

# การศึกษาเชิงคำนวณของขั้นตอนการดูดซับของแก๊สอลูมิเนียมคลอไรด์ ในกระบวนการอะตอมมิกซ์ เลเยอร์ ดีพอสิชันของฟิล์มบางอลูมิเนียมออกไซด์

## Computational Study of the Adsorption Step of Aluminum Chloride Gas in the Atomic Layer Deposition Process of Aluminum Oxide Thin Film

พิพัฒน์ นันทจุล<sup>1</sup>, จิรเมธ ชมภูแก้ว<sup>1</sup>, ธนบัตร พรหมจันทร์วสินี<sup>1</sup>, ปรมะรัฐ จันทร์เพ็ง<sup>2</sup>,  
ยุทธนา อุไรชื่น<sup>2</sup>, เสกสรร สุขะเสนา<sup>3</sup> และ ภ.พึ้งบุญ ปานศิลา<sup>1\*</sup>

Pipat Nantajul<sup>1</sup>, Jiramate Chompokeaw<sup>1</sup>, Tanabat Promjun<sup>1</sup>, Poramate Chunpang<sup>2</sup>,  
Yuthana Uraichuen<sup>2</sup>, Seckson Sukhasena<sup>3</sup> and P. Pungboon Pansila<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>หน่วยวิจัยแอแอลดีไทยเทคโนโลยี (ALD ThaiTech) เครือข่ายวิจัยสหวิทยาการเพื่อเทคโนโลยีระดับสูง (iRAT)  
คณะวิทยาศาสตร์ ศรีราชา มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

<sup>2</sup>ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหาสารคาม

<sup>3</sup>เครือข่ายวิจัยสหวิทยาการเพื่อเทคโนโลยีระดับสูง วิทยาลัยเพื่อการค้นคว้าระดับรากฐาน มหาวิทยาลัยนครสวรรค์

<sup>1</sup>Unit Research for Atomic Layer Deposition Thailand Technology (ALD ThaiTech), The Interdisciplinary Research  
for Advance Technology (iRAT) as Research Networks, Faculty of Science at Sriracha, Kasetsart University

<sup>2</sup>Department of Physics, Faculty of Science, Mahasarakham University

<sup>3</sup>The Interdisciplinary Research for Advance Technology (iRAT) as Research Networks,  
The Institute for Fundamental Study, Naresuan University

Received : 21 June 2018

Accepted : 4 December 2018

Published online : 14 December 2018

### บทคัดย่อ

งานวิจัยนี้ได้ศึกษาแบบจำลองการดูดซับโมเลกุลแก๊สอลูมิเนียมคลอไรด์บนพื้นผิวซิลิกอนโดยใช้จุดดูดซับเป็นไฮดรอกซิล ในขั้นตอนการดูดซับของกระบวนการปลูกฟิล์มบางแบบอะตอมมิกซ์ เลเยอร์ ดีพอสิชัน (ALD) ที่อุณหภูมิ 298.1 เคลวิน ลักษณะเฉพาะของการดูดซับคำนวณโดยใช้โปรแกรมเกาส์เซียน 09 (Gaussian 09) เพื่อนำข้อมูลที่ได้จากการศึกษาไปใช้เป็นพื้นฐานของการออกแบบการทดลองในกระบวนการปลูกฟิล์มบางอลูมิเนียมออกไซด์ด้วยวิธีอะตอมมิกซ์ เลเยอร์ ดีพอสิชันที่อุณหภูมิห้อง โดยใช้แก๊สอลูมิเนียมคลอไรด์ ( $AlCl_3$ ) เป็นสารตั้งต้นและใช้ซิลิกอนระนาบ 100 เป็นวัสดุรองรับ จากการคำนวณด้วยโปรแกรมเกาส์เซียนพบว่ามีความเป็นไปได้ที่แก๊สอลูมิเนียมคลอไรด์จะถูกดูดซับบนจุดดูดซับ -OH บนผิวซิลิกอนที่อุณหภูมิห้องโดยมีโครงสร้างแบบ  $Si_9H_{12}O_2AlCl$  นอกจากนี้ บทความนี้ยังรายงานลักษณะเฉพาะของการดูดซับแก๊สอลูมิเนียม และความถี่การสั่นของอะตอมอลูมิเนียมกับคลอรีนในย่านความถี่อินฟราเรดด้วย

**คำสำคัญ :** แบบจำลองการดูดซับ, อลูมิเนียมคลอไรด์, ซิลิกอน, เกาส์เซียน, อะตอมมิกซ์ เลเยอร์ ดีพอสิชัน

\*Corresponding author. E-mail : p.pungboon@gmail.com

## Abstract

This research purpose is to study the adsorption model of aluminum chloride gas on the silicon surface using hydroxylated silicon as the adsorption site in the adsorption step of atomic layer deposition (ALD) at low temperature. The characteristic of surface adsorption is calculated by Gaussian 09 package to utilize as the database in designing adsorption step in the ALD process.  $AlCl_3$  is used as the aluminium source and Si(100) is a substrate. Base on the Gaussian calculation, it is found  $AlCH_3$  possible to adsorb on the surface using -OH adsorption site as the  $Si_9H_{12}O_2AlCl$  structure at room temperature. Besides, this paper reports the adsorption characteristic and the vibrational frequency of aluminium and chlorine atom in the infrared region as well.

**Keywords:** adsorption model,  $AlCl_3$ , Silicon, Gaussian, atomic layer deposition

## บทนำ

ปัจจุบันเทคโนโลยีใหม่ได้พัฒนาอย่างรวดเร็วเพื่อตอบสนองต่อความต้องการที่หลากหลาย ประเทศไทยได้ก้าวสู่วงการอุตสาหกรรมใหม่ก่อให้เกิดเทคโนโลยีและผลิตภัณฑ์รูปแบบใหม่ ๆ โดยเฉพาะอย่างยิ่งเทคโนโลยีการปลูกฟิล์มบางเป็นการปรับปรุงสมบัติเชิงพื้นผิววิธีหนึ่ง ที่มีประสิทธิภาพและกำลังได้รับความสนใจจากกลุ่มนักวิจัยต่าง ๆ ซึ่งฟิล์มบางถูกนำไปใช้งานกันอย่างกว้างขวาง เช่น เพิ่มความแข็งแรงของชิ้นงานเคลือบเครื่องประดับลดการกัดกร่อนของผิววัสดุ ฯลฯ เพื่อเพิ่มความหลากหลายของผลิตภัณฑ์จากฟิล์มบาง และช่วยเพิ่มมูลค่าแก่ผลิตภัณฑ์อีกด้วย นอกจากนี้ยังมีการนำฟิล์มบางมาใช้งานด้านต่าง ๆ มากมาย เช่น ใช้ในอุตสาหกรรมรถยนต์ และกระจกตกแต่งอาคาร (Witt-anuna, 2001)

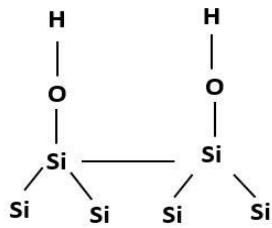
ฟิล์มบาง (Thin films) หมายถึง ชั้นของอะตอมหรือกลุ่มของอะตอมที่จับรวมกันเรียงตัวอยู่บนชิ้นงานเป็นชั้นบาง ๆ บนวัสดุรองรับ ซึ่งความหนาอยู่ในระดับนาโนเมตรจนถึงในระดับไมโครเมตรฟิล์มบางคุณภาพสูงส่วนใหญ่จะสังเคราะห์ด้วยกระบวนการเคลือบในสุญญากาศ (Smith, 1995) การเตรียมฟิล์มบางสามารถทำได้หลายวิธี เช่น การปลูกฟิล์มบางทางกายภาพ (Physical Vapor Deposition: PVD) การปลูกฟิล์มบางทางเคมี (Chemical Vapor Deposition: CVD) และการปลูกฟิล์มบางแบบอะตอมมิกซ์ เลเยอร์ ดีพอสิชัน (ALD) งานวิจัยนี้สนใจการปลูกฟิล์มบางด้วยวิธี ALD ซึ่งเป็นวิธีหนึ่งของกระบวนการปลูกฟิล์มบางทางเคมี (CVD) ข้อดีของการปลูกฟิล์มบางด้วยวิธี ALD คือ สามารถปลูกฟิล์มบางลงบนชิ้นงานสามมิติได้สามารถปลูกฟิล์มบางที่ชิ้นงานมีความซับซ้อนสูงได้ สามารถปลูกชั้นฟิล์มบนชิ้นงานขนาดใหญ่ได้อย่างต่อเนื่องสม่ำเสมอ ได้ฟิล์มบางคุณภาพสูงและสามารถกำหนดความหนาของฟิล์มได้อย่างแม่นยำในระดับอะตอม นอกจากนี้ฟิล์มบางที่ได้มีความทนทานและมีสมบัติการยึดเกาะดี (Smith, 1995) การปลูกฟิล์มด้วยวิธี ALD เป็น การปลูกฟิล์มบางที่อาศัยการตกสะสมของไอสารเคมีของสารตั้งต้นในรูปแบบแก๊ส สารตั้งต้นเหล่านี้จะถูกดูดซับบนพื้นผิวของวัสดุรองรับจนอิ่มตัว จากนั้นทำปฏิกิริยาบนผิวด้วยสารไวปฏิกิริยาเพื่อให้ได้ชั้นฟิล์มที่ต้องการ กระบวนการปลูกฟิล์มบางแบบอะตอมมิกซ์ เลเยอร์ ดีพอสิชัน ประกอบด้วย 4 ขั้นตอนสำคัญ คือ 1) ขั้นตอนการดูดซับ (Adsorption) เกิดปฏิกิริยาแบบ self-terminating reaction ของสารตั้งต้น จนแก๊สนั้นอิ่มตัวบนผิววัสดุรองรับ 2) ขั้นตอนการเคลื่อนย้ายแก๊สที่เหลือจากการดูดซับ (Evacuation) ขั้นตอนนี้คือการนำโมเลกุลแก๊สที่เหลือจากการดูดซับออกจากระบบปลูกฟิล์ม 3) ขั้นตอนการทำปฏิกิริยา (Reaction) คือ ขั้นตอนการใช้แก๊สไวปฏิกิริยาเข้าทำปฏิกิริยากับสารตั้งต้นที่อิ่มตัวอยู่บนผิววัสดุ และ 4) ขั้นตอนการเคลื่อนย้ายแก๊สที่เหลือจากการดูดซับ (Evacuation) ขั้นตอนนี้คือการนำโมเลกุลแก๊สที่เหลือจาก

การทำปฏิกิริยาและสารผลิตภัณฑ์ที่เกิดจากกระบวนการออกจากระบบปลูกฟิล์ม (George, 2010, Riikka & Puurunen, 2005)

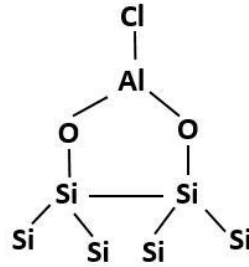
โดยทั่วไปแล้วสมบัติและโครงสร้างของฟิล์มบางที่ปลูกได้จะขึ้นอยู่กับกระบวนการที่ใช้ และเงื่อนไขในการปลูกฟิล์ม ซึ่งนักวิจัยหลายกลุ่มได้ทำการศึกษาเงื่อนไขในกระบวนการปลูกฟิล์มบางอลูมิเนียมออกไซด์และอลูมิเนียมไนไตรด์ ด้วยวิธีต่าง ๆ เช่น Petri และคณะ (2002) ได้ศึกษาการปลูกฟิล์มบางอลูมิเนียมออกไซด์ ( $Al_2O_3$ ) โดยใช้แก๊ส  $AlCl_3$  และ  $Al(OiPr)_3$  เป็นสารตั้งต้น ด้วยวิธี ALD โดยใช้อุณหภูมิช่วง 150-375 องศาเซลเซียส พบว่าที่อุณหภูมิ 300 องศาเซลเซียส ฟิล์มอลูมิเนียมออกไซด์มีอัตราการเติบโตประมาณ 0.8 อังสตรอมต่อรอบ (Petri *et al.*, 2002) ในปี 2011 Ozgit และคณะ รายงานการศึกษาการปลูกฟิล์มบางอลูมิเนียมไนไตรด์ (AlN) บนพื้นผิว Si(100) ที่อุณหภูมิต่ำ ด้วยวิธี ALD โดยใช้แก๊สไตรเมทิลอลูมิเนียม ( $Al(CH_3)_3$ ) และแก๊สแอมโมเนีย ( $NH_3$ ) เป็นสารตั้งต้น และ สารไวปฏิกิริยา ตามลำดับ พบว่าที่อุณหภูมิ การปลูกในช่วง 100-200 องศาเซลเซียส ฟิล์มบางที่ได้มีอัตราการเจริญเติบโตประมาณ 0.86 อังสตรอมต่อรอบ (Ozgit *et al.*, 2011) ในปีเดียวกันนั้น Alevli และคณะได้รายงานการศึกษาผลของอุณหภูมิต่อกระบวนการปลูกฟิล์มบาง AlN ด้วยวิธี ALD บนพื้นผิว Si(100) ด้วยกระบวนการพลาสมาอะตอมิกซ์ เลเยอร์ ดีพอสิชัน (PEALD) โดยใช้ไตรเมทิลอลูมิเนียมและแอมโมเนีย ( $NH_3$ ) เป็นสารตั้งต้น และ สารไวปฏิกิริยา ตามลำดับ (Alevli *et al.*, 2011) จากการศึกษา งานวิจัยต่าง ๆ ที่ได้กล่าวมานั้นยังไม่พบการศึกษาแบบจำลองของขั้นตอนการดูดซับสารตั้งต้นที่เป็นแก๊สของขั้นตอนการดูดซับสารตั้งต้นในกระบวนการ ALD บนผิว Si(100) ด้วยวิธีการคำนวณทางคอมพิวเตอร์ ในงานนี้ ผู้วิจัยสนใจศึกษาการดูดซับแก๊สอลูมิเนียมไตรคลอไรด์บนผิว Si(100) เพื่อทำนายพฤติกรรมการดูดซับในขั้นตอนการดูดซับของกระบวนการ ALD ที่อุณหภูมิห้อง โดยจำลองการดูดซับแบบต่าง ๆ โดยการคำนวณปริมาณที่เกี่ยวข้องด้วยทฤษฎีเด้นซิตีฟังก์ชัน (density functional theory) ผ่านโปรแกรมเกาส์เซียน 09 เพื่อนำข้อมูลที่ได้ไปใช้สำหรับการออกแบบขั้นตอนการดูดซับในการปลูกฟิล์มบางของสารประกอบอลูมิเนียมออกไซด์ด้วยวิธี ALD ต่อไป

### วิธีดำเนินการวิจัย

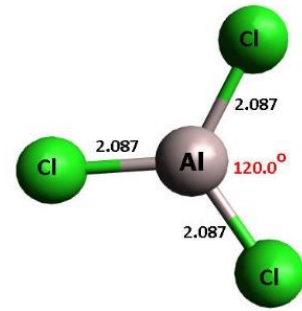
งานวิจัยนี้ใช้แก๊ส  $AlCl_3$  เป็นสารตั้งต้นและใช้ซิลิกอนระนาบ 100 เป็นวัสดุรองรับการคำนวณจะกำหนดให้  $AlCl_3$  ดูดซับบน Si(100)(2x1) ที่อุณหภูมิห้อง 298.1 เคลวิน และใช้โปรแกรมเกาส์เซียน 09 (Frisch *et al.*, 2010) ในการคำนวณด้วยทฤษฎีเด้นซิตีฟังก์ชัน B3LYP และ เบซิสเซต 6-31G(d, p) ใช้โปรแกรม Avogadro Chemistry (Hanwell *et al.*, 2012) ในการออกแบบจำลองโครงสร้างอะตอมและพันธะเคมี ใช้จุด -OH บนผิว Si(100)(2x1) ใช้ไอโซโทปของอะตอมไฮโดรเจน 28 เท่าของมวลไฮโดรเจนเพื่อถ่วงอะตอมไฮโดรเจนให้มีมวลใกล้เคียงกับซิลิกอนและช่วยในการทำให้คู่ของอิเล็กตรอนในโครงสร้างซิลิกอนถูกต้อง และใช้ค่าถ่วงน้ำหนักเท่ากับ 0.9610 เพื่อทำให้ความถี่ในการสั่นโมเลกุลถูกต้องกับผลการคำนวณที่ได้ ใช้รูปแบบซิลิกอนโมเลกุล  $Si_9H_{12}$  วัสดุรองรับดังตามภาพที่ 1 และออกแบบการดูดซับแก๊ส  $AlCl_3$  บนจุดดูดซับ -OH บนผิวหน้า Si(100) เป็นโครงสร้างแสดงดังภาพที่ 2



ภาพที่ 1 แบบจำลองจุดการดูดซับ -OH บนผิวหน้า Si(100)



ภาพที่ 2 แบบจำลองจุดการดูดซับแก๊ส  $AlCl_3$  บนจุดดูดซับ -OH บนผิวหน้า Si(100)

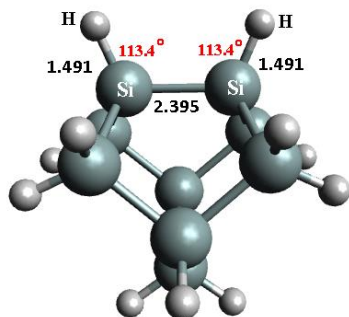


ภาพที่ 3 โครงสร้างแก๊ส  $AlCl_3$

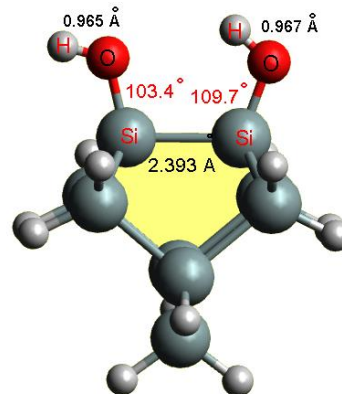
**ผลการวิจัยและวิจารณ์ผล**

ผลคำนวณลักษณะเฉพาะของโครงสร้างสารตั้งต้นแก๊สอลูมิเนียมคลอไรด์พบว่า มุมระหว่างพันธะ Cl-Al-Cl เท่ากับ 120 องศา ระยะห่างระหว่างอะตอม Al และอะตอม Cl มีค่าเท่ากับ 2.087 อังสตรอม ดังแสดงในภาพที่ 3 ส่วนผลการคำนวณลักษณะเฉพาะของโครงสร้างของวัสดุรองรับ Si(100)พบว่า มุมระหว่างพันธะ H-Si-Si เท่ากับ 113.4 องศา ระยะห่างระหว่าง Si-Si มีค่าเท่ากับ 2.395 อังสตรอม และระยะห่างระหว่าง Si-H มีค่าเท่ากับ 1.491 อังสตรอม ดังแสดงในภาพที่ 4

สำหรับแบบจำลองจุดดูดซับของ -OH บน Si(100) โครงสร้าง  $Si_9H_{12}(OH)_2$  พบว่ามีมุมระหว่างพันธะของ O-Si-Si เท่ากับ 103.4 องศา มุมระหว่างพันธะของ Si-O-H เท่ากับ 109.7 องศา และมีระยะห่างระหว่าง Si-Si เท่ากับ 2.393 อังสตรอม ซึ่งจะเห็นว่าระยะห่างระหว่างอะตอม Si บนชั้นที่หนึ่งของโครงสร้างซิลิกอนไดเมอร์เปลี่ยนแปลงไป ซึ่งอาจสันนิษฐานว่าเกิดจากผลของการดูดซับของอะตอมออกซิเจนที่มีมวลมาก นอกจากนี้ยังพบว่าระยะห่างระหว่าง Si-O มีค่าเท่ากับ 1.694 และ 1.683 อังสตรอมและระยะห่างระหว่าง O-H มีค่า 0.965 และ 0.967 อังสตรอม ดังแสดงในภาพที่ 5 ค่าพลังงานอิสระกิบส์ (Gibbs free energy) เท่ากับ -8.91 กิโลจูลต่อโมล ซึ่งจากค่าพลังงานอิสระกิบส์ที่ได้จากการคำนวณสามารถอนุมานได้ว่า -OH สามารถดูดซับบน Si(100) ได้ที่อุณหภูมิห้อง ซึ่งการสั่นของโครงสร้าง  $Si_2(O-H)_2$  ของอะตอมของออกซิเจนและไฮโดรเจนบนผิว Si(100) ในความถี่ย่านอินฟราเรดของโหมดการสั่นต่าง ๆ ตามแบบจำลองการดูดซับแสดงรายละเอียดไว้ในตารางที่ 1 ลูกศรสีเขียวแสดงทิศการเคลื่อนที่ของอะตอม

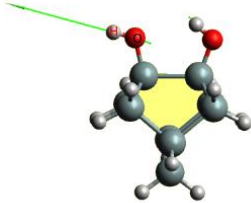
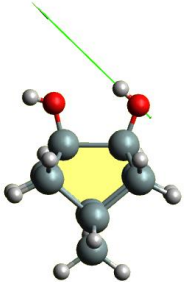
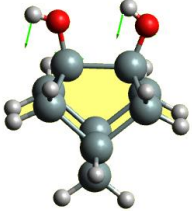
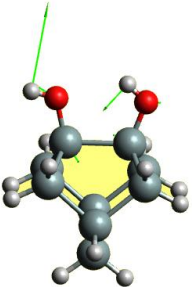
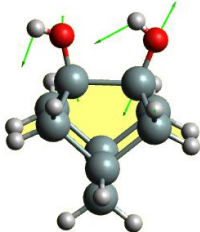
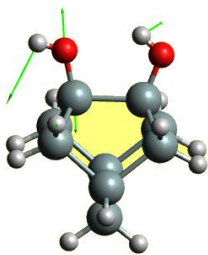


ภาพที่ 4 โครงสร้างของ Si(100)

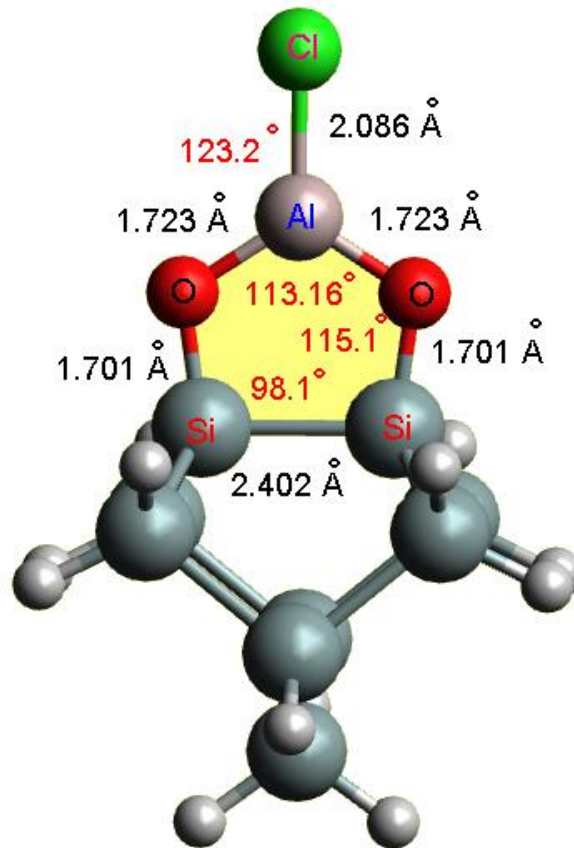


ภาพที่ 5 จุดดูดซับของ -OH บนผิวหน้า Si(100)

ตารางที่ 1 ลักษณะเฉพาะการสั่นของอะตอม -OH ที่ดูดซับอยู่บนผิวหน้า Si(100)

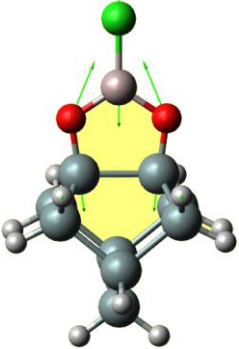
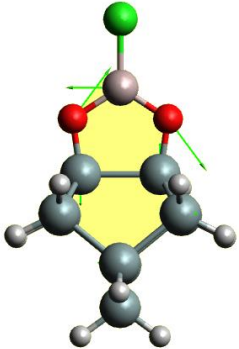
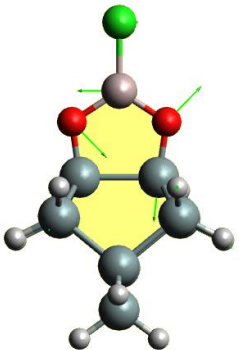
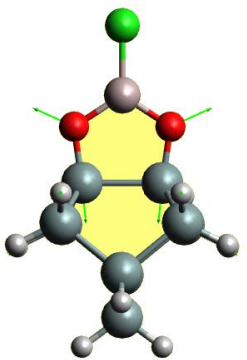
แบบจำลองโมเลกุล	รูปแบบการสั่น	เลขคลื่น ( $\text{cm}^{-1}$ )
	Stretching mode	3709.67
	Stretching mode	3684.45
	Bending mode	898.23
	Bending mode	843.61
	Bending mode	800.80
	Bending mode	772.04

จากผลการคำนวณด้วยโปรแกรมเกาส์เซียนด้วยวิธี B3LYP กับเบซิสเซต 6-31G(d, p) ของแบบจำลองการดูดซับแก๊ส  $\text{AlCl}_3$  บนจุดดูดซับ -OH ที่ผิว  $\text{Si}(100)$  โครงสร้าง  $\text{Si}_9\text{H}_{12}\text{O}_2\text{AlCl}$  พบว่ามีมุมระหว่าง O-Si-Si เท่ากับ 98.1 องศา มุมระหว่าง Si-O-Al เท่ากับ 115.1 องศา มุมระหว่าง O-Al-Cl เท่ากับ 123.2 องศา และมีระยะห่างระหว่างอะตอมคู่ Si-Si เท่ากับ 2.402 อังสตรอม ระยะห่างระหว่าง Si-O เท่ากับ 1.701 อังสตรอม ระยะห่างระหว่าง O-Al เท่ากับ 1.723 อังสตรอม และมีระยะห่างระหว่าง Al-Cl เท่ากับ 2.086 อังสตรอม ดังแสดงในภาพที่ 6 โดยพบว่าพลังงานอิสระกิบส์มีค่าเท่ากับ -57.60 กิโลจูลต่อโมล ซึ่งอาจอนุมานได้ว่าโครงสร้าง  $\text{Si}_9\text{H}_{12}\text{O}_2\text{AlCl}$  อาจเกิดได้ที่อุณหภูมิห้อง เพื่อที่จะพิจารณาค่าความถี่ของการสั่นระหว่างอะตอมของ Al และอะตอมของ Cl ในย่านอินฟราเรด ของโครงสร้าง  $\text{Si}_9\text{H}_{12}\text{O}_2\text{AlCl}$  เพื่อนำไปเป็นแนวทางในการทดลองเพื่อยืนยันการมีอยู่ของ Al-Cl ที่ดูดซับอยู่บนผิวซิลิกอนในระบบการปลูกฟิล์มบางด้วยวิธี ALD การคำนวณด้วยวิธี B3LYP ให้ค่าการสั่นของอะตอมคู่ Al-Cl ที่ดูดซับบนซิลิกอนโดยมีออกซิเจนเป็นตัวเชื่อมไว้ดังแสดงในตารางที่ 2 ซึ่งพบว่ารูปแบบการสั่นของอะตอมหน้าระหว่างอะตอมของซิลิกอน ออกซิเจน อลูมิเนียม และคลอรีน มีการสั่นแบบผสมระหว่างโหมดการสั่น Stretching และ โหมด Bending ซึ่งในที่นี้จะแสดงค่าการสั่นที่มีความเข้มข้นอินฟราเรดที่มีค่ามากกว่า  $500\text{ cm}^{-1}$  ซึ่งเป็นค่าที่สามารถวัดได้โดยการทดลองด้วยเครื่องอินฟราเรดสเปกโตรมิเตอร์โหมดการดูดกลืนร่วมกับชิ้นงานที่ให้สัญญาณอินฟราเรดแบบสะท้อนกลับภายใน



ภาพที่ 6 จุดดูดซับแก๊ส  $\text{AlCl}_3$  บนจุดดูดซับ -OH ที่ผิวหน้า  $\text{Si}(100)$

ตารางที่ 2 ลักษณะการการสั่นของอะตอม  $\text{AlCl}_3$  ที่ถูกดูดซับบน -OH ที่ผิวหน้า  $\text{Si}(100)$  รูปแบบโครงสร้าง  $\text{Si}_9\text{H}_{12}\text{O}_2\text{AlCl}$

แบบจำลองโมเลกุล	รูปแบบการสั่น	เลขคลื่น ( $\text{cm}^{-1}$ )
	Al-Cl (Stretching mode) and Al-O-Si (Asymmetric stretching mode)	872.23
	Al-Cl (Bending mode) and Al-O-Si (Asymmetric stretching mode)	842.62
	Al-Cl (Bending mode) and Al-O-Si: (Asymmetric stretching mode)	718.58
	Si-O (Bending + Stretching mode) and Al-Cl (stretching mode)	706.31

## สรุปผลการวิจัย

จากผลการศึกษาพบว่าค่าความหนาแน่นเชิงตัวเลขของปริมาณทางฟิสิกส์โดยใช้วิธี B3LYP โดยใช้โปรแกรม เกาส์เซียนมีความสามารถในการทำนายลักษณะเฉพาะของการดูดซับแก๊สออกซิเจนบนซิลิกอนโดยใช้จุดดูดซับไฮดรอกซิลในกระบวนการปลูกฟิล์มบางด้วยวิธีอะตอมมิกซ์ เลเยอร์ ดีพอสิชัน ผลการคำนวณให้ค่าลักษณะเฉพาะของรูปแบบการดูดซับและความถี่การสั่นของไฮดรอกซิลและแก๊สออกซิเจนบนซิลิกอนในยานอวกาศ ข้อมูลที่ได้สามารถนำไปเป็นข้อมูลพื้นฐานสำหรับการทดลองปลูกฟิล์มบางออกซิเจนออกไซด์ได้อย่างมีประสิทธิภาพจากค่าพลังงานอิสระกิบส์อาจทำนายได้ว่าแก๊สออกซิเจนบนซิลิกอนสามารถเกิดการดูดซับบนซิลิกอนในขั้นตอนการดูดซับของกระบวนการอะตอมมิกซ์ เลเยอร์ ดีพอสิชันได้ที่อุณหภูมิห้อง ซึ่งการทำนายนี้จะเป็นประโยชน์ต่อการออกแบบการทดลองปลูกฟิล์มบางออกซิเจนออกไซด์ที่อุณหภูมิต่ำบนวัสดุรองรับที่ไม่ทนต่ออุณหภูมิสูง เช่น พลาสติกประเภทต่าง ๆ สำหรับอุตสาหกรรมอาหารหรืออุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์แบบงอได้ต่อไป

## กิตติกรรมประกาศ

ขอขอบคุณคณะวิทยาศาสตร์ ศรีราชา มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ ที่มอบทุนสนับสนุนบางส่วนในงานวิจัยนี้ ขอขอบคุณวิทยาลัยเพื่อการค้นคว้าระดับรากฐาน มหาวิทยาลัยนเรศวร และภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยมหาสารคามที่สนับสนุนด้านการคำนวณ และสถานที่ปฏิบัติการวิจัย ขอขอบคุณนางสาววศินี ชัยวงศ์ และนางสาวอัจฉราวดี ทองดี ที่ให้ความช่วยเหลือบางส่วนในงานวิจัยนี้

## เอกสารอ้างอิง

- Alevli, M., Ozgit, C., Donmez, I. (2011). The Influence of Growth Temperature on the Properties of AlN Films Grown by Atomic Layer Deposition. *Acta Physica Polonica*, 120(6-A), 58-60.
- Frisch, M.J., Trucks, G.W., Schlegel, H.B., Scuseria, G.E., Robb, M.A., Cheeseman, J.R., Scalmani, G., Barone, V., Mennucci, B., Petersson, G.A., Nakatsuji, H., Caricato, M., Li, X., Hratchian, H.P., Izmaylov, A.F., Bloino, J., Zheng, G., Sonnenberg, J.L., Hada, M., Ehara, M., Toyota, K., Fukuda, R., Hasegawa, J., Ishida, M., Nakajima, T., Honda, Y., Kitao, O., Nakai, H., Vreven, T., Montgomery, J.A., Peralta, Jr., J. E., Ogliaro, F., Bearpark, M., Heyd, J.J., Brothers, E., Kudin, K.N., Staroverov, V. N., Keith, T., Kobayashi, R., Normand, J., Raghavachari, K., Rendell, A., Burant, J.C., Iyengar, S.S., Tomasi, J., Cossi, M., Rega, N., Millam, J.M., Klene, M., Knox, J.E., Cross, J.B., Bakken, V., Adamo, C., Jaramillo, J., Gomperts, R., Stratmann, R.E., Yazyev, O., Austin, A.J., Cammi, R., Pomelli, C., Ochterski, J.W., Martin, R.L., Morokuma, K., Zakrzewski, V.G., Voth, G.A., Salvador, P., Dannenberg, J.J., Dapprich, S., Daniels, A.D., Farkas, O., Foresman, J.B., Ortiz, J.V., Cioslowski, J., and Fox, D.J. (2010). *Gaussian 09, Inc., Wallingford CT*, Revision B.01.
- George, S. M. (2010). Atomic Layer Deposition: An Overview. *Chemical Reviews*, 110 (1), 111-131.
- Hanwell, M.D., Curtis, D., Loni, D.C., Vandermeersch, T., Zurek, E., Hutchison, G.R. (2012). Avogadro: an advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform. *Journal of Cheminformatics*, 4, 1-17.



- Ozgit, C., Donmez, I., Alevli, M., Biyikli, B. (2011). Self-limiting low-temperature growth of crystalline AlN thin films by plasma-enhanced atomic layer deposition. *Thin Solid Films*, 520, 2750–2755.
- Petri, I.R., Mikko, R.L., Markku, L.A. (2002). Atomic layer deposition of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> films using AlCl<sub>3</sub> and Al(O<sup>i</sup>Pr)<sub>3</sub> as precursors., *Department of Chemistry*, University of Helsinki, P.O. Box 55.
- Riikka, L., Puurunen. (2005). Surface chemistry of atomic layer deposition: a case study for the trimethylaluminum/ water process, *Applied Physics*, 97, 1-54.
- Smith, D.L. (1995). *Thin-film deposition: principle and practice*, New York: McGraw-Hill.
- Witit-anuna, N., Chaiyakun, S., Limsuwan, P., and Chewpraditkul, W. (2001). Thickness Measurement of Gold Film Coating on Glass Substrate by X-Ray Fluorescence Technique, *KMUTT Research and Development Journal*, 3, 299-310, (in Thai)