

Суперкомпьютерное моделирование напряжений в тонких оптических пленках при различных температурах подложки

Ф. В. Григорьев, В. Б. Сулимов и А.В. Тихонравов

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
Научно-исследовательский вычислительный центр*



ТОНКИЕ ПЛЕНКИ

Применение:

Мобильные телефоны, видео-фотокамеры, архитектурное стекло, очки, фильтры, зеркала, линзы...

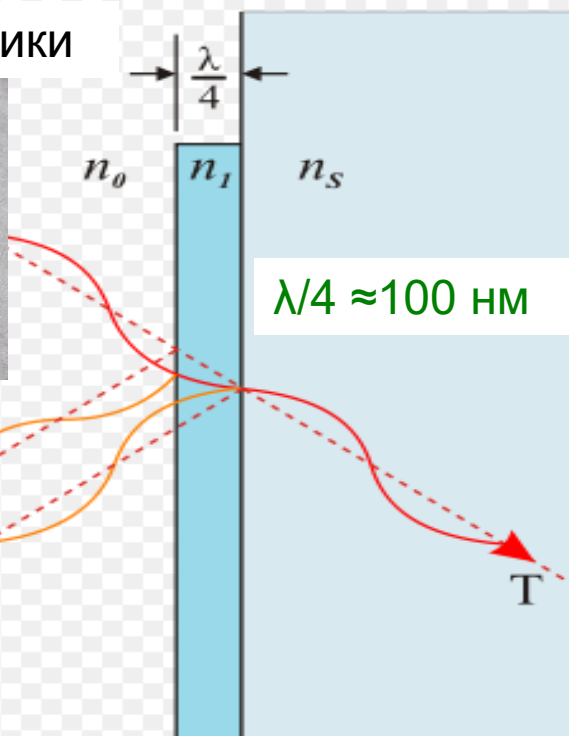
Изготовление:

напыление в вакуумной камере на подложку

Цели моделирования:

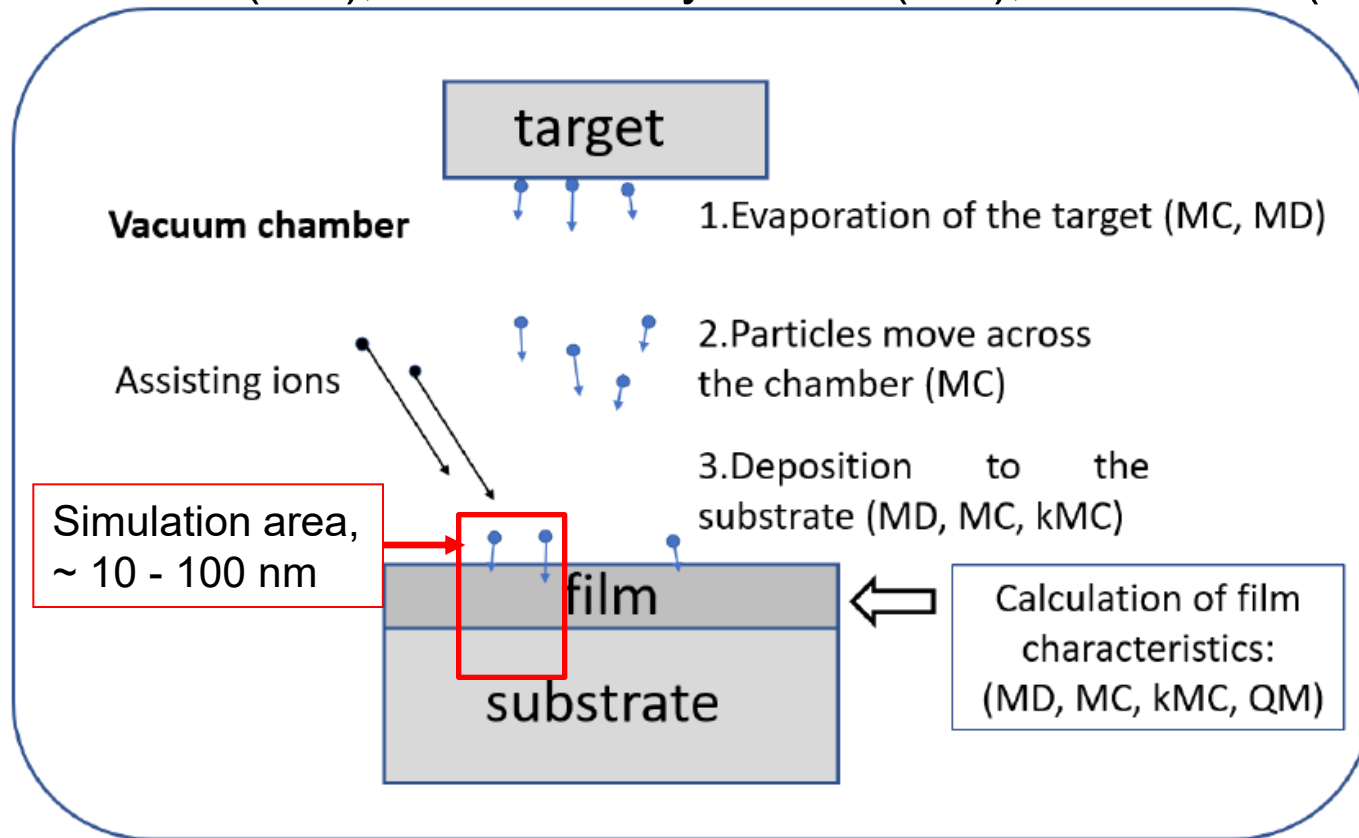
1. Разработка методов математического моделирования процесса напыления тонких пленок, ориентированных на использование технологий суперкомпьютерных вычислений.
2. Разработка численных методов расчета структурных и механических свойств тонких пленок с использованием атомистических кластеров, полученных в результате моделирования процессов напыления. Программная реализация разработанных методов.
3. Исследование зависимостей структурных и механических свойств тонких пленок от технологических параметров процесса напыления.

Просветление оптики



Методы атомистического моделирования роста тонких пленок

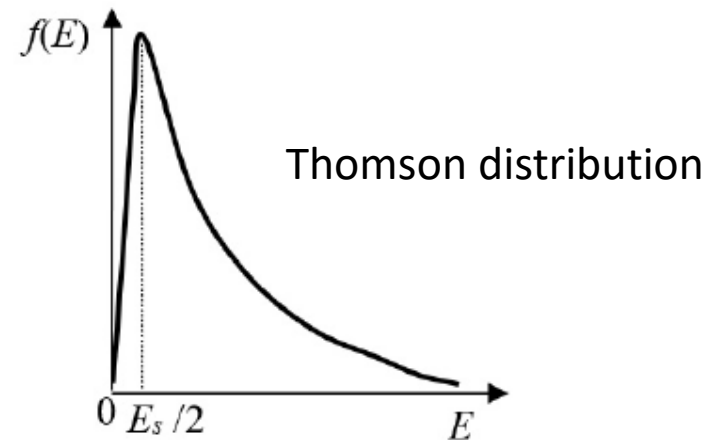
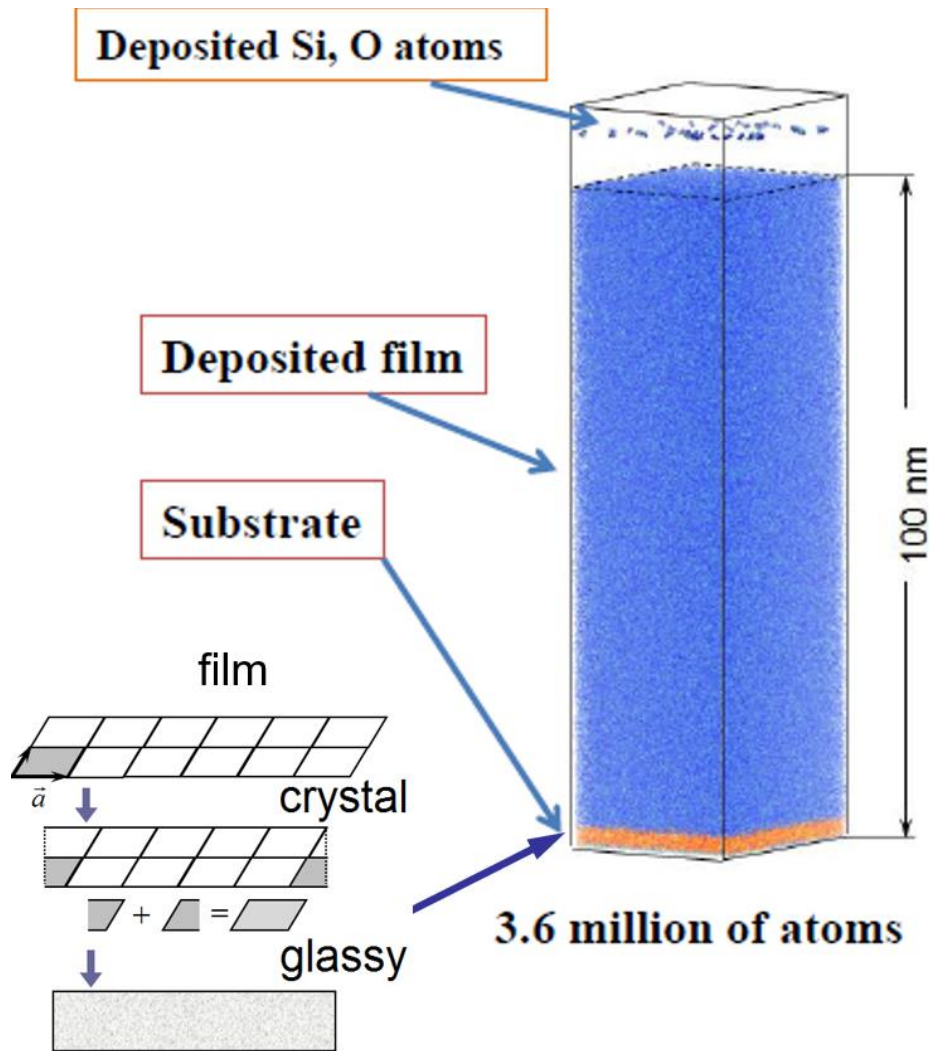
Monte Carlo (MC); molecular dynamics (MD); kinetic MC (kMC)



Параметры:

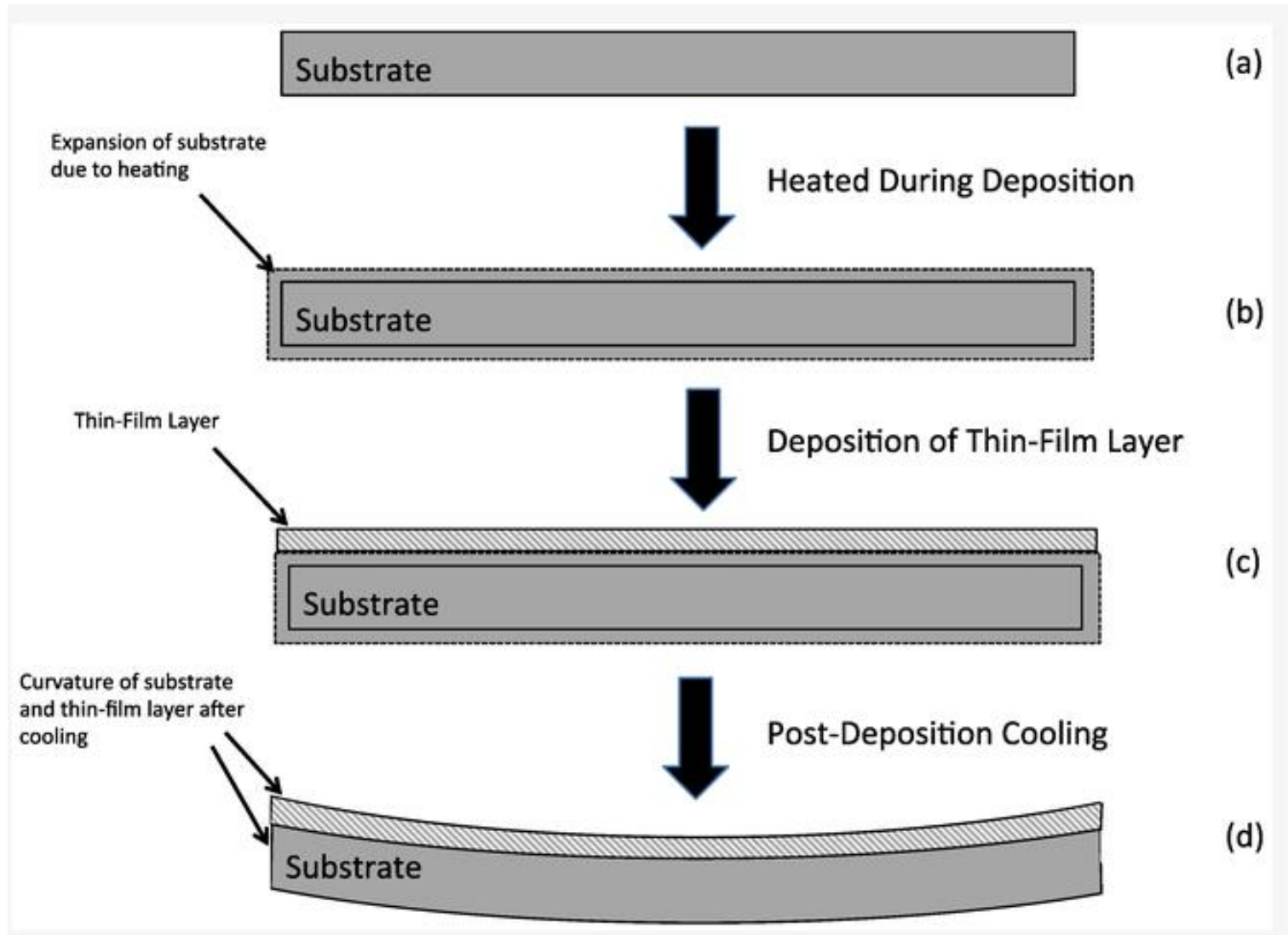
Температура подложки, угловое и энергетическое распределение осаждаемых частиц, ионное ассистирование, вращение подложки, оксидные и металлические мишени, состав и давление газа в камере, и т.д.

Моделирование напыления



1. Step by step procedure. At every step deposited atoms are injected to the modeling box
2. MD simulation of the interaction of injected atoms with previously deposited film layers and substrate
3. Parameters of the MD simulation: NVT (constant number of the particles, volume and temperature)
4. Duration of MD modeling of one cycle several ps

Появление напряжений при напылении пленок



Результаты расчета напряжений

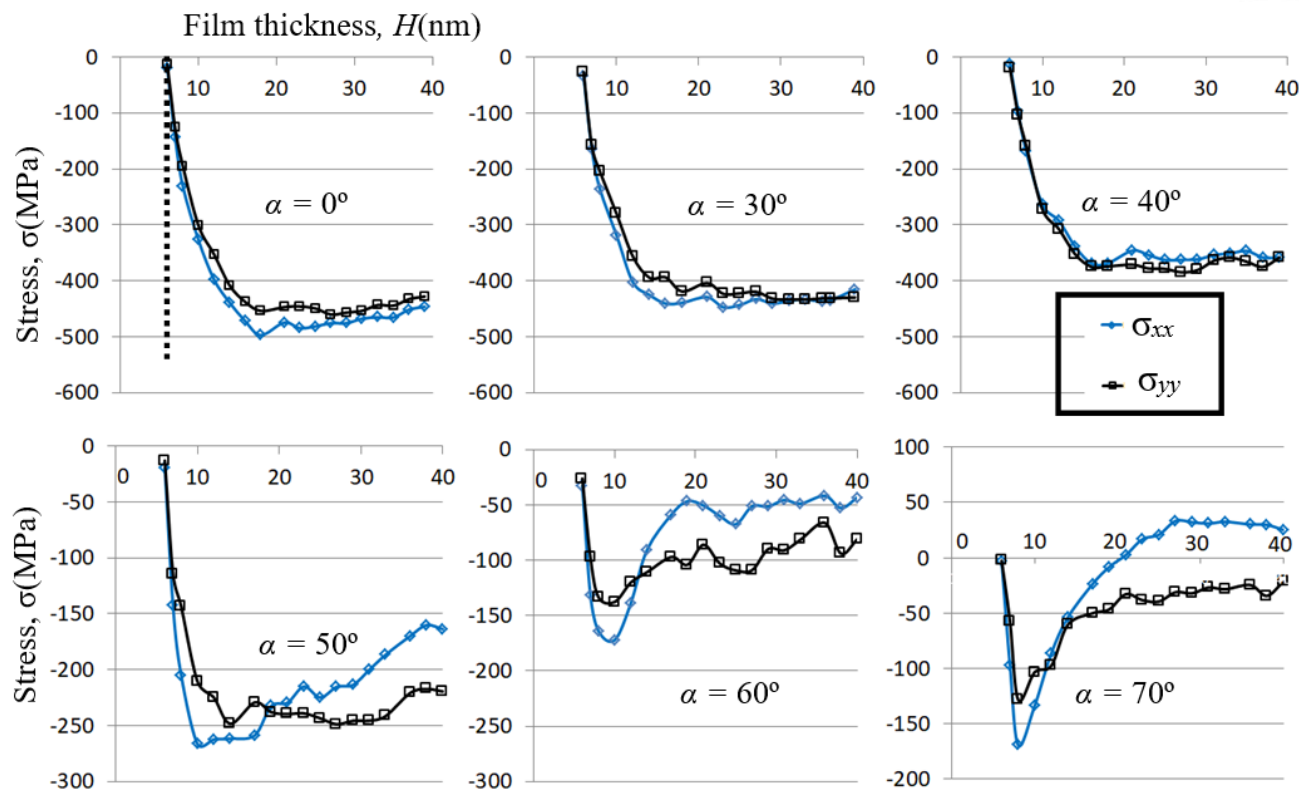
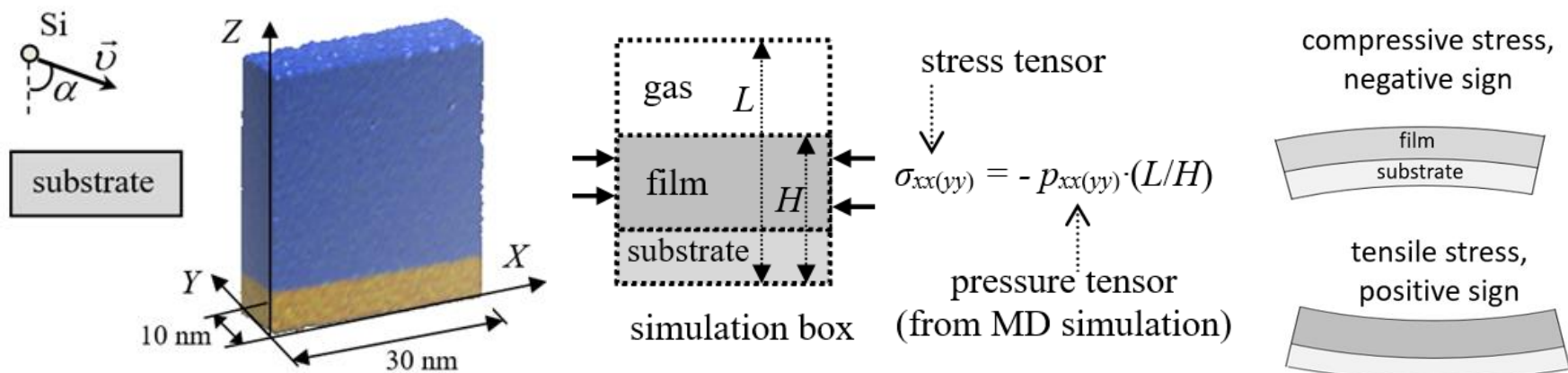
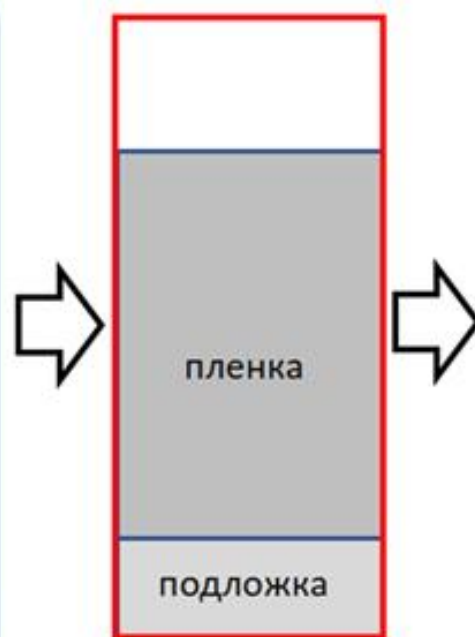


Схема расчета напряжений при напылении на горячую подложку

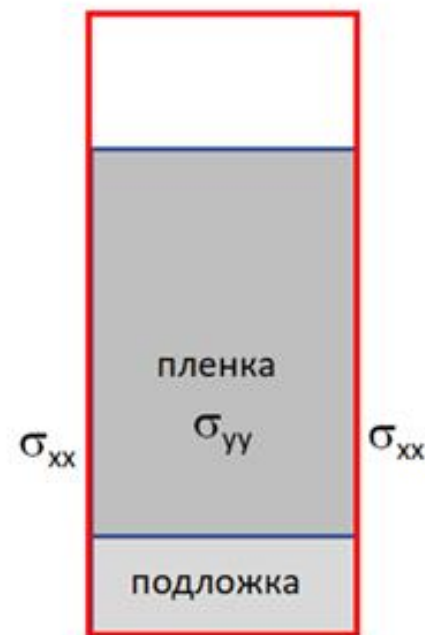
1. Моделирование напыления



2. Охлаждение до 300 К

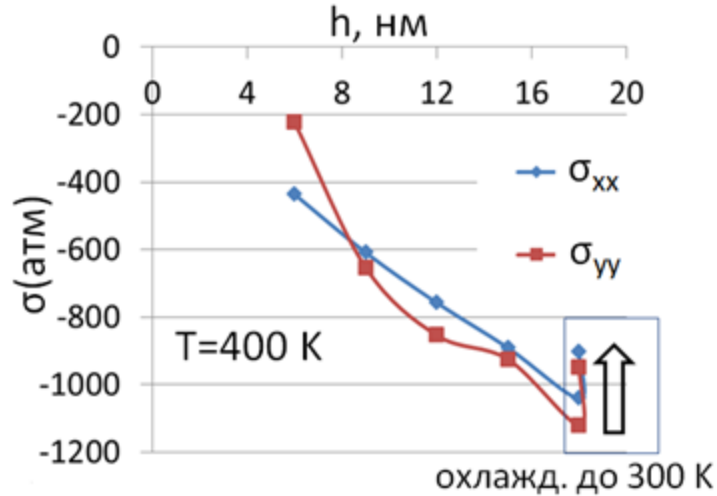


3. Расчет напряжений

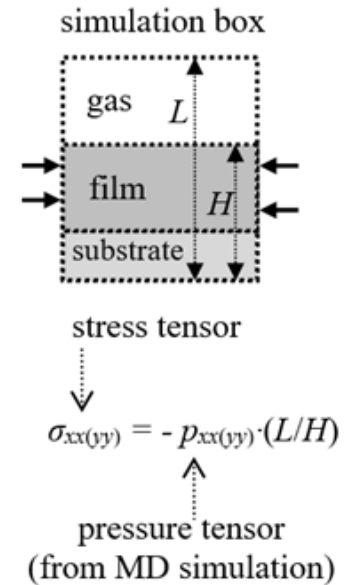
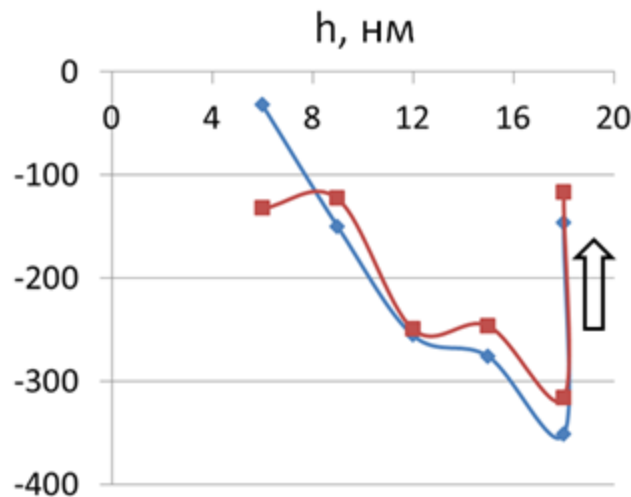
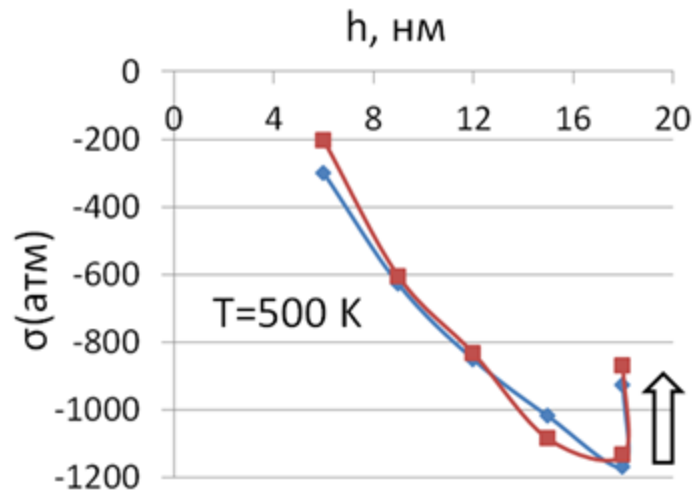
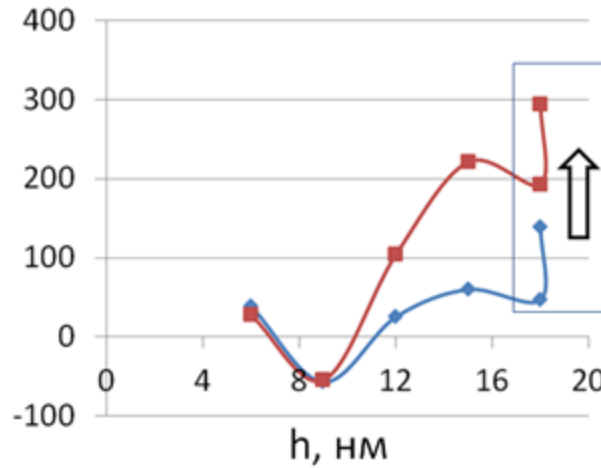


Зависимость напряжений от толщины пленки при различных температурах горячей подложки, а-SiO₂

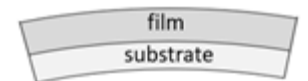
$E(\text{Si})=10 \text{ эВ}$



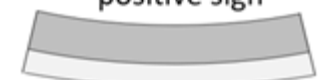
$E(\text{Si})=0.1 \text{ эВ}$



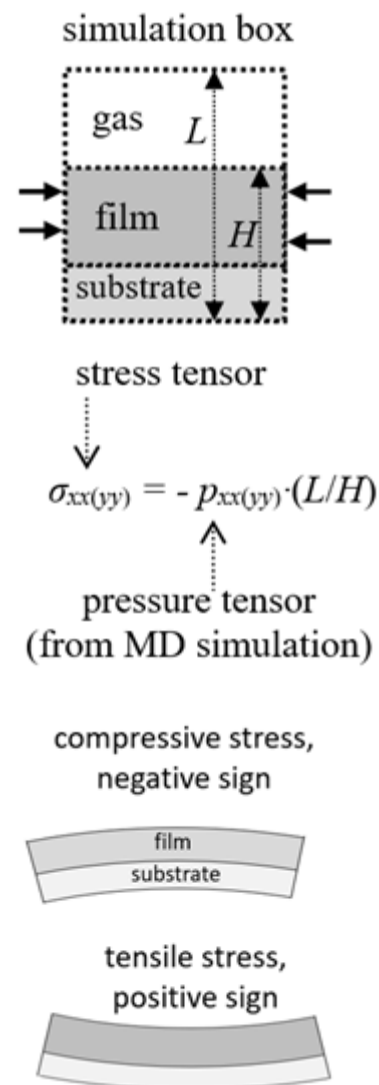
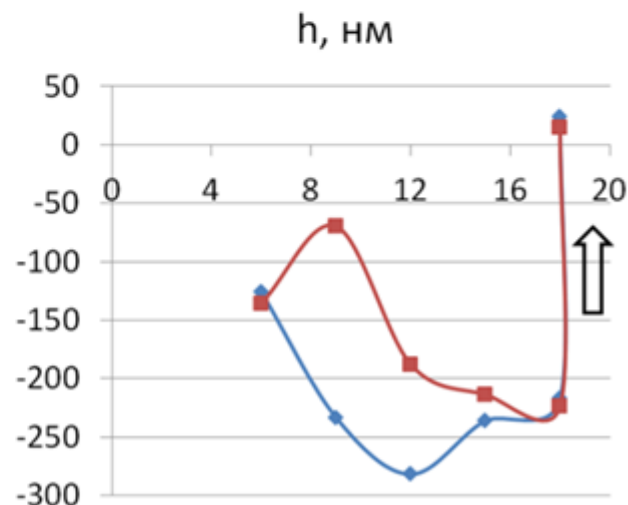
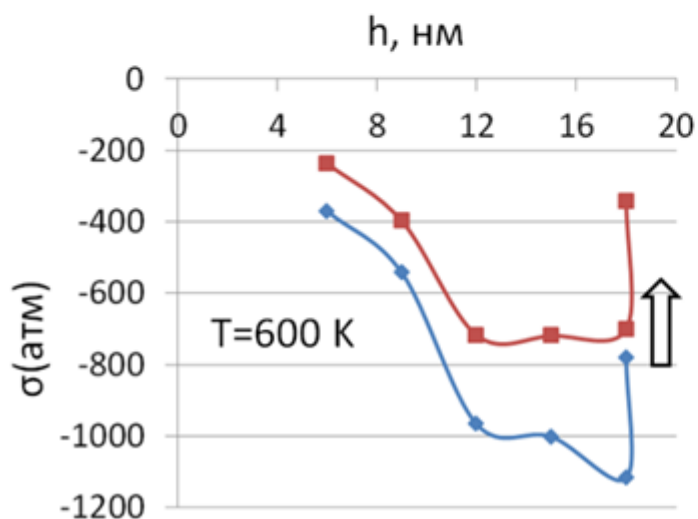
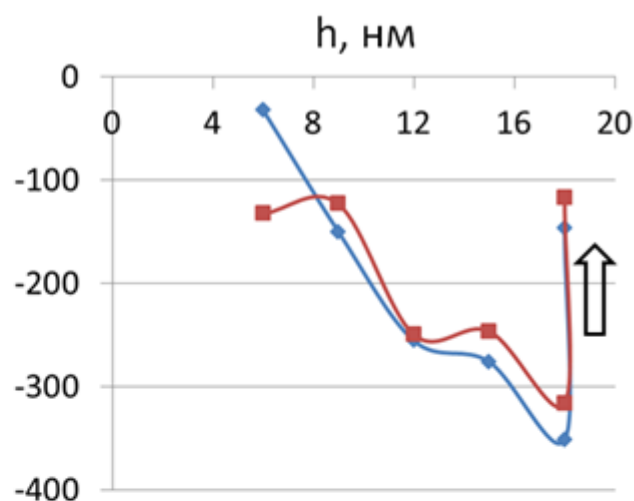
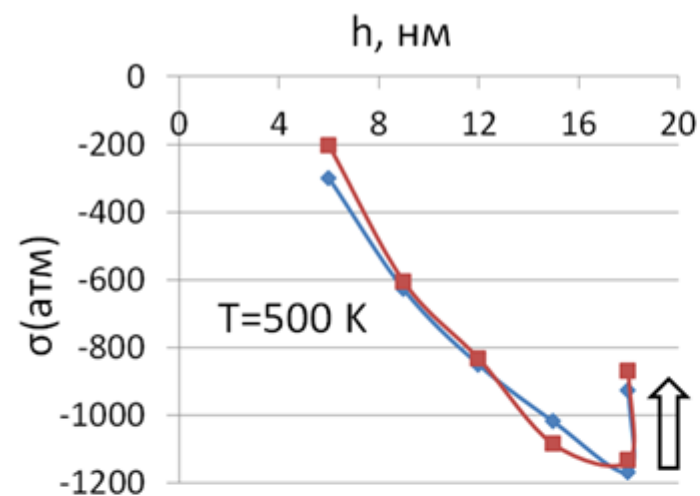
compressive stress,
negative sign



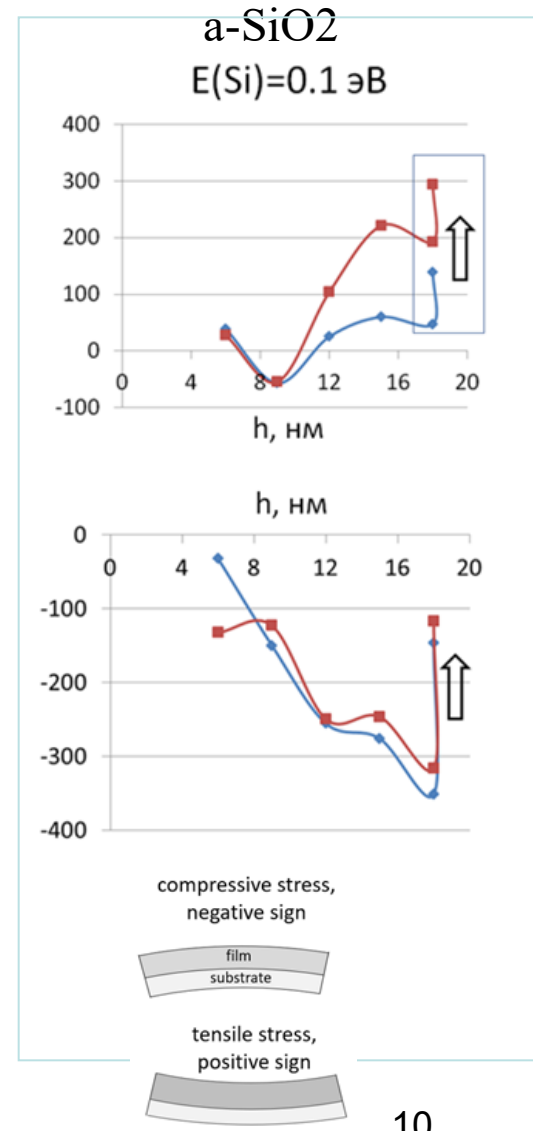
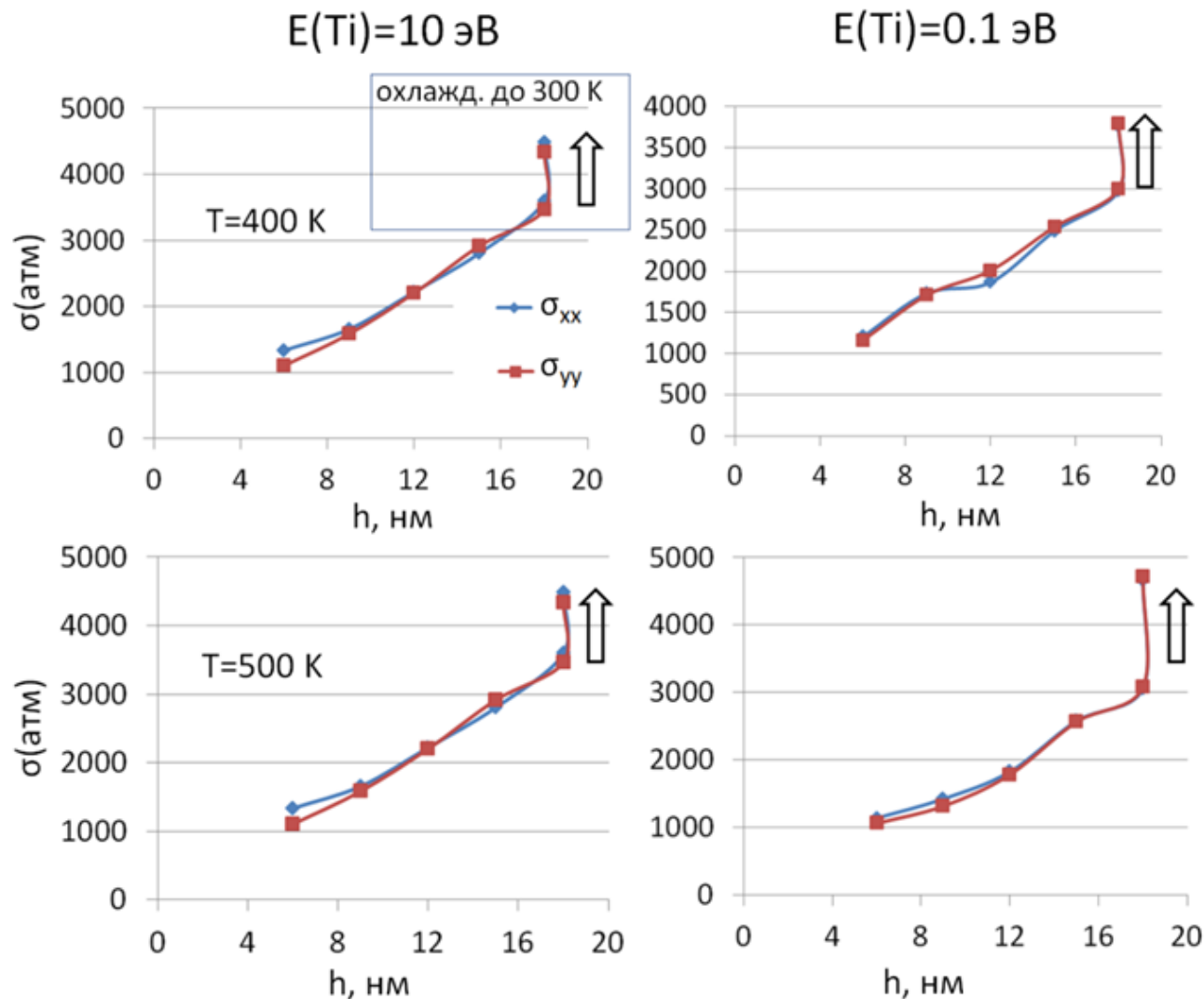
tensile stress,
positive sign



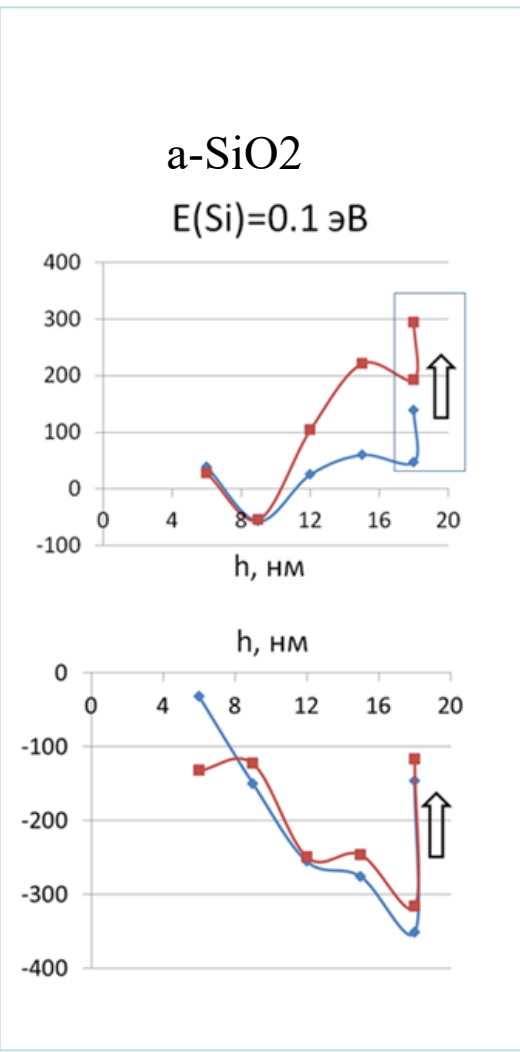
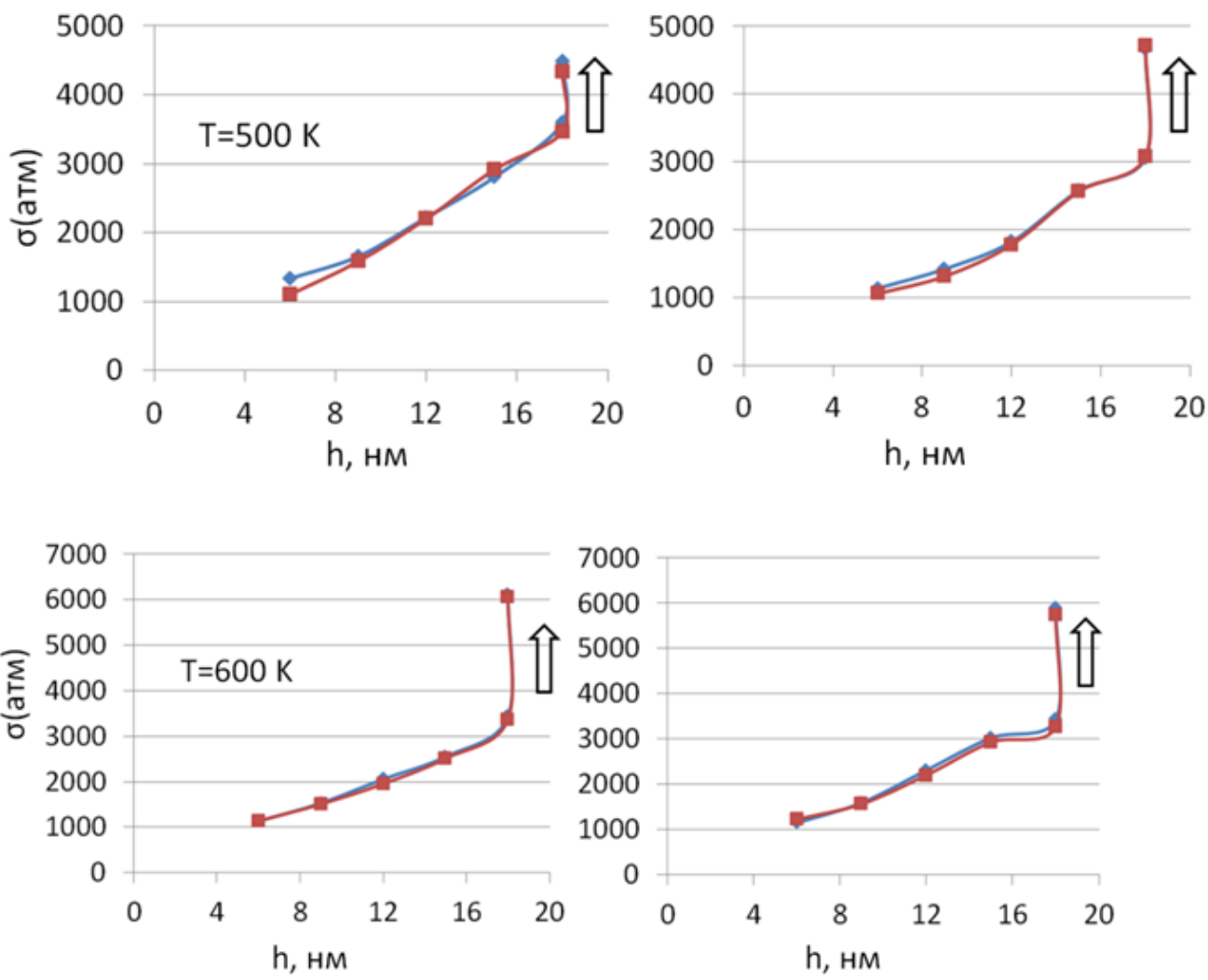
Зависимость напряжений от толщины пленки при различных температурах горячей подложки, а-SiO₂



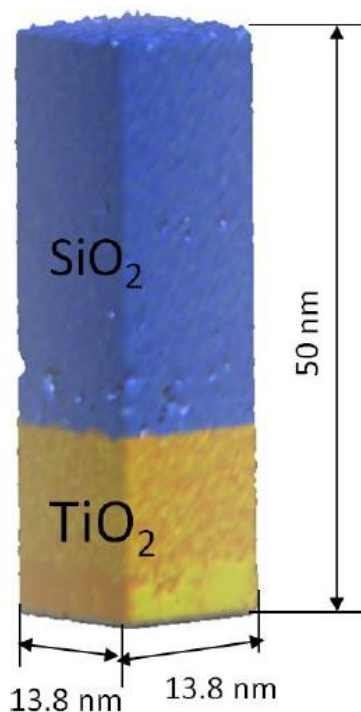
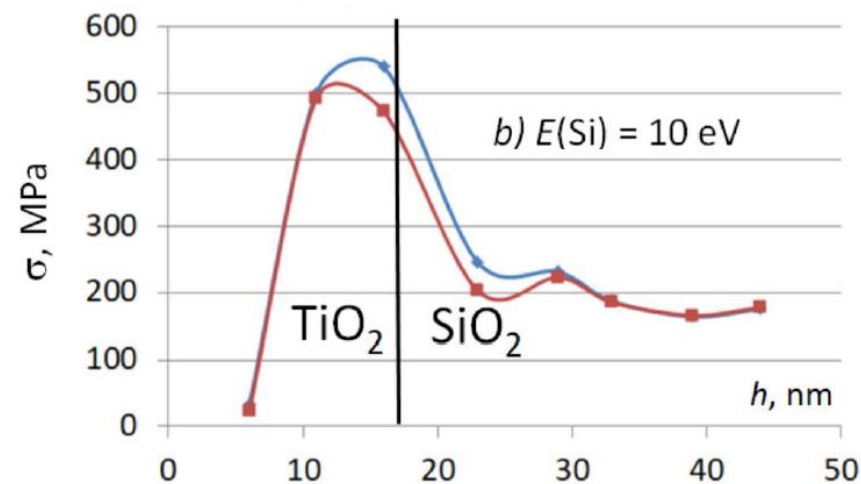
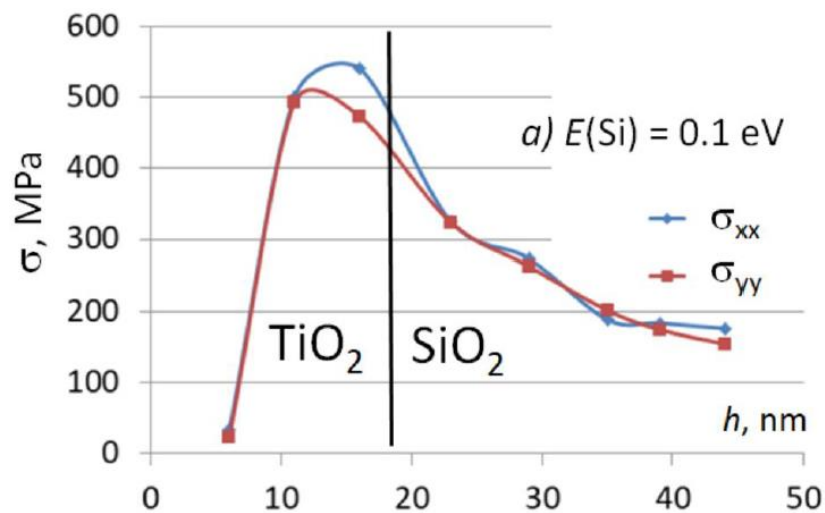
Зависимость главных компонент тензора напряжений от толщины пленки при различных температурах горячей подложки, α -TiO₂



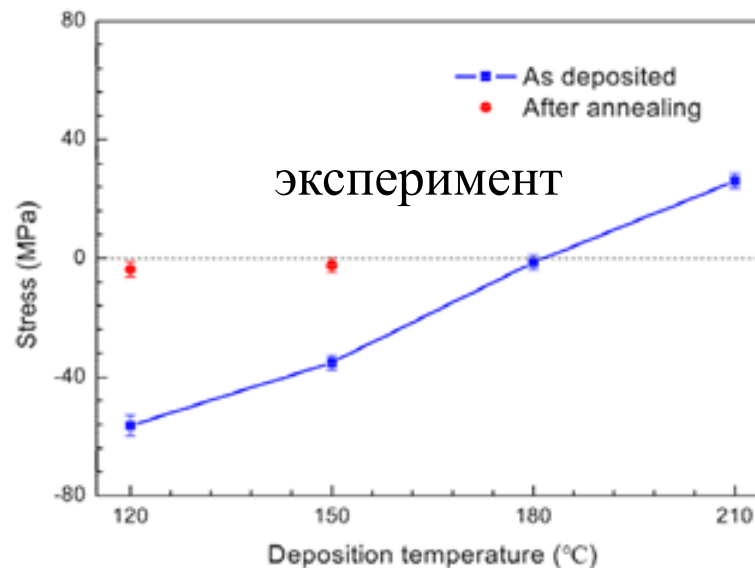
Зависимость главных компонент тензора напряжений от толщины пленки при различных температурах горячей подложки, α -TiO₂



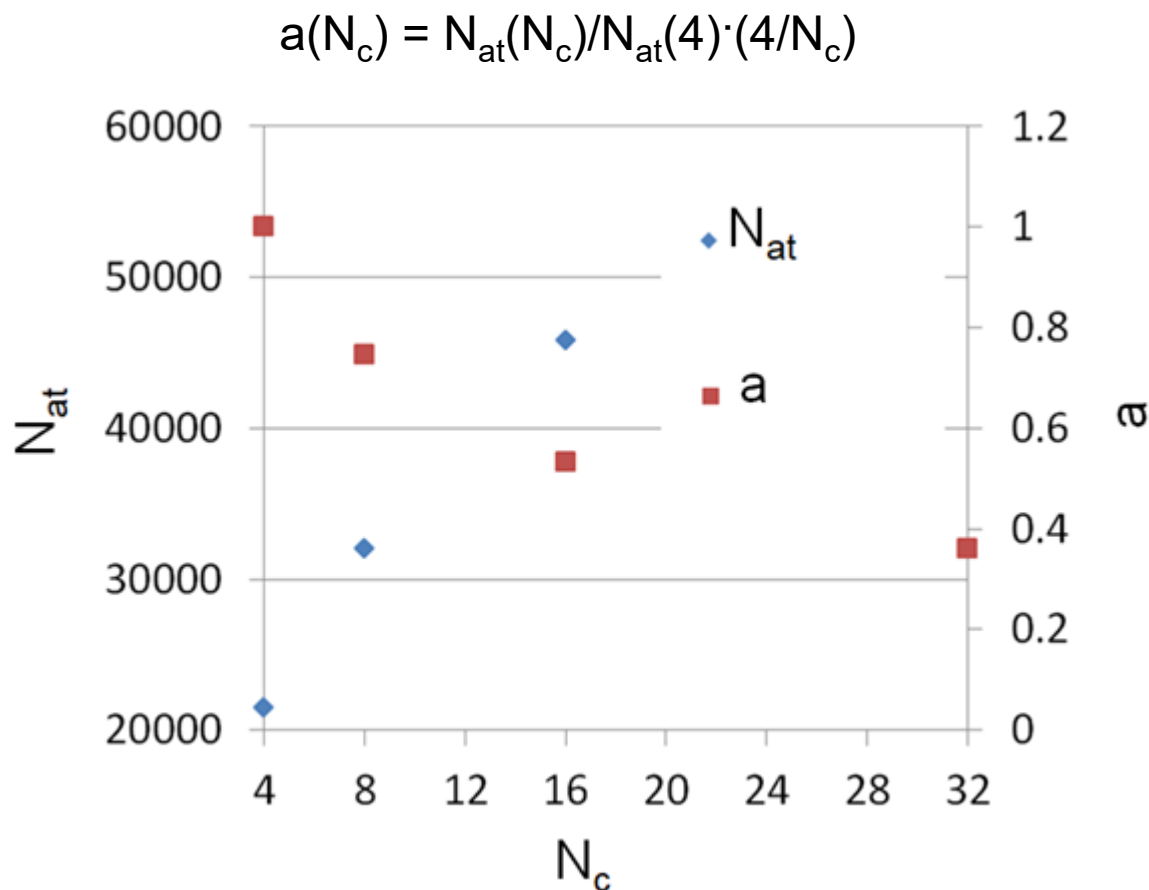
Напряжения в пленках TiO₂-SiO₂



Guo, C.; Kong, M. *Coatings* **2020**, *10*, 720.



Зависимость числа напыленных атомов и эффективности параллельных расчетов от числа ядер



Расчеты проведены в разделе «pascal» суперкомпьютера «Ломоносов-2» со следующими характеристиками: общее число узлов 160, центральный процессор Intel Xeon Gold 6126 (12 ядер, 2.6 ГГц), графический ускоритель 2 x Nvidia P100 (3584 cuda ядер, 16 ГБ памяти), объем оперативной памяти на узле 96 ГБ.

Выводы

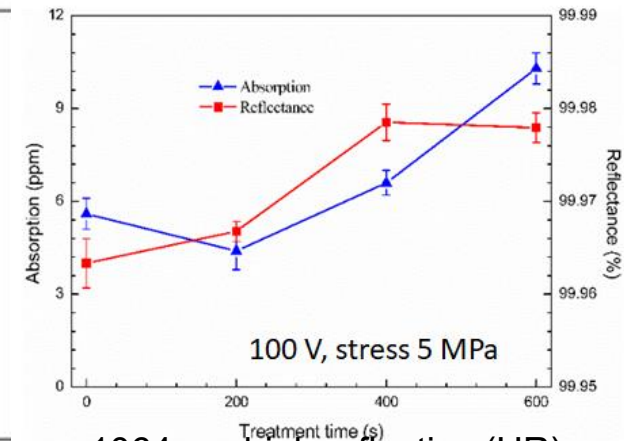
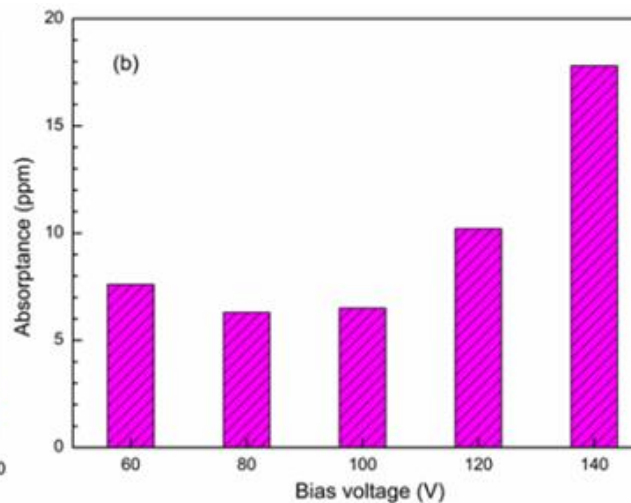
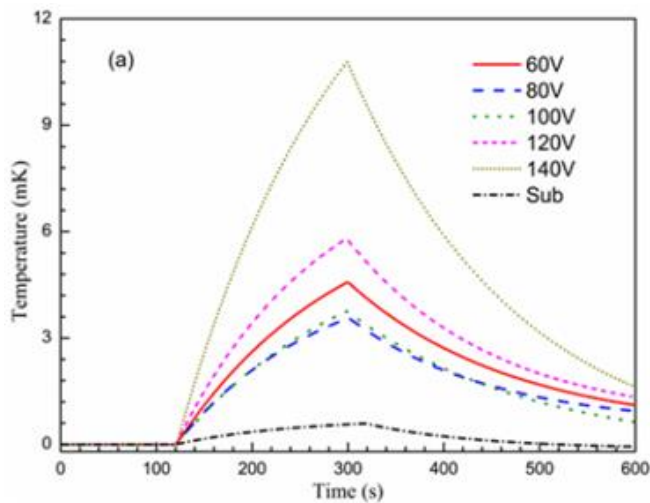
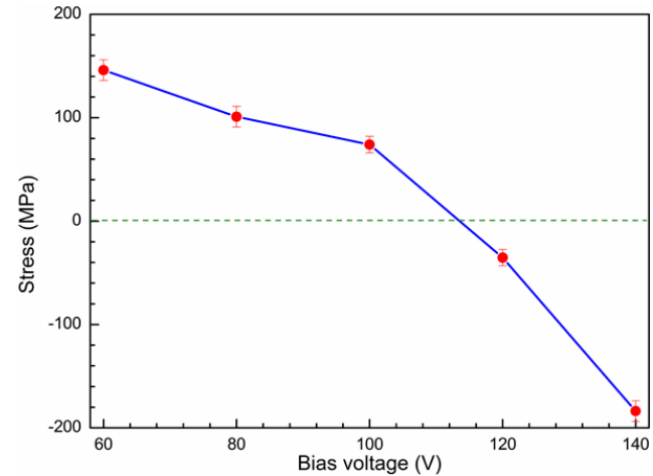
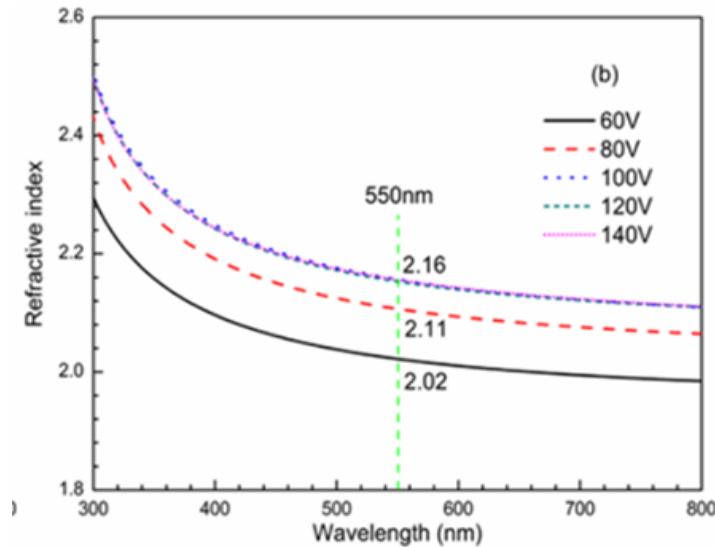
По результатам суперкомпьютерного моделирования напыления тонких пленок диоксида кремния и диоксида титана на горячей подложке сделаны следующие выводы:

1. В пленках диоксида кремния напряжения в основном сжимающие (compressive stress), а их абсолютная величина существенно зависит от энергии напыления. При высокоэнергетическом напылении охлаждение подложки приводит к уменьшению напряжений по абсолютной величине, при низкоэнергетическом напряжения могут как увеличиваться, так и уменьшаться.
2. В диоксиде титана как при высокоэнергетическом, так и при низкоэнергетическом напылении наблюдаются растягивающие напряжения (tensile stress). При охлаждении подложки их абсолютная величина растет.

Спасибо за внимание!

Ta₂O₅: показатель преломления, напряжения, поглощение

Chun Guo et al, Opt. Continuum **3**, 1679-1687 (2024)



1064 nm high reflective (HR)
coating consisting of Ta₂O₅ and
SiO₂