

THE **Journal of Materials Education**

Journal of Materials Education

Universidad Autónoma del Estado de México: University of North Texas

vsm@uaemex.mx

ISSN (Versión impresa): 0738-7989

MÉXICO

2004

Gary L. Gray / Andrew J. Miller / Thomas J. Yurick / Suzanne E. Mohny
SOFTWARE EDUCATIVO PARA EL PROCESAMIENTO DE MATERIALES

Journal of Materials Education, año/vol. 26, número 3-4

Universidad Autónoma del Estado de México: University of North Texas

Toluca, México

pp. 339-348

Red de Revistas Científicas de América Latina y el Caribe, España y Portugal

Universidad Autónoma del Estado de México



SOFTWARE EDUCATIVO PARA EL PROCESAMIENTO DE MATERIALES

Gary L. Gray¹, Andrew J. Miller¹, Thomas J. Yurick Jr.¹ y Suzanne E. Mohny²

¹Engineering Science and Mechanics, 212 Earth and Engineering Sciences Bldg.; ²Materials Science and Engineering, and Materials Research Institute, 109 Steidle Bldg., The Pennsylvania State University, University Park, PA 16802.

RESUMEN

Se han desarrollado dos herramientas educativas para el procesamiento de modelaje de materiales. La primera es una caja de herramientas para el MATLAB, llamada FDPDE. Utiliza el método de diferencia finita para resolver los problemas de difusión y transferencia de calor de dos dimensiones, y ha sido probado en un curso de licenciatura sobre el fenómeno de transporte en el procesamiento de los materiales en la Universidad Estatal de Pensilvania. El FDPDE proporciona una forma particularmente efectiva para que los alumnos visualicen las soluciones a los problemas que se les dejan de tarea, así como para resolver una mayor variedad de problemas de los que ellos pueden solucionar analíticamente. La segunda herramienta es un sitio Web, que pueden usar los estudiantes para completar una tarea sobre la influencia de los parámetros de deposición en la micro estructuras de películas finas. Los estudiantes realizan experimentos virtuales en los que depositan películas delgadas bajo una variedad de condiciones y comparan sus resultados. Esto ya se ha utilizado en un curso de mayor nivel sobre películas finas, y seguimos ampliando la cantidad de experimentos virtuales disponibles en este sitio Web.

INTRODUCCIÓN

Las simulaciones electrónicas pueden ser muy valiosas para el procesamiento de materiales, reduciendo el número de experimentos que se deben realizar para desarrollar u optimizar un proceso. Las simulaciones electrónicas también se pueden usar en el salón de clase para permitir a los estudiantes explorar la incidencia de los parámetros de diversos sistemas mucho más rápido que lo que se podría en el laboratorio o a través de la solución de problemas

analíticamente.¹⁻⁶ Además, las computadoras son especialmente útiles para visualizar las soluciones. En este artículo, describimos dos herramientas educativas que hemos desarrollado y usado para enseñar a los estudiantes sobre el procesamiento de materiales, la primera permite a los estudiantes modelar problemas de transferencia y difusión de calor en dos dimensiones, y la segunda les permite simular la deposición física de vapor en películas finas.

SIMULACIÓN DE TRANSFERENCIA Y DIFUSIÓN DE CALOR

La caja de herramientas que hemos desarrollado para el MATLAB, denominada FDPDE, permite a los estudiantes resolver los dos problemas dimensionales de transferencia y difusión de calor. A través del uso una fase gráfica para el usuario, los estudiantes forman modelos, resuelven las ecuaciones asociadas, y después visualizan las soluciones usando una variedad de herramientas gráficas, incluyendo animaciones. Tanto los problemas permanentes como los dependientes del tiempo se pueden resolver.

Unos cuantos detalles del FDPDE

La FDPDE resuelve ecuaciones de diferencial parcial de la forma

$$A(x, y) \frac{\partial \phi}{\partial t} - \nabla \cdot [B(x, y) \nabla \phi] = G(x, y, t), \quad (1)$$

donde $A(x, y)$, $B(x, y)$ y $G(x, y, t)$ se especifican de acuerdo al problema particular a resolver y a $\phi = \phi(x, y, t)$. La ecuación representa el tiempo dependiente de la transferencia o difusión del calor. Si A es cero y G no es una función de tiempo, la ecuación proporciona una solución permanente. La ecuación está resuelta para el campo ϕ (representando temperatura o concentración) sobre un dominio bidimensional y está sujeto a condiciones límite de la forma $\phi = c$ o $\partial \phi / \partial n + a \phi = b$, donde a , b y c pueden ser funciones de espacio (x, y) y tiempo (t) y $\partial / \partial n$ representa la derivada junto con la unidad normal externa al límite.

Las reglas de la diferencia finita se usan para separar la dependencia espacial del campo para obtener un conjunto de ecuaciones ordinarias diferenciales (ODEs) en el caso dependiente del tiempo, o ecuaciones algebraicas en el caso de estado estable. La FDPDE reviste el dominio con una retícula rectangular de diferencia finita para obtener los puntos discontinuos que son calculados de las soluciones. El usuario tiene la opción de colocar la cantidad de líneas de la

cuadrícula para cambiar el nivel de precisión. La ecuación diferencial parcial discontinua (PDE) está resuelta en intersecciones de cada par de líneas de la cuadrícula que están dentro del dominio. Los puntos en donde las líneas de la cuadrícula intersectan el límite se toman como nodos límites, y las condiciones límites son aplicadas en estos puntos. Para las condiciones límite que contienen derivadas, se usan diferencias regresivas junto con la unidad normal. En el caso de tiempo dependiente, el método Crank-Nicolson⁸ se usa para resolver el PDE, y actualmente el usuario también necesita especificar la medida del tiempo en el que el sistema se resuelve, así como las condición inicial en ϕ , esto es, $\phi(x, y, 0)$. Finalmente, el signo del operador del MATLAB (\setminus) se usa para resolver sistemas lineares en cada medida de tiempo. No es necesario que los estudiantes entiendan los detalles del solucionador, pero se incluye la información por referencia.

Uso del FDPDE

El programa FDPDE se puede usar para resolver una variedad de problemas bidimensionales de transferencia y difusión de calor. Por ejemplo, los estudiantes lo han usado en el salón de clase para examinar el enfriamiento de una tira de plástico inyectada en un molde, la distribución de la temperatura en una barra de combustible nuclear y la difusión intrínseca del carbono de la superficie de partes de acero (carburación). El procedimiento para resolver problemas con el FDPDE se puede dividir en tres etapas: modelado, resolución y graficado (o analizando el resultado generado por el solucionador).

Modelado

El modelado del problema es resuelto a través de los siguientes seis pasos que a continuación se describen:

1. *Tamaño del conjunto de la cuadrícula y del espaciado*

El primer paso simplemente permite al usuario elegir una cuadrícula conveniente

por encima de la cual los límites de un objeto se pueden dibujar. La característica de “trabajo fácil para cuadricular” es una opción disponible.

2. Trazar límites del área de competencia de los problemas

El siguiente paso en el proceso de modelado es trazar límites del área de competencia del problema. El requerimiento básico es trazar un objeto límite para cada condición de límite requerida. Se proporcionan nueve herramientas: (1) *selección de herramienta*, (2) *herramienta de acercamiento*, (3) *herramienta lineal*, (4) *herramienta rectangular*, (5) *herramienta circular/elipsoidal*, (6) *herramienta de traducción*, (7) *herramienta de rotación*, (8) *herramienta de división*, y (9) *herramienta de intersección*. Estas herramientas, usadas combinadamente, permiten a los usuarios crear arbitrariamente objetos formados con múltiples segmentos junto a los que se pueden aplicar una variedad de condiciones límite.

3. Aplicación de un conjunto de problemas

Después de trazar los límites que constituyen el perfil del área de competencia del problema, el usuario determina la aplicación para el problema. La aplicación se puede determinar tanto para la *transferencia o para la difusión de calor*. La aplicación del problema determina los tipos de parámetros que se pueden determinar para el PDE y las condiciones límite.

4. Generar el área de competencia del problema

Una vez que todos los límites están trazados y se ha determinado la aplicación del problema, el usuario genera el área de competencia del problema seleccionando **Make Domain** del menú **Problem**. El área de competencia del problema es la región

incluida dentro de los límites trazados previamente, y el PDE está resuelto en los puntos del área de competencia. Los límites deben formar un contorno cerrado para que el área de competencia esté creada adecuadamente.

5. Determinar el tipo y parámetros de PDE

Después de que se ha determinado el área de competencia, el usuario determina el tipo de PDE a resolver (estado estable o de tiempo dependiente) y determina todos los parámetros que son relevantes para ese PDE. Para el problema de transferencia de calor de tiempo dependiente, el PDE en (1) se integra

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla \cdot (k \nabla T) = g, \quad (2)$$

donde T es temperatura, ρ es la densidad de masa, C_p es el calor específico, k es la conductividad térmica y g es la tasa de generación por unidad de volumen. Para el problema de transferencia de calor de estado estable, $\partial T / \partial t = 0$. Para el problema de difusión dependiente del tiempo, el PDE en (1) se integra

$$\frac{\partial C}{\partial t} - \nabla \cdot (D \nabla C) = 0, \quad (3)$$

donde C es la concentración y D es el coeficiente de difusión. Para el problema de difusión de estado estable, $\partial C / \partial t = 0$.

Para los problemas de transferencia de calor, los usuarios ingresan valores de conductividad térmica, densidad y calor específico. Para problemas de difusión se ingresa el coeficiente de difusión.

6. Determinación de condiciones límite y parámetros

Las condiciones límite se determinan por la selección de objetos límite con el ratón y posteriormente seleccionando **Set Boundary Conditions** del menú **Problem**. Las condiciones límite caen en tres diferentes tipos: una condición que especifica el valor del campo (temperatura o concentración)

sobre el límite (también conocido como condición *Dirichlet límite*), una condición que especifica el valor de la derivada del campo sobre el límite (también conocida como condición *Neumann límite*), o una condición que contiene tanto el campo y sus derivadas (también conocida como condiciones de límite mixtas o de *Robin* o de *Neumann generalizadas*). Estos tipos de condiciones límite dependen de la aplicación que se esté resolviendo.

Como ejemplo, suponga que la aplicación esté determinada para la transferencia de calor. En este caso, hay cuatro opciones de condiciones límites posibles que aparecen en la ventana de diálogo. La primera es llamada **Insulated Neumann** y está dada por la ecuación $\partial T / \partial t = 0$, donde n es la unidad exterior normal al límite. Esta condición límite determina el límite a ser aislado, entendiendo que no puede fluir el calor a través del límite. La segunda se conoce como **Flux Neumann** y está dada por la ecuación $-k\partial T / \partial n = q$, donde q es la especificación del usuario del flujo de calor a través del límite y k es la conductividad térmica. Esta condición permite la especificación del flujo de calor a través del límite. La tercera se conoce como **Convection Neumann** y está dada por la ecuación

$$-k\partial T / \partial n = h[T - T_e],$$

donde h es el coeficiente de transferencia de calor y T_e es la temperatura externa. En este caso, el usuario determina h y T_e . Esta condición límite es una condición mixta ya que contiene T y $\partial T / \partial n$. Ésta permite la especificación de la transferencia de calor para o desde una conducción media con temperatura T_e fuera del límite. La cuarta es llamada **Dirichlet** o **Constant T_s** , para lo cual el usuario especifica una temperatura constante sobre el límite. Para problemas de difusión, uno puede determinar las condiciones límite de una manera análoga.

Se debe usar una colocación constante de unidades, ya que el software no despliega o convierte unidades.

Resolución

Después de que el problema ha sido modelado apropiadamente, está listo para resolverse. Funcionando el solucionador es más bien fácil comparado con el modelado. Hay tres pasos que se necesitan para hacer funcionar el solucionador del FDPDE, como se describe a continuación.

1. *Determinar la cuadrícula finita diferencial*

El solucionador FDPDE sólo trabaja en una cuadrícula cartesiana de espacios regulados. Los puntos de muestra usados en el cálculo de la diferencia finita están ubicados en todas las intersecciones de la cuadrícula. Los puntos de muestra del límite están ubicados en las intersecciones de las líneas de la cuadrícula con los límites. Para ver donde están ubicados los puntos de muestreo, los usuarios pueden seleccionar **Make Finite Difference Grid** del menú **Solve**. El espaciamiento de los puntos de muestreo afecta la exactitud de la solución. Mientras decrece el espaciado de los puntos de muestreo, la exactitud de la solución se incrementa. Sin embargo, el tiempo requerido para generar una solución se incrementa mientras el espaciado disminuye. Para aprender cómo se afectan las soluciones por el espaciado, se le encarga a los estudiantes que prueben diferentes espaciados y describan lo que observan como parte de una tarea utilizando el software.

2. *Determinar las condiciones iniciales y la medición del tiempo*

Este paso sólo aplica para los PDEs dependientes del tiempo. Las condiciones iniciales están especificadas como una veta que da el valor inicial del campo en el interior del área de competencia. La condición inicial puede contener las variables espaciales x y y si la condición

inicial necesita ser una función de la posición. Por ejemplo, ingresando 300 se determina la condición inicial de cada punto en el área de competencia a 300 unidades de temperatura o concentración, o ingresando $20x$ se determina la condición inicial como un valor que se incrementa uniformemente mientras x se incrementa. Los valores de x y y dependen de la posición del área de competencia en la ventana de la cuadrícula, así que debe cuidarse esto cuando se especifique una condición inicial que contenga x o y .

3. Solución del PDE

Para resolver el PDE, el usuario selecciona **Solve PDE** del menú **Solve**. El solucionador primero hará la cuadrícula finita diferencial, si es que no está ya hecha por el usuario para los ambientes actuales, y muestra los puntos de muestreo del área de competencia en la ventana principal. Después, el solucionador resuelve el PDE tanto para el caso de estado estable o dependiente de tiempo, dependiendo del tipo de PDE. Para el PDE dependiente del tiempo se usa el método Crank-Nicolson.

Graficado

Ya que el solucionador ha terminado, se puede analizar la información generada por éste, lo cual se hace en FDPDE graficando el resultado de la información de varias formas. Todos los esquemas están a todo color y se generan usando la caja de diálogo **Plot Settings**. Para los PDEs dependientes del tiempo hay dos maneras básicas de graficar la información. La primera es una gráfica de distribución del campo (temperatura o concentración) para un tiempo específico. Por ejemplo, en la Fig. 1 se muestra la distribución de la temperatura a través de la sección de cruce de una banda de polímero moldeada por inyección mientras se enfría. La segunda manera es una gráfica de serie de tiempo para un punto específico espacial del área de competencia, como se muestra en la Fig. 2. En este ejemplo, los estudiantes pueden monitorear la temperatura como una función de

tiempo en la línea central (o cualquier otra posición) en la banda de polímero moldeada por inyección de la Fig. 1. La distribución de la gráfica también se puede animar para mostrar cómo cambia la distribución con el tiempo. Las soluciones de los PDEs para los problemas de estado estable sólo se muestran como gráficas de distribución de la solución del estado estable.

También están disponibles algunas variaciones sobre estos procedimientos básicos de graficado. Por ejemplo, también se puede generar un perfil de la distribución del campo frente a la posición a lo largo de la trayectoria de la línea recta.

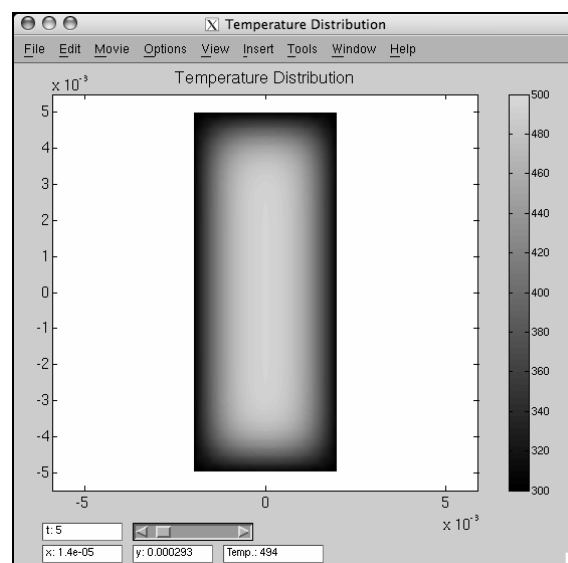


Figura 1. Distribución de la temperatura en un punto en tiempo durante el enfriamiento de una banda de polímero moldeada por inyección. Esta banda está más caliente en el centro y más fría en las orillas que están más cerca del molde.

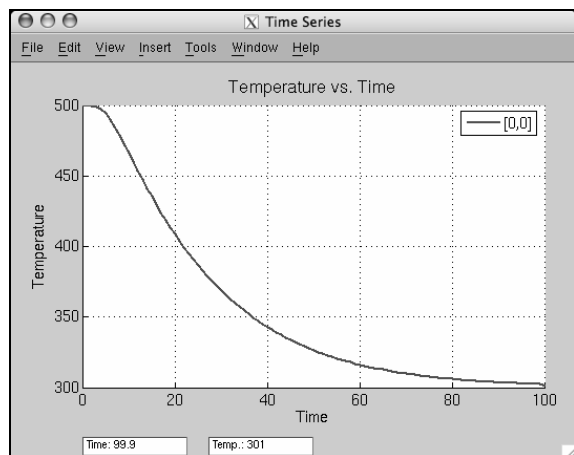


Figura 2. Temperatura como una función de tiempo en la línea del centro de la banda de polímero moldeada por inyección mostrada en la Fig. 1.

Valoración de la clase

Para evaluar el software, se pidió a los estudiantes que respondieran tres preguntas y que elaboraran sus respuestas bajo una encuesta anónima. Cuando se les preguntó si encontraron que el software era fácil de usar, 80% de los estudiantes de una clasificación de 25 respondieron “sí”. Sólo 12% respondieron “no”, mientras que 8% dijo que el software era un poco fácil de usar. Sin embargo, 8% también comentó que probablemente habían encontrado más fácil el uso del software que lo que encontraron el primer día en que éste fue introducido.

La siguiente pregunta que hicimos, “¿te ayudó el software a visualizar mejor las soluciones para problemas de transferencia de calor?”. Una clara mayoría de la clase, 92%, respondieron “sí”, 8% contestó que el software ayudó “en algo”, mientras que ningún estudiante dijo que no fuera útil.

Recibimos algunas respuestas interesantes a la pregunta, “¿te ayudó el software a entender mejor cómo resolver problemas de transferencia de calor?”. La mayoría de los estudiantes (56%) respondieron “sí”, y algunos estudiantes dieron mayor explicación de cómo les fue útil el programa. Un estudiante respondió: “me hizo pensar acerca del problema en lugar de sólo

ingresar los datos”. Otro dijo: “Los problemas realizados en clase y en HW son muy rígidos. Con el software pude observar el acontecimiento de otros eventos y no sólo a lo que está enfocado el problema”. Otro estudiante indicó que ahora pudo “entender con más claridad lo que en realidad significa el estado estable”.

Por otra parte, inicialmente estábamos decepcionados de que 8% de la clase respondió que el software les había ayudado “en algo” a entender cómo resolver los problemas de transferencia de calor, mientras 36% dijo que no les había ayudado. Sin embargo, algunas de las explicaciones de por qué el software no ayudó, demostró que el software estaba realmente diseñado tanto como lo proyectamos. Por ejemplo, un estudiante que no encontró útil el software advirtió que “Necesitas entender lo que querías hacer para que el software sea útil”. Por supuesto, intentamos exigir a los estudiantes que reconocieran cuáles ecuaciones diferenciales se necesitaban resolver y cuáles variables eran importantes en sus problemas. El propósito del software fue ayudarles a resolver fácilmente las ecuaciones y visualizar las soluciones. Otro estudiante destacó que “Una vez que se identificaron las variables, fue fácil que se obstruyera el camino de principio a fin del problema”. Ya que no pretendíamos que el software fuera difícil de usar, no consideramos este comentario por ser enteramente negativo.

SIMULACIÓN DE LA DEPOSICIÓN DE PELÍCULA FINA

Una galería de simulaciones de deposición de película fina para el níquel se ha creado usando simulaciones moleculares dinámicas. Estas simulaciones están disponibles a través de una página Web que permite a los estudiantes elegir una variedad de condiciones de deposición, de modo que permite a los estudiantes realizar “experimentos virtuales”. El estado actual de la página Web, que se titula “Simulación del Crecimiento de Películas finas”, permite al estudiante seleccionar la energía de las especies que ingresan, la temperatura del sustrato, el ángulo de incidencia de las especies entrantes y

(como una opción futura) el tiempo dependiente de rotación del sustrato perpendicular al plano de la película. La parte izquierda de la página Web que permite esta selección se muestra en la Fig. 3. Antes de discutir cómo se usaron estos experimentos virtuales en el salón de clases, describiremos brevemente la dinámica molecular (MD) y cómo se usaron éstas para crear esos experimentos virtuales.

Una Breve Descripción de la Dinámica Molecular

La dinámica molecular es una técnica de simulación para materiales que está basada en mecánica clásica. En contraste a la mecánica cuántica donde se considera el movimiento de las partículas sub atómicas, la MD emplea una generalización de conceptos del átomo. En la MD, los átomos están representados por puntos de masa o partículas, y sus interacciones con átomos vecinos están gobernadas por una función apropiada empírica de energía potencial. El potencial de Lennard-Jones (L-J), que ha sido el que hemos usado en estas simulaciones, es un ejemplo de tal potencial empírico y está dado por

$$U(r_{ij}) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (4)$$

donde σ y ε , que están basadas en datos experimentales, son la longitud del lazo de equilibrio y la energía del lazo de equilibrio, respectivamente, y r_{ij} es la distancia entre los átomos i y j . El término $(\sigma/r_{ij})^{12}$ representa la interacción repulsiva entre dos átomos, y el término

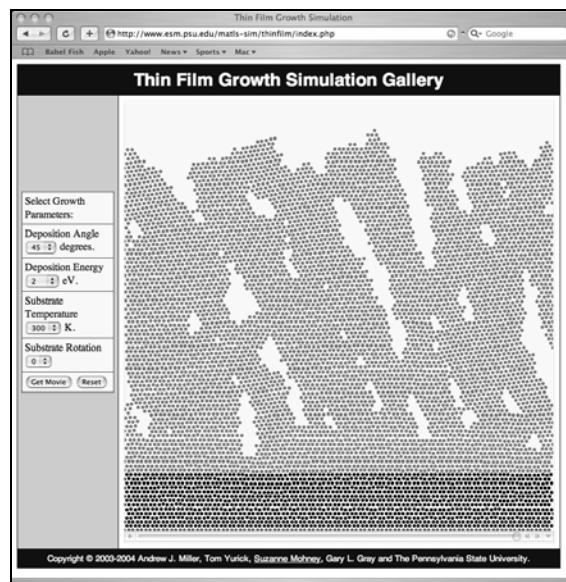


Figura 3. Página Web de simulación de crecimiento de película delgada que ilustra las opciones de deposición disponibles para los alumnos. En esta simulación, Se utilizan el ángulo de deposición (o ángulo de incidencia) de 45°, energía de deposición (o energía de entrada de átomos de Ni) de 2 eV, y un sustrato de temperatura de 300K.

$(\sigma/r_{ij})^6$ representa la atracción entre dos átomos. Mientras el potencial L-J se desarrolló para modelar la interacción interatómica en gases inertes con ataduras tipo Van der Waals, los parámetros del potencial pueden ser adaptados a la información experimental de otras sustancias, tal como materiales cúbicos de cara centrada, así que el potencial L-J se puede usar para modelados genéricos de otros tipos de adaptaciones.

En la MD, la ecuación gobernante para la partícula i th es, por supuesto, la segunda ley de Newton,

$$\mathbf{f}_i = m_i \ddot{\mathbf{r}}_i, \quad (5)$$

donde \mathbf{f}_i es la fuerza total sobre la partícula i , m_i es la masa de la partícula i , \mathbf{r}_i es la posición de la partícula i , y el icono denota la diferenciación con respecto al tiempo. La fuerza total sobre la particular i está dada por la suma de sus interacciones con las otras partículas N -

1, esto es, $\mathbf{f}_i = \sum_{j=1}^N \mathbf{f}_{ij}, (i \neq j)$, donde \mathbf{f}_{ij} es la fuerza sobre la partícula i debido a la partícula j y está dada por

$$\mathbf{f}_{ij} = -\frac{dU}{dr_{ij}} \mathbf{u}_{ij}, \quad (6)$$

Y donde \mathbf{u}_{ij} es un vector unitario desde la partícula i a la partícula j . La fuerza está frecuentemente truncada o “cortada” para salvar el tiempo computacional, esto es, $\mathbf{f}_{ij} \neq 0$ para $r_{ij} \in (0, r_c)$, donde r_c es la distancia cortada. Si este es el caso, entonces cuando se calcula la fuerza sobre la partícula i , sólo las partículas dentro de un cierto radio cortado son consideradas y las partículas más allá de esta distancia son abandonadas, ya que no contribuyen significativamente a la fuerza. Un corte típico para los sistemas L-J es $r_c = 2.5\sigma$, y eso es lo que se usa en estas simulaciones.

Finalmente, (5) es resuelta numéricamente usando un método de diferencia finita. El método usado en estas simulaciones el método corrector predictor de Gear.⁷

Cómo se deposita una película delgada

Para iniciar la simulación de la deposición de una película delgada, las partículas de las especies deseadas son posiciones iniciales asignadas en una cuadrícula ideal que representa el sustrato. En una simulación bidimensional, esta cuadrícula es un plano empaquetado triangular, y en una simulación tridimensional la cuadrícula es un cubo de cara centrada.* Las velocidades iniciales están asignadas a las partículas escaladas así que el momento lineal total del sistema es cero, y después escalada nuevamente así que la energía cinética promedio de las partículas es equivalente a una temperatura fija. Este escalamiento de temperatura está hecho usando el teorema *equipartition*, el cual requiere que

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \langle v_i^2 \rangle = \frac{3}{2} N k_B T, \quad (7)$$

donde v_i es la velocidad de la partícula i , T es la temperatura deseada, k_B es la constante Boltzmann, N es el número de partículas en la simulación, y $\langle \cdot \rangle$ denota un promedio del tiempo. El factor de 3 del lado derecho pertenece al número de grados de libertad del sistema. Para un sistema bidimensional, este factor debe cambiarse a 2. Las velocidades de la partícula también están escaladas a la temperatura deseada periódicamente durante el uso de la simulación (7).

Las partículas a lo largo de la mayoría del fondo de las capas del sustrato están restringidas de movimiento para así arreglar el sustrato en el espacio. Las condiciones límite periódicas son aplicadas a los lados del sustrato para imitar el efecto de un sustrato infinito. La cúspide del sustrato se abre para permitir la deposición de partículas de películas. Una vez que se ha construido el sustrato, se permite equilibrar para un número de pasos así que el promedio de la energía cinética del sistema alcanza la de la temperatura determinada. Durante este tiempo las velocidades de la partícula son escaladas al punto de temperatura determinada.

Después de la etapa de equilibración, las partículas de las especies de las películas deseadas son introducidas dentro de las celdas del simulador. Estas partículas están asignadas a posiciones iniciales arriba del sustrato a una distancia suficiente para que no haya interacción entre la partícula de la película y el sustrato. La velocidad inicial de las partículas de la película es asignada para que corresponda con la energía de deposición especificada. Ya que estas partículas son depositadas, forman la película fina. La cantidad de tiempo entre la introducción de las partículas es determinada para que las partículas alcancen el sustrato y se equilibre antes de que se introduzca la siguiente serie de partículas.

* La estructura del sustrato depende del material que está siendo simulado.

Mientras se acumulan las partículas de las películas, su energía cinética también se acumula. Para remover este exceso de energía cinética y para reflejar el hecho de que el calor es normalmente removido a través del sustrato, se escalan las velocidades de las partículas. Este escalamiento de la velocidad es realizado en una capa de partículas ubicadas encima de las partículas arregladas del sustrato, debajo de las capas

cúspide de la película. Mientras crece la película y se vuelve más gruesa, la capa de las partículas cuya velocidad es escalada crece igualmente en grosor. Es importante advertir que la mayoría de las cúspides de la capa de la película está siempre libre para moverse bajo la física del simulador y no está influenciada directamente por la escala de temperatura.

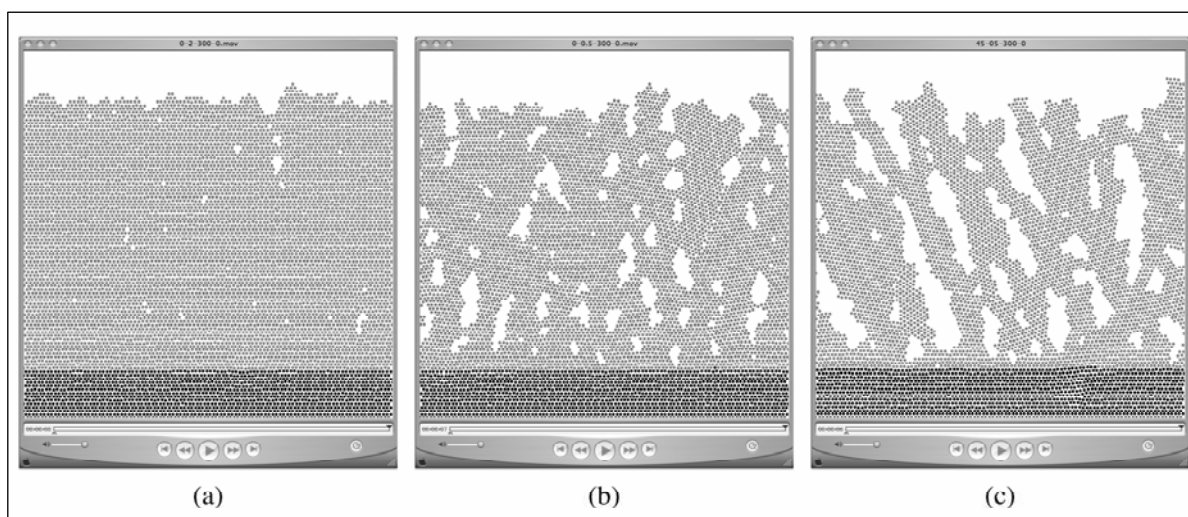


Figura 4. Simulación de película de Ni depositada sobre un sustrato a 300K a (a) 0° ángulo de incidencia y 2 eV energía de especies entrante, (b) 0° ángulo de incidencia 0.5 eV energía de especies entrante, y (c) 45° ángulo de incidencia y 0.5 eV energía de especies entrante.

Ocasionalmente, durante el proceso de deposición, la entrada de partículas finas impacta el sustrato y son reflejadas. Estas partículas reflejadas son detectadas y se resetea su posición y velocidad para redepositarlas sobre la película creciente. Una vez que la película alcanza el grosor deseado, se detiene la introducción de nuevas partículas dentro del simulador. En este punto, no se permite que termine el proceso de deposición de ninguna particular que no haya alcanzado la película. Entonces, se realiza una equilibración posterior para remover cualquier exceso de energía cinética.

Uso en una Asignación de Tarea

Estas simulaciones fueron usadas por uno de los autores como experimentos virtuales en el otoño del 2003 en un curso titulado “Síntesis y Elaboración de Materiales electrónicos y

Fotónicos”. Los estudiantes que evaluaron el efecto de estos parámetros en este curso superior de películas finas fueron fácilmente capaces de observar y reportar que un incremento en la energía de los átomos de Ni entrantes resultaron en la densificación de películas depositadas en ángulos de incidencia normales o casi normales, como pretende ser esperado para el rango de las energías usado en estas simulaciones. El efecto de esta variable se puede observar comparando las Figs. 4(a) y 4(b), en las cuales los átomos de Ni se depositaron con una energía de 0.5 y 2 eV, respectivamente. La última condición resulta en una película más densa, ya que los átomos tienen suficiente energía para moverse a sitios más favorables antes de que llegue el resto. Los estudiantes también observaron fácilmente una estructura en forma de columna en muchas de sus películas, y fueron capaces de evaluar el efecto del ángulo de incidencia de los átomos

de Ni entrantes sobre las direcciones de esas columnas. Comparando las Figs. 4(b) y 4(c), vemos que al cambiar el ángulo de incidencia de los átomos de Ni entrantes de 0 a 45°, manteniendo otros parámetros constantes, resulta en la inclinación de las columnas en la película hacia la fuente de los átomos de Ni. Sin embargo, sólo dos temperaturas de sustrato (300 y 600K) estuvieron disponibles al tiempo que las simulaciones fueron usadas por los estudiantes, y se necesitaron mayores temperaturas del sustrato para hacer más obvia la temperatura de éste. En particular, como la temperatura del sustrato se eleva bien más arriba de 600K, los átomos tienen suficiente energía para su reacomodo durante el proceso de deposición, y la película se vuelve más densa con una desaparición de la morfología de la forma de la columna. Las simulaciones para 900 K se añadieron a la galería durante el verano de 2004.

SÍNTESIS

Se han descrito dos herramientas educativas basadas en la computadora para modelar la elaboración de materiales. La caja de herramientas FDPDE del MATLAB se puede usar para resolver una variedad de problemas de difusión y transferencia de calor en 2D y está disponible sin costo a través del sitio Web <<http://www.esm.psu.edu/matls-sim/>>.

También se puede encontrar en este sitio un manual detallado del usuario y problemas de ejemplo. Los usuarios deben registrarse en el sitio Web y solicitar un clave de acceso, que es devuelta por un correo electrónico una vez que el usuario está aprobado. Requerimos que los usuarios no distribuyan su clave de acceso para que podamos mantener una lista de usuarios. Se enviarán notificaciones de las actualizaciones y retroalimentaciones requeridas en un futuro. Se puede tener acceso a la galería de simulaciones de deposición de películas finas a través del sitio Web <<http://www.esm.psu.edu/matls-sim/thinfilmm/>>. Más simulaciones,

particularmente para mayores temperaturas del sustrato, se incluirán durante el verano de 2004. Para prestar atención a las preguntas acerca de los materiales obtenidos por Internet deben dirigirse a Suzanne Mohny al correo <mohny@ems.psu.edu>.

RECONOCIMIENTOS

Los autores desean agradecer el apoyo de la Fundación Nacional de Ciencias a través de la beca 9952597 y al Instituto de Investigación en Materiales de la Universidad Estatal de Pensilvania.

REFERENCIAS

1. M. C. Dorneich y P. M. Jones, *Journal of Engineering Education* **Octubre**, 279 (2001).
2. H. Hodge, H. S. Hinton, y M. Lightner, *Journal of Engineering Education* **Octubre**, 507 (2001).
3. R. de Hoog, T. de Jong, y F. de Vries, *Education and Computing* **6**, 359 (1991).
4. T. de Jong, *Education and Computing* **6**, 217 (1991).
5. W. R. van Joolingen y T. de Jong, *Education and Computing*, **6**, 241 (1991).
6. P. J. Mosterman, M. A. M. Dorlandt, J. O. Campbell, C. Burow, R. Bouw, A. J. Brodersen y J. R. Bourne, *Journal of Engineering Education* **Julio**, 279 (1994).
7. J. M. Haile, *Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods* (John Wiley and Sons, Nueva York, 1997) pp. 157-166.
8. D. R. Poirier y G. H. Geiger, *Transport Phenomena in Materials Processing*, (TMS, Warrendale, PA, 1994), pp. 571-608.