

离子束辅助沉积对类金刚石膜结构影响的计算机模拟*

李之杰¹⁾²⁾ 潘正瑛^{1)†} 朱 靖¹⁾ 魏 启¹⁾ 王月霞¹⁾ 臧亮坤¹⁾ 周 亮¹⁾ 刘提将¹⁾

¹⁾ 复旦大学现代物理研究所, 上海 200433)

²⁾ 内蒙古民族大学物理与机电学院, 通辽 028043)

(2004 年 5 月 20 日收到, 2004 年 10 月 20 日收到修改稿)

采用分子动力学(MD)模拟研究了离子束辅助沉积(IBAD)生长类金刚石(DLC)膜的物理过程. 分别选 C₂ 分子和 Ar 离子作为沉积源和辅助沉积粒子. 改变 Ar 的入射能量和到达比(Ar/C), 研究了它对 DLC 膜结构的影响. 重点讨论了 Ar 辅助沉积引起表面原子的瞬间活性变化对薄膜结构产生的影响. 分析表明, 由于 Ar 离子的轰击引起的能量和动量的传递, 大大地增强了 C 原子在表面的反冲动能及迁移概率, 增加了合成薄膜的 SP³ 键含量. 研究结果和实验观察一致, 并从合成机理上给出了一些定量解释.

关键词: 类金刚石膜, 离子束辅助沉积, 分子动力学模拟

PACC: 7115Q, 6185, 6855

1. 引言

类金刚石(diamond-like carbon, DLC)薄膜是 SP³ 键含量比较高的无定形碳膜. 因其具有很多优良的性质, 得到了广泛应用. 当前已有很多制备类金刚石薄膜技术. 离子束辅助沉积(ion-beam-assisted deposition, IBAD)方法, 因其一些参量容易控制(如通量、能量、温度等等), 且制备的薄膜具有很好的物理和化学性质而受到关注. 实验研究表明, 应用 IBAD 方法, 合成的 DLC 膜具有很好的四面体结构, 显示出低摩擦性和高硬度, 并与衬底结合很好^[1-3].

理论上对 IBAD 制备 DLC 膜的机理有不同的解释, 例如, 择优溅射和 SP² 杂化原子的移位效应等^[4-6]. 文献[5]用 Monte Carlo 方法研究了离子能量和离子(Ar)与原子(C)的比率对薄膜结构的影响, 和实验测量结果定性符合. Fedotov 等人采用 Tersoff 作用势的分子动力学(molecular dynamics, MD)模拟研究了 IBAD 方法合成碳膜的动力学过程^[7], 定量的计算了离子与原子的比率对薄膜结构的影响. 其不足之处是假设离子直接注入薄膜, 没有考虑离子的散射.

我们知道, 伴随离子轰击出现的瞬时高温和 C

原子的迁移将对 DLC 膜结构的形成起重要作用, 目前尚缺少对此基本机理的详细讨论.

此前我们曾用 MD 模拟研究了 C₂ 分子作沉积源生长 DLC 薄膜的动力学过程^[8,9]. 在此基础上, 本文用 MD 模拟方法研究辅助沉积离子(Ar)对碳膜结构的影响, 重点讨论辅助离子的能量、动量对沉积动力学及薄膜结构的影响.

2. 计算模型

2.1. MD 模拟和原子间相互作用势

本文的 MD 计算模型与文献[8,9]类似. 我们研究的体系是以原子为基本粒子组成 N 个粒子的体系, 由入射粒子和衬底原子构成. 分子动力学 MD 方法的核心是通过数值求解系统的运动方程, 得到体系的相空间轨道 $\mathbf{r}^N(t)$, $\mathbf{p}^N(t)$. 体系的哈密顿量 H 为

$$H(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i \cdot p_i}{2m_i} + \Phi(\mathbf{r}^N). \quad (1)$$

体系的正则方程为

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i} = \frac{\mathbf{p}_i}{m_i}, \\ \frac{d\mathbf{p}_i}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i} = -\nabla_i \Phi(\mathbf{r}^N), \end{aligned} \quad (2)$$

* 国家自然科学基金(批准号: 10275012)资助的课题.

† E-mail: panzy@fudan.edu.cn

式中 $\Phi(\mathbf{r}^N)$ 为体系的总势能, 它只与粒子的坐标有关而与动量无关; m_i, r_i, p_i 分别为 i 粒子的质量、位置和动量; $\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N$ 表示 N 各粒子的位置和动量; t 为时间.

由(2)式可看出, 作用势的选取对正确求解正则方程至关重要. 选取半经验公式 Brenner 作用势描述 C-C 原子间的相互作用^[10], Tersoff 作用势描述 C-Si 和 Si-Si 原子间的相互作用^[11]. Ziegler, Biersack 和 Littmark(ZBL)对势描述 Ar-C 和 Ar-Si 原子间的相互作用^[12], ZBL 作用势 $V(r)$ 表述为

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \phi\left(\frac{r}{a}\right), \quad (3)$$

其中 $\phi\left(\frac{r}{a}\right) = \sum_{i=1}^4 c_i e^{-b_i \frac{r}{a}}$ 称为屏蔽函数, 这是应用于碰撞问题的一个普适屏蔽函数.

Tersoff 势是一种用于描述半导体原子间相互作用的多体势, 其形式为

$$\Phi(\mathbf{r}^N) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij}, \quad (4)$$

$$V_{ij} = f_c(r_{ij}) [f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})],$$

其中

$$b_{ij} = (1 + \beta_i^{n_i} \cdot \zeta_{ij}^{n_i})^{1/2n_i},$$

$$\zeta_{ij} = \sum_{k \neq i, j} f_c(r_{ik}) \cdot \omega_{ik} \cdot g(\theta_{ijk}).$$

f_R 为排斥势, f_A 为吸引势, f_c 为截断函数, 它使两原子间的相互作用在距离较远时光滑地趋向于零. 函数 b_{ij} 被称为键序函数(bond order function), 它由同一原子的两个共价键间的夹角(θ_{ij}), 即体系中原子的三维空间结构决定, 它反映原子间的三体相互作用, m_i 为 Tersoff 势的参数值. Tersoff 势可以很好地描述异类原子间的相互作用(如 C-Si, Si-Ge 等), 它在半导体材料体系表面、界面的模拟中应用很广泛.

Brenner 势也是一种半经验势多体势, 它是在 Tersoff 势的基础上改进、发展而来. 改进主要体现在键序函数. 体系的总势能 E_b 表示成

$$E_b = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} [V_R(r_{ij}) - \overline{B_{ij}} \cdot V_A(r_{ij})], \quad (5)$$

$V_A(r_{ij}), V_R(r_{ij})$ 分别是 i, j 两原子间两体相互作用的吸引势部分和排斥势部分. 它们只与 i, j 原子间的距离 r_{ij} 有关.

Brenner 势中最富有特色的部分就是(5)式中的键序函数 $\overline{B_{ij}}$, 它反映了某两原子所成键与其所处的环境(周围原子)的多体非局域相互作用^[10], 该势已广泛用于化学气相沉积机理的研究中^[13].

2.2. 离子束辅助沉积的物理模型

MD 方法模拟 Ar 辅助沉积合成 DLC 膜, 用 C_2 分子沉积在 Si(001)(2×1) 表面, Si 衬底温度为 100K, C_2 是由两个碳原子构成的线性分子, 每个 C_2 分子的入射能量为 5eV. 辅助沉积离子用荷能 Ar 原子代替. Ar 原子入射能量记作 E_a , 分别选为 30 和 50eV. 辅助和沉积原子的比率(到达比)记作 η , 它分别选为 0.1, 0.25 和 0.5. 根据计算需要, 模拟中使用了两种 Si 衬底的厚度. 随着注入 Ar 能量的改变, 分别为 10 层和 16 层, 每层 64 个 Si 原子. 并通过 MD 模拟试验, 验证衬底尺寸足以保证模拟结果的收敛. 衬底底部两层保持固定不动, 模仿成厚衬底. 顶部两层原子的动力学过程完全受势场的作用. 应用 Berendsen^[14]速度标度法于中间的几层原子, 维持衬底为常温. 平行于表面($x-y$ 平面)应用周期边界条件. C_2 分子开始放置的位置距离当前表面足够远, 使得分子和表面原子的相互作用可以忽略. 然后, C_2 分子沿法线方向(z 轴)入射到 Si(001)(2×1) 表面. 全部原子体系的运动方程应用蛙跳算法求积分.

在薄膜制备过程的模拟中, 用 900 个 C_2 分子合成薄膜, 厚度大约为 1.5nm. 为了与实验结果相比较, 在 MD 模拟中, 设置的沉积速率尽可能低, 在每个团簇开始入射时, 保证前一个团簇和衬底得以充分地弛豫. 根据单个团簇的模拟结果, 每个团簇沉积动力学过程大约需要 1ps^[8,9]. 因此, 每两个 C_2 入射的时间间隔选择为 2.5 至 3.0ps. Ar 和 C_2 之间的碰撞时间间隔设置为 3ps, 比前者稍大. 为研究 Ar 辅助沉积生长 DLC 膜的机理, 对 Ar 轰击碳膜的影响进行了研究. 定量分析了 Ar 轰击引起的瞬间高温、表面 C 原子获得较大反冲动能和 C 原子的移位.

3. 结果和讨论

3.1. Ar 辅助沉积对碳膜结构的影响

我们模拟了几种具有不同 η 和 E_a 值的薄膜. 为了重点研究 Ar 辅助沉积的影响, 所有事件中 C_2 的入射能量均选为 5eV.

我们首先跟踪了 Ar 离子轨迹, 观察到大部分 Ar 离子经历多次碰撞并且损失大部分动能后在表面被散射, 少数 Ar 离子留在薄膜内. 依据 E_a 不同, 仅有 5% 到 15% 的 Ar 注入到薄膜系统. 在实验中这

些离子将被蒸发.因此,Ar 辅助沉积中主要通过其能量和动量的转移影响薄膜的性质.

图 1 显示两个典型碳膜侧视图($x-z$ 平面)的快照.其中图 1(a) ($\eta = 0$) 是没有辅助沉积的碳膜,图 1(b) 是选 $E_a = 30\text{eV}$, $\eta = 0.25$ 时辅助沉积的碳膜.为了看得清楚,在 y 方向将薄膜切了一半,仅显示了前半部分模拟体系的原子位置.显然,经辅助沉积后其密度比起前者更高,衬底和薄膜界面处的混合部分变宽.

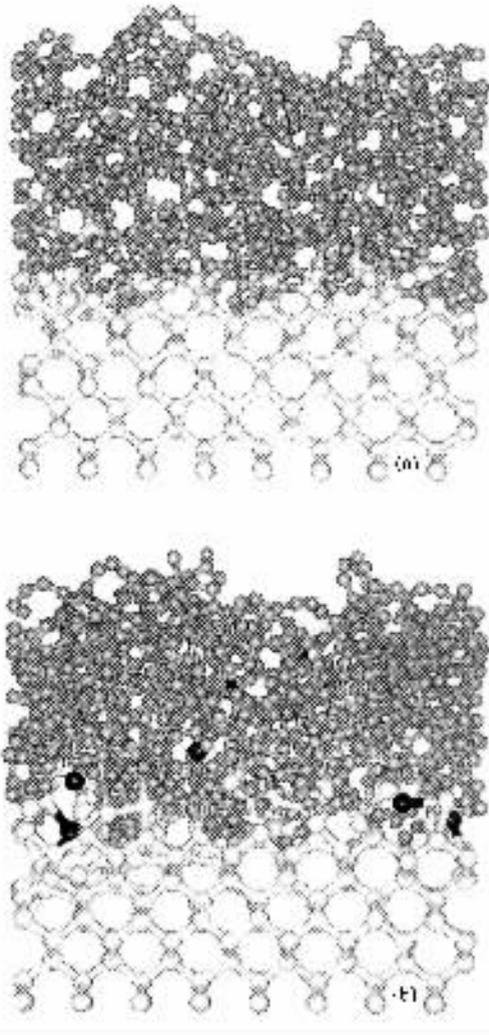


图 1 能量为 5eV 的 C_2 分子在 Si 表面合成薄膜的原子位置侧视图.(a) 没有 Ar 轰击 (b) Ar 辅助沉积, $E_a = 30\text{eV}$, $\eta = 0.25$. 每个碳膜由 900 个 C_2 沉积而成,图中黑圆点为 C 原子,灰白圆点表示 Si 原子.大的黑圆点是留在碳膜系统中的 Ar 离子

为了定量研究到达比 η 对薄膜结构的影响,我们模拟了四类辅助沉积碳膜,并计算了它们沿 z 轴的原子密度分布, η 的取值分别为 0.5, 0.25, 0.1 和 0.0 (无 Ar). Ar 离子的轰击能量为 50eV,合成碳膜的

原子数相同,均超过 1800 个,其他的模拟参数相同.我们发现,随着 η 值的增加,其密度分布的峰值增大,而宽度减小.取密度分布的峰值一半处宽度定义为薄膜的半宽度.表 1 给出不同 η 值对应的薄膜半宽度值.从表中看出,当 $\eta = 0.50, 0.25, 0.10$ 时,薄膜的半宽度分别比 $\eta = 0.0$ 减少了 21.42%, 13.0% 和 6.49%.

表 1 不同辅助离子/沉积原子(到达比)时 Ar 辅助沉积合成薄膜宽度的比较(Ar 的轰击能量 $E_a = 50\text{eV}$)

到达比	0.0	0.1	0.25	0.5
半宽度/nm	1.504	1.406	1.308	1.182

然后,分别在上述四个碳膜的中间部分截取相同体积,计算该体积的平均密度,其数值见表 2.从表中看到当 $\eta = 0.5$ 时密度达到最大为 $3.02\text{g}/\text{cm}^3$, 比 $\eta = 0.0$ 时大 27%.表中每组数据都以 3fs 为周期进行了 20 次以上的统计分析.

表 2 不同到达比 η 合成薄膜的平均密度比较.

Ar 的轰击能量 $E_a = 50\text{eV}$

到达比(Ar/C)	0.0	0.1	0.25	0.5
平均密度(g/cm^3)	2.38	2.66	2.84	3.02

考虑到石墨和金刚石分别具有三配位和四配位结构.为进一步分析薄膜的类金刚石特性,我们使用了与计算平均密度相同的统计方法计算了薄膜中 C 原子的近邻数分布,如图 2 所示,计算的截断距离取为 0.21nm.从图中看出当 $\eta = 0$ 时 3 近邻最大,且随着 η 的增大而降低.4 近邻部分随着 η 值的增大而增大,反映出薄膜中有更多的 SP^3 键形成.

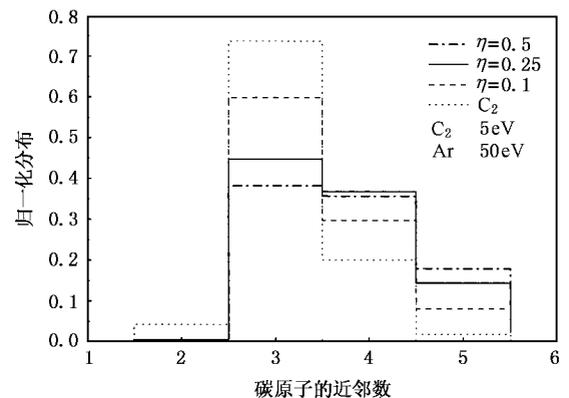


图 2 不同到达比 η 合成碳膜的近邻数分布比较. C_2 团簇入射能量为 5eV, 辅助 Ar 离子的入射能量为 50eV. η 分别选为: 0.5 (点划线), 0.25 (实线), 0.1 (虚线), 0.0 (点线)

接下来,研究了入射能量 E_a 对薄膜结构的影

响. Ar 的碰撞能量选择为 30 和 50eV, 选取相同的到达比值 ($\eta = 0.25$). 我们按如上方法计算了两种薄膜的密度分布、近邻数分布和平均密度等参量. 表 3 给出了两种薄膜的平均密度, $E_a = 50\text{eV}$ 时薄膜的平均密度大于 $E_a = 30\text{eV}$. 此外, $E_a = 30\text{eV}$ 时其碳原子的 3 近邻数较 50eV 时高出 10.1%, 而后的 4 近邻数较前者高 4.6%. 结果显示随着 Ar 能量的增加, 薄膜的性质可得到相应的改良.

表 3 不同的 Ar 轰击能量, 合成薄膜的平均密度比较. 到达比 $\eta = 0.25$

Ar 的轰击能量/eV	30	50
平均密度/(g/cm ³)	2.77	2.84

另外一个有意义的、用以判定薄膜质量的参数是合成的薄膜与衬底的附着力. 实验发现, IBAD 方法制备的薄膜与衬底界面的结合处变宽且附着力增强^[15]. 我们用计算机模拟比较了下述两种薄膜在衬底表面附近的结构, 即没有 Ar 辅助沉积 ($\eta = 0$) 和有辅助沉积 ($E_a = 50\text{eV}$, $\eta = 0.25$) 合成的薄膜. 图 3 显示了两种薄膜沉积的 C 原子和衬底 Si 原子的深度分布. 为了表达清楚, 图中仅显示了溅射至衬底表面的 Si 原子和注入到衬底表面以下的 C 原子. 点线表示衬底表面. 前者注入 Si 衬底的 C 原子数是 55 后者为 70. 再看 C 原子进入 Si 衬底的深度, 当 $\eta = 0.25$ 时深度达 0.6nm, 是 $\eta = 0$ 时的两倍. 因此有辅助沉积合成的薄膜在界面处的混合层变宽.

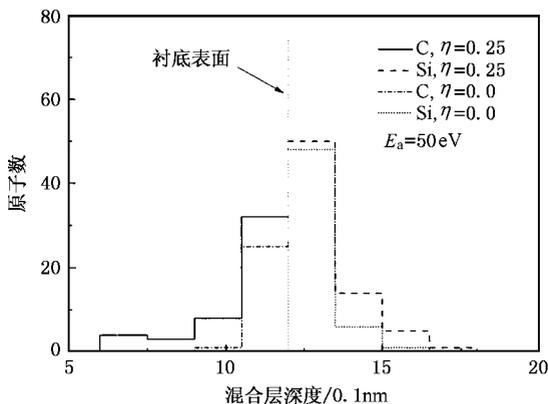


图 3 有 Ar 辅助沉积和无 Ar 辅助沉积两种碳膜在衬底表面附近 C 和 Si 的深度分布. Ar 入射能量 $E_a = 50\text{eV}$, 到达比 $\eta = 0.25$. 图中仅绘出溅射至衬底表面的 Si 原子和注入到衬底表面以下的 C 原子

另外, 我们以 SiC 的键长 (0.189nm) 为基准计算了在分界面附近 C-Si 键的成键数目、合成 C-Si 键的 C 原子数等. 发现有辅助沉积合成的薄膜和无辅助

沉积合成的薄膜相比, 前者和衬底 Si 原子成键的 C 原子数比后者增加了 20%. 此结论支持了实验观测结果^[15,16].

3.2. Ar 辅助沉积改善薄膜结构的机理分析

从以上所述, 我们发现 Ar 辅助沉积对 DLC 膜结构的影响. 但 IBAD 过程是如何改善了 DLC 膜结构性质呢? 据有关文献讨论, 认为 Ar 轰击引起的表面原子移位和薄膜中原子的瞬时活性起主要作用^[5,17]. 为了探索其机理, 我们从两个方面对薄膜沉积的动力学过程进行了讨论. 先分析了 Ar 轰击后碳膜中 C 原子的反冲动能, 然后计算了 Ar 轰击后 C 原子的移位. 选 $\eta = 0.25$, E_a 分别为 30 和 50eV 两种条件下制备的薄膜. 在 MD 模拟中, 我们跟踪了体系中每个原子的坐标、速度随时间的变化过程. 我们发现, 在每个 Ar 轰击后 100fs 左右, 表面反冲原子速度接近最大值, 然后迅速减小. 为此我们记录了每个 C 原子的最大反冲动能 E_{kr} , 并统计了具有较高反冲动能的 C 原子数与 E_a 的关系. 因为这些原子有较大的概率在表面迁移, 从而影响薄膜的结构. 对应每个 Ar 的轰击, 表 4 给出体系中最大反冲动能 (E_{kr}) 大于 5, 10, 15 和 20eV 的 C 原子数, 表中数据为 100 次 Ar 轰击的平均值.

表中看出具有较高反冲动能的原子数很强的依赖于 E_a . 例如, $E_a = 50\text{eV}$, E_{kr} 大于 10eV 的反冲原子数为 $E_a = 30\text{eV}$ 的 5 倍以上. 另外, 当 $E_a = 50\text{eV}$, 最高的 E_{kr} 可达到 20eV. 这样可以部分解释实验上对 IBAD 过程的观测, 由于 SP^2 杂化原子移位域能在 10 到 20eV 附近, 低于 SP^3 杂化原子 (35eV 左右)^[6,18], 获得足够动能的三配位原子可克服势垒而过渡为四配位结构. 因此, 应用 IBAD 方法并适当提高 Ar 离子的能量能改善类金刚石薄膜的 SP^3 比例^[16].

表 4 单个 Ar 离子轰击后获得较高反冲动能 (E_{kr}) 的 C 原子数 (数据为 100 次 Ar 轰击的平均值)

E_a/eV \ E_{kr}/eV	> 5	> 10	> 15	> 20
50	1.33	0.28	0.08	0.02
30	0.56	0.05	0	0

最后, 还计算了 Ar 离子轰击引起的 C 原子迁移. 图 4 显示了 C 原子在垂直表面方向 (z 方向) 和平行方向 (径向) 的移位分布, 后者用沿着 r 方向的分布表述, $\Delta r = \sqrt{(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2}$. 数据是通过计算

Ar 轰击前和轰击后同一个碳原子的坐标变化获得的,并取为 100 次 Ar 轰击的平均值.从统计结果可以看出表面原子的移位特别是具有较大移位的碳原子数很强烈地依赖于 E_a .当 $E_a = 50\text{eV}$ 和 30eV 时,平均每个 Ar 离子轰击引起 C 原子向下移位超过 b_0 ($b_0 = 0.154\text{nm}$,金刚石的键长)的 C 原子数分别为 1.16 和 0.28,前者为后者的 4 倍.而每次 Ar 轰击引起径向移位超过 b_0 的 C 原子数分别为 3.97 和 1.31,前者的概率为后者的 3 倍(表 5),说明原子的移位强依赖于 E_a .另外,图 4 和表 5 显示,向下方向移位距离大于 b_0 的原子数多于向上方向的.这是因为辅助沉积 Ar 离子与衬底间的动量转移.因此,有辅助沉积的薄膜在 z 方向的密度增加并使薄膜与衬底之间的混合层变宽.这与图 1 显示的结果相一致,支持了实验的结论,即辅助沉积提高了原子的迁移

率从而使薄膜变得密集、光滑^[15,16].

表 5 单个 Ar 离子轰击后发生较大移位的碳原子数,其中 Δz_- 和 Δz_+ 分别表示向下和向上的移位,

$\Delta r = \sqrt{(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2}$ 是水平方向移位. $b_0 = 0.154\text{nm}$, 为金刚石键长.数据为 100 次 Ar 轰击的平均值

E_a/eV	50	30	50	30	50	30
移位	Δr		Δz_-		Δz_+	
$> 0.5b_0$	10.61	5.35	2.69	1.08	1.98	0.56
$> b_0$	3.97	1.31	1.16	0.28	0.70	0.08
$> 1.3b_0$	3.04	0.72	0.86	0.16	0.58	0.04

4. 结 论

本文用 MD 模拟研究了 IBAD 法制备 DLC 膜的物理过程.详细分析了离子束能量和离子与原子的到达比 η 对 DLC 膜结构的影响,重点分析了由于 Ar 的辅助沉积引起的能量和动量的传递,增强了表面沉积 C 原子的活性及迁移率.本文的主要结果如下:

1. 辅助沉积 Ar 离子采用适当的能量时,可以改善合成碳膜的种类金刚石性质.当选择适当能量的 Ar 时,随着 η 值的增加,薄膜的密度和 sp^3 杂化比例均随之增加.

2. 与没有 Ar 辅助沉积的碳膜比较,我们发现当有 Ar 辅助沉积时,衬底和薄膜的原子混合层增加,从而使薄膜在表面的附着力增强.

3. 研究了 Ar 轰击对体系微观过程的影响,特别是表面 C 原子的瞬时活性,统计了 C 原子的最大反冲动能及其移位.观察到少数 C 原子获得了较大的反冲动能,其数值接近 sp^2 杂化原子的移位能.此过程对碳膜长成四面体结构起了主要作用,从而在原子尺度上揭示了离子束辅助沉积类金刚石薄膜过程中部分物理机理.

最后,应该注意到因为计算机运算时间所限,MD 模拟行为被限制到只能研究瞬间动力学.众所周知,DLC 膜的生长是一个复杂的物理和化学过程.其他因素,像热激发的过程,被视为一个较长期的过程,尚未考虑在内.因此,所得到的结果与实验结果定性一致,还不能定量解释实验结果.今后我们将结合 MD 和 Monte-Carlo 模拟开展进一步研究.

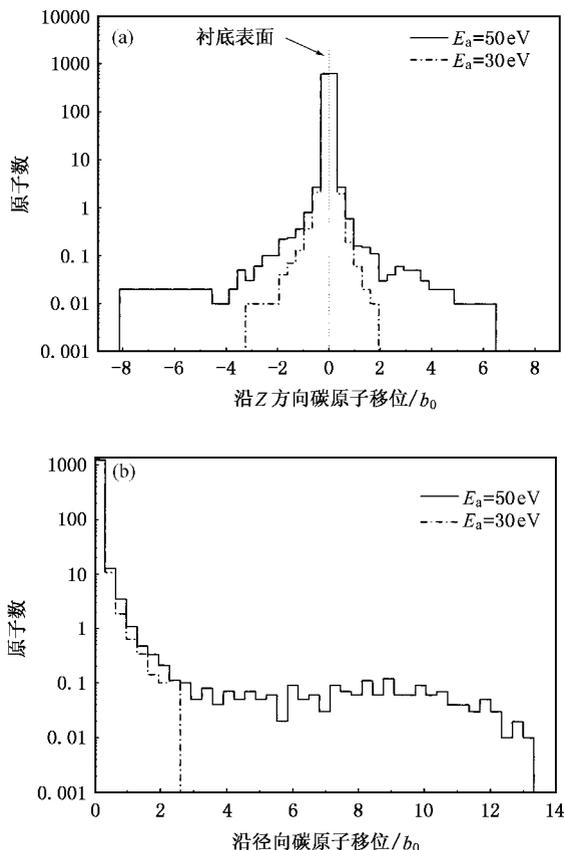


图 4 Ar 轰击引起的 C 原子移位分布.(a)与表面垂直方向(即 z 方向)的原子移位分布.(b)平行于表面方向(即径向 r 方向)的原子移位分布(到达比均为 0.25,Ar 离子的能量分别为 50eV (实线)和 30eV (点划线),数据为 100 次 Ar 轰击的平均值. $b_0 = 0.154\text{nm}$,为金刚石键长)

- [1] Hirvonen J K 1991 *Mater. Sci. Repores* **6** 215
- [2] Colligon J S 1991 *Mater. Sci. Eng. A* **139** 199
- [3] Wang B B *et al* 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 251 (in Chinese) [王必本等 2001 *物理学报* **50** 251]
- [4] Lifshitz Y , Kasi S R and Rabalais J W 1989 *Phys. Rev. Lett.* **62** 1290
- [5] Rossi F and Andre B 1992 *Jpn. J. Appl. Phys.* **31** 872
- [6] Moller W 1991 *Appl. Phys. Lett.* **59** 2391
- [7] Fedotov S A , Efimchik AA and Byeli AV 1997 *Diam. Relat. Mater.* **6** 1638
- [8] Li Z J *et al* 2003 *Euro. Phys. J. D* **23** 369
- [9] Wei Q *et al* 2003 *Phys. Rev. B* **68** 234508
- [10] Brenner D W 1990 *Phys. Rev. B* **42** 9458
- [11] Tersoff J 1989 *Phys. Rev. B* **39** 5566
- [12] Eckstein W 1991 *Computer simulation of ion-solid interactions* (Berlin , New York : Springer-Verlag) p40
- [13] Zhu W J , Pan Z Y and Ho Y K 1999 *Eur. Phys. J. D* **5** 83
- [14] Berendsen H J C , Postman J P M , van Gunsteren W F , DiNola A and Haak J R J 1984 *Chem. Phys.* **81** 3684
- [15] Tsai H C and Bogy D B 1987 *J. Vac. Sci. Technol. A* **5** 3287
- [16] Qi J , Luo J B , Wen S Z , Wang J and Li W Z 2000 *Surf. Coat. Technol.* **128** 324
- [17] Wang Z and Seebauer E G 2002 *Phys. Rev. B* **66** 205409
- [18] Zaiser M and Banhart F 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 3680

Simulations of the structure characteristic of diamond-like carbon films formed by ion-beam-assisted deposition^{*}

Li Zhi-Jie^{1,2)} Pan Zheng-Ying^{1)†} Zhu Jing¹⁾ Wei Qi¹⁾ Wang Yue-Xia¹⁾
Zang Liang-Kun¹⁾ Zhou Liang¹⁾ Liu Ti-Jiang¹⁾

¹⁾*Institute of Modern Physics , Fudan University , Shanghai 200433 , China)*

²⁾*College of Physics and Electromechanics , Inner Mongolia University for Nationalities , Tongliao 028043 , China)*

(Received 20 May 2004 ; revised manuscript received 20 October 2004)

Abstract

Molecular dynamics (MD) simulation was used to study the growth process of diamond-like carbon (DLC) films synthesized via ion-beam-assisted deposition (IBAD). The C₂ molecules and Ar ions were selected as deposition and assistance projectiles , respectively. The influence of the impact energy of Ar as well as the assistance/deposition atomic ratio (Ar/C) , on the film structure was investigated. The transient mobility and the migration of C atoms caused by Ar impact were studied. Our results indicate that the impact-induced high recoil energy and displacement of deposited C atoms play a leading role in the growth of DLC films. This can be attributed to the incident energy and momentum of assistance Ar. Our results agree well with the experimental observation. Furthermore , it explains the growth mechanism partly.

Keywords : diamond-like carbon film , ion-beam assisted deposition , molecular dynamics simulation

PACC : 7115Q , 6185 , 6855

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10275012).

[†]E-mail : panzy@fudan.edu.cn