

离子束辅助激光制备织构薄膜的计算机模拟*

邓玉荣¹ 刘庆华¹ 黄新堂¹ 祁守仁¹ 王又青²

(1. 华中师范大学 2. 华中科技大学激光技术国家重点实验室)

摘 要 在离子束辅助激光制备取向薄膜的物理机制基础上, 利用计算机模拟了织构薄膜生长的物理过程. 结果表明, 织构薄膜的质量直接与不同取向晶粒被辅助离子束溅射掉的几率相关, 这在实验中表现为与辅助离子束入射方向、离子束能量、薄膜材料种类等因素有关.

关键词 辅助离子束 织构 薄膜制备 计算机模拟

分类号 TB383

文章编号 1005-3093(2001)02-0205-04

COMPUTER SIMULATION OF ALIGNED FILM PREPARED BY LASER ABLATION WITH ASSISTANT ION BEAM

DENG Yurong^{1**} LIU Qinghua¹ HUANG Xintang¹ QI Shouren¹ WANG Youqing²

(1. Department of Physics, Central China Normal University, Wuhan 430079

2. The State Key Lab. Of Laser Technology, Huazhong University of Science and Technology)

ABSTRACT Based on the mechanism of depositing oriented film with assistant ion beam by laser ablation, the growth development of the textured films were simulated. The oriented films deposited with assistant ion beam are the result of the higher sputtering yields of all orientation other than the retained crystallite's direction. Utilizing the simulated experiment, the relationship between the aligned film status and the film thickness (film depositing time) was discussed when aligned and non-aligned crystallites deposit on the substrate in different probabilities. The results showed that the quality of textured films is strongly dependent on the depositing probabilities of aligned and non-aligned crystallites on the substrate, and also dependent on the direction of the ion beam, the energy of the ion beam and the material of films in the experiment.

KEY WORDS assistant ion beam, texture, film deposition, computer simulation

利用各种薄膜沉积技术能在多种基片上沉积高质量的具有织构薄膜^[1~4]. 由于辅助离子束或电子束的作用, 使得任意取向的多晶薄膜转变成了具有织构的薄膜. 实验和理论研究表明, 离子束辅助之所以能够在多晶衬底上沉积出取向薄膜, 主要原因是沉积的薄膜中某些取向的晶

* 国家自然科学基金资助项目 59602004. 2000年4月14日收到初稿; 2000年9月12日收到修改稿.

本文联系人: 邓玉荣, 武汉市 430079, 华中师范大学物理系

** To whom correspondence should be addressed

粒被辅助离子束溅射掉, 而另一些取向的晶粒不容易被辅助离子束溅射掉^[5,6]. 因此, 薄膜的晶粒取向, 不但与辅助离子束的能量大小、离子束辅助方向强烈相关, 还与基底材料及其所沉积的薄膜成分、种类相关. 虽然离子束或电子束辅助制备取向薄膜的物理机制很早就有较为详细的讨论, 也有许多的实验结果支持前面提到的物理机理, 但在目前所及的研究范围内, 还没有见到应用计算机具体模拟织构薄膜制备的物理过程的报道^[7~10]. 本文以离子束或电子束辅助制备取向薄膜的物理机制为基础, 利用计算机模拟试验, 研究不同取向的晶粒以不同几率被辅助离子束溅射掉时, 取向薄膜的织构状态与薄膜厚度(沉积薄膜时间)之间的关系.

1 计 算 方 法

为了用计算机模拟薄膜沉积的物理过程, 应用 Monte carlo 模拟方法, 将正方形基片划分为 $n \times n$ 个小格子. 基于激光制备薄膜的保成分性^[7,8], 设激光产生的等离子体以小晶粒形式沉积在基底上的小格中. 不同取向的晶粒以不同的几率沉积在各个小格子中(离子束溅射使得不同取向的晶粒被溅射掉的几率不同). 并且认为在 c -轴取向和平面织构的基片上, 总能生长出织构的晶粒, 而在非织构的基片之上, 如果是织构的晶粒沉积上去, 也应该产生织构的结果, 但如果非织构晶粒沉积上去, 仍为非织构晶粒格子^[5,6]. 应用计算机模拟这一物理过程, 还须考虑如下三个参数: 晶粒取向数、小正方格子的数目、晶粒沉积在基底上的几率.

1.1 晶粒取向数

对于立方晶系, 可以认为基矢之间相差 10° 以下的晶粒其取向是一致的^[9,10]. 于是, 可以得到晶粒的取向个数约为 600(在球坐标系中, α 的取值范围 $0^\circ \sim 360^\circ$, 10° 为一个区, 共有 36 个区; θ 的取值范围为 $0^\circ \sim 180^\circ$, 共有 18 个区, 故 θ 总取向数为 $36 \times 18 \sim 600$) 种. 即在无离子束辅助的条件下, 在激光与靶材相互作用所产生的等离子体中的一个晶粒, 或计算机产生的一个晶粒, 只有 $1/600$ 的几率处于所希望的织构状态.

1.2 随机取向晶粒沉积到基底上的几率

不同取向晶粒被辅助离子束或电子束溅射掉的几率不同, 是用辅助离子束制备取向薄膜的关键因素. 这一随机数可用计算机随机数控制. 此几率不同, 对织构薄膜厚度和沉积时间的影响也不同. 而离子束溅射掉不同取向晶粒的几率是由离子束能量、温度和离子束与基底的法向夹角等因素决定的.

编程的基本思想为: 首先用计算机产生一个在 $1 \sim 600$ 之间均匀分布的随机数, 以表示沉积到基片上晶粒的取向. 随后产生一个在 $1 \sim 160000$ 之间均匀分布的随机数, 以表示 400×400 的小方格. 将计算机产生的某一取向的晶粒以不同的几率沉积到此小方格上. 以不同的几率, 周而复始, 运行以上程序.

2 结 果 与 讨 论

2.1 最佳格子数为 400×400

取晶粒的取向为 600 种, 织构晶粒被溅射掉的几率为 20%, 非织构晶粒被溅射掉的几率为 60%. 这里只简单地把各种不同取向的晶粒分为织构和非织构, 可使模型简单一些.

在具体模拟中, $(n \times n)$ 为 200×200 , 300×300 , 400×400 , 500×500 , 平均每种格子数进行了 20 次模拟试验.

由图 1 中可以看出: 400×400 , 500×500 的曲线比较稳定, 其平均值相差不大. 这说明 400×400 以上的格子数, 可以消除计算机模拟产生的边界效应. 因此取 400×400 状态的格子数为薄膜沉积基底的大小. 另一方面, 如果以典型的钇稳锆 (YSZ) 织构薄膜为例, 每一小方格的大小与立方系 YSZ 原胞大小一致, 即基片尺寸约为 $0.22 \mu\text{m}$ ($400 \times 0.54 \text{nm} \approx 0.2 \mu\text{m}$, 0.54nm 为 YSZ 晶格常数). 这一结果已基本属于宏观尺寸, 足够消除边界效应.

2.2 薄膜织构状态与不同取向晶粒沉积在基片上的几率关系

在计算机模拟中, 取晶粒的取向为 600 种, 基底分为 400×400 个格子数, 几率取一系列值, 具有织构的晶粒沉积到薄膜上的几率为 $100\% \sim 40\%$ (被辅助离子束溅射掉的几率 $0\% \sim 60\%$), 非织构的晶粒被沉积到薄膜上几率从 $100\% \sim 20\%$ (被辅助离子束溅射掉的几率为 $0\% \sim 80\%$).

图 2a 表明, 在织构晶粒沉积到基片上的几率, 非织构晶粒沉积到基片上的几率分别为 (100%, 100%) 时, 即在没有辅助离子束辅助条件下沉积薄膜的条件下 (非晶基片上), 同样可以沉积出织构的薄膜, 只不过沉积时间很长 (薄膜厚), 这与文献^[5]的结果一致. 在织构晶粒沉积到基片上的几率不变 (100%), 非织构晶粒沉积到基片上的几率从 100%, 80%, 60% 到 40% 时, 要达到同样的薄膜织构状态, 薄膜厚度 (沉积时间) 越来越小. 图 2b 表明, 在织构晶粒沉积到基片上的几率和非织构晶粒沉积到基片上的几率分别为 (100%, 60%), (90%, 60%), (80%, 60%), (70%, 60%) 时, 在同一薄膜厚度 (即薄膜沉积时间相同) 处, 薄膜织构状态随织构晶粒沉积到基片上的几率的增加逐渐变好. 由于离子束辅助沉积取向薄膜时, 辅助离子束溅射不同取向的晶粒的几率与离子束能量、离子束入射方向与晶粒取向的夹角和靶材种类 (即靶材晶格结构) 有关. 用计算机模拟的辅助离子束沉积取向薄膜的结果说明辅助离子束能量、辅助离子束与基片法向的夹角是沉积不同材料取向薄膜的关键因素.

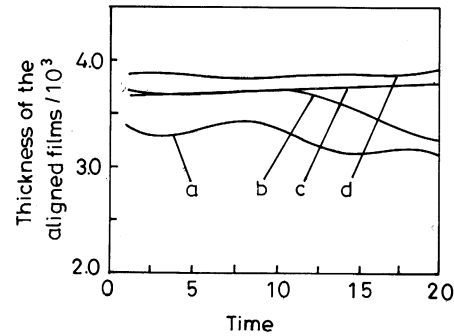


图 1 织构薄膜厚度与模拟试验次数之间的关系 (纵轴以晶胞 c -轴长度为单位)

Fig.1 The relationship between the thickness of the aligned film and the times of the experiments (the unit of thickness of aligned film is the lattice constant). (a), (b), (c), and (d) indicates the simulating ($n \times n$) being (200×200), (300×300), (400×400), and (500×500) respectively

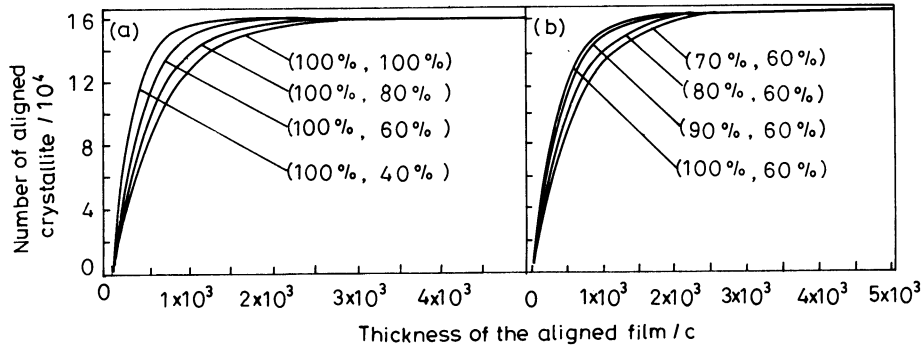


图 2 织构和非织构晶粒以不同几率沉积到基片上时, 织构状态与薄膜厚度 (薄膜沉积时间) 之间的关系 (横轴以晶胞 c -轴长度为单位). 织构晶粒沉积到基片上的几率与非织构晶粒沉积到基片上的几率分别为 (100%, 100%), (100%, 80%), (100%, 60%), (100%, 40%) 时的模拟结果 (a); 为 (100%, 60%), (90%, 60%), (80%, 60%), (70%, 60%) 时的模拟结果 (b)

Fig.2 The relationship between the aligned film status and the film thickness (film deposition time) when aligned and non-aligned crystallites deposit on the substrate in different probabilities (the unit of thickness of aligned film is the lattice constant). simulating result when the depositing probability of aligned crystallites on the substrate and the depositing probability of non-aligned crystallites on the substrate is (100%, 100%), (100%, 80%), (100%, 60%), and (100%, 40%) (a); (100%, 60%), (90%, 60%), (80%, 60%), and (70%, 60%) (b)

3 结 论

离子束或电子束辅助制备取向薄膜的物理机制是辅助离子束或电子束溅射掉不同取向薄膜的晶粒的几率不同. 用计算机具体模拟了织构晶粒沉积到基片上的几率和非织构晶粒沉积到基片上的几率分别为 (100%, 100%)、(100%, 80%)、(100%, 60%)、(100%, 40%), (100%, 60%)、(90%, 60%)、(80%, 60%)、(70%, 60%) 的实验. 结果表明, 当薄膜织构状态相同时, (100%, 100%) 与 (100%, 60%) 和 (100%, 60%) 与 (70%, 60%) 的沉积时间 (或薄膜厚度) 相差约 3 倍. 因此用辅助离子束或电子束辅助制备取向薄膜, 既提高取向薄膜的质量, 又提高工作效率.

参 考 文 献

- 1 J.D.Klein, A.Yen, S.L.Clauson, Appl.Phys.Lett., **56**, 394(1990)
- 2 X.T.Huang, Y.Q.Wang, Q.L.Wang, Q.M.Chen, Physica.Status.Solids., **A174**, R11(1999)
- 3 X.T.Huang, Y.Q.Wang, Q.L.Wang, Q.M.Chen, J.Phys.:Condensed Matter, **12**, 761(2000)
- 4 X.D.Wu, S.R.Foltyn, P.Arendt, IEEE transactions on applied superconductivity, **5**, 2001(1995)
- 5 N.Sonnenberg, A.S.Longo, M.J.Cima, B.P.Chang, K.G.Ressker, P.C.McIntrye, Y.P.Liu, J.Appl.Phys., **74**, 1027(1993)
- 6 R.M.Bradley, J.M.E.Harper, D.A.Smith, Films desposited with ion beam asistance, Appl.Phys., **60**, 4160(1986)
- 7 S.Otsubo, T.Minamikawa, Y.Yonezawa, A.Norilmoto, T.Shimuzu, Jpn.J.Appl.Phys., **29**, L73(1990)
- 8 R.K.Singh, D.Bhattacharya, J.Narayan, Appl.Phys.Lett., **57**, 2022(1990)
- 9 D.Dimos, P.Chandhari, J.Manhart, F.K.LeGoues, Phys.Rev.Lett., **61**, 219(1998)
- 10 D.Dimos, P.Chandhari, J.Manhart, Phys.Rev., **B41**, 4038(1990)