

ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ В.Н. КАРАЗІНА

(повне найменування вищого навчального закладу)

ІНІ «ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ»

(повне найменування інституту)

КАФЕДРА МАТЕРІАЛІВ РЕАКТОРОБУДУВАННЯ ТА ФІЗИЧНИХ ТЕХНОЛОГІЙ

(повна назва кафедри)

Пояснювальна записка

до дипломного проекту (роботи)

МАГІСТРА

(освітньо-кваліфікаційний рівень)

на тему

укр. Моделювання магетронного нанесення покриттів методом молекулярної динаміки

англ. Molecular dynamics simulation of coating deposition by magnetron sputtering

Виконав: студент 2-го курсу навчання

за ОПІ магістр

напрямок підготовки 105 Прикладна фізика та

наноматеріали

Тресницький І.В.

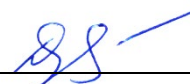
(прізвище та ініціали)



(особистий підпис)

Керівник: Дудін С.В.

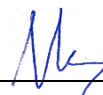
(прізвище та ініціали)



(особистий підпис)

Рецензент: Середа І.М.

(прізвище та ініціали)



(особистий підпис)

Харків – 2023 рік

ЗМІСТ

Abstract.....	2
Анотація.....	3
ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ	4
ВСТУП.....	5
РОЗДІЛ 1. ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ	8
1.1. Особливості пристроїв спінтроники	8
1.2. Потіки частинок на підкладку при магнетронному нанесенні	11
1.3. Метод молекулярної динаміки	13
1.4. LAMMPS: Впровадження методу молекулярної динаміки.....	15
РОЗДІЛ 2. ОПИС МОДЕЛІ.....	18
РОЗДІЛ 3. РЕЗУЛЬТАТИ МОДЕЛЮВАННЯ	22
3.1. Валідація моделі.....	22
3.2. Взаємодія атомів кисню різних енергій з ґраткою атомів заліза	25
3.3. Роль координати точки удару атома високої енергії.....	33
3.4. Взаємодія атомів кисню високої енергії з шаром оксиду магнію.....	37
3.5. Обговорення результатів.....	38
ПЕРЕЛІК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	44

Abstract

This thesis presents an extensive study on the modeling of magnetron coating using molecular dynamics, specifically utilizing the Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS). The primary objective is to develop a comprehensive model to simulate magnetron deposition processes and understand the fundamental dynamics of coating deposition. The methodology encompasses substrate preparation with multiple layers Cu, Fe analysis of particle dynamics with varying energy levels, and exploration of layer arrangements based on material properties.

A crucial aspect of the study involves temperature-controlled environments to examine the temperature-dependent dynamics of the deposition process, coupled with detailed modeling of particle collisions. The deposition includes diverse atom types Mg and MgO to represent different scenarios in magnetron deposition, and the study incorporates reactive deposition processes involving oxygen atoms.

Special attention is given to particle flow and energy, establishing base parameters for flow density and particle energy distribution. The simulation also includes plasma particle dynamics with a focus on magnesium and sputtered matter, examining the energy dependence on voltage and the flux of reflected particles.

The modeling parameters are set to reflect realistic timescales and spatial dimensions, aiming for coating thicknesses relevant to applications in spintronics. The thesis addresses computational challenges, emphasizing optimizations for modeling efficiency and accuracy.

Through this work, significant insights are gained into the molecular dynamics of magnetron coating, contributing to a more profound understanding of the process and paving the way for advanced applications in material science and engineering.

Анотація

У дипломній роботі представлено широке дослідження з моделювання магнетронного покриття з використанням молекулярної динаміки, зокрема з використанням великомасштабного атомно-молекулярного масивно-паралельного симулятора (LAMMPS). Основною метою є розробка комплексної моделі для моделювання процесів магнетронного осадження та розуміння фундаментальної динаміки осадження покриттів. Методологія включає підготовку підкладки з декількома шарами Cu, Fe аналіз динаміки частинок з різними енергетичними рівнями та дослідження розташування шарів на основі властивостей матеріалу.

Важливим аспектом дослідження є використання середовищ з контрольованою температурою для вивчення залежної від температури динаміки процесу осадження в поєднанні з детальним моделюванням зіткнень частинок. Осадження включає різні типи атомів Mg та MgO для представлення різних сценаріїв магнетронного осадження, а також дослідження включає процеси реактивного осадження за участю атомів кисню.

Особливу увагу приділено потоку та енергії частинок, встановленню базових параметрів для густини потоку та розподілу енергії частинок. Моделювання також включає динаміку частинок плазми з акцентом на магнії та розпиленій речовині, досліджуючи залежність енергії від напруги та потоку відбитих частинок.

Параметри моделювання встановлені таким чином, щоб відображати реалістичні часові масштаби і просторові розміри, з метою отримання товщини покриттів, релевантних для застосувань у спінтроніці. У дисертації розглядаються обчислювальні проблеми, з акцентом на оптимізації для підвищення ефективності і точності моделювання.

Завдяки цій роботі отримано значні знання про молекулярну динаміку магнетронного покриття, що сприяє глибшому розумінню процесу і прокладає шлях до передових застосувань у матеріалознавстві та інженерії.

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

MTN - Magnetron Thermal Nitridation

MTJ - Magnetoresistive Tunnel Junction

TMB - Thin Metal Barrier

МД - магнетронне осадження

NVE - Nearly Vacuum Ensemble

NVT - Nearly Vacuum Thermodynamic

ВСТУП

Ключовим елементом багатьох спінтронних пристроїв є магнітні тунельні переходи (MTJ), які являють собою сендвічі з двох магнітних електродів, розділених тонким тунельним бар'єром. Струм, що протікає, є спін-поляризованим і, таким чином, залежить від конфігурації магнітних моментів магнітних електродів. Для електродів, сформованих з одного і того ж магнітного матеріалу, тунельний струм є високим, коли намагніченості цих електродів паралельні, і нижчим, коли вони антипаралельні. Різниця в опорі цих 2 станів, поділена на менше значення опору, називається тунельним магнітоопором (TMR). Для реальних застосувань типові MTJ в ідеалі мають питомий опір 1-10 кОм і значення TMR, що перевищують 200-300 % при кімнатній температурі. Сучасні MTJ з такими властивостями формуються за допомогою полікристалічних CoFeB електродів і тунельних бар'єрів з MgO, які переважно орієнтовані в напрямку (100) кристалу. За останнє десятиліття було виявлено, що чим повільніше осаджується тунельний бар'єр MgO (методом ВЧ магнетронного розпилення з використанням мішені з MgO), тим вищим є TMR. Припускається, що це пов'язано з ростом шарів MgO з меншою кількістю дефектів.

Плівки, що використовуються в спінтронних пристроях, зазвичай дуже тонкі (кілька атомних шарів), і високий ступінь досконалості (кристалічності) є дуже важливим. Зростання кристалічної плівки вимагає самоорганізації хаотично вилетівших атомів у регулярну структуру, яка потребує додаткової локальної енергії для уможливлення руху атомів поверхні. Ця енергія може походити від регулярного нагрівання або надходити ззовні з потоками високоенергетичних частинок, що бомбардують поверхню (це називається нерівноважним нагріванням). Бомбардування повинно бути строго дозованим. Щоб уникнути пошкодження кристалічної решітки, енергія важких частинок (іонів і нейтралів) повинна бути менше ніж 10 еВ при достатній щільності потоку. Більш енергійні частинки можуть пошкодити кристалічну решітку або навіть проникнути в нижній шар.

TMR магнітного тунельного переходу це – величина, яка сильно залежить від технології його виготовлення. При магнетронному розпиленні енергія частинок (як

нейтральних, так і заряджених), що потрапляють на поверхню осаджуваної плівки, може бути значною. Важкі енергійні частинки можуть проникати глибше одного атомного шару і викликати пошкодження кристалічної решітки. Експерименти показують, що коли ВЧ магнетронне джерело розміщується безпосередньо під підкладкою, це може призвести до значного пошкодження осаджуваної плівки і навіть до розпилення будь-яких шарів, вже нанесених на підкладку. Зменшення енергії частинок – одне з найважливіших завдань, але воно досить складне. Поверхня одночасно бомбардується потоками позитивних іонів, негативних іонів і нейтральних атомів, які мають різну енергію з різними (навіть протилежними) залежностями від параметрів процесу. Бомбардування негативними іонами є важливим для конкретного випадку пристроїв спітроніки, оскільки тунельні бар'єри часто виготовляються з оксидів, а кисень легко утворює негативні іони в магнетронній плазмі. Належний контроль плазми між магнетроном і підкладкою також важливий, оскільки потоки іонів надходять на оброблювану поверхню саме з цієї вторинної плазми.

Зокрема, в системі магнетронного розпилення генеруються наступні потоки частинок:

- Потік позитивних іонів;
- Негативні іони (тільки для електронегативних видів (кисень), надходять з магнетронної мішені або з світіння мішені);
- Розпилені атоми;
- Відбиті атоми інертних газів.

Аналіз наукової літератури показує, що вплив бомбардування високоенергетичними частинками під час росту функціонального шару на його властивості вивчено недостатньо для практичного застосування. У кількох дослідженнях було вивчено вплив параметрів магнетронного розпилення на властивості плівок МТІ. Було виявлено, що чим нижча швидкість нанесення, тим вищий тунельний магнітоопір (TMR), який є ключовим показником для МТІ. Це пояснюється зростанням шарів MgO з меншою кількістю дефектів.

Для аналізу пошкоджень кристалічної ґратки доцільно застосувати моделювання методом молекулярної динаміки, який дозволяє відслідковувати рух окремих атомів. Таке моделювання може надати детальну інформацію про морфологію, кристалічність і дефектну структуру плівок.

Метою даної роботи є розробка комплексної моделі молекулярної динаміки з використанням великомасштабного атомно-молекулярного масивно-паралельного симулятора (LAMMPS) для моделювання процесу магнетронного розпилення при виготовленні магнітних тунельних переходів у спінтронних пристроях. Ця модель фокусується на дослідженні впливу бомбардування покриття, що зростає, частинками різних енергій на кристалічну структуру і загальну якість тонких плівок.

РОЗДІЛ 1. ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

1.1. Особливості пристроїв спінтроники

Спінтроніка, галузь досліджень, що швидко розвивається, базується на маніпулюванні та використанні спіну електронів на додаток до їх заряду. Ця унікальна властивість обіцяє створити пристрої, які перевершують обмеження традиційної електроніки, прокладаючи шлях до революційного прогресу в обчислювальній, комунікаційній та сенсорній техніці[1].

Використовуючи власний спін електронів, пристрої спінтроники можуть досягти функціональності, недосяжної для звичайних пристроїв на основі заряду. Ці пристрої можуть виконувати різноманітні функції, такі як читання і запис даних, генерування і детектування сигналів, а також зондування магнітних полів. Це відкриває широкий спектр можливостей для розробки нових пристроїв з підвищеною продуктивністю, ефективністю та мініатюризацією [2].

Пристрої спінтроники продемонстрували неабиякий потенціал у різних сферах застосування. Магнітні тунельні переходи (MTJ), квінтесенція технології спінтроники, складаються з двох феромагнітних електродів, розділених тонким ізоляційним бар'єром. При подачі напруги електрони можуть тунелювати через бар'єр, зберігаючи свою спінову поляризацію. Це дозволяє виявляти і маніпулювати спін-поляризованими струмами, що є ключовим фактором для магнітної пам'яті з довільним доступом з передачею спінового моменту (STT-MRAM), перспективної технології енергонезалежної пам'яті, яка може революціонізувати зберігання даних.

Пристрої на основі спінового ефекту Холла використовують спіновий ефект Холла - явище, в якому спін електронів перетворюється на поперечний електричний струм. Цей ефект може бути використаний для генерації спін-поляризованих струмів, які потім можуть бути використані для різних застосувань, таких як датчики магнітного поля і генератори сигналів.

Польові транзистори Spintronics, подібно до звичайних польових транзисторів, використовують спін-поляризовані струми для керування потоком носіїв заряду. Польові транзистори Spintronics пропонують підвищену продуктивність та енергоефективність порівняно зі звичайними аналогами, що робить їх перспективними кандидатами для високошвидкісної та малопотужної електроніки.

Пристрої спін-орбітального крутного моменту використовують спін-орбітальну взаємодію, зв'язок між спіном і орбітальним рухом електронів, для створення крутного моменту на магнітних шарах. Цей крутний момент можна використовувати для маніпулювання намагніченістю шарів, що уможливує застосування в магнітній пам'яті та логічних пристроях[2]

Тунельні магнітні бар'єри (MTJ) (схематично зображено на рис. 1.1) є критично важливими компонентами багатьох пристроїв спінтроники, в тому числі MTJ і спін-орбітальних крутильних пристроїв. ТМВ складаються з багат шарової структури, яка містить два феромагнітних електроди, розділених тонким ізоляційним бар'єром, зазвичай завтовшки порядку одного нанометру[1].

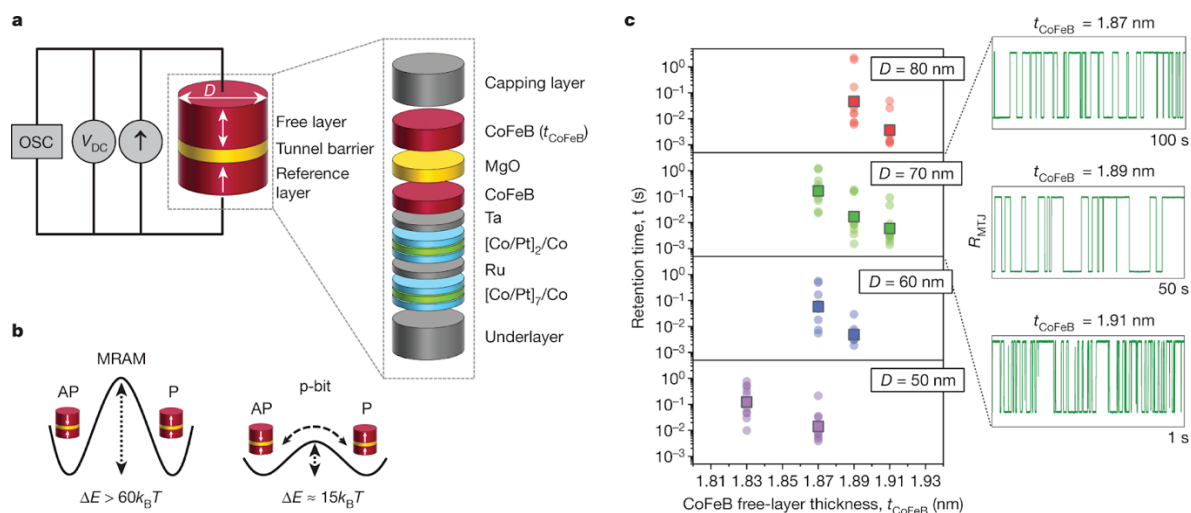


Рис. 1.1. Блок-схема тунельного магнітного переходу

Ізоляційний шар діє як тунельний бар'єр, дозволяючи електронам тунелювати крізь нього, зберігаючи свою спінову поляризацію. Ефективність передачі спіну через бар'єр залежить від товщини і властивостей бар'єрного шару.

На рис. 1.2 показано блок-схему тунельного магнітного переходу, який є ключовим компонентом у багатьох пристроях спітроніки. Він складається з двох феромагнітних електродів (зазвичай з CoFeB), розділених тонким ізоляційним бар'єром (зазвичай MgO). Оксидний шар діє як тунельний бар'єр, дозволяючи електронам тунелювати крізь нього, зберігаючи при цьому свою спінову поляризацію. Характерною рисою шарів у пристроях спітроніки є їх надзвичайно мала товщина. На рис. 1.2 у дужках надано товщини окремих шарів. Видно, що товщина бар'єрного оксидного шару складає лише 0,89 нм. Зважаючи на те, що крок кристалічної ґратки оксиду магнію складає 0,42 нм, можна зробити висновок, що цей бар'єр складається лише з двох шарів кристалічної ґратки[2].

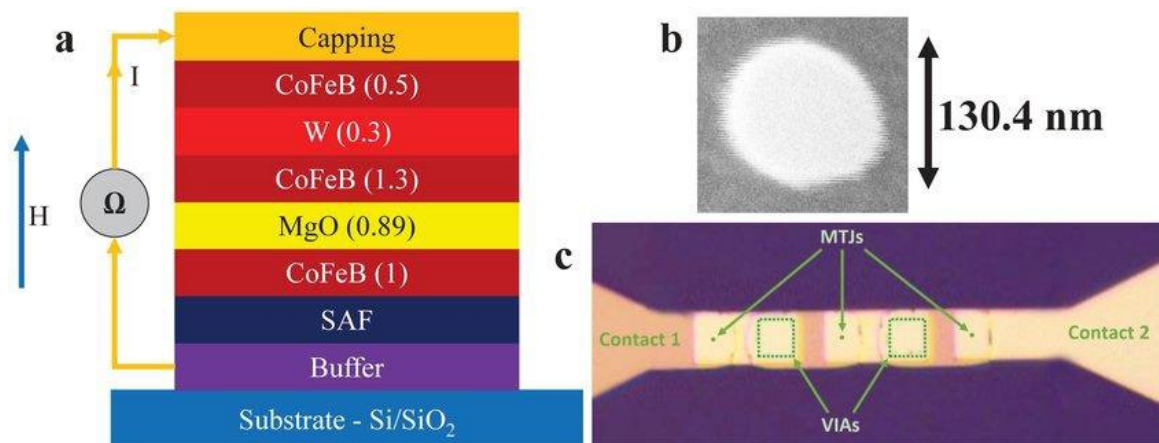


Рис 1.2. Схема тунельного магнітного переходу (в дужках надано товщини окремих шарів).

MTJ виготовляють різними методами, включаючи магнетронне розпилення, молекулярно-променевою епітаксією та осадження атомних шарів. Вибір методу виготовлення залежить від конкретних вимог пристрою. Продуктивність пристроїв спітроніки дуже чутлива до якості функціональних шарів. Ультратонка природа шарів і делікатна взаємодія спіну і заряду роблять їх чутливими до дефектів і домішок. Навіть незначні недоліки можуть суттєво погіршити роботу пристрою[2].

Тому розробка передових технологій виготовлення має першорядне значення для реалізації повного потенціалу спітроніки. Ці методи повинні бути зосереджені

на точному контролі осадження тонких плівок, мінімізації дефектів і домішок та забезпеченні цілісності багат шарової структури.

Спінтроніка є перспективною галуззю з потенціалом для революції в галузі електроніки. Використовуючи спін електронів, пристрої спінтроніки можуть досягти функціональності, недосяжної для звичайних пристроїв на основі заряду. Однак реалізація цього потенціалу залежить від розвитку передових технологій виготовлення високоякісних функціональних шарів. З подальшим прогресом у цій галузі, спінтроніка готова відкрити нову еру мініатюрних, високопродуктивних пристроїв.

1.2. Потоки частинок на підкладку при магнетронному нанесенні

Магнетронне розпорощення стало ключовою технологією в осадженні тонких плівок - процесі, який є центральним для розвитку спінтроніки. Цей метод характеризується бомбардуванням поверхні зростаючої плівки іонами, що є невід'ємною частиною процесу, який визначає кінцеву якість плівки [3].

Цей процес особливо вигідний завдяки можливості високошвидкісного осадження на великих площах, що посилюється в умовах використання постійного або імпульсного постійного струму. Одним з найважливіших факторів магнетронного розпилення є можливість контролювати потік і енергію позитивних іонів. Цей контроль дозволяє налаштовувати властивості плівки, що досягається, наприклад, шляхом маніпулювання зовнішньою напругою зсуву, яка подається на підкладку.

Однак складнощі виникають при наявності в розряді речовин, які мають високу спорідненість до електронів, таких як гази або матеріали мішені. Ці умови можуть призвести до утворення негативних іонів. Незважаючи на складність вимірювання цих іонів, припускають, що вони відіграють значну роль в енергетичному бомбардуванні плівок, потенційно спричиняючи радіаційне пошкодження. Цей ефект є особливо критичним для електроночутливих плівок, таких як прозорі провідні оксиди, які дедалі ширше застосовуються в сучасних технологіях [3]. Дослідження з використанням енергодисперсійних мас-спектрометрів у магнетронних розрядах

показують, що негативні іони можуть мати енергію понад 100 еВ, особливо в розрядах постійного струму, причому пікова енергія часто корелює з напругою розряду мішені [3].

Основною проблемою магнетронного розпилення є балансування зменшення енергії негативних іонів для запобігання пошкодженню плівки без негативного впливу на швидкість осадження. Це балансування є особливо складним через вольтамперні характеристики магнетронів, які характеризуються значними змінами струму при зміні потужності.

У цьому контексті ВЧ розряди, незважаючи на проблеми з масштабуванням, пропонують переконливу перевагу. Працюючи при загалом нижчих напругах самозсуву на мішені через посилену об'ємну іонізацію, ВЧ розряди можуть значно зменшити бічні неоднорідності в плівках - перевага, продемонстрована в різних дослідженнях Мінами. Ці неоднорідності, які часто характеризуються максимумами опору навпроти ерозійної канавки магнетрона, пояснюються радіаційним пошкодженням, причому Мінами та ін. вважають, що більш загальною причиною є кількість і реактивність кисню на поверхні підкладки. Крім того, Елмер та ін. спостерігали зміни в морфології плівки і зменшення енергії при переході від постійного до ВЧ-випромінювання при осадженні [3].

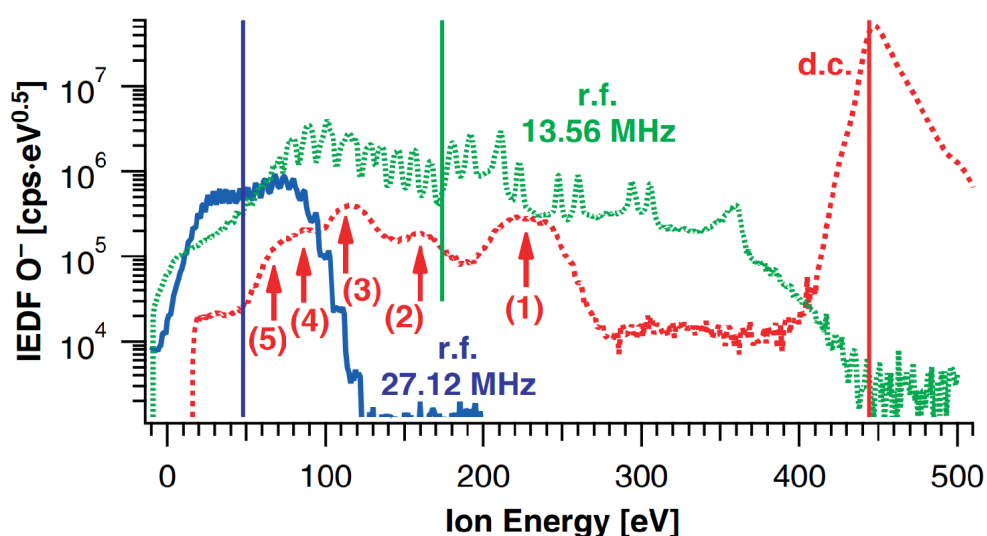


Рис 1.2. функції розподілу енергії іонів (IEDF)

У роботах проф. Еллмера та ін. представлено результати вимірювання функції розподілу за енергією частинок, що вилітають з магнетронної плазми у напрямку плівки, що осаджується. Зокрема, показано, що в системі магнетронного розпилення генеруються наступні потоки частинок:

- Позитивні іони;
- Негативні іони (тільки для електронегативних видів (кисень), надходять з магнетронної мішені або з світіння мішені);
- Розпилені атоми;
- Відбиті атоми інертних газів.

Аналіз цих результатів показав, що при нанесенні оксидів найбільш небезпечними є негативні іони кисню, оскільки вони мають найвищу енергію. На рис. 1.2. показано функції розподілу негативних іонів кисню за енергією в магнетронному розряді постійного струму (d.c.) та у високочастотному розряді (r.f.). З цих кривих можна зробити висновок, що у обох випадках зростаючу плівку бомбардують іони з енергіями від 0 до 500 еВ. Відомо, що бомбардування поверхні іонами з такою високою енергією може призводити до значних пошкоджень як кристалічної ґратки підкладки, так і плівки, що зростає. Це може призводити до деградації параметрів пристроїв спінтроники чи, навіть, до їх повного пошкодження. Тож, виникнення дефектів при такому бомбардуванні, їх кількість та глибина, потребують ретельного вивчення.

1.3. Метод молекулярної динаміки

Вивчення дефектів поверхні твердого тіла, які виникають внаслідок бомбардування високоенергетичними частинками, можливо експериментальними методами, чи за допомогою моделювання. Оскільки глибина залягання дефектів дуже мала (одиниці нанометрів), експериментальне їх вивчення є досить складним завданням. У той же час, моделювання методом молекулярної динаміки дозволяє відстежувати рух кожного атома, а його можливості добре узгоджуються з нанометровим масштабом об'єктів, що досліджуються у цій роботі [4]

Молекулярна динаміка (MD) — це метод обчислювального моделювання, який моделює фізичні рухи атомів і молекул. Це теоретичний підхід, який широко використовується в матеріалознавстві, зокрема для розуміння поведінки атомних і молекулярних систем з часом. Застосовуючи закони руху Ньютона, MD дозволяє дослідникам спостерігати детальний рух кожної частинки в симуляції, надаючи розуміння динамічних властивостей матеріалів на атомарному рівні [4-9]

Теоретичне підґрунтя MD лежить у статистичній і квантовій механіці. Цей метод поєднує мікроскопічний світ атомів і молекул із макроскопічними властивостями матеріалів. У контексті магнетронного розпилення та осадження тонких плівок MD служить ефективним інструментом для розуміння того, як різні потоки частинок взаємодіють з поверхнею підкладки на атомарному рівні. Це дозволяє досліджувати такі явища, як іонне бомбардування, поверхнева дифузія та механізми росту плівки за різних умов розпилення [4]

MD моделювання починається з визначення початкового стану системи, включаючи позиції, швидкості та типи залучених атомів або молекул. Сили між цими частинками обчислюються за допомогою потенціальних функцій, а їхні рухи моделюються з часом за допомогою чисельних методів для вирішення рівнянь руху Ньютона. Цей підхід дозволяє вивчати різні фізичні процеси, такі як теплові коливання, фазові переходи та кінетика реакції.

Моделювання магнетронного розпилення методом може бути особливо корисним для дослідження впливу різних енергій іонів і кутів бомбардування на властивості плівки. Це забезпечує методологічну основу для моделювання та аналізу того, як ці змінні впливають на атомну структуру, кристалічність і дефекти в нанесених плівках.

Останні досягнення в галузі MD зосереджені на підвищенні точності потенційних функцій та інтеграції квантово-механічних ефектів для більш точного моделювання. У контексті осадження тонких плівок MD була реалізована для вивчення поверхневих реакцій і динаміки росту плівки за різних умов осадження. Наприклад, моделювання може виявити, як енергія вхідних іонів впливає на шорсткість поверхні, кристалічність і утворення дефектів [5].

MD моделювання є особливо цінним для вивчення сценаріїв, які важко вивчити експериментально. Вони дозволяють маніпулювати змінними в контрольованому віртуальному середовищі. Цей аспект важливий для розуміння процесу осадження при магнетронному розпиленні, де керування кінетичною енергією частинок та їхньою взаємодією з підкладкою може значно вплинути на якість плівки.

MD також допомагає досліджувати термічні ефекти осадження, наприклад вплив температури підкладки на якість плівки. Моделюючи різні температурні умови, дослідники можуть оптимізувати параметри осадження для кращої якості та продуктивності плівки.

MD забезпечує надійну теоретичну та методологічну базу для вивчення складних взаємодій під час процесу магнетронного розпилення. Цей метод пропонує детальне розуміння явищ на атомному рівні та служить критичним інструментом для оптимізації процесу осадження для покращення якості плівки в спінтронних пристроях. Оскільки MD продовжує розвиватися з більш складними моделями та обчислювальними можливостями, його роль у просуванні матеріалознавства та технології тонких плівок стає все більш важливою [5].

1.4. LAMMPS: Впровадження методу молекулярної динаміки

Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) — це універсальний і широко використовуваний пакет програмного забезпечення з відкритим вихідним кодом для моделювання молекулярної динаміки. LAMMPS виділяється своєю здатністю ефективно моделювати великі системи частинок із різноманітними потенціалами та умовами взаємодії, що робить його ідеальним інструментом для вивчення складних матеріалів і процесів, таких як ті, які зустрічаються у спінтроніці та осадженні тонких плівок [10].

LAMMPS працює на основі принципів класичної механіки, зокрема рівнянь руху Ньютона, щоб моделювати поведінку частинок у часі. Він включає низку потенційних моделей для опису міжатомних взаємодій, що дозволяє моделювати широкий спектр матеріалів у різних умовах навколишнього середовища. Гнучкість LAMMPS полягає

в його модульній конструкції, яка дозволяє користувачам легко налаштовувати та розширювати його функціональні можливості відповідно до конкретних дослідницьких потреб.

Реалізація молекулярної динаміки в LAMMPS включає кілька ключових кроків, як показано в наданому вами коді LAMMPS:

Ініціалізація: Налаштування середовища моделювання має вирішальне значення. Це передбачає визначення одиниць, стилів атомів і граничних умов. У вашому коді вказано одиниці `metal` і `atom_style atomic`, адаптуючи симуляцію для металевих систем із взаємодією атомів [10].

Визначення змінних: ключові параметри моделювання, такі як температура підкладки, енергія адатома та швидкість, встановлюються як змінні. Це дозволяє легко коригувати для дослідження різних умов моделювання.

Створення симуляційного блоку та атомів: команди `lattice` та `region` визначають простір симуляції, тоді як команди `create_box` та `create_atoms` використовуються для ініціалізації субстрату та атомів, які беруть участь у процесі осадження.

Потенціали взаємодії: команди `pair_style` і `pair_coeff` визначають, як частинки взаємодіють одна з одною. Це має вирішальне значення для точного моделювання фізичних явищ, що відбуваються під час процесу осадження[9].

Динаміка та контроль температури: команди `velocity` та `fix` використовуються для встановлення початкових швидкостей частинок і для застосування різних алгоритмів динаміки та контролю температури. Це включає в себе налаштування системи для ньютонівської (NVE) або динаміки, керованої термостатом (NVT).

Запуск симуляції: команда запуску виконує моделювання протягом певної кількості часових кроків, що дозволяє спостерігати за поведінкою частинок і еволюцією системи з часом.

У цій роботі LAMMPS використовується для моделювання процесу осадження плівок при магнетронному розпорощенні. Детальний контроль над взаємодією частинок і умовами навколишнього середовища, який забезпечує LAMMPS, дозволяє

комплексно проаналізувати, як різні параметри осадження впливають на морфологію та якість тонких плівок.

LAMMPS — це інструмент для моделювання молекулярної динаміки в матеріалознавчих дослідженнях. Його здатність точно моделювати взаємодію та динаміку частинок робить його особливо придатним для вивчення складних процесів, таких як магнетронне розпилення у спінтроніці. Можливість адаптації та широкий набір функцій LAMMPS дозволяють глибоко досліджувати теоретичні підходи та методології, суттєво сприяючи розумінню та оптимізації процесів осадження тонких плівок[9].

РОЗДІЛ 2. ОПИС МОДЕЛІ

Ця модель описує бомбардування атомами кисню підкладки з заліза. Модель використовує код молекулярної динаміки LAMMPS і потенціал Леннарда-Джонса для опису взаємодії між атомами. Модель виконує загалом до 30 000 ітерацій у часі з кроком 0,0001 пс. Швидкість атома кисню встановлюється на певне значення, а швидкості рухомих і нерухомих атомів встановлюються відповідно до розподілу Максвелла-Больцмана з температурою 100,0 К. Результати моделювання виводяться у форматі файлів хуз. На рис. 2.1 схематично показано розташування різних груп атомів в області моделювання.

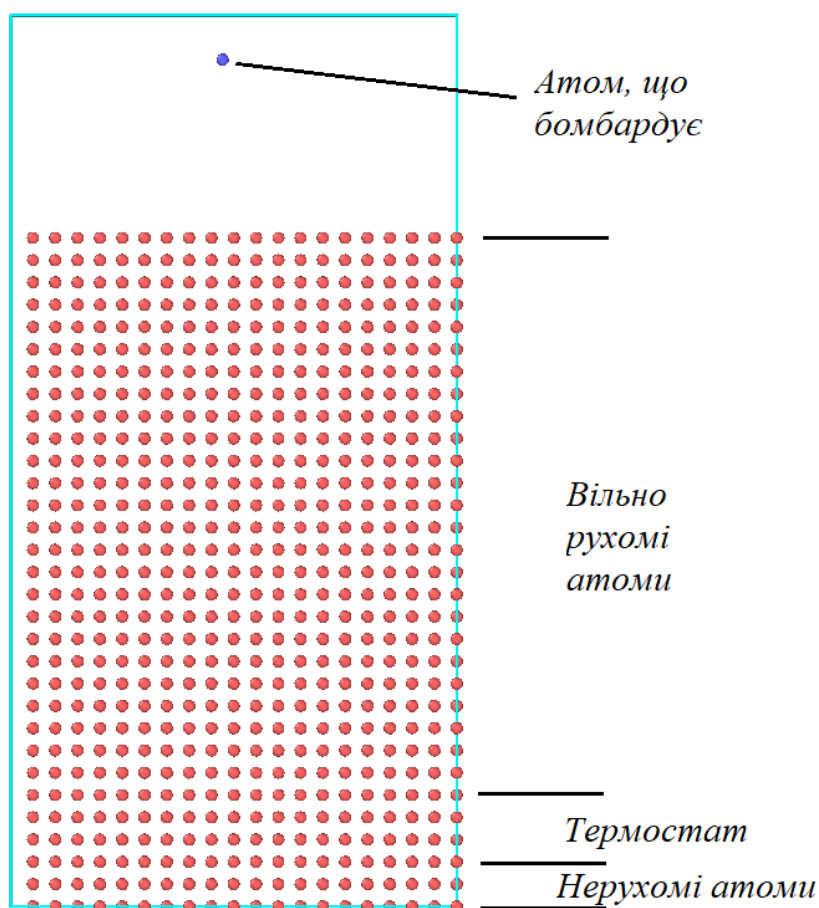


Рис. 2.1. Розташування груп атомів заліза в області моделювання

Наведемо перелік основних налаштувань моделі:

Базові налаштування:

- 1) Потенціал взаємодії налаштовані на метал.
- 2) Для атомарного стилю встановлено атомарний.
- 3) Граничні умови встановлюються як `prf`, що означає, що вікно моделювання має періодичні межі в напрямках x , y та z .

Далі визначемо змінні для моделювання:

- 1) Для змінної `substrate_temp` встановлено значення `100,0`, що є температурою субстрату в Кельвінах.
- 2) Змінні `adatom_x_lat` і `adatom_y_lat` встановлюються на `0,0`, що є початковими положеннями x і y координат атома кисню в кроках решітки.
- 3) Змінна `adatom_energy` має значення `100,0`, що є початковою енергією атома кисню в еВ.
- 4) Змінна `adatom_mass` має значення `16,0 × 1.67-27`, що є масою атома кисню в кг.
- 5) Змінна `adatom_velocity` обчислюється на основі початкової енергії та маси атома кисню.
- 6) Змінні `adatom_x` і `adatom_y` встановлюються на початкові позиції x і y атома кисню в ангстремах.

Наступним кроком буде створення вікна моделювання:

- 1) Решітка визначається як ГЦК з постійною решітки `3,6` ангстрем.
- 2) Коробка моделювання визначається як блок із розмірами від `0` до `30` ангстремів у напрямку x , від `0` до `30` ангстремів у напрямку y та від `0` до `25` ангстремів у напрямку z .
- 3) Коробка моделювання створюється за допомогою команди `create_box`.

Далі код створює субстрат:

- 1) Область визначається як блок із нескінченними розмірами в напрямках x і y та кінцевим розміром `15` ангстрем у напрямку z .
- 2) Атоми створюються в цій області за допомогою команди `create_atoms` і призначаються групі `substrate`.

3) Для стилю пари встановлено значення $lj/cut/opt$ із коефіцієнтом оптимізації 7,5 ангстрем.

a) Парні коефіцієнти встановлюються для атомів підкладки.

b) Маса атомів підложки встановлена 55,8 а.е.м.

Визначення змінних *mobile* та *termos*:

1) Рухома область визначається як блок із розмірами від 2 до 28 ангстремів у напрямку x , від 2 до 28 ангстремів у напрямку y та від 2,5 до 15 ангстремів у напрямку z .

2) Область *termos_mobile* визначається як блок із розмірами від 1 до 29 ангстрем у напрямку x , від 1 до 29 ангстрем у напрямку y та від 1 до 15 ангстрем у напрямку z .

3) Група *termos* створюється шляхом віднімання групи *termos_mobile* від групи *mobile*

Наступним кроком є створення атому кисню:

1) Атом кисню створюється в позиції координат (15, 15, 24) у вікні моделювання.

2) Атоми відносяться до групи змінною *adatoms*.

3) Встановлюються гарні коефіцієнти для атомів кисню.

4) Маса атомів кисню дорівнює 16,0 а.е.м.

5) Потім код обчислює парні коефіцієнти між атомами субстрату та атомами кисню:

6) Парні коефіцієнти встановлюються для взаємодії між атомами субстрату та атомами кисню.

Запуск симуляції:

1) Крок за часом встановлено на 0,0001 пс.

2) Список сусідніх атомів оновлюється кожні 0 кроків.

3) Швидкості рухомих і атомів встановлюються відповідно до коефіцієнта розподілу Максвелла-Больцмана з температурою 100,0 кельвінів.

4) Швидкість атома кисню встановлюється на певне значення.

Фіксація атомів визначається наступним чином:

- 1) Група `adatoms` фіксується за допомогою команди оптимізації `nve`.
- 2) Мобільна група фіксується за допомогою команди оптимізації `nve`.
- 3) Група `termos` фіксується за допомогою команди оптимізації `nvt`.

Відображення результатів:

- 1) Кількість кроків.
- 2) Кількість атомів.
- 3) Температура підкладки, рухомих і нерухомих груп.

Завдяки ретельно написаному файлу моделювання LAMMPS, ми можемо ретельно дослідити змодельований експеримент розпорошення атому кисню на металеву підложку.

РОЗДІЛ 3. РЕЗУЛЬТАТИ МОДЕЛЮВАННЯ

3.1. Валідація моделі

Перед початком основної серії розрахунків було проведено валідацію моделі. Для представлення атомів середовища температуру змінювали в діапазоні 200-4500 К. Ця процедура гарантувала, що обчислювальна модель охоплює всі три стадії з переходами, включаючи тверду, рідку і газову фази. Температури плавлення і точки випаровування відповідають встановленим значенням, що слугують еталонами для валідації моделі.

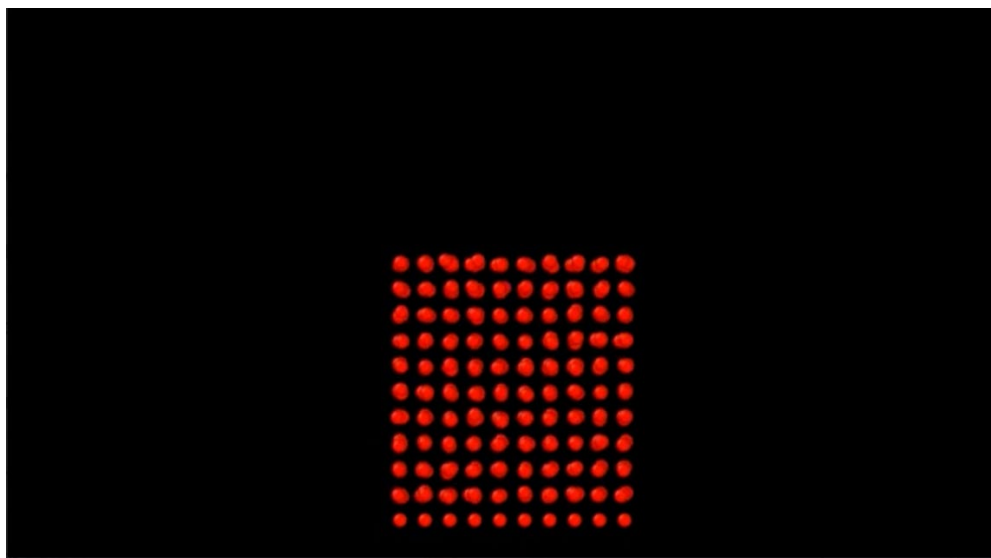


Рис 3.1. Твердий стан мідної підкладки

У твердому стані атоми тісно упаковані у ґратку, яка демонструє високий ступінь впорядкованості і мінімальний рух навколо фіксованих позицій атомів. Цей стан характеризується сильними міжатомними зв'язками, які підтримують структуру ГЦК, що видно з чітко визначеного її геометричного розташування. Стабільність при низьких температурах у цій фазі пояснюється мінімальною кінетичною енергією, недостатньою для подолання сил притягіння між атомами.

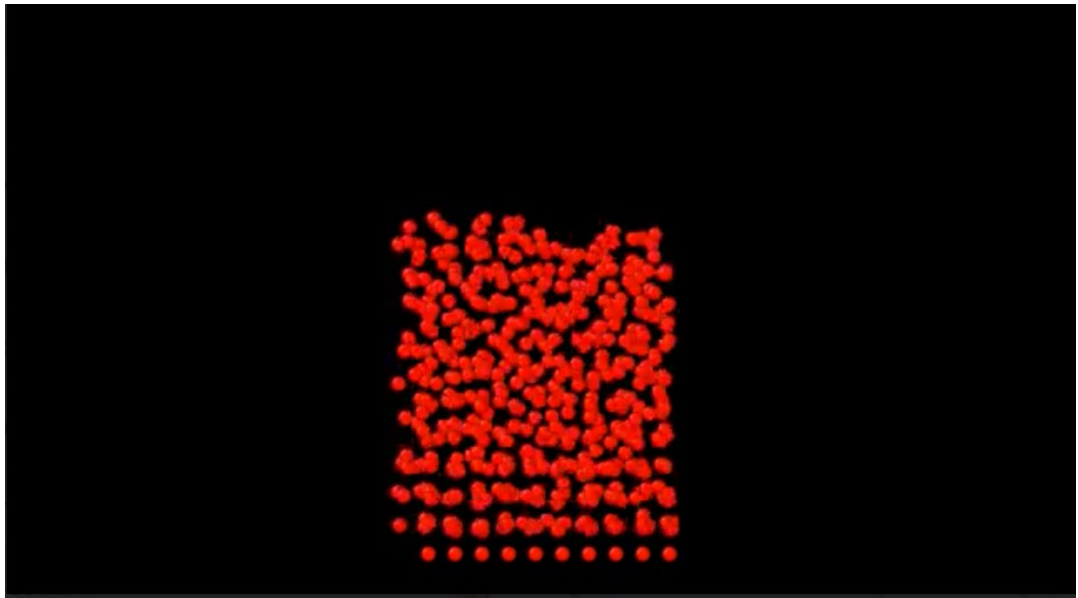


Рис 3.2. Перехід у рідкий стан

При підвищенні температури до температури плавлення атоми набувають достатньої кінетичної енергії, щоб вирватися зі своїх фіксованих положень. Рідкий стан характеризується проміжною атомною рухливістю, що дозволяє атомам рухатись один повз одного, все ще утримуючись разом когезійними силами. Розташування стає неупорядкованим, і з'являється стан помітного руху атомів речовини, як показано на рисунку 3.2 ГЦК стає менш структурованою.

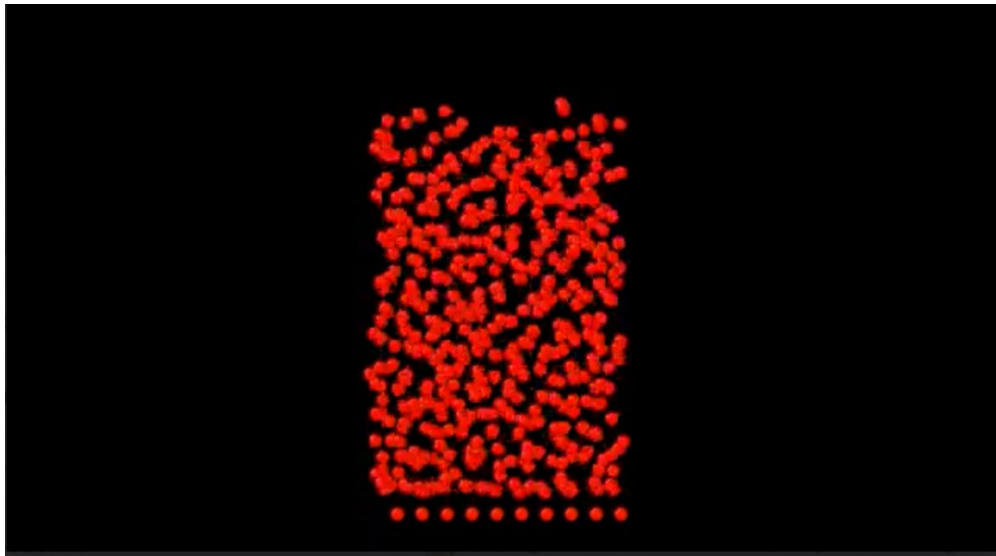


Рис 3.3. Перехід у газоподібний стан

При подальшому підвищенні температури до точки випаровування атоми набувають достатньої енергії, щоб повністю подолати міжатомне притягіння. У газоподібному стані міжатомний зв'язок руйнується і атоми починають рухатися незалежно один від одного. Ця фаза має високу неупорядкованість, низьку густину, і атоми можуть рівномірно заповнювати контейнер, про що свідчить їх розташування.

Таким чином, обчислювальна модель демонструє класичну поведінку речовини у відповідь на зміну теплової енергії. Фазові переходи від твердого тіла до рідини, а потім до газоподібного стану, які зображені на малюнках.

3.2. Взаємодія атомів кисню різних енергій з ґраткою атомів заліза

Осадження атома кисню на залізну підкладку являє собою фундаментальну взаємодію, що має значення для науки про поверхню та інженерії матеріалів. Представлена послідовність зображень ілюструє вплив різної кінетичної енергії при зіткненні - від 0,1 еВ до 500 еВ.

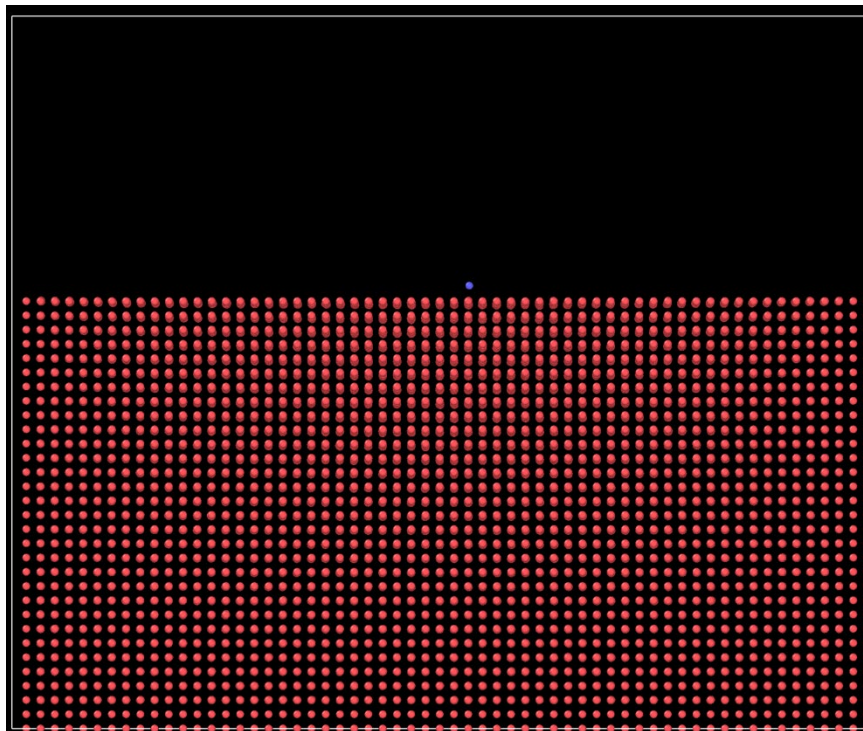


Рис 3.2.1. Енергія атому кисню 0.1 еВ

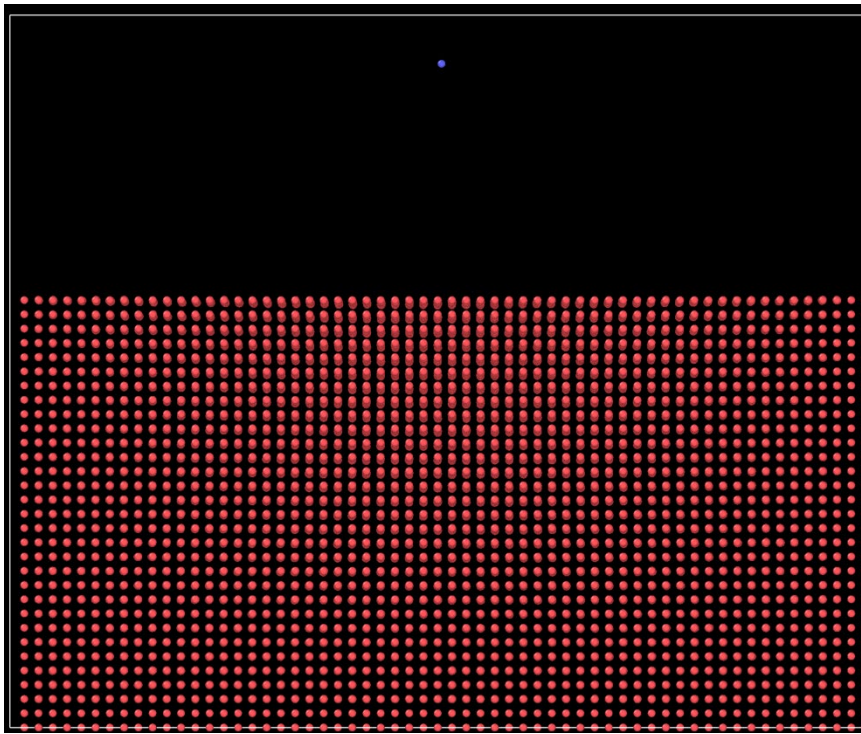


Рис 3.2.2. Енергія атому кисню 1 eV

На нижньому кінці енергетичного спектру, з енергією зіткнення 0,1 eV і 1 eV, взаємодія атома кисню з залізною підкладкою мінімальна, з недостатньою енергією, щоб викликати значне зміщення або дислокацію в решітці підкладки. Ці сценарії вказують на режим, в якому домінують адсорбційні процеси, а потенціал пошкодження або суттєвої зміни підкладки є незначним.

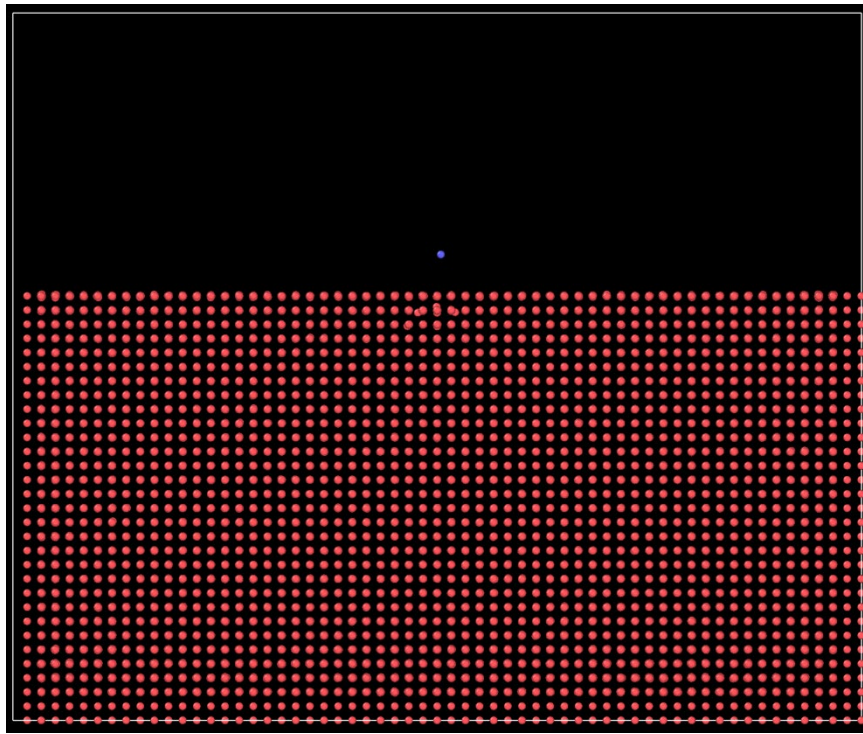


Рис 3.2.3. Енергія атому кисню 10 eV

Коли енергія збільшується до 10 eV, атом кисню вносить помітні збурення в підкладку. На цьому етапі ми починаємо спостерігати початкові стадії руйнування поверхні, коли енергія удару порівнянна з енергіями зв'язку атомів у підкладці. Це призводить до виникнення локалізованих дислокацій, які в основному є оборотними, оскільки система має здатність релаксувати і повертатися до стану, близького до початкової конфігурації.

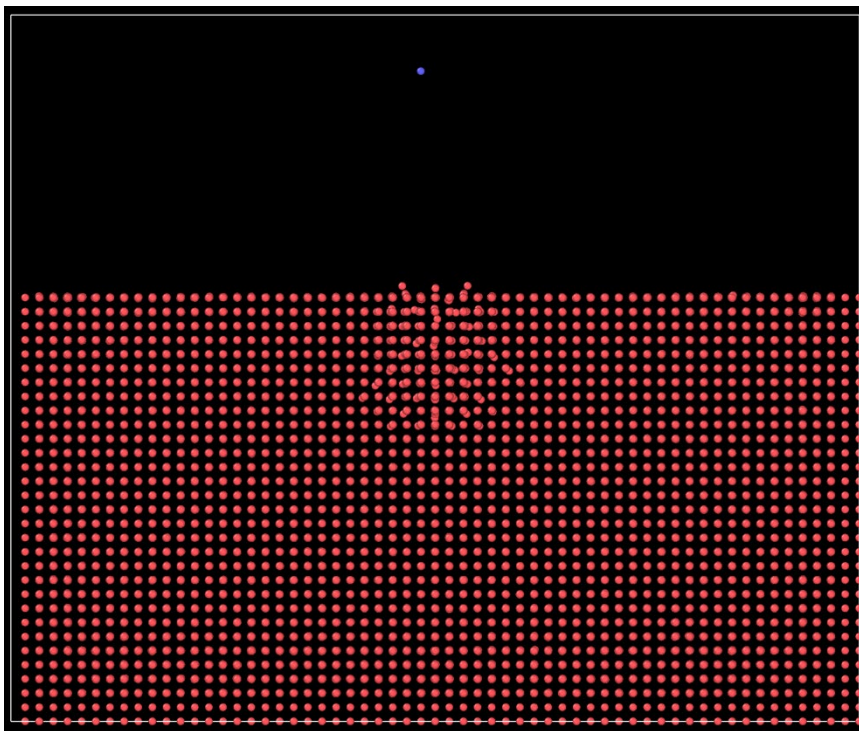


Рис 3.2.4. Енергшия атому кисню 100 eV

При подальшому збільшенні енергії до 100 eV вплив стає сильнішим, що призводить до найбільшого розвитку дислокацій, які спостерігаються в цій серії. Тут передача енергії є досить значною, щоб спричинити незворотні пошкодження - дислокації, які не можуть бути повністю відновлені при релаксації системи. Це являє собою перехід до режиму, коли кінетична енергія атома, що влітає, здатна викликати незворотні зміни в структурі ґратки підкладки.

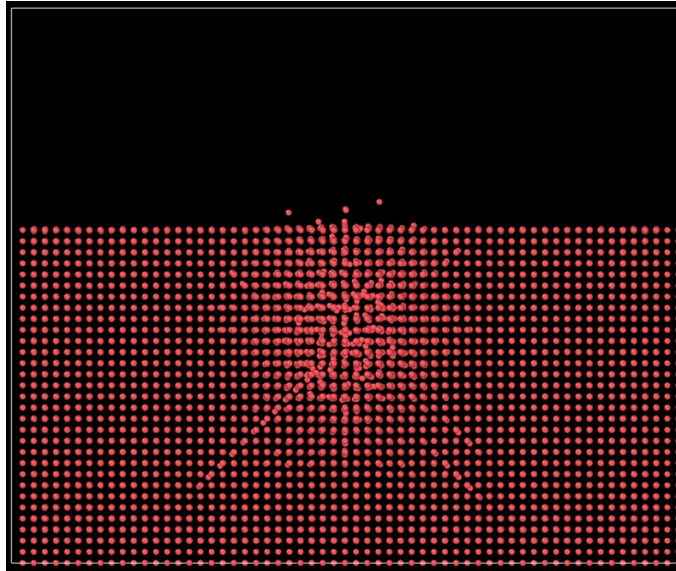


Рис 3.2.5. Енергія атому кисню 500 eV

На найвищому зображеному енергетичному рівні, 500 eV, удар атома кисню призводить до значного руйнування підкладки. Початкова взаємодія характеризується високим ступенем незворотних пошкоджень, про що свідчать яскраво виражені дислокації. Однак з часом, навіть при такому високоенергетичному впливі, система демонструє певний ступінь релаксації. Ця дихотомія між миттєвою і довготривалою реакцією субстрату на удар призвела до введення понять оборотних і необоротних пошкоджень для опису цих явищ.

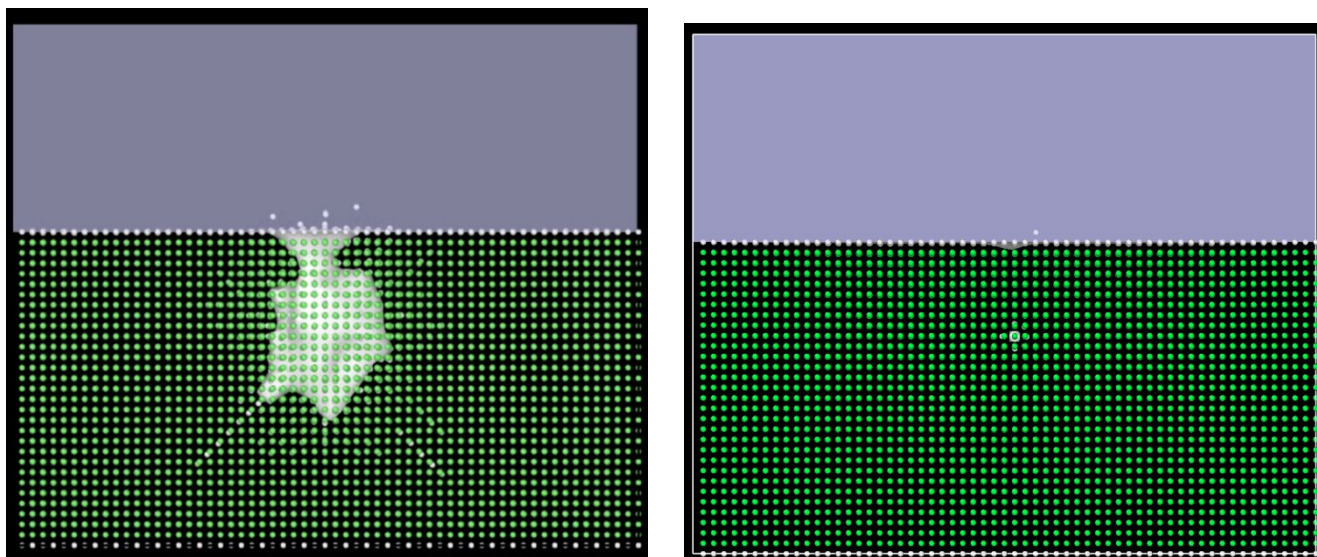


Рис. 3.2.6. Зворотні/незворотні дефекти: 500 еВ, ліворуч – максимальний розвиток, праворуч - після релаксації

В ході моделювання атому кисню при енергії 500 еВ виявило, що після релаксації в основі ГЦК залишаються незворотні дефекти. Ці дефекти розташовуються на глибині, що перевищує 40 нанометрів, підкреслюючи довгостроковий вплив процесів високоенергетичного бомбардування на цілісність матеріалу. Це спостереження є критичним для розуміння стійкості змін, викликаних атомним осадженням, і впливає на довговічність і надійність пофарбованих матеріалів.

Результати моделювання взаємодії атомів кисню з залізною підкладкою були узагальнені шляхом статистичного аналізу. Результати цього аналізу показано на наступних рисунках. Результати моделювання були зіставлені і побудовані графіки, щоб проілюструвати зв'язок між енергією удару атома кисню і пошкодженням залізної підкладки, що виникає в результаті. Цей зв'язок досліджували в логарифмічному масштабі, щоб охопити широкий діапазон енергій і відповідні варіації у реакції субстрату.

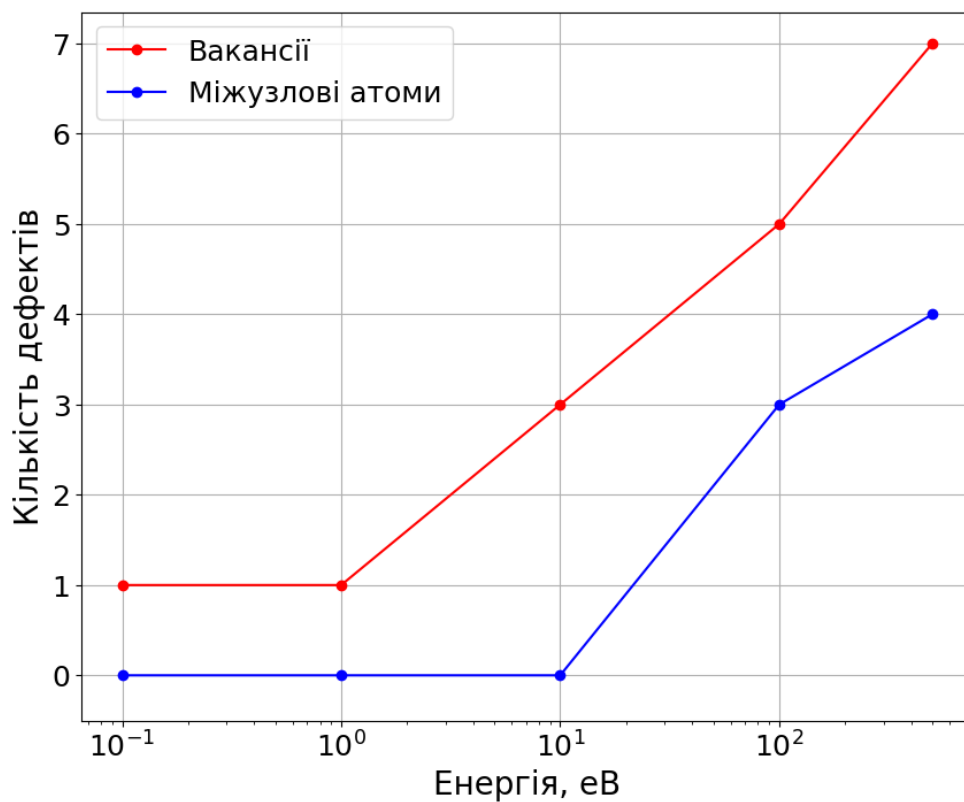


Рис 3.2.7. Графік залежності кількості дефектів від енергії

Наступний логарифмічний графік демонструє кількість вакансій і міжвузлових атомів в залежності від енергії атома кисню. Він вказує на порогову енергію, нижче якої дефекти не утворюються, і на збільшення кількості дефектів зі збільшенням енергії.

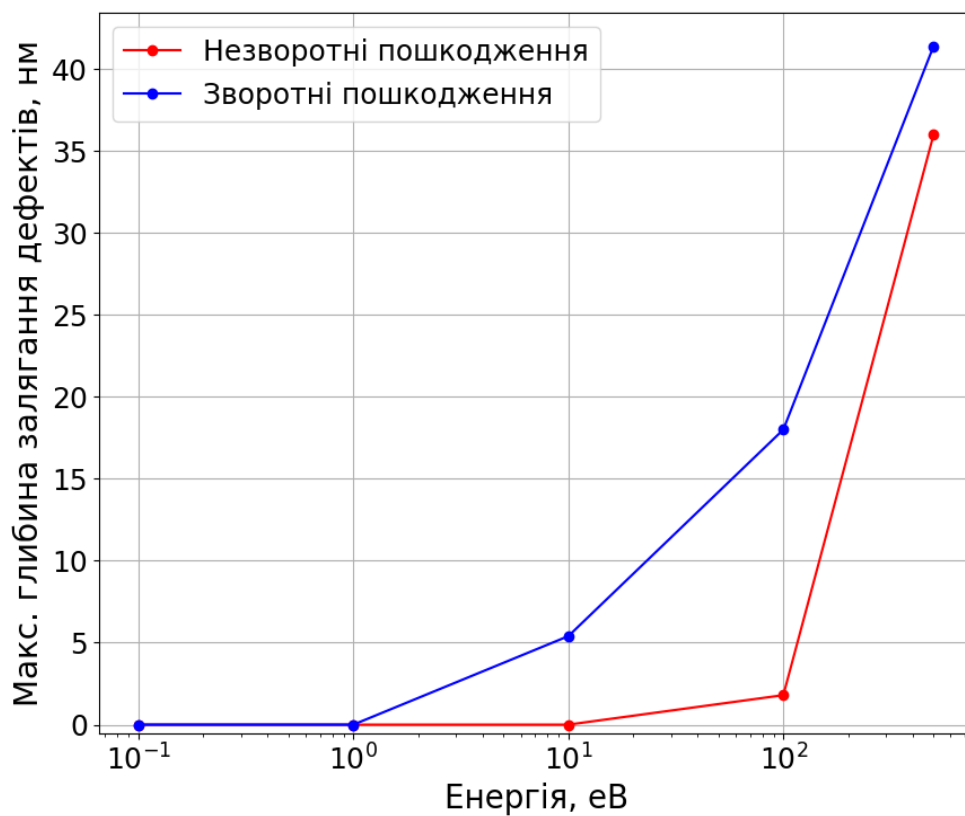


Рис 3.2.8. Графік залежності максимальної глибини залягання дефектів від енергії

Подібно до графіка 3.4, цей результат демонструє кількість оборотних і незворотних дефектів, створених на різних енергетичних рівнях атома, які стикаються з металевою підкладкою. Різне зростання при вищих енергіях свідчить про перехід до стану, коли передача енергії є достатньою для створення значної кількості незворотних дефектів.

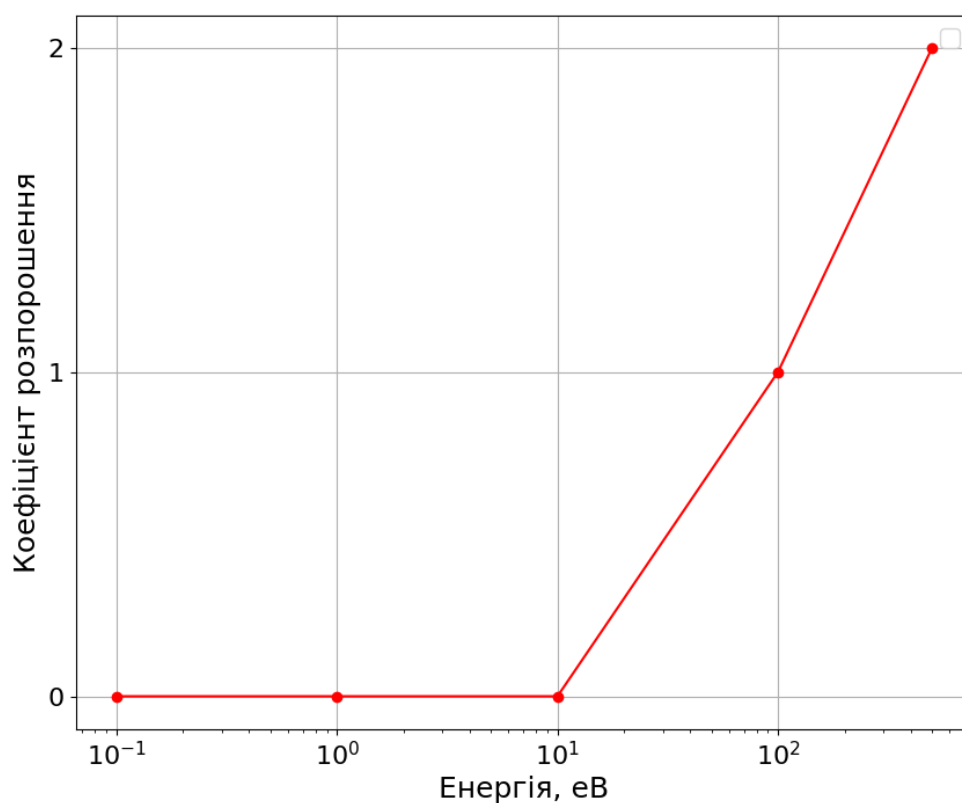


Рис 3.2.9. Графік залежності коефіцієнта розпорошення від енергії

Останній графік, демонструє залежність коефіцієнта розпорошення від енергії атома кисню. Графік вказує на нелінійну залежність, де пікова енергія призводить до збільшення ймовірності виникнення дефектів.

3.3. Роль координати точки удару атома високої енергії

В ході досліджень було виявлено, що зміщення точки удару відіграє велику роль у наслідках зіткнення. Для високоенергетичних зіткнень, таких як зіткнення при 100 eV і 500 eV, точне місце, в якому атом кисню вдаряється об залізну підкладку, може суттєво впливати на ступінь і природу утворених дислокацій.

Проаналізуємо результати моделювання, отримані за допомогою молекулярно-динамічного моделювання бомбардування атомами кисню металевої підкладки.

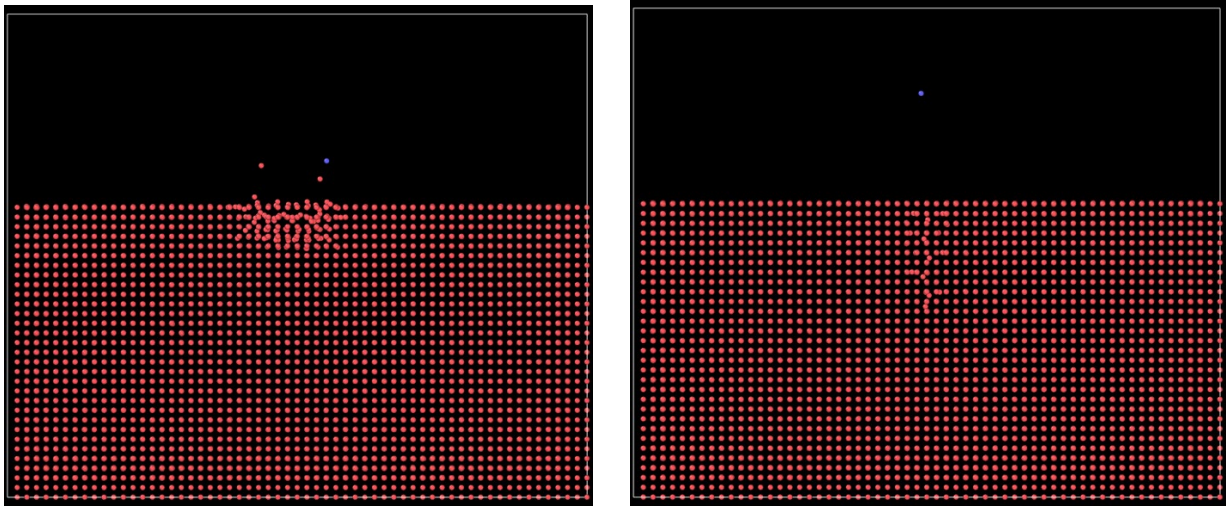


Рис 3.3.1. Удар високоенергетичного атома з зміщенням точки удару (ліворуч $x=0.0$, $y=0.0$, праворуч $x=2.0$, $y=2.0$)

Використовуючи середовище моделювання LAMMPS, ми ретельно визначили початкові умови та параметри взаємодії для відтворення процесів на атомному рівні. Рисунок 3.3.1. демонструє критично важливе розуміння динаміки дефектоутворення під впливом взаємодій процесу осадження.

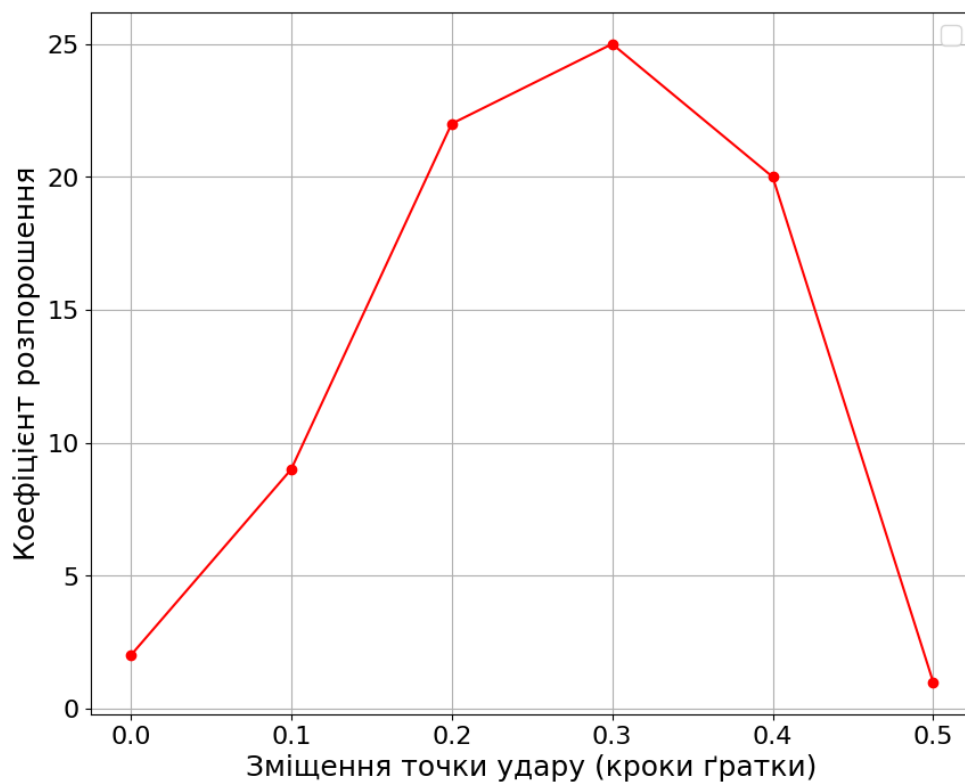


Рис 3.3.2. Графік залежності коефіцієнта розпорошення від точки зміщення удару

Цей графік демонструє залежність коефіцієнта розпорошення від зміщення точки зіткнення атома кисню. Пік вказує на оптимальне зміщення, при якому цей коефіцієнт є максимальним, що свідчить про утворення дефектів та каскадів зіткнень.

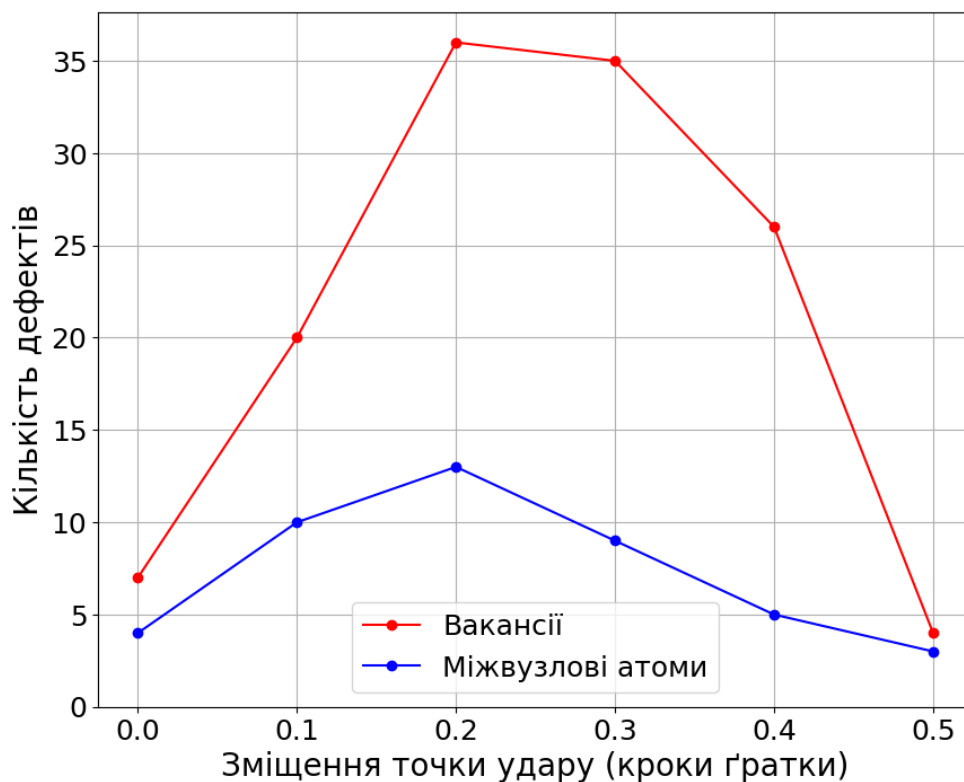


Рис 3.3.3. Графік залежності кількості ударів від точки зміщення удару

Порівняльна характеристика кількості вакансій і міжвузлових атомів в залежності від зміщення точки зіткнення. Існує чітка різниця між цими двома дефектами, причому кількість вакансій досягає піку в певній точці, що дозволяє припустити, що це зміщення може корелювати з максимальним порушенням структури ґратки.

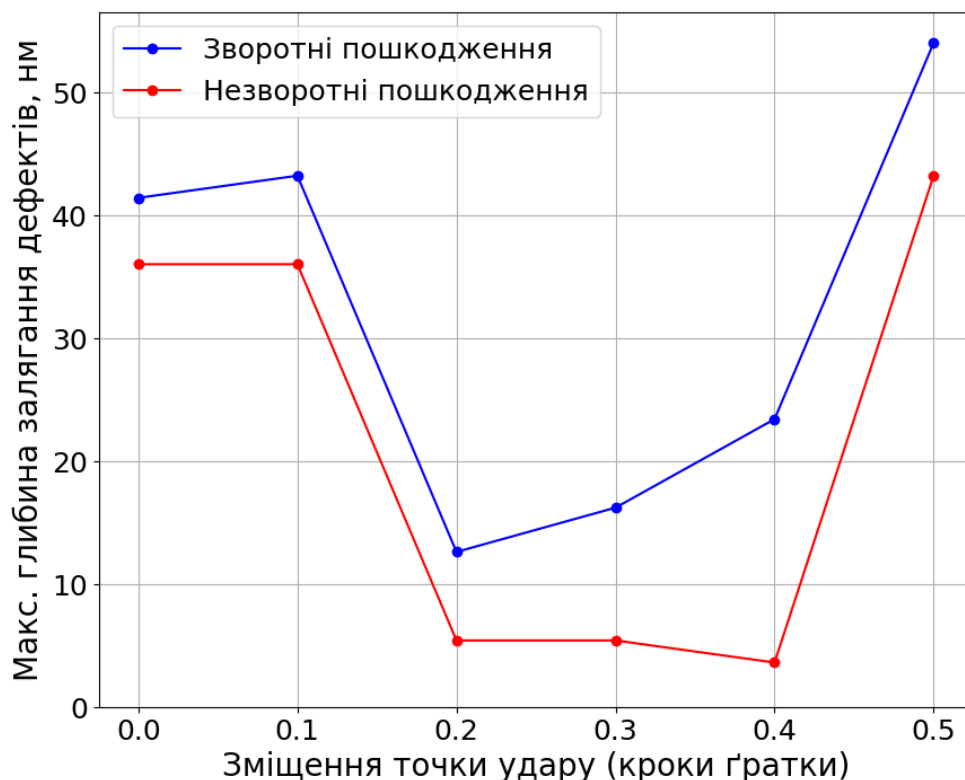


Рис 3.3.4. Графік залежності максимальної глибини залягання дефектів від точки зміщення удару

На графіку показані оборотні та необоротні дефекти в залежності від зміщення точки удару. Тенденція свідчить про те, що певні зміщення з більшою ймовірністю призводять до оборотних дефектів, тоді як інші призводять до незворотного пошкодження підкладки.

3.4. Взаємодія атомів кисню високої енергії з шаром оксиду магнію

Для з'ясування наслідків бомбардування атомами кисню високої енергії шару оксиду магнію, що є бар'єрним шаром у пристроях спінтроніки, було проведене відповідне моделювання. Результати моделювання для енергії атома кисню 500 еВ показано на рис. 3.4.1. Видно, що удар такого атома по поверхні оксиду магнію призводить до значно більших руйнувань порівняно з ударом по поверхні заліза. Видно утворення суцільного отвору у оксидному шарі, що є неприпустимим при

формуванні тунельного бар'єру. Цей ефект можна пояснити тим, що атоми кисню та магнію, з яких складається оксид, є значно легшими за атоми заліза, а передача енергії між двома атомами кисню максимальна завдяки рівності мас.

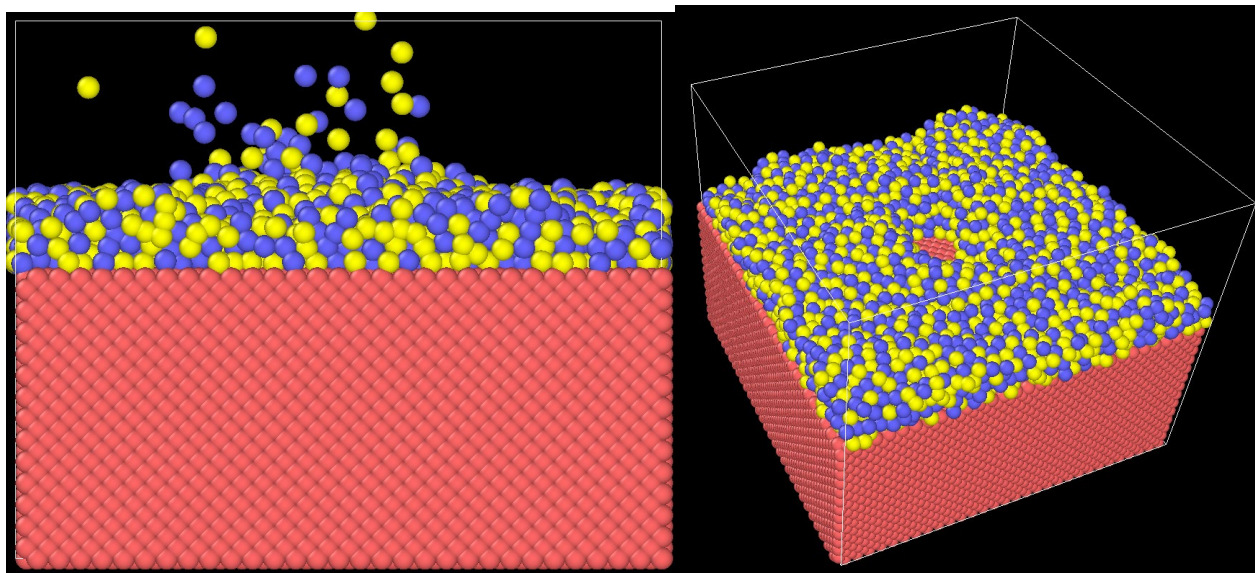


Рис. 3.4.1. Результати моделювання бомбардування шару оксиду магнію товщиною 1 нм, осадженого на поверхні заліза, атомом кисню з енергією 500 еВ.

3.5. Обговорення результатів

Надані вище графіки відображають кількісний прояв взаємодій між атомом кисню та металевої підкладки, окреслюючи зв'язок між кінетичною енергією атома кисню, що зіштовхується з металевою підкладкою, і його положенням відносно її розштатування. Вони дають розуміння того, як різні енергетичні рівні та точки зміщення впливають на створення вакансій, міжвузлових атомів та оборотних і необоротних дефектів у решітці металевої підкладки.

Наступні результати дослідження являють собою серію знімків з симуляції молекулярної динаміки, що візуалізують зіткнення та подальшу взаємодію атома кисню з металевою підкладкою. Ці знімки відображають динамічну еволюцію системи в міру того, як атом кисню осаджується на підкладку.

Надамо опис до кожного зображення. Аналіз дислокацій атому кисню при енергії 0.1,1,10,100 та еВ. Ліворуч зображено глибина залягання для зворотніх дефектів, праворуч для незворотні дефектів.

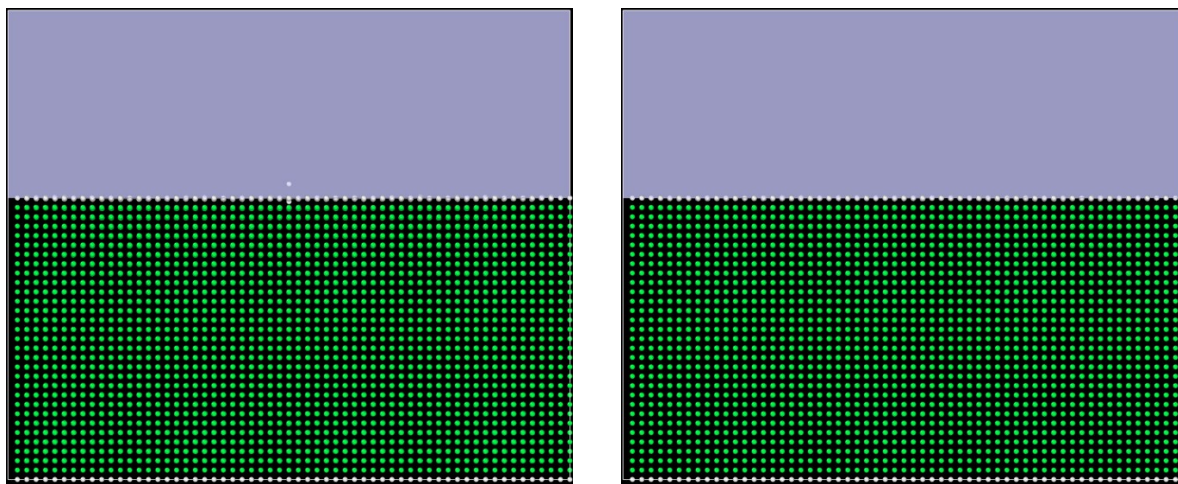


Рис. 3.5.1. Аналіз дислокацій атому кисню при енергії 1 eV

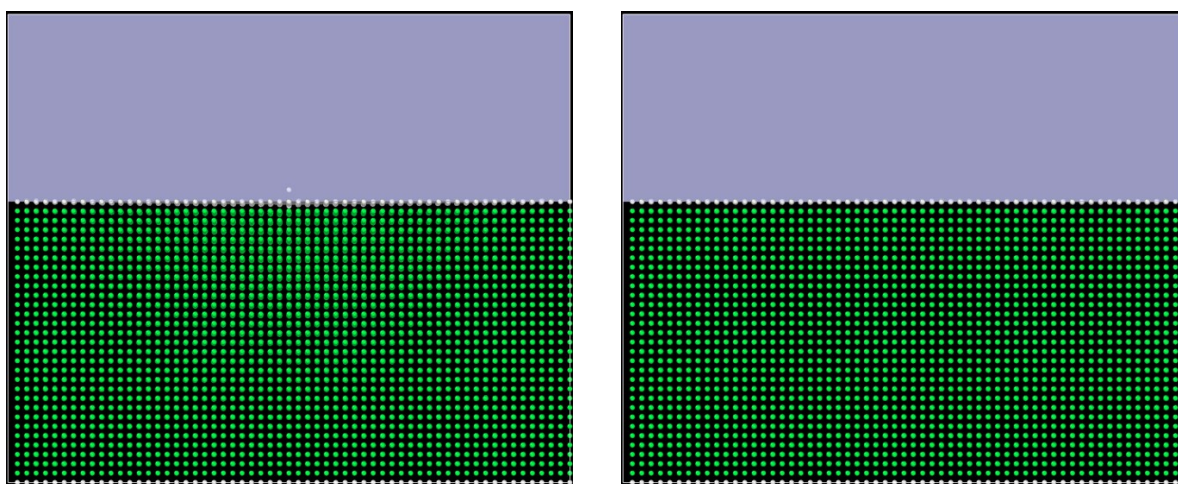


Рис. 3.5.2. Аналіз дислокацій атому кисню при енергії 0.1 eV

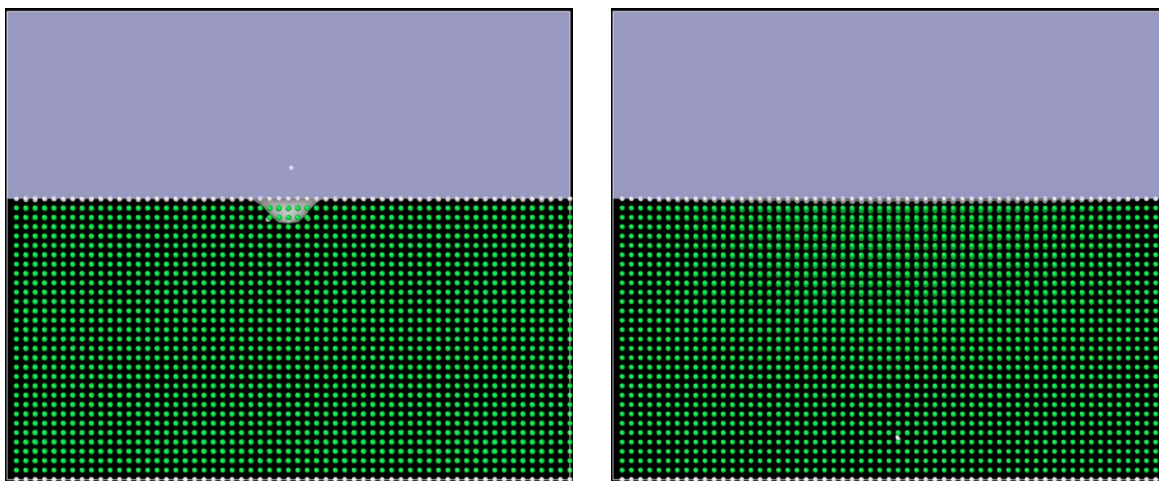


Рис. 3.5.3. Аналіз дислокацій атому кисню при енергії 10 еВ.

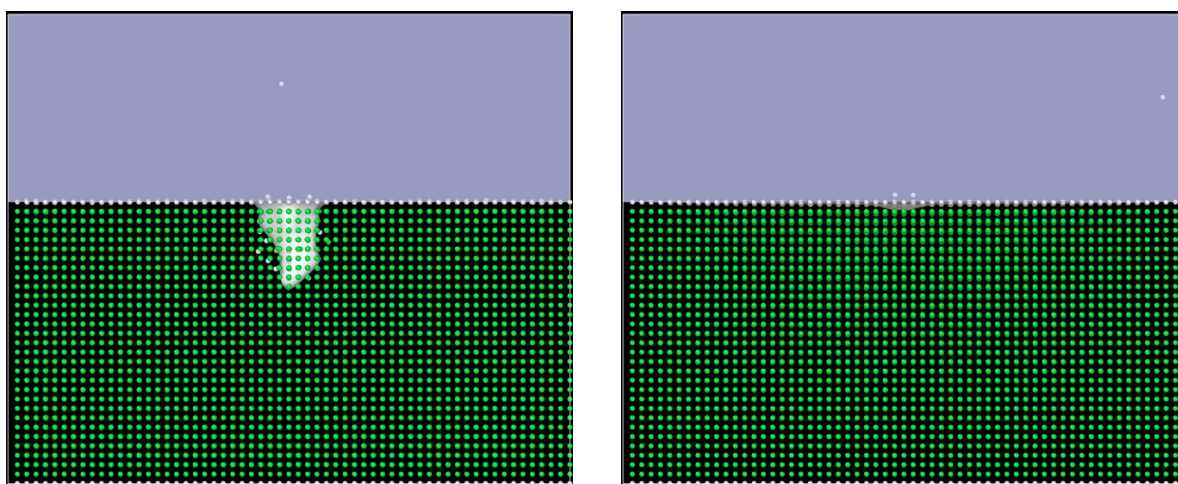


Рис. 3.5.4. Аналіз дислокацій атому кисню при енергії 100 еВ

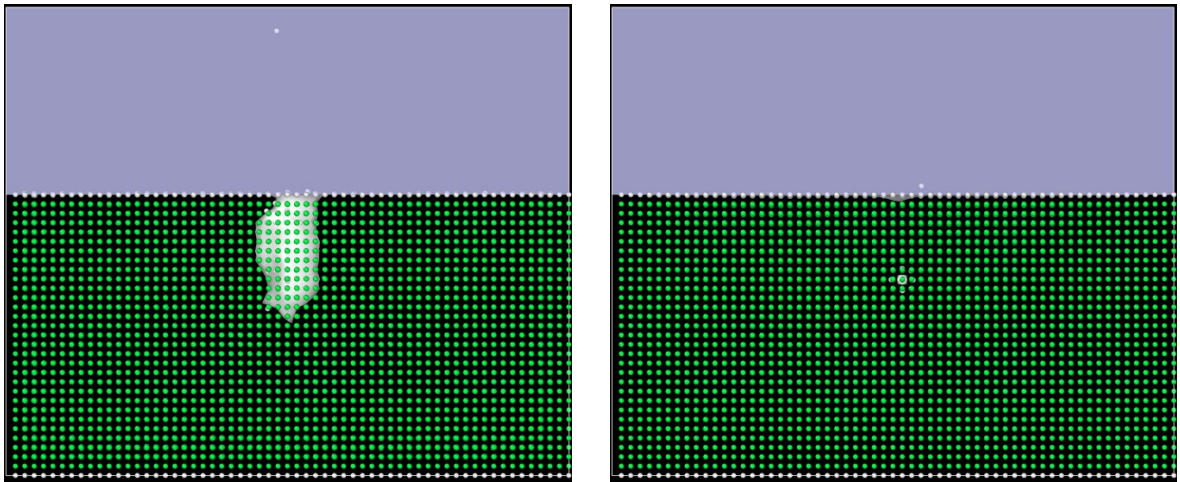


Рис. 3.5.5. Аналіз дислокацій атому кисню при енергії 500 eV

Зображення 1-2: Ці фіксують початковий момент удару, коли атом кисню, представлений білою сферою над підкладкою, наближається до поверхні металу. Атоми підкладки щільно упаковані в правильну решітку, що свідчить про добре впорядковану кристалічну структуру.

Зображення 3-5: На цих кадрах спостерігається проникнення атома кисню в ґратку підкладки. Локалізоване викривлення решітки підтверджується зміщенням атомів навколо точки удару, створюючи "яму", оскільки деякі атоми підкладки виштовхуються зі своїх рівноважних положень. Це свідчить про передачу кінетичної енергії від атома кисню до підкладки, що призводить до утворення точкових дефектів.

Зображення 5-8: На цих кадрах демонструється процес інтеграції атома кисню в підкладку. Порушення структури кристалічної ґратки є більш вираженим, з помітним каскадом зміщених атомів підкладки, що простягається вглиб матеріалу. Це може бути пов'язано зі створенням каскаду зіткнень, коли в результаті первинного удару виникають вторинні зміщення.

Зображення 8-10: На наступних кадрах спостерігається наслідки осадження атома кисню. Решітка атомів заліза поглинула атом кисню, і відбулася певна релаксація. Хоча атом заспокоївся в решітці, залишкова напруга і дефекти зберігаються, що характеризується деформацією навколо місця зіткнення. Ця

деформація може свідчити як про точкові дефекти, так і про протяжні дефекти, такі як дислокаційні петлі або кластери вакансій.

З проведеного аналізу зіткнень атома кисню з металевою підкладкою можна зробити висновок щодо передачі енергії та утворення дефектів під час процесу атомістичного осадження. Початкова кінетична енергія атома кисню розсіюється через металеву решітку, що призводить до зміщення атомів і утворення різних дефектних структур. Ці структури суттєво впливають на властивості матеріалу, включаючи його механічну міцність, електропровідність та дифузійну поведінку.

ВИСНОВКИ

У роботі розроблено комплексну модель процесу взаємодії атомів кисню в діапазоні енергій 0,1-500 еВ з металевою підкладкою. Моделювання проводилось з використанням методу молекулярної динаміки, який було реалізовано за допомогою пакету LAMMPS. За допомогою цієї моделі досліджено вплив бомбардування покриття, що зростає, частинками різних енергій на кристалічну структуру і загальну якість тонких плівок. Отримано наступні результати.

1. Бомбардування кристалічної ґратки заліза атомами кисню з енергією більше 100 еВ призводить до виникнення незворотніх пошкоджень ґратки;
2. За енергії 500 еВ глибина залягання дефектів може досягати більше ніж 40 нм, що на порядок перевищує типовий розмір пристроїв спінтроники;
3. Глибина і кількість дефектів ґратки, що виникають внаслідок удару атому високої енергії, сильно залежать від зміщення точки удару відносно атома підкладки;
4. Бомбардування шару MgO товщиною 1 нм атомами кисню з енергією 500 еВ може призводити до утворення отворів у оксидному шарі.

Можна зробити загальний висновок, що бомбардування іонами кисню високих енергій, які генеруються у магнетронній плазмі, може призводити до критичних пошкоджень функціональних шарів пристроїв спінтроники, що має враховуватись при розробці технологій магнетронного осадження таких шарів. Ефективним інструментом для дослідження цих пошкоджень є моделювання методом молекулярної динаміки.

ПЕРЕЛІК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. R. Bläsing et al., "Magnetic Racetrack Memory: From Physics to the Cusp of Applications Within a Decade," in Proceedings of the IEEE, vol. 108, no. 8, pp. 1303-1321, Aug. 2020, doi: 10.1109/JPROC.2020.2975719.
2. Parkin, Stuart & Yang, See-Hun. (2015). Memory on the racetrack. Nature nanotechnology. 10. 195-8. 10.1038/nnano.2015.41.
3. Thomas Weltzel and Klaus Ellmer. J. Phys. D: Appl. Phys. 46 (2013) 315202 (9 pages) – frequency. Impact of negative ions on film growth in magnetron sputtering by M.
4. Molecular dynamics (MD) simulations for thin film deposition: a review by X. Zhang, B. Wang, Y. Q. Wang, Q. Zhang, and Y. Wang (2022) in Materials Today Physics, volume 18, pages 100027.
5. Molecular dynamics simulation of ion bombardment effects on thin film properties by X. Zhang, K. Hu, and X. Zhang (2020) in Materials Science Forum, volume 951, pages 360-363.
6. Heggie and K. Masuda (2017) in Surface and Interface Analysis, volume 39. Reducing negative ion bombardment in magnetron sputtering by T. Weltzel, K. Ellmer, and S. Selberherr (2021) in Journal of Applied Physics, volume 110, pages 073303.]..
7. Van Speybroeck et al. (2021). Large-Scale Molecular Dynamics Simulations Reveal New Insights Into the Phase Transition Mechanisms in MIL-53(Al). Frontiers.
8. Keupp and Schmid. (2019). Large scale force-field-based MD simulations on a series of MOFs. Journal Name.
9. Rogge et al. (2019). Mesocell and nanocell behavior in MD simulations. Journal Name.
10. LAMMPS Documentation: <https://docs.lammps.org/Manual.html>
11. A brief introduction to giant magnetoresistance [Електронний ресурс] / [L. Chang, M. Wang, L. Liu та ін.] // arXiv. – 2014. – Режим доступу до ресурсу: <https://arxiv.org/abs/1412.7691>.
12. Barron, A.R., Physical Methods in Chemistry and Nano Science. Connexions: Houston, TX, 2012: p. 365.

13. Zhao, Z. and A. Barron, Gas Chromatography Analysis of the Hydrodechlorination Reaction of Trichloroethene. Connexions: Houston, TX, 2012.