

多弧离子镀

沉积过程的计算机模拟

赵时璐 著

 冶金工业出版社
Metallurgical Industry Press

013043725

TG174.4
13

多弧离子镀 沉积过程的计算机模拟

赵时璐 著



北 京
冶金工业出版社
2013



北航

C1646745

TG174.4
13

027030810

内 容 简 介

本书系统介绍了多弧离子镀沉积过程的计算机模拟。全书共分13章, 主要内容包括: 绪论; 真空镀膜技术的介绍; 多弧离子镀沉积过程模拟的理论基础; 多弧离子镀物理过程的分析; 计算机模拟技术; 数学模型的建立; 程序的编制; 模拟的结果; 模拟结果的讨论与验证; 6个模块的主要程序代码等。

本书可供从事材料表面改性, 特别是从事真空镀膜技术研究开发及实际生产应用的科技工作者阅读, 也可供材料表面工程专业的本科生和研究参考。

图书在版编目(CIP)数据

多弧离子镀沉积过程的计算机模拟/赵时璐著. —
北京: 冶金工业出版社, 2013. 4

ISBN 978-7-5024-6227-7

I. ①多… II. ①赵… III. ①计算机模拟—应用—
离子镀—研究 IV. ①TG174. 4—39

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 068089 号

出 版 人 谭学余

地 址 北京北河沿大街嵩祝院北巷 39 号, 邮编 100009

电 话 (010)64027926 电子信箱 yjchs@cnmip.com.cn

责任编辑 杨盈园 美术编辑 李 新 版式设计 孙跃红

责任校对 李 娜 责任印制 张祺鑫

ISBN 978-7-5024-6227-7

冶金工业出版社出版发行; 各地新华书店经销; 三河市双峰印刷装订有限公司印刷
2013 年 4 月第 1 版, 2013 年 4 月第 1 次印刷

850mm×1168mm 1/32; 7.625 印张; 203 千字; 232 页

26.00 元

冶金工业出版社投稿电话: (010)64027932 投稿信箱: tougao@cnmip.com.cn

冶金工业出版社发行部 电话: (010)64044283 传真: (010)64027893

冶金书店 地址: 北京东四西大街 46 号(100010) 电话: (010)65289081(兼传真)

(本书如有印装质量问题, 本社发行部负责退换)

前 言

多弧离子镀技术在现代科技领域中有着非常广泛的应用，人们对薄膜的沉积过程通过理论和实验也进行了深入的研究。随着计算机技术的迅速发展，以及对镀膜物理过程的分析理解，利用计算机对多弧离子镀的沉积过程进行模拟，是进行薄膜材料研究的有效方法。然而，目前这方面研究的文章和专著尚不多见。

本书概述了利用计算机来直观模拟多弧离子镀的镀膜过程。首先建立一套镀膜过程的物理模型，包括源粒子蒸发过程模型、偏压电场分布模型、粒子运动过程模型、粒子吸附过程模型，使其与真空镀膜室内的实际镀膜过程保持一致。然后建立数学模型，把多弧离子镀设备的真空镀膜室看做一个圆柱形的设备，基片看做中间的杆。筒壁和上下底为正极，杆为负极。在正负极间外加电压（称为“负偏压”），把电压转化为电场中场强对电荷的作用，电场力就可以看作是正负电荷对电场中电荷的力的作用。靶材蒸发而形成的等离子体在电场的作用下被加速。先进行电场强度的计算，利用库仑定律并运用积分法分别计算杆、上下底及筒壁对真空镀膜室内电场的贡献；并通过电荷 Q 来计算的电场强度在显示时转化为用偏压 U 来表述的电场强度；然后进行带电粒子在电场中的受力分析及位移和速度的计算；最后模拟带

II 多弧离子镀沉积过程的计算机模拟

电粒子在电场中运动的轨迹。这样在假设的基础上完成了模型的建立,经过反复的检验证明是准确无误的。最后在数学模型的基础上采用 V C + + 语言,编制程序对镀膜过程进行了计算机模拟。

本书在近似计算的基础上,通过对圆柱形真空镀膜室——偏压电场的模拟,用曲线图表明了电场强度 E 和两坐标轴 ρ 与 z 的关系,设计了对称的粒子接收屏(与实际镀膜实验中的基片相当),讨论了在不同的偏压电场下粒子的运动特性,得出了多弧离子镀的涂层成分及其均匀性的影响因素,并研究出合金靶材中不同带电粒子的相对接收比例,揭示了成分离析效应的影响因素,从而可以进行阴极靶材的合金成分设计及涂层的合金成分控制,模拟结果与实际的镀膜实验相符。

本书的出版得到了沈阳大学硕士生导师张钧教授的支持和鼓励,并在百忙之中审阅了书稿,提出了宝贵的意见,在此表示最衷心的感谢。

本书的完成得益于沈阳大学先进材料制备技术辽宁省重点实验室,以及沈阳大学表面改性技术与材料研究所的老师和研究生的大力支持,参考了国内外相关文献,在此向文献的作者致以深切的谢意。

由于作者水平有限,本书若有不妥之处,敬请广大读者批评指正。

作 者
2013 年 1 月

冶金工业出版社部分图书推荐

书 名	作 者	定价(元)
基于新竞争力视角的企业规模 经济性研究	刘 明 等著	20.00
中学英汉—汉英双向分科词典	王治江 主编	29.00
计算几何若干方法及其在空间 数据挖掘中的应用	樊广俭 著	25.00
生产者责任延伸制度下企业环 境成本控制	刘丽敏 著	25.00
现代有色金属冶金科学技术丛 书——镓冶金	翟秀静 等编著	45.00
德国固体废弃物处置技术	赫英臣 等编著	65.00
室内声场脉冲响应的测量	杨春花 著	25.00
典型排土场边坡稳定性控制 技术	孙世国 等著	62.00
旅游地质系列丛书 旅游地质 景观空间信息与可视化	庞淑英 等著	25.00
旅游地质系列丛书 旅游地质 景观类型与区划	李 波 等著	22.00
旅游地质系列丛书 旅游地生 态地质环境	范 弢 等著	25.00
创业投资引导基金的理论与 实践	李吉林 著	25.00
河北环渤海经济区科学发展 探索	张大维 等著	39.00
论数学真理	李浙生 著	25.00
有色金属冶金科学技术丛书 金技术	赵由才 等编著	38.00



目 录

1 绪论	1
1.1 引言	1
1.2 研究意义	1
1.3 研究内容及方法	2
1.3.1 建立物理及数学模型	2
1.3.2 实现模拟	2
1.3.3 模拟结果及分析	3
1.4 研究技术路线	3
2 真空镀膜技术	4
2.1 真空镀膜技术概述	4
2.2 真空镀膜技术分类	6
2.2.1 真空蒸发镀技术	7
2.2.2 真空溅射镀技术	8
2.2.3 真空离子镀技术	10
2.2.4 束流沉积技术	12
2.2.5 化学气相沉积技术	15
2.3 多弧离子镀技术概述	17
2.3.1 离子镀技术发展	17
2.3.2 多弧离子镀技术特点	18
2.3.3 多弧离子镀技术原理	20
3 多弧离子镀沉积过程的理论基础	23
3.1 真空物理基础	23

IV 目 录

3.1.1	真空度和真空区域划分	23
3.1.2	气体分子运动论	24
3.2	等离子体物理基础	25
3.2.1	低温等离子体物理概述	25
3.2.2	弧光放电特性	27
3.2.3	带电粒子与表面的作用	29
3.3	薄膜生长	29
3.3.1	薄膜生长过程概述	29
3.3.2	吸附与凝结过程	30
4	多弧离子镀物理过程及成分离析效应	31
4.1	多弧离子镀物理过程	31
4.1.1	粒子蒸发过程	31
4.1.2	粒子运动过程	32
4.1.3	粒子吸附过程	32
4.2	主要工艺参数	33
4.2.1	基体负偏压	33
4.2.2	气体分压	34
4.2.3	弧电流强度	34
4.2.4	本底真空度	35
4.2.5	试样温度	35
4.2.6	试样转动速率	36
4.2.7	沉积时间	36
4.2.8	磁场	36
4.3	离化率和成分离析效应	36
4.3.1	阴极电弧产物与离化现象	36
4.3.2	离化率	37
4.3.3	成分离析效应	38
5	计算机模拟技术	39
5.1	计算机模拟技术概述	39

5.1.1 计算机模拟技术特点	39
5.1.2 材料加工工艺的计算机模拟技术	40
5.2 多弧离子镀计算机模拟技术的研究现状及发展 趋势	41
5.2.1 利用多弧离子镀技术来制备涂层的研究历程	41
5.2.2 模拟技术的研究历程及发展趋势	42
6 数学模型的建立	45
6.1 电场强度计算	46
6.1.1 杆的贡献	46
6.1.2 上、下底的贡献	47
6.1.3 筒壁的贡献	50
6.2 电场强度公式转化	51
6.3 带电粒子受力分析及其速度和位移计算	53
6.4 模拟带电粒子运动轨迹	54
7 程序的编制	55
7.1 模拟内容	55
7.2 软件介绍	55
7.3 程序语言介绍	55
7.3.1 面向对象的程序设计	55
7.3.2 Visual C 语言介绍	56
7.3.3 程序设计基本步骤	56
7.4 系统框架图	58
7.5 系统流程图	59
7.6 算法流程图	60
8 粒子蒸发过程模拟	63
8.1 粒子蒸发宏观过程	63
8.1.1 单一元素靶材	63

VI 目 录

8.1.2	二元合金靶材	63
8.1.3	多元合金靶材	65
8.2	粒子蒸发微观过程	66
8.2.1	单一元素靶材	67
8.2.2	二元合金靶材	68
8.2.3	多元合金靶材	69
9	偏压电场分布情况模拟	71
9.1	偏压电场分布曲线	71
9.2	一个粒子在偏压电场内的运动	72
10	粒子运动过程模拟	74
10.1	单一元素靶材	74
10.2	二元合金靶材	78
10.3	多元合金靶材	87
11	粒子吸附过程模拟	95
11.1	单一元素靶材	95
11.2	二元合金靶材	95
11.3	多元合金靶材	96
12	模拟结果的讨论与验证	99
12.1	偏压电场及其分布情况	99
12.2	偏压对涂层均匀性的影响	100
12.3	成分分离效应分析	101
12.3.1	成分分离效应的影响因素	101
12.3.2	成分分离效应的效果	102
12.3.3	成分分离效应小结	106
12.3.4	成分分离效应的模拟结果与实验验证	107

13 主要程序代码.....	110
13.1 蒸发宏观过程模块.....	110
13.2 蒸发微观过程模块.....	120
13.3 偏压电场分布曲线模块.....	128
13.4 偏压电场内运动模块.....	136
13.5 粒子运动模块.....	138
13.6 粒子附着模块.....	148
附录	156
附录 1 真空镀膜设备通用技术条件	156
附录 2 真空技术 术语	165
参考文献.....	227

1 绪 论

1.1 引言

目前多弧离子镀薄膜已成为薄膜制备的主导技术之一，发展迅速，应用领域广泛，各种镀膜设备层出不穷，针对多弧离子镀的计算机模拟研究主要集中在薄膜生长过程的研究。相比之下，关于镀膜过程的研究和了解显得相对薄弱。为进一步改进镀膜技术、开发镀膜设备、设计合金靶材的成分、提高镀膜产品质量等，有必要深入开展关于多弧离子镀薄膜的定量半定量分析，以便进一步掌握多弧离子镀的物理过程，为多弧离子镀的研究提供更为准确的科学指导。

多弧离子镀薄膜的过程是极其复杂的高真空、动态、瞬时过程，难以直接观察。必须控制这个过程使材料的成分、组织、性能最后处于最佳状态，使缺陷减到最小或将它驱赶到危害最小的地方去。但这一切都不能直接观察到，间接测试也十分困难。所以随着计算机的应用和不断发展，计算机模拟成为实验和理论的有力补充。可以利用计算机来直观模拟多弧离子镀薄膜的过程，进而详尽地考查各个有关的影响参数对涂层成分的影响关系和效果，从而指导靶材成分的设计，提高镀膜的质量。

1.2 研究意义

(1) 本书是借助合理的物理抽象，在一定的数学近似的基础上实现有关镀膜过程的模拟，进而研究出主要的工艺参数对涂层成分的影响关系和效果，这样对沉积过程有更深入的了解，进一步把握镀膜工艺的质量，以便更好地控制涂层的质量，使设计更完善。

(2) 其次通过计算机模拟进行设计，也是对物理沉积技术

的一个概括和总结。这不仅对于迅速扩大的薄膜制备队伍非常必要,而且对于探索新的镀膜方法、改进已有技术也有深远意义。

1.3 研究内容及方法

1.3.1 建立物理及数学模型

1.3.1.1 物理模型

本模型是对多弧离子镀过程的一种真实模拟,是对镀膜过程中的重要参数的一种控制模拟。它把镀膜过程中的一些影响因素进行过滤,用适当的表现规则描绘出简洁的沉积过程模型。

镀膜过程包括3个部分:源粒子的蒸发过程,粒子在真空室内的运动过程,粒子的吸附过程。首先建立一套基本的镀膜过程模型,包括源粒子蒸发过程模型、偏压电场分布模型、粒子运动过程模型、粒子吸附过程模型,使其与真空镀膜室内的实际镀膜过程取得一致。

1.3.1.2 数学模型

在一定假设的基础上,首先,进行电场强度的计算,应用库仑定律并利用积分法分别计算杆、上下底及筒壁对真空镀膜室内电场的贡献。

其次,通过电荷 Q 计算的电场强度转化为用偏压 U 表述的电场强度。

再次,进行带电粒子在电场中的受力分析及位移和速度的计算。

最后,模拟带电粒子在电场中运动的轨迹。

1.3.2 实现模拟

利用 Visual C++ 语言来对粒子蒸发过程、偏压电场分布情况、粒子运动过程及粒子吸附过程进行程序的编制,实现多弧离子镀薄膜过程的模拟。

1.3.3 模拟结果及分析

本书通过对圆柱形镀膜室—偏压电场的模拟,用曲线图表明电场强度 E 和两坐标轴 ρ 与 z 的关系,设计了对称的粒子接收屏(与实际镀膜实验中的基片相当),讨论了在不同的工艺条件下粒子的运动特性,得出了多弧离子镀的涂层成分及其均匀性的影响因素,并研究出合金靶材中不同粒子的相对接收比例,得出了成分析效应的影响因素,从而可以进行阴极靶材的合金成分设计及涂层的合金成分控制。

1.4 研究技术路线

研究技术路线框架如图 1-1 所示。

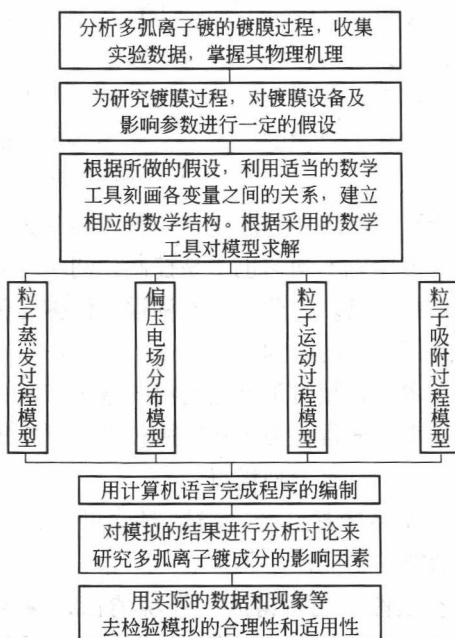


图 1-1 技术路线框架

2 真空镀膜技术

2.1 真空镀膜技术概述

真空镀膜技术是真空应用领域的一个重要方面，它是以真空技术为基础，利用物理或化学方法，并吸收电子束、分子束、离子束、等离子束、射频和磁控等一系列新技术，为科学研究和实际生产提供薄膜制备的一种新工艺。简单地说，在真空中把金属、合金或化合物进行蒸发或溅射，使其在被涂覆的物体（称基板、基片或基体）上凝固并沉积的方法，称为真空镀膜。

众所周知，在某些材料的表面上，只要镀上一层薄膜，就能使材料具有许多新的、良好的物理和化学性能。20 世纪 70 年代，在物体表面上镀膜的方法主要有电镀法和化学镀法。前者是通过通电，使电解液电解，被电解的离子镀到作为另一个电极的基体表面上，因此这种镀膜的条件，基体必须是电的良导体，而且薄膜厚度也难以控制。后者是采用化学还原法，必须把膜材配制成溶液，并能迅速参加还原反应，这种镀膜方法不仅薄膜的结合强度差，而且镀膜既不均匀也不易控制，同时还会产生大量的废液，造成严重的污染。因此，这两种被人们称之为湿式镀膜法的镀膜工艺受到了很大的限制。

真空镀膜技术则是相对于上述的湿式镀膜方法而发展起来的一种新型镀膜技术，通常称为干式镀膜技术。真空镀膜技术与湿式镀膜技术相比较，具有下列优点：

(1) 薄膜和基体选材广泛，薄膜厚度可进行控制，以制备具有各种不同功能的功能性薄膜。

(2) 在真空条件下制备薄膜，环境清洁，薄膜不易受到污染，因此可获得致密性好、纯度高和涂层均匀的薄膜。

(3) 薄膜与基体结合强度好, 薄膜牢固。

(4) 干式镀膜既不产生废液, 也无环境污染。

真空镀膜技术主要有真空蒸发镀、真空溅射镀、真空离子镀、真空束流沉积、化学气相沉积等多种方法。除化学气相沉积法外, 其他几种方法均具有以下共同特点:

(1) 各种镀膜技术都需要一个特定的真空环境, 以保证制膜材料在加热蒸发或溅射过程中所形成蒸气分子的运动, 不致受到大气中大量气体分子的碰撞、阻挡和干扰, 并消除大气中杂质的不良影响。

(2) 各种镀膜技术都需要有一个蒸发源或靶子, 以便把蒸发制膜的材料转化成气体。目前, 由于源或靶的不断改进, 大大扩大了制膜材料的选用范围, 无论是金属、金属合金、金属间化合物、陶瓷或有机物质, 都可以蒸镀各种金属膜和介质膜, 而且还可以同时蒸镀不同材料而得到多层膜。

(3) 蒸发或溅射出来的制膜材料, 在与待镀的工件生成薄膜的过程中, 对其膜厚可进行比较精确的测量和控制, 从而保证膜厚的均匀性。

(4) 每种薄膜都可以通过微调阀精确地控制镀膜室中残余气体的成分和质量分数, 从而防止蒸镀材料的氧化, 把氧的质量分数降低到最小的程度, 还可以充入惰性气体等, 这对于湿式镀膜而言是无法实现的。

(5) 由于镀膜设备的不断改进, 镀膜过程可以实现连续化, 从而大大地提高产品的产量, 而且在生产过程中对环境无污染。

(6) 由于在真空条件下制膜, 所以薄膜的纯度高、密实性好、表面光亮不需要再加工, 这就使得薄膜的力学性能和化学性能比电镀膜和化学膜好。

早在 20 世纪初, 美国大发明家爱迪生就提出了唱片蜡膜采用阴极溅射进行表面金属化的工艺方法, 并于 1930 年申报了专利, 这便是薄膜技术在工业应用的开始。但是, 这一技术当时因受到真空技术和其他相关技术发展的限制, 其发展速度较慢。直



到 20 世纪 40 年代,这一技术在光学工业中才得到了迅速的发展,并且逐渐形成了薄膜光学,成为光学领域的一个重要分支。

真空镀膜技术在电子学等方面开始主要用来制造电阻和电容元件。但是,随着半导体技术在电子学领域中的大量应用,真空镀膜技术就成了晶体管制造和集成电器生产的必要工艺手段。

尽管电子显微镜能揭开微观世界的奥秘,但其标本必须经过真空镀膜处理才能观察。激光技术的核心——激光器,需要镀上精密控制的光学薄膜才能使用。所以,太阳能的利用也与真空镀膜技术息息相关。

用真空镀膜技术代替传统的电镀工艺,不但能节省大量的膜材并降低能耗,而且还会消除湿法镀膜产生的环境污染。因此,在国外已经大量使用真空镀膜来代替电镀,为钢铁零件涂覆防腐层和保护膜,在冶金工业中也用来为钢板加镀铝防护层。

塑料薄膜采用真空镀膜技术加镀铝等金属膜,再进行染色,可得到用于纺织工业中的金银丝等制品,或用于包装工业中的装饰品。

在建筑工业上,采用建筑玻璃镀膜已经十分盛行。这种薄膜不但可以美化和装饰建筑物,而且可以节约能源,这是因为在玻璃上镀反射膜,可以使低纬地区的房屋避免炎热的阳光直射室内,从而节约了空调费用;玻璃上镀滤光膜和低辐射膜,可使阳光射入,而作为室内热源的红外辐射又不能通过玻璃辐射出去,这在高纬地区也可达到保温节能的目的。

近些年来,随着真空镀膜技术由过去传统的蒸发镀和普通的二级溅射镀,发展为磁控溅射镀、离子镀、分子束外延和离子束溅射等一系列新的镀膜工艺,几乎任何材料都可以通过真空镀膜的方法,涂覆到其他材料的表面上,这就为真空镀膜技术在各种工业领域中的应用,开辟了更加广阔的道路。

2.2 真空镀膜技术分类

真空镀膜技术一般分为两大类,即物理气相沉积(PVD)