



MOLECULAR DYNAMICS STUDY OF MECHANICAL STRESS FORMATION IN POLYCRYSTALLINE Cr FILMS AND THE EFFECT OF Ar ION BOMBARDMENT DURING AND AFTER DEPOSITION

A.S. Babushkin, A.N. Kupriyanov

Valiev institute of physics and technology of Russian Academy of Sciences, Yaroslavl Branch, Yaroslavl, Russia, artem.yf-ftian@mail.ru

Abstract

The results of modeling the growth of a polycrystalline Cr film are presented. The dependence of the surface morphology and mechanical stress on the energy of the deposited atoms has been investigated. The higher the energy of the deposited particles the more atoms penetrate from the surface into the grain boundary and the greater the compressive stress in the film. It was also shown that bombardment with Ar ions increases the compressive stress both during and after deposition.

Model

Моделирование было проведено с использованием свободного пакета для классической молекулярной динамики LAMMPS. Шаг моделирования был равен 1 фс. Взаимодействие между атомами Cr задавалось с помощью потенциала MEAM, а взаимодействие Ar/Ar и Ar/Cr задавалось с помощью потенциала ZBL. Для имитации поликристаллической пленки Cr, находящейся на начальном этапе роста, были сформированы полусферические островки с ориентацией (110) и радиусом 2 нм.

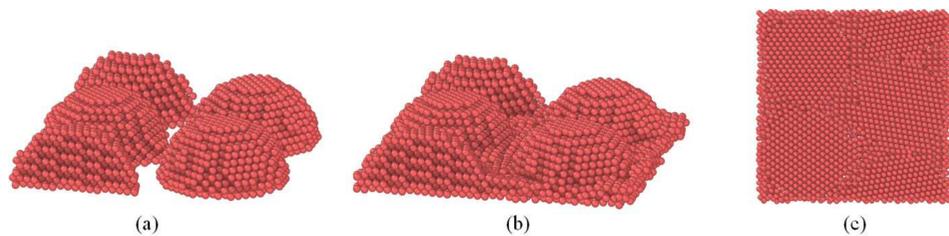


Fig.1. Model before deposition: hemispherical islands before (a) and after the formation of a thin layer of grain boundary (b), also bottom view (c).

Однако, осадив атомы Cr поверх полусфер из Cr на монокристаллической подложке из Cr, мы получили один цельный монокристалл. Поэтому полусферические кристаллиты были повернуты друг относительно друга по оси симметрии на углы 45° и 90° (рис.1). Поворот сделан для того, чтобы при осаждении зерна не срастались, а формировали разупорядоченную межзеренную границу. На боковых гранях области моделирования были заданы периодические граничные условия. Нижний слой атомов в полусферах был зафиксирован. Для исключения сквозного пролета осаждаемых атомов пространство между зернами на высоте четырех атомных слоев было заполнено атомами Cr (рис.1.b). Нижний слой этой группы атомов был зафиксирован, но только по оси Z, в результате чего после проведения процедуры минимизации свободной энергии они перестроились, сформировав начало межзеренной границы. Плотность заполнения этих четырех слоев во многом определяла значение исходных напряжений в пленке. Перед проведением осаждения во всей модели задавалась температура равная 300 К и производилась процедура релаксации. При проведении осаждения, в четырех атомных слоях над фиксированным слоем был задан термостат 300 К.

Results

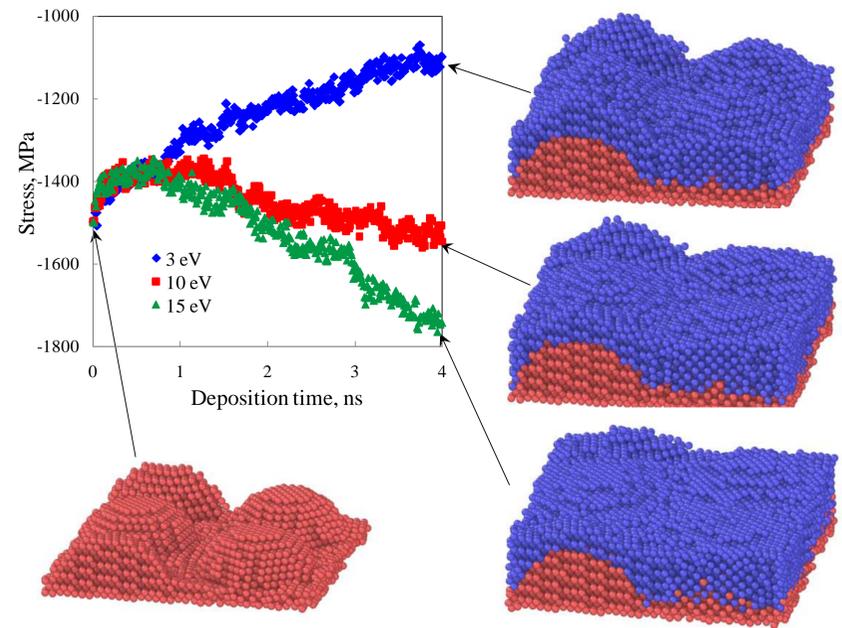


Fig. 2. Surface morphology and stress in a Cr film depending on deposition energy.

После осаждения с энергией 3 эВ шероховатость поверхности составляет 0,45 нм, в то время как при 10 эВ и 15 эВ она равна 0,3 нм и 0,21 нм соответственно. Вероятно, это обусловлено тем, что атомы, осажденные с большей энергией, будучи на поверхности, обладали большей подвижностью, а также имели большую вероятность преодолеть барьер Эрлиха-Швобеля на краю атомной ступени [1]. Таким образом, чем выше энергия осажденной частицы, тем выше вероятность того, что она достигнет края ступени и сможет спуститься с неё на ступень ниже.

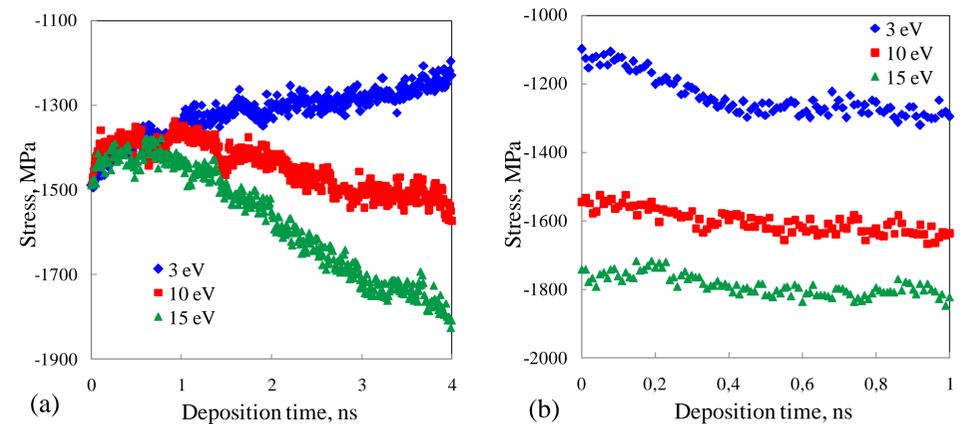


Fig. 3. Effect of 30 eV Ar ion bombardment during (a) and after (b) deposition on Cr film stress.

Описанные выше процессы влияют и на величину напряжений в пленке (рис.2), так как формирование сжимающих напряжений связано с проникновением атомов с поверхности в межзеренную границу [2]. Бомбардировка поверхности ионами Ar, по всей видимости, способна стимулировать их подвижность, при том как во время осаждения (рис.3a), так и после (рис.3b).

Conclusions

Рассчитанные в ходе моделирования зависимости влияния энергии осаждаемых частиц на морфологию поверхности и напряжения в поликристаллических пленках Cr достаточно хорошо согласуются с теоретическими данными, представленными в литературе. Полученные MD модели поликристаллических пленок обладают достаточно естественной межзеренной границей, морфологией поверхности и остаточными напряжениями, поэтому могут быть использованы в дальнейших исследованиях в качестве исходных объектов моделирования.