

УДК 539.216:519.876.5

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИОННОГО УПЛОТНЕНИЯ ПЛЕНОК НИОБИЯ**И.Г. Марченко^{1,2}, А.В. Чишкала², И.М. Неклюдов¹**¹Национальный Научный центр «Харьковский физико-технический институт»,
ул. Академическая 1, г. Харьков, 61108, Украина²Научный физико-технологический центр, ул. Новгородская 1, г. Харьков, 61145, УкраинаE-mail: march@vl.kharkov.ua

Поступила в редакцию 19 марта 2004 г.

В работе методом молекулярной динамики проведено математическое моделирование атомно-ионного осаждения пленок ниобия. Ионный поток составлял 10% от общего потока осаждаемых атомов, энергия ионов - 200 эВ. После термического осаждения пленки при температуре 300 К до толщины, при которой достигается стационарная плотность, проводилось атомно-ионное осаждение пленки. Ионное воздействие приводило к повышению плотности растущей пленки и уменьшению ее шероховатости. В статье показано, что ионное уплотнение происходит благодаря двум физическим механизмам. Первый механизм связан со сглаживанием пленки во время ионной бомбардировки. Это приводит к уменьшению количества «микротрещин», под которыми располагаются поры. Вторым механизмом является ионное уплотнение пленок за счет вбывание собственных междоузельных атомов.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: пленки, вакуумное осаждение, ионы, моделирование, ниобий.

В последние годы для улучшения свойств защитных, упрочняющих, фрикционных и пр. покрытий широко применяют различные технологии ионного воздействия, которые позволяют получать компактные покрытия с хорошей адгезией при низких температурах. Воздействуя ионами, можно эффективно влиять на такие характеристики пленки как плотность, стехиометрический состав, остаточные микронапряжения, блочность и др. Свойства пленок, растущих под облучением, определяются типом и энергией ионов, плотностью ионного тока. В технологических установках обычно используют ионы газов: Ar, Ne, Xe, N, O и др. Хотя использование газовых ионов имеет ряд преимуществ, корректная интерпретация полученных физических результатов сильно затруднена. Это связано, прежде всего, с образованием в пленке сложных примесных комплексов. Поэтому для исследовательских целей предпочтительно использовать собственные ионы осаждаемого материала. Такую возможность предоставляет метод атомно-ионного распыления (АИР) [1, 2], суть которого заключается в следующем: на подложку осаждают частично ионизированные пары наносимого металла. Пары получают путем разогрева материала электронным лучом. Плотность ионного тока регулируют степенью ионизации паров в низковольтном разряде постоянного тока. Энергию ионов изменяют путем подачи потенциала на подложку.

Метод АИР позволяет проводить осаждение в широком интервале температур, энергий ионов, плотности ионного тока и исследовать влияние собственных ионов на микроструктуру получаемых пленок.

На рис. 1 приведены данные, полученные методом АИР, по влиянию энергии падающих ионов на плотность конденсатов ниобия [3]. Плотность пленок, отделенных от подложки, определяли методом гидростатического взвешивания в четыреххлористом углероде. Из рисунка видно, что плотность пленки Nb, полученная термическим осаждением существенно отличается от плотности массивного материала. Наличие в осаждаемом потоке ионов приводит к увеличению плотности осаждаемых пленок. Из приведенного графика следует, что плотность пленки растет с повышением энергии ионов и достигает значения плотности объемного материала при энергии 200 - 250 эВ. Этот эффект известен как «ионное уплотнение». Данные

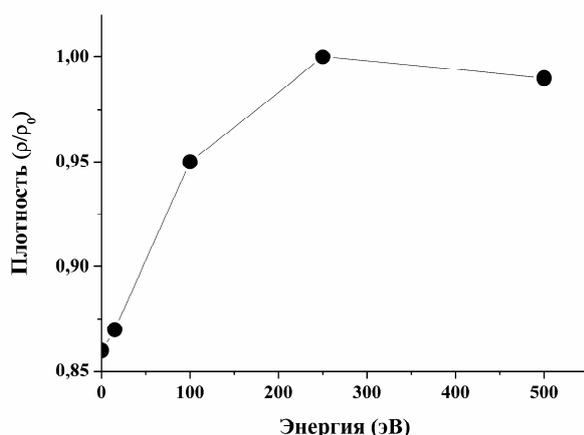


Рис. 1. Зависимость плотности ниобиевых конденсатов от энергии ионов, полученных методом АИР.

Степень ионизации $\gamma=0,1$; температура 300 К, ρ_0 - плотность массивного ниобия.

экспериментов также свидетельствуют, что ионное уплотнение сопровождается изменением размеров блоков и внутренних микронапряжений [3-4]. Для объяснения механизма ионного уплотнения и сопровождающих его эффектов необходимо понимание физических механизмов формирования структуры пленок под облучением.

Механизм ионного уплотнения пытались описать различными физическими моделями: увеличением поверхностной подвижности атомов под ионным пучком [5], моделью баллистического уплотнения [6-7], радиационно-диффузионной моделью [8-9]. Модель увеличенной поверхностной подвижности носит качественный характер и основывается на предположении об увеличении поверхностной диффузионной подвижности атомов под воздействием ионного облучения. В результате образуется более совершенная структура пленки. Модель баллистического уплотнения предполагает, что ионное уплотнение происходит за счет внедрения междоузельных атомов, образующихся в процессе облучения. Расчеты с использованием данной модели дают некорректные результаты при больших плотностях ионного тока: существенное превышение плотности пленки над плотностью массивного материала. В радиационно-диффузионной модели учтен процесс диффузии точечных радиационных дефектов, что позволило корректно объяснить результаты экспериментов при средних и высоких температурах. В то же время в рассматриваемой модели используется ряд величин и зависимостей, которые должны определяться из внешних источников. Это касается, в частности, зависимости “затравочной” плотности пленки от ионного тока и температуры. К сожалению, все приведенные модели не могут объяснить взаимосвязь изменения плотности осаждаемых пленок с изменением их микроструктуры. Для этого требуются дополнительные данные о кинетике атомного упорядочения в пленках при ионном воздействии.

Развитие вычислительной техники привело к интенсивному использованию методов компьютерного моделирования в исследовании свойств осаждаемых пленок. В выполненных ранее исследованиях применялись модели баллистического осаждения [10-11], метод Монте-Карло [12-14], метод молекулярной динамики [15-19]. Метод молекулярной динамики (ММД) дает наиболее полное описание физических процессов на атомарном уровне, так как он основан на решении уравнений движения для каждого осаждаемого атома пленки. В то же время широкое применение данного метода в исследовании вакуумного осаждения ограничивается существующими вычислительными возможностями. Поэтому до настоящего времени ММД применялся, в основном, для компьютерного моделирования осаждения пленок в двухмерном случае [15-17], а единичные работы, посвященные моделированию реальных трехмерных структур при вакуумном осаждении, не дают достаточной информации о кинетике атомного упорядочения при ионном облучении [18-19].

Несмотря на проведенные экспериментальные работы, теоретические модели и компьютерные расчеты, физический механизм низкотемпературного ионного уплотнения до настоящего времени окончательно не установлен. Также не выявлена взаимосвязь ионного уплотнения с изменением микроструктуры пленок, в частности, с изменением блочной структуры.

Целью настоящей работы было изучение физических механизмов ионного уплотнения пленок ниобия методами математического моделирования.

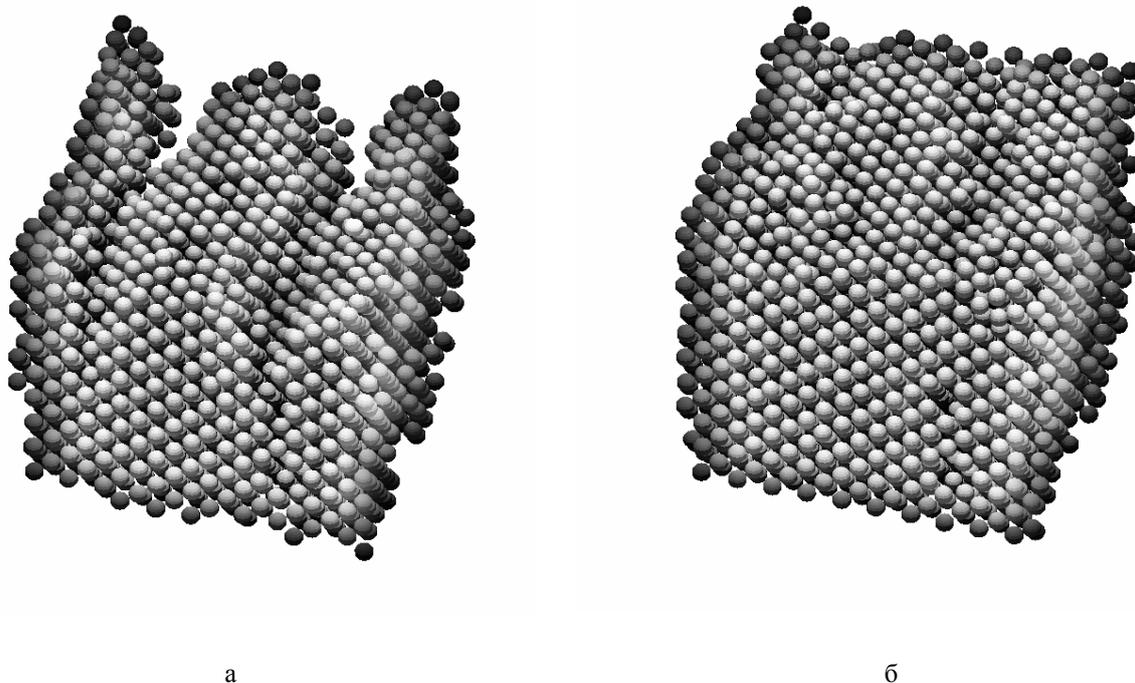


Рис. 2. Внешний вид поверхности пленки ниобия.

а - при термическом осаждении 24 монослоев,

б - при дополнительном осаждении 12 монослоев атомно-ионного потока на термически осажденную пленку.

МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Компьютерное моделирование атомно-ионного осаждения тонких пленок ниобия производили методом молекулярной динамики с использованием программы DYNAMOD [20]. Расчетная ячейка представляла собой прямоугольный параллелепипед с размерами по осям X, Y, и Z соответственно 4,63; 4,67 и 13,8 нм. Ось X имела кристаллографическое направление [100], ось Y - [011], ось Z - [011]. Вдоль направлений X и Y применялись периодические граничные условия. Рост кристаллита происходил в направлении оси Z. Атомно-ионный поток осаждался на пленку, предварительно полученную термическим осаждением [21]. Пленка представляла собой 24 монослоя, осажденных на плотно упакованную плоскость типа {110}. Термическое осаждение пленки проводилось при температуре 300 К. При атомно-ионном осаждении температура поддерживалась постоянной при помощи алгоритма коррекции атомных скоростей [22]. Данный алгоритм применяли ко всем атомам, кроме четырех последних нанесенных монослоев. Взаимодействие атомов описывалось в приближении погруженного атома [23]. Энергию кристаллита рассчитывали как сумма парных взаимодействий и энергии “внедрения”:

$$E = \sum_i F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{ij}(R_{ij}), \quad (1)$$

где ϕ_{ij} потенциал парного взаимодействия, $F_i(\rho_i)$ - энергия необходимая для внедрения атома типа i в электронный газ в точке i с электронной плотностью ρ_i . Электронную плотность находили как :

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} \rho_j^0(R_{ji}), \quad (2)$$

где $\rho_j^0(R_{ji})$ - электронная плотность от атома типа j на расстоянии R_{ji} в точке i . Функции, описывающие парное межатомное взаимодействие, атомную электронную плотность и функцию внедрения в электронный газ взяты из работы Джонсона [24]. На малых межатомных расстояниях взаимодействие описывалось потенциалом Хартри-Фока в аппроксимации Мольера [25].

Осаждаемые атомы случайным образом равномерно распределялись в плоскости параллельной плоскости осаждения. Время осаждения одного монослоя составляло 0,142 нс. Термически осаждаемые атомы имели энергию 0,2 эВ, характерную для вакуумного осаждения и импульс, направленный перпендикулярно плоскости осаждения. Так как в экспериментах максимальная плотность пленки достигалась при энергии ионов около 200 эВ, то ионный поток в компьютерном моделировании имел следующие характеристики: энергия ионов – 200 эВ, количество ионов – 10% от общего количества упавших атомов.

Анализ атомной структуры пленки и определение поверхностных атомов производили при помощи алгоритма, описанного в работе [26].

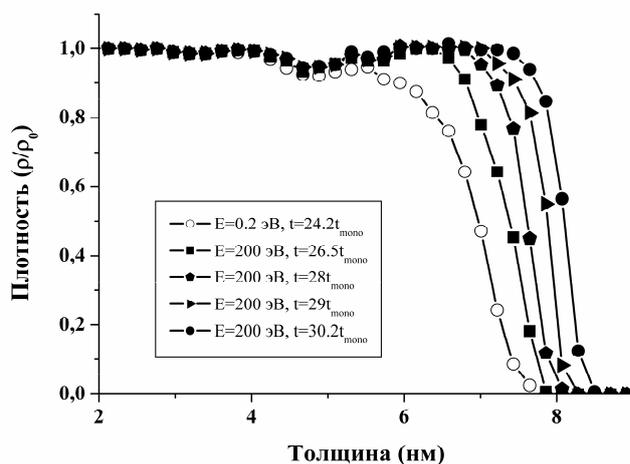


Рис. 3. Изменение плотности пленки по глубине при термическом и атомно-ионном осаждении.

Разные кривые соответствуют различным временам осаждения. После термического осаждения пленки до $24,2 t_{\text{моно}}$ осуществляли атомно-ионное осаждение. Незаполненными маркерами отмечена плотность предварительно термически осажденной пленки.

роли ионного облучения в формировании структуры пленок сначала моделировали термическое осаждение пленки ниобия. Ранее методами компьютерного моделирования были исследованы процессы формирования микроструктуры таких пленок ниобия при вакуумном осаждении [21]. Было установлено, что пористость получающихся пленок обусловлена возникновением микропор, которые формируются под “микротрещинами”, воз-

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Изучение физических механизмов формирования структуры пленок при различных условиях осаждения методологически можно проводить двумя способами. Первый способ - традиционный: на подложку наносят пленки фиксированной толщины при различных условиях осаждения. Изменяя структурные характеристики таких пленок, можно делать выводы о физических механизмах образования микроструктуры пленок.

Второй возможностью является изучение изменения структуры переходного слоя при изменении условий осаждения. Для этого сначала наносят пленку при одних условиях осаждения, а затем продолжают осаждение при измененных условиях, измеряя во времени изменения структурных характеристик переходного слоя. Таким методом можно получить большую информацию о процессах происходящих в осаждаемых пленках, чем традиционным.

В настоящей работе была использована вторая из описанных методик. Для выяснения

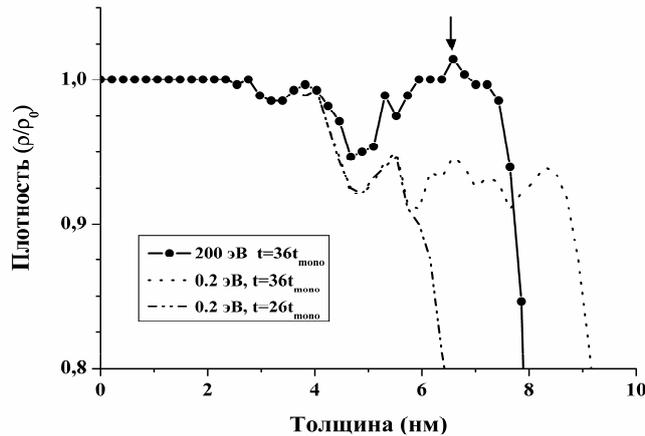


Рис. 4. Изменение плотности пленки по глубине при атомно-ионном осаждении.

Пунктиром для сравнения нанесены данные изменения плотности по глубине термически осажденной пленки при $t=26t_{\text{mono}}$ и $t=36t_{\text{mono}}$.

плотность пленки достигает плотности массивного материала. Надо отметить, что при атомно-ионном осаждении заполнение атомных слоев на фронте растущей пленки выше, чем в случае термического осаждения.

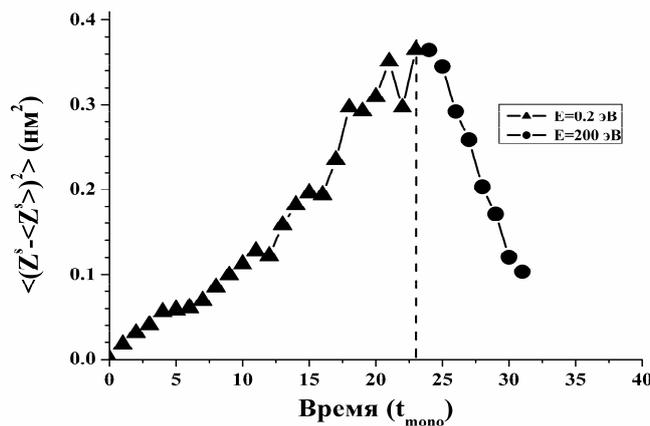


Рис. 5. Изменение величины $\langle (Z^s - \langle Z^s \rangle)^2 \rangle$, характеризующей шероховатость поверхности со временем осаждения.

После термического осаждения пленки (отмечено на рисунке треугольными маркерами) осуществлялось атомно-ионное осаждение.

этом вакансии образуются, как правило, на поверхности пленки. Возникающие в объеме растущей пленки междоузельные атомы мигрируют и могут либо выходить на границу растущей пленки, либо залечивать вакансионные кластеры, находящиеся в ее глубине. Таким образом, одним из механизмов ионного уплотнения при низких энергиях является “залечивание” вакансионных кластеров, образующимися междоузельными атомами.

Вместе с тем ионное воздействие не сводится только к баллистическому уплотнению. На рис. 5 приведено изменение шероховатости пленки как при ее нанесении термическим способом, так и после атомно-ионного осаждения. При термическом осаждении шероховатость растет со временем. Как было показано в работе [21], эта шероховатость связана с возникновением и развитием на поверхности растущей пленки “микротрещин”. При атомно-ионном осаждении шероховатость пленки уменьшается. Это уменьшение связано с исчезновением “микротрещин”. На рис. 2б приведена структура поверхности пленки после дополнительного атомно-ионного осаждения 12 монослоев. Видно, что поверхность гладкая без “микротрещин”. Сглаживание поверхности связано как с распылением поверхностных атомов, так и с увеличением подвижности атомов в слоях под воздействием ионной бомбардировки.

никающими на поверхности растущей пленки. На рис. 2а показан микрорельеф пленки ниобия после осаждения 24 монослоев. На поверхности пленки видны две “микротрещины”. Под этими образованиями находится область, обогащенная вакансионными кластерами.

На рис. 3 незаполненными маркерами приведено изменение плотности термически осажденной пленки по глубине. В дальнейшем на эту пленку осаждали атомно-ионный поток. Плотность пленки, полученной атомно-ионным нанесением, на графике отмечена заполненными маркерами. За единицу плотности принята плотность массивного ниобия. Из графиков видно, что плотность вновь наносимых слоев повышается. После осаждения более трех монослоев из атомно-ионного потока плотность пленки достигает плотности массивного материала. Надо отметить, что при атомно-ионном осаждении заполнение атомных слоев на фронте растущей пленки выше, чем в случае термического осаждения.

Изменение плотности пленки после осаждения 12 монослоев из атомно-ионного потока на предварительно сформированную пленку показано на рис. 4 (заполненные маркеры). Как следует из рисунка, вновь осаждаемые слои достигают плотности массивного материала. Пунктирными линиями там же приведены значения плотности термически осажденной пленки в момент начала атомно-ионного осаждения и при дальнейшем термическом осаждении без участия ионов.

Надо отметить, что при ионно-атомном осаждении увеличивается плотность не только вновь образуемых слоев, но также наблюдается изменение плотности в глубине пленки. Обращает на себя внимание факт появления в пленке плотности, превышающей плотность массивного материала (на рисунке отмечено стрелкой). Это связано с появлением в пленке собственных междоузельных атомов. Междоузельные атомы образуются при передаче атомам пленки кинетической энергии большей, чем пороговая энергия смещения атомов пленки. В результате этого процесса создаются пары Френкеля. При

В таблице приведены данные подвижности атомов в направлении роста пленки при термическом осаждении и ионной бомбардировке. При ее составлении использовались данные по изменению местоположения атомов после нанесения следующих 0,25 атомных монослоя. В первой строке приведено отношение количества атомов, совершивших переход между атомными слоями пленки к общему количеству упавших атомов при термическом и атомно-ионном осаждении. Как следует из таблицы, во время термического осаждения переход испытывает приблизительно каждый пятый атом. При атомно-ионном воздействии количество атомных переходов возрастает. Учитывая, что при моделировании ионный компонент составлял 10% от осаждаемого потока, каждый ион вызывает в среднем около 20 дополнительных переходов между слоями осажденных ранее атомов. Во второй строке таблицы приведены величины средних смещений атомов $\langle \Delta Z \rangle$ в постоянных решетке. Как при термическом, так и при атомно-ионном осаждении смещения направлены вглубь пленки. При этом среднее значение смещений при атомно-ионном осаждении несколько меньше, чем при термическом. В третьей строке таблицы отражено изменение среднеквадратичного отклонения смещенных атомов $\langle (\Delta Z - \langle \Delta Z \rangle)^2 \rangle$ при росте пленки.

Из таблицы следует, что ионное уплотнение, в основном, происходит за счет увеличения подвижности атомов в приповерхностном слое под ионной бомбардировкой. Это увеличение подвижности приводит к блокированию механизма образования “микротрещин” на поверхности растущей пленки. Как было показано ранее [21], плотность термически осажденных пленок уменьшается за счет образования “микротрещин” на поверхности. Эти “микротрещины” возникают как следствие развития неустойчивости формы поверхности. При росте “микротрещин” под ними образуется область, обогащенная вакансионными кластерами. Ионное облучение, увеличивая подвижность поверхностных атомов, блокирует развитие “микротрещин”.

Таблица. Подвижности атомов в направлении роста пленки при термическом осаждении и ионной бомбардировке.

T	0,25t _{моно}		0,5t _{моно}		1,0t _{моно}		1,5t _{моно}		2,0t _{моно}	
	Term	Ion	Term	Ion	Term	Ion	Term	Ion	Term	Ion
N _{displ} /N _{depos}	0,16	2,01	0,16	2,27	0,23	2,34	0,14	2,32	0,19	2,2
$\langle \Delta Z \rangle$ (a)	-0,40	-0,39	-0,55	-0,63	-0,55	-0,16	-0,47	-0,31	-0,70	-0,33
$\langle (\Delta Z - \langle \Delta Z \rangle)^2 \rangle$ (a ²)	0,02	0,11	0,10	0,05	0,21	0,22	0,11	0,11	0,22	0,03

N_{displ} – количество атомов совершивших переход между слоями за время 0,25t_{моно}, N_{depos} – количество осажденных за то же время атомов. $\langle \Delta Z \rangle$ – величина среднего смещения атомов, испытавших переход между слоями, a – постоянная решетки

Если сравнить полученные результаты компьютерного моделирования с экспериментальными данными (см. рис. 1, 3, 4), можно отметить качественное согласие результатов. Так, плотность пленок достигает плотности массивного материала при атомно-ионном осаждении с энергией ионов 200 эВ. В то же время значение плотности термически осажденных пленок, полученное в результате моделирования, ниже экспериментально наблюдаемого. Это расхождение может быть связано с влиянием примесей из остаточной атмосферы. В работе [4] было показано, что в пленке действительно наблюдаются вакансионно-примесные комплексы. Примеси могут выступать в качестве “стабилизатора” развития пористости. Поэтому проблема влияния примесей на рост пленок требует дополнительного исследования методом компьютерного моделирования.

ВЫВОДЫ

В работе исследовано влияние низкоэнергетического облучения собственными ионами на микроструктуру пленок ниобия. Показано, что ионное воздействие влияет на рельеф растущей пленки. Изучен эффект ионного уплотнения. Установлено, что при энергии ионов 200 эВ и степени ионизации 0,1 плотность образующихся пленок равна плотности массивного материала. Эти данные хорошо совпадают с экспериментальными результатами, полученными методом атомно-ионного осаждения. Показано, что ионное уплотнение обеспечивается двумя физическими механизмами: блокировкой развития “микротрещин” на поверхности растущей пленки и уничтожением вакансионных кластеров собственными междоузельными атомами, возникающими при облучении ионами с энергиями выше порогового значения энергии смещения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Белоус В.А., Картмазов Г.Н., Павлов В.С. и др. Ионно-плазменные методы осаждения покрытий. Метод атомно-ионного распыления. - М.: ЦНИИ атомформ, 1988. - 16с.-(Препринт ХФТИ 88-98).
2. Алексеенко И.В., Булатова Л.В., Дикий Н.П. и др. Исследование параметров микро- и субструктуры толстых покрытий, полученных вакуумной конденсацией высокоплотных атомных и атомно-ионных потоков // Вопр. атомной науки и техники. Сер. ФРП и РМ.- 1987.- Вып. 1 (2).- С. 73-90.
3. Слепцов С.Н., Марченко И.Г., Булатова Л.В., Слепцов А.Н., Поляков Ю.И. Структурное состояние толстых конденсатов ниобия, осажденных из собственных атомно-ионных потоков // Вопр. атомной и техники. Сер. ФРП и РМ.- 1993.- Вып. 1(60).- С. 62-69.

4. Слепцов С. Н., Марченко И.Г., Слепцов А.Н. Тонкая структура конденсатов ниобия, сформированных из ионно-атомных потоков в атмосфере гелия // Физика и химия обработки материалов.- 1994. - №4-5.- С. 94-100.
5. Лузин А.Н., Тюшев А.Н., Распыление кристаллов и поверхностная миграция атомов под воздействием бомбардировки медленными ионами // ЖТФ. - 1979. - Т.49. - №12. - С. 2671-2679.
6. Muller K.H. Model of ion-assisted thin film densification // J. Appl. Phys. - 1986. - V. 59(8). - P. 2803-2807.
7. Muller K.H. Modeling ion-assisted deposition of CeO₂ films // J. Appl. Phys. (A). - 1986. - V. 40. - P. 209-213.
8. Бакай А.С., Слепцов С.Н., Жуков А.И., Марченко И.Г., Слепцов А.Н., Резниченко А.Э. Низкотемпературное уплотнение пленок хрома, индуцированное бомбардировкой ионами аргона и хрома // Металлофизика и новейшие технологии.- 1996. - Т. 18. - №1. - С. 62-69.
9. Bakaj A.S., Sleptsov S.N., Zhukov A.I., Marchenko I.G., Sleptsov S.N., Sleptsov A.N. Mathematical modeling of the densification of niobium films deposited from self-ion-atomic fluxes // Met. Phys. Adv. Tech. - 1996. - V. 15. - P. 1329-1342.
10. Liu D., Dew S.K., Brett M.J., Janacek T., Smy T., Tsai W., Experimental study and computer simulation of collimated sputtering of titanium thin films over topographical features // J. Appl. Phys. - 1993. - V. 74. - P. 1339-1344.
11. Dirks A.G., Leamy H.J., Columnar microstructure in vapor-deposited thin films // Thin Solid Films. - 1977. - V. 47. - P. 219-233.
12. Smilauer P., Wilby M.R., Vvedensky D.D. [Reentrant layer-by-layer growth: A numerical study](#) // Phys. Rev. B. - 1993. - V. 47. - P. 4119-4122.
13. Smilauer P., Wilby M.R., Vvedensky D.D. [Shape of the surface-step-density oscillations during sputtering of singular and vicinal surfaces](#) // Phys. Rev. B. - 1993. - V. 48. - P. 4968-4971.
14. Salik J. Computer simulation of thin film nucleation and growth // J. Appl. Phys. - 1985. - V. 57. - P. 5017-5023.
15. Muller K.H. [Ion-beam-induced epitaxial vapor-phase growth: A molecular-dynamics study](#) // Phys. Rev. B. - 1987. - V. 35. - 1987. - P. 7906-7913.
16. Smith R. W., Srolovitz D. J. Void formation during film growth: A molecular dynamics simulation study // J. Appl. Phys. - 1996. - V. 79 (3). - P. 1448-1457.
17. Muller K.H. Dependence of thin-film microstructure on deposition rate by means of a computer simulation // J. Appl. Phys. - 1985. - V. 58. - P. 2573-2576.
18. Bunnik B.S., de Hoog C., Haddeman E.F.C., Thijsse B.J. [Molecular dynamics study of Cu deposition on Mo and the effects of low-energy ion irradiation](#) // Nucl. Instr. and Meth. B. - 2002. - V. 187. - P. 57-65.
19. Haddeman E.F.C., Bunnik B.S., Thijsse B.J. [Thin film growth and ion-beam modification: MD simulations going beyond simple systems](#) // Mat. Res. Soc. Symp. Proc. -2000. - P. 103-106.
20. Ганн В.В., Марченко И.Г. Комплекс программ "ДИМОД" для динамического моделирования дефектов в металлах и сплавах.- М.: ЦНИИ атоминформ, 1987. - 10 с. - (Препринт ХФТИ 87-24).
21. Марченко И.Г., Марченко И.И., Неклюдов И.М. Компьютерное моделирование вакуумного осаждения пленок ниобия // Вестн. Харьк. ун-та. Сер. "ядра, частицы, поля". - 2004. - №628. - Вып. 2(24). - С. 93-98.
22. Luedtke W.D., Landman Uzi Molecular-dynamics studies of the growth modes and structure of amorphous silicon films via atom deposition // Phys. Rev. B. - 1989. - V.40. - №17. - P. 11733-11745.
23. Baskes M.I. Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities // Phys. Rev. B. - 1992. - V. 46. - №5. - P. 2727-2742.
24. Johnson R.A., Oh D.J. Analytic embedded atom method model for bcc metals // J. Mater. Res. - 1989. - V.4. - №5. - P. 1195-1201.
25. Лейман. К. Взаимодействие излучения с твердым телом и образование элементарных дефектов.- М.: Атомиздат, 1979. - 296 с.
26. Марченко И.Г., Марченко И.И., Неклюдов И.М., Определение атомной структуры поверхности тонких пленок в методе молекулярной динамики // Вопр. атом. науки и техники. Сер. ФРП и РМ. - 2004. - №3 (85). - С. 26-30.

COMPUTER SIMULATION OF ION DENSIFICATION OF NIOBIUM FILMS

I.G. Marchenko^{1,2}, A.V. Chishkala², I.M. Neklyudov¹

¹National Science Center "Kharkov Institute of Physics and Technology"

1, Akademicheskaya St., 61108 Kharkov, Ukraine

²Scientific Center of Physics and Technology,

1, Novgorodskaya St., 61145 Kharkov, Ukraine

E-mail: March@vl.kharkov.ua

The paper is about the mathematical simulation of atomic-ion deposition of niobium films performed by the method of molecular dynamics. The ion flux was 10% of the total flux of deposited atoms, the ion energy was 200 eV. After thermal deposition of the film at a temperature of 300 K, to the thickness with which a stationary density is reached, the atomic-ion deposition of the film was followed. Ion action resulted in decreasing the density of the growing film and decreasing its roughness. The investigation shows that the ion densification occurs due to two physical mechanisms. The first mechanism is related with the film smoothing under ion bombarding. It leads to decreasing the quantity of "microcracks" below which pores take place. The second mechanism is the ion densification of films at the expense of knocking-in of proper interstitial atoms.

KEY WORDS: films, vacuum deposition, ions, computer simulation, niobium