

УДК 621.914.2:669

В.И. Ходырев, д-р техн. наук, проф., В.М. Шеменков, А.Ф. Короткевич

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА МОДИФИКАЦИИ ТВЕРДЫХ СПЛАВОВ ПОТОКОМ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

В статье 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.

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» разработан способ модификации твердосплавного инструмента потоком ионов в плазме тлеющего разряда. 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 [1]. Изменение свойств поверхностных слоев происходит вследствие взаимодействия с ним бомбардирующих ионов [2].

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 [3].

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.

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 [4].

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 двух 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:

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

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

Согласно рис.1 θ_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.

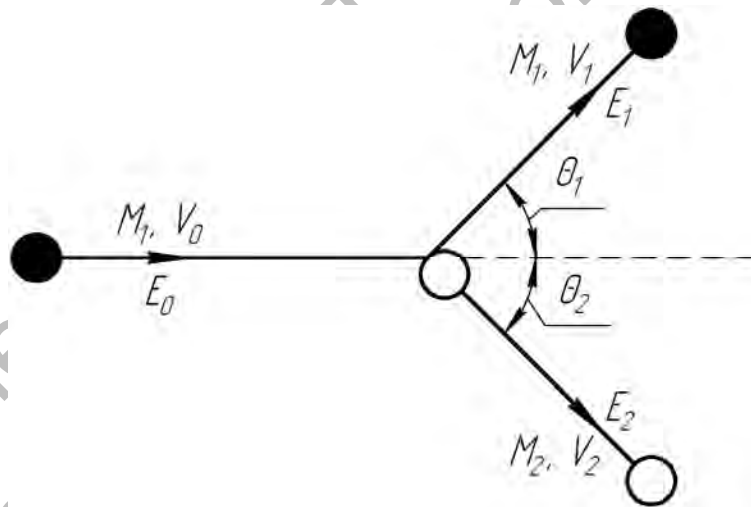


Рис. 1. Схема парного столкновения

На основе законов сохранения энергии (1) и импульса (2) можно определить углы $\theta_{1,2}$ в лабораторной системе координат после столкновения:

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

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

где $A = M_2/M_1$.

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):

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

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

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

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

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 представляют 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 Ea , которую необходимо передать атому, чтобы он перешел в междоузлие и возник дефект. Эта энергия должна превышать энергию связи атома в кристаллической решетке или молекуле Ed . 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 Ns . 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

$$Nd \approx 0,4 \frac{Ns \cdot Sn(E)}{Ed}. \quad (11)$$

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

Если энергия смещенного атома Ea превышает Ed , 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 $Ea = 2Ed$, и полное их число будет равно $\nu(E) = Ea/2Ed$.

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 A нм, где параметр A 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 потока 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 $Br(T)$, учитывающий вышеуказанные процессы.

Тогда выражение для определения предела прочности на сдвиг примет вид:

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

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; $Br(T)$, $B(T)$ – 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.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Ходырев, В. И.** Прогрессивные электрофизические методы упрочнения твердосплавного инструмента / В. И. Ходырев, А. Ф. Короткевич, В. М. Шеменков // Вестн. МГТУ. - 2002. - № 2. - С. 159–163.
2. Применение низкоэнергетического воздействия на материалы с целью формирования их свойств / В. И. Ходырев [и др.] // Современные направления развития производственных технологий и робототехника: материалы междунар. науч.-техн. конф. – Могилев : ММИ, 1999. – С. 158.
3. Процессы плазменного нанесения покрытий: теория и практика / А. Ф. Ильющенко [и др.] ; под общ. ред. акад. НАН Беларуси А. П. Достанко, П. А. Витязя. – Мн. : Науч. центр исслед. политики и бизнеса “Артемида – Маркетинг, Менеджмент”, 1999. – 544 с. : ил.
4. **Экштайн, В.** Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твёрдого тела / В. Экштайн. - М. : Мир, 1995. - 321 с. : ил.

Белорусско-Российский университет
Материал поступил 02.11.2005

V.I. Khodyrev, V.M. Shemenkov, A.P. Korotkevich
Simulation of process of modification of firm
alloy by a stream of the charged particles
Belarusian-Russian University

In a paper the questions connected to improvement of technique of ionic - plasma hardening are analysed. The decision of the given problem with the help of simulation is offered. General provisions of model of pair collisions and the physical phenomena underlying the given model are reduced.