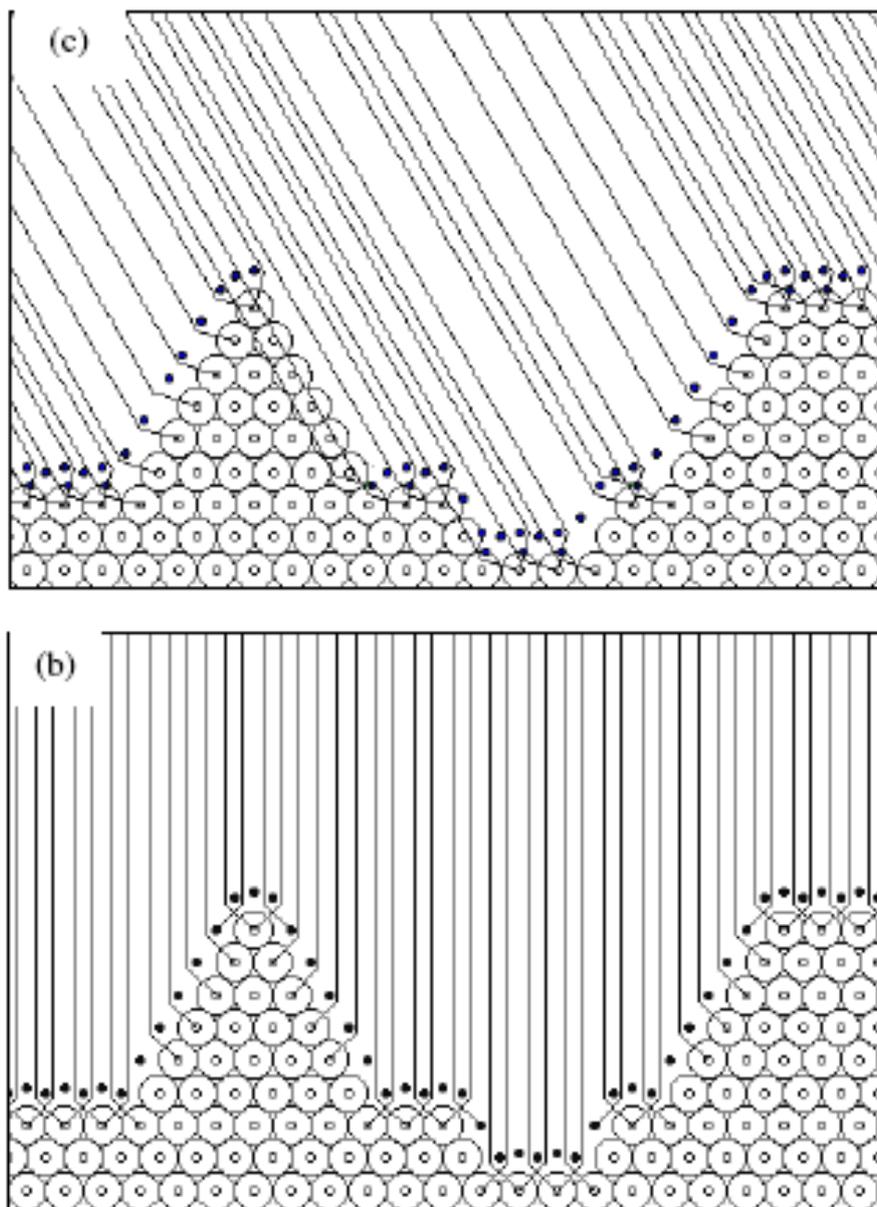


圖 2-1 原子沉積捕捉長度與可能沉積位置

(a) 晶格上兩個原子間的捕捉長度。P1-P5 為不同晶格點的鬆弛可能性(即點 1-5)。(b) 垂直氣相沉積的捕捉長度與可能沉積位置。(c) 斜向氣相沉積的捕捉長度與可能沉積位置。

為了證實本文所假設的鬆弛理論模型是可行的，如圖 1-1 所示，假設有一個 45 度的沉積線。假如初始的沉積位置在沉積線的上方，則鬆弛現象會發生在沉積線上方的某個位置點，如果初始的沉積是在沉積線的下方，那麼鬆弛則會發生在線下方的某一點。而圖 1-1 所見

以電腦模式模擬結構區域模型中薄膜的成長

的黃點，為平衡點，共有 1-5 個位置，而這五個點也分別代表著個別的捕捉長度。

應用在本文模型的擴散過程主要是應用文獻上提出的隨機氣相模型[1]。文獻所提出的是，當已沉積的原子並沒有被後沉積的原子所覆蓋時，且擁有足夠的熱能可以克服位能障(local potential barrier)時，那麼此原子則會產生隨機跳躍的情形。

在文中的模擬模型中考慮了沉積速率的影響，因此可以根據下(1)式，定義出兩個欲沉積蒸氣原子間的特性。

$$N = \frac{\tau_m}{\tau_h} \quad (1)$$

其中 N 表示為原子在理想狀況下，基板溫度為  $T_s$ ，兩個新沉積原子的時間間隔為  $\Delta t$  的基板表面下的平均跳躍數。上式中的  $\tau_m$  為沉積一層原子層所需的沉積時間，並可定義如下(2)式。

$$\tau_m = \frac{a_d}{r} \quad (2)$$

其中  $a_d$  表示原子與原子間到基板的垂直平均距離， $r$  為沉積速率。 $\tau_h$  是在基本溫度為  $T_s$  下的平均跳躍時間，在晶格震動頻率為  $\nu$  時， $\tau_h$  可表示為(3)式。

$$\tau_h = \frac{1}{\nu} \exp\left(\frac{Q}{KT_s}\right) \quad (3)$$

$Q$  亦代表表面活化能， $\nu$  的階層為  $10^{14} \text{s}^{-1}$ ，而  $K$  為波茲曼常數 (Boltzmann constant)。

透過波茲曼的統計，原子能會大於隨機熱能( $E$ )的可能性為[11]。

$$P(\varepsilon > E) = 1 - \exp\left(\frac{-E}{KT_s}\right) \quad (4)$$

因此，可得到隨機熱能( $E$ )為。

$$E = -KT_s \ln(1 - P^N) \quad 0 < P < 1 \quad (5)$$

其中  $P$  為均勻隨機分配數，其值介於  $(0,1)$ ，並且可以應用在 Monte Carlo 的抑制技術上[12, 13]。

根據 Muller[1]所提出的位能障公式可以表示為(6)式。

$$B_{ij} = \begin{cases} Q & N_j < N_i \\ Q + (N_j - N_i)\Phi & \text{otherwise} \end{cases} \quad (6)$$

其中  $\Phi$  為單一能鍵， $Q$  為表面擴散的活化能， $N_i$  為原子擴散前相鄰此原子的原子個數， $N_j$  為擴散後相鄰此擴散原子的原子個數(詳見圖 2-2， $A$  為未擴散前原子，相鄰原子種數 3； $A'$  與  $A''$  為擴散後原子，其相鄰原子分別為 2 與 4 個)。而參數  $Q$  與溫度以及金屬熔點溫度有關，而實驗結果則是參照文獻上 Neumann 和 Hirschwald 所研究的成果(只在  $T_s < 0.5 T_m$  有效)[1, 14]，亦可表示為下式。

$$Q = \left(5 + \frac{20T_s}{3T_m}\right)KT_m \quad (7)$$

將熱能與活化能障進行比較，就可以對原子遷移的可能性進行研究探討。假如原子有足夠的能量，可以用最低的能量進行遷移。而原子擴散長度可以透過下(7)式實現[15]。

以電腦模式模擬結構區域模型中薄膜的成長

$$\bar{x} = \frac{1}{2} a_d \left( \frac{\tau_m}{\tau_h} \right)^{1/2} \quad (8)$$

斜向蒸鍍的模擬也可以從圖 1(c)中知道，這也會改變其捕捉長度以及增加自我遮蔽效應的影響，因此薄膜會變為斜向沉積。

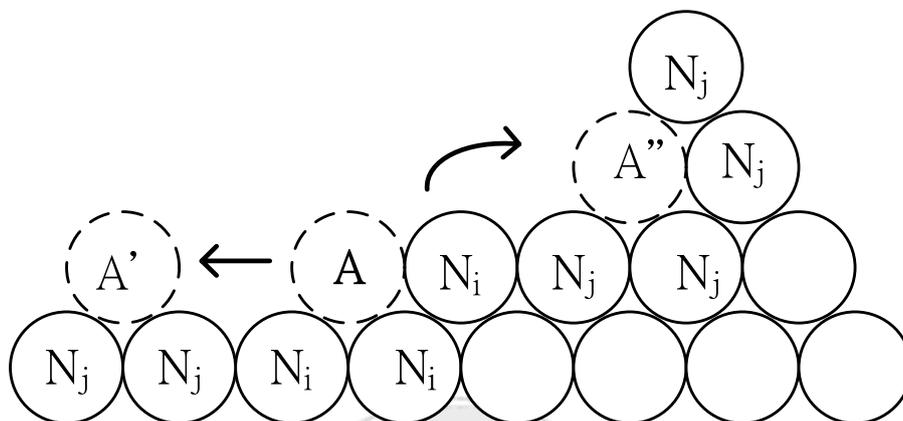


圖 2- 2 原子擴散示意圖

在接下來的部分，會在本文中陸續介紹影響鍍薄參數的名詞及其原理解釋。

## 2-2 自我遮蔽效應(self-shadowing effect)[16]

薄膜製成技術可分為正向沈積與斜向沈積技術，經正向沈積的製程技術可獲得均向性光學薄膜，在製鍍時，基板表面與蒸鍍源方向的沈積角 $\alpha$ 為0，其中沈積角 $\alpha$ 定義是蒸鍍材料入射到基板方向與基板法線之夾角，另一種薄膜製程技術為斜向沈積技術[17]，斜向沈積技術可獲得非均向性光學薄膜，圖2-3 所示，當有個入射角度 $\alpha$ 時，會因為自我遮蔽效應(self-shadowing effect)而使薄膜的長成斜向的柱狀結構，而此柱狀結構與基板法線的夾角為 $\beta$ ，為薄膜成長的斜角，而透過不同的入射沉積角度，也可以得到不同的生長柱狀結構，也為

以電腦模式模擬結構區域模型中薄膜的成長

本文所要探討的主題之一。

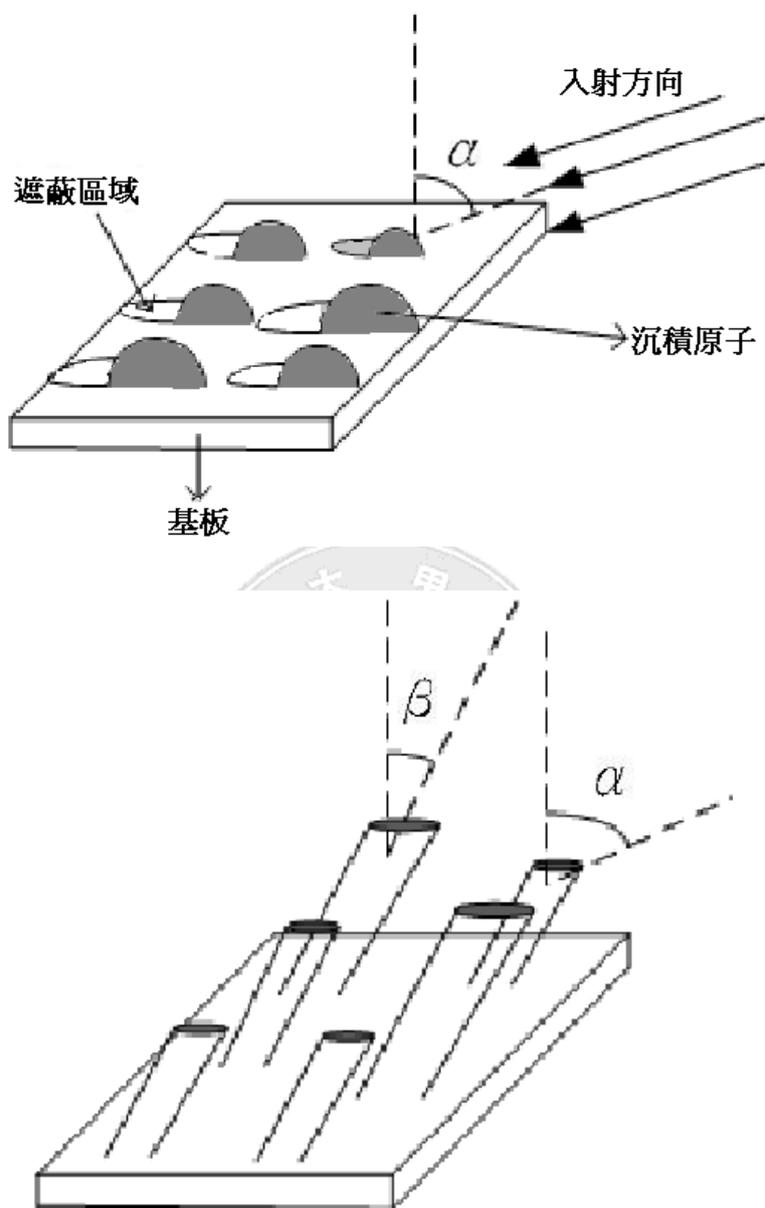


圖 2-3 沉積角度和柱狀傾斜角度關係示意圖

## 2-3 表面擴散[19]

表面擴散是原子、分子以及固態原子團常見的運動過程。此過程通常都被視為是粒子在表面間相鄰吸附原子間的跳躍現象，如圖 2-4。正如塊狀擴散過程，通常會隨著溫度的增加而提升擴散速率。

以電腦模式模擬結構區域模型中薄膜的成長

且跳躍過程已經不僅僅只有相鄰最近兩原子間的跳躍，也包含了與次鄰近原子之間的跳躍。表面擴散速率與其機制都會受到眾多因素的影響，包含了基板表面顆粒鍵結強度、表面晶格的位置、基板表面與化學能梯度間的吸引力以及排斥力。

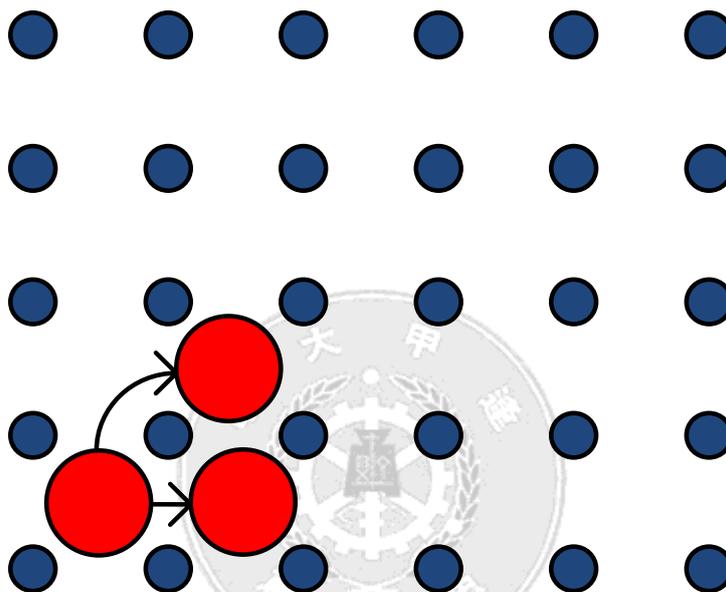


圖 2-4 原子表面擴散示意圖

## 2-4 結構區域模型(Structure Zone Model)

結構區域模型(Structure Zone Model, SZM)如圖 2-5 所示。此模型為 Thornton 於 1974 年發表的濺鍍膜的結構模型[20]，此模型不僅適用於濺鍍亦適用於熱蒸鍍。可以從圖 2-5 中得知，X 軸為基板溫度對上蒸鍍材質熔點的比值，Y 軸為氬氣之氣壓，由圖可知當基板溫度與蒸鍍物熔點溫度比值越來越高時，結構會慢慢從鬆散的多孔錐形晶體結構、稠密的纖維狀顆粒結構、柱狀晶體，變為最緻密的再結晶晶粒結構。而它們分別代表了區域 I(ZONE I)、過渡帶(ZONE T)、區域

以電腦模式模擬結構區域模型中薄膜的成長

II(ZONE II)與區域三(ZONE III)。由圖可以區域 I 的比值約為 0 至 0.1，過渡區為 0.1 至 0.32 而區域 II 和 III 分別為 0.32 至 0.5 與 0.5 至 1.0。

仔細觀察也可以發現，在同樣的基板溫度與蒸鍍物熔點溫度比例下，氬氣氣壓越高時結構會越鬆散，這個原因是因為，當氬氣氣壓越高時，薄膜表面越容易包覆氣體分子，因此其結構會越粗且鬆散，隨著溫度升高才能將薄膜內的氣體排除使結構變得緻密。

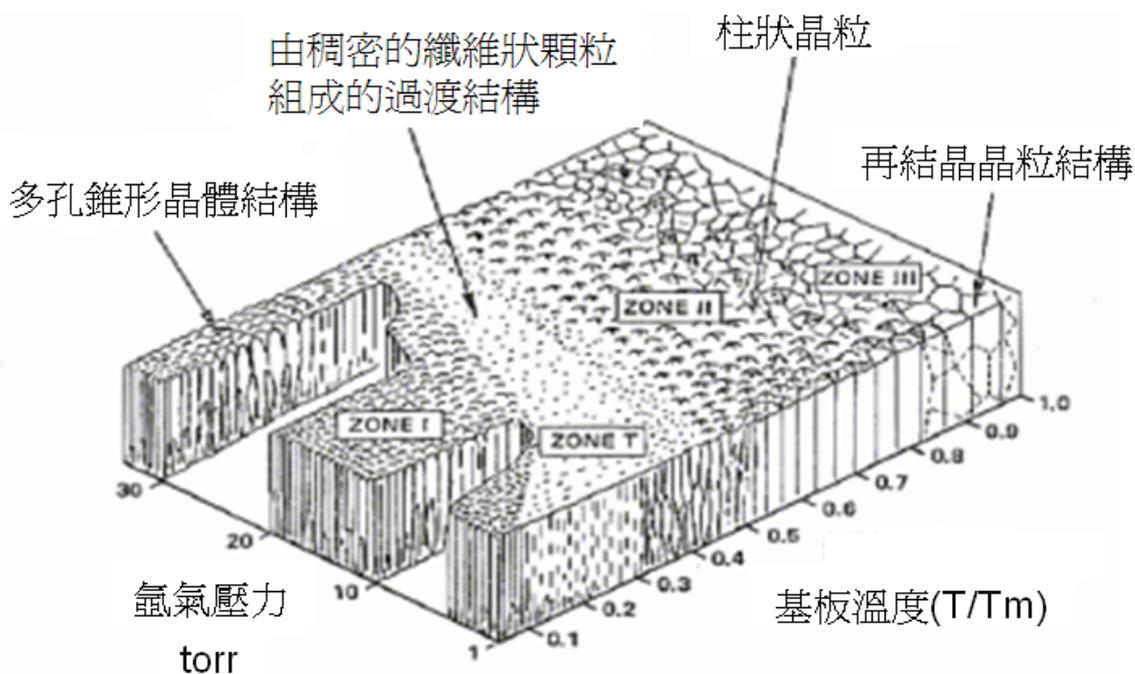


圖 2- 5 氣壓與溫度對薄膜長成之模型

而 Ritter[21]文獻中，也有將會影響鍍膜膜質的參數列出如表 2-1 所示。表中的輝光效應為用來清潔基板之用。其中○表示可能有關係、◎表示有關係、●表示可能很有關係、空白為沒關係者。

表 2- 1 鍍膜參數對膜質的影響

	基板 材料	基板 清潔	起始 材料	輝光 效應	蒸鍍 方法	蒸鍍 速率	真空 度	蒸發 角度	基板 溫度
折射率			◎	◎		●	●	●	●
穿透率			◎	◎	◎	○	○		○
散射	●	◎	○	○	◎	○	●	◎	●
物理厚度		◎		◎		◎	◎	◎	●
應力	●	○	●			◎	◎	◎	◎
附著性	◎	●		●	◎	◎	◎	◎	◎
硬度	◎	◎				◎	●	◎	●
溫度穩定性	◎					◎		◎	●
不溶解度	○	◎	◎	◎		◎	●	◎	●
雷射幅射 承受度	○	◎	◎	◎	◎	◎			◎
結構缺陷	●	◎	◎	◎	●	◎	○		◎

## 第三章 結果與討論

### 3-1 典型的薄膜長成結果

本文所用的模型設定，寬度為 106 個原子寬，模擬中所有的沉積原子數為 1250 個。有三分之一的原子數沉積在平坦的基板上，然後也會模擬粗糙面與非晶面基板。而為了模擬一個無限制的系統，必須套用週期性的邊界條件。

3D 模型在隧道掃描式顯微鏡(scanning tunneling microscope, STM) 影像中，薄膜實際在不同生長條件下的初始階段長成 [10, 23-29]，在本文的 2D 模型中可能只有在基板溫度高(即  $T_s > 750 \text{ K}$ ) 的情況下會發生。而我們模擬的典型薄膜長成條件為  $T_s = 800 \text{ K}$  與  $0.1 \text{ ML s}^{-1}$  如圖 3-1 所示，而每層原子數為 100，而此薄膜長成過程中在文獻中的模型在低溫度與低擴散下也可能發生。

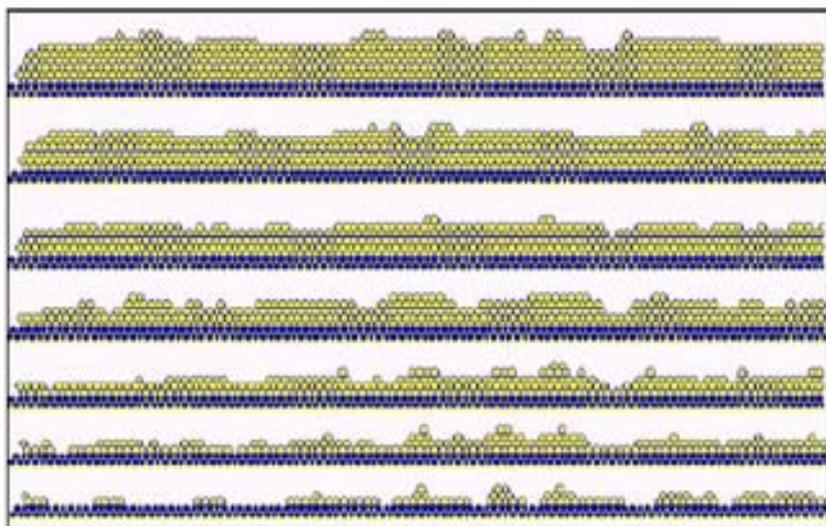


圖 3- 1 典型薄膜長成過程

## 3-2 垂直入射光滑基板的沉積模擬

本文中所套用的原子為鎳(Ni)原子，熔點  $T_m = 1726 \text{ K}$ ，鍵結能  $\Phi = -0.74 \text{ eV}$ ，一開始的實驗是將基板溫度固定為  $T_s = 600 \text{ K}$ ，沉積速率由  $R = 0.001 \text{ ML s}^{-1}$  上升至  $R = 100 \text{ ML s}^{-1}$ ，發現沉積現象並沒有明顯的變化。因此，在接下來的部分，會分別針對不同的沉積速率以及基板溫度的改變對於薄膜長成的影響與其結果進行探討。

### 3-2-1 沉積速率固定時，改變基板溫度

首先，先固定沉積速率為  $R = 0.001 \text{ ML s}^{-1}$  的情況下，針對不同的基板溫度進行模擬，而本模擬所使用的基板溫度分為  $T_s = 600 \text{ K}$  與  $T_s = 750 \text{ K}$ 。如圖 3-2 所示，白色圓球代表擴散原子；而灰色圓球代表非擴散原子。

我們可以明顯的觀察到，當沉積溫度為  $T_s = 600 \text{ K}$  時，其結構較為鬆散，孔隙較大，如圖 3-2(a)；而  $T_s = 750 \text{ K}$  時的情況下，其結構較為緻密，孔隙也較小，如圖 3-2(b)，這符合結構區域模型的敘述。

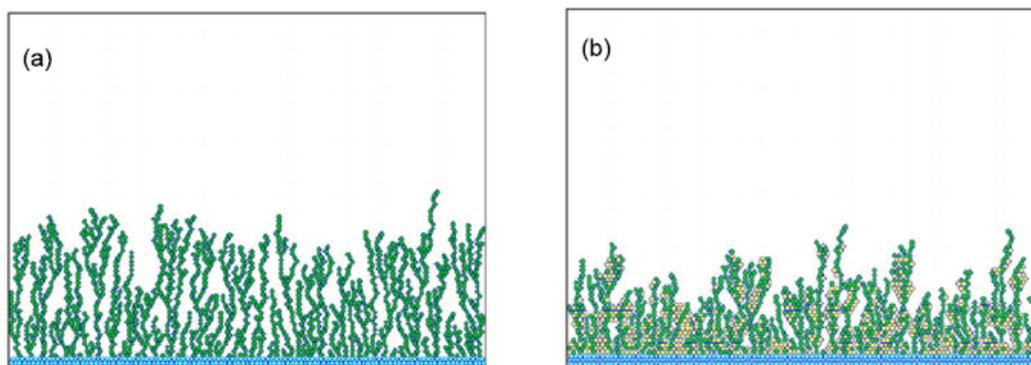


圖 3- 2 固定沉積速率情況下，改變基板溫度時薄膜長成情形  
(a)  $T_s = 600 \text{ K}$  (b)  $T_s = 750 \text{ K}$

### 3-2-2 基板溫度固定時，改變沉積速率

接下來，將基板溫度升至 850 K，如圖 3-3 所示，圖 3-3(a)至圖 3-3(f)表示沉積速率由慢到快排列，可以很明顯的觀察到隨著沉積速率的增加，被覆蓋的原子數也相對的增加，其中，白圓球代表擴散原子；而黑圓球代表被覆蓋的原子。

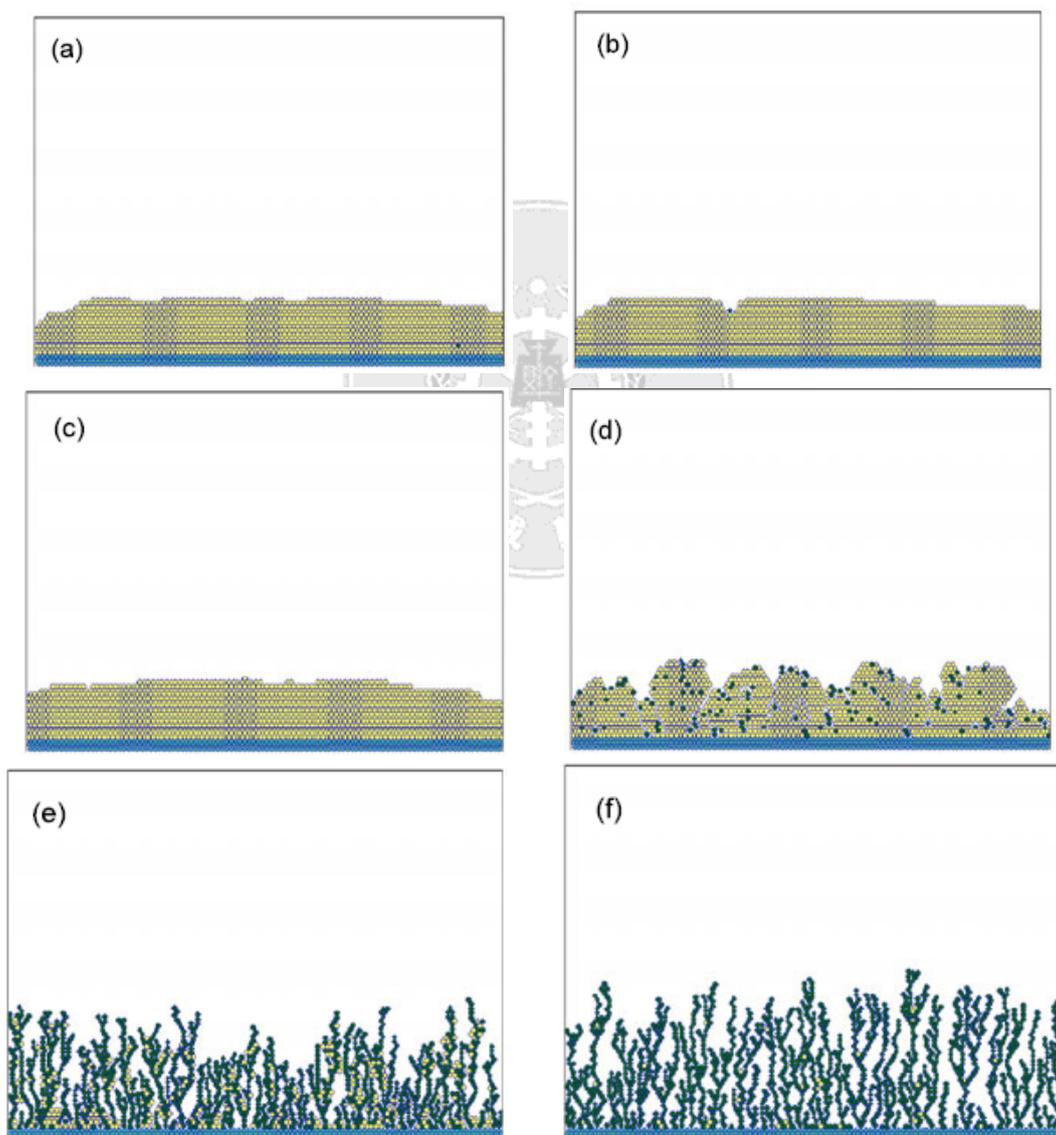


圖 3- 3 固定基板溫度時，不同的沉積速率所相對應的薄膜長成情形  
(a)  $R = 0.001 \text{ ML s}^{-1}$  (b)  $R = 0.01 \text{ ML s}^{-1}$  (c)  $R = 0.1 \text{ ML s}^{-1}$  (d)  $R = 1 \text{ ML s}^{-1}$   
(e)  $R = 10 \text{ ML s}^{-1}$  (f)  $R = 100 \text{ ML s}^{-1}$

接下來，我們將上述模擬結果繪如圖 5，圖 5(a)為在不同的基板溫度下，不同的沉積速率所相對應的擴散原子數的曲線圖；而圖 5(b)為在不同的基板溫度下，沉積速率所對應的堆積密度曲(Packing density)線圖。圖 5(a)所示，擴散原子數會隨著沉積速率的增加而減少，這是因為當沉積速率增加時，被覆蓋的原子數會增加，所以擴散原子數就相對的減少；也可以看到即便在基板溫度高的情況下，其能擴散的原子數也是相當稀少的(沉積速率由○至▲增加)。而圖 5(b)以看見，不論在小或大的沉積速率下，堆積密度都會在基板溫度約 550 K 時急遽增加，這是因為當基板溫度為 550 K 時，基板溫度與鎳的熔點比值約為 0.32，剛好通過過渡帶，而正準備進入區域 II，為晶格結構，所以堆積密度會急遽增加(沉積速率由○至△增加)；而當溫度約為 900 K 時，基板與鎳熔點的溫度比例約為 0.52 時會開始再結晶現象，所以其堆積密度在不同沉積速率下並沒有太大的差異，而這 550 K 與 900 K 這兩個點的結果與結構區域模型所預測的結果相符合[22-25]。

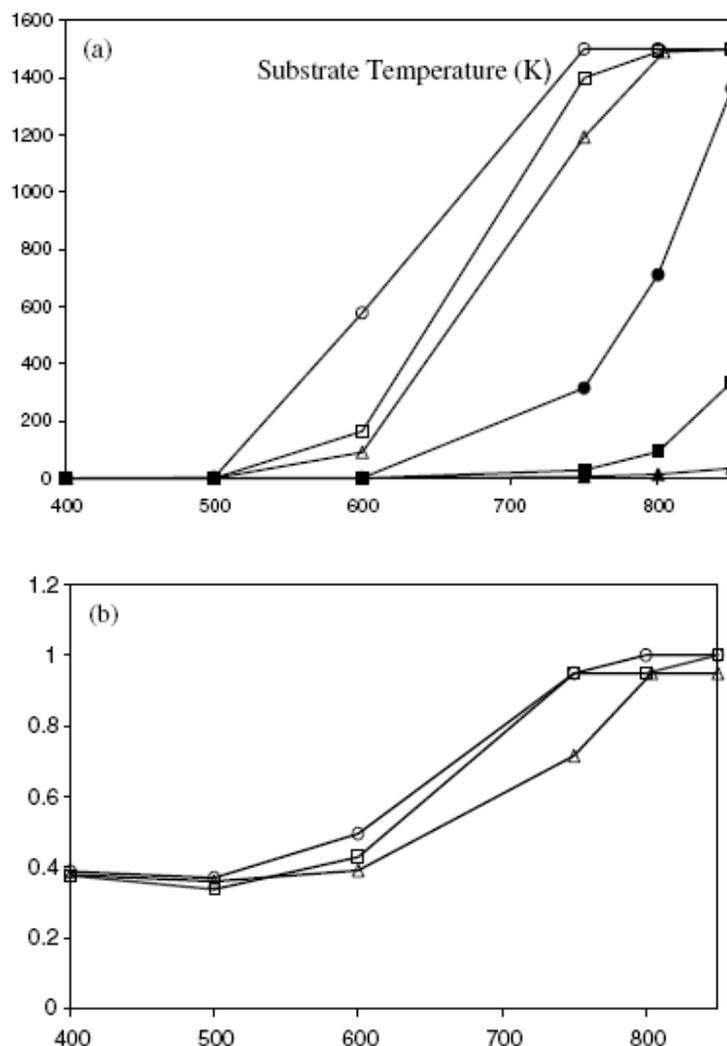


圖 3-4 不同的基板溫度與沉積速率下，擴散原子數與堆積密度曲線圖  
(a) 應變量為擴散原子數，其沉積速率由○至▲增加  
(b) 應變量為堆積密度，其沉積速率由○至△增加

### 3-3 垂直入射粗糙面與非晶面的沉積模擬

#### 3-3-1 典型的粗糙面薄膜生長情形

本文中在粗糙面上的薄膜生長條件為，基板溫度 400 K，沉積速率為  $R = 0.1 \text{ ML s}^{-1}$ ，其中 400 K 時， $T_s/T_m = 0.23$ ，其結果如圖 3-5 所示。同樣的在這樣的條件下，將沉積速率由  $R = 0.1 \text{ ML s}^{-1}$  升至  $R = 100 \text{ ML s}^{-1}$  並沒有很明顯的改變。而由於粗糙面本身所造成的自我遮蔽效應，可

以電腦模式模擬結構區域模型中薄膜的成長

以從圖中得知，最大的柱狀結構會出現在粗糙面的最突起處。

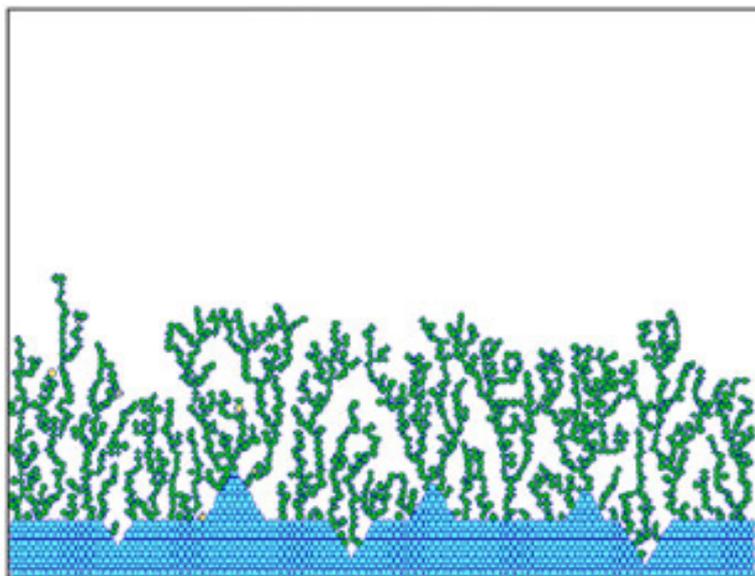
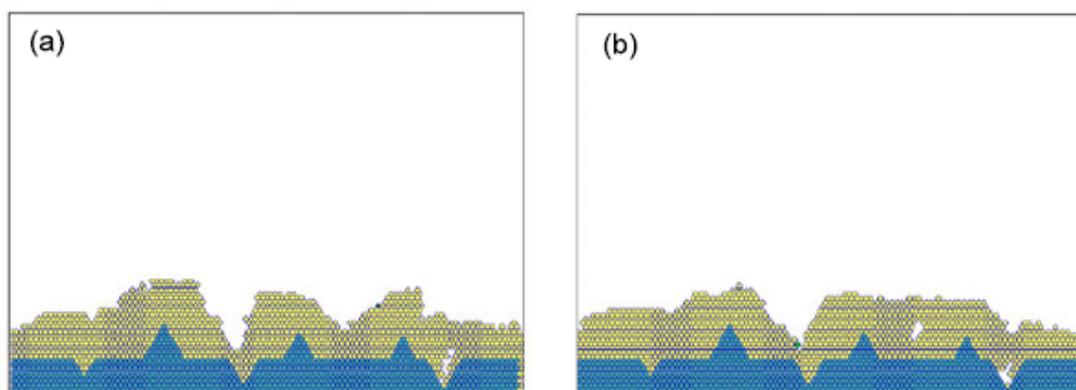


圖 3- 5 粗糙表面的薄膜長成情形

### 3-3-2 不同沉積速率在粗糙面上薄膜生長情形

此處，將基板溫度設為 850 K，並且進行不同沉積速率的薄膜長成模擬。在較低沉積速率的情形下，由於擴散原子增加且被覆蓋的原子數減少，因此預期會出現柱狀晶格結構(即區域 III)。但是，在較低得沉積速率時，粗糙面最突起處，其薄膜比較平滑區沉積來得多，這個原因是因為粗糙面基板本身的自我遮蔽效應所致。



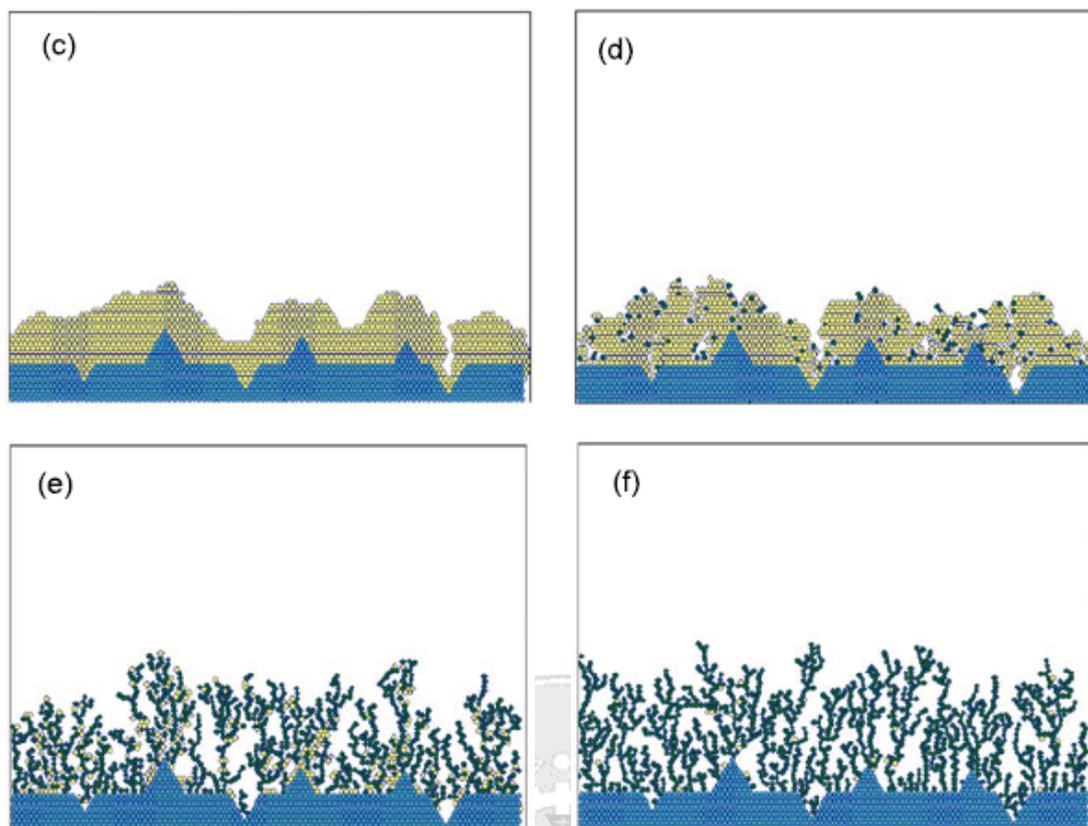


圖 3-6 固定溫度下，不同沉積速率在粗糙基板上的薄膜長成情形  
(a)  $R = 0.001 \text{ ML s}^{-1}$  (b)  $R = 0.01 \text{ ML s}^{-1}$  (c)  $R = 0.1 \text{ ML s}^{-1}$  (d)  $R = 1 \text{ ML s}^{-1}$   
(e)  $R = 10 \text{ ML s}^{-1}$  (f)  $R = 100 \text{ ML s}^{-1}$

### 3-3-3 不同沉積速率在非晶面上薄膜生長情形

為了更進一步的研究探討，將基板從粗糙面改為非晶面進行模擬研究，從模擬結果上可知，非晶結構比起結晶結構來說，對於薄膜的長成影響更甚。由於晶粒與晶粒間並沒有恰當的邊界，換句話說，由於基板表面凹凸面增加的情況下，即使基板溫度在 850 K 的情況下，仍會引起非常高的擴散現象，且由於這些邊界相當的穩定，所以更難加以填滿。而從圖上可知，由於基板的因素，薄膜沉積的結構非常像是區域 I 的錐狀結構。

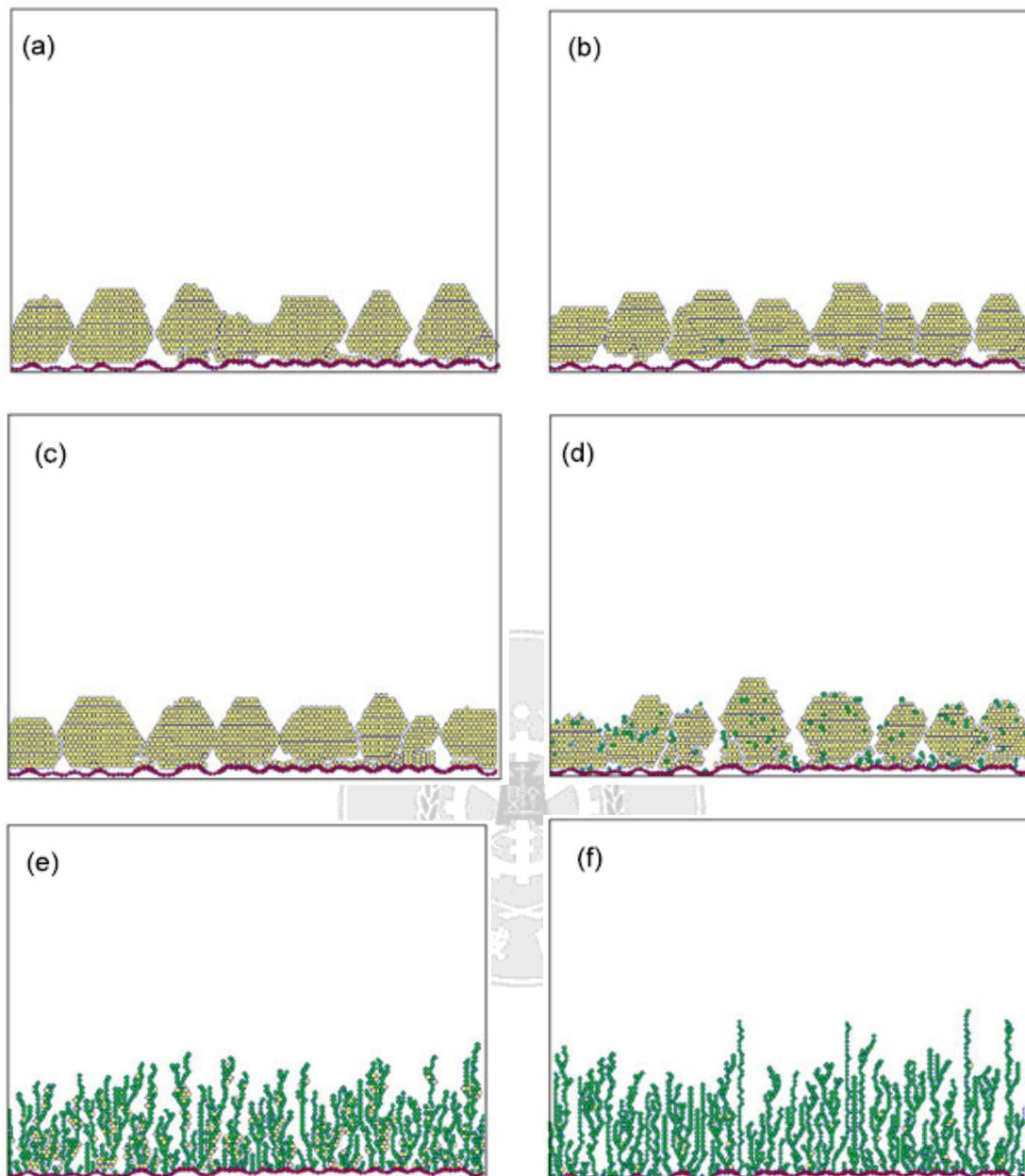


圖 3- 7 固定溫度下，不同沉積速率在非晶基板上的薄膜長成情形  
(a)  $R = 0.001 \text{ ML s}^{-1}$  (b)  $R = 0.01 \text{ ML s}^{-1}$  (c)  $R = 0.1 \text{ ML s}^{-1}$  (d)  $R = 1 \text{ ML s}^{-1}$   
(e)  $R = 10 \text{ ML s}^{-1}$  (f)  $R = 100 \text{ ML s}^{-1}$

### 3-4 斜向入射平滑基板表面的薄膜生長

斜向入射於 1959 年被發現[26]，因此有眾多文獻都在探討斜向入射的議題[27-29]。原生的特殊斜向結構會與自身的遮蔽效應有關，而此遮蔽效應也會影響薄膜的長成。由於遮蔽效應生長的薄膜是為一

以電腦模式模擬結構區域模型中薄膜的成長

束斜向柱狀結構，並且垂直對準入射方向成長。傾角的柱狀結構必須介於薄膜與入射方向的正交向。且亦由非常多的模型，用於討論斜向蒸鍍上[10, 30-33]。而在斜向沉積上，表面擴散扮演一個非常中要的角色，由其是在隨機與有方向性的表面擴散差異上。

圖 3-8 與圖 3-9 分別模擬了入射角度為  $15^\circ$ 、 $30^\circ$  與  $45^\circ$  在基板溫度為 400 K 與 850 K 情形下的薄膜生長情況，而沉積速率則固定在  $R = 1 \text{ ML s}^{-1}$ 。然後我們根據切線準則(tangent rule)可以得知，薄膜的傾角與入射角度的關係式如(9)式。

$$\tan(\beta) = \frac{1}{2} \tan(\alpha) \quad (9)$$

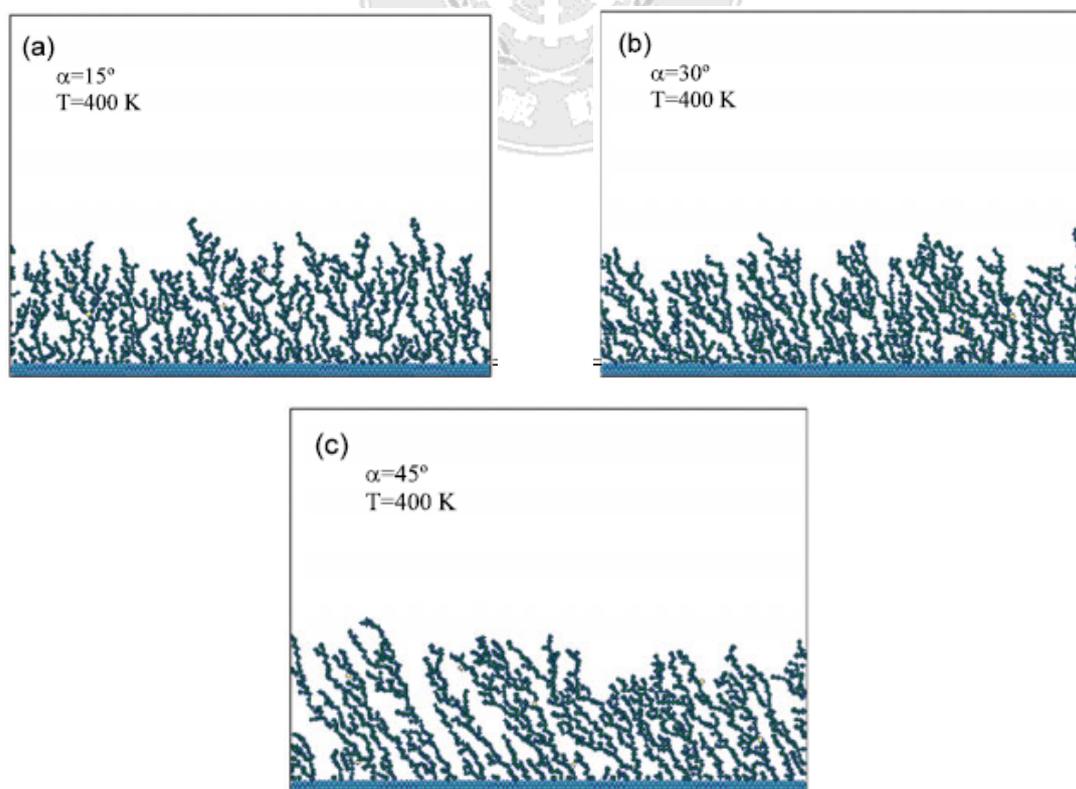


圖 3- 8 不同入射角度，在基板溫度 400 K 時，薄膜沉積情形

以電腦模式模擬結構區域模型中薄膜的成長

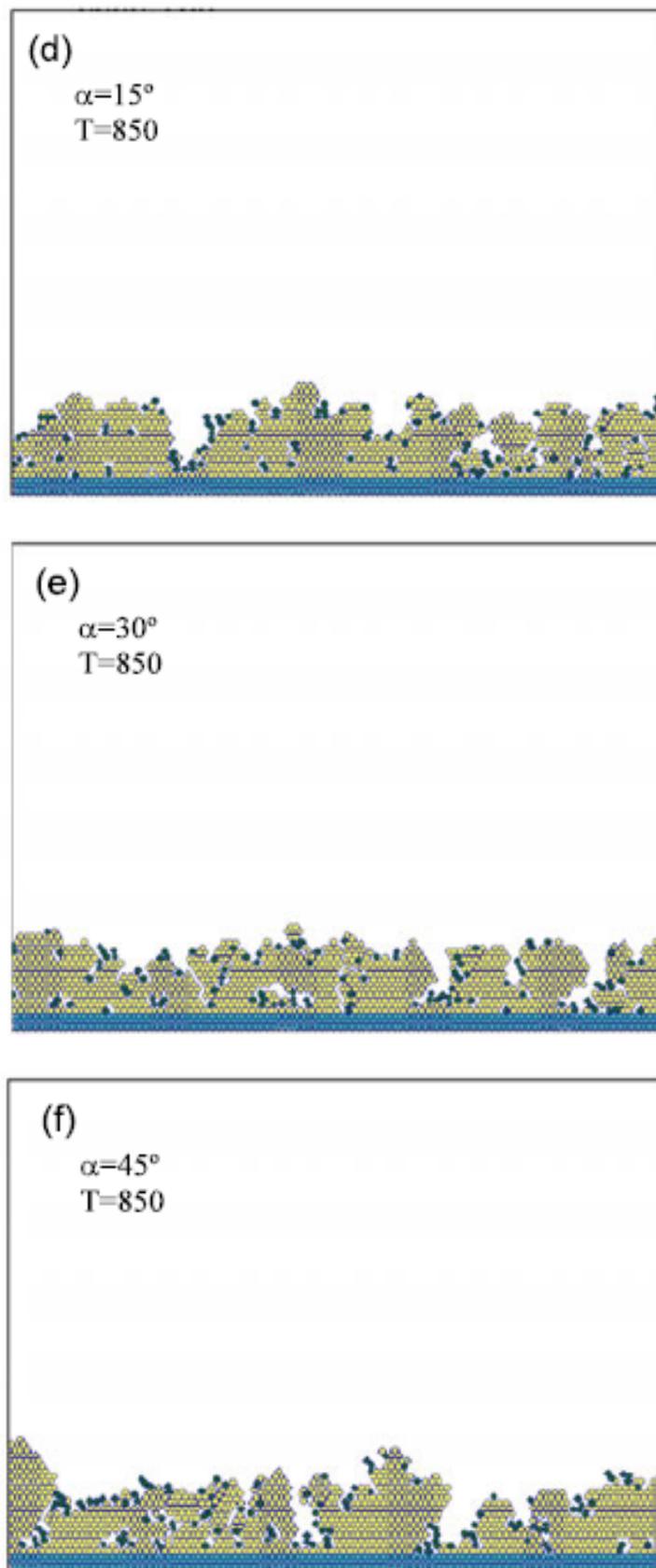


圖 3- 9 不同入射角度，在基板溫度 850 K 時，薄膜沉積情形

## 第四章 結論

成功的發表了 2D 的原子彈道沉積模型。其中探討的影響薄膜參數包含了基板溫度、沉積速率、入射角度、自我遮蔽效應、平坦基板、粗糙基板與非晶基板等等的因素，而結果來講，與文獻中的結構區域模型相當吻合，也可以獲得 Srolovitz[34] 等人所提出的理論結果。即使模擬結果在較低的基板溫度上(區域 I)，是屬於樹狀結構以及有著非常低的擴散，但是在基板溫度較高時，模擬結果會完全與結構區域模型吻合。

而如果將我們的模擬結果與 Muller 利用 Henderson 的原子鬆弛模型進行比較時，Muller 的模擬結果，在基本溫度較低時(區域 I)，比起本文的模擬有著更高的擴散率。因此，本文在模型的修正上可能要進行微調才有辦法完全符合結構區域模型(SZM)的結果。

一般來講，本文的簡易模型可以預測幾乎所有的結構區域結果，且也與文獻的相吻合。而本模型的好處是，其假設法相當的簡易，且也相當吻合實際的薄膜生長情形，且可以減少運算所需的時間，這是本研究最大的好處。

## 參考文獻

- [1] Muller K H 1985 J. Appl. Phys. 58 2573
- [2] Muller K H 1985 J. Vac. Sci. Technol. A 3 2089
- [3] Henderson D, Brodsky M H and Chaudari P 1974 Appl. Phys. Lett. 25 641
- [4] Das Sarma S, Marmorkos I K and Paik S M 1990 Surf. Sci. 228 28
- [5] Hrach R and Sobotka M 1990 Int. Electron. 69 49
- [6] Muller Pfeifer S, Van Kranenburg H and Lodder C 1992 Thin Solid Films 213 143
- [7] Leamy H J, Gilmer G H and Dirks A G 1980 Curr. Top. Mater. Sci. 6 309
- [8] Meakin P, Ramanlal P, Sander L M and Ball R C 1986 Phys. Rev. A 34 5091
- [9] Jullien R and Meakin P 1987 Europhys. Lett. 4 1385
- [10] Dirks A G and Leamy H J 1977 Thin Solid Films 47 219
- [11] Outlaw R A and Heubocked J H 1985 Thin Solid Films 123 159
- [12] Newman M E J and Barkema G T 1999 Monte Carlo Methods in

Statistical Physics (Oxford: Clarendon)

[13] Ozawa S, Sasajima Y and Heermann D W 1996 Thin Solid Films  
272 172

[14] Neumann G and Hirschwald W 1972 Z. Phys. Chem. B 81 163

[15] Abelmane L and Lodder C 1997 Thin Solid Films 305 1

[16] 趙榮輝 1 陳炯良 2, “利用紋理特徵擷取計算光學薄膜之柱狀  
角”, 德霖學報「第二十二期」, 民國 97 年 6 月

[17] K. Robbie, J. C. Sit and M. J. Brett, "Advanced techniques  
for glancing angle deposition" J. Vac. Sci. Technol. B16,  
pp.1115-1122 (1998).

[18] D. Vicka\*, L. J. Friedricha, S. K. Dewa, M. J. Brett, K.  
Robbiea, M. Setoa, T. Smyb, "Self-shadowing and surface  
diffusion effects in obliquely deposited thin films" Thin Solid  
Films, Vol. 339, pp.88-94 (1999)

[19] [http://en.wikipedia.org/wiki/Surface\\_diffusion](http://en.wikipedia.org/wiki/Surface_diffusion)

[20] Thornton J.A., "Influence of apparatus geometry and  
deposition conditions on the structure and topography of thick  
sputtered coatings", J. Vac. Sci. Technol. 11, 1974, pp 666-670

[21] Ritter E., "Properties of optical film materials", Appl.

Opt. 20, 1981, pp. 21-25.

[22] Messier R, Giri A P and Roy R A 1984 J. Vac. Sci. Technol.

A 2 500

[23] Grovenor C R M, Hentzell H T G and Smith D A 1984 Acta Metall.

32 773

[24] Barna P B and Adamik M 1995 Science and Technology of Thin

Films ed F C Maticotta and G Ottaviani (Singapore: World

Scientific) pp 1 - 28

[25] Messier R and Yehoda J E 1985 J. Appl. Phys. 58 3739

[26] Knorr T G and Hoffmann R W 1959 Phys. Rev. 113 1039

[27] Neumann G and Hirschwald W 1972 Z. Phys. Chem. B 81 163

[28] Hara K, Kamiya M, Hashimoto T, Okamoto K and Fujiwara H

1988 Thin Solid Films 158 239

[29] Vick D, Friedrich L J, Dew S K, Brett M J, Robbie K, Seto

M and Smy T 1999 Thin Solid Films 339 88

[30] Nieuwenhuizen J M and Haanstra H B 1966 Philips Tech. Rev.

27 87

[31] Meakin P B 1988 Phys. Rev. A 38 994 - 1004

[32] Krug J and Meakin P 1991 Phys. Rev. A 43 900 - 19

以電腦模式模擬結構區域模型中薄膜的成長

[33] Hara K, Kamiya M, Hashimoto T, Okamoto K and Fujiwara H

1988 J. Magn. Magn. Mater. 73 161

[34] Srolovitz H, Mazor A and Bukiet B G 1988 J. Vac. Sci.

Technol. A 6 2371

