

Characterization of the nucleation and growth of nanoparticles by post-implantation annealing

Kun-Dar Li, Kwanyu Chen, Zhong-Long Chang, Shun-Kai Hsu*

Department of Materials Science, National University of Tainan, Tainan, Taiwan

Abstract — Nano-scale materials, such as nanoparticles, are widely applied in various high-potential techniques due to their unique chemical and physical properties. In this study, a phase field model and numerical simulations were applied to reconstruct the formation and evolutions of nanoparticles, e.g. the nucleation and growth process, including Ostwald ripening, induced by post-implantation annealing. Integrating with this theoretical model and Monte-Carlo TRIM calculation, the effects of the implantation parameters, such as ion dose, ion energy and annealing temperature, on the nucleation and growth kinetics of nanoparticles were also investigated. This study provides various simulation results with different implantation parameters and material properties, which well characterizes the evolutions and behaviors for the nucleation and growth of the nanoparticles during post-implantation annealing. That is useful to develop the unique and valuable nanostructured materials, and further facilitates the technological utilizations of post-implantation annealing process.

Index Terms — Post-implantation annealing, nanoparticles, phase field model, nucleation and growth kinetics



* Corresponding author:

kundar@mail.nutn.edu.tw

DOI : 10.6159/IJSE.2015.(5-3).02

佈植後退火之奈米粒子成核成長特性研究

李昆達*、陳冠仔、張宗龍、許舜凱

國立臺南大學 材料科學系

摘要

奈米粒子擁有獨特的化學與物理特性，被廣泛地應用在各領域之中。本研究以相場法(Phase Field Method)所建立之理論模型與數值模擬方法，可探討經離子佈植後的退火過程，基材中等向性奈米粒子的形成與演化機制，其中包含奈米粒子隨時間增加其析出相變之成核、成長與奧氏熟化(Ostwald ripening)的過程。結合 Monte Carlo TRIM 離子佈植的模擬計算，分析不同製程條件參數下，如佈植離子劑量、離子能量和退火製程溫度等，對奈米粒子微觀結構之演化與成核成長動力學特性的影響。本理論模型提供不同佈植參數和材料特性的模擬結果，預測經佈植後退火奈米粒子之成核成長與演化特性。可用以發展具特殊形貌與應用價值之奈米結構材料，增加佈植退火製程在奈米技術中的應用性。

關鍵字:佈植後退火、奈米粒子、相場理論、成核成長動力學

壹、前言

當物質在縮小到奈米尺寸後，其原有材料特性將有別於塊材尺度，擁有獨特的物理和化學特性，例如磁性[1]、熔點[2]、熱阻[3]、光學性能[4]、電學位能[5]、表面能、化學活性和催化性等等。這些特殊的性質可應用在各種具有高度前景的科技上，使得近年來吸引了大批科學家投入研究。藉由不同的化學或物理方式，可製備出不同形態的奈米材料，如奈米粒子、奈米線、奈米柱等。目前已有許多技術方法被開發用於奈米粒子的合成與製作，如水熱法(Hydrothermal)、溶膠-凝膠法(Sol-gel)、濺射(Sputtering)、離子佈植法(Ion implantation)、離子交換法(Ion exchange)等等[6]。在各式不同物理或化學製備奈米粒子的方法中，離子佈植的製程技術提供乾淨、可控制的加工過程，並能精確控制摻雜離子在基材表面位置之分佈與

濃度，是一種極具潛力的工具，也是近年來較新穎的表面改質與摻雜技術[7-9]，因此廣泛地應用於表面工程、光電、半導體製程領域。

離子佈植技術是藉由離子加速器，將高能量離子植入基材表面附近的特定區域，以達到表面摻雜的目的。相較於傳統的擴散摻雜，佈植技術能提供過飽和狀態之摻雜濃度與幾乎適用所有元素種類的摻雜，使其成為形成熱力學上非平衡相和材料特性改質的重要手段。透過佈植後的退火(Annealing)過程，可消除基材內部因佈植過程所形成之輻照損傷，並同時讓摻雜原子藉由擴散聚集、成核，析出於基材表面附近，形成奈米粒子。經過佈植後退火形成奈米粒子的反應機制，大致上可分為幾個階段，分別為佈植後的過飽和狀態、析出成核、成長和奧氏熟化(Ostwald ripening)等過程[10]。在佈植離子與基材原子互不相溶的情況下，能經由控制製程參數，如離子劑量或能量、退火溫度、基材種類等，或使用不同類型之退火製程，如快速熱退火(Rapid thermal annealing)、急遽退火(Spike annealing)或雷射退火等方式，可形成不同尺寸、形貌及各種亞穩相結構的奈米粒子、團簇或帶狀微觀結構[11]。而由此法合成之奈米複合材料，因為奈米粒子受到基材相的保護，能免於環境的影響與破壞，擁有更好的機械強度。若再結合其他製程方法，離子佈植技術將能創造更多新型奈米材料。

儘管由離子佈植術合成之奈米粒子具有以上諸多優點，但如何精確控制奈米粒子的粒徑大小、粒徑分佈和表面形貌，以符合後續應用上對材料物理性質、表面光學特性的要求，成為離子佈植技術需要進一步探索與研究的重要課題。因此，本研究基於離子佈植製程技術，利用相場法(Phase field method)建立理論模型，模擬摻雜原子經佈植後退火的擴散過程，基材內部奈米粒子的成核、成長與微觀結構隨時間之演化。配合數值計算參數的改變，釐清佈植製程因素對粒徑大小、分佈與形貌控

制的影響，以便能更清楚了解佈植後退火合成奈米粒子之成核成長機制與特性，增加佈植退火製程在奈米技術中的應用性。

貳、研究方法

一、理論模型

本研究以相場法之數值計算為基礎，重建佈植離子在退火過程中，形成奈米粒子的演化過程，並結合Monte Carlo TRIM的模擬計算來探討，在基材中不同劑量、能量之佈植離子的分佈狀況，對於奈米粒子的成核、成長、粒徑分布與形貌的影響。在本理論模型中，假設系統由基材原子與佈植離子兩種互不相溶的元素所組成，並以系統成分場(Composition field)來表示材料微觀結構。因此，系統的佈植離子濃度可表示為空間和時間之函數， $c(x,t)$ ，其中 x 為空間座標， t 為時間單位。定義 c 的數值範圍介於0到1之間；當其數值接近1時，代表佈植離子之析出相；而當數值接近0時，則代表基材相。根據Cahn-Hilliard方程式[12]得知，佈植離子濃度 $c(x,t)$ 隨時間的變化，可由保守場之擴散方程式加以描述：

$$N \frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \cdot J \quad (1)$$

其中 N 為單位體積中之原子個數、 J 為單位體積佈植離子的流量。此流量由佈植離子化學位勢(chemical potential, μ)的梯度所驅動，如 $J = -MN \nabla \mu$ ，其中 M 為佈植離子之擴散遷移率(Mobility)。若假設在基材內為等向性的遷移率，則 M 為常數係數。依據熱力學定義，化學位勢 μ 由系統之總自由能(G)對組成成份的偏微分獲得($\mu = \partial G / \partial c$)。一般而言，系統之總自由能 G 可分為系統組態自由能與表面能，如下所示[12]：

$$G = \int_V [g(c) + \frac{\gamma}{2} |\nabla c|^2] dV \quad (2)$$

其中 $g(c)$ 為系統組態自由能、 V 為系統體積、 γ 為界面能係數。當系統為等向性(isotropic)界面能時， γ 為材料相關常數。在不互溶之系統中，系統組態自由能又常以具有雙井

(Double-well)形式之常規溶液(Regular solution)的自由能來表示[13]：

$$g(c) = g_i c + g_m (1 - c) + N k_B T [c \ln c + (1 - c) \ln(1 - c)] + N \Omega c (1 - c) \quad (3)$$

其中 g_i 為單位體積之佈植原子自由能、 g_m 為單位體積之基材原子自由能、 k_B 為波茲曼常數、 T 為絕對溫度係數、 Ω 為基材原子與佈植原子之鍵結能係數[14]。分別將上述關係式與方程式(2)、(3)，代入方程式(1)中，即可推得： $\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{N}{N^2} \nabla^2 (N k_B T [\ln c - \ln(1 - c)] + N \Omega (1 - 2c) - \gamma^2 \nabla^2 c)$ (4) 為簡化在數值計算時長度與時間尺度因素的影響，定義長度單位為 $h = \gamma (N k_B T)^{-1/2}$ ，以及時間單位為 $\tau = 1/M \cdot (\gamma / k_B T)^2$ ，並將方程式(4)之空間座標和時間分別正規化，可得到正規化之無因次(Dimensionless)方程式：

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} = \nabla^{*2} \left([\ln c - \ln(1 - c)] - \frac{\Omega}{k_B T} (1 - 2c) - \nabla^{*2} c \right) \quad (5)$$

其中，正規化時間 $\tau^* = t / \tau$ ，正規化運算子 $\nabla^* = h \nabla$ 。此方程式(5)可用來描述佈植離子在退火的等向性擴散過程中，奈米粒子隨時間之析出成核、成長與熟化的演化機制。

二、數值計算方法

本研究採用有限體積法(finite volume)來進行二維的數值模擬計算，重現奈米粒子的形成與演化過程。計算網格數大小為 200×200 ，網格之間距大小為 0.5 ，邊界條件為 $x=0$ 、 $x=L$ 、 $y=0$ 和 $x=L$ 之一階導數為 0 。其中， L 為 x 、 y 方向之網格長度。在考慮初始佈植離子分佈條件時，在基材中佈植離子濃度之初始分佈(D)可以高斯分佈曲線來呈現，其佈植離子濃度與空間之關係表示為[15]：

$$I = \frac{I_0}{(2\pi)^2 \Delta R_p} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x_d - R_p}{\Delta R_p} \right)^2 \right] \quad (6)$$

其中， I_0 係數正比於初始佈植離子之總劑量、 x_d 為沿離子植入方向的深度、 R_p 為最大佈植離子濃度值之位置、 ΔR_p 為最大離子濃度之半高寬。本研究中，以 x 軸之正向為離子入射方向，即在模擬圖中離子由左側向右入射。參數 R_p 與 ΔR_p 受佈植離子種類、能量和基材特性等因素影響，可由Monte Carlo TRIM [15]模擬計算獲得。因此，本研究進一步結

合 TRIM 的計算結果，取得在不同離子能量、劑量率等製程下之 R_p 與 ΔR_p 參數，並根據相關文獻 [16-18] 分別獲得數值計算所須之材料特性係數，如 $N=1 \times 10^{-19} \text{m}^{-2}$ 、 $\Omega=1.77 \times 10^{-20} \text{J}$ 、 $\gamma=8 \times 10^{-19} \text{J}$ 、 $T=321 \text{K}$ 等。以便模擬計算能對應實際離子佈植製程條件，如文獻 [19] 之金 (Au) 奈米粒子析出於二氧化矽 (Silica) 基材的實驗，探討製程參數奈米粒子的析出成核、成長與演化的影響。

參、結果與討論

根據上述之理論模型與數值計算方法，圖 1 所示為本研究數值模擬二維離子佈植經退火後奈米粒子的形成及演化過程。如圖 1(a) 所示，經離子佈植後，基材內散佈大量的佈植離子，其散佈配置方式乃根據 TRIM 之模擬結果所得，並呈現高斯分布，且部分高離子濃度的位置已達過飽和的狀態。互不相溶之基材原子與佈植離子在隨後的退火製程中，為降低系統自由能將進行相分離 (Phase separation)，以使得佈植離子逐漸聚集，並析出成核，如圖 1(b)-(c) 所示。由於佈植濃度分佈的關係，局部離子會往過飽和位置擴散、成核，造成大部分析出物接近於佈植離子濃度較高的範圍內。隨退火時間的增長，經擴散形成之析出物吸收更多的佈植離子，而使析出粒子尺寸成長，如圖 1(d)-(e) 所示。在析出物的成長後期，系統為進一步降低粒子表面能，表面擁有較大曲率的小尺寸析出物會逐漸被大尺寸之析出物合併，此即所謂奧氏熟化 (Ostwald ripening) 過程，如圖 1(f) 所示。在圖 1 中清楚重現佈植後退火，奈米粒子之成核、成長機制與演化特性，並與文獻 [19] 於二氧化矽 (Silica) 基材析出奈米金 (Au) 粒子之實驗觀察結果相符。為進一步探討製程參數差異，對奈米粒子結構之形成與演化的影響，本研究接著以此模擬結果作為對照參數，改變佈植離子劑量、退火溫度和佈植離子能量等製程參數來進行數值計算與討論。

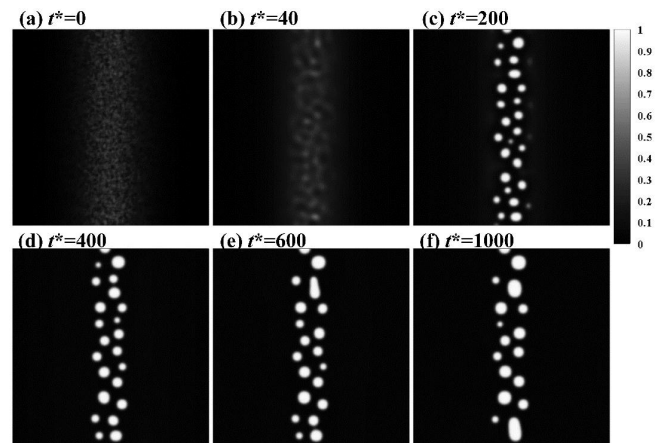


Fig.1 數值模擬佈植後退火奈米粒子之形成與演化過程

一、佈植離子劑量之影響

首先探討佈植離子劑量的影響，假設離子佈植能量不變，使得佈植離子於基材中之相對分佈情況相同。藉由改變方程式 (6) 中的 I_0 ，模擬不同佈植離子總劑量的初始條件，在退火過程中析出粒子之形貌及演化的變化。

圖 2 所示為數值模擬高離子劑量之二維奈米粒子的形成與形貌演化。在高劑量的離子濃度條件下，基材中佈植離子之過飽和程度變大，為降低系統組態自由能，於退火過程中第二相的析出速度加快。同時，基材內出現大量析出粒子的成核，如圖 2(a)-(c) 所示。然而，大量的粒子析出亦造成系統表面能增加，為降低表面能鄰近的析出粒子相互聚集，合併成體積較大之團簇粒子，如圖 2(d)-(e) 所示。在退火後期，組態自由能與表面能的增減逐漸達到平衡，使得析出粒子之成核成長的速度減緩，如圖 2(f) 所示。

圖 3 所示為數值模擬低離子劑量下，二維奈米粒子的形成與形貌演化。低劑量的佈植離子濃度，其固溶體之過飽和程度較低，使得相分離之驅動力較小。因此，在退火初期之析出成核現象較緩慢且不明顯，如圖 3(a)-(c) 所示。隨時間增加，佈植離子逐漸擴散、成核。相較於高離子劑量的情況，少量的析出物在低劑量之基材中形成，並呈現單顆鏈狀排列於佈植離子濃度較高的深度位置，如圖 3(d)-(f)。為定量分析奈米粒子之成核成長相變動力學，本研究分別量測不同佈植

離子劑量下，各退火時間析出物的面積分率，如圖4所示。由圖中之S曲線可知，退火過程所形成的奈米粒子滿足一般典型成核成長相變化曲線。藉由分析奈米粒子面積與退火時間之簡單線性關係，可分別由時間軸之截距以及曲線斜率，評估析出粒子之孕核期與成長速率，以及奈米粒子不同演化階段的分界。圖4顯示在退火過程中奈米粒子從初期過飽和固溶狀態的快速析出，逐漸變化為相分離驅動力減緩的析出飽和狀態。從圖中也可清楚發現在低離子劑量時，孕核期時間較長，成長速率較慢，飽和之析出物面積較低；當離子劑量提升時，所需的析出成核時間變短，且擁有較高的析出成長速率。由圖中獲得定量之孕核期時間、成長速率與飽和析出物面積，與離子劑量之高低比例完全相符。比較圖1(e)-(f)、圖2(d)-(f)、圖3(d)-(f)，與圖4之成核成長曲線亦可知，在成長後期析出粒子的形貌持續合併、長大，但析出物總量並無增加，說明此階段析出粒子以減少與基材間界面面積來降低系統總自由能，在理論模型中由方程式(4)之 $\gamma^2 \nabla^2 c$ 項所影響，而此演化現象即為離子佈植退火實驗[19-21]所觀察之Ostwald Ripening。

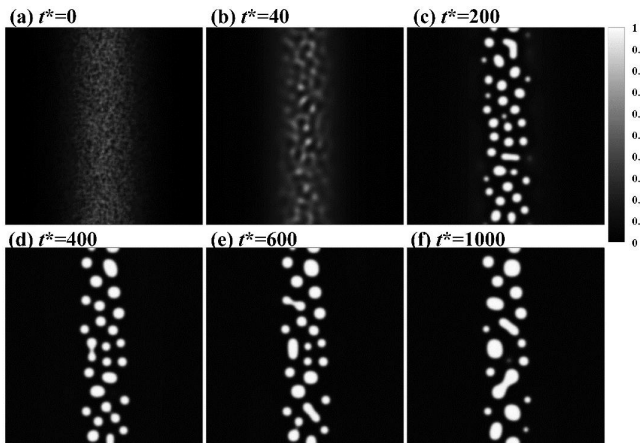


Fig.2 數值模擬高離子劑量下，佈植後退火奈米粒子之形成與演化過程

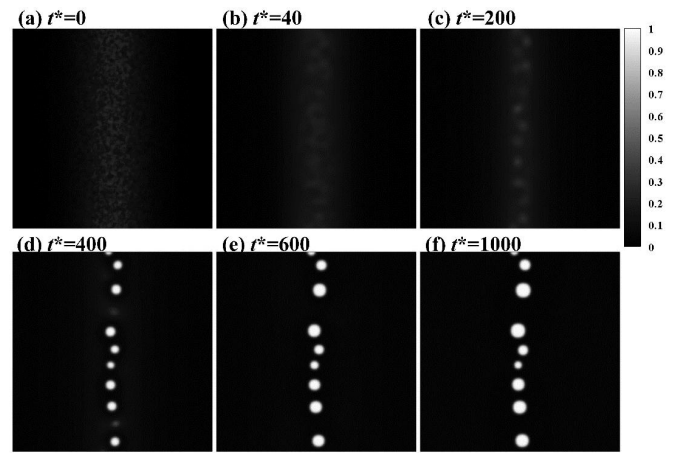


Fig.3 數值模擬低離子劑量下，佈植後退火奈米粒子之形成與演化過程

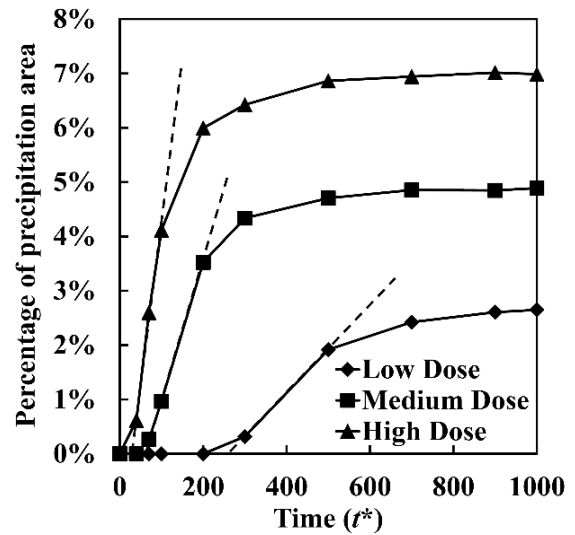


Fig.4 不同劑量下佈植後退火析出面積與時間之關係

二、退火溫度之影響

退火溫度主要會影響佈植離子於基材中的擴散遷移率，而溫度與擴散係數之間的關係，一般呈指數函數形式。在高溫條件下退火，佈植離子有較高的遷移速率，進而促進擴散相分離的進行。本研究針對在不同溫度下，具有與圖1相同離子佈植條件的情況進行數值模擬。

圖5與圖6分別表示為中溫與高溫退火後，奈米粒子之形成與演化的模擬結果。比較圖5(a)-(b)與圖1(a)-(b)的演化過程可以發現，溫度較高時，在較短的時間之內即有析出核的生成；在相同退火時間下，其成核點數量較少，但析出粒子的尺寸較大，如圖5(c)所示。而較高溫度所造成的高

擴散速率，也促進奈米粒子的成長與熟化過程；隨退火時間增加，粒子間的合併行為發生頻繁，最終粒子形貌多為長島狀，且以鏈狀排列於高佈植離子濃度範圍，如圖5(e)-(f)所示。當在更高退火溫度條件下，溫度對奈米粒子成核、成長的影響，同樣具有如上述的演化趨勢，且其變化更加明顯，如圖6(a)-(f)所示。此溫度影響模擬結果亦與文獻[19]實驗觀察一致。

針對不同退火溫度之模擬結果所進行的定量成核成長動力學曲線分析顯示於圖7之中。由圖中可知，隨溫度的提高對析出物的成核成長有很大影響。退火溫度越高，時間軸上之截距越短，表示析出成核時間越早；高曲線斜率顯示析出成長的速率越快，並且迅速達到析出量的飽和狀態。不過，值得注意的是在析出總量上的微小差異。推測可能是高溫使得佈植離子更容易獲得足夠的能量以跨越析出成核成長時的活化能障，使得在析出演化後期，隨退火溫度增加，析出物的總量有些微上升。

之形成與演化過程

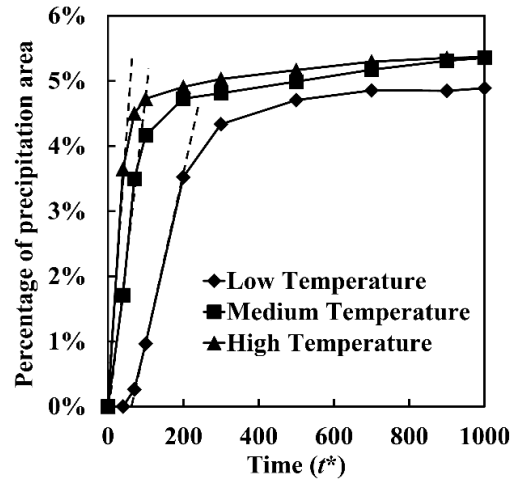


Fig.7 不同溫度之佈植後退火析出面積與時間之關係

三、佈植離子能量之影響

在佈植離子總劑量固定的條件下，佈植離子能量的改變會影響基材中離子的分佈狀況。低佈植能量下，離子的分佈範圍較接近基材表面，且散佈範圍較窄；而在高佈植能量時，佈植離子分佈範圍較廣，且更深入基材表面。藉由 Monte Carlo TRIM 的模擬計算，可分別求得高斯分佈曲線中受離子能量影響的最大值離子濃度深度與其半高寬，再將其值代入理論模型進行數值計算，以探討不同能量之佈植製程經退火後，對基材中析出物成核成長特性的影響。圖8與圖9所示分別為低離子能量與高離子能量的數值模擬結果。由低離子能量的演化過程可以觀察到，較窄的離子分佈範圍使退火初期的過飽和程度較高，提高析出成核的驅動力，造成退火初期佈植離子便大量析出，如圖8(a)-(c)所示。受侷限的離子散佈範圍亦使相鄰的析出粒子間距較短，並縮短析出粒子互相合併降低系統表面能所需的時間，加速熟化階段的進行，最後析出粒子以鏈狀排列的形式存在基材中，如圖8(d)-(f)所示。另一方面，當佈植離子能量提高時，較寬的離子分佈使得局部位置之離子濃度偏低，造成相分離驅動力降低，成核、成長的速率都變為較緩慢，如圖9(a)-(c)所示。經過長時間的擴散、成長之後，析出物彼此的間距較大，因而減少奧氏熟化的發生。最後析出物以較小尺寸的粒子為主，析出物

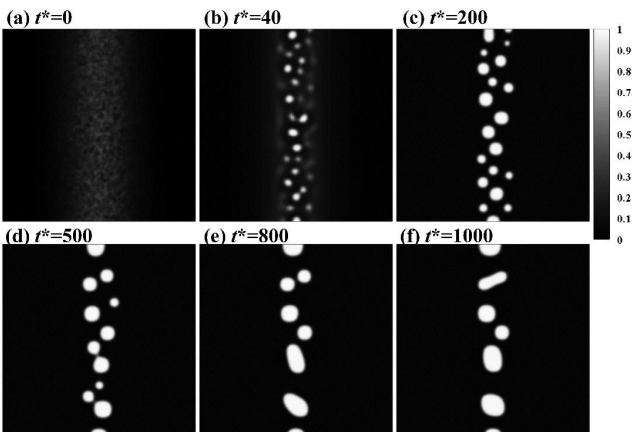


Fig.5 數值模擬中溫條件下，佈植後退火奈米粒子之形成與演化過程

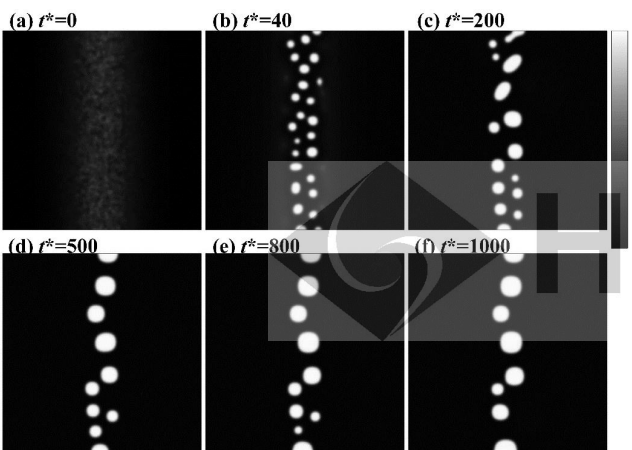


Fig.6 數值模擬高溫條件下，佈植後退火奈米粒子

的分佈也較低佈植能量寬廣且深入基材，呈現帶狀分佈，如圖9(d)-(f)所示。

圖10所示為定量分析不同佈植能量之析出成核成長動力學曲線。由圖中可知，佈植離子的析出動力學與佈植離子能量，亦即離子初始分佈狀態有密切關係。在低離子能量的情況下，佈植離子分佈集中，提高析出的趨動力，縮短孕核時間、成長速率，與促進析出粒子合併，導致析出成核成長過程快速進行，並迅速達到析出飽和狀態。而高能量的佈植情況則相反，散佈的離子使得析出緩慢且需較長的粒子成長時間，而由於析出驅動力的不足，造成較多的佈植離子固溶於基材中，導致在有限的退火時間下析出物的總量下降。

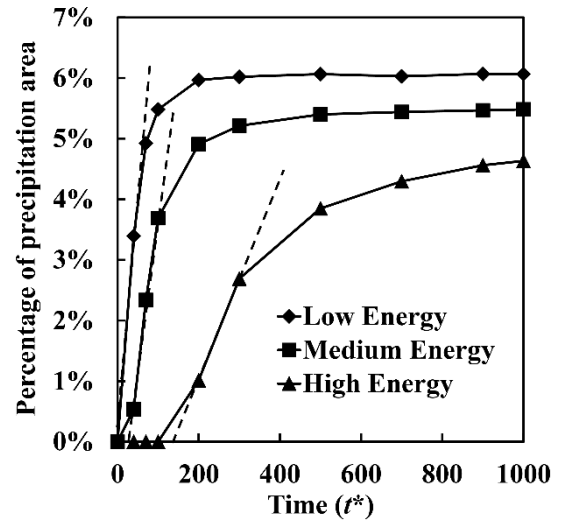


Fig.10 不同離子能量退火後析出面積與時間之關係

肆、結論

綜合上述之模擬結果與討論，本研究所建立之理論模型與數值方法，成功重建經佈植後退火之奈米粒子成核、成長與奧氏熟化的演化過程。結合 Monte Carlo TRIM 的模擬計算，可深入探討製程參數，如佈植離子劑量、離子能量和退火溫度等，對析出粒子之成核成長動力學特性的影響。當離子劑量提高，奈米粒子析出成核時間越短，析出粒子總面積越多，其析出時間快慢與成長速率趨勢相同；隨著時間增長，析出粒子會與鄰近析出物合併，以降低系統表面能。當退火溫度升高，離子擴散速率越快，使得奈米粒子成核時間越快，且成長與擴散速率呈正比關係，也越快完成析出相變化過程。改變佈植離子能量，因佈植深度及寬度的變化，影響奈米粒子成核、成長的特性。若提高佈植能量，離子分佈範圍廣，在相同初始總劑量情形下，離子於局部位置的濃度下降；能量越高，成核時間越久、成長速率越慢，且析出總面積越少。本研究關於佈植後退火奈米粒子析出之成長動力學的研究成果，使得以離子佈植術合成奈米粒子的技術更為完備，提升退火製程的理論性與應用性。

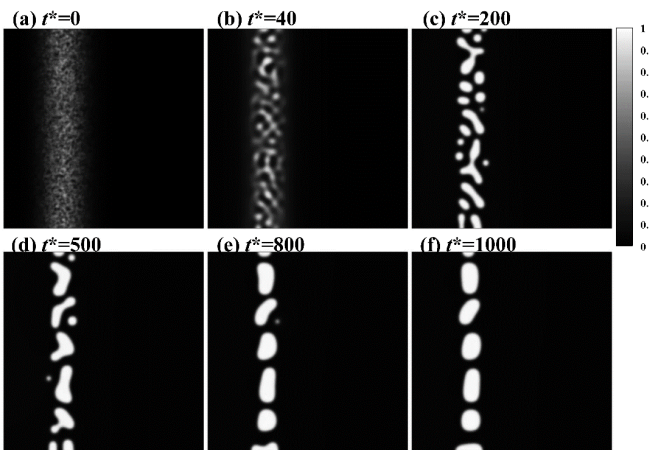


Fig.8 數值模擬低離子能量下，佈植後退火奈米粒子之形成與演化過程

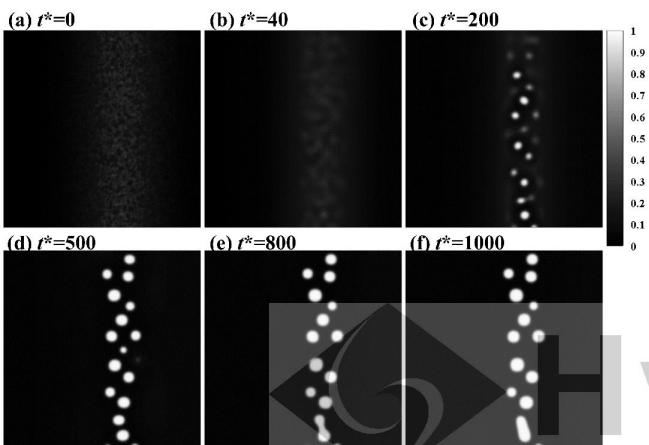


Fig.9 數值模擬高離子能量下，佈植後退火奈米粒子之形成與演化過程

誌謝

感謝科技部之研究經費補助，計畫編號為(NSC 101-2221-E-024 -008)。

伍、參考文獻

- [1] S. Honda, F. A. Modine, A. Meldrum, J. D. Budai, T. E. Haynes, L. A. Boatner, *Applied Physics Letters*, 77 (2000) 711.
- [2] B. Chatterjee, *Physics Letters A*, 69 (1979) 429.
- [3] G. A. Slack, *Physical Review*, 127 (1962) 694.
- [4] A. Meldrum, C. W. White, L. A. Boatner, I. M. Anderson, R. A. Zuhr, E. Sonder, J. D. Budai, D. O. Henderson, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 148 (1999) 957.
- [5] Y. Ueda, E. Hashimoto, H. Tamura, T. Kino, *J. Phys. IV France*, 05 (1995) C7.
- [6] L. Thomé, G. Rizza, F. Garrido, M. Gusso, L. Tapfer, A. Quaranta, *Applied Physics A* 67 (1998) 241.
- [7] G. Mattei, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 191 (2002) 323.
- [8] S. Dhara, *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences*, 32 (2007) 1.
- [9] J. C. Pivin, M. A. Garcia, H. Hofmeister, A. Martucci, M. S. Vassileva, M. Nikolaeva, O. Kaitasov, and J. Llopis, *The European Physical Journal D - Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics*, 20 (2002) 251.
- [10] K. H. Heinig, T. Müller, B. Schmidt, M. Strobel, and W. Möller, *Applied Physics A*, 77 (2003) 17.
- [11] S. Vilayurganapathy, A. Devaraj, R. Colby, A. Pandey, T. Varga, V. Shutthanandan, S. Manandhar, P. Z. El-Khoury, A. Kayani, W. P. Hess, S. Thevuthasan, *Nanotechnology*, 24 (2013) 095707.
- [12] J. W. Cahn and J. E. Hilliard, *The Journal of Chemical Physics*, 28 (1958) 258.
- [13] A. G. Kachaturyan, *Theory of Structural Transformation in Solids* (Wiley, New York, 1982).
- [14] D. A. Porter, K. E. Easterling, and M. Y. Sherif, *Phase Transformations in Metals and Alloys*, 3rd ed. (CRC, Boca Raton, FL, 2009).
- [15] J. F. Ziegler, J. P. Biersack, and U. Littmark, *The Stopping and Range of Ions in Solids* (Pergamon, New York, 1985).
- [16] Z. Suo and W. Lu, *Journal of Nanoparticle Research*, 2 (2000) 333.
- [17] H.-C. Yu, W. Lu, *Acta Mater.*, 53 (2005) 1799.
- [18] K.-D. Li, *Journal of Applied Physics*, 110 (2011) 044318.
- [19] Y. Ramjaun, G. Rizza, S. Perruchas, T. Gacoin, R. Botha, *Journal of Applied Physics*, 107 (2010) 104303.
- [20] F. Ren, X. H. Xiao, G. X. Cai, J. B. Wang, C. Z. Jiang, *Applied Physics A*, 96 (2009) 317.
- [21] A. L. Stepanov, *Reviews on Advanced Materials Science*, 26 (2010) 1.

作者簡介

李昆達目前為國立台南大學材料科學系副教授。研究方向主要致力於電腦模擬與數值計算方法，透過理論模型建立與實驗驗證結合，發展材料科學及相關領域之學術研究。

陳冠仔為國立台南大學材料科學系 103 級碩士班研究生。

張宗龍為國立台南大學材料科學系 104 級碩士班研究生。

許舜凱為國立台南大學材料科學系 104 級碩士班研究生。