

Impiego di simulazioni multifisiche per l'efficientamento dei processi Galvanici e di Elettroformatura

Andrea Giaccherini ^{1,*}, Claudio Zafferoni ² e Stefano Caporali ^{1,*} - ¹ Dipartimento Ingegneria Industriale (DIEF), Università di Firenze, Via S.Marta, 3, 50139, Firenze, Italia; ² STMicroelectronics, Via C. Olivetti, 2, 20864, Agrate Brianza, MB, Italia
*Corrispondenza: S.C. stefano.caporali@unifi.it; A.G. andreagiaccherini@gmail.com

Sommario

In questo contributo vengono presentati i vantaggi dell'utilizzo di simulazioni multifisiche per lo sviluppo di nuovi sistemi e processi industriali basati su elettrodeposizione o elettroformatura. Tali nuovi strumenti matematici sono utilizzabili per lo studio degli effetti dei parametri di processo sul comportamento del sistema e sulla qualità del prodotto. In particolare, tale approccio basato sulla modellizzazione dei fenomeni fisici permette di ottimizzare i processi di produzione attraverso l'analisi di "prototipi virtuali" che consentono di ridurre tempi e costi di sviluppo, evitando la realizzazione ripetuta di prototipi fisici. In questo articolo verranno presentati alcuni esempi pratici evidenziando i vantaggi apportati da questa innovativa strategia di sviluppo industriale.

INTRODUZIONE

I processi di galvanica ed elettroformatura, sono di fondamentale importanza per molte industrie manifatturiere. Tuttavia, lo sviluppo e l'ottimizzazione di nuovi processi e sistemi industriali in questo campo presenta numerose sfide, tra cui la minimizza-

zione dei costi di sperimentazione, il miglioramento dell'efficienza dei processi e la riduzione degli scarti di produzione. Nell'affrontare queste problematiche, l'utilizzo delle simulazioni multifisiche, può costituire un efficace strumento. Le simulazioni multifisiche sono modelli matematici che consentono di analizzare le interazioni tra diversi fenomeni, come la dinamica dei fluidi, il trasporto termico, la meccanica elettrica e la chimica. I modelli così realizzati forniscono risultati "in silico", ovvero su elaborazione numerica, permettendo a ingegneri e ricercatori di testare scenari di processo estremi o di valutare l'impatto della variazione dei parametri di processo sulle proprietà del prodotto. Ciò senza dover effettuare test su vasta scala riducendo quindi i costi di sviluppo e di produzione. Vediamo cosa sono le simulazioni multifisiche e come possono venire applicate ai processi elettrochimici industriali.

PROGETTAZIONE DI PROCESSI ELETTROCHIMICI ASSISTITA MEDIANTE SIMULAZIONI MULTIFISICHE

L'approccio multifisico è intrinsecamente orientato alla simulazione simultanea dei fenomeni fisici e chimici presenti in un processo industriale, fornendo una rappresentazione det-

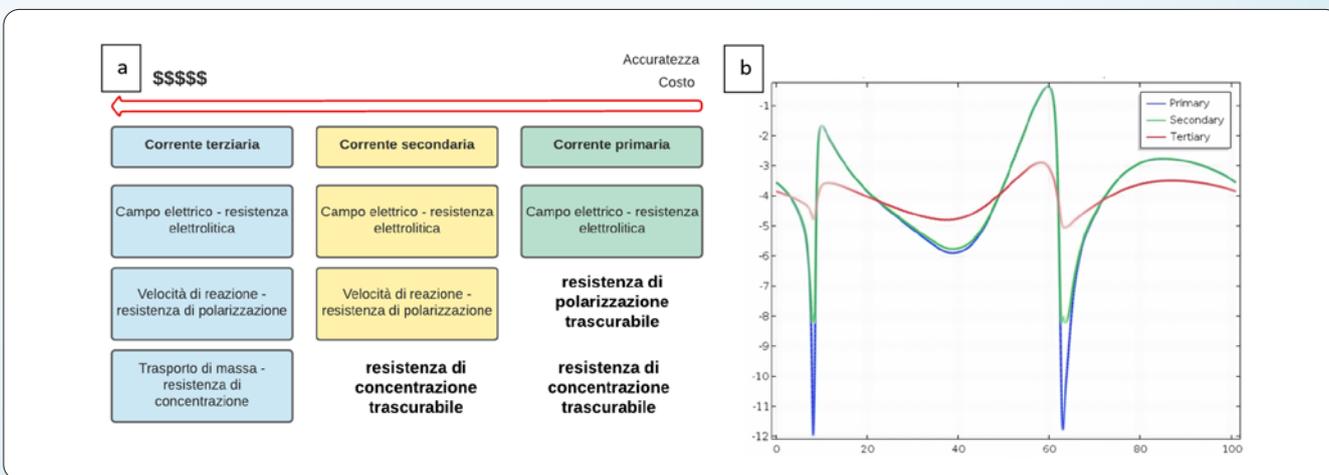


Fig. 1 - (a) Simulazione di possibili scenari per celle galvaniche in base ai tre livelli di approssimazione descritti nel testo, (b) risultati di simulazione su una sezione a geometria complessa. Si nota che dalla corrente primaria alla terziaria si ottengono risultati più fedeli al profilo reale dello spessore depositato



Fig. 2 - Impianto pilota per l'elettrodeposizione industriale dell'alluminio da liquidi ionici (sinistra) e modello della cella elettrochimica simulata (destra)

tagliata delle variabili e dei loro impatti sul prodotto finale. Il vantaggio significativo di questa metodologia è la capacità di generare modelli computazionali di alta fedeltà, che potremo chiamare "prototipi virtuali", i quali sono suscettibili di rapidi adattamenti e miglioramenti, evitando pertanto la necessità di costruire costosi prototipi fisici.

Nel contesto della modellazione di un processo elettrochimico, le variabili critiche da considerare includono, fra le molte possibili, la densità di corrente, la temperatura, la composizione della soluzione e le proprietà del substrato. Il modello fondamentale in questo scenario interpreta la cella elettrochimica come un conduttore elettrico caratterizzato da condizioni di corrente, o potenziale, sulla superficie.

Dal punto di vista elettrico questo corrisponde ad una semplice resistenza che chiude il circuito fra i due elettrodi. Ogni ulteriore effetto può essere assimilato ad una resistenza aggiuntiva: un fenomeno più veloce si traduce in una corrente maggiore e una resistenza correlata più bassa. Queste resistenze di varia natura sono definite: a) elettrolitiche, b) di polarizzazione (a volte anche dette di attivazione), c) di concentrazione, dando quindi origine a tre livelli di approssimazione crescente, denominati: corrente terziaria, secondaria e primaria [1,2,3]. Le peculiarità e i pro e contro di questi tre approcci computazionali sono schematicamente rappresentati nella Figura 1a.

Le moderne tecniche di modellazione multifisica permettono di considerare anche l'effetto della variazione della geometria durante il processo di deposizione o di elettrocorrosione [4,5]. L'interrogativo principale riguarda l'entità dell'effetto di queste approssimazioni su un sistema elettrochimico. Sono queste sempre necessarie?

La Figura 1b fornisce una risposta a questa domanda. Nel caso in oggetto, l'approssimazione di corrente terziaria è essenziale per ottenere risultati accurati, tuttavia, l'approssimazione di corrente primaria può, in casi con geometrie più sem-

plici, prevedere le prestazioni del processo galvanico e contribuire alla valutazione dell'effetto dei parametri geometrici.

Le approssimazioni possono avere un impatto significativo sui risultati della simulazione. Tuttavia, anche il modello più rudimentale può produrre risultati pertinenti. Ogni semplificazione porta vantaggi in termini di stabilità del modello matematico e velocità di calcolo, offrendo così una risposta più rapida alle esigenze di valutazione del team di progettazione. Di conseguenza, ogni caso deve essere esaminato individualmente, tenendo conto degli aspetti del sistema elettrochimico, dei tempi di consegna e delle specifiche tecniche richieste, integrandosi nel flusso di lavoro di progettazione aziendale.

Negli ultimi anni, le simulazioni multifisiche sono state efficacemente impiegate per valutare una vasta gamma di aspetti dei processi galvanici o di elettroformatura, tra cui l'effetto delle condizioni di processo sulla qualità del prodotto, l'ottimizzazione dei parametri di processo per incrementare l'omogeneità dei depositi galvanici, l'identificazione delle cause di problemi o delle inefficienze nella produzione di determinati prodotti e lo sviluppo di nuovi processi o prodotti.

ESEMPI DI APPLICAZIONI DELLE SIMULAZIONI MULTIFISICHE AI PROCESSI GALVANICI

La scelta della migliore strategia di modellazione è fondamentale per permettere di supportare adeguatamente la progettazione di sistemi e processi innovativi. Di seguito vengono riportati, e descritti, esempi di tali applicazioni pratiche, omettendo però alcune informazioni tecniche, e di processo, per la salvaguardia del segreto industriale.

3.1 Elettrodeposizione di alluminio da liquidi ionici

L'obiettivo della ricerca condotta, avviata in sinergia con partners industriali e scientifici internazionali nell'ambito del pro-

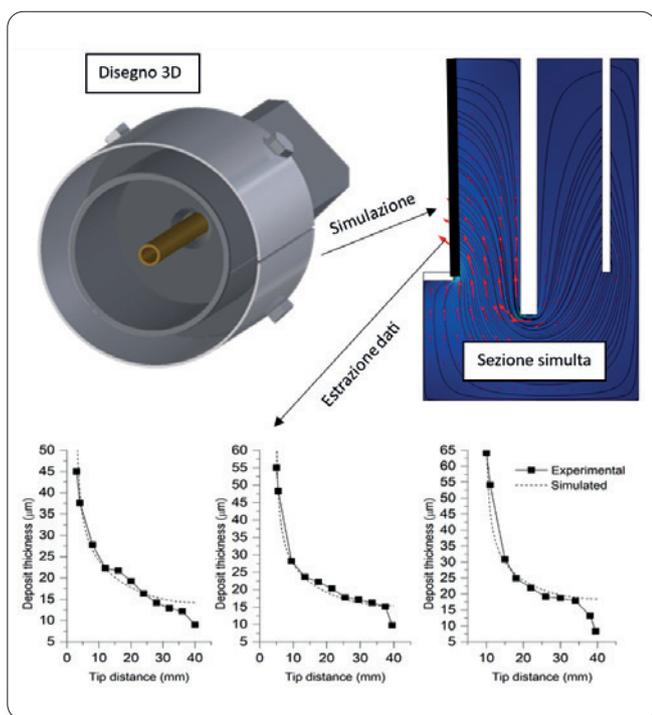


Fig. 3 - a) Rappresentazione 3D della cella RHC; b) sezione trasversale corrispondente; c) confronto tra i dati sperimentali (linea tratteggiata) e gli spessori di deposizione simulati (linea piena)

getto europeo "Scail-up" (<https://cordis.europa.eu/project/id/608698>), ha avuto come obiettivo lo sviluppo di un procedimento industriale di elettrodeposizione di alluminio come alternativa ai bagni di cromo esavalente in uso nell'industria aeronautica ed automobilistica.

Il procedimento, pur svolgendosi in liquidi ionici (condizioni anidre), ha beneficiato dell'applicazione di modellizzazioni multifisiche. Queste simulazioni si sono avvalse dell'approssimazione di corrente terziaria e di modelli tridimensionali semplificati per migliorare l'efficienza computazionale del processo di simulazione [6]. I risultati ottenuti dalle simulazioni hanno fornito indicazioni per la progettazione e lo sviluppo di un sistema sperimentale dedicato all'elettrodeposizione industriale dell'alluminio (Figura 2).

3.2 Nuova cella di Hull a Cilindro Rotante (RHC)

Un dispositivo di analisi noto come Cella Rotante di Hull (Rotating Hull Cell, RHC) costituisce un elemento fondamentale nell'indagine delle proprietà dei bagni galvanici. Tale apparato è composto da un cilindro conduttivo rotante, il cui movimento è regolato in termini di velocità, circondato da un anello non conduttivo distanziato e immerso nella soluzione elettrochimica (Figura 3a).

Al momento dell'applicazione di una corrente elettrica, la densità di corrente sul cilindro non risulta omogenea, ma varia in maniera dipendente sia dalla distanza che dall'altezza dell'anello non conduttivo. Simultaneamente, la rotazione del cilindro genera un flusso costante di soluzione sulla superficie del cilindro, il che assicura condizioni di trasporto di massa rigorosamente definite e ben controllabili.

E' pratica in uso di prelevare un'aliquota di elettrolita dal bagno galvanico e testarlo "ex situ", ad esempio in laboratorio.

Tuttavia, in questa specifica circostanza, si è optato per la progettazione di una cella RHC innovativa, direttamente integrabile nel bagno galvanico. Il dimensionamento di tale cella è stato realizzato impiegando prototipi virtuali con diverse lunghezze del catodo rotante e dell'anello di schermatura.

Il processo ha necessitato della quantificazione di vari parametri, tra cui la densità di corrente di scambio, i coefficienti di diffusione e la viscosità dell'elettrolita. Data la simmetria cilindrica del sistema, è stata possibile la modellizzazione di un solo segmento dell'apparato (Figura 3b), conducendo alla simulazione della densità di corrente sul cilindro.

La Figura 3c illustra l'ottimo accordo tra gli spessori di deposizione sperimentali (misurati) di metallo e i corrispondenti valori teorici dedotti dal modello. Le discrepanze rilevate per distanze superiori a 35 mm sono da attribuire a distorsioni nel campo di velocità dell'elettrolita, e quindi al di fuori del campo di applicabilità della cella RHC.

3.3 Applicazioni all'elettronica di consumo

La ricerca, sviluppata in sinergia con STMicroelectronics, verte sull'ottimizzazione della configurazione geometrica di un bagno galvanico che integra al suo interno tre strutture di supporto che agiscono in qualità di catodo. Ogni struttura, rappresentata come supporti in Figura 4, accoglie 450 microchip. Il problema tecnologico di interesse è la disomogeneità dello strato di rame medio depositato fra i diversi microchip ancorati alle strutture di supporto. La configurazione del bagno galvanico include uno schermo regolabile interposto tra l'anodo e il catodo, mentre quest'ultimo è collegato a un collettore di corrente in grado di spostarsi in direzione trasversale ed il ricircolo dell'elettrolita è garantito da un insieme di eduttori, o tubi di Venturi.

Nel corso del processo di ottimizzazione, sono state prese in considerazione come variabili la distanza delle strutture di supporto dagli anodi, nonché la loro posizione rispetto agli schermi ed agli eduttori. Il parametro soggetto a ottimizzazione è risultato essere l'uniformità nella distribuzione della corrente primaria. Il modello adottato, seppur semplificato, ha dimostrato notevole efficienza in termini computazionali e solidità nelle sue previsioni.

Al fine di calibrare il modello simulato, è stato implementato un coefficiente di scala, promuovendo così un confronto diretto con i dati raccolti sperimentalmente. L'elaborazione dei dati risultanti dalla simulazione comporta l'integrazione del flusso di corrente su un campione di 270 microchip tra i 1350 totali. Da questa integrazione, si può ricavare lo spessore del rivestimento di rame depositato. I dati modellistici sono stati correlati con le osservazioni empiriche, come rappresentato schematicamente in Figura 5. L'analisi dei "prototipi virtuali" costruiti sulla base delle variazioni della geometria del sistema originale sono stati esaminati in funzione della distribuzione della densità di corrente. Questa analisi ha permesso di valutare velocemente le diverse possibilità di sviluppo del processo di elettrodeposizione.

CONCLUSIONI

L'utilizzo di simulazioni multifisiche di processi elettrochimici sta guadagnando sempre più terreno in molteplici e diversi settori industriali, grazie ai molti vantaggi che offre. Da un lato, permette di snellire notevolmente i processi di sviluppo, riducendo la necessità di realizzare numerosi prototipi fisici e con-

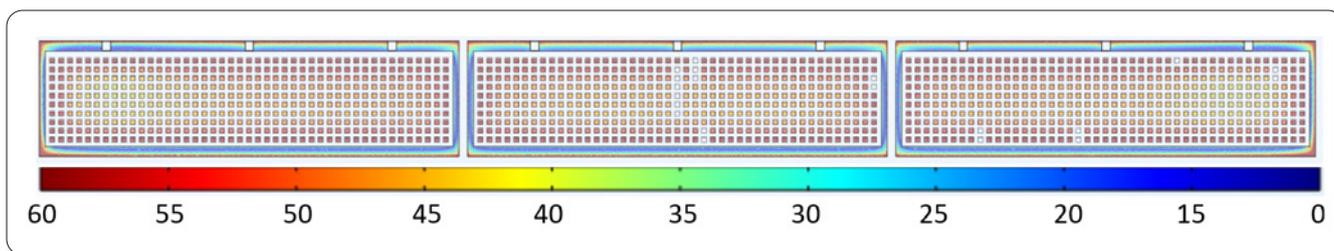


Fig. 4 - Spessore depositato sui chip, la scala colorata e riportata in μm di Cu depositato

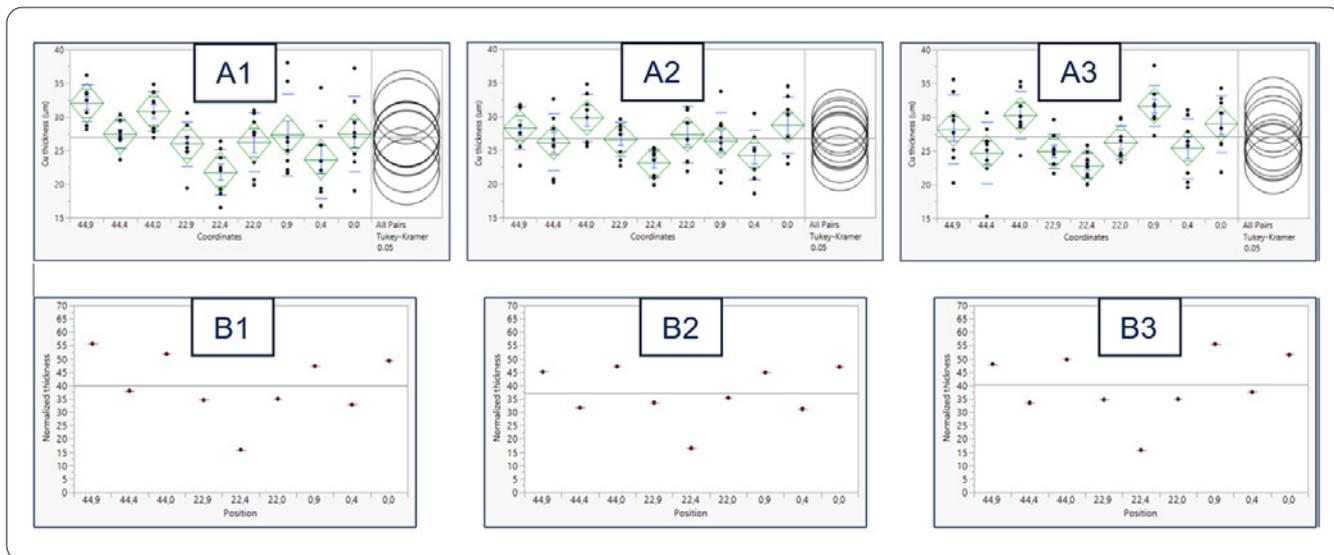


Fig. 5 - Confronto fra lo Spessore di Cu (μm) simulato (A) e sperimentale (B) in funzione della coordinata di campionamento in segregazione per coordinata e posizione

sentendo di esplorare opzioni di progettazione in un ambiente virtuale. In tal modo, si conseguono significative economie in termini di tempo, costi e risorse, oltre a minimizzare l'impatto ambientale derivante dalla produzione di prototipi fisici.

Le simulazioni multifisiche agiscono anche come catalizzatori per l'innovazione, accelerando il tempo di sviluppo di nuovi processi industriali ed agevolando la rapida risposta al variare delle esigenze di mercato.

Tali vantaggi competitivi sono fondamentali in un ambiente industriale in rapida evoluzione.

Un altro elemento di forza delle simulazioni multifisiche risiede nella possibilità di ottenere una comprensione approfondita dei processi produttivi. Infatti, grazie alla precisione con cui riescono a modellare fenomeni anche complessi, forniscono preziose indicazioni sull'influenza dei diversi parametri e sulle caratteristiche del prodotto finale. È stato infatti possibile studiare e comprendere meglio l'effetto di variabili fisiche, quali la fluidodinamica dell'elettrolita o la movimentazione dei manufatti, sui risultati del processo galvanico, dimostrandosi efficaci in molteplici contesti, dall'automotive all'aerospaziale passando per l'elettronica e gli accessori moda.

Ringraziamenti

Desideriamo ringraziare i Dott.ri Stefano Martinuzzi ed Enrico Berretti per la raccolta dei dati sperimentali presenti nella Figura 3c e per la creazione della rappresentazione grafica in

Figura 3a. La loro collaborazione è stata fondamentale per lo studio condotto sulla cella RHC.

Bibliografia

- [1] Al Khatib M., Bellini M., Pogni R. et alii, Effect of electrode shape and flow conditions on the electrochemical detection with band microelectrodes (2021) *Sensors*, 18(10), 3196.
- [2] Giaccherini A., Al Khatib M., Cinotti S., et alii, Analysis of mass transport in ionic liquids: a rotating disk electrode approach (2020) *Scientific Reports*, 10(1), 13433.
- [3] Kauffman J., Gilbert J., Eric Paterson, Multi-Physics Modeling of Electrochemical Deposition, *Fluids*, (2020), 5(4), 240,
- [4] Braun T. M., Josell D., John J. et alii, Editors' Choice—Simulation of Copper Electrodeposition in Through-Hole Vias, *J. Electrochem. Soc.* (2020) 167, 013510, 10.1149/2.0102001jes
- [5] Karimi-Sibaki E., Kharicha A., Abdi M. et alii, A Dynamic Mesh Method to Model Shape Change during Electrodeposition, *J. Electrochem. Soc.* (2020) 166 D521, 10.1149/2.1241912jes
- [6] Giaccherini A., Caporali S., Berretti E., et alii, Finite Elements Analysis of an Electrochemical Coating Process of an Irregularly Shaped Cathode with COMSOL Multiphysics®, *ECS Trans.*, (2015) 64, 1.