

شبیه‌سازی رشد لایه‌های مورب تلورید کادمیوم و سولفید روی و مقایسه آن با نتایج تجربی

محمد حسین احسانی*، میرکاظم عمرانی، مهران مین‌باشی، رضا زارعی‌مقدم

گروه فیزیک، دانشکده فیزیک، دانشگاه سمنان، سمنان، ایران

تاریخ دریافت: ۱۳۹۵/۰۸/۰۱ ویرایش نهائی: ۱۳۹۵/۱۲/۰۴ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۵/۱۲/۲۳

چکیده

این پژوهش به شبیه‌سازی لایه‌های ستونی مورب (GLAD) تلورید کادمیوم و سولفید روی با زاویه‌های رشد مختلف بر روی زیرلایه شیشه پرداخته است. نتایج به‌دست آمده از طراحی با نتایج تجربی مقایسه شد. برای شبیه‌سازی فرآیند رشد در این تحقیق از کد شبیه‌سازی NASCAM استفاده شد. این کد بر اساس مدل مونت کارلو کار می‌کند. ابتدا با استفاده از نرم‌افزار SRIM و SIMTRA انرژی و زاویه ذراتی که به سمت زیرلایه حرکت می‌کنند و مدت زمان حرکت محاسبه می‌شود. پس از آن، این فایل به‌عنوان ورودی برای NASCAM برای محاسبه ساختار لایه‌ها استفاده می‌شود. برای نمایش ساختار لایه‌های شبیه‌سازی شده، اطلاعات خروجی نرم‌افزار NASCAM به نرم‌افزارهای JMOL و PoreSTAT داده شد. نتایج این شبیه‌سازی با نتایج تجربی مقایسه شد و ملاحظه شد که از لحاظ زاویه و ساختار مطابقت خوبی دارند.

کلیدواژگان: لایه‌های ستونی مورب، زیرلایه شیشه، کد شبیه‌سازی NASCAM

مقدمه

بار بیش از صد سال پیش گزارش شد [۱، ۲]، اما تا سال ۱۹۷۰ تمرکز بر روی میکروساختارهای ستونی از این لایه‌ها و عوامل کنترل آن توسعه داده نشده بود [۳]، [۴]. پس از این مراحل اولیه، ۲۰ تا ۲۵ سال طول کشید که شاهد کاربرد سیستماتیک از لایه‌نشانی زاویه مورب برای توسعه انواع مختلفی از دستگاه‌ها در زمینه‌هایی مانند فناوری حسگر، سلول‌های فتوولتائیک، مغناطیس، وسایل نوری، الکتروشیمیایی و تجزیه‌باشیم که همگی نیازمند کنترل دقیق بر تخلخل، ناهمسانگردی و یا بافت بلورشناسی از لایه است. انتشار تعداد قابل توجهی از مقالات و کتاب‌ها [۵-۹] در طول این دوره که مستند سازی خوبی در رابطه با زمینه اصول و اثرات علمی/فناوری این روش به‌شمار می‌رود به‌وضوح نشان می‌دهد که جامعه علمی علاقه زیادی به این موضوع

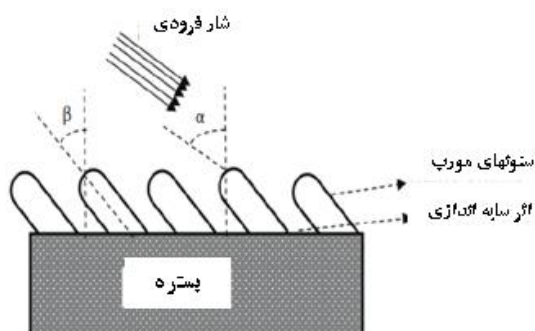
مهندسی سطح یک حوزه فناوری است که به لطف بهره علمی و صنعتی بالا مجموعه زیادی از کاربردها را در برمی‌گیرد. علاوه بر حوزه‌های کلاسیکی مانند اپتیک، تریبولوژی^۱ و محافظت در برابر خوردگی/سایش، که در آنها تراکم زیاد و تخلخل کم از موارد مهم مورد نیاز میکروساختاری هستند، ظهور فناوری‌های پدید آمده به لایه‌های متخلخل نیاز دارد که روش‌های لایه‌نشانی لایه نازک با هدف افزایش این ویژگی‌های ریخت‌شناسی^۲ توسعه داده شود. یک نمونه رویکرد تجربی در این زمینه استفاده از یک پیکربندی هندسی زاویه مورب در طول فرآیند لایه‌نشانی است. مدارک و شواهد از تخلخل بالا، رشد لایه‌های ناهمسانگرد نوری با استفاده از این روش برای اولین

* نویسنده مسئول: Ehsani@semnan.ac.ir

¹ Tribology

² Morphologic

بخار برخوردی با زیرلایه نیست. زاویه زیرلایه نسبت به شار بخار را با α و زاویه رشد ستون‌ها را با β نشان می‌دهند. معمولاً زاویه β از زاویه α کمتر است. در



شکل ۲ نحوه رشد لایه‌ها و همچنین زاویه زیرلایه با شار بخار و زاویه رشد ستون‌ها نشان داده شده است [۱۶].

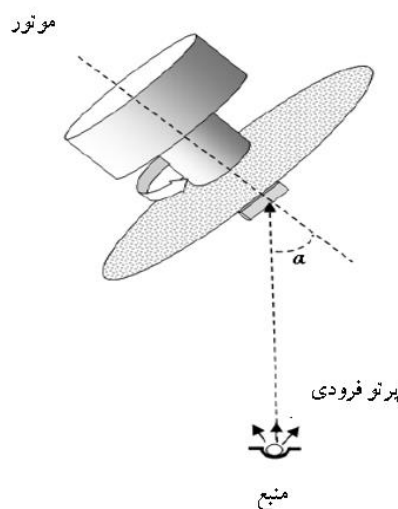
شکل ۲. نحوه رشد لایه و همچنین زاویه شار بخار نسبت به زیرلایه α و زاویه رشد ستون‌ها [۱۶].

روابط مختلفی برای توضیح این رفتار پیشنهاد شده است، اما داده‌های تجربی نشان می‌دهند که وابستگی بین شیب ستون‌ها و زاویه شار بخار فرودی نسبت به صفحه زیرلایه نمی‌تواند تنها با یک رابطه توصیف شود. عوامل مختلفی مانند درجه حرارت زیرلایه، نرخ رسوب، فشار در زمان لایه‌نشانی، نوع و نحوه آماده سازی زیرلایه روی این مقدار تأثیر می‌گذارد. در این شرایط رابطه عمومی با قانون \tan ساخته می‌شود [۱۸]:

$$\tan \beta = \frac{1}{2} \tan \alpha \quad ۱$$

اگر چه ارائه قانون \tan یکی از تلاش‌های اولیه برای توصیف داده‌های تجربی بود اما این قانون برای زوایای کمتر از ۵۰ درجه شار بخار فرودی نسبت به زیرلایه تقریباً مناسب است [۱۹]. تعمیم قانون \tan با اضافه

دارند. لایه‌های ستونی مورب GLAD^۱ توسط روش‌های مختلفی از جمله کندوپاش مگنترون [۱۰]، لایه‌نشانی تبخیر شیمیایی [۱۱]، لایه‌نشانی تبخیر فیزیکی توسط بوتله حرارتی و تفنگ الکترونی [۱۴]–[۱۲]، لایه‌نشانی لیزر پالسی [۱۵]، ... انجام می‌شود. سازوکار چرخش زیرلایه در روش GLAD توسط موتوری که در پشت زیرلایه قرار گرفته در شکل ۱ آورده شده است [۱۶].



شکل ۱. مکانیزم چرخش زیرلایه توسط موتور [۱۶].

اساس مهندسی لایه‌های نازک در GLAD، به پدیده سایه‌اندازی برمی‌گردد. به منظور بهینه کردن و کنترل اثر سایه‌اندازی در فرآیند رشد، تنظیم پارامتر شار بخار ورودی بسیار حائز اهمیت است. دو راهکار اساسی برای دستیابی به شار تنظیم شده در این فرآیند وجود دارد: فاصله زیاد بین چشمه و زیرلایه و استفاده از موانع فیزیکی برای همسو کردن شار بخار [۱۷]. همان‌طور که در شکل ۲ مشاهده می‌شود، زاویه ستون‌های رشد داده شده دقیقاً همان اندازه زاویه شار

^۱ Glancing Angle Deposition

می‌شود. سپس ساختار و زاویه‌های شبیه‌سازی شده لایه‌ها با نتایج تجربی مقایسه می‌شود.

شبیه‌سازی

برای شبیه‌سازی در این تحقیق از کد شبیه‌سازی لایه‌نشانی NASCAM بر اساس مدل مونت کارلو استفاده شده است. این نرم‌افزار می‌تواند فرآیندهای مختلف انجام شده بر روی سطح مانند رشد لایه‌های نازک را شبیه‌سازی کند [۲۵]. در این نرم‌افزار همه شرایط انجام آزمایش اعمال می‌شود، که می‌توان از جمله آن به زاویه لایه‌نشانی، سرعت لایه‌نشانی، چرخش منبع اشاره کرد. از ویژگی‌های خاص NASCAM می‌توان به توانایی چرخش زیرلایه، حرکت جابجایی و اعمال زاویه به زیرلایه اشاره کرد. بنابراین به کمک این نرم‌افزار می‌توان لایه‌هایی با رشد زاویه‌ای مورب یا به صورت زیگ‌زاگی شبیه‌سازی کرد. در کار حاضر، زیرلایه به صورت زاویه‌دار نسبت به منبع در نظر گرفته شده است. ابتدا با استفاده از نرم‌افزار SRIM [۲۶] انرژی و زاویه ذراتی که به سمت زیرلایه حرکت می‌کنند را به دست می‌آوریم. سپس این ذرات در فاز گازی با استفاده از کد SIMTRA [۲۷] مدت زمان بین دو برخورد برای گونه‌ها و مولکول‌های مختلف پراکنده، محاسبه می‌شود. پس از آن، این فایل به عنوان ورودی برای NASCAM استفاده می‌شود. دیگر پارامترها مانند تعداد اتم‌ها، اندازه زیرلایه، سرعت لایه‌نشانی را نیز می‌توان در ورودی (با توجه به شرایط انجام آزمایش) تنظیم کرد. نمونه‌ای از ورودی نرم‌افزار NASCAM برای شبیه‌سازی تلورید کادمیوم در این پروژه در شکل ۳ آورده شده است.

کردن یک پارامتر اتصال به دست می‌آید که برای زوایای بالاتر قابل استفاده است:

$$\beta = \alpha - \sin^{-1}\left(\frac{1 - \cos \alpha}{2}\right) \quad ۲$$

اگرچه این قوانین می‌توانند تا یک تقریب مرتبه اول رفتار مورد انتظار β را ارائه کنند، ولی رفتار واقعی لایه‌های GLAD می‌تواند با عوامل مختلفی مانند افزایش دمای زیرلایه، کاهش فشار محفظه لایه نشانی می‌تواند روی تغییر اندازه β موثر باشد [۲۰، ۲۱]. نیم‌رساناهای گروه II-IV کاربردهای مختلفی در وسایل الکترونیکی نوری همانند تلفیق‌گرهای الکتریکی-نوری، پوشش‌های نوری دارند [۲۲]. سولفید روی یکی از مهم‌ترین مواد گروه II-IV است که گاف نواری پهنی (۳/۶-۳/۹ الکترون‌ولت) دارد [۲۰، ۲۱]. ضریب شکست بالا و همچنین ضریب جذب نوری پایین در ناحیه طول‌موجی مرئی و فروسرخ باعث شده که سولفید روی در ساخت پوشش‌های نوری بسیار پرکاربرد باشد. در سال‌های اخیر مواد تلورید کادمیوم CdTe بس‌بلور با در نظر گرفتن اینکه گاف نواری مستقیم (۱/۴۵ الکترون‌ولت) و ضریب جذب بالایی دارد در ساخت سلول‌های خورشیدی بسیار مورد توجه بوده است [۲۳]. همچنین گزارشاتی مبنی بر اینکه روش GLAD می‌تواند باعث بهبود پارامترهای اپتیکی لایه‌های نیم‌رسانا شود داده شده است [۲۴]. همچنین احسانی و همکاران نشان داده‌اند که با رشد لایه‌های تلورید کادمیوم به صورت زیگ‌زاگی ضریب جذب افزایش و ضریب شکست کاهش یافته است [۱۶].

در این تحقیق شبیه‌سازی لایه‌های تلورید کادمیوم و سولفید روی به صورت مورب و زیگ‌زاگی انجام و در نهایت با نتایج تجربی مقایسه می‌شود. ابتدا شبیه‌سازی لایه‌ها با استفاده از کد شبیه‌سازی NASCAM انجام

ساختار لایه‌ها که با استفاده از نرم‌افزارهای JMOL و PoreSTAT به دست آمد نشان داده شده است.

کارهای آزمایشگاهی

در این تحقیق از نتایج تجربی که توسط احسانی و همکاران انجام گرفته بود جهت مقایسه با نتایج شبیه‌سازی مورد استفاده قرار گرفت [۱۲،۱۶]. ساخت لایه‌های کادمیوم تلورید و سولفید روی به شرح زیر انجام گرفته بود. ابتدا زیرلایه‌ها با استفاده از استون و درون حمام التراسونیک شستشو شدند و بعد از آن توسط گاز نیتروژن خشک شدند. لایه‌ها توسط دستگاه لایه‌نشانی Hind-HiVac (مدل 15F6) بر روی زیرلایه شیشه لایه‌نشانی شدند. قبل از شروع فرآیند لایه‌نشانی، زیرلایه‌ها در معرض اشعه ماورای بنفش قرار گرفتند. مواد تلورید کادمیوم و سولفید روی با خلوص ۹۹٫۹۹ درصد مورد استفاده قرار گرفتند. فشار محفظه لایه‌نشانی برای تلورید کادمیوم و سولفید روی حدود 5×10^{-5} میلی‌بار انتخاب شد. نرخ لایه‌نشانی برای تلورید کادمیوم ۱۰ آنگستروم بر ثانیه و برای سولفید روی ۵ آنگستروم بر ثانیه در نظر گرفته شد. ضخامت لایه‌ها با استفاده از بلور ضخامت‌سنج کوآرتز کنترل شد. شرایط لایه‌نشانی لایه‌ها در جدول ۱ آورده شده است. لایه تلورید کادمیوم در زاویه‌های ۰ و ۲۰ و ۷۰ و لایه سولفید روی در زاویه‌های ۰ و ۶۰ و ۸۰ لایه‌نشانی شد. جهت تعیین ضخامت لایه‌ها، ساختارهای مورب ستون‌ها و ساختارهای زیگ‌زاگی لایه‌ها از آزمون میکروسکوپ الکترونی روشی گسیل میدانی^۱ (FESEM) استفاده شد [۱۲،۱۶].

```
!
! GLAD: input for simulate CdTe thin film
!
!|-----
Substrate_type           0
Dimensions                400 10 400 200000 0
Deposition_rate,(ML/s)   0.05
Correction                 1.0
masked_deposition        0
pattern_name              LARN.txt
linear_movement           0 0.05
Ea_diff,(eV)             1.70
Ea_nn_inc,(eV)           1.9
Ea_nn_dec,(eV)           1.9
Ea_detach,(eV)           1.95
Ea_up,(eV)               2.0
Ea_down,(eV)             0.95
Ea_detrapp,(eV)          4.5
Ea_sub_evap,(eV)         4.5
Ea_lay_evap,(eV)         4.5
Temp,(eV)                0.022
save_data                 0      100
Energy_source_type        1 1
Mean_Energy_of_both_incident_atoms,(eV) 0.029 0.029
Energy_to_create_surface_defect,(eV) 3.0
Atomic_displacement_energy_of_growing_film,(eV) 3.0
Energy_file               E_DST.txt histo_gas.txt
Angular_source            1 1
Teta0,phi0,dteta(deg)    70 0 1
Teta02,phi02,dteta2(deg) 0 0 0
Angular_file              A_DST2_45.TXT A_DST2.TXT
Rotation:w_rot(1/s);A_osc(deg);w_osc(1/s) 0.0 0 4.5
Gas_conc                  0.0
Species                   SiO2 CdTe Ar
Masses,(a.e.)             60.1 240.01 40.0
Forced_deposition         1e12
```

شکل ۳. نمونه‌ای از ورودی نرم‌افزار NASCAM برای شبیه‌سازی تلورید کادمیوم.

شبیه‌سازی برای سولفید روی در زاویه‌های ۰ و ۶۰ و ۸۰ درجه انجام گرفت. زاویه رشد ستون‌ها با استفاده از نرم‌افزار در نهایت به ترتیب ۰ و ۴۰٫۴۶ و ۵۶٫۷۳ به دست آمد (جدول ۱). همچنین شبیه‌سازی برای تلورید کادمیوم در زاویه‌های ۰ و ۲۰ و ۷۰ درجه انجام گرفت. زاویه رشد لایه‌ها با استفاده از نرم‌افزار در نهایت به ترتیب ۰ و ۱۰٫۶۳ و ۵۱٫۷۱ به دست آمد (جدول ۲). برای نمایش ساختار لایه‌های شبیه‌سازی شده، اطلاعات خروجی نرم‌افزار NASCAM به نرم‌افزارهای JMOL و PoreSTAT داده شد. در شکل

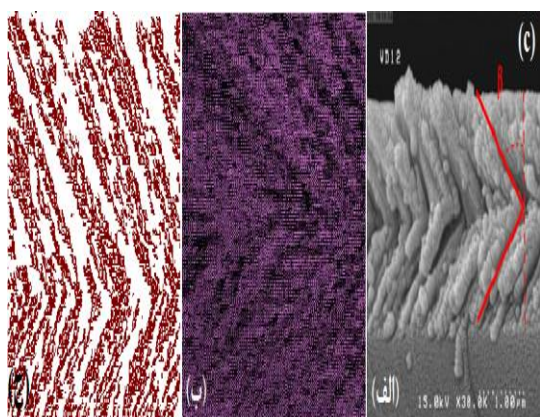
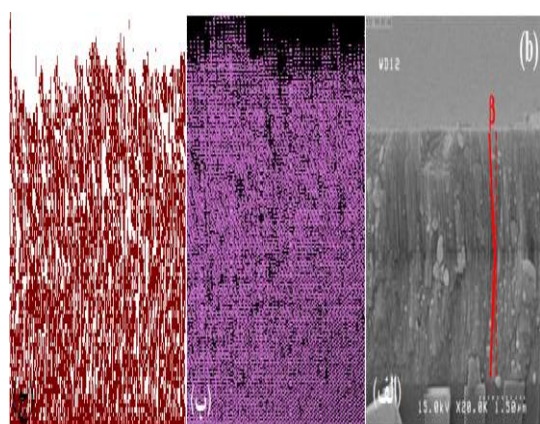
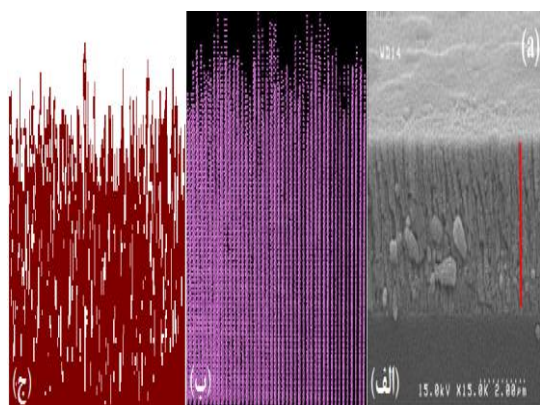
^۱ Field emission scanning electron microscopy

جدول ۱. شرایط لایه‌نشانی لایه‌ها [۱۲،۱۶].

دمای زیرلایه (°C)	نرخ لایه‌نشانی 0 (Å/s)	فشار (لایه‌نشانی) (mbar)	فاصله زیرلایه تا هدف (cm)	مواد
دمای اتاق	۱۰	5×10^{-5}	۱۵	تلورید کادمیوم
	۵		۲۵	سولفید روی

نتایج و بحث

شبیه‌سازی ساختار لایه‌ها توسط نرم‌افزار NASCAM انجام شد. تصاویر ساختار لایه‌های شبیه‌سازی شده توسط نرم‌افزارهای JMOL و PoreSTAT به‌دست آمد. جهت مقایسه لایه‌های شبیه‌سازی شده و ساخته شده، تصاویر به‌دست آمده توسط نرم‌افزار و توسط FESEM [۱۲،۱۶] در کنار هم در شکل‌های ۴ و ۵ قرار گرفتند. در شکل ۴ تصاویر FESEM [۱۲،۱۶] و JMOL و PoreSTAT از لایه تلورید کادمیوم در زاویه‌های (a) ۰ درجه و (b) ۲۰ درجه و (c) ۷۰ درجه آورده شده است. در شکل ۵ قسمت الف تصویر عرضی FESEM [۱۲،۱۶]، قسمت ب خروجی نرم‌افزار JMOL و قسمت ج خروجی نرم‌افزار PoreSTAT است. در شکل ۵ تصاویر FESEM [۱۲،۱۶] و JMOL و PoreSTAT از لایه سولفید روی در زاویه‌های (a) ۰ درجه و (b) ۶۰ درجه و (c) ۸۰ درجه آورده شده است. در شکل ۵ قسمت الف تصویر عرضی FESEM [۱۲،۱۶]، عرضی و قسمت ب خروجی نرم‌افزار JMOL و قسمت ج خروجی نرم‌افزار PoreSTAT است.



شکل ۴. تصاویر FESEM و JMOL و PoreSTAT از لایه تلورید کادمیوم در زاویه‌های (a) ۰ درجه و (b) ۲۰ درجه و (c) ۷۰ درجه. قسمت الف تصویر عرضی FESEM لایه‌ها، قسمت ب خروجی نرم‌افزار JMOL و قسمت ج خروجی نرم‌افزار PoreSTAT است.

شده بسیار به زاویه رشد لایه‌ها بعد از لایه‌نشانی نزدیک است. در جدول ۳ زاویه‌های شبیه‌سازی و لایه‌نشانی قبل و بعد از انجام لایه‌نشانی سولفید روی آورده شده است. این نتایج نشان می‌دهند که زاویه لایه‌های شبیه‌سازی شده بسیار به زاویه رشد لایه‌ها بعد از لایه‌نشانی نزدیک است.

جدول ۲. نتایج زاویه‌های شبیه‌سازی شده و تجربی [۱۲،۱۶] قبل و بعد از رشد لایه‌های تلورید کادمیوم

زاویه لایه‌نشانی α (درجه) [۱۲]	زاویه رشد (درجه) β		ضخامت نهایی (μm)
	داده های تجربی [۱۲]	داده های شبیه سازی شده در این کار	
۰	۰	۰	۳
۲۰	۱۰،۳۱	۱۰،۶۳	۳
۷۰	۵۰،۷۹	۵۱،۷۱	۲

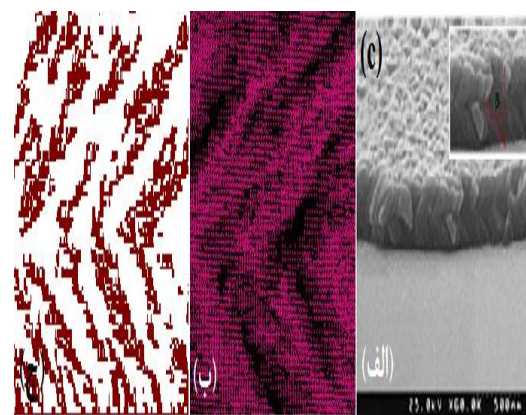
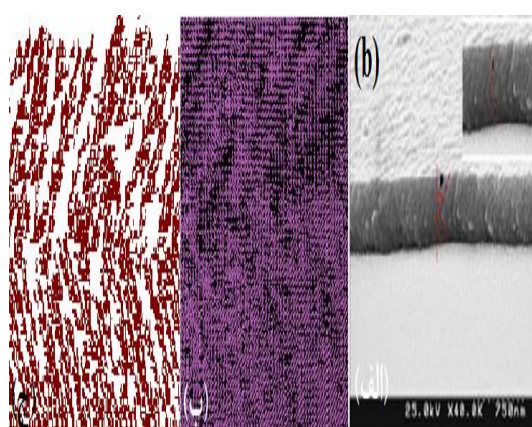
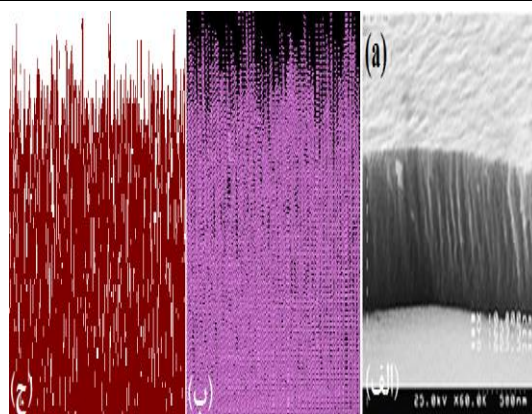
جدول ۳. نتایج زاویه‌های شبیه‌سازی شده و تجربی قبل و بعد از رشد لایه‌های سولفید روی

زاویه لایه‌نشانی α (درجه) [۱۶]	زاویه رشد (درجه) β		ضخامت نهایی (μm)
	داده های تجربی [۱۶]	داده های شبیه سازی شده در این کار	
۰	۰	۰	۶۰۰
۶۰	۴۰،۸۹	۴۰،۴۶	۴۵۰
۸۰	۵۵،۵۹	۵۶،۷۳	۳۰۰

با مقایسه تصاویر و زاویه‌های به‌دست آمده توسط نرم‌افزار و تصاویر و زاویه‌های به‌دست آمده توسط آزمون FESEM [۱۲،۱۶] می‌توان به این نتیجه دست یافت که شبیه‌سازی لایه‌ها توسط نرم‌افزار بسیار به لایه‌های ساخته شده نزدیک است.

نتیجه گیری

در این تحقیق لایه‌های مورب تلورید کادمیوم و سولفید روی در زاویه‌های مختلف توسط نرم افزار



شکل ۶. تصاویر FESEM و JMOL و PoreSTAT از لایه سولفید روی در زاویه‌های (a) ۰ درجه و (b) ۶۰ درجه و (c) ۸۰ درجه. قسمت الف تصویر عرضی FESEM لایه‌ها، قسمت ب خروجی نرم‌افزار JMOL و قسمت ج خروجی نرم‌افزار PoreSTAT است.

در جدول ۲ زاویه‌های شبیه‌سازی و لایه‌نشانی قبل و بعد از انجام لایه‌نشانی تلورید کادمیوم آورده شده است. این نتایج نشان می‌دهد که زاویه لایه‌های شبیه‌سازی

A.J. Hart, Engineering of micro and nanostructured surfaces with anisotropic geometries and properties, *Advanced Materials* **24** (2012)1628–74.

[7] Y. He, Y. Zhao, Advanced multi-component nanostructures designed by dynamic shadowing Growth, *Nanoscale* **3** (2011) 2361–75.

[8] A. Lakhtakia, R. Messier, Sculptured thin films: nanoengineered morphology and optics Bellingham, WA: *SPIE press* **122** (2005).

[9] M.M. Hawkeye, M. T.Taschuk, M.J. Brett, *Glancing angle deposition of thin films: engineering the nanoscale*, John Wiley & Sons, (2014).

[10] J. Musil, P. Baroch, J. Vlček, K.H. Nam, J.G. Han. Reactive magnetron sputtering of thin films: present status and trends, *Thin solid films* **475.1** (2005) 208-218.

[11] S. Samukawa, M. Hori, SH. Rauf, K. Tachibana, P. Bruggeman, G. Kroesen, J.C. Whitehead, A.B. Murphy, A.F. Gutsol, S. Starikovskaia, U. Kortshagen, The 2012 plasma roadmap, *Applied physics* **45** (2012) 253001.

[12] S.Z. Rahchamani, H. Rezagholipour Dizaji, M.H. Ehsani, Study of structural and optical properties of ZnS zigzag nanostructured thin films, *Applied Surface Science* **356** (2015) 1096-1104.

[13] W. Szmaja, W. Kozłowski, J. Balcerski, P.J. Kowalczyk, J. Grobelny, M. Cichomski. Study of obliquely deposited thin cobalt films. *Alloys and compounds* **506** (2010) 526–529.

[14] L. Chen, L. Andrea, Y.P. Timalisina, G.C. Wang, T.M. Lu, Engineering epitaxial-

NASCAM بر اساس مدل مونت کارلو شبیه‌سازی شد و در نهایت با نتایج تجربی مقایسه شد. از نرم‌افزارهای SIMTRA و SRIM به‌عنوان فایل ورودی NASCAM مورد استفاده قرار گرفت. اطلاعات خروجی نرم‌افزار NASCAM به نرم‌افزارهای JMOL و PoreSTAT داده شد و ساختار لایه‌های شبیه‌سازی شده نمایش داده شد. بعد از انجام شبیه‌سازی، از داده‌های تجربی جهت مقایسه استفاده شد. مقایسه تصاویر و زاویه‌های به‌دست آمده با استفاده از شبیه‌سازی و نتایج به‌دست آمده از آزمون FESEM. نشان می‌دهد که هم ساختار لایه‌ها و هم زاویه‌ها با هم تطابق خوبی دارند.

مرجع‌ها

[1] F. Kaempf, Größe und Ursache der Doppelbrechung in Kundtschen Spiegeln und Erzeugung von Doppelbrechung in Metallspiegeln durch Zug, *Annalen der Physik* **321** (1905) 308-333.

[2] C. Bergholm, Über doppelbrechung in kathoden zerstäubten metallsuchten, *Annalen der Physik* **348** (1913)1–23.

[3] H. König, G. Helwig, Über die Struktur schräg aufgedampfter Schichten und ihr Einfluß auf die Entwicklung submikroskopischer Oberflächenrauigkeiten, *Optik* **6** (1950) 111-124.

[4] O.N. Young, J. Kowal, Optically active fluorite films, *Nature* **183** (1959) 104-105.

[5] M.T. Taschuk, M.M. Hawkeye, M.J. Brett, *Glancing angle deposition. Handbook of Deposition Technologies for Films and Coatings* (2010) 621-678.

[6] S. Tawfick, M. Volder, D. Copic, S .J. Park, C.R. Oliver, E.S. Polsen, M.J. Roberts,

- [22] X. Wu, F. Lai, L. Lin, J. Lv, B. Zhuang, Q. Yan, Z. Huang, Optical inhomogeneity of ZnS films deposited by thermal evaporation, *Applied Surface Science*, **254** (2008) 6455–6460.
- [23] A.A. Al-Ghamdi, S.A. Khan, A. Nagat, M.A. El-Sadek. Synthesis and optical characterization of nanocrystalline CdTe thin films. *Optics & Laser Technology*, **42** (2010) 1181-1186.
- [24] X. Xiao, G. Dong, J. Shao, H. He and Z. Fan. Optical and electrical properties of SnO 2: Sb thin films deposited by oblique angle deposition. *Applied Surface Science*, **256** (2010) 1636-1640.
- [25] NASCAM, <http://www.unamur.be/sciences/physique/pm/telechargement/logiciels/nascam>.
- [26] S. Lucas, P. Moskovkin. Simulation at high temperature of atomic deposition, islands coalescence, Ostwald and inverse Ostwald ripening with a general simple kinetic Monte Carlo code. *Thin Solid Films*, **518** (2010) 5355-5361.
- [27] K.V. Aeken, SIMTRA www.draft.ugent.be/
- nanospiral metal films using dynamic oblique angle deposition. *Crystal Growth* **13** (2013) 2075–80.
- [15] R. Eason, editor. Pulsed laser deposition of thin films. Hoboken, New Jersey, *John Wiley & Sons*, (2007).
- [16] M.H. Ehsani, H. Rezagholipour Dizaji, S. Azizi, S.F. Ghavami Mirmahalle, F. Hosseini Siyanaki, Optical and structural properties of cadmium telluride films grown by glancing angle deposition, *Physica Scripta* **88** (2013) 025602-025608.
- [17] E.S. Goh, T.P. Chen, S.F. Huang, Y.C. Liu, C.Q. Sun, Bandgap expansion and dielectric suppression of self-assembled Ge nanocrystals. *Applied Physics*, **109** (2011) 064307.
- [18] I. Hodgkinson, Q.h. Wu, J. Hazel, Empirical equations for the principal refractive indices and column angle of obliquely deposited films of tantalum oxide, titanium oxide, and zirconium oxide. *Applied optics*, **37** (1998) 2653-2659.
- [19] T. Hashimoto, K. Okamoto, K. Hara, M. Kamiya, H. Fujiwara. Columnar structure and texture of iron films evaporated at oblique incidence. *Thin Solid Films* **91** (1982) 145-154.
- [20] K. Okamoto, T. Hashimoto, K. Hara, M. Kamiya, H. Fujiwara. Columnar structure and texture of iron films prepared at various evaporation rates. *Thin Solid Films* **147** (1987) 299-311.
- [21] K. Okamoto, K. Itoh. Incidence angle dependences of columnar grain structure and texture in obliquely deposited iron films. *Japanese journal of applied physics*, **44** (2005) 1382-1388.

Growth simulation oblique layers of cadmium telluride and zinc sulfide as compared with experimental results

Mohammad Hossein Ehsani*, Mirkazem Omrani, Mehran Minbashi, Reza Zarei Moghadam

Faculty of Physics, Semnan University, Semnan, Iran

Received: 22.10.2016 Final revised: 22.02.2017 Accepted: 13.03.2017

Abstract

This research discussed the simulation of the oblique column layers of cadmium telluride and zinc sulfide with different growth angles on glass substrate. The obtained results from the simulation were compared with the experimental results. For the simulation of the growth process, the NASCAM simulation code, that works based on monte carlo, was used. First, using SRIM software and SIMTRA software's, the energy and the particles angle, moving to the substrate, and the movement time are calculated. This file is then used as the input of NASCAM software for calculation of the layer structures. Finally, to show the column, the output data of the NASCAM software was fed into JMOL and PROSTAT software's. The results of the simulation, compared with the experimental results, showed conformity in terms of angle and structure.

Keywords: Oblique column layers, Glass substrate, NASCAM simulation code

* Corresponding Author: Ehsani@semnan.ac.ir