



**KAUNO TECHNOLOGIJOS UNIVERSITETAS
MATEMATIKOS IR GAMTOS MOKSLŲ FAKULTETAS**

Karolis Petruškevičius

**AUGANČIOS ANT KIETOJO KŪNO PAVIRŠIAUS DANGOS
FAZINĖS STRUKTŪROS MODELIAVIMAS**

Baigiamasis magistro projektas

Vadovas
Prof. habil. dr. Arvidas Galdikas

KAUNAS, 2016

KAUNO TECHNOLOGIJOS UNIVERSITETAS
MATEMATIKOS IR GAMTOS MOKSLŲ FAKULTETAS

AUGANČIOS ANT KIETOJO KŪNO PAVIRŠIAUS DANGOS
FAZINĖS STRUKTŪROS MODELIAVIMAS

Baigiamasis magistro projektas
Taikomoji fizika (kodas 621F30005)

Vadovas
Prof. habil. dr. Arvidas Galdikas

Recenzentas
Doc. dr. Vytautas Stankus

Projektą atliko
Karolis Petruškevičius

KAUNAS, 2016



KAUNO TECHNOLOGIJOS UNIVERSITETAS

Matematikos ir gamtos mokslų
(Fakultetas)

Karolis Petruškevičius
(Studento vardas, pavardė)

Taikomoji fizika, 621F30005
(Studijų programos pavadinimas, kodas)

„Augančios ant kietojo kūno paviršiaus dangos fazinės struktūros modeliavimas“

AKADEMINIO SAŽININGUMO DEKLARACIJA

20 ____ m. _____ d.
Kaunas

Patvirtinu, kad mano, **Karolio Petruškevičiaus**, baigiamasis projektas tema „Augančios ant kietojo kūno paviršiaus dangos fazinės struktūros modeliavimas“ yra parašytas visiškai savarankiškai ir visi pateikti duomenys ar tyrimų rezultatai yra teisingi ir gauti sąžiningai. Šiame darbe nei viena dalis nėra plagijuota nuo jokių spausdintinių ar internetinių šaltinių, visos kitų šaltinių tiesioginės ir netiesioginės citatos nurodytos literatūros nuorodose. Įstatymų nenumatytų piniginių sumų už šį darbą niekam nesu mokėjęs.

Aš suprantu, kad išaiškėjus nesąžiningumo faktui, man bus taikomos nuobaudos, remiantis Kauno technologijos universitete galiojančia tvarka.

(vardą ir pavardę įrašyti ranka)

(parašas)

Petruškevičius Karolis. Augančios ant kietojo kūno paviršiaus dangos fazinės struktūros modeliavimas. *Magistro* baigiamasis projektas / vadovas prof. habil. dr. Arvidas Galdikas; Kauno technologijos universitetas, Matematikos ir gamtos mokslų fakultetas.

Mokslo kryptis ir sritis: Fiziniai mokslai, Fizika 02P.

Reikšminiai žodžiai: *plona danga, nusodinimas, fazinė struktūra, modeliavimas, Monte-Karlo*.
Kaunas, 2016. 56 p.

SANTRAUKA

Plonų dangų formavimas – intensyviai vystomas, įvairiais metodais realizuojamas procesas. Norint užauginti kokybiškas struktūras yra būtina tiksli atitinkamų parametrų kontrolė, tai – vakuuminės kameros slėgis, temperatūra, nusodinamųjų dalelių srauto intensyvumas, padėklo posvyrio kampas srauto atžvilgiu ir kt. Sukurta daug teorinių modelių aprašančių šį procesą, tačiau jie nėra pilnai realizuoti kompiuterinių programų pavidalu, todėl, daugeliu atvejų, neįmanoma patikrinti kokia dangos struktūra susidarys prieš ją suformuojant fiziškai.

Šiame darbe aprašomas naujas, kompiuterinis, ant kietojo kūno paviršiaus augančios dangos fazinės struktūros modeliavimo algoritmas, kuris buvo sudarytas remiantis Monte–Karlo metodu, neatsižvelgiant į kitų autorių programinius kodus. Aptariami pagrindiniai šio modelio parametrai, atliekama literatūros analizė palyginant kitų autorių darbus šia tema su gautais rezultatais, taip pat palyginamos ir sumodeliuotosios struktūros su realiomis dangomis. Detaliai aprašomas modelio veikimas. Atsižvelgiant į rezultatus, įvertinami procesai, vykstantys auginant realias dangas.

Atliekant rezultatų analizę, pastebėta, kad šis modelis pasižymi universalumu, jo pagalba suformuojamos struktūros panašios į sumodeliuotas kitų autorių, taip pat ir į realias dangas. Modelį planuojama atnaujinti dangos auginimą perkeliant iš stačiakampės į šešiakampę gardelę, tikslesnėms dalelių trajektorijoms nusakyti pritaikant kompiuterinėje grafikoje naudojamus spindulio sekimo algoritmus, taip pat įvedant: dalelių nudulkinimą nuo dangos paviršiaus, šilumos pernešimo, lydymosi reiškinius ir kt., tokiu būdu priartėjant prie tikslo – sukurti modelį, kuriuo remiantis būtų nustatoma kokia danga susidarys dar prieš pradėdant realų jos auginimą.

Petruškevičius Karolis. *Phase Structure Simulation of Coating, Grown on a Rigid Surface*. Master's thesis in applied physics / supervisor prof. habil. dr. Arvidas Galdikas. Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Kaunas University of Technology.

Research area and field: Physical sciences, Physics 02P

Key words: *thin film, deposition, phase structure, simulation, Monte-Carlo*

Kaunas, 2016. 56 p.

SUMMARY

Deposition of the thin film coatings is a process that is being intensively developed and realised by means of various methods. In order to form high quality structures, the control of specific parameters is a must. Such parameters include: pressure and temperature of the vacuum system, particle flux density, the angle at which the substrate is rotated etc.

A completely new, Monte-Carlo based, algorithm simulating the coating growth on a rigid surface, was described in this thesis. The main parameters of this model were described as well as literature analysis was performed, where the works of other authors, as well as theoretical information, regarding this topic, were discussed. Examples of simulated structures were provided. The working principles of this model were discussed in detail. According to the results, the processes that are present during the growth of real thin films, were analysed.

It was noticed, that the results obtained with this model, reflect the works of other authors, and the structures of some real coatings as well. It is planned to change the program code so that the deposition would happen in a hexagonal, instead of orthogonal lattice. In the near future, the following processes and additions are also planned to be implemented: particle sputtering, ray tracing algorithm for more accurate description of various trajectories, thermal conductivity, melting etc., thus bringing one step closer to the goal of evaluating what the coating will be like before the real deposition begins.

TURINYS

1. SANTRUMPOS	8
2. ĮŽANGA.....	10
3. LITERATŪROS APŽVALGA.....	11
3.1. Monte-Karlo metodas. Klasterių augimo modeliai.....	11
3.2. Edeno klasteriai	11
3.3. Difuzinės agregacijos, balistinio nusodinimo modelis.....	12
3.4. Teoriniai dangų augimo modeliai	13
3.4.1. Adsorbicija, desorbicija, implantacija	14
3.5. Kompiuteriniai dangų sudarymo modeliai.....	16
3.6. Realių dangų pavyzdžiai	17
3.7. Temos ir uždavinių pagrindimas	20
4. MEDŽIAGOS IR TYRIMO METODAI	21
4.1. Dangos struktūros ir prisijungimo zonų matricos	21
4.2. Dalelių generavimas.....	23
4.3. Realiųjų procesų imitavimas	24
4.3.1. Adsorbicija	24
4.3.2. Migracija	25
4.3.3. Desorbicija nuo dangos ir nuo padėklo paviršiaus.....	25
4.3.4. Dalelių implantacija į dangą.....	27
4.4. Pagrindo, ant kurio auginama danga, formavimas.....	27
4.5. Paviršinių elementų pozicijų identifikavimas, desorbicijos zonų atvaizdavimas	28
4.6. Paviršiaus šiurkštumo koeficientų skaičiavimas	29
4.7. Dangos auginimo parametrai ir rezultatų pateikimas.....	30
5. TYRIMŲ REZULTATAI IR JŲ APTARIMAS.....	31
5.1. Parametrų įtaka dangos struktūrai	32

5.1.1. Dalelių skirstymas pagal energijas	32
5.1.2. Migracijos trukmė	33
5.1.3. Desorbcijos tikimybė ir padėklo struktūra	37
5.2. Dangų faziniai žemėlapiai	45
6. IŠVADOS.....	48
PADĖKA.....	49
7. LITERATŪROS SĄRAŠAS.....	50
PRIEDAI	52
1 priedas. Užaugintų dangų atvaizdų galerija	52

1. SANTRUMPOS

DLA – difuzijos apribota agregacija (angl. *Diffusion Limited Aggregation*);

PVD – fizinis nusodinimas iš garų fazės (angl. *physical vapor deposition*);

SEM – skenuojantis elektroninis mikroskopas;

MK – Monte–Karlo (angl. *Monte-Carlo*) metodas;

kMK – kinetinis Monte–Karlo metodas;

a – mažiausių energijų intervalo riba [eV];

b – energijų intervalo riba, nusakanti ar vyks migracija, ar prisijungimas [eV];

c – didžiausių energijų intervalo pradžios riba [eV];

d – atstumas tarp gretimų pirmojo dangos sluoksnio elementų [nm];

i – matricos eilutės numeris;

j – matricos stulpelio numeris;

A – dangos matrica;

B – prisijungimo zonų matrica;

AB – matrica naudojama desorbcijos procese;

K_{ad5l} – adsorbcijų, įvykusių dalelei patekus į zoną **B** = 0,5 arba **B** = 1, kiekio [vnt.] ir jų pozicijų matrica;

K_{adl} – adsorbcijų, įvykusių dalelei patekus į zoną **B** = 1, kiekio [vnt.] ir jų pozicijų matrica;

k_a – parametras, valdantis a ;

k_b – parametras, valdantis b ;

k_c – parametras, valdantis c ;

$k_{\Delta a}$ – parametro k_a pokytis;

$k_{\Delta b}$ – parametro k_b pokytis;

$k_{\Delta c}$ – parametro k_c pokytis;

K_{des} – desorbcijų kiekis [vnt.] atitinkamuose elementuose;

K_{imp} – dalelių, kurios buvo implantuotos, pozicijos, užregistruotos kai jos tapo dangos struktūros dalimi;

k_m – migracijos trukmę keičiantis parametras;

K_m – dalelių, prisijungusių po migracijos pozicijos;

K_{pm} – priverstinių migracijų kiekis atitinkamuose elementuose [vnt.];

\mathbf{K}_{pr1} – dalelių, prisijungusių praleidžiant migracijos, bet nevykstant implantacijos procesams, pozicijų matrica;

m – matricą sudarančių eilučių skaičius;

n – matricą sudarančių stulpelių skaičius;

N_{m1} – migracijos procesų, prasidėjusių zonose, kur $\mathbf{B} = 1$, kiekis [vnt.];

N_{m51} – migracijos procesų, prasidėjusių zonose, kur $\mathbf{B} = 0,5$ arba $\mathbf{B} = 1$, kiekis [vnt.];

N_{pr1} – dalelių, prisijungusių zonose $\mathbf{B} = 1$, kiekis [vnt.];

N_{imp} – implantuotų (tapusių struktūros dalimi) dalelių kiekis [vnt.];

N_m – prisijungusių po migracijos dalelių kiekis [vnt.];

N_{des} – nurodo kiek kartų dalelės desorbavosi kol dangą buvo užauginta [vnt.];

N_{pm} – priverstinių migracijų kiekis [vnt.];

N_{gen} – sugeneruotų dalelių kiekis [vnt.];

N_{Δ} – skirtumas tarp N_{gen} ir N [vnt.];

ρ – dalelių tankis [sant. vnt.];

P_{des} – desorbcijos tikimybė [%] kiekvieno migracijos žingsnio pradžioje;

\mathbf{R} – paviršiaus šiurkštumo koeficientų matrica;

R_a – vidutinis nuokrypis nuo aproksimuotos paviršinės linijos [nm];

R_v – giliausios įdubos gylis [nm];

R_p – aukščiausio iškilimo aukštis [nm];

R_t – maksimalus profilio aukštis [nm];

R_q – nuokrypio nuo aproksimuotos paviršinės linijos kvadratinių verčių vidurkio šaknis [nm];

t_m – migracijos trukmė, žingsniais [vnt.];

X – atsitiktinis skaičius.

2. ĮŽANGA

Plonų dangų auginimas – taikant įvairius nusodinimo metodus pastaraisiais dešimtmečiais plačiai tyrinėjamas dėl šių dangų praktinės naudos biologijoje, optikoje, chemijoje, transporto, elektrotechnikos ir kitose srityse. Kita vertus tai sudėtingas, reikalaujantis specifinių žinių ir finansinių išteklių, procesas.

Naudojant tas pačias medžiagas ir taikant skirtingus nusodinimo metodus, dangos gali skirtis savo morfologija, tuo pačiu ir savybėmis. Nėgana to, plonų dangų struktūrai įtakos turi ir auginimo proceso metu parinktų parametrų vertės: dalelių srauto energija, nusodinimo kampas, temperatūra ir kt. Tiek nusodinimo proceso parametrų kontrolė, tiek jų daromos įtakos suvokimas yra būtini auginant dangas, pasižyminčias atitinkamomis savybėmis.

Šiuo metu dėl finansinių, mokslinių priežasčių kuriami įvairūs dangų augimą imituojantys modeliai. Juose plačiai taikomi MK [1] arba molekulinės dinamikos [2] metodais paremti algoritmai.

Šio darbo tikslas: pritaikant pasirinktą programavimo kalbą sukurti algoritmą, taikytiną ant kietojo kūno paviršiaus augančios dangos fazinės struktūros modeliavimui.

Tikslui įgyvendinti keliami šie uždaviniai:

- susipažinti su MK ir Molekulinės dinamikos metodais;
- algoritme taikyti adsorbcijos, desorbcijos, migracijos, implantacijos mechanizmus;

Reikalavimai algoritmui:

- turi būti naujas, sudarytas atsižvelgiant į fizikos dėsnius, nanoklasterių augimo dėsningumus ir nesinaudojant kitų autorių programiniais kodais;
- spartus veikimas;
- apskaičiuojamų duomenų aktualumas ir gausa;
- galimybė algoritmą atnaujinti, įvesti papildomus procesus, dydžių skaičiavimus;
- visi skaičiavimų rezultatai turi būti išsaugomi skaitmeniniu formatu.

3. LITERATŪROS APŽVALGA

3.1. Monte-Karlo metodas. Klasterių augimo modeliai.

MK metodas įgalina tirti kompleksinės sistemos jautrumą įvairiems parametrams naudojant statistinius metodus. Jis plačiai taikomas finansiniuose, fizikiniuose ir matematinuose modeliuose, jame remiamasi pseudo-atsitiktinių verčių generavimu ir pagal jas gautų rezultatų patikrinimu [1, 3].

3.2. Edeno klasteriai

Analizuojant augimo modelius galima nustatyti koks sąryšis yra tarp mikroskopinės augimo taisyklės ir susidariusios makroskopinės formos. Kokioms sąlygoms esant susiformuoja briaunos, kampai, plokšti paviršiai ar kitokios formos, kurios natūraliai susidaro gamtoje.

Vieni iš lengviausiai apibūdinamų ir modeliujamų objektų – Eden'o klasteriai. Šis modelis buvo aprašytas 1961 m. Murray'jaus Eden'o darbe „Dvimatis augimo procesas“ (angl. *A two-dimensional growth process*) siekiant pavaizduoti kaip auga mikrobu kolonijos jiems dauginantis [4]. Laikui bėgant paaiškėjo, jog Eden'o modelis gerai tiko aprašant ne vien bakterijų kolonijų, bet ir vėžinių navikų, kietos fazės dangų ant padėklo augimą, koloidinių suspensijų sklidimą paviršiuje ir kt.

Eden'o klasteris auginamas dvimatėje matricoje (galima auginti ir daugiau dimensijų turinčioje gardelėje), jam suteikiant pradžios koordinatas – branduolį. Jei branduolys sudarytas iš vieno matricos elemento, kurio indeksai (i, j) , tai gretimi taškai, esantys $(i - 1, j)$, $(i + 1, j)$, $(i, j - 1)$ ir $(i, j + 1)$ pozicijose bus traktuojami kaip laisvės laipsniai naujam klasterio elementui prisijungti prie branduolio. Kitais žodžiais tariant, visi su klasterio elementais besiribojantys neužpildyti matricos laukeliai yra laisvės laipsniai naujo elemento prisijungimui. 1 pav. pavaizduoti keletas pirmųjų klasterio augimo žingsnių, kai prisijungimo zonos formuojamos keturiomis kryptimis – statmenuose augančios struktūros elementams laukeliuose:



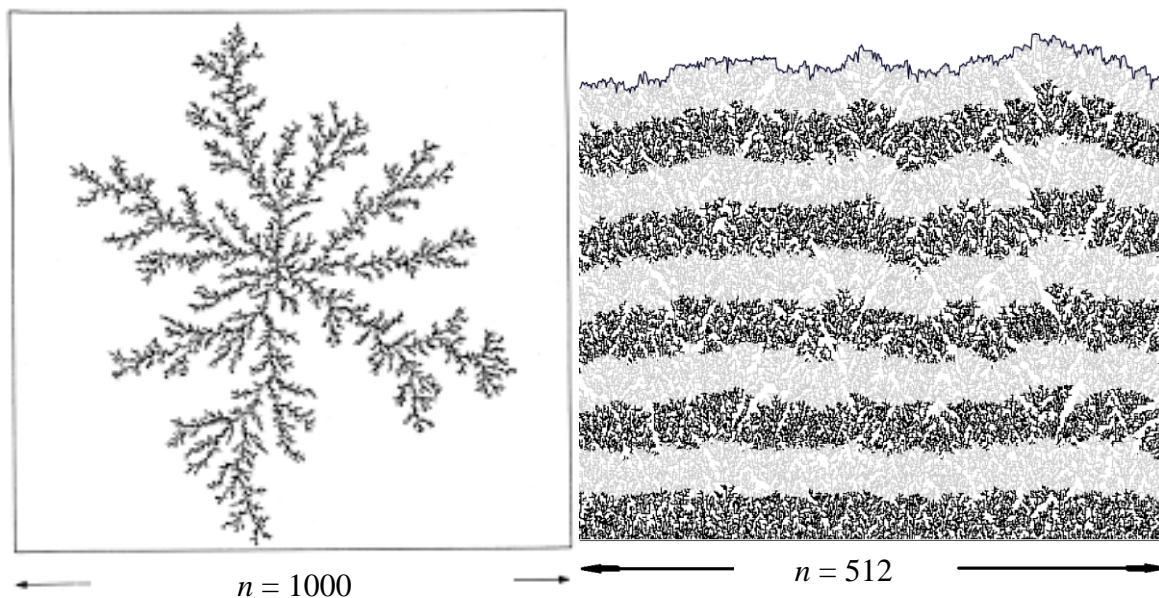
1 pav. Eden'o klasterio augimas ir laisvės laipsnių parinkimas

Laisvės laipsnių kūrimas pritaikomas šiame darbe aprašytame algoritme.

3.3. Difuzinės agregacijos, balistinio nusodinimo modelis

Dar vienas klasterių modeliavimo pavyzdžių – DLA struktūrų auginimas. Jis plačiai taikomas modeliuojant dendritines struktūras, fraktalinių nanoklasterių formavimąsi. Šį modelį taip pat galima taikyti nagrinėjant: kai kurių kristalų, koralų, gyvenviečių augimą, žaibo formos ypatumus, paviršinės difuzijos metu gaunamų klasterių struktūrą, darbuotojų ergonomiškumą [5] ir t.t..

DLA atveju dalelės prisijungia prie klasterio struktūros atkeliaudamos iš jį supančios aplinkos [6-8], judėdamos atsitiktinėmis trajektorijomis imituojant Brauno judėjimą (angl. *Brownian motion*) [9]. Augimo procesas pradamas nuo klasterio sėklos (branduolio), turinčios fiksuotą poziciją plokštumoje, (arba erdvėje) suformavimo. Nauja dalelė paleidžiama atsitiktinai parinktoje vietoje, toli nuo klasterio ir juda paklusdama Brauno aprašytiems dėsningumams. Kai ši dalelė pasiekia klasterį, ji gali sustoti ir tapti jo dalimi. DLA struktūrai prisijungus naują elementą sugeneruojama kita dalelė ir judėjimo – prisijungimo procesas kartojamas iki klasteris įgyja pageidaujamą dydį, dažnai apibūdinamą dalelių skaičiumi.

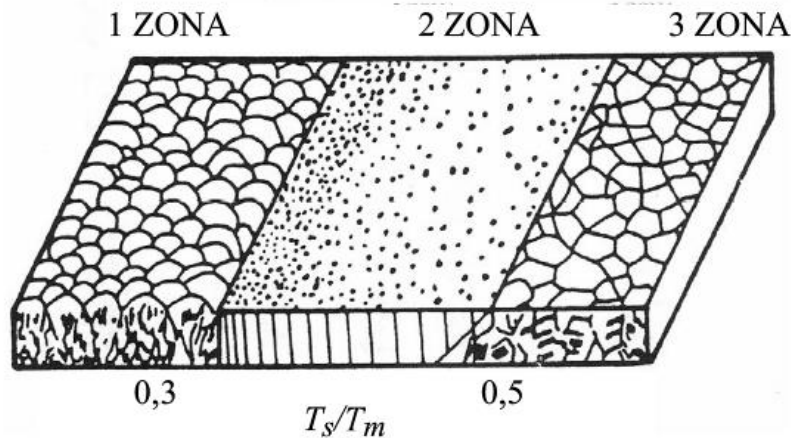


2 pav. DLA klasteris (kairėje) [10] ir struktūra, užauginta suteikus dalelėms prioritetinę judėjimo kryptį [11]

Dalelės judėjimas apribojamas tam tikrame plote siekiant išvengti per ilgai trunkančių skaičiavimų. Jei ji „pažeidžia“ ribas – generuojama nauja dalelė. Kai migruojančioms dalelėms suteikiama judėjimo kryptis taip, kad jos lėktų link augančios struktūros – gaunamas paprastas balistinio nusodinimo atvejis. Šiame darbe aprašytame algoritme taikomi balistinio nusodinimo principai.

3.4. Teoriniai dangų augimo modeliai

Vienas iš būdų teoriškai atvaizduoti augančių dangų struktūrą, buvo dar 1969 m. Movchan'o ir Demchishin'o pasiūlyta struktūrinių zonų diagrama 4 pav., sudaryta išanalizavus tūkstančius bandinių [12]. Šis modelis taikytas storoms dangoms, nusodintoms garinimo būdu ir buvo grindžiamas sąryšiu tarp padėklo ir nusodinamosios dangos lydymosi temperatūrų T/T_m [13]. Čia T – padėklo temperatūra, T_m – nusodinamosios medžiagos lydymosi temperatūra.



3 pav. Movchan'o ir Demchishin'o plonų sluoksnių mikrostruktūros ir temperatūros zonis modelis [13]

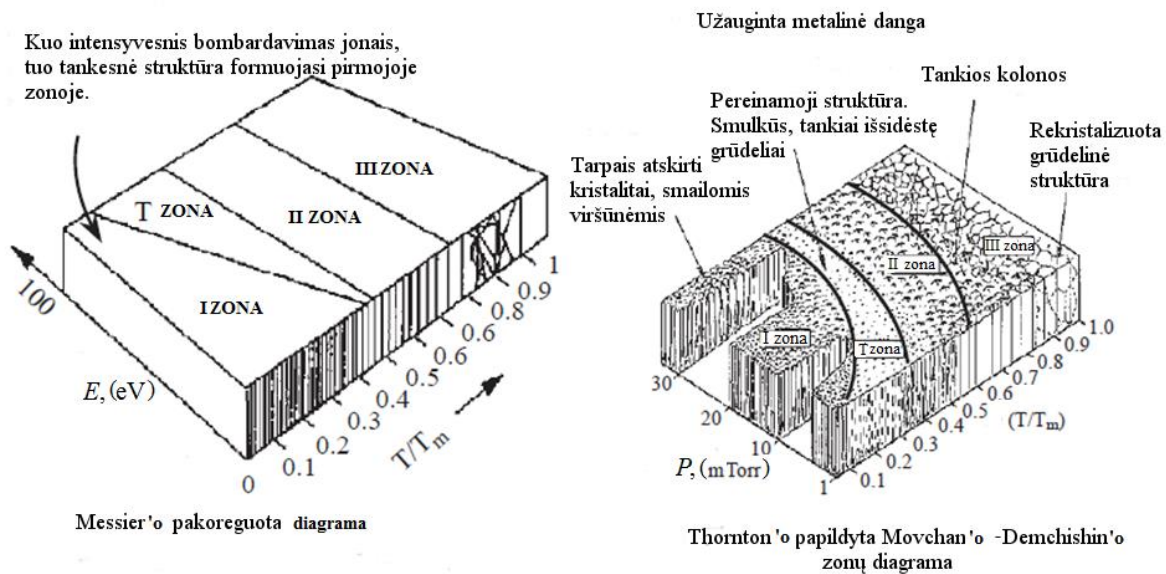
Pirmojoje zonoje adsorbuotų atomų difuzijos koeficientas – mažas, o atomų sklidimui didelę įtaką daro ekranavimo efektai. Esant tokioms sąlygoms, užaugančių kristalinių sluoksnių formos kugeliškos, koloninės, tarp jų susidaro tuštumos. Kolonų augimo orientacija – išilgai link dangos paviršiaus lekiančių dalelių srautui [13].

Antrojoje zonoje mikrostruktūros (kristalitiniai sluoksniai) didėja keliant padėklo temperatūrą, jos išsidėsto tankiau, susidaro koloninės formos kristalinių sluoksnių. Tai lemia: šešėliavimas, mažas adatomų judris. Keliant temperatūrą – kristalitiniai sluoksniai didėja [13].

Trečiojoje zonoje dominuoja chaotiškai orientuoti lygiaašiai kristalitiniai sluoksniai. Tokia dangų struktūra gaunama dėl tūrinės atomų difuzijos, t.y. rekristalizacijos proceso [13].

Messier'as šį modelį papildė įvertindamas padėklą bombarduojančiųjų jonų energijas [12, 14].

Kai dangos nusodinamos joniniu dulkinimu, jų struktūrai įtaką daro ir dujų slėgis vakuuminėje sistemoje. Thornton'as išplėtė 3 pav. pavaizduotos diagramos modelį papildydamas jį parametru, atitinkančiu dujų slėgį nusodinimo metu [13] (4 pav.). Čia E žymi bombarduojančiųjų jonų energijos vertę, o P – argono dujų slėgį:



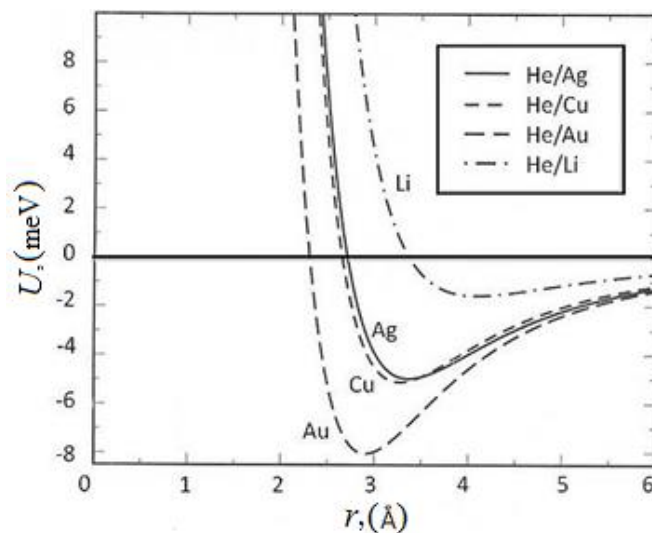
4 pav. Thornton'o ir Messier'o diagramos [15]

Šiame darbe nesiekama įvertinti T/T_m ir į 3, 4 pav. diagramas atsizvelgiama kaip į užaugančių struktūrų pavyzdį.

3.4.1. Adsorbcija, desorbcija, implantacija

Fizinio nusodinimo metu vyksta įvairūs reiškiniai: desorbcija, nukleacija, adsorbcija, difuzija, chemisorbcija ir kt. Šie procesai lemia tai, kokia struktūra susidarys ir priklauso nuo nusodinamųjų ir nusėdusiųjų (arba padėklo) dalelių tarpusavio sąveikos.

Dalelei pasiekus medžiagos paviršius, ji gali būti adsorbuota 5 pav. [16] dėl elektrostatinės sąveikos (Van Der Vaals'o) jėgos, arba nuo jo atšokti.



5 pav. He atomo sąveikos su įvairiais metalais potencinė energija [16]. Čia: U – adsorbcijos potencinė energija, r – atstumas tarp skriejančios dalelės ir metalo paviršiaus atomų centrų.

Desorbcijos procesas aprašytas Rozanov'o [17].

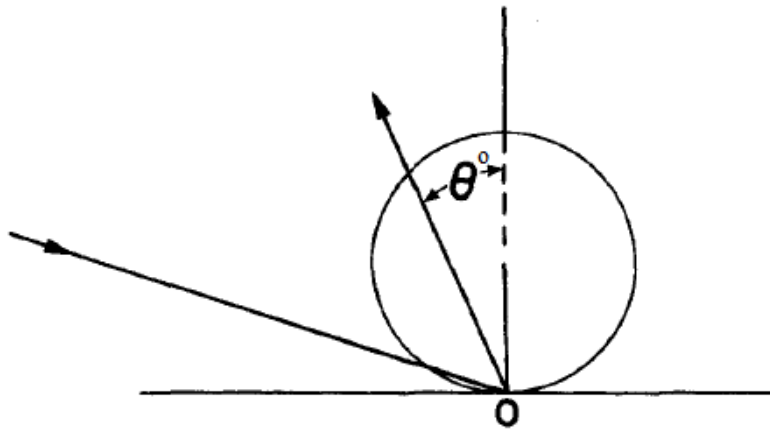
$$\varepsilon = \int_0^\gamma \sin(2 \cdot \gamma) d\gamma = \sin^2 \gamma ; \quad (1)$$

Čia ε – dalis molekulių paliekančių paviršių kryptimis, apibūdinamomis intervalu, kuris žymi nuokrypį nuo normalės paviršiui atitinkančio erdvinio kampo γ kraštus.

$$\gamma = \arcsin \sqrt{\varepsilon} ; \quad (2)$$

Nesunku įsitikinti, kad dalelei būti desorbuotai kryptimi, statmena dangos paviršiui, tikimybė yra didžiausia.

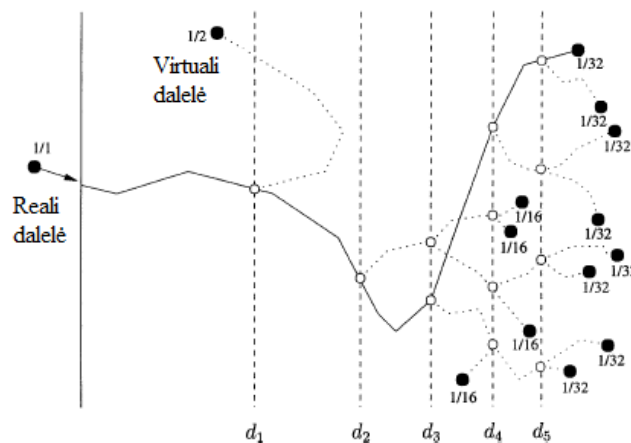
Jei dalelė atsitrenkia į paviršių ir nėra adsorbuojama, ji „pamiršta“ savo pradinę kryptį [17], išsklaidoma nuo paviršiaus kampu θ° :



6 pav. Dalelių sklaida nuo dangos paviršiaus [17]

Tikimybė dalelei įgyti konkrečią kryptį skaičiuojama taip pat kaip ir desorbcijos atveju.

Implantacijos mechanizmus modeliavo Hernandez'as–Mangas [18].

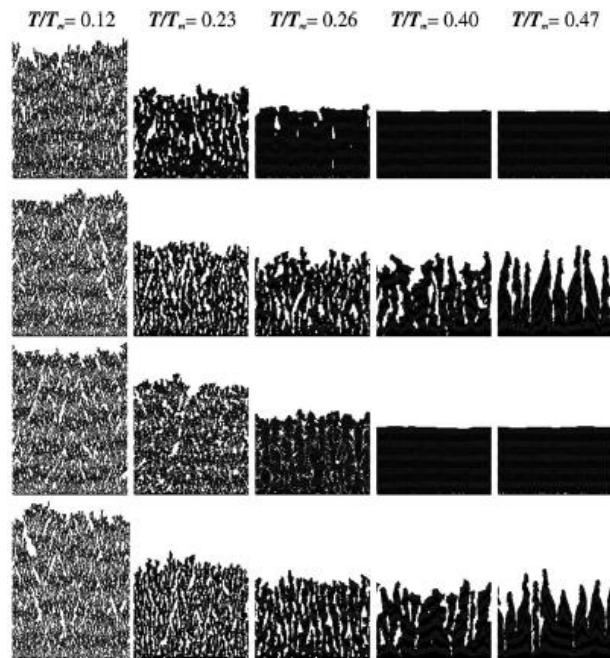


7 pav. Implantacijos mechanizmas [18]

Šiam procesui aprašyti taip pat dažnai taikomas MK metodas [19], braižomi fraktaliniai implantacijos trajektorijų ir dalelės sustojimo pozicijų medžiai.

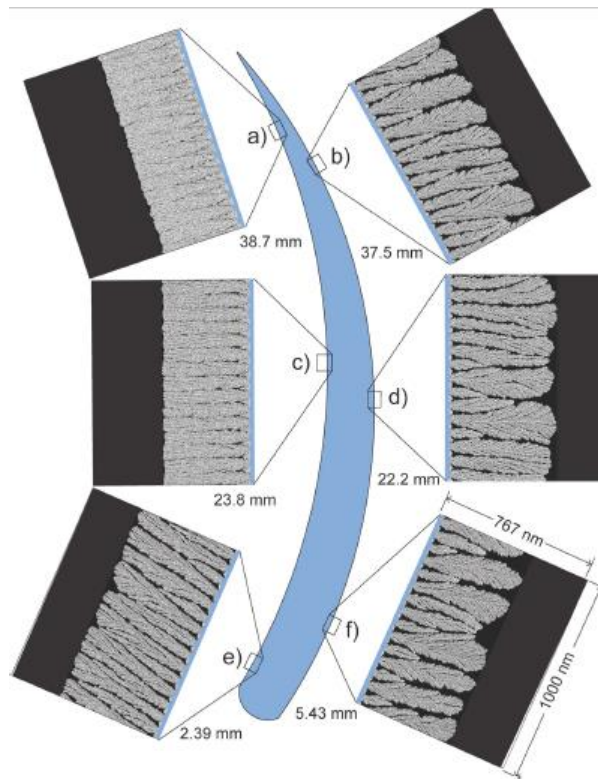
3.5. Kompiuteriniai dangų sudarymo modeliai

Dangų auginimo mechanizmus imitavo Sanchez'as [20], Rodgers'as [21]. Jų aprašomuose modeliuose naudotos Movchan'o ir Demchishin'o diagramos (Sanchez'as), kMK metodas (Rodgers'as).



8 pav. Dangos sudaromos jas nusodinant monosluoksniais (Sanchez'as) [20]

Rodgers'as imitavo TBC (angl. *thermal barrier coating*) dangų augimą ant lenkto paviršiaus jas nusodinant EB-PVD ir PS-PVD (angl. *plasma sprayed physical vapor deposition*).



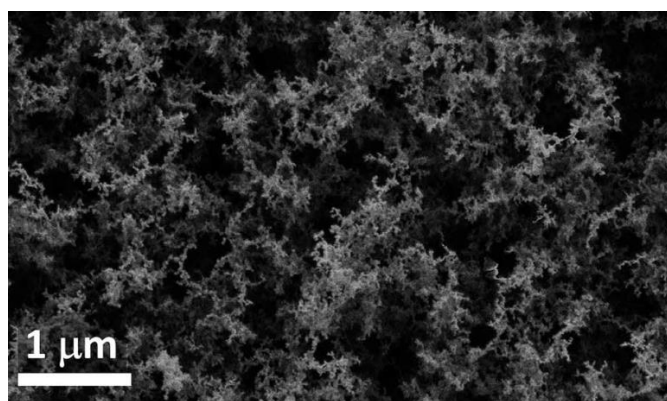
9 pav. Rodgers'o užaugintos struktūros taikant kMK metodą [21]

Rodgers'o modelyje įvertinama daug kintamųjų, reikalingi dideli skaičiavimo technikos pajėgumai, tačiau rezultatai - detalūs.

3.6. Realių dangų pavyzdžiai

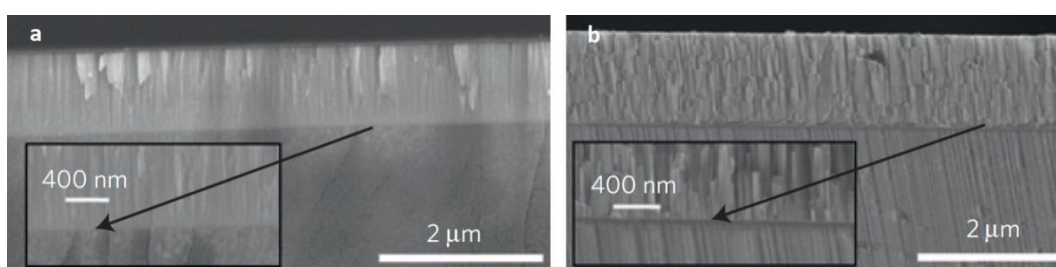
Dauguma šiame skyriuje pateikiamų dangų užauginta PVD metodais. Jų struktūra naudojama kaip orientyras siekiant šio darbo tikslo. Sudarinėjant dangos auginimo modelį į pateiktų pavyzdžių pritaikymą neatsižvelgiama, orientuojamasi tik į fazinę struktūrą ir ją lemiančius parametrus.

10 pav. pateikiamas dangos, sudarytos vienu iš terminio garinimo metodų – FAD (angl. *flame aerosol deposition*). Gauta reta, trapi struktūra, kurios didžiąsą dalį sudaro monoklininės fazės gardelės [22].

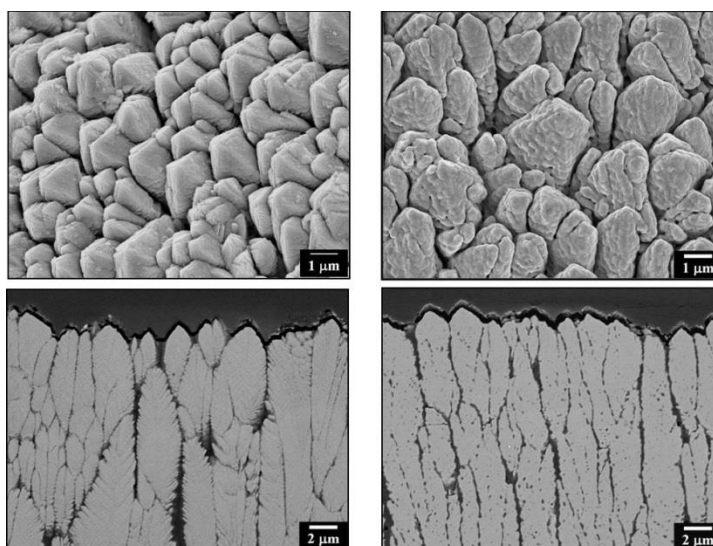


10 pav. $Y_2O_3:Eu$ nanofosforo dangos SEM paviršiaus vaizdas [22]

11 pav. pavaizduota $BaZr_{0.8}Y_{0.2}O_{3-\delta}$ (BZY) danga, nusodinta lazerinės abliacijos metodu:



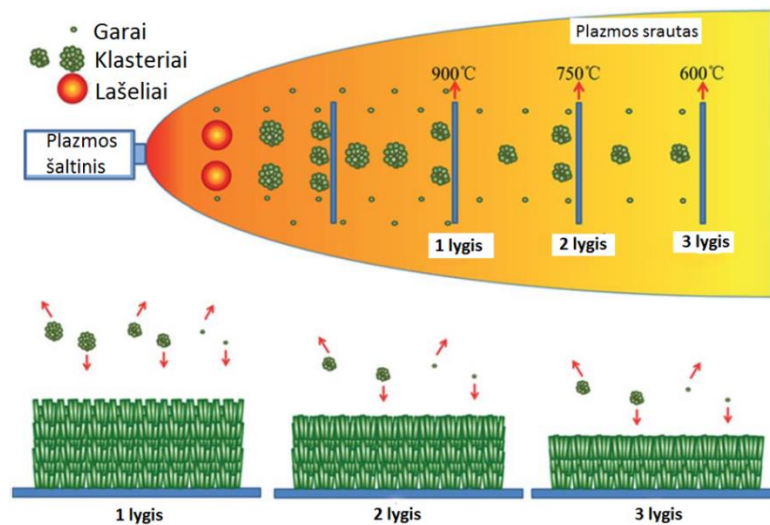
11 pav. BZY dangos, nusodintos ant MgO (a) ir safyro (b) padėklų, FE-SEM mikrogramos [23]



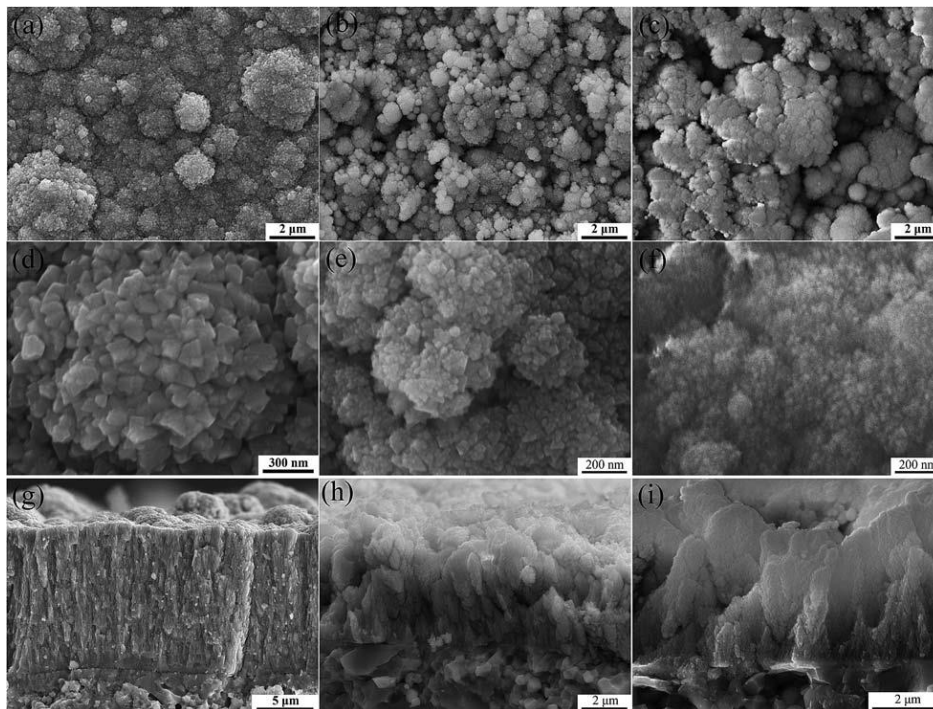
12 pav. YSZ danga prieš atkaitinimą (kairėje) ir po 50 h trukmės atkaitinimo 1100 °C temperatūroje [24]

12 pav. pavaizduota danga, užauginta EB–DVD (angl. *electron beam direct vapor deposition*) metodu prieš atkaitinimą (kairėje) ir po jo (dešinėje). Viršuje – dangos paviršiaus vaizdas, apačioje – skerspjūvio.

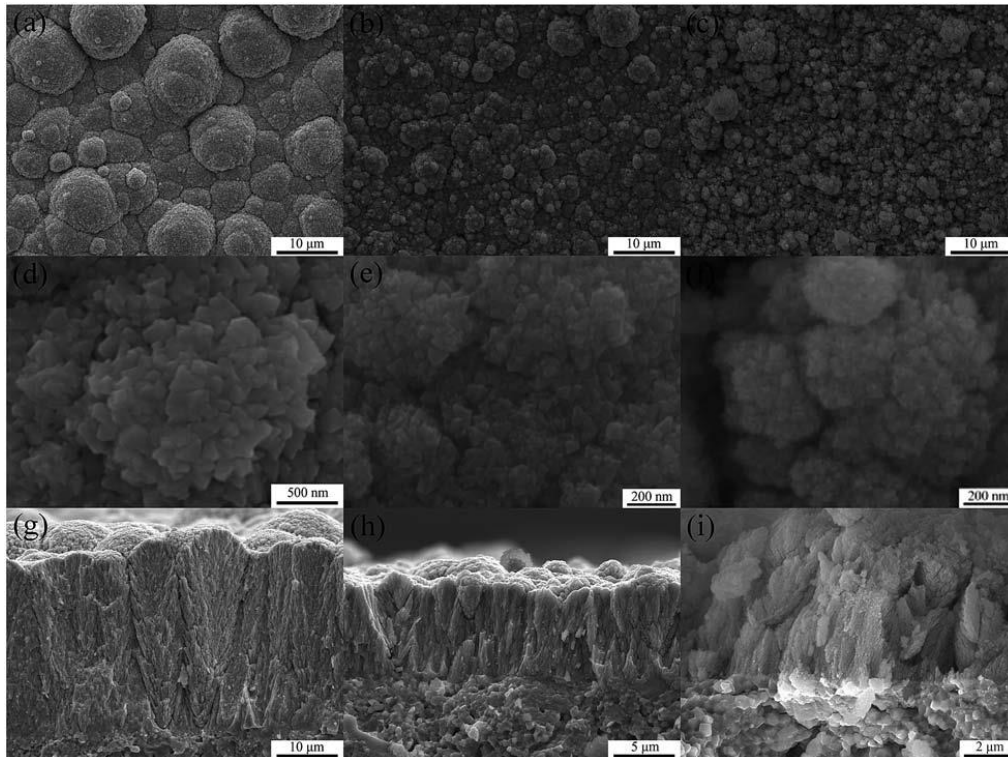
14 pav. ir 15 pav. pavaizduotos dangos gautos PS–PVD (angl. *plasma spray – physical vapour deposition*) būdu, šešėliuojant plazmos srautą užtvarais. Padėklai, ant kurių auginamos dangos pritvirtinti plazmos srauto centre, išdėstyti ašyje, vienas po kito:



13 pav. Padėklų išdėstymas plazmos sraute. Lygio numeris žymi prieš juo pažymėtą padėklą esančių užtvarų skaičių ir atitinka atstumus: (1) – 260 mm, (2) – 340 mm, (3) – 420 mm [25].



14 pav. YSZ dangos paviršiaus ir skerspjūvio morfologija, kai danga užauginta esant 60 kW plazmos šaltinio galiai. Atstumai tarp plazmos šaltinio ir augančios dangos: 260 mm (a, d, g), 340 mm (e, h) ir 420 mm (c, f, i) [25]



15 pav. YSZ dangos paviršiaus ir skerspjūvio morfologija kai danga užauginta esant 78 kW plazmos šaltinio galiai. Atstumai tarp plazmos šaltinio ir augančios dangos: 260 mm (a, d, g), 340 mm (b, e, h), 420 mm (c, f, i) [25]

Matyti, jog augančios dangos struktūrai įtakos turi: šešėliavimas, plazmos šaltinio galingumas, ant padėklo patenkančių dalelių dydis, fazė, padėklo struktūra.

3.7. Temos ir uždavinių pagrindimas

Realių dangų nusodinimas – brangus, ilgai trunkantis procesas, kuriam reikalinga speciali techninė įranga, aukštos kvalifikacijos specialistai. Kadangi yra daug parametrų, kurie daro ytaką augančios dangos struktūrai, eksperimentiškai patikrinti galimas jų kombinacijas nėra paprasta. Čia išryškėja kompiuterinio modeliavimo nauda.

Atlikus literatūros apžvalgą įsitikinta, kad įmanoma aprašyti realių dangų augimą atitinkamu tikslumu imituojančius modelius, susipažinta su juose naudojamais algoritmais. Atrinkti fizikiniai procesai, kurie bus integruoti į šiame darbe aprašomą dangų auginimo modelį. Remiantis literatūros šaltiniu [3], išanalizuoti skaičiavimų MK metodu ypatumai, todėl laikoma, jog modelio sudarymui yra pasiruošta.

4. MEDŽIAGOS IR TYRIMO METODAI

Modelis sudarytas kompiuterine skaičiuokle „Matlab“. Rezultatų analizė atliekama programomis „MS Excel“ ir „Matlab“.

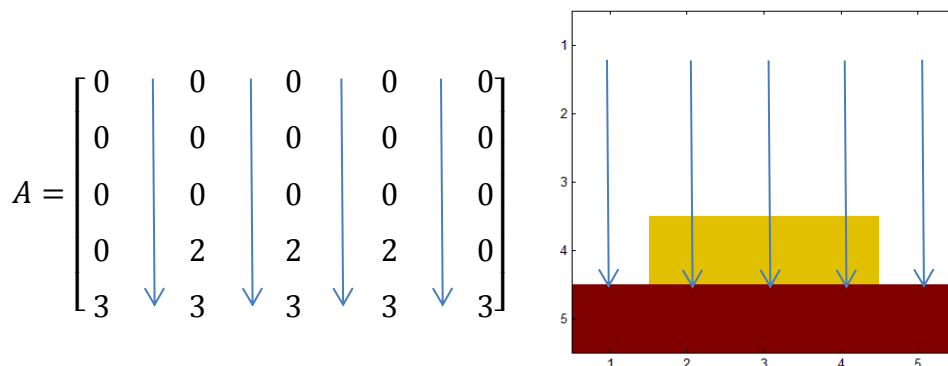
Modelis taikomas atvejams, kai link dangos lekiančių dalelių srauto kryptis yra statmena padėklo paviršiui. Tariama, kad judėjimas vyksta aukštame vakuume ir į dalelių sklaidą, iki jos pasiekia padėklą – neatsižvelgiama. Kiekvienos jų poziciją matricose $\mathbf{A}(m,n)$ ir $\mathbf{B}(m,n)$ apibūdina indeksai i ir j . Dalelės paleidžiamos po vieną ir juda iki tampa dangos dalimi (prisijungia) arba išlekia už matricos ribų, t.y. nauja dalelė paleidžiama, kai pažeidžiama viena iš šių sąlygų: $m > i > 1$ arba $n > j > 1$.

4.1. Dangos struktūros ir prisijungimo zonų matricos

Dangos auginimas vykdomas matricoje \mathbf{A} kurios nelygūs nuliui elementai atitinka dangos arba padėklo struktūrą. Pavieniai elementai gali turėti šias vertes:

- 0 – tuščias laukelis;
- 2 – priklauso dangai;
- 3 – priklauso padėklui.

16 pav. pavaizduota matrica sudaryta iš $m = 5$ eilučių ir $n = 5$ stulpelių. Dešinėje pusėje pateikiamas \mathbf{A} vaizdas kuriame padėklui ir dangai priklausantys elementai pažymėti skirtingomis spalvomis.



16 pav. \mathbf{A} ir jos atvaizdavimo pavyzdys. Rodyklės nurodo dalelių srauto kryptį

Dauguma dangų pateikiamų 5 šio darbo skyriuje yra užaugintos matricose, kurių $m = 4096$ arba $n = 4096$, o padėklo storis siekia iki trijų eilučių, todėl skirtingų spalvų vaizdavimas, pakankamai neišdidinus vaizdo, netenka prasmės ir tiek dangos struktūrai, tiek pagrindui priklausantys elementai spalvinami juodai. Nei dangos, nei pagrindo elementai simuliacijos metu savo pozicijų nekeičia.

Dalelės galimybę migruoti arba prisijungti, t.y. tapti struktūros dalimi apibūdinančios elementų pozicijos (toliau vadinamos prisijungimo zonomis) saugomos matricoje **B**, kurios eilučių ir stulpelių skaičius toks pat kaip **A**. **B** elementai taip pat gali įgyti 3 skirtingas vertes:

- 0 – adsorbcija, migracija ar prisijungimas vyksti negali;
- 0,5 – zona, kurioje gali vykti adsorbcija arba dalelės prisijungimas prie struktūros po migracijos;
- 1 – zona, prie kurios dalelė gali adsorbuotis arba iškart prisijungti.

Matricos **B** elementai savo pozicijos taip pat nekeičia skaičiavimų metu, tačiau būna panaikinti jei $\mathbf{A}(i, j) = 0$ vertė pakinta iš 0 į 2.

Atsižvelgus į dalelių srauto kryptingumą ir siekiant sumažinti skaičiavimų trukmę, **B** vertės formuojamos pagal 17 pav. pavaizduotą taisyklę:

$$\text{Jei } \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \text{ tai } \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,5 & 1 & 0,5 & 0 \\ 0 & 0,5 & 0 & 0,5 & 0 \\ 0 & 0,5 & 1 & 0,5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

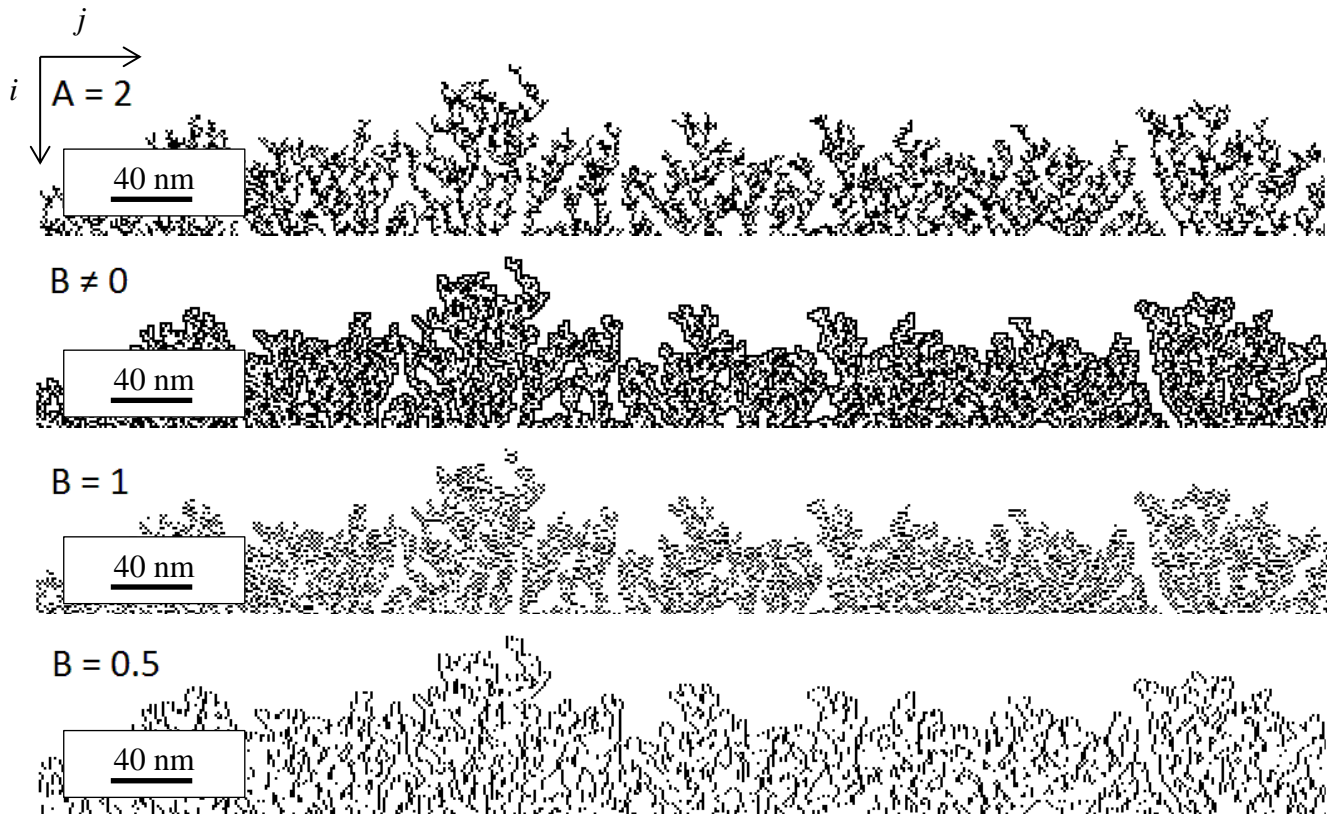
17 pav. Prisijungimo zonų kūrimo pavyzdys

Taigi jei $\mathbf{A}(i, j) = 2$ ir $\mathbf{A}(i + 1, j) = 0$ ir/arba $\mathbf{A}(i - 1, j) = 0$, tai $\mathbf{B}(i + 1, j) = 1$ ir/arba $\mathbf{B}(i - 1, j) = 1$. Visi kiti su $\mathbf{A}(i, j) = 2$ horizontaliai arba įstrižai besiribojančius elementus atitinkantys **B** laukeliai bus užpildyti skaičiais 0,5. Jei skaičiavimų metu prisijungimo zonos persidengia - paliekama didžiausia $\mathbf{B}(i, j)$ vertė. Padėklo elementai, priklausomai nuo nagrinėjamo atvejo, gali būti traktuojami taip pat kaip ir dangos struktūra. 18 pav. pateikiama pagal matricą **A** (17 pav.) suformuota **B**:

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0,5 & 1 & 1 & 1 & 0,5 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

18 pav. Prisijungimo zonų pavyzdys matricai **A** (17 pav.)

Nelygūs nuliui B elementai vaizduojami juoda spalva, 19 pav. pateikiami didesnių matmenų matricoje augančios struktūros ir jos prisijungimo zonų vaizdai:



19 pav. Užaugintos struktūros ir jos prisijungimo zonų išdidintas vaizdas

4.2. Dalelių generavimas

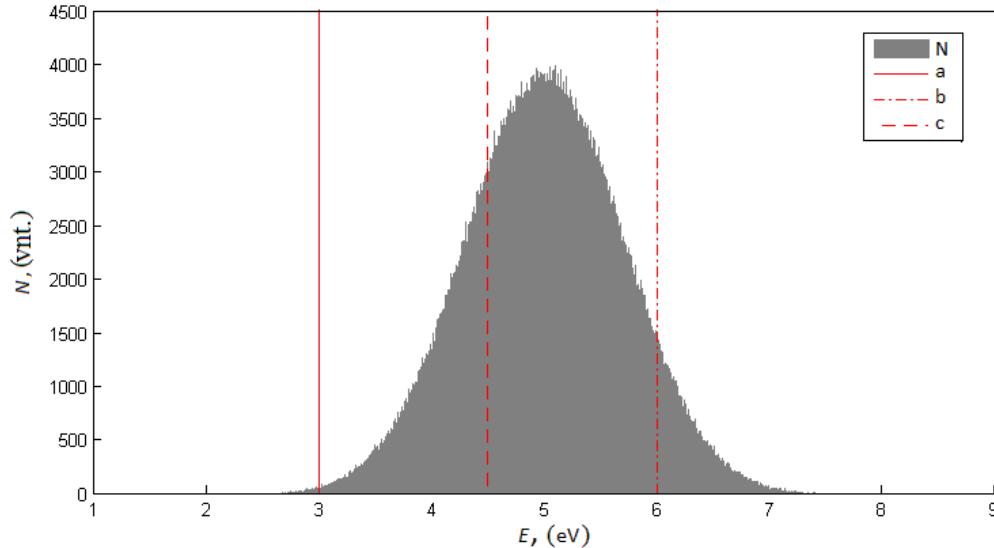
Dalelės paleidžiamos statmenai pagrindo paviršiui, jei jis yra horizontalus t.y. suformuotas matricos eilutėje (-ėse), dalelių paleidimas kitomis kryptimis šiame darbe neaptarinėjamas.

Dalelė juda eilutėmis iteruojant $i = i + 1$, nekeičiant krypties ($j = \text{const.}$) iki priartėja prie pagrindo arba patenka į prisijungimo zoną. Kiekvienai dalelei paleidimo metu atsitiktinių skaičių generatorius suteikia atitinkamas vertes E (eV) ir j . Priklausomai nuo iškelto uždavinio sąlygos ir algoritmo parametrų E gali būti traktuojama kaip pilnutinė dalelės energija arba tik kaip kinetinė. Svarbu pabrėžti, kad šiame darbe nėra įvertinami šilumos pernešimo reiškiniai arba, pavyzdžiui, dalelių vibracinė, rotacinė energijos, tačiau modelis sudarytas taip, kad papildomų skaičiavimų įtraukimui nereikėtų keisti pagrindinės algoritmo struktūros. Paprastumo dėlei dydis E toliau bus vadinamas tiesiog dalelės energija.

E vertės parenkamos pagal Gauss'o (angl. *Gauss*) skirstinį, kuris „Matlab“ programoje užrašomas simbolių seka: „ $E = \text{randn}(1) * \text{sqrt}(\text{sigma}) + \text{miu}$ “, čia komanda „ $E = \text{randn}(1)$ “ pagal

normalųjį pasiskirstymą generuoja skaičių $E \in (0; 1)$ vertes. Koeficientai $\sqrt{\sigma}$ („sqrt(sigma)“) ir μ („miu“) pasirenkami laisvai. Šiame darbe naudojamų koeficientų vertės: $\sigma = 0.5$ ir $\mu = 5$.

20 pav. pateikiama histograma sudaryta užregistravus $N = 1 \cdot 10^7$ sugeneruotų dalelių energijas ir suskaidžius gautuosius duomenis į 1000 intervalų:



20 pav. Sugeneruotų E verčių histograma. $E_{min} = 1.68$ eV, $E_{max} = 8.63$ eV, $a = 3$ eV, $b = 4.5$ eV, $c = 6$ eV

Čia E_{min} – mažiausioji E vertė, E_{max} – didžiausioji, N – dalelių turinčių atitinkamas energijos vertes skaičius. Dydziai a , b ir c yra intervalų, nulemiančių dalelės elgseną kai pasiekama prisijungimo zona arba padėklo paviršius, ribos.

Tarkime, kad įpusėjus dangos auginimo simuliacijai (dangos struktūra jau susiformavusi virš viso padėklo paviršiaus) buvo sugeneruotos 4 dalelės kurioms teko atitinkamos E vertės: $E_1 < a$; $a \leq E_2 < b$; $b \leq E_3 < c$; $c \leq E_4$. Pirmoji dalelė, turinti mažiausią energiją, adsorbuosis bet kurioje prisijungimo zonoje, E_2 – adsorbuosis tik prie zonų $\mathbf{B}(i, j) = 1$, E_3 – pataikiusi į zoną $\mathbf{B}(i, j) = 1$ sustos ir taps struktūros dalimi praleisdama migracijos etapą, E_4 – pataikiusi į $\mathbf{B}(i, j) = 1$ - implantuosis. Implantacija, desorbcija nuo pagrindo, desorbcija nuo užaugintos dangos struktūros, adsorbcija ir migracija apibūdinamos kitame šio darbo skyriuje.

4.3. Realiųjų procesų imitavimas

4.3.1. Adsorbcija

Algoritmas sudarytas taip, kad adsorbcija vyktų dviem atvejais:

- a) $E < a$, $\mathbf{B}(i, j) > 0$,
- b) $a \leq E < b$, $\mathbf{B}(i, j) = 1$.

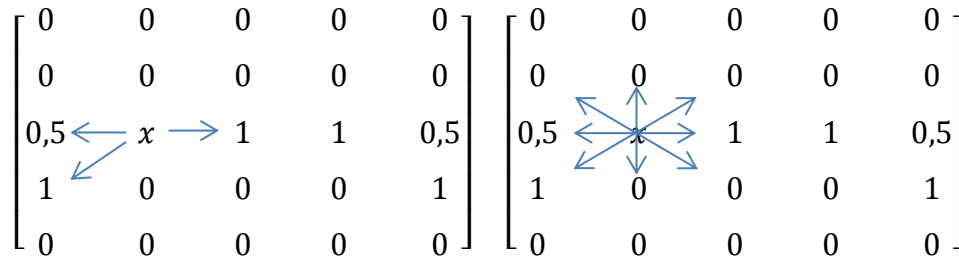
Taigi fizikinė adsorbpcija gali įvykti tik tada, kai dalelės pozicija **B** matricoje atitinka nelygų nuliui elementą, o $E < b$.

Įvykus adsorbpcijai dalelė praranda dalį savo energijos (šiam darbe imituojama tik netamprioji sąveika) ir paleidžiamas migracijos mechanizmas.

4.3.2. Migracija

Dalelei migruoti leidžiama tik gretimais, nelygiais 0 matricos **B** elementais. 21 pav. pavaizduotos pozicijos, nurodytos rodyklėmis, į kurias leidžiama pereiti dalelei. Kiekvieno migracijos žingsnio pradžioje įvertinama desorbpcijos tikimybė P_{des} . Jei desorbpcija neįvyksta – migracija tęsiama.

Migracijos trukmė apibūdinama žingsnių skaičiumi t_m . Panašiai kaip ir E atveju t_m vertė parenkama iš normaliojo skirstinio. Atsitiktinių skaičių generatoriaus pateikiamos t_m vertės apvalinamos iki sveikųjų skaičių. Kai dalelė išnaudoja visus jai suteiktus žingsnius – tampa dangos dalimi. t_m skaičiuojamas tokiu principu: dalelė bando žengti į bet kurią gretimą langelį, net jei jis lygus nuliui ir, nepriklausomai nuo to ar pakeitė savo poziciją ar ne, vykdoma iteracija $t_m = t_m - 1$.



21 pav. B matrica. Leidžiamos migracijos zonos (kairėje) ir visi žingsnių, kuriuos dalelė gali „mėginti“ žengti, variantai (dešinėje). Dalelės pozicija pažymėta – „x”

Matome, jog šiuo atveju tikimybė pakeisti „x” poziciją yra lygi $\frac{3}{8}$. Taigi tai, kokį atstumą vertikaliai ar horizontaliai, dalelė nukeliaus, jai priskyrus žingsnių skaičių t_m , priklauso ir nuo paviršiaus reljefo. Migracija, taip pat pradėdama vykdyti po dalele „x”, kurios pozicija i, j ir $b \leq E < c$, kai $A(i + 1, j - 1) = 0$ ir $A(i + 1, j + 1) = 0$, ir $A(i + 1, j) = 2$.

4.3.3. Desorbpcija nuo dangos ir nuo padėklo paviršiaus

Kuriant šį modelį buvo priimtas sprendimas taikyti du atskirus desorbpcijos mechanizmus dėl keleto priežasčių:

- siekiant imituoti skirtumus tarp dangą sudarančios medžiagos ir padėklo;

- padėklas šiame darbe parenkamas plokščias arba tiksliai nusakoma jo forma, o dangos paviršius matematiškai nėra aprašomas;

- siekiant palikti galimybę atnaujinti ar papildyti algoritmą nekeičiant jo struktūros.

Desorbcija nuo dangos vykdoma atsižvelgiant į [17] nurodytą metodiką, aproksimuojant funkciją (1) taip, kad liktų tik trys galimos judėjimo kryptys. Skaičiuoklėje „Matlab“ naudojama tokia seka:

- pagal diskretųjį pasiskirstymą parenkamas atsitiktinis skaičius α iš intervalo [1,1802].
- jei $\alpha \leq 508$, dalelės koordinatė toliau nusakoma vykdant iteracijas $i = i - 1, j = j - 1$;
- jei $508 < \alpha \leq 1016$ tai $i = i - 1$; jei $\alpha > 1016$ tai $i = i - 1, j = j + 1$. Tokiu būdu „ x “

gali atšokti nuo pagrindo $45^\circ, 90^\circ$, ir 135° kampais, esant atitinkamomis tikimybėmis $P_{45^\circ} = P_{135^\circ} = 0.282$; $P_{90^\circ} = 0.436$.

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & x & 0 & 2 \\ 3 & 3 & 3 & 3 & 3 \end{bmatrix}$$

22. Desorbcijos nuo padėklo pavyzdys

Siekiant ženkliai padidinti desorbcijos mechanizmo tikslumą algoritme planuojama pritaikyti „Ray tracing“ metodą [26], kuris plačiai naudojamas kompiuterinėje grafikoje.

Desorbcija nuo dangos paviršiaus vykdoma tokiu būdu:

1. Sumuojami matricių \mathbf{A} ir \mathbf{B} elementai $i \in [i - 1, i, i + 1]$ ir $j \in [j - 1, j, j + 1]$, t.y. tiek i , tiek j gali įgyti tris skirtingas vertes priklausančias teigiamų sveikųjų skaičių aibei. Tokiu būdu gaunama nauja matrica \mathbf{AB} , sudaryta iš $m = 3$ eilučių ir $n = 3$ stulpelių, kurios elementas $\mathbf{AB}(2,2)$ atitinka tuometinę dalelės poziciją.
2. Suskaičiuojama kiek \mathbf{AB} elementų turi vertes lygias 0.
3. Dalelė desorbuojama ir toliau juda vieno iš atsitiktinai parinktų tuščių laukelių kryptimi (23 pav.).

$$\mathbf{AB} = \begin{bmatrix} 0,5 & 0 & 0 \\ 1 & x & 0,5 \\ 2 & 2 & 0,5 \end{bmatrix}$$

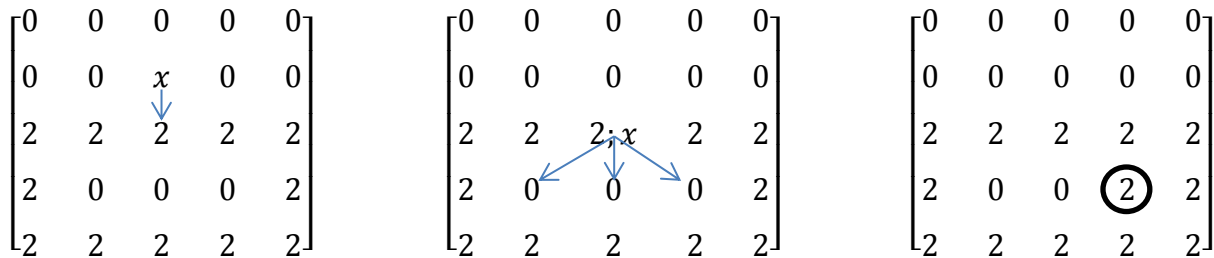
23 pav. Desorbcijos nuo dangos paviršiaus pavyzdys

4.3.4. Dalelių implantacija į dangą

Kai dalelės $E \geq c$ ir pozicija atitinka vertes i ir j , o $\mathbf{A}(i+1, j) = 2$ - paleidžiamas implantacijos mechanizmas. Šis procesas vyksta tokia eilės tvarka:

1. Dalelei neleidžiama desorbuotis.
2. Dalelė kiekviename žingsnyje skverbiasi gilyn į dangą, iteruojant jos poziciją eilutėse $i = i + 1$, o j vertė parenkama atsitiktinai iš sveikųjų skaičių intervalo $[-1, 1]$.
3. Dalelei patekus į laukelį $\mathbf{A}(i, j) = 0$ – ji tampa dangos struktūros dalimi ir paleidžiama nauja dalelė.
4. Jei „ x “ įgyja poziciją už matricos \mathbf{A} ribų – procesas nutraukiamas ir paleidžiama nauja dalelė.

24 pav. pateikiamas implantacijos proceso pavyzdys matricos \mathbf{A} dalyje, skirtingais laiko momentais. Rodyklės žymi kryptis kuriomis leidžiama judėti dalelei:



24 pav. Dalelės implantacija matricoje \mathbf{A}

Kaip ir desorbcijos nuo pagrindo atveju, implantacijos mechanizmą planuojama tobulinti, dalelės prasiskverbimo gylį ir kryptį tiesiogiai susiejant su E ir dangos/padėklo parametrais.

4.4. Pagrindo, ant kurio auginama danga, formavimas

Prieš pradėdant dangos auginimą padėklas paruošiamas vienu iš trijų būdų:

- a) visas padėklo paviršius padengiamas dangą sudarančios „medžiagos“ sluoksniu, imituojant padėklą kurio adhezija didelė (25 pav. a);
- b) tam tikrose pozicijose į padėklą įterpiami „medžiagos“ laukeliai, nurodoma kad pirmosios virš padėklo esančios eilutės elementai, dangai augant, galėtų tapti prisijungimo zonomis (25 pav.b);
- c) tam tikrose pozicijose į padėklą įterpiami „medžiagos“ laukeliai, tačiau nurodoma, kad padėklas yra linkęs atstumti prie jo priartėjusias „medžiagos“ daleles, t.y. prisijungimo zonos prie pat padėklo nebūtų kuriamos (25 pav. c).

$$\begin{array}{cc}
 \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 2 & 2 & 0 \\ 2 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 3 & 3 & 3 & 3 & 3 \end{bmatrix} & \text{(a)} \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0,5 & 1 & 1 & 1 & 0,5 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\
 \\
 \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 3 & 2 & 3 & 3 \end{bmatrix} & \text{(b)} \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,5 & 1 & 0,5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\
 \\
 \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 3 & 2 & 3 & 3 \end{bmatrix} & \text{(c)} \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}
 \end{array}$$

25 pav. Padėklo formavimo būdai

Atstumas (atitinkamų stulpelių numerių skirtumas) tarp gretimų į padėklą įterptų „medžiagos“ laukelių, tyrimo rezultatų skyriuje apibūdinamas parametru d [nm]. Padėklo parinkimas daro įtaką augančios dangos struktūrai ir augimo greičiui simuliacijos pradžioje.

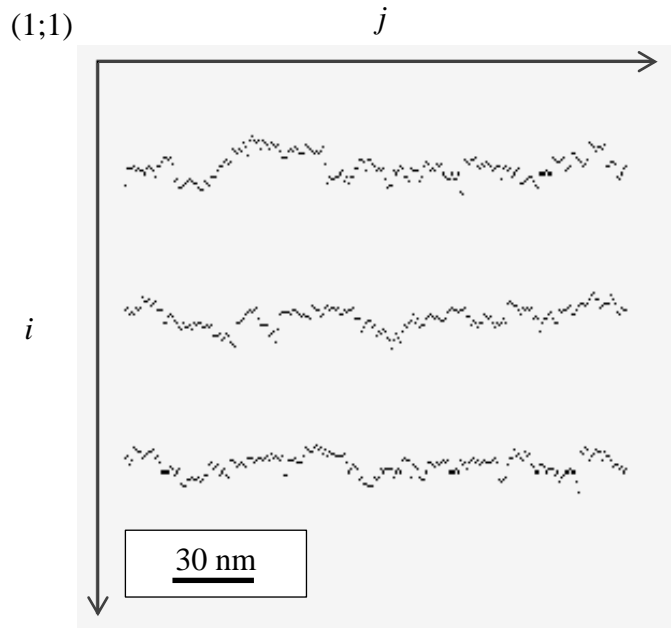
4.5. Paviršinių elementų pozicijų identifikavimas, desorbcijos zonų atvaizdavimas

Augančių dangų paviršiaus analizei buvo sudarytas algoritmas imituojantis profilometro veikimą. Jis apibūdinamas taip:

- Algoritmo pradžioje nustatomas parametras h [vnt.], nurodantis kada turi būti tikrinamas dangos paviršius. Čia h atitinka pasirinktą prisijungusių dalelių skaičių. Jei $h = 10000$ vnt., tai kiekvieną kartą, kai ant dangos prisijungia 10000 naujų dalelių, įjungiamas menamasis profilometras;
- Dangos paviršiaus morfologiją apibūdinančių duomenų rinkimas prasideda sustabdant dalelių judėjimą. Po to nustatomos kiekviename stulpelyje mažiausią indeksą i turinčių matricos \mathbf{A} elementų, priklausančių dangos struktūrai, pozicijos;

- Rezultatai saugomi matricoje (26 pav.). Pagal juos vykdomi papildomų parametru skaičiavimai ir bėžiami profilio atvaizdai.

Augančios dangos kraštuose dėl įvairių šiam modeliui būdingų procesų atsiranda tam tikri reljefo iškreipimai, todėl profilometras neregistruoja duomenų iš sričių, esančių prie pat matricos A kraštų. Šiame darbe, iš abiejų pusių, atmetama po 5% ($0,05 \cdot n$) matrijos stulpelių.



26 pav. Profilometro užregistruotų duomenų matricos pavyzdys. Matmenys: $m = 256$, $n = 256$

Šiame paveikslėlyje matyti, jog viso dangos auginimo metu, paviršius buvo tirtas tris kartus, kiekvienas juodas taškas rodo tuo metu aukščiausiai esantį, (t.y. turintį mažiausią indeksą i) atitinkamo stulpelio j , elementą.

4.6. Paviršiaus šiurkštumo koeficientų skaičiavimas

Keletas iš dažniausiai vartojamų paviršiaus šiurkštumo koeficientų [27] žymimi: R_a , R_v , R_p , R_t , R_q . Jie skaičiuojami pagal šias formules:

$$R_a = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i| \text{ [nm]}; \quad (3)$$

$$R_v = \min_i y_i \text{ [nm]}; \quad (4)$$

$$R_p = \max_i y_i \text{ [nm]}; \quad (5)$$

$$R_t = R_p + R_v \text{ [nm]}; \quad (6)$$

$$R_q = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i^2} \text{ [nm]}; \quad (7)$$

Dydis y_i [nm] nusako nuokrypį nuo linijos (ordinačių ašies atžvilgiu), atitinkančios visų nagrinėjamo paviršiaus aukščio verčių vidurkį m_{vid} [nm]. Algoritme m_{vid} apskaičiuojamas sumuojant visas profilometro užregistruotas i vertes ir dalinant jas iš patikrintų matricos **A** stulpelių skaičiaus. Koeficientai apskaičiuojami kiekvieną kartą kai paleidžiamas profilometras ir saugomi matricoje **R**, sudarytoje iš 6 eilučių ir tiek stulpelių, kiek kartų paviršius buvo analizuojamas (27 pav.):

5	H			
	I	II	III	IV
m_{vid} , nm	43.29	74.68	95.49	94.55
R_a , nm	5.58	13.42	20.09	28.17
R_v , nm	-10.71	-18.32	-26.51	-36.45
R_p , nm	26.29	33.68	68.49	77.55
R_t , nm	15.57	15.37	41.98	41.09
R_q , nm	7.68	15.52	24.83	31.90

27 pav. Išmatuotų paviršiaus šiurkštumo koeficientų lentelės pavyzdys

Čia lentelės viršutiniame, kairiajame kampe nurodomas matavimo parinkus atitinkamus dangos augimo parametrus numeris, indeksai I, II, III, IV nurodo sluoksnio, kuris buvo tiriamas, numerį H . Tarp kiekvieno iš šių matavimų nusodinamas dalelių kiekis h . Pagal gautuosius duomenis brėžiami atitinkamų **R** verčių grafikai.

4.7. Dangos auginimo parametrai ir rezultatų pateikimas

Rezultatai 5 skyriuje, dauguma atvejų, pateikiami lentelių, grafikų ir paveikslėlių pavidalais, kartu nurodant skaičiavimo parametrus. Čia aprašomi algoritme naudojami parametrai:

d – atstumas [nm], stulpelių atžvilgiu, tarp ant ruošiamo padėklo užnešamo pirmo dangos sluoksnio elementų. Pavyzdžiui: jei $d = 0$ nm arba $d = 1$ nm, tai visas padėklo paviršius padengiamas dangos struktūrai priklausančiais elementais. Jei $d = 10$ nm, tai kas dešimtas elementas (išskyrus tuos, kurių pozicijos matricoje atitinka stulpelius $j = 1$ ir $j = n$) užpildomas dvejetais;

k_m skaičiuoklėje „Matlab“ įterpiamas komandoje „ $t_m = \text{round}(k_m * (\text{randn}(1) * \text{sqrt}(\text{sigma}) + \text{miu}))$ “. Jis su t_m susietas tokia išraiška:

$$t_m = \left\| k_m \cdot X \sqrt{\sigma} + \mu \right\| \text{ [vnt.];} \quad (8)$$

čia X pagal normalųjį skirstinį iš intervalo (0;1) parenkamas realusis skaičius;

k_a – a vertę keičiantis parametras, su a susietas tokia išraiška:

$$a = k_a \cdot \mu \text{ [eV];} \quad (9)$$

k_b, k_c – analogiškai (9) formulei intervalų ribas b, c keičiantys parametrai;

$k_{\Delta a}, k_{\Delta b}, k_{\Delta c}$ – dangos auginimo metu, kai kuriais atvejais (imituojant nehomogeniškos fazinės struktūros augimą), ciklo viduje keičiami k_a, k_b, k_c . Parametrai $k_{\Delta a}, k_{\Delta b}, k_{\Delta c}$ nurodo kokiomis vertėmis pakinta k_a, k_b, k_c . Vykdomos tokios iteracijos:

$$k_a = k_a + k_{\Delta a} \text{ [eV]}; \quad (10)$$

$$k_b = k_b + k_{\Delta b} \text{ [eV]}; \quad (11)$$

$$k_c = k_c + k_{\Delta c} \text{ [eV]}; \quad (12)$$

Tokiu būdu keičiamos ribos: a, b, c . Tai alternatyva prisijungimo taisyklių ar dalelių srauto pasiskirstymo pagal energijas keitimui ciklo viduje. Pavyzdžiui, jei norime modifikuoti dalelių srauto pasiskirstymą pagal E tam, kad kistų implantuojamų dalelių kiekis, vietoje to keičiame ribos, virš kurios pradeda vykti implantacija, vertę, nusakomą skaičiumi c . Taip sumažinama skaičiavimų trukmė, o loginių patikrinimų kiekis algoritme padidėja nežymiai.

Keičiant koeficientus antrą kartą, vykdomos šios iteracijos:

$$k_a = k_a - k_{\Delta a} \text{ [eV]}; \quad (13)$$

$$k_b = k_b - k_{\Delta b} \text{ [eV]}; \quad (14)$$

$$k_c = k_c - k_{\Delta c} \text{ [eV]}. \quad (15)$$

k_E – parametras, nurodantis kaip pakinta su padėklu ar dangos struktūra sąveikąvusios dalelės energija jai desorbavus.

Dangos santykinis tankis apskaičiuojamas pagal formulę:

$$\rho = \frac{N}{m \cdot n} = \frac{N}{N_{max}}; \quad (16)$$

5. TYRIMŲ REZULTATAI IR JŲ APTARIMAS

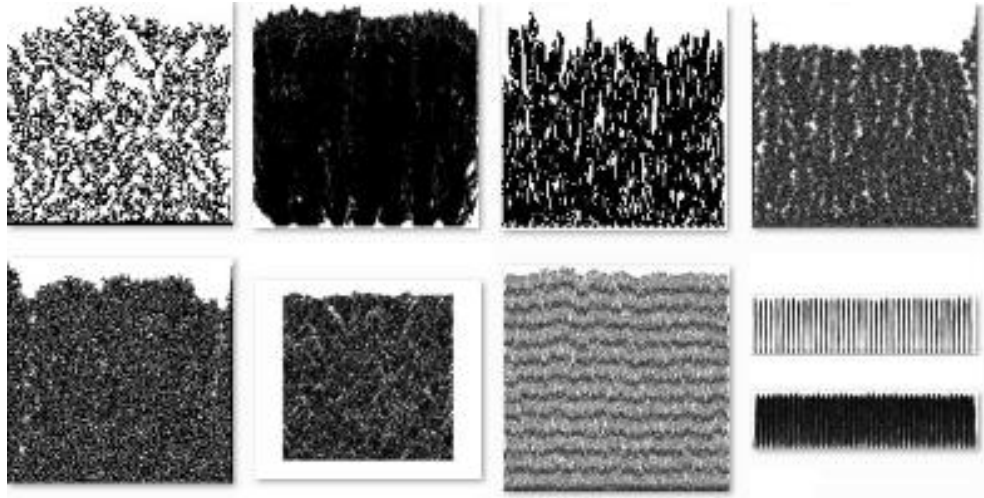
Šiame skyriuje atliekama sumodeliuotų dangų analizė, pateikiami 4.7 skyriuje įvardinti duomenys, padaromos išvados. Čia nepateiktų struktūrų pavyzdžiai ir jų palyginimas su kai kuriomis realiomis dangomis – pateikiami priede.

Visi pagal matricas \mathbf{A} sudaryti paveikslėliai turėtų būti suvokiami kaip dangų skerspjūvių vaizdai. Mąstelis čia pateikiamas tik kaip orientyras priimant, kad dangos užauginamos iš vienodo dydžio (1 nm skersmens) struktūrinių vienetų. Kadangi \mathbf{A} žymi dangai priklausančių, vienodo dydžio dalelių pozicijas viena kitos atžvilgiu, tai mąstelį, šiuo atveju, galima pasirinkti laisvai.

Nagrinėjant susidariusias dangas svarbu atkreipti dėmesį ne į tai, kokie jų išmatavimai (t.y. aukštis ar plotis išreikštas nm), o į susidarančių struktūrų formos kitimą, nulemiamą parametru k_a , k_b , k_c , k_m , P_{des} , d ir k_E .

5.1. Parametru įtaka dangos struktūrai

Keičiant k_a , k_b , k_c , k_m , P_{des} , d ir k_E gaunamos įvairios dangos:



28 pav. Sumodeliuotų dangų pavyzdžiai

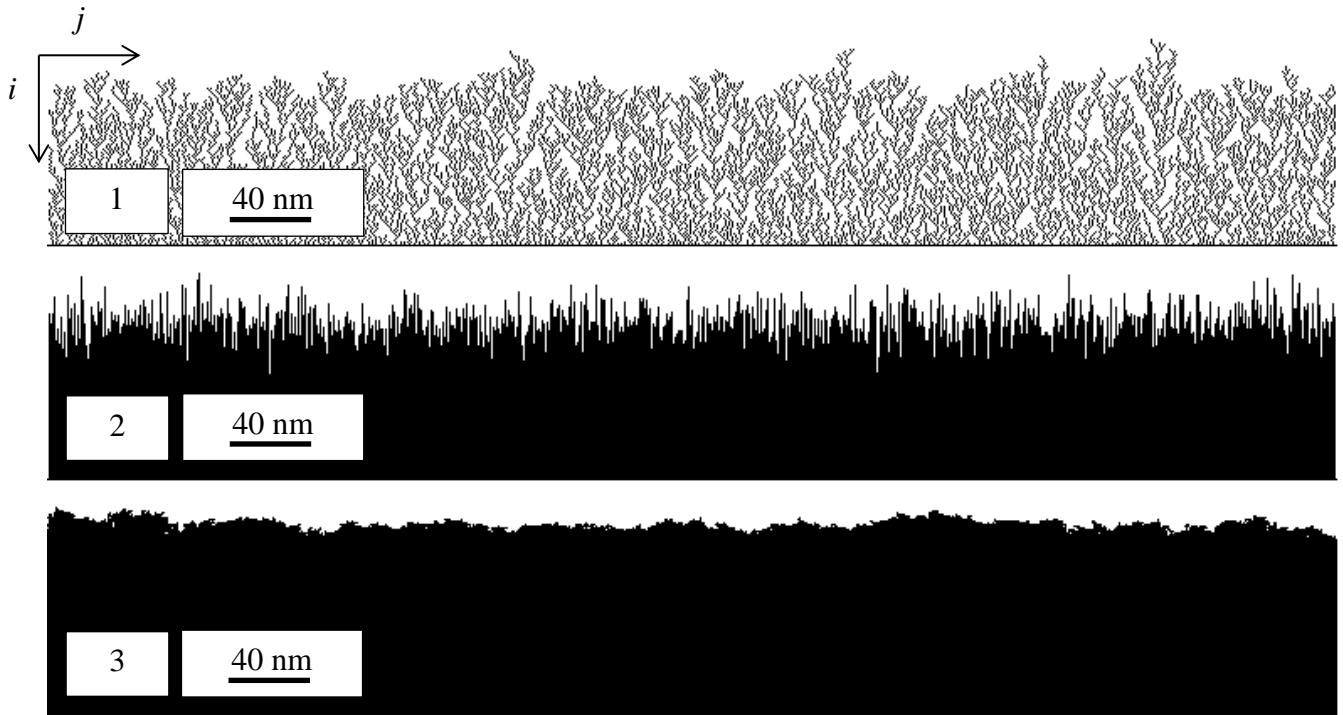
Šiame poskyryje detalai aprašoma pastarųjų parametru įtaka ir atliekami dydžių R_a , R_v , R_p , R_t , R_q skaičiavimai.

5.1.1. Dalelių skirstymas pagal energijas

Siekiant parodyti kokią įtaką dangos struktūrai daro koeficientai k_a , k_b , k_c . 29 pav. pateikiami matricų **A** pavyzdžiai kai keičiamos intervalų ribos a , b , c , kuriuos sudarant nevyksta nei migracija ($t_m = 0$), nei desorbcija ($P_{des} = 0$). Parametras d taip pat išlaikomas pastovus. 1 lent. surašyti šių dangų duomenys ir jų sudarymui parinkti parametrai:

1 lentelė. 29 pav. pavaizduotų dangų auginimo parametrai ir papildomi duomenys

Nr.	m	n	d , nm	k_a	k_b	k_c	k_m	P_{des} , %	N_{m5l} , vnt.	N_{prl} , vnt.	N_{imp} , vnt.	N , vnt.	ρ , sant.vnt.
1	128	768	1	1,5	1,5	1,6	0	0	18959	4	0	18963	0,193
2	128	768	1	0,1	0,2	1,6	0	0	0	70324	0	70324	0,715
3	128	768	1	0,1	0,1	0,8	0	0	0	23618	62501	86119	0,876



29 pav. k_a, k_b, k_c įtaka dangos struktūrai

Pirmuoju atveju gaunama šakota, mažiausio tankio danga. Taip atsitinka dėl to, kad dalelės sustoja iškart kai pasiekia prisijungimo zoną $\mathbf{B} > 0$ ir tampa struktūros dalimi, taigi joms nesuteikiama galimybė užpildyti gilesniuose sluoksniuose esančias tuščias zonas.

Antruoju atveju matoma struktūra, sudaryta iš įvairaus aukščio ir pločio kolonų. Mažiausias kolonos plotis – vienas matricos elementas (1 nm). Šiuo atveju dalelės taip pat prilimpa iškart, bet tik prie zonų $\mathbf{B} = 1$. Gilesniuose dangos sluoksniuose dalelių struktūra kompaktiška.

Auginant trečiąjį pavyzdį parinkti tokie parametrai, kad danga augtų dviem būdais: taip, kaip antruoju atveju, ir vykstant implantacijai. Gilesni dangos sluoksniai užpildomi kompaktiškai, paviršius taip pat pastebimai tankesnis nei 2 pavyzdyje.

Čia nepateikiamas variantas kai daugiausiai dalelių generuojama iš E intervalo – $[a;b)$, kadangi jis apibūdina išskirtinai migracijos procesą, prasidedantį zonose $\mathbf{B} = 1$, todėl, kai $k_m = 0$, gaunami antrajam atvejui identiški rezultatai.

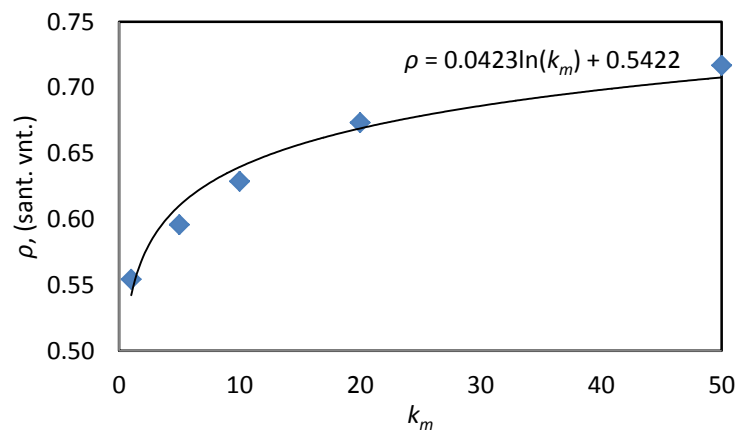
5.1.2. Migracijos trukmė

Migracija leidžia dalelėms patekti į sritis, kurios 29 pav. 1 atveju būtų nepasiekiamos, „užkimšti“ tarpus tarp koloninių struktūrų (29 pav. 2) ir kitaip daryti įtaką augančiai dangai. 2 lent. pateikiami duomenys, kai keičiamas migracijos trukmę t_m valdantis parametras k_m .

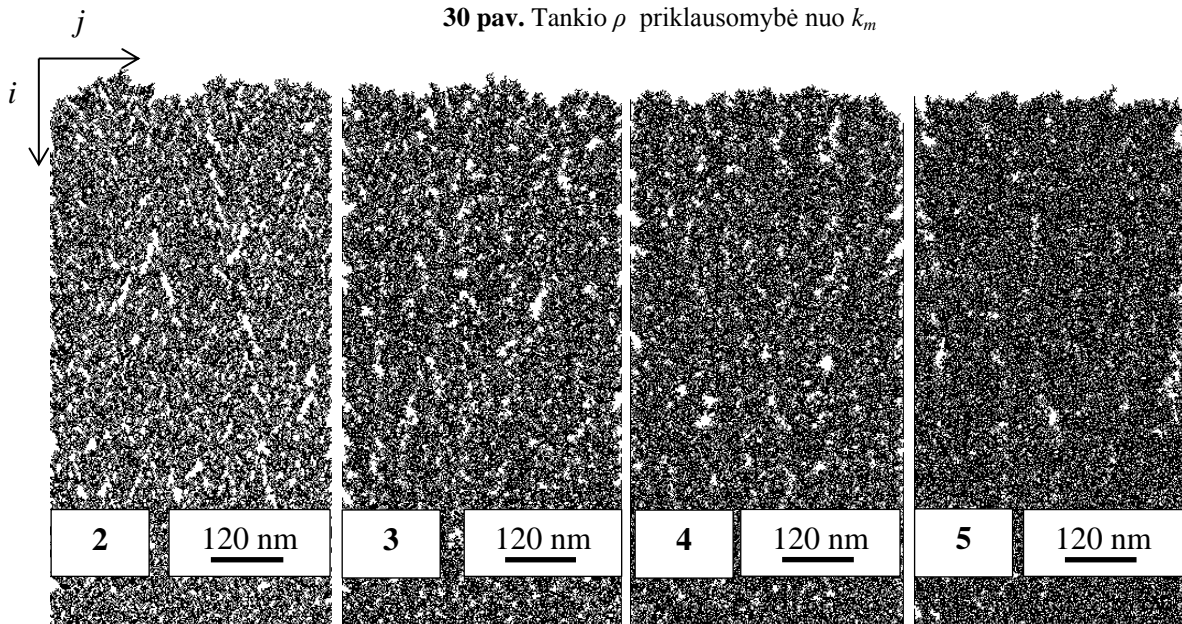
2 lentelė. Čia $P_{des} = 0.01\%$, $d = 1$ nm, $m = 512$, $n = 256$, $k_a = 0.6$, $k_b = 1.5$, $k_c = 1.6$

Nr.	ρ , sant. vnt.	k_m	N_{ml} , vnt.	N_{m51} , vnt.	N_{pr1} , vnt.	N_m , vnt.	N_{des} , vnt.	N , vnt.	N_{gen} , vnt.	N_{Δ} , vnt.
1	0.55	1	72460	202	12	72639	24	72651	73555	904
2	0.60	5	77997	210	16	78073	134	78089	79051	962
3	0.63	10	82374	256	15	82391	240	82408	83587	1179
4	0.67	20	88439	365	16	88239	565	88255	89719	1464
5	0.72	50	94634	679	17	93941	1375	93958	95940	1982

Daugiausiai dalelių šiuo atveju generuojama joms priskiriant E vertes, priklausančias intervalui $[a;b)$. Matyti, jog didinant k_m , didėja ir ρ . Ši priklausomybė pavaizduota 30 pav., o užaugintos dangos – 31 pav.:

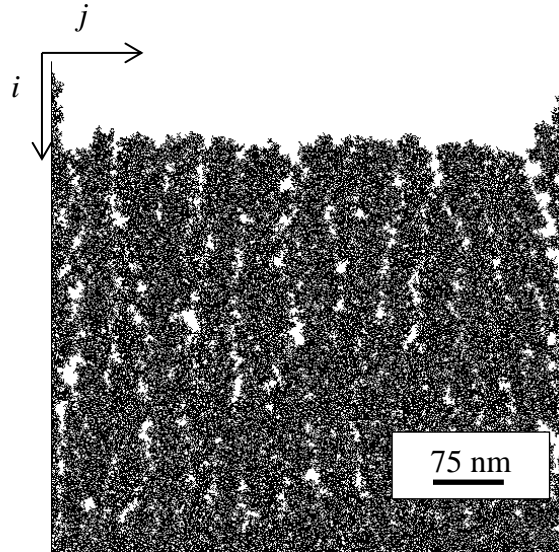


30 pav. Tankio ρ priklausomybė nuo k_m



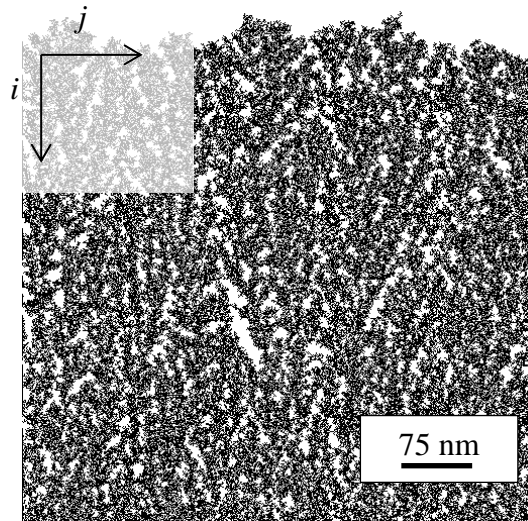
31 pav. Iš kairės į dešinę: $k_m = 5$, $k_m = 10$, $k_m = 20$, $k_m = 50$

Didinant k_m vertę pastebėta, jog matricos kraštuose danga pradeda augti sparčiau nei likusi dalis, todėl norint analizuoti ρ priklausomybes, kai $k_m > 50$, (16) formulė naudoti netinkama. Taip pat didėjant t_m , ilgėja ir dangos užauginimo trukmė. Taip yra todėl, kad kiekviename migracijos žingsnyje turi būti sugeneruojamas naujas atsitiktinis skaičius. 32 pav. pavaizduota danga, sumodeliuota parinkus $k_a = 1.5$:



32 pav. Danga, užauginta kai: $k_a = 1.5$, $k_b = 1.5$, $k_c = 1.6$, $k_m = 50$

Šiuo atveju pastebimas ne tik spartesnis dangos augimas A kraštuose, bet ir koloninių struktūrų formavimasis. Bandymas kartotas keletą kartų, tačiau gaunami vizualiai panašūs rezultatai. 29 pav. (1) naudojamas identiškas parametrų rinkinys, tačiau skiriasi migracijos parametrai k_m . Abiem atvejais $P_{des} < 1\%$. 33 pav. pavaizduota danga, užauginta parinkus $k_m = 10$:



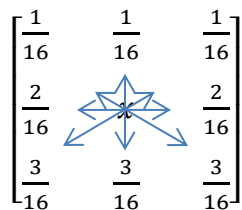
33 pav. Danga, užauginta kai: $k_a = 1.5$, $k_b = 1.5$, $k_c = 1.6$, $k_m = 10$

Matyti, jog jos struktūra yra šakotesnė nei 32 pav. atveju. Užauginamos dangos, mažinant k_m , panašėja į 29 pav. (1) atvejį. 3 lent. pateikiama daugiau šios tyrimo dalies rezultatų:

3 lentelė. Parametrų vertės: $m = 512$, $n = 256$, $P_{des} = 0.01\%$, $k_a = 1.5$, $k_b = 1.5$, $k_c = 1.6$

Nr.	ρ , sant. vnt.	k_m	N_{m51} , vnt.	N_{pr1} , vnt.	N_{imp} , vnt.	N_m , vnt.	N_{des} , vnt.	N_{pm} , vnt.	N , vnt.	N_{gen} , vnt.	N_{Δ} , vnt.
1	0.34	1	44699	15	1	44690	10	1	44706	45260	554
2	0.48	5	62402	11	2	62290	112	0	62303	63137	834
3	0.54	10	70519	7	3	70281	241	3	70291	71243	952
4	0.62	20	81326	16	2	80785	543	2	80803	82141	1338
5	0.63	30	83156	11	0	82412	744	0	82423	83849	1426

Taip pat buvo auginamos dangos, kai migracijos proceso pradžioje pirmųjų žingsnių skaičiui, kurio vertė lygi k_m , buvo suteiktos skirtingos migracijos tikimybės kaip, kad pavaizduota 34 pav.. Tokio tipo migracija buvo vykdoma tik tais atvejais, kai $E \in [b ; c) \cap \mathbf{A}(i + 1, j - 1) = 0 \cap \mathbf{A}(i + 1, j - 1) = 0 \cap \mathbf{A}(i + 1, j) = 2$.



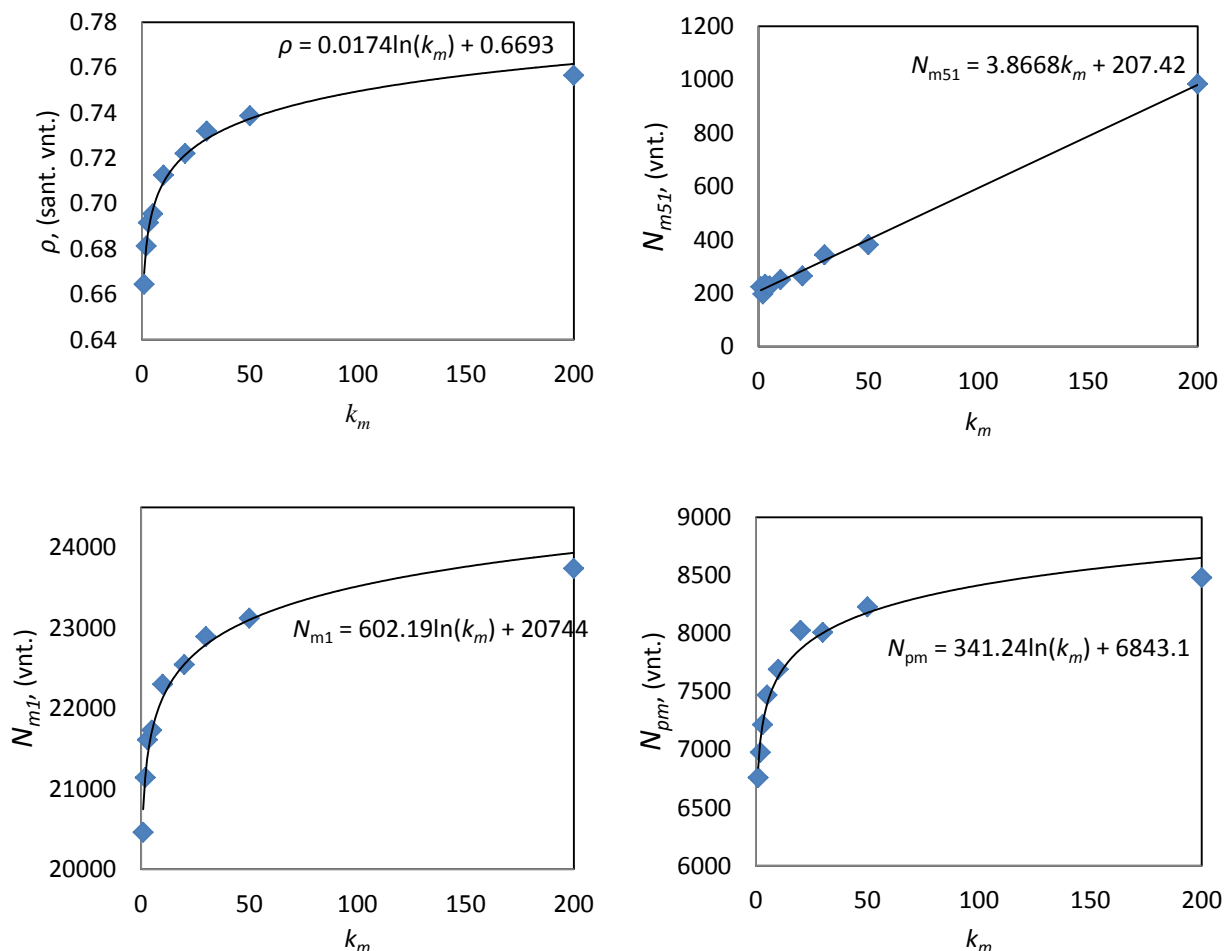
34 pav. Prioritetinės migracijos krypties pavyzdys

Čia matricos elemento vertė nurodo tikimybę P , kad dalelė „ x “ mėgins į jį patekti tol, kol nuo migracijos pradžios bus atlikta k_m bandymų keisti „ x “ poziciją. Kai bandymų migruoti skaičius tampa didesnis už k_m – dalelė juda pagal įprastinį, jau aprašytą, migracijos mechanizmą. Šio bandymo rezultatai pateikiami 4 lent.:

4 lentelė. Prioritetinė migracijos kryptis. Parametrų vertės: $m = 512$, $n = 256$, $P_{des} = 0.01\%$, $k_a = 0.6$, $k_b = 0.9$, $k_c = 1.5$

Nr.	ρ , sant. vnt.	k_m	N_{m1} , vnt.	N_{m51} , vnt.	N_{pr1} , vnt.	N_{imp} , vnt.	N_m , vnt.	N_{des} , vnt.	N_{pm} , vnt.	N , vnt.	N_{gen} , vnt.	N_{Δ} , vnt.
1	0.66	1	20458	224	59632	18	27432	9	6759	87089	88122	1033
2	0.68	2	21139	197	60990	16	28293	21	6977	89299	90360	1061
3	0.69	3	21608	234	61600	19	29030	27	7215	90649	91782	1133
4	0.70	5	21729	227	61753	24	29382	44	7470	91159	92221	1062
5	0.71	10	22300	251	63234	16	30151	92	7692	93401	94532	1131
6	0.72	20	22545	265	64006	17	30637	200	8027	94660	95879	1219
7	0.73	30	22892	344	64974	22	30948	298	8010	95944	97199	1255
8	0.74	50	23122	382	65499	22	31313	420	8229	96834	98286	1452
9	0.76	200	23740	984	67747	19	31406	1799	8481	99172	101410	2238

Pagal šiuos duomenis nubrėžti grafikai:



35 pav. 4 lent. duomenų grafikai

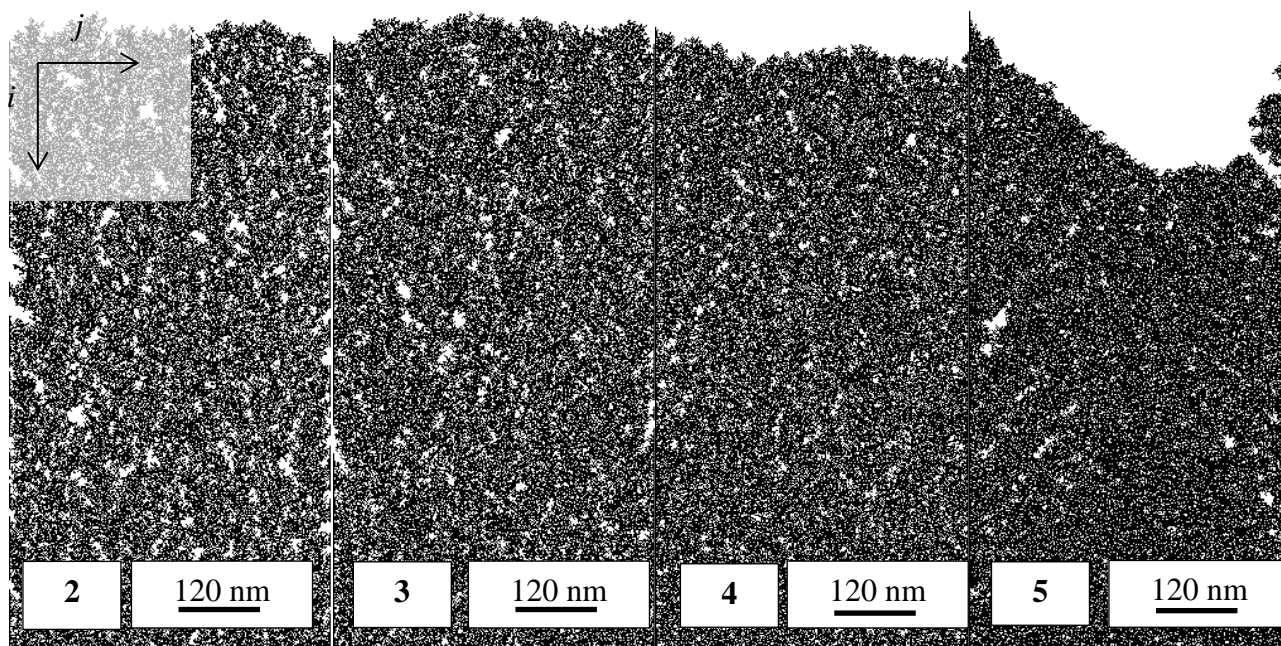
Palyginus šiuos duomenis su kitais papildomų bandymų rezultatais, paaiškėjo, jog aprašytoji prioritentinė migracijos kryptis didelės įtakos dangos struktūrai nedaro (išskyrus tuos atvejus, kai $k_m > 50$) – tankis ρ padidėja maždaug 1%, tačiau nyksta vieno elemento (atitinkamai – 1 nm) storio stulpelių augimas, pavaizduotas 29 pav. nr. 2 (jų susidaro mažiau) ir danga padėklo kraštuose nebeauga taip greitai kaip paprastosios migracijos atveju. Visais tolimesniuose skyriuose aprašytais atvejais vykdoma tik paprastoji (be prioritetinės krypties) migracija.

5.1.3. Desorbcijos tikimybė ir padėklo struktūra

Atlikus bandymus su įvairiomis d ir P_{des} vertėmis pastebėta, jog jų įtaka dangos struktūrai ne mažesnė nei migracijos trukmės t_m . Toliau pateikiami dangų pavyzdžiai, kai kuriais atvejais papildomai nurodant apskaičiuotas jų paviršiaus šiurkštumo koeficientų vertes, atvaizduojant desorbcijos zonų matricas \mathbf{K}_{des} .

5 lentelė. Parametrai: $k_m = 10$, $m = 512$, $n = 256$, $k_a = 0.6$, $k_b = 1.5$, $k_c = 1.6$

Nr.	ρ , sant. vnt.	P_{des} , %	N_{m1} , vnt.	N_{m51} , vnt.	N_{pr1} , vnt.	N_m , vnt.	N_{des} , vnt.	N , vnt.	N_{gen} , vnt.	N_{Δ} , vnt.
1	0.63	1	82369	279	9	82408	240	82419	83582	1163
2	0.63	10	84543	1060	7	82975	2629	82983	85783	2800
3	0.68	100	111016	10682	20	88962	32737	88983	112668	23685
4	0.70	200	144051	25639	25	91441	78251	91468	146084	54616
5	-	500	284090	124975	48	85235	323833	85287	288134	202847



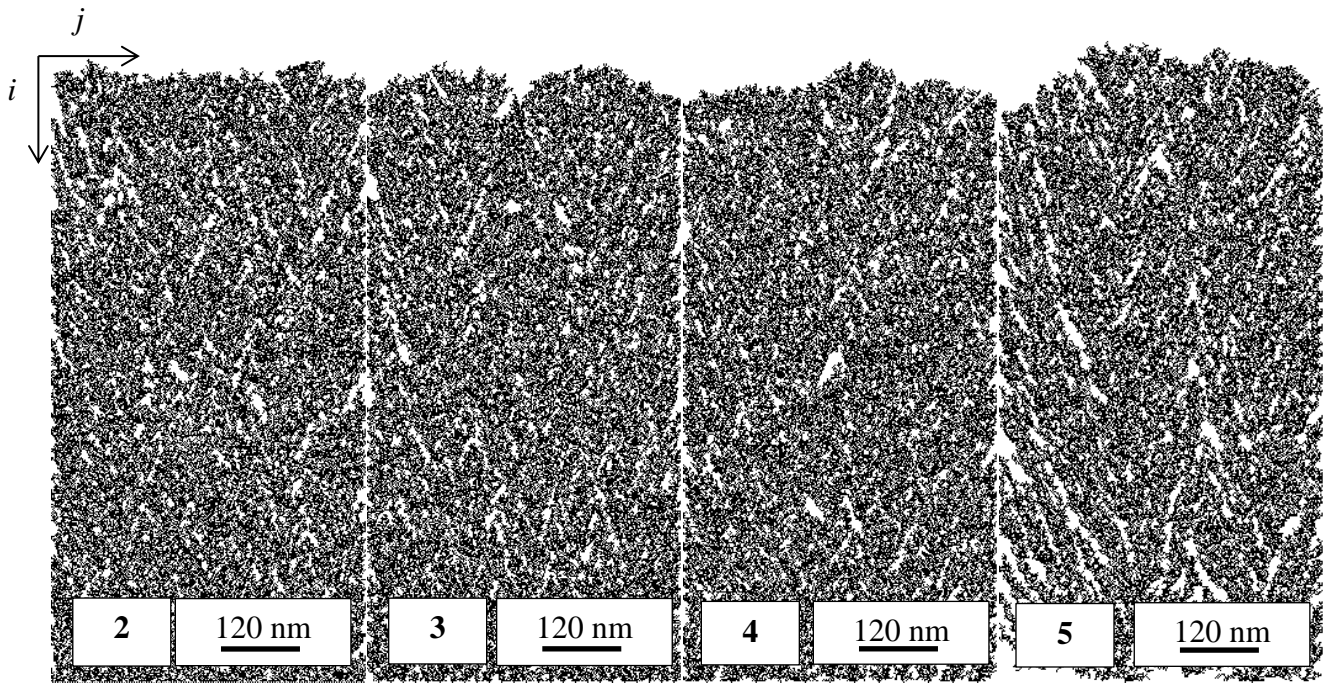
36 pav. 5 lent. pateiktus duomenis atitinkančios dangos. Iš kairės į dešinę, atitinkamai: $P_{des} = 0.1$ %; 1%; 2%; 5%

Pažvelgus į dangą, užaugintą kai $P_{des} = 5\%$, matyti, kad dangos kraštai auga sparčiau nei likusi dalis. Atlikus papildomus bandymus auginant dangą „|_” formos inde (padėkle), kurio visi kraštai lygūs, pastebėta, kad kai P_{des} vertė didėja – vis daugiau dalelių nusėda ant jo sienelių. Ant kiekvieno krašto auga į puslankį panašią formą turinčios struktūros.

6 lent. pateikiami rezultatai, kai padėklo forma parenkama plokščia ir keičiamas parametras d :

6 lentelė. Parametrai: $k_m = 1$, $P_{des} = 1\%$, $m = 512$, $n = 256$, $k_a = 0.6$, $k_b = 1.5$, $k_c = 1.6$

Nr.	ρ , sant. vnt.	d , nm	N_{m1} , vnt.	N_{m51} , vnt.	N_{pr1} , vnt.	N_m , vnt.	N_{des} , vnt.	N , vnt.	N_{gen} , vnt.	N_{Δ} , vnt.
1	0.56	1	74704	854	20	73027	2531	73047	75805	2758
2	0.56	2	75249	1031	15	73677	2832	73693	76585	2892
3	0.56	10	74764	1195	10	73356	3315	73366	76540	3174
4	0.55	20	73643	1247	11	72272	3964	72285	76052	3767
5	0.51	100	67829	1831	13	67285	8880	67300	75363	8063



37 pav. Iš kairės į dešinę: $d = 2$ nm; 10 nm; 20 nm; 100 nm. Visų šių matricių matmenys: $m = 512$, $n = 256$

2	H						
	I	II	III	IV	V	VI	VII
m_{vid} , nm	12.66	18.06	16.37	11.11	16.73	22.46	14.02
R_a , nm	3.12	3.49	4.61	4.00	4.59	5.51	3.39
R_v , nm	-11.34	-14.94	-14.63	-15.89	-18.27	-17.54	-10.98
R_p , nm	10.66	16.06	14.37	9.11	14.73	20.46	12.02
R_t , nm	-0.68	1.12	-0.26	-6.78	-3.54	2.92	1.04
R_q , nm	3.87	4.89	5.63	5.15	5.73	7.23	4.54

7 lentelė. Dangos nr. 2 sluoksnių paviršių apibūdinantys koeficientai, čia $h = 10000$ vnt.

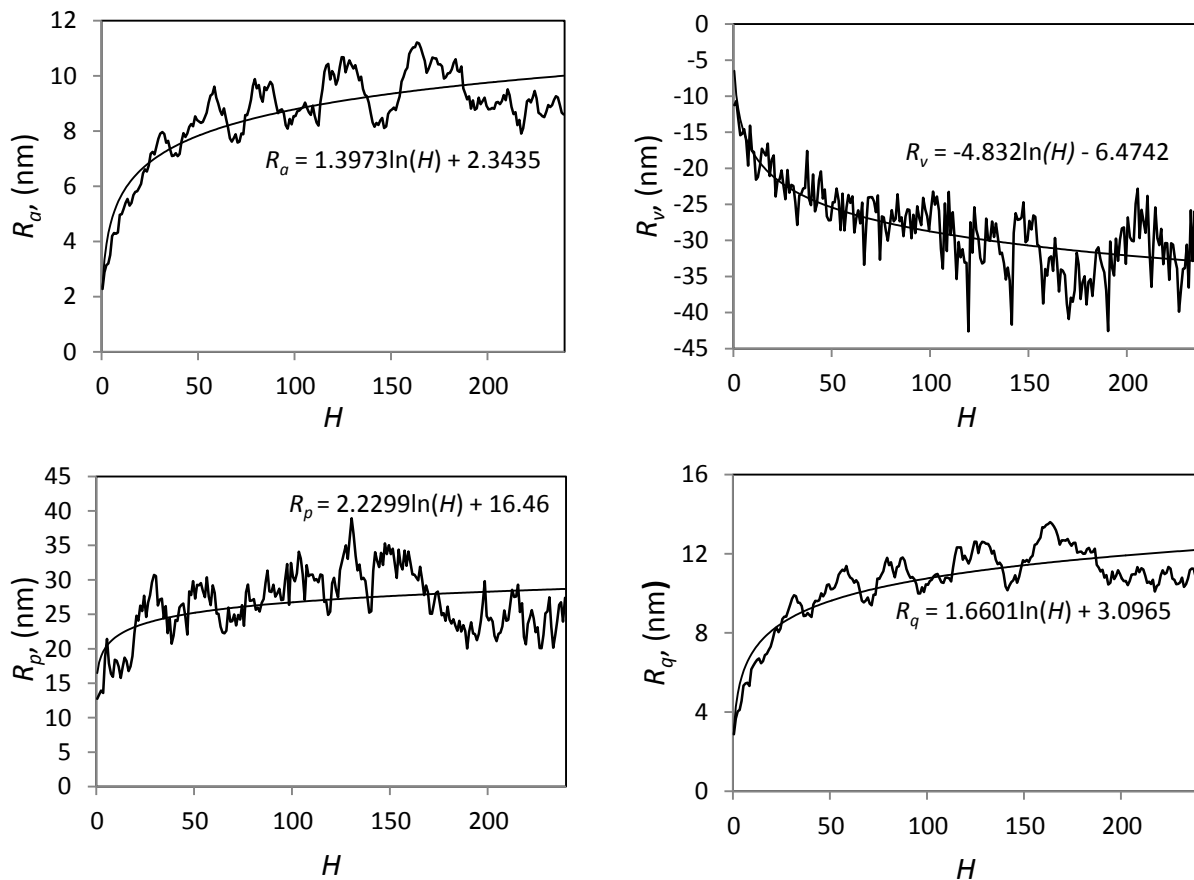
5	H					
	I	II	III	IV	V	VI
m_{vid} , nm	33.70	29.10	18.87	20.54	25.12	22.10
R_a , nm	16.98	12.91	10.20	9.54	9.50	11.21
R_v , nm	-84.30	-48.90	-37.13	-40.46	-44.88	-42.90
R_p , nm	31.70	27.10	16.87	18.54	23.12	20.10
R_t , nm	-52.61	-21.80	-20.25	-21.93	-21.77	-22.79
R_q , nm	23.55	16.64	12.65	12.41	12.91	14.21

8 lentelė. Dangos nr. 5 paviršių apibūdinantys koeficientai, čia $h = 10000$ vnt.

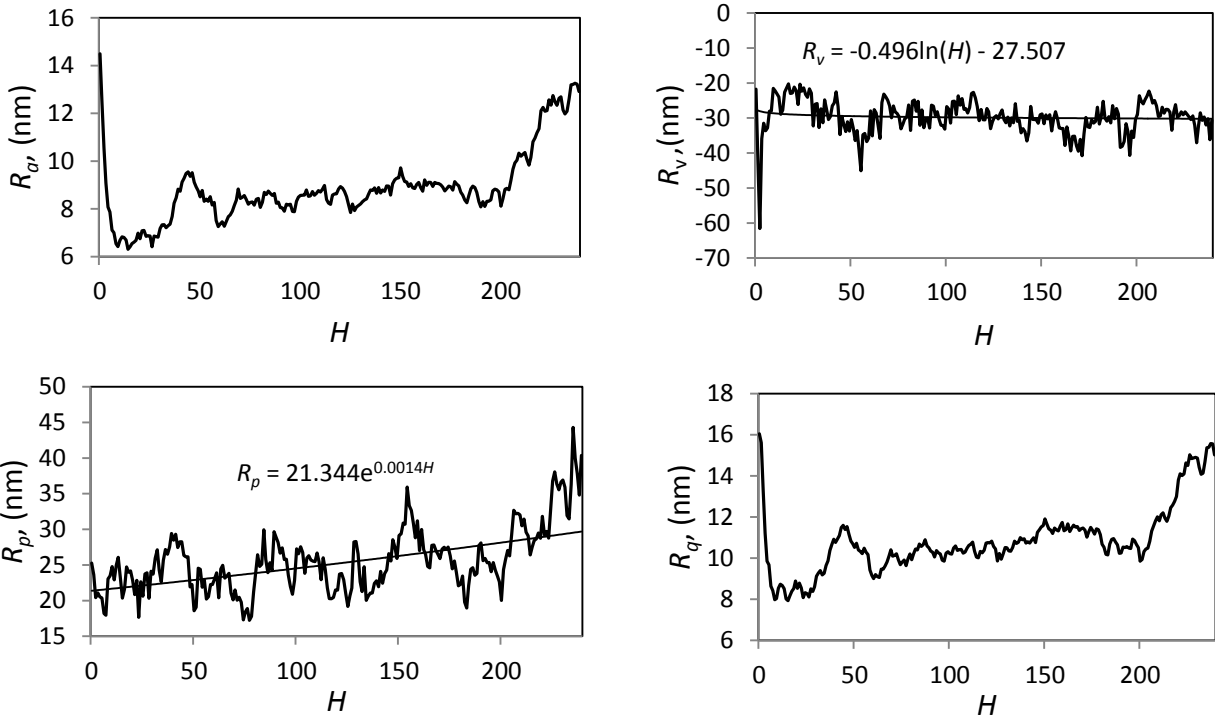
Palyginus 7 ir 8 lent. duomenis, matyti, kad kuo didesnis d , tuo šiurkštesnė užauga danga, tačiau duomenų imtys labai mažos ir sunku įžvelgti kitokius dėšningumus, todėl nuspręsta auginimą vykdyti didesnių matmenų matricose. Bandymų rezultatai pateikti 9 lent.:

9 lentelė. Parametrai: $k_m = 1, P_{des} = 1 \%, m = 4096, n = 1024, k_a = 0.60, k_b = 1.50, k_c = 1.60$

Nr.	ρ , sant. vnt.	d , nm	N_{ml} , vnt.	N_{m5l} , vnt.	N_{pr1} , vnt.	N_m , vnt.	N_{des} , vnt.	N , vnt.	N_{gen} , vnt.	N_{Δ} , vnt.
1	0.57	1	2463384	32036	465	2409577	85866	2410062	2476902	66840
2	0.57	10	2453014	32312	433	2400678	87576	2401143	2469321	68178
3	0.57	100	2450514	34792	451	2400689	104946	2401171	2484408	83237



38 pav. Dangos nr.1 (9) sluoksnių paviršiaus šiurkštumo koeficientai, čia $h = 10000$ vnt.

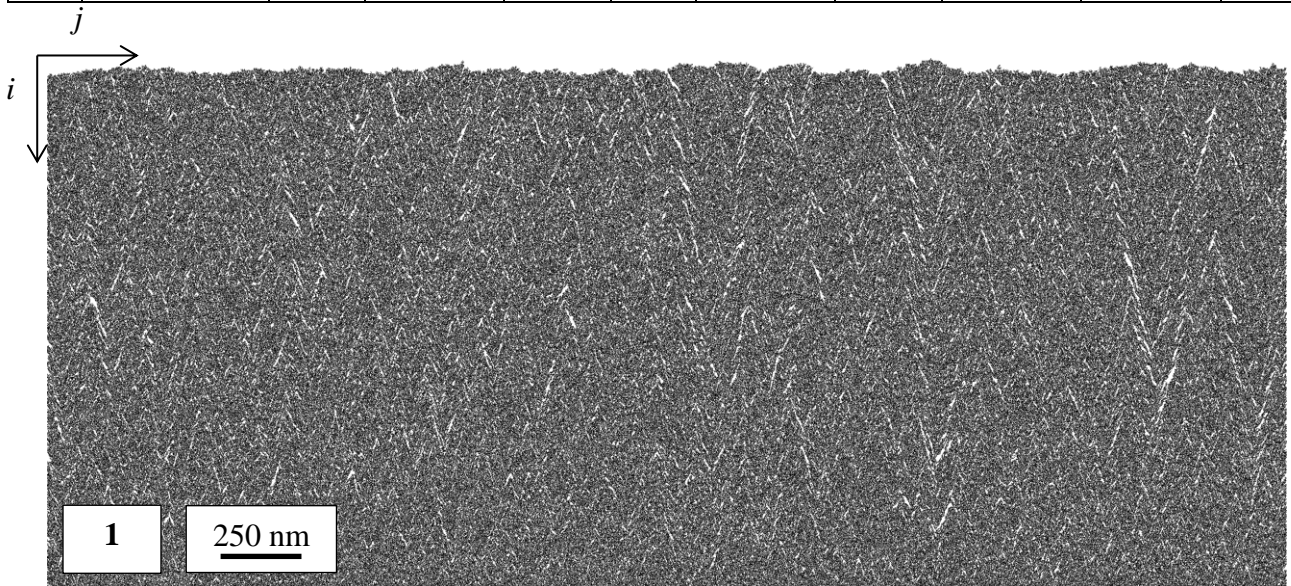


39 pav. Dangos nr. 3 (9 lent.) sluoksnių paviršiaus šiurkštumo koeficientai, $h = 10000$ vnt.

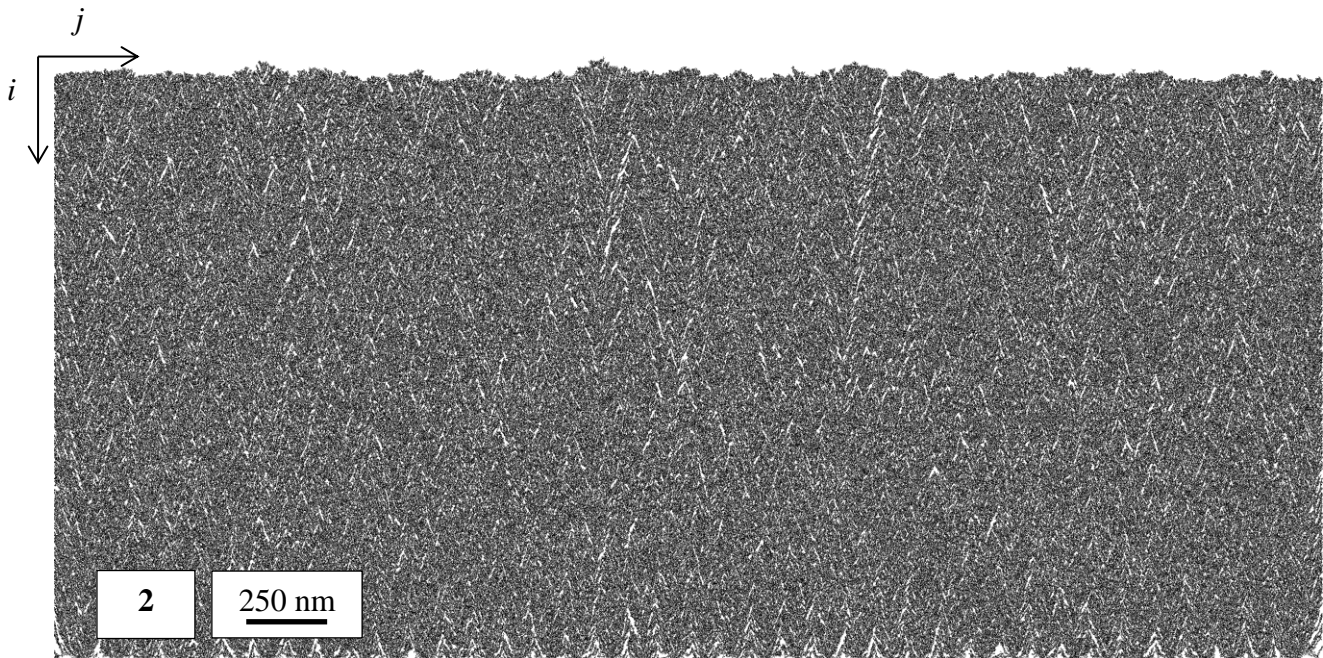
Taip pat buvo modeliuojamos dangos, kurių $m < n$ (10 lent.).

10 lentelė. Parametrai: $k_m = 1$, $P_{des} = 1\%$, $m = 2048$, $n = 4096$, $k_a = 0.60$, $k_b = 1.50$, $k_c = 1.60$

Nr.	ρ , sant. vnt.	d , nm	N_{m1} , vnt.	N_{m51} , vnt.	N_{pr1} , vnt.	N_m , vnt.	N_{des} , vnt.	N , vnt.	N_{gen} , vnt.	N_{Δ} , vnt.
1	0.56	1	4712566	11639	874	4722635	1616	4723571	4728105	4534
2	0.55	100	4625865	24691	863	4648982	75313	4649905	4714897	64992

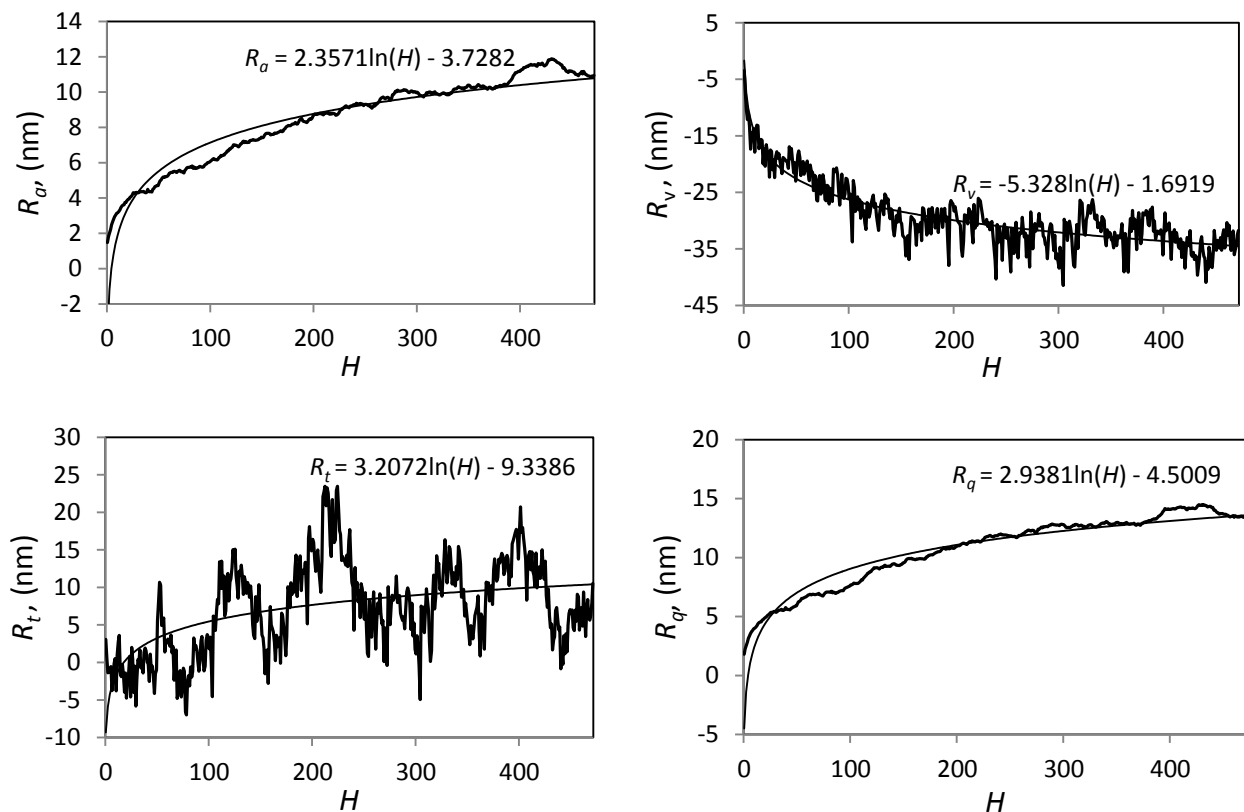


40 pav. Pirmosios dangos matricos A vaizdas (10 lent.)

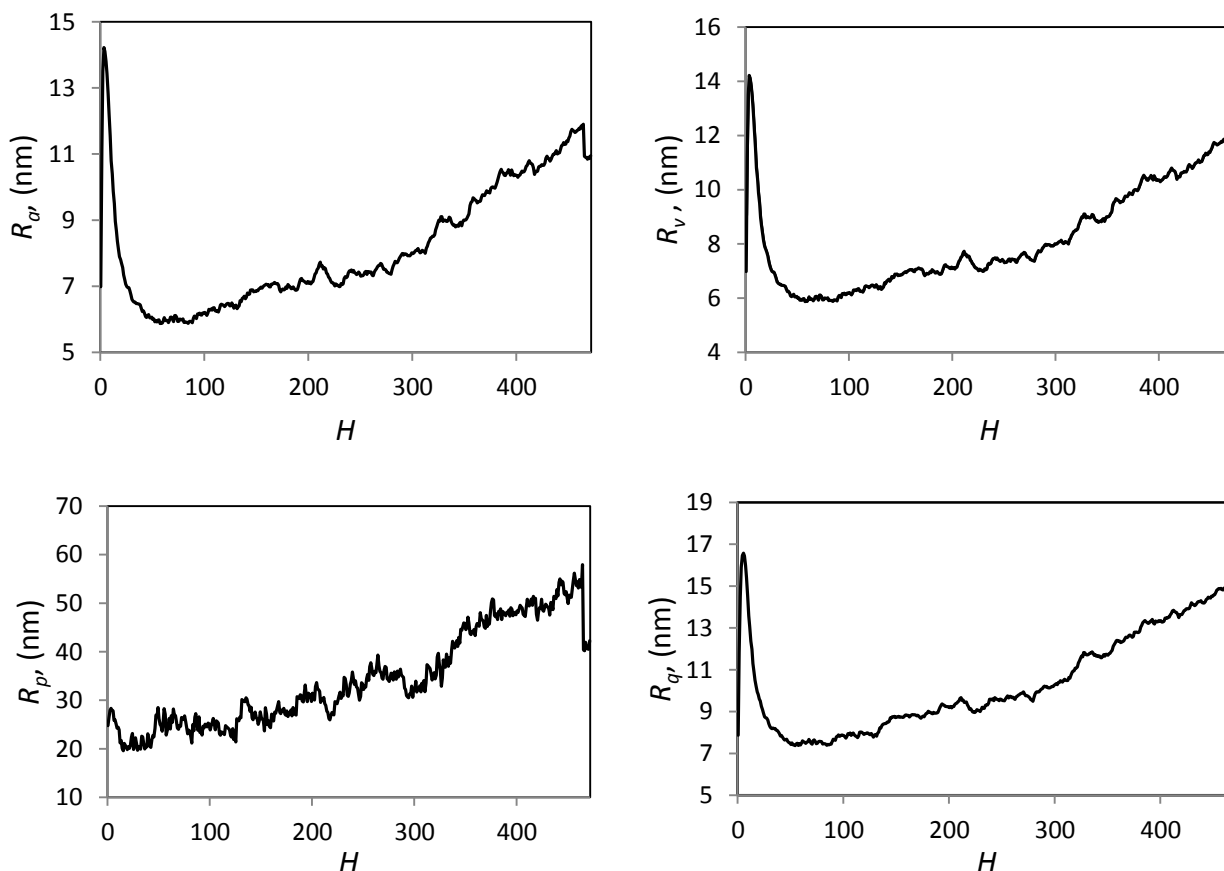


41 pav. Antrosios dangos matricos A vaizdas (10 lent.)

Esminiai skirtumai matomi dangos apačioje, prie pat padėklo kuris sudarytas vadovaujantis 25 pav. (a) taisykle – pirmuoju atveju ir 25 pav. (c) – antruoju atveju. 42 pav. ir 43 pav. paveikslėliuose pateikiami, atitinkamai, pirmosios ir antrosios dangos sluoksnių paviršiaus tyrimo rezultatai:



42 pav. Dangos, pavaizduotos 40 pav. sluoksnių paviršiaus šurkštumo koeficientai. Čia $h = 10000$ vnt.



43 pav. Dangos pavaizduotos 41 pav. sluoksnių paviršiaus šiurkštumo koeficientai. $h = 10000$ vnt.

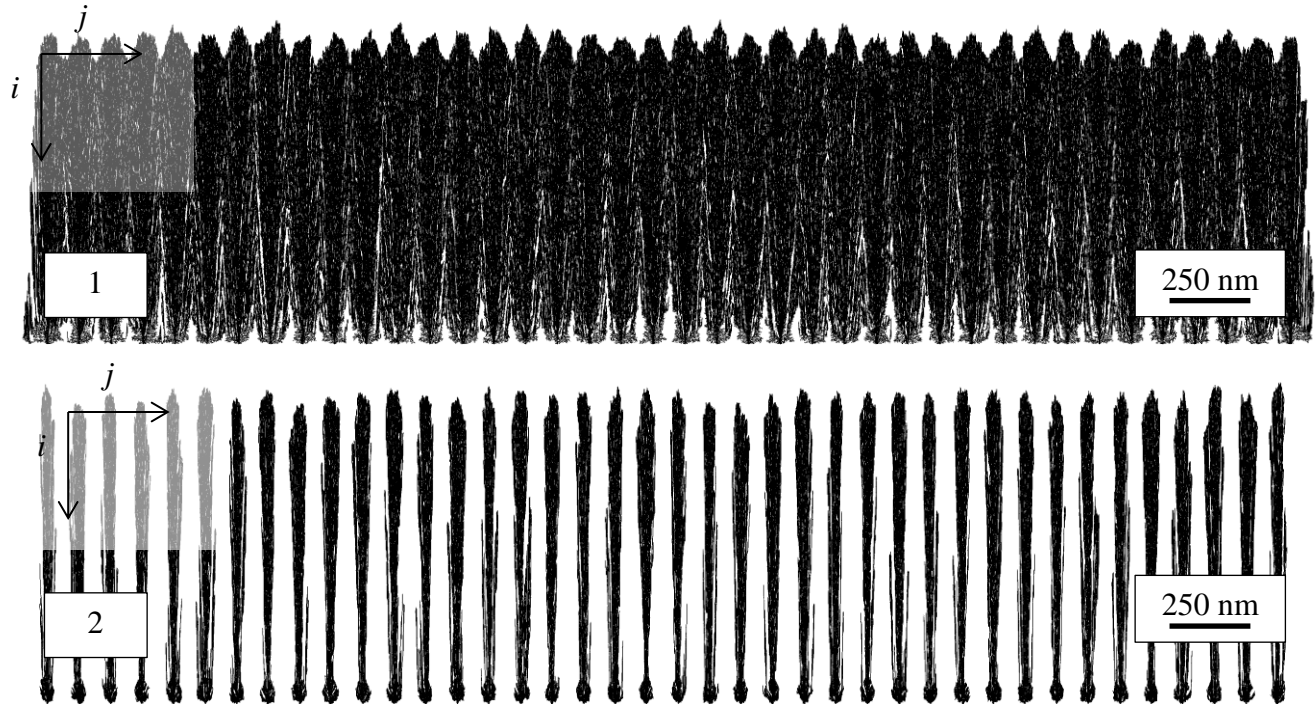
43 pav. matyti, kad kai sluoksnio numerio H vertė artima 440, visi koeficientai staiga sumažėja. Taip įvyko dėl to, kad tarp dviejų profilometro matavimo ciklų buvo uždenyta sąlyginai daug tuščių „\“ ir „/“ formos ertmių, 41 pav. matomų baltos spalvos tarpelių, susiformavusių prie pat dangos paviršiaus.

11 lent. pateikiami rezultatai bandymo, kai danga buvo auginama parinkus dvi skirtingas k_E vertes taip, kad: pirmuoju atveju dalelės po desorbcijos turėtų tokią E vertę kaip ir anksčiau aprašytų bandymų metu, o antruoju – kad E po sąveikos su dangos ar padėklo struktūra sumažėtų nežymiai (1%) ir ne visos dalelės galėtų adsorbuotis prie atitinkamų **B** zonų, taip imituojant artimą tampriajai sąveiką.

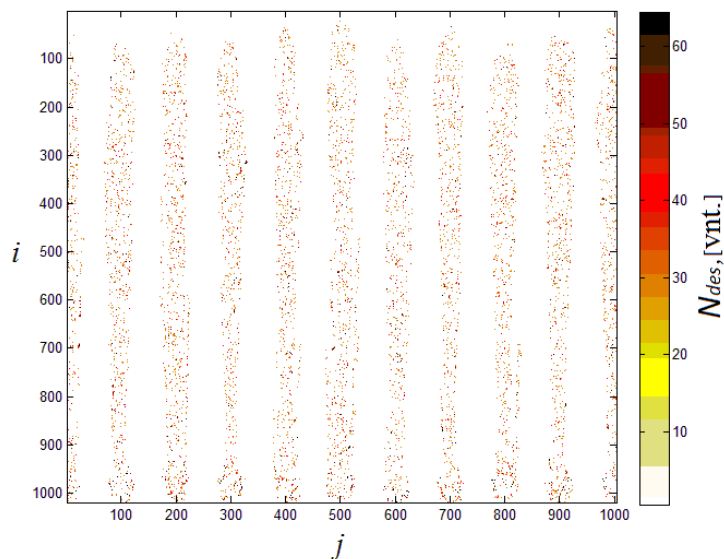
11 lentelė. Parametrai: $d = 100$ nm; $k_m = 1$, $P_{des} = 50\%$, $m = 1024$, $n = 4096$, $k_a = 0.3$, $k_b = 0.5$, $k_c = 1.3$

Nr.	ρ , sant. vnt.	N_{m51} , vnt.	N_{pr1} , vnt.	N_{imp} , vnt.	N_m , vnt.	N_{des} , vnt.	N_{pm} , vnt.	N , vnt.	N_{gen} , vnt.	N_{Δ} , vnt.
1	0.77	2356400	3000534	58527	160687	3872436	401788	3219748	4222640	1002892
2	0.66	6	2702347	43353	21490	3015895	219063	2767190	4283535	1516345

Antruoju atveju dangos auginimas vyksta žymiai lėčiau, nes dalelės daug kartų atšoka nuo dangos ar padėklo paviršiaus, desorbuojasi žymiai dažniau nei kitais atvejais ($P_{des} = 50\%$). Šio bandymo rezultatai suteikia informacijos apie algoritmo desorbcijos mechanizmų veikimą ir leidžia daryti prielaidą, jog erdmėse tarp kolonų, realiu atveju, slėgis padidėja.

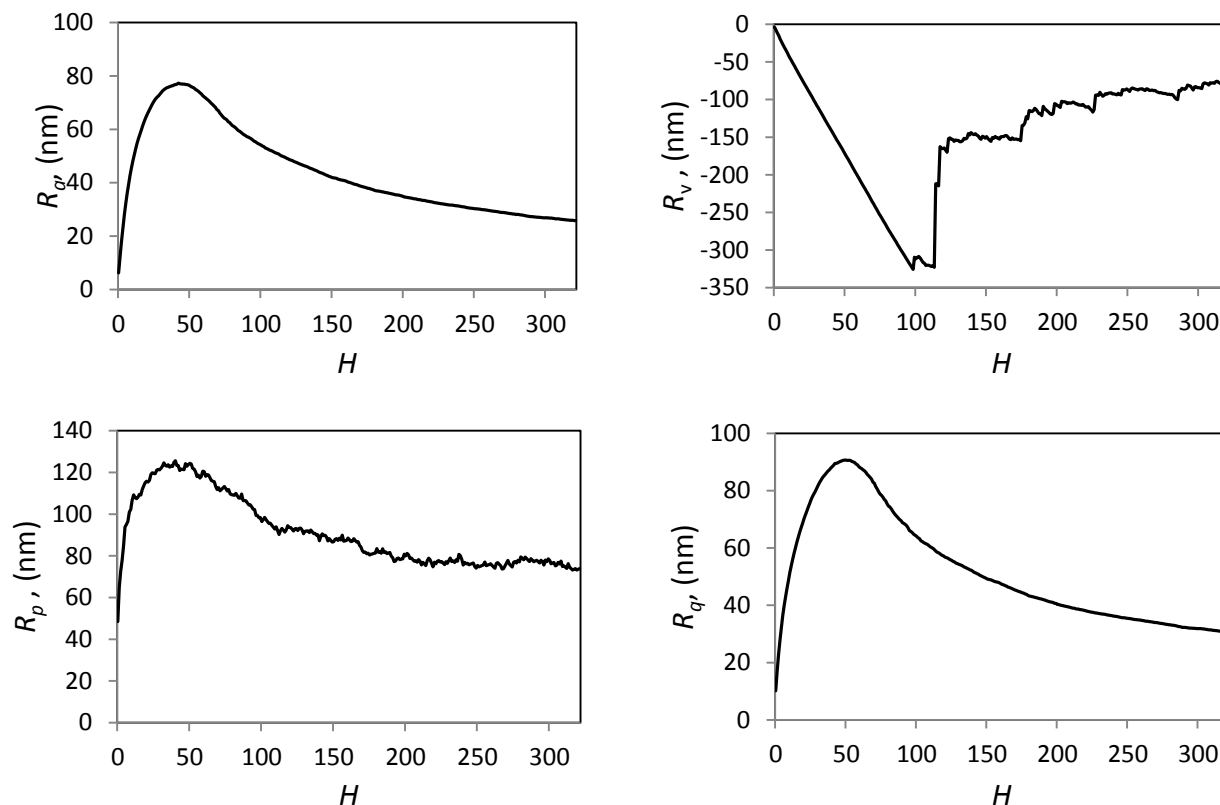


44 pav. Dangos, atitinkančios 11 lent. pateiktus duomenis. Matmenys, abiem atvejais: $m = 1024$, $n = 4096$
 Dalis \mathbf{K}_{des} matricos, gautos užauginus 44 pav. dangą nr. 2, pavaizduota 45 pav.:



45 pav. Desorbcijos nuo dangos struktūros zonų matrica.
 Čia atspalvis žymi desorbcijų skaičių, įvykusių juo pažymėtoje vietoje.

46 pav. pavaizduoti 44 pav. struktūrų analizės rezultatai:

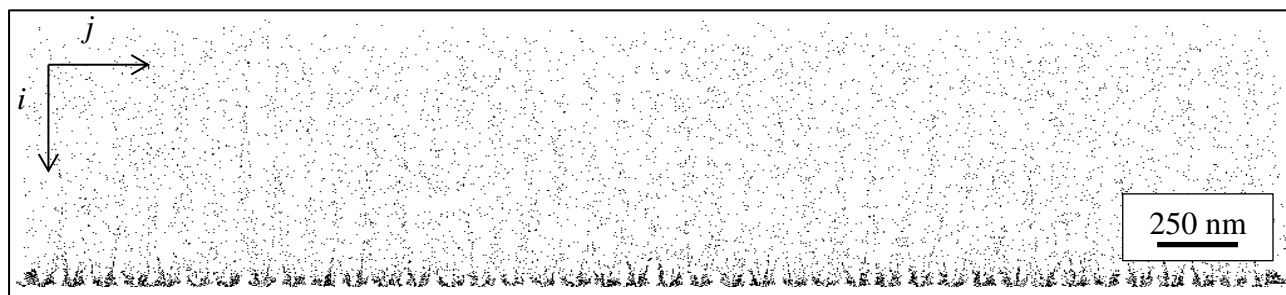


46 pav. Šiurkštumo koeficientai. 11 lent., danga nr. 1. Čia $h = 10000$ vnt.

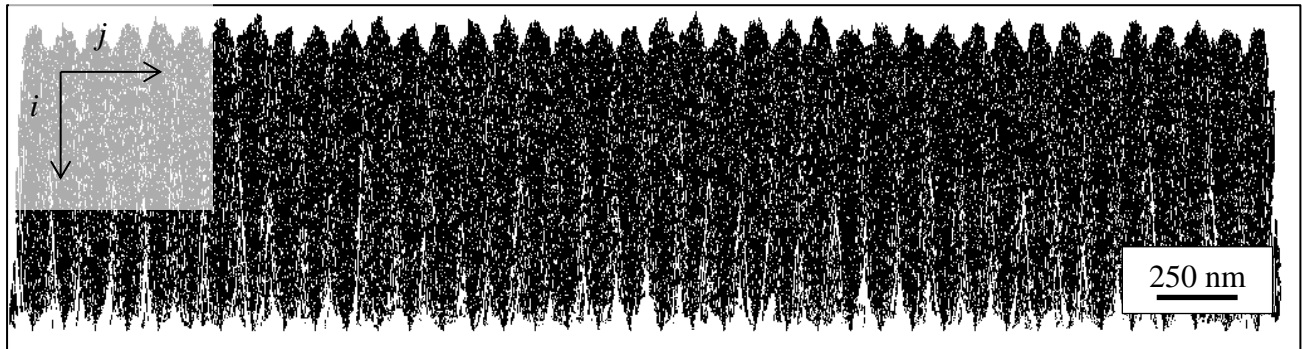
Toks šių kreivių pavidalas gaunamas dėl to, kad pradžioje kolonos auga pavieniui. Nusėdant vis didesniam dalelių kiekiui kolonos plėtėja, jų viršunės palaipsniui susiliečia.

5.2. Dangų faziniai žemėlapiai

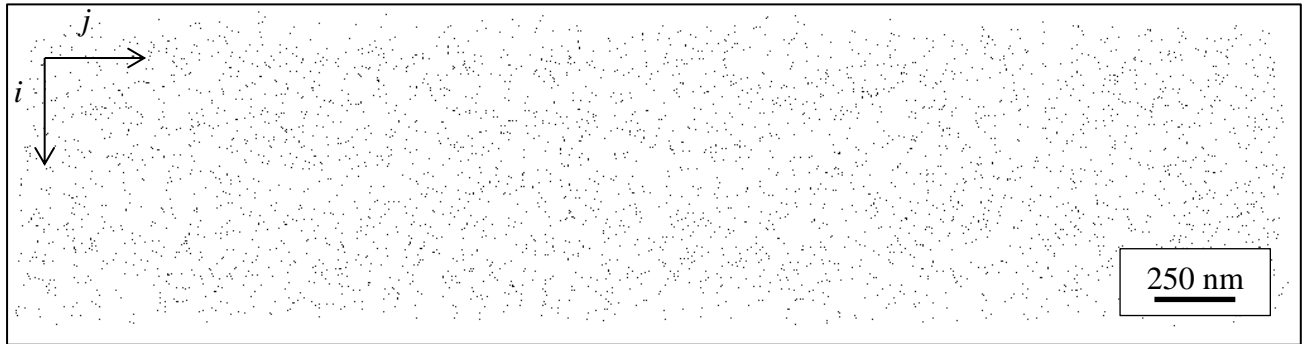
Tariama, kad dalelės N_{pr1} , N_{imp} , ir N_m dangoje sudaro skirtingas fazes. Jų pozicijos registruojamos matricose \mathbf{K}_m , \mathbf{K}_{pr1} ir \mathbf{K}_{imp} . Šiame darbe grafiškai atvaizduotos \mathbf{K}_m , \mathbf{K}_{pr1} ir \mathbf{K}_{imp} vadinamos faziniais žemėlapiais. Toliau pateikiami tokių žemėlapių pavyzdžiai jų detaliai neanalizuojant.



47 pav. \mathbf{K}_m priklausanti dangai, apibūdintai 11 lent. nr. 1. Matmenys: $m = 1024$, $n = 4096$

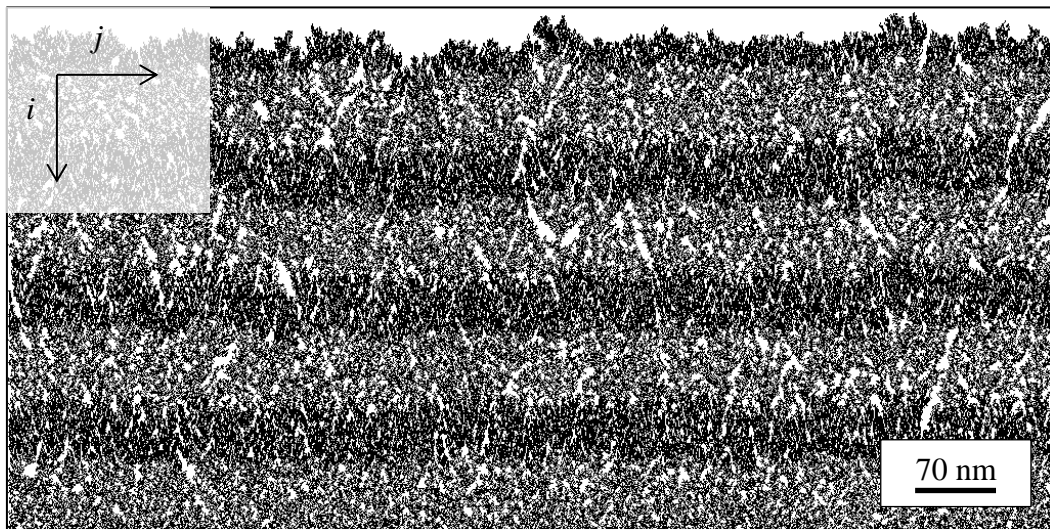


48 pav. \mathbf{K}_{pr1} priklausanti dangai, apibūdintai 11 lent. nr. 1. Matmenys: $m = 1024$, $n = 4096$



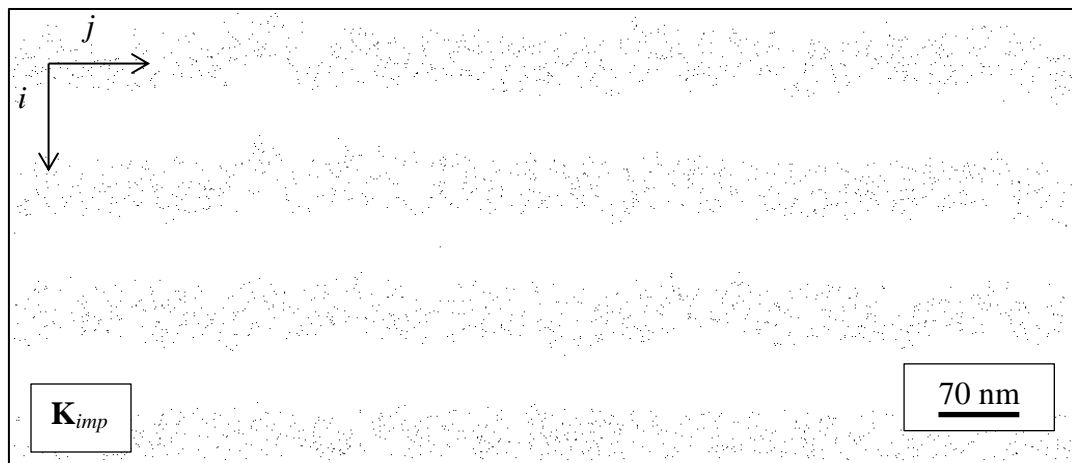
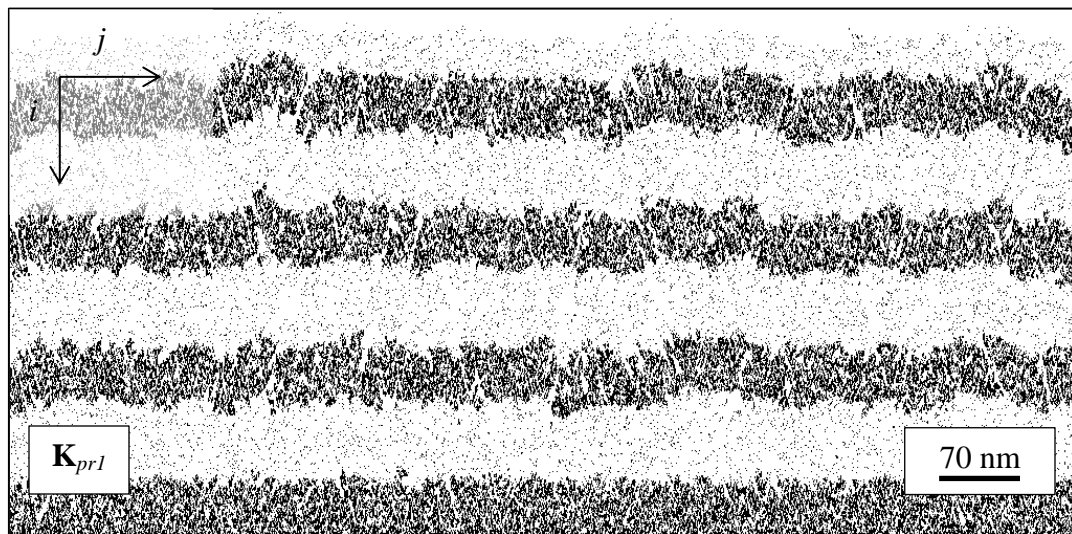
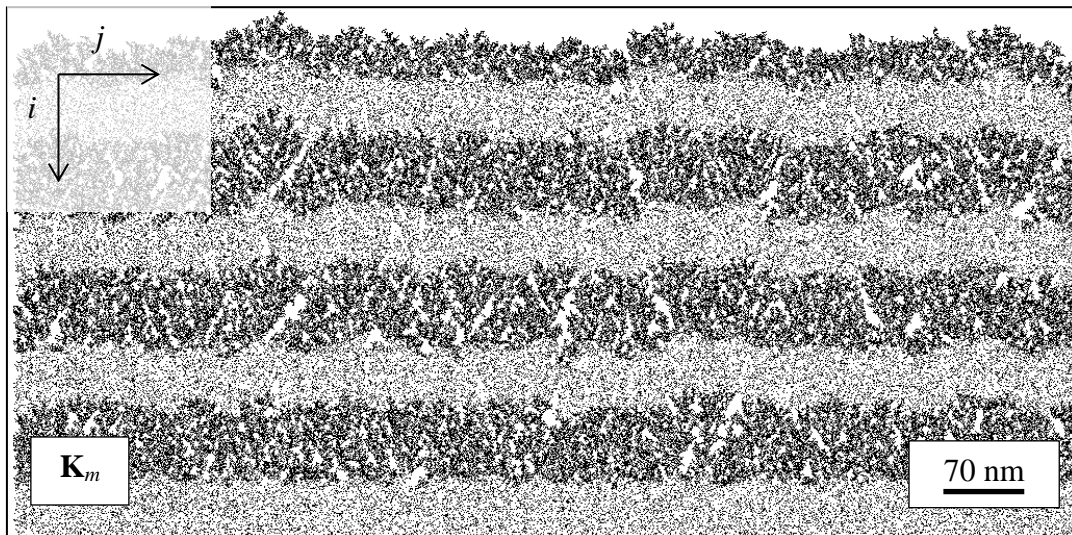
49 pav. \mathbf{K}_{imp} priklausanti dangai, apibūdintai 11 lent. nr. 1. Matmenys: $m = 1024$, $n = 4096$

Kitas dangos pavyzdys užaugintas įvedant koeficientus $k_{\Delta a}$, $k_{\Delta b}$, $k_{\Delta c}$. Parametrai k_a , k_b , k_c perskaičiuojami, kai prie struktūros prisijungia $h = 40000$ naujų dalelių. Čia $k_a = 1.0$, $k_b = 1.2$, $k_c = 1.6$, $k_{\Delta a} = k_{\Delta b} = k_{\Delta c} = -0.3$, $k_m = 3$, $P_{des} = 1\%$.



50 pav. Nehomonogeniška danga. Matmenys: $m = 512$, $n = 1024$

Šią dangą apibūdinančių matricių \mathbf{K}_m , \mathbf{K}_{pr1} ir \mathbf{K}_{imp} vaizdai.



51 pav. Nehomonogeniškos dangos faziniai žemėlapiai. Matmenys: $m = 512$, $n = 1024$

6. IŠVADOS

Atsižvelgiant į modeliavimo metu gautus duomenis padarytos šios išvados:

1. Gaunamos dangos panašios į sumodeliuotas Sanchez'o [20], parinkus atitinkamus parametrus – į Katzav'o [11], kitų literatūros šaltinių [28, 29], dalelėms priskyrus sąveikos su kiekviena prisijungimo zona tikimybės vertę, nelygią 1, užauginamos struktūros panašėja į Rodgers'o [21] (žiūrėti priedą). Tai rodo šio modelio universalumą.
2. Dangų struktūrai įtaką daro: migracijos trukmė, desorbcijos tikimybė, dalelių srauto pasiskirstymas pagal energiją, padėklo forma ir adhezija (dangos elementų atžvilgiu), į padėklą lekiančių dalelių srauto kryptis.
3. Apšaudant padėklą lėtomis dalelėmis, jei jos migruoja labai trumpai arba iškart tampa dangos dalimi, prilipdamos viena prie kitos, gaunamos mažo tankio struktūros.
4. Didėjant dalelių srauto energijai, mažėja tuščių ertmių dangoje. Gaunamos tankesnės struktūros.
5. Didinant migracijos trukmę, šiame darbe atliktų skaičiavimų diapozone, užaugančių dangų tankis didėja.
6. Jeigu formuojama daugiasluoksnė danga, tai tvirtesnės, mažesnio paviršiaus šiurkštumo dangos gaunamos, kai pirmasis sluoksnis suformuojamas apšaudant padėklą didesnės energijos dalelių srautu.
7. Atsižvelgiant į desorbcijų matricos žemėlapi, gautą kai desorbcijos tikimybė sąlyginai didelė, ir į modelio specifiką, daroma prielaida jog koloninių struktūrų tarpuose realaus dangos nusodinimo proceso metu vakuumas nėra toks aukštas kaip dangos išorėje, todėl tarpkoloninėse srityse turėtų sutrumpėti dalelių laisvojo lėkio atstumas.
8. Vienas iš būdų nustatyti desorbcijos ir migracijos trukmes realios dangos auginimo atveju galėtų būti dangos auginimas „|_“ padėkle. Pagal tai, kaip danga auga ant jo sienelių, kai kuriais atvejais, galima įvertinti migracijos trukmę ir desorbcijos tikimybę.
9. Algoritmas sudarytas taip, kad papildomų skaičiavimų įtraukimui nereikėtų keisti pagrindinės jo struktūros.

PADĖKA

Šio darbo autorius, už įvairaus pobūdžio pagalbą baigiamojo semestro metu, dėkoja:

Darbo vadovui prof. habil. dr. Arvaidui Galdikui

KTU matematikos ir gamtos mokslų fakulteto Dekanei Bronei Narkevičienei

Doc. dr. Sigitui Joneliūnui

Doc. dr. Vytautui Stankui

Dr. Vytautui Adomoniui

7. LITERATŪROS SARAŠAS

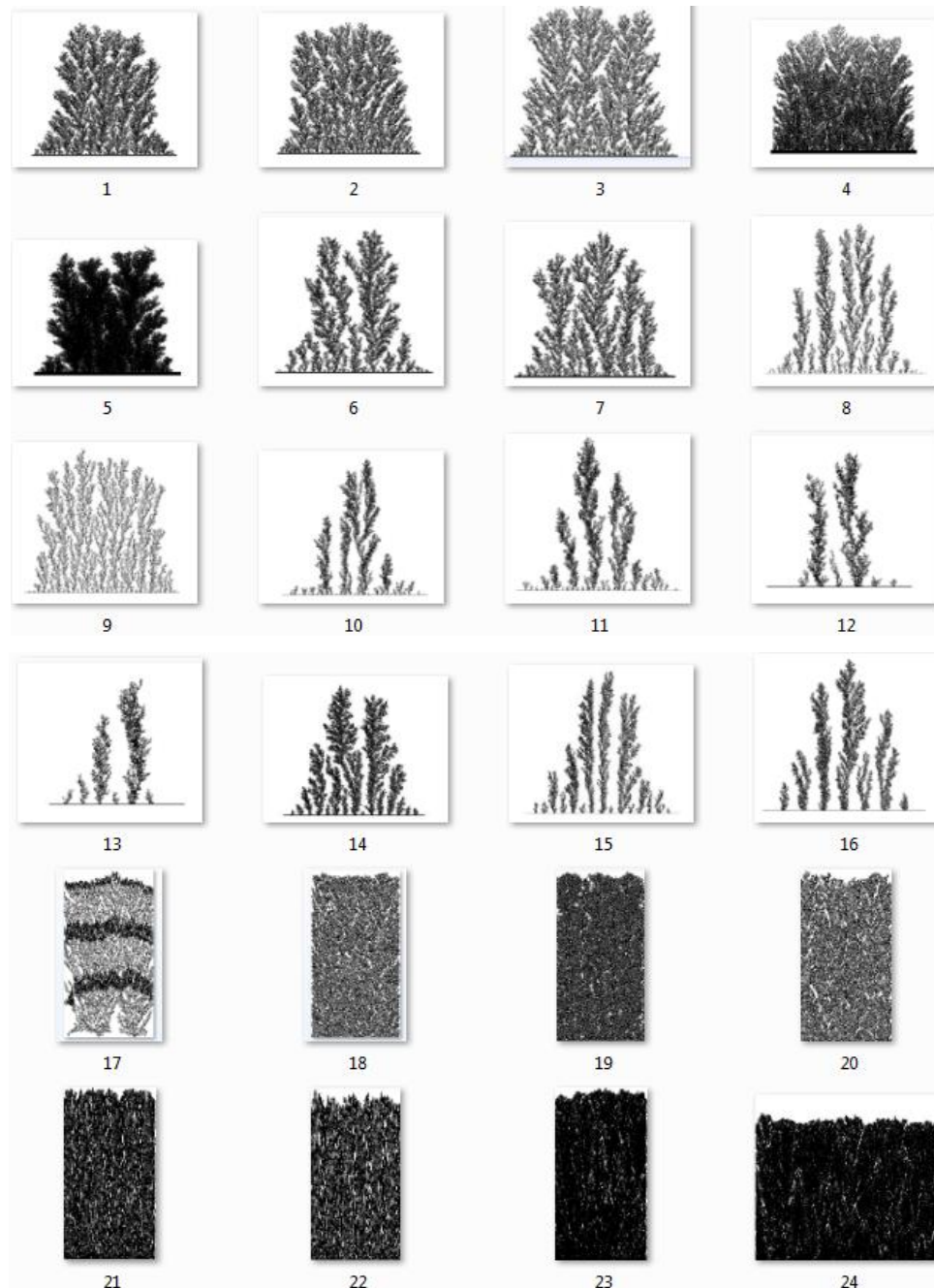
1. Li, H., L. Jun, and N.-B. Ming, *Monte-Carlo simulation of crystal growth with diffusion employing an anisotropic model*. Solid State Communications, 1991. **80**(5): p. 311-314.
2. Haberland, H., Z. Insepov, and M. Moseler, *Molecular-dynamics simulation of thin-film growth by energetic cluster impact*. Physical Review B, 1995. **51**(16): p. 11061-11067.
3. Brooks, S., A. Gelman, G. Jones, and X.-L. Meng, *Handbook of Markov Chain Monte Carlo*. 2011: CRC press.
4. Eden, M., *A two-dimensional growth process*. Dynamics of fractal surfaces, 1961. **4**: p. 223-239.
5. Clarke, K.C., S. Hoppen, and L. Gaydos, *A self-modifying cellular automaton model of historical urbanization in the San Francisco Bay area*. Environment and planning B: Planning and design, 1997. **24**(2): p. 247-261.
6. Nagatani, T., *Fractal structure and pattern in two-species growth model: a generalized directed percolation*. Journal of the Physical Society of Japan, 1992. **61**(9): p. 3196-3202.
7. Török, L. *Crystal Growth Simulation: From Fractals to Compact Growth*. in *Materials Science Forum*. 1996. Trans Tech Publ.
8. Helali, N. and B. Rezig, *Computer simulation of fractal growth via a 2D-MECA percolative system representing an extended nutrient releasing source (NRS)*. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 2001. **292**(1): p. 9-25.
9. Karatzas, I. and S. Shreve, *Brownian motion and stochastic calculus*. Vol. 113. 2012: Springer Science & Business Media.
10. Meakin, P., *The Growth of Fractal Aggregates*, in *Time-Dependent Effects in Disordered Materials*, R. Pynn and T. Riste, Editors. 1987, Springer US: Boston, MA. p. 45-70.
11. Katzav, E., S.F. Edwards, and M. Schwartz, *Structure below the growing surface*. EPL (Europhysics Letters), 2006. **75**(1): p. 29.
12. Anders, A., *A structure zone diagram including plasma-based deposition and ion etching*. Thin Solid Films, 2010. **518**(15): p. 4087-4090.
13. Dudonis, J., *Plonų dangų fizika ir nanotechnologijos: mokomoji knyga*. 2007, Šiauliai: VšĮ Šiaulių universiteto leidykla.
14. Bishop, C.A., *Vacuum Deposition onto Webs, Films, and Foils* (William Andrew, Norwich, 2007), 2007.
15. Folkenant, M., K. Nygren, P. Malinovskis, J. Palisaitis, P.O.Å. Persson, E. Lewin, and U. Jansson, *Structure and properties of Cr-C/Ag films deposited by magnetron sputtering*. Surface and Coatings Technology, 2015. **281**: p. 184-192.
16. Zaremba, E. and W. Kohn, *Theory of helium adsorption on simple and noble-metal surfaces*. Physical Review B, 1977. **15**(4): p. 1769-1781.
17. Rozanov, L.N., *Vacuum technique*. 2002, IOP Publishing.
18. Hernández-Mangas, J.M., L. Enriquez, J. Arias, M. Jaraíz, and L. Bailón, *Enhanced modelization of ion implant simulation in compound semiconductors*. Solid-State Electronics, 2002. **46**(9): p. 1315-1324.
19. Tian, S., *Accurate Monte Carlo simulation of fluorine and BF₂ ion implantation into crystalline silicon*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 2004. **215**(3-4): p. 403-412.
20. Sánchez, P.A., T. Sintès, J.H. Cartwright, and O. Piro, *Influence of microstructure on the transitions between mesoscopic thin-film morphologies in ballistic-diffusive models*. Physical Review E, 2010. **81**(1): p. 011140.

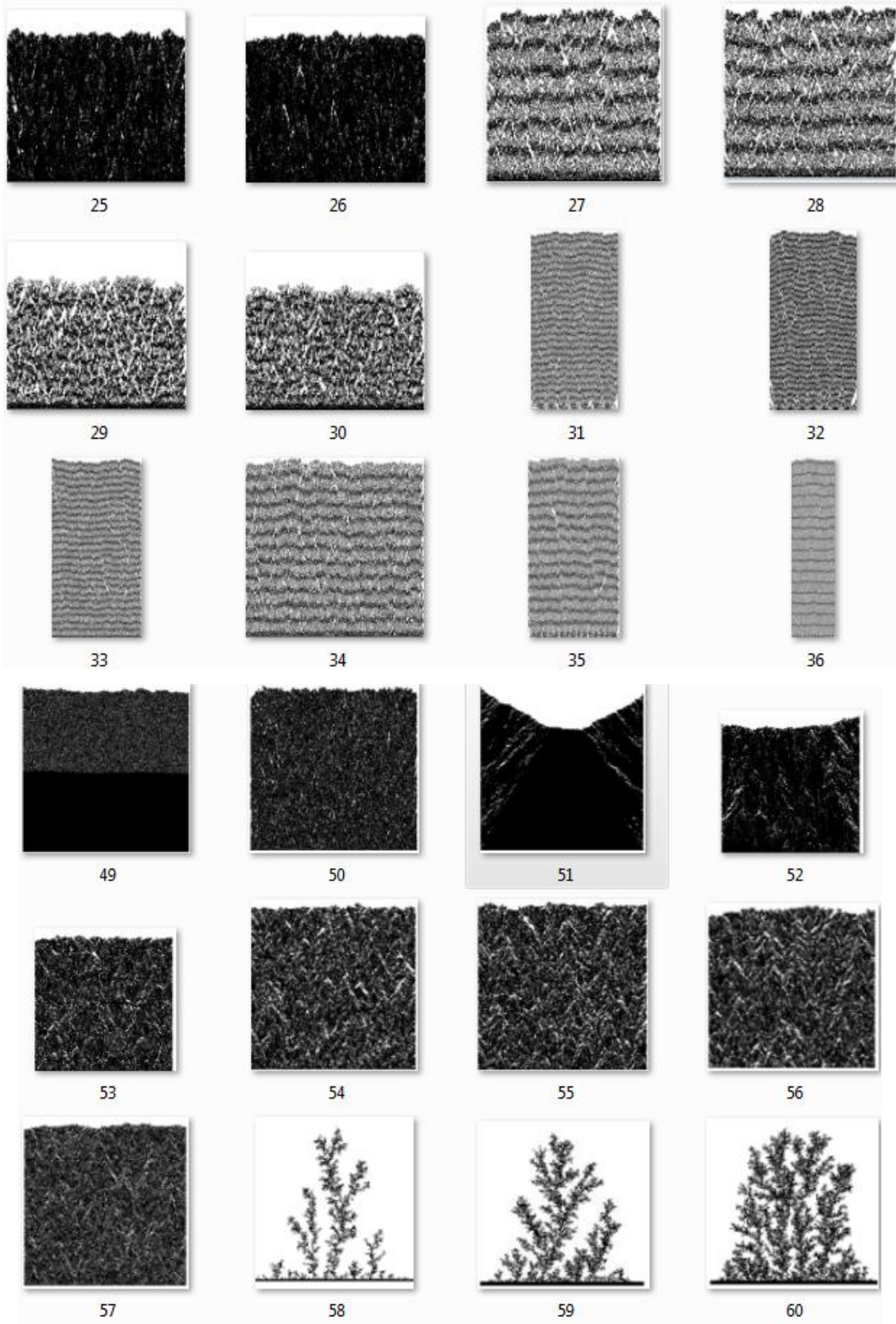
21. Rodgers, T.M., H. Zhao, and H.N. Wadley, *Microstructure of vapor deposited coatings on curved substrates*. Journal of Vacuum Science & Technology A, 2015. **33**(5): p. 05E118.
22. Kubrin, R., J.J. do Rosario, and G.A. Schneider, *Transparent nanophosphor films with high quantum efficiency through cold compaction*. RSC Advances, 2015. **5**(32): p. 25555-25564.
23. Pergolesi, D., E. Fabbri, A. D'Epifanio, E. Di Bartolomeo, A. Tebano, S. Sanna, S. Licoccia, G. Balestrino, and E. Traversa, *High proton conduction in grain-boundary-free yttrium-doped barium zirconate films grown by pulsed laser deposition*. Nat Mater, 2010. **9**(10): p. 846-852.
24. Zhao, H., Z. Yu, and H.N. Wadley, *The influence of coating compliance on the delamination of thermal barrier coatings*. Surface and Coatings Technology, 2010. **204**(15): p. 2432-2441.
25. Chen, Q.-Y., C.-X. Li, T. Wei, H.-B. Sun, S.-L. Zhang, X.-T. Luo, G.-J. Yang, C.-J. Li, and M.-L. Liu, *Controlling grain size in columnar YSZ coating formation by droplet filtering assisted PS-PVD processing*. RSC Advances, 2015. **5**(124): p. 102126-102133.
26. Pantazopoulos, J.S. and S.G. Tzafestas, *An Efficient Algorithm for Ray Tracing*. Journal of Intelligent and Robotic Systems, 2000. **28**(1): p. 171-180.
27. DeGarmo, E.P., J. Black, R.A. Kohser, and B.E. Klamecki, *Materials and process in manufacturing*. John Wiley and Sons, USA, 2003: p. 974.
28. *Crossover from anomalous to normal diffusion in porous media*. Physical Review E, 2014. **89**(6).
29. Godinho, V., P. Moskovkin, R. Álvarez, J. Caballero-Hernández, R. Schierholz, B. Bera, J. Demarche, A. Palmero, A. Fernández, and S. Lucas, *On the formation of the porous structure in nanostructured a-Si coatings deposited by dc magnetron sputtering at oblique angles*. Nanotechnology, 2014. **25**(35): p. 355705.
30. Gonzalez-Garcia, L., I. Gonzalez-Valls, M. Lira-Cantu, A. Barranco, and A.R. Gonzalez-Elipe, *Aligned TiO₂ nanocolumnar layers prepared by PVD-GLAD for transparent dye sensitized solar cells*. Energy & Environmental Science, 2011. **4**(9): p. 3426-3435.
31. Thomas, R. and G.M. Rao, *Synthesis of 3-dimensional porous graphene nanosheets using electron cyclotron resonance plasma enhanced chemical vapour deposition*. RSC Advances, 2015. **5**(103): p. 84927-84935.
32. Yang, S., R. Gao, P. Niu, Z. Zou, and R. Yu, *Arc Discharge Synthesis and Photoluminescence of 3D Feather-like AlN Nanostructures*. Nanoscale Res Lett, 2010. **6**(1): p. 1-6.

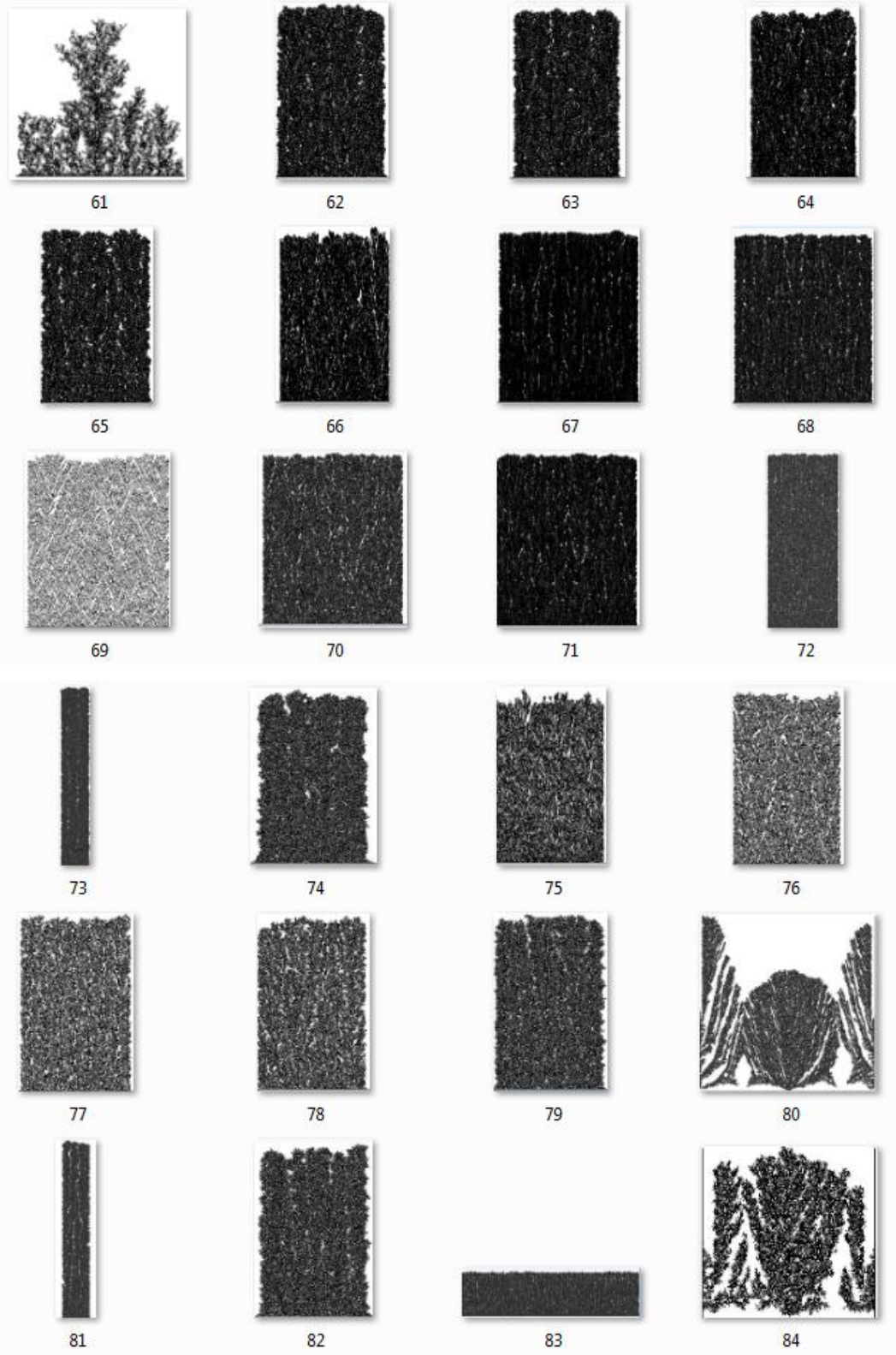
PRIEDAI

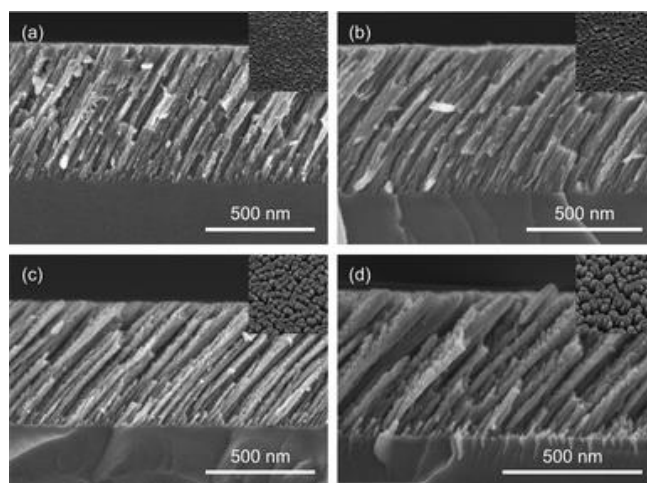
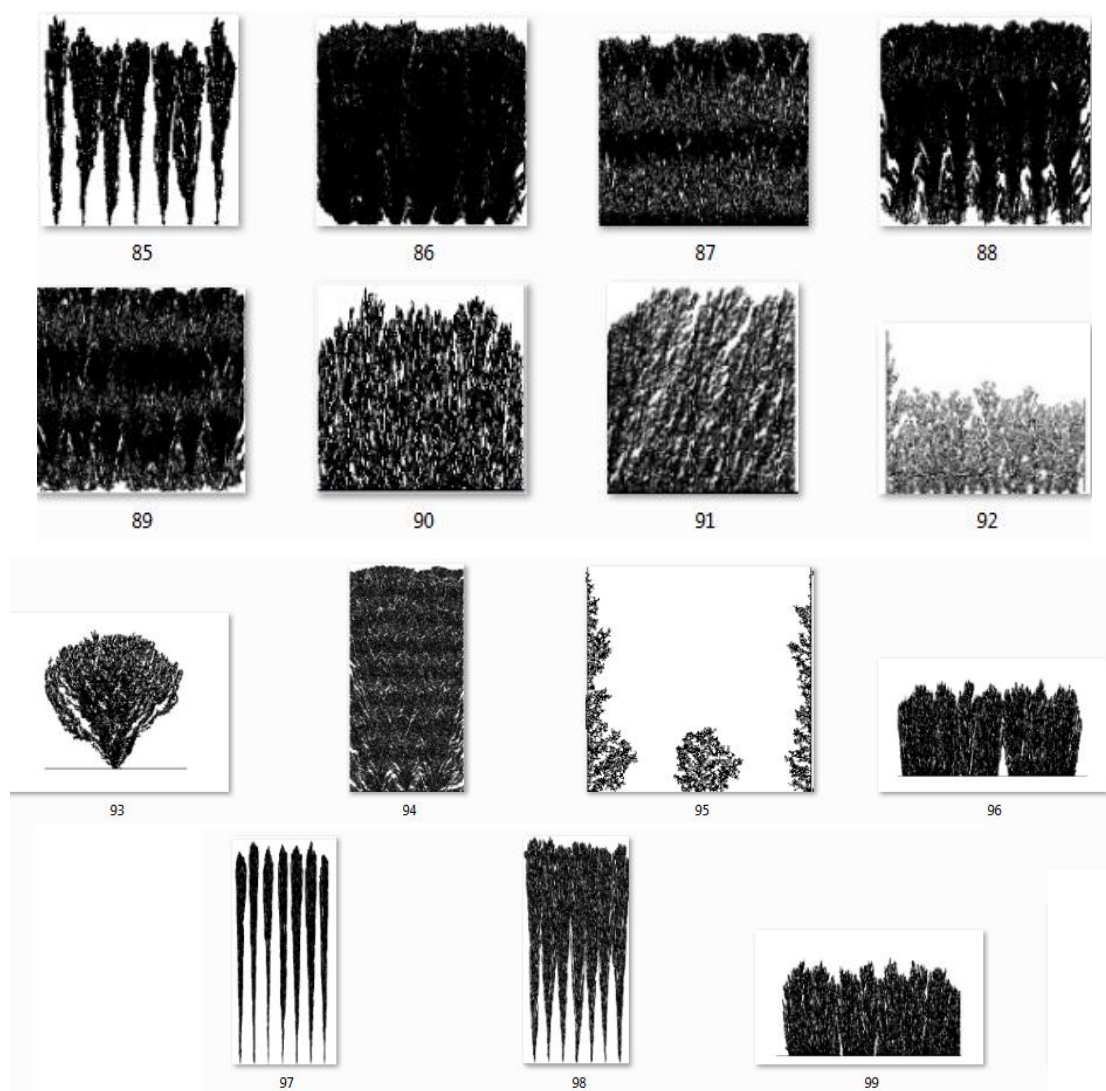
1 priedas. Užaugintų dangų atvaizdų galerija

Čia pateikiami struktūrų, kurios buvo užaugintos naudojant šiame darbe aprašytą algoritmą, vaizdai, jų neapartinėjant. Kai kuriais atvejais algoritmas buvo modifikuotas įvedant papildomas sąlygas (pavyzdžiui, žemas vakuumas, galerijos nr.: 1 – 16, 58 – 61). Modifikavimo mastas – nuo parametrų verčių keitimo iki keliolikos programinių eilučių. Auginant šias dangas priimta, kad visos visos jas sudarančios dalelės – vienodo dydžio. Taip pat, vizualiniam palyginimui, pateikiamos ir realių dangų nuotraukos.

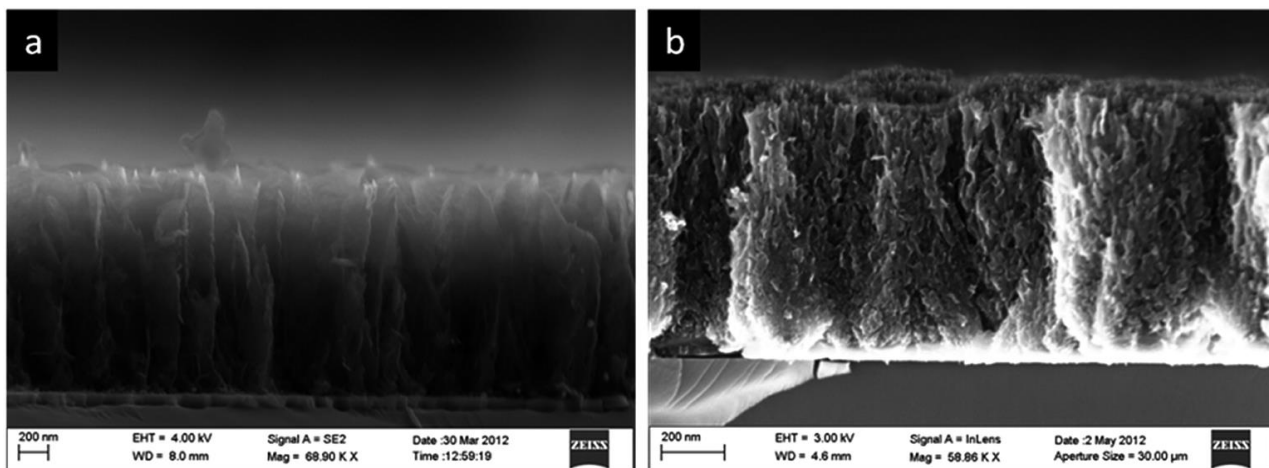




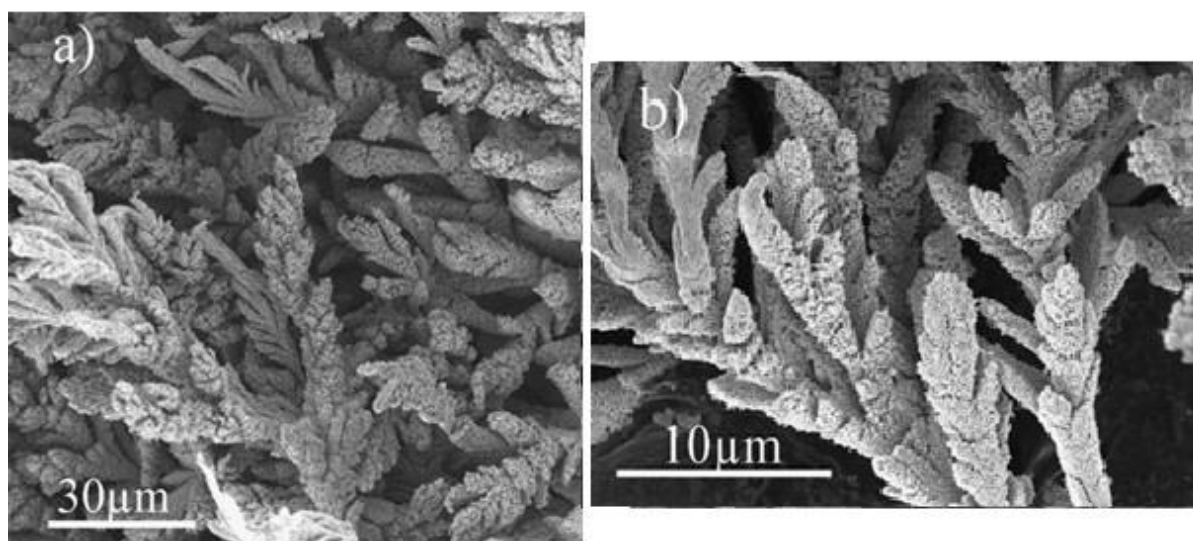




52 pav. TiO₂ nanostruktūros suformuotos PVD metodu [30]. Siūloma palyginti su šio priedo galerijos 85, 91, 97 ir 98 paveikslėlių augimo taisyklėmis.



53 pav. Grafeno nanodangos, suformuotos mikrobangų plazmos CVD (angl. *microwave plasma chemical vapor deposition*) metodu [31]. Siūloma palyginti su galerijos 85 ir 88 nr.



54 pav. AlN struktūros, gautos lankinio išlydžio būdu, FE-SEM vaizdai [32]. Siūloma palyginti su galerijos nr.: 1-16, 58-61.