

05

Об изменении плотности аморфного углерода при воздействии на него атомами углерода с энергиями 10–500 eV

© В.И. Иванов-Омский, С.Г. Ястребов, А. Рихтер

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, С.-Петербург
Университет прикладных исследований, Вильдау, Бахнхофштрассе,
15745, Вильдау, Берлин, ФРГ

Поступило в Редакцию 17 апреля 2002 г.

Обсуждаются результаты численного моделирования процесса изменения плотности аморфного углерода в результате воздействия на материал атомов углерода с энергиями 10–500 eV. Расчет проведен с использованием методов молекулярной динамики. Показано, что максимальное уплотнение достигается при энергиях атомов углерода, лежащих в диапазоне 30–40 eV. Приводится сравнение расчета с экспериментальными данными.

Модель неглубокой имплантации (субплантации), приводящая к повышению плотности в приповерхностном слое вещества в результате воздействия на него имплантируемых гомоатомов, была впервые предложена в работе [1] и теоретически подтверждена в работе [2] с помощью метода, учитывающего кулоновское взаимодействие при столкновении между частицами [3]. В работе [4] для изучения этой модели в диапазоне энергий 10–100 eV был использован расчет методами молекулярной динамики (МД) с использованием первых принципов. С этой целью авторы использовали неупорядоченную решетку, содержащую 130 атомов углерода, добавляя к ней при моделировании не более 20 новых атомов. Результаты в целом подтверждают справедливость субплантационной модели при энергиях, превышающих 30 eV. Однако в рамках цитируемой работы оказалось возможным добавить в систему только небольшое количество атомов, поскольку методы МД, использующие первые принципы, оказываются весьма дорогостоящими с точки зрения затрат машинного времени. Это обстоятельство значительно снижает достоверность полученных результатов. В настоящей работе с целью получения зависимостей абсолютных значений плотности образца (аморфный углерод) от расстояния от его поверхности, подвер-

гаемой бомбардировке добавляемыми в систему атомами, используются методы классической МД. Полуэмпирическая формулировка задачи многих тел, сводящаяся к использованию в расчетах парного взаимодействия между атомами в виде потенциала Бреннера [5,6], позволила произвести существенное увеличение добавляемых в систему частиц по сравнению с методами МД, использующими первые принципы. Результаты численного эксперимента свидетельствуют об уплотнении материала подложки в приповерхностной области при энергии добавляемых атомов порядка 3–40 eV. Данные, приведенные в работе, находятся в хорошем согласии с литературными данными, полученными авторами ранее [7] в относительных единицах. Кроме того, выполненное ранее в работе [7] статистическое усреднение числа ближайших соседей, по-видимому, является недостаточно корректным, маскируя локальный характер эффекта субплантации. Об этом же обстоятельстве свидетельствуют данные работы [8], в которой для увеличения усредненного по общему количеству атомов числа ближайших соседей потребовалось модифицировать ход зависимости потенциала Бреннера. В данной работе приводятся абсолютные значения распределения плотности, позволяющие провести прямое сравнение оригинальных расчетных данных с экспериментальными данными работы [8], не внося изменений в полуэмпирический потенциал.

Полуэмпирический парный потенциал взаимодействия C–C, используемый в данной работе, был введен впервые Бреннером [5,6]. Он уточняет ход зависимости потенциальной функции, предложенной в работе [9] (потенциал Терцова), но в отличие от последнего позволяет описать не только решетку алмаза и графита, но и сопряженные связи в углеводородах и дает лучшее согласие с экспериментом при моделировании кластеров углерода, содержащих небольшое количество атомов. Классический метод МД [10] основан на численном интегрировании уравнений движения, при этом силы, действующие на каждый атом системы, определены из зависимости от расстояния потенциальной функции. В настоящей работе использовались две модели подложек, в качестве которых выступал аморфный углерод. При этом взаимное расположение атомов, используемое при моделировании материала подложки, взято из работы [11], где оно определялось с использованием первых принципов. Первая модель соответствовала аморфному углероду с плотностью порядка 2 g/cm^3 (подложка низкой плотности), а вторая — с плотностью порядка 3 g/cm^3 (подложка высокой плотности). Обе подложки были сконструированы из ячеек, состоящих из 128 ато-

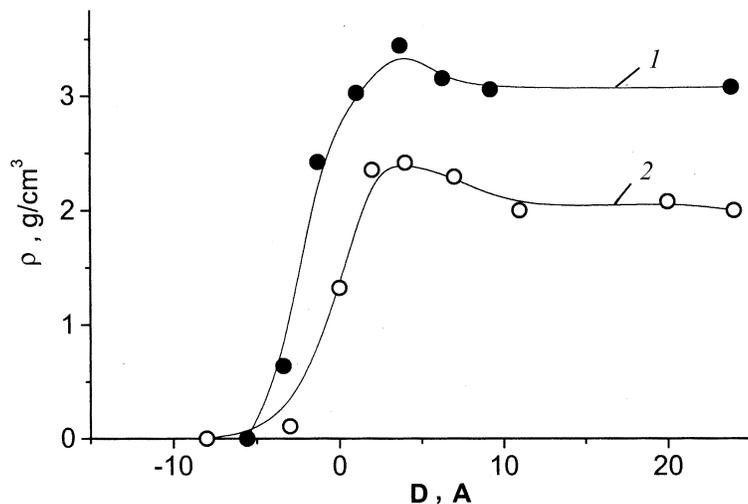


Рис. 1. Плотность вещества после добавления к исходной системе 400 атомов, построенная как функция глубины для случая высокой (1) и низкой (2) плотности исходной подложки. Ноль на рисунке соответствует исходной поверхности подложки.

мов углерода. При энергиях атомов, добавляемых в систему, менее или порядка 30 eV подложка состояла из восьми таких ячеек (1024 атома). При энергиях, превышающих 100 eV, подложка состояла из 16 ячеек (2048 атомов). Периодические граничные условия фиксировали атомы по границам ячейки и на ее дне, верхняя поверхность ячейки оставалась свободной. Поскольку атомы вблизи поверхности подложки не фиксированы и содержат большое количество оборванных связей, поверхность подложки в данной модели далека от равновесия. Поэтому до начала добавления к подложке новых атомов углерода ей давали возможность релаксировать в течение 2 ps, а в последующие 2 ps из системы удалялись излишки энергии, вводя в уравнения движения затухание с постоянной времени порядка 2 ps. Этот же принцип применялся при добавлении в систему новых атомов углерода, т.е. атом углерода, имеющий определенное значение энергии, сталкивался со случайно выбранной точкой на поверхности подложки, подлетая нормально к ее поверхности. Перед добавлением в систему очередного атома ей

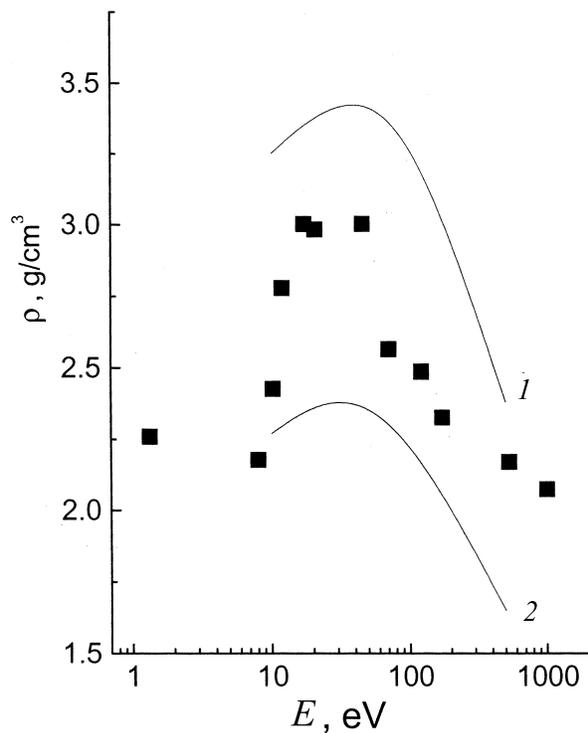


Рис. 2. Плотность пленок аморфного углерода как функция энергии добавляемых в систему атомов. 1 — подложка высокой плотности и 2 — подложка низкой плотности по данным численного эксперимента. Черные квадраты соответствуют экспериментальным данным [12].

давали возможность эволюционировать в течение последующих 4 ps по алгоритму, описанному для свободной поверхности. Процесс расчета заканчивался после добавления 400 атомов.

Результаты численного моделирования для энергии атомов углерода 30 eV представлены на рис. 1. Зависимость плотности материала от координаты имеет максимум, который находится на некотором расстоянии под исходной поверхностью подложки. Абсолютное значение максимума существенно зависит от исходной плотности материала, а

наибольшее значение ($\sim 3.5 \text{ g/cm}^3$) достигается при подложке высокой плотности. Для сравнения между численным и реальным экспериментом при разных энергиях использовались расчетные значения на расстоянии 4 \AA в глубину от исходной поверхности. Экспериментальные данные были восстановлены из значений плазменных частот, приведенных в работе [12], в которой использовалась спектроскопия характеристических потерь электронов. Этот метод является чувствительным к состоянию поверхности, что делает обоснованным сравнение реального и численного экспериментов.

Коллекция данных как функция энергии атомов представлена на рис. 2. Из рисунка видно, что материал максимальной плотности образуется в диапазоне энергий $30\text{--}40 \text{ eV}$. Результаты для подложек обоих типов повторяют ход экспериментальной зависимости, отличаясь от нее по абсолютной величине. Возможно, что такое отличие связано с тем, что в случае работы [12] в качестве подложки служит кремний, а в настоящей работе используется аморфный углерод.

Итак, в настоящей работе построена реалистичная модель, которая применена для исследования эффекта уплотнения аморфного углерода, подвергаемого бомбардировке атомами углерода с различными энергиями. Сравнение численного и физического экспериментов показывает важность для практической реализации синтеза алмаза с применением технологических методов на основе ионной (атомной) бомбардировки выбора материала подложки и диапазона энергий.

Эта работа поддержана проектом DAAD/ZIP „International Quality Networks“ в рамках темы „Technology of New Materials“ (грант N 214/IQN) и выполнена в Институте прикладных исследований в Вильдау, Берлин. Авторы также выражают благодарность РФФИ за частичную поддержку грантом 00-02-17004-а.

Список литературы

- [1] *Lifshitz Y., Kasi S.R., Rabalais J.W., Eckstein W.* // Phys. Rev. 1990. В. 41. P. 10468.
- [2] *Lifshitz Y., Kasi S.R., Rabalais J.W.* // Phys. Rev. Lett. 1989. V. 62. P. 1290.
- [3] *Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U.* The Stopping and Ranges of Ions in Matter (Pergamon, Oxford, 1985).
- [4] *Uhlmann S., Frauenheim T., Lifshitz Y.* // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 81. P. 641.
- [5] *Brenner D.W.* // Phys. Rev. B. 1990. V. 42. P. 9458.

- [6] *Brenner D.W.* // Phys. Rev. B. 1992. V. 46. P. 1948.
- [7] *Yastrebov S., Smith R.* // Nuclear Instruments and methods. 2001. B1-4. P. 145.
- [8] *Jaeger H.U., Albe K.* // J. Appl. Phys. 2000. V. 88. P. 1129.
- [9] *Tersoff J.* // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 61. P. 2879.
- [10] *Smith R.* // Atomic & Ion Collisions in Solids and at Surfaces. Cambridge: University Press, 1997.
- [11] *Frauenheim Th., Jungnickel G., Koehler Th.* et al. // J. Non-Cryst Solids. 1995. V. 182. P. 1861.
- [12] *McKenzie D.R., Muller D., Pailthorpe B.A.* // Phys. Rev. Lett. 1991. V. 67. P. 773.