

УДК 669.1:537.5

І.М. ПАСТУХ, Г.М. СОКОЛОВА

Хмельницький національний університет

## КІНЕТИКА ВХОДЖЕННЯ ІОНІВ У ЗІТКНЕННЯ З ПОВЕРХНЕЮ В РОЗШИРЕНОМУ ЕНЕРГЕТИЧНОМУ ДІАПАЗОНІ

Викладено аналітичний апарат розрахунку кутів зіткнення іонів з частками поверхні, що становить основу енергетики передачі імпульсу при азотуванні у тліючому розряді (АТР), оскільки величина і напрямок силової дії іона впливають на характер та інтенсивність основних субпроцесів модифікації: утворення нітридів, дифузії азоту в глибину поверхневого шару, розпорошення поверхні. Запропоновані аналітичні вирази можуть застосовуватись у межах до 1200 В, що повністю перекриває енергетичний діапазон, реально використовуваний при АТР.

Ключові слова: азотування, тліючий розряд, іон, кут зіткнення з поверхнею.

I.M. PASTUKH, G.M. SOKOLOVA

Khmelnytsky National University

### KINETICS OF ION ENTRY INTO COLLISION WITH THE SURFACE AT THE EXTENDED ENERGY RANGE

The article deals with the analytical apparatus of the calculating of angles of ions collision with the particles of the surface, which is the basis of energy transmission of pulse when nitriding in glow discharge as the magnitude and direction of ion force affects the nature and intensity of the major modification subprocesses: formation of nitrides, nitrogen diffusion into the depth of the surface layer, surface spraying.

The analytical dependences allow to calculate accurately the angle of entry of different types ions in the collision with the surface, which is crucial for energy transfer and thus for prediction the probability of various subprocesses of surface modification by nitriding in glow discharge. The proposed analytical expressions can be used within 1200 В, which completely covers the energy rang actually used in the process of nitriding in glow discharge.

Keywords: nitriding, glow discharge, ion, angle of collision with the surface.

#### Вступ

Величина енергії та напрямок силової дії іона при його зіткненні з часткою поверхні визначають не тільки відповідність переданої енергії режимам АТР, при яких можливий той чи інший субпроцес, але й подальший напрямок руху часток поверхні. Дійсно при малих кутах (відносно вектора поля) частка поверхні більш ймовірно буде розпорошуватись, і навпаки, при силовій дії в напрямку вектора поля (перпендикулярно до поверхні) будуть стимулюватися процеси дифузії часток в глибину поверхневого шару та утворення нітридів (рівно як і при енергії, що значно перевищує енергетичний поріг утворення нітридів, відбуватиметься розпад нітридів, що фактично стимулює дифузійні явища).

#### Аналіз джерел за темою дослідження

Наведений в [1] аналітичний апарат в аспекті тодішніх задач обмежувався міжелектродною напругою 500 В. У зв'язку з розробкою технологічних процесів з автономними енергетичними параметрами можливий рівень міжелектродної напруги може досягати 1000 В. У цьому випадку використання згаданого аналітичного апарату видає комплексне або від'ємне значення, що унеможливило використання програмного забезпечення, розробленого на його основі. Крім того, як виявилось, структурна модель аналітичного апарату була надмірно ускладнена в плані точності визначення кута входу іонів у сутичку, що пов'язано з використанням практично всіх енергетичних параметрів, хоча не всі вони відіграють в однаковій мірі суттєву роль. Це насамперед стосується густини струму розряду, яка практично не впливає на характер зміни та абсолютну величину значення кута входження іона в зіткнення з поверхнею.

#### Постановка завдання

Метою роботи є розробка аналітичних залежностей та алгоритму визначення кутів входження іонів у зіткнення з поверхнею, які у свою чергу визначають величину частки енергії, яка і формуватиме характер взаємодії падаючого потоку з поверхнею.

#### Виклад основного матеріалу

Розрахунки кутів входження іонів різного типу (молекулярний та атомарний азот, атомарний аргон, молекулярний та атомарний водень) у зіткнення з поверхнею виконані з фіксацією значення кута напрямку руху іона в момент, коли шлях, пройдений іоном, дорівнює середній довжині вільного пробігу частки. Базовим середовищем вибрана газова суміш N75Ar25 (вміст за об'ємом азоту – 75 %, решта – аргон). У випадку використання інших складів газового середовища застосовується формула:

$$\frac{\bar{\beta}_{N75Ar25}}{\bar{\beta}_W} = \frac{\sigma_{vcW}}{\sigma_{vcN75Ar25}},$$

де  $\bar{\beta}_{N75Ar25}$ ,  $\bar{\beta}_W$  – середні значення кута входження у зіткнення з поверхнею деякої частки, котра рухається відповідно в середовищі N75Ar25 і в довільному середовищі;

$\sigma_{vcN75Ar25}$ ,  $\sigma_{vcW}$  – приведені перетини сутичок для аналогічних умов.

Аналіз результатів проведених розрахунків вказує на те, що густина струму практично не впливає на величину кутів (рис. 1).

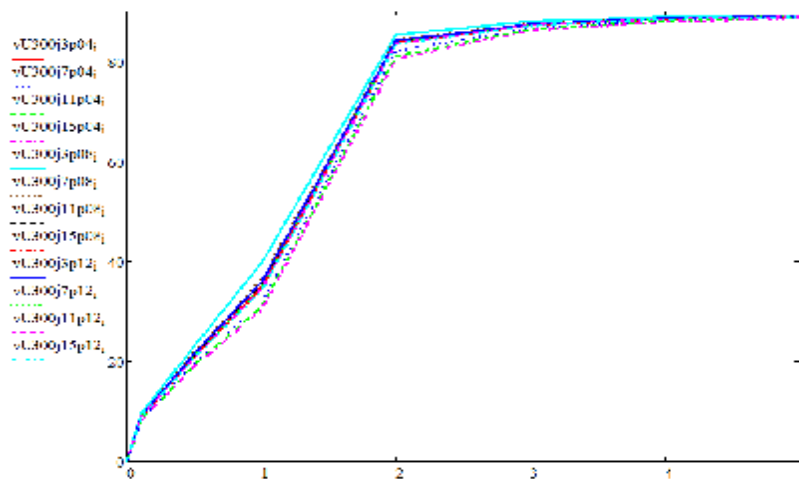


Рис. 1. Характер впливу густини струму на зміну кута входження іона у зіткнення з поверхнею

Наведені графіки залежності кутів входження іонів у зіткнення з поверхнею від аналогу швидкості свідчать про те, що згадані кути практично не відрізняються при зміні значення густини струму, тому в подальшому апроксимація проводилася для опосередкованого графіка, який об'єднував графіки при зміні густини струму в межах 3 – 15 А/м², що відповідає реальним даним технології азотування у тліючому розряді.

У роботі [1] криві, зображені на рис. 1, апроксимувались рівняннями:

$$\bar{\beta}(p, j, U, v) = 90(1 - a(p, j, U)^{-v}) - b(p, j, U)ve^{-0,1v^c}, \quad (1)$$

де  $a, b, c$  – константи;

$v$  – аналог швидкості,  $v = V \cdot 10^{-4}$  м/с.

Вплив збільшення коефіцієнтів  $a, b, c$  на форму кривої (рис. 1) показано на рис. 2.

Кращі результати апроксимації (кореляційне відношення між розрахунковими та апроксимаційними даними – 0,999) досягаються при використанні залежності виду:

$$\bar{\beta}(p, U, v) = 90(1 - a(p, U)^{-2av}) - b(p, U)ve^{-0,1v^c}.$$

Коефіцієнт  $a$  визначається за допомогою залежності:

$$a(U, p) = K_{a1}(p) + K_{a2}(p)U + K_{a3}(p)U^2 + K_{a4}(p)U^3.$$

Застосування переходу у вигляді полінома третього ступеня дозволяє абсолютно точно відобразити характер зміни розрахункових даних залежно від напруги між електродами на відміну від варіанта, наведеного в [1], де застосовано поліном другого степеня. Коефіцієнти  $K_{a1}(p), K_{a2}(p), K_{a3}(p), K_{a4}(p)$  визначаються залежно від типу іона за методикою, наведеною в [2].

Для молекулярного іона азоту:

$$K_{a1}(p) = 1,445 + 0,2737p - 0,1344p^2;$$

$$K_{a2}(p) = -5,278 \cdot 10^{-4} + 3,595 \cdot 10^{-4}p - 1,694 \cdot 10^{-4}p^2;$$

$$K_{a3}(p) = -7,917 \cdot 10^{-7} - 7,639 \cdot 10^{-7}p + 3,472 \cdot 10^{-7}p^2;$$

$$K_{a4}(p) = -2,932 \cdot 10^{-10} + 2,894 \cdot 10^{-10}p - 1,447 \cdot 10^{-10}p^2.$$

Для атомарного іона азоту:

$$K_{a1}(p) = 0,14 + 3,0125p - 1,71875p^2;$$

$$K_{a2}(p) = 0,0061444445 - 0,014930556p - 0,00840277779p^2;$$

$$K_{a3}(p) = -8,8333333 \cdot 10^{-6} + 2,125 \cdot 10^{-5}p - 1,1805555 \cdot 10^{-5}p^2;$$

$$K_{a4}(p) = 3,7654321 \cdot 10^{-9} - 9,1049383 \cdot 10^{-9}p + 5,0154321 \cdot 10^{-9}p^2.$$

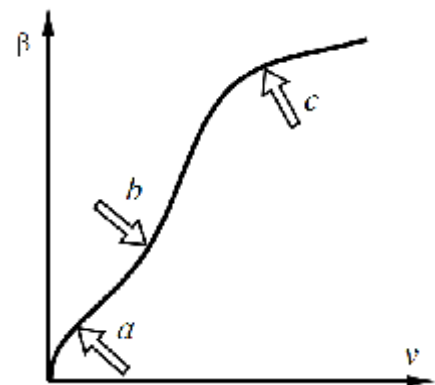


Рис. 2. Характер впливу збільшення коефіцієнтів рівняння (1) на форму кривої

Для атомарного іона аргону:

$$K_{a1}(p) = 0,99 + 1,5875p - 0,90625p^2;$$

$$K_{a2}(p) = 1,8166667 \cdot 10^{-3} - 7,0069447 \cdot 10^{-3}p + 39409724 \cdot 10^{-3}p^2;$$

$$K_{a3}(p) = -2,4444444 \cdot 10^{-6} + 8,9583332 \cdot 10^{-6}p - 5,0347221 \cdot 10^{-6}p^2;$$

$$K_{a4}(p) = 9,2592594 \cdot 10^{-10} - 3,3950618 \cdot 10^{-9}p + 1,9290124 \cdot 10^{-9}p^2.$$

Слід звернути увагу на необхідність використання точних значень числових констант, оскільки будь-яке спрощення коефіцієнтів (скорочення, заокруглення) дуже сильно впливає на точність апроксимації.

Коефіцієнти  $b$  та  $c$  визначаються залежно від сталої  $a$ :

$$b = K_{ba} \cdot a, \quad c = K_{ca} \cdot a.$$

Значення коефіцієнтів пропорційності  $K_{ba}$ ,  $K_{ca}$  розраховується за аналогічним алгоритмом:

$$K_{ba}(U, p) = K_{ba1}(p) + K_{ba2}(p)U + K_{ba3}(p)U^2 + K_{ba4}(p)U^3,$$

$$K_{ca}(U, p) = K_{ca1}(p) + K_{ca2}(p)U + K_{ca3}(p)U^2 + K_{ca4}(p)U^3,$$

де коефіцієнти  $K_{ba1}(p)$ ,  $K_{ba2}(p)$ ,  $K_{ba3}(p)$ ,  $K_{ba4}(p)$  та  $K_{ca1}(p)$ ,  $K_{ca2}(p)$ ,  $K_{ca3}(p)$ ,  $K_{ca4}(p)$  визначаються залежно від типу іона.

Для молекулярного іона азоту:

$$K_{ba1}(p) = 26,015786 - 5,0941125p + 2,6246188p^2;$$

$$K_{ba2}(p) = -0,0010503478 - 0,043442671p + 0,03008p^2;$$

$$K_{ba3}(p) = 8,391134 \cdot 10^{-6} + 6,3065109 \cdot 10^{-5}p - 4,6637828 \cdot 10^{-5}p^2;$$

$$K_{ba4}(p) = -2,3908664 \cdot 10^{-9} - 2,9746337 \cdot 10^{-8}p + 2,1564746 \cdot 10^{-8}p^2.$$

$$K_{ca1}(p) = 5,9519541 - 6,0670128p + 4,1910313p^2;$$

$$K_{ca2}(p) = -0,0048905104 + 0,028587466p - 0,020199979p^2;$$

$$K_{ca3}(p) = 2,5198767 \cdot 10^{-6} - 2,9554249 \cdot 10^{-5}p + 2,1526092 \cdot 10^{-5}p^2;$$

$$K_{ca4}(p) = -8,5591036 \cdot 10^{-10} + 1,009789 \cdot 10^{-8}p - 7,4560 \cdot 10^{-9}p^2.$$

Для атомарного іона азоту:

$$K_{ba1}(p) = 6,5489316 - 7,6529605p + 8,5418244p^2;$$

$$K_{ba2}(p) = -0,16776038 - 0,17817609p + 0,072082428p^2;$$

$$K_{ba3}(p) = -2,9280027 \cdot 10^{-4} + 4,2509329 \cdot 10^{-4}p - 1,9110135 \cdot 10^{-4}p^2;$$

$$K_{ba4}(p) = 1,3885574 \cdot 10^{-7} - 2,301671 \cdot 10^{-7}p + 1,0672018 \cdot 10^{-7}p^2.$$

$$K_{ca1}(p) = 2,9188738 - 1,5833844p + 1,4892403p^2;$$

$$K_{ca2}(p) = -0,005394058 + 0,011503148p - 0,0096121931p^2;$$

$$K_{ca3}(p) = 4,0593344 \cdot 10^{-6} - 1,1646138 \cdot 10^{-5}p + 1,0939438 \cdot 10^{-5}p^2;$$

$$K_{ca4}(p) = -7,2614204 \cdot 10^{-10} + 3,0189746 \cdot 10^{-9}p - 3,5309712 \cdot 10^{-9}p^2.$$

Для атомарного іона аргону:

$$K_{ba1}(p) = -34998606 + 116,48713p - 68,184353p^2;$$

$$K_{ba2}(p) = -0,27108479 - 0,74607721p + 0,452606p^2;$$

$$K_{ba3}(p) = -3,6527726 \cdot 10^{-4} + 1,1018098 \cdot 10^{-3}p - 6,8253615 \cdot 10^{-4}p^2;$$

$$K_{ba4}(p) = 1,5235244 \cdot 10^{-7} - 4,7696871 \cdot 10^{-7}p + 3,0014617 \cdot 10^{-7}p^2.$$

$$K_{ca1}(p) = 6,4778458 + 11,165162p - 16,270505p^2;$$

$$K_{ca2}(p) = -0,040189844 + 0,05032968p + 0,02667645p^2;$$

$$K_{ca3}(p) = 6,591998 \cdot 10^{-5} - 1,2631248 \cdot 10^{-4}p - 8,3856375 \cdot 10^{-6}p^2;$$

$$K_{ca4}(p) = -2,969926 \cdot 10^{-8} + 6,4146299 \cdot 10^{-8}p - 2,1767156 \cdot 10^{-9}p^2.$$

Характер зміни кута зіткнення з поверхнею залежно від аналога швидкості для іонів водню значно простіший. Форма кривої, що його описує, та вплив збільшення коефіцієнтів  $a$  та  $b$  показані на рис. 3.

Наведена крива описується формулою:

$$\bar{\beta}(p, U, v) = a(p, U) \cdot v^{b(p, U)}.$$

Алгоритм розв'язання задачі аналогічний викладеному вище для іонів азоту та аргону з тією різницею, що коефіцієнт  $b$  розраховується залежно від коефіцієнта  $a$ , а коефіцієнт  $c$  відсутній.

Для молекулярних іонів водню:

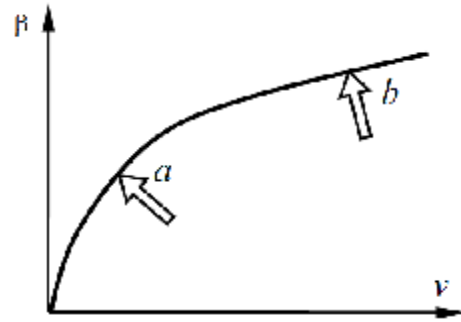


Рис. 3. Форма та характер зміни залежності кута входження іона водню у зіткнення з поверхнею від аналога швидкості

$$K_{a1}(p) = -2,1 + 55,875p - 29,6875p^2;$$

$$K_{a2}(p) = 0,059555558 - 0,22166667p + 0,11736112p^2;$$

$$K_{a3}(p) = -8,5000001 \cdot 10^{-5} + 2,9166667 \cdot 10^{-4}p - 1,5244448 \cdot 10^{-4}p^2;$$

$$K_{a4}(p) = 3,6419752 \cdot 10^{-8} - 1,2037037 \cdot 10^{-7}p + 6,1728394 \cdot 10^{-8}p^2.$$

$$K_{ba1}(p) = -0,11052979 - 0,15883205p + 0,053822988p^2;$$

$$K_{ba2}(p) = -2,3835916 \cdot 10^{-4} + 6,2058061 \cdot 10^{-4}p - 1,8911998 \cdot 10^{-4}p^2;$$

$$K_{ba3}(p) = 2,9099801 \cdot 10^{-7} - 7,6850142 \cdot 10^{-7}p + 2,0255428 \cdot 10^{-7}p^2;$$

$$K_{ba4}(p) = -1,2154138 \cdot 10^{-10} + 3,160025 \cdot 10^{-10}p - 6,8367523 \cdot 10^{-11}p^2.$$

Для атомарних іонів водню:

$$K_{a1}(p) = 9,1 - 3,25p + 4,375p^2;$$

$$K_{a2}(p) = -4,1666667 \cdot 10^{-3} - 0,032083333p - 0,029861111p^2;$$

$$K_{a3}(p) = -1,111111 \cdot 10^{-6} - 3,75 \cdot 10^{-5}p + 3,8194445 \cdot 10^{-5}p^2;$$

$$K_{a4}(p) = 1,8518517 \cdot 10^{-9} + 1,3888889 \cdot 10^{-8}p - 1,5432099 \cdot 10^{-8}p^2.$$

$$K_{ba1}(p) = 0,0911871715 + 0,080475806p - 0,085693859p^2;$$

$$K_{ba2}(p) = -1,2084277 \cdot 10^{-4} - 3,813668 \cdot 10^{-4}p + 4,0748942 \cdot 10^{-4}p^2;$$

$$K_{ba3}(p) = 1,9953847 \cdot 10^{-7} + 4,2667718 \cdot 10^{-7}p - 5,2671946 \cdot 10^{-7}p^2;$$

$$K_{ba4}(p) = -9,1394652 \cdot 10^{-11} - 1,6507308 \cdot 10^{-10}p + 2,2457303 \cdot 10^{-10}p^2.$$

### Висновки

Отримані аналітичні залежності дозволяють з високою точністю розраховувати кут входження іонів різних типів у зіткнення з поверхнею, що є визначальним для передачі енергії, а відтак для прогнозування ймовірності різних субпроцесів модифікації поверхні азотуванням у тліючому розряді.

### Література

1. Пастух І. М. Кінетика прикатодних процесів як фактор формування енергетичного спектра падаючого потоку / І. М. Пастух // Вісник Технологічного університету Поділля. – 2004. – № 1. – С. 53–64.

2. Пастух І. М. Методика обробки даних багатфакторних моделей / І. М. Пастух // Вісник ТУП. – 2002. – № 6. – С. 42–46.

### References

1. M. Pastukh, Kinetyka prykatodnyh protsesiv yak faktor formuvannia energetichnoho spektra padayuchego potoku, Visnyk Tekhnolohichnoho universytetu Podillia. 2004. Issue 1. S. 53–64.

2. M. Pastukh, Mertodyka obrobky danykh bagatofaktornykh modeley, Visnyk Tekhnolohichnoho universytetu Podillia, 2002. Issue 6. S. 42–46.

Рецензія/Peer review : 13.7.2015 р.

Надрукована/Printed : 28.6.2015 р.

Стаття рецензована редакційною колегією