УДК 620:519.876.5:004

Я.С. ПАРШУТІН, НТУ «ХПІ», Харків, Україна
І.І. МАРЧЕНКО, асист., НТУ «ХПІ», Харків, Україна
М.М. МАЛЬКО, канд. техн. наук, доц., НТУ «ХПІ», Харків, Україна

Моделювання процесів утворення тонких металевих шарів при вакуумному осадженні

Важливим завданням наукових досліджень є створення нових матеріалів із заздалегідь заданими властивостями. Одним із способів вплинути на фізичні характеристики є нанесення на поверхню базового матеріалу шарів товщиною від частки нанометра до декількох мікрометрів. Такі поверхневі шарі володіють рядом особливостей атомно-кристалічної структури, електричних і інших фізичних властивостей. Через свої унікальні властивості вони набули величезної популярності в різноманітних галузях науки й техніки, бо завдяки ним стало можливо створювати нові технології, які використовують нові надміцні захисні покриття, що створені з тонких плівок, використовувати ці плівки в побудові нових надпровідників тощо.

У даній роботі було розроблене програмне забезпечення, що дозволяє моделювати процес утворення тонких металевих шарів при вакуумному осадженні за допомогою методу молекулярної динаміки. Програмний засіб містить бібліотеку класів, що дозволяють моделювати динаміку взаємодії атомів у розрахунковій комірці. Також був розроблений інтерфейс користувача, який дозволяє проводити чисельні експерименти для вивчення процесів утворення металевих тонких плівок зі значною кількістю параметрів за допомогою WinForms. Графічний інтерфейс також дозволяє візуалізувати отримані результати моделювання тонкої плівки в тривимірному просторі за допомогою OpenGL.

Використовуючи розроблене програмне забезпечення було зроблено серію тестових комп’ютерних експериментів. У якості базових матеріалів були обрані мідь та вольфрам. Було перевірено коректність граничних умов, коректність парної взаємодії між атомами і т. п. Також для обраних матеріалів було розраховано енергію активації дифузії адатома з одного положення в інше. Результати розрахунків співпадають з даними експериментів. Таким чином, розроблений програмний комплекс можливо використовувати для дослідження більш складних процесів, що відбуваються при формуванні тонких шарів.

За допомогою розробленого програмного комплексу було зроблено серію розрахунків для більш складних систем. Так було встановлено, що еволюція рельєфу поверхні тонких шарів призводить до росту шоркісті поверхні.

Таким чином, розроблене програмне забезпечення може бути використане для всебічного дослідження процесів утворення тонких металевих шарів при вакуумному осадженні.