



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ
ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

Δ.Π.Μ.Σ.

ΜΙΚΡΟΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΚΑΙ ΝΑΝΟΔΙΑΤΑΞΕΙΣ

Φαινόμενα Εστίασης Συνόλων Νανοδοματιδίων

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Ελένη Κ. Βάθη

Επιβλέπων: Δημήτριος Τσουκαλάς
Καθηγητής Ε.Μ.Π

Αθήνα 2014



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ
ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

Δ.Π.Μ.Σ.

ΜΙΚΡΟΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΚΑΙ ΝΑΝΟΔΙΑΤΑΞΕΙΣ

Φαινόμενα Εστίασης Συνόλων Νανοσωματιδίων

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Ελένη Κ. Βάθη

Επιβλέπων: Δημήτριος Τσουκαλάς
Καθηγητής Ε.Μ.Π

Αθήνα 2014

.....

Ελένη Κ. Βάθη

Διπλωματούχος Ηλεκτρολόγος Μηχανικός και Μηχανικός Υπολογιστών Ε.Μ.Π.

Copyright © Ελένη Κ. Βάθη, 2014

Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος. All rights reserved.

Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξ ολοκλήρου ή τμήματος αυτής, για εμπορικό σκοπό. Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθήκευση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα. Ερωτήματα που αφορούν τη χρήση της εργασίας για κερδοσκοπικό σκοπό πρέπει να απευθύνονται προς τον συγγραφέα.

Οι απόψεις και τα συμπεράσματα που περιέχονται σε αυτό το έγγραφο εκφράζουν τον συγγραφέα και δεν πρέπει να ερμηνευθεί ότι αντιπροσωπεύουν τις επίσημες θέσεις του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.

Περίληψη

Στα πλαίσια της παρούσας εργασίας, έγινε μελέτη των τεχνικών εναπόθεσης λεπτών υμενίων και των μεθόδων παραγωγής νανοσωματιδίων, οι οποίες βρίσκουν εφαρμογή σε πολλά πεδία. Πιο συγκεκριμένα, δόθηκε ιδιαίτερη βαρύτητα στην τεχνική της ιοντοβολής. Η τεχνική της ιοντοβολής χρησιμοποιεί δέσμες ενεργητικών ιόντων, οι οποίες κατευθύνονται προς έναν στόχο (υλικό προς εναπόθεση), ώστε να αποσπάσουν τα άτομα του και να τα μεταφέρουν στην επιφάνεια δειγμάτων, όπου συμπυκνώνονται για να σχηματίσουν το επιθυμητό υμένιο (φιλμ).

Στη συνέχεια, περιγράφηκε και υλοποιήθηκε προσομοίωση μιας τεχνικής ιοντοβολής, η οποία εκμεταλλεύεται μόνο το φορτίο των νανοσωματιδίων για να επιτύχει την εστίασή τους και να τα οργανώσει σε δομές. Για την προσομοίωση χρησιμοποιήθηκε το περιβάλλον προγραμματισμού Matlab. Πιο συγκεκριμένα, υπολογίστηκαν οι τροχιές των νανοσωματιδίων κατά την εναπόθεση και μελετήθηκαν οι διάφορες παράμετροι που τις επηρεάζουν. Κάποιες από αυτές τις παραμέτρους είναι το πλάτος των λωρίδων εστίασης, στις οποίες θέλουμε να καταλήξουν τα νανοσωματίδια και η τιμή της εξωτερικής τάσης που εφαρμόζεται στο δείγμα με στόχο να επιταχύνει τα νανοσωματίδια.

Ακολούθως, μελετήθηκε η επίπτωση της κινητικής ενέργειας των νανοσωματιδίων στη μεταβολή της θερμοκρασίας της επιφάνειας των δειγμάτων. Η μελέτη της θερμοκρασίας είναι σημαντική, καθώς οι μεγάλες θερμοκρασίες προκαλούν καταστροφή της ρητίνης.

Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης έδειξαν ότι τα φορτισμένα σωματίδια δημιουργούν ένα φαινόμενο αυτο-εστίασης, το οποίο επηρεάζει την εναπόθεσή τους. Αποδείχθηκε ότι, κατά τη διάρκεια της εναπόθεσης, τα νανοσωματίδια εμφανίζουν εκλεκτικότητα ως προς την προσγείωση τους στο αγωγίμο υπόστρωμα ή στην επιφάνεια της ρητίνης. Είναι, έτσι, εφικτό, να δημιουργηθεί ένα συνεχές φιλμ νανοσωματιδίων σε συγκεκριμένες θέσεις πάνω στο υπόστρωμα. Αποδείχτηκε, επίσης, ότι η αύξηση της θερμοκρασίας είναι μεγαλύτερη στην επιφάνεια του

υποστρώματος σε σχέση με την επιφάνεια της ρητίνης, γεγονός που αποτρέπει την παραμόρφωση των δομών της ρητίνης.

Λέξεις Κλειδιά: εναπόθεση, λεπτά υμένα, ηλεκτρικό πεδίο, νανοσωματίδια, ιοντοβολή, αυτο-εστίαση.

Abstract

In this thesis, thin film deposition techniques and nanoparticles synthesis methods were studied, which are applicable in many fields. Specifically, we studied the dc sputter deposition (sputtering) method. In sputter deposition, highly energetic ion particles are directed against a target to dislodge (sputter) the target molecules, which are subsequently transported to the wafer surface, where they condense to form the desired film.

Moreover, a simulation was described and implemented for a sputtering technique exploiting only the nanoparticles charge to create a self-focusing effect and to assemble them into well-organized structures. For this simulation we used the programming environment Matlab. More specifically, the trajectories of nanoparticles upon deposition were calculated and the various parameters which affect the trajectories were studied. Some of these parameters are the width of the focusing strips, where the arriving nanoparticles are driven towards, and the value of the external voltage applied to the sample in order to accelerate the nanoparticles.

Subsequently, we studied the effect of the nanoparticles kinetic energy on the increase in temperature at the surface of the samples. The study of the temperature is important, because high temperatures can cause the destruction of the photoresist.

The simulation results showed that the charged particles create a self-focusing effect, which affects their deposition. It was demonstrated that during the deposition process, the nanoparticles exhibit quite good selectivity for landing on the conductive substrate or the photoresist. Thus, it is possible to fabricate a continuous thin film of nanoparticles at specific substrate positions following adequate patterning. It was shown, also, that the increase in temperature of the substrate surface is greater compared to the photoresist surface, which prevents the deformation of the photoresist structures.

Keywords: deposition, thin films, nanoparticles, electric field sputtering, self-focusing.

Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον καθηγητή μου κ. Δημήτριο Τσουκαλά, για τη δυνατότητα που μου έδωσε να εκπονήσω τη μεταπτυχιακή μου εργασία, καθώς και τον Παναγιώτη Μπούσουλα, υποψήφιο διδάκτορα της σχολής Ε.Μ.Φ.Ε, για την καθοδήγηση και τη συμβολή του στη διεκπεραίωση της εργασίας αυτής. Τέλος, τους γονείς μου, για την έμπρακτη και διαρκή υποστήριξη που μου παρείχαν για την ολοκλήρωση της εργασίας αυτής, αλλά και στο σύνολο των σπουδών μου.

Πίνακας Περιεχομένων

1	Εισαγωγή	1
1.1	Σύνοψη της μεταπτυχιακής εργασίας.....	1
1.2	Οργάνωση του κειμένου	2
2	Θεωρητικό Υπόβαθρο	3
2.1	Τεχνικές εναπόθεσης λεπτών υμενίων.....	3
2.1.1	Η μέθοδος της ιοντοβολής (sputtering)	4
2.2	Παραγωγή νανοσωματιδίων.....	9
2.2.1	Παραγωγή νανοσωματιδίων με την τεχνική της ιοντοβολής.....	11
3	Εναπόθεση σωματιδίων μέσω εστίασης	15
3.1	Περιγραφή της μεθόδου.....	16
3.2	Υπολογισμός του ηλεκτρικού πεδίου.....	18
3.2.1	Επίλυση του ολοκληρώματος.....	19
3.2.2	Γραφικές παραστάσεις.....	19
4	Προσομοίωση της συμπεριφοράς των νανοσωματιδίων	23
4.1	Ανάλυση του προβλήματος.....	23
4.1.1	Υποθέσεις και αρχικές συνθήκες.....	24
4.1.2	Υπολογισμός της μάζας των νανοσωματιδίων	24
4.1.3	Υπολογισμός της επιτάχυνσης των νανοσωματιδίων	25
4.1.4	Περιγραφή της τροχιάς του σωματιδίου	26
4.1.5	Περιγραφή του κώδικα	28
4.2	Αποτελέσματα.....	28
5	Εφαρμογή τάσης	37
5.1	Ανάλυση του προβλήματος.....	37
5.1.1	Υπολογισμός του πεδίου.....	38
5.2	Αποτελέσματα.....	39
6	Υπολογισμός της θερμοκρασίας	47
6.1	Η σημασία της θερμοκρασίας κατά την εναπόθεση	47
6.2	Ανάλυση του προβλήματος.....	48

6.2.1	Υπολογισμός της μάζας.....	49
6.2.2	Υπολογισμός της θερμοκρασίας.....	50
6.2.3	Περιγραφή του κώδικα.....	50
6.3	Αποτελέσματα.....	51
7	Επίλογος.....	57
7.1	Σύνοψη και συμπεράσματα.....	57
7.2	Μελλοντικές επεκτάσεις.....	58
8	Βιβλιογραφία.....	59
	Παράρτημα.....	61

1

Εισαγωγή

1.1 Σύνοψη της μεταπτυχιακής εργασίας

Τα τελευταία χρόνια, μεγάλη έμφαση έχει δοθεί στη μελέτη των τεχνικών εναπόθεσης λεπτών υμενίων και παραγωγής νανοσωματιδίων. Ο λόγος που συμβαίνει αυτό είναι ότι οι τεχνικές αυτές βρίσκουν εφαρμογή σε πολλά πεδία, όπως για παράδειγμα στην οπτική και την ηλεκτρονική. Μια από τις πιο διαδεδομένες τεχνικές εναπόθεσης είναι η τεχνική της ιοντοβολής ή αλλιώς sputtering.

Στόχος της παρούσας εργασίας είναι η περιγραφή και η μελέτη μιας τεχνικής sputtering η οποία εκμεταλλεύεται το φορτίο των νανοσωματιδίων με στόχο να τα οργανώσει σε δομές. Η μελέτη θα γίνει με τη βοήθεια προσομοίωσης, η οποία υλοποιήθηκε στο περιβάλλον προγραμματισμού της γλώσσας Matlab. Μέσω της προσομοίωσης θα μελετηθούν οι διάφορες παράμετροι οι οποίες επηρεάζουν το φαινόμενο της εστίασης, το οποίο εκμεταλλεύεται η τεχνική αυτή.

Πιο συγκεκριμένα, η πρώτη φάση των προσομοιώσεων αφορά τον υπολογισμό των τροχιών των νανοσωματιδίων κατά την εναπόθεση, μιας και στόχος μας είναι να δείξουμε κατά πόσο αυτή η τεχνική διευκολύνει τη δημιουργία συγκεκριμένων μοτίβων από νανοσωματίδια. Σε δεύτερη φάση, και αφού έχουν μελετηθεί οι διάφορες παράμετροι που επηρεάζουν τις τροχιές, θα μελετηθεί η επίπτωση που έχει η τεχνική στην αύξηση της θερμοκρασίας του δείγματος, στο οποίο εναποτίθενται τα νανοσωματίδια.

1.2 Οργάνωση του κειμένου

Στο Κεφάλαιο 2 της εργασίας αναλύεται το θεωρητικό υπόβαθρο το οποίο είναι απαραίτητο για την κατανόηση του αντικειμένου της εργασίας. Συγκεκριμένα, αναφέρονται οι τεχνικές εναπόθεσης λεπτών υμενίων και παραγωγής νανοσωματιδίων. Στη συνέχεια, στο Κεφάλαιο 3 γίνεται μια περιγραφή της μεθόδου εναπόθεσης με αυτο-εστίαση (self-focusing effect), την οποία θέλουμε να προσομοιώσουμε, ενώ γίνεται και ο υπολογισμός του ηλεκτρικού πεδίου. Στο Κεφάλαιο 4 περιγράφεται η διαδικασία που ακολουθήθηκε για την προσομοίωση των τροχιών των νανοσωματιδίων και παρουσιάζονται τα αντίστοιχα αποτελέσματα. Ακολούθως, στο Κεφάλαιο 5 παρουσιάζεται μια παραλλαγή της προσομοίωσης στην οποία εφαρμόζεται εξωτερική τάση. Στο Κεφάλαιο 6 μελετάται το πώς επιδρά η ενέργεια των νανοσωματιδίων στην αλλαγή της θερμοκρασίας της επιφάνειας δείγματος. Τέλος, το Κεφάλαιο 7 συνοψίζει τα συμπεράσματα της διπλωματικής εργασίας και παρουσιάζει πιθανές μελλοντικές επεκτάσεις.

2

Θεωρητικό Υπόβαθρο

Στο παρόν κεφάλαιο θα αναλύσουμε το θεωρητικό υπόβαθρο το οποίο είναι απαραίτητο για την κατανόηση του αντικειμένου της εργασίας. Συγκεκριμένα, θα γίνει αναφορά στις τεχνικές εναπόθεσης λεπτών υμενίων, στις μεθόδους παραγωγής νανοσωματιδίων, ενώ ιδιαίτερη βαρύτητα θα δοθεί στην τεχνική της ιοντοβολής (sputtering).

2.1 Τεχνικές εναπόθεσης λεπτών υμενίων

Ένα λεπτό υμένιο (thin film) είναι ένα στρώμα υλικού του οποίου το πάχος κυμαίνεται από κλάσματα του νανομέτρου έως αρκετά μικρόμετρα. Παρ' όλο που η κατασκευή λεπτών υμενίων έχει γίνει πρακτικά συνώνυμη με την τεχνολογία ημιαγωγών, έχει εφαρμογές σε πολλά άλλα πεδία, όπως είναι η οπτική και η χημεία.

Η διαδικασία εφαρμογής ενός λεπτού υμενίου σε μια επιφάνεια ονομάζεται εναπόθεση λεπτών υμενίων (thin-film deposition). Οι τεχνικές εναπόθεσης λεπτών υμενίων χωρίζονται σε δύο μεγάλες κατηγορίες, ανάλογα με το αν η διαδικασία είναι

κατά κύριο λόγο χημική ή φυσική. Έτσι έχουμε τις τεχνικές χημικής εναπόθεσης, όπου η εναπόθεση προκύπτει ως προϊόν χημικής αντίδρασης (όπως είναι η τεχνική χημικής εναπόθεσης από ατμούς πτητικών αερίων – Chemical Vapor Deposition) και τις τεχνικές φυσικής εναπόθεσης όπου η εναπόθεση προκύπτει μέσω μιας φυσικής διαδικασίας (όπως είναι για παράδειγμα η εξάχνωση - Evaporation).

Στην παρούσα εργασία θα ασχοληθούμε με μία από τις τεχνικές φυσικής εναπόθεσης, τη μέθοδο της ιοντοβολής (sputtering). Η τεχνική παραγωγής νανοσωματιδίων με τη μέθοδο της ιοντοβολής, αποτελεί μια από τις διαδικασίες φυσικής εναπόθεσης ατμών (Physical Vapor Deposition – PVD). Η φυσική εναπόθεση ατμού περιγράφει ένα σύνολο μεθόδων εναπόθεσης κενού που χρησιμοποιούνται για την δημιουργία λεπτών φιλμ πάνω σε διάφορες επιφάνειες (όπως είναι τα wafers) μέσω της συμπύκνωσης του επιθυμητού υλικού το οποίο είναι σε μορφή ατμού.

2.1.1 Η μέθοδος της ιοντοβολής (sputtering)

Όταν η επιφάνεια ενός στερεού βομβαρδίζεται με ενεργητικά σωματίδια, τότε αυτή διαβρώνεται, ενώ τα επιφανειακά άτομα απομακρύνονται και η μορφολογία της επιφάνειας τροποποιείται. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται ιοντοβολή (sputtering). [1]

Το φαινόμενο αυτό παρατηρείται σε μεγάλο βαθμό στη φύση, κυρίως σε αστρονομικά σώματα χωρίς αέρα, όπως είναι η Σελήνη, στα οποία προκαλείται διάβρωση της επιφάνειας λόγω ακτινοβολίας. Παρ' όλα αυτά, η πρώτη καταγραφή ιοντοβολής σε εργαστήριο σημειώθηκε το 1852 από τον William Robert Grove και αφορούσε το σχηματισμό μιας εναπόθεσης (deposition) στην άνοδο ενός σωλήνα εκκένωσης αερίου και την απομάκρυνσή της όταν η πολικότητα των ηλεκτροδίων αντιστρεφόταν. Για σχεδόν έναν αιώνα μετά την ανακάλυψη του Grove, οι περισσότερες από τις παρατηρήσεις σχετικά με την ιοντοβολή έγιναν με εκκενώσεις αερίου. Η απομόνωση και ο χαρακτηρισμός της διαδικασίας με ελεγχόμενες δέσμες ιόντων σε κενό ξεκίνησε μόλις πριν από μερικές δεκαετίες.

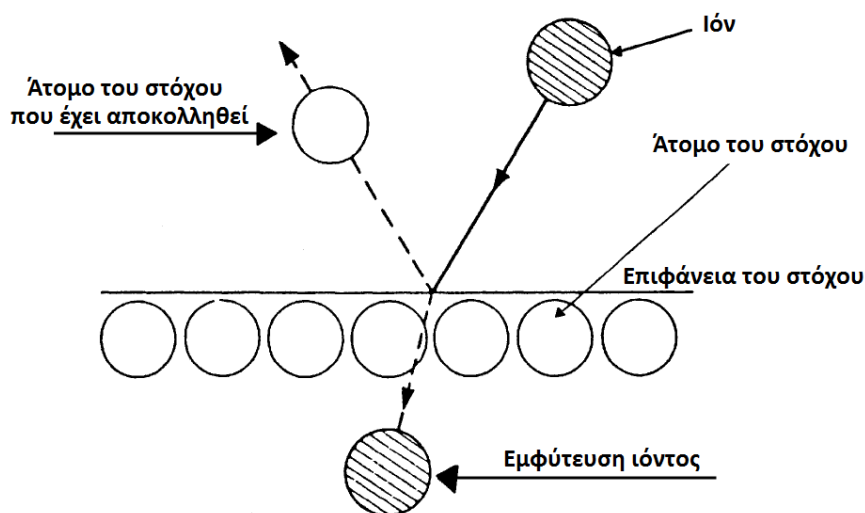
Εκτός από την ιοντοβολή, ο βομβαρδισμός επιφανειών με σωματίδια δημιουργεί και άλλες επιπτώσεις. Ένα κλάσμα των ιόντων οπισθοσκεδάζεται σε συγκρούσεις με άτομα του στόχου, άλλα εμφυτεύονται και έρχονται σε ηρεμία λόγω μεταφοράς της ενέργειάς τους σε ηλεκτρόνια και άτομα του πλέγματος. Αφού επιβραδυνθούν μπορεί να διαχυθούν περαιτέρω και τελικά να παγιδευτούν στο στερεό ή να προσροφηθούν στην επιφάνεια. Ο βομβαρδισμός ιόντων προκαλεί επιπλέον την εκπομπή ηλεκτρονίων και φωτονίων και μπορεί επίσης να καταστρέψει τα επιφανειακά στρώματα του στερεού, μεταβάλλοντας έτσι την επιφανειακή δομή του υλικού.

Εκ πρώτης όψεως η ιοντοβολή είναι μια επιβλαβής για το υλικό διαδικασία, έχει όμως μια πολύ σημαντική χρήση, καθώς χρησιμοποιείται ως διαδικασία εναπόθεσης λεπτών υμενίων. Η μέθοδος της ιοντοβολής είναι η πιο ευρέως χρησιμοποιούμενη διαδικασία φυσικής εναπόθεσης, καθώς προσφέρει καλύτερο έλεγχο των ιδιοτήτων του φιλμ, όπως είναι το πάχος του, το μέγεθος κόκκων καθώς και στο βαθμό κάλυψης μιας σχηματοποιημένης επιφάνειας (step coverage). [2]

Στην εναπόθεση με ιοντοβολή, δέσμες ενεργητικών ιόντων κατευθύνονται προς έναν στόχο (υλικό προς εναπόθεση) ώστε να αποσπάσουν τα άτομα του στόχου, τα οποία τελικά μεταφέρονται στην επιφάνεια των δειγμάτων, όπου συμπυκνώνονται για να σχηματίσουν το επιθυμητό φιλμ. Η εναπόθεση με ιοντοβολή πραγματοποιείται σε σχετικά χαμηλές πιέσεις σε περιβάλλον αδρανούς αερίου (το οποίο είναι συνήθως αργό). [2]

Το sputtering χρησιμοποιείται επίσης ευρύτατα για τον καθαρισμό επιφανειών και την αφαίρεση υλικού από ένα στερεό σώμα (etching), στην εναπόθεση λεπτών υμενίων, στην ανάλυση επιφανειών και επιφανειακών στρώσεων και σε τεχνικές sputtering με πηγές ιόντων. Οι τεχνικές sputtering είναι από τις πιο γνωστές και διαδεδομένες μεθόδους εναπόθεσης. Αυτό οφείλεται στην απλότητα των φυσικών διαδικασιών που λαμβάνουν χώρα, στην ευκολία χρήσης, προσαρμογής και τροποποίησης αυτών των τεχνικών. Οι τεχνικές sputtering χρησιμοποιούνται ευρέως για την παραγωγή ημιαγωγών, ημιαγωγικών και φωτοβολταϊκών διατάξεων, καθώς και σε διάφορες άλλες βιομηχανικές χρήσεις. Υλικά με υψηλό σημείο τήξης όπως κεραμικά, πυρίμαχα μέταλλα τα οποία είναι δύσκολο να εναποτεθούν με τεχνικές

εξάχνωσης, μπορούν να εναποτεθούν με την τεχνική sputtering. Οι τεχνικές sputtering εκτείνονται από το απλό DC Discharge Sputtering που περιορίζεται στο sputtering των αγωγίμων στόχων, στο RF Sputtering, όπου οποιοσδήποτε στόχος ανεξάρτητα από την αγωγιμότητά του μπορεί να εναποτεθεί, μέχρι και την εξεζητημένη τεχνική ion beam sputtering που είναι μια πολύ καλά ελεγχόμενη διαδικασία εναπόθεσης υλικών. [3]



Σχήμα 2.1: Η αποκόλληση ενός ατόμου του στόχου

Στη συνέχεια θα αναλύσουμε τα τρία βασικά συστήματα sputtering, το DC sputtering, το RF sputtering και το magnetron sputtering.

2.1.1.1 DC sputtering

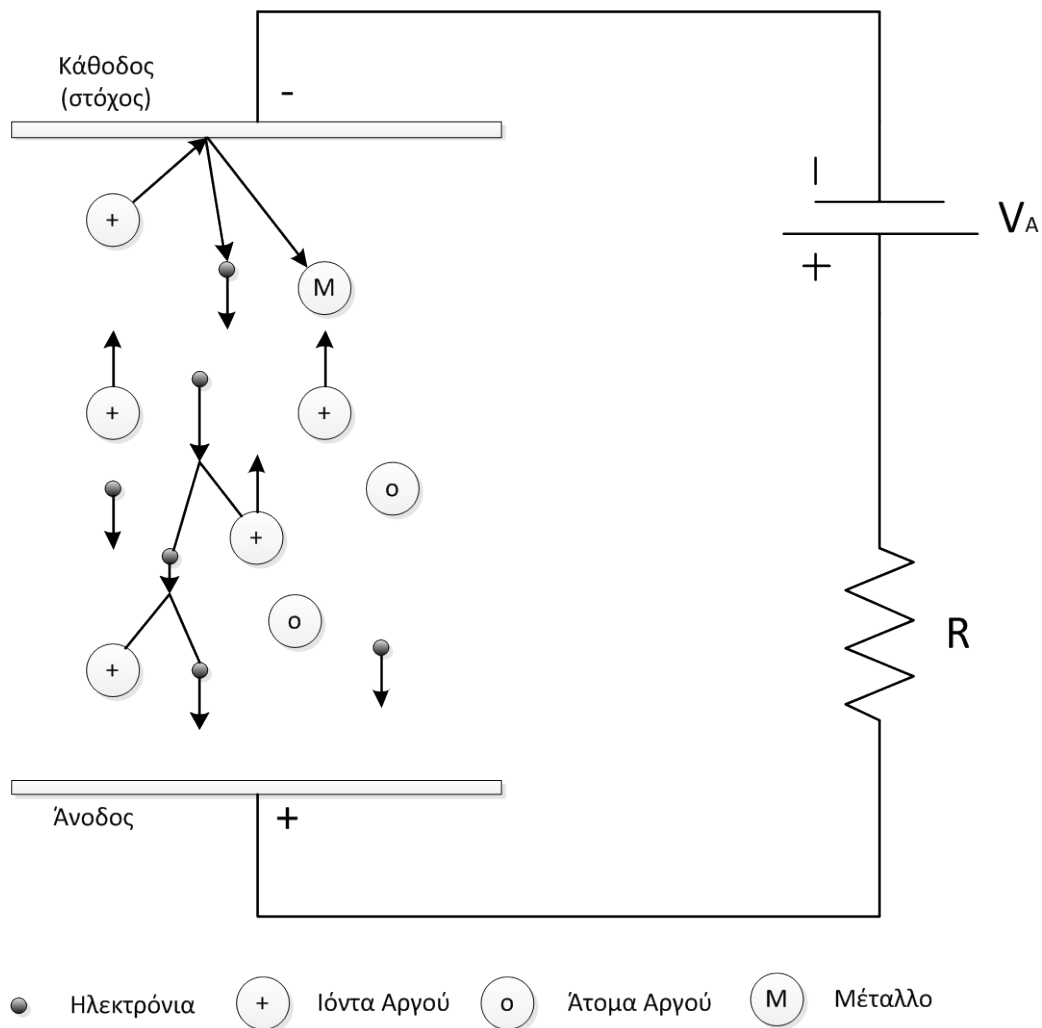
Μεταξύ των συστημάτων ιοντοβολής, το πιο απλό μοντέλο είναι το σύστημα DC sputtering. Το σύστημα DC sputtering αποτελείται από ένα ζεύγος επίπεδων ηλεκτροδίων, την κάθοδο και την άνοδο. Η μπροστινή επιφάνεια της καθόδου καλύπτεται με το υλικό-στόχο το οποίο θέλουμε να εναποθέσουμε. Το υπόστρωμα τοποθετείται στην άνοδο.

2.1.1.2 RF sputtering

Αν αντικαταστήσουμε τον μεταλλικό στόχο με έναν μονωτή στο σύστημα dc sputtering, τα κατιόντα του αργού συσσωρεύονται πάνω στην επιφάνεια του μονωτή,

με αποτέλεσμα να απαιτείται η εφαρμογή υπερβολικά μεγάλων τιμών τάσεων (της τάξης των εκατοντάδων kV) ώστε να διατηρηθεί το πλάσμα. Για το λόγο αυτό, όταν ο στόχος αποτελείται από μη αγώγιμο υλικό, στα ηλεκτρόδια εφαρμόζεται εναλλασσόμενο σήμα. Το σύστημα αυτό ονομάζεται RF sputtering και αποτελεί βελτίωση του συστήματος του DC sputtering. [4]

Το εναλλασσόμενο σήμα, όταν είναι σε συχνότητες μεγαλύτερες των 50 kHz, προκαλεί ταλάντωση στα ηλεκτρόνια του πλάσματος παρέχοντάς τους αρκετή ενέργεια για να ιονίσουν τα άτομα του πλάσματος, γεγονός που επιταχύνει τη διαδικασία. Ακόμα, οι συγκρούσεις των ηλεκτρονίων στο στόχο αναιρούν τη συσσώρευση θετικού φορτίου. Η συχνότητα η οποία χρησιμοποιείται είναι τα 13.56MHz.



Σχήμα 2.2: Διαδικασία εναπόθεσης με dc sputtering

2.1.1.3 DC Magnetron sputtering

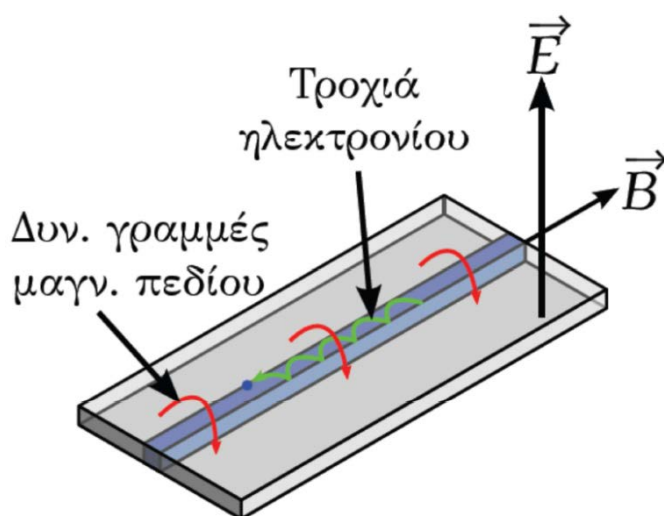
Η μέθοδος αυτή αποτελεί παραλλαγή της μεθόδου του DC sputtering. Το magnetron sputtering έρχεται να δώσει λύση στην χαμηλή απόδοση του DC, καθώς στην περίπτωση εκείνη τα περισσότερα ηλεκτρόνια χάνουν την ενέργειά τους προτού ιονίσουν τα άτομα του αερίου. Στην περίπτωση του magnetron, ισχυροί μαγνήτες στην περιοχή του στόχου χρησιμοποιούνται για την παραγωγή μαγνητικού πεδίου σε γωνία με το ηλεκτρικό πεδίο που δημιουργείται ανάμεσα στα ηλεκτρόδια, λόγω της DC τάσης. Όταν ένα μαγνητικό πεδίο, \mathbf{B} , υπερτίθεται στο ηλεκτρικό πεδίο, \mathbf{E} , η δύναμη Lorentz που δέχονται τα ηλεκτρόνια, φορτίου q , μάζας m και ταχύτητας v θα είναι:

$$F = m \frac{dv}{dt} = -q(E + v \times B) \quad (2.1)$$

Η δύναμη αυτή προκαλεί την ελικοειδή κίνηση των ηλεκτρονίων και τα αποτρέπει από το να φύγουν από το χώρο της εκκένωσης και να χαθούν στα τοιχώματα του θαλάμου. Με αυτόν τον τρόπο τα ηλεκτρόνια παραμένουν καθηλωμένα κοντά στην κάθοδο. Επομένως το χρονικό διάστημα κατά το οποίο το ηλεκτρόνιο βρίσκεται κοντά στην κάθοδο παρατείνεται και συνεπώς, αυξάνεται η πιθανότητα να συγκρουστεί με κάποιο άτομο του αερίου. Σε πραγματικές εφαρμογές, βέβαια, οι διευθύνσεις των δύο πεδίων είναι κάθετες μεταξύ τους, δηλαδή το ηλεκτρικό πεδίο είναι κάθετο στο στόχο και το μαγνητικό παράλληλο σε αυτόν. Αυτό επιτυγχάνεται τοποθετώντας ένα μαγνήτη σε μορφή δακτυλίου ή πλαισίου κάτω από τον στόχο, ούτως ώστε οι μαγνητικές δυναμικές γραμμές να ξεκινάνε κάθετα στο στόχο, στη συνέχεια να κάμπτονται παράλληλα σε αυτόν και, τέλος, να επιστρέφουν κάθετα σε αυτόν. Συνεπώς τα ηλεκτρόνια που φεύγουν από την κάθοδο επιταχύνονται προς την άνοδο κάνοντας μια ελικοειδή κίνηση αλλά όταν συναντούν το παράλληλο μαγνητικό πεδίο η τροχιά τους κάμπτεται αναγκάζοντάς τα να επιστρέψουν προς τον στόχο.

Η μεγάλη επιτυχία του magnetron ανάγεται στο γεγονός ότι ένα πολύ μεγάλο ποσοστό των ηλεκτρονίων αξιοποιείται για τον ιονισμό των ατόμων του αερίου. Έτσι σε έναν συνήθη κύκλο εναπόθεσης, αρχικά, ηλεκτρόνια της καθόδου παγιδεύονται στο μαγνητικό πεδίο. Κατόπιν συγκρούονται με ένα άτομο του αερίου του πλάσματος το οποίο ιονίζουν. Αυτό με τη σειρά του λόγω της κρούσης κινείται προς τον στόχο στην κάθοδο στον οποίον προσκρούει και αφαιρεί μερικά άτομα από την επιφάνεια.

Στη συνέχεια το ιόν του αερίου συγκρούεται ξανά με τα προηγούμενα ηλεκτρόνια που έχουν μαζευτεί στην περιοχή του πεδίου και παραλαμβάνει ένα ηλεκτρόνιο ώστε να γίνει ηλεκτρικά ουδέτερο. Μετά συγκρούεται και πάλι με τα άφθονα ηλεκτρόνια που βρίσκονται κοντά στην κάθοδο κ.ο.κ. Με αυτόν τον τρόπο, το magnetron μπορεί να δώσει λεπτά υμένια από ελαφριά μέταλλα με ρυθμούς ταχύτερους και από $1 \mu m/min$, δηλαδή τάξεις μεγέθους μεγαλύτερες από τους συνήθεις ρυθμούς του DC ή του RF sputtering.



Σχήμα 2.3: Η παγίδευση των ηλεκτρονίων σε ένα επίπεδο magnetron

2.2 Παραγωγή νανοσωματιδίων

Παρ' όλο που δεν υπάρχει ένας ενιαίος ορισμός για τα νανοσωματίδια, συνήθως αναφέρονται ως τα σωματίδια των οποίων το μέγεθος δεν ξεπερνά τα 100 nm . Από αυτό το μέγεθος και κάτω, οι ιδιότητες ενός υλικού δεν μεταβάλλονται απλά ως προς την κλίμακα, αλλά αλλάζουν τελείως. Τα νανοσωματίδια παρουσιάζουν καινούριες ή βελτιωμένες ιδιότητες βασισμένες στα χαρακτηριστικά τους (μέγεθος, κατανομή, μορφολογία, φάση κλπ.), σε σχέση με τα μεγαλύτερα σωματίδια του ίδιου υλικού.

Τα νανοσωματίδια μπορούν να κατασκευαστούν από ένα ευρύ φάσμα υλικών, εκ των οποίων τα πιο συνηθισμένα είναι τα μέταλλα, τα κεραμικά, τα μεταλλικά

οξειδία, το πυρίτιο ή ακόμη και πολυμερή. Η μορφολογία τους παρουσιάζει μεγάλη ποικιλία, όμως τα μεταλλικά νανοσωματίδια είναι συνήθως σφαιρικά.[5]

Η παραγωγή νανοσωματιδίων μπορεί να επιτευχθεί με διάφορες μεθόδους. Οι πιο συνηθισμένες προσεγγίσεις είναι [6]:

- Μέθοδος στερεάς κατάστασης ή μηχανικές διεργασίες.
- Μέθοδοι ατμού.
- Χημική σύνθεση ή υγρές χημικές (κolloειδείς) διεργασίες.

Κάθε κατηγορία περιλαμβάνει κάποιες συγκεκριμένες μεθόδους οι οποίες ανάλογα με την επιλογή των υλικών και χρήση των νανοσωματιδίων παρουσιάζουν πλεονεκτήματα και κάποια μειονεκτήματα έναντι των άλλων.

1. Μέθοδος στερεάς κατάστασης ή μηχανικές διεργασίες

Μέχρι τη δεκαετία του 70, οι μηχανικές διεργασίες των σωματιδίων (σκόνες) χρησιμοποιούνταν ως μέθοδος σύνθεσης νέων κραμάτων και μιγμάτων φάσεων σε βιομηχανική κλίμακα. Οι μέθοδοι αυτοί προσέλκυσαν το ενδιαφέρον για την παρασκευή άμορφων και νανοδομημένων υλικών για ένα μεγάλο εύρος κραμάτων, κεραμικών και συνθετικών υλικών. Ο μηχανισμός σχηματισμού της μικροδομής είναι πολύ διαφορετικός από άλλες μεθόδους σύνθεσης νανοσωματιδίων. Η μικροδομή που προκύπτει είναι βέβαια η ίδια. Με τη μέθοδο αυτή μπορούν να ξεπεραστούν οι ποσοτικοί περιορισμοί στην παραγωγή νανοκρυσταλλικών υλικών. Το πλεονέκτημα των μεθόδων στερεάς κατάστασης είναι το χαμηλό κόστος εξοπλισμού και η απλότητα της συνολικής διαδικασίας. Στα μειονεκτήματα περιλαμβάνονται κάποιοι τεχνικοί περιορισμοί όπως η αδυναμία παραγωγής πολύ λεπτών σωματιδίων καθώς και η αδυναμία επίτευξης ομοιογένειας στο μέγεθος τους.

2. Μέθοδοι ατμών

Η ανάπτυξη στερεών από ατμούς (συμπύκνωση) στηρίζεται στον μετασχηματισμό φάσης από μια μη – κρυσταλλική σε μια κρυσταλλική κατάσταση. Η συμπύκνωση αρχίζει με την δημιουργία πυρήνων (clusters). Το είδος της πυρηνοποίησης εξαρτάται από το μέσο δημιουργίας των πυρήνων. Αν οι πυρήνες αναπτυχθούν μέσα σε αέριο, το οποίο συμπυκνώνεται για να σχηματίσει πρωτογενείς

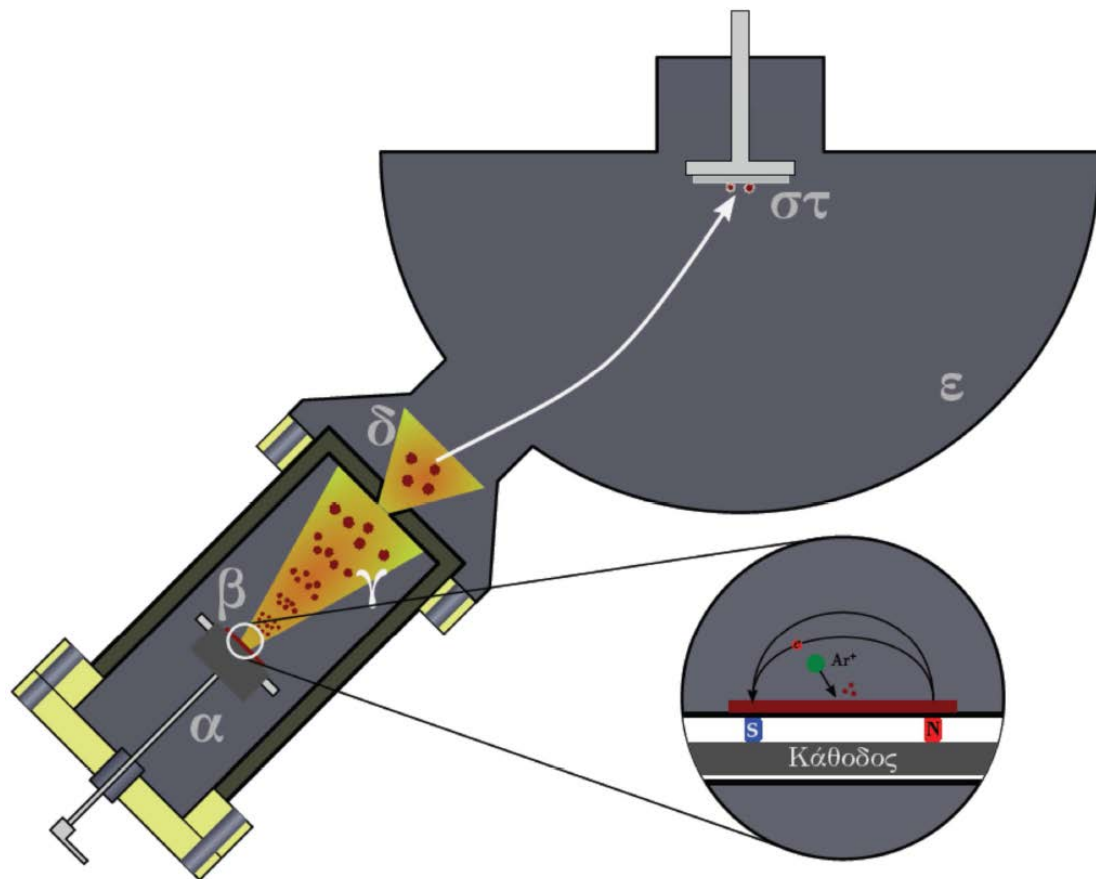
πυρήνες, αναφερόμαστε σε ομογενή πυρηνοποίηση, ενώ αν αναπτυχθούν σε ξένα σωματίδια που υπάρχουν στο αέριο (π.χ. ιόντα, σωματίδια σκόνης ή επιφάνειες), τότε μιλάμε για ετερογενή πυρηνοποίηση. Η παραγωγή πυρήνων ή μεγαλύτερων νανοσωματιδίων από την αέρια φάση απαιτεί την δημιουργία υπερκορεσμού με μια από τις δύο παρακάτω τεχνικές: α) με διαστολή των ατμών και β) άμεση θερμική εξαέρωση, ιοντοβολή (sputtering), ή αποκόλληση με laser.

3. Χημική σύνθεση ή υγρές χημικές (κolloειδείς) διεργασίες

Κατά τη σύνθεση νανοσωματιδίων με επιθυμητές ιδιότητες, πρέπει να ληφθούν υπόψη οι δομικές (κρυσταλλική ή άμορφη δομή, μέγεθος, σχήμα, μορφολογία) και οι χημικές ιδιότητες (σύνθεση του όγκου, της διεπιφάνειας και της επιφάνειας). Η χημική σύνθεση επιτρέπει το χειρισμό της ύλης σε μοριακό επίπεδο και συνεπώς μπορεί να επιτευχθεί καλή χημική ομοιογένεια. Υπάρχουν δυσκολίες που προκύπτουν κατά τις χημικές διαδικασίες. Σε πολλές περιπτώσεις η χημεία των ενώσεων είναι δύσκολη και επικίνδυνη. Υπάρχει επίσης, πιθανότητα να παγιδεύονται κατά τη διαδικασία, διάφορες ακαθαρσίες στο τελικό προϊόν, οι οποίες πρέπει να αποφεύγονται ή να ελαχιστοποιούνται για να έχουμε τις επιθυμητές ιδιότητες. Τέλος, ένα γεγονός που μπορεί να μεταβάλλει τις ιδιότητες (σε κάθε βήμα της σύνθεσης) του υλικού είναι η συσσώρευση συσσωματωμάτων.

2.2.1 Παραγωγή νανοσωματιδίων με την τεχνική της ιοντοβολής

Η μέθοδος σύνθεσης νανοσωματιδίων που χρησιμοποιείται στο εργαστήριο, και η οποία θεωρούμε ότι χρησιμοποιείται και κατά την προσομοίωση, μπορεί να περιγραφεί ως μια τεχνική “διακοπτόμενης συμπύκνωσης αερίου”. Τα νανοσωματίδια παράγονται από DC magnetron sputtering ακολουθούμενη από συμπύκνωση αέριας φάσης. Τελικά τα νανοσωματίδια που παράγονται τείνουν να κατέχουν ένα επιπλέον ηλεκτρόνιο. Το πλεονάζον ηλεκτρόνιο επιτρέπει τον ηλεκτροστατικό χειρισμό των νανοσωματιδίων. Τα νανοσωματίδια μπορούν να επιταχυνθούν προς το υπόστρωμα παράγοντας μια μεγάλη ποικιλία μορφολογιών, όπως μεμονωμένες νησίδες του υλικού εναπόθεσης μέχρι πολύ λεπτά στρώματα επικάλυψης (υμένια). Το σύστημα magnetron sputtering του εργαστηρίου φαίνεται στο σχήμα 2.4.



Σχήμα 2.4: Σχηματική αναπαράσταση του συστήματος magnetron sputtering του εργαστηρίου. Τα μέρη του συστήματος είναι τα εξής: α) Βραχίονας ρύθμισης θέσης του στόχου, β) στόχος με τη διάταξη magnetron, γ) ζώνη συμπύκνωσης νανοσωματιδίων, δ) διάφραγμα εξόδου, ε) θάλαμος εναπόθεσης, στ) υπόστρωμα

Το σχήμα των νανοσωματιδίων επηρεάζεται από αρκετές διαφορετικές παραμέτρους. Η κεφαλή του magnetron sputtering μπορεί να μετακινηθεί μέσα στη ζώνη συμπύκνωσης. Μειώνοντας την απόσταση από την κεφαλή μέχρι το πρώτο άνοιγμα εκτόνωσης, μειώνεται η απόσταση και ο χρόνος όπου συμβαίνει η συμπύκνωση και επομένως ελαττώνεται το μέσο μέγεθος των νανοσωματιδίων. Η πηγή επιτρέπει την εισαγωγή αερίου (ήλιο ή αργό) που θα λειτουργήσει ως φορέας των παραγόμενων νανοσωματιδίων. Αυξάνοντας τον ρυθμό ροής του αερίου παρατηρείται μείωση του μέσου μεγέθους των παραγόμενων νανοσωματιδίων, εξαιτίας της μείωσης του χρόνου παραμονής τους στη ζώνη συσσωμάτωσης. Η πίεση στη ζώνη άντλησης των νανοσωματιδίων είναι περίπου $10^{-3} mbar$ ενώ η πίεση στο θάλαμο εναπόθεσης είναι περίπου $5 \cdot 10^{-5} mbar$. Λόγω αυτής της βαθμίδας στην πίεση, τα νανοσωματίδια παρασύρονται στον θάλαμο εναπόθεσης και επικάθονται στο δείγμα.

Όπως αναφέραμε παραπάνω, η ανάπτυξη στερεών από ατμούς (συμπύκνωση) στηρίζεται στον μετασχηματισμό φάσης από μια μη-κρυσταλλική σε μια κρυσταλλική κατάσταση. Η συμπύκνωση αρχίζει με την δημιουργία πυρήνων. Αφού παραχθούν οι ατμοί, κατά την διάρκεια της διαστολής ψύχονται, ξεπερνούν το όριο συνύπαρξης υγρού/στερεού και γίνονται υπέρκοροι. Η πυκνότητα των πυρήνων που δημιουργούνται εξαρτώνται από τον βαθμό υπερχορεσμού. Αξίζει να αναφέρουμε ότι υπάρχουν δύο βασικές διαφορές ανάμεσα στους πυρήνες και τα νανοσωματίδια. Πρώτον τα νανοσωματίδια που παράγονται απ' ευθείας από υπέρκορους ατμούς είναι συνήθως μεγαλύτερα (1 - 100 nm) από τους πυρήνες και δεύτερον τα νανοσωματίδια παράγονται, συνήθως σε πολύ μεγαλύτερες ποσότητες από τους πυρήνες. Ο λόγος χρήσης του αδρανούς αερίου είναι ότι οι συχνές συγκρούσεις με τα άτομα του αδρανούς αερίου μειώνουν το βαθμό διάχυσης των ατόμων μακριά από την περιοχή της πηγής. Αν ο ρυθμός διάχυσης δεν περιοριστεί ικανοποιητικά, δεν επιτυγχάνεται υπερχορεσμός. Εκτός από τη δημιουργία υπέρκορων ατμών, σημαντικό φαινόμενο είναι η συσσωμάτωση σωματιδίων. Αν η πυκνότητα των σωματιδίων είναι σχετικά μικρή και ο χρόνος, πριν συλληχθούν τα σωματίδια, είναι σχετικά μικρός, τότε το ποσοστό συσσωμάτωσης τους είναι μικρό. Με την πάροδο του χρόνου, αφού σχηματιστούν τα σωματίδια, συγκρούονται και είτε ενώνονται το ένα με το άλλο για να σχηματίσουν ένα μεγαλύτερο σωματίδιο, είτε θρομβώνονται. Το ποια από τις δύο διαδικασίες θα προκύψει εξαρτάται από τη θερμοκρασία και την διαθέσιμη ενέργεια.

Ας εξετάσουμε με μεγαλύτερη ακρίβεια τον τρόπο παραγωγής των νανοσωματιδίων στη διάταξή μας. Η κατάσταση dc πλάσματος προκαλείται με το αδρανές αέριο Ar να είναι περιορισμένο κοντά στον στόχο χάρη στο μαγνητικό πεδίο του DC magnetron sputtering. Το αποτέλεσμα είναι η δημιουργία υπέρκορων ατμών του στόχου που περιέχουν άτομά του. Τυπικά, παρασύρονται στην ζώνη συσσωμάτωσης από το αδρανές αέριο όπου υφίστανται την διαδικασία της συμπύκνωσης και της πυρηνοποίησης, με αποτέλεσμα τη δημιουργία μιας κατανομής νανοσωματιδίων με ποικιλία μεγέθους. Άτομα του στόχου με πολύ υψηλές κινητικές ενέργειες ψύχονται από το αέριο (ισοδύναμα οδηγούνται σε καταστάσεις χαμηλότερης κινητικής ενέργειας) προκαλώντας την πυρηνοποίηση των σωματιδίων (σμήνη σωματιδίων) του στόχου. Η πυρηνοποίηση αυτών των μικρών σωματιδίων

(κόκκων) ακολουθείται από την ανάπτυξη κόκκων σε μεγαλύτερα σωματίδια (σμήνη).

Η ανάπτυξη των σμηνών εξαρτάται έντονα από τις διατομικές συγκρούσεις (εδώ γίνεται φανερή η παρουσία του αδρανούς αερίου). Μόλις τα σμήνη μεγαλώσουν και υπερβούν μια κρίσιμη ακτίνα, μεγαλύτερα σμήνη μεγαλώνουν από κόκκους που ήδη έχουν αναπτυχθεί πάνω σε σμήνη με μεγαλύτερο ρυθμό απ' ότι νέοι κόκκοι σχηματίζονται. Αφού το αδρανές αέριο είναι πρωτίστως υπεύθυνο για τη διεργασία δημιουργίας σμηνών (συμπύκνωση), η πίεση του χρησιμοποιείται για τον έλεγχο της κατανομής του μεγέθους των σμηνών. Η ανάπτυξη και η πυρηνοποίηση των σμηνών διακόπτεται καθώς τα σμήνη εισέρχονται μέσω μιας μικρής οπής στη ζώνη φιλτραρίσματος, όπου επικρατεί σημαντικά χαμηλότερη πίεση. Από εδώ «παίρνουμε» τα νανοσωματίδια που θα εναποθέσουμε στο δείγμα μας. Οι συνθήκες εναπόθεσης που επηρεάζουν την επιφανειακή πυκνότητα των νανοσωματιδίων και την κατανομή του μεγέθους τους, είναι η θερμοκρασία του υποστρώματος, ο χρόνος εναπόθεσης, η ισχύς της εναπόθεσης και ο ρυθμός ροής του αδρανούς αερίου.[3]

3

Εναπόθεση σωματιδίων μέσω εστίασης

Τα τελευταία χρόνια, η παραγωγή και ο χαρακτηρισμός των νανοσωματιδίων έχουν λάβει πολλή προσοχή, εξαιτίας των καταλυτικών, φωτοενεργών και ηλεκτρονικών ιδιοτήτων τους. Πιο συγκεκριμένα, μεταλλικά νανοσωματίδια έχουν ήδη ενσωματωθεί σε συσκευές αισθητήρων. Στόχος αυτού του κεφαλαίου είναι η περιγραφή μία μεθόδου η οποία διευκολύνει την οργάνωση των νανοσωματιδίων σε δομές. Όπως θα εξηγηθεί και παρακάτω, η μέθοδος αυτή εκμεταλλεύεται το φαινόμενο της αυτο-συναρμολόγησης ή αυτο-οργάνωσης των νανοσωματιδίων και αποτελεί μια πολλά υποσχόμενη τεχνική για μελλοντικές εφαρμογές σε ηλεκτρονικές, οπτικές ή μαγνητικές συσκευές.

Η αυτο-συναρμολόγηση των νανοσωματιδίων σε οργανωμένες δομές συνήθως επιτυγχάνεται με την εφαρμογή εξωτερικού ηλεκτρικού πεδίου σε φορτισμένα μεταλλικά νανοσωματίδια, αφού ο χειρισμός φορτισμένων νανοσωματιδίων από ένα εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο έχει ήδη μελετηθεί εκτενώς. Παρότι για τις περισσότερες μεθόδους η εφαρμογή εξωτερικού ηλεκτρικού πεδίου είναι απαραίτητη, η μέθοδος που θα περιγράψουμε αξιοποιεί μόνο το φορτίο των

νανοσωματιδίων για να επιτύχει την εστίαση των νανοσωματιδίων και κατ' επέκταση τη δημιουργία λωρίδων νανοσωματιδίων.

3.1 Περιγραφή της μεθόδου

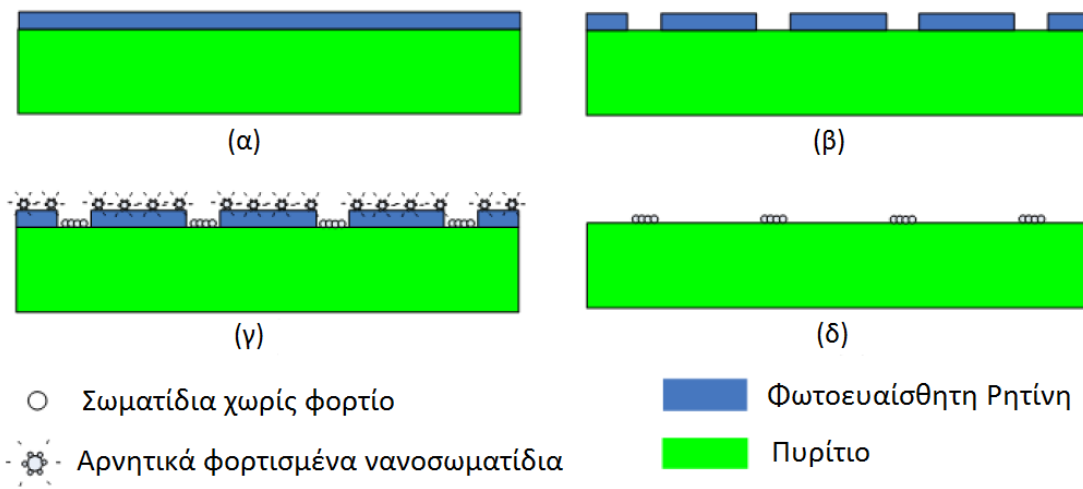
Το σύστημα σύνθεσης που χρησιμοποιείται για την κατασκευή των νανοσωματιδίων αποτελείται από μια πηγή DC magnetron sputtering που είναι συνδεδεμένη με ένα θάλαμο εναπόθεσης. Στο θάλαμο εναπόθεσης τοποθετείται το δείγμα, ενώ οι δύο θάλαμοι επικοινωνούν μέσω ενός μικρού ανοίγματος. Κατά τη διάρκεια της εναπόθεσης, υπάρχει υψηλή διαφορά πίεσης (δύο τάξεων μεγέθους) ανάμεσα στους δύο θαλάμους, με την πίεση να είναι υψηλότερη για την πηγή νανοσωματιδίων. Η διαφορά πίεσης οδηγεί τα νανοσωματίδια που σχηματίζονται στην πηγή μέσα στο θάλαμο εναπόθεσης και τελικά πάνω στο δείγμα.

Ο σχηματισμός των νανοσωματιδίων βασίζεται σε μια φυσική διαδικασία εναπόθεσης ατμού (physical vapor deposition - PVD). Λόγω της υψηλής πίεσης στο εσωτερικό της πηγής, τα άτομα έχουν αρκετά χαμηλή κινητική ενέργεια και δεν συσσωματώνονται το ένα στο άλλο. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα τα νανοσωματίδια να αυξάνουν σε όγκο καθώς πλησιάζουν προς το μικρό άνοιγμα. Κατά τη διάρκεια της δημιουργίας τους, τα νανοσωματίδια φορτίζονται αρνητικά μέσω της αλληλεπίδρασης με τα ελεύθερα ηλεκτρόνια του πλάσματος.

Τα διάφορα στάδια της διαδικασίας, από την προετοιμασία του δείγματος μέχρι τον σχηματισμό των λωρίδων, παρουσιάζονται στο σχήμα 3.1.

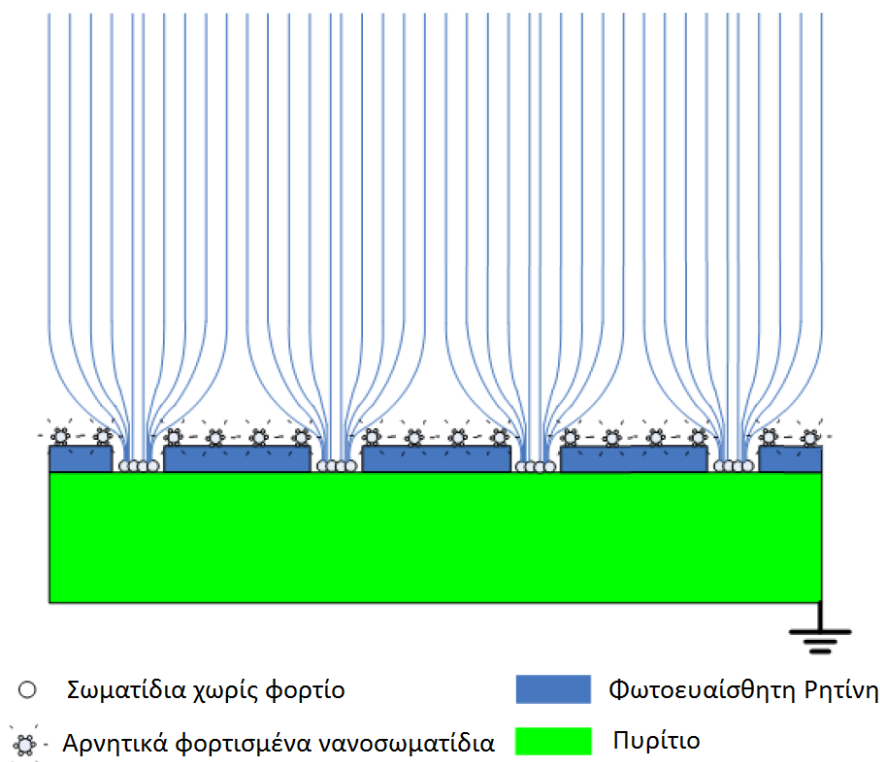
Πριν τοποθετηθεί στο θάλαμο εναπόθεσης, ένα υπόστρωμα πυριτίου p-τύπου επικαλύπτεται με φωτοευαίσθητη ρητίνη (photoresist) (σχήμα 3.1α). Η ρητίνη διαμορφώνεται σε λωρίδες με τη χρήση οπτικής λιθογραφίας (σχήμα 3.1β). Το, διαμορφωμένο πλέον, δείγμα τοποθετείται στο θάλαμο εναπόθεσης, ενώ το υπόστρωμα πυριτίου είναι γειωμένο. Τα αρνητικά φορτισμένα σωματίδια εναποτίθενται πάνω στην επιφάνεια του δείγματος. Λόγω της διαφοράς αγωγιμότητας ανάμεσα στο πυρίτιο και στην ρητίνη και του γεγονότος ότι το υπόστρωμα είναι γειωμένο, τα σωματίδια που εναποτίθεται πάνω στην επιφάνεια του πυριτίου χάνουν

το φορτίο τους. Αντίθετα, όσα εναποτίθενται πάνω στη ρητίνη το διατηρούν, εξαιτίας των μονωτικών της ιδιοτήτων (σχήμα 3.1γ).



Σχήμα 3.1: Διαδικασία εναπόθεσης Νανοσωματιδίων

Η διαφορά πυκνότητας φορτίου που σχηματίζεται σταδιακά ανάμεσα στο πυρίτιο και τη ρητίνη δημιουργεί ένα ηλεκτρικό πεδίο που οδηγεί τα νανοσωματίδια προς την επιφάνεια του πυριτίου, όπως απεικονίζεται στο σχήμα 3.2.



Σχήμα 3.2: Αναπαράσταση του ηλεκτρικού πεδίου λόγω εστίασης των νανοσωματιδίων

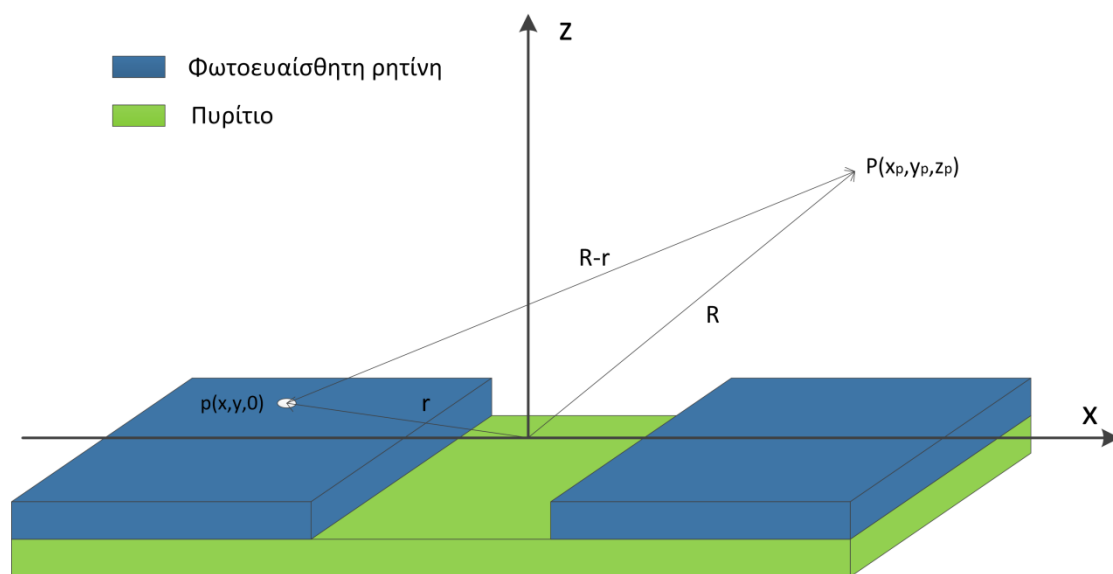
Μετά την εναπόθεση, αφαιρείται η ρητίνη σε ακετόνη. Με τον τρόπο αυτό η ρητίνη και τα φορτισμένα νανοσωματίδια πάνω της αφαιρούνται, ενώ τα νανοσωματίδια που βρίσκονται πάνω στο πυρίτιο παραμένουν στη θέση τους (σχήμα 3.1δ).

3.2 Υπολογισμός του ηλεκτρικού πεδίου

Το ηλεκτρικό πεδίο που δημιουργείται σε ένα σημείο $P(x_p, y_p, z_p)$ από μια δισδιάστατη κατανομή φορτίου με σταθερή πυκνότητα σ δίνεται από τον τύπο (3.1):

$$E_i(x_p, y_p, z_p) = \frac{\sigma}{4\pi\epsilon} \int_{y_{min}}^{y_{max}} \int_{x_{min}}^{x_{max}} \frac{\vec{R} - \vec{r}}{|\vec{R} - \vec{r}|^3} i dx dy \quad (3.1)$$

όπου το i μπορεί να αντικατασταθεί με x , y ή z , ανάλογα με το ποια συνιστώσα του ηλεκτρικού πεδίου θέλουμε να υπολογίσουμε, ϵ είναι η διηλεκτρική σταθερά του χώρου πάνω από το δείγμα, ενώ τα \vec{R} και \vec{r} είναι τα διανύσματα από την αρχή του συστήματος αναφοράς μέχρι το σημείο $P(x_p, y_p, z_p)$ όπου βρίσκεται το σωματίδιο και μέχρι την επιφάνεια του φορτίου, αντίστοιχα, όπως φαίνεται στο σχήμα 3.3. Τα x_{min} , x_{max} , y_{min} , y_{max} είναι τα όρια της κατανομής φορτίου. Στην περίπτωσή μας, θα πρέπει να χρησιμοποιήσουμε τον τύπο (3.1) δύο φορές, αθροίζοντας το αποτέλεσμα, για τις δύο κατανομές φορτίου που βρίσκονται δεξιά και αριστερά της λωρίδας, αντικαθιστώντας τα αντίστοιχα όρια.



Σχήμα 3.3: Σύστημα αναφοράς για δείγματα με μόνο μία λωρίδα πυριτίου

3.2.1 Επίλυση του ολοκληρώματος

Στη συνέχεια θα υπολογίσουμε το ηλεκτρικό πεδίο στο χώρο πάνω από την επιφάνεια του δείγματος, δηλαδή για $z > 0$. Ο υπολογισμός αυτός θα μας βοηθήσει στην καλύτερη κατανόηση του φαινομένου της εστίασης που προκαλείται από την κατανομή φορτίου πάνω στη ρητίνη. Για το λόγο αυτό, θα χρησιμοποιήσουμε τους τύπους (3.2) και (3.3), οι οποίοι δίνονται στη συνέχεια:

$$E_x(x_p, y_p, z_p) = -\frac{\sigma}{4\pi\epsilon} \tanh^{-1} \left(\frac{\sqrt{(x-x_p)^2 + y^2 + z_p^2}}{y} \right) \Big|_{x_{min}}^{x_{max}} \Big|_{y_{min}}^{y_{max}} \quad (3.2)$$

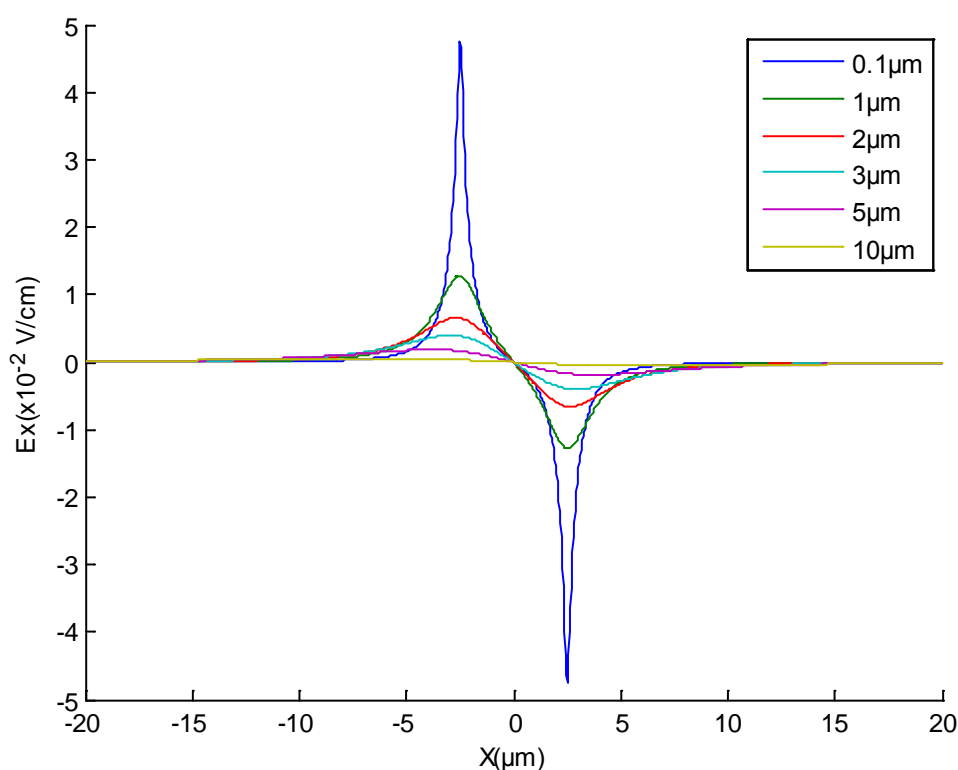
$$E_z(x_p, y_p, z_p) = \frac{\sigma}{4\pi\epsilon} \tan^{-1} \left(\frac{(x-x_p)y}{z_p \sqrt{(x-x_p)^2 + y^2 + z_p^2}} \right) \Big|_{x_{min}}^{x_{max}} \Big|_{y_{min}}^{y_{max}} \quad (3.3)$$

Οι παραπάνω τύποι προκύπτουν δίνουν τις συνιστώσες του ηλεκτρικού πεδίου σε κάθε σημείο και προκύπτουν από τον τύπο (3.1) μετά από πράξεις. Ο λόγος που δεν χρησιμοποιούμε τον τύπο (3.1) είναι για να μειώσουμε το υπολογιστικό κόστος. Οι αναλυτικές πράξεις για να καταλήξουμε στους τύπους (3.2) και (3.3) βρίσκονται στο παράρτημα.

3.2.2 Γραφικές παραστάσεις

Έστω ότι έχουμε ένα δείγμα πλευράς W ίσης με 10 cm , το οποίο έχει μόνο μία λωρίδα πυριτίου πλάτους L ίσο με $5 \text{ }\mu\text{m}$ και η ρητίνη έχει πάχος h ίσο με $1 \text{ }\mu\text{m}$. Με τη βοήθεια των τύπων (3.2) και (3.3), θέτοντας $y_{min} = -\frac{W}{2}$, $y_{max} = \frac{W}{2}$, $x_{min} = -\frac{W}{2}$, $x_{max} = -\frac{L}{2}$ για την κατανομή φορτίου αριστερά της λωρίδας και $y_{min} = -\frac{W}{2}$, $y_{max} = \frac{W}{2}$, $x_{min} = \frac{L}{2}$, $x_{max} = \frac{W}{2}$ για την κατανομή δεξιά της λωρίδας, υπολογίζουμε τις συνιστώσες x και z του ηλεκτρικού πεδίου για το επίπεδο $y = 0$. Για ευκολία θέτουμε το λόγο $\frac{\sigma}{4\pi\epsilon}$ ίσο με τη μονάδα. Η συνιστώσα y του ηλεκτρικού πεδίου είναι ίση με το μηδέν λόγω συμμετρίας. Τα αποτελέσματα του υπολογισμού για το E_x και E_z φαίνονται στα σχήματα 3.4 και 3.5, αντίστοιχα.

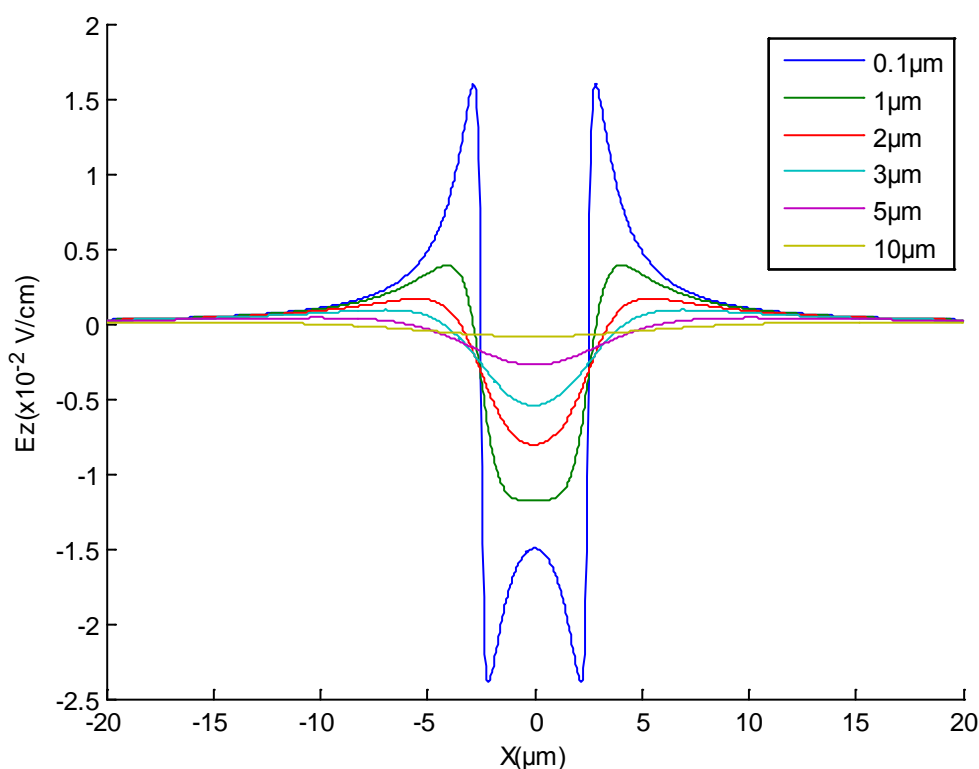
Αν παρατηρήσουμε το διάγραμμα του E_x (σχήμα 3.4), μπορούμε να κατανοήσουμε γιατί εμφανίζεται το φαινόμενο της εστίασης. Για τιμές του x μεγαλύτερες κατά απόλυτη τιμή από $L/2$, δηλαδή για το χώρο πέρα από τα όρια της λωρίδας πυριτίου, το E_x παίρνει πολύ μικρές τιμές, σχεδόν μηδενικές. Όσο πλησιάζουμε την λωρίδα, η τιμή του E_x αυξάνεται ραγδαία, ενώ παίρνει τη μέγιστη τιμή γύρω από τις άκρες της λωρίδας.



Σχήμα 3.4: Συνιστώσα x του ηλεκτρικού πεδίου

Το γεγονός ότι το πρόσημο της x συνιστώσας του πεδίου είναι θετικό για αρνητικές τιμές του x και αρνητικό για θετικές τιμές του x επιβεβαιώνει ότι αυτός είναι ο κύριος λόγος που σπρώχνει τα σωματίδια προς τη λωρίδα του πυριτίου. Το E_z παίζει επίσης σημαντικό ρόλο, δεδομένου ότι, όπως φαίνεται και στο σχήμα 3.5, παίρνει αρνητικές τιμές όταν το x παίρνει τιμές στο διάστημα $(-L/2, L/2)$. Επομένως, εάν ένα σωματίδιο βρεθεί πάνω από τη λωρίδα πυριτίου, ανεξαρτήτως από

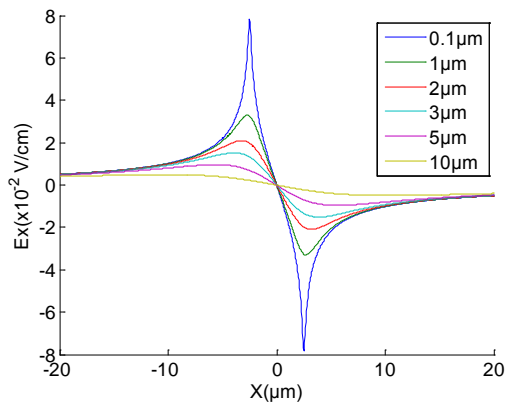
το πόσο μεγάλη είναι η τιμή του z , εφόσον η τιμή του E_z είναι αρνητική, το σωματίδιο θα πρέπει να έλκεται προς την κατεύθυνση της λωρίδας.



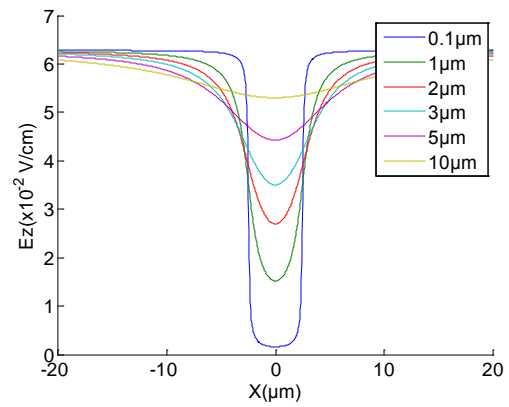
Σχήμα 3.5: Συνιστώσα z του ηλεκτρικού πεδίου

Στα σχήματα 3.4 και 3.5, εκτός από το ηλεκτρικό πεδίο που δημιουργείται από τα αρνητικά φορτισμένα σωματίδια πάνω στη ρητίνη, έχουμε συνυπολογίσει και το ηλεκτρικό πεδίο που δημιουργείται από το εικονικό (θετικό) φορτίο που δημιουργείται στη διεπιφάνεια ανάμεσα στη ρητίνη και το πυρίτιο. Για καλύτερη κατανόηση, στο σχήμα 3.6 υπολογίζουμε χωριστά τις συνιστώσες x και z του πεδίου που προκαλούνται από το αρνητικό και το θετικό φορτίο. Το συνολικό πεδίο προκύπτει από το άθροισμά τους.

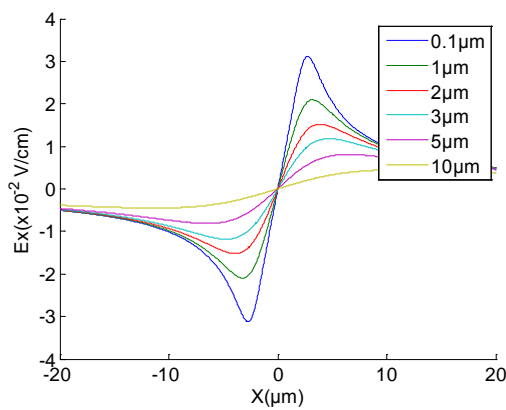
Στα σχήματα 3.6α και 3.6β βλέπουμε τη συνιστώσα x και z του ηλεκτρικού πεδίου, αντίστοιχα, που προκαλείται από τα αρνητικά φορτισμένα σωματίδια πάνω στη ρητίνη, ενώ στα σχήματα 3.6γ και 3.6δ βλέπουμε τη συνιστώσα x και z του ηλεκτρικού πεδίου, αντίστοιχα, που προκαλείται από το ηλεκτρικό πεδίο που δημιουργείται από το εικονικό θετικό φορτίο.



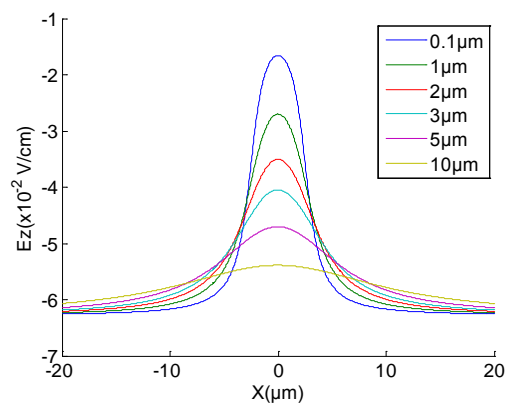
(α)



(β)



(γ)



(δ)

Σχήμα 3.6: α) Συνιστώσα x και β) συνιστώσα z του ηλεκτρικού πεδίου που προκαλείται από τα αρνητικά φορτισμένα σωματίδια πάνω στη ρητίνη, γ) συνιστώσα x και δ) συνιστώσα z του ηλεκτρικού πεδίου που προκαλείται από το ηλεκτρικό πεδίο που δημιουργείται από το εικονικό (θετικό) φορτίο

4

Προσομοίωση της συμπεριφοράς των νανοσωματιδίων

Όπως αναπτύχθηκε και στα προηγούμενα κεφάλαια, στόχος αυτής της εργασίας είναι να προσομοιώσουμε τη συμπεριφορά των φορτισμένων νανοσωματιδίων κατά την εστίαση. Στο παρόν κεφάλαιο θα περιγραφεί με ποιον τρόπο επιτεύχθηκε αυτό και θα εξηγηθούν όλες οι λεπτομέρειες και τα ζητήματα που προέκυψαν κατά τη συγγραφή του κώδικα. Επιπρόσθετα, θα παρουσιαστούν τα αποτελέσματα που προέκυψαν από την προσομοίωση.

4.1 Ανάλυση του προβλήματος

Το παρόν υποκεφάλαιο πραγματεύεται τα επιμέρους ζητήματα τα οποία προκύπτουν κατά την ανάλυση του προβλήματος.

4.1.1 Υποθέσεις και αρχικές συνθήκες

Ένα από τα βασικά ζητήματα είναι οι υποθέσεις που έγιναν για τη μέθοδο κατά τη συγγραφή του κώδικα. Οι υποθέσεις αυτές συνοψίζονται στη συνέχεια. Κάποιες από αυτές έχουν αναφερθεί σε προηγούμενες παραγράφους και επαναλαμβάνονται για λόγους πληρότητας:

- Κάθε σωματίδιο που φθάνει στην επιφάνεια του πυριτίου χάνει το φορτίο του, ενώ όσα φθάνουν στην επιφάνεια της ρητίνης το διατηρούν.
- Διαστάσεις του δείγματος: Το δείγμα είναι ένα τετράγωνο πλευράς ίσης με $W = 1 \text{ cm}$. Το δείγμα είναι καλυμμένο με ρητίνη πάχους $h = 1 \mu\text{m}$, η οποία στη μέση του δείγματος διακόπτεται από μια στενή λωρίδα όπου το πυρίτιο είναι εκτεθειμένο. Το πάχος L της λωρίδας πυριτίου εξαρτάται από την εκάστοτε προσομοίωση.
- Φορτίο νανοσωματιδίων: Όλα τα μεταφερόμενα σωματίδια έχουν φορτίο ίσο με το φορτίο ενός ηλεκτρονίου.
- Διαστάσεις νανοσωματιδίων: Η διάμετρος των νανοσωματιδίων ακολουθεί κατανομή Gauss με μέση τιμή 4 nm και τυπική απόκλιση 1 nm .
- Αρχικές συνθήκες για τη θέση, την ταχύτητα και την επιτάχυνση: Όλα τα σωματίδια δημιουργούνται σε ύψος z ίσο με $100 \mu\text{m}$ από την φωτοευαίσθητη επιφάνεια και είναι τυχαία κατανεμημένα στο x . Η αρχική τους ταχύτητα δίνεται από το διάνυσμα $(0, 0, V)$, με $V < 0$. Η αρχική επιτάχυνση είναι ίση με $(0, 0, 0)$.
- Για κάθε θέση που καταλαμβάνουν τα σωματίδια, η επιτάχυνση τους υπολογίζεται με τη βοήθεια του συνολικού ηλεκτρικού πεδίου. Το συνολικό ηλεκτρικό πεδίο είναι το αλγεβρικό άθροισμα του πεδίου που προκαλείται από την κατανομή αρνητικού φορτίου πάνω στη ρητίνη και του πεδίου που προκαλείται από το εικονικό (θετικό) φορτίο που δημιουργείται στη διεπιφάνεια ανάμεσα στη ρητίνη και το πυρίτιο. Στο συνολικό πεδίο δεν έχουμε λάβει υπ' όψιν τις αλληλεπιδράσεις ανάμεσα στα σωματίδια, άρα η τροχιά κάθε σωματιδίου είναι ανεξάρτητη από τις υπόλοιπες.

4.1.2 Υπολογισμός της μάζας των νανοσωματιδίων

Όπως αναφέρθηκε στην προηγούμενη παράγραφο, η διάμετρος των νανοσωματιδίων ακολουθεί κατανομή Gauss με μέση τιμή 4 nm και τυπική απόκλιση 1 nm . Από τη διάμετρο κάθε σωματιδίου είναι εύκολο να υπολογίσουμε τον όγκο του, αν φανταστούμε ότι κάθε σωματίδιο ακολουθεί μια σφαιρική κατανομή. Ο όγκος της σφαίρας δίνεται από τον τύπο (4.1):

$$V = \frac{4}{3}\pi r^2 \quad (4.1)$$

όπου V είναι ο όγκος και r η ακτίνα (ισούται με το μισό της διαμέτρου). Αφού υπολογίσουμε τον όγκο κάθε σωματιδίου, η μάζα υπολογίζεται με την βοήθεια του τύπου της πυκνότητας (4.2), αν λύσουμε ως προς m :

$$\rho = \frac{m}{V} \quad (4.2)$$

όπου ρ η πυκνότητα, V ο όγκος και m η μάζα.

Η τιμή της πυκνότητας που θα χρησιμοποιήσουμε εξαρτάται από το υλικό από το οποίο κατασκευάζονται τα νανοσωματίδια. Ενδεικτικά, κάποιες τιμές πυκνοτήτων δίνονται στον παρακάτω πίνακα:

Στοιχείο	Πυκνότητα (ρ)
Νικέλιο (Ni)	8.908 g/cm ³
Πλατίνα (Pt)	21.09 g/cm ³
Πυρίτιο (Si)	2.33 g/cm ³
Χρυσός (Au)	19.3 g/cm ³

Πίνακας 4.1

4.1.3 Υπολογισμός της επιτάχυνσης των νανοσωματιδίων

Όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως, η επιτάχυνση υπολογίζεται με τη βοήθεια του ηλεκτρικού πεδίου. Για να γίνει αυτό, θα πρέπει πρώτα να υπολογίσουμε τη δύναμη που δέχεται το σωματίδιο σε κάθε θέση με τη βοήθεια του τύπου:

$$F_i(x, y, z) = q \cdot E_i(x, y, z) \quad (4.3)$$

όπου \mathbf{E} είναι το ηλεκτρικό πεδίο, \mathbf{F} είναι η δύναμη που δέχεται το σωματίδιο, q είναι το φορτίο του νανοσωματιδίου και (x, y, z) είναι η θέση του σωματιδίου.

Στη συνέχεια, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε το δεύτερο νόμο του Νεύτωνα για να υπολογίσουμε την επιτάχυνση:

$$F_i(x, y, z) = m \cdot a_i(x, y, z) \quad (4.4)$$

όπου m είναι η μάζα του σωματιδίου και \mathbf{a} η επιτάχυνσή του. Το i , όπως και προηγουμένως, μπορεί να αντικατασταθεί με x , y , ή z , ανάλογα με το ποια συνιστώσα των μεγεθών θέλουμε να υπολογίσουμε.

4.1.4 Περιγραφή της τροχιάς του σωματιδίου

Το πρώτο κομμάτι της προσομοίωσης αφορά τον υπολογισμό των τροχιών των σωματιδίων. Για το λόγο αυτό, θα περιγράψουμε τις τροχιές με μια διαφορική εξίσωση πρώτης τάξης, δηλαδή με μία εξίσωση της μορφής $\bar{y}' = \bar{F}(x, \bar{y})$, όπου x είναι μια μεταβλητή, \bar{y} είναι διάνυσμα του οποίου τα στοιχεία είναι συναρτήσεις του x , δηλαδή $\bar{y}(x) = [y_1(x), y_2(x), \dots, y_m(x)]$ και η \bar{F} είναι μια διανυσματική συνάρτηση που παίρνει σαν είσοδο το διάνυσμα \bar{y} και το x .

Στη συγκεκριμένη περίπτωση, τα μεγέθη που μας ενδιαφέρουν και θα αποτελούν στοιχεία του διανύσματος \bar{y} είναι η θέση και η ταχύτητα του σωματιδίου, τα οποία αποτελούν συναρτήσεις του χρόνου. Από τα δυο παραπάνω μεγέθη μας ενδιαφέρουν μόνο οι συνιστώσες x και z , μιας και η y συνιστώσα του ηλεκτρικού πεδίου είναι μηδενική λόγω συμμετρίας. Επομένως, το διάνυσμα \bar{y} θα έχει τέσσερις συνιστώσες, οι οποίες θα είναι οι εξής:

$$y_1(t) = x(t)$$

$$y_2(t) = z(t)$$

$$y_3(t) = u_x(t)$$

$$y_4(t) = u_z(t)$$

όπου $x(t)$ είναι η x συνιστώσα της θέσης του σωματιδίου, $z(t)$ είναι η z συνιστώσα της θέσης του σωματιδίου, $u_x(t)$ είναι η x συνιστώσα της ταχύτητας του σωματιδίου και $u_z(t)$ είναι η z συνιστώσα της ταχύτητας του σωματιδίου.

Ζητούμενο είναι να βρούμε τη διανυσματική συνάρτηση \vec{F} . Επομένως θα πρέπει να εκφράσουμε κάθε στοιχείο του διανύσματος \vec{y}' ως συνάρτηση του t και των στοιχείων του \vec{y} . Ας εξετάσουμε κάθε στοιχείο του διανύσματος \vec{y}' χωριστά:

- Υπολογισμός του $y_1'(t)$:

$$\begin{aligned} y_1(t) &= x(t) \Rightarrow \\ y_1'(t) &= x'(t) \Rightarrow \\ y_1'(t) &= u_x(t) \Rightarrow \\ y_1'(t) &= y_3(t) \end{aligned}$$

- Υπολογισμός του $y_2'(t)$:

$$\begin{aligned} y_2(t) &= z(t) \Rightarrow \\ y_2'(t) &= z'(t) \Rightarrow \\ y_2'(t) &= u_z(t) \Rightarrow \\ y_2'(t) &= y_4(t) \end{aligned}$$

- Υπολογισμός του $y_3'(t)$:

$$\begin{aligned} y_3(t) &= u_x(t) \Rightarrow \\ y_3'(t) &= u_x'(t) \Rightarrow \\ y_3'(t) &= a_x(t) \Rightarrow \\ y_3'(t) &= \frac{F_x(x, 0, z)}{m} = \frac{F_x(y_1(t), 0, y_2(t))}{m} \Rightarrow \\ y_3'(t) &= \frac{q}{m} E_x(y_1(t), 0, y_2(t)) \end{aligned}$$

- Υπολογισμός του $y_4'(t)$:

$$\begin{aligned} y_4(t) &= u_z(t) \Rightarrow \\ y_4'(t) &= u_z'(t) \Rightarrow \\ y_4'(t) &= a_z(t) \Rightarrow \\ y_4'(t) &= \frac{F_z(x, 0, z)}{m} = \frac{F_z(y_1(t), 0, y_2(t))}{m} \Rightarrow \\ y_4'(t) &= \frac{q}{m} E_z(y_1(t), 0, y_2(t)) \end{aligned}$$

Όπου τα $E_x(x, y, z)$, $E_z(x, y, z)$ δίνονται από τους τύπους (3.2) και (3.3), ενώ η μάζα m υπολογίζεται με τη διαδικασία που περιγράφηκε στην παράγραφο 4.1.2.

Συνολικά, η ζητούμενη διαφορική εξίσωση δίνεται από το παρακάτω σύστημα:

$$\begin{bmatrix} y_1'(t) \\ y_2'(t) \\ y_3'(t) \\ y_4'(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_3(t) \\ y_4(t) \\ \frac{q}{m} E_x(y_1(t), 0, y_2(t)) \\ \frac{q}{m} E_z(y_1(t), 0, y_2(t)) \end{bmatrix} \quad (4.5)$$

Πλέον, έχουμε μία περιγραφή του προβλήματος με τη μορφή μιας διαφορικής εξίσωσης. Η διαφορική αυτή εξίσωση μπορεί να λυθεί με τη χρήση κάποιας επαναληπτικής μεθόδου αριθμητικής ανάλυσης. Στη συγκεκριμένη περίπτωση επιλέχθηκε η χρήση συνάρτησης του Matlab η οποία χρησιμοποιεί τη μέθοδο Runge-Kutta.

4.1.5 Περιγραφή του κώδικα

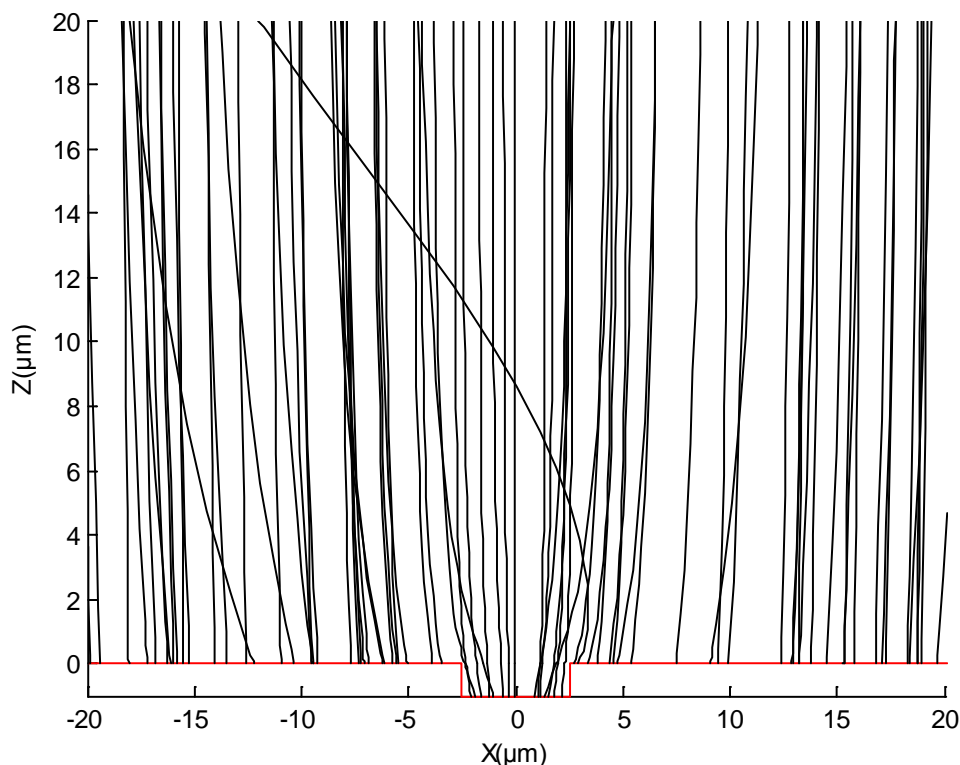
Στη συνέχεια δίνεται το πρόγραμμα που χρησιμοποιήθηκε σε μορφή ψευδοκώδικα.

```
Αρχικοποίηση των μεταβλητών που περιέχουν τον αριθμό σωματιδίων,
τις διαστάσεις του δείγματος και την πυκνότητα του φορτίου πάνω στη
ρητίνη
Υπολογισμός των αρχικών θέσεων και ταχυτήτων των σωματιδίων
Υπολογισμός των μαζών των σωματιδίων
while (Ο αριθμός σωματιδίου είναι μικρότερος από τον αριθμό
σωματιδίων)
    Υπολόγισε την τροχιά μέχρι την ευθεία z=0 ή μέχρι το
σωματίδιο να φύγει εκτός των ορίων του δείγματος
    Αποθήκευσε την τροχιά
    if (το σωματίδιο πέρασε την ευθεία z=0 και είναι εντός των
ορίων της λωρίδας πυριτίου)
        Κάνε νέο υπολογισμό τροχιάς με αρχικές συνθήκες τις
τελικές τιμές την προηγούμενης τροχιάς για όσο το
σωματίδιο βρίσκεται εντός των ορίων της λωρίδας
        Αποθήκευσε τη νέα τροχιά
    end
    Αύξησε τον αριθμό σωματιδίου
end
Σχεδίασε όλες τις τροχιές
```

4.2 Αποτελέσματα

Το φαινόμενο της αυτο-εστίασης είναι ένα δυναμικό φαινόμενο. Σε αυτό παρατηρούμε δύο φάσεις, τη μεταβατική και τη σταθερή κατάσταση. Αρχικά, η επιφάνεια της ρητίνης δεν έχει καθόλου φορτία. Σταδιακά αυτό αλλάζει, καθώς νέα σωματίδια φτάνουν στην επιφάνεια. Κατά τη διάρκεια αυτής της μεταβατικής φάσης, η δύναμη που ασκείται στα σωματίδια από το ηλεκτρικό πεδίο είναι αρκετά μικρή και

δεν επηρεάζει την αρχική κατεύθυνση της κίνησής τους. Στο σχήμα 4.1 απεικονίζονται οι τροχιές των νανοσωματιδίων που παρατηρήθηκαν κατά την αρχική αυτή φάση για λωρίδα πυριτίου 5 μm .

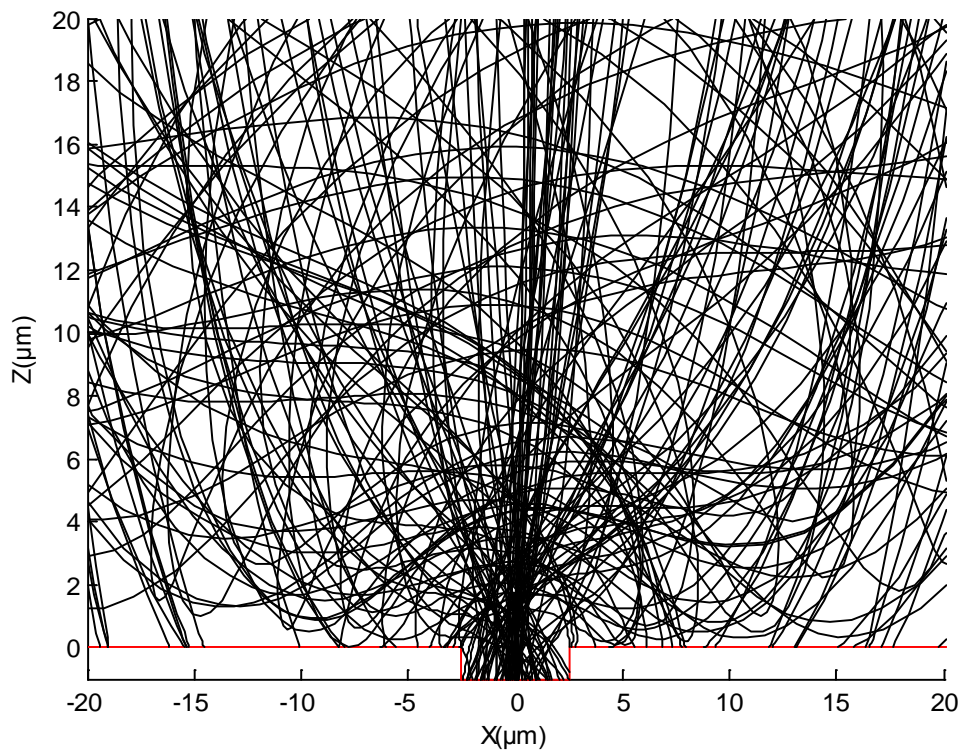


Σχήμα 4.1: Τροχιές νανοσωματιδίων κατά τη μεταβατική φάση ($\sigma = 10^9$ σωματίδια/ cm^2) σε λωρίδα 5 μm

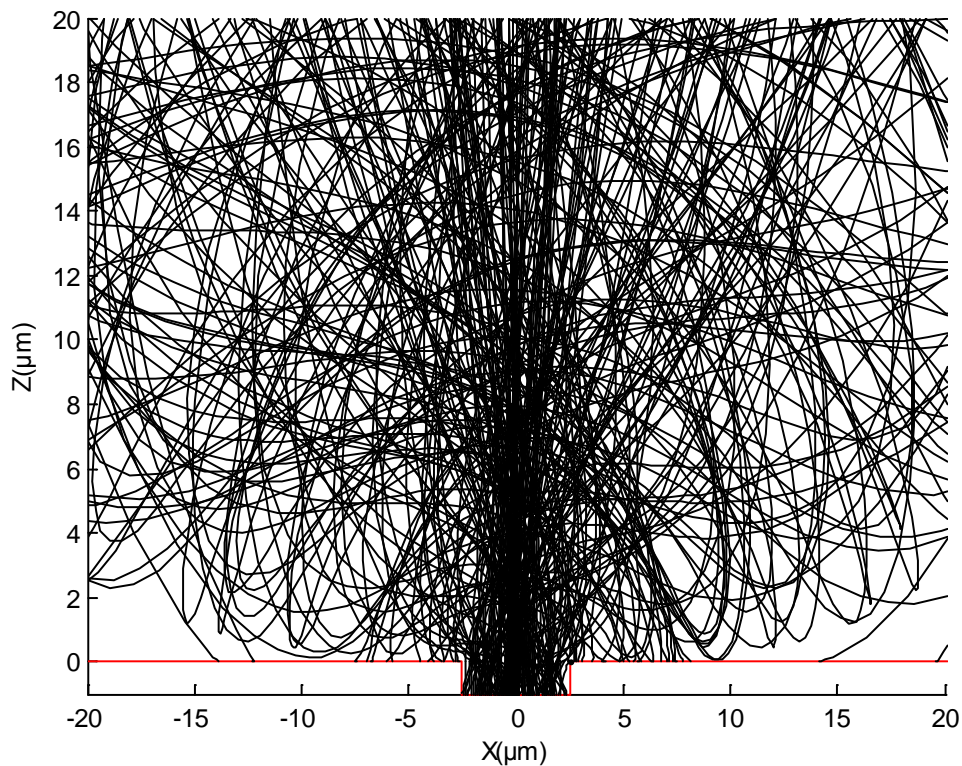
Καθώς περισσότερα σωματίδια αρχίζουν να πέφτουν πάνω στο δείγμα, και πιο συγκεκριμένα πάνω στην φωτοευαίσθητη ρητίνη, η επιφανειακή πυκνότητα φορτίου αυξάνεται, γεγονός που έχει σαν αποτέλεσμα όλο και περισσότερα σωματίδια να οδηγούνται προς τη λωρίδα πυριτίου. Κατά τη διάρκεια αυτής της φάσης, λαμβάνει χώρα και ένα ακόμα γεγονός, η απώλεια σωματιδίων λόγω απόθησης.

Μόλις η πυκνότητα φορτίου πάνω στη ρητίνη πλησιάσει το σημείο κορεσμού μπαίνουμε στην σταθερή κατάσταση, κατά την οποία τα περισσότερα σωματίδια είτε απωθούνται είτε πέφτουν πάνω στη λωρίδα πυριτίου. Το σχήμα 4.2 παρουσιάζει τις τροχιές των σωματιδίων που παρατηρήθηκαν σε αυτή την κατάσταση, σε δείγμα με πλάτος λωρίδας πυριτίου 5 μm . Είναι σαφές ότι τα περισσότερα από τα σωματίδια εστιάζονται στη λωρίδα του πυριτίου, ενώ πολύ λίγα σωματίδια πέφτουν πάνω στη ρητίνη. Όσο αυξάνει η πυκνότητα του φορτίου πάνω στη ρητίνη, τόσο πιο έντονο γίνεται το φαινόμενο της εστίασης. Αυτό διαπιστώνεται και από τα σχήματα 4.3 και

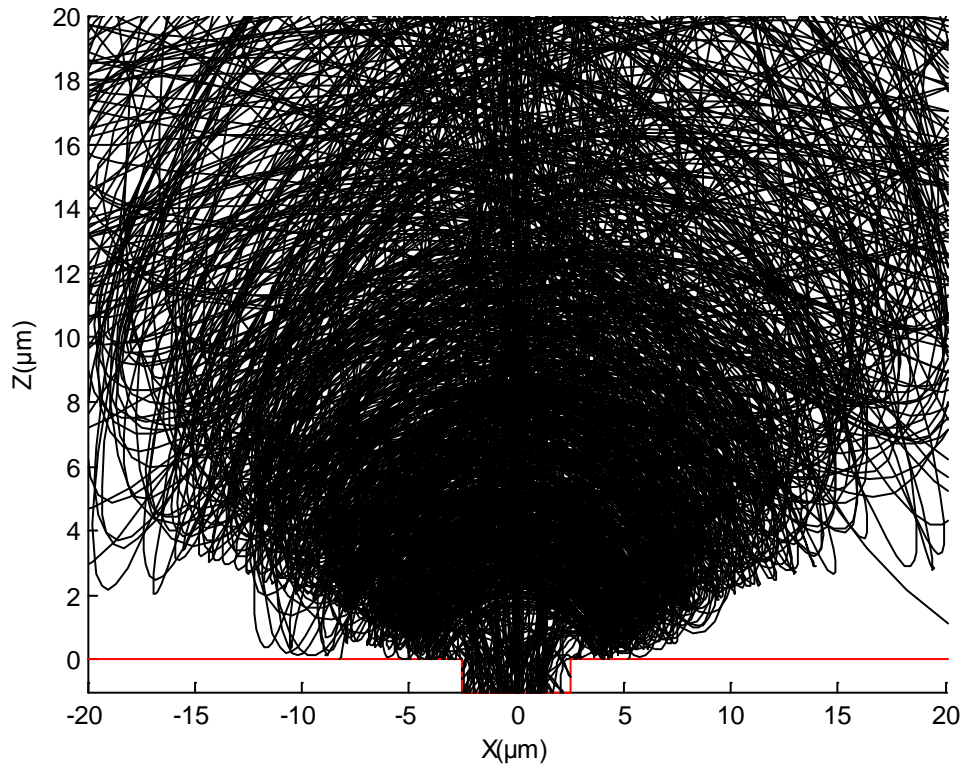
4.4, όπου απεικονίζονται οι τροχιές για επιφανειακή πυκνότητα φορτίου $\sigma = 5 \cdot 10^{10}$ σωματίδια/cm² και $\sigma = 10^{11}$ σωματίδια/cm².



Σχήμα 4.2: Τροχιές νανοσωματιδίων κατά τη σταθερή φάση ($\sigma = 10^{10}$ σωματίδια/cm²) σε λωρίδα 5 μm

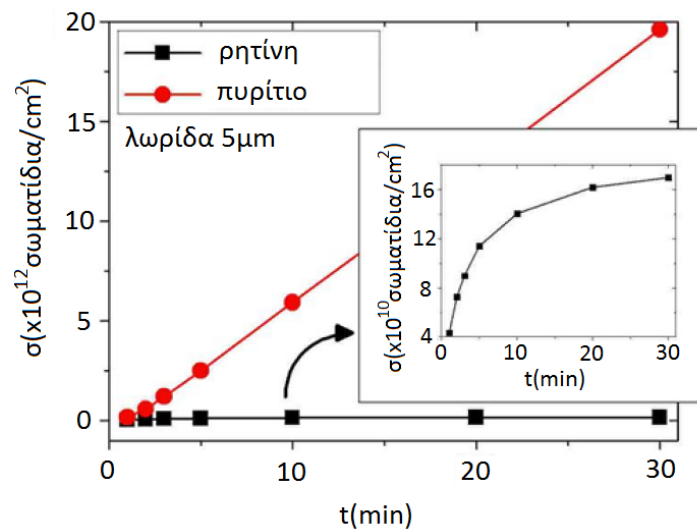


Σχήμα 4.3: Τροχιές νανοσωματιδίων για πυκνότητα φορτίου $\sigma = 5 \cdot 10^{10}$ σωματίδια/cm² σε λωρίδα 5 μm



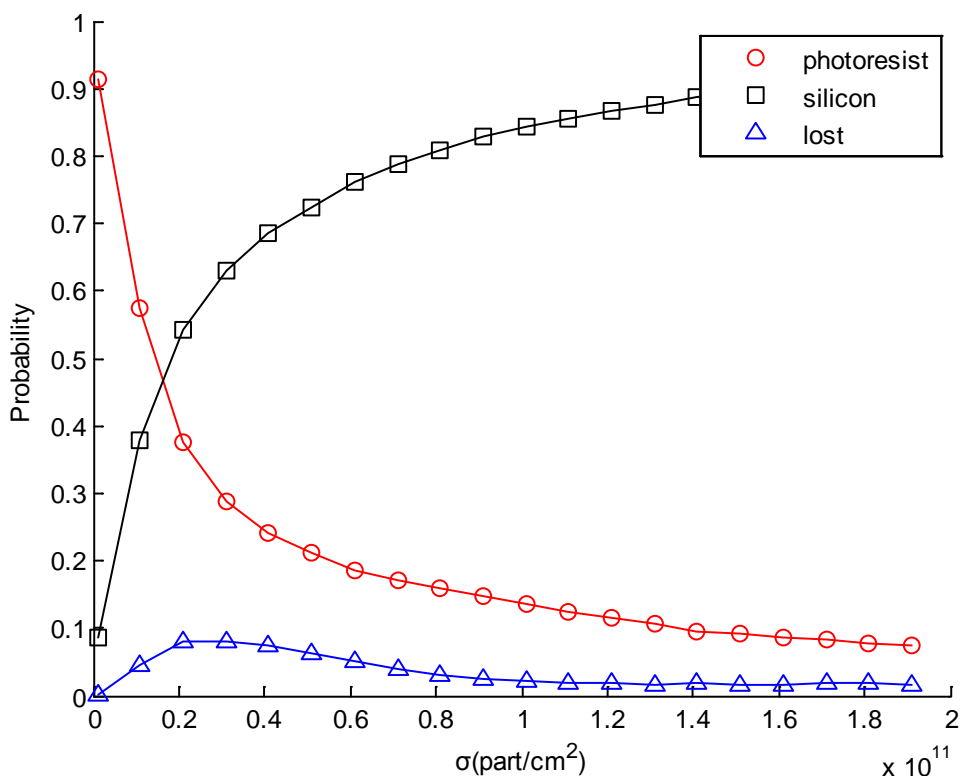
Σχήμα 4.4: Τροχιές νανοσωματιδίων για πυκνότητα φορτίου $\sigma = 10^{11}$ σωματίδια/cm² σε λωρίδα 5μm

Από τη βιβλιογραφία [8] γνωρίζουμε ότι, ενώ η πυκνότητα σωματιδίων στη λωρίδα πυριτίου αυξάνει γραμμικά, η πυκνότητα σωματιδίων στη ρητίνη γίνεται κορεσμένη σε μία τιμή που είναι δύο με τρεις τάξεις μεγέθους μικρότερη από τις τιμές στο πυρίτιο. Αυτό φαίνεται και στο σχήμα 4.5, όπου απεικονίζεται η πυκνότητα σωματιδίων στο πυρίτιο και τη ρητίνη.



Σχήμα 4.5: Εξέλιξη ως προς το χρόνο της πυκνότητας νανοσωματιδίων στο πυρίτιο και τη ρητίνη [8]

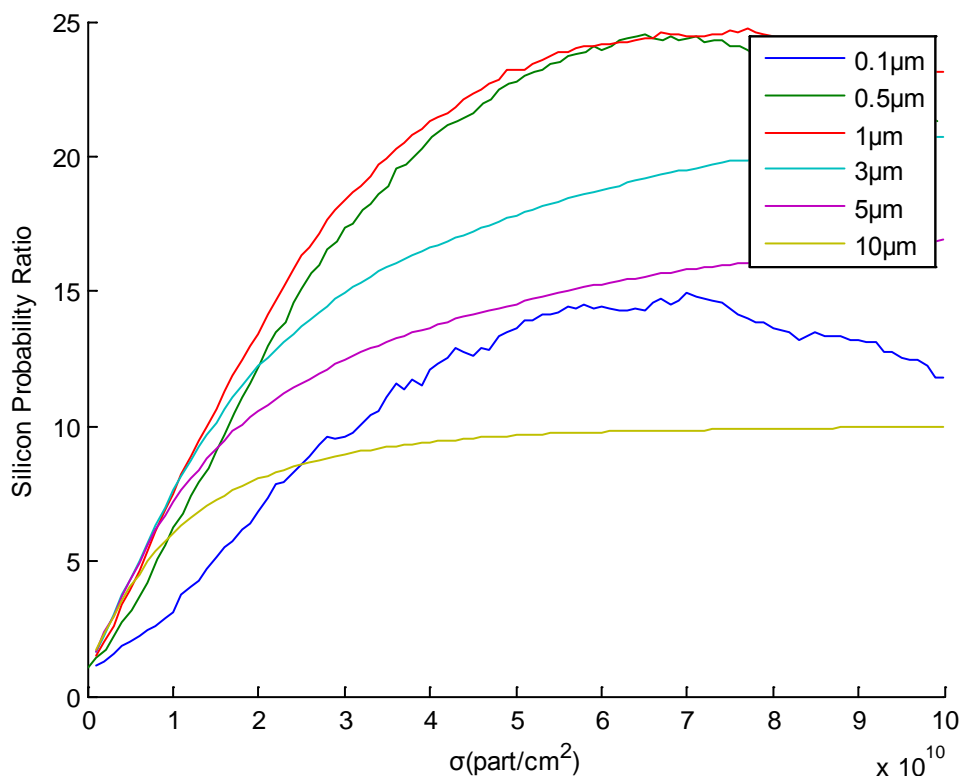
Για να κατανοήσουμε καλύτερα τη συμπεριφορά του φαινομένου, θα υπολογίσουμε την πιθανότητα να πέσει ένα σωματίδιο στο πυρίτιο, να πέσει στη ρητίνη ή να χαθεί, για διαφορετικές τιμές της πυκνότητας φορτίου στη ρητίνη. Το πλάτος της λωρίδας, όπως και προηγουμένως, είναι ίσο με $5\ \mu\text{m}$, ενώ για ευκολία θεωρούμε ότι η αρχική θέση των σωματιδίων έχει την x συνιστώσα στο διάστημα $[-50\ \mu\text{m}, 50\ \mu\text{m}]$. Με αυτά τα δεδομένα, εάν δε συνέβαινε το φαινόμενο της εστίασης (αν δηλαδή οι τροχιές των σωματιδίων ήταν ευθείες), θα αναμέναμε ότι η θεωρητική πιθανότητα να πέσει ένα σωματίδιο στη λωρίδα πυριτίου θα ήταν ίση με 0.05. Όπως, όμως, βλέπουμε και στο σχήμα 4.6, η πιθανότητα αυτή ξεπερνά γρήγορα αυτό το νούμερο.



Σχήμα 4.6: Η πιθανότητα να πέσει ένα σωματίδιο στο πυρίτιο, να πέσει στη ρητίνη ή να χαθεί, για διαφορετικές τιμές της πυκνότητας φορτίου, σε δείγμα με λωρίδα $5\ \mu\text{m}$ και x στο διάστημα $[-50\ \mu\text{m}, 50\ \mu\text{m}]$.

Στη συνέχεια θα μελετήσουμε τι συμβαίνει όταν αλλάζει το πλάτος της λωρίδας πυριτίου του δείγματος (κρατώντας όλες τις υπόλοιπες διαστάσεις ίδιες). Τα αποτελέσματα φαίνονται στο σχήμα 4.7, όπου βλέπουμε το λόγο πιθανοτήτων συναρτήσει της πυκνότητας φορτίου για λωρίδες πλάτους $0.5\ \mu\text{m}$, $1\ \mu\text{m}$, $3\ \mu\text{m}$, $5\ \mu\text{m}$

και $10 \mu\text{m}$. Ο λόγος πιθανοτήτων ορίζεται ως ο λόγος της παρατηρούμενης από την προσομοίωση πιθανότητας προς τη θεωρητική πιθανότητα (χωρίς εστίαση).

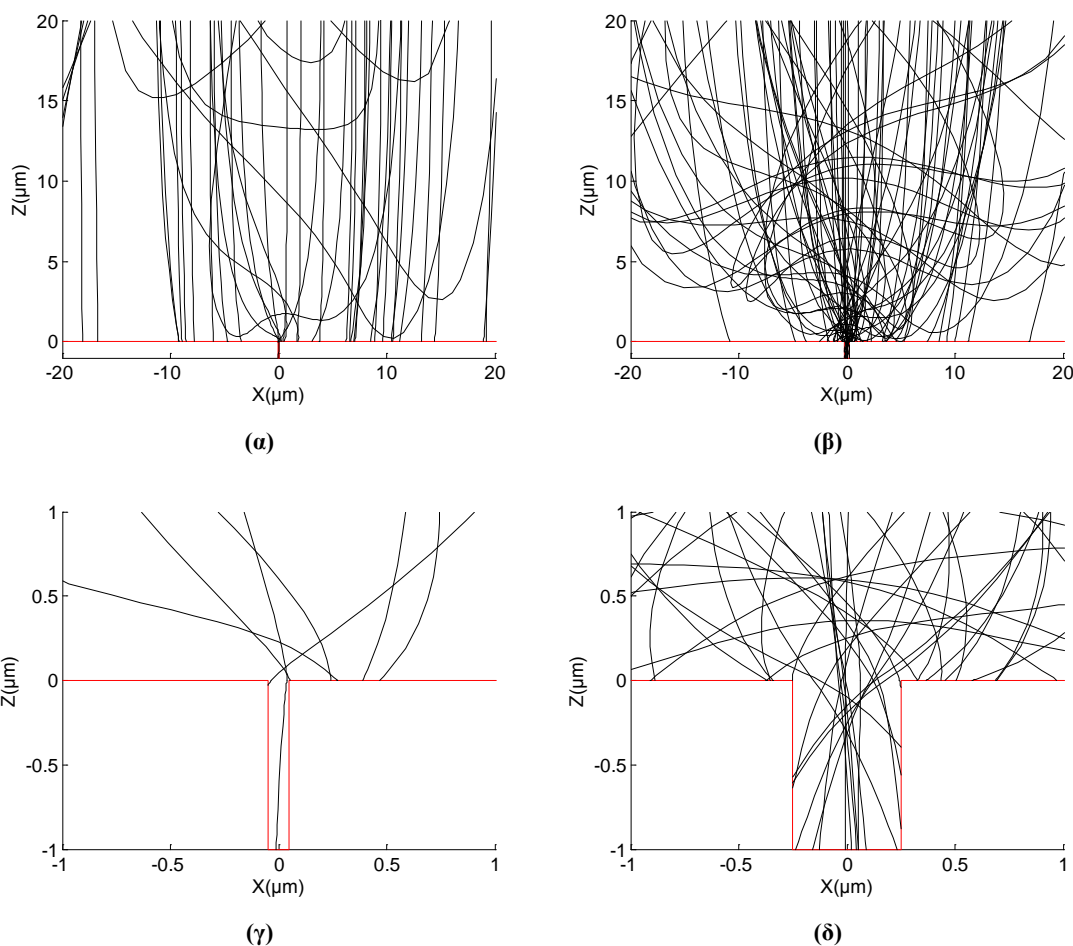


Σχήμα 4.7: Ο λόγος πιθανότητας για διαφορετικά πλάτη λωρίδας συναρτήσει της πυκνότητας φορτίου στη ρητίνη

Παρατηρούμε ότι όσο μειώνεται το πλάτος της λωρίδας, μέχρι τα $0.5 \mu\text{m}$, ο λόγος πιθανοτήτων αυξάνει σημαντικά, γεγονός που συνεπάγεται την αύξηση του ρυθμού εναπόθεσης νανοσωματιδίων στην περιοχή του πυριτίου.

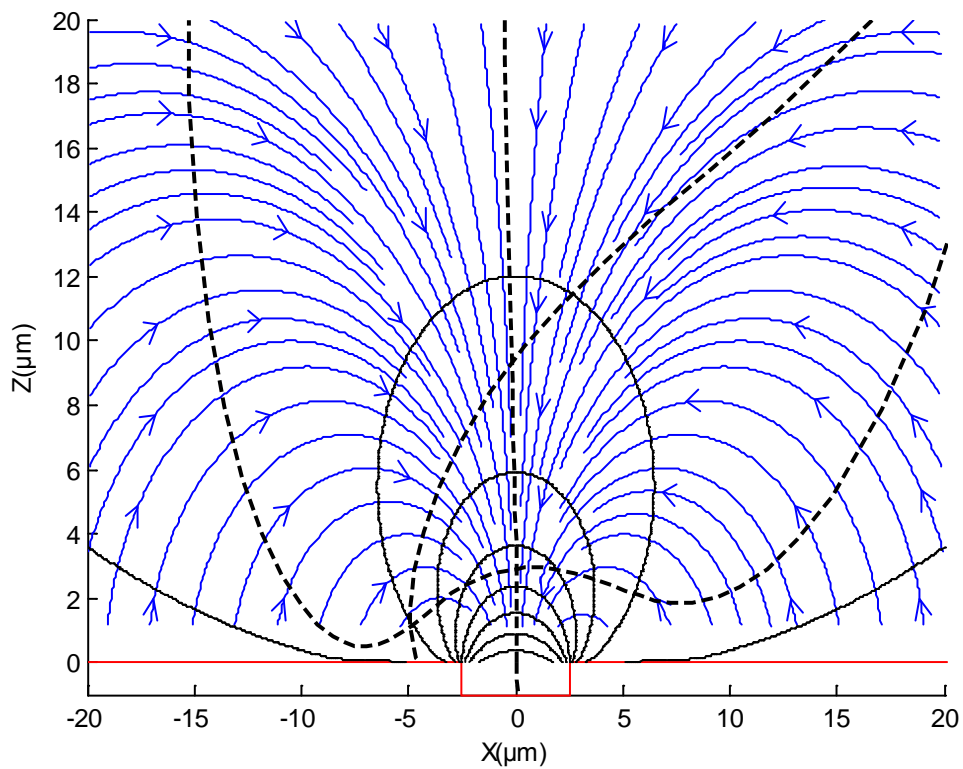
Από τη γραφική παράσταση του λόγου πιθανοτήτων για τα $0.1 \mu\text{m}$, συμπεραίνουμε ότι, για πλάτη λωρίδας μικρότερα των $0.5 \mu\text{m}$ και για όλες τις τιμές της πυκνότητας φορτίου πάνω στη ρητίνη, ο λόγος πιθανοτήτων μειώνεται σημαντικά. Αυτό φαίνεται και στο σχήμα 4.8, όπου γίνεται μία σύγκριση ανάμεσα στις τροχιές σε δύο δείγματα με λωρίδα πυριτίου πλάτους $0.1 \mu\text{m}$ και $0.5 \mu\text{m}$. Οι τροχιές του σχήματος 4.8 αντιστοιχούν σε πυκνότητα φορτίου ίση με $\sigma = 5 \cdot 10^{10} \text{ σωματίδια}/\text{cm}^2$, ενώ για να είναι πιο ευδιάκριτες οι τροχιές, επιλέχθηκε μικρός αριθμός σωματιδίων ($N = 300 \text{ σωματίδια}$).

Αν συγκρίνουμε τα σχήματα 4.8α και 4.8β, όπου βλέπουμε τις τροχιές για λωρίδα πλάτους $0.1 \mu\text{m}$ και $0.5 \mu\text{m}$, αντίστοιχα, παρατηρούμε ότι πολύ λιγότερα σωματίδια εστιάζονται προς τη λωρίδα πυριτίου στην πρώτη περίπτωση. Λόγω του μικρού πλάτους της λωρίδας, τα σωματίδια αντιλαμβάνονται την επιφάνεια της ρητίνης σαν μια συνεχή κατανομή φορτίου, με αποτέλεσμα είτε να απωθούνται από την επιφάνεια και να χάνονται, είτε να έχουν σχεδόν ευθείες τροχιές. Επιπλέον, από τα σωματίδια που τελικά καταφέρνουν να πλησιάσουν τη λωρίδα με τη βοήθεια της εστίασης, επειδή η λωρίδα είναι αρκετά λεπτή, μεγάλο ποσοστό από αυτά καταλήγει πολύ κοντά στα όρια της λωρίδας, πάνω στη ρητίνη. Αυτό φαίνεται στα σχήματα 4.8γ και 4.8δ, όπου φαίνονται οι ίδιες τροχιές μεγεθυμένες.



Σχήμα 4.8: Τροχιές νανοσωματιδίων σε δείγματα με πυκνότητα φορτίου $\sigma = 5 \cdot 10^{10}$ σωματίδια/ cm^2 σε α) λωρίδα πλάτους $0.1 \mu\text{m}$, β) λωρίδα πλάτους $0.5 \mu\text{m}$, γ) λωρίδα πλάτους $0.1 \mu\text{m}$ (μεγεθυμένη), δ) λωρίδα πλάτους $0.5 \mu\text{m}$ (μεγεθυμένη).

Τέλος, για λόγους πληρότητας, στο σχήμα 4.9 παρουσιάζονται οι τροχιές τριών νανοσωματιδίων, καθώς και οι δυναμικές και οι ισοδυναμικές γραμμές του ηλεκτρικού πεδίου.



----- Τροχιές Νανοσωματιδίων ————— Δυναμικές γραμμές ————— Ισοδυναμικές γραμμές

Σχήμα 4.9: Οι τροχιές τριών νανοσωματιδίων και πως επηρεάζονται από το ηλεκτρικό πεδίο

Στο σχήμα 4.9 φαίνεται η επίδραση που έχει το ηλεκτρικό πεδίο στην μεταβολή της διεύθυνσης της τροχιάς των νανοσωματιδίων.

5

Εφαρμογή τάσης

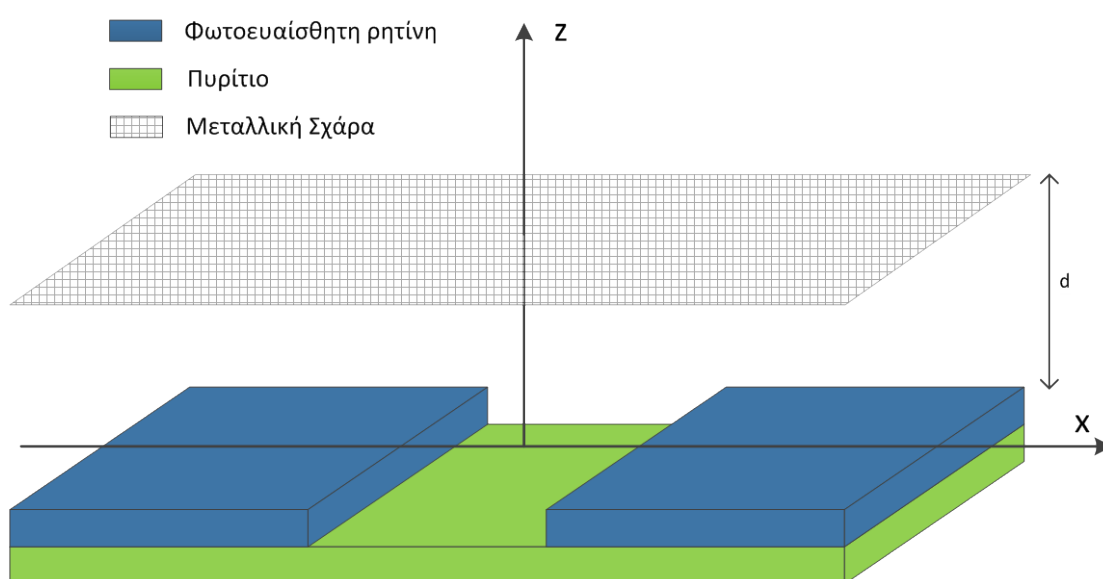
Σε αυτό το κεφάλαιο θα παρουσιάσουμε μία παραλλαγή της προσομοίωσης που περιγράφηκε στο κεφάλαιο 4. Πιο συγκεκριμένα, θα μελετήσουμε τη συμπεριφορά των σωματιδίων όταν σε αυτά εφαρμόζεται ένας επιπλέον όρος ηλεκτρικού πεδίου, ο οποίος προκαλείται από μία μεταλλική σχάρα στην οποία εφαρμόζεται υψηλή αρνητική τάση. Ακολουθώντας, αφού προσομοιώσουμε αυτή την παραλλαγή, θα δούμε πως επιδρά στο φαινόμενο της εστίασης.

5.1 Ανάλυση του προβλήματος

Για ευκολία αλλά και για να μπορούμε να συγκρίνουμε άμεσα τα αποτελέσματα με αυτά του προηγούμενου κεφαλαίου, διατηρούμε τις ίδιες παραδοχές και αρχικές συνθήκες με αυτές του προηγούμενου κεφαλαίου.

5.1.1 Υπολογισμός του πεδίου

Όπως φαίνεται και στο σχήμα 5.1, πάνω από το δείγμα, και σε απόσταση d , τοποθετείται μεταλλική σχάρα. Στη σχάρα εφαρμόζεται υψηλή αρνητική τάση V , η οποία παίρνει τιμές από -500 V μέχρι -5 kV . Όπως έχουμε αναφέρει και στα προηγούμενα κεφάλαια, το υπόστρωμα πυριτίου είναι γειωμένο, άρα ο χώρος ανάμεσα στο πυρίτιο και τη σχάρα λειτουργεί ως πυκνωτής.



Σχήμα 5.1: Απεικόνιση του δείγματος και της μεταλλικής σχάρας

Επομένως, το ηλεκτρικό πεδίο που δημιουργείται από τη σχάρα δίνεται από τους παρακάτω τύπους:

$$E_{x,σχαρας} = 0 \quad (5.1)$$

$$E_{z,σχαρας} = \frac{V}{d} \quad (5.2)$$

Παρατηρούμε ότι η μεταλλική σχάρα δεν επηρεάζει την x συνιστώσα του ηλεκτρικού πεδίου.

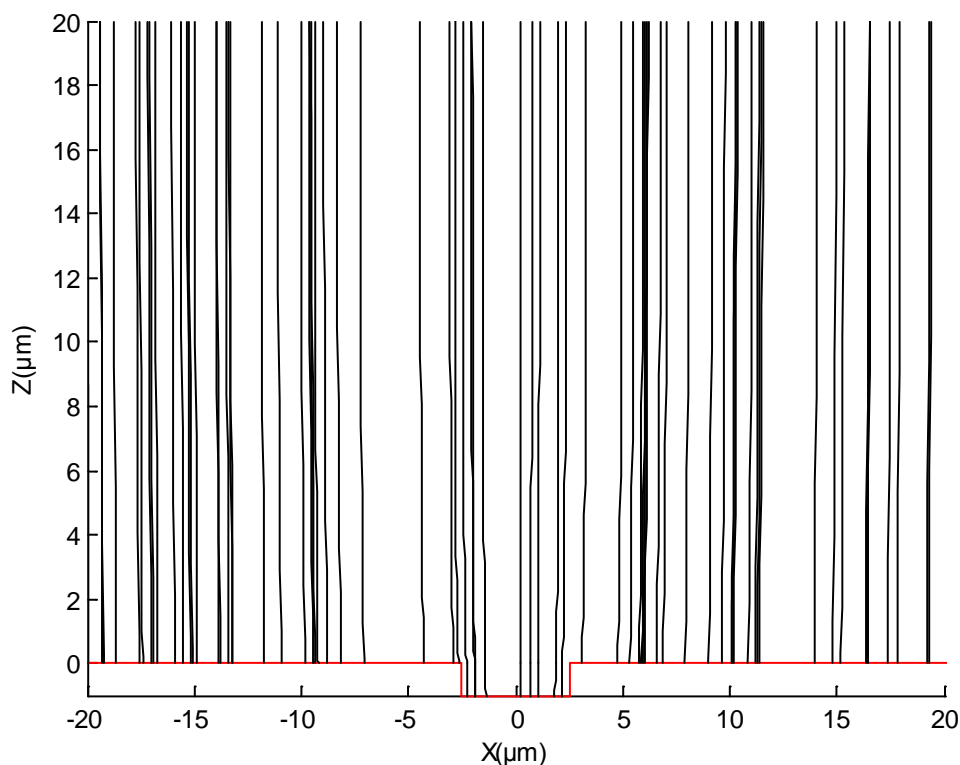
Το συνολικό πεδίο προκύπτει αν προσθέσουμε τους τύπους (5.1) και (5.2) στους όρους του ηλεκτρικού πεδίου που προκύπτουν με τη βοήθεια των τύπων (3.2) και (3.3).

Με εξαίρεση τον τύπο του ηλεκτρικού πεδίου, όλοι οι υπόλοιποι υπολογισμοί και τύποι που περιγράφηκαν στο κεφάλαιο 4 παραμένουν ίδιοι. Επίσης, η δομή του κώδικα παραμένει ίδια.

5.2 Αποτελέσματα

Στη συνέχεια θα παρουσιάσουμε τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων. Θεωρούμε ότι η σχάρα βρίσκεται σε απόσταση 0.5 cm από το υπόστρωμα και πάνω της εφαρμόζεται υψηλή αρνητική τάση.

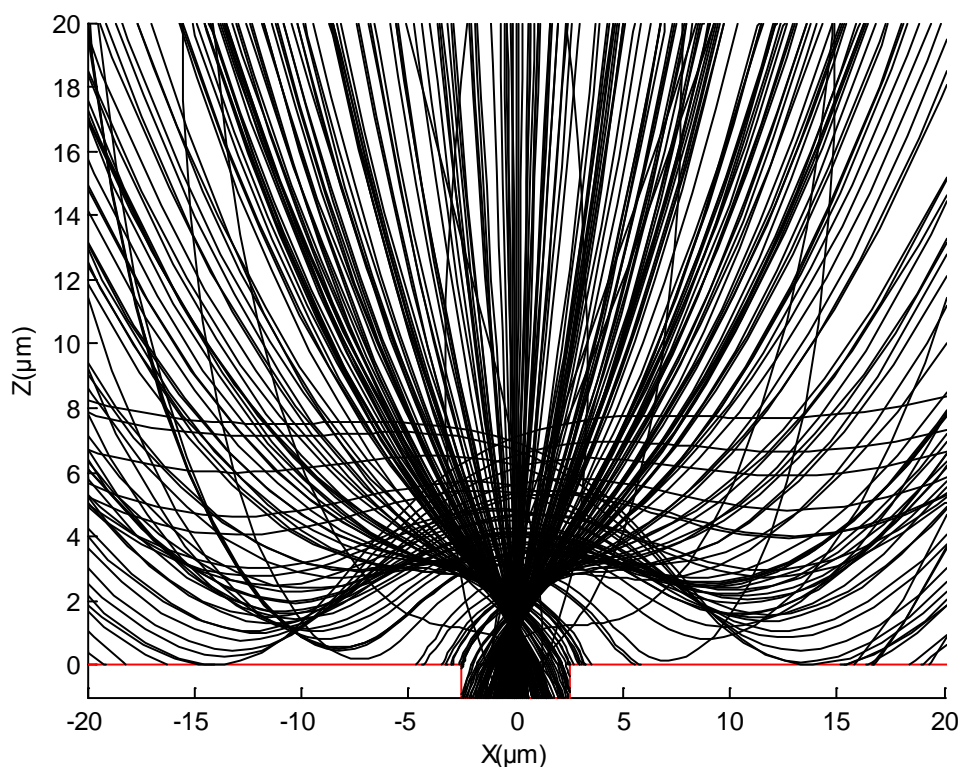
Όπως και στο προηγούμενο κεφάλαιο, αρχικά θα υπολογίσουμε τις τροχιές των σωματιδίων. Για να έχουμε μια καλύτερη εικόνα των διαφορών στις δύο περιπτώσεις, θα υπολογίσουμε τις τροχιές για τιμή πυκνότητας φορτίου ίδια με αυτήν του σχήματος 4.2 ($\sigma \sim 10^{10}\text{ σωματίδια/cm}^2$) και για τάση $V = -500\text{ V}$. Στο εν λόγω σχήμα, όπως εξηγήθηκε νωρίτερα, το φαινόμενο ήταν στη σταθερή φάση. Αντίθετα, όπως βλέπουμε στο σχήμα 5.2, οι τροχιές είναι σχεδόν ευθείες, που σημαίνει ότι το φαινόμενο είναι ακόμα στη μεταβατική φάση.



Σχήμα 5.2: Τροχιές νανοσωματιδίων σε δείγμα με λωρίδα $5\mu\text{m}$ και τάση $V = -500\text{V}$ κατά τη μεταβατική φάση ($\sigma \sim 10^{10}\text{ σωματίδια/cm}^2$)

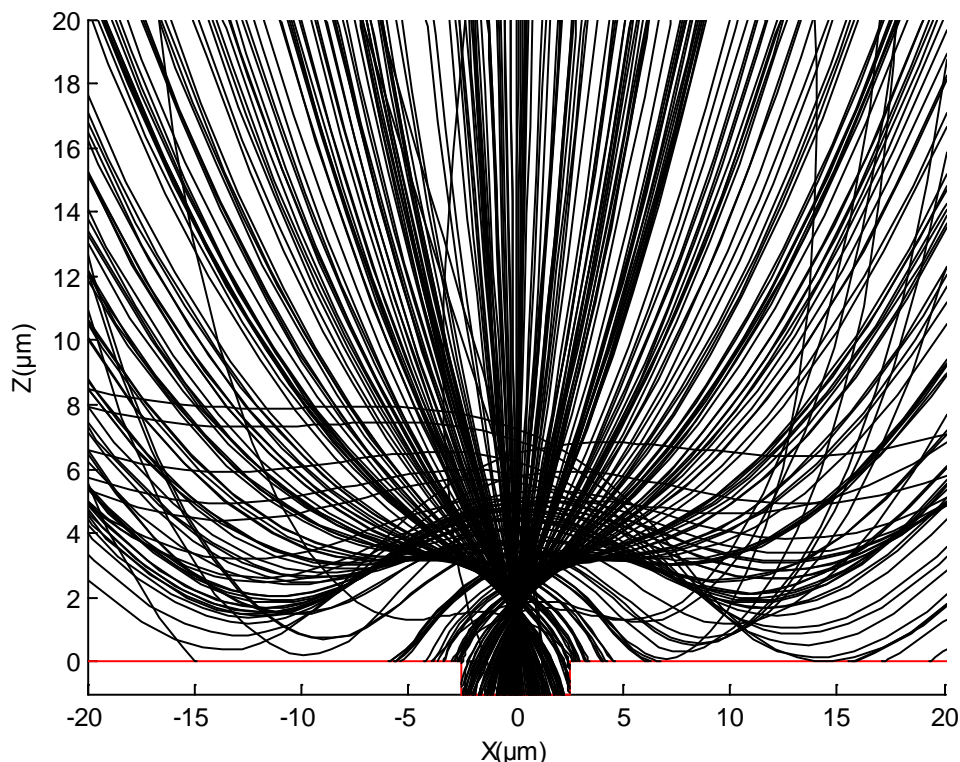
Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι ο επιπλέον όρος του ηλεκτρικού πεδίου ασκεί επιπλέον δύναμη στα σωματίδια, με αποτέλεσμα να επιταχύνονται προς το δείγμα πριν η πυκνότητα φορτίου στη ρητίνη καταφέρει να αλλάξει την κατεύθυνση της τροχιάς τους.

Για να ξεκινήσει η σταθερή φάση, θα πρέπει η πυκνότητα να αυξηθεί κατά δύο περίπου τάξεις μεγέθους ($\sigma \sim 10^{12}$ σωματίδια/cm²), όπως φαίνεται και στο σχήμα 5.3. Υπενθυμίζουμε ότι σταθερή φάση κατά την εξέλιξη του φαινομένου της εστίασης ονομάζουμε την κατάσταση κατά την οποία τα περισσότερα από τα σωματίδια πέφτουν στη λωρίδα πυριτίου, ενώ ελάχιστα καταλήγουν πάνω στη ρητίνη.



Σχήμα 5.3: Τροχιές νανοσωματιδίων σε δείγμα με λωρίδα 5μm και τάση $V = -500V$ κατά τη σταθερή φάση ($\sigma \sim 10^{12}$ σωματίδια/cm²)

Καθώς αυξάνουμε την τάση, η πυκνότητα φορτίου για τη μετάβαση στη σταθερή φάση αυξάνει επίσης. Στο σχήμα 5.4 βλέπουμε τις τροχιές για τάση $V = -2500 V$. Για να επιτύχουμε το ίδιο αποτέλεσμα με το σχήμα 5.3, αυξήσαμε την πυκνότητα κατά μία τάξη μεγέθους ($\sigma \sim 10^{13}$ σωματίδια/cm²).

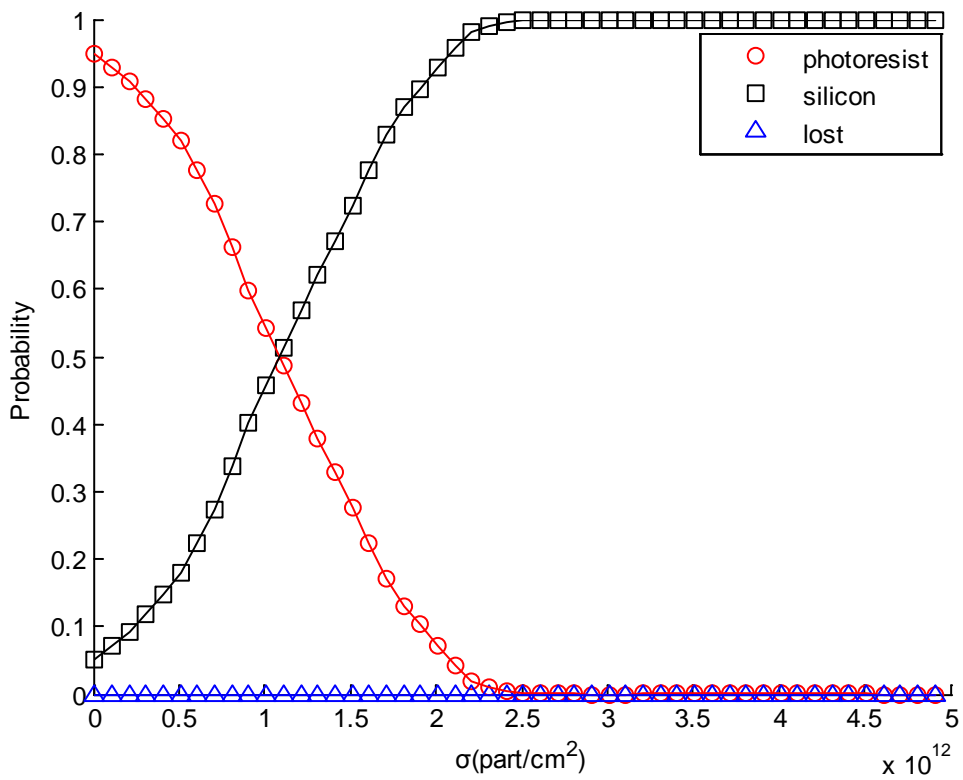


Σχήμα 5.4: Τροχιές νανοσωματιδίων σε δείγμα με λωρίδα 5μm και τάση $V = -2500V$ κατά τη σταθερή φάση ($\sigma \sim 10^{13}$ σωματίδια/cm²)

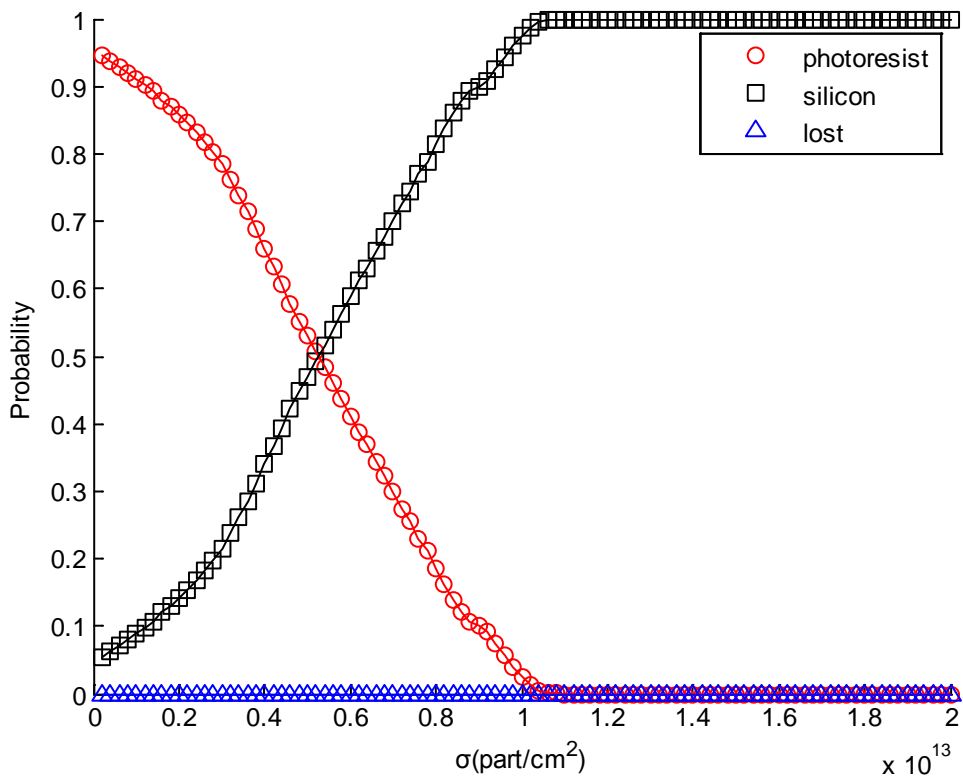
Στη συνέχεια θα υπολογίσουμε τις πιθανότητες να πέσει ένα σωματίδιο στο πυρίτιο, να πέσει στη ρητίνη ή να χαθεί, για διαφορετικές τιμές της πυκνότητας σωματιδίων πάνω στη ρητίνη. Οι διαστάσεις του δείγματος, καθώς και οι αρχικές τιμές της θέσης των σωματιδίων είναι ίδιες με το προηγούμενο κεφάλαιο.

Στα σχήματα 5.5 και 5.6 απεικονίζονται οι τιμές των πιθανοτήτων για τάση $V = -500 V$ και $V = -2500 V$, αντίστοιχα. Παρατηρούμε ότι, για λωρίδα πλάτους 5μm, η πιθανότητα να χαθεί ένα σωματίδιο για υψηλές τιμές της τάσης είναι μηδενική, για κάθε τιμή της πυκνότητας. Αυτό συμβαίνει λόγω του επιπλέον όρου δύναμης που δέχονται τα σωματίδια, ο οποίος τα κατευθύνει προς το υπόστρωμα.

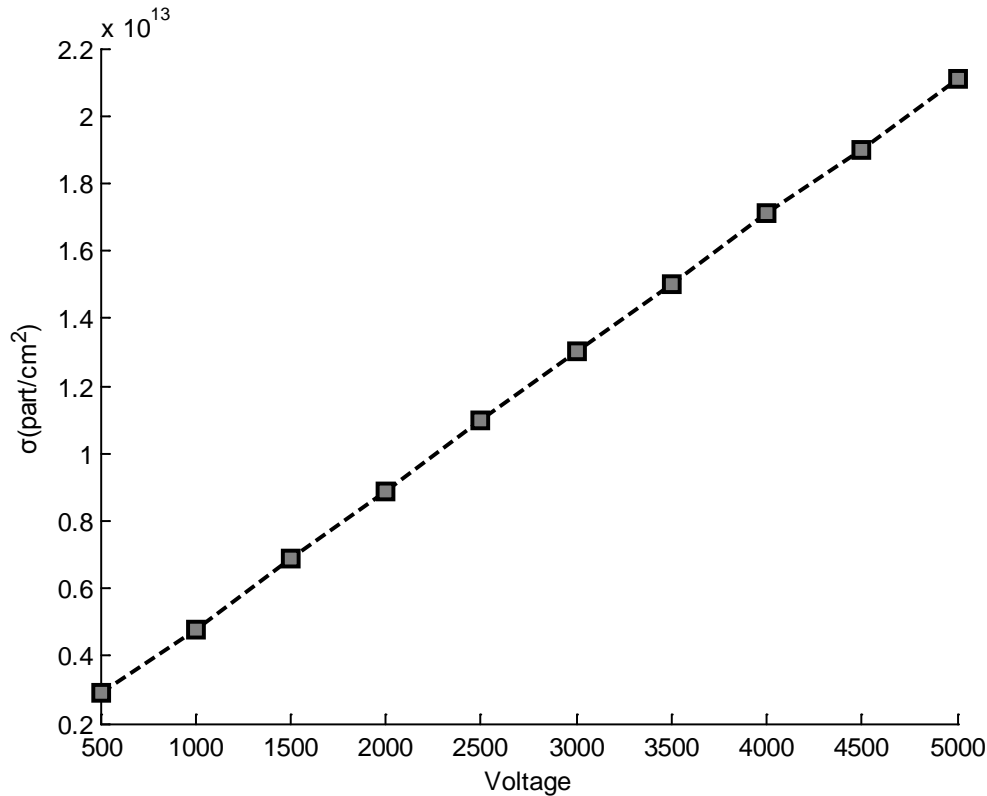
Μια δεύτερη παρατήρηση είναι ότι η μορφή των γραφικών παραστάσεων των πιθανοτήτων δεν αλλάζει με την αύξηση της τάσης. Για το λόγο αυτό, ιδιαίτερο ενδιαφέρον έχει να υπολογίσουμε σε ποια τιμή της πυκνότητας φορτίου η πιθανότητα να πέσει ένα σωματίδιο στο πυρίτιο γίνεται ίση με τη μονάδα, για διαφορετικές τιμές της τάσης. Την πληροφορία αυτή μας τη δίνει το σχήμα 5.7.



Σχήμα 5.5: Η πιθανότητα να πέσει ένα σωματίδιο στο πυρίτιο, να πέσει στη ρητίνη ή να χαθεί, για διαφορετικές τιμές της πυκνότητας, σε δείγμα με λωρίδα $5\mu\text{m}$ και τάση ίση με $V = -500\text{V}$.



Σχήμα 5.6: Η πιθανότητα να πέσει ένα σωματίδιο στο πυρίτιο, να πέσει στη ρητίνη ή να χαθεί, για διαφορετικές τιμές της πυκνότητας, σε δείγμα με λωρίδα $5\mu\text{m}$ και τάση ίση με $V = -2500\text{V}$.

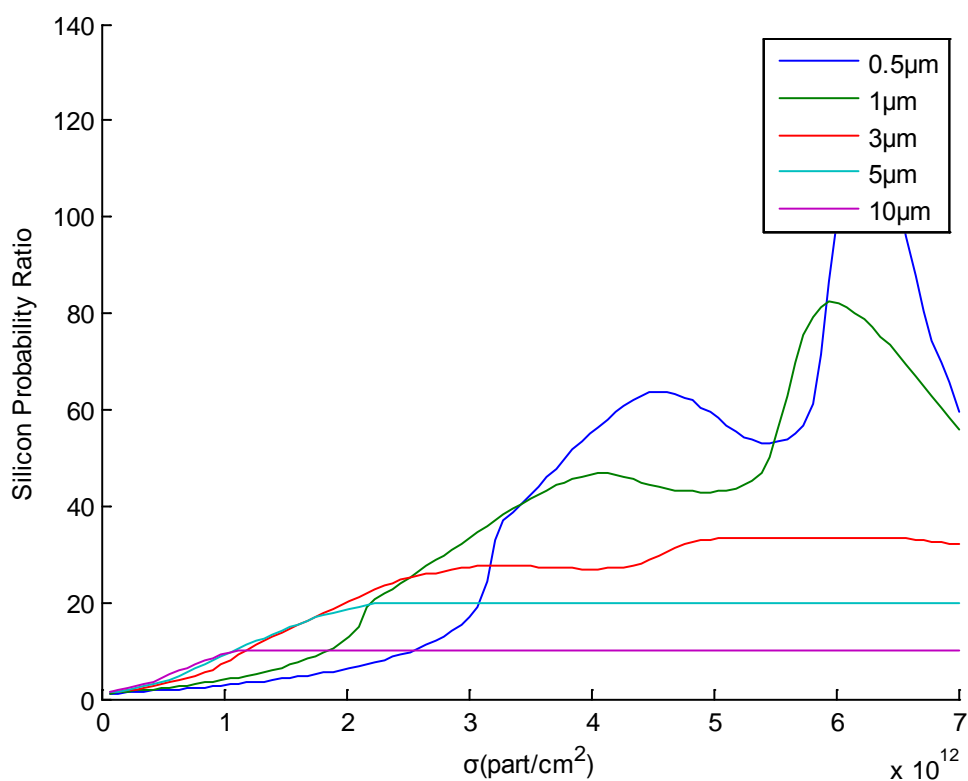


Σχήμα 5.7: Η πυκνότητα φορτίου στην οποία η πιθανότητα να πέσει ένα σωματίδιο στο πυρίτιο γίνεται ίση με τη μονάδα, συναρτήσει της τάσης.

Στη συνέχεια θα υπολογίσουμε το λόγο πιθανοτήτων για διαφορετικές τιμές του πλάτους της λωρίδας πυριτίου. Στο σχήμα 5.8 απεικονίζονται οι λόγοι πιθανοτήτων, συναρτήσει της πυκνότητας, για λωρίδες πλάτους 0.5 μm , 1 μm , 3 μm , 5 μm και 10 μm . Υπενθυμίζουμε ότι ο λόγος πιθανοτήτων ορίζεται ως ο λόγος της πιθανότητας που υπολογίζουμε από την προσομοίωση προς τη θεωρητική πιθανότητα (χωρίς εστίαση).

Παρατηρούμε ότι, για μικρές τιμές της πυκνότητας, ο λόγος πιθανοτήτων είναι μεγαλύτερος για μεγαλύτερα πλάτη λωρίδας. Αυτό οφείλεται στον επιπλέον όρο επιτάχυνσης που προκαλεί στα σωματίδια η τάση της σχάρας, ο οποίος φαίνεται να «αναιρεί» το φαινόμενο της εστίασης.

Όσο η πυκνότητα αυξάνει, το φαινόμενο της εστίασης αρχίζει να γίνεται πιο έντονο, οπότε παρατηρείται μεγαλύτερος λόγος πιθανοτήτων για μικρότερα πλάτη λωρίδας.



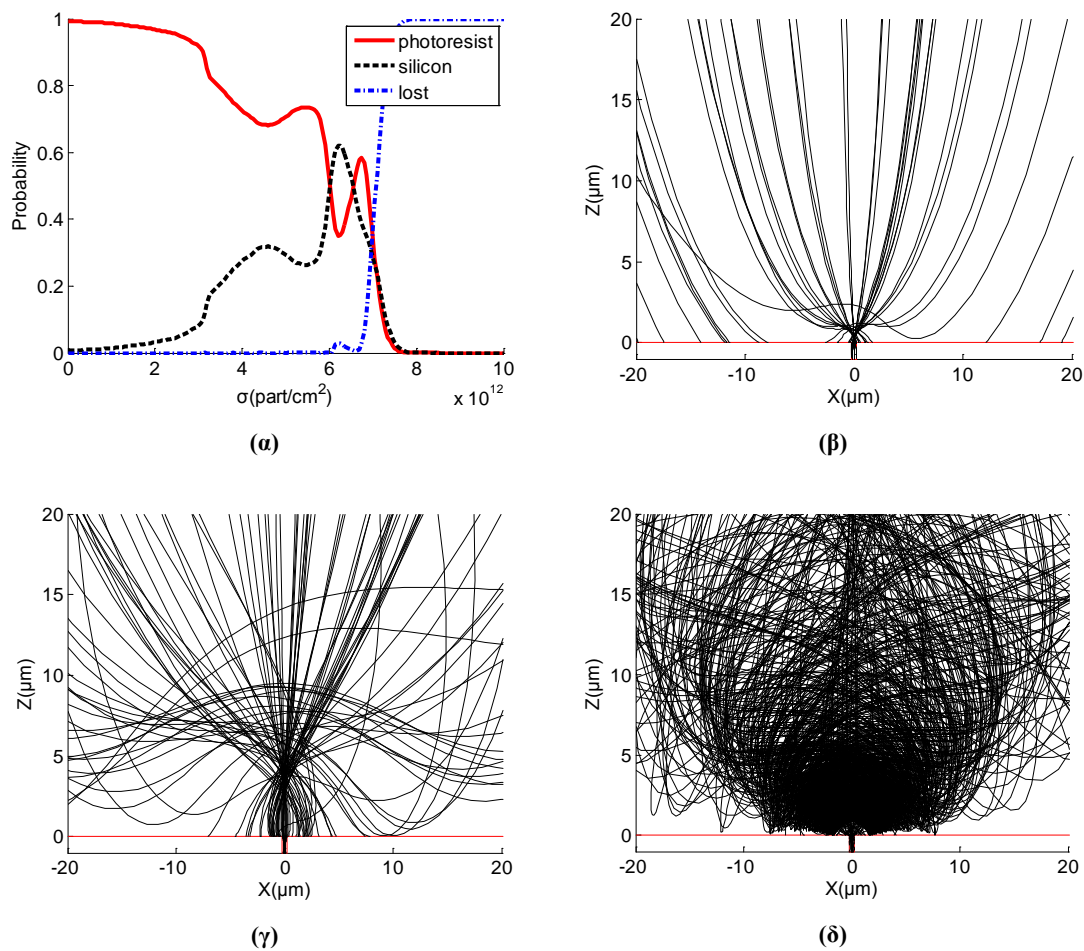
Σχήμα 5.8: Ο λόγος πιθανότητας για διαφορετικά πλάτη λωρίδας συναρτήσει της πυκνότητας στη ρητίνη, για τάση ίση με $V = -500V$

Στο σχήμα 5.8 παρατηρούμε επίσης μια διακύμανση του λόγου πιθανοτήτων, η οποία γίνεται πιο έντονη στα μικρότερα πλάτη λωρίδας. Αυτή τη συμπεριφορά θα προσπαθήσουμε να εξηγήσουμε με τη βοήθεια του σχήματος 5.9. Μιας και το φαινόμενο είναι πιο έντονο σε μικρά πλάτη λωρίδας, στο σχήμα 5.9α υπολογίζουμε, για λωρίδα πλάτους $0.5 \mu m$, την πιθανότητα ένα σωματίδιο να πέσει στη ρητίνη, στη λωρίδα πυριτίου, ή να χαθεί. Παρατηρούμε ότι η μείωση του λόγου πιθανοτήτων οφείλεται στο γεγονός ότι περισσότερα σωματίδια καταλήγουν πάνω στη ρητίνη.

Για να αποκτήσουμε καλύτερη εικόνα του τι ακριβώς συμβαίνει, υπολογίζουμε τις τροχιές των σωματιδίων για τρία σημεία της καμπύλης που αντιστοιχεί στην πιθανότητα να πέσει το σωματίδιο στη λωρίδα πυριτίου. Στο σχήμα 5.9β υπολογίζουμε τις τροχιές για το πρώτο τοπικό μέγιστο, δηλαδή για $\sigma = 4.5 \cdot 10^{12} \text{ σωματίδια/cm}^2$, όπου παρατηρείται το φαινόμενο της εστίασης, το οποίο όμως δεν είναι πολύ έντονο.

Καθώς η πυκνότητα φορτίου αυξάνει, όλο και περισσότερα σωματίδια ωθούνται προς τη λωρίδα. Επειδή η λωρίδα είναι αρκετά λεπτή και η πυκνότητα δεν είναι αρκετά μεγάλη, κάποια από αυτά περνάνε πάνω από τη λωρίδα και καταλήγουν πάνω στη ρητίνη στην άλλη μεριά του δείγματος. Η συμπεριφορά αυτή απεικονίζεται στο σχήμα 5.9γ, που αντιστοιχεί στο τοπικό ελάχιστο ($\sigma = 5.5 \cdot 10^{12}$ σωματίδια/ cm^2) και εξηγεί για ποιο λόγο έχουμε απότομη αύξηση των σωματιδίων στη ρητίνη.

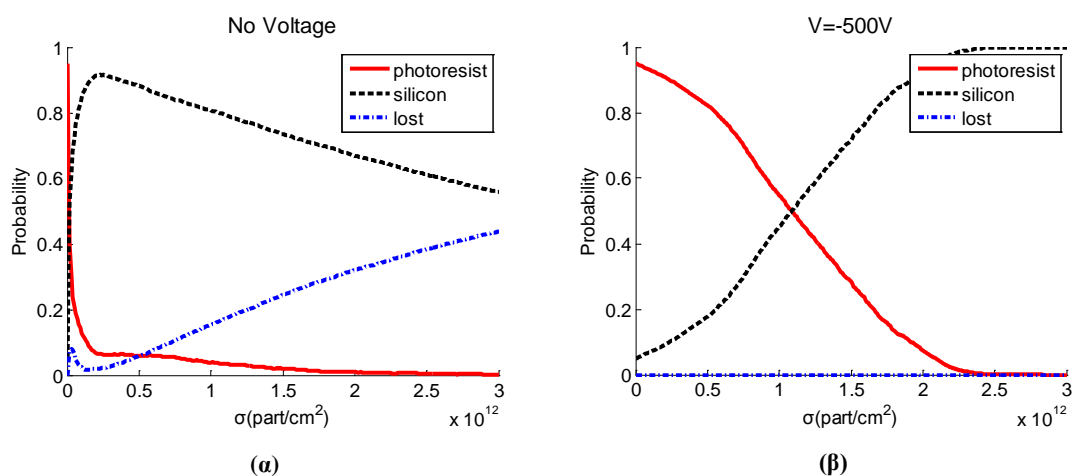
Το σχήμα 5.9δ απεικονίζει τις τροχιές στο μέγιστο ($\sigma = 6.25 \cdot 10^{12}$ σωματίδια/ cm^2) της καμπύλης πιθανότητας για τη λωρίδα πυριτίου. Σε αυτό το σχήμα παρατηρούμε ότι ακόμα και αν ένα σωματίδιο περάσει πάνω από τη λωρίδα πυριτίου, η πυκνότητα φορτίου στην άλλη πλευρά του δείγματος είναι τόσο μεγάλη, που το απωθεί και το στέλνει πάλι προς τη λωρίδα.



Σχήμα 5.9: Σε δείγμα με λωρίδα $0.5 \mu m$ και τάση ίση με $V = -500V$ α) η πιθανότητα να πέσει ένα σωματίδιο στο πυρίτιο, να πέσει στη ρητίνη ή να χαθεί, συναρτήσει της πυκνότητας, β) οι τροχιές των σωματιδίων για πυκνότητα $\sigma = 4.5 \cdot 10^{12}$ σωματίδια/ cm^2 , γ) για πυκνότητα $\sigma = 5.5 \cdot 10^{12}$ σωματίδια/ cm^2 και δ) πυκνότητα $\sigma = 6.25 \cdot 10^{12}$ σωματίδια/ cm^2

Σημειώνεται ότι και στα τρία σχήματα (5.9β, γ και δ) ο αριθμός σωματιδίων είναι ίδιος. Ο λόγος που στο σχήμα 8δ οι τροχιές φαίνονται πιο πυκνές είναι γιατί τα σωματίδια περνάνε πολλές φορές πάνω από τη λωρίδα πριν καταλήξουν σε αυτή.

Τέλος, στο σχήμα 5.10 γίνεται μια σύγκριση ανάμεσα στην προσομοίωση χωρίς τάση (σχήμα 5.10α) και στην προσομοίωση με τάση (σχήμα 5.10β). Στις δύο γραφικές παραστάσεις απεικονίζονται οι πιθανότητες να πέσει ένα σωματίδιο στη λωρίδα πυριτίου, στη ρητίνη ή να χαθεί ως συνάρτηση της πυκνότητας, για λωρίδα πλάτους $5\ \mu\text{m}$. Τα δύο διαγράμματα υπολογίστηκαν για τιμές της πυκνότητας τέτοιες, μέχρι να μηδενιστεί η πιθανότητα να πέσει ένα σωματίδιο στη ρητίνη στην πρώτη περίπτωση.



Σχήμα 5.10: Η πιθανότητα να πέσει ένα σωματίδιο στο πυρίτιο, να πέσει στη ρητίνη ή να χαθεί, για διαφορετικές τιμές της πυκνότητας, σε δείγμα με λωρίδα $5\ \mu\text{m}$, (α) χωρίς τάση και (β) με τάση ίση με $V = -500\text{V}$.

Σημειώνεται ότι, παρότι η πρώτη περίπτωση φαίνεται να παρουσιάζει καλύτερα αποτελέσματα, οι συγκεντρώσεις στις δύο περιπτώσεις δεν αυξάνονται με τον ίδιο ρυθμό, άρα δεν μπορούμε να βγάλουμε απόλυτα συμπεράσματα ως προς τη σύγκρισή τους.

6

Υπολογισμός της θερμοκρασίας

Στα προηγούμενα κεφάλαια, αναλύθηκε εκτενώς ο τρόπος με τον οποίο το συνολικό ηλεκτρικό πεδίο μεταβάλλει τις τροχιές των σωματιδίων. Στη συνέχεια, θα μελετήσουμε με ποιον τρόπο η κινητική ενέργεια των σωματιδίων μεταβάλλει τη θερμοκρασία της επιφάνειας του δείγματος.

6.1 Η σημασία της θερμοκρασίας κατά την εναπόθεση

Προτού να αναλύσουμε την μέθοδο με την οποία έγινε ο υπολογισμός της θερμοκρασίας, ας δούμε γιατί η θερμοκρασία είναι σημαντική κατά την εναπόθεση. Ο πρώτος λόγος για τον οποίο μας ενδιαφέρει η θερμοκρασία, είναι ότι η αύξηση της θερμοκρασίας προκαλεί συσσωμάτωση των αρχικών νανοσωματιδίων, γεγονός που οδηγεί σε σχηματισμό νανοσωματιδίων μεγαλύτερου μεγέθους [10].

Οι μεγάλες θερμοκρασίες έχουν επίδραση και στη ρητίνη, αφού προκαλούν παραμόρφωση στις δομές της ρητίνης. Η θερμοκρασία πάνω από την οποία έχουμε καταστροφή της ρητίνης είναι άμεσα συνδεδεμένη με τη θερμοκρασία υαλώδους

μετάβασης (glass transition temperature), η οποία αποτελεί μέτρο της θερμικής σταθερότητας της ρητίνης. Η θερμική σταθερότητα της ρητίνης εξαρτάται από το είδος της ρητίνης, την πυκνότητα του εναπομένοντος διαλύτη και τις συνθήκες ψησίματος. Σημειώνεται ότι η σκλήρυνση της ρητίνης μπορεί να επιτευχθεί με την έκθεση σε υψηλής έντασης βαθιά υπεριώδη (deep-UV) ακτινοβολία, με επεξεργασία πλάσματος και με βομβαρδισμό δέσμης ηλεκτρονίων [11].

6.2 Ανάλυση του προβλήματος

Στόχος μας είναι να υπολογίσουμε τη θερμοκρασία σε κάθε σημείο της επιφάνειας του δείγματος, η οποία περιλαμβάνει:

- Την πάνω πλευρά της ρητίνης, η οποία περιλαμβάνει την περιοχή όπου $z = 0$ και $-\frac{W}{2} < x < -\frac{L}{2}$ και την περιοχή όπου $z = 0$ και $\frac{L}{2} < x < \frac{W}{2}$.
- Την επιφάνεια του πυριτίου εντός των ορίων της λωρίδας, όπου $z = -h$ και $-\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2}$.
- Τα πλαϊνά τοιχώματα της ρητίνης, όπου $x = -\frac{L}{2}$, $-h < z < 0$ και $x = \frac{L}{2}$, $-h < z < 0$.

Κάθε σωματίδιο που φτάνει στην επιφάνεια του δείγματος, έχει κινητική ενέργεια, η οποία κάθε στιγμή δίνεται από τον τύπο:

$$K = \frac{1}{2} m u^2 \quad (6.1)$$

όπου m είναι η μάζα του σωματιδίου και u η ταχύτητά του. Επειδή θεωρούμε ότι ο χώρος πάνω από την επιφάνεια του δείγματος είναι κενός, καθώς και ότι τα σωματίδια δεν αλληλεπιδρούν μεταξύ τους, ώστε να μεταφέρεται ενέργεια από το ένα στο άλλο, όλη αυτή η ενέργεια θα μετατραπεί σε θερμότητα μόλις το σωματίδιο φτάσει στην επιφάνεια του δείγματος. Η θερμότητα συνδέεται με τη θερμοκρασία μέσω του τύπου:

$$Q = M \cdot C \cdot \Delta T \quad (6.2)$$

όπου Q είναι η συνολική θερμότητα, M η συνολική μάζα στην οποία μεταφέρεται η θερμότητα, C η ειδική θερμοχωρητικότητα και ΔT η διαφορά θερμοκρασίας.

Στην συγκεκριμένη εργασία κάναμε την παραδοχή ότι κάθε σωματίδιο που πέφτει πάνω στην επιφάνεια του δείγματος μεταφέρει την ενέργεια μόνο στα σωματίδια που έχουν πέσει στο ίδιο σημείο πριν από αυτό. Επομένως, στον τύπο (6.2) δεν λαμβάνουμε υπ' όψιν τη μάζα του πυριτίου ή της ρητίνης.

6.2.1 Υπολογισμός της μάζας

Όπως εξηγήθηκε προηγουμένως, κάθε σωματίδιο που πέφτει πάνω στην επιφάνεια του δείγματος, μεταφέρει την ενέργειά του, με τη μορφή θερμότητας, στη συνολική μάζα των σωματιδίων που έχουν πέσει στο ίδιο σημείο πριν από αυτό. Άρα, θα πρέπει κάθε στιγμή να έχουμε αποθηκευμένη τη συνολική μάζα που υπάρχει σε κάθε σημείο της επιφάνειας. Αν θεωρήσουμε K σημεία πάνω στην επιφάνεια του δείγματος (τα οποία ισαπέχουν), μπορούμε να ορίσουμε έναν πίνακα M , μεγέθους $1 \times K$, στον οποίο θα αποθηκεύουμε τις επιμέρους μάζες. Έτσι, το στοιχείο $M(k)$ θα περιέχει τη συνολική μάζα η οποία υπάρχει στο k -στο σημείο της επιφάνειας. Προφανώς, όσο μεγαλύτερο είναι το K που θα επιλέξουμε, τόσο μεγαλύτερη ακρίβεια θα έχουμε στον υπολογισμό της θερμοκρασίας.

Αρχικά, ο πίνακας M έχει όλα του τα στοιχεία μηδενικά. Κάθε φορά που ένα σωματίδιο πέφτει πάνω στην επιφάνεια του δείγματος, υπολογίζουμε το σημείο k της επιφάνειας το οποίο είναι πιο κοντά στο σημείο που έπεσε το σωματίδιο και προσθέτουμε τη μάζα του σωματιδίου στο στοιχείο $M(k)$ του πίνακα M . Επομένως, τη χρονική στιγμή που θα πέσει στην επιφάνεια του δείγματος το σωματίδιο n , ενημερώνουμε τα στοιχεία του πίνακα M ως εξής:

$$M(i, n) = \begin{cases} M(i, n - 1) + m_n, & \text{για } i = k \\ M(i, n - 1), & \text{για κάθε } i \neq k \end{cases} \quad (6.3)$$

όπου m_n είναι η μάζα του n -στού σωματιδίου, $M(i, n - 1)$ είναι η μάζα του σημείου i τη χρονική στιγμή που έχει πέσει το σωματίδιο $n - 1$ και $M(i, n)$ η μάζα του

σημείου i τη χρονική στιγμή που έχει πέσει το σωματίδιο n . Ισχύει, επίσης, ότι $M(i, 0) = 0$ για κάθε i .

6.2.2 Υπολογισμός της θερμοκρασίας

Με την ίδια λογική που χρησιμοποιήσαμε και στην προηγούμενη παράγραφο, ορίζουμε έναν πίνακα ΔT , μεγέθους $1 \times K$, στον οποίο θα αποθηκεύουμε την θερμοκρασία κάθε σημείου της επιφάνειας του δείγματος.

Προηγουμένως, κάναμε την παραδοχή ότι όλη η κινητική ενέργεια του σωματιδίου μετατρέπεται σε θερμότητα. Άρα, από τους τύπους (6.1) και (6.2) έχουμε ότι:

$$\frac{1}{2} m u^2 = M \cdot C \cdot \Delta T \Rightarrow \Delta T = \frac{m u^2}{2 M C}$$

Επομένως, τα στοιχεία του πίνακα ΔT ενημερώνονται ως εξής:

$$\Delta T(i, n) = \begin{cases} \Delta T(i, n - 1) + \frac{m_n(u_x^2 + u_z^2)}{2M(i, n)C}, & \text{για } i = k \\ \Delta T(i, n - 1), & \text{για κάθε } i \neq k \end{cases} \quad (6.4)$$

Όπου k είναι το σημείο που είναι πιο κοντά στο σημείο που έπεσε το σωματίδιο, m_n είναι η μάζα του n -στού σωματιδίου, $M(i, n)$ είναι η μάζα του σημείου i τη χρονική στιγμή που έχει πέσει το σωματίδιο n , $\Delta T(i, n - 1)$ η διαφορά θερμοκρασίας (σε σχέση με την αρχική θερμοκρασία) του σημείου i τη χρονική στιγμή που έχει πέσει το σωματίδιο $n - 1$ και $\Delta T(i, n)$ η διαφορά θερμοκρασίας του σημείου i τη χρονική στιγμή που έχει πέσει το σωματίδιο n . Αρχικά, θεωρούμε ότι τα στοιχεία του πίνακα είναι μηδενικά, άρα $\Delta T(i, 0) = 0$ για κάθε i .

6.2.3 Περιγραφή του κώδικα

Στη συνέχεια δίνεται το πρόγραμμα που χρησιμοποιήθηκε σε μορφή ψευδοκώδικα.

Αρχικοποίηση των μεταβλητών που περιέχουν τον αριθμό σωματιδίων, τις διαστάσεις του δείγματος και την πυκνότητα του φορτίου πάνω στη ρητίνη

Υπολογισμός των αρχικών θέσεων και ταχυτήτων των σωματιδίων

Υπολογισμός των μαζών των σωματιδίων

while (Ο αριθμός σωματιδίου είναι μικρότερος από τον αριθμό σωματιδίων)

Υπολόγισε την τροχιά μέχρι την ευθεία $z=0$ ή μέχρι το σωματίδιο να φύγει εκτός των ορίων του δείγματος

Αποθήκευσε την τροχιά

if (το σωματίδιο πέρασε την ευθεία $z=0$ και είναι εντός των ορίων της λωρίδας πυριτίου)

Κάνε νέο υπολογισμό τροχιάς με αρχικές συνθήκες τις τελικές τιμές την προηγούμενης τροχιάς για όσο το σωματίδιο βρίσκεται εντός των ορίων της λωρίδας

Αποθήκευσε τη νέα τροχιά

end

Ενημέρωσε τα στοιχεία του πίνακα M

Υπολόγισε την ταχύτητα του σωματιδίου στην τελική του θέση

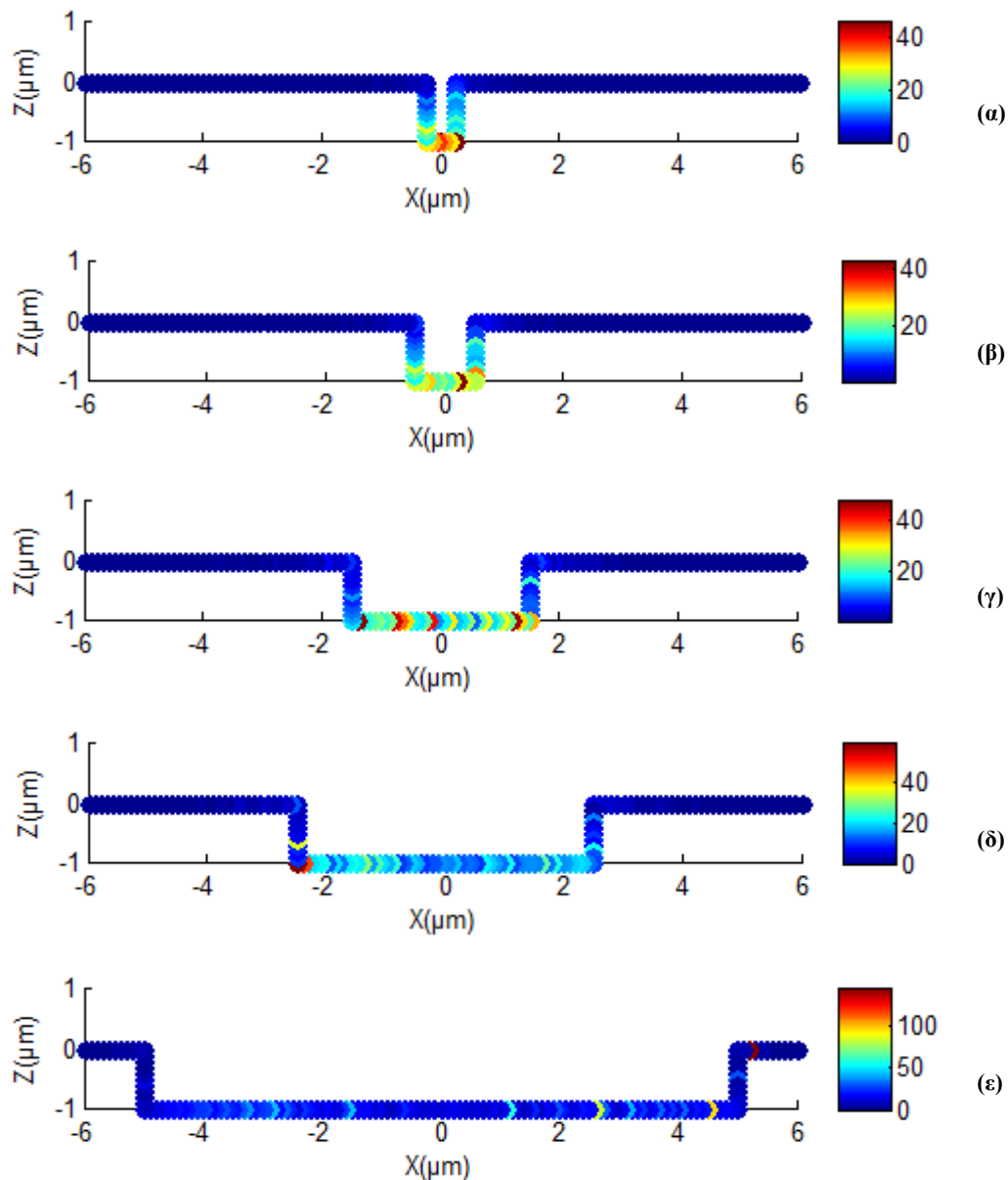
Ενημέρωσε τα στοιχεία του πίνακα ΔT

end

Τύπωσε το αποτέλεσμα

6.3 Αποτελέσματα

Σε αυτή την παράγραφο θα παρουσιάσουμε τις μετρήσεις της θερμοκρασίας, οι οποίες υπολογίστηκαν με τη βοήθεια των προσομοιώσεων. Αρχικά, στο σχήμα 6.1 απεικονίζεται η διαφορά θερμοκρασίας για δείγματα χωρίς τάση και για διαφορετικά πλάτη λωρίδας.

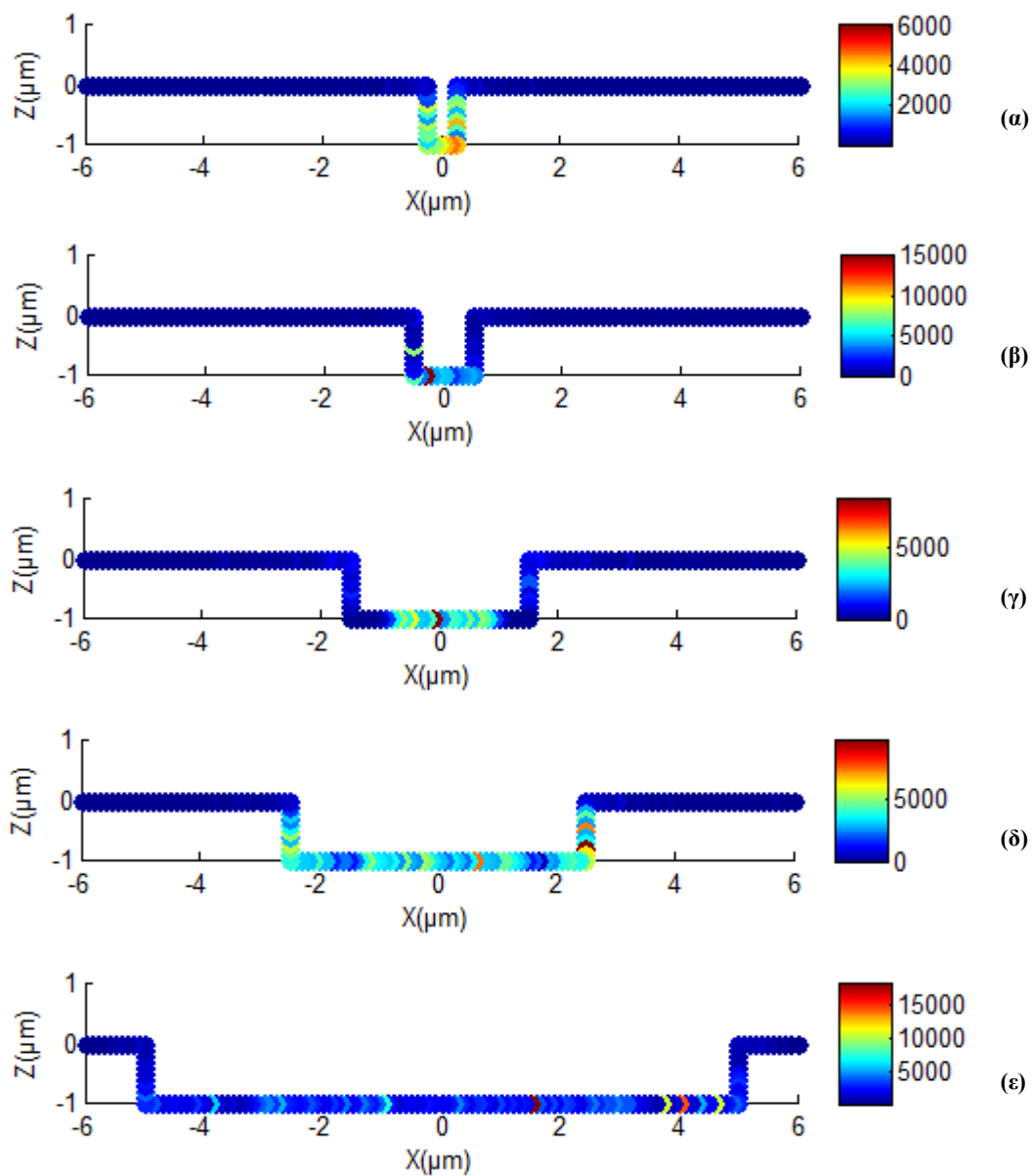


Σχήμα 6.1: Διαφορά θερμοκρασίας σε δείγμα χωρίς τάση για λωρίδα πυριτίου πλάτους α) $0.5\mu m$ β) $1\mu m$ γ) $3\mu m$ δ) $5\mu m$ ε) $10\mu m$

Σημειώνεται ότι και στις πέντε περιπτώσεις του σχήματος 6.1 η πυκνότητα φορτίου ήταν η ίδια. Η τιμή της πυκνότητας, $\sigma = 2 \cdot 10^{10}$ σωματίδια/cm², επιλέχθηκε να είναι τέτοια, ώστε το φαινόμενο της αυτο-εστίασης να είναι στη σταθερή του φάση. Εξαιτίας αυτού, τα περισσότερα σωματίδια καταλήγουν μέσα στη λωρίδα πυριτίου, και γι' αυτό παρατηρούμε ότι πάνω στη ρητίνη η διαφορά θερμοκρασίας είναι σχεδόν μηδενική, ενώ μέσα στη λωρίδα υπάρχουν σημεία τα οποία φτάνουν μέχρι και τους 50 βαθμούς διαφορά. Ακόμα, παρατηρούμε ότι στα μικρότερα πλάτη λωρίδας έχουμε μεγαλύτερες διαφορές θερμοκρασίας. Αυτό είναι

αναμενόμενο, αφού στο προηγούμενο κεφάλαιο δείξαμε ότι όσο μικρότερο πλάτος έχει η λωρίδα πυριτίου, τόσο μεγαλύτερος είναι ο λόγος πιθανοτήτων.

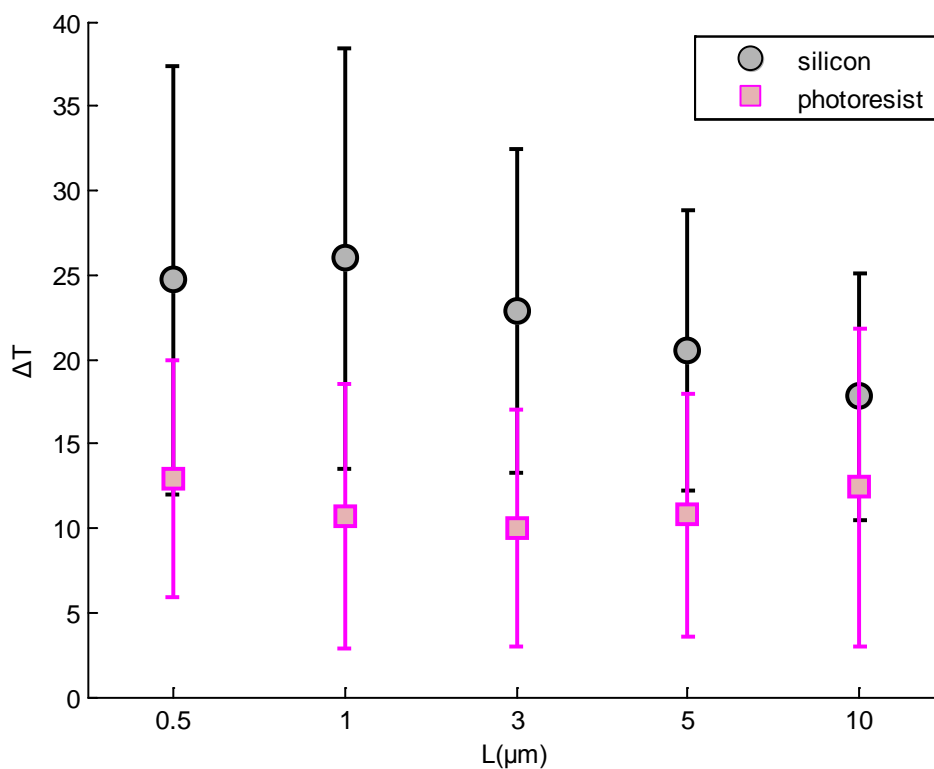
Στο σχήμα 6.2 απεικονίζεται η διαφορά θερμοκρασίας για δείγμα με τάση $V = -500\text{ V}$, για διαφορετικά πλάτη λωρίδας. Η πυκνότητα φορτίου στη ρητίνη που επιλέχθηκε είναι $\sigma = 4 \cdot 10^{12}\text{ σωματίδια}/\text{cm}^2$, για τους ίδιους λόγους με προηγουμένως.



Σχήμα 6.2: Διαφορά θερμοκρασίας σε δείγμα με τάση $V = -500\text{ V}$ για λωρίδα πυριτίου πλάτους α) $0.5\mu\text{m}$ β) $1\mu\text{m}$ γ) $3\mu\text{m}$ δ) $5\mu\text{m}$ ε) $10\mu\text{m}$

Παρατηρούμε και πάλι, ότι πάνω στη ρητίνη η διαφορά θερμοκρασίας είναι σχεδόν μηδενική. Μέσα στη λωρίδα η διαφορά θερμοκρασίας είναι μεγάλη, ενώ είναι δύο τάξεις μεγέθους μεγαλύτερη σε σχέση με την περίπτωση χωρίς τάση. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι η θερμοκρασία είναι ανάλογη με το τετράγωνο της ταχύτητας με την οποία φτάνουν τα σωματίδια στην επιφάνεια του δείγματος, η οποία είναι μεγαλύτερη λόγω της δύναμης που ασκεί το ηλεκτρικό πεδίο της σχάρας στα σωματίδια.

Στη συνέχεια θα υπολογίσουμε την μέση τιμή και την τυπική απόκλιση της θερμοκρασίας στο πυρίτιο και στα τοιχώματα της ρητίνης. Τα αποτελέσματα για προσομοίωση χωρίς τάση φαίνονται στο σχήμα 6.3.



Σχήμα 6.3: Μέση τιμή και τυπική απόκλιση της θερμοκρασίας για όλα τα σημεία πάνω στο πυρίτιο και τα τοιχώματα της ρητίνης, σε δείγμα χωρίς τάση, για διαφορετικά πλάτη λωρίδας

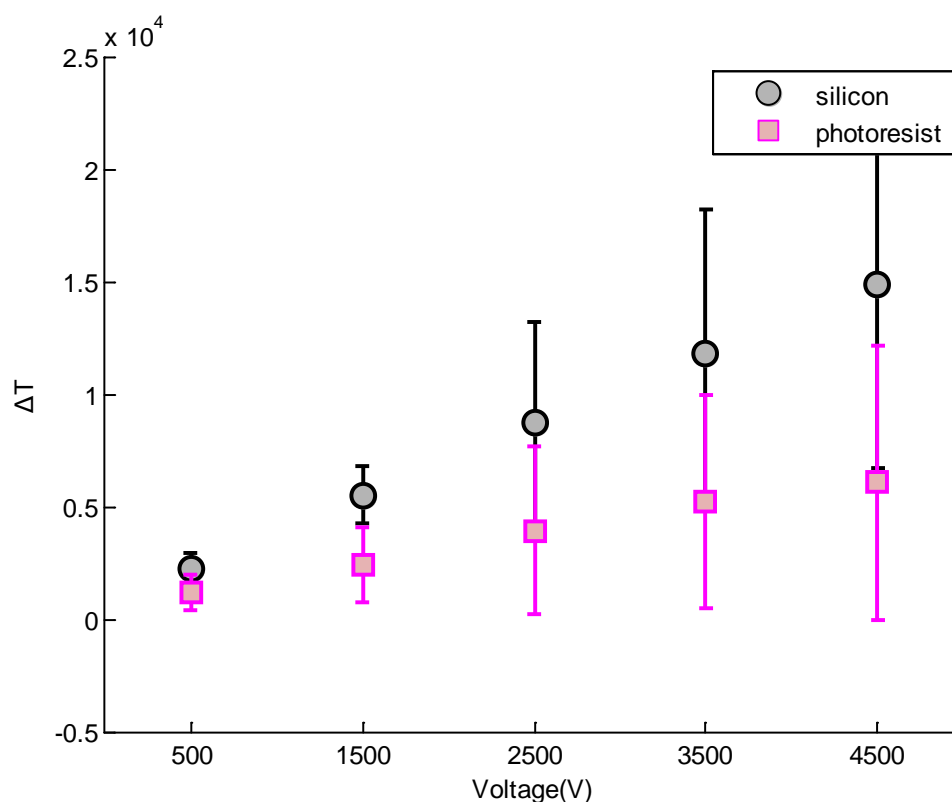
Επειδή οι αρχικές θέσεις και οι μάζες των σωματιδίων είναι διαφορετικές κάθε φορά που τρέχουμε τον κώδικα της προσομοίωσης, θα έχουμε διαφορετικά αποτελέσματα κάθε φορά. Για το λόγο αυτό, για να έχουμε μικρότερο σφάλμα στα

αποτελέσματα του σχήματος 6.3, τρέξαμε τον κώδικα 100 φορές για κάθε πλάτος λωρίδας και υπολογίσαμε τη μέση τιμή των αποτελεσμάτων.

Στο σχήμα 6.3 παρατηρούμε αρκετά πράγματα άξια σχολιασμού. Η πρώτη παρατήρηση είναι ότι σε όλα τα πλάτη λωρίδας, η μέση θερμοκρασία του πυριτίου είναι μεγαλύτερη από τη μέση θερμοκρασία της ρητίνης. Αυτό οφείλεται στην εστίαση, η οποία στέλνει μεγαλύτερο ποσοστό σωματιδίων πάνω στη λωρίδα πυριτίου σε σχέση με τα τοιχώματα της ρητίνης. Παρατηρούμε, επίσης, ότι η μέση θερμοκρασία του πυριτίου είναι μεγαλύτερη για τα πλάτη λωρίδας στα οποία το φαινόμενο της εστίασης δουλεύει καλύτερα. Αυτό είναι αναμενόμενο, γιατί όσο περισσότερα σωματίδια πέφτουν πάνω στο πυρίτιο, τόσο περισσότερη ενέργεια μεταφέρεται σε αυτό, άρα αναμένεται μεγαλύτερη μέση θερμοκρασία. Για τον ίδιο λόγο, η μέση θερμοκρασία στα τοιχώματα της ρητίνης είναι μικρότερη για τα πλάτη λωρίδας στα οποία το φαινόμενο της εστίασης δουλεύει καλύτερα.

Ακολούθως, θα παρουσιάσουμε τα αποτελέσματα της θερμοκρασίας για την περίπτωση των προσομοιώσεων με τάση. Στο σχήμα 6.4 απεικονίζονται η μέση τιμή και η αντίστοιχη τυπική απόκλιση της θερμοκρασίας στο πυρίτιο και στα τοιχώματα της ρητίνης για διαφορετικές τιμές της τάσης και για σταθερό πλάτος λωρίδας ίσο με $5\mu m$. Όπως και στο προηγούμενο σχήμα, οι προσομοιώσεις έτρεξαν 100 φορές και υπολογίστηκε η μέση τιμή των αποτελεσμάτων.

Όσο αυξάνεται η τάση, αυξάνεται και η επιτάχυνση που δέχονται τα σωματίδια. Γι' αυτό παρατηρούμε ότι η μέση θερμοκρασία, τόσο του πυριτίου, όσο και της ρητίνης, αυξάνει γραμμικά με την αύξηση της τάσης. Παρ' όλα αυτά, η νοητή ευθεία για τη ρητίνη έχει μικρότερη κλίση, λόγω του φαινομένου της εστίασης.



Σχήμα 6.4: Μέση τιμή και τυπική απόκλιση της θερμοκρασίας για όλα τα σημεία πάνω στο πυρίτιο και τα τοιχώματα της ρητίνης, σε δείγμα με πλάτος λωρίδας 5μm, για διαφορετικές τιμές της τάσης

Σε αυτό το σημείο πρέπει να προσθέσουμε ότι οι τιμές της θερμοκρασίας που παρουσιάζονται στα σχήματα 6.3 και 6.4 είναι εξαιρετικά υψηλές και ως εκ τούτου μη φυσικά αποδεκτές σε σχέση με αυτές που θα υπολογίζαμε σε πραγματικά δείγματα. Ο λόγος που συμβαίνει αυτό είναι ότι, στο μοντέλο που χρησιμοποιήσαμε για τον υπολογισμό της θερμοκρασίας, δεν έχουμε λάβει υπ' όψιν το γεγονός ότι η θερμότητα που μεταφέρεται στην επιφάνεια του δείγματος διαχέεται προς το υπόστρωμα. Μια βελτίωση του μοντέλου, η οποία όμως ξεφεύγει από τα όρια της παρούσας εργασίας, θα περιλάμβανε τη μελέτη της διάχυσης της θερμότητας στο υπόστρωμα και τον υπολογισμό της θερμοκρασίας, όχι μόνο στην επιφάνεια, αλλά σε κάθε σημείο της μάζας των δειγμάτων.

7

Επίλογος

7.1 Σύνοψη και συμπεράσματα

Συνοπτικά, στην παρούσα εργασία παρουσιάστηκε μια απλή και αποτελεσματική μέθοδος αυτο-συναρμολόγησης των νανοσωματιδίων. Μελετήθηκε, με τη βοήθεια προσομοίωσης, η εναπόθεση αρνητικά φορτισμένων νανοσωματιδίων, κατασκευασμένων με τη βοήθεια συστήματος DC sputtering, πάνω σε διαμορφωμένα δείγματα σε θάλαμο υψηλού κενού. Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης έδειξαν ότι τα φορτισμένα σωματίδια δημιουργούν ένα φαινόμενο αυτο-εστίασης, το οποίο επηρεάζει την εναπόθεσή τους. Η προσομοίωση, επίσης, έδωσε πληροφορίες για τα φαινόμενα που λαμβάνουν χώρα κατά τη διάρκεια της μεταβατικής και της σταθερής κατάστασης του φαινομένου.

Επιπροσθέτως, υλοποιήθηκε μια παραλλαγή της παραπάνω προσομοίωσης, κατά την οποία στα νανοσωματίδια εφαρμόζεται επιπλέον επιτάχυνση μέσω μιας αρνητικά φορτισμένης σχάρας, η οποία τοποθετείται σε απόσταση από το

υπόστρωμα. Αποδείχθηκε ότι, κατά τη διάρκεια της εναπόθεσης, τα νανοσωματίδια εμφανίζουν εκλεκτικότητα ως προς την προσγείωση τους στο αγωγίμο υπόστρωμα ή στην επιφάνεια της ρητίνης, τόσο στην περίπτωση που δεν εφαρμόζεται επιπλέον τάση πάνω στα σωματίδια, όσο και όταν εφαρμόζεται. Η πυκνότητα νανοσωματιδίων ανάμεσα στις δυο επιφάνειες μπορεί να διαφέρει πάνω από δύο τάξεις μεγέθους, ανάλογα πάντα και με τις συνθήκες της εναπόθεσης. Είναι, έτσι, εφικτό, να δημιουργηθεί ένα συνεχές φιλμ νανοσωματιδίων σε συγκεκριμένες θέσεις πάνω στο υπόστρωμα.

Τέλος, μελετήθηκε η αύξηση της θερμοκρασίας που παρατηρείται πάνω στην επιφάνεια του δείγματος. Αποδείχτηκε ότι η αύξηση της θερμοκρασίας είναι μεγαλύτερη στην επιφάνεια του υποστρώματος σε σχέση με την επιφάνεια της ρητίνης. Ακόμα, όσο περισσότερο ευνοούν το φαινόμενο της εστίασης οι συνθήκες της εναπόθεσης, τόσο μεγαλύτερη είναι η διαφορά θερμοκρασίας πάνω στο υπόστρωμα και τόσο μικρότερη είναι πάνω στη ρητίνη, και αντιστρόφως.

7.2 Μελλοντικές επεκτάσεις

Η παρούσα μελέτη θα μπορούσε να έχει πολλές μελλοντικές επεκτάσεις. Αρχικά, θα μπορούσαμε να μελετήσουμε το φαινόμενο της αυτο-εστίασης για νανοσωματίδια κατασκευασμένα από άλλα υλικά. Αυτό μπορεί να επιτευχθεί εύκολα, αν μεταβάλλουμε την τιμή της πυκνότητας των νανοσωματιδίων στον κώδικα (σχέση 4.2). Επίσης, θα μπορούσαμε να αλλάξουμε τις διαστάσεις και το σχήμα του δείγματος. Για παράδειγμα, θα μπορούσαμε να δούμε την συμπεριφορά των νανοσωματιδίων όταν, αντί για λωρίδα πυριτίου, σχηματίζονται πιο περίπλοκες δομές. Αυτό θα είχε ως προϋπόθεση ο υπολογισμός των τροχιών των νανοσωματιδίων να γίνεται σε τρεις διαστάσεις αντί για δύο.

8

Βιβλιογραφία

- [1] R. Behrisch, “Sputtering by Particle Bombardment I: Physical Sputtering of Single-Element Solids”, Springer Berlin Heidelberg, 1981
- [2] K. Saraswat, “Deposition & Planarization”, Σημειώσεις του μαθήματος “Advanced Integrated Circuit Fabrication Processes”, Stanford (<http://www.stanford.edu/class/ee311/>)
- [3] “Τεχνικές για την εναπόθεση λεπτών υμενίων”, Σημειώσεις του μεταπτυχιακού μαθήματος “Εργαστηριακές τεχνικές και Νανοϋλικά”, Μικροσυστήματα & Νανοδιατάξεις, ΣΕΜΦΕ
- [4] K. Wasa, M. Kitabatake, H. Adachi, “Thin Film Materials Technology: Sputtering of Compound Materials”, William Andrew Publishing, Norwich, NY, 2004
- [5] Willems & van de Wildenberg (W&W), “Roadmap Report on Nanoparticles”, NRM Nanoroadmap Project, 2005
- [6] K. Χαριτίδης, “Νανοδομές και Νανοϋλικά: Σύνθεση, Ιδιότητες & Εφαρμογές”, ΕΜΠ, Χημ. Μηχανικοί, 2006

- [7] J. L. Tanner, D. Mousadakos, K. Giannakopoulos, E. Skotadis, D. Tsoukalas, “High strain sensitivity controlled by the surface density of platinum nanoparticles”, *Nanotechnology*, 2012
- [8] J. Tang, E. Verrelli, D. Tsoukalas, “Assembly of charged nanoparticles using self-electrodynamic focusing”, *Nanotechnology*, 2009
- [9] E. Verrelli, D. Tsoukalas, P. Normand, A. H. Kean, N. Boukos, “Forming-free resistive switching memories based on titanium-oxide nanoparticles fabricated at room temperature”, *Applied Physics Letters*, 2013
- [10] Y. Hatakeyama, K. Onishi, K. Nishikawa, “Effects of Sputtering Conditions on Formation of Gold Nanoparticles in Sputter Deposition Technique”, *RSC Adv.*, 2011
- [11] C. Mack, “Fundamental Principles of Optical Lithography: The science of microfabrication”, *Wiley*, 2007
- [12] I. Kolev, A. Bogaerts, “Detailed Numerical Investigation of a DC Sputter Magnetron”, *IEEE Transactions on Plasma Science*, 2006
- [13] E. Quesnel, E. Pauliac-Vaujour, V. Muffato, “Modeling metallic nanoparticle synthesis in a magnetron-based nanocluster source by gas condensation of a sputtered vapor”, *Journal of Applied Physics*, 2010
- [14] K. Lonngren, S. Savoy, R. Jost, “Fundamentals of Electromagnetics with Matlab”, *SciTech Publishing, Inc.*, 2007
- [15] L. F. Shampine, I. Gladwell, S. Thompson, “Solving ODEs with Matlab”, *Cambridge University Press*, 2003

Παράρτημα

Στη συνέχεια θα γίνει η επίλυση των ολοκληρωμάτων για τον υπολογισμό των συνιστωσών του ηλεκτρικού πεδίου. Υπενθυμίζουμε ότι το ηλεκτρικό πεδίο που δημιουργείται σε ένα σημείο $P(x_p, y_p, z_p)$ από μια δισδιάστατη κατανομή φορτίου με σταθερή πυκνότητα σ δίνεται από τον τύπο:

$$E_i(x_p, y_p, z_p) = \frac{\sigma}{4\pi\epsilon} \int_{y_{min}}^{y_{max}} \int_{x_{min}}^{x_{max}} \frac{\vec{R} - \vec{r}}{|\vec{R} - \vec{r}|^3} \hat{i} dx dy \quad (\text{Π. 1})$$

όπου το i μπορεί να αντικατασταθεί με x , y ή z , ανάλογα με το ποια συνιστώσα του ηλεκτρικού πεδίου θέλουμε να υπολογίσουμε, ϵ είναι η διηλεκτρική σταθερά του χώρου πάνω από το δείγμα, ενώ τα \vec{R} και \vec{r} είναι τα διανύσματα από την αρχή του συστήματος αναφοράς μέχρι το σημείο $P(x_p, y_p, z_p)$ όπου βρίσκεται το σωματίδιο και μέχρι την επιφάνεια του φορτίου, αντίστοιχα, και τα x_{min} , x_{max} , y_{min} , y_{max} είναι τα όρια της κατανομής φορτίου.

Ο υπολογισμός των τροχιών των νανοσωματιδίων θα γίνει πάνω στο επίπεδο $y = 0$. Για το λόγο αυτό, από τις συνιστώσες του ηλεκτρικού πεδίου μας ενδιαφέρουν μόνο η E_x και η E_z , αφού η E_y είναι μηδενική. Έχουμε θεωρήσει, επίσης, ότι η επιφάνεια της ρητίνης βρίσκεται στο $z = 0$. Άρα, τα διανύσματα \vec{R} και \vec{r} γράφονται, αντίστοιχα, ως εξής:

$$\begin{aligned}\vec{R} &= x_p \hat{x} + y_p \hat{y} + z_p \hat{z} = x_p \hat{x} + 0 \hat{y} + z_p \hat{z} = x_p \hat{x} + z_p \hat{z} \\ \vec{r} &= x \hat{x} + y \hat{y} + z \hat{z} = x \hat{x} + y \hat{y} + 0 \hat{z} = x \hat{x} + y \hat{y}\end{aligned}$$

Αν αντικαταστήσουμε τα διανύσματα \vec{R} και \vec{r} στον τύπο (Π. 1), έχουμε:

$$E_x(x_p, y_p, z_p) = \frac{\sigma}{4\pi\epsilon} \int_{y_{min}}^{y_{max}} \int_{x_{min}}^{x_{max}} \frac{\vec{R} - \vec{r}}{|\vec{R} - \vec{r}|^3} \hat{x} dx dy \Rightarrow$$

$$E_x(x_p, y_p, z_p) = \frac{\sigma}{4\pi\epsilon} \int_{y_{min}}^{y_{max}} \int_{x_{min}}^{x_{max}} \frac{x_p \hat{x} + z_p \hat{z} - x \hat{x} - y \hat{y}}{|x_p \hat{x} + z_p \hat{z} - x \hat{x} - y \hat{y}|^3} \hat{x} dx dy \Rightarrow$$

$$E_x(x_p, y_p, z_p) = \frac{\sigma}{4\pi\epsilon} \int_{y_{min}}^{y_{max}} \int_{x_{min}}^{x_{max}} \frac{x - x_p}{((x - x_p)^2 + y^2 + z_p^2)^{\frac{3}{2}}} dx dy \quad (\text{Π. 2})$$

Και αντίστοιχα:

$$E_z(x_p, y_p, z_p) = \frac{\sigma}{4\pi\epsilon} \int_{y_{min}}^{y_{max}} \int_{x_{min}}^{x_{max}} \frac{\vec{R} - \vec{r}}{|\vec{R} - \vec{r}|^3} \hat{z} dx dy \Rightarrow$$

$$E_z(x_p, y_p, z_p) = \frac{\sigma}{4\pi\epsilon} \int_{y_{min}}^{y_{max}} \int_{x_{min}}^{x_{max}} \frac{x_p \hat{x} + z_p \hat{z} - x \hat{x} - y \hat{y}}{|x_p \hat{x} + z_p \hat{z} - x \hat{x} - y \hat{y}|^3} \hat{z} dx dy \Rightarrow$$

$$E_z(x_p, y_p, z_p) = \frac{\sigma}{4\pi\epsilon} \int_{y_{min}}^{y_{max}} \int_{x_{min}}^{x_{max}} \frac{z_p}{((x - x_p)^2 + y^2 + z_p^2)^{\frac{3}{2}}} dx dy \quad (\text{Π. 3})$$

Αρχικά θα λύσουμε το ολοκλήρωμα:

$$\int_{x_{min}}^{x_{max}} \frac{1}{(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{3}{2}}} dx$$

το οποίο εμφανίζεται (με εναλλαγή των x και y) και στους δύο τύπους. Επομένως, αν θέσουμε $x = \tan(u)\sqrt{y^2 + z^2}$, τότε

$$dx = \frac{du}{\cos^2(u)} du \Rightarrow$$

$$dx = \frac{d}{dx} (\tan(u)\sqrt{y^2 + z^2}) du \Rightarrow$$

$$dx = \sqrt{y^2 + z^2} \frac{d}{dx} \left(\frac{\sin(u)}{\cos(u)} \right) du \Rightarrow$$

$$dx = \sqrt{y^2 + z^2} \frac{\sin'(u) \cos(u) - \sin(u) \cos'(u)}{\cos^2(u)} du \Rightarrow$$

$$dx = \sqrt{y^2 + z^2} \frac{\cos^2(u) + \sin^2(u)}{\cos^2(u)} du \Rightarrow$$

$$dx = \sqrt{y^2 + z^2} \frac{1}{\cos^2(u)} du$$

Επομένως:

$$\begin{aligned} & \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \frac{1}{(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{3}{2}}} dx = \\ &= \int_{u_{\min}}^{u_{\max}} \frac{1}{(\tan^2(u)(y^2 + z^2) + y^2 + z^2)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{y^2 + z^2} \frac{1}{\cos^2(u)} du = \\ &= \int_{u_{\min}}^{u_{\max}} \frac{1}{(\tan^2(u)(y^2 + z^2) + y^2 + z^2)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{y^2 + z^2} \frac{1}{\cos^2(u)} du = \\ &= \int_{u_{\min}}^{u_{\max}} \frac{1}{(\tan^2(u) + 1)^{\frac{3}{2}} (y^2 + z^2)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{y^2 + z^2} \frac{1}{\cos^2(u)} du = \\ &= \int_{u_{\min}}^{u_{\max}} \frac{1}{\left(\frac{\sin^2(u)}{\cos^2(u)} + 1\right)^{\frac{3}{2}} (y^2 + z^2) \cos^2(u)} du = \\ &= \int_{u_{\min}}^{u_{\max}} \frac{1}{\left(\frac{\sin^2(u) + \cos^2(u)}{\cos^2(u)}\right)^{\frac{3}{2}} (y^2 + z^2) \cos^2(u)} du = \\ &= \int_{u_{\min}}^{u_{\max}} \frac{1}{\cos^{-3}(u) (y^2 + z^2) \cos^2(u)} du = \\ &= \int_{u_{\min}}^{u_{\max}} \frac{\cos(u)}{(y^2 + z^2)} du \\ &= \frac{\sin(u)}{(y^2 + z^2)} \Big|_{u_{\min}}^{u_{\max}} \end{aligned}$$

Ξέρουμε ότι:

$$x = \tan(u) \sqrt{y^2 + z^2}$$

Άρα:

$$\tan(u) = \frac{x}{\sqrt{y^2 + z^2}} \Rightarrow$$

$$\tan^2(u) = \frac{x^2}{y^2 + z^2} \Rightarrow$$

$$\frac{\sin^2(u)}{\cos^2(u)} = \frac{x^2}{y^2 + z^2} \Rightarrow$$

$$\frac{\cos^2(u)}{\sin^2(u)} = \frac{y^2 + z^2}{x^2} \Rightarrow$$

$$\begin{aligned} \frac{\cos^2(u)}{\sin^2(u)} + 1 &= \frac{y^2 + z^2}{x^2} + 1 \Rightarrow \\ \frac{\cos^2(u) + \sin^2(u)}{\sin^2(u)} &= \frac{x^2 + y^2 + z^2}{x^2} \Rightarrow \\ \frac{1}{\sin^2(u)} &= \frac{x^2 + y^2 + z^2}{x^2} \Rightarrow \\ \sin^2(u) &= \frac{x^2}{x^2 + y^2 + z^2} \Rightarrow \\ \sin(u) &= \sqrt{\frac{x^2}{x^2 + y^2 + z^2}} \Rightarrow \\ u &= \sin^{-1}\left(\sqrt{\frac{x^2}{x^2 + y^2 + z^2}}\right) \end{aligned}$$

Άρα:

$$\begin{aligned} \int_{x_{min}}^{x_{max}} \frac{1}{(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{3}{2}}} dx &= \frac{\sin(u)}{(y^2 + z^2)} \Big|_{u_{min}}^{u_{max}} \Rightarrow \\ \int_{x_{min}}^{x_{max}} \frac{1}{(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{3}{2}}} dx &= \frac{\sin\left(\sin^{-1}\left(\sqrt{\frac{x^2}{x^2 + y^2 + z^2}}\right)\right)}{(y^2 + z^2)} \Big|_{x_{min}}^{x_{max}} \Rightarrow \\ \int_{x_{min}}^{x_{max}} \frac{1}{(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{3}{2}}} dx &= \frac{\sqrt{\frac{x^2}{x^2 + y^2 + z^2}}}{(y^2 + z^2)} \Big|_{x_{min}}^{x_{max}} \Rightarrow \\ \int_{x_{min}}^{x_{max}} \frac{1}{(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{3}{2}}} dx &= \frac{x}{(y^2 + z^2)\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \Big|_{x_{min}}^{x_{max}} \quad (\text{Π. 4}) \end{aligned}$$

Αντίστοιχα, αν αλλάξουμε τα ονόματα των μεταβλητών x και y , έχουμε ότι:

$$\int_{y_{min}}^{y_{max}} \frac{1}{(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{3}{2}}} dy = \frac{y}{(x^2 + z^2)\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \Big|_{y_{min}}^{y_{max}} \quad (\text{Π. 5})$$

Επομένως, από τους τύπους (Π. 2) και (Π. 5) έχουμε ότι:

$$E_x(x_p, y_p, z_p) = \frac{\sigma}{4\pi\epsilon} \int_{x_{min}}^{x_{max}} \frac{(x - x_p)y}{((x - x_p)^2 + z_p^2)\sqrt{(x - x_p)^2 + y^2 + z_p^2}} \Big|_{y_{min}}^{y_{max}} dx \quad (\text{Π. 6})$$

Ενώ από τους (3.3) και (3.4) προκύπτει ότι:

$$E_z(x_p, y_p, z_p) = \frac{\sigma}{4\pi\epsilon} \int_{y_{min}}^{y_{max}} \frac{z_p(x - x_p)}{(y^2 + z_p^2)\sqrt{(x - x_p)^2 + y^2 + z_p^2}} \Big|_{x_{min}}^{x_{max}} dy \quad (\text{Π. 7})$$

Ακολούθως θα λύσουμε το ολοκλήρωμα:

$$\int_{x_{min}}^{x_{max}} \frac{xy}{(x^2 + z^2)\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} dx$$

Θέτουμε $x = \tan(u)\sqrt{y^2 + z^2}$, άρα ισχύει ότι:

$$dx = \frac{\sqrt{y^2 + z^2}}{\cos^2(u)} du$$

όπως αποδείξαμε και πριν.

Άρα:

$$\begin{aligned} & \int_{x_{min}}^{x_{max}} \frac{xy}{(x^2 + z^2)\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} dx = \\ & = y \int_{x_{min}}^{x_{max}} \frac{x}{(x^2 + z^2)\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} dx = \\ & = y \int_{u_{min}}^{u_{max}} \frac{\tan(u)\sqrt{y^2 + z^2}}{(\tan^2(u)(y^2 + z^2) + z^2)\sqrt{\tan^2(u)(y^2 + z^2) + y^2 + z^2}} \frac{\sqrt{y^2 + z^2}}{\cos^2(u)} du = \\ & = y \int_{u_{min}}^{u_{max}} \frac{\tan(u)\sqrt{y^2 + z^2}}{(\tan^2(u)(y^2 + z^2) + z^2)\sqrt{\tan^2(u) + 1}\sqrt{y^2 + z^2}} \frac{\sqrt{y^2 + z^2}}{\cos^2(u)} du = \\ & = y \int_{u_{min}}^{u_{max}} \frac{\tan(u)\sqrt{y^2 + z^2}}{(\tan^2(u)(y^2 + z^2) + z^2)\sqrt{\frac{\sin^2(u)}{\cos^2(u)} + 1}} \frac{1}{\cos^2(u)} du = \\ & = y \int_{u_{min}}^{u_{max}} \frac{\tan(u)\sqrt{y^2 + z^2}}{(\tan^2(u)(y^2 + z^2) + z^2)\sqrt{\frac{\sin^2(u) + \cos^2(u)}{\cos^2(u)}}} \frac{1}{\cos^2(u)} du = \\ & = y \int_{u_{min}}^{u_{max}} \frac{\tan(u)\sqrt{y^2 + z^2}}{(\tan^2(u)(y^2 + z^2) + z^2)\sqrt{\frac{1}{\cos^2(u)}}} \frac{1}{\cos^2(u)} du = \\ & = y \int_{u_{min}}^{u_{max}} \frac{\tan(u)\sqrt{y^2 + z^2}}{(\tan^2(u)(y^2 + z^2) + z^2)\cos(u)} du = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= y\sqrt{y^2+z^2} \int_{u_{\min}}^{u_{\max}} \frac{\sin(u)}{(\tan^2(u)(y^2+z^2)+z^2)\cos^2(u)} du = \\
&= y\sqrt{y^2+z^2} \int_{u_{\min}}^{u_{\max}} \frac{\sin(u)}{\sin^2(u)y^2+\sin^2(u)z^2+\cos^2(u)z^2} du = \\
&= y\sqrt{y^2+z^2} \int_{u_{\min}}^{u_{\max}} \frac{\sin(u)}{\sin^2(u)y^2+z^2} du = \\
&= y\sqrt{y^2+z^2} \int_{u_{\min}}^{u_{\max}} \frac{\sin(u)}{(1-\cos^2(u))y^2+z^2} du
\end{aligned}$$

Αν θέσουμε $s = \cos(u)$ τότε $ds = -\sin(u)du$, άρα:

$$\begin{aligned}
&\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \frac{xy}{(x^2+z^2)\sqrt{x^2+y^2+z^2}} dx = \\
&= y\sqrt{y^2+z^2} \int_{u_{\min}}^{u_{\max}} \frac{\sin(u)}{(1-\cos^2(u))y^2+z^2} du = \\
&= y\sqrt{y^2+z^2} \int_{s_{\min}}^{s_{\max}} -\frac{1}{(1-s^2)y^2+z^2} ds = \\
&= y\sqrt{y^2+z^2} \int_{s_{\min}}^{s_{\max}} -\frac{1}{y^2-s^2y^2+z^2} ds = \\
&= y\sqrt{y^2+z^2} \int_{s_{\min}}^{s_{\max}} -\frac{1}{(y^2+z^2)\left(1-\frac{s^2y^2}{y^2+z^2}\right)} ds = \\
&= -\frac{y}{\sqrt{y^2+z^2}} \int_{s_{\min}}^{s_{\max}} \frac{1}{\left(1-\frac{s^2y^2}{y^2+z^2}\right)} ds
\end{aligned}$$

Θέτουμε $p = \frac{sy}{\sqrt{y^2+z^2}}$, άρα $dp = \frac{y}{\sqrt{y^2+z^2}} ds$:

$$\begin{aligned}
&\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \frac{xy}{(x^2+z^2)\sqrt{x^2+y^2+z^2}} dx = \\
&= -\frac{y}{\sqrt{y^2+z^2}} \int_{s_{\min}}^{s_{\max}} \frac{1}{\left(1-\frac{s^2y^2}{y^2+z^2}\right)} ds = \\
&= -\int_{p_{\min}}^{p_{\max}} \frac{1}{1-p^2} dp = \\
&= -\int_{p_{\min}}^{p_{\max}} \frac{1}{1-p^2} dp = \\
&= -\tanh^{-1}(p) \Big|_{p_{\min}}^{p_{\max}} =
\end{aligned}$$

$$= -\tanh^{-1}\left(\frac{sy}{\sqrt{y^2+z^2}}\right) \Big|_{S_{min}}^{S_{max}} =$$

$$= -\tanh^{-1}\left(\frac{\cos(u)y}{\sqrt{y^2+z^2}}\right) \Big|_{u_{min}}^{u_{max}}$$

Ξέρουμε ότι:

$$x = \tan(u)\sqrt{y^2+z^2}$$

Άρα:

$$\tan(u) = \frac{x}{\sqrt{y^2+z^2}} \Rightarrow$$

$$\tan^2(u) = \frac{x^2}{y^2+z^2} \Rightarrow$$

$$\frac{\sin^2(u)}{\cos^2(u)} = \frac{x^2}{y^2+z^2} \Rightarrow$$

$$\frac{\sin^2(u)}{\cos^2(u)} + 1 = \frac{x^2}{y^2+z^2} + 1 \Rightarrow$$

$$\frac{\sin^2(u) + \cos^2(u)}{\cos^2(u)} = \frac{x^2 + y^2 + z^2}{y^2+z^2} \Rightarrow$$

$$\frac{1}{\cos^2(u)} = \frac{x^2 + y^2 + z^2}{y^2+z^2} \Rightarrow$$

$$\cos^2(u) = \frac{y^2+z^2}{x^2+y^2+z^2} \Rightarrow$$

$$\cos(u) = \sqrt{\frac{y^2+z^2}{x^2+y^2+z^2}} \Rightarrow$$

$$u = \cos^{-1}\left(\sqrt{\frac{y^2+z^2}{x^2+y^2+z^2}}\right)$$

Επομένως:

$$\int_{x_{min}}^{x_{max}} \frac{xy}{(x^2+z^2)\sqrt{x^2+y^2+z^2}} dx = -\tanh^{-1}\left(\frac{\cos(u)y}{\sqrt{y^2+z^2}}\right) \Big|_{u_{min}}^{u_{max}} \Rightarrow$$

$$\int_{x_{min}}^{x_{max}} \frac{xy}{(x^2+z^2)\sqrt{x^2+y^2+z^2}} dx = -\tanh^{-1}\left(\frac{y\sqrt{\frac{y^2+z^2}{x^2+y^2+z^2}}}{\sqrt{y^2+z^2}}\right) \Big|_{x_{min}}^{x_{max}} \Rightarrow$$

$$\int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \frac{xy}{(x^2 + z^2)\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} dx = -\tanh^{-1}\left(\frac{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}{y}\right) \Big|_{x_{\min}}^{x_{\max}} \quad (\text{Π. 8})$$

Από τους τύπους (Π. 6) και (Π. 8) έχουμε:

$$E_x(x_p, y_p, z_p) = -\frac{\sigma}{4\pi\epsilon} \tanh^{-1}\left(\frac{\sqrt{(x-x_p)^2 + y^2 + z_p^2}}{y}\right) \Big|_{x_{\min}}^{x_{\max}} \Big|_{y_{\min}}^{y_{\max}} \quad (\text{Π. 9})$$

Τέλος θα λύσουμε το ολοκλήρωμα:

$$\int_{y_{\min}}^{y_{\max}} \frac{zx}{(y^2 + z^2)\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} dy$$

Όπως και πριν, θέτουμε $y = \tan(u)\sqrt{x^2 + z^2}$, άρα ισχύει ότι:

$$dy = \frac{\sqrt{x^2 + z^2}}{\cos^2(u)} du$$

$$u = \sin^{-1}\left(\sqrt{\frac{y^2}{x^2 + y^2 + z^2}}\right)$$

Επομένως:

$$\begin{aligned} & \int_{y_{\min}}^{y_{\max}} \frac{x}{(y^2 + z^2)\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} dy = \\ & = x \int_{u_{\min}}^{u_{\max}} \frac{1}{(\tan^2(u)(x^2 + z^2) + z^2)\sqrt{\tan^2(u)(x^2 + z^2) + x^2 + z^2}} \frac{\sqrt{x^2 + z^2}}{\cos^2(u)} du = \\ & = x \int_{u_{\min}}^{u_{\max}} \frac{1}{(\tan^2(u)(x^2 + z^2) + z^2)\sqrt{(\tan^2(u) + 1)(x^2 + z^2)}} \frac{\sqrt{x^2 + z^2}}{\cos^2(u)} du = \\ & = x \int_{u_{\min}}^{u_{\max}} \frac{1}{(\tan^2(u)(x^2 + z^2) + z^2)\sqrt{\left(\frac{1}{\cos^2(u)}\right)(x^2 + z^2)}} \frac{\sqrt{x^2 + z^2}}{\cos^2(u)} du = \\ & = x \int_{u_{\min}}^{u_{\max}} \frac{\cos(u)}{(\tan^2(u)(x^2 + z^2) + z^2)\sqrt{x^2 + z^2}} \frac{\sqrt{x^2 + z^2}}{\cos^2(u)} du = \\ & = x \int_{u_{\min}}^{u_{\max}} \frac{1}{\cos(u)(\tan^2(u)(x^2 + z^2) + z^2)} du = \\ & = x \int_{u_{\min}}^{u_{\max}} \frac{\cos(u)}{\cos^2(u)(\tan^2(u)(x^2 + z^2) + z^2)} du = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= x \int_{u_{\min}}^{u_{\max}} \frac{\cos(u)}{\sin^2(u)(x^2 + z^2) + \cos^2(u)z^2} du = \\
&= x \int_{u_{\min}}^{u_{\max}} \frac{\cos(u)}{\sin^2(u)(x^2 + z^2) + \cos^2(u)z^2} du = \\
&= x \int_{u_{\min}}^{u_{\max}} \frac{\cos(u)}{\sin^2(u)x^2 + \sin^2(u)z^2 + \cos^2(u)z^2} du = \\
&= \frac{x}{z^2} \int_{u_{\min}}^{u_{\max}} \frac{\cos(u)}{\frac{\sin^2(u)x^2}{z^2} + 1} du
\end{aligned}$$

Στη συνέχεια, θέτουμε $s = \frac{\sin(u)x}{z}$, άρα $ds = \frac{ds}{du} du = \frac{\cos(u)x}{z} du$:

$$\begin{aligned}
&\int_{y_{\min}}^{y_{\max}} \frac{x}{(y^2 + z^2)\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} dy = \\
&= \frac{x}{z^2} \int_{s_{\min}}^{s_{\max}} \frac{\frac{z}{x}}{s^2 + 1} ds = \\
&= \frac{1}{z} \int_{s_{\min}}^{s_{\max}} \frac{1}{s^2 + 1} ds = \\
&= \frac{1}{z} \tan^{-1}(s) \Big|_{s_{\min}}^{s_{\max}} = \\
&= \frac{1}{z} \tan^{-1}\left(\frac{\sin(u)x}{z}\right) \Big|_{u_{\min}}^{u_{\max}} = \\
&= \frac{1}{z} \tan^{-1}\left(\frac{\sin\left(\sin^{-1}\left(\sqrt{\frac{y^2}{x^2 + y^2 + z^2}}\right)\right)x}{z}\right) \Big|_{y_{\min}}^{y_{\max}} = \\
&= \frac{1}{z} \tan^{-1}\left(\frac{\sqrt{\frac{y^2}{x^2 + y^2 + z^2}}x}{z}\right) \Big|_{y_{\min}}^{y_{\max}} = \\
&= \frac{1}{z} \tan^{-1}\left(\frac{xy}{z\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}\right) \Big|_{y_{\min}}^{y_{\max}}
\end{aligned}$$

Άρα, καταλήγουμε ότι:

$$\int_{y_{min}}^{y_{max}} \frac{x}{(y^2 + z^2)\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} dy = \frac{1}{z} \tan^{-1} \left(\frac{xy}{z\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \right) \Big|_{y_{min}}^{y_{max}} \quad (\text{Π. 10})$$

Από τους τύπους (Π. 7) και (Π. 10) προκύπτει ότι:

$$E_z(x_p, y_p, z_p) = \frac{\sigma}{4\pi\epsilon} \tan^{-1} \left(\frac{(x - x_p)y}{z_p\sqrt{(x - x_p)^2 + y^2 + z_p^2}} \right) \Big|_{x_{min}}^{x_{max}} \Big|_{y_{min}}^{y_{max}} \quad (\text{Π. 11})$$