

DFG-Projekt Schmauder 746/68-2

„Molekulardynamische Modellierung und Validierung der Herstellung und der Struktur-Eigenschaft-Korrelationen von SiC/SiN-Nanolaminaten“

Projektbeginn: 01.10.2007

Projektende: 31.03.2011

Ziele und Vorgehensweise:

Die kontinuierlich steigenden Anforderungen an Bauteile führten zu einem Überdenken der in der Materialwissenschaft bereits bekannten Methoden und Materialien, Eisen und hochfesten Stähle wurden teilweise durch Keramiken ersetzt. Das wohl bekannteste Beispiel für einen keramischen Werkstoff ist Naturdiamant, der als das härteste Material gilt. Unter den künstlich hergestellten nichtoxydischen Keramiken sind insbesondere Siliziumkarbid und Siliziumnitrid von großer Bedeutung. Die Nutzung beider Materialien in Form von vollkeramischen Bauteilen ist in der Industrie sehr verbreitet, allerdings sind diese Stoffe aufgrund der stark gerichteten kovalenten Bindung sehr spröde und dadurch nicht formbar. Durch die Beschichtung mit Keramik erhalten bereits geformte Bauteile die gewünschten Eigenschaften wie die sehr hohe mechanische und thermische Stabilität, gleichzeitig lässt sich das Problem der Formbarkeit umgehen.

Ziel des DFG-Projektes „Molekulardynamische Modellierung und Validierung der Herstellung und der Struktur-Eigenschaft-Korrelationen von SiC/SiN-Nanolaminaten“ ist die gezielte Herstellung und Analyse von gesputterten Siliziumkarbid- und Siliziumnitrid-Viellagenschichten. Dabei wird der gesamte Prozess von der Herstellung bis zur Schichtanalyse sowohl mit experimentellen Methoden (KIT) als auch unter Heranziehung von Computersimulationen (IMWF) beschrieben. Ein besonderer Wert wird auf die gegenseitige Validierung beider Untersuchungsmethoden gelegt. Durch die enge Verzahnung von Modellierung und Experiment, sollen, auf das Projekt bezogen verbesserte Mehrlagenschichtsysteme gezielt hergestellt werden, um das heuristische Stadium der Beschichtungsentwicklung zu verlassen.

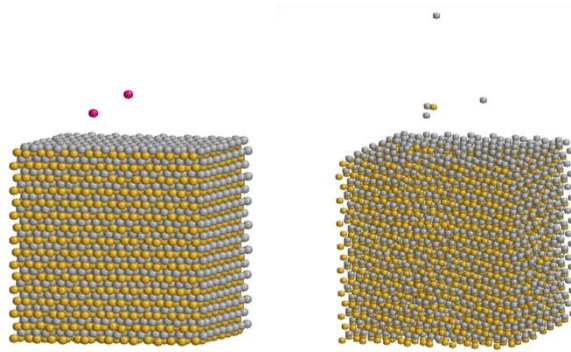


Bild 1: SiC-Sputterprozess, nach dem Einschlag von zwei Argonionen auf ein SiC-Target (links) werden fünf Atome gesputtert (rechts).

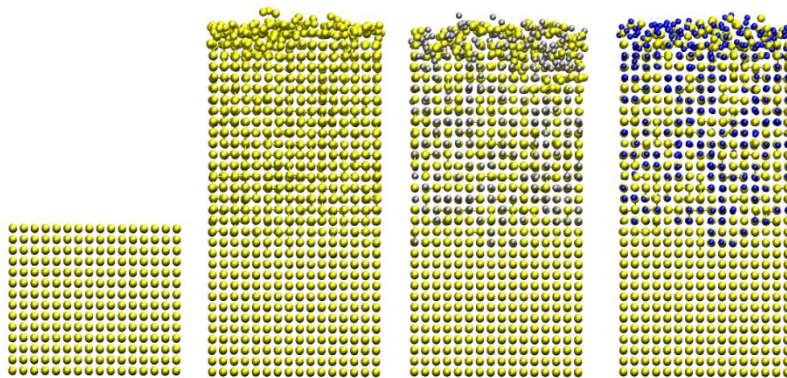


Bild 2: Ausgehend von links: Siliziumsubstrat, reine Siliziumschicht, Siliziumkarbidschicht und Siliziumnitridschicht auf einem Siliziumsubstrat.

Partner:

Gemeinschaftsprojekt des Instituts für Materialprüfung, Werkstoffkunde und Festigkeitslehre (IMWF) der Universität Stuttgart und des Instituts für Materialforschung I des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT)

Danksagung:

Wir danken der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) für die Finanzierung im Rahmen von SCHM 746/68-2 und ZI 1174/3-2

Veröffentlichungen:

1. A.-P. Prskalo, S. Schmauder, C. Ziebert, J. Ye, S. Ulrich, *Molecular dynamics simulations of SiC and Si₃N₄*, Surf. Coat. Technol. (2009), in press.
2. C. Ziebert, J. Ye, S. Ulrich, A. Prskalo, S. Schmauder, *Sputter deposition of nanocrystalline β -SiC films and molecular dynamics simulations of the sputter process*, J. Nanosci. Nanotechnol. (2009), 10 (2010) 1120-1128.
3. A.-P. Prskalo, S. Schmauder, C. Ziebert, J. Ye, S. Ulrich, *Molecular dynamics simulations of the sputtering process of silicon and the homoepitaxial growth of a Si coating on silicon*, Computational Material Science (2010), doi:10.1016/j.commatsci.2010.08.006.

Ansprechpartner:

Dipl.-Phys. Alen-Pilip Prskalo

Institut für Materialprüfung, Werkstoffkunde und Festigkeitslehre IMWF

Universität Stuttgart

Pfaffenwaldring 32

70569 Stuttgart

Tel: +49 711 685 62579

Fax: +49 711 685 62635

Email: alen-pilip.prskalo@imwf.uni-stuttgart.de