

Моделювання формування плівкових наноструктур

Гончаров О.А.¹, Юнда А.М.², Гончарова С.А.¹, Фесенко О.В.¹

¹Сумський державний університет, вул. Римського-Корсакова, 2,
40007, м. Суми, Україна

²Інститут прикладної фізики НАН України, вул. Петропавлівська, 58
40007, м. Суми, Україна

e-mail: o.goncharov@mss.sumdu.edu.ua

Контроль мікроструктури нанокристалічних плівок залежить від досить великого числа взаємопов'язаних факторів при магнетронному розпиленні (ПТ або ВЧ). Вплив експериментальних параметрів, таких як температура підкладки, швидкість осадження, робочий тиск, характеристики потоку пари не дозволяє точно контролювати елементарні процеси на атомному рівні, що регулюють еволюцію мікроструктури під час росту (взаємодія плазми з поверхнею, поверхнева дифузія, зіткнення атомів, тощо). Це стимулює необхідність розробки комплексних і прогнозуючих моделей, що засновані на чисельному моделюванні і реалізації багаторівневого підходу.

Моделювання за методом Монте-Карло [1] успішно застосовується для прогнозування морфології зростання тонких плівок в технологічно значущих масштабах простору і часу. Це дозволяє відтворювати стохастичну природу процесу зростання і реалізовувати різні атомістичні процеси, швидкості яких в ідеалі отримані з більш докладних і точних розрахунків, таких як молекулярна динаміка або методи з перших принципів, засновані на теорії функціонала щільності. В запропонованій нами моделі розглядалася кінетика зростання наноструктурованих плівок боридів та нітридів перехідних металів під час реактивного розпилення, з урахуванням впливу технологічних параметрів магнетронної розпилювальної системи [2].

1. Nita F. Three-dimensional kinetic Monte Carlo simulations of cubic transition metal nitride thin film growth/ F. Nita, C. Mastail, G. Abadias// *Physical Review B* 93. –2016 (064107).

2 Гончаров А.А. Физические процессы формирования структуры и свойств пленок диборидов переходных металлов/ А.А. Гончаров// *Физика металлов и металловедение*. – 2011. – Т. 111. – N 3. – С. 1-12.