

УДК 621.396.96

О. І. Дерев'янку, канд. техн. наук, доц.;

О. Є. Квятковський, асп.

## УПРАВЛІННЯ ПРОЦЕСОМ ФОРМУВАННЯ МІКРОСТРУКТУРИ ФУНКЦІОНАЛЬНИХ ПОКРИТТІВ

У рамках молекулярної динаміки розглянуто задачу управління рухом в області перетину Пуанкаре для багатьох взаємодіючих частинок парофазного середовища. Запропонований підхід дає можливість розглянути однопараметричне управління для переходу від хаотичного режиму до полігармонічного.

### Вступ

Нанорозмірні плівкові покриття викликають інтерес завдяки своїм фізичним властивостям, які істотно відрізняються від властивостей твердих тіл з кристалічною або аморфною структурою. Однією з технологій отримання таких покриттів є PVD-технологія (Physical Vapor Deposition), за якою покриття формується осадженням конденсату з пари матеріалу.

Технологія PVD реалізується в три етапи: дисоціація молекул початкової речовини, формування елементів структури покриття у парофазному середовищі, осадження сформованих елементів функціонального покриття та організація їх адгезії з поверхнею покриття [1].

Перехід речовини в пароподібний стан зумовлений дисоціацією молекул речовини. При цьому в молекулі, як нелінійній коливальній системі, реалізується сценарій переходу до хаотичних коливань. Поява хаотичних коливань атомів пов'язана із виникненням хаотичного резонансу, зумовленого зміною спектра.

### Результати досліджень

У дослідженнях авторів для отримання пари нафталіну ( $C_{10}H_8$ ) і дисоціації її молекул використовувалися створені в (НМетАУ) низьковакуумні газорозрядні електронні гармати (НГЕГ), що працюють в діапазоні тисків 1...100 Па. Схема експериментальної установки для формування PVD покриттів показана на рис. 1.

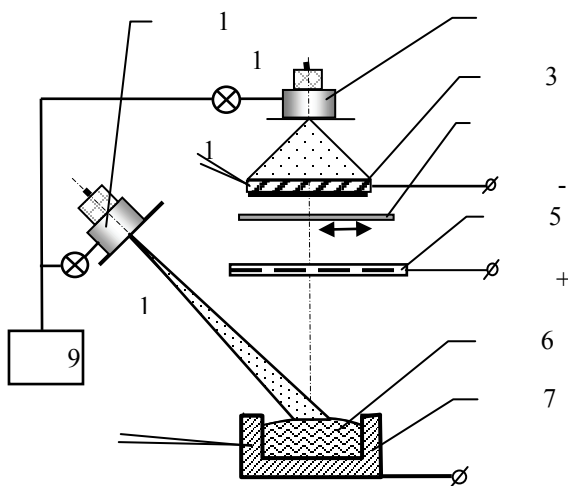


Рис. 1. Схема установки формування покриттів із застосуванням НГЕГ:

- 1 — НГЕГ випарника; 2 — НГЕГ для нагріву підкладки; 3 — підкладка з покриттям;
- 4 — заслінка; 5 — анод іонізатора; 6 — матеріал, що випаровується; 7 — тигель;
- 8, 11 — термопари; 9 — система піддування газу; 10, 12 — вакуумні натікачі

Метод класичної молекулярної динаміки розглядає фізичні тіла як сукупність взаємодіючих частинок, що рухаються у відповідності до законів класичної механіки [2]. Сукупність  $N$  взаємодіючих частинок (атомів, молекул) знаходяться також під дією зовнішнього силового поля. Рівняння руху таких частинок мають вигляд [3]

$$m\ddot{\bar{r}}_k = \sum_{n=1}^N \Phi(r_{kn})\bar{r}_{kn} + \sum_{n=1}^N \Psi(r_{kn}, v_{kn})\bar{r}_{kn} + \bar{\varphi}(\bar{r}_k) + \bar{\psi}(\bar{r}_k, \bar{v}_k); \quad (1)$$

$$\bar{r}_{km} = \bar{r}_k - \bar{r}_n; \quad \bar{v}_{km} = \bar{v}_k - \bar{v}_n; \quad r_{kn} = |r_{kn}|; \quad v_{kn} = |v_{kn}|,$$

де  $\bar{r}_k$  і  $\bar{v}_k$  — вектори положення і швидкості  $k$ -ї частинки;  $m$  — маса частинки;  $\Phi(r)$  і  $\Psi(r, v)$  — консервативна і неконсервативна взаємодії між частинками;  $\varphi(r)$  і  $\psi(r, v)$  — зовнішнє консервативне і неконсервативне силові поля.

Як модель взаємодії молекул парової фази вуглецю, що осаджуються, прийнятий потенціал Морзе

$$\Pi(r) = D\left(e^{-2\alpha(r-a)} - 2e^{-\alpha(r-a)}\right), \quad (2)$$

де  $D$  — енергія зв'язку;  $a$  — рівноважна відстань між молекулами;  $\alpha$  — параметр, який характеризує ширину потенційної ями.

Існує багато алгоритмів числового інтегрування рівнянь руху [3]. Специфіка методу молекулярної динаміки полягає в необхідності інтегрування великої кількості рівнянь, що висуває жорсткі вимоги до продуктивності комп'ютера. При цьому основні витрати розрахункового часу припадають на обчислення нелінійної сили, що діє на частинку. Ці обставини знижують ефективність числових методів, які на кожному кроці інтегрування багаторазового обчислення правої частини рівнянь руху (наприклад, методи Рунге-Кутта).

Одним з найефективніших методів обчислень є алгоритм Верле [4], що дозволяє обчислити наступне місце розташування точки з поточного та минулого:

$$\bar{r}(t + \tau) = 2\bar{r}(t) - \bar{r}(t - \tau) + \bar{\omega}(t)\tau^2, \quad (3)$$

де  $\tau$  — крок інтегрування;  $\bar{\omega}(t)$  — прискорення частинки, отримане підстановкою розрахункових значень у праву частину рівнянь (1).

Ця схема не вимагає обчислення швидкостей і зручна, якщо в рівняннях (1) відсутні неконсервативні сили.

Використання відображення Пуанкаре дозволяє суттєво зменшити кількість обчислень і, разом з тим, зберігає можливість аналізувати багато принципових питань, наприклад, встановлення в системі регулярного чи хаотичного режиму [5].

Рух частинки описується рівнянням

$$\ddot{x} = -\gamma\dot{x} + e^{-x}(1 - e^{-x}) + \mu \cos(\omega t), \quad (4)$$

де  $\mu \cos(\omega t)$  — зовнішній гармонічний вплив.

За певних значень параметрів в цій системі виникають хаотичні коливання і, як результат, — хаотичний аттрактор. Якщо побудувати переріз Пуанкаре для аттрактора, то співвідношення між координатами двох послідовних точок на перетині визначатимуться формулою логістичного відображення [6]

$$x(n+1) = ax(n)(1-x(n)), \quad (5)$$

де  $a \in [0, 4]$  та  $x(n) \in [0, 1]$ .

Таким чином, динаміка руху частинок в процесі осадження описується логістичним відображенням. Вираз (5) є рекурсивним відображенням, що визначає поточне значення елемента часового ряду. Нерухомі точки відображення (5) зі зміною параметра утворюють послідовність біфуркацій подвоєння періоду, що формують сценарій переходу в хаотичний режим.

Розглянемо оптимальне рівняння:

$$x(n+1) = ax(n)(1-x(n)) + U(n). \quad (6)$$

Прийнявши за критерій управління

$$J = (x(n+1) - x(n))^2 + \omega U^2(n), \tag{7}$$

з умови оптимальності отримуємо, що оптимальний керувальний вплив, що стабілізує хаотичний режим одновимірного відображення, має вигляд

$$U(x) = \frac{x(n) - ax(n)(1 - x(n))}{1 + \omega}. \tag{8}$$

Діапазон значень параметра стабілізації  $\omega$  визначає стійку область біфуркаційної діаграми хаотичних коливань, в яку переходить система під дією керувального впливу.

Отриманий в результаті числових експериментів спектр, що характеризує перехідний процес, має вигляд сценарію подвоєння періоду під час переходу до хаосу (рис. 2).

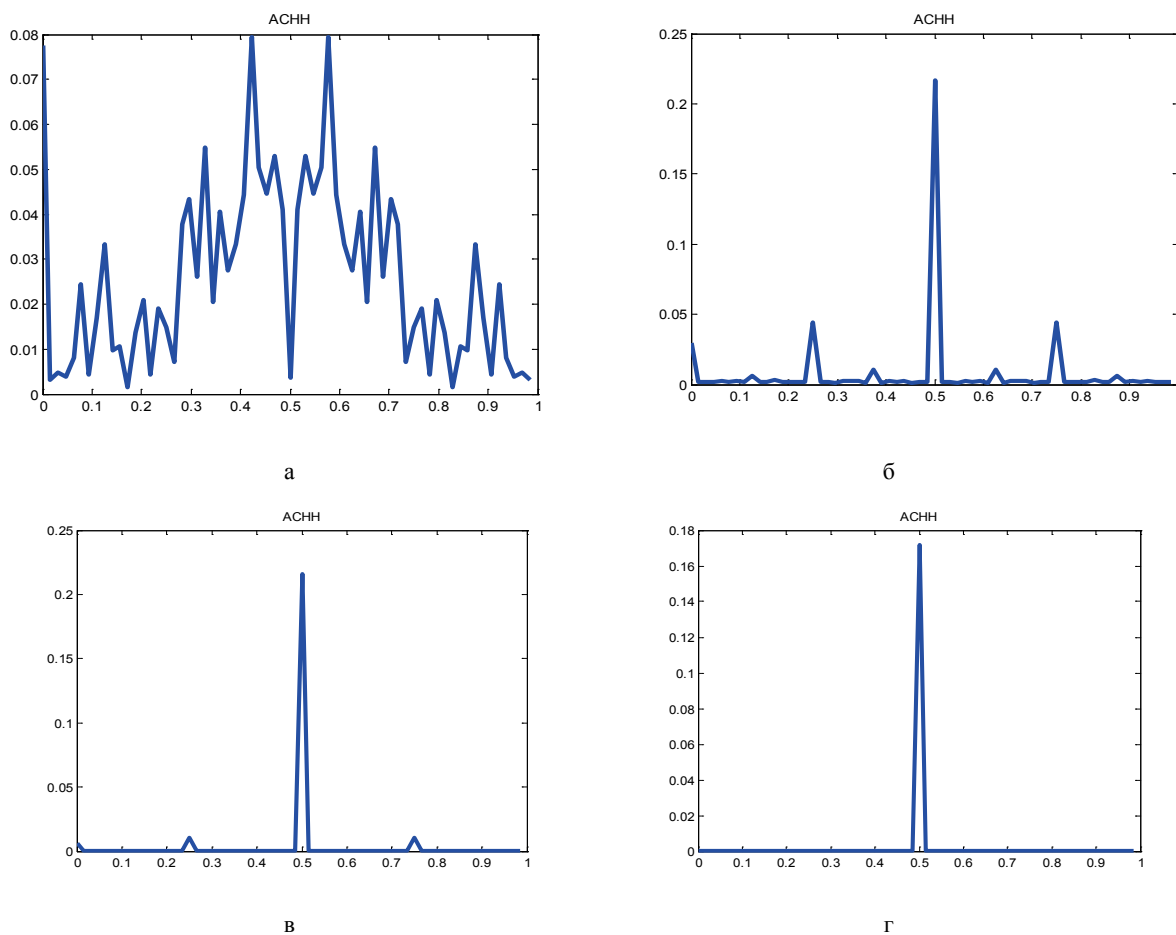


Рис. 2. Спектр Фур'є для: а —  $\omega = 12$ ; б —  $\omega = 6$ ; в —  $4 < \omega < 5$ ; г —  $2 < \omega < 4$

Вибір значення керувального параметра  $\omega$  дозволяє встановити термодинамічний режим газового середовища для формування мікроструктури функціональних покриттів із заданими топологічними властивостями. У цьому випадку спостерігаються варіації геометрії мікроструктури від далекого порядку до кластерної, що має фрактальні властивості.

У технології PVD керувальний вплив формується набором значень, що характеризують стан інертного газу, який інjektується в активне газове середовище. Забезпечення стабільності такого набору параметрів в процесі технологічного циклу є складним технічним завданням. Запропонований оптимальний алгоритм управління дозволяє підтримувати стабільність процесу формування мікроструктури в умовах хаотичних коливань активної фази газового середовища.

## Висновки

У рамках молекулярної динаміки в роботі розглянуто задачу управління рухом багатьох взаємодіючих частинок в області перетину Пуанкаре. Запропонований підхід дає можливість розглянути однопараметричне управління для переходу від хаотичного режиму до полігармонічного. Вибір значення керувального параметра дозволяє підтримувати стабільність процесу формування елементів структури покриття, що утворюється за технологією PVD.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Суздаев И. П. Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов / И. П. Суздаев. — М. : Наука, 2006. — 592 с.
2. Валуев А. А. Метод молекулярной динамики: теория и приложения / А. А. Валуев, Г. Э. Норман, В. Ю. Подлипчук // Математическое моделирование : Физико-химические свойства вещества. — М. : Наука, 1989. — С. 5—40.
3. Mattox D. M. Physical vapor deposition / D. M. Mattox. — New Mexico, 1998. — P. 907.
4. Frankel D. Understanding molecular simulation / D. Frankel, B. Smit. — San Diego : Academic press, 2002. — P. 628.
5. Кузнецов С. П. Динамический хаос : курс лекций / С. П. Кузнецов. — М. : Издательство Физико-математической литературы, 2001. — 296 с.
6. Kapral R. Chaos and Fluctuations in Nonlinear. Dissipative Systems / R. Kapral, M. Schell, S. Fraser // J. Phys. Chem. — Vol. 86. — 1982. — P. 2205—2217.

Рекомендована кафедрою електроніки

Стаття надійшла до редакції 4.03.11  
Рекомендована до друку 23.03.11

*Деревянко Олександр Іванович* — доцент, *Квятковський Олександр Євгенович* — аспірант.  
Кафедра інформаційних технологій і систем, Національна металургійна академія України, Дніпропетровськ