УДК 669.1:537.5

Г. М. СОКОЛОВА
Хмельницький національний університет

ВІДНОСНІ ЕНЕРГЕТИЧНІ ФАКТОРИ ПРОЦЕСУ АЗОТУВАННЯ У ТЛІЮЧОМУ РОЗРЯДІ

Запропоновано комплекс вихідних факторів моделювання процесу азотування у тліючому розряді, що базується на енергетичній моделі процесу і дозволяє враховувати вплив на результати модифікації інтенсивності перебігу основних субпроцесів досліджуваного процесу – утворення нітридів, розпорошення поверхні та дифузії. Розглянуто характер взаємозалежності між відносними енергетичними факторами і на цій основі запропоновано методи математичного моделювання, що можуть бути використані для прогнозування кількісних характеристик поверхневих шарів матеріалів, азотованих в тліючому розряді.

Ключові слова: азотування, тліючий розряд, багатофакторний процес, моделювання.

G. M. SOKOLOVA
Khmelnytsky National University

RELATIVE ENERGY FACTORS OF NITRIDING IN GLOW DISCHARGE PROCESS

It was proposed alternative approaches to formation of the initial factors complex based on energy model of the nitriding in glow discharge (NGD) process, that take into account the influence of the intensity of the main subprocesses (the formation of nitrides, surface sputtering and diffusion) on the modification results. The nature of relationship between the relative energy factors was analyzed and on this basis it was found that it can be represented by a second order surface. The practical value of such representing is that the formation of the model of the nitriding in glow discharge process with independent parameters can be significantly simplified by reducing the number of input factor, because a combination of two relative energy factors uniquely determines the third one. It was proposed the methods of mathematical modeling that can be used to predict the quantitative characteristics of the surface layers of materials nitrided in a glow discharge.

Keywords: nitriding, glow discharge, multifactorial process, modelling.

Вступ

Достовірність результатів прогнозування стану та властивостей досліджуваного об’єкта залежить від того, наскільки повно враховані усі можливі способи впливу на нього, тому прийнятність створюваної моделі у кінцевому підсумку визначається правильністю вибору комбінації вихідних факторів. При моделюванні процесу азотування у тліючому розряді (АТР) у цій якості традиційно використовувались лише режимні параметри – температура, тиск, склад газової суміші та тривалість процесу. Втім, значний вплив, який справляють на основні характеристики азотованих шарів енергетичні параметри розряду, свідчить про неприпустимість ігнорування напруги та густини струму при формуванні комбінації факторів математичної моделі АТР. Однак, необхідність врахування впливу вказаних показників спричиняє іншу проблему – велика кількість факторів (до того ж за умов, що частина їх пов’язана нелінійними залежностями) суттєво ускладнює процес побудови моделі. Зазначена проблема може бути вирішена шляхом введення деяких опосередкованих показників, що враховували б вплив усіх технологічних параметрів процесу АТР.

Аналіз джерел за темою дослідження

У роботі [1] було запропоновано використати у якості згаданих узагальнюючих показників відносні енергетичні фактори – аналітичні критерії, що характеризують інтенсивність перебігу трьох основних субпроцесів АТР – утворення нітридів, розпорошувальної та дифузійної дії. Вказані показники були введені в рамках енергетичної моделі процесу АТР. Загальні принципи їх розрахунку викладені у роботі [2]. У [3] досліджено залежність відносних енергетичних факторів від технологічних параметрів режиму АТР.

Постановка завдання

Відносні енергетичні фактори характеризують складові процесу азотування лише якісно, тобто дозволяють проаналізувати можливий вплив параметрів технології на структуру та властивості азотованого шару з позицій “більше-менше”, “краще-гірше”. Застосування запропонованої системи показників для кількісного прогнозування результатів АТР вимагає встановлення функціональних залежностей між значеннями ВЕФ та кількісними характеристиками модифікованого шару, але цьому має передувати дослідження характеру взаємозв’язку між окремими ВЕФ, оскільки саме ним визначається область припустимих методів математичного моделювання, які можуть бути застосовані з метою прогнозування шуканих характеристик.

Виклад основного матеріалу

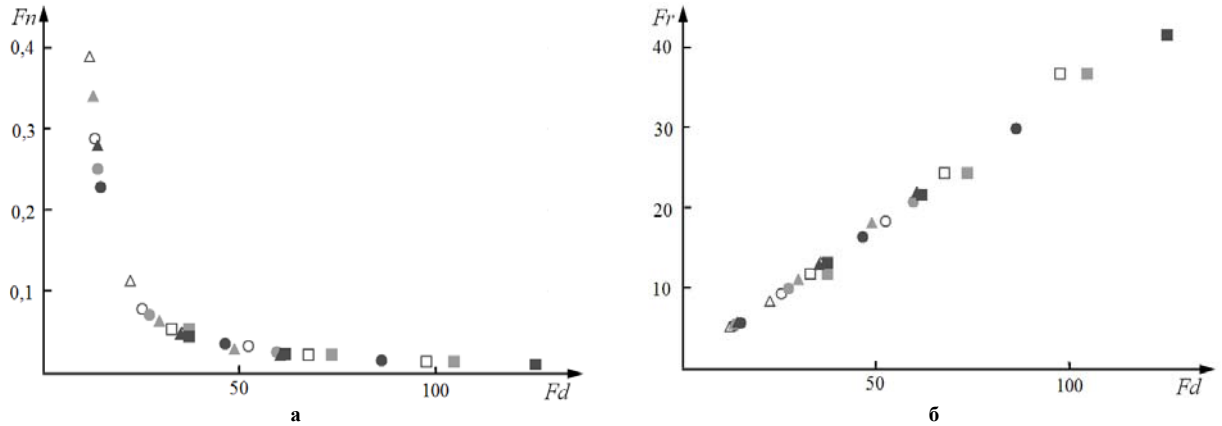
У таблиці 1 наведено значення відносних енергетичних факторів, розраховані за допомогою програмного забезпечення, розробленого автором енергетичної моделі [2].

Таблиця 1

Значення відносних енергетичних факторів

Температура, С°	Тиск, торр	Напруга, В	Густина струму, А/м^2	ВЕФ розпорошувальної дії	ВЕФ дифузійної дії	ВЕФ утворення нітридів		
						Сталь 45	40Х	38Х2МЮА
520	0,4	1020	9,4	36,67765	97,88986	0,01197	0,01224	0,01272
		800	6	24,19797	67,90978	0,02047	0,02110	0,02224
		500	2,8	11,52915	33,09167	0,03282	0,03480	0,03686
	0,8	800	12	18,21936	52,40937	0,02053	0,02132	0,02249
		500	6,4	9,09364	25,34668	0,07795	0,08148	0,08773
		300	1,8	5,14168	13,42316	0,28774	0,29332	0,31436
	1,2	600	13,4	13,03211	35,62180	0,04837	0,05042	0,05387
		450	10	8,18610	22,42668	0,11225	0,11550	0,12357
		300	5,6	5,01237	11,98822	0,38865	0,39608	0,41729
560	0,4	1100	11	34,73191	104,97881	0,01027	0,01048	0,01087
		820	7,2	26,37017	73,83184	0,01849	0,01905	0,02006
		515	3,2	12,97231	37,48390	0,04689	0,04902	0,05268
	0,8	840	13,2	20,57869	59,74901	0,02448	0,2532	0,02683
		700	10,7	15,57631	44,75965	0,03604	0,03751	0,04008
		515	7,2	9,75368	27,26150	0,07020	0,07366	0,07958
		300	2,8	5,29830	14,12675	0,25016	0,25525	0,27448
	1,2	700	15,8	17,96776	48,91995	0,02849	0,02947	0,03114
		515	12,8	10,92007	29,92542	0,06238	0,06473	0,06929
		300	7,2	5,21246	12,91481	0,34025	0,34699	0,36925
600	0,4	1250	14	41,19022	125,80661	0,00798	0,00812	0,00837
		700	6,2	21,46048	61,92667	0,02200	0,02274	0,02407
		500	4	12,89066	37,47126	0,04312	0,04516	0,04863
	0,8	1050	16	29,82257	86,38759	0,01386	0,01423	0,01490
		700	11,6	16,17211	46,60104	0,03462	0,03606	0,0386
		300	3,6	5,47850	14,83218	0,22802	0,25100	0,23287
	1,2	800	18,8	21,87710	60,58764	0,02074	0,02135	0,02241
		550	15,6	12,74405	35,16155	0,04663	0,04860	0,05205
		300	10	5,50532	14,03370	0,27941	0,28514	0,30587

На рис. 1 отримані результати представлені графічно.



а **б**

Рис. 1. Взаємозалежність відносних енергетичних факторів:
***а* – утворення нітридів від дифузійної дії; *б* – розпорошувальної дії від дифузійної**

Аналіз отриманих даних дозволяє припустити, що геометрично взаємозв'язок вказаних факторів при постійній температурі та складі газової суміші може бути представлений поверхнею другого порядку, яка у випадку неявного задання описується рівнянням:

$$a_{11}x^2 + a_{22}y^2 + a_{33}z^2 + 2a_{12}xy + 2a_{23}yz + 2a_{13}zx + 2a_{14}x + 2a_{24}y + 2a_{34}z + a_{44} = 0, \quad (1)$$

тобто:

$$a_{11}F_r^2 + a_{22}F_d^2 + a_{33}F_n^2 + 2a_{12}F_rF_d + 2a_{23}F_dF_n + 2a_{13}F_nF_r + 2a_{14}F_r + 2a_{24}F_d + 2a_{34}F_n + a_{44} = 0, \quad (2)$$

де a_{ij} (i = 1, 2, 3, j = 1, 2, 3, 4) – коефіцієнти, що визначають тип поверхні, її положення та орієнтацію у просторі.

Такий спосіб задання поверхні не завжди є однозначним [4, с. 153], тому для доведення правомірності застосування у подальших розрахунках рівняння (2) необхідно визначити тип заданої ним поверхні.

Для будь-якої поверхні другого порядку існує прямокутна система координат, в якій вона належить

до одного з сімнадцяти типів (еліпсоїд, гіперболоїд, циліндр і т.д.) [5, с. 563].

Тип поверхні може бути визначений за значеннями її інваріантів:

$$I_1 = a_{11} + a_{22} + a_{33}; \qquad I_2 = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{12} & a_{22} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{23} & a_{33} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} a_{33} & a_{13} \\ a_{13} & a_{11} \end{vmatrix};$$

$$I_3 = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{12} & a_{22} & a_{23} \\ a_{13} & a_{23} & a_{33} \end{vmatrix}; \qquad I_4 = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{12} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{13} & a_{23} & a_{33} & a_{34} \\ a_{14} & a_{24} & a_{34} & a_{44} \end{vmatrix}. \tag{3}$$

Для випадку, що відповідає умовам проведення експерименту (T = 560 °С, 80N20Ar), коефіцієнти a_{ij} можуть бути визначені з системи рівнянь:

$$\begin{cases} a_{11}x_{00} + a_{22}x_{01} + a_{33}x_{02} + 2a_{12}x_{03} + 2a_{23}x_{04} + 2a_{13}x_{05} + 2a_{14}x_{06} + 2a_{24}x_{07} + 2a_{34}x_{08} + a_{44}x_{09} = 0; \\ a_{11}x_{10} + a_{22}x_{11} + a_{33}x_{12} + 2a_{12}x_{13} + 2a_{23}x_{14} + 2a_{13}x_{15} + 2a_{14}x_{16} + 2a_{24}x_{17} + 2a_{34}x_{18} + a_{44}x_{19} = 0; \\ \ldots \\ a_{11}x_{90} + a_{22}x_{91} + a_{33}x_{92} + 2a_{12}x_{93} + 2a_{23}x_{94} + 2a_{13}x_{95} + 2a_{14}x_{96} + 2a_{24}x_{97} + 2a_{34}x_{98} + a_{44}x_{99} = 0. \end{cases} \tag{4}$$

де $x_{i0} = F_{ri}2$; $x_{i1} = F_{di}2$; $x_{i2} = F_{ni}2$; $x_{i3} = F_{ri}{\cdot}F_{di}$; $x_{i4} = F_{di}{\cdot}F_{ri}$; $x_{i5} = F_{ni}{\cdot}F_{ri}$; $x_{i6} = F_{ri}$; $x_{i7} = F_{di}$; $x_{i8} = F_{ni}$; $x_{i9} = 1$.

Система рівнянь (4) може бути розв'язана методом Гауса (з цією метою у системі MathCAD було розроблено спеціальний математичний апарат).

Загальний розв'язок системи матиме вигляд:

– для сталі 45:

$a_{11} = 0{,}104\ a_{44}$; $a_{22} = 0{,}009\ a_{44}$; $a_{33} = 3{,}575\ a_{44}$;
$a_{12} = -0{,}032\ a_{44}$; $a_{23} = -1{,}564\ a_{44}$; $a_{13} = 4{,}063\ a_{44}$;
$a_{14} = -0{,}411\ a_{44}$; $a_{24} = 0{,}137\ a_{44}$; $a_{34} = -1{,}047\ a_{44}$;

– для сталі 40Х:

$a_{11} = 0{,}096\ a_{44}$; $a_{22} = 0{,}009\ a_{44}$; $a_{33} = 3{,}147\ a_{44}$;
$a_{12} = -0{,}029\ a_{44}$; $a_{23} = -1{,}361\ a_{44}$; $a_{13} = 3{,}488\ a_{44}$;
$a_{14} = -0{,}383\ a_{44}$; $a_{24} = 0{,}127\ a_{44}$; $a_{34} = -0{,}821\ a_{44}$;

– для сталі 38Х2МЮА:

$a_{11} = 0{,}089\ a_{44}$; $a_{22} = 0{,}008\ a_{44}$; $a_{33} = 2{,}686\ a_{44}$;
$a_{12} = -0{,}027\ a_{44}$; $a_{23} = -1{,}164\ a_{44}$; $a_{13} = 2{,}948\ a_{44}$;
$a_{14} = -0{,}360\ a_{44}$; $a_{24} = 0{,}119\ a_{44}$; $a_{34} = -0{,}646\ a_{44}$,

де a_{44} – довільне число.

Можливість варіювання коефіцієнтів пояснюється тим, що система (4) є сумісною, але невизначеною (у результаті перетворень, виконаних за методом Гауса, останнє рівняння системи приймає вигляд 0 = 0). Цей факт жодним чином не впливає на однозначність задання поверхні рівнянням (2), оскільки поверхня, задана у деякій системі координат рівнянням $F(x, y, z) = 0$, може бути задана й іншим рівнянням, наприклад, $G(x, y, z) = 0$; при цьому в силу теореми єдиності усі коефіцієнти багаточлена $G(x, y, z)$ отримуються з відповідних коефіцієнтів багаточлена $F(x, y, z)$ шляхом множенням на деяке число $k \neq 0$ [5, с. 554].

Нехай $a_{44} = 1$, тоді для випадку, що розглядається, інваріанти дорівнюють:

– для сталі 45:

$I_1 = 3{,}688$; $I_2 = -18{,}551$; $I_3 = -0{,}009$; $I_4 = -0{,}0008$.

– для сталі 40Х:

$I_1 = 3{,}251$; $I_2 = -13{,}692$; $I_3 = -0{,}007$; $I_4 = -0{,}0007$.

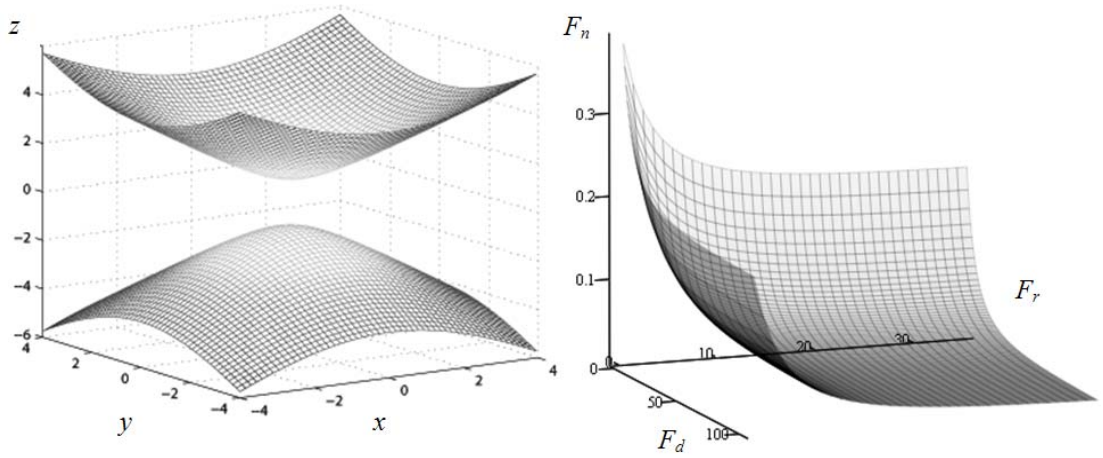
– для сталі 38Х2МЮА:

$I_1 = 2{,}782$; $I_2 = -9{,}788$; $I_3 = -0{,}006$; $I_4 = -0{,}0006$.

Оскільки $I_3 \neq 0$, $I_4 < 0$, $I_2 < 0$ ($I_1 I_3 < 0$), то у деякій системі координат $Oxyz$, отриманій шляхом паралельного переносу та повороту осей системи координат $OF_rF_dF_n$, поверхня, задана рівнянням (2), є двопорожнинним гіперболоїдом [4, с. 153]. В принципі у новій системі координат рівняння поверхні, що розглядається, може бути приведено до канонічного вигляду, але в даному випадку у цьому немає потреби, оскільки практичний інтерес становить саме система координат $OF_rF_dF_n$, а усі вищенаведені положення мають на меті лише доведення того факту, що рівнянням (2) задана реальна поверхня другого порядку. Загальний вигляд двопорожнинного гіперболоїда наведено на рис. 2 *а*; графік поверхні, заданої рівнянням (2) у системі координат $OF_rF_dF_n$, – на рис. 2 *б*.

Очевидно, що відсутність на рис. 2 *б* другої порожнини гіперболоїда пояснюється тим, що значення F_r, F_d, F_n можуть бути лише додатними. Варто також зауважити, що вказаною поверхнею описується взаємозв'язок усіх принципово можливих значень відносних енергетичних факторів, тобто вона є суто теоретичною; що ж стосується області значень, яка відповідає реальним процесам АТР, то вона обмежується лише невеликою ділянкою цієї поверхні.

Практична цінність представлення взаємозв'язку між відносними енергетичними факторами у якості поверхні полягає у тому, що процес формування моделі АТР з незалежними параметрами може бути суттєво спрощений завдяки скороченню кількості вихідних факторів з трьох до двох, оскільки згідно з виразом (2) комбінація двох ВЕФ цілком однозначно визначає третій.



а **б**

Рис. 2. Графік поверхні, заданої рівнянням (2):
***а* – у системі координат *Oxyz; б* – у системі координат $OF_rF_dF_n$**

Наявність нелінійної залежності між вихідними факторами моделі (у даному випадку між ВЕФ дифузійної дії і ВЕФ утворення нітридів) суттєво звужує коло методів, що можуть бути застосовані для математичного моделювання досліджуваного процесу, і однозначно виключає можливість побудови регресійних моделей у рамках методу планування експерименту, що є традиційним підходом при прогнозуванні кількісних характеристик модифікованих шарів, отриманих азотуванням у тліючому розряді.

Серед існуючих методів математичного моделювання багатофакторних процесів, що дозволяють прогнозувати їхні результати залежно від взаємопов'язаних факторів впливу, варто виділити описані у роботах [6] та [7]. Перший дозволяє будувати графічні моделі багатофакторних процесів із використанням методологічного апарату нарисної геометрії багатовимірного простору. При всій наочності цього методу його застосування є надто трудомістким, а точність доволі відносною, оскільки вона визначається точністю побудов та вимірювань, тому більш раціональним можна вважати застосування другого методу. Суттєвою його перевагою є той факт, що алгоритм формування математичної моделі може бути повністю автоматизований (наприклад, у системі MathCAD), що дозволить знаходити значення цільової функції при заданій комбінації взаємозалежних факторів впливу без проведення проміжних розрахунків.

Висновки

Запропоновано комплекс вихідних факторів моделювання процесу азотування у тліючому розряді, що базується на енергетичній моделі і дозволяє враховувати вплив на результати модифікації інтенсивності перебігу основних субпроцесів досліджуваного процесу – нітридоутворення, розпорошення поверхні та дифузії. Розглянуто характер взаємозалежності між відносними енергетичними факторами і на цій основі запропоновано методи математичного моделювання, що можуть бути використані для прогнозування кількісних характеристик поверхневих шарів матеріалів, азотованих в тліючому розряді.

Література

1. Соколова Г. М. Прогнозування результатів азотування в тліючому розряді на основі енергетичної моделі процесу / Г. М. Соколова // Вісник Хмельницького національного університету. Технічні науки. – 2016. – № 2. – С. 181–185.

2. Пастух И. М. Теория и практика безводородного азотирования в тлеющем разряде / И. М. Пастух. – Х. : ННЦ ХФТИ, 2006. – 364 с.

3. Фізико-технічна обробка поверхні металів безводневим азотуванням в тліючому розряді : дисертація ... доктора технічних наук : 05.03.07 / Пастух Ігор Маркович. – Хмельницький, 2008. – 520 с.

4. Голованов Н. Н. Геометрическое моделирование / Н. Н. Голованов. – М. : Изд-во Физико-математической литературы, 2002. – 472 с.

5. Александров П. С. Лекции по аналитической геометрии, пополненные необходимыми сведениями из алгебры / П. С. Александров. – М. : Наука, 1968. – 911 с.

6. Чижик М. А. Алгоритмы конструирования графических оптимизационных моделей многофакторных процессов / М. А. Чижик, К. С. Яковенко, В. Я. Волков // Омский научный вестник. – 2012. – № 1. – С. 17–20.

7. Соколова Г. М. Моделювання багатофакторних процесів з взаємозалежними факторами впливу / Г. М. Соколова // Вісник Хмельницького національного університету. Технічні науки. – 2016. – № 1. – С. 117–120.

Рецензія/Peer review : 15.5.2016 р. Надрукована/Printed : 6.6.2016 р.
Рецензент: д.т.н., проф.. Пастух І.М.