УДК 621.865.6

Г. И. Костюк, А. Н. Костюк, И. В. Кантемир

# Объем нанокластера и глубина его залегания при действии ионов разных энергий, зарядов и сортов на магниевые сплавы

### Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «ХАИ» Харьковский национальный университет радиоэлектроники

Проведены исследования величины объема нанокластера и глубины его залегания в зависимости от энергии, заряда и сорта ионов (B+, N+, C+, Al+, V+, Cr+, O+, Ni+, Zr+, Mo+, Hf+, W+, Ta+, Pt+), что позволяет определить состав ионов, их энергии и заряды для получения наноструктур в требуемом слое, а с учетом необходимой плотности ионного тока получить практически все технологические параметры потока требуемой толщины и физикомеханических характеристик в магниевом сплаве. Показано, что можно получать нанокластеры объемом от 1,97·10<sup>-27</sup> до 4,95·10<sup>-22</sup> м<sup>3</sup>, причем глубины их залегания колеблются в диапазоне от 1,65·10<sup>-9</sup> до 1,65·10<sup>-7</sup> м. Всё это свидетельствует о том, что можно получать наноструктурные слои различной толщины с максимальной толщиной до десятых микрометра, а изменяя сорта ионов, можно варьировать физико-механические характеристики. *Ключевые слова:* нанокластер, ион, заряд, энергия, глубина залегания.

#### Введение

Применение магниевых сплавов для создания деталей авиационной и ракетной техники выдвигает ряд важных требований к их поверхностному слою: высокая износостойкость и контактная прочность (что связано с необходимостью получения высокой микротвердости), ударная и усталостная прочность, а также коррозионная стойкость (что связано с необходимостью получения высоких физикомеханических характеристик поверхностного слоя). Всё это возможно при реализации НС в достаточно большом слое и при соответствующем выборе плотности ионного тока для каждого сорта, что даст возможность прогнозировать глубину слоя и эксплуатационные характеристики детали и обеспечить детали авиационной техники из магниевых сплавов высокими прочностными свойствами и достаточной работоспособностью.

Работа выполнена в рамках программы Министерства образования и науки Украины «Новые 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 интегрированных технологий плазменно-ионной обработки деталей аэрокосмической техники» (подсекция 6 «Физико-технические проблемы материаловедения»), «Концепция создания наноструктур, нано- и традиционных покрытий с учетом влияния адгезии на эффективность и работоспособность деталей АТ, АД и РИ», хоздоговорных работ и договоров о сотрудничестве.

#### Состояние вопроса

На основе многих исследований наноструктур [1-10] показана возможность конструирования поверхностного слоя детали с помощью наноструктур, но научные основы такого конструирования еще не созданы. При наличии возможности создавать слои из наноструктур требуемых физико-механических

характеристик и на необходимой глубине можно существенно расширить эти исследования и решить вопрос о наноструктурах в поверхностном слое, обеспечивающих существенное повышение работоспособности деталей. Ясно, что, зная размер зерна, который будет получаться в соответствующем слое, прогнозировать изменение физико-механических характеристик можно поверхностного слоя по глубине, а следовательно, выбирать слои, которые обеспечат конструирование слоя по требуемым характеристикам. Всё это свидетельствует о своевременности и актуальности проводимых исследований и дает пути создания сложных композитных наноструктурных слоев, имеющих высокую работоспособность и достаточно высокие физико-механические характеристики, причем по глубине они будут изменяться с учетом возможности соответствующих слоев наноструктур.

В настоящей статье рассмотрены объем наноструктурированого кластера и глубина его залегания в магниевом сплаве, что позволит обеспечить высокий ресурс деталей из магниевых сплавов.

# 2. Постановка задачи

Рассмотрена совместная задача теплопроводности и термоупругости, учитывающая энергию на образование зерна, которую принимают несколько большей, чем энергия атомизации атомов зерен, с помощью которой рассчитывают температуры скорости их нарастания, температурные напряжения и скорости деформирования, объем и размер нанозерна, глубины его залегания, а также число частиц в нанокластере в первом приближении. Затем рассчитывают энергию образования зерна (нанокластера), пересчитывают все исследуемые величины, включая и число частиц в нанокластере, после чего переходят к первому шагу [2].

В качестве критериев образования наноструктур принимают необходимые температуры (500...1500 К), скорости их нарастания (более 10<sup>7</sup> К/с), при этом желательно наличие давлений (температурных напряжений 10<sup>7</sup>...10<sup>9</sup> Па), нанокатализатора и достаточное заполнение объема материала наноструктурами (НС).

В дальнейшем рассматривают модель действия индивидуального иона, которая включает в себя:

- баланс тепла в элементарном объеме [3];
- граничные и начальные условия на различных поверхностях [2];
- расчет (предварительный) числа частиц в нанокластере [2];
- расчет энергий образования нанокластера [1].

Расчет повторяют и рассчитываются все основные параметры: число частиц в нанокластере (окончательное), по которому определяют энергиюя образования зерна, поля температур и диапазон скоростей роста температуры, температурные напряжения и скорости деформирования, объем нанокпастера и глубину его залегания, размер зерна.

# 3. Модель действия индивидуального иона на конструкционный материал

Взаимодействие потоков заряженных частиц и плазменных потоков с конструкционными материалами связано с реализацией широкого круга процессов: столкновительных, теплофизических, термомеханических, термоусталостных, диффузионных, термохимических и плазмохимических, но в настоящее время отсутствуют работы, учитывающие эти факторы и тем более их взаимосвязь. Все

эти процессы влияют как на характер теплообмена в объеме мишени, так и на поверхности, поэтому учет таких процессов необходим и в балансе энергии в элементарном объеме металлической мишени, и в теплообмене на поверхности мишени, т.е. в граничных условиях.

Задача подробно описана в нашей работе [1].

# 3.1. Баланс тепла в элементарном объеме детали

Изменение количества тепла в единичном объеме (первое слагаемое в левой части равенства) реализуется за счет: перемещения потока частиц вдоль обрабатываемой поверхности или перемещения мишени относительно потока плазмы со скоростью Vп (второе слагаемое); теплофизических процессов: влияние на теплообмен конечной скорости распространения тепла (третье слагаемое), теплопроводности (первое слагаемое справа), смещения фронта испарения (второе слагаемое), плавления (третье слагаемое); столкновительных процессов: объемного источника тепла за счет действия частицы (четвертое слагаемое), затраты энергии на смещение атомов (пятое слагаемое); термоупругих, термопластических и термоусталостных процессов, определяющих энергию деформирования материала элементарного объема (шестое слагаемое); диффузионных процессов, определяющих теплоперенос диффундирующим материалом (седьмое слагаемое); термохимических процессов, связанных с реализацией химических реакций между материалом мишени и бомбардирующими ионами или же между компонентами сплавов и композитных материалов и ленц-джоулева нагрева (восьмое слагаемое) за счет растекания ионного тока и энергии образования кристалла (девятое слагаемое).

$$\begin{aligned} \mathbf{C}[T] \cdot \boldsymbol{\gamma}[T] \frac{dT(x, y, z, t)}{dt} + \mathbf{C}[T] \cdot \boldsymbol{\gamma}[T] \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial y} \cdot \mathbf{V}_{n} + \mathbf{C}[T] \cdot \boldsymbol{\gamma}[T] \cdot \tau_{p} \frac{d^{2}T(x, y, z, t)}{dt^{2}} = \\ \nabla \lambda [T \cdot \nabla T](x, y, z, t) + \mathbf{C}[T] \cdot \boldsymbol{\gamma}[T] \cdot \mathbf{V}_{m} \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial x} - \mathbf{A} \cdot \mathbf{L}_{c} \cdot \boldsymbol{\gamma}[T] \frac{d\mathbf{V}_{c}}{dt} + \\ + \mathbf{B} \cdot j_{i,e} \cdot \mu_{i,e} \frac{\partial \mathbf{E}_{i,e}}{\partial x} - \mathbf{E}_{,,M} \cdot \mathbf{S}_{,,M} \frac{j_{i,e}}{\lambda_{cpi,e}} \pm D \frac{dW(x, y, z, t)}{dt} \pm m_{a} \cdot \mathbf{C}_{a}[T_{a}] \frac{dn_{a}}{dt} (T_{a} - T(x, y, z, t)) \pm \\ \pm P_{T.X.}(n_{A}, n_{B}, T, t_{e}) \frac{dn_{A(B)}}{dt} \mathbf{L}_{T, X, P} + \rho[T] \cdot j^{2}(x, y, z, t) \end{aligned}$$

где *C[T]* и *γ[T]* – теплоемкость и плотность материала мишени, соответствующие температуре T;

*т*<sub>р</sub> – время релаксации температуры на один кельвин;

*V<sub>n</sub>* – скорость перемещения ионного потока или мишени относительно него;

*L*<sub>ПЛ</sub> и *L*<sub>Т.Х.Р</sub> – удельные теплота плавления и термохимической реакции;

*V*<sub>ф</sub>[*T*] – скорость смещения фронта испарения;

*V<sub>пл</sub>* – объем расплавленного металла;

*j*<sub>*i*,e</sub> – плотность тока ионов, электронов или плазменного потока;

*µ*<sub>*i*,e</sub> – коэффициент аккомодации иона и электрона;

$$\partial E_i$$

<u>- потери энергии иона и электрона на глубине мишени;</u>

*Е*<sub>см</sub> – энергия смещения атомов;

**S**<sub>см</sub> – число смещенных атомов в результате действия иона или электрона;

λ<sub>cp i,e</sub> – средняя линейная длина свободного пробега ионов и электронов в мате-

риале мишени;

*W*(*x*, *y*, *z*, *t*) – энергия деформирования единичного объема мишени; *m*<sub>a</sub> – масса диффундирующего атома;

 $C_a[T_a]$  – теплоемкость диффундирующего материала при температуре  $T_a$ ;  $P_{T,X}(n_A, n_B, T, t_{B3})$  – вероятность термохимической реакции, зависящая от концентрации реагентов  $n_A$  и  $n_B$ , температуры T и времени взаимодействия  $t_{B3}$ ;  $n_A$  и  $n_B$  – концентрация реагента, определяющего возможность реакции;  $\rho[T]$  – удельное электрическое сопротивление при температуре T;

*j* (*x*, *y*, *z*, *t*) – плотность тока с учетом растекания тока;

*Екр* – удельная энергия образования кристаллов.

Определить число атомов, находящихся на границе вблизи атомов другого зерна и взаимодействующих энергетически, можно приняв зерно в виде сферы радиусом R. Тогда площадь поверхности определим как  $4\pi R^2$ , а число атомов на единице поверхности в монослое можно вычислить, использовав зависимость числа атомов N<sub>M</sub> в монослое от атомного номера (рис. 4.2 из [19]). Число атомов одного зерна, взаимодействующих с атомами соседних зерен N<sub>вз</sub>, определим так:

$$N_{\rm B3} = 4\pi R^2 \cdot N_{\rm MOH} \,. \tag{2}$$

Зная число взаимодействующих атомов и приняв, что существуют только взаимодействия пограничных атомов соседних зерен, можно оценить энергию образования нанострукруры

Энергию деформирования единичного объема определим как

$$W = G \left[ \varepsilon_{xx}^{2} + \varepsilon_{yy}^{2} + \varepsilon_{zz}^{2} + 2 \left( \varepsilon_{xy}^{2} + \varepsilon_{yz}^{2} + \varepsilon_{zx}^{2} \right) + \frac{\mu}{1-\mu} \ell^{2} - \frac{2(1+\mu)\alpha_{1}}{1-2\mu} \ell (T(x,y,z,t) - T) \right], (3)$$
  
rde  $2\varepsilon_{ik} = 2\varepsilon_{ki} = \frac{\partial u_{k}}{\partial i} + \frac{\partial u_{i}}{\partial k}$  (k, i = x, y, z);  $\ell = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}$ ,

*ɛ<sub><i>xx*</sub>, *ɛ<sub><i>yy*</sub>, *ɛ<sub><i>zz*</sub> – удлинения;

*ε<sub>xv</sub>, ε<sub>vz</sub>, ε<sub>zx</sub>* – сдвиги относительно соответствующих осей;

*u<sub>x</sub>, u<sub>v</sub>, u<sub>z</sub>* – перемещения относительно соответствующих осей,;

а1 – коэффициент линейного расширения материала мишени;

*µ* – коэффициент Пуассона (отношение поперечной деформации к продольной, значения *µ* заключены между 0 и 0,5);

**G** – модуль сдвига (модуль второго рода);

 $T_{\mu}$  – начальная температура. Для железа  $G = 3,5...5,3.10^{10}$  H/м<sup>2</sup>,  $\mu = 0,23...0,31$ .

Деформации сдвигов *ε*<sub>*ik*</sub> не могут задаваться произвольно, они связаны дифференциальными соотношениями – условиями совместности:

$$\frac{\partial^{2} \varepsilon_{xx}}{\partial y^{2}} + \frac{\partial^{2} \varepsilon_{yy}}{\partial x^{2}} = 2 \frac{\partial^{2} \varepsilon_{xy}}{\partial x \partial y}; \qquad \frac{\partial^{2} \varepsilon_{xx}}{\partial y \partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ -\frac{\partial \varepsilon_{yz}}{\partial x} + \frac{\partial \varepsilon_{zx}}{\partial y} + \frac{\partial \varepsilon_{xy}}{\partial z} \right]$$

$$\frac{\partial^{2} \varepsilon_{yy}}{\partial z^{2}} + \frac{\partial^{2} \varepsilon_{zz}}{\partial y^{2}} = 2 \frac{\partial^{2} \varepsilon_{xy}}{\partial z \partial y}; \qquad \frac{\partial^{2} \varepsilon_{yy}}{xy \partial z} = \frac{\partial}{\partial y} \left[ -\frac{\partial \varepsilon_{zx}}{\partial y} + \frac{\partial \varepsilon_{xy}}{\partial z} + \frac{\partial \varepsilon_{yz}}{\partial x} \right]$$

$$\frac{\partial^{2} \varepsilon_{xx}}{\partial z^{2}} + \frac{\partial^{2} \varepsilon_{zz}}{\partial x^{2}} = 2 \frac{\partial^{2} \varepsilon_{zx}}{xz}; \qquad \frac{\partial^{2} \varepsilon_{zz}}{\partial y \partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ -\frac{\partial \varepsilon_{yx}}{\partial z} + \frac{\partial \varepsilon_{yz}}{\partial x} + \frac{\partial \varepsilon_{xz}}{\partial x} \right]$$

$$(4)$$

Этими условиями проверяется правильность определения удлинений и сдвигов, а их корректировка – вводом дополнительных напряжений.

Для определения удлинений  $\varepsilon_{xx}$ ,  $\varepsilon_{yy}$ ,  $\varepsilon_{zz}$  и сдвигов  $\varepsilon_{xy}$ ,  $\varepsilon_{yz}$ ,  $\varepsilon_{zx}$  воспользуемся выражением термоупругого потенциала перемещений Ф.

$$\Delta \boldsymbol{\Phi} - \frac{1 - 2\mu}{2(1 - \mu)} \cdot \frac{\gamma}{G} \cdot \frac{\partial^2 \boldsymbol{\Phi}}{\partial t^2} = \frac{1 + \mu}{1 - \mu} \cdot \boldsymbol{\alpha}_1 \cdot [T(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{t}) - T_{\boldsymbol{\tau}}], \tag{5}$$

где *ү* – плотность материала мишени.

Учитывая, что решение задачи проводится в подвижной системе координат и при выходе на стационарный или близкий к нему режима, второе слагаемое в левой части уравнения (4) становится незначительным, получим

$$\Delta \boldsymbol{\Phi} = \frac{1+\mu}{1-\mu} \cdot \boldsymbol{\alpha}_1 \cdot [T(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{t}) - \boldsymbol{T}]. \tag{6}$$

По величине термоупругого потенциала перемещений и по известным соотношениям находим удлинения и сдвиги:

$$\varepsilon_{ik} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial i \partial k}, (i, k = x, y, z).$$
 (7)

Величины температурных напряжений определим по выражению

$$\sigma_{ik} = 2G \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial i \partial k} - \Delta \Phi \cdot \delta_{ik} \right), \tag{8}$$

где  $\delta_{ik}$  подчиняется условиям:  $\delta_{ik} = 0$  при  $i \neq k$  (i, k = x, y, z)  $\delta_{ik} = 1$  при i = k.

В седьмом слагаемом формулы (1), учитывающем теплоперенос диффундирующим материалом, массу диффундирующего атома определяют по формуле

$$\boldsymbol{m}_{\boldsymbol{a}} = \boldsymbol{M} \cdot \boldsymbol{m}_{\boldsymbol{p}}, \qquad (9)$$

где *М* – атомный вес наносимого материала;

*m<sub>p</sub>* – масса протона.

Изменение концентрации диффундирующих атомов в единицу времени можно при  $t < t_k$  определить как:

$$\frac{dn_a}{dt} = \frac{j}{\mathbf{e} \cdot \mathbf{z} \cdot \sqrt{\alpha \tau}}.$$

При *t* ≥ *t*<sub>k</sub>

$$\frac{dn_a}{dt} = \frac{j}{\mathbf{e} \cdot \mathbf{z} \cdot \mathbf{L}_D},\tag{10}$$

где *ј* – плотность тока;

- е заряд электрона;
- *z* зарядовое число наносимого материала;
- *L*<sub>D</sub> толщина детали;
- $t_k$  время, за которое деталь прогреется на всю толщину,  $t_k = L_D^2/\alpha$ ;

*а* – коэффициент температуропроводности.

Формула для расчета коэффициента диффузии имеет вид

$$K_{\partial u\phi} = a_d \cdot d_{\mathfrak{s}^2} \cdot V_0 \cdot \exp(-U/(kT)), \qquad (11)$$

где *a*<sub>d</sub> – множитель порядка 0,1, определяемый типом кристаллической решетки;

*d*<sub>э</sub> – расстояние между ближайшими эквивалентными положениями вакансий в кристалле;

 $V_0$  – величина порядка частоты атомных колебаний в кристалле (10<sup>12</sup>...10<sup>14</sup> с<sup>-1</sup>);

*U* – потенциальный барьер, который необходимо преодолеть вакансии при смещении в соседнее положение;

*k* – постоянная Больцмана;

*Т* – абсолютная температура.

### 3.2. Теплообмен на поверхности детали

Тепловой поток на поверхности мишени создается для таких процессов:

1. Столкновительных: тепла, выделяемого на поверхности вследствие действия электрона или иона (первое слагаемое справа) – отводится тепловой поток с распыленными частицами (второе слагаемое), с термоэлектронами (третье слагаемое), для ионов – отводится тепловой поток с ионно-ионной эмиссией или вторичной ионной эмиссией (пятое слагаемое), потенциальной ионно-электронной эмиссией (шестое слагаемое), кинетической ионно-электронной эмиссией (седьмое слагаемое), характеристическим рентгеновским излучением (восьмое слагаемое), тормозным рентгеновским излучением (девятое слагаемое), переходным излучением (десятое слагаемое).

2. Теплофизических: отводится тепловой поток с испаренным материалом (одиннадцатое слагаемое), с ушедшим материалом в жидкой фазе, если создаются условия для его выброса (двенадцатое слагаемое), с тепловым излучением нагретой поверхности (тринадцатое слагаемое) и с конденсированными атомами, ранее испаренными (четырнадцатое слагаемое).

3. Плазмохимических: реализуются за счет реакций потока плазмы или потока ионов с распыленным и испаренным материалом мишени или с адсорбированными газами (пятнадцатое слагаемое), эта энергия передается излучением.

Передача энергии также осуществляется путем излучения потока ионов, электронов или плазмы (последнее слагаемое):

$$-\lambda[T]\frac{\partial T(x,y,z,t)}{\partial x} = F_{i,e} - F_{pacn} - F_{M.3.} - [F_{uu.e} + F_{u.\phi.3} + F_{u.3.3} + F_{\kappa u3} + F_{x.pu} + F_{mpu} + F_{nu}]_{i} - F_{ucn} - F_{nn} - \sigma \varepsilon T^{*}(0,y,z,t) \pm F_{\kappa u a b} + F_{nx} + \sigma \varepsilon_{c} T^{*}_{c}, \qquad (12)$$

где о – постоянная Стефана-Больцмана.

Для решения вопроса эффективного заполнения объема наноструктурами необходимо определить энергии, заряды и сорта ионов, при которых это условие выполняется. Оно должно выполняться для каждого из потоков ионов, причем желательно, чтобы диапазоны глубин, где реализуются наноструктуры, дополняли друг друга.

### 4. Влияние энергии ионов, их сорта и заряда на величину объема наноструктуры и определение эффективной плотности тока для получения НС в магниевых сплавах

Величина объема наноструктур при единичном действии иона на магниевый сплав дает возможность прогнозировать требуемую плотность ионного тока в потоке для полного заполнения слоя, где возможно образование для этого иона соответствующего сорта, энергии и заряда. Так, на рис. 1–9 показаны зависимости объема нанокластера и глубин его залегания от зарядового числа *z* и энергии Е для ионов: В, С – рис. 1; N, AI – рис. 2; V, Cr – рис. 3, аналогичные зависимости для ионов О, Fe – рис. 4; Ni, Co – рис. 5; Y, Zr – рис. 6; Mo, Hf – рис. 7; Ta,

#### W – рис. 8; Pt – рис. 9.

Видно, что с ростом энергии ионов и их зарядов реализуется существенный рост объемов, влияет и заряд для ионов бора и углерода (рис. 1, а) и на глубину залегания объемов НС (рис 1, б, в).





Рис. 1. Зависимости объема нанокластера V (а), максимальной глубины образования HC  $h_{max}$  (б) и минимальной глубины образования HC h (в) от энергии ионов B<sup>+</sup>(---) и C<sup>+</sup> (—) (1 – однозарядный, 2 – двухзарядный и 3 – трехзарядный ион) для магниевых сплавов

Для случая действия ионов азота и алюминия на магниевый сплав определяющее влияние оказывают энергия и заряд иона (рис. 2, а), причем глубина его залегания растет существенно с ростом энергии и заряда ионов. Максимальная глубина, на которой существует нанокластер, составляет 1,2 10<sup>-7</sup> м, тогда как минимальная – 2,32 10<sup>-9</sup>.



Рис. 2. Зависимости объема нанокластера V (а), максимальной глубины образования HC  $h_{max}$  (б) и минимальной глубины образования HC h (в) от энергии ионов N+(---) и Al+ (—) (1 – однозарядный, 2 – двухзарядный и 3 – трехзарядный ион) для магниевых сплавов

#### Открытые информационные и компьютерные интегрированные технологии № 65, 2014



Аналогичные зависимости для случая действия ионов ванадия и хрома показаны на рис. 3. Видно, что энергия и заряд иона существенно влияют на объем кластера (рис. 3, а), тогда как переход от ванадия к хрому практически не изменил характера и численного значения величин.





Рис. 3. Зависимости объема нанокластера V (а), максимальной глубины образования HC  $h_{\rm max}$  (б) и минимальной глубины образования HC h (в) от энергии ионов V+(---) и Cr+ (—) (1 – однозарядный, 2 – двухзарядный и 3 – трехзарядный ион) для магниевых сплавов

То же самое наблюдается и для глубин залегания НК, причем на глубину залегания существенно влияеют энергия и заряд ионов, в случае действия ионов кислорода и железа объем нанокластера также существенно зависит от энергии и заряда (рис. 4, а), и глубины залегания нанокластера (максимальная и минимальная) (рис. 4, б, в)

#### Открытые информационные и компьютерные интегрированные технологии № 65, 2014







Действие ионов никеля и кобальта позволяет получать нанокластеры довольно значительных размеров, причем их величина существенно зависит от энергии и заряда ионов. Такое же влияние испытывают и максимальная и минимальная глубины залегания НК (рис. 5, б, в), но переход от никеля к кобальту практически не меняет ни объема нанокластера, ни глубины его залегания.





Рис. 5. Зависимости объема нанокластера V (а), максимальной глубины образования HC *h*<sub>max</sub> (б) и минимальной глубины образования HC *h* (в) от энергии ионов Ni+(---) и Co+ (□) (1 – однозарядный, 2 – двухзарядный и 3 – трехзарядный ион) для магниевых сплавов Аналогичные зависимости для случая действия ионов иттрия и циркония показаны на рис. 6, где также наблюдается определяющая зависимость объема (рис. 6, а) и глубин его залегания (рис. 6, б, в) от энергии и заряда иона, тогда как переход от иона иттрия к иону циркония эти зависимости не изменяет.





Рис. 6. Зависимости объема нанокластера V (а), максимальной глубины образования HC  $h_{max}$  (б) и минимальной глубины образования HC h (в) от энергии ионов Y+(---) и Zr+ (—) (1 – однозарядный, 2 – двухзарядный и 3 – трехзарядный ион) для магниевых сплавов

В случае действия ионов молибдена и гафния на магниевый сплав объем (рис. 7, а) и глубина залегания (рис. 7, б, в) нанокластера существенно зависят от энергии и заряда иона.



Рис. 7. Зависимости объема нанокластера V (а), максимальной глубины образования HC  $h_{\rm max}$  (б) и минимальной глубины образования HC h (в) от энергии ионов Мо+(---) и Hf+ (—) (1 – однозарядный, 2 – двухзарядный и 3 – трехзарядный ион) для магниевых сплавов



В этом случае для таких ионов величины разные, тогда как для случая действия тантала и вольфрама влияние сорта иона практически отсутствует, а замечено определяющее влияние энергии и заряда иона (рис. 8).





Рис. 8. Зависимости объема нанокластера V (а), максимальной глубины образования HC (б) и минимальной глубины образования HC h (в) от энергии ионов Ta+(---) и W+ (—) (1 – однозарядный, 2 – двухзарядный и 3 – трехзарядный ион) для магниевых сплавов

При действии платины на магниевый сплав также отмечается высокое влияние энергии и заряда иона на величины объема и глубины его залегания (рис. 9).



Полученные зависимости будут необходимы для определения потребной плотности тока соответствующего сорта, заряда и энергии для полного заполнения слоя наноструктурами, а выбрав необходимые энергии, заряды и сорта ионов для получения наноструктур в основном требуемой толщины, аналогично проводим оценки требуемых плотностей токов в каждом слое.

Зная объем, занимаемый наноструктурой при соответствующих энергиях, сортах и зарядах ионов и диапазон глубин, на которых этот объем находится, очевидно, можно оценить плотность ионного тока.

Тогда по известным диапазонам глубин залегания зон, где образуются наноструктуры, выбираем энергии, сорта и зарядности ионов для полного заполнения объема по глубине, т.е. так, чтобы они дополняли друг друга. Далее определяем плотность тока каждого из сортов иона и заряда, чтобы максимально заполнить необходимый объем поверхностного слоя детали наноструктурами (желательно, чтобы окончание первого слоя было началом второго, окончание второго - началом третьего слоя, и т.д.). Тогда для любого i-го слоя плотность тока определяем как

$$j_i = \frac{h_{i2} - h_{i1}}{V_{HCi}} z_i e$$

где h<sub>i1</sub> и h<sub>i2</sub> – начальная и конечная координаты зоны, где реализуются

наноструктуры для i-го иона; V<sub>HCi</sub> – объем зоны, где образуются наноструктуры; z<sub>i</sub>e – зарядовое число i-го иона; е – заряд электрона.

Зная  $\dot{J}_i$ ,  $V_{HCi}$ ,  $h_{i1}$ ,  $h_{i2}$  и  $z_i$  и выбрав  $E_i$ , можно сформировать необходимое количество потоков ионов, позволяющих получить наноструктурированный слой требуемой толщины, а с учетом технической задачи формирования немоноэнергетичных разнозарядовых потоков ионов можно решить задачу, касающуюся технологических параметров ионной обработки.

# Выводы

1. Показана принципиальная возможность конструирования поверхностного слоя в магниевом сплаве путем создания наноструктур различного состава и физико-механических характеристик

2. Видно, что определяющее влияние на объем нанокластера оказывает энергия иона и его заряд, в то же время влияет и масса иона, правда, не так существенно.

3. Глубина залегания нанокластера достигает десятых долей микрометра, т.е. слой материала испытывающего существенные изменения, довольно значительный, а если учесть и возможность диффузии ионов и даже аномальной диффузии, то можно получить слои с измененными характеристиками уже в пределах нескольких микрометров.

4. Видно, что для ряда пар ионов при действии на магниевый сплав сорт иона не оказывает влияния на зависимости объема нанокластера и глубины его залегания от энергии и заряда. Такими парами являются: «ванадий-хром», «никель-кобальт», «иттрий - цирконий», «тантал- вольфрам».

# 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] / Г. И. Костюк. – К.: Изд-во АИНУ, 2002. – Кн.1: Физические процессы плазменно-ионных, ионно-лучевых, плазменных, светолучевых и комбинированных технологий. – 596 с.

3. Костюк, Г. И. Физико-технические основы нанесения покрытий, ионной имплантации и ионного легирования, лазерной обработки и упрочнения, комбинированных технологий [Текст] / Г. И. Костюк. – К.: Изд-во АИНУ, 2002. – Кн. 2: Справочник для расчета основных физических и технологических параметров, оценки возможностей, выбора типа технологий и оборудования. – 482 с.

4. Костюк, Г. И. Наноструктуры и нанопокрытия: перспективы и реальность [Текст]: учеб. пособие / Г. И. Костюк. – Х.: Нац. аэрокосм. ун-т «Харьк. авиац. ин-т», 2009. – 406 с.

5. Костюк, Г.И. Научные основы создания современных технологий

[Текст]: учеб. пособие / Г.И. Костюк. – Х.: Нац. аэрокосм. ун-т «Харьк. авиац. ин-т», 2008. – 552 с.

6. Костюк, Г. И. Эффективный режущий инструмент с покрытием и упрочненным слоем [Текст]: моногр.-справ. / Г. И. Костюк. – Х.: Нац. аэрокосм. ун-т «Харьк. авиац. ин-т», 2007. – 633 с.

7. Костюк, Г. И. Эффективный режущий инструмент с покрытием и упрочненным слоем [Текст]: справ. / Г. И. Костюк. – К.: Вид-во АІНУ, 2003. – 412 с.

8. Костюк, Г. И. Физико-технические основы роботизированного производства [Текст]: учеб. пособие / Г. И. Костюк. – Х.: Нац. аэрокосм. ун-т «Харьк. авиац. инт», 2006. – 614 с.

9. Гречихин, Л. И. Физика наночастиц и нанотехнологий [Текст] /Л. И. Гречихин. – М.: УП «Технопринт», 2004. – 397 с.

10. Шнейдер, П. Инженерные проблемы теплопроводности [Текст] / П. Шнейдер. – М.: Иностр. лит. – 1960. – 488 с.

11. Аксенов, И. И. Вакуумная дуга в эрозионных источниках плазмы [Текст] / И. И. Аксенов. – Х.: Изд-во НИИ «ХФТИ», 2005. – 211 с.

12. Хаякава, С. Ядерно-физический аспект [Текст]: в 2 кн. / С. Хаякава. – М.: Мир, 1973. – Кн. 2. – 701 с.

13. Готт, Ю. В. Взаимодействие частиц с веществом в плазменных исследованиях [Текст] / Ю. В. Готт. – М.: Атомиздат, 1978. – 271 с.

14. Гусев, А. И. Нанокристаллические материалы: методы получения и свойства [Текст] / А. И. Гусев. – Екатеринбург: Изд-во РАН, Уральское отд-ние, 1998. – 302 с.

15. Гусев, А. И. Наноматериалы наноструктуры, нанотехнологии [Текст] / А. И. Гусев. – М.: Физматлит, 2005. – 416 с.

16. Решетняк, Е. Н. Синтез упрочняющих наноструктурных покрытий [Текст] / Е. Н. Решетняк, А. И. Стрельницкий // Вопросы атомной науки и техники. – 2008. – № 2. – С. 119 – 130.

17. Андриевский, Р. А. Наноматериалы: концепция и современные проблемы [Текст] / Р. А. Андриевский // Физика металлов и металловедение. – 2003. – Т. 91, № 1. – С. 50 – 56.

18. Состав, структура и свойства наноструктурных пленок боридов тантала [Текст] / А. А Гончаров, П. И. Игнатенко, В. В. Петухов и др. // ЖТФ. –2006. – Т. 76, вып. 10. – С. 82 – 87.

19. Коваленко В. Ф. Теплофизические процессы и электровакуумные приборы [Текст] / В. Ф. Коваленко. – М.: Сов. радио, 1975. – 212 с.

Рецензент: д-р техн. наук, проф. зав. каф. А. И. Долматов, Национального аэрокосмического университета «ХАИ» им. Н.Е. Жуковского, Харьков Поступила в редакцию 05.09.2014

# Об'єм нанокластера і глибина його залягання при дії іонів різних енергій, зарядів і сортів на магнієві сплави

Проведено дослідження величини об'єму нанокластера і глибини його залягання залежно від енергії, заряду і сорту іонів (B+, N+, C+, Al+, V+, Cr+, O+, Ni+, Zr+, Mo+, Hf+, W+, Ta+, Pt+), що дозволяє визначити склад іонів, їх енергії і заряди для отримання наноструктур (HC) у необхідному шарі, а з урахуванням необхідної густини іонного струму отримати практично всі технологічні параметри потоку необхідної товщини і фізико-механічних характеристик HC у магнієвому сплаві. Показано, що можна отримувати нанокластери об'ємом від 1,97·10<sup>-27</sup> до 4,95·10<sup>-22</sup> м<sup>3</sup>, причому глибини їх залягання коливаються в діапазоні від 1,65·10<sup>-9</sup> до 1,65·10<sup>-7</sup> м. Все це свідчить про те, що можна отримувати наноструктурні шари різної товщини з максимальною товщиною до десятих мікрометра, а змінюючи сорти іонів, можна варіювати фізико-механічні характеристики.

Ключові слова: нанокластери, іон, заряд, енергія, глибина залягання.

# The volume of the nanocluster and its depth under the action of ions of different energies, charges and varieties on magnesium alloys

The research value of the volume of the nanocluster and its depth in the depending on the energy charge and the type of ions (B+, N+, C+, Al+, V+, Cr+, O+, Ni+, Zr+, Mo+, Hf+, W+, Ta+, Pt+), which allows to determine the composition of the ions, their energy and charges for nanostrutkure in the desired layer, and with the required density of the ion current to get almost all of the technological parameters of the flow required thickness and physical and mechanical characteristics of the magnesium alloy. It is shown that it is possible to obtain nanoclusters volume from  $1,97 \cdot 10^{-27}$  to  $4,95 \cdot 10^{-22}$  m<sup>3</sup>, with the depth of their occurrence range from  $1,65 \cdot 10^{-9}$  to  $1,65 \cdot 10^{-7}$  m. all of this suggests that it is possible to obtain nanostructured layers of varying thickness with a maximum thickness of up to tenths of a micrometer, and changing the type of ions can be varied physical and mechanical characteristics.

Keywords: nanoclusters, ion, charge, energy and depth.