

斜入射离子束辅助沉积对类金刚石薄膜结构影响的分子动力学模拟^{*}

开花 李运超 郭德成 李双 李之杰[†]

(内蒙古民族大学物理与电子信息学院, 通辽 028043)

(2008 年 2 月 17 日收到, 2008 年 6 月 10 日收到修改稿)

采用分子动力学(MD)模拟方法,从原子尺度上研究了离子束辅助沉积(IBAD)类金刚石(DLC)薄膜过程中离子束入射角对薄膜结构的影响.重点讨论了不同的离子束入射角所对应的薄膜表面模型,平均密度和 sp^3 键含量.结果表明,离子束斜入射加强了入射原子的水平动能,从而加强了原子水平迁移;Ar 离子斜入射时 C 原子迁移率均比垂直入射大,薄膜密度和 sp^3 键含量都比垂直入射小.不同的离子束入射角随着到达比和入射能的变化,对薄膜结构的影响不同.离子束斜入射时可以得到不同结构的膜.

关键词:类金刚石薄膜,入射角,离子束辅助沉积,分子动力学模拟

PACC:7115Q,6185,6855

1. 引言

类金刚石薄膜是一类力学、光学、电学和化学等特性类似于金刚石的非晶碳膜.自上世纪 80 年代以来,其一直是各国镀膜技术领域研究的热点之一^[1].当前已有很多制备类金刚石薄膜技术,广泛应用于光学器件、磁记录介质、机械工具和医用矫形体的保护层^[2].近年来,采用离子束辅助沉积(IBAD)方法制备出多种非晶薄膜及亚稳态薄膜^[3],并应用于工件表面改性,因此 IBAD 已成为一项研发新型非晶材料的有力工具.实际工作中,工件表面形貌比较复杂,离子束入射方向往往与工件表面成一定角度.最近研究表明,IBAD 方法中离子束入射角度对薄膜的结构及各项性能有较大的影响,例如,在 Co/Cu 和 Fe/Nb 系统中,当其他沉积条件均相同的情况下,离子束入射角度不同,微观结构大相径庭,并制备出了一些新的亚稳合金^[4].在沉积 YSZ(钇稳定氧化锆), Hf, TiN 等薄膜时,发现薄膜可具有特定取向或织构^[5].为解释上述现象,人们提出了沟道效应^[6]和溅射效应等模型^[7].马天宝等研究了 DLC 薄膜生长的动态过程,提出了原子表面运动模型,并讨论过 C

原子入射角对金刚石基体粗糙度的影响^[8,9].文献 [10]用 MD 模拟方法研究了辅助沉积离子(Ar)对碳膜结构的影响,模拟了辅助离子垂直入射的过程,但没有考虑斜入射的情况.

本文用 MD 模拟方法从原子层次研究辅助沉积离子(Ar)的入射角对薄膜微观结构的影响.

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 [10—12]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

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

体系的正则方程为

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

^{*} 内蒙古自治区教育厅科研基金(批准号: NJ04062)和内蒙古民族大学博士启动基金(批准号: BS183)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: zhijie_li@fudan.edu.cn

式中 $\Phi(r^n)$ 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; r^N, p^N 表示 N 个粒子的位置和动量, 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^[13], Tersoff 作用势描述 C-Si 和 Si-Si 原子间的相互作用^[14]. Ziegler, Biersack 和 Littmark (ZBL) 对势描述 Ar-C 和 Ar-Si 原子间的相互作用^[15], 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

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

其中

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

$$b_{ij} = (1 + \beta_{ij}^3 \cdot \zeta_{ij}^n)^{1/2n_{ij}},$$

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

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, n_{ij} 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,该势已广泛用于化学气相沉积机理的研究中^[16]。

2.2. 离子束辅助沉积的物理模型

MD 方法模拟 Ar 斜入射辅助沉积合成 DLC 膜,用 C_2 分子沉积在 Si(001)(2×1) 表面, Si 衬底温度为 100 K, 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 5 eV. 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 10, 30 和 50 eV. 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. Si 衬底的厚度为 10 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 等^[17] 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 轴反方向)入射到 Si(001)(2×1) 表面. 辅助沉积离子 Ar 以不同的角入射. Ar 离子的入射角指 Ar 离子的入射方向与底靶表面法线方向的夹角. 图 1 是 C_2 和 Ar 的入射角示意图, 带箭头的实线表示 Ar 的入射方向, 虚线表示 C_2 的入射方向, 灰色平面表示底靶表面. 考虑了两种情况: 1) 如图 1(a) C_2 垂直入射, Ar 离子的入射角为 α , 与薄膜表面法线方向成 α 角斜入射. α 分别选为 $60^\circ, 45^\circ, 30^\circ$ 和 0° (垂直入射), 而且方位角不变, 向同一个方向入射. 2) 如图 1(b), C_2 垂直入射, Ar 离子的入射角为 β 与薄膜表面法线方向成 β 角斜入射. β 分别选为 $60^\circ, 45^\circ, 30^\circ$ 和 0° , 而且程序中调用随机数, 使方位角随机变化. 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 1200 个 C_2 分子合成薄膜, 厚度大约为 1.8 nm. 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 1 ps^[11, 12]. 因此, 每两个 C_2 入射的时间间隔选择为 2.5 至 3.0 ps. Ar 和 C_2 之间的碰撞时间间隔设置为 3 ps, 比前者稍大. 为研究斜入射离子束辅助沉积对生长 DLC 膜的机理, 轰击离子 Ar 的不同入射角对碳膜的影响进行了研究. 定量分析了不同的入射角所对应的表面模型的比例和薄膜的密度、近邻数等判定薄膜质量的参数。

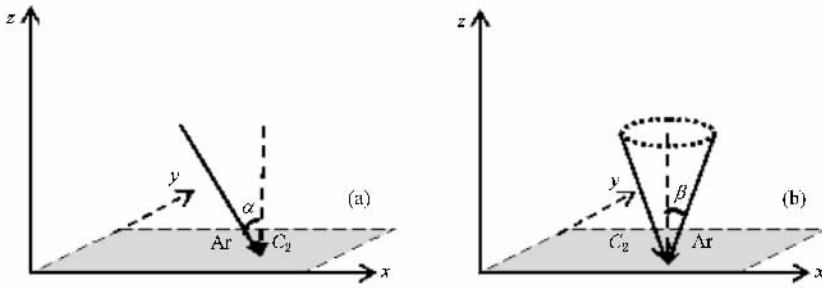


图 1 C_2 和 Ar 的入射角示意图 (a) Ar 以 α 角入射 (b) Ar 以 β 角空间随机入射

3. 计算结果与讨论

3.1. 入射角对原子表面行为及薄膜结构的影响

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^[10]. 本文选择了厚度为 1.6 nm 的薄膜表面,计算了 Ar 轰击前和轰击后同一个 C 原子的坐标变化,并据文献[9]统计了每次 Ar 轰击,C 原子发生各种表面行为的原子占原子总数比例随着入射角的变化趋势.用 ΔZ 表示 Ar 轰击后 C 原子入射深度: $\Delta Z = Z_{前} - Z_{后}$, $Z_{前}$ 和 $Z_{后}$ 分别是 Ar 轰击前和轰击后 C 原子 Z 方向的坐标,若 ΔZ 为负值,则表示 C 原子向上移动,若 ΔZ 为正值,则表示 C 原子向下移动. ΔR 表示 C 原子的水平迁移距离: $\Delta R = \sqrt{\Delta X^2 + \Delta Y^2}$,其中 ΔX 和 ΔY 表示原子在水平和正交方向的移位.根据原子入射深度 ΔZ 和水平迁移距离 ΔR 的大小,入射原子的各种表面行为可以按照以下判据进行区分:若 $-2 \text{ nm} < Z < 0.2 \text{ nm}$ 且 $\Delta R < 0.154 \text{ nm}$ (金刚石中的 C—C 键长),则称之为原子冷冻在薄膜表面;若 $\Delta Z < -2 \text{ nm}$,则判定入射原子反弹;若 $\Delta Z > 0.2 \text{ nm}$,即入射原子平衡在薄膜表面以下 0.2 nm 的深度,则判定入射原子注入薄膜;若 $\Delta Z > -2 \text{ nm}$ 且 $\Delta R > 0.154 \text{ nm}$,即原子在水平方向的迁移距离大于金刚石中的 C—C 键长,则称之为原子发生迁移.

Ar 离子以不同的入射角入射,C 原子的表面状态具有不同比例,如表 1,2 冷冻原子所占比例占据主要地位,这是因为 C_2 的入射能均取为 5 eV,入射能量较低,Ar 轰击没产生碰撞的 C 原子保持原有的动能,冷冻在薄膜表面.当以 α 角入射时,随着入射角的减小迁移率减小,注入率增加,相应的薄膜平均密度和 sp^3 杂化比例增加,如表 3.当以 β 角入射时,

斜入射的迁移率比垂直入射大,相应的薄膜密度和 sp^3 杂化比例都比垂直入射小. $\beta = 60^\circ$ 时比 $\beta = 45^\circ$ 和 30° 迁移率小,注入率大,薄膜密度也大.Ar 离子以 α 角入射和 β 角入射产生 C 原子的表面行为所占比例不同,相应的密度和 sp^3 杂化比例也不同.以 β 角入射时注入率比 α 角入射大,相应的薄膜密度和 sp^3 杂化比例也基本都比 α 入射大.当 $\beta = 45^\circ$ 时比 $\alpha = 45^\circ$ 迁移率大 1.2 倍,但注入率更大,1.4 倍,薄膜密度和 sp^3 杂化比例也大. $\alpha = 30^\circ$ 比 $\beta = 30^\circ$ 虽然注入率小,但迁移率更小,相应的薄膜密度和 sp^3 杂化比例大.

表 1 Ar 以不同 α 角入射,碳原子在薄膜表面状态的统计 (80 次平均值)

角($^\circ$)	60	45	30	0
冷冻/%	97.18	97.54	97.86	97.85
反弹/%	0.01	0.0	0.0	0.0
注入/%	0.05	0.07	0.07	0.09
迁移/%	2.76	2.39	2.07	2.06

表 2 以不同 β 入射,碳原子在表面状态的统计 (80 次平均值)

角($^\circ$)	60	45	30	0
冷冻/%	97.55	97.03	97.21	98.07
反弹/%	0.01	0.0	0.0	0.01
注入/%	0.11	0.10	0.09	0.13
迁移/%	2.33	2.87	2.70	1.79

表 3 $\eta = 0.5, E_a = 50 \text{ eV}$ 时离子束入射角对薄膜结构的影响

角($^\circ$)	60	45	30	0	
密度(g/cm^3)	α	2.49	2.65	2.80	2.96
	β	2.72	2.66	2.70	3.01
$sp^3/\%$	α	26.6	30.1	35.2	35.4
	β	31.0	30.5	34.0	37.1

综上所述,注入率越大薄膜密度和 sp^3 杂化比

例越大,迁移率越小,薄膜密度和 sp^3 杂化比例越大。 Ar 离子斜入射时 C 原子迁移率均比垂直入射大,薄膜密度和 sp^3 杂化比例都比垂直入射小。这个结果与其他文献结果一致。原子注入有利于形成 sp^3 杂化占优的亚稳态结构,而原子迁移却导致薄膜的热弛豫,使亚稳态 sp^3 结构向更稳定的 sp^2 结构转化,对薄膜生长不利。入射原子注入和迁移数目及剧烈程度的对比决定了薄膜生长的模式和最终结构^[9]。斜入射加强了入射原子的水平动能分量,从而加强了原子水平迁移,所以薄膜的水平弛豫效应比较明显,薄膜发生石墨化,质量有所下降。

Ar 离子经历碰撞,把大部分动能传递给 C 原子,主要使它产生迁移或注入,很少使 C 原子产生反弹。而 Ar 离子经历多次碰撞并且损失大部分动能后在表面散射,入射角越大散射的越多,薄膜中滞留的 Ar 离子的含量越少。如表 4 所示,其他沉积条件都相同,斜入射时薄膜中滞留的 Ar 原子数比垂直入射少,有利于提高薄膜的硬度。由于 Ar 离子有较强

的刻蚀作用,当其含量较低时,有利于提高膜的硬度^[18]。

表 4 900 个 C_2 薄膜中滞留的 Ar 原子的数, $\eta = 0.5$, $E_a = 50$ eV

角($^\circ$)	60	45	30	0
Ar 原子数 α	16	32	34	73
β	17	34	46	60

斜入射可以得到不同形貌的薄膜。如图 2 所示,(a)(b)(c)(d)是 Ar 离子以 α 角入射时碳膜侧视图($X-Z$ 平面)的快照。从图中可以看出当 $\alpha = 60^\circ$ 时可以得到一边高一边低的薄膜, $\alpha = 45^\circ$ 时观察到两边高中间低的碳膜。以 60° 和 45° 斜入射也观察到了多孔结构,如图 2(e)(f)分别是 $\beta = 60^\circ$ 和 45° 时碳膜的俯视图。一些实验表明采用 IBAD 方法能得到多孔结构,文献 [19] 实验中离子以 45° 斜入射制备的样品中出现了孔洞结构。对此有人提出“扩散迁移”理论^[20]来解释这一现象。该理论认为,扩散能力有限的吸附原子倾向于沉积在薄膜表面突出部,而不是

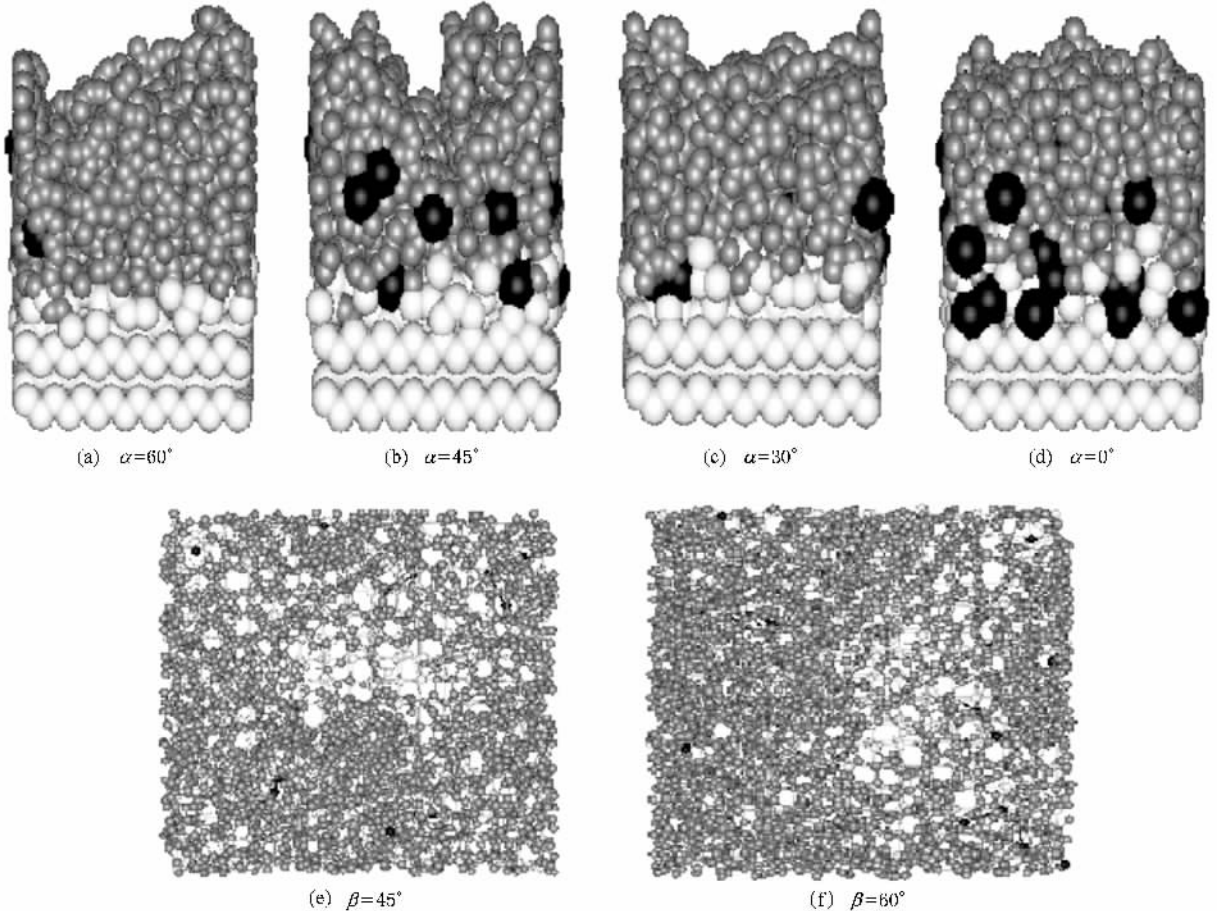


图 2 (a)(b)(c)(d)是 Ar 原子以 α 角入射时碳膜侧视图($X-Z$ 平面)的快照,(e)(f)分别是 $\beta = 60^\circ$ 和 45° 时碳膜的俯视图,灰色圆点: C 原子,白色点: Si 原子,黑色点: Ar 原子。 $\eta = 0.5$, $E_a = 50$ eV

低洼处,从而形成孔洞结构.所以模拟中离子以 60° 和 45° 斜入时出现多孔结构的原因是:此时,斜入射时限制了离子束对表面增强扩散能力的提高,使“扩散迁移”成为主导因素,从而产生了多孔结构,这些孔洞在随后的薄膜生长过程中由于“宏观荫蔽效应”(geometrical shadowing)^[20]而得以维持.

3.2. 入射角随着到达比的变化对薄膜结构的影响

为了定量研究入射角随着到达比的变化对薄膜结构的影响,模拟了在不同入射角 β 下,到达比分别取为 0.0(无 Ar) 0.1 0.25 和 0.5,合成薄膜的原子数相同,均超过 2000 个,其他的模拟参数相同,分别计算了薄膜的平均密度和 sp^3 杂化比例.如图 3 和 4,入射角相同时密度和 sp^3 杂化比例随着到达比的变化趋势基本一致,随着到达比的增加而增加. $\eta = 0.1$ 和 0.25 时入射角越小密度和 sp^3 杂化比例越大. η 从 0.25 增加到 0.5 时 30° 和 0° 的密度和 sp^3 杂化比例增加得更快. $\eta = 0.1$, $\beta = 60^\circ$ 和 45° 时薄膜的

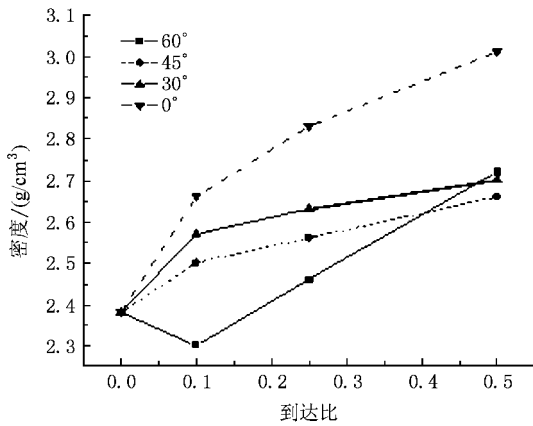


图 3 各种入射角 β 在不同的到达比下薄膜的密度比较 ($E_a = 50$ eV)

表 5 Ar 以 α 角,不同的入射能 (E_a) 轰击时薄膜的平均密度, $\eta = 0.25$

α 角($^\circ$)	60			45			30			0		
能/eV	10	30	50	10	30	50	10	30	50	10	30	50
密度(g/cm^3)	2.08	2.04	2.09	2.37	2.42	2.49	2.48	2.60	2.75	2.56	2.74	2.81

表 6 Ar 以 β 角,不同的入射能 (E_a) 轰击时薄膜的平均密度, $\eta = 0.25$

β 角($^\circ$)	60			45			30			0		
能/eV	10	30	50	10	30	50	10	30	50	10	30	50
密度(g/cm^3)	2.06	2.19	2.46	2.51	2.53	2.56	2.56	2.71	2.63	2.63	2.75	2.83

4. 结 论

本文用 MD 模拟研究了 IBAD 法制备 DLC 膜时

sp^3 杂化比例比 $\eta = 0.0$ 时还小,此时 sp^2 杂化比例大,容易形成类石墨薄膜,不利于形成 sp^3 键.所以斜入射时为了提高 DLC 膜质量可以适当提高到达比.

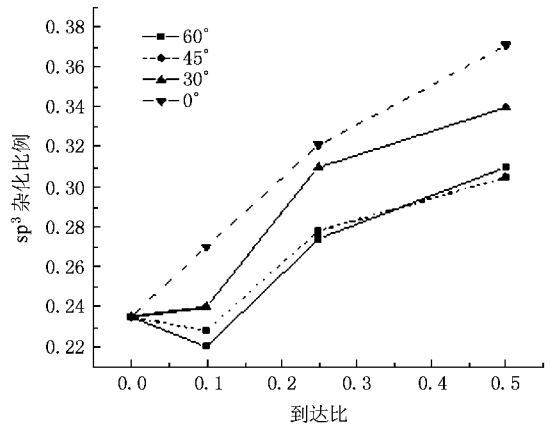


图 4 各种入射角 β 在不同的到达比下合成薄膜的 sp^3 杂化比例比较 ($E_a = 50$ eV)

3.3. 入射角随着入射能的变化对薄膜结构的影响

如表 5 和 6 所示,入射角相同时,除了 $\alpha = 60^\circ$ 和 $\beta = 30^\circ$ 随着入射能的增加薄膜密度也增加^[21]. $\beta = 45^\circ$ 时入射能的变化对薄膜密度的影响不太明显,而且 $\alpha = 60^\circ$ 时入射能 10 eV 的密度比 30 eV 的大, $\beta = 30^\circ$ 时入射能 30 eV 的密度比 50 eV 的大.所以,离子束斜入射时入射能大不一定薄膜质量好,斜入射的能量阈值与垂直入射不同.这是因为此时虽然入射能的增加促进了 C 原子的注入,但斜入射 Ar 有较高的入射能量时原子能够获得更高的水平方向动能,因此具有更大的概率发生水平迁移.此时,相对低的入射能可以得到质量与垂直入射时相似或甚至更好的薄膜.

Ar 离子的不同入射角对 DLC 膜结构的影响,得到了以下结论.

1. Ar 离子斜入射时 C 原子迁移率均比垂直入射大,薄膜密度和 sp^3 杂化比例都比垂直入射小.斜

入射加强了入射原子的水平动能分量,从而加强了原子水平迁移,所以薄膜的水平弛豫效应比较明显,薄膜发生石墨化,质量有所下降。

2. 离子束斜入射时观察到多孔和沟槽结构,可以得到不同形貌的薄膜。Ar 入射能量较高时,离子束刻蚀的影响加强。

3. Ar 离子不同的入射角,随着到达比的变化对薄膜结构的影响有所不同。从 $\eta = 0.25$ 增加到 0.5 时 60° 和 0° 的密度和 sp^3 杂化比例增加得更快。 $\eta =$

0.1 斜入射时不利于形成 sp^3 键,所以为了提高 DLC 膜质量斜入射时可以适当增加到达比。

4. Ar 离子入射角相同时,离子束入射能的增加促进了 C 原子的注入,但斜入射当 Ar 以较高的能量入射 C 原子能够获得更高的水平方向动能,发生水平迁移的概率更大。所以,离子束斜入射时入射能大于等于能量阈值时薄膜质量变坏,斜入射的能量阈值与垂直入射不同。

- [1] Li L H , Xia L F , Zhang H Q 2001 *J. Tribology* **21** 76 (in Chinese)
[李刘合、夏立芳、张海泉 2001 摩擦学学报 **21** 76]
- [2] Spear K E , Dismukes J P 1994 *Synthetic Diamond : Emerging CVD Science and Technology* (New York : John Wiley & Sons Inc) p91
- [3] Setsuhara Y , Suzuki T , Makino Y et al 1995 *Phys. Res. B* **106** 120
- [4] Zeng F , Gao Y , Fan Y W 2003 *J. Appl. Phys.* **42** 6869
- [5] Jiang B , Ren C , Zheng Z 2004 *Phys. Res. B* **215** 413
- [6] Dobrev D 1982 *Thin Solid Films* **92** 41
- [7] Bradley R M , Harper J M E , Smith D A 1986 *J. Appl. Phys.* **60** 4160
- [8] Hu Y Z , Ma T B , Wang H 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2922 (in Chinese)
[胡元中、马天宝、王 慧 2006 物理学报 **55** 2922]
- [9] Ma T B , Hu Y Z , Wang H 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 480 (in Chinese)
[马天宝、胡元中、王 慧 2007 物理学报 **56** 480]
- [10] Li Z J , Pan Z Y , Zhu J , Wei Q , Wang Y X , Zang L K , Zhou L 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2233 (in Chinese)
[李之杰、潘正瑛、朱靖、魏 启、王月霞、臧亮坤、周 亮 2005 物理学报 **54** 2233]
- [11] Li Z J , Pan Z Y , Wei Q , Du A J , Huang Z , Zhang Z X , Ye X S , Bai T , Wang C , Liu J R 2003 *Euro. Phys. J. D* **23** 369
- [12] Wei Q , Pan Z Y , Li Z J , Zhang Z X , Zang L K , Wang Y X , Ye X S , Bai T , Wang C , Liu J R 2003 *Phys. Rev. B* **68** 234508
- [13] Brenner D W 1990 *Phys. Rev. B* **42** 9458
- [14] Tersoff J 1989 *Phys. Rev. B* **39** 5566
- [15] Eckstein W 1991 *Computer simulation of ion-solid interactions* (Berlin , New York : Springer-Verlag) p40
- [16] Zhu W J , Pan Z Y , Ho Y K 1999 *Eur. Phys. J. D* **5** 83
- [17] Berendsen H J C , Postman J P M , van Gunsteren W F , DiNola A , Haak J R J 1984 *J. Chem. Phys.* **81** 3684
- [18] Liu Y H , Zh J L , Wang W G , Li J , Liu D P , Ma T C 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1458 (in Chinese)
[刘艳红、张家梁、王卫国、李建、刘东平、马腾才 2006 物理学报 **55** 1458]
- [19] Ding Y Q , Ceng F , Gu Y , Geng K W , Pan F 2006 *J. Vac. Sci. Tech.* **26** 61 (in Chinese)
[丁宇清、曾 飞、谷 宇、耿魁伟、潘峰 2006 真空科学与技术学报 **26** 61]
- [20] Bales G S , Zang Will A 1991 *J. Vac. Sci. Tech. A* **9** 145
- [21] Chen M , Wei H L , Liu Z L , Yao K L 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 2446 (in Chinese)
[陈 敏、魏合林、刘祖黎、姚凯伦 2001 物理学报 **50** 2446]

Molecular dynamics simulation of the structure characteristic of diamond-like carbon films influence by oblique incidence ion-beam-assisted deposition *

Kai Hua Li Yun-Chao Guo De-Cheng Li Shuang Li Zhi-Jie[†]

(College of Physics and Electronic Information , Inner Mongolia University for Nationalities , Tongliao 028043 , China)

(Received 17 February 2008 ; revised manuscript received 10 June 2008)

Abstract

On atomic scale , using molecular dynamics (MD) simulation , the influence of different ion-beam incident angles on the structure of diamond-like carbon (DLC) films was discussed in the process of ion-beam-assisted deposition (IBAD). The study focused on the model of film surface , average density and SP3 hybridization fraction under different ion beam incidence angles . The results showed that horizontal kinetic energy of the incident atoms was enhanced by the oblique incident assist ions , thereby the horizontal migration of the C-atoms were also enhanced . The ratio of migration of C-atoms with ion-beam oblique incidence became greater than with vertical incidence , however , the density of the film and SP3 hybridization fraction became smaller . The effect of different ion-beam incident angle on the films structure varies with the variation of assistance/deposition atomic ratio (Ar/C) and incident energy . Thus films with different structures could be obtained when the incidence of ion-beam is oblique .

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

PACC : 7115Q , 6185 , 6855

* Project supported by the Scientific Research Foundation of Education Bureau of the Inner Mongolia Autonomous regions , China (Grant No. NJ04062) and the Scientific Research Starting Foundation for the Doctor Inner Mongolia University for Nationalities , China (Grant No. BS183).

[†] Corresponding author. E-mail: zhijie_li@fudan.edu.cn