

05;07;11;12

Исследование и моделирование роста твердосмазочных покрытий MoSe_x при импульсном лазерном осаждении

© В.Н. Неволин, В.Ю. Фоминский, А.Г. Гнедовец, Р.И. Романов

Московский инженерно-физический институт (государственный университет),
115409 Москва, Россия
e-mail: vyfominskij@mephi.ru

(Поступило в Редакцию 23 января 2008 г.)

Проведены исследования химического состава и трибологических свойств тонкопленочных покрытий из диселенида молибдена, полученных импульсным лазерным осаждением в вакууме и в разреженной атмосфере инертного газа (аргона). Установлено, что при осаждении в газе при давлении ~ 2 Па формировались покрытия стехиометрического состава с улучшенными антифрикционными свойствами по сравнению с вакуумно-осажденными покрытиями. Однако чрезмерное повышение давления (до ~ 10 Па) оказывало негативное влияние на трибологические свойства покрытия.

Исследованы особенности структурообразования покрытий MoSe_x при импульсном лазерном осаждении на ненагретую подложку. Установлено, что в вакууме и в аргоне при давлении 2 Па формировались достаточно гладкие покрытия с плотной аморфной структурой, содержащей наноразмерные включения молибдена. Осаждение при повышенном давлении аргона приводило к образованию развитого рельефа и неплотной структуры покрытия.

Разработана математическая модель, основанная на кинетическом методе Монте-Карло и и описывающая формирование структуры покрытий при физическом осаждении потока атомов. В результате сравнительного анализа установлено удовлетворительное качественное совпадение характера структурообразования модельных и реальных покрытий, созданных импульсным лазерным осаждением в различных по давлению газа условиях.

PACS: 68.55.at, 52.38.Mf, 62.20.Qp

Введение

Дихалькогениды переходных металлов, в частности дисульфиды и диселениды вольфрама и молибдена, обладают качественными антифрикционными свойствами, обусловленными особым — слоистым — характером упаковки атомов в кристаллической решетке. Эти свойства наиболее ярко проявляются при трении в вакууме, инертной или иной атмосфере (азоте) с пониженной влажностью. При формировании твердосмазочных покрытий для реализации наилучших трибологических свойств необходимо добиваться оптимального химического и структурного состояния осаждаемых слоев, которое обеспечивало бы качественное сцепление с основой и минимальный износ в объеме самого покрытия при трении.

В настоящее время наиболее распространенным способом формирования твердосмазочных покрытий является ионно-плазменное (магнетронное) распыление. В этом методе оптимизация режима осаждения достигается эмпирическим путем за счет изменения мощности разряда, давления газа, положения основы для осаждения относительно распыляемой мишени, потенциала смещения, температуры осаждения (см., например, [1]). Особенности применения метода импульсного лазерного осаждения для формирования тонкопленочных покрытий трибологического назначения исследованы в гораздо меньшей степени. Однако этот метод имеет ряд достоинств, которые позволяют рассматривать его как пер-

спективный инструмент формирования тонкопленочных покрытий. Следует отметить технологическую простоту и универсальность метода с точки зрения формирования покрытий самого различного химического состава, в том числе — нанокompозитных, а также возможность гибкого варьирования энергии осаждаемых частиц и ионов в очень широком диапазоне (от ~ 1 до $\sim 10^4$ eV) [2–4].

Наиболее распространенным способом управления структурой и свойствами покрытий, формируемых импульсным лазерным осаждением, является изменение интенсивности лазерного облучения мишени (энергии лазерного импульса и плотности лазерной энергии в пятне фокусировки). Эксперименты [2,5] по созданию покрытий MoS_x в вакууме показали, что в случае лазерного облучения мишени из дисульфида молибдена очень сложно реализовать конгруэнтный перенос химического состава мишени на достаточно большую площадь поверхности основы. При относительно низких плотностях лазерной энергии выброс массы из пятна фокусировки происходил в относительно узкий телесный угол, при этом угловая диаграмма разлета серы оказывалась заметно шире, чем у молибдена. Существенное повышение плотности энергии позволило реализовать практически изотропный разлет атомов серы и молибдена. Однако падающий поток частиц вызывал селективное распыление серы, и как следствие, формировались пленки субстехиометрического состава с существенным недостатком серы ($x < 2$). В [5] было предложено понизить энергию осаждаемых частиц из мишени MoS_2 за счет

столкновений с буферным газом — аргоном. В результате повышения давления газа в камере для осаждения состав покрытий MoS_x , сформированных при высоких значениях плотности лазерной энергии, был приближен к стехиометрическому ($x \approx 2$), а твердосмазочные свойства тонкопленочных покрытий MoS_x , осажденных на кремниевые пластины, заметно улучшились.

Влияние давления и состава газовой среды на химический состав и свойства покрытий из дихалькогенидов, формируемых импульсным лазерным осаждением, остается малоизученным. Нет полной ясности в вопросе выбора оптимальных условий импульсного лазерного осаждения твердосмазочных покрытий, обеспечивающих наилучшие трибологические свойства.

Цель настоящей работы заключалась в экспериментальном исследовании влияния инертного газа (аргона) на антифрикционные свойства покрытий из диселенида молибдена, определении оптимальных по давлению газа условий осаждения покрытий с улучшенными свойствами, изучении особенностей структурообразования таких покрытий при осаждении в вакууме и разреженном газе.

Для объяснения особенностей формирования структуры получаемых в экспериментах покрытий ставилась также задача разработки трехмерной численной модели процесса осаждения, основанной на кинетическом методе Монте-Карло — (КМК — Kinetic Monte Carlo). В этом методе моделируются движение и столкновение с поверхностью каждого отдельно взятого атома из потока осаждаемого вещества. Выбор всех возможных событий — начальной пространственной координаты, скорости и направления движения каждого атома, его осаждения на поверхность, поверхностных реакций и др. — проводится на вероятностной основе по стандартным схемам статистических выборок. В работе рассматривался случай низкотемпературного осаждения (при температуре, близкой к комнатной). В этих условиях поверхностная миграция атомов, химические реакции и фазовые превращения не оказывали существенного влияния на структурообразование покрытия.

Основные принципы метода КМК были разработаны еще в 1970-х гг. [6], и с тех пор этот метод эффективно использовался для прямого компьютерного моделирования физических систем на атомарном уровне при исследовании многих технологических процессов нанесения покрытия, таких как молекулярно-лучевая эпитаксия, плазменное осаждение и травление, магнетронное напыление и др. (см., например, [7–10]).

Применительно к импульсному лазерному осаждению двухкомпонентных покрытий ранее для моделирования использовался метод случайных траекторий Монте-Карло СТМК (RTMC — Random Trajectory Monte Carlo), подробно описанный в работе [11], в которой в зависимости от давления буферного газа проведены расчеты скоростей роста, профилей и стехиометрического состава образующихся покрытий, но не рассматривались особенности формирования нано-

и микроструктуры. Аналогичные модельные результаты для распределений толщины осаждаемых покрытий в зависимости от расположения подложки относительно лазерноиспаряемой мишени, но также без анализа структурообразования, приводятся и в [12].

Импульсное лазерное осаждение тонкопленочных покрытий MoSe_x . Исследование структуры и свойств

Экспериментальная установка для импульсного лазерного осаждения покрытий на основе дихалькогенидов переходных металлов, особенности создания лазерных мишеней, технические параметры использованной лазерной системы были подробно рассмотрены в ряде работ [2,3,13]. При формировании покрытий MoSe_x излучение лазера направлялось под углом 45° на мишень, изготовленную из прессованного порошка MoSe_2 . Луч сканировался по площади 5×5 см. Использовалось излучение YAG:Nd⁺ лазера с длительностью импульса излучения, равной 15 ns. Частота следования лазерных импульсов составляла 25 Hz, энергия излучения в импульсе ~ 50 мДж. Плотность энергии в пятне фокусировки составляла 7.5 Дж/см². Осаждение проводилось в вакууме при давлении остаточного газа $\sim 10^{-4}$ Па и в атмосфере аргона при давлении от 1 до 10 Па. Для этого после откачки камеры до давления $\sim 10^{-4}$ Па в нее напускался особо чистый аргон (99.98%) до требуемого давления. Подложки для осаждения покрытий устанавливались на расстоянии 5 см от мишени.

В экспериментах по исследованию трибологических свойств тонкопленочные покрытия MoSe_x толщиной ~ 200 нм наносились на полированные диски из стали 95X18 при 250°C . Эти покрытия подвергались испытаниям по методике скольжения шарика по диску (трибометр — CSM Instruments, Switzerland). Трибо-тесты проводились без смазки на воздухе с относительной влажностью 50%. Шарик диаметром 3 мм был изготовлен из стали ШХ15. Нагрузка на шарик составляла 1 N. Скорость скольжения была равна 10 см/с. После испытаний проводилось также микроскопическое исследование поверхности контактирующих поверхностей.

Контроль за химическим составом осаждаемых слоев проводился методом обратного резерфордского рассеяния ионов гелия (ОРРИ). Энергия ионов в анализирующемся пучке составляла 1.5 MeV.

Для структурных исследований тонкие пленки MoSe_x толщиной ~ 25 и ~ 60 нм осаждались в аналогичных условиях на кристаллы NaCl и полированные кремниевые пластины соответственно. Осаждение проводилось при комнатной температуре подложки, что позволило минимизировать влияние термически-активированных процессов на структурообразование пленок. Перед установкой в камеру кремниевые пластины и стальные диски промывались в спирте. Дополнительная обработка поверхности пластин и дисков не проводилась.

Пленки MoSe_x , которые осаждались на кремниевые пластины, исследовались методом атомно-силовой микроскопии (АСМ). Пленки, осажденные на кристаллы соли, высаживались на металлические сетки и исследовались методом просвечивающей электронной микроскопии и микродифракции (ПЭМ/МД).

Одновременно с осаждением пленок проводилось измерение ионных сигналов лазерной плазмы. Для этого рядом с подложкой устанавливался детектор ионов, на который подавалось небольшое отрицательное смещение (-40 V). Сигнал с детектора регистрировался запоминающим осциллографом.

Исследование химического состава пленок MoSe_x методом ОРПИ показало, что и в вакууме, и в аргоне химический состав покрытий MoSe_x , как и покрытия MoSe_x [2], заметно изменялся при удалении от центра зоны осаждения. В центре зоны осаждения, который располагался примерно напротив области лазерного облучения мишени, толщина пленки была наибольшей, а концентрация селена — наименьшей. При осаждении в вакууме в центре зоны осаждения наблюдался недостаток селена ($x \sim 1.5$). Применение аргона позволяло повысить концентрацию селена в пленках. При давлении около 2 Pa в центре подложки формировалось покрытие, химический состав которого был близок к стехиометрическому ($x \sim 2$). Повышение давления аргона до $5\text{--}10\text{ Pa}$ вызывало небольшой дальнейший рост концентрации селена ($x \sim 2.3$).

Наиболее вероятный механизм изменения концентрации селена в покрытии MoSe_x при осаждении в аргоне заключается в снижении энергии падающих атомов и ионов и, как следствие, снижении эффективности процессов селективного распыления и десорбции атомов селена из поверхностных слоев покрытия MoSe_x . Исследование ионной компоненты лазерно-иницированного факела от мишени MoSe_2 показало (рис. 1), что интенсивность сигнала от ионов молибдена и селена заметно снижалась при давлении $\sim 2\text{ Pa}$. При более высоком давлении аргона ($\sim 10\text{ Pa}$) амплитуда ионного сигнала уменьшалась практически в 20 раз по сравнению с ее величиной в вакууме. В сигнале появлялась новая составляющая, соответствующая медленным ионам.

Снижение интенсивности сигнала в газе было обусловлено рассеянием ионов на молекулах газа и отклонением от зоны детектирования. Форма сигнала также несколько изменялась за счет попадания на детектор рассеянных молекулами газа ионов, а также, возможно, за счет падения ионизованных вследствие перезарядки молекул газа. Эти ионы попадали на детектор примерно через $15\text{--}25\text{ }\mu\text{s}$ после лазерного импульса.

Исследования трибологических свойств тонкопленочных покрытий MoSe_x показали (рис. 2), что в процессе трения по покрытию, осажденному в вакууме, коэффициент трения, плавно изменялся от значения 0.09 до 0.08 . Испытания были остановлены после 10^4 циклов трения. За это время в центральной зоне трека, образовавшегося на диске, покрытие истерлось практически

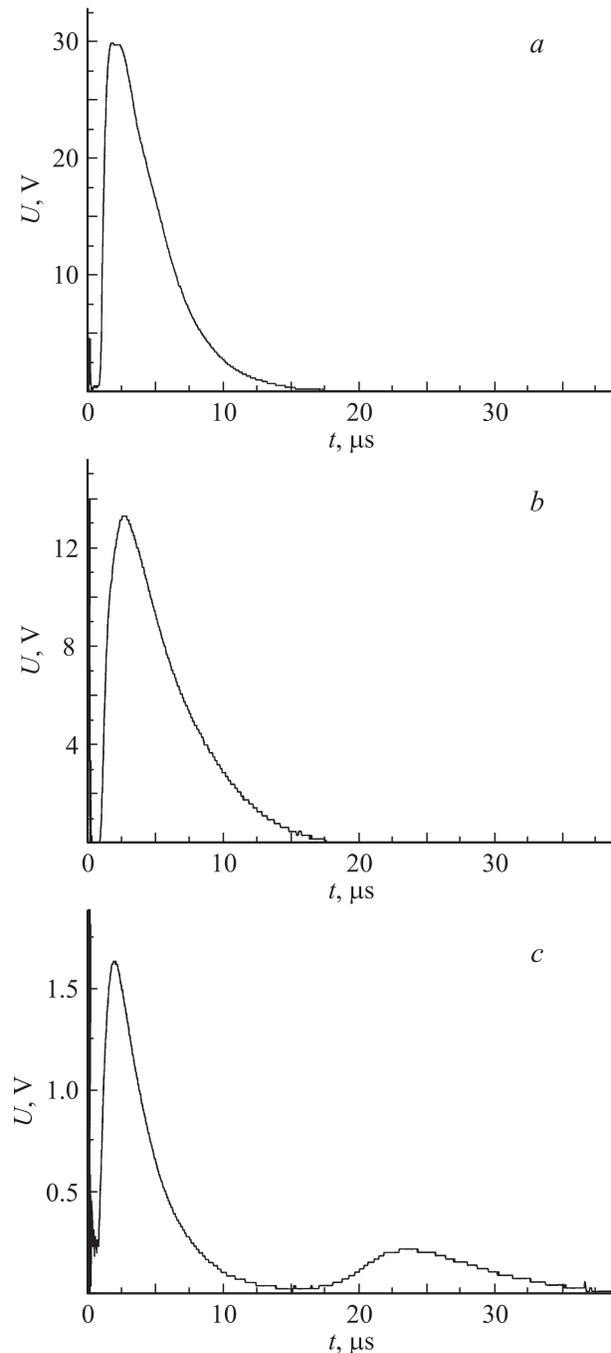


Рис. 1. Ионный сигнал лазерной плазмы при осаждении пленок MoSe_x в вакууме (a) и аргоне при давлении 2 (b) и 10 Pa (c). Время отсчитывалось от момента лазерного воздействия на мишень.

до стальной основы. Ширина трека износа покрытия составила примерно $100\text{ }\mu\text{m}$. Трибологические свойства покрытий, осажденных в аргоне, зависели от давления газа. Покрытие, осажденное при 2 Pa , обладало наименьшим коэффициентом трения, который после приработки составил 0.04 . Дальнейшее повышение давления вызывало увеличение значения коэффициента трения. Исследования треков показали, что во всех случаях

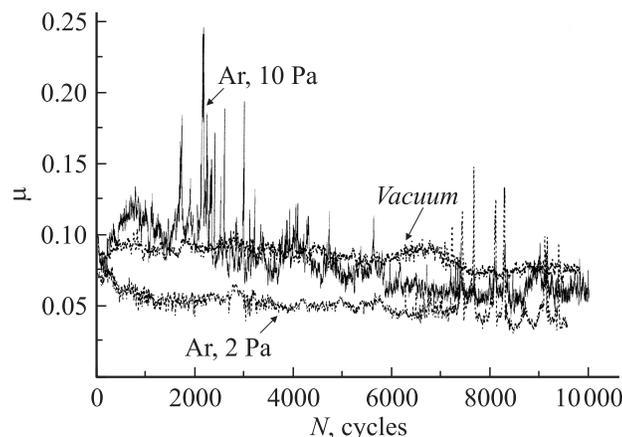


Рис. 2. Зависимость коэффициента трения от числа циклов вращения диска с тонкопленочным покрытием MoSe_x , созданным импульсным лазерным осаждением в вакууме и аргоне при давлении 2 и 5 Па.

наблюдалось уширение дорожки износа по сравнению с вакуумно-осажденным покрытием. Наиболее узкий трек образовался на покрытии, осажденном при 2 Па. Его ширина составила $130 \mu\text{m}$.

Сравнение картин износа покрытий, осажденных в вакууме и аргоне при давлении 12 Па, показало, что в обоих случаях испытание в течение 10^4 циклов приводило к практически полному удалению покрытия в центре трека, но износа стального диска не происходило. Наиболее очевидное различие заключалось в том, что при трении по покрытию, осажденному в вакууме, на краях трека образовалась относительно широкая полоса пластически деформированного материала покрытия. После испытания покрытия, созданного в аргоне, на границе полосы износа образовались более „рваные“ края. Это могло быть обусловлено влиянием условий осаждения на сцепление MoSe_x покрытия со стальной основой. Снижение энергии частиц, падающих на поверхность стального диска при осаждении в газе, могло уменьшить эффективность очистки поверхности от углеродсодержащих слоев (поверхностного загрязнения) на стальных дисках. Ослабление адгезии таких покрытий к стальной основе, вероятно, и вызывало понижение их износостойкости по сравнению с вакуумно-осажденными слоями. Улучшение антифрикционных свойств MoSe_x покрытий при осаждении в аргоне при давлении 2 Па по сравнению с вакуумно-осажденными покрытиями обусловлено, вероятно, формированием покрытий с оптимальным химическим составом, практически равным стехиометрическому.

Сравнительные структурные исследования тонких пленок, осажденных при комнатной температуре подложки в вакууме и в аргоне, показали, что все пленки обладали аморфной структурой, содержащей включения молибдена с размерами $5\text{--}30 \text{ nm}$. Проведенные исследования не выявили существенных структурных различий в пленках, полученных в вакууме и в аргоне при давлении $\sim 2 \text{ Pa}$. Эти пленки обладали достаточно плотной

аморфной структурой. Если при относительно низком давлении аргона регистрировался достаточно ровный контраст (рис. 3), характерный для однородной аморф-

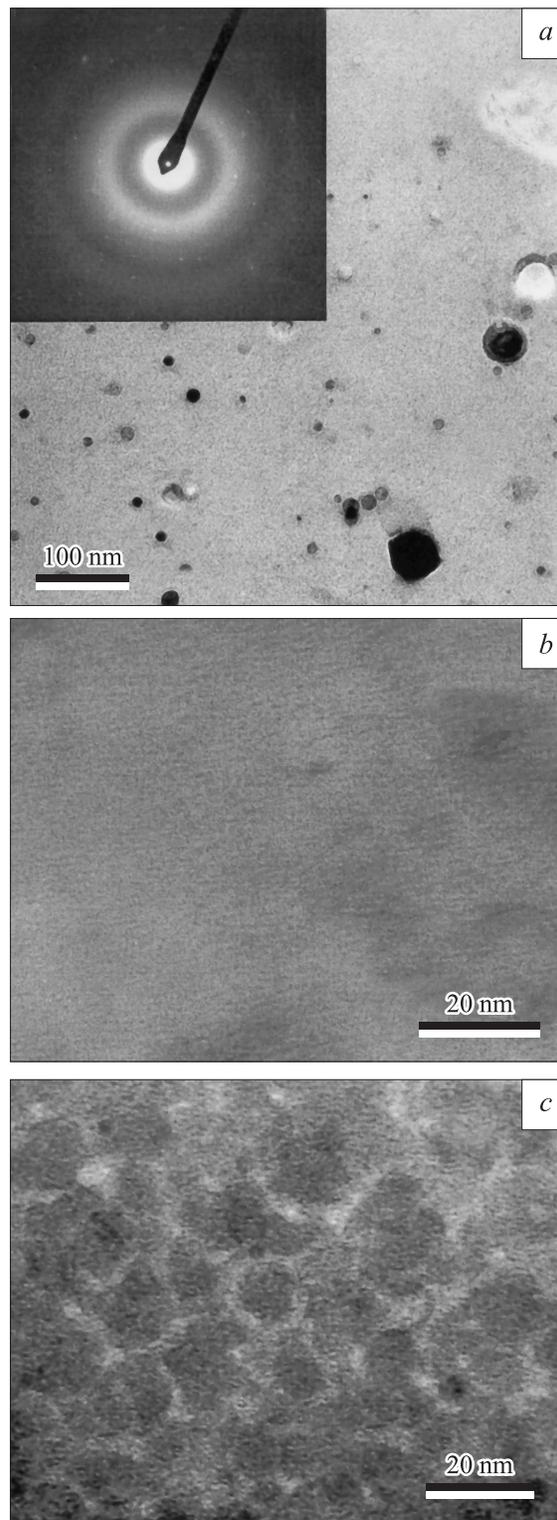


Рис. 3. Микродифракция и электронно-микроскопическое изображение структуры тонких пленок MoSe_x , созданных импульсным лазерным осаждением в вакууме (a, b) и аргоне при давлении 10 Па (c).

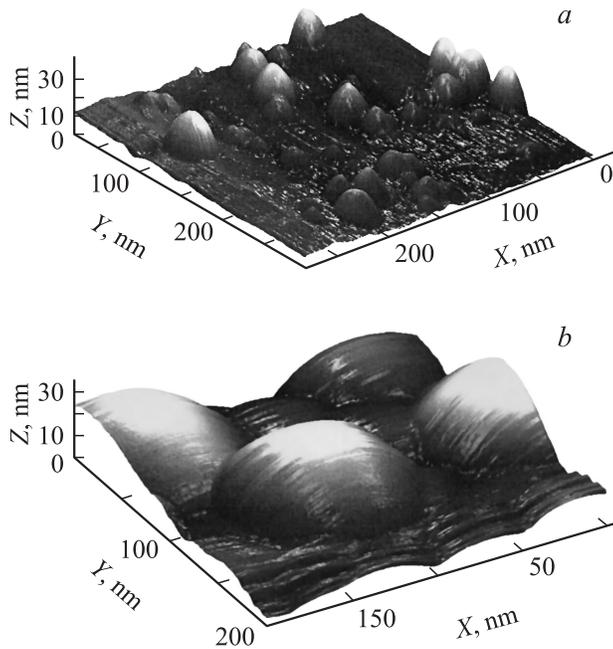


Рис. 4. АСМ-изображения поверхности пленок MoSe_x , созданных импульсным лазерным осаждением в вакууме (а) и аргоне при 10 Па (b).

ной структуры, то при давлении 10 Па контраст имел островковую (островковую) структуру. Характерный размер ячейки составлял примерно 10–14 нм. Для объяснения наблюдаемого явления было сделано предположение, что контраст аморфных пленок, осажденных при 10 Па, мог зависеть в основном от неоднородности их толщины, т.е. при высоких давлениях аргона, вероятно, формировались пленки с рыхлой структурой и развитым рельефом.

Такие выводы подтверждались результатами АСМ-исследования более толстых пленок MoSe_x , нанесенных на кремниевые пластины. На рис. 4 видно, что при осаждении в вакууме формировались пленки с относительно гладкой поверхностью, на которой располагались отдельно лежащие частицы с размерами 5–30 нм. Согласно ПЭМ/МД-исследованиям, это могли быть частицы молибдена. Пленки, осажденные при 10 Па, обладали развитым рельефом с размерами неровностей по поверхности до 50 нм. Высота неровностей не превышала 30 нм.

Математическое моделирование роста покрытий. Сравнение с экспериментом

Формирование модельного покрытия методом КМК производилось путем последовательной „укладки“ падающих атомов осаждаемого вещества на подложку. Для упрощения расчетов рассматривался рост покрытия на кубической пространственной решетке. В качестве физических параметров наносимого вещества использовались табличные данные для молибдена. Движение частиц

испаренного вещества и рост покрытия моделировались в декартовой системе координат X, Y, Z (оси X, Y — в плоскости подложки) в области $L_x \times L_y \times L_z$ на пространственной сетке с шагом, равным a — межатомному расстоянию в конденсированной фазе.

Каждая частица (атом) вводилась в расчетную область через верхнюю плоскость $Z = L_z$ в точке, координаты которой X_0 и Y_0 всякий раз выбирались случайным образом. Величина и направление скорости частицы определялись при помощи стандартной процедуры выборки из заданного распределения. Тип распределения выбирался в зависимости от экспериментального реализуемых условий осаждения.

В модели использовались периодические граничные условия по X и Y направлениям. При этом каждая частица, покидающая область моделирования, например на ее правой границе, вновь вводится в эту область с прежней скоростью и под тем же углом на левой границе. Высота профиля покрытия $h(X, Y)$ при этом является периодической функцией координат. Применение периодических граничных условий дает возможность рассматривать рост покрытия на достаточно малом участке поверхности подложки, на котором уже проявляются основные структурные особенности покрытия. Это позволяет, во-первых, существенно сократить объем необходимых вычислений и, во-вторых, избавиться от возможных нефизических эффектов и искажений структуры покрытия на краях области моделирования.

Движение частиц в газовой фазе вблизи подложки описывается обычными формулами ньютоновской механики. При столкновении атома с поверхностью с определенной долей вероятности могут произойти различные процессы: осаждение (прилипание атома к поверхности); отражение (упругое или диффузное); распыление (выбивание атомов покрытия) и др. Вероятность каждого из этих процессов зависит от скорости соответствующих поверхностных реакций. Как правило, скорость (вероятность) указанных реакций описывается аррениусовскими зависимостями [10,12]. Для выбранного события в соответствии с заданными „правилами“ проводятся дальнейшие операции с частицей (атом может быть осажден на поверхность, отразиться от нее и т.д.). Очередной цикл алгоритма завершается, как только атом займет свое положение на поверхности основы или покрытия.

Наконец, производится обновление структуры покрытия. Занятая вновь осажденным атомом ячейка присваивается множеству элементарных объемов, составляющих покрытие. Информация о структуре покрытия записывается в матрицу s_{ijk} . Элемент матрицы равен единице, если он соответствует занятой атомом ячейке пространственной сетки, и нулю, если соответствует незаполненному пространству. Матрица s_{ijk} используется в расчетах на следующих циклах вычислений, а также представляет собой набор вокселей („воксель“ — элемент объемного изображения, аналог двумерного „пикселя“), из которых потом строится трехмерное компьютерное изображение покрытия. Описанный алгоритм

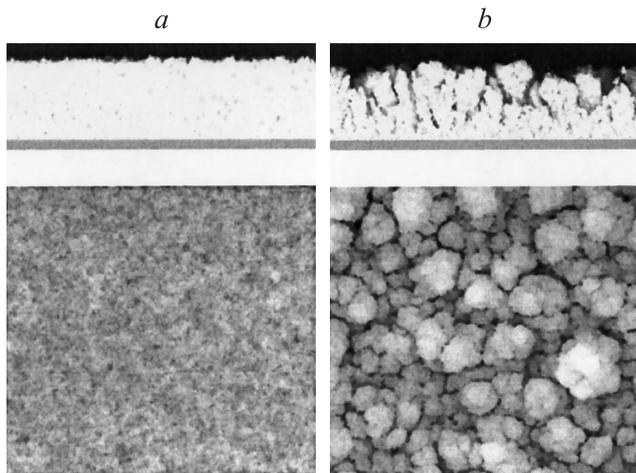


Рис. 5. Модельные структуры покрытий (вид сбоку и сверху): *a* — осаждение в вакууме; *b* — осаждение в условиях сильного рассеяния в инертном газе. Участки подложки 300×300 , толщина покрытий $h = 90$. Геометрические размеры даны в межатомных расстояниях. (То же на рис. 6).

циклически повторяется до тех пор, пока не появится покрытие требуемой толщины.

На рис. 5 представлены характерные модельные структуры покрытий, образующиеся в двух сильно различающихся режимах осаждения:

1) при осаждении направленного потока атомов в вакууме;

2) при осаждении потока атомов, претерпевающих сильное рассеяние на молекулах инертного газа.

В первом случае углы столкновения атомов с подложкой изменялись в пределах от 0 до 10° , во втором — от 0 до 90° . В численных экспериментах моделировалось осаждение $\sim 10^7$ частиц. Расчеты проводились на пространственной сетке $300 \times 300 \times 100$ единиц, измеряемых в межатомных расстояниях. На компьютерных изображениях модельных покрытий (вид сверху) оттенки серого цвета изменяются от черного до белого при изменении высоты участка покрытия от минимального до максимального уровня.

Результаты моделирования показали, что при нормальном падении атомарного пучка в вакууме, когда угловое рассеяние атомов незначительно, должна формироваться плотная структура и относительно гладкая поверхность. При осаждении в инертном газе рассеиваемые атомы попадают на подложку под различным углом, и на поверхности формируется заметный рельеф. Анализ динамики роста модельного покрытия (рис. 6) показал, что в условиях сильного углового рассеяния потока осаждаемых атомов рост покрытия происходит в три стадии:

1) формирование начального тонкого ровного слоя покрытия с толщиной до ~ 10 межатомных расстояний;

2) образование единичных неровностей и островков высотой до ~ 10 – 20 межатомных расстояний;

3) дальнейшее развитие рельефа покрытия в результате теневого эффекта, формирование столбчатых структур или образование на поверхности покрытия наноразмерных частиц неправильной формы.

Теневой эффект обусловлен тем, что налетающие под углом к поверхности атомы не могут попасть в лежащие вне „линии прямой видимости“ зоны, образовавшиеся за уже выросшими неровностями и элементами рельефа покрытия. Высота неровностей может достигать 25 межатомных расстояний. Размер неровностей (по поверхности) составляет 20–40 межатомных расстояний.

Для проведения сравнительного анализа результатов компьютерного моделирования и экспериментальных результатов исследования структуры тонкопленочных покрытий MoSe_x было сделано предположение, что лазерно-осажденные пленки обладали однородной гомогенной структурой, состоящей из атомов молибдена и селена. Межатомное расстояние приравнивалось характерному значению для расстояния между ближайшими атомами в аморфной структуре MoSe_x и составляло $\sim 0.3 \text{ nm}$ [14]. В этих условиях при росте

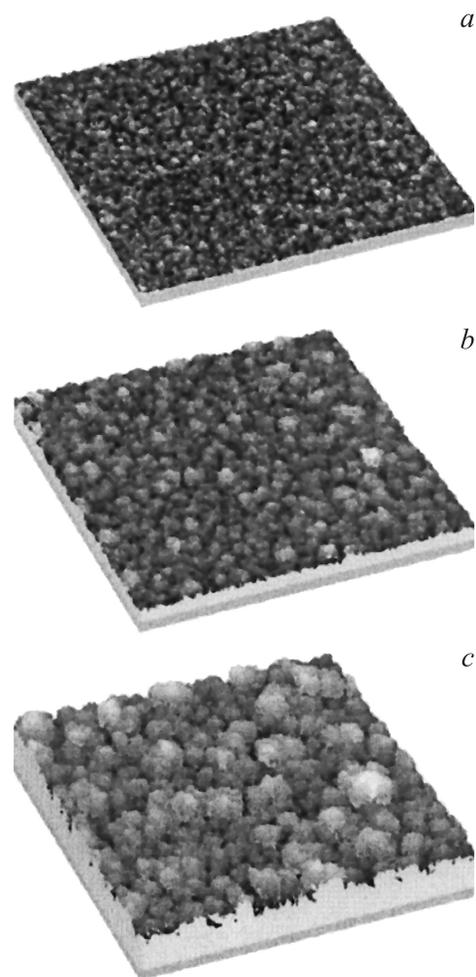


Рис. 6. Эволюция модельной структуры покрытия при осаждении в инертном газе: *a* — формирование тонкого плотного подслоя ($h = 10$); *b* — образование наноразмерных неровностей ($h = 20$); *c* — рост колончатых структур ($h = 60$).

покрытия MoSe_x в аргоне при 10 Па размер неровностей в плоскости должен возрастать примерно от 5 нм (толщина покрытия ~ 15 нм) до 10 нм (толщина покрытия ~ 30 нм). Данные значения вполне удовлетворительно согласуются с экспериментально измеренными методом ПЭМ размерами неоднородностей в MoSe_x пленках, осажденных лазерными импульсами при 10 Па. Исследования методом АСМ проводились на пленках толщиной более 60 нм и выявили увеличение размеров неровностей в таких пленках до 50 нм.

Следует отметить, что для более корректного моделирования роста покрытий при импульсном лазерном осаждении в инертном газе необходимо использовать достаточно точные характеристики осаждаемого потока частиц, а также вводить в модель процессы распыления покрытий падающим потоком атомов. Предварительные исследования и моделирование этих процессов для случая осаждения двухэлементного покрытия MoSe_x показали, что угловое распределение падающих частиц и эффективность распыления поверхности существенно зависят от начального скоростного распределения атомов молибдена и селена в лазерно-иницированном потоке частиц. Моделирование разлета в аргоне лазерного факела, состоящего из атомов Mo и Se, выполненные по методике СТМК при указанных режимах облучения мишени, позволили установить, что при 10 Па возможно существенное уширение углового распределения осаждаемых атомов, особенно атомов селена. Однако расчетное угловое распределение было далеко от изотропного. Согласно проведенным расчетам, в осаждаемом потоке сохраняется также высокая доля частиц, падающих практически по нормали к поверхности и обладающих достаточно высокой энергией. Эти частицы могут инициировать процессы распыления и таким образом „сглаживать“ поверхность покрытия. Несмотря на отмеченные упрощения разработанная модель в целом достаточно адекватно описывает процессы, оказывающие важную, во многом определяющую роль в процессах структурообразования покрытий при импульсном лазерном осаждении в инертном газе при относительно низких температурах.

Выводы

Использование инертного газа при импульсном лазерном осаждении тонкопленочных покрытий из диселенида молибдена позволяет изменять химический состав покрытия и его структуру. При оптимальных по давлению газа условиях осаждения формируются тонкопленочные покрытия стехиометрического состава с улучшенными антифрикционными свойствами. При давлении аргона, равном 2 Па, коэффициент трения для сформированных покрытий снижается практически вдвое (до 0.04) по сравнению с его значением для вакуумно-осажденных покрытий. Повышение давления аргона до 10 Па вызывает формирование рыхлой структуры покрытий с развитым рельефом поверхности и, как следствие, ухудшение трибологических свойств покрытий.

Разработана трехмерная компьютерная модель роста тонкопленочных покрытий при низкотемпературном физическом осаждении потока атомов на плоскую подложку. Сравнительный анализ результатов компьютерного моделирования роста покрытий и экспериментального исследования структуры сформированных покрытий MoSe_x показал, что разработанная модель достаточно адекватно описывает рост покрытия, учитывая его зависимость от условий падения атомов на поверхность растущего покрытия. Созданная модель может быть использована для моделирования роста покрытий при импульсном лазерном осаждении при условии корректной постановки задачи, учитывающей основные характеристики падающего потока частиц в лазерно-иницированном потоке вещества.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант № 07-02-12012-офи).

Список литературы

- [1] *Savan A., Simmonds M.C., Huang Y. et al. // Thin Solid Films. 2005. Vol. 489. P. 137–144.*
- [2] *Fominski V.Yu., Nevolin V.N., Romanov R.I. et al. // J. Appl. Phys. 2001. Vol. 89. P. 1449–1457.*
- [3] *Fominski V.Yu., Nevolin V.N., Romanov R.I. et al. // Tribology Letters. 2004. Vol. 17. N 2. P. 289–294.*
- [4] *Неволин В.Н., Фоминский В.Ю., Гнедовец А.Г. и др. // ЖТФ. 2007. Т. 77. Вып. 11. С. 88–95.*
- [5] *Fominski V.Yu., Markeev A.M., Nevolin V.N. et al. // Thin Solid Films. 1994. Vol. 248. P. 240–246.*
- [6] *Bortz A.B., Kalos M.H., Lebowitz J.L. // J. Comput. Phys. 1975. Vol. 17. P. 10–18.*
- [7] *Drotar J.T., Zhao Y.P., Lu T.M. et al. // Phys. Rev. B. 2000. Vol. 62. N 3. P. 2118–2125.*
- [8] *Karabacak T., Wang G.G., Lu T.M. // J. Appl. Phys. 2003. Vol. 94. N 12. P. 7723–7728.*
- [9] *Depla D., Chen Z.Y., Bogaerts A. et al. // J. Vac. Sci. Technol. A. 2004. Vol. 22. N 4. P. 1524–1529.*
- [10] *Liu Z.L., Yu L., Yao K.L. et al. // J. Phys. D: Appl. Phys. 2005. Vol. 38. P. 4202–4209.*
- [11] *Itina T.E. // J. Appl. Phys. 2001. Vol. 89. N 1. P. 740–746.*
- [12] *Morozov A.A., Geretovszky Z., Szorenyi T. // J. Phys. D: Appl. Phys. 2008. Vol. 41. N 1. P. 015 303 (1–6).*
- [13] *Shtansky D.V., Lobova T.A., Fominski V.Yu. et al. // Surf. Coat. Tech. 2004. Vol. 183. P. 328–336.*
- [14] *Lieber C.M., Kim Y. // Thin Solid Films. 1991. Vol. 206. P. 355–359.*