

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В ПОВЕРХНОСТНОМ СЛОЕ МАТЕРИАЛОВ ПРИ ИХ ИМПЛАНТАЦИОННОЙ ОБРАБОТКЕ

А.И.Ляпин

Могилевский Машиностроительный Институт, ул. Ленинская 70, ММИ, 212005, Могилев, Республика Беларусь, e-mail: lyapin@mimi.mogilev.unibel.by

В работе обсуждается модель процесса имплантационной обработки материалов и результаты модельных расчетов. Модель представляет собой систему нелинейных дифференциальных уравнений и позволяет исследовать динамику структурных превращений в имплантируемом слое в процессе имплантации. Основные процессы, сопутствующие ионной имплантации, введены в модель в виде их вероятностей. Модельные расчеты приводят к экспериментально обоснованным результатам. Модель может быть использована при планировании физических экспериментов по имплантации.

1. Введение

Физические эксперименты по исследованию влияния условий имплантационной обработки на свойства обрабатываемой поверхности требуют больших материальных затрат. Поэтому предварительные теоретические исследования и, основанное на их результатах, прогнозирование указанных свойств является весьма актуальными. К настоящему времени накоплен обширный теоретический и экспериментальный материал по ионной имплантации и установлены основные закономерности [1-3]. Это позволяет моделировать последствия ионного облучения материалов, т.е. прогнозировать их свойства.

Цель данной работы - показать, что моделирование, основанное на синергетических подходах [4] кластерной динамики, приводит к результатам, которые могут иметь практическое применение. В работе обсуждается модель и результаты модельных расчетов процесса имплантационной обработки. Этот процесс описан с помощью системы нелинейных дифференциальных уравнений. В расчет приняты основные процессы, сопутствующие имплантационную обработку. Каждый из рассматриваемых процессов введен в модель в виде его вероятности. Эти вероятности вычисляются, как функции изменяющихся параметров облучения. В отличие от работ [5-7] в настоящей работе рассматриваются такие процессы, как аморфизация, формирование твердого раствора, кристаллизация и распыление и детализирована связь указанных вероятностей с параметрами процесса.

2. Исходные предпосылки модели

Ионы с энергией несколько кэВ, попадая в кристаллическую матрицу, приводят к возникновению неупорядоченных образований из небольшого числа атомов ("аморфных кластеров", АК). Кроме того, после возмущения, вызванного ионом, атомы матрицы и примеси могут образовывать кластеры с правильной упаковкой, КК. Примесные атомы могут образовывать кластеры типа ТРК (твердого раствора) или, в результате взаимодействия между собой, образовывать кластеры типа НКК (содержащие только примесь). Кластеры ТРК могут образовываться во время имплантации иона. Формирование кластеров НКК долж-

но поддерживаться диффузией. Условия облучения определяют динамику взаимных превращений кластеров.

На ранней стадии облучения формирование К⁺ из АК не выражено. Увеличение дозы облучения и развитие аморфизации приводит к тому, что КК, возникающие в аморфном слое как вкрапления более стабильной фазы, начинают расти за счет АК. Соотношение фаз в имплантируемом слое формируется в результате развития двух процессов - процесса перемешивания атомов на начальной стадии облучения (за время проникновения иона в матрицу) и процесса их сегрегации под действием сил химической природы в последующей стадии (за время между двумя последующими попаданиями иона в данный кластер). В зависимости от условий облучения и термохимических параметров между фазами имплантированного слоя устанавливается то или иное динамическое равновесие.

3. Модель структурных превращений в имплантируемом слое

Для простоты представим образец в виде плоскопараллельных слоев, каждый из которых в данный момент времени содержит кластеры АК, ТРК, НКК или "кластеры исходной матрицы" ИК. Если ион с вероятностью f попадает в данный кластер, то последний с вероятностью a становится кластером АК. Дальнейшее состояние кластера (за время t_n до следующего попадания иона) определится ближайшим окружением, наличием в нем примеси и термохимическими параметрами. Пренебрегая корреляцией макровременных процессов с микровременными, весь процесс имплантации можно разбить на две стадии: "столкновительную" и "диффузионную". В модели приняты следующие обозначения:

w_p - вероятность прохождения ионом данного слоя;

w_x - вероятность нахождения иона в данном слое;

$w_{сг}$ - вероятность структурного превращения АК→КК в результате "диффузионного" взаимодействия кластеров (за время t_n);

l, s, n - вероятности отсутствия среди соседей данного кластера соответственно кластеров ИК, ТРК или НКК;

w_s, w_n, w_i - вероятности образования соответственно ТРК, НКК или ИК за время t_n ;
 w_d - вероятность распада ТРК за время t_n ;
 I, A, S и N - вероятности того, что данный кластер станет соответственно кластером ИК, АК, ТРК или НКК после пролета одного иона.

В предположении малости изменения основных параметров процесса при пролете одного иона, эволюцию различных фаз в имплантируемом слое в процессе облучения можно описать следующей системой уравнений:

$$\frac{dI}{dt} = (1-i)(1-a)wp + \frac{wcr}{f \cdot wp} (1-wx)A \cdot s \cdot n(1-ws)$$

$$\times (1-wn) - I(wp + wx(1-a)) + S(1-wd) \cdot \frac{wcr}{f \cdot wp}$$

$$\frac{dA}{dt} = a \cdot wp - (wp + \frac{wcr}{f \cdot wp} (wx \cdot i \cdot s(1-ws)(1-wi)$$

$$+ (1-wx) \cdot n \cdot s(1-ws)(1-wn) + wx \cdot i \cdot n(1-wi)$$

$$\times (1-wn))A$$

$$\frac{dN}{dt} = i \cdot s \cdot wp(1-a) + \frac{wcr}{f \cdot wp} (wx \cdot i \cdot s(1-ws)$$

$$\times (1-wi)A + S \cdot wd) - N \cdot wp$$

$$\frac{dS}{dt} = n \cdot i \cdot wp(1-a) + \frac{wcr}{f \cdot wp} \cdot wx \cdot i \cdot n \cdot A(1-wi)$$

$$\times (1-wn) + I \cdot wx(1-a) - S(wp + wd \cdot \frac{wcr}{f \cdot wp})$$

где $dt = f \cdot dD$, dD - "доза", соответствующая одному иону.

Граничные условия модели задаются "нулевой дозой D_0 " и дозой "полной аморфизации D_a ". За нулевую дозу принята минимальная доза, при которой заметных изменений в имплантированном слое не наблюдается. Расчеты проводились методом Рунге-Кутты с переменным шагом интегрирования.

4. Результаты модельных расчетов и их обсуждение

Здесь приводятся лишь некоторые результаты расчетов зависимости I, A, S и N от дозы облучения D при различных значениях температуры T и энергии E (интенсивность облучения $J=5 \times 10^{18} \text{ м}^{-2} \text{ с}^{-1}$). На рис.1-3 показаны графики изотермических зависимостей для комбинации $B \rightarrow Ni$. Выбор этой комбинации обусловлен наличием для нее экспериментальных данных [3].

Из рис.1 следует, что при комнатной температуре доминирующим процессом в имплантируемом слое является аморфизация. Начиная с дозы $D=6.5 \times 10^{19} \text{ м}^{-2}$ слой оказывается полностью аморфизированным.

Косвенным экспериментальным подтверждением этого результата могут служить результаты работы [3], в которой аморфизация Ni наблюдалась при дозе $D=4 \times 10^{19} \text{ м}^{-2}$ и энергии облучения 40кэВ.

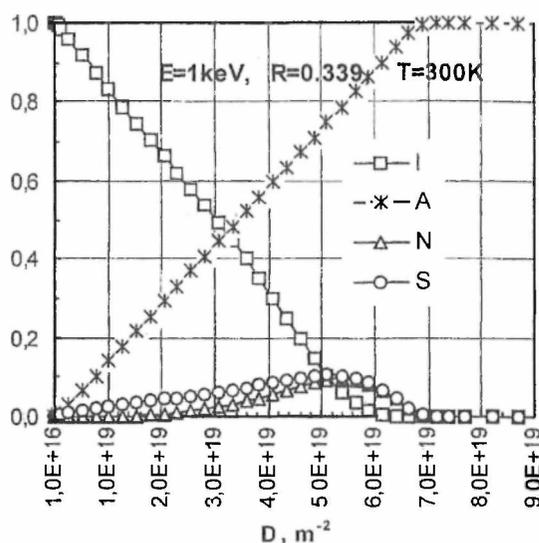


Рис. 1. Зависимость I, A, N и S от дозы облучения D при $E=1 \text{ кэВ}$, $T=300 \text{ К}$, $J=5 \times 10^{18} \text{ м}^{-2} \text{ с}^{-1}$

На рис.2 приведены результаты расчетов для температуры 500К, при которой проявляются процессы, поддерживаемые диффузией [8].

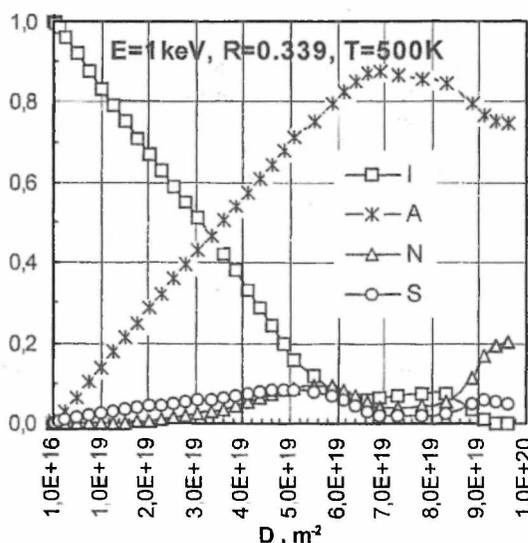


Рис. 2. Зависимость I, A, N и S от дозы облучения D при $E=1 \text{ кэВ}$, $T=500 \text{ К}$, $J=5 \times 10^{18} \text{ м}^{-2} \text{ с}^{-1}$

Как видно из рисунка, при величине дозы $D=8.5 \times 10^{19} \text{ м}^{-2}$ в аморфном слое начинает развиваться фаза НКК. Впрочем, ее вероятность достигает лишь величины 0.2.

Увеличение энергии облучения до 3кэВ (рис.3) приводит к существенному изменению в соотношении фаз в имплантируемом слое. Это соотношение изменяется в пользу фазы НКК.

Зависимости I, A, S и N от дозы для других комбинаций ведут себя в основном так же, как и аналогичные зависимости, приведенные для $B \rightarrow Ni$.

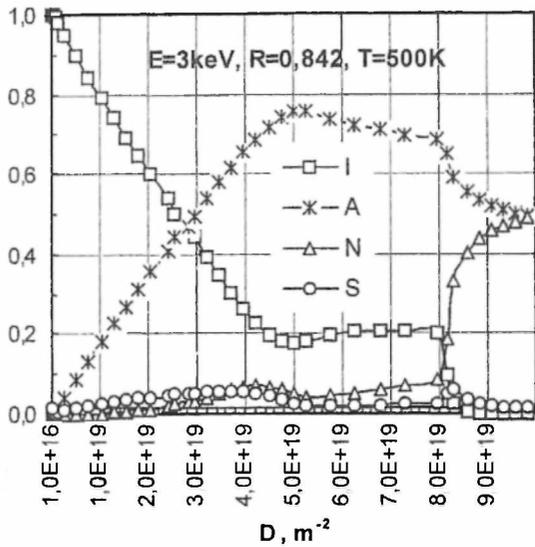


Рис. 3. Зависимость I, A, N и S от дозы облучения D при $E=3\text{keV}, T=500\text{K}, J=5 \times 10^{18} \text{ м}^{-2}\text{с}^{-1}$

Отличие проявляется в том, что точки характерных перегибов кривых для рассмотренных комбинаций наблюдаются при различных дозах. Величины I, A, S, N в этих точках имеют разные значения. Этот факт можно объяснить различием динамических характеристик для этих комбинаций (коэффициент распыления R , число смещенных атомов на один падающий ион и т.д.).

Нами также проведены расчеты для неизотермического облучения. Такая ситуация может реализоваться в экспериментах в случае плохого теплоотвода от облучаемого образца. Наши расчеты показывают, что последствия ионного облучения, будучи зависимыми от интенсивности облучения и теплофизических свойств системы образец-держатель образца, в первую очередь определяются скоростью нарастания температуры.

Приведенные результаты получены для одной комбинации ($B \rightarrow Ni$). Однако необходимо отметить следующее: во время имплантации во всех материалах протекают одинаковые процессы (разупорядочение и кристаллизация); вероятности этих процессов подчиняются одним и тем же законам, они определяются спецификой конкретной комбинации ион-мишень и условиями облучения. В рассматриваемой модели все эти особенности учитываются. Это означает, что модель может быть использована для других комбинаций. Конечно, численные значения требуют экс-

периментального уточнения, но характер зависимостей, по крайней мере качественно, должен правильно отражать реальную ситуацию.

Таким образом, задав параметры комбинации ион-мишень и условия облучения можно прогнозировать физическое состояние имплантируемого слоя при различных значениях дозы.

5. Заключение

Рассматриваемая модель позволяет рассчитывать соотношение между различными фазами в имплантированном слое при выбранных условиях облучения, либо решать обратную задачу - определить условия облучения, требуемые для получения заданного соотношения фаз в поверхностном слое облучаемого материала. Модель позволяет также исследовать динамику структурных превращений во время неизотермического облучения. Следует отметить, что модель приводит к приемлемым результатам в широкой области изменения значений J, D и T . Кроме того, подходы, лежащие в основе модели, дают возможность дальнейшей ее детализации. Например, учесть возникновение твердого раствора внедрения или замещения и т.д.

В модели учитываются такие параметры обработки, как энергия иона, интенсивность, доза и температура облучения. Эти параметры могут быть легко связаны с технологическими параметрами различных способов имплантационной обработки материалов. Это могут быть давление и степень ионизации газа, ускоряющий потенциал обрабатываемой детали и время обработки.

Результаты наших модельных расчетов могут быть использованы для планирования физических экспериментов.

Список литературы

1. Dearmaley G., Freeman J.H., Nelsen R.S. Ion Implantation. - Amsterdam: North-Holland, 1973.
3. Руссел X., Рузе И. Ионная имплантация. - М.: Наука, 1983. - 360 с.
3. Комаров Ф.Ф. Ионная имплантация в металлы. - М.: Металлургия, 1990.
4. Николис Г., Пригожин И. Самоорганизация в неравновесных системах. - М.: Мир, 1979. - 512 с.
5. Kiselevskii L.I., Lyapin A.I., Pivovarov V.Y. // ICPIG XIX. - Belgrad, 1989. - P.104-105.
6. Ляпин А.И., Егоров А.Г. // Деп. ВИНТИ №3598-B92.
7. Katkalo A.A., Lyapin A.I. // ICPIG XXIII. - Toulouse, 1997. - 4, P.234-235.
8. Johnson W.L., Cheng Y.T., Van Rosum M. // Nucl. Instrum. and Methods Phys.Res. - 1985. - D7/8. P. 657-665.

MODELLING OF STRUCTURAL CONVERSIONS IN SURFACE LAYER OF MATERIAL DURING IMPLANTATION TREATMENT

A.I.Lyapin

*The Mogilev Mechanical Engineering Institute, Lenin St 70, MMI, 212005, Mogilev,
Belarus, e-mail: lyapin@mimi.mogilev.unibel.by*

The aim of this paper is to investigate the dynamics of the ion-stimulated structural conversions in the implanted layer during implantation treatment. The model and the results of the model calculation are considered in this article. The model is a system of non-linear differential equations. This equations system is obtained on the basis of synergetic approaches. Such basic processes as amorphization, formation of solid solution, crystallisation and sputtering are taken into account in the model. Each of these processes in the given model is presented in the manner of their probability. These probabilities are calculated as functions of the changing parameters of implantation treatment. The considered model permits to calculate the ratio between various phases in an implanted layer under chosen irradiation conditions, or to determine conditions required for obtaining the given phase ratio in the irradiated layer. The model also permits to investigate the dynamics of the structural conversions during nonisothermal irradiation. Some results of calculation of the probabilities of occurrence of the initial crystal phase, amorphous phase, intermediate phase and new crystal phase are presented on drawings. The results obtained do not contradict the experimental data.

It must be noted that although the results for one (B→Ni) combination are given, model possibilities allow the calculation to be carried out for any combination. Moreover, the calculations are not bound up with some definite way of treatment and, therefore, may be applied in different cases when the surface treatment occurs with bombardment by particles of keV energies. Such parameters of processing as the ion energy, intensity, dose and temperature of irradiation are taken into consideration in the model. These parameters can be easily connected with the technological parameters of different ways of the implantation treatment of materials. These can be the pressure and the ionising degree of gas, the accelerating potential of the part being processed and the time of processing.