

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ИОННО-ПЛАЗМЕННОЙ МОДИФИКАЦИИ ТВЕРДЫХ СПЛАВОВ ¹

Е.С. Ахралович, В.М. Шеменков

Проанализированы вопросы, связанные с отработкой технологии ионно-плазменного упрочнения. Предложено решение возникающих проблем с помощью компьютерного моделирования. Приведены общие положения модели парных столкновений и физические явления, лежащие в основе данной модели.

Ключевые слова: модификация, парное столкновение, электрон, тлеющий разряд.

Важнейшей народнохозяйственной задачей, является создание новых упрочняющих технологий, основанных на целенаправленном управлении свойствами материалов. Наиболее перспективными как в научном, так и в прикладном плане являются исследования процессов воздействия потоков различных энергий на поверхность материалов и сплавов. Одним из таких новых процессов является процесс низкоэнергетического воздействия в вакууме.

С целью повышения срока службы твердосплавного инструмента за счет увеличения износостойкости и твердости поверхности, улучшения эксплуатационных характеристик, при сохранении геометрических и конструктивных параметров изделий, на кафедре «Металлорежущие станки и инструменты» Белорусско-Российского университета разработан способ модификации твердосплавного инструмента потоком ионов в плазме тлеющего разряда [1]. Сущность способа заключается в том, что процесс модификации осуществляется без специально приготовленной и вводимой в камеру рабочей среды (азота или азотосодержащих газов), изделия упрочняются при низких температурах, не вызывающих термических превращений, за короткое время [2]. Изменение свойств поверхностных слоев происходит вследствие взаимодействия с ним бомбардирующих ионов [3].

Значительные сложности экспериментальной отработки новых технологических процессов и оборудования сдерживают внедрение предложенного метода обработки в производство. Для экспериментальных исследований необходимо специальное дорогостоящее оборудование, которое недоступно для большинства учреждений и фирм. Поэтому исследование и отработка новых технологических процессов проводится методом «проб и ошибок», что требует больших материальных и временных затрат.

Одно из эффективных направлений решения этой проблемы – применение методов компьютерного моделирования, при которых возможно получение максимального объема информации об изучаемом процессе при минимуме дорогостоящих экспериментальных исследований [4].

Компьютерному моделированию процесса упрочнения твердосплавного инструмента потоком ионов в плазме тлеющего разряда должно предшествовать математическое описание данного способа упрочнения. При его описании будем ориентироваться на положения модели парных столкновений.

¹ Статья подготовлена в ходе выполнения научно-исследовательской работы студентов на кафедре «Металлорежущие станки и инструменты»

Приближение парных столкновений было первым модельным подходом, применявшимся к анализу процессов, вызываемых ионной бомбардировкой твердых тел, в частности при моделировании пробегов. Предметом обсуждения данной статьи является единичное парное столкновение. Термины «атом», «частица» или «налетающая частица» будут использоваться независимо от зарядового состояния [5].

Предположим, что атом мишени массой M_1 находится в состоянии покоя, а налетающая частица массой M_2 имеет начальную скорость V_0 и начальную энергию E_0 . Кроме того, примем, что при столкновении возможны неупругие потери энергии Q , приводящие к возбуждению электронов атомов или ионизации, как атома мишени, так и налетающей частицы (либо обеих этих частиц). В нерелятивистском случае из условия сохранения энергии следуют соотношения

$$E_0 = E_1 + E_2 + Q;$$

$$\frac{1}{2}M_1 \cdot V_0^2 = \frac{1}{2}M_1 \cdot V_1^2 + \frac{1}{2}M_2 \cdot V_2^2 + Q, \quad (1)$$

где E_1 , V_1 и E_2 , V_2 представляют собой кинетическую энергию и скорость налетающей частицы и атома мишени после столкновения соответственно.

Закон сохранения импульса можно представить следующим образом:

$$M_0 \cdot V_0 = M_1 \cdot V_1 \cdot \cos \theta_1 + M_2 \cdot V_2 \cdot \cos \theta_2.$$

$$0 = M_1 \cdot V_1 \cdot \sin \theta_1 + M_2 \cdot V_2 \cdot \sin \theta_2. \quad (2)$$

Согласно рис.1 V_1 представляет собой угол рассеяния налетающей частицы, а θ_2 – угол между направлением движения атома отдачи после столкновения и исходным направлением движения налетающей частицы. Выражение (2) подразумевает, что неупругие потери энергии Q либо являются полностью внутренними (приводят к возбуждению электронов в одном или двух сталкивающихся атомах), либо передаются только электронам твердого тела (например, электронам электронного газа), так что соответствующее изменение импульса пренебрежимо мало из-за малости массы электронов.

На основе законов сохранения энергии (1) и импульса (2) можно определить углы θ_1 , в лабораторной системе координат после столкновения:

$$\cos \theta_1 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{E_1}{E_0}} \cdot (1 + A) + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{E_0}{E_1}} \cdot \left[1 - A \cdot \left(1 - \frac{Q}{E_0} \right) \right]; \quad (3)$$

$$\cos \theta_2 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{E_2}{E_0}} \cdot \frac{1 + A}{\sqrt{A}} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{E_0}{E_2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{A}} \cdot \frac{Q}{E_0}, \quad (4)$$

$$\text{где } A = \frac{M_1}{M_2}.$$

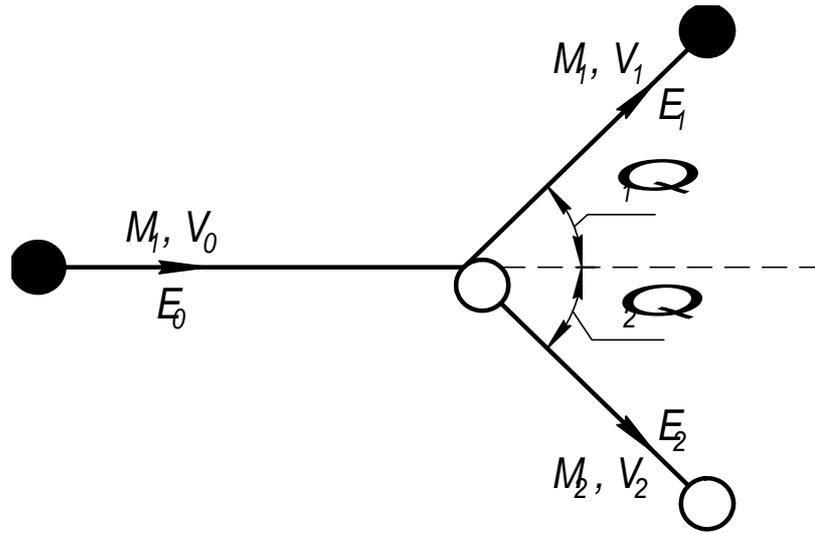


Рис. 1. Схема парного столкновения

В полярной системе координат уравнениям (3) и (4) соответствуют окружности радиуса $r = \sqrt{E_i/E_0}$. Радиусы R_i окружностей с центрами в точках x_i на оси x определяют исходя из уравнений (3) и (4):

$$R_1 = \frac{A}{1+A} \cdot f; \quad x_1 = \frac{1}{1+A}; \quad (5)$$

$$R_2 = \frac{\sqrt{A}}{1+A} \cdot f; \quad x_2 = \frac{\sqrt{A}}{1+A}; \quad (6)$$

$$f^2 = 1 - \frac{1+A}{A} \cdot \frac{Q}{E_0} \quad (7)$$

Энергии налетающей частицы после рассеяния и атома отдачи в лабораторной системе определяются исходя из выражений (3) и (4):

$$\frac{E_1}{E_0} = \frac{1}{(1+A)^2} \cdot \left(\cos \theta_1 \pm \sqrt{A^2 \cdot f^2 - \sin^2 \theta_1} \right)^2 = \left(\frac{V_1}{V_0} \right)^2; \quad (8)$$

$$\frac{E_2}{E_0} = \frac{A}{(1+A)^2} \left(\cos \theta_2 \pm \sqrt{f^2 - \sin^2 \theta_2} \right)^2 = A \left(\frac{V_2}{V_0} \right)^2. \quad (9)$$

Тогда с учетом уравнений (8) и (9) максимальная энергия, которая может быть передана при столкновении, равна

$$T_{\max} = \frac{4A}{1+A^2} \cdot E_0. \quad (10)$$

Внедрение ионов в материалы сопровождается изменением структуры и свойств в результате образования многочисленных дефектов. При ионной обработке число возникающих дефектов столь велико, что может происходить полное видоизменение свойств поверхности обрабатываемого материала. Уже сами внедренные ионы пред-

ставляют собой дефекты структуры материала. Однако большая часть дефектов возникает в результате смещения атомов материала. Простейшими дефектами структуры, вызванными смещениями, являются точечные дефекты материала типа Френкеля. Эти дефекты характеризуются возникновением пары: атом в междоузлии и вакансия. При накоплении до определённого уровня дефекты эволюционируют в дислокационные петли.

Теория радиационных нарушений в материалах исходит из предположения, что существует пороговая энергия E_a , которую необходимо передать атому, чтобы он перешел в междоузлие и возник дефект. Эта энергия должна превышать энергию связи атома в кристаллической решетке или молекуле E_d . Число и распределение возникающих при ионной обработке дефектов смещения определяется ядерным торможением ионов, т. е. параметром ядерной тормозной способности $Sn(E)$ и дозой бомбардирующих ионов N_s . Максимум концентрации дефектов лежит на расстоянии $\bar{\lambda}_p$ от поверхности и, в целом, распределение дефектов i повторяет распределение внедренных ионов. Число возникающих дефектов может быть оценено выражением

$$N_d \approx 0,4 \frac{N_s \cdot Sn(E)}{E_d}. \quad (11)$$

Из-за возникновения вторичных дефектов глубина нарушенного слоя материала может быть значительно большей, чем глубина внедрения ионов.

Если энергия смещенного атома E_a превышает E_d , то могут возникать вторичные дефекты, так как смещенный атом способен вызвать смещение другого. Вероятность возникновения вторичных дефектов при столкновении увеличивается от нуля до единицы при энергии смещенного атома $E_a = 2E_d$, и полное их число будет равно $\nu(E) = E_a / 2E_d$.

Помимо прямого выбивания атомов материала из равновесных положений бомбардирующими ионами происходит распространение дефектной области в цепочках последовательной передачи энергии и импульса между атомами. Диаметр зоны нарушений, создаваемой одним ионом, имеет значение порядка Λ нм, где параметр Λ равен численному значению энергии иона, выраженной в килоэлектрон-вольтах. Можно ожидать, что при энергиях несколько килоэлектрон-вольт и дозах бомбардирующих ионов порядка $10^{14} \dots 10^{16}$ ион/см² будет происходить перекрытие дефектных зон, слияние точечных дефектов в сплошную дефектную зону. Монокристаллическая структура превращается в аморфную. Критическая доза, при которой происходит аморфизация поверхностных слоев обрабатываемого материала, зависит от энергии и массы ионов, температуры, вида образующихся дефектов, коэффициента распыления материала и других параметров.

В расчетах плотности дислокаций необходимо учесть внутрикаскадную и межкаскадную рекомбинацию пар Френкеля, их миграция вглубь обрабатываемого потоком частиц материала и конденсацию на стоках точечных дефектов, аннигиляцию дислокационных петель различного типа и их отжиг. Поэтому для получения адекватной модели увеличения предела прочности на сдвиг пластин, обработанных потоком частиц, введем зависимый от температуры этой обработки коэффициент $B_r(T)$, учитывающий вышеуказанные процессы.

Тогда выражение для определения предела прочности на сдвиг примет вид:

$$\tau = \tau_{ом} + B_r(T) \cdot G \cdot b \cdot \sqrt{\Delta\rho}. \quad (12)$$

Общеизвестная корреляция предела точности на сдвиг с микротвердостью позволяет определить более доступную с практической точки зрения характеристику материала пластин

$$H_{\mu} = H_{\mu 0} + B(T) \cdot G \cdot b \sqrt{\Delta\rho}, \quad (13)$$

где $H_{\mu 0}$ – микротвердость материала пластин до упрочнения, МПа; $B\tau(T)$, $B(T)$ – коэффициенты, учитывающие температурную зависимость повреждаемости, а также влияние на эту зависимость плотности потока частиц, при определении предела прочности на сдвиг и микротвердости соответственно.

Указанные коэффициенты в исследуемом интервале плотности потока частиц зависят практически только от температуры пластин. Учитывая этот факт, а также обозначив $\beta(T) = B(T) \cdot G \cdot b$ микротвердость обработанных потоком частиц пластин запишется как

$$H_{\mu} = H_{\mu 0} + \beta(T) \cdot \sqrt{\Delta\rho}. \quad (14)$$

Полученная формула определяет повышение микротвёрдости твердосплавных пластин в результате модификации последних потоком частиц в плазме тлеющего разряда.

Литература

1. А.с. 1309593 СССР, М. Кл. с 23 с 11/00. Способ упрочнения изделий из металлов и сплавов / В.С. Камалов, В.И. Ходырев, И.И. Силин, Э.А. Липский (СССР). – 1985.
2. Ходырев, В.И. Прогрессивные электрофизические методы упрочнения твердосплавного инструмента / В.И. Ходырев, А.Ф. Короткевич, В.М. Шеменков // - Вестник МГТУ «Электромеханика, приборостроение и информатика» 2002.- №2 - с. 159 – 163.
3. Применение низкоэнергетического воздействия на материалы с целью формирования их свойств / В.И. Ходырев, Р.Н. Шадура, Э.А. Липский и др. // Современные направления развития производственных технологий и робототехника: Материалы междунар. науч.-техн. конф. - Могилев, 1999. – С. 158.
4. Процессы плазменного нанесения покрытий: теория и практика / А.Ф. Ильющенко, С.П. Кундас, А.П. Достанко и др.: Под общ. ред. Акад. НАН Беларуси А.П. Достанко, П.А. Витязя. – Мн.: Науч. центр исслед. политики и бизнеса «Артемиды – Маркетинг, Менеджмент», 1999. – 544 с.: ил.
5. Экштайн, В. Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твёрдого тела. - М.: Мир, 1995.- 321 с.: ил.

Ахралович Елена Сергеевна

Студентка машиностроительного факультета
Белорусско-Российского факультета
Тел.: +375 (0222) 46-11-19

Шеменков Владимир Михайлович

Старший преподаватель кафедры «Металлорежущие станки и инструменты»
Белорусско-Российский университет
Тел.: + 375 (0222) 23-60-31
E-mail: Shemenkov@BRU.Mogilev.by