

# РАСЧЕТ ПЛОТНОСТЕЙ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ АТОМОВ ПО НАПЫЛЯЕМЫМ ПЛОСКОСТЯМ

С.А. Желтов<sup>1</sup>, Н.Н. Чупятов<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Тверской государственной университет, г. Тверь

<sup>2</sup> ПАО "Электромеханика", г. Ржев

Процесс нанесения покрытий на поверхности является одним из важнейших при нанесении защитных слоев. Особенно актуальным является метод молекулярно-лучевой эпитаксии, который применяют, например, для нанесения покрытий металлов и полимеров на металлические поверхности. Однако при производстве установок необходимо провести много предварительных экспериментов для получения максимально однородных напыленных поверхностей: размеры кювет, уровень расплава в кювете, расстояния до напыляемой поверхности и расположения системы кювет.

Упрощением проведения этих реальных экспериментов является метод Монте-Карло. Моделируя компьютерные эксперименты с предполагаемыми параметрами установки, можно быстро получить необходимый результат с высокой точностью. В каждом компьютерном эксперименте разыгрывался вылет  $N = 10^8$  частиц (атомов, молекул), что обеспечивало получение всех результатов с высокой точностью.

Было установлено, что результаты расчетов не зависят от масс частиц. Анализ полученных данных позволил установить, что частицы, испарявшиеся с поверхности расплава по равновероятному закону и по закону косинуса, имеют близкие распределения, отличающиеся не более чем на 10%. Увеличение расстояния от верхнего края пластины до напыляемой плоскости с расстояния  $G = 0,01$  м до расстояния  $G = 0,05$  м приводит к тому, что плотность распределения для первого случая, имеющая значительный максимум около середины кюветы, становится практически равномерным распределением во втором случае. Применение метода Монте-Карло для процессов напыления в вакууме эффективно использовать не только для плоских поверхностей, но и на поверхности произвольных форм, например, цилиндрических.

*Ключевые слова:* молекулярно-лучевая эпитаксия, метод Монте-Карло, компьютерное моделирование.

## ВВЕДЕНИЕ

Использование молекулярно-лучевой эпитаксии в установках по нанесению защитных поверхностных слоев на поверхности металлов или полимеров является эффективным способом нанесения покрытий. Для определенных процессов нанесения покрытий этот способ является единственно возможным. В Советском Союзе инициатором внедрения данного способа нанесения покрытий был Ройх [1,2] и позднее [3,4]. Для создания соответствующей установки нужно провести предварительные эксперименты: определить размеры испаряемых элементов, расстояние между ними и расстояние до напыляемой поверхности. Необходимо отметить, что все установки находились в вакуумной камере. Несмотря на то, что процесс напыления происходит в вакууме в свободномолекулярном режиме, испарившиеся атомы и молекулы могли сталкиваться друг с другом до попадания на напыляемую поверхность. Это приводит к рассеиванию потока.

Анализ всех факторов, влияющих на процесс молекулярно-лучевой эпитаксии, позволил прийти к заключению, что этот процесс можно смоделировать с помощью метода Монте-Карло [5,6]. Движение атомов или молекул от поверхности расплава до напыляемой поверхности в свободномолекулярном режиме в условиях глубокого вакуума происходит по

прямой линии. Траектории частиц не зависят от их масс. Атомы и молекулы можно представить в виде точечных частиц.

## ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

Кювету можно представить как щелевую систему, у которой длина много больше ширины, рис. 1.



Рис. 1. Схема испарительного элемента и напыляемой плоскости

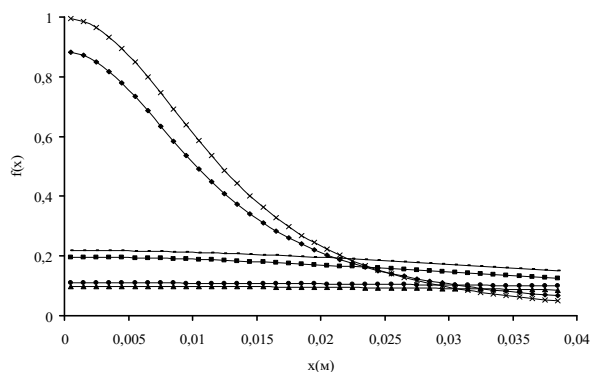
На поверхности расплава ( $z = 0$ ) случайным образом разыгрывалась координата точки испарения частицы. С помощью датчика нормального

распределения разыгрывались компоненты скорости частицы ( $v_x; v_z$ ). Определялась возможность вылета частицы из кюветы без столкновения со стенками. Некоторая часть частиц могла попасть на стенки системы. После столкновения со стенкой системы частица могла попасть в расплав, на другую стенку системы или вылететь из системы. В каждом компьютерном эксперименте разыгрывалось  $N = 10^8$  частиц, что обеспечило высокую точность полученных результатов.

Вылетевшие частицы попадали на напыляемую поверхность, расположенную параллельно плоскости Оху и отстоящую от верхнего края кюветы на расстоянии  $G$ . Вычисления проводились для значений  $G = 0,01$  м;  $0,05$  м и  $0,1$  м.

Расчеты проводились для двух случаев значения параметра  $r = U / kT$ , где  $k$  – постоянная Больцмана,  $U$  – величина потенциального барьера на поверхности расплава,  $T$  – температура расплава. В первом случае значение  $r = 0$ , что возможно при высокой температуре расплава. Частицы с поверхности расплава вылетают равномерно. Во втором случае значение  $r \rightarrow \infty$ , что возможно при низкой температуре расплава. В данном случае частицы с поверхности расплава вылетали по закону косинуса [7]. Проведено сравнение результатов этих вариантов вылета частиц.

На рис. 2 приведены результаты расчетов по напылению частиц из кюветы с малым расстоянием от расплава до верхнего края кюветы  $H = 0,0005$  м.



Равномерный закон:  $\blacklozenge$  -  $G = 0,01$  м,  $\blacksquare$  -  $G = 0,05$  м,  $\blacktriangle$  -  $G = 0,1$  м.  
Закон косинуса:  $\times$  -  $G = 0,01$  м,  $--$  -  $G = 0,05$  м,  $\bullet$  -  $G = 0,1$  м.

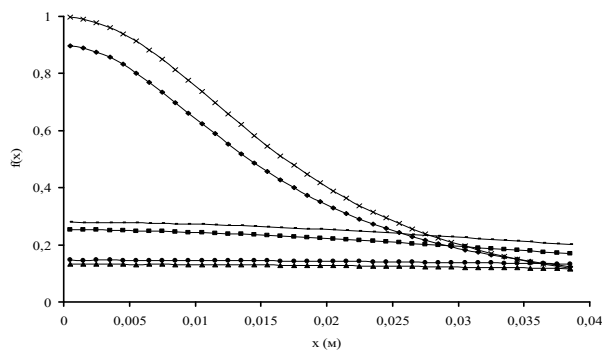
**Рис. 2. Плотности распределений атомов по напыляемым плоскостям.  $H = 0,0005$  м**

Для маленького расстояния  $G = 0,01$  м распределения имеют выраженный максимум в рассматриваемом диапазоне расстояний от оси системы  $x$  (0;0,4) м. Для больших значений  $G$  получены практически линейные распределения, незначительно уменьшающиеся в рассмотренном диапазоне  $x$ . Специально проведенные вычисления для больших расстояний  $x$  показали, что вид этих распределений по оси  $x$  такой же, как и распределение для расстояния  $G = 0,01$  м, т.е. около

центра системы имеется максимум и вид распределений такой же, как и для  $G = 0,01$  м. Распределения для вылета частиц по равномерному закону и по закону косинуса имеют одинаковый вид и отличаются друг от друга не более чем на 10%. Кривые для распределений по закону косинуса расположены выше, чем кривые распределений по равномерному закону. Это объясняется тем, что при розыгрыше компонент скоростей  $v_z$  средние значения для закона косинуса в раз  $\sqrt{2}$  больше, чем средние значения для равномерного закона.

Анализ плотностей распределений показал, что если напыляемая деталь имеет размеры меньше метра, то более 30% испарившегося вещества пролетают мимо нее для  $G$ , больших  $0,05$  м. Использование компьютерного эксперимента позволит найти оптимальное соотношение геометрии системы и потери испаряемого вещества.

На рис. 3 приведены результаты расчетов для кюветы с  $H = 0,005$  м. Если в предыдущих расчетах расстояние от расплава до верхнего края кюветы  $H = 0,0005$  м, в данных расчетах оно в 10 раз больше. Плотности распределений имеют одинаковый вид, но во втором случае они расположены несколько выше. Это связано с тем, что с увеличением  $H$  начинают играть роль стенки системы. Увеличивается вероятность попадания на стенки системы частиц, вылетевших с поверхности расплава.



Равномерный закон:  $\blacklozenge$  -  $G = 0,01$  м,  $\blacksquare$  -  $G = 0,05$  м,  $\blacktriangle$  -  $G = 0,1$  м.  
Закон косинуса:  $\times$  -  $G = 0,01$  м,  $--$  -  $G = 0,05$  м,  $\bullet$  -  $G = 0,1$  м.

**Рис. 3. Плотности распределений атомов по напыляемым плоскостям.  $H = 0,005$  м**

Результаты исследования по влиянию расстояния от расплава до верхнего края кюветы  $H$  на плотности распределений для частиц, вылетающих из расплава по закону косинуса, представлены на рис. 4 и 5.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

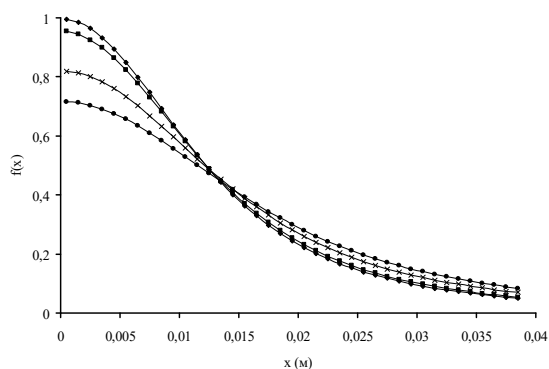
Проведенные компьютерные эксперименты позволили найти закономерности влияния параметров  $H$  и  $G$  на плотности распределений частиц по напыляемым поверхностям. Установлено, что вылеты частиц с поверхности расплава по равновероятному закону и по закону косинуса имеют близкие распределения, отличающиеся меньше чем на 10%. Данное исследование может быть применено к системе кювет. Использование данного подхода может быть применено к моделированию напыления частиц на цилиндрические поверхности [8,9].

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Ройх И.Л., Колтунова Л.Н. Защитные вакуумные покрытия на стали. - М.: Машиностроение, 1971, -280 с.
2. Ройх И.Л., Колтунова Л.Н., Федосов С.Н. Нанесение защитных покрытий в вакууме. - М.: Машиностроение, 1976, -367 с.
3. Липин Ю.В., Рогачев А.В., Харитонов В.В. Вакуумная металлизация полимерных материалов. - Л.: Химия, 1987, -149 с.
4. Красовский А.М., Толстопятов Е.М. Получение тонких пленок распылением полимеров в вакууме. - Минск: Наука и техника, 1989, -181 с.
5. Берд Г. Молекулярная газовая динамика. - М.: Мир, 1981, - 319 с.
6. Nanbu K., Watanabe Y. Thickness distribution of films fabricated by molecular beam epitaxial technique // Vacuum. - 1986. - v. 36. - №6. - p. 349-354.
7. Pletnev L.V., Gvozdev M.A., Samartsau K.S. Computer Modeling of Particles Transport Stationary Process in Open Cylindrical Nanosystems by Monte Carlo method // Monte Carlo Methods and Applications. - 2009. - v. 6. - №2. - p.191-203.
8. Ерохин М.Н., Плетнев Л.В., Чупятов Н.Н. Управление процессом формирования карбидохромовых CVD-покрытий на внешней поверхности цилиндрической подложки // Труды ГОСНИТИ, том 124, № 3, 2016, сс. 26-34. ISSN: 0131-9299. Импакт-фактор РИНЦ 2014: 0.152.
9. Ерохин М.Н., Плетнев Л.В., Чупятов Н.Н. Разработка методики управления процессом формирования CVD-покрытий на внешней поверхности цилиндрической подложки//Вестник «Московский государственный агроинженерный университет им. В.П. Горячкина», № 5(75), 2016, сс.25-30. Импакт-фактор РИНЦ 2014: 0.115.

*Желтов Сергей Александрович – старший преподаватель кафедры компьютерной безопасности и математических методов управления, Тверской государственный университет ФГБОУ ВПО ТвГУ, тел. 8(920)1624827, e-mail: Zheltov.SA@tversu.ru.*

*Чупятов Николай Николаевич – д.т.н., заместитель генерального директора по производству, ПАО "Электромеханика", тел. (48232) 2-06-06, e-mail: nikolajch@mail.ru*



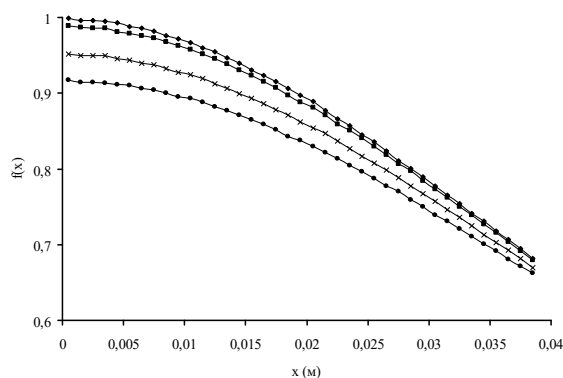
$G = 0,01$  м. ♦-  $H = 0,0005$  м, ■-  $H = 0,001$  м, × -  $H = 0,003$  м, ●-  $H = 0,005$  м.

**Рис. 4.** Плотности распределений атомов по напыляемым плоскостям по закону косинуса

Для расстояния до напыляемой поверхности  $G = 0,01$  м кривые плотностей распределений имеют одинаковый вид. С увеличением расстояния  $H$  плотности распределения около оси кюветы существенно уменьшаются, но с увеличением расстояния от оси симметрии кюветы, начиная с  $x \approx 0,01$  м, плотности распределений практически совпадают.

Для расстояния от кюветы до напыляемой поверхности  $G = 0,05$  м получены аналогичные распределения. Эти распределения похожи на распределения для  $G = 0,01$  м области  $x < 0,01$  м. Детальное рассмотрение плотностей распределений на большие расстояния показало, что они имеют распределения, похожие на распределения, изображенные на рис. 4. Для частиц, вылетающих из расплава по равновероятному закону, получены аналогичные закономерности.

Установлено, что вероятности вылета частиц из испарительного элемента без столкновения со стенками систем, даже для  $G = 0,01$  м, не меньше 0,9986, т.е. примерно 2 частицы из 1000 сталкиваются со стенками.



$G = 0,05$  м. ♦-  $H = 0,0005$  м, ■-  $H = 0,001$  м, × -  $H = 0,003$  м, ●-  $H = 0,005$  м.

**Рис. 5.** Плотности распределений атомов по напыляемым плоскостям. По закону косинуса

## CALCULATION OF THE DISTRIBUTION DENSITY OF ATOMS

S.A. Zheltov<sup>1</sup>, N.N. Chupyatov<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Tver State University, Tver

<sup>2</sup> PJSC "Electromechanics", Rzhev

Abstract – The coating process on surfaces is one of the most important in the application of protective layers. Particularly relevant is the method of molecular beam epitaxy, which is used, for example, for the deposition of coatings of metals and polymers on metal surfaces. However, in the manufacture of installations, it is necessary to carry out many preliminary experiments to obtain the most homogeneous sprayed surfaces: the dimensions of the cuvettes, the level of the melt in the cuvette, the distance to the sprayed surface and the location of the cuvette system.

A simplification of these real-world experiments is the Monte Carlo method. By simulating computer experiments with the expected parameters of the installation, it is possible to quickly obtain the required result with high accuracy. In each computer experiment, the emission of  $N = 108$  particles (atoms, molecules) was played, which ensured obtaining all results with high accuracy.

It was found that the calculation results do not depend on the particle masses. An analysis of the data obtained made it possible to establish that the particles evaporated from the surface of the melt according to the equiprobable law and according to the cosine law have similar distributions differing by no more than 10%. An increase in the distance from the upper edge of the plate to the sprayed plane from a distance of  $G = 0.01$  m to a distance of  $G = 0.05$  m leads to the fact that the distribution density for the first case, which has a significant maximum near the middle of the cell, becomes an almost uniform distribution in the second case. ... The use of the Monte Carlo method for vacuum deposition processes can be effectively used not only for flat surfaces, but also on surfaces of arbitrary shapes, for example, cylindrical ones..

Index terms: molecular beam epitaxy, Monte Carlo method, computer simulation.

### REFERENCES

1. Roikh I.L., Koltunova L.N. Protective vacuum coatings on steel. - M.: Mechanical Engineering, 1971, -280 p.
2. Roikh I.L., Koltunova L.N., Fedosov S.N. Applying protective coatings in a vacuum. - M.: Mechanical Engineering, 1976, -367 p.
3. Lipin Yu.V., Rogachev A.V., Kharitonov V.V. Vacuum metallization of polymeric materials. - L.: Chemistry, 1987, -149 p.
4. Krasovsky A.M., Tolstopyatov E.M. Obtaining thin films by spraying polymers in a vacuum. - Minsk: Science and technology, 1989, -181 p.
5. Byrd G. Molecular Gas Dynamics. - M.: Mir, 1981, -319 p.
6. Nanbu K., Watanabe Y. Thickness distribution of films fabricated by molecular beam epitaxial technique // Vacuum. - 1986. - v. 36. - №6. - p. 349-354.
7. Pletnev L.V., Gvozdev M.A., Samartsau K.S. Computer Modeling of Particles Transport Stationary Process in Open Cylindrical Nanosystems by Monte Carlo method // Monte Carlo Methods and Applications. - 2009. - v. 6. - №2. - p.191-203.
8. Erokhin M.N., Pletnev L.V., Chupyatov N.N. Control of the process of formation of chromium carbide CVD coatings on the outer surface of a cylindrical substrate // Proceedings of GOSNI-TI, vol. 124, no. 3, 2016, pp. 26-34. ISSN: 0131-9299. Impact factor RSCI 2014: 0.152.
9. Erokhin M.N., Pletnev L.V., Chupyatov N.N. Development of a methodology for controlling the process of forming CVD coatings on the outer surface of a cylindrical substrate. Vestnik "Moskovskii State Agroengineering University. V.P. Goryachkina", No. 5 (75), 2016, pp. 25-30. Impact factor RSCI 2014: 0.115.

Zheltov Sergey Aleksandrovich – Senior Lecturer, Department of Computer Security and Mathematical Methods of Control, Tver State University, Tver State University, tel. 8 (920) 1624827, e-mail: Zheltov.SA@tversu.ru.

Chupyatov Nikolay Nikolaevich - Doctor of Technical Sciences, Deputy General Director for Production, PJSC "Electromechanics", tel. (48232) 2-06-06, e-mail: nikolaj-ch@mail.ru