

基于原子运动模型的类金刚石薄膜生长机理研究^{*}

马天宝[†] 胡元中 王 慧

(清华大学摩擦学国家重点实验室, 北京 100084)
(2006 年 5 月 9 日收到, 2006 年 6 月 20 日收到修改稿)

利用分子动力学模拟方法, 从原子尺度上研究了类金刚石(DLC)薄膜生长过程. 按照运动特点把入射原子在表面的行为分为表面冷冻、迁移、注入和反弹等四种, 并由此提出原子运动模型. 入射原子的表面行为对 DLC 薄膜的微观结构以及生长方式有重要影响. 其中原子水平迁移是薄膜热弛豫的主要途径, 入射原子的注入和迁移行为相互竞争, 决定了薄膜生长的模式和最终结构. 利用统计分析手段给出了入射能量对原子表面行为进而对薄膜结构的影响, 加深了对 DLC 薄膜生长机理的认识.

关键词: DLC 膜, 分子动力学模拟

PACC: 7115Q, 6855

1. 引 言

类金刚石(DLC)薄膜具有天然金刚石的许多优异特性:它具有超硬、原子级光滑、摩擦系数低、膜层均匀、耐腐蚀等特点,因此在磁存储技术中得到了广泛的应用^[1]. 国内外很多研究小组通过磁过滤阴极真空电弧沉积(FCVA)等实验手段^[2]初步探索了在磁头、磁盘表面沉积超薄类金刚石膜的技术方案. 与传统的磁控溅射方法相比,FCVA 技术中采用了更高能量和电离度的等离子体碳源,制备出了力学性能更优异的薄膜. 在薄膜生长的表面动力学研究方面,王恩哥等^[3]从原子层次上,系统的研究了亚单层生长时原子在表面上的扩散、粘接、成核,以及已经形成的原子岛之间的相互作用、兼并、失稳和退化等一系列过程. 在 DLC 薄膜生长机理方面, Lifshitz 提出“亚表层注入模型”^[4],即入射原子注入薄膜亚表层引起局域密度增加,以及 sp³ 占优的金刚石相的出现;另外,注入原子同样会引起热峰(thermal spike)作用,使得局域密度得到弛豫. 但是该模型没有讨论原子水平迁移的问题,对薄膜弛豫途径的阐述不够具体. 目前入射原子表面行为仍然缺乏完整而准确的描述,但其对于研究 DLC 薄膜生长机理却

十分重要.

本文通过分子动力学模拟方法再现了 DLC 薄膜生长的动态过程,提出了原子表面运动模型,以 1 eV—500 eV 等几种入射原子动能为例,考察了入射能量对原子表面行为的影响,揭示了薄膜的生长机理,对制备 sp³ 占优的均匀、光滑、致密薄膜有一定的指导意义.

2. 模型及模拟方法

为了准确的描述碳原子与金刚石表面的相互作用,我们选取由 Brenner 等人^[5]研究的半经验的反应式键序势函数(REBO)体系的总势能表示成

$$E_b = \sum_i \sum_{j(k>i)} [V^R(r_{ij}) - b_{ij}V^A(r_{ij})], \quad (1)$$

其中 $V^R(r)$ 和 $V^A(r)$ 分别表示原子间排斥和吸引相互作用的对势, b_{ij} 是键序函数,它反映任意两个原子的相互作用受周围近邻原子影响的多体效应.

$$V^R(r) = f^c(r) \left(1 + Q/r \right) A e^{-\alpha r}$$
$$V^A(r) = f^c(r) \sum_{n=1,3} B_n e^{-\beta_n r}, \quad (2)$$

其中截断函数 $f^c(r)$ 限制了共价键作用力程,可以在保持精度的前提下减小计算量. $f^c(r)$ 的函数形式是

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 50390060, 50675111)和国家重点基础研究发展规划(批准号: 2003CB716201)资助的课题.

[†] E-mail: mtb03@mails.tsinghua.edu.cn

$$f_{ij}^c(r) = \begin{cases} 1, & r < D_{ij}^{\min}, \\ [1 + \cos((r - D_{ij}^{\min})(D_{ij}^{\max} - D_{ij}^{\min}))]/2, & D_{ij}^{\min} < r < D_{ij}^{\max}, \\ 0, & r > D_{ij}^{\max}, \end{cases} \quad (3)$$

其中 D_{ij}^{\max} 和 D_{ij}^{\min} 为内外两个截断半径,该公式保证了截断函数值从 1 平稳降至 0。后来 Jager 等人^[6]在利用分子动力学方法模拟类金刚石薄膜生长时,通过修正 Brenner 势函数中的两个截断半径,即 $R = 1.95\text{\AA}$ 和 $S = 2.25\text{\AA}$,得到了改进的力场,使得模拟和实验结果更趋一致。

本文采用修正截断半径的 REBO 势函数,模拟体系与文献[7]相同,1300 个碳原子依次沿着法线方向入射到金刚石基体(100)表面,如图 1 所示,其中基体部分由 768 个碳原子组成,尺寸为 $2\text{ nm} \times 2\text{ nm} \times 1\text{ nm}$,整个体系采用 X, Y 方向周期性边界条件,而 Z 方向不采用周期性边界条件,用来模拟半无限晶体表面。基体最底两层原子被约束固定,使其不会产生空间的整体平移,靠近固定层的 4 层原子耦合在温度 $T = T_s$ (100 K)热浴中,使入射原子动能得以耗散。灰色的圆柱形区域以入射原子为中心,其内部原子按照牛顿定律做无约束的自由运动,原子与表面发生作用时产生的热量会通过自由运动层向控温原子层扩散,这样可以更好的描述入射原子在表面的各种行为。

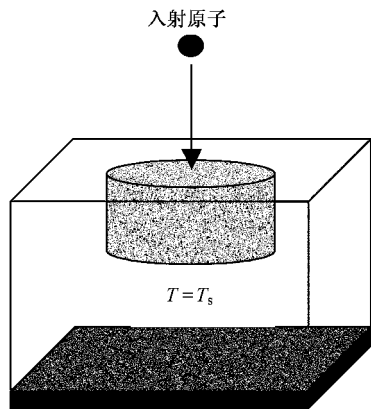


图 1 模型示意图

3. 计算结果及讨论

3.1. 原子表面运动模型

首先考察入射原子在薄膜表面的行为。这里记

录了入射原子从初始位置到与薄膜相互作用,最后达到平衡态的全过程运动轨迹。计算结果表明,原子的表面行为具有较大的随机性,按照不同的运动特点可以把原子的表面行为分为四类。图 2 给出了入射原子在各种运动形式下的轨迹。图中箭头表示原子的行进方向,灰色平面表示 DLC 薄膜表面,实线部分表示原子在薄膜表面以上的轨迹,虚线部分表示原子注入薄膜。图 2(a)给出的是入射原子的“冷冻”行为,即原子与表面作用后,被约束在入射位置周围一个有限的空间内振动,载能原子与温度相对较低的薄膜交换能量时经过一个快速的“淬火”过程并被“冷冻”在薄膜表面;图 2(b)给出的是入射原子的“反弹”行为,即入射原子与薄膜表层原子发生若干次碰撞后以一定的角度反弹离开表面,或有些薄膜原子在碰撞过程中得到足够的能量被溅射离开表面;图 2(c)给出的是入射原子的“注入”行为,即原子引起表面原子移位后从间隙注入薄膜表层以下并达到平衡,图中注入深度约为 3.4\AA ;图 2(d)给出的是入射原子的“迁移”行为,即原子在水平方向翻越若干能量势垒,最终达到平衡状态,图中水平迁移距离大约是 6.5\AA 。

下面介绍入射原子发生各种表面行为的判据。首先定义入射原子与薄膜表面相互作用后的入射深度和水平迁移距离。沉积过程中,表面在法线方向的位置是随时间而变化的“即时表面”,即表面位置由“表面原子”的坐标的平均值决定。这里表面原子是按照 Kaukonen 等人的方法^[8]给定的。原子入射深度 Δz 的计算公式为

$$\Delta z = z_{\text{surf}} - z_{\text{atom}}, \quad (4)$$

其中 z_{surf} 表示即时表面位置, z_{atom} 表示入射原子的最终平衡位置。若 Δz 为负值,则代表原子平衡在即时表面以上,若 Δz 为正值,则代表原子平衡在即时表面以下。原子的水平迁移距离 Δr 的计算公式为

$$\Delta r = \sqrt{(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2}, \quad (5)$$

其中 $\Delta x, \Delta y$ 表示原子在水平正交方向的位移。

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 $-20\text{\AA} < \Delta z < 2\text{\AA}$ 且 $\Delta r < 1.54\text{\AA}$ (金刚石中的 C—C 键长),则认为原子冷冻在薄膜表面;若

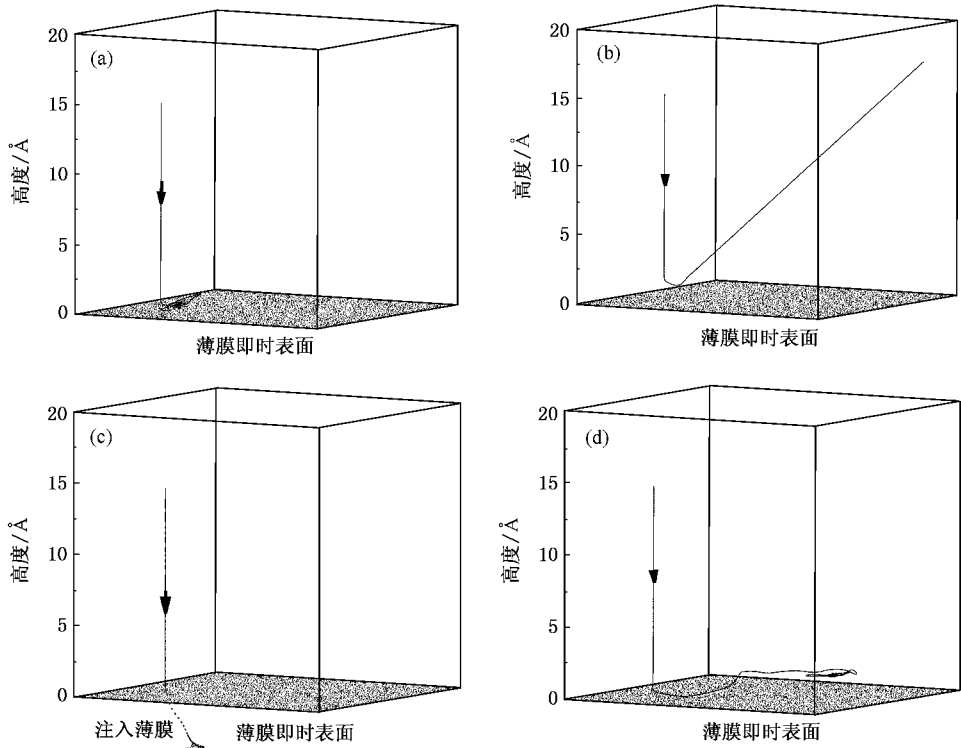


图2 原子表面行为 (a)冷冻 (b)反弹 (c)注入 (d)迁移

$\Delta z < -20\text{\AA}$, 则判定入射原子反弹; 若 $\Delta z > 2\text{\AA}$, 即入射原子平衡在即时表面以下 2\AA 的深度, 则判定入射原子注入薄膜; 若 $\Delta z > -20\text{\AA}$ 且 $\Delta r > 1.54\text{\AA}$, 即原子在水平方向的迁移距离大于金刚石中的 C—C 键长, 则认为原子发生迁移。

综合以上对入射原子表面行为的分析, 提出了原子表面运动模型。入射原子在表面的行为可以分为注入、迁移、冷冻、反弹等四种。各种表面行为随机发生, 其在 DLC 薄膜生长过程中扮演着不同的角色。在 3.2 节将进行详细分析。表面行为的随机性体现在入射原子与薄膜表面原子作用时的相对位置和相对运动速度的随机性, 该问题将在其他文章中加以阐述。同时, 入射原子表面行为具有统计规律性, 体现在随着入射能量的改变, 各种运动形式所占比例呈现一定的变化规律, 在 3.3 节将给出定量分析。

3.2. 类金刚石薄膜生长机理研究

本文研究了入射能量为 1 eV, 30 eV, 100 eV 和 300 eV 等情况下类金刚石薄膜的生长过程以及原子的各种表面行为在薄膜生长中所起到的不同作用。首先是表面冷冻。这种行为在入射能量较低的情况

下通常占据主要地位。原子冷冻在基体表面, 有利于 2 配位原子和 3 配位原子的形成, 其重要证据之一就是较低能量下薄膜中原子串、原子环结构的形成。图 3 给出了入射能量很小(1 eV)时, 薄膜生长初期基体表面产生的一维、二维纳米结构。最初的入射原子由于较低的入射动能, 无法克服能量势垒并注入基体或发生水平迁移, 所以只是在基体的几个势能低谷位置吸附并冷冻。连续入射的碳原子在表面上形成一维原子串结构, 并在不断吸附入射原子的过程中逐渐伸长, 最长的原子串可以由 10 个碳原子组成, 如图 3 曲线 1 所标出。随后, 在原子间相互作用下, 原子串结构失去稳定性并发生连接或缠绕, 形成二维的原子环结构, 如图 3 曲线 2 所标出。接下来无定型碳结构逐渐取代规则的原子串、原子环结构, 薄膜开始呈现稳定生长。对 DLC 薄膜的最终结构(如图 4(a)所示)加以分析不难发现, 1 eV 下沉积的薄膜密度较低, 其中 2 配位原子和 3 配位原子占绝大多数, 而金刚石结构中典型的 4 配位原子非常少^[7]。可见入射能量过低时, 由于较多的入射原子发生表面冷冻, 薄膜的致密结构难以得到保证。

然后是原子反弹。原子反弹存在两种形式, 分别对应着不同的机理。一部分入射原子没有与薄膜

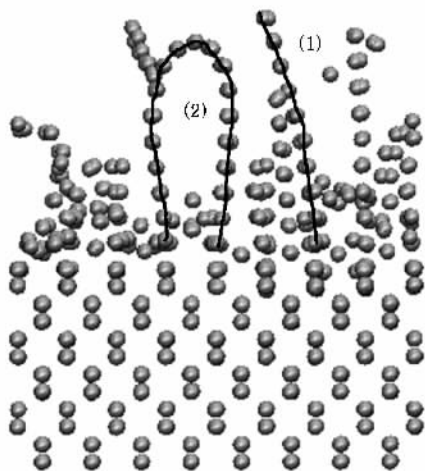


图3 薄膜生长初期的一维、二维纳米结构(原子串、原子环)

交换足够的能量,在与薄膜碰撞后保持原有的动能直接反弹,其对薄膜表面结构没有造成太大的影响;另一部分原子与表面作用后,注入薄膜的亚表层,在接触部位的薄膜释放弹性形变能的作用下反弹,碰撞引起的热峰作用,使薄膜原子重新排列,局域密度得以弛豫和退火。反弹原子数目过多,不仅会影响薄膜的沉积率,而且由于碰撞引起的薄膜热弛豫会导致薄膜中 sp^3 杂化比例下降,从而对薄膜生长不利。

下面重点研究原子注入和迁移行为在 DLC 薄膜生长中的作用。在较高入射能量下原子具有较大的概率注入薄膜亚表层或更深位置,与反弹情况不同之处在于,原子注入薄膜后,薄膜释放的弹性能主要转化为局域原子的动能和势能而不是促使入射原子反弹。入射原子注入薄膜亚表层成为间隙原子,使薄膜局域密度增大,并伴随亚稳态的 sp^3 占优的金刚石相的出现。当然,原子碰撞同样会引起热峰作用,使得局域密度得到弛豫,而 sp^3 结构会向稳态的 sp^2 占优的石墨相发生转变,DLC 薄膜的最终结构正是注入效应和弛豫效应平衡的结果,这可以由 Lifshitz 等人^[4]提出的亚表层注入模型(subplantation model)来解释。然而,Lifshitz 提出的薄膜弛豫只是从实验或模拟现象^[8,9]中得出的推论,对薄膜弛豫途径的阐述不够具体;另外该模型在解释入射能量超过最优范围上限时,DLC 薄膜质量反而下降的原因^{时^[10]}存在一定的局限性。

为了解决目前亚表层注入模型中存在的问题,我们研究了原子注入和水平迁移运动之间的关系,试图找出薄膜弛豫的途径。图4给出了原子沉积过

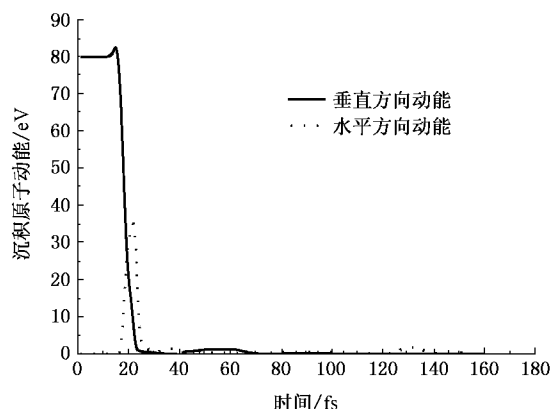


图4 原子沉积过程中垂直和水平方向动能随时间演化曲线

程中,原子水平方向动能(实线)和垂直方向动能(点线)的演化曲线。其中原子水平动能 E_T 和垂直动能 E_V 分别为

$$E_T = m(v_x^2 + v_y^2), \quad E_V = mv_z^2/2, \quad (6)$$

其中 m 为碳原子质量, v_x, v_y, v_z 分别表示入射碳原子在 X, Y, Z 方向的速度。单个原子沉积过程中发生了先后两次能量转化:首先是入射原子在垂直方向的动能向水平动能转化,然后是全部入射原子动能转化为薄膜原子的动能和势能,并通过热浴得以耗散。当入射原子与薄膜表面距离达到势函数的截断半径以内时,开始发生相互作用,这时垂直动能曲线出现一个由于薄膜原子吸引作用导致的微小上升,进而由于薄膜的排斥作用迅速下降。与此同时水平动能曲线则清晰的显示出一个峰,该峰位于入射原子与表面相互作用大约 10 fs 以后,由于能量转化,水平方向动能从 0 迅速上升达到极大值(在这里大约是 35 eV)。随着入射能量增加,该峰值也趋于增大,说明在较高入射能量下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,即原子在水平方向上移动到能量低谷,从而实现体系更低的能量状态,原子最终平衡并稳定在薄膜表面或内部的空位位置。

由亚表层注入模型,可知原子的水平迁移不会增强注入效应,即水平迁移不会引起局域密度的增大和 sp^3 相的形成,那么这种行为在 DLC 膜生长中起到什么作用呢?为了研究这个问题,我们计算了带有一定倾斜角度的薄膜沉积结果,在该模型中,除了沿着垂直方向的动能外,入射原子在水平方向也具有一定的动能分量。计算了 $30^\circ, 45^\circ$ 和 60° 三种入射角度下的薄膜密度和 sp^3 杂化比例,对应的垂直

和水平动能分别为(30 eV ,51.96 eV)(30 eV ,30 eV)(30 eV ,17.32 eV),这三组算例以及能量为 30 eV 和 60 eV 的原子垂直入射的两组算例的结果被列在表 1 中. 其中重点比较了: 1) 具有相同合动能的情况下, 带有倾斜角度和垂直入射的计算结果 2) 具有相同垂直动能分量情况下, 以不同倾斜角度入射的计算结果.

表 1 入射角度对薄膜结构的影响

角度(°)	90	30	45	60	90
能量/eV	60	(30, 51.96)	(30, 30)	(30, 17.32)	30
密度/(g/cm ³)	2.96	2.66	2.70	2.80	2.88
sp ³ 杂化比例/%	65.7	57.8	59.1	62.6	69.4

由表 1 可以看出, 原子倾斜入射(30 eV ,51.96 eV)和以 60 eV 垂直入射两种情况具有相同合动能, 然而倾斜入射下薄膜密度和 sp³ 杂化比例都要明显低于垂直入射情况, 可见与垂直动能分量相比, 水平分量并没有对生长致密薄膜起到作用. 进一步分析不同倾斜角度入射下的薄膜结构, 虽然原子的垂直方向动能分量相同, 都为 30 eV, 但水平分量越大, 薄膜的密度和 sp³ 杂化比例越低, 这说明水平动能分量对沉积的 DLC 薄膜质量不利. 通过带有倾斜角度的薄膜沉积结果, 证明了入射原子的水平动能分量加强了原子水平迁移, 不利于薄膜的均匀致密生长, 解释了原子注入和迁移在 DLC 薄膜生长中起到的不同作用, 其中, 原子水平迁移可以降低体系势能, 是薄膜结构弛豫的重要途径.

基于以上讨论, 我们认为所谓薄膜弛豫, 从微观角度来说是一个原子间动能交换的过程. 原子注入的过程中同样伴随着弛豫效应, 只是其效果不如注入效应明显. 原子水平迁移则是导致体系势能降低和薄膜弛豫的主要途径, 它使得薄膜局域密度减小, sp³ 结构向 sp² 结构转化. 入射能量超过最优范围上限时, 原子注入深度过大, 导致原子有机会在更长的时间内与更多的薄膜原子交换能量, 并伴随着更强烈的水平迁移, 使薄膜的弛豫现象更为明显. 综上所述, 原子注入有利于形成 sp³ 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 sp³ 结构向更稳定的 sp² 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.

3.3. 入射能量对原子表面行为及薄膜结构的影响

利用原子表面运动模型, 对所有入射原子按照

表面运动形式进行统计分析, 可以很好的研究入射能量对 DLC 薄膜生长及薄膜结构的影响. 虽然单个原子的表面行为具有相当大的随机性, 但相当数量原子的表面行为却具有统计规律性.

根据前面的定义和判据, 图 5 给出了发生各种表面行为的原子占原子总数比例随着入射能量的变化趋势. 在较低的入射能量(1—30 eV)下, 入射原子主要冷冻在表面上, 很少发生反弹和注入, 薄膜内部以 2 配位和 3 配位原子为主, 具有较多空位缺陷. 值得注意的是, 在该能量范围内, 冷冻原子比例经历了一个先上升后下降的过程, 而反弹和迁移原子比例则先下降后上升. 在能量为 1 eV 时, 冷冻原子比较少的原因是由于入射原子难以提供与薄膜表面原子形成化学吸附的活化能, 所以较多入射原子与表面原子没有进行足够的能量交换直接反弹, 或是与薄膜表面形成不稳定的物理吸附, 并由于热扰动或外来原子的碰撞实现解吸附而反弹或者迁移到周围更稳定的区域并被吸附. 而在入射能量超过 10 eV 时, 入射原子可以提供足够的化学吸附活化能, 从而与薄膜表面原子发生电子转移形成化学键, 各种表面行为所占比例随着入射能量升高开始呈现单调的变化趋势, 冷冻原子数目随着入射能量的增大而迅速减少, 同时越来越多的入射原子穿过表面注入薄膜, 部分原子首先注入表面以下, 引起薄膜较大的弹性变形, 然后在变形能恢复的过程中得以反弹.

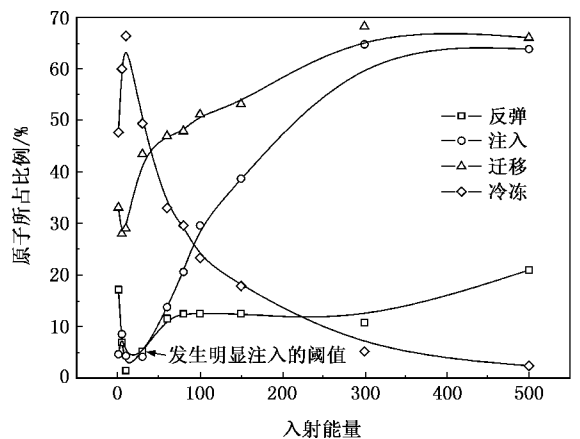


图 5 原子各种表面行为所占比例随入射能量的变化

由图 5 可知, 即使在很低的入射能量下, 原子迁移也能够发生, 而只有当能量高于一定的阈值(30 eV)时才会发生明显的原子注入. 随着入射能量的升高, 注入与迁移原子比例都有所升高, 但是注入原子比例上升的更快些. 在较高的能量范围内(300—

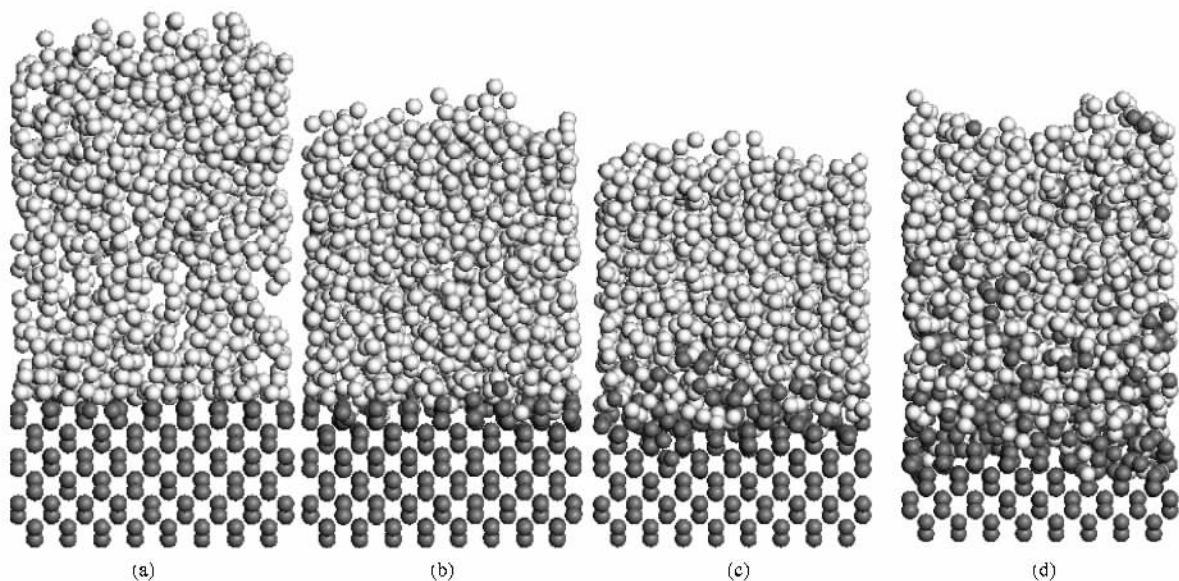


图6 入射能量为(a)1 eV (b)30 eV (c)100 eV (d)300 eV 下沉积的薄膜最终构型

500 eV)这两种表面行为所占比例达到基本相同的稳定数值,这时部分原子注入深度过大,可达6个原子层以上,而且原子发生了很大的水平迁移,所以薄膜的弛豫效应比较明显,薄膜发生石墨化,质量有所下降.这可以从下文对薄膜结构的分析中清楚地看到.

图6为四种能量(1 eV, 30 eV, 100 eV, 300 eV)下生长的类金刚石薄膜最终结构.其中灰色小球表示的初始基体原子,白色小球表示沉积原子.可以看出,DLC薄膜呈现无定型结构,所有薄膜厚度大约是2—3 nm.随着入射能量的增加,薄膜的结构从疏松变得致密,通过计算可知,在一定的入射能量范围内,DLC薄膜的密度可以达到 2.8 g/cm^3 甚至更高.观察膜-基结合部位,在入射能量比较低时初始基体表面原子仍然保持比较整齐的排列(见图6(a)).当入射能量远大于金刚石内聚能(7.4—7.7 eV)时,由于原子注入的作用,在膜-基结合处发生了沉积原子与初始基体原子明显的相互混合(见图6(c)),而较厚的混合层对于增强膜-基附着力有重要意义.当入射能量为300 eV时,部分原子的注入深度为6—7个原子层,薄膜与初始基体原子发生了剧烈的相互混合,薄膜的弛豫效应非常明显,导致薄膜的结构致密性下降.同样的,随着入射能量的增加,薄膜中 sp^3 杂化比例也有所增加,当能量超过30 eV时, sp^3 比例可以达到70%左右,并且保持相对平稳,而当入射能量超过100 eV时, sp^3 比例反而下降.计算得

到的 sp^3 杂化比例随入射能量变化趋势与实验结果^[11]基本一致.由此可见,当入射能量在30—100 eV之间时,原子的注入效应比较明显,而迁移引起的弛豫效应的影响比较弱,因此是获得最优薄膜质量的能量范围.若高于该能量范围上限,则薄膜的弛豫效应会占据主要地位,使DLC薄膜质量下降.

4. 结 论

本文提出了类金刚石(DLC)薄膜生长中的原子表面运动模型,有助于揭示薄膜的生长机理.入射原子在表面的行为可以分为注入、迁移、冷冻、反弹等四种.各种表面行为随机发生,其在薄膜生长过程中扮演着不同的角色.其中原子注入有利于形成 sp^3 杂化占优的致密薄膜,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DLC薄膜生长的模式和最终结构.

入射原子表面行为同样具有统计规律性.入射能量对原子的各种表面行为进而对DLC薄膜结构有重要影响.较大的入射能量既可以提供较大的垂直动能,使更多的入射原子注入薄膜,或使其注入更大深度,从而形成均匀、致密的薄膜,并增强沉积原子和初始基体原子的相互混合和膜—基附着力.较大的入射能量也可以提供较大的水平动能,导致原

子的水平迁移和薄膜的弛豫. DLC 薄膜的最终结构 是原子注入效应和弛豫效应互相竞争的结果.

- [1] Robertson J 2001 *Thin Solid Films* **383** 81
- [2] Casiraghi C , Ferrari A C , Robertson J , Ohr R , Gradowski M V , Schneider D , Hilgers H 2004 *Diam. Relat. Mater.* **13** 1480
- [3] Wang E G 2003 *Progress in Physics* **23** 1 (in Chinese) [王恩哥 2003 物理学进展 **23** 1
Wang E G 2003 *Progress in Physics* **23** 145 (in Chinese) [王恩哥 2003 物理学进展 **23** 145]
- [4] Lifshitz Y 1989 *Phys. Rev. Lett.* **62** 1290
- [5] Brenner D 2002 *J. Phys.-Condens. Mat.* **14** 783
- [6] Jager H U , Albe K 2000 *J. Appl. Phys.* **88** 1129
- [7] Ma T B , Hu Y Z , Wang H , 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2922 (in Chinese) [马天宝, 胡元中, 王 慧 2006 物理学报 **55** 2922]
- [8] Kaukonen M and Nieminen R M 1992 *Phys. Rev. Lett.* **68** 620
- [9] Lifshitz Y 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 2753
- [10] Lifshitz Y 1996 *Diam. Relat. Mater.* **5** 388
- [11] Fallon P J 1993 *Phys. Rev. B* **48** 4777

Growth mechanism of diamond-like carbon film based on the simulation model of atomic motion *

Ma Tian-Bao[†] Hu Yuan-Zhong Wang Hui

(State Key Laboratory of Tribology , Tsinghua University , Beijing 100084 , China)

(Received 9 May 2006 ; revised manuscript received 20 June 2006)

Abstract

Molecular dynamics simulations are performed to study the growth of diamond-like carbon (DLC) films on the atomic scale. The behaviors of incident atoms on the surface are classified into four categories : surface freezing , migration , implantation and rebounding , according to the atomic movement. The behaviors of incident atoms have an important impact on microstructure and growth mode of DLC film. The transverse migration of the atoms is the main route of film relaxation. The competition between atomic implantation and migration determines the growth mode and final structures of the film. Energy dependence of surface behaviors of deposited atoms and film structures is analyzed statistically , which deepens the understanding of DLC film growth mechanism.

Keywords : DLC film , molecular dynamics simulation

PACC : 7115Q , 6855

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 50390060 , 50675111) and the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 2003CB716201).

[†] E-mail : mtb03@mails.tsinghua.edu.cn