

## ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

УДК 538.975

## АМОРФИЗАЦИЯ ПЛЕНКИ СЕРЕБРА НА КОБАЛЬТЕ

А. А. Кацнельсон, А. Э. Мороз, О. С. Трушин, В. С. Степанюк

*(кафедра физики твердого тела)*

Представлены результаты моделирования методом молекулярной динамики процесса аморфизации пленки серебра, выращенной на подложке кобальта. Для описания межчастичных взаимодействий использован обобщенный потенциал Ленарда-Джонса. Анализ двумерной парной корреляционной функции  $g(r)$  указывает на наличие в плотноупакованной сетке серебра ближнего порядка и на отсутствие дальнего порядка, что соответствует ее аморфному состоянию.

Значительный прогресс в области технологий, основанных на применении тонких пленок, обусловил развитие фундаментальных исследований зависимости структурных характеристик пленок от методов и режимов их напыления. В настоящее время существует большое количество экспериментальных работ, в которых исследуются физические свойства пленок в зависимости от технологии напыления. Теории роста пленок носят в основном феноменологический характер из-за сложного многочастичного характера взаимодействий. В данной ситуации вычислительный эксперимент, в котором эволюция физической системы моделируется с высоким пространственным и временным разрешением, может стать связующим звеном между экспериментом и теорией. Метод молекулярно-динамического моделирования в настоящее время успешно применяется для получения информации о механизмах роста тонких пленок на микроскопическом уровне.

Достаточно широко этот метод использовался для исследования структуры полупроводниковых пленок. Так, он применялся авторами [1] для моделирования роста пленок кремния при молекулярно-лучевой эпитаксии. В качестве потенциала межчастичного взаимодействия использовался потенциал Стиллленжера—Вебера, включающий двух- и трехчастичное взаимодействия атомов кремния. Изучалось влияние температуры подложки на структуру пленки. При низкой температуре ( $(1/8) T_m$ ), где  $T_m$  — температура плавления, наблюдался рост аморфных слоев кремния и наличие  $2 \times 1$ -реконструкции поверхности. При температуре, составляющей  $(2/3) T_m$ , слои получались более упорядоченные и исчезал эффект реконструкции. Эти результаты находились в качественном согласии с экспериментом. В работе [2] предпринималась попытка проследить за изменениями структуры пленки аморфного кремния при различных направлениях пучков падающих атомов. Было установлено, что при использовании пучка, падающего на подложку кремния (111) под углом  $60^\circ$  к нормали, происходит формирование так называемой «микроколончатой» структуры. Значительно меньше информации имеется в литературе о механизмах роста пленок металлов на металлических подложках.

В данной работе мы представляем результаты моделирования методом молекулярной динамики процесса аморфизации пленки серебра, выращенной на подложке кобальта. Для описания межчастичных взаимодействий использовался обобщенный потенциал Ленарда-Джонса [3].

Метод построения молекулярно-динамической модели состоит в следующем. В расчетной ячейке, имеющей форму куба, создаются два статических и три динамических слоя атомов кобальта. Каждый слой состоит из 50 частиц. Динамические слои находятся над статическими и играют роль подложки. Таким образом, моделируется поверхность кобальта с ориентацией (100). Периодические граничные условия накладываются параллельно плоскости поверхности. Система не имеет периодических граничных условий в направлении  $z$  (перпендикулярном к поверхности). В начале процесса атомы подложки находятся в узлах г. ц. к. решетки. Затем атомам динамических слоев задаются скорости согласно распределению Максвелла при заданной температуре. Временная эволюция системы прослеживается путем численного интегрирования уравнений движения атомов по схеме с перешагиванием («leap-frog») [4] с временным шагом  $2 \cdot 10^{-3}$  пс. После уравнивания атомных слоев подложки при заданной температуре начинается вбрасывание атомов металла из случайно выбранных позиций на верхней грани расчетной ячейки. Каждый вбрасываемый атом получает импульс в направлении нормали к поверхности подложки и в начальный момент находится на расстоянии от подложки, большем радиуса обрыва парного потенциала взаимодействия.

Атомы, которые вследствие столкновений с другими атомами пучка или подложки дрейфуют в сторону источника, уничтожаются при достижении ими верхней границы. Температура системы контролируется путем масштабирования скоростей частиц подложки. Частота вбрасывания в систему атомов соответствует 100 временным шагам. Эта частота выбирается так, чтобы исключить взаимодействия между атомами в пучке.

На первой стадии молекулярно-динамического эксперимента было проведено моделирование процесса напыления атомов серебра на подложку кобальта. Температура подложки составляла 300 К. Энергия падающих атомов соответствовала температуре 1500 К. После 15 000 временных шагов полученная пленка серебра состояла из хорошо упорядочен-

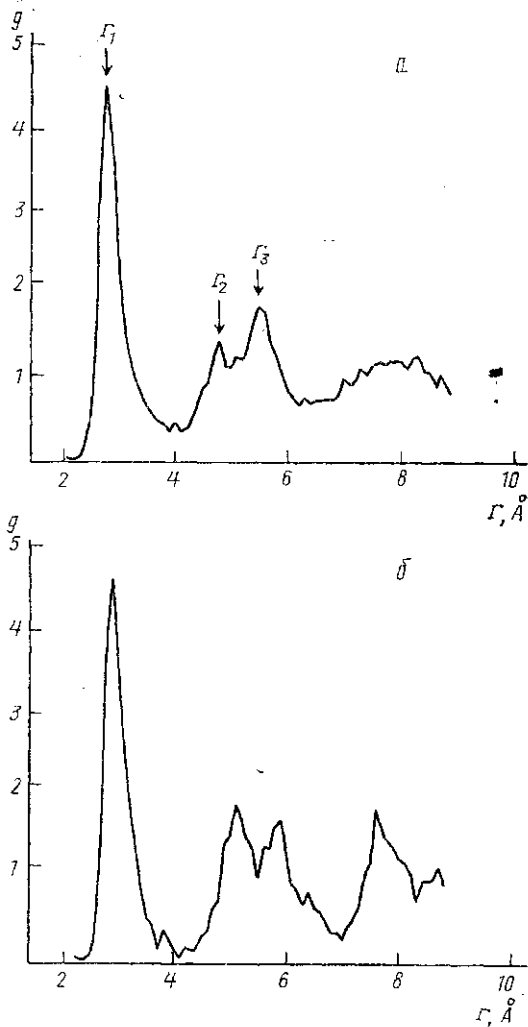


Рис. 1. Функция  $g(r)$  одного из слоев пленки аморфного (а) и кристаллического серебра (б) при  $T=300$  К

ных слоев, которые образовывали гексагональную сетку, соответствующую либо плоскости (111) г. ц. к. решетки, либо плоскости (001) г.п.у. решетки.

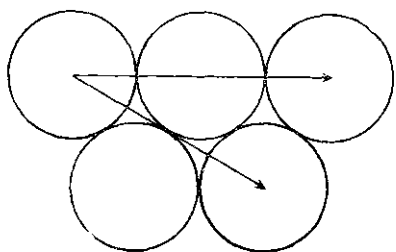


Рис. 2. Схема окружения одного из атомов ближайшими и следующими соседями

Далее полученная система была подвергнута нагреванию до 1500 К с последующим быстрым охлаждением (скорость охлаждения составляла примерно  $10^{14}$  град/с) до 20 К. Затем данная система была выдержана при 20 К в течение 10 000 временных шагов, а после этого ее температура была доведена до 300 К. На рис. 1, а представлена двумерная парная корреляционная функция  $g(r)$  [5] одного из слоев Ag, полученная в рассматриваемом эксперименте, а на рис. 1, б — аналогичная функция, полученная при 300 К.

Видно, что на кривой рис. 1, а отсутствует четвертый пик. Это указывает на отсутствие дальних корреляций в расположении атомов, которые характерны для хорошо упорядоченных кристаллических слоев. Поэтому полученная при быстром охлаждении функция  $g(r)$  указывает на отсутствие в этом случае хорошей упорядоченности (дальнего порядка). В то же время, судя по виду  $g(r)$  на рис. 1, а, ближний порядок в напыляемой пленке возникает даже при быстром охлаждении. Имеющиеся 3 максимума (рис. 2) соответствуют расстояниям между ближайшими соседями ( $r_1 = 2R_{at}$ ); между атомами, находящимися на концах длинной диагонали ромба ( $r_2 = 2R_{at}\sqrt{3}$ ), образованного касающимися атомами; между атомами, находящимися на расстоянии  $r_3 = 2 \cdot 2R_{at}$ . Это означает что плотноупакованная сетка содержит не более трех координационных окружностей. Стоит также отметить, что ширина максимумов  $g(r)$  растет с ростом  $r$ . Такая ситуация вполне соответствует возникновению аморфной сетки [6].

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Gawlinski E. T., Gunton J. D.//Phys. Rev. 1987. B36. P. 4774.
2. Luedtke W. D., Uzi Landman//Phys. Rev. 1989. B40. P. 11773.
3. Shu Zhen, Davies G. T.//Phys. Stat. Solidi(a). 1983. 78. P. 595.
4. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М., 1987.
5. Jia Zhenging, Yang Genging, Ghen Zhaonian et al.//J. Phys. Condens. Matter. 1994. 6. P. 1083.
6. Металлические стекла. Т. 2/Под ред. Г. Бека и Г.-И. Гюнтерердта. М., 1983.

Поступила в редакцию  
07.12.94