

## **Уточненная инженерная методика определения возможности получения наноструктур при действии ионов различных сортов, энергий и зарядов**

*Национальный аэрокосмический университет им. Н. Е. Жуковского  
«Харьковский авиационный институт»*

Представлена уточненная инженерная методика оценки возможности получения наноструктур при действии ионов различных сортов, энергий и зарядов, которая рассматривает выделение энергии в некотором объеме в отличие от ранее рассматриваемого точечного источника тепла, что позволило уточнить методику и приблизить ее к реальным условиям. На примере действия ионов титана, циркония и гафния на D16T (алюминиевый сплав) определены технологические режимы для получения наноструктур.

**Ключевые слова:** уточненная методика, наноструктуры, ионы, алюминиевые сплавы.

### **Введение**

Получение наноструктур в настоящее время является больше искусством оператора установки, чем технологией, обеспечивающей ее получение на научных основах. Наноструктуры обладают уникальными свойствами: высокой твердостью приближающейся к твердости алмаза и малым модулем упругости, возможностью иметь высокую адгезию, как к неорганическим, так и органическим материалам и многие другие. Все это выдвигает создание методик оценки технологических параметров установок для получения наноструктур в одну из современных важнейших задач науки и техники.

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», «Концепция создания наноструктур, нано и традиционных покрытий с ростом влияния адгезии на эффективность и работоспособность деталей АТ, АД и РИ», хоздоговорных работ и договоров о сотрудничестве.

### **1. Состояние вопроса**

В настоящее время разработана инженерная методика оценки технологических параметров для получения наноструктур при действии ионов [1], существует теоретический метод расчета результатов действия ионов различных сортов, зарядов, энергий [1–2] позволяющих выбрать на основе выбранных критериев: требуемого диапазона температур (500–1500 К), необходимой скорости ее нарастания более  $10^7$  К/с и желательных давлений (температурных напряжений  $10^8$ – $10^9$  Н/м<sup>2</sup>) и дающий результаты с точностью не хуже 20 %, но последняя методика сложна и громоздка при расчетах и требует значительного машинного времени даже у современных ЭВМ. Результаты же расчетов по инженерной методике и теоретическому методу на основе решения совместной задачи теплопроводности и термоупругости отличаются существенно, особенно для энергии ионов

больших 700 эВ.

Выше изложенное позволяет утверждать, что представление источника тепла – иона, как точки выделяющей энергию некорректно, а следовательно, необходимо в инженерной методике учесть и объем, в котором выделяется энергия иона, что позволит существенно уточнить результаты расчетов температур, температурных напряжений и определения зон, где образуются наноструктуры. В конечном счете дает уточненные технологические параметры установки при получении наноструктур.

## 2. Постановка задачи

Можно было идти путем послойного выделения энергий, используя выражение для потери энергии на каждом шаге, как это делалось в работе [3], но это приведет к незначительному упрощению по сравнению с теоретическим рассмотрением задачи о действии иона. Учитывая сказанное проведем оценку объема, в котором выделяется энергия иона, который включает объем, в котором реализуется передача энергии за счет столкновений плюс дополнительная часть объема, в которую передается часть энергии за счет теплопроводности за время действия теплового источника частицы.

Объем зоны передачи энергии будем представлять в виде сферы радиусом  $0,3L + \sqrt{a\tau}$  ( $L$  – проективный пробег иона,  $a$  – коэффициент температуропроводности,  $\tau$  – время действия иона), а также двух цилиндров длиной  $0,2L$  и диаметром  $(0,2L + 2\sqrt{a\tau})$ . Тогда проведя элементарные расчеты можно получить оценку объема, в котором будет передана энергия и он примерно будет составлять  $1,1(L + \sqrt{a\tau})^3$ . Приняв, что характер распространения тепла от нагретого объема будет таким же, как и от нагретой точки [1] и получим выражение для температуры

$$T_{max}(b, t) = T_n + \frac{E_i \cdot e \cdot z}{C \cdot \gamma_a \cdot 1,1(L + \sqrt{a\tau})^3} \cdot \exp - \frac{(b \cdot L + 2\sqrt{a\tau})^2}{4\pi a \tau}, \quad (1)$$

где  $b = \frac{x}{L}$ ;

$x$  – координата по глубине;

$E_i$  – энергия иона;

$e$  – заряд электрона;

$z$  – зарядовое число иона (рассматривали  $z = 1, 2, 3$ );

$C$  – теплоемкость;

$a$  – температуропроводность материала детали;

$\gamma$  – плотность материала детали.

Эту формулу можно записать несколько иначе: умножив полученный объем на атомную плотность  $\gamma_A$  (атом/м<sup>3</sup>), получим число атомов участвующих в передаче энергии, а умножив на массу атома детали получим массу, которой передается энергия, а умножив на теплоемкость, получим энергию необходимую на повышение температуры на один Кельвин. Тогда выражение (1) перепишем в виде

$$T(b, \tau) = T_n + \frac{E \cdot e \cdot z}{C \cdot \gamma_A \cdot m_a \cdot 1,1(L + \sqrt{a\tau})^3} \cdot \exp - \frac{(bL + 2\sqrt{a\tau})^2}{4\pi a \tau} \quad (2)$$

Выражение (1) получено с использованием интегрального подхода, а выражение (2) с использованием микроподхода.

Получив значение температур, определяем скорости их нарастания:

$$V_T = \frac{T(b, \tau_i)}{\tau_i} \quad (3)$$

Затем проводим оценку значений температурных напряжений по выражению

$$\sigma(b_j) = \epsilon \cdot \alpha [T(b_j, \tau_i) - T(b_{j-1}, \tau_i)],$$

где  $E$  – модуль упругости I рода;  $j$  – шаг по  $b$  (доля пробега  $L$ ), берутся только те участки, где выполняется критерий по диапазону температур.

На рисунке 1 представлены распределения температур по глубине к концу действия теплового источника частицы для ионов действующих на алюминиевый сплав D16.

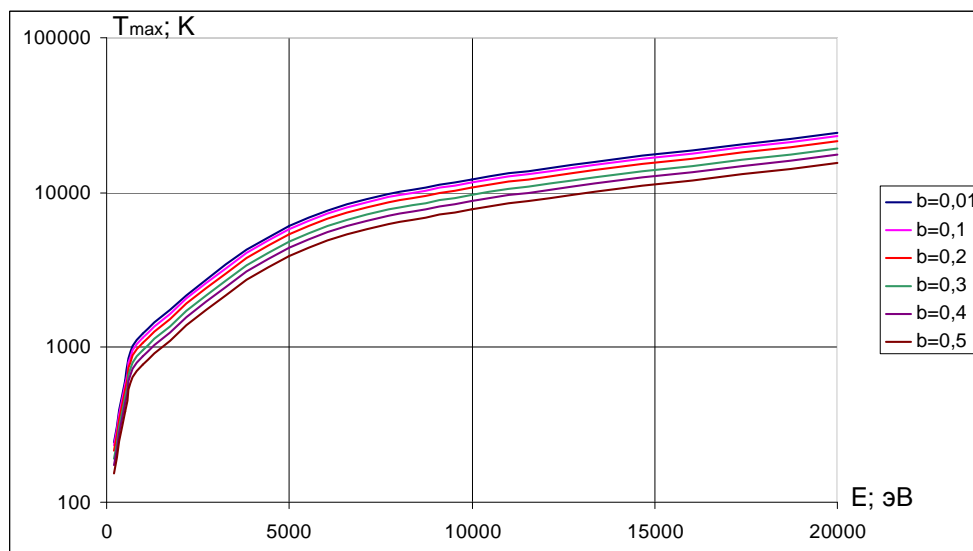


Рис. 1. Зависимость величины температуры от энергии иона  $Ti^+$ , при действии на алюминиевые сплавы для различных  $b$  (0–0,5)

В случае длительного действия теплового потока от потока ионов будет влиять и интегральный эффект от его действия, а температура детали будет изменяться, следуя выражению

$$T(x, t) = T_n + \frac{q}{\lambda} \left\{ \frac{2\sqrt{at}}{\pi} \exp - \frac{x^2}{4at} - x \left( 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{x}{2\sqrt{at}} \right) \right) \right\} \quad (4)$$

где  $\lambda$  – коэффициент теплопроводности;

$q - j_i E_i \mu_i$  (где  $\mu_i$  – коэффициент аккомодации иона);

$j_i$  – плотность ионного тока;

$\operatorname{erf} \left( \frac{x}{2\sqrt{at}} \right)$  – интеграл Лапласа.

### 3. Результаты расчетов и их обсуждение

Исследование максимальной величины температуры в зависимости от величины энергии иона важны для оценки принципиальных возможностей полученных наноструктур. В то же время большое значение имеет характеры распределения температуры от зоны выделения энергии как к поверхности практически детали так и в глубь ее. Так как практически распределение температуры как в сторону поверхности одинаково то будем рассматривать изменение температуры только к поверхности детали.

В случае действия ионов титана на алюминиевый сплав изменение максимальной температуры в зависимости от энергии ионов представлено на рис. 1. видно что в зоне максимального выделения энергии ( $x = 0,5 \cdot b$ ) температура больше, затем при изменении координаты (т.е. уменьшается  $b$ ) они снижаются и становятся минимальными на поверхности детали. В этом случае значение температуры практически во всей зоне, т.е. при всех энергиях превышают необходимые для получения наноструктур. Только в зоне от энергии 200 до 500 эВ температуры недостаточны, что не позволяет использовать эти режимы для получения наноструктур.

Характер распределения температуры, от источника к поверхности (поверхность  $b = 0,5$ ) рис.2 позволяет более точно выбрать зону где реализуются наноструктуры, так как видно что при энергии 200 эВ получить наноструктуры проблематично. Тогда как уже при энергии 500 эВ есть реальная возможность хотя бы в части обрабатываемой зоны в материале реализовать получение наноструктур.

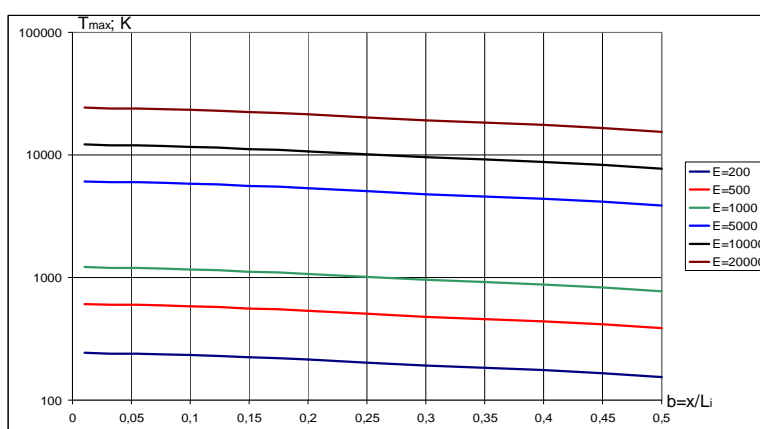


Рис. 2. Зависимость величины температуры от относительной глубины  $b$  для различных энергий иона  $Ti^+$  200–20000 эВ для алюминиевого сплава

Рассмотрение аналогичной зависимости для случая действия иона циркония (рис 3, 4). Показано, что характер распределения температуры несколько изменяется и увеличивается зона где реализация наноструктур мало вероятна. Здесь уже даже при энергии 500 эВ есть значительная часть зоны по глубине где наноструктуры не образуются, что связано с существенным влиянием сорта иона бомбардирующего поверхность.

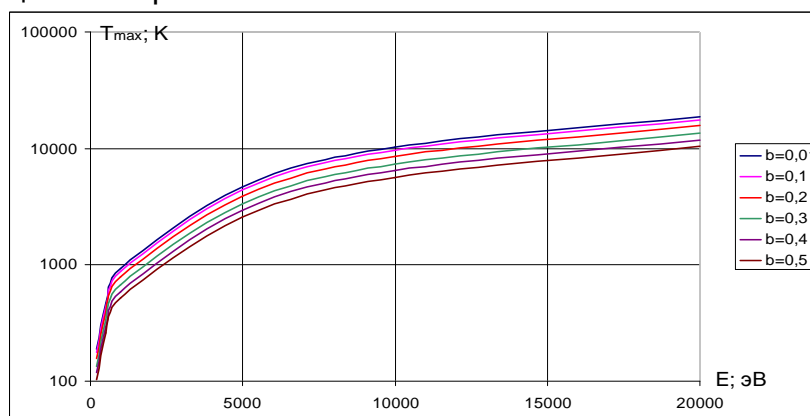


Рис. 3. Зависимость величины температуры от энергии иона  $Zr^+$  для различных  $b$  (0–0,5) для D16T

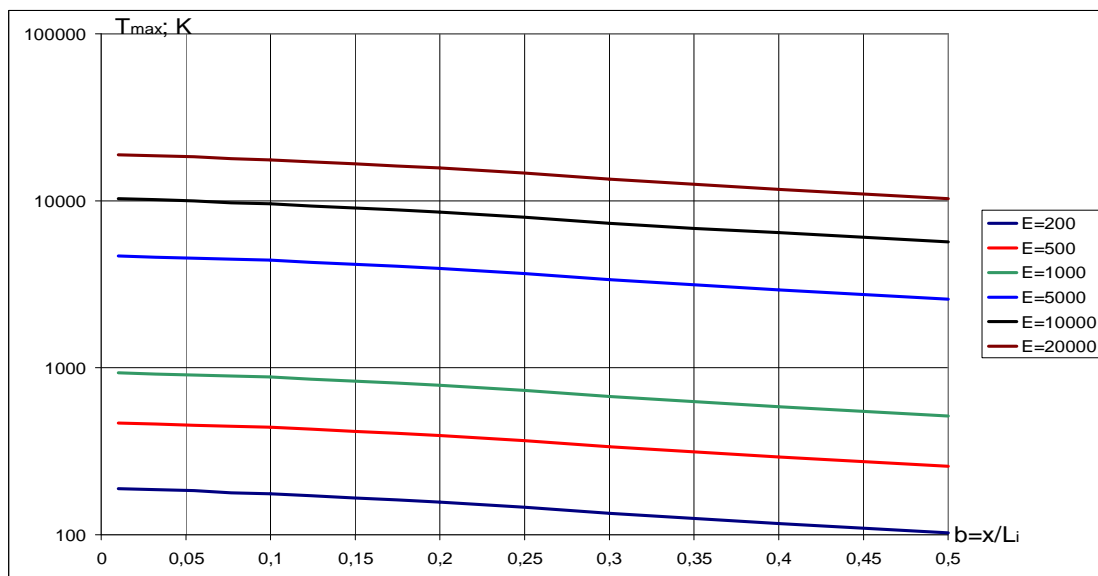


Рис. 4. Зависимость величины температуры от относительной глубины  $b$  для различных энергий иона  $Zr^+$  200–20000 эВ для D16T

Для случая действия иона гафния (рис 5, 6) температура в зоне действия ионов малых энергий еще больше снизилась, что в конечном счете привело к тому, что даже при энергии 1000 эВ не всегда образуются наноструктуры.

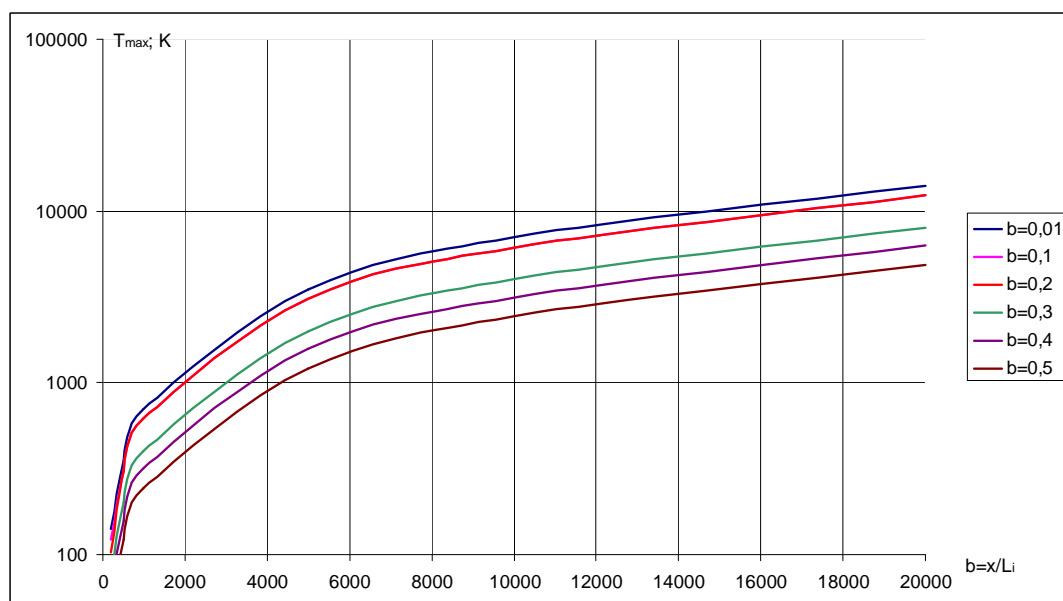


Рис. 5. Зависимость величины температуры от энергии иона  $Hf^+$  при различных  $b$  (0–0,5) для D16T

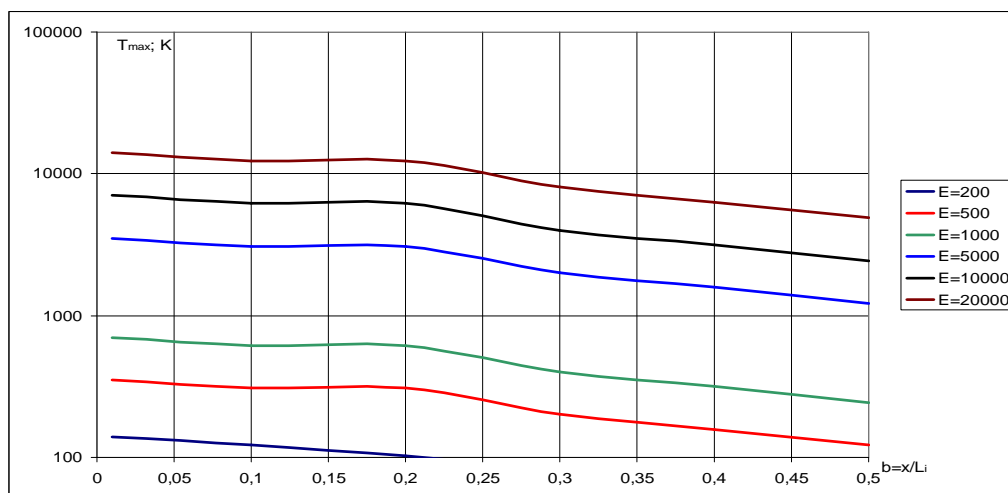


Рис. 6. Зависимость величины температуры от относительной глубины  $b$  при различных энергиях иона  $Hf^+$  200–20000 эВ для D16Т

Во всех рассмотренных вариантах максимальная температура не превышает 1500 К, что говорит о возможности использования энергии больше 1000 эВ для получения наноструктур.

Вторым критерием достижения условия образования наноструктур является скорость повышения температуры, которая должна быть больше  $10^7$  К/с. Зависимости скорости изменения температуры от энергии на различных глубинах представлено на рис. 7, видно, что практически вся энергия обеспечивается получение наноструктур. Причем максимальные скорости достигают  $3 \cdot 10^{14}$  К/с, минимально вблизи  $10^{10}$  К/с.

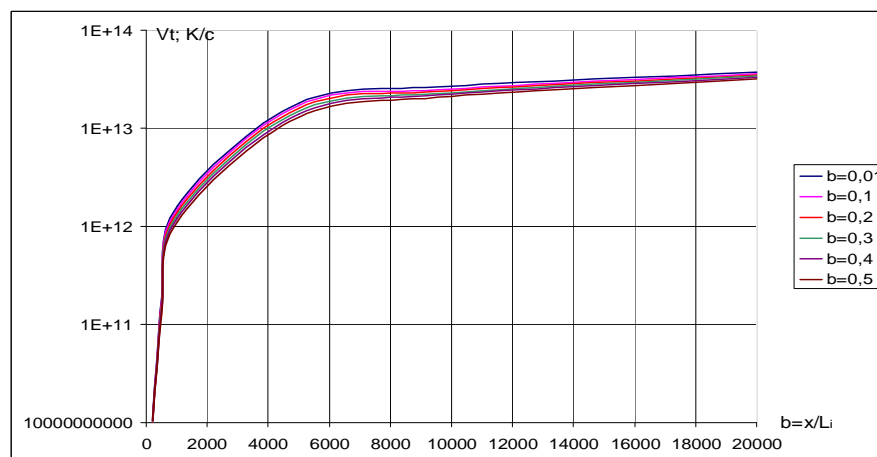


Рис. 7. Зависимость величины скорости роста температуры при энергии иона  $Ti^+$ , для различных  $b$  (0–0,5) для D16Т

Исследование изменения скорости роста температуры от координаты (рис. 8) показал что при приближении к поверхности скорости роста температуры изменяется незначительно. Аналогичные зависимости для иона  $Zr$  представлены на рис. 9, 10.

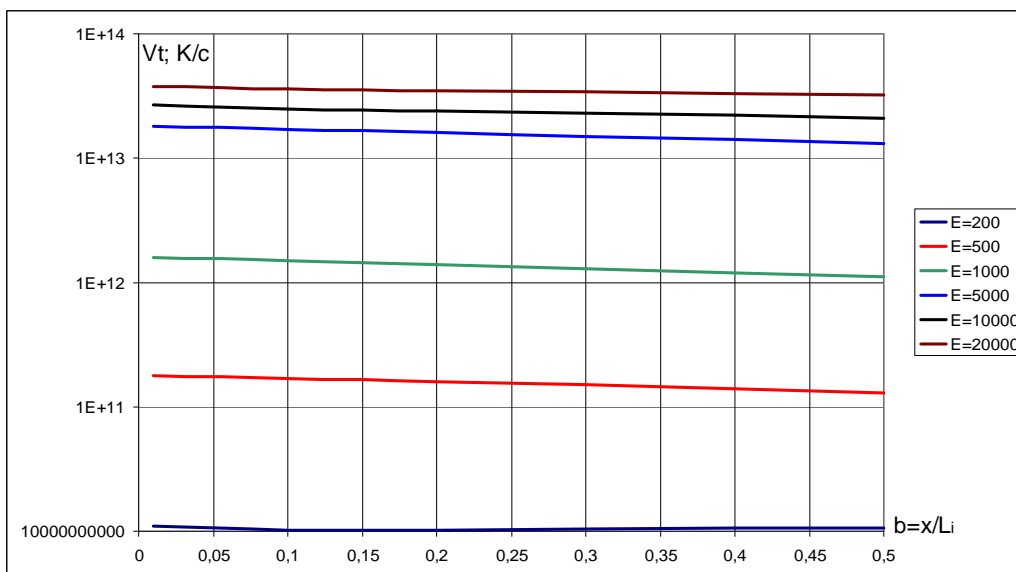


Рис. 8. Зависимость величины скорости роста температуры от относительной глубины  $b$  при различных энергиях иона  $Ti^+$  200–20000 эВ для D16T

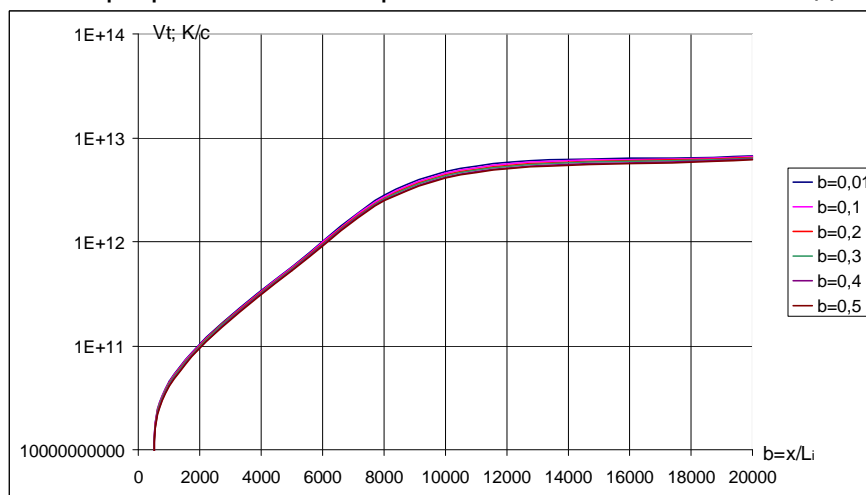


Рис. 9. Зависимость величины скорости при росте температуры энергии иона  $Zr^+$  для различных  $b$  (0–0,5) для D16T

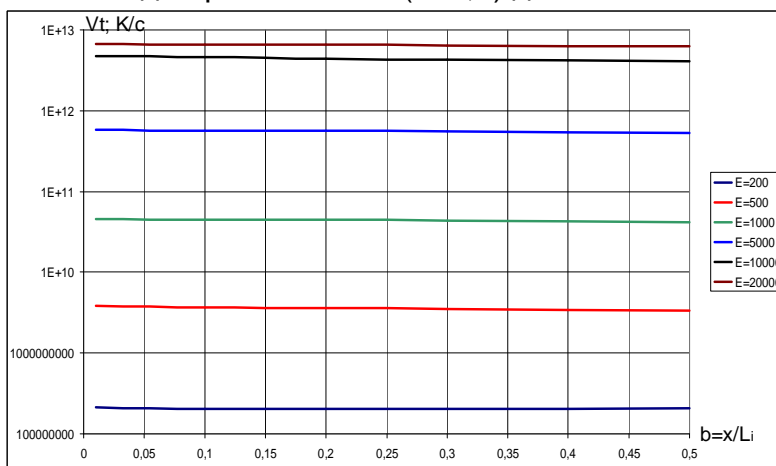


Рис. 10. Зависимость величины скорости роста температуры от относительной глубины  $b$  при различных энергиях иона  $Zr^+$  200–20000 эВ для D16T

Видно что в этом случаи скорости изменении температуры снизились и не достигают  $10^{13}$  К/с, а для участков близких к поверхности она приближается  $10^8$  К/с, что говорит о том, что нельзя использовать энергию меньше 200 эВ, это зачастую и в экспериментах приводило к худшим результатам чем при больших энергиях.

Например для иона Zr минимальная микротвердость реализовалась при энергии 110 эВ, а максимальная при энергии 350–500 эВ.

Переход к гафнию (рис. 11, 12) приводит к дальнейшему снижению скорости роста температуры и она становится несколько больше максимальной  $10^{10}$  К/с, тогда как в зоне между энергиями 200 и 500 эВ она становится ниже  $10^7$  К/с, что говорит о том, что этот режим нельзя использовать для получения наноструктур. Видно что для этого иона этих условий только при энергиях больше 1000 эВ будет возможность реализовать получение наноструктурных слоев, что очень важно для выбора технологических режимов получения наноструктур.

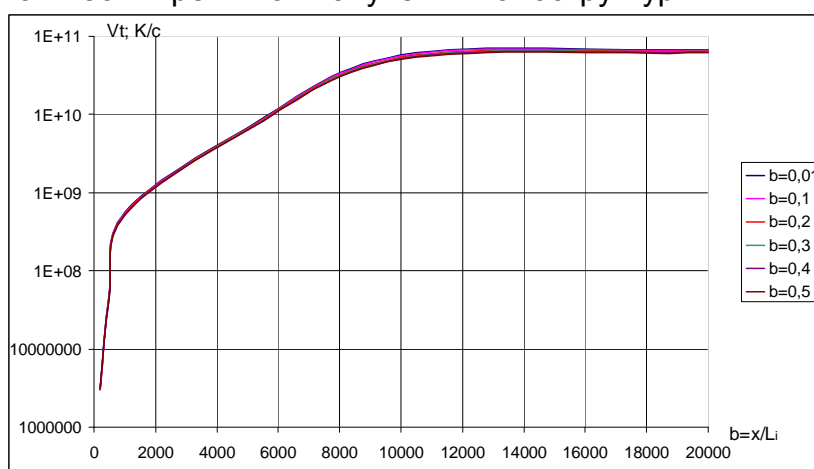


Рис. 11. Зависимость величины скорости роста температуры при энергии иона  $Hf^+$  для различных  $b$  (0–0,5) для D16T

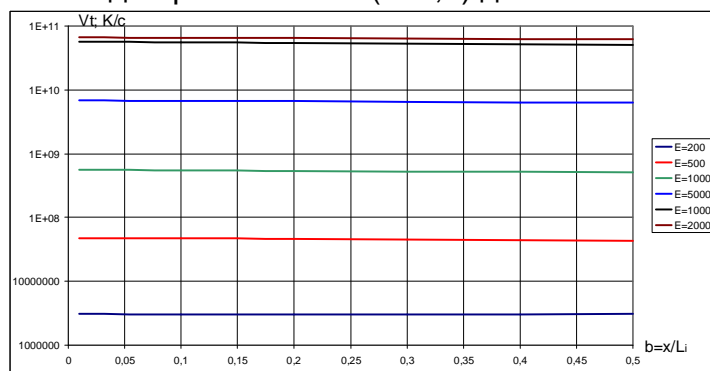


Рис. 12. Зависимость величины скорости роста температуры от относительной глубины  $b$  при различных энергиях иона  $Hf^+$  200–20000 эВ для D16T

Важным фактором для повышения вероятности получения наноструктур является наличие дополнительного давления которое создается за счет температурных напряжений. Были рассчитаны температурные напряжения для тех же условий что и скорости их нарастания. Результаты расчеты температурных напряжений в зависимости от энергии иона и распределение температурных напряжений по глубине представлены на рис. 13, 14.



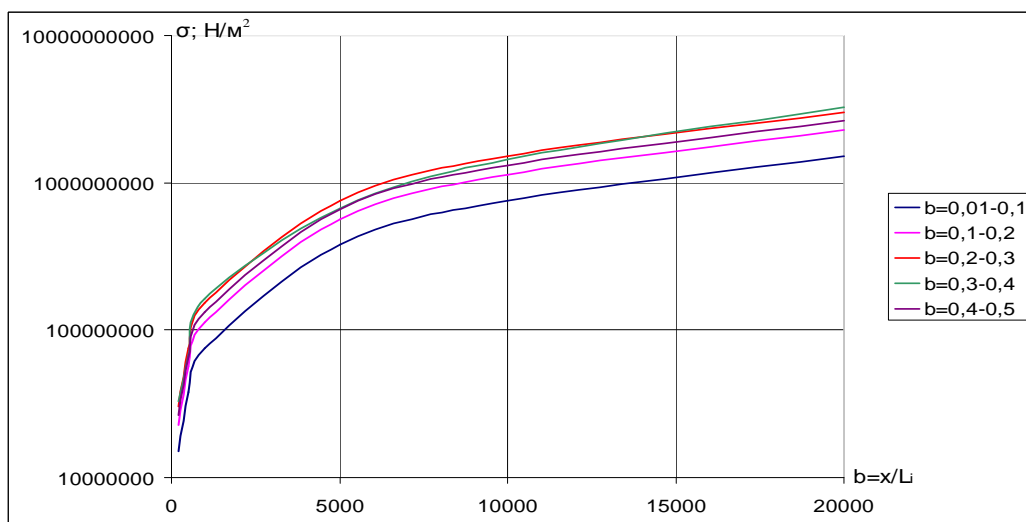


Рис. 13. Зависимость величины температурных напряжений при энергии иона  $Ti^+$  для различных  $b$  (0–0,5) для D16T

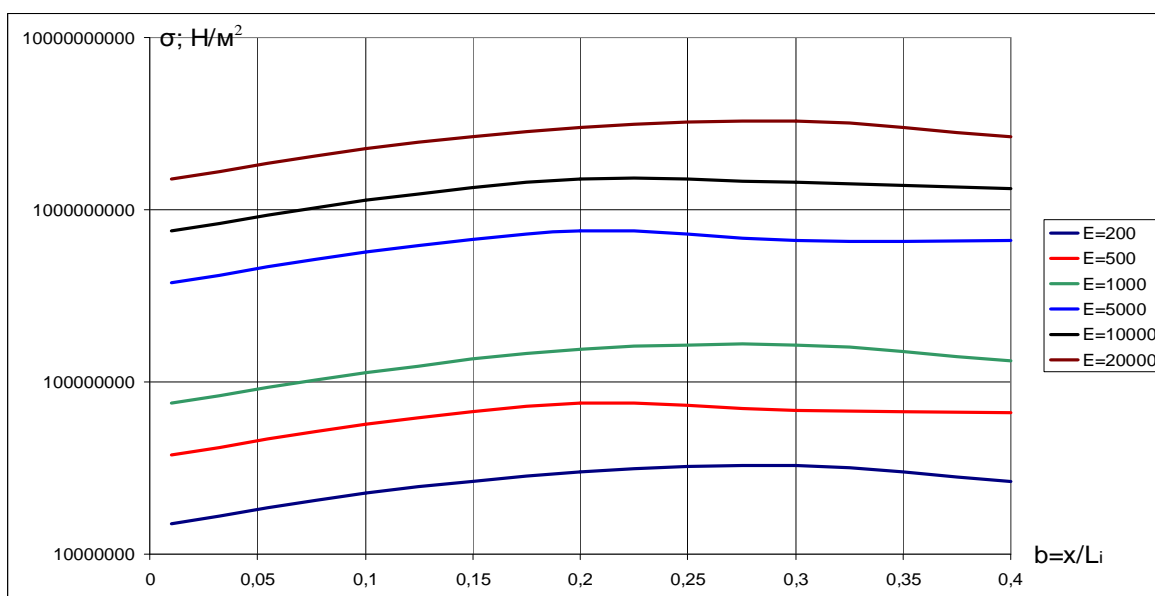


Рис. 14. Зависимость величины температурных напряжений от относительной глубины  $b$  при различных энергиях иона  $Ti^+$  200–20000 эВ для D16T

Для случая действия ионов  $Ti$  на алюминиевый сплав видно, что максимальные температурные напряжения реализующая при максимальной энергии на всех глубинах превышают  $10^9$  Н/м<sup>2</sup>. Тогда как приближение к минимальным энергиям снижает эту величину практически до  $10^7$  Н/м<sup>2</sup>, что говорит о реальной возможности повышения вероятности получения наноструктур при действии ионов  $Ti$ .

Аналогичные зависимости для случая действия  $Zr$  на алюминиевый сплав представлено на рисунке 15, 16. Видно что напряжения несколько уменьшились, хотя не значительно и даже при минимальных энергиях они превышают на  $10^7$  Н/м<sup>2</sup>.

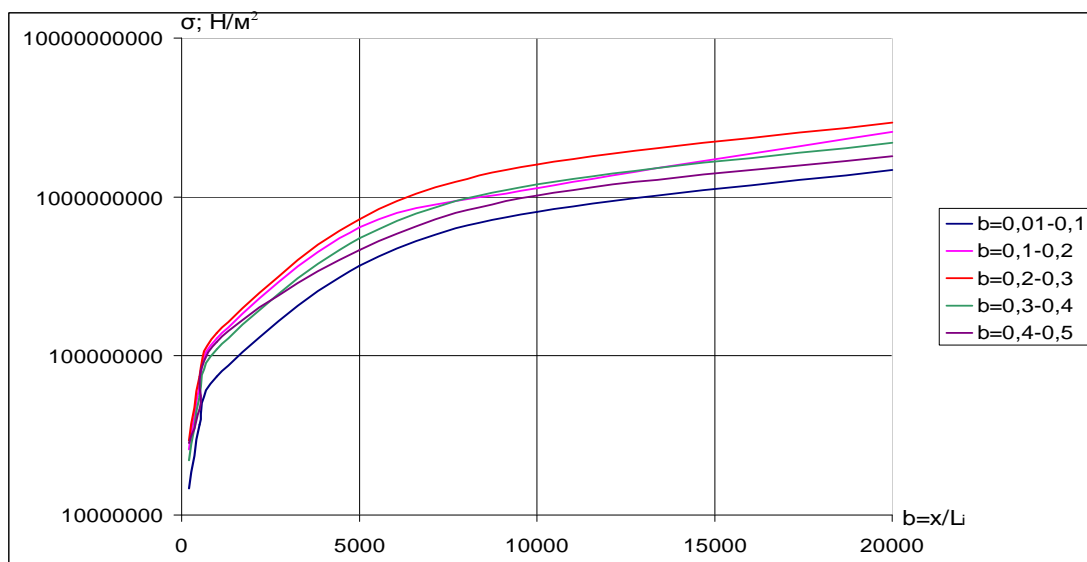


Рис. 15. Зависимость величины температурных напряжений при энергии иона  $Zr^+$ , для различных  $b$  (0–0,5) для D16T

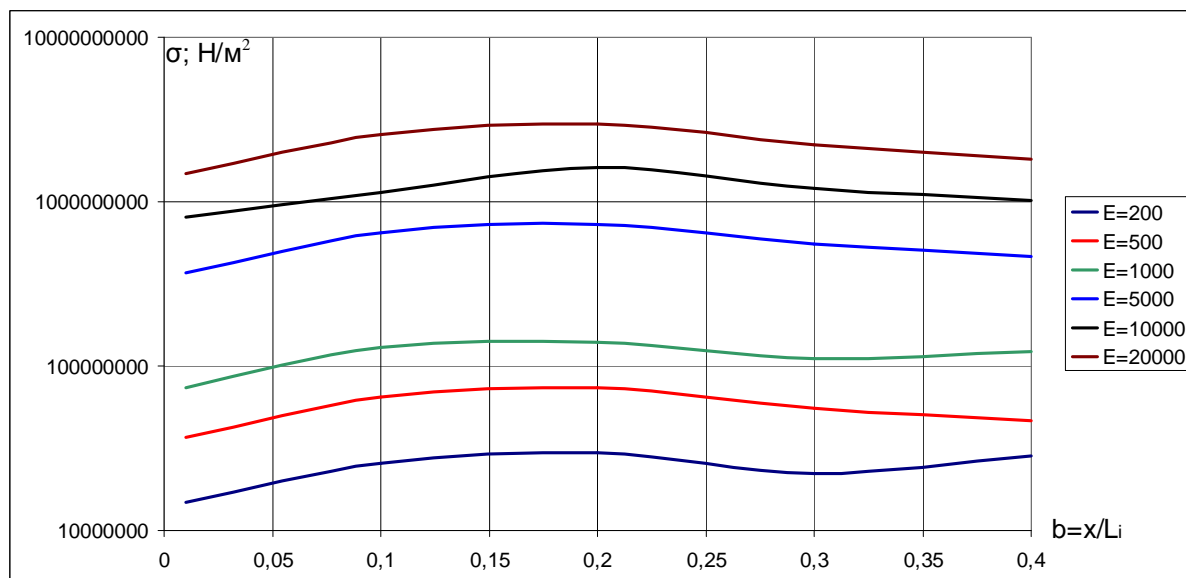


Рис. 16. Зависимость величины температурных напряжений от относительной глубины  $b$  при различных энергиях иона  $Zr^+$  200–20000 эВ для D16T

Распределение температурных напряжений в зависимости от энергии и глубины слоя для ионов гафния представлены на рис. 17, 18. Видно что напряжения в этом случае еще больше снизились по сравнению с Ti и Zr, но все равно они лежат в диапазоне  $10^7$ – $10^9$ . Все это говорит, что величины напряжений достаточны для того что бы интенсифицировать образование наноструктур, но сами они не могут обеспечить образование наноструктур, тогда как для этого нужны давления порядка  $10^{10}$  Н/м<sup>2</sup>.

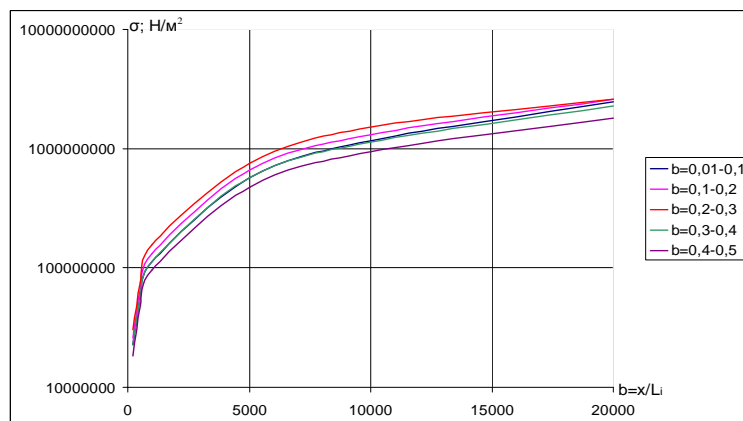


Рис. 17. Зависимость величины температурных напряжений при энергии иона  $\text{Hf}^+$  для различных  $b$  (0–0,5) для D16T

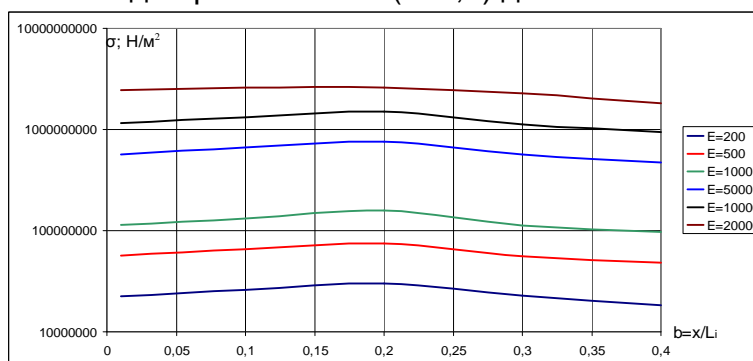


Рис. 18. Зависимость величины температурных напряжений от относительной глубины  $b$  при различных энергиях иона  $\text{Hf}^+$  200–20000 эВ для D16T

### Выводы

Показана возможность получения наноструктур при действии ионов Ti, Zr, Hf на алюминиевый сплав D16T, в зависимости от режимов обработки можно обеспечить получение наноструктур на всей глубине или на ее части. Показано при каких режимах нет возможности получения наноструктур. Причем для ионов титана при всех исследованных энергий всегда реализуются наноструктуры. Для циркония в области энергии 200–500 эВ проблематично получить наноструктуры, а для иона гафния эта энергия приближается к 1000 эВ.

Полученные результаты позволяют выбирать режимы обработки алюминиевых сплавов при бомбардировке ионами Ti, Zr, Hf. В тоже время дают возможность определить эффективность обработки и обеспечение критериев получения наноструктур (требуемый диапазон температур, скоростей их изменения и величин температурных напряжений). Очевидно еще необходимо определить плотность ионного тока которая обеспечивает более полное заполнение поверхностного слоя наноструктурами, что можно сделать используя выражения из работы [3].

Важной характеристикой является глубина на которой образуются наноструктуры поэтому используя зависимости исследованных величин от величины  $b$  которая является долей пробега, можно найти зону начала образования наноструктур и зону где она уже не образуется, что позволяет создавать наноструктуры на определенной глубине, а выбирая разные ионы обеспечить заполнение наноструктурами требуемого слоя.

### Список литературы

1. Костюк, Г. И. Нанотехнологии: теория, эксперимент, техника, перспективы [Текст]: моногр. / Г. И. Костюк. –К.: Изд. центр Междунар. академии наук и инновац. технологий, 2012. – 648 с
2. Костюк, Г. И. Физико-технические основы нанесения покрытий, ионной имплантации и ионного легирования, лазерной обработки и упрочнения, комбинированных технологий [Текст] В 2 кн. / Г. И. Костюк. – К.: Изд-во АИНУ, 2002. – 1030 с.
3. Костюк, Г. И. Наноструктуры и нанопокрyтия: перспективы и реальность [Текст]: учеб. пособие / Г. И. Костюк. – Х.: Нац. аэрокосм. ун-т «Харьк. авиац. ин-т», 2009. – 406 с.
4. Костюк, Г. И. Эффективные покрытия и модифицированные упрочненные слои на режущих инструментах [Текст]: моногр.-справочник / Г.И. Костюк. – К.: Изд. центр Междунар. академии наук и инновац. технологий, 2012. – 728 с.

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

Поступила в редакцию 11.06.2014

### **Уточнена інженерна методика визначення можливості отримання наноструктур при дії іонів різних сортів, енергій і зарядів**

Наведено уточнену інженерну методику оцінювання можливості отримання наноструктур при дії іонів різних сортів, енергій і зарядів, яка розглядає виділення енергії в деякому обсязі на відміну від раніше розглянутого точкового джерела тепла , що дозволило уточнити методику і наблизити її до реальних умов . На прикладі дії іонів титану , цирконію та гафнію на D16T (алюмінієвий сплав) визначено технологічні режими для отримання наноструктур.

**Ключові слова:** уточнена методика, наноструктури, іони, алюмінієві сплави.

### **Improved method of determination of engineering opportunities under the influence nanostructures by ion of different varieties of energy and charge**

A refined engineering technique estimates the possibility of obtaining nanostructures under the influence of ions of different varieties of energy and charge , which considers the energy release in a certain volume in contrast to the previously considered a point source of heat, which allowed us to refine the methodology and closer to the real conditions . On an example the influence of ion of titanium, zirconium and hafnium on D16T ( aluminum alloy) defined technological regimes for nanostructures.

**Keywords:** improved technique , nanostructures , ions, aluminum alloys.