

УДК 541.18.046.8

Г.И. КОСТЮК, О.М. МЕЛКОЗЕРОВА

*Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «ХАИ», Украина*

## ИНЖЕНЕРНАЯ МОДЕЛЬ ДЕЙСТВИЯ ИОНОВ РАЗЛИЧНЫХ СОРТОВ, ЗАРЯДНОСТЕЙ, ЭНЕРГИЙ И КАПЕЛЬ, СКОНДЕНСИРОВАННЫХ НА ПОВЕРХНОСТИ

*При взаимодействии материала с ионными пучками или плазменными потоками на поверхности твердого тела и в его поверхностном слое протекает ряд процессов, которые определяют качество получаемых покрытий, их состав, скорость их нанесения. Предложена инженерная модель действия потока заряженных частиц различных сортов, зарядностей и энергий, а также капель материала, сконденсированного на подложку. Были получены поля температур и температурных напряжений, скорости нарастания температур, которые доказывают возможность получения наноструктурных материалов, как на глубине материала, так и на его поверхности в виде покрытия нанометровой толщины, которое имеет очень высокую адгезию к основному материалу.*

**Ключевые слова:** наноструктура, температурные поля, температурные напряжения, скорости нарастания температур

### Введение

При взаимодействии плазмы с подложкой часть ионов осаждается на подложку, образуя защитное покрытие, часть проникает внутрь кристаллической решетки, при этом образуются наноструктуры, как на поверхности материала в виде покрытия нанометровой толщины, так и на глубине, равной расстояниям, на которые проникают ионы различных энергий, сортов и зарядностей. Таким образом, на поверхности подложки формируется покрытие, которое имеет хорошую адгезию к подложке за счет того, что в нижних слоях имеются атомы, однородные по химическому составу и свойствам.

При взаимодействии поверхностей с ионными пучками или плазменными потоками на поверхности твердого тела и в его поверхностном слое протекает ряд процессов, которые определяют качество получаемых покрытий, их состав, скорость их нанесения и определенное качество изделия. Процессы, проходящие вблизи поверхности, влияют в основном на скорость нанесения покрытия и состав пленки. Те процессы, которые протекают в приповерхностном слое, обуславливают образование формируемой структуры и качественных показателей покрытия [1].

Вероятность каждого из процессов сложным образом зависит от свойств самих ионов (масса, величина заряда), скорости его движения и угла столкновения с поверхностью, а также от состава, температуры, физико-энергетических свойств. Все это расширяет диапазон возможных плазменных технологий.

Поэтому так важно проанализировать обстановку при действии различных ионов на подложку и при конденсации на нее покрытия.

Работа выполнялась в рамках программы Министерства образования и науки Украины «Новые и ресурсосберегающие технологии в энергетике, промышленности и агропромышленном комплексе» (подсекция 13 «Аэрокосмическая техника и транспорт») и по темам: «Создание физико-технических основ повышения качества материалов аэрокосмических конструкций» и «Разработка технологических основ интегрирования технологий плазменно-ионной обработки деталей аэрокосмической техники», хозяйственных работ о сотрудничестве.

### Исследования действия бомбардировки ионов различных сортов, энергий и зарядности на поверхность детали

Действие заряженных частиц на конструкционные материалы приводит к появлению на глубине довольно высоких температур, при действии индивидуальных ионов разных сортов и энергий, в зоне теплового воздействия есть вероятность появления температурных напряжений значительной величины, что подтверждает возможность зарождения локальных зон, где достигаются условия появления наноструктур [2].

Нами было рассмотрено действие таких ионов как азот и титан. Мы ввели обозначения: частица А – азот, энергия частицы  $E=250$  эВ, зарядовое число равно трем; частица В – азот, энергия частицы  $E=1000$  эВ, зарядовое число равно трем; частица С –

титан, энергия частицы  $E=1000$  эВ, зарядовое число равно трем.

В табл. 1 приведены значения температур, температурных напряжений и радиусов их распределения, которые были получены в результате воздействия перечисленных выше частиц, по методике, предложенной в [3].

Таблица 1  
Значения максимальных температур и температурных напряжений

Радиусы	Температуры	Напряжения
$x = 0$ (поверхность подложки)		
$R_A = 2,27$ нм	$T_A = 275,18$ К	$\sigma_A = 9,96 \cdot 10^{10}$ Па
$R_B = 6,93$ нм	$T_B = 284,78$ К	$\sigma_B = 2,04 \cdot 10^{10}$ Па
$R_C = 1,7$ нм	$T_C = 417$ К	$\sigma_C = 2,34 \cdot 10^{10}$ Па
$x = 0,5L_C = 8,52$ нм; ( $T_i, E=1000$ эВ, $z=3$ )		
$R_A = 6,24$ нм	$T_A = 4,34 \cdot 10^4$ К	$\sigma_A = 4,69 \cdot 10^9$ Па
$R_B = 6,93$ нм	$T_B = 5,34 \cdot 10^4$ К	$\sigma_B = 2,33 \cdot 10^{10}$ Па
$R_C = 6,82$ нм	$T_C = 1,57 \cdot 10^6$ К	$\sigma_C = 9,99 \cdot 10^{10}$ Па
$x = 0,5L_A = 11,4$ нм; ( $N, E=250$ эВ, $z=3$ )		
$R_A = 9,08$ нм	$T_A = 6,92 \cdot 10^4$ К	$\sigma_A = 4,69 \cdot 10^9$ Па
$R_B = 6,93$ нм	$T_B = 1,05 \cdot 10^5$ К	$\sigma_B = 2,4 \cdot 10^{10}$ Па
$R_C = 3,92$ нм	$T_C = 8,49 \cdot 10^5$ К	$\sigma_C = 9,96 \cdot 10^{10}$ Па
$x = 0,5L_B = 34,6$ нм; ( $N, E=1000$ эВ, $z=3$ )		
-	-	-
$R_B = 2,27$ нм	$T_B = 3,25 \cdot 10^5$ К	$\sigma_B = 2,46 \cdot 10^{10}$ Па
-	-	-
$x = 0,8L_B = 55,4$ нм; ( $N, E=1000$ эВ, $z=3$ )		
-	-	-
$R_B = 6,923$ нм	$T_B = 1,44 \cdot 10^5$ К	$\sigma_B = 2,29 \cdot 10^{10}$ Па
-	-	-

### Исследование действия различных размеров капель титана, сконденсированных на поверхность подложки железа

В начальный момент за время  $dt$  прогреется слой  $dx$ , поэтому решаем одномерную задачу. Уравнение теплопроводности для одномерной задачи, которое позволяет определить температуру в поверхностном слое  $dx$ , имеет вид [4]:

$$\frac{2\pi}{3} r_0^3 c_{v1} \rho_1 T_{пл} = \frac{2\pi}{3} r_0^3 c_{v1} \rho_1 T_1 + \pi dx c_{v2} (T_1 - T_0), \quad (1)$$

где  $r_0$  - радиус капли;  $c_{v1}$  - удельная теплоемкость сконденсированного материала;  $c_{v2}$  - удельная теплоемкость материала подложки;  $\rho_1$  - плотность сконденсированного материала;  $\rho_2$  - плотность материала подложки;  $T_{пл}$  - температура плавления сконденсированного материала;  $T_1$  - температура, установившаяся в слое  $dx$  и в капле;  $T_0$  - температура подложки.

Минимальный слой  $dx$  можно принять за размер кристаллической решетки подложки  $\zeta$ , тогда установившаяся температура в слое, равному размеру кристаллической решетки:

$$T_1 = \frac{c_{v1} \rho_1 T_{пл} + \frac{3R}{2r_0} c_{v2} \rho_2 T_0}{c_{v1} \rho_1 + c_{v2} \rho_2}. \quad (2)$$

Время, в течение которого фронт тепла прошел расстояние, равное размеру кристаллической решетки:

$$\Delta t = \frac{\zeta^2 \rho_2 c_{v2} (T_1 - T_0)}{\chi (T_{пл} - T)}, \quad (3)$$

где  $\chi$  - коэффициент температуропроводности среды.

$$\chi = \frac{\kappa}{\rho c_v}, \quad (4)$$

где  $\kappa$  - положительная постоянная, зависящая от материала и его физического состояния;  $\rho$  - плотность материала;  $c_v$  - удельная теплоемкость.

Последовательно увеличивая расстояние проникновения теплового фронта, из уравнения (3) можно определить температуру на каждом шаге, а в начальный момент времени дополнительно вычислить скорость распространения тепла:

$$V_{пл} = \frac{\zeta}{\Delta t}. \quad (5)$$

Одномерная задача имеет место только в начальный момент соприкосновения капли с основой. Со временем одномерная задача переходит в трехмерную.

При решении трехмерной задачи температура, до которой нагрелась основа на глубину  $r_0$  и до которой остыла жидкая капля:

$$T_1 = \frac{c_{v1} \rho_1 T_{пл} + c_{v2} \rho_2 T_0}{c_{v1} \rho_1 + c_{v2} \rho_2}. \quad (6)$$

Граница раздела между температурой  $T_1$  и температурой основы  $T_0$  имеет размер, равный расстоянию размера кристаллической решетки  $\zeta$ . Поэтому градиент температуры на сфере радиуса  $r_0$  будет:

$$\frac{\partial T}{\partial r_0} = \frac{T_1 - T_0}{\zeta}. \quad (7)$$

Значение постоянной интегрирования будет:

$$C_1 = r_0^2 \left[ \frac{c_{v1} \rho_1 T_{пл} + c_{v2} \rho_2 T_0 - T_0}{\zeta} \right]. \quad (8)$$

Скорость распространения фронта разогрева можно записать в виде:

$$\frac{\partial r}{\partial t} = \frac{\chi C_1}{c_{v2} \rho_2 r_{cp}^2 (T_1 - T_0)}, \quad (9)$$

где  $r_{cp} = r + dr$ ,  $r$  - переменный радиус проникновения тепла в глубь основы.

Итак, зная скорость распространения тепла, можно последовательно, начиная с начального значения  $r = r_0$ , определить скорость движения фронта распространения тепла и получить функциональную зависимость изменения температуры в каждый момент времени от радиуса  $r$ .

Расчет был проведен для подложки железа, на которую были сконденсированы капли титана.

Согласно [5] объем капли, расплюсченной при ударе о поверхность образца и имеющий диаметр  $D_k$ , равен объему сферы диаметром  $d_k = 1/2 D_k$ . Были рассмотрены капли с радиусами 0,1; 0,2 и 0,3 мм, распыленные на участок (квадрат, с длиной стороны 50 мкм).

Зависимость количества капель на единицу площади в единицу времени от их диаметра имеет вид:

$$\frac{\Delta n}{\Delta S} t = 112,66r^2 - 1198,2r + 2381,655. \quad (10)$$

Тогда получаем, что на площадь 0,025 м<sup>2</sup> можно разместить две капли с радиусом 0,1 мкм, две капли с радиусом 0,2 мкм и одну каплю с радиусом 0,3 мкм.

На основании выражений (6) – (9) были получены распределения скорости нарастания температуры по глубине подложки и по радиусам распределения температур, возникших в результате воздействия сконденсированных различных размеров капель титана (рис. 1, 2).

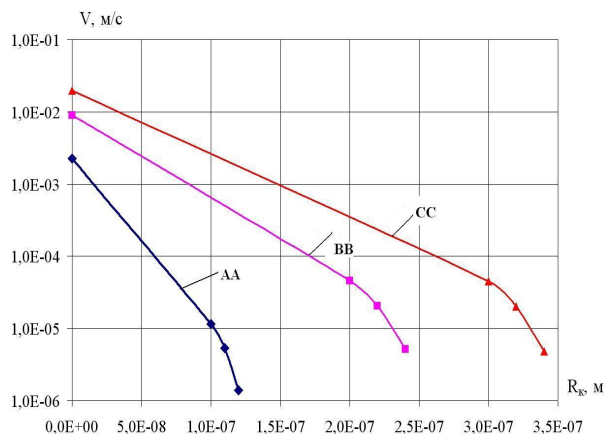


Рис. 1. Скорость распространения фронта тепла полученного в результате осаждения капель AA, BB и CC на подложку по радиусам распределения температуры

На рис. 3 приведено распределение температуры по глубине железной подложки, полученное при конденсации капель титана различных размеров. Величина температуры на глубине, очень близкой к

поверхности, приблизительно одинакова для капель всех размеров и составляет 802K, затем наблюдается увеличение температуры до глубины, равной радиусу капли, на 170 K, и резкий спад до температуры окружающей среды. Температура, полученная в результате воздействия капель на подложку, практически не зависит от размера капли, так как условия конденсации одинаковы и материал один и тот же.

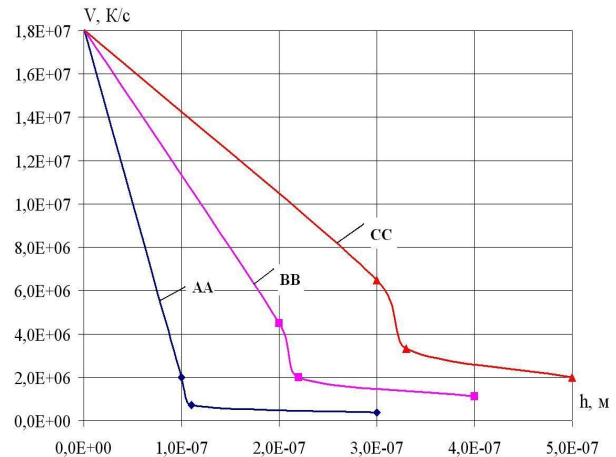


Рис. 2. Распределение скорости нарастания температуры по глубине подложки, полученное в результате воздействия сконденсированных различных размеров капель AA, BB и CC

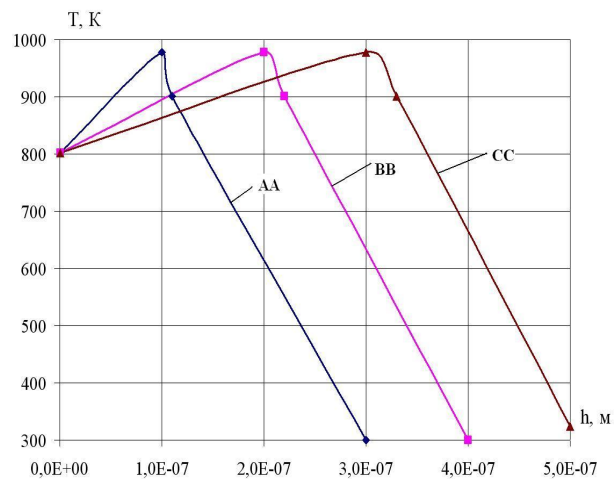


Рис. 3. Распределение температуры, полученное в результате воздействия сконденсированных капель AA, BB и CC по глубине подложки

Если рассматривать воздействие капель титана в плоскостях, параллельных поверхности подложки и расположенных на глубине половины свободного пробега ионов, различных сортов, зарядностей и энергий, то получаем распределение по радиусам воздействия температур (рис. 4). Эти плоскости расположены на глубине, меньшей, чем радиусы капель, т. е. от плоскости к плоскости капельная температура будет расти.

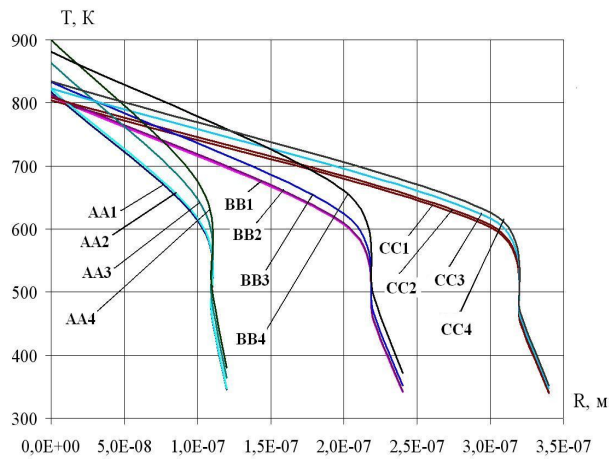


Рис. 4. Распределение температуры, полученной в результате воздействия каплей AA<sub>i</sub>, BB<sub>i</sub> и CC<sub>i</sub> (i=1,4), по радиусам действия температур подложки железа в различных плоскостях (i=1 – плоскость, расположена на глубине x = 0,5L<sub>C</sub>; i=2 – плоскость, расположена на глубине x = 0,5L<sub>A</sub>; i=3 – плоскость, расположена на глубине x = 0,5L<sub>B</sub>; i=4 – плоскость, расположенная на глубине x = 0,8L<sub>B</sub>)

Затем рассматриваем плоскости, расположенные параллельно поверхности на глубине радиусов капель. На первой плоскости есть распределение температур капель всех размеров (температура от воздействия капли с радиусом 0,1 мкм будет максимальной), на второй – нет температуры от воздействия капли с радиусом 0,1 мкм, на третью плоскость воздействует лишь капля с радиусом 0,3 мкм.

Введем обозначения – AA – капли с радиусом 0,1 мкм, BB – капли с радиусом 0,2 мкм, CC – капли с радиусом 0,3 мкм.

На рис. 5 приведено трехмерное расположение описанных выше плоскостей и распределения на них температур в результате воздействия сконденсированных на подложку капель титана и бомбардировки поверхности ионами различных сортов и зарядностей.

Для полного описания состояния поверхностного слоя, в котором образуется наноструктура, необходимо составить картину температурных напряжений, возникающих в связи с действием ионов различных сортов, зарядностей и энергий, а также капель, сконденсированных на подложку, которые также имеют свою температуру и соответствующие температурные напряжения. Температурные напряжения для соответствующих плоскостей и температур определяем по формуле:

$$\sigma = \Delta T E \alpha, \tag{11}$$

где  $\Delta T$  – падение (возрастание) температуры на каждом шаге расчета; E – модуль упругости подложки, ГПА;  $\alpha$  – коэффициент линейного расширения.

Распределение температурных напряжений, полученное в результате воздействия сконденсиро-

ванных различных размеров капель титана (0,1; 0,2; 0,3 мкм), по глубине подложки железа показано на рис. 6., распределение по радиусу – на рис. 7.

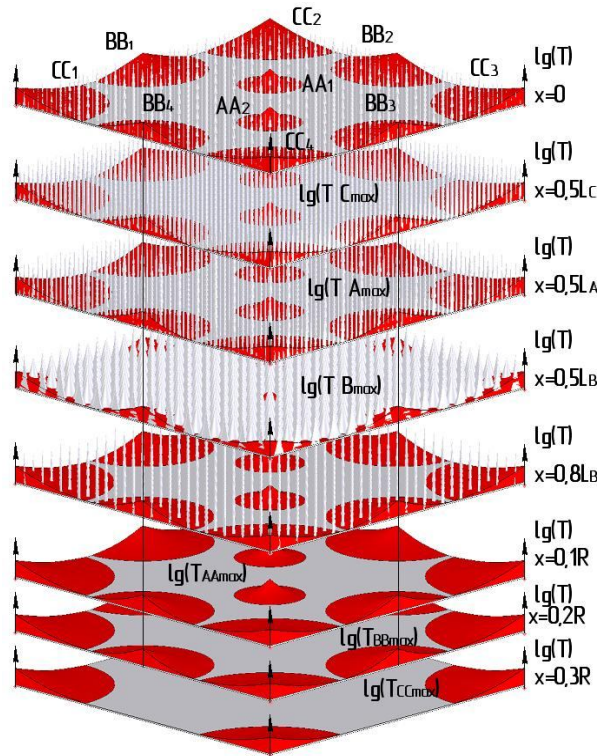


Рис. 5. Трехмерная модель полей температур, распределенных по глубине подложки на плоскостях x=0; x = 0,5L<sub>A</sub>; x = 0,5L<sub>B</sub>; x = 0,5L<sub>C</sub>; x = 0,8L<sub>B</sub>; x=0,1 мкм; x=0,2 мкм; x=0,3 мкм к концу действия тепловых источников (частиц-ионов и капель, сконденсированных на подложку)

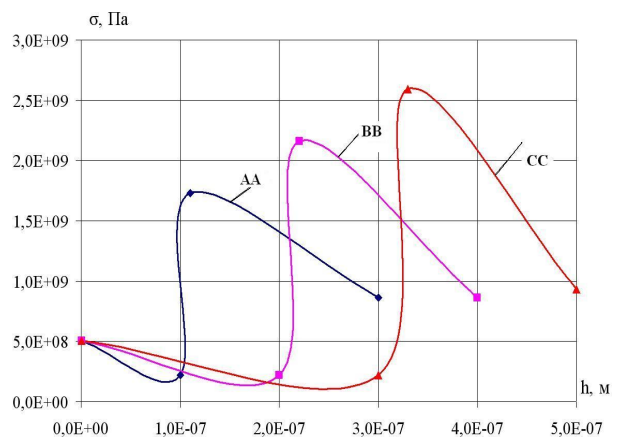


Рис. 6. Распределение температурных напряжений, полученное в результате воздействия сконденсированных различных размеров капель AA, BB и CC по глубине подложки

На рис. 8 приведена трехмерная модель полей напряжений, распределенных по глубине подложки на плоскостях x=0; x = 0,5L<sub>A</sub>; x = 0,5L<sub>B</sub>; x = 0,5L<sub>C</sub>; x = 0,8L<sub>B</sub>; x=0,1 мкм; x=0,2 мкм; x=0,3 мкм к концу действия тепловых источников (частиц-ионов и ка-



пель, сконденсированных на подложку), частицы А – частица N ( $z = 3 E=250\text{эВ}$ ), В - частица N ( $z = 3 E=1000\text{эВ}$ ), С - частица Ti ( $z = 3 E=1000\text{эВ}$ ); капли: AA – капли Ti ( $r=0,1\text{ мкм}$ ), BB - капли Ti ( $r=0,2\text{ мкм}$ ), CC - капли Ti ( $r=0,3\text{ мкм}$ ).

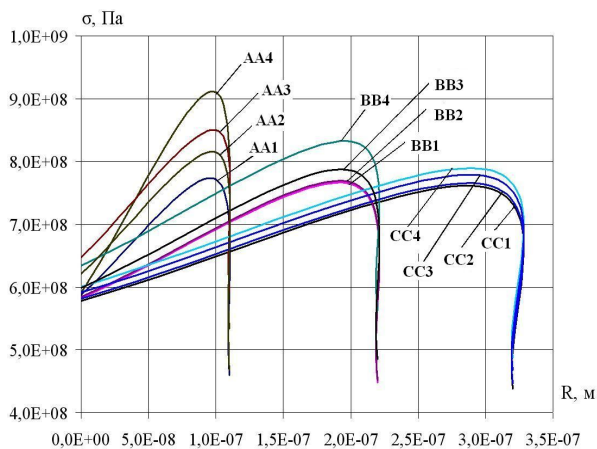


Рис. 7. Распределение температурных напряжений, полученное в результате воздействия сконденсированных капель AA<sub>i</sub>, BB<sub>i</sub> и CC<sub>i</sub> ( $i=1,4$ ), по радиусам действия температур подложки железа в различных плоскостях ( $i=1$  – плоскость, расположена на глубине  $x = 0,5L_C$ ;  $i=2$  – плоскость, расположена на глубине  $x = 0,5L_A$ ;  $i=3$  – плоскость, расположена на глубине  $x = 0,5L_B$ ;  $i=4$  – плоскость, расположена на глубине  $x = 0,8L_B$ )

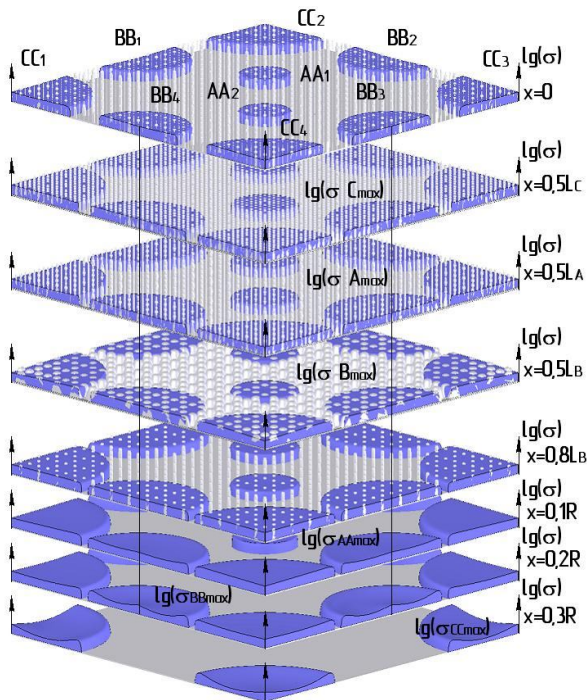


Рис. 8. Трехмерная модель полей температурных напряжений, распределенных по глубине подложки на плоскостях  $x=0$ ;  $x = 0,5L_A$ ;  $x = 0,5L_B$ ;  $x = 0,5L_C$ ;  $x = 0,8L_B$ ;  $x=0,1\text{ мкм}$ ;  $x=0,2\text{ мкм}$ ;  $x=0,3\text{ мкм}$  к концу действия тепловых источников (частиц-ионов и капель, сконденсированных на подложку)

### Заключение

Проведенные расчеты полей температур и температурных напряжений в объеме, где действуют ионы и их температурные поля, капли и их температурные поля позволяют утверждать: в зоне действия капель размером от 100 до 350 нм реализуются поля температур на поверхности от максимальной температуры 802К, на глубине половинного пробега частицы С ( $E = 1000\text{эВ}$ ) она повышается до 807-817К, на глубине половинного пробега частицы А ( $E=250\text{эВ}$ ) температура увеличивается до 808-822К, на глубине половинного пробега частицы В ( $E=1000\text{эВ}$ ) температура достигает 822-863 К, на глубине  $x = 0,8L_B$  температура лежит в пределах – 835-900К.

Температурные напряжения в зоне действия этих температурных полей составляют в первом случае ( $x = 0$ ) величину  $5 \cdot 10^8\text{Па}$ , во втором ( $x = 0,5L_C$ ) температурные напряжения лежат в пределах  $7,59 \cdot 10^8 - 7,72 \cdot 10^8\text{ Па}$ , далее, при  $x = 0,5L_A$  температурные напряжения достигают  $7,67 \cdot 10^8 - 7,76 \cdot 10^8\text{ Па}$ , при  $x = 0,5L_B - 7,76 \cdot 10^8 - 8,15 \cdot 10^8\text{ Па}$ , при  $x = 0,8L_B - 7,88 \cdot 10^8 - 8,5 \cdot 10^8\text{ Па}$ .

В случае действия ионов различных сортов, энергий и зарядностей колебания температуры на поверхности подложки составляют 275 - 417 К, в плоскости ( $x = 0,5L_C$ ) температура составляет –  $4,34 \cdot 10^4 - 1,57 \cdot 10^6\text{К}$ ; в плоскости, расположенной на глубине половины свободного пробега азота ( $E = 250\text{эВ}$ ) с зарядным числом 3, температура составляет  $6,92 \cdot 10^4 - 8,42 \cdot 10^5\text{ К}$ ; следующие две плоскости расположены на глубинах  $x = 0,5L_B$  и  $x = 0,8L_B$ , параллельно поверхности (частица В – N,  $E=1000\text{эВ}$ ), к этим плоскостям проникает температурное поле только частицы В, его максимум составляет  $3,25 \cdot 10^5$  и  $1,44 \cdot 10^5\text{ К}$  на соответствующей плоскости.

При действии ионов наблюдаются также температурные напряжения, которые на поверхности составляют  $6,49 \cdot 10^8 - 2,34 \cdot 10^{10}\text{ Па}$ , в следующей рассматриваемой плоскости ( $x = 0,5L_C$ ) напряжения составляет –  $4,69 \cdot 10^9 - 9,99 \cdot 10^{10}\text{ Па}$ ; в плоскости, расположенной на глубине половины свободного пробега азота ( $E = 250\text{эВ}$ ) с зарядным числом 3, напряжения составляет  $4,69 \cdot 10^9 - 9,96 \cdot 10^{10}\text{ Па}$ ; следующие две плоскости расположены на глубинах  $x = 0,5L_B$  и  $x = 0,8L_B$ , параллельно поверхности (частица В – N,  $E = 1000\text{эВ}$ ), к этим плоскостям проникает поле температурных напряжений только частицы В, его максимум составляет  $2,46 \cdot 10^{10}$  и  $2,29 \cdot 10^{10}\text{ Па}$  на соответствующей плоскости.

Все это показывает, что есть возможность образования наноструктур за счет действия ионов, а также есть довольно высокая вероятность их образования в зоне действия капель.

## Литература

1. Костюк Г.И. *Наноструктуры и нанопокрyтия: перспективы и реальность: учеб. пособие / Г.И. Костюк.* – Х.: Нац. аэрокосм. ун-т «Харьк. авиац. ин-т», 2009. – 406 с.

2. Костюк Г.И. *Получение наноструктур в объеме детали при комбинированном упрочнении / Г.И. Костюк, О.М. Мелкозерова // Вісті академії інженерних наук України: сб. науч. тр. Нац. аэрокосм. ун-та им. Н. Е. Жуковского «ХАИ». – № 1 (38). – Х., 2009. – С. 12-20.*

3. Мелкозерова О.М. *Образование наноструктур TiN в поверхностном слое железа при действии*

*ионов различных сортов, зарядностей и энергий / О.М. Мелкозерова // Вопросы проектирования и производства конструкции летательных аппаратов: сб. науч. тр. Нац. аэрокосм. ун-та им. Н.Е. Жуковского «ХАИ». – Вып. 3 (63). – Х., 2010. – С. 24-30.*

4. Гречихин Л.И. *Физика наночастиц и нанотехнологий. Общие основы, механические, тепловые и эмиссионные свойства: монография / Л.И. Гречихин.* – Мн. УП «Технопринт», 2004. – 399 с.

5. Аксенов И.И. *Вакуумная дуга в эрозионных источниках плазмы / И.И. Аксенов.* – Х.: ННЦ ХФТИ, 2005. – 212 с.

Поступила в редакцию 8.04.2011

**Рецензент:** д-р техн. наук., проф., зав. каф. технологии проектирования авиационных двигателей, А.И. Долматов, Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «ХАИ», Украина

## ІНЖЕНЕРНА МОДЕЛЬ ДІЇ ЙОНІВ РІЗНИХ СОРТІВ, ЗАРЯДНОСТЕЙ, ЕНЕРГІЙ ТА КАПЕЛЬ, СКОНДЕНСОВАНИХ НА ПОВЕРХНІ

*Г.І. Костюк, О.М. Мелкозерова*

При взаємодії матеріалу з йонами або плазмовими струмами на поверхні деталі та в її поверхневому шарі існує ряд процесів, які впливають на якість покриттів, їх склад, швидкість їх нанесення. Дана інженерна модель дії струму заряджених частинок різних сортів, зарядностей, енергій, та також капель матеріалу, які були сконденсовані на поверхню. Розраховані поля температур та температурних напружень, швидкостей їх зростання, які доказують можливість одержання наноструктурних матеріалів, як на глибині деталі, так і на її поверхні у вигляді покриття нанометрової товщини, яке має високу адгезію до основного матеріалу.

**Ключові слова:** наноструктура, температурні поля, температурні напруження, швидкості зростання температур

## ENGINEERING MODEL OF THE ACTION OF DIFFERENT KIND CHARGE, ENERGY PARTICLES AND DROPS CONDENSAT AT THE SURFACE

*G.I. Kostyk, O.M. Melkozerova*

At interaction of surfaces with ionic beams or plasma streams on a surface of a firm body and in its superficial layer a number of processes which determine quality of received coverings, their structure, speed of their drawing and the certain quality of a product proceeds. The engineering model of action of a stream of the charged particles of various grades, charge and energy, and also drops of a material, condensate on the substrate is offered. Fields of temperatures and temperature pressure, speeds of increase of temperatures which prove about an opportunity of reception nanostructure materials, both on depth of a material, and on its surface in the form of a covering nanometre thickness which has very good adhesion to the basic material have been received.

**Keywords:** nanostructure, temperature fields, temperature pressure, speeds of increase of temperatures

**Костюк Геннадий Игоревич** – д-р техн. наук, проф., зав. каф. робототехнических систем и комплексов, Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «ХАИ», Украина

**Мелкозерова Ольга Михайловна** - аспирант кафедры робототехнических систем и комплексов, Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «ХАИ», Украина, e-mail: olja.mex@gmail.com