



ESTUDO DE MODELO MATEMÁTICO DE CRESCIMENTO DE MICROESTRUTURA AO ESTUDO DE CRESCIMENTO DE FILMES EM SUBSTRATOS METÁLICOS POR SIMULINK NO MATLAB

Thiago Reis de Almeida – thiago.almeida@engenharia.ufjf.br
Universidade Federal de Juiz de Fora, Faculdade de Engenharia, Departamento de Engenharia de Produção e Mecânica.
Rua José Lourenço Kelmer, s/n – Campus Universitário da UFJF – 4ª Plataforma – Setor de Tecnologia. Bairro São Pedro
36036-900 – Juiz de Fora – Minas Gerais

Rogério de Almeida Vieira – rogerio.vieira@engenharia.ufjf.br
Universidade Federal de Juiz de Fora, Faculdade de Engenharia, Departamento de Engenharia de Produção e Mecânica.
Rua José Lourenço Kelmer, s/n – Campus Universitário da UFJF – 4ª Plataforma – Setor de Tecnologia. Bairro São Pedro
36036-900 – Juiz de Fora – Minas Gerais

Resumo: *Nos últimos anos, pesquisas vem sendo realizadas no sentido de melhor entender a nucleação e crescimento de filmes finos em superfícies de substratos metálicos. Este estudo se torna necessário devido as deficiências de aderência de determinados materiais quando nucleadas e crescidas nestas superfícies. Neste trabalho foi estudado, através de um modelo matemático, crescimento de microestrutura ao estudo de crescimento de filmes substratos metálicos através do uso do SIMULINK em ambiente Matlab. Os resultados apresentados por SIMULINK mostraram valores bastante similares aos encontrados por Duarte.*

Palavras-chave: *SIMULINK, modelo matemático, crescimento de microestrutura de filmes.*

1. INTRODUÇÃO

Nos últimos anos, a área de Engenharia de Superfícies se encontra em constante crescimento no seguimento de Engenharia, Física, Química e Ciência dos Materiais. Juntamente a este crescimento, técnicas de caracterização e simulação vem se tornando cada vez mais importantes e interessantes com objetivo de um melhor estudo e entendimento da dinâmica de crescimento de filmes.

2. MÉTODOS E TÉCNICAS PARA SIMULAÇÃO E ANÁLISE DE FILMES FINOS



2.1 Simulação computacional

Nos últimos anos, a simulação computacional vem assumindo uma importância cada vez maior na vida de diversos pesquisadores como engenheiros, físicos, matemáticos, biólogos, e também em áreas como da medicina e esportes, com o objetivo de adquirir dados cada vez mais complexos como auxílio de suas áreas para o aprimoramento do conhecimento.

Na simulação desenvolvida nos primórdios da Pesquisa Operacional, os problemas eram resolvidos por meio da obtenção dos melhores resultados possíveis para cada parte individual do modelo. Entretanto, à medida que a complexidade dos problemas cresceu, surgiu a necessidade de se utilizar uma abordagem mais sistêmica e generalista, com isto os desenvolvedores de *softwares*, a cada dia que se passa melhoram diversos programas para serem utilizados na pesquisa de simulação computacional.

2.2 Simulação no simulink

O SIMULINK, que é desenvolvido pela The Mathworks. Inc., é um software destinado à simulação de sistemas dinâmicos. O programa é usado para sistemas lineares e não lineares, contínuos e/ou discretos no tempo. Utiliza uma interface gráfica com o usuário para construção dos modelos com diagramas de blocos, através de clique-e-arraste do mouse. Facilitando assim a montagem dos modelos sem precisar usar comandos de programação.

O SIMULINK é a evolução de pacotes de simulação anteriores, que necessitavam a formulação de equações diferenciais ou de equações de diferenças em linguagens de programação. Inclui bibliotecas de blocos contendo fontes, visualizadores, componentes lineares, não lineares e conectores, com a opção de criação ou personalização de blocos. Com o modelo em mãos, a simulação pode ser feita com diferentes algoritmos de resolução, procurando cada um a partir dos menus do SIMULINK. Usando osciloscópios (Scopes) ou outros visualizadores de gráficos dos modelos matemáticos, é possível visualizar o resultado gráfico da simulação mesmo sendo executada a simulação.

2.3 Simulação por modelagem matemática

Outra forma também encontrada para entender a dinâmica de crescimento de filmes finos tem sido desenvolvida através de modelos matemáticos. Alguns autores têm conseguido resultados muito importantes e ajudado no controle destes processos. Em um destes trabalhos “Figura 1”, foi desenvolvido um modelo matemático que depois foi simulado em *software* MATLAB [DUARTE].

Este resultado mostrou a formação de três mecanismos K sendo: $k=0$ formação de ilhas bidimensionais, com a sua mobilidade pela interface limitando o transporte de massa, ou seja, a sua reação com a interface; $k=1$ formação de ilhas bidimensionais, com difusão na superfície, limitando o transporte de massa, ou seja, difusão na superfície; e $k=3$ formação de agrupamentos bidimensionais, com difusão/deslocamento de superfície, limitando a transferência de massa, ou seja, deslocação/difusão.

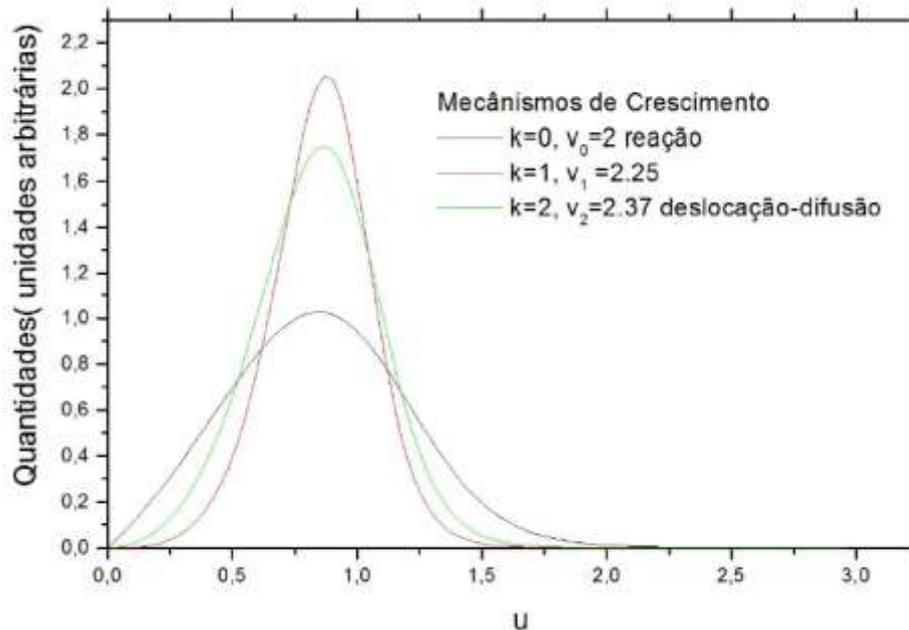


Figura 1 – Gráfico do trabalho de Duarte.
[Duarte, P. T. Ijuí, RS, agosto de 2010]

3. METODOLOGIA

3.1 Simulação no simulink

A simulação no SIMULINK, foi feita baseada num modelo matemático, da “Equação (1)”, que é uma equação da dissertação de mestrado de Patrik Tavares Duarte, [Duarte, P. T. Ijuí, RS, agosto de 2010] da qual explica o crescimento de filmes finos para casos gerais, como o caso dos filmes finos de TiN e AlN, sendo $F(u)$ uma função distribuição de tamanho (unidades arbitrárias), (K) uma constante física determinada pelas características estruturais do material, (v) fator de crescimento em função do mecanismo (adim) e (u) Variável adimensional, representa a variação do tamanho do grão.

$$F_k(u_i) = \frac{2Ku_i(2v)^{\frac{3}{2}}}{[2v_k(u-1)-u^2]^{\frac{3}{2}}} \exp\left[\frac{-6v}{\sqrt{8v-4v^2}} \left(\arctan\left(\frac{2u-2v}{\sqrt{8v-4v^2}}\right) - \arctan\left(\frac{-2v}{\sqrt{8v-4v^2}}\right)\right)\right] \quad (1)$$

Equação de [Duarte, P. T. Ijuí, RS, agosto de 2010]

Para fazer a simulação do modelo matemático da “Equação (1)”, no SIMULINK, foram construídos modelos de blocos, que são as fontes, diagramas a serem modelados e as saídas, que são encontrados na biblioteca de fontes do Matlab. Para este modelo foram utilizadas as fontes: *Constant*, *Gain*, *Math Function*, *Sqrt*, *Subtract*, *Product*, *Divide*, *Trigonometric Function*, *Scope* e o *Ramp*.

3.2 Construção do diagrama de bloco

Na construção do digrama de blocos, foi fixado as constantes u , k e v , no bloco *ramp*, para emular as suas variações. A modelação da equação por digramas de blocos foi feita em ambiente SIMULINK.

4. RESULTADOS

4.1 Simulink

Através do diagrama de blocos, construído no SIMULINK, mostrado na “Figura 2”, é observado no lado esquerdo as entradas, com os blocos *constant* e *ramp*, nos três blocos *ramp*, representando as variáveis v , u e k , cada uma variando entre zero e 2,50, que logo após são ligados aos demais blocos até chegar no bloco de saída, que é o bloco *scope*, sendo este o que gera o gráfico da simulação computacional.

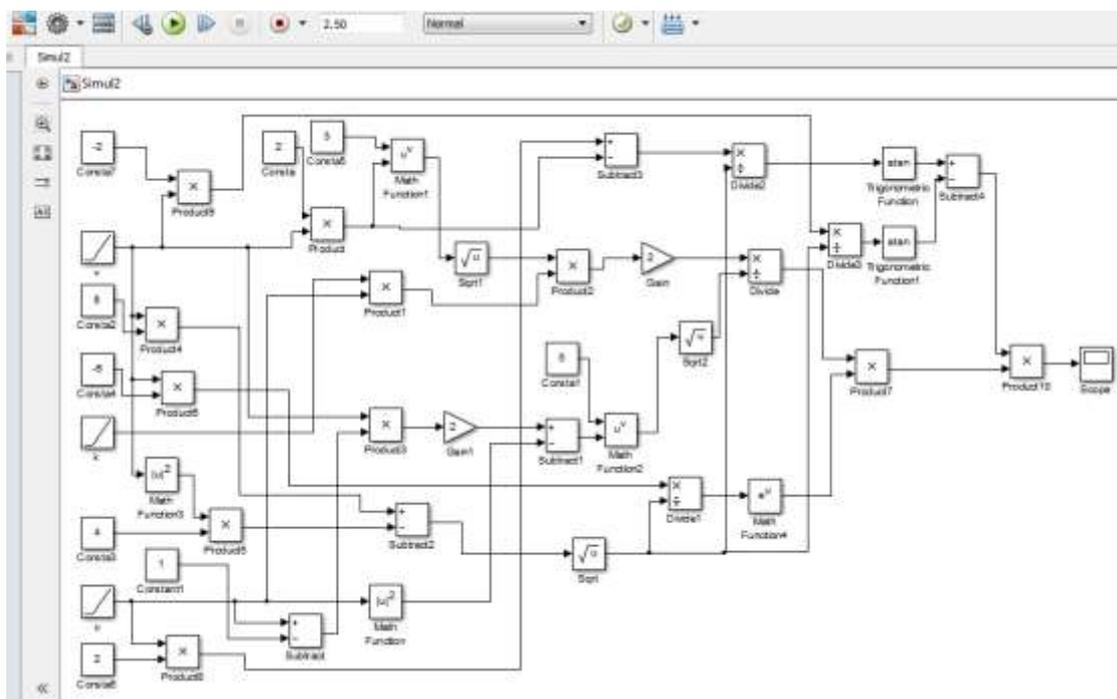


Figura 2. Digrama de blocos do modelo matemático para crescimento de filmes.

O resultado da simulação gerada através do modelo matemático da “Equação (1)”, é mostrado na “Figura 3” sendo, o eixo das ordenados o $F(u)$ uma função distribuição de tamanho (unidades arbitrárias), e no eixo das abscissas as varáveis: (K) uma constante física determinada pelas características estruturais do material, (v) fator de crescimento em função do mecanismo (adimensional) e (u) Variável adimensional, representa a variação do tamanho do grão, cada uma delas variando entre zero e 2,50. Este resultado esta de acordo com o encontrado por Duarte “Figura 1”.

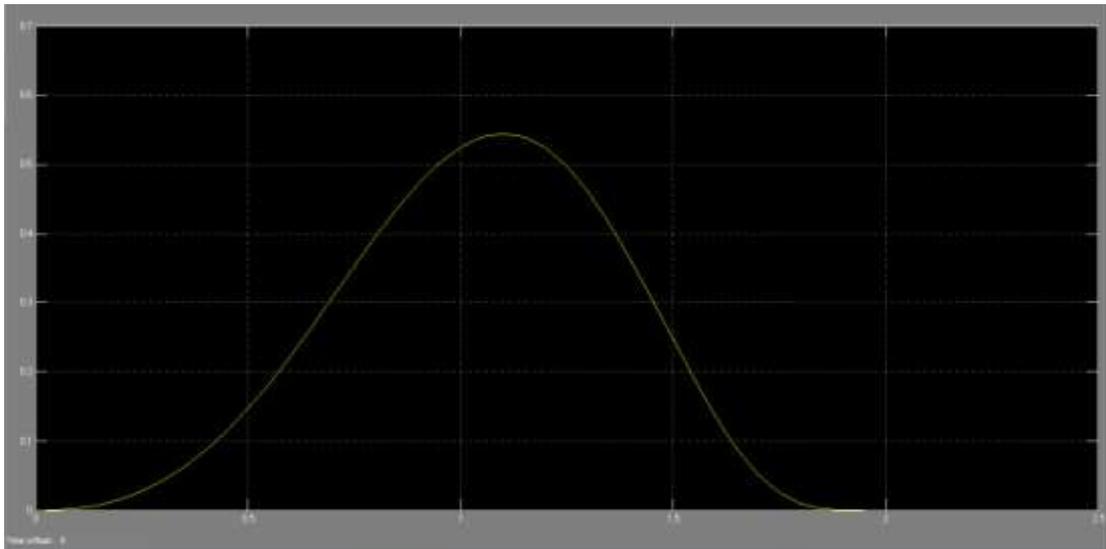


Figura 3. Gráfico gerado pelo *scope*, no SIMULINK.

5. CONCLUSÃO

Neste trabalho foi investigado a simulação de crescimento de filmes em substratos metálicos por SIMULINK no Matlab através de modelo matemático de crescimento de microestrutura.

A simulação no SIMULINK, mostrou-se algo bem próximo do valor apresentado por Duarte. Este modelo será otimizado para aplicações em filmes finos a serem depositados em substratos metálicos com o objetivo de verificar o início da formação de suas interfaces.

Agradecimentos

Os autores gostariam de agradecer à FAPEMIG pela auxílio financeiro e pela bolsa de iniciação científica fornecida durante o período de realização deste projeto de pesquisa.

6. REFERÊNCIAS

Bell, T.; Mao, K.; Sun, Y. Surface engineering design: modelling surface engineering systems for improved tribological performance. *Surface Coating Technology*, v.108/109, p. 360-368, 1998.

Binh, V. T. *Surface mobilities on solid materials: fundamental concepts and applications*. [S.l.]: Plenum Press, 1983.

Bromark, M.; Larsson, M.; Hedenqvist, P.; Hogmark, S. Wear of PVD Ti/TiN multilayer coatings. *Surface Coating Technology*, v.90, p.217-223, 1997.



Brown, I.G.; Anders, A.; Dickinson, M.R.; Macgill, R.A.; Monteiro, O.R. Recent advances in surface processing with metal plasma and ion beams. *Surface Coating Technology*, v.112, p. 271-277, 1999.

Celis, J.P.; Drees, D.; Huq, M.Z.; Wu, P.Q.; De Bonte, M. Hydrid process – a versatile technique and coating needs. *Surface Coating Technology*, v.113, p.165-181, 1999.

Davis, J.R. Surface engineering of specialty steels. *Surface Engineering*, v.5, p.762-775, 1994.

Doolittle. Computer Graphic Service. 1995. Disponível em: <<http://www.genplot.com>>. Acesso em: 26 mar. 2004.

Duarte, P. T. Aplicação de modelos matemáticos de crescimento de microestrutura ao estudo do crescimento de grãos em filmes de Al nanoestruturados. Dissertação de Mestrado. Ijuí, RS, Agosto de 2010.

Filho, B. S. S. Curso de Simulink. Modelagem, Simulação e Análise de Sistemas Dinâmicos. 1ª Edição. Faculdade de Engenharia, Laboratório de Engenharia Elétrica Programa Prodenge / Sub-Programa Reenge. Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Gavira, M. O. Simulação computacional como uma ferramenta de aquisição de conhecimento. Dissertação de Mestrado – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2003.

Heidsieck, H. Status of vacuum and plasma technology. *Surface Coating Technology*, v.112, p. 324-338, 1999.

Lewis, B.; Anderson, J.C. Nucleation and growth of thin films. New York: Academic Press, 1978.

Mattox, D.M. Thin film adhesion and adhesive failure - A perspective. In: Mittal, K.L. (ed). *Adhesion measurement of thin films, thick films and bulk coatings*. [S.l.]: American Society for Testing and Materials, 1978. p. 54.

Mclean, M. Interface in materials. In: _____ (ed). *The science of interfaces in materials engineering*. Belgium: Proceedings of The Colloquium Brusels, 1988. p.7-27.

Mclean, M. Thermodynamics of interfaces. In: _____ (ed). *The Science of Interfaces in Materials Engineering*, [S.l.]: [S.n.], 1988. p.8-27.

Rother, B.; Jehn, H.A.; Gabriel, H.M. Multilayer hard coatings by coordinated substrate rotation modes in industrial PVD deposition systems. *Surface Coating Technology*, v.86/87, p.207-211, 1996.



Síkola, T.; Spousta, J.; Ceska, R.; Zlámál, J.; Dittrichová, L.; Nebojsa, A.; Navrátil, K.;

Rafaja, D.; Zemek, J.; Perina, V. Deposition of metal nitrides by IBAD. *Surface Coating Technology*, v.108, p. 284-291, 1998.

Spaepen, F. Interfaces and stresses in thin films. *Acta Materialia*, v.48, p.31-42, 2000.

Strafford, K.N.; Subramanian, C. Surface engineering : an enabling technology for manufacturing industry. *Journal of Material Processing Technology*, v.53, p.393-403, 1995.

Suchentrunk, R.; Fuesser, H.J.; Staudigl, G.; Jonke, D.; Meyer, M. Plasma surface engineering – innovative processes and coating systems for high-quality products. *Surface Coating Technology*, v.112, p.351-357, 1999.

Tabor, D. Interaction between surfaces : adhesion and friction. In: Blakely, J.M. (ed.). *Surface physics of materials*. New York: Academic Press, 1975. p.476-529.

Vieira, R.A.; Nono, M.C.A. Microstructure and interface analyses of TiN thin films deposited on M2 speed steel substrate by cathodic arc technique. *Journal of Metastable and Nanocrystalline Materials*, Suíça, v. 20-21, p. 654-658, 2004.

Vieira, R.A.; Nono, M.C.A. Surface analyses of TiN thin films grown on 304 stainless steel by cathodic arc technique. *Acta Microscópica*, v. 12, p. 173-174, 2003.

Vieira, R.A.; Nono, M.C.A.; Mattos, M.L.B. MEV and EDS investigations of the Ti film-steel substrate interface. *Acta Microscopica*, Supplement A, v.B, p.309-310, 1999.