

05;06;11;12

О новом методе послойного нанесения покрытий

© С.Г. Псахье, К.П. Зольников, Т.Ю. Уваров

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Поступило в Редакцию 27 марта 2000 г.

На основе молекулярно-динамического моделирования предложен новый подход к послойному нанесению покрытий. В основе подхода лежит взаимодействие нелинейного импульса со свободной поверхностью материала. Показано, что при достаточно большой амплитуде импульса происходит отрыв атомной плоскости со свободной поверхности, которая при налете на мишень образует монослойное покрытие. Комбинируя материалы "источника", можно создавать многослойные покрытия со сложным составом и структурой.

Изучение поведения материалов в условиях высокоэнергетического импульсного воздействия показало, что в кристаллах могут формироваться нелинейные волны, в том числе уединенные импульсы сжатия (УИС) [1–6], которые по своим свойствам подобны солитонам. УИС представляют собой нелинейные плоские волны с длиной волны в несколько параметров решетки. В бездефектном кристалле они распространяются без диссипации энергии, сохраняя свою форму и амплитуду. В работах [7,8] было показано, что взаимодействие УИС со свободной поверхностью кристаллита приводит к растяжению приповерхностной области с последующим отражением УИС от поверхности вглубь образца, либо к отрыву приповерхностных слоев, скорости которых могут достигать нескольких километров в секунду. Вследствие малой длины волны, отрывающиеся фрагменты имеют толщину от одного до нескольких межплоскостных расстояний.

В настоящей работе была поставлена задача: теоретически исследовать возможность использования обнаруженного ранее эффекта отрыва наноскопических слоев для создания нового подхода нанесения сложных тонкослойных покрытий.

Как и в работах [7,8], расчеты проводились на основе молекулярно-динамического подхода с использованием потенциалов межатомного взаимодействия, рассчитанных в рамках метода погруженного ато-

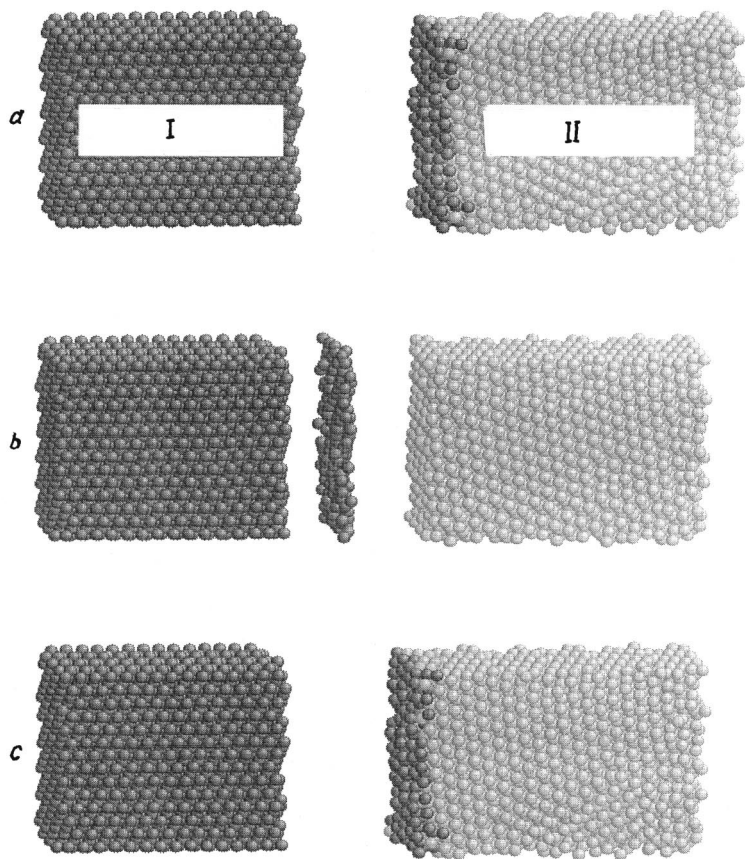


Рис. 1. *a* — моделируемая система; *b* — отрыв фрагмента от тыльной поверхности кристаллита I; *c* — монослойное покрытие на кристаллите II.

ма [9,10]. Моделировались два кристаллита меди с одинаковым сечением, но разной ориентацией (рис. 1, *a*). Каждый из них содержал более 3000 атомов. В кристаллите I генерировались УИС с амплитудой 2600 m/s по схеме, предложенной в [7]. Величина амплитуды была выбрана, исходя из требования формирования отрыва фрагментов

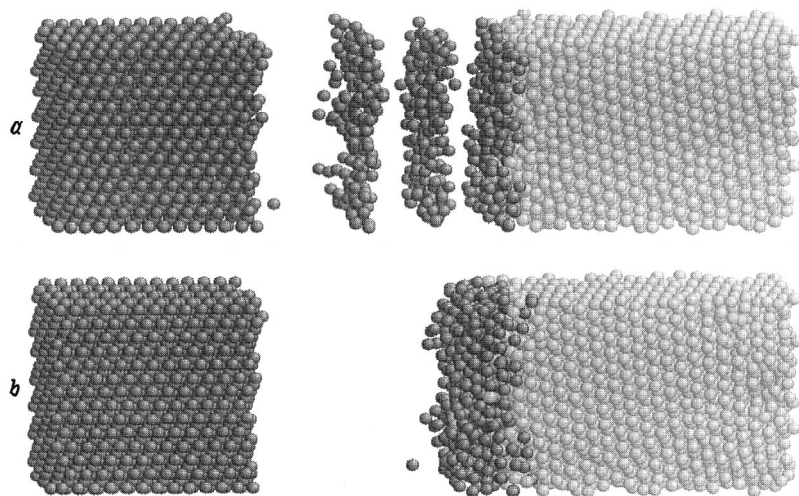


Рис. 2. *a* — последовательный отрыв 3 фрагментов от тыльной поверхности кристаллита I; *b* — структура покрытия кристаллита II после налета на него трех фрагментов.

материала при взаимодействии УИС с тыльной поверхностью данного кристаллита (рис. 1, *b*).

Расчеты показали, что столкновение оторвавшегося фрагмента со свободной поверхностью кристаллита II приводит к генерации в нем УИС. После релаксационных процессов область, прилегающая к налетевшему фрагменту, практически полностью принимает свою исходную структуру, при этом нанесенный слой достраивается в структуру кристаллита-мишени (рис. 1, *c*).

В случае генерации в кристаллите-источнике пакета из трех и более УИС характер процесса существенно изменяется, если период между налетами фрагментов на мишень меньше характерного времени соответствующих релаксационных процессов. На рис. 2, *a* моделируемая система показана в один из моментов времени при налете трех фрагментов на кристаллит II. Как видно из рис. 2, *b*, в этом случае в приповерхностной области формируется структура, существенно отличающаяся от структуры мишени и содержащая большое количество

вакансионных комплексов и других структурных дефектов. При этом структура нанесенного покрытия зависит от интервала времени между налетами фрагментов.

На основании проведенных расчетов можно заключить, что эффект отрыва наноскопических слоев при взаимодействии нелинейных импульсов со свободной поверхностью материала, может быть положен в основу нового метода нанесения многослойных покрытий. Следует отметить, что технологические параметры процесса, такие как амплитуда импульсов, интервал между импульсами, угол налета и т.д. могут быть оценены на основе молекулярно-динамического моделирования. Данный метод открывает возможность формировать многослойные нанопокрyтия типа "сэндвич" с заданной последовательностью слоев. Для этого в качестве "донорских" необходимо использовать соответствующие, заранее подобранные материалы.

Список литературы

- [1] *Toda M.* Теория нелинейных решеток. М.: Мир, 1984.
- [2] *Holian B.L., Straub G.K.* // *Phys. Rev.* 1978. В. 18. N 4. P. 1593–1609.
- [3] *Betteh J., Powel J.* // *J. Appl. Phys.* 1978. V. 49. N 7. P. 3933–3941.
- [4] *Псахье С.Г., Зольников К.П., Коростелев С.Ю.* // Письма в ЖТФ. 1995. Т. 21. В. 13. С. 1–5.
- [5] *Псахье С.Г., Зольников К.П., Сараев Д.Ю.* // Письма в ЖТФ. 1998. Т. 24. В. 3. С. 42–46.
- [6] *Псахье С.Г., Зольников К.П., Кадыров Р.И.* и др. // Письма в ЖТФ. 1999. Т. 25. В. 6. С. 7–12.
- [7] *Псахье С.Г., Зольников К.П., Кадыров Р.И., Руденский Г.Е., Сараев Д.Ю.* // ФГВ. 1999. Т. 35. № 4. С. 106–108.
- [8] *Зольников К.П., Уваров Т.Ю., Липницкий А.Г.* и др. // Письма в ЖТФ. 1999. Т. 25. В. 23. С. 22–27.
- [9] *Берч А.В., Липницкий А.Г., Чулков Е.В.* // Поверхность. 1994. № 6. С. 23–31.
- [10] *Eremeev S.V., Lipnitskii A.G., Potekaev A.I., Chulkov E.V.* // *Physics of Low-Dimensional Structures.* 1997. N 3/4. P. 127–133.