



Simulación del crecimiento de películas delgadas de carbono amorfo sobre sustratos de silicio y diamante

E.B. Halac^{a,b*}, E. Burgos^{a,c}, M. Reinoso^{a,b}

*halac@cnea.gov.ar

^a Centro Atómico Constituyentes, Comisión Nacional de Energía Atómica. ^b Universidad Nacional de San Martín. ^c CONICET - ARGENTINA.

INTRODUCCIÓN

Existen numerosos métodos de producción de diamante y de películas "diamond-like" (DLC). El depósito de películas DLC se realiza por CVD (carbon vapor deposition), laser plasma, haz de iones, y técnicas de sputtering. El depósito por haz de iones se realiza a 300 K, mientras que los otros métodos requieren altas temperaturas.

A diferencia del diamante microcristalino, (todos los C con coordinación cuatro), los DLC obtenidos mediante haces de iones son altamente desordenados exhibiendo una mezcla de enlaces sp^2 y sp^3 (coordinación tres y cuatro respectivamente).

Las propiedades de las películas varían con el contenido de hidrógeno (cuando son obtenidas a partir hidrocarburos). Los films libres de H son generalmente más duros, resistentes al desgaste y transparentes; su densidad es más próxima a la del diamante.

Las propiedades físicas de las películas obtenidas por haz de iones tales como densidad, relación sp^2/sp^3 , dureza, resistencia al desgaste, resistividad eléctrica y transparencia óptica están fuertemente relacionadas entre sí. Los valores óptimos para la densidad y sp^2/sp^3 , se obtienen para las siguientes energías de depósito $E_{haz} = 40-80$ eV, 115-215 eV y 100-500 eV, dependiendo de las condiciones experimentales.

RESULTADOS

La Fig. 1-a muestra la penetración para átomos de C inyectados en el sustrato de Si, en función de la energía del haz. Ellas permiten estimar el número de planos atómicos en el sustrato a incluir en las simulaciones. En la Fig 1-b ve que la profundidad media alcanzada es proporcional a la velocidad de los iones.

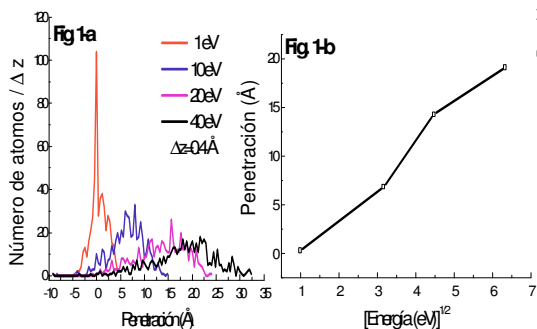
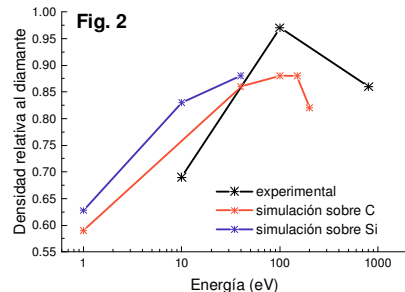
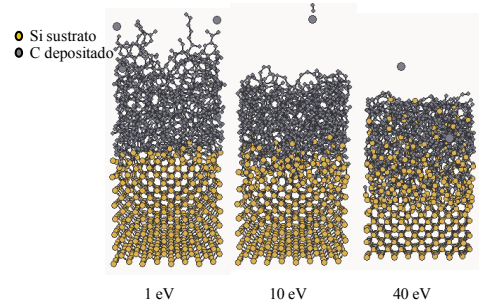


Fig.2 compara la densidad de películas crecidas sobre diamante y Si en función de la energía del haz con resultados experimentales sobre Si.



Aquí se muestran algunas imágenes de estas simulaciones.



DESCRIPCIÓN DEL CÁLCULO

Simulación del crecimiento de DLC sobre diamante y silicio, por dinámica molecular usando el potencial clásico (many-body) de Tersoff.

Sustratos	Planos atómicos	Sup. de depósito (plano (X,Y))	No. Tot. de
Diamante (100)	12	5 x 5 celdas unit	600
Silicio (100)	16	4 x 4 celdas unit.	512

Los átomos en las dos capas inferiores están fijos en sus posiciones de equilibrio representando un cristal semi-infinito. A los restantes átomos se les permite el movimiento dinámico completo, con condiciones de contorno periódicas en el plano (X,Y).

Estudiamos la dependencia con la energía de la calidad del film que crece a partir de un haz monoenergético de átomos neutros de C. Luego del depósito se realiza la relajación estructural y en algunos casos el recocido. Los procesos inelásticos debidos a excitación electrónica no son importantes en el rango de energías estudiado. En la mayoría de los experimentos la corriente iónica es tal que se puede considerar que los iones impactan independientemente en el tiempo sobre el sustrato (tiempo muy largo entre dos impactos)

Las interacciones C-C, C-Si y Si-Si se describen mediante el potencial de Tersoff, con parámetros obtenidos por ajuste de energías de cohesión, constantes de la red y módulos de bulk de politipos de carbono, de carburo de silicio y de silicio cristalino.

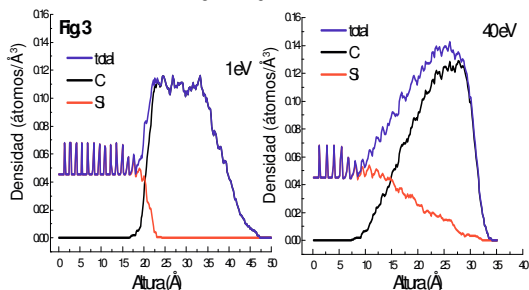
El sustrato es inicialmente relajado, a $P = 0$, y termalizado a $T = 300$ K durante $2000 \Delta t$, con Δt en el rango 0.17-0.5 fs, dependiendo de la energía del haz incidente. El número de pasos de tiempo N , entre átomos inyectados se elige suficientemente grande como para disipar su energía en el sustrato antes de que el próximo átomo llegue a la superficie.

Se emplea el método de Berendsen *et. al.* para simular el acoplamiento a un baño térmico. En el mismo, las velocidades de los átomos termalizados son corregidas por un factor λ ,

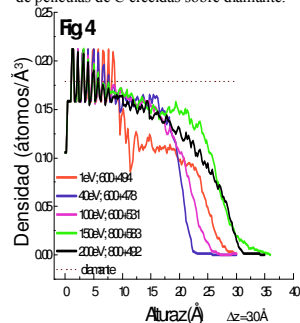
$$v(t) = \lambda(t) v(0) \quad \lambda = \left[1 + \frac{\Delta T}{T} \left(\frac{T_0}{T(t-\Delta t)} - 1 \right) \right]^{-1/2}$$

donde T_0 y T son las temperaturas del baño y del sistema, respectivamente. La constante de relajación τ es fijada al valor $\tau = 50 \Delta t$. A fin de permitir la correcta transferencia de energía al sistema, los últimos 10 átomos implantados no son incluidos en la termalización.

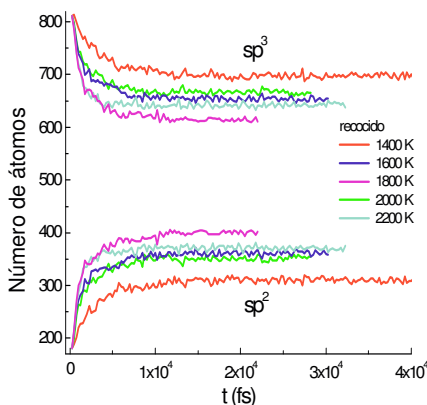
En la Fig. 3 se muestran los perfiles de densidad de películas de C crecidas sobre Si donde se observa que el espesor de la interfase Si-C aumenta considerablemente con la energía de depósito.



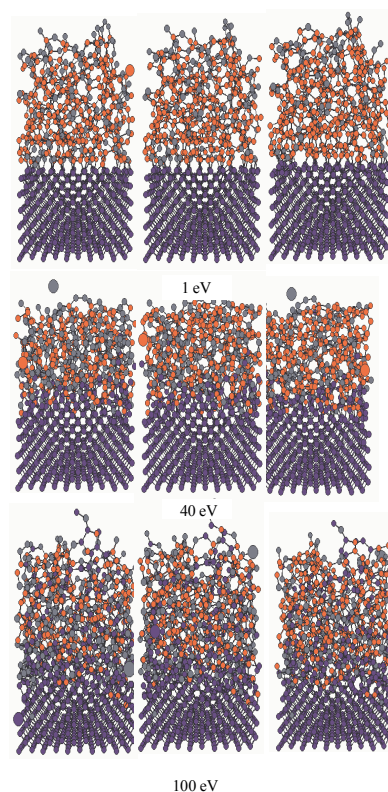
En la Fig. 4 se muestran los perfiles de densidad de películas de C crecidas sobre diamante.



En la Fig. 5 se observa el crecimiento del número de átomos con coordinación tres a expensas de aquellos con coordinaciones dos y cuatro, a medida que aumenta la temperatura de recocido, en acuerdo con las evidencias experimentales. Esta grafitización, observada por espectroscopia Raman no es reflejada en la densidad de estados vibracionales calculada, posiblemente debido a la extensión insuficiente de la superficie de depósito en las simulaciones.



sin recocido, recocido a 1400 K, recocido a 2200 K



● C sustrato
● C depositado sp^2
● C depositado NO sp^2