

А.И Деревянко, А.А. Кавац

ИМИТАЦИОННАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ПОКРЫТИЙ ПО ТЕХНОЛОГИИ PVD

Работа посвящена имитационному моделированию процесса формирования функциональных покрытий. Исследуется процесс формирования функциональных покрытий в парофазной среде.

Ключевые слова: функциональные покрытия, имитационная модель, процесс формирования, технология PVD.

Введение. В настоящее время для получения покрытий различного вида оксидов, карбидов, нитридов, алмазоподобных углеродных пленок и т.п. используются Chemical Vapor Deposition (CVD) и Physical Vapor Deposition (PVD) - технологии. Моделирования процесса формирования функциональных покрытий по технологии PVD является актуальной задачей.

Постановка и решение задачи. Работа посвящена исследованию процесса формирования функциональных покрытий по технологии PVD. Развитие технологии структурообразования функциональных покрытий направленно на минимизацию допуска по технологическим параметрам. Сравнение разных технологий, которые способны обеспечить выполнение этих требований, показало, что выросла роль физических – Physical Vapor Deposition (PVD) методов осаждения пленок из потоков атомов паровой или газовой фазы вещества.

На практике технология PVD выполняется в три этапа:

1. Диссоциация молекул начального вещества.
2. Формирование элементов структуры функционального покрытия в паровой среде.
3. Транспортировка сформированных элементов к подложке.
4. Осаждение сформированных элементов и адгезия на поверхность покрытия.

По технологии PVD структурообразование происходит в паровой среде, где динамический коэффициент вязкости приближен к нулю.

На рисунке 1 представлена схема формирования покрытий с применением НГЭП [2].

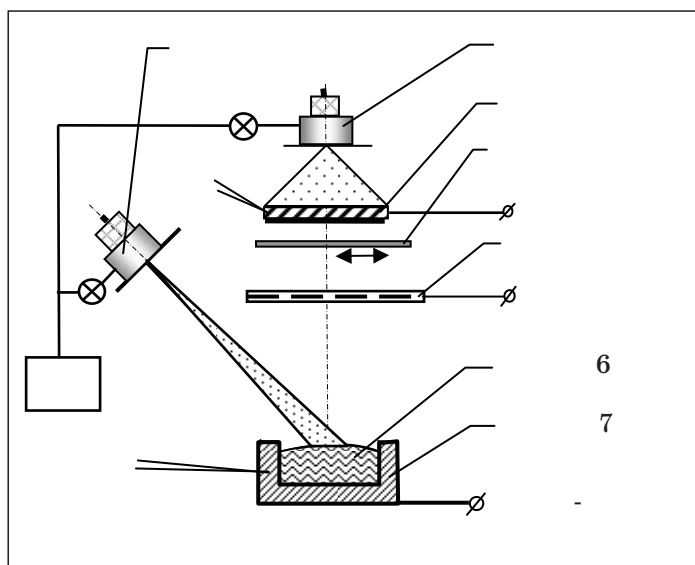


Рисунок 1 - Схема формирования покрытий с применением НГЭП.

1 – НГЭП испарителя; 2 – НГЭП для нагрева подложки; 3 – подложка с покрытием; 4 – заслонка; 5 – анод ионизатора; 6 – испаряемый материал; 7 – тигель; 8, 11 – термопары; 9 – система поддува газа; 10, 12 – вакуумные натекатели

Моделирование движения частицы, основано на следующем выражении:

$$m\ddot{x} = F(x, u) \quad (1)$$

где x - координаты центров кристаллизации, F - сумма всех сил, действующих на микрокристалл, u - вектор входных параметров, $F_A = 0$ - сила Архимеда, F_U - сила потенциального взаимодействия (потенциал Морзе $U(r)$), которая описана следующим уравнением:

$$F_U = \frac{\partial U(r)}{\partial r} = 2aD \left(e^{-\alpha(r-\sigma)} - e^{-2\alpha(r-\sigma)} \right) \quad (2)$$

где D - энергия диссоциации, σ - равновесное межатомное расстояние.

Таким образом, моделирование движения частиц обусловлено с физической точки зрения. С помощью полученных данных становится возможным моделирование процесса формирования функциональных покрытий. Моделирование процесса образования в парофазной среде структурных компонентов с помощью разработанного программного продукта «Colcryst», который позволяет задавать начальные параметры, идентичные параметрам реального эксперимента

процесса формирования структурных компонент функциональных покрытий по технологии PVD. В результате исследований, проводимых в лабораторных условиях НМетАУ, получена серия изображений структурных компонент функциональных покрытий, осажденных в парофазной среде, одно из которых представлено на рисунке 2.

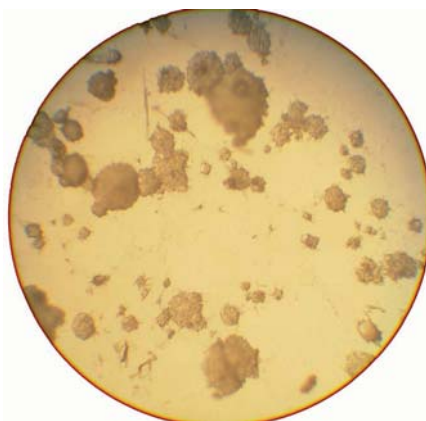


Рисунок 2 – Изображения функциональных покрытий, осажденных по технологии PVD

На рисунке 3 приведены результаты работы программы «Colcryst» [1].



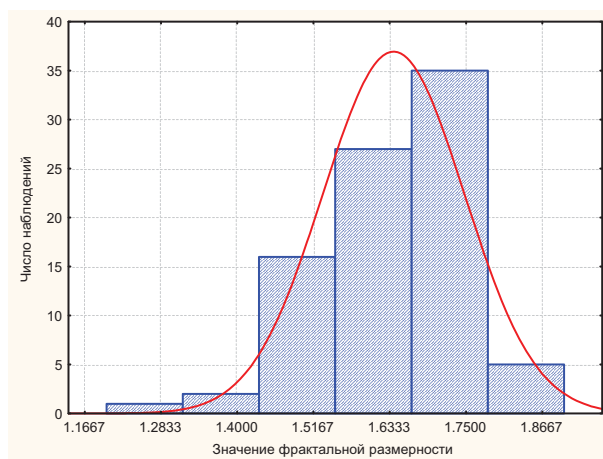
Рисунок 3 – Изображение функциональных покрытий в парофазной среде, полученных путем моделирования в программном продукте «Colcryst»

В результате экспериментальных исследований была получена серия изображений функциональных покрытий при малых экспозициях, которая являются цветными (модель RGB). Для определения фрактальной размерности необходимо преобразовать цветное изображение в монохромный вид, при этом главную роль играет определение порога бинаризации изображений функциональных покрытий.

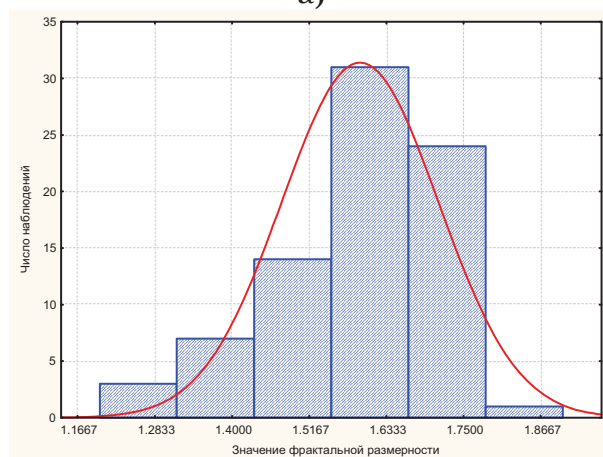
Дискретизация порога осуществлялась по формуле $K * (0 \div 255)$, где K - значение порога бинаризации изменяющегося в диапазоне $[0;1]$.

По значениям фрактальной размерности для экспериментальных изображений и изображений, полученных путем моделирования, построены вариационные ряды, по которым статистическими методами определен критерий χ^2 , для каждого вариационного ряда соответственно.

Определен доверительный интервал $[1,616; 1,663]$ для экспериментальных изображений значений фрактальной размерности и $[1,567; 1,637]$ – по результатам численного моделирования. Таким образом, пересечение этих доверительных интервалов находится в диапазоне $[1,616; 1,637]$.



а)



б)

Рисунок 4 - Оценка нормальности распределения по критерию χ^2 для значений фрактальных размерностей полученных: а) по экспериментальным изображениям, б) по результатам численного моделирования

Выводы

В работе построена и исследована имитационная модель процесса формирования функциональных покрытий в парофазной среде, при нулевом коэффициенте динамической вязкости. Получены оценки интегральных характеристик значений фрактальной размерности функциональных покрытий. Адекватность разработанной модели подтверждена результатом статистической проверки гипотез о совпадении доверительных интервалов оценок фрактальной размерности для физического эксперимента парофазного осаждения функциональных покрытий и оценок полученных по результатам моделирования этого процесса.

ЛИТЕРАТУРА

1. Кавац О. О. Моделирование процесса кристаллизации металлических сплавов/ О. О. Кавац, О. І. Дерев'янюк, А. І. Гуда, М І Гасик // Регіональний міжвузівський збірник наукових праць «Системні технології», № 4'(63) – Дніпропетровськ., 2009. – с. 144-149.
2. Тутык В.А. Газоразрядные электронные пушки для аэродинамических исследований /В.А. Тутык // Харьковская нанотехнологическая ассамблея Том 1. Вакуумные нанотехнологии и оборудование (Сборник докладов 7-й Международной конференции «Вакуумные нанотехнологии и оборудование»).- Харьков: ННЦ ХФТИ, “Константа”, 2006. - с.50-54.
3. Завьялов М.А. Плазменные процессы в технологических электронных пушках./ М.А. Завьялов, Ю.Е. Крейндель, А.А. Новиков, Л.П. Шантурин – М.: Энергоатомиздат, 1989 – с. 123.
4. Сивухин Д. В. – Общий курс физики: Термодинамика и молекулярная физика. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005.