УДК 621.9.044

Г.И. КОСТЮК, О.Д. СЕМЕНЕНКО

ВЛИЯНИЯ СПОСОБА ЗАДАНИЯ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ И ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ТВЕРДОГО СПЛАВА В3 НА ХАРАКТЕР И ЭФФЕКТИВНОСТЬ ОБРАЗОВАНИЯ НАНОСТРУКТУР

На основе решения совместной задачи теплопроводности и термоупругости в зоне действия ионов (B+, C+, N+, Al+, V+, Cr+, Ni+, Y+, Zr+, Hf+ W+) на твердый сплав В3 при использовании стохастических значений, полученных квантово-механическим методом теплофизических и термомеханических характеристик, определялись максимальные температурные напряжения, объемы, зоны где реализуются наноструктурные и максимальные глубины их залегания. Показано, что для квантово - механического способа задания теплофизических и термомеханических характеристик всегда реализуется большее значение температурных напряжений, объема образования наноструктур. Тогда как объёмы наноструктур для двух способов задания тебплофизических и термамеханичебских характеристик фактически не отличается.

Исследования показали, что с ростом массы иона величины температурных напряжений уменьшаются, объемы наноструктур снижаются незначительно и при действии иона гафния и вольфрама они снижаются больше чем на порядок. Максимальная глубина залегания наноструктуры также снижается и для малых энергий составляет 2-5 10^{-9} м. При чем наиболее существенно в случае задания стохастических значений теплофизических и термомеханических характеристик эти глубины уменьшаются с ростом массы иона. В результате исследования определены ионы, их заряды и сорта для которых необходимо проводить расчеты с использованием квантово-механического метода.

Ключевые слова: технологические параметры лазера, фемтосекундный лазер, твердый сплав «В3», режущий инструмент, наноструктурные слоя.

Г. І. КОСТЮК, О.Д. СЕМЕНЕНКО

ВПЛИВ СПОСОБУ ЗАВДАННЯ ТЕПЛОФІЗИЧНИХ І ТЕРМОМЕХАНІЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ТВЕРДОГО СПЛАВА В3 НА ХАРАКТЕР І ЕФЕКТИВНІСТЬ СТВОРЕННЯ НАНОСТРУКТУР

На основі рішення спільної задачі теплопровідності і термопружності в зоні дії іонів (B +, C +, N +, Al +, V +, Cr +, Ni +, Y +, Zr +, HF + W +) на твердий сплав В3 при використанні стохастичних значень, отриманих квантово - механічних методом теплофізичних і термомеханічних характеристик, визначалися максимальні температурні напруги, обсяги, зони де реалізуються наноструктурні і максимальні глибини їх залягання. Показано, що для квантово - механічного способу завдання теплофізичних і термомеханічних характеристик завжди реалізується більше значення температурних напружень, обсягу освіти наноструктур. Тоді як обсяги наноструктур для двох способів завдання тебплофізическіх і термамеханічебскіх характеристик фактично не відрізняється.

Дослідження показали, що з ростом маси іона, величини температурних напружень зменшуються, обсяги наноструктур знижуються незначно і при дії іона гафнію і вольфраму вони знижуються більше ніж на порядок. Максимальна глибина залягання наноструктури також знижується і для малих енергій становить 2-5 10^{-9} м. При чому найбільш істотно в разі завдання стохастичних значень теплофізичних і термомеханічних характеристик ці глибини зменшуються з ростом маси іона. В результаті дослідження визначено іони, їх заряди і сорти для яких необхідно проводити розрахунки з використанням квантово- механічного методу.

Ключові слова: технологічні параметри лазера, фемтосекундний лазер, твердий сплав «В3», ріжучий інструмент, наноструктурні шари.

G. I. KOSTYUK, O.D SEMENENKO

INFLUENCE OF THE METHOD OF THE TASK OF THE THERMOPHYSICAL AND THERMOMECHANICAL CHARACTERISTICS OF SOLID B3 ALLOY ON THE CHARACTER AND EFFICIENCY OF FORMATION OF NANOSTRUCTURES

Based on the solution of the joint problem of heat conduction and thermoelasticity in the zone of action of ions (B +, C +, N +, Al +, V +, Cr +, Ni +, Y +, Zr +, Hf + W +) on hard alloy B3 using stochastic values and obtained quantum-mechanical by the method of thermophysical and thermomechanical characteristics, the maximum temperature stresses, volumes, zones where nanostructural and maximum depths of their occurrence were determined. It is shown that for the quantum mechanical method of specifying thermophysical and thermomechanical characteristics, a larger value of thermal stresses, the volume of formation of nanostructures is always realized. While the volumes of nanostructures for the two ways of specifying the thermophysical and thermomechanical characteristics are virtually no different.

Studies have shown that with an increase in the mass of an ion, the temperature stresses decrease, the volumes of nanostructures decrease slightly, and under the action of hafnium and tungsten ions they decrease more than an order of magnitude. The maximum depth of the nanostructure is also reduced and for low energies is 2-5 10^{-9} m. Moreover, in the case of setting stochastic values of thermophysical and thermomechanical characteristics, these depths decrease with increasing ion mass. As a result of the study, ions were determined, their charges and varieties for which it is necessary to carry out calculations using the quantum mechanical method.

Keywords: laser technological parameters, femtosecond laser, hard alloy «B3», cutting tool, nanostructured layers.

Введение. В настоящие время широко применяется твердые сплавы на основе AL_2O_3 особенно зарубежом, что требует более точного нахождения технологических параметров при которых могут быт образованы наноструктуры. Все это показывает, что необходимо провести исследование напряженного состояния, вероятного значения объема наноструктур и глубин его залегания для двух случаев задания теплофизических и термомеханических характеристик.

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

© Г.И. Костюк, О.Д. Семененко, 2018

аэрокосмической техники» (подсекция 6 «Физико-технические проблемы материаловедения»), «Концепция создания наноструктур, нано- и традиционных покрытий с учётом влияния адгезии на эффективность и работоспособность деталей АТ, АД и РИ», «Экспериментально-теоретическое исследование получения наноструктур при действии ионных и светолучевых потоков на конструкционные материалы и РИ», хоздоговорных работ и договоров о сотрудничестве.

Состояние вопроса. В настоящие время существует значительное число работ, которые рассматривают теоретические аспекты образования наноструктур [1-7], но они, к сожалению, не учитывают энергию затрачиваемую на образование нано зерна а также квантово-механический метод описания теплофизических и термомеханических характеристик. Поэтому, рассмотрение этих вопросов является актуальным и важным для оценки вероятности образования нано структур при действии потока ионов на твердый сплав В3.

Постановка задачи исследования. Решалась совместная задача теплопроводности и термоупругости с разными теплофизическими и термомеханическими характеристиками твердого сплава, полученными с использованием стохастических значений и рассчитанных квантово-механическим методом.

Результаты и их обсуждение. Проводилось исследование максимальных температурных напряжений, максимальной глубины залегания нанокластера и объема нанокластера в зависимости от энергии ионов (B+, C+, N+, Al+, V+, Cr+, Ni+, Y+, Zr+, Hf+ W+)

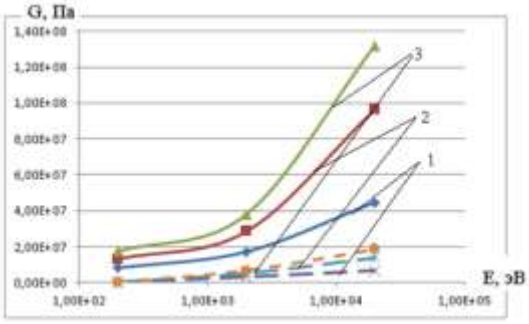
При расчетных значениях теплофизических и термомеханических характеристик полученных квантово-механическим методом и их стохастическими значениями. Проводилось сравнение значений этих величин, что позволило определить те значения при которых наблюдается корреляция и когда они существенно отличаются. Для иона бора эти значения для зарядового числа 1,2 и 3 существенно отличается, а также отличается их значение при разных способах задания теплофизических и термомеханических характеристик

Температурные напряжения обычно больше при квантово-механическом способе задания теплофизических и термомеханических характеристик в зоне твердого сплава В3, (практически в 10 раз больше чем при использовании стохастических значений). Максимальные глубины залегания при энергиях до 2 кэВ практически не отличаются при разных способах заданиях теплофизических и термомеханических характеристик. Тогда как при больших энергиях использование их стохастических значений приводит к большим значениям максимальных глубин залегания

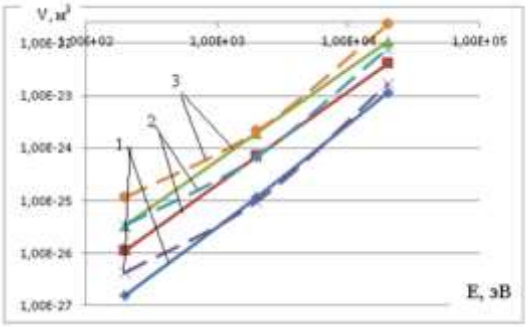
Для объема наноструктуры наблюдается, следующие условия для энергии порядка 2 кэВ реализуются одинаковые значение иона при обоих случаев, тогда как с дальнейшим ростом значений энергии иона при стохастических значениях реализуются несколько большие величины объема зерна.

При переходе к ионам углерода (рис. 2) температурные напряжения для стохастических значений наблюдается более низкое значение (1,5 10^7 Па/м^2.) тогда как при квантово-механическом способе задания получены значительно большие значения и достигают 4,2 10^8 Па/м^2.

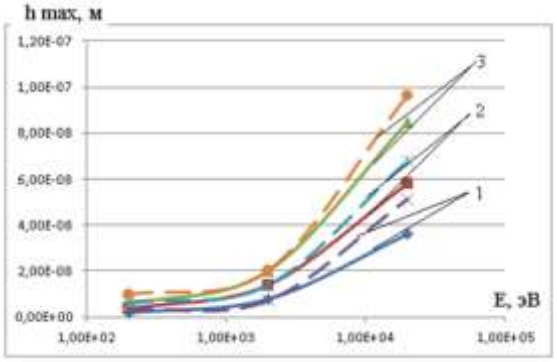
Для случая действия иона азота (рис. 3) использования стохастических значений, приводит к тому, что максимальных напряжений практически близки для всех зарядовых чисел (1,2,3). Тогда как в случае учета квантово-механического эффекта эти значения существенно отличаются и превышают величины, полученные в первом случае. (4 10^7 –1,2 10^8 Па/м^2. Тогда как в первом случае они лежат вблизи 1 10^7.



а

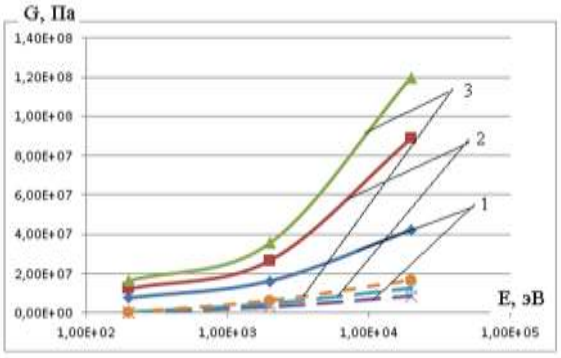


б

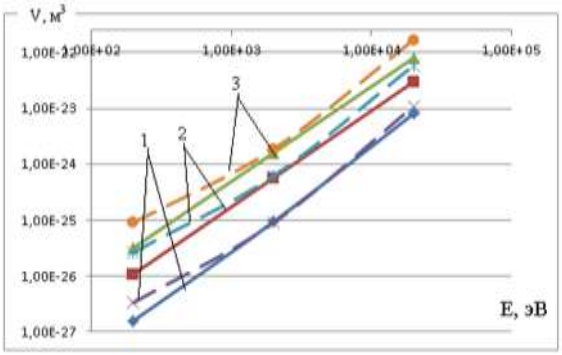


в

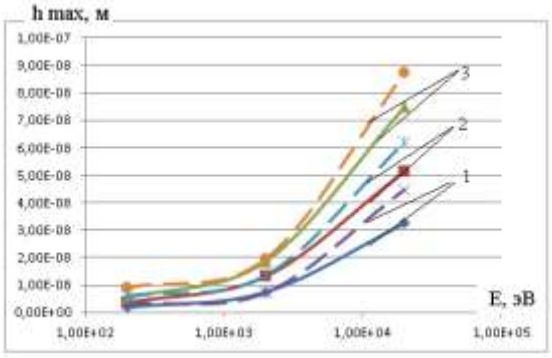
Рис. 1 - Зависимости максимальных температурных напряжений (а), объема зерна (б) и максимальной глубины залегания (в) в твердом сплаве В3 при действии от энергии иона бора с разным зарядовым числом (1 = 1, 2=2, 3=3)



а

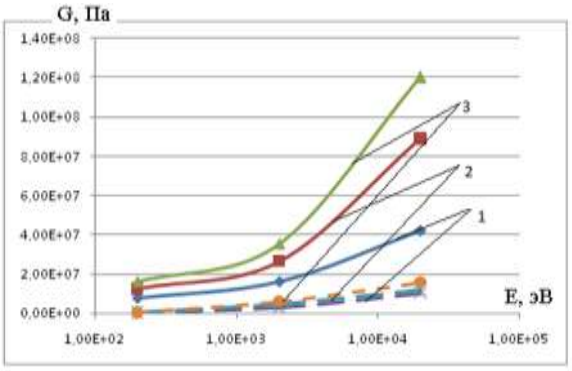


б

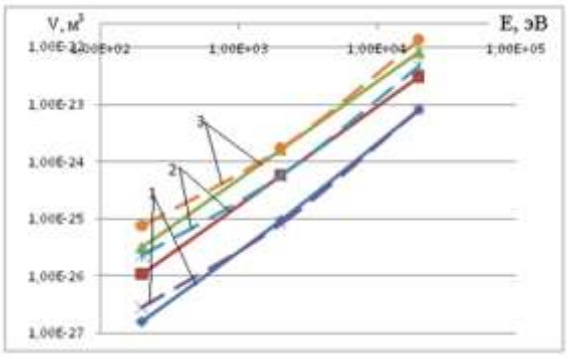


в

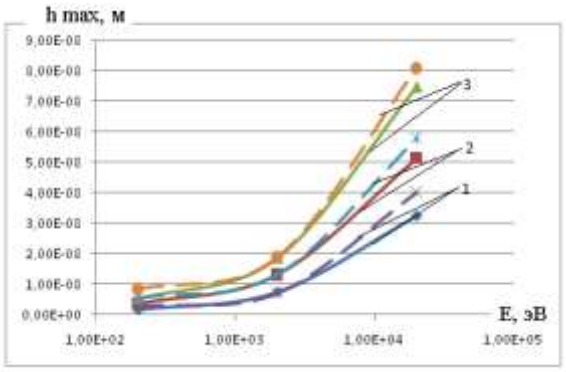
Рис. 2 - Зависимости максимальных температурных напряжений (а), объема зерна (б) и максимальной глубины залегания (в) в твердом сплаве В3 при действии от энергии иона углерода с разным зарядовым числом (1 = 1, 2=2, 3=3)



а

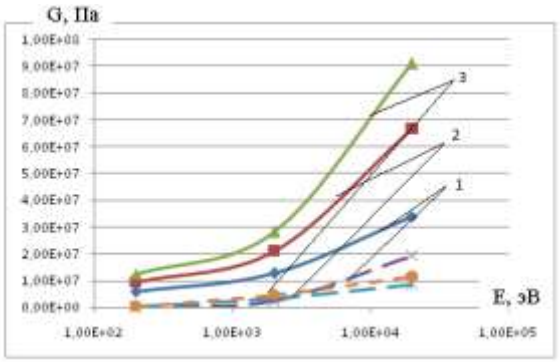


б

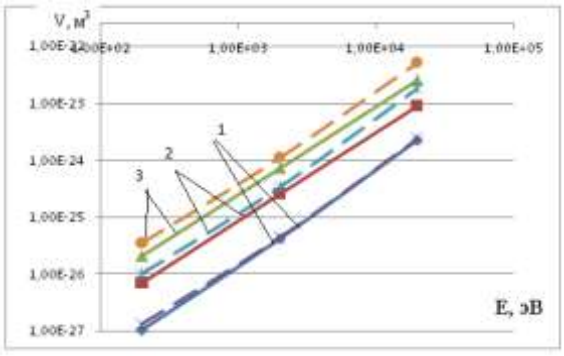


в

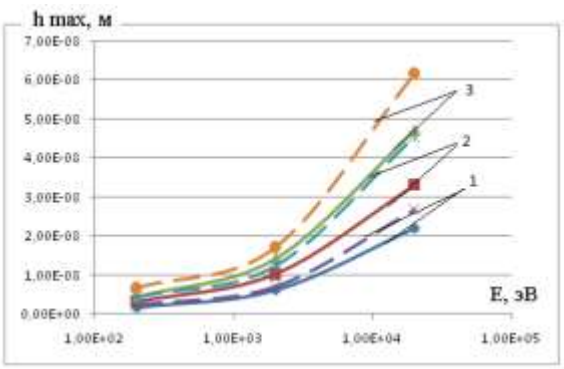
Рис. 3 - Зависимости максимальных температурных напряжений (а), объема зерна (б) и максимальной глубины залегания (в) в твердом сплаве В3 при действии от энергии иона азота с разным зарядовым числом (1 = 1, 2=2, 3=3)



а

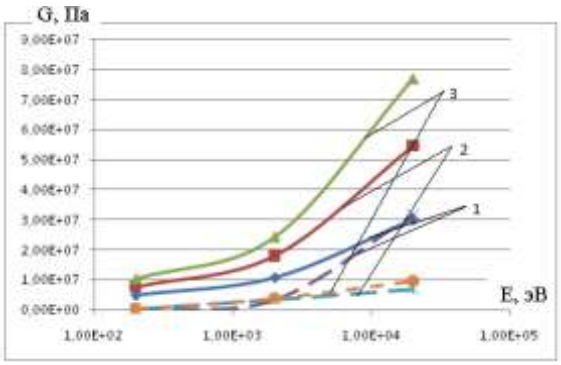


б

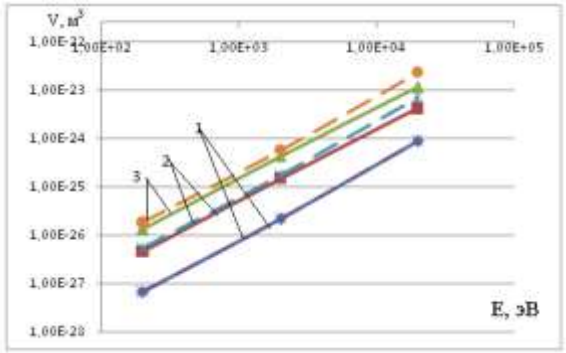


в

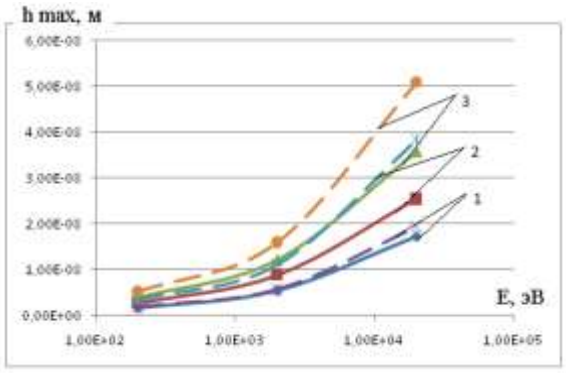
Рис. 4 - Зависимости максимальных температурных напряжений (а), объема зерна (б) и максимальной глубины залегания (в) в твердом сплаве В3 при действии от энергии иона алюминия с разным зарядовым числом (1 = 1, 2=2, 3=3)



а

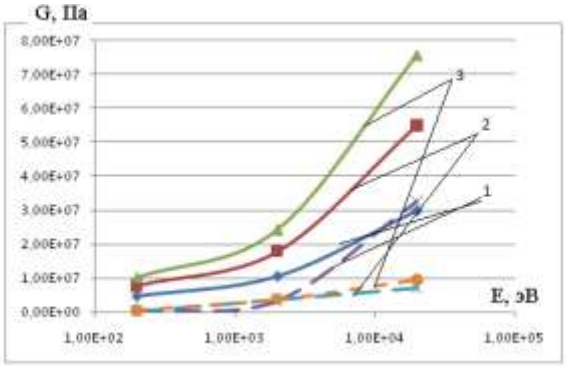


б

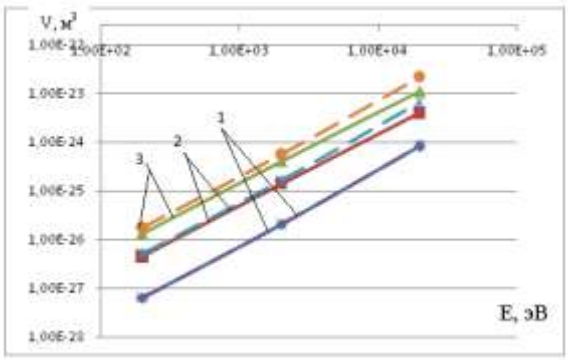


в

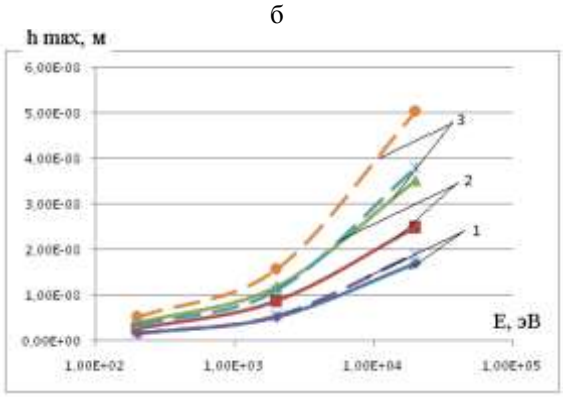
Рис. 5 - Зависимости максимальных температурных напряжений (а), объема зерна (б) и максимальной глубины залегания (в) в твердом сплаве В3 при действии от энергии иона ванадия с разным зарядовым числом (1 = 1, 2=2, 3=3)



а



б



в

Рис. 6 - Зависимости максимальных температурных напряжений (а), объема зерна (б) и максимальной глубины залегания (в) в твердом сплаве В3 при действии от энергии иона хрома с разным зарядовым числом (1 = 1, 2=2, 3=3)

Для случая действия ионов алюминия (рис. 4) на твердый сплав В3 имеем существенное отличие значений напряжений, которые в первом случае имеют небольшие значения, менышие или равные 10^7 Па/м^2, а в случае квантов механического подхода они лежат в диапазонное 3,4- 9 10^7 Па/м^2. Величины объемов Н.С. при значениях зарядового числа равного 2 практически одинаковы, а для z =1 вообще не отличаются (рис. 4, а).

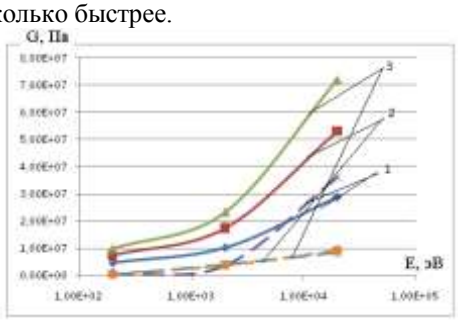
Для объема наноструктур наблюдаем совпадение значений по двум способам задания теплофизических и термомеханических характеристик при зарядовом числе 2, тогда как в остальных случаях они отличаются особенно существенно при малых энергиях (рис. 3, б).

Максимальная глубина залегания для обоих случаях отличается незначительно что говорит о том, что при оценке глубины залегания Н.С. можно не учитывать квантов механический эффект (рис. 3, в).

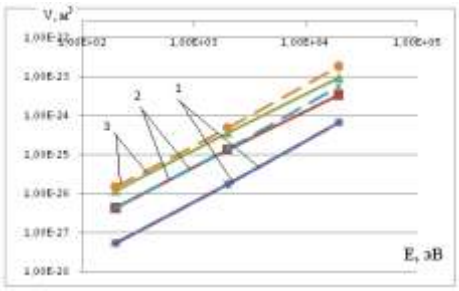
Максимальная глубина залегания Н.С. для ионов алюминия отличается для двух способов уже гораздо менее значительнее. Для случая использования стохастических значений она лежит в приделах от $2 \cdot 10^{-8}$ до $4{,}8 \cdot 10^{-8}$. Тогда как для использования квантово-механического подхода эти значения укладываются в диапазон $2{,}5 \cdot 10^{-8}$ до $6{,}1 \cdot 10^{-8}$ (рис. 4, в)

При использовании ионов ванадия и хрома (рис. 5-6) ситуация несколько изменилась. В этом случае максимальные температурные напряжения реализуются для квантово-механического способа задания теплофизических и термомеханических характеристик тогда как значения их существенно разнятся и лежат в диапазоне ($3 \cdot 10^7$ - $7{,}6 \cdot 10^7$). Для максимальных энергий объемы Н.С. также коррелируют, при чем для Z=1 они практически совпадают, при Z=2 они отличаются, а при Z=3 отличаются больше.

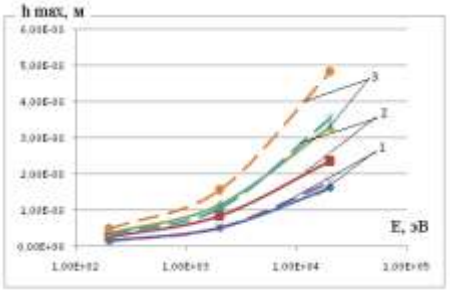
Для случая действия ионов никеля и иттрия (рис. 7-8) максимальные температурные напряжения также возрастают с ростом энергии, при чем для ионов иттрия даже несколько быстрее.



а



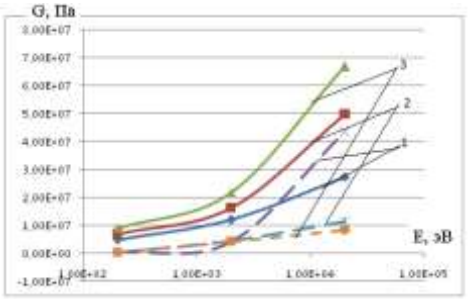
б



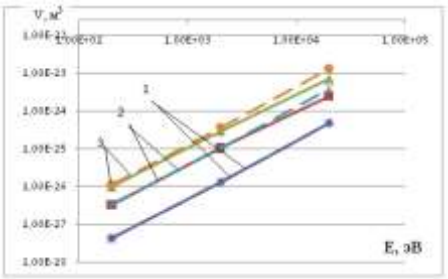
в

Рис. 7 - Зависимости максимальных температурных напряжений (а), объема зерна (б) и максимальной глубины залегания (в) в твердом сплаве В3 при действии от энергии иона никеля с разным зарядовым числом (1 = 1, 2=2, 3=3)

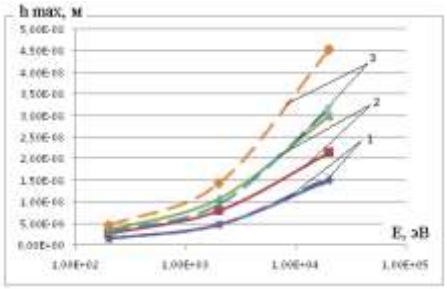
Хотя абсолютное значение меньше. В этом случае также наибольшие напряжение реализуется при использовании характеристик полученных квантово-механическим методом. При чем для иттрия абсолютные значения ниже. Объемы наноструктур получаются практически одинаковы при двух способах задания теплофизических и термомеханических характеристик (рис.7, б и рис.8, б).



а



б



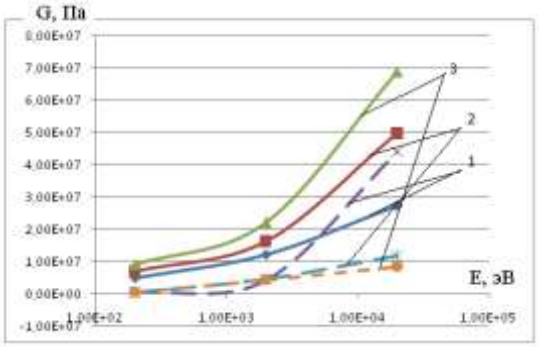
в

Рис. 8 - Зависимости максимальных температурных напряжений (а), объема зерна (б) и максимальной глубины залегания (в) в твердом сплаве В3 при действии от энергии иона иттрия с разным зарядовым числом (1 = 1, 2=2, 3=3)

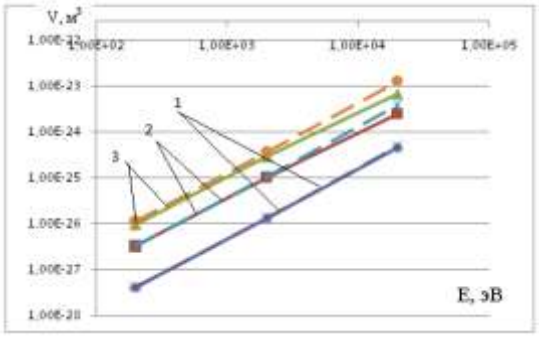
Максимальные глубины залегания Н.С. минимальны для квантово-механического способа задания этих характеристик Причем глубина для никеля несколько большая.

Для случая действия ионов циркония и гафния (рис. 9-10) на твердый сплав В3 максимальные температурные напряжения ведут себя практически одинаково только для циркония наблюдается большие значение температурных напряжений. В этом случае квантово-механический подход дает большие значения температур. На объемы создания наноструктур способ задания теплофизических и термомеханических характеристик практически не влияет. Наблюдается рост его от энергии иона. (рис. 9б, 10б). Для глубины залегания этого объема стохастические методы дают большее значение глубины тогда как квантово-механический метод снижают данную величину (рис.

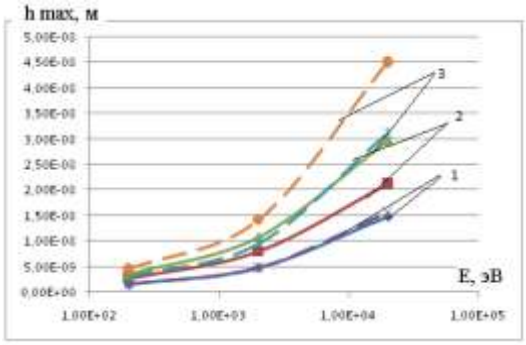
9, в, рис. 10, в).



а



б



в

Рис. 9 - Зависимости максимальных температурных напряжений (а), объема зерна (б) и максимальной глубины залегания (в) в твердом сплаве В3 при действии от энергии иона циркония с разным зарядовым числом (1 = 1, 2=2, 3=3)

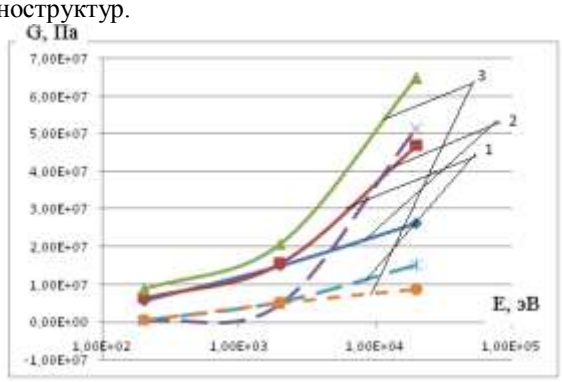
При действии иона вольфрама характер зависимостей сохраняется, объем Н.С одинаков для обоих способов (рис. 11, б). А глубина для стохастического метода значительно больше, чем для квантово-механического метода.

Проведенные исследования дают представления о важнейших характеристиках в зоне получения наноструктур. Картину температурных напряжений, которые могут влиять на скорость образования наноструктур, объем и глубину их залегания.

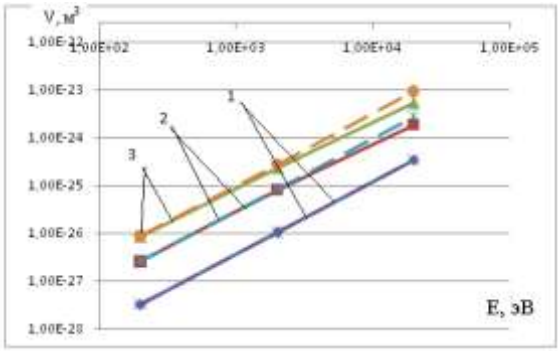
Все это позволяет утверждать о том, что проведенные исследования могут быть полезны при выборе технологических режимов образования наноструктур.

При действии иона вольфрама характер зависимостей сохраняется, объем Н.С одинаков для обоих способов (рис. 11, б). А глубина для стохастического метода значительно больше, чем для квантово-механического метода.

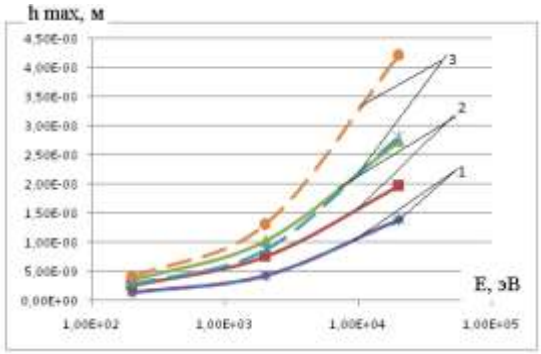
Проведенные исследования дают представления о важнейших характеристиках в зоне получения наноструктур.



а



б



в

Рис. 10- Зависимости максимальных температурных напряжений (а), объема зерна (б) и максимальной глубины залегания (в) в твердом сплаве В3 при действии от энергии иона гафния с разным зарядовым числом (1 = 1, 2=2, 3=3)

Картину температурных напряжений, которые могут влиять на скорость образования наноструктур, объем и глубину их залегания.

Все это позволяет утверждать о том, что проведенные исследования могут быть полезны при выборе технологических режимов образования наноструктур.

Выводы. Определено влияние способа задания теплофизических и термомеханических характеристик на величины максимальных температурных напряжений, объема зерна и максимальные глубины его залегания.

Показано, что способ задания теплофизических и термомеханических характеристик практически не влияет на объем наноструктур.

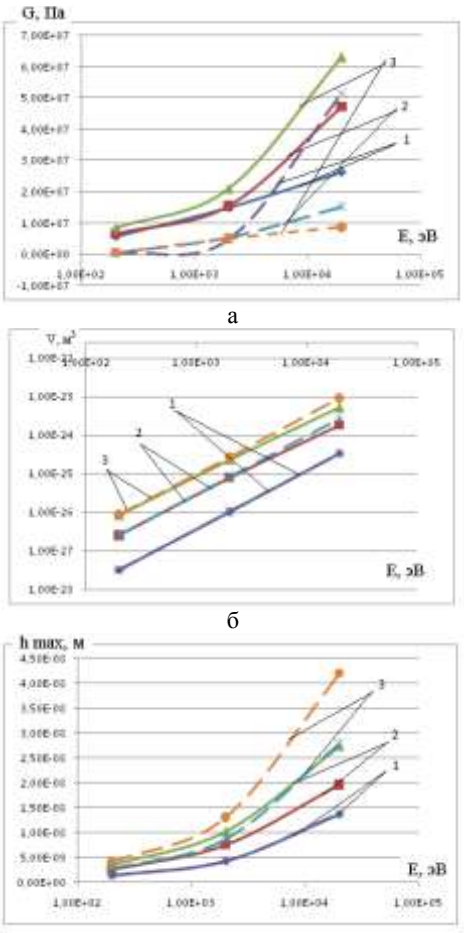


Рис. 11 - Зависимости максимальных температурных напряжений (а), объема зерна (б) и максимальной глубины залегания (в) в твердом сплаве В3 при действии от энергии иона вольфрам с разным зарядовым числом (1 = 1, 2=2, 3=3)

Для максимальных температурных напряжений и глубины залегания наблюдается существенное влияния способа задания теплофизических и термомеханических характеристик. Так для максимальных температурных напряжений их значение реализуется большее для квантово-механического метода, тоже для глубины залегания объема наноструктур больше значение соответствует квантово-механическому способу задания.

Проведенные исследования создают научную основу для выбора технологических параметров потоков ионов разных сортов, энергии и зарядов для выбора технологических параметров для получения наноструктур

Список литературы

1. Костюк Г. И. *Эффективный режущий инструмент с нанопокрытиями и наносруктурными модифицированными слоями*: монография-справ. в 2 кн. Кн.1. *Плазменно-ионные и ионно-лучевые технологии*. Харьков: «Планета-Принт», 2016. 735 с.
2. Костюк Г. И. *Нанотехнологии: выбор технологических параметров и установок, производительность обработки, физико-механические характеристики наноструктур*: монография. Киев: Изд. центр Междунар. академии наук и инновац. технологий, 2014. 472 с.
3. Костюк Г. И. *Нанотехнологии: теория, эксперимент, техника, перспективы*: монография. Киев: Изд. центр Междунар. академии наук и инновац. технологий, 2012. 648 с.
4. Костюк Г. И. Наноструктуры и нанопокрытия: перспективы и реальность: учеб. пособ. Харьков: Нац. аэрокосм. ун-т «Харьк. авиац. ин-т», 2009. 406 с.
5. Костюк Г. И. *Научные основы создания современных технологий*: учеб. пособ. Харьков: Нац. аэрокосм. ун-т «Харьк. авиац. ин-т», 2008. – 552 с.
6. Костюк Г. И. *Эффективный режущий инструмент с покрытием и упрочненным слоем*: монография-справочник. Харьков: Нац. аэрокосм. ун-т «Харьк. авиац. ин-т», 2007. 633 с.
7. Костюк Г. И. *Эффективный режущий инструмент с покрытием и упрочненным слоем*: справочник. Киев.: Вид-во АІНУ, 2003. 412 с.
8. Гречихин Л. И. *Физика наночастиц и нанотехнологий* Москва: УП «Технопринт», 2004. 397 с.
9. Аксенов И. И. *Вакуумная дуга в эрозионных источниках плазмы*. Харьков: Изд-во НИИ «ХФТИ», 2005211 с.
10. Гусев А. И. *Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии*. Москва: Физматлит, 2005. 416 с.

References (transliterated)

1. Kostyuk G. I. *Effective cutting tool with nanocoatings and nanoscale modified layers: monograph-reference*. in 2 books. Book 1. *Plasma-ion and ion-beam technologies*. Kharkov: "Planet-Print", 2016. 735 p
2. Kostyuk G. I. *Nanotechnologies: selection of technological parameters and installations, processing capacity, physical and mechanical characteristics of nanostructures*: monograph. Kiev: Publ. center of Intern. Academy of Sciences and Innovation. technologies, 2014. 472 p.
3. Kostyuk G. I. *Nanotechnology: theory, experiment, technology, perspectives*: monograph. Kiev: Publ. center of Intern. Academy of Sciences and Innovation. technologies, 2012. 648 p.
4. Kostyuk G. I. *Nanostructures and nanocoatings: perspectives and reality*: Proc. Help. Kharkov: The national. aerospace. University of «Kharkov. aviats. in-t», 2009. 406 p.
5. Kostyuk G. I. *Scientific foundations of the creation of modern technologies*: Textbook. Help. Kharkov: Nats. aerospace. University of Kharkov. aviats. in-t », 2008. 552 p.
6. Kostyuk G. I. *Effective cutting tool with a coating and a reinforced layer*: a monograph-reference book. Kharkov: Nats. aerospace. University of Kharkov. aviats. in-t », 2007. 633 p.
7. Kostyuk G. I. *Effective cutting tool with a coating and a reinforced layer*: a reference book. Kiev: View of AINU, 2003. 412 p.
8. Grechikhin L. I. *Physics of Nanoparticles and Nanotechnologies*. Moscow: UP "Technoprint", 2004. 397 p.
9. Aksenov I. I. *Vacuum arc in erosive plasma sources*. Kharkov: Publishing house of scientific research institute "Kharkov Institute of Physics and Technology ", 2005. 211 p.
10. Gusev A. I. *Nanomaterials, nanostructures, nanotechnologies*. Moscow: Fizmatlit, 2005. 416 p.

Поступила (*received*) 10.11.2018

Відомості про авторів / Сведения об авторах / About the Authors

Костюк Геннадій Ігорович (Костюк Геннадий Игоревич, Kostyuk Gennady Igorovich)– доктор технічних наук, професор, професор кафедри теоретичної механіки, машинознавства та роботомеханічних систем, Національний аерокосмічний університет ім. М.Є. Жуковського «ХАІ», м. Харьків, Україна, тел.: (057)-788-42-06, e-mail: gennadiykostyuk206@gmail.com.

Семененко Ольга Діонісівна (Семененко Ольга Дионисовна, Semenenko Olga Dionisovna) – аспирант, Національний аерокосмічний університет ім. М. Є. Жуковського «ХАІ», м. Харьків, Україна, тел.: (057)-788-42-06, e-mail: gennadiykostyuk206@gmail.com