# Те**оретическо**е описание

Настоящая модель основана на предыдущих исследованиях [14], выполненных для одиночной металлической мишени, напыляемой в реактивной атмосфере. С помощью теории газовой кинетики и установившегося материального баланса при различных задействованных поверхностях реактора и включенной скорости откачки можно установить изменение парциального давления реактивного газа в зависимости от его введения, сделав некоторые упрощающие предположения. Для удобства понимания математической разработки в рамках теоретического подхода будет проанализирована система титан-хром-кислород. При этом будет считаться, что (i) ионы аргона ответственны за напыление мишени, (ii) скорость откачки постоянна для каждого вводимого газообразного вещества, (iii) на титане образуются стехиометрические соединения TiO и Cr2O3; формируются на титановой и хромовой мишени соответственно, (iv) молекулы реагирующего газа беспорядочно перемещаются в камере и могут быть поглощены металлическими поверхностями (хемосорбция) или стехиометрическими соединениями на поверхности.

# Методическая часть

Для проведения моделирования процесса двойного осаждения была построена программа ЭВМ и оформлена в виде модуля на языке питон.

Разработанный модуль работает с тремя классами:

1. Targer-setup – Класс отвечающий за моделирование процессов проходящих а мишени и хранящий параметры мишени.
2. Model – Класс отвечающий за моделирование процессов происходящих в всей камере и хранение параметров процесса
3. Painter – Класс, отвечающий за вывод изображений и их оформление

Для того чтобы провести моделирование необходимо провести следующие операции:

## Создание объекта мишени

Для того, чтобы создать объекты соответствующие распыляем мишеням необходимо указать следующе параметры. Параметры могут быть как константами, так и набором значений, соответствующих каждому рассматриваемому давлению активного газа.

k – атомов мишени в соединение (в Cr2O3 - 2).

n – атомов окислителя в соединение на один атом мишени (в Cr2O3 - 1.5).

A – Площадь мишени в м^2.

A\_chamber – Подверженная воздействию потока частиц площадь поверхности камеры в м^2.

S – Коэффициент распыления материала мишени.

S\_compoud – Коэффициент распыления прореагировавшего материала.

alpha0 – Коэффициент задерживания молекулы окислителя на непрореагировавшей поверхности мишени.

alpha0\_c – Коэффициент задерживания молекулы окислителя на непрореагировавшей поверхности камеры и образца.

alpha0\_compound – Коэффициент задерживания молекулы окислителя на прореагировавшей поверхности мишени.

alpha0\_compound\_с – Коэффициент задерживания молекулы окислителя на прореагировавшей поверхности камеры и образца.

alpha0\_O– Коэффициент задерживания молекулы остаточного кислорода на поверхности мишени.

alpha0\_O2\_compound – Коэффициент задерживания молекулы остаточного кислорода на поверхности камеры и образца.

J – Плотность потока ионов аргона распыляющих мешень (молекул/(м2\*с)).

Ro – Плотность вещества мишени в кг/м^3.

M – Молярная масса вещества мишени в кг/моль.

Для создания объекта мишени служат команды:

*import* ***target\_setup*** *as ts #Импорт класса мишени*

*target = ts.****target****(k, n, t, A, A\_chamber, S, S\_compound, alpha0, alpha0\_compound, alpha0\_c, alpha0\_compound\_c, alpha0\_O2, alpha0\_O2\_compound, J, Ro, M) #создание объекта мишени*

## Создание объекта модели

Для того, чтобы создать объект хранящий параметры проведения процесса необходимо указать следующе параметры. Параметры могут быть как константами, так и набором значений, соответствующих каждому рассматриваемому давлению активного газа.

*target\_1 – Первая мишень.*

*target\_2 – Вторая мишень.*

*T – Абсолютная температура реакционного газа (K).*

*moleclar\_mass – масса реактивного газа (кг).*

*S –Скорость откачки подаваемого газа (м3/c).*

*alpha0\_O2 – Коэффициент задерживания молекулы кислорода.*

*K1 – Коэффициент пересчёта. По умолчанию 3.7e-21.*

*Для создания объекта модели необходимо выполнить следующие команды:*

*import* ***Model*** *#Импорт класса модели*

***Model*** *= Model.****model****(target\_1, target\_2, T, moleclar\_mass, S, K1) #создание объекта модели*

## Создание массива давлений

Моделирование поводится как вычисление параметров системы для набора давлений реакционного газа, подаваемого в систему.

start – Минимальное рассматриваемое давление.

stop – Минимальное рассматриваемое давление*.*

Step – шаг моделирования

Набор давлений задаётся командой:

*import* ***numpy*** *as* ***np*** *#импорт модуля numpy*

*import* ***panda*** *as* ***pd*** *#импорт модуля pandas*

*df = pd.****DataFrame****([ ]) # создание пустой таблицы данных*

*df["P\_O2"] = np.****arange****(start, stop, step) #создание массива давлений в столбце P\_02 созданной таблицы*.

## Расчёт характеристической функции процесса

Для расчёта характеристической функции процесса требуется расчитать производную потока реактивного газа по давдению реактивного газа по формуле (1)0

Этот процесс можно выполнить следующими командами:

*df["dq/dP"] = Si\_Mo.dq\_dp(df.P\_O2) #обращаемся к объекту модели и вызываем функцию расчёта производной.*