УДК 627.78

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА РОСТА ТЕТРАГОНАЛЬНЫХ АМОРФНЫХ УГЛЕРОДНЫХ ПЛЕНОК

Антон Вадимович Гуров

Магистр 1 года,
кафедра «Электронные технологии в машиностроении»
Московский Государственный Технический Университет

Научный руководитель: Ю.В. Панфилов,
доктор технических наук, профессор кафедры «Электронные технологии в машиностроении»

Тетрагональные аморфные углеродные (ta-C) пленки благодаря своим уникальным характеристикам, таким, как высокая твердость, низкий коэффициент трения, химическая инертность и биосовместимость, находят свое применение в различных областях науки и техники: от машиностроения до биомедицинских технологий. Выбор метода нанесения пленок и оптимизация параметров технологического процесса требуют не только качественного представления о физике их формирования, но и количественной оценки структурных характеристик ta-C пленок.

Данные пленки содержат три фазы углерода, образованные sp, sp^2 и sp^3 связями. Увеличение концентрации sp^3 связей в пленке повышает ее твердость и теплопроводность, приближает ее характеристики к свойствам алмаза. Таким образом, целью моделирования является предсказание распределения концентрации sp^3 связей в сформированной пленке. Задачами данной работы являются: 1) определение физической модели, описывающей формирование ta-C пленок; 2) анализ существующих методов моделирования процесса осаждения ta-C пленок; 3) выбор метода моделирования для проведения дальнейших исследований.

Предложенная модель субплантации [1] описывает формирование sp^3 фазы, как результат локального увеличения плотности при проникновении высокоэнергетических (1 – 1000 эВ) атомов осаждаемого вещества в приповерхностные слои растущей пленки. Данный подход сводит задачу к анализу движения частицы в твердом теле и моделированию процесса изменения химических связей.

Существует два подхода к моделированию процесса движения частицы в твердом теле [2]:

1. Методы, основанные на модели парных столкновений;
2. Методы, основанные на модели классической динамики (метод молекулярной динамики).

В первом случае рассматриваются только атомы, бомбардирующие поверхность твердого тела и движущиеся в нем, а также первично и вторично выбитые атомы. Выбор свободного пробега для таких модельных атомов производится методом Монте-Карло и основывается на заданных свойствах твердого тела. Проблемой при таком подходе является учет изменения химической связи атомов углерода.

Данная проблема решается при моделировании методом молекулярной динамики [3], где отслеживаются перемещения, как осаждаемых атомов, так и атомов твердого тела. Большие вычислительные затраты данной задачи накладывают определенные ограничения, связанные с количеством рассматриваемых атомов, число которых обычно составляет $10^3 - 10^4$. Однако, учитывая особенность роста этого типа пленок, где нет явления поверхностной диффузии, мы можем ограничиться небольшими размерами модельного кристалла (порядка $10\times 10\times 30$ атомов). Для имитации объемного

кристалла и уменьшения влияния границ часто используют периодические граничные условия [2].

Подводя итог, остановим наш выбор на методе молекулярной динамики, как на наиболее полно описывающем процессы, происходящие при росте ta-C пленок и предсказывающем интересуемые нас характеристики пленки.

Литература

1. Lifshitz Y., Kasi S. R., Rabalais J.W. Subplantation model for film growth from hyperthermal species. – Physical Review B, 1990.
2. Экштайн В. Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела. – М.: «Мир», 1995 – 322 с.
3. Marks N.A. Thin film deposition of tetrahedral amorphous carbon: a molecular dynamics study, Diamond and Related Materials 14 (2005) 1223–1231.