

РОЛЬ ТЕРМОДИНАМИКИ ПРИ ВЫБОРЕ ПРЕКУРСОРОВ ПОД ОСАЖДЕНИЕ DLC ПОКРЫТИЙ

А.А. Ковалевский, Д.А. Котов, К.А. Корзун, С.А. Никитюк, С.В. Гранько

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, П. Бровки, 6,
220027, г. Минск, Беларусь,
e-mail: kristin.korzun@gmail.com*

Проведены численные расчеты энергий разрыва химических связей и изменения энергии Гиббса с температурой для соединений, представляющих интерес в технологии производства алмазоподобных углеродных покрытий. При проведении термодинамических расчетов реакций разложения углеводородов до углерода особое внимание было сосредоточено на метане (CH_4), этилене (C_2H_4), ацетилене (C_2H_2) и гексиле (C_6H_{12}), поскольку они привлекательны, благодаря минимальному соотношению в их структуре между атомами углерода и водорода. Показано, что из всех рассмотренных углеводородов и механизмов их разложения наиболее перспективным для формирования алмазоподобных (DLC) пленок является ацетилен.

Ключевые слова: ацетилен; углеводороды; энтальпия; энтропия; энергия Гиббса; энергия связи.

THE ROLE OF THERMODYNAMICS IN THE SELECTION OF PRECURSORS FOR DEPOSITION OF DLC COATINGS

A.A. Kovalevskiy, D.A. Kotov, K.A. Korzun, S.A. Nikitiuk, S.V. Granko

*Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, P. Brovki str, 6,
220013 Minsk, Belarus
Corresponding author: kristin.korzun@gmail.com*

Numerical calculations of the energy of chemical bonds opening and changes in Gibbs energy with temperature for compounds of interest in diamond-like carbon coating production technology are performed. When carrying out thermodynamic calculations of reactions of decomposition of hydrocarbon to carbon, special attention was focused on methane (CH_4), ethylene (C_2H_4), acetylene (C_2H_2) and hexylene (C_6H_{12}), because they are most suitable due to the minimum ratio between carbon and hydrogen atoms in their structure. It is shown that of all the hydrocarbons considered and the mechanisms of their decomposition, acetylene is the most promising for the formation of diamond-like (DLC) films.

Key words: acetylene; hydrocarbons; enthalpy; entropy; Gibbs energy; bond energy.