

بهینه‌سازی تحلیل شکل قله ایکس‌پی‌اس برای مطالعه ریخت نانوسیم‌های

طلای درآمیخته با پلیمر

اعظم میرعلی، شاکر حاجتی*، ابوالقاسم عوض‌پور

گروه فیزیک، دانشگاه یاسوج، یاسوج، ایران

چکیده

روشی بهینه برای تحلیل شکل قله ایکس‌پی‌اس برای شناسایی دقیق نانوساختارهای فلزی درآمیخته با یک ماتریس پلیمری ارائه می‌شود. در این جا، توزیع عمقی نانوسیم‌های استوانه‌ای طلای درآمیخته با پلیمر با جزئیات به دست می‌آید، که در آن تنها از تحلیل یک طیف در گستره وسیعی از انرژی (حداقل تا ۵۰ الکترون‌ولت پایین‌تر از انرژی قله) و کاهش زمینه ایجاد شده در اثر برخوردی ناکشسان الکترون‌ها با لحاظ ترابرد الکترون مربوط به هر دو مؤلفه فلزی و پلیمری استفاده شده است. این بدان معنی است که روشی بسیار ساده و غیر مخرب برای تصویربرداری سه بعدی غیر مستقیم ایکس‌پی‌اس برای شناسایی درخط نانوساختارهای سطحی دو مؤلفه‌ای شامل فلز و پلیمر ایجاد شده است که این می‌تواند روشی بسیار مناسب برای استفاده در خطوط کنترل کیفیت تولید چنین نانوساختارهای سطحی باشد.

کلیدواژگان: فلز درآمیخته با پلیمر، نانوسیم استوانه‌ای طلا، تحلیل شکل قله ایکس‌پی‌اس، تصویربرداری سه بعدی ایکس‌پی‌اس

مقدمه

می‌توان اطلاعات خوبی در مورد میزان تداخل نانوساختارها و شبکه پلیمری که در داخل آن قرار گرفته‌اند، به دست آورد ولی این روش بسیار وقت‌گیر و در عین حال مخرب است. از این رو لازم است از یک روش کمی غیر مخرب، ساده و سریع برای مطالعه ترکیب و ساختار ناحیه سطحی (چند نانومتر بیرونی‌تر) ماده استفاده شود. طیف‌سنجی فوتوالکترون تحریک شده با اشعه ایکس (XPS) امکان بررسی سطح نانوساختارها را با این کیفیت فراهم می‌کند. اما آنالیز طیف XPS که بر پایه شدت قله XPS است، خطاهای بزرگی را در بررسی توزیع عمقی اتم‌ها در چند نانومتر بیرونی‌تر سطح نانو ساختارها ایجاد می‌کند [۲]. توگارد آنالیز شکل طیف XPS را توسعه داد [۲-۸] و در دهه گذشته یک ساده‌سازی بر روی آن انجام داد [۹ و ۱۰].

نانوساختارهای درآمیخته با پلیمر اهمیت فیزیکی قابل ملاحظه‌ای دارند. در بسیاری از زمینه‌ها از قبیل بسته‌بندی غذا، اتصالات تراشه، منعکس‌کننده‌های نور ماشین، دیسک‌های فشرده، حفاظ الکتریکی کیس‌های رایانه، فیلترهای رنگی فوق‌العاده نازک نوری، زیرلایه مولکول‌های حیاتی به کار می‌رود [۱]. از این رو مطالعه ویژگی‌های سطحی این‌گونه نانوساختارها ضروری می‌باشد. روش‌های طیف‌سنجی الکترونی متعددی از قبیل AFM، TEM و XTEM برای مطالعه این نانوساختارها به کار می‌رود. با روش AFM، می‌توان ساختار سطحی نانوساختارها را مشاهده کرد ولی نمی‌توان اطلاعاتی در مورد توزیع اتم‌ها در عمق به ویژه زمانی که در یک شبکه پلیمری جایگزیده می‌شوند، به دست آورد. همچنین از روش XTEM،

لحاظ شده است. به عبارت دیگر، در این آنالیز فرض شده است که فوتوالکترون‌های ساطع شده از اتم طلا و تحریک شده به وسیله اشعه ایکس که در داخل پلیمر جایگزیده شده است، تنها در داخل پلیمر حرکت می‌کند تا از نمونه خارج شود، که این با واقعیت سازگار نیست. به علاوه، واضح است که پدیده انتقال الکترون‌های برانگیخته از اتم‌های طلای جایگزیده در درون پلیمر، هم به ریخت نانوذره طلا و هم به ضخامت لایه پلیمر که در بالای آن قرار گرفته است، بستگی دارد. از این رو باید به طور هم‌زمان در آنالیز، مشخصات پراکندگی الکترون هم در طلا و هم در پلیمر را لحاظ کرد که این مشخصات شامل سطح مقطع پراکندگی ناکشسان الکترون و مسافت آزاد میانگین ناکشسان الکترون در طلا و پلیمر می‌باشد، که میزان تأثیر این پارامترها بستگی به شکل نانوذره طلا و ضخامت لایه پلیمری که بر روی آن قرار گرفته است دارد. در این کار، برای نشان دادن اهمیت تأثیر پارامترهای ذکر شده بر نتایج آنالیز، نمونه‌ای از نانوسیم استوانه‌ای طلا با ارتفاع (قطر) 40 \AA بر روی پلیمر و درون پلیمر (در عمق 20 \AA زیر لایه پلیمر) مدل‌سازی می‌شود.

نظریه

همان‌طور که در بالا گفته شد، از روش آنالیز شکل قله XPS که توسط توگارد و همکاران توسعه یافته، استفاده می‌شود. هر چه الکترون‌ها مسیر بیشتری را طی کنند شانس از دست دادن انرژی آن‌ها بیشتر می‌شود و در نتیجه شدت قله طیف انرژی XPS کاهش می‌یابد. الکترون‌هایی که انرژی خود را از دست داده‌اند، در انرژی‌های پایین‌تر در طیف XPS ظاهر می‌شوند و انحراف انرژی آن‌ها از انرژی قله اصلی طیف XPS قابل توجه است. اگر توزیع ذاتی $F(E)$ و غلظت عمقی پروفایل $f(x)$ ، سطح مقطع پراکندگی ناکشسان $K(T)$ ، مسیر آزاد میانگین ناکشسان (λ) و زاویه بین بردار عمود

هر دو روش بر پایه این واقعیت است که زمینه ناکشسان در طیف توزیع انرژی الکترون‌ها، به شدت به غلظت ماده در پروفایل عمقی بستگی دارد. فرآیندهای ناکشسان باعث انحراف توزیع انرژی از توزیع انرژی اولیه در نقطه برانگیختگی در داخل جامد می‌شود [۵-۳]. فاصله بین پراکندگی‌های ناکشسان فقط حدود 1 nm است [۱۱ و ۱۲] و شکل زمینه حاصل از توزیع انرژی در یک بازه گسترده انرژی (50 eV تا 100 eV) پائین‌تر از اصلی‌ترین قله طیف XPS به شدت به توزیع عمقی اتم‌ها در مقیاس نانومتر بستگی دارد. این پدیده دقت آنالیز به روش XPS را افزایش می‌دهد و اطلاعات مفیدی را از توزیع اتم‌ها در عمق فراهم می‌سازد [۵-۷]. روش توگارد به طور گسترده برای مطالعه بسیاری از نانو ساختارها مورد استفاده قرار می‌گیرد [۳-۸]. این روش به طور موفقیت‌آمیزی توسط حاجتی و همکاران در ایجاد تصاویر سه بعدی از نانو ساختارهای سطحی مورد استفاده قرار گرفت [۱۶-۱۳]. این در حالی است که به دست آوردن داده برای تصویربرداری سه بعدی بسیار وقت گیر بوده و اغلب به دلیل اینکه نمونه مدت زیادی در معرض اشعه ایکس قرار می‌گیرد، آسیب می‌بیند. برای جلوگیری از این آسیب و سرعت بخشیدن به آنالیز، حاجتی و همکاران [۱۷] از آنالیز شکل طیف XPS برای توصیف و ایجاد تصاویر غیرمستقیم سه بعدی از نانوذرات کروی طلا درون پلیمر یا بر روی سطح پلیمر، استفاده کردند به طوری که چگالی و اندازه تعریف شده نانوذرات طلا بر روی پلیمر با تصاویر TEM گرفته شده از نمونه، توافق خوبی داشت. اما برای نانوذرات طلا جایگزیده شده در داخل پلیمر، نتایج حاصل قطعیت لازم را ندارد، زیرا به جای این‌که کلیه پارامترهای مؤثر در پراکندگی الکترون (شامل سطح مقطع پراکندگی ناکشسان الکترون و مسافت آزاد میانگین ناکشسان الکترون در طلا و پلیمر) در نظر گرفته شود، تنها پارامترهای مربوط به پلیمر در آنالیز

$$F(E) = \frac{1}{P_1} \{ J(E) - \int dE' J(E') \} \quad (4)$$

$$\times \int_{-\infty}^{+\infty} ds \exp(i2\pi[E' - E]) \times \left[1 - \frac{P_1}{P(s)} \right]$$

که

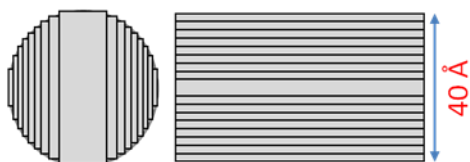
۵

$$p_1 = \int_0^{\infty} dx f(x) \exp\left(\frac{-x}{\lambda \cos \theta}\right) \quad (a)$$

$$p(s) = \int_0^{\infty} dx f(x) \times \exp\left(\frac{-x}{\lambda \cos \theta} \left[1 - \int_0^{\infty} dT \lambda K(T) \exp(-isT) \right] \right) \quad (b)$$

توگارد با اعمال روابط ذکر شده در بالا، نرم افزار Quases-Tougaard را برای تولید طیف نانولایه‌های سطحی که توزیع عمقی آنها شبیه جعبه بود، طراحی کرد [۲۰].

در این کار که نانوساختار تحت بررسی، نانوسیم‌های استوانه‌ای می‌باشد، با استفاده از روش حاجتی و همکاران [۱۷] آن‌ها به گونه‌ای شبیه‌سازی می‌شوند که بتوان از نرم‌افزار توگارد برای به دست آوردن صحیح طیف آن‌ها استفاده کرد. برای به دست آوردن طیف نانوسیم استوانه‌ای، هر نیمه از آن به نه جزیره تقسیم می‌شود (شکل ۱).



شکل ۱. نمای بالایی نانوسیم استوانه‌ای طلای جزیره‌بندی شده (شکل سمت راست) و نمای جانبی نانوسیم استوانه‌ای طلای جزیره‌بندی شده (شکل سمت چپ).

بر سطح و آشکارساز، θ ، مشخص باشند، طیف XPS اندازه‌گیری شده، $J(E)$ از معادله ۱ به دست می‌آید:

$$J(E) = \frac{1}{2\pi} \int dE_0 F(E_0) \int ds e^{is(E_0 - E)} \quad (1)$$

$$\times \int_0^{\infty} dx f(x) \exp\left[\frac{-x}{\lambda \cos \theta} (1 - \int_0^{\infty} \lambda K(T) e^{-isT} dT)\right]$$

که در این کار برای لحاظ نمودن انتقال الکترون در طلا و پلیمر به ترتیب از معادلات ۲ و ۳ استفاده شده است.

$$\lambda K(T) = \frac{BT}{(C + T^2)^2} \quad (2)$$

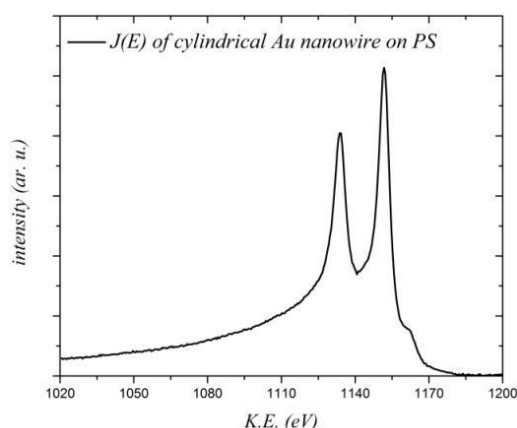
می‌باشد $C = 1643 \text{ eV}^2$ و $D = 3000 \text{ eV}^2$ که با دقت قابل قبولی

$$\lambda K(T) = \frac{BT}{(C - T^2)^2 + DT^2} \quad (3)$$

که C و D مشخصه ماده هستند. مسیر آزاد میانگین ناکشسان الکترون در طلا و پلیمر با فرمول TPP [۱۱] و [۱۲] به دست می‌آید. همان‌طور که در معادله ۱ دیده می‌شود، طیف XPS اندازه‌گیری شده، $J(E)$ تابع $F(E)$ و $K(T)$ و $f(x)$ است. در یک آنالیز کمی صحیح، می‌توان با برطرف کردن انحرافات ناشی از پراکندگی‌های ناکشسان الکترون که در طیف اندازه‌گیری شده $J(E)$ وجود دارد به تابع توزیع ذاتی $F(E)$ دست پیدا کرد. اگر این کار به درستی صورت بگیرد، مقدار تابع $F(E)$ در یک بازه پهن انرژی بین ۵۰ تا ۱۵۰ الکترون ولت در طرف انرژی‌های جنبشی کمتر از انرژی فله طیف XPS صفر می‌شود. عمومی‌ترین راه حل برای استخراج $F(E)$ از $J(E)$ به روش زیر است [۶ و ۱۸ و ۱۹]:

قرار می‌گیرد، که مقدار آن در درون طلا $13/48 \text{ \AA}$ و درون پلیمر 30 \AA می‌باشد.

۱- طیف XPS نانوسیم استوانه‌ای با ارتفاع 40 \AA بر روی پلیمر از معادلات ۱ و ۲ و ۶ به دست می‌آید (شکل ۲) که $J_1(E)$ نامیده می‌شود.



شکل ۲. $J_1(E)$ طیف XPS نانوسیم استوانه‌ای با ارتفاع 40 \AA بر روی سطح پلیمر که از فرمول‌های ۱ و ۲ و ۶ به دست می‌آید.

در تولید $J_1(E)$ فرض شده است که فوتوالکتردهای ساطع شده از اتم طلا، تنها با اتم‌های طلا برهم‌کنش می‌دهند که این طبق انتظار است. از این رو برای کاهش زمینه طیف $J_1(E)$ و به دست آوردن $F(E)$ ، نیازی به استفاده از مشخصات پراکندگی هر دوی طلا و پلیمر نیست و استفاده از سطح مقطع پراکندگی ناکشسان الکترون و مسافت آزاد میانگین ناکشسان الکترون در طلا، به $F(E)$ صحیح منجر می‌شود که با $F(E)$ مرجع همخوانی دارد (شکل ۳).

با فرض تساوی پوشش جزایر و هندسه نانوسیم و استفاده از رابطه ۶، می‌توان ارتفاع هر یک از جزیره‌ها را به دست آورد:

$$h_i = 2R \sqrt{1 - \left(\frac{2i-1}{18}\right)^2} \quad i = 1, 2, \dots, 9 \quad 6$$

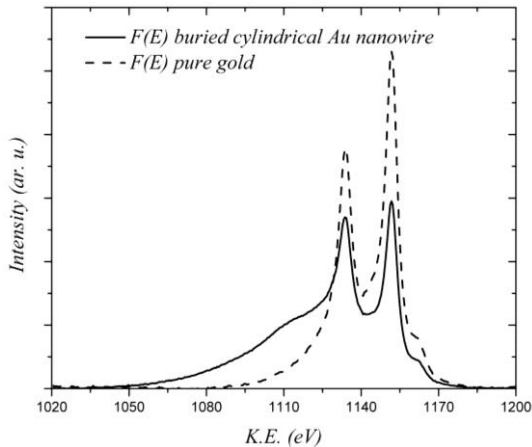
که R شعاع سطح مقطع دایره‌ای نانوسیم استوانه‌ای است و $2R = 40 \text{ \AA}$ می‌باشد. سپس با استفاده از نرم‌افزار Quases-Tougaard که معادلات فوق را به کار می‌گیرد، طیف XPS هر یک از آن‌ها به دست می‌آید. پس از به دست آوردن طیف هر نیمه که از جمع طیف نه جزیره به دست می‌آید، آن را دو برابر کرده تا طیف کل این نانوسیم استوانه‌ای به دست آید.

نتایج و بحث

توزیع عمقی نانوسیم‌های طلا با دو ریخت متفاوت مطالعه می‌شود:

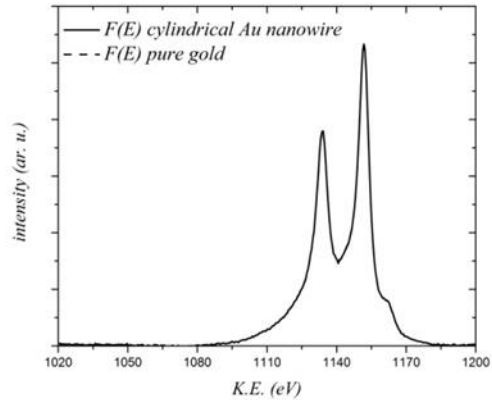
۱- نانوسیم استوانه‌ای با ارتفاع 40 \AA بر روی پلیمر.
۲- نانوسیم استوانه‌ای با ارتفاع 40 \AA با 20 \AA پلیمر بر روی آن.

همان‌طور که در بالا اشاره شد، از معادله ۶ برای شبیه‌سازی نانوسیم استوانه‌ای استفاده می‌شود. برای بررسی تأثیر ویژگی‌های پراکندگی طلا و پلیمر که شامل سطح مقطع پراکندگی ناکشسان الکترون و مسافت آزاد میانگین ناکشسان الکترون در طلا و پلیمر است، آنالیز به روش زیر انجام می‌شود. فرمول TPP [۱۱ و ۱۲] برای محاسبه مسافت آزاد میانگین ناکشسان الکترون تراز $4d$ طلا در درون طلا و پلیمر مورد استفاده



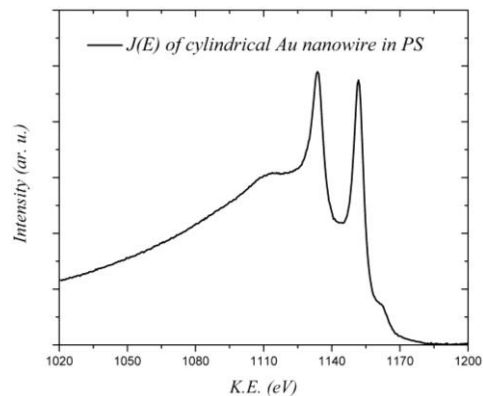
شکل ۵. مقایسه طیف تصحیح شده $F(E)$ نانوسیم استوانه‌ای درون پلیمر با $F(E)$ مرجع (با اعمال پارامترهای مربوط به طلا).

در این حالت $F(E)$ از روش دیگری به دست می‌آید. ابتدا طیف $J_2(E)$ تنها با لحاظ سطح مقطع پراکندگی ناکشسان الکترون و مسافت آزاد میانگین ناکشسان الکترون در طلا، آنالیز می‌گردد. در این حالت $F(E)$ حاصل با $F(E)$ نمونه طلای خالص همخوانی ندارد (شکل ۵). سپس در آنالیز طیف $J_2(E)$ از سطح مقطع پراکندگی ناکشسان الکترون و مسافت آزاد میانگین ناکشسان الکترون در پلیمر استفاده می‌شود. همان‌طور که در (شکل ۶) مشاهده می‌شود $F(E)$ حاصل با $F(E)$ مرجع هم‌خوانی خوبی دارد، اما ریخت به دست آمده با این روش با ریخت نمونه شبیه‌سازی شده تفاوت زیادی دارد (شکل ۷).

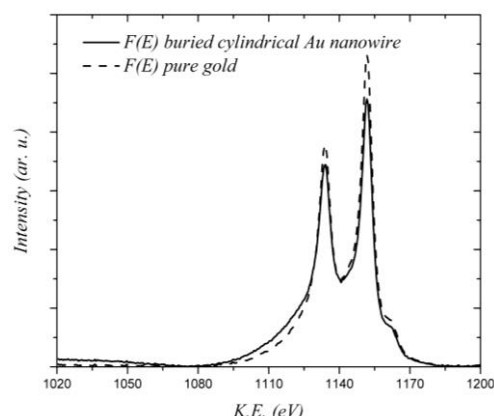
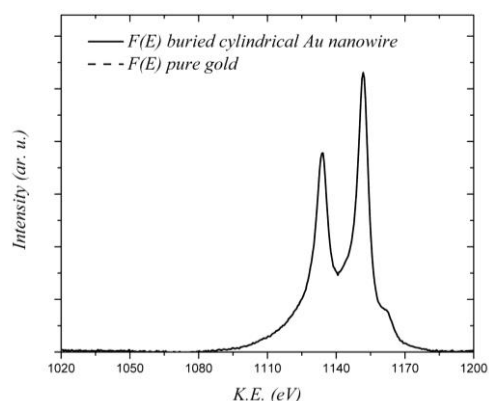


شکل ۳. مقایسه طیف تصحیح شده $F(E)$ نانوسیم استوانه‌ای بر روی پلیمر با $F(E)$ مرجع (با اعمال پارامترهای مربوط به طلا). شایان ذکر است که $F(E)$ مرجع بر اساس الگوی ذکر شده در قسمت مبانی نظری با کاهش زمینه طیف تجربی حاصل از یک نمونه طلای خالص با توزیع اتمی یکنواخت و با ضخامت ۱۰۰۰ آنگستروم به دست می‌آید.

۲- طیف XPS نانوسیم استوانه‌ای با ارتفاع 40 \AA با 20 \AA پلیمر بر روی آن که از معادلات ۱ و ۲ و ۶ به دست می‌آید، $J_2(E)$ نامیده می‌شود (شکل ۴).



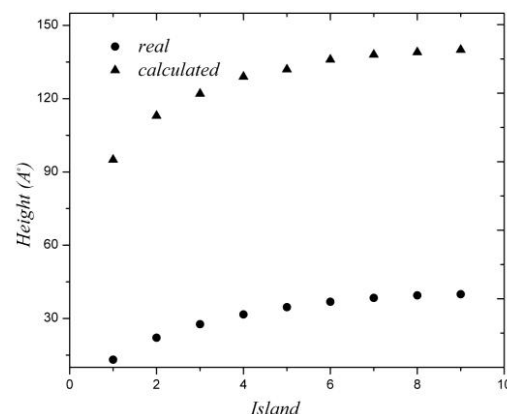
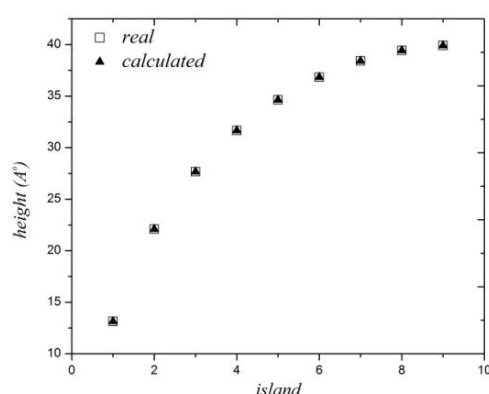
شکل ۴. $J_2(E)$ طیف XPS نانوسیم استوانه‌ای با ارتفاع 40 \AA با 20 \AA پلیمر بر روی آن.



شکل ۶. مقایسه طیف تصحیح شده $F(E)$ نانوسیم استوانه‌ای درون پلیمر با $F(E)$ مرجع (با اعمال پارامترهای مربوط به پلیمر و طلا).

شکل ۷. مقایسه طیف تصحیح شده $F(E)$ نانوسیم استوانه‌ای درون پلیمر با $F(E)$ مرجع (با اعمال پارامترهای مربوط به پلیمر).

به‌علاوه ارتفاع هر یک از جزیره‌های به‌دست آمده از آنالیز، با مقادیر واقعی هم‌خوانی دقیقی دارد (شکل ۹).



شکل ۹. مقایسه ارتفاع به‌دست آمده برای هر جزیره با ارتفاع واقعی (بعد از اعمال پارامترهای پراکندگی پلیمر و طلا).

شکل ۸. مقایسه ارتفاع به‌دست آمده برای هر جزیره، با ارتفاع واقعی (بعد از اعمال پارامترهای پراکندگی پلیمر).

در واقع با لحاظ کلیه پارامترهای مؤثر در پراکندگی الکترون که شامل سطح مقطع پراکندگی ناکشسان الکترون و مسافت آزاد میانگین الکترون در طلا و پلیمر می‌باشد، آنالیز شکل طیف XPS بهینه‌سازی شده است، به‌طوری‌که دقت آنالیز در تعیین مشخصات نانوسیم واقع شده درون پلیمر بسیار بالا رفته است.

پس باید روش دیگری برای آنالیز طیف $J_2(E)$ به‌کار گرفته شود. در این روش برای آنالیز طیف $J_2(E)$ ، سطح مقطع پراکندگی ناکشسان الکترون و مسافت آزاد میانگین ناکشسان الکترون در طلا و پلیمر با فاکتور وزنی وابسته به ریخت طلا و ضخامت پلیمر بر روی هر جزیره، به کار می‌رود. در این حالت توافق خوبی بین $F(E)$ به دست آمده و $F(E)$ مرجع وجود دارد (شکل ۸).

signal in XPS, *Surface Science* 162 (1985) 875-885.

[4] S. Tougaard, Inelastic background removal in x-ray excited photoelectron spectra from homogeneous and inhomogeneous solids, *Journal of Vacuum Science & Technology A* 5 (1987) 1230-1234.

[5] S. Tougaard, Quantitative Analysis of the Inelastic Background in Surface Electron Spectroscopy, *Surface and Interface Analysis* 11 (1988) 453-472.

[6] S. Tougaard, H.S. Hansen, Non-destructive depth profiling through quantitative analysis of surface electron spectra, *Surface and Interface Analysis* 14 (1989) 730-738.

[7] S. Tougaard, Accuracy of the Non-destructive Surface Nanostructure Quantification Technique Based on Analysis of the XPS or AES Peak Shape, *Surface and Interface Analysis* 26 (1998) 249-269.

[8] S. Tougaard, in: D. Briggs, J.T. Grant, [ed.] *Surface Analysis by Auger and X-Ray Photoelectron Spectroscopy*, Chichester, IM-Publications (2003) 295-343.

[9] S. Tougaard, Quantitative x-ray photoelectron spectroscopy: Simple algorithm to determine the amount of atoms in the outermost few nanometers, *Journal of Vacuum Science & Technology A* 21 (2003) 1081-1086.

[10] S. Tougaard, Algorithm for automatic x-ray photoelectron spectroscopy data processing and x-ray photoelectron spectroscopy imaging, *Journal of Vacuum Science & Technology A* 23 (2005) 741-745.

[11] S. Tanuma, C.J. Powell, D.R. Penn, Calculations of electron inelastic mean free paths. II. Data for 27 elements over the 50–

نتیجه‌گیری

در این کار، آنالیز شکل قله ایکس‌پی‌اس که برای توصیف دقیق نانوساختارهای فلزی درآمیخته با پلیمر به‌کار می‌رود، با موفقیت بهینه‌سازی شده است. توزیع عمقی دقیق نانوسیم استوانه‌ای طلای درآمیخته با پلیمر تنها از تحلیل یک طیف و با لحاظ تراورد الکترون مربوط به هر دو مؤلفه فلزی و پلیمری به‌طور دقیق به‌دست آمد. این بدان معنی است که روشی بسیار ساده و غیر مخرب برای تصویربرداری سه بعدی غیر مستقیم ایکس‌پی‌اس برای شناسایی در خط نانوساختارهای سطحی دو مؤلفه‌ای شامل فلز و پلیمر ایجاد شده است که می‌تواند روشی بسیار مناسب برای استفاده در خطوط کنترل کیفیت تولید چنین نانوساختارهای سطحی باشد.

سپاس‌گزاری

از سون توگارد (از دانشگاه SDU دانمارک) به خاطر در اختیار قرار دادن نرم‌افزار مورد استفاده کمال تشکر به‌عمل می‌آید.

مرجع‌ها

[1] K.L. Mittal, [ed.] *Metalized plastics: Fundamentals and Applications*, Marcel Dekker, New York (1998).

[2] S. Tougaard, Surface nanostructure determination by x-ray photoemission spectroscopy peak shape analysis, *Journal of Vacuum Science & Technology A* 14 (1996) 1415-1423.

[3] S. Tougaard, Composition depth information from the inelastic background

- [20] S. Tougaard, Software package for Quantitative XPS/AES of Surface Nanostructures by Peak Shape Analysis, [Online] 5.1 QUASES, (1994-2005). (www.quases.com).
- 2000 eV range, *Surface and Interface Analysis* 17 (1991) 911-926.
- [12] S. Tanuma, C.J. Powell, D.R. Penn, Calculations of electron inelastic mean free paths. V. Data for 14 organic compounds over the 50–2000 eV range, *Surface and Interface Analysis* 21 (1994) 165-176.
- [13] S. Hajati, S. Coultas, C. Blomfield, S. Tougaard, XPS imaging of depth profiles and amount of substance based on Tougaard's algorithm, *Surface Science* 600 (2006) 3015-3021.
- [14] S. Hajati, S. Tougaard, J. Walton, N. Fairley, Noise reduction procedures applied to XPS imaging of depth distribution of atoms on the nanoscale, *Surface Science* 602 (2008) 3064-3070.
- [15] S. Hajati, S. Coultas, C. Blomfield, S. Tougaard, Nondestructive quantitative XPS imaging of depth distribution of atoms on the nanoscale, *Surface and Interface Analysis* 40 (2008) 688-691.
- [16] S. Hajati, S. Tougaard, XPS for non-destructive depth profiling and 3D imaging of surface nanostructures, *Anal. Bioanal. Chem* 396 (2010) 2741–2755.
- [17] S. Hajati, V. Zaporozhchenko, F. Faupel, S. Tougaard, Characterization of Au nano-cluster formation on and diffusion in polystyrene using XPS peak shape analysis, *Surface Science* 601 (2007) 3261-3267.
- [18] D. Briggs, J.T. Grant, in: D. Briggs, J.T. Grant, [ed.] *Surface Analysis by Auger and Photoelectron Spectroscopy*, IM Publications, Chichester, (2003).
- [19] J.C. Riviere, S. Myhra, [ed.] *Handbook of Surface and Interface Analysis: Methods for Problem-solving*, 2nd edition, CRC Press, Boca Raton (2009).

Study of Modified weighted density approximation functional theory: Freezing of simple liquids

Alireza Razeghizadeh*

Department of Physics, Faculty of Science, Payame Noor University, Iran

Abstract

In this paper fusion liquid-solid phase by numerical method using weighted density functional theory (*MWDA*), hard-sphere potential model (*HS*) and function (*PY*) by calculating total free energy of liquid metals such as sodium, magnesium and aluminum for the first time has been studied.

Then we calculated the amount of density of the solid and liquid coexist using free energy graph according to density of hard-sphere fluid and solids fcc, bcc and hcp which these results good agreement with Mont Carlo simulation results and other Previous works. Finally we study stability lattices fcc, bcc and hcp, according to their energy.

Keywords: Modified weighted density approximation, Helmholtz free energy, Hard sphere potential model, Freezing

*Corresponding Author: razeghizadeh@yahoo.com