

ІМІТАЦІЙНА МОДЕЛЬ АГРЕГАЦІЇ В ТЕХНОЛОГІЇ PVD

Анотація. В роботі створена імітаційна модель агрегації кластерних утворень при формуванні плівок за технологією Physical Vapor Deposition.

Ключові слова: комп'ютерна модель, агрегація, потенціал Морзе, хаотичні коливання.

Вступ

Порівняння різних технологій формування покриттів, показує, що постійно зростає роль фізичних методів осадження плівок (Physical Vapor Deposition) з атомизованих потоків речовини в паровій або газовій фазі. Методи PVD дозволяють одержувати багатошарові покриття, і покриття із градієнтом уздовж підкладки або по товщині покриття, що досягається за рахунок підвищення енергії часток, а не загальної температури [1].

Технологічно процес PVD реалізується в три етапи:

1. Дисоціація ісходні речовини та утворення її часток [2]..
2. Агрегація часток та формування кластерних утворень.
3. Осадження кластерних утворень та адгезія з поверхнею.

Таким чином, моделювання процесів дисоціації та агрегації методами молекулярної динаміки дає можливість дослідити (прогнозувати) умови створення наноструктурних утворень за технологією PVD.

Постановка задачі

Метою роботи є створення імітаційної моделі агрегації за принципами молекулярної динаміки для дослідження руху та взаємодії часток в обмеженому просторі за умов вприску часток інертного газу.

Основна частина

Комп'ютерне моделювання є ефективним методом дослідження складних систем. При цьому імітаційне моделювання виходить з того, що закони взаємодії та руху часток системи відомі апіорі, а результатом моделювання є поведінка всієї системи. У випадку стохас-

тичної або хаотичної поведінки в якості оцінки критерія адекватності моделі має розглядатися не точність прогнозу, а її статистичний аналог – доствірність [3].

Приймемо опис динаміки окремої частки системи у вигляді класичної гамільтонової моделі [4]:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \Pi(r) - \mu(r)u(t), \quad (1)$$

де $r(t)$ - відстань між частками, m - маса окремої частки, $\Pi(r)$ - потенціал взаємодії між частками, $\mu(r)$ - дипольний момент, $u(t)$ - зовнішнє керуюче поле.

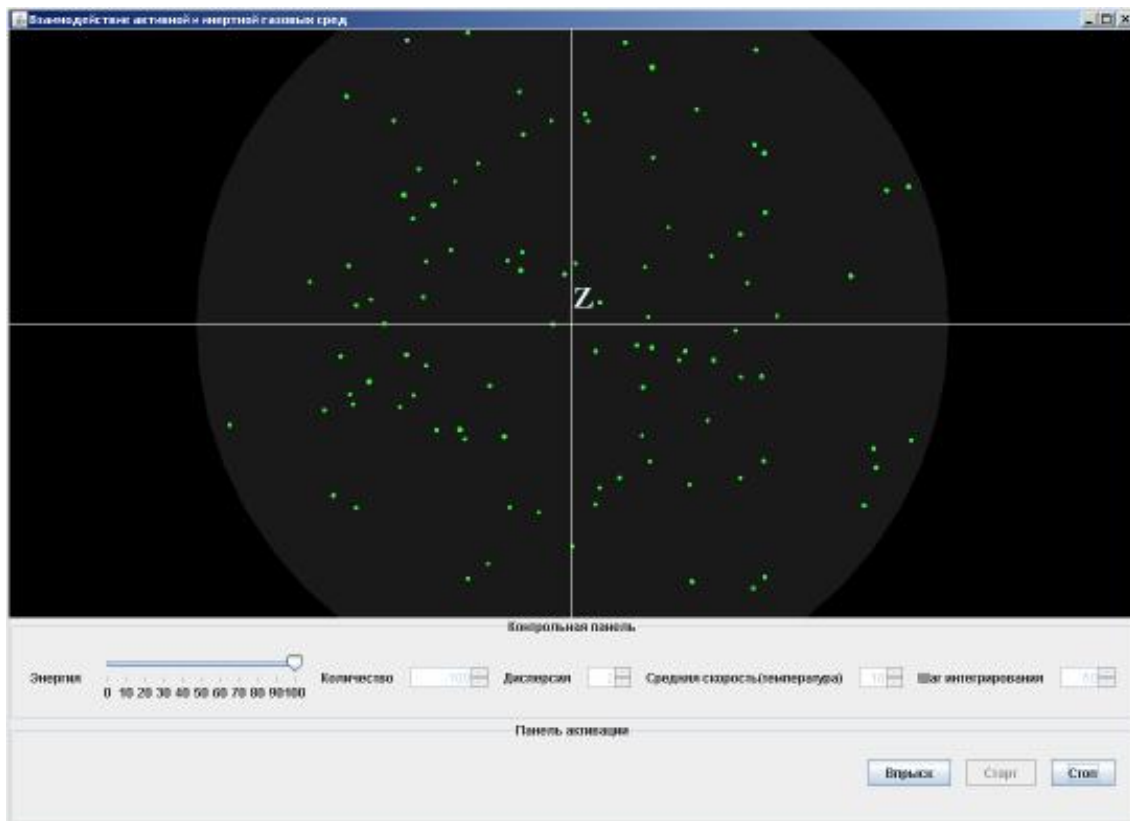


Рисунок 1 – Початок моделювання
(хаотичний рух часток першого виду)

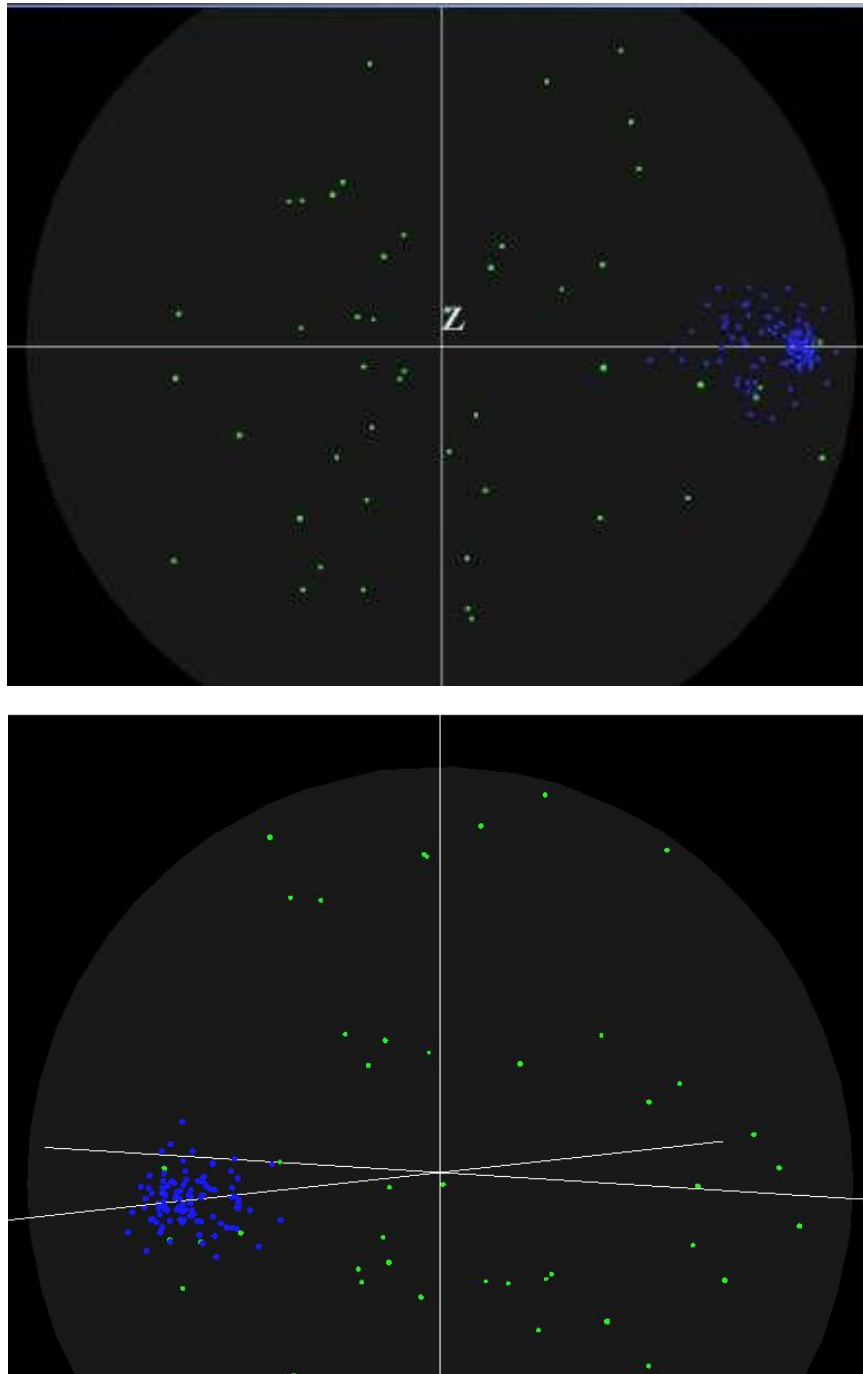


Рисунок 2 – Впрыск инертных частиц
(под разными углами наблюдения)

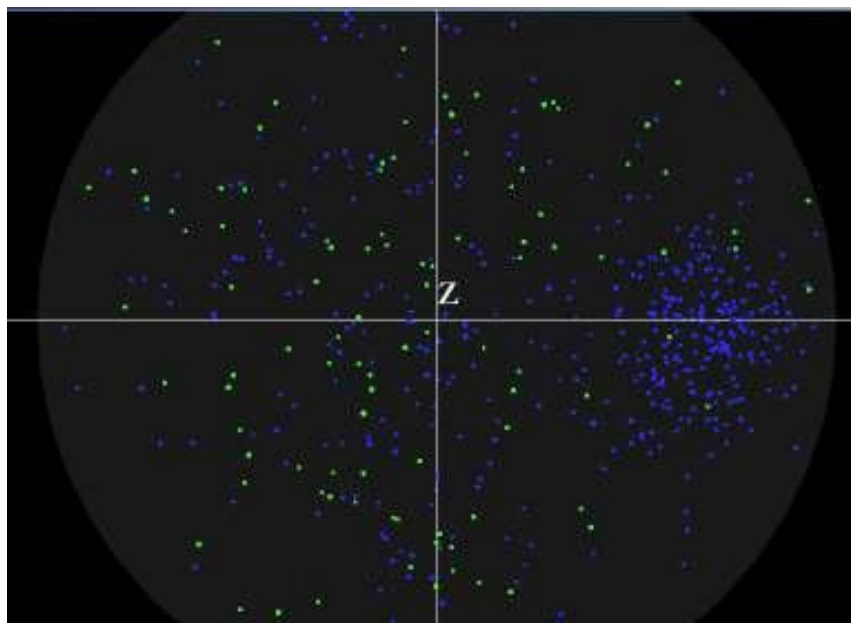


Рисунок 3 – Дифузія інертних часток

Для опису взаємодії між частки системи в роботі використовано потенціал Морзе:

$$P(r) = D(1 - e^{-a(r-a)})^2 - D = D(e^{-2a(r-a)} - 2e^{-a(r-a)}), \quad (2)$$

де D – енергія зв'язку (дисоціації), a – рівноважна відстань між частками. Дипольний момент

$$\mu(r) = A r e^{-\alpha r^4}, \quad (3)$$

в роботі розглянуто за умови малого значення ζr^4 , тобто у формі:

$$\mu(r) = A r, \quad (4)$$

При цьому рівняння керування часток системи в формі Лагранжа має вигляд:

$$m\ddot{r} = 2aD(e^{-2a(r-a)} - e^{-a(r-a)}) + Au(t). \quad (5)$$

В роботі [5] показано, що осцилятор Морзе (5) за певних умов зовнішнього впливу $u(t)$ має хаотичний режим руху. Існування цього режиму пов'язано із газовою фазою (станом) речовини.

Рівняння (5) припускає, що рух часток системи одновимірний, та орієнтован уздовж силових ліній керуючого зовнішнього поля, тобто ефектами зміни орієнтації й обертання молекули зневажається. При цьому слід зазначити, що модель системи залишається тривимірною.

Крім того, в системі існують особливі частки, що виконують роль інертного газу. Ці частки взаємодіють між собою та першим ви-

дом часток за принципом абсолютно пружного зіткнення, та з'являються в обмеженому просторі системи за рахунок вприску у точці кордону, що вказаній користувачем. Цей потік, маючи низьку температуру, та виконує роль стоку енергії для часток першого виду.

Всі частки мають однаковий розподіл Больцмана.

На початку моделювання (рис. 1) присутні лише частки першого виду, що здійснюють хатичні коливання та мають енергію, яка перевищує енергію дисоціації, і тому не взаємодіють між собою (поводять себе як інертні частки).

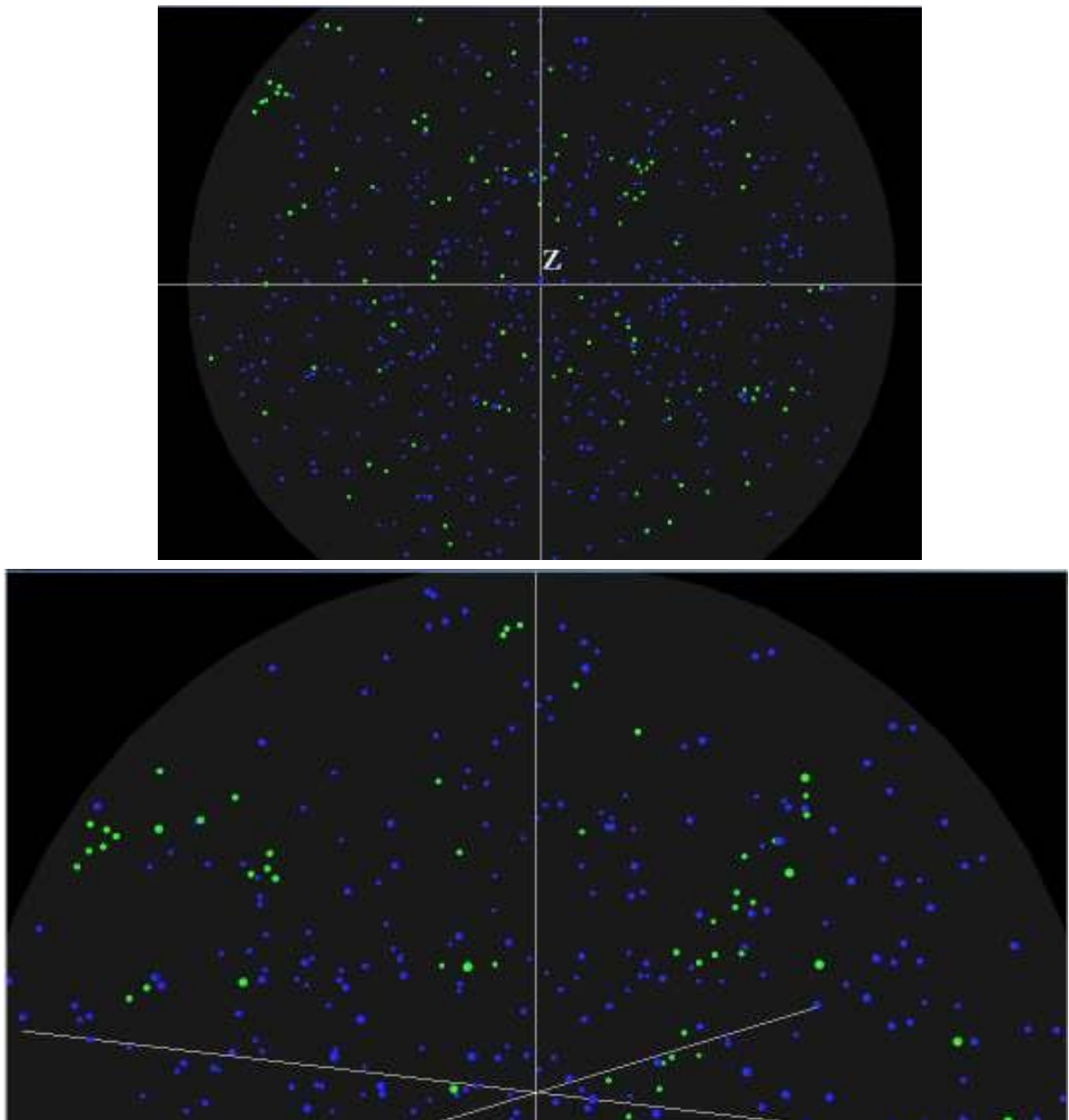


Рисунок 4 – Створення кластерів
(спостереження під різними кутами та масштабами)

Висновки

Дослідження руху окремих часток, що входять до складу утворених кластерів, мають характер полігармонійних коливань на відміну від вільних, які здійснюють хаотичний рух. Таким чином, формування кластерних структур пов'язано з виникненням нового фазового стану системи.

Параметр впливу $u(t)$ однаковий на кожну окрему частку (5) та обумовлен тиском інертного газу та швидкістю його потрапляння в об'єм системи.

ЛІТЕРАТУРА

1. Суздалев И.П.. Нанотехнология: физико-химия нанокластеров наноструктур и наноматериалов. – М.: КоаКнига, 2006, – 592с.
2. Деревянко А.И. Determine the conditions of dissociation in pvd tecnoledgy// Produkcja i zarzadzanie w przemysle. Seria Metalurgia, nr 56. Poltecnika czestochowska, 2014. – p.359-364.
3. Самарский А.А., Калиткин Н.Н. «Математическое моделирование» - М.: Наука, 1989, - 19с.
4. Zaslavsky G. M. The physics of chaos in hamiltonial systems. – London.: Imperial College Press, 2007, - 329p.
5. Lie G., Yuan J-M. Bistable and chaotic behavior in a damped driven Morse oscillator – J.Chem.Phys., vol.84, No.10, 1986, 5486-5493.