

Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский Томский
политехнический университет»

На правах рукописи



Чан Ми Ким Ан

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ И ВОЗДЕЙСТВИЯ
КОНЦЕНТРИРОВАННЫХ ПОТОКОВ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ НА
МЕТАЛЛЫ**

01.04.20 – Физика пучков заряженных частиц и ускорительная техника

Диссертация на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук
Коваль Тамара Васильевна

Томск – 2019

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	4
ГЛАВА 1. НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ВЫСОКОИНТЕНСИВНЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ И ИОННЫЕ ПУЧКИ.....	11
1.1. Экспериментальные источники низкоэнергетических высокоинтенсивных электронных и ионных пучков	12
1.1.1. Электронный источник с плазменным катодом	12
1.1.2. Экспериментальные измерения температуры поверхности при импульсном высокоскоростном электронно-пучковом воздействии	14
1.1.3. Ионный источник с плазменно-иммерсионным формированием.....	17
1.1.4. Экспериментальное исследование азотирования материала высокоинтенсивным сфокусированным ионным пучком	20
1.2. Математическое моделирование формирования электронных и ионных пучков.....	24
1.3. Математическое моделирование взаимодействия электронных и ионных пучков с материалами.....	29
1.3.1. Моделирование тепловых процессов.....	29
1.3.2. Моделирование азотирования.....	32
1.4. Выводы по главе 1	35
ГЛАВА 2. ИССЛЕДОВАНИЕ ПЛАЗМЕННО-ИММЕРСИОННОГО ФОРМИРОВАНИЯ ИОННЫХ ПУЧКОВ С БАЛЛИСТИЧЕСКОЙ ФОКУСИРОВКОЙ.....	37
2.1. Формирование слоя разделения заряда.....	37
2.2. Аналитическая модель формирования низкоэнергетического сфокусированного ионного пучка	42
2.3. Численное исследование транспортировки ионного пучка с баллистической фокусировкой (метод макрочастиц)	44
2.4. Транспортировка ионного пучка в узком пространстве дрейфа	52
2.5. Аналитические оценки.....	53
2.6. Выводы по главе 2	55
ГЛАВА 3. МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФфуЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ ПРИ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОМ ПЛАЗМЕННО-ПУЧКОВОМ ВОЗДЕЙСТВИИ НА МЕТАЛЛЫ.....	57
3.1. Моделирование диффузии в многофазном твердом теле	58

3.2. Формирование ионно-модифицированных слоев при азотировании стали 40Х высокоинтенсивным ионным пучком	61
3.2.1 Формирование ионно-модифицированных слоев железа высокоинтенсивным ионным пучком.....	63
3.2.2 Плазменное азотирование стали.....	66
3.2.3 Формирование ионно-модифицированных слоев стали 40Х при низкоэнергетической импульсной имплантации азота.....	68
3.3. Выводы по главе 3	75
ГЛАВА 4. ИССЛЕДОВАНИЕ НАГРЕВА МЕТАЛЛОВ В ИМПУЛЬСЕ ВЫСОКОСКОРОСТНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА	77
4.1. Моделирование импульсного высокоскоростного воздействия низкоэнергетического электронного пучка на металлические материалы.....	78
4.2. Высокоскоростной нагрев алюминиевого и титанового образцов.....	81
4.3. Высокоскоростной нагрев алюминия с титановым покрытием.....	87
4.4. Выводы по главе 4.....	90
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	91
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	93
Приложение А. Теплофизические параметры алюминия и титана	105
Приложение Б. Иллюстрация теплофизических параметров алюминия и титана по разным подходам включения фазового перехода в расчетах.....	106
Приложение В. Теплофизические параметры использованных материалов.....	107

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность работы. Прогресс в разработке и развитии технологии модификации поверхностных слоев металлов и сплавов, определяет одно из направлений будущего развития науки и промышленности, и во многом связывается с эффективными методами воздействия концентрированных потоков энергии (КПЭ) на вещество. Плазма и КПЭ (газовое пламя, электрическая дуга, пучок электронов, поток ионов и поток плазмы и др.) представляют собой универсальный технологический инструмент, достоинствами которого являются высокая интенсивность, непосредственное воздействие источника энергии на зону образцов, ограниченная (локализованная) зона воздействия, быстрота, эффективность, производительность и экологически чистое влияние по сравнению с традиционными видами механической и химико-термической обработки. К отраслям, которые используют технологии, основанные на применении КПЭ, относятся микроэлектроника, автомобильная, аэрокосмическая, приборостроительная, инструментальная промышленность, машиностроение и т.д. [1-7].

Для целей легирования среди различных способов обработки КПЭ вызывает интерес плазменные способы, позволяющие проводить обработку больших площадей (сотни квадратных сантиметров) за один импульс. Эффект дальнего действия и сверхглубокого проникновения примеси (несколько сотен микрометров) обуславливает интерес к методам ионно-пучкового воздействия, среди которых плазменно-иммерсионная имплантация является наиболее привлекательной. Импульсная электронно-пучковая обработка позволяет формировать в зоне оплавления закалочные структуры (благодаря предельным градиентам температуры 10^7 - 10^8 К/м). Следующим шагом повышения эффективности модификации структуры и свойств материала являются электронно-ионно-плазменные методы, сочетающие воздействие на поверхность плазменных потоков, ускоренных ионных и электронных пучков [5-7].

В Институте сильноточной электроники СО РАН (ИСЭ СО РАН) разрабатываются плазменные источники с накалированными и полыми катодами, электронные источники со взрывоэмиссионным и плазменным катодами [8-10], в Научной лаборатории высокоинтенсивной имплантации ионов Национально-исследовательского Томского политехнического университета (НЛ ВИИ НИ ТПУ) разрабатывается низкоэнергетический импульсно-периодический источник с плазменно-иммерсионным формированием и баллистической фокусировкой ионного пучка [11,12]. Характеристики этих источников позволяют эффективно их использовать для целенаправленного изменения свойств поверхностных слоев материалов и изделий. Несмотря на существующее множество экспериментальных и теоретических работ, из-за сложности и многообразия процессов, протекающих при формировании пучков заряженных частиц и воздействия их на материалы, требуются дальнейшие исследования для определения устойчивых режимов работы этих источников и, соответственно, оптимальных параметров воздействия потоков энергии на поверхность материалов и изделий.

Тематика диссертационной работы, направленная на теоретическое исследование и численное моделирование процессов плазменно-иммерсионного формирования и транспортировки сфокусированного ионного пучка, закономерностей воздействия высокоинтенсивных (с плотностью тока до 0.5 А/см^2) низкоэнергетических (1-3 кэВ) ионных пучков металлов и газов, нагрева мишени в импульсе (50-200 мкс) высокоскоростного воздействия низкоэнергетического (10-30 кэВ) интенсивного электронного пучка (с плотностью энергии 8-30 Дж/см²) является актуальной для решения вопроса управления ионно- и электронно-пучковой обработкой, обуславливающего дальнейшее развитие технологий по улучшению эксплуатационных свойств материалов и изделий.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российским научным фондом, грант 17-19-01169.

Цель диссертационной работы – теоретическое исследование с применением численного моделирования, сравнение с экспериментами и

определение основных закономерностей процессов плазменно-иммерсионного формирования и транспортировки сфокусированного ионного пучка, воздействия на металлы интенсивных ионных и электронных низкоэнергетических пучков.

Основные задачи исследований:

1. Математическое моделирование плазменно-иммерсионного формирования и транспортировки высокоинтенсивных низкоэнергетических ионных пучков с баллистической фокусировкой.

2. Построение математической модели формирования ионно-модифицированных слоев металла с учетом распыления поверхности ионами пучка и исследование закономерностей модификации металла стали 40Х высокоинтенсивными пучками ионов низкой энергии.

3. Численное исследование высокоскоростного воздействия на металлические образцы низкоэнергетического интенсивного электронного пучка

Предмет исследования – математическое моделирование формирования высокоинтенсивных низкоэнергетических пучков заряженных частиц (ионов и электронов), тепловые и диффузионно-кинетические процессы в приповерхностных слоях металлов при пучковом воздействии.

Научная новизна работы:

1. Теоретически с применением численного моделирования проведено исследование плазменно-иммерсионного формирования и транспортировки сфокусированных высокоинтенсивных (до 500 мА/см^2) ионных пучков и подтверждены наблюдаемые в эксперименте основные закономерности; показано, что ограничение ионного тока на коллекторе обусловлено формированием виртуального анода в пространстве транспортировки пучка, одним из механизмов компенсации пространственного заряда которого является ионно-электронная эмиссия с поверхности электродов.

2. Построена диффузионная модель многофазного твердого тела с учетом распыления поверхности ионами пучка и проведено исследование влияния плотности тока ($0.01 \dots 0.5 \text{ А/см}^2$) низкоэнергетических ($1 \dots 3 \text{ кэВ}$) ионов азота на формирование ионно-модифицированных слоев стали 40Х.

3. Проведено численное исследование высокоскоростного (50...200 мкс) электронно-пучкового воздействия с плотностью энергии 8...20 Дж/см² на поверхность металлических образцов (алюминий, титан, алюминий с титановым покрытием) и показано влияние динамики радиального распределения плотности тока электронного пучка в источнике с плазменным катодом СОЛО на скорость нагрева поверхности образцов.

Практическая значимость работы. Результаты моделирования, полученные в диссертационной работе, применялись для анализа экспериментальных результатов по электронно-пучковому (ИСЭ СО РАН) и ионно-пучковому (НЛ ВИИ НИ ТПУ) воздействию на металлы и могут быть использованы при оптимизации и управлении режимами плазменной, ионно- и электронно-пучковой обработки материалов для образования модифицированных слоев с заданными свойствами.

Положения, выносимые на защиту:

1. Численным моделированием показано, что в источнике с плазменно-иммерсионным формированием пучка геометрия пространства дрейфа, параметры плазмы, амплитуда и частота отрицательного потенциала смещения определяют условия компенсации пространственного заряда фокусируемого пучка и динамику заряженных частиц (плазмы и пучка) в пространстве транспортировки пучка. Ограничение тока ионного пучка на коллектор, а также спонтанное укорочение длительности импульсов тока ионного пучка, обусловлено формированием виртуального анода, одним из механизмов, компенсации пространственного заряда которого является ионно-электронная эмиссия с поверхности электродов.

2. С применением математической модели, построенной в терминах параметров азотирования и описывающей взаимосвязанный рост нитридных ($\text{Fe}_2\text{-}_3\text{N}$) ϵ - и (Fe_4N) γ' -слоев, получено, что конкуренция скоростей распыления поверхности и радиационно-стимулированной диффузии при воздействии на сталь 40Х импульсно-периодического пучка ионов азота (с энергией ионов 1.2 кэВ при плотности ионного тока $j = 50\ldots 500$ мА/см²) определяет

экспериментальные профили распределения примеси азота по глубине, максимальную глубину (180 мкм) при $j = 300 \text{ мА/см}^2$ и формирование приповерхностного γ' слоя, ответственного за эффект упрочнения поверхности.

3. Численно получено, что скорость нагрева поверхности мишени при воздействии энергии ($8...20 \text{ Дж/см}^2$, $\tau = 50...200 \text{ мкс}$) электронного пучка определяется основными характеристиками пучка на мишени и динамикой радиального распределения плотности тока пучка (обусловленной процессами формирования и транспортировки электронного пучка в источнике с плазменным катодом СОЛО); сравнение с экспериментами показывает, что процессы, связанные взаимодействием интенсивного пучка с расплавленным алюминием (при энергии пучка $E > 15 \text{ Дж/см}^2$), влияют не только на конфигурацию импульса тока пучка, но и на измерения температуры поверхностного слоя.

Апробация результатов. Основные результаты, полученные в диссертационной работе, докладывались и обсуждались на научных семинарах кафедры прикладной математики ИК ТПУ и доложены на:

- III Международной научной конференции «Информационные технологии в науке, управлении, социальной сфере и медицине» 23-26 мая 2016 г., Томск;
- XIV Международной научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Молодежь и современные информационные технологии», 7-11 ноября 2016 г., г. Томск;
- 13th International Conference on Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows, 2-7 октября, 2016, г. Томск;
- XII International Conference Radiation-Thermal Effects and Processes in Inorganic Materials, 4 - 12 September 2016, Tomsk, Russia;
- 12-й Международной конференции «Взаимодействие излучений с твердым телом (ВИТТ - 2017)», 19-22 сентября 2017 г., Минск;
- Всероссийской (с международным участием) конференции «Физика низкотемпературной плазмы» ICPLTP 2017, 5 – 9 июня 2017 г., Казань;

- VI международном Крейнделевском семинаре «Плазменная эмиссионная электроника». 3–8 августа 2018 г., Улан-Удэ;
- 14th International Conference on Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows, September 16–22, 2018, in Tomsk, Russia;
- 20th International Symposium on High-Current Electronics, September 16–22, 2018, in Tomsk, Russia.

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в 20 печатных работах, из которых 6 статей, индексируемых международными базами данных (Web of Science, Scopus и др.), 1 статья в отечественном рецензируемом журнале, входящих в перечень ВАК РФ, и 8 полнотекстовых докладов в трудах международных и всероссийских конференций и симпозиумов.

Достоверность. Результаты диссертационной работы подтверждаются удовлетворительным совпадением результатов расчетов с экспериментальными данными и систематическим характером исследований.

Личный вклад автора – проведение аналитических оценок и численных расчетов, сравнительные анализы экспериментальных и теоретических результатов, формулирование научной новизны, защищаемых положений и выводов.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения и 3 приложений. Объем диссертации составляет 104 страницы, включая 54 рисунка, 1 таблицу и список литературы из 100 наименований.

Краткое содержание диссертационной работы

Во введении обоснованы актуальность, цель, основные задачи, предмет исследования и практическая значимость диссертационной работы. Излагается краткое содержание диссертационной работы, формулируются научная новизна и выносимые на защиту научные положения.

В первой главе приведены характеристики электронного источника, методика и результаты измерения температуры поверхности металлических мишеней в импульсе высокоскоростного воздействия низкоэнергетического электронного пучка; приведены характеристики ионного источника с плазменно-

иммерсионным формированием пучка и результаты эксперимента по азотированию стали 40Х; проводится описание математических моделей формирования пучков заряженных частиц, взаимодействия ионных и электронных пучков с материалами.

Во второй главе численно с применением метода крупных частиц (КАРАТ) подтверждаются результаты эксперимента, показывающего возможность плазменно-иммерсионного формирования и транспортировки высокоинтенсивного ионного пучка с баллистической фокусировкой, определяются условия формирования виртуального анода и устойчивой транспортировки ионного пучка.

В третьей главе изложено построение математической модели диффузии в многофазном твердом теле с учетом распыления поверхности ионами пучка, исследуются закономерности формирования ионно-модифицированных слоев при воздействии высокоинтенсивного импульсно-периодического пучка ионов азота на сталь 40Х, проведено сравнение результатов моделирования с результатами экспериментов.

В четвертой главе с применением численного моделирования проводится исследование высокоскоростного воздействия в импульсе низкоэнергетического интенсивного электронного пучка на мишени (алюминий, титан, алюминий с титановым покрытием), проведено сравнение с экспериментальными измерениями температуры.

В заключении сформулированы основные результаты, полученные в диссертационной работе.

ГЛАВА 1. НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ВЫСОКОИНТЕНСИВНЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ И ИОННЫЕ ПУЧКИ

В настоящее время развиваются направления модификации поверхностных свойств материалов с использованием воздействия на них пучками различных видов излучения, под действием которого в поверхностных слоях твердых тел происходят различные изменения: фазовые, структурные, физические, механические, химические и т.д. Среди высококонцентрированных источников энергии наиболее распространены электронно-лучевая и плазменная технологии. Выбор метода модификации определяется конкретными задачами и возможностями их решения.

Низкоэнергетические (до десятков кэВ) интенсивные (0.1...30 кА) микросекундные и субмиллисекундные электронные пучки с высокой плотностью энергии (1...100) Дж/см² позволяют регулировать в широком интервале энергию их заряженных частиц, глубину их проникновения в металл, характеристики и динамику полей температур и напряжений. Сверхвысокие скорости нагрева (10⁸...10¹⁰ К/с) до температуры и последующего охлаждения тонкого приповерхностного слоя (10⁻⁷...10⁻⁶ м), формирование предельных градиентов температуры (до 10⁷...10⁸ К/м) создают условия для образования в приповерхностном слое аморфной, нано- и субмикроструктурной структуры [9]. Методика измерения импульсной температуры и с использованием численного моделирования тепловых полей в образце открывает возможность управления основными технологическими параметрами электронно-пучкового воздействия с целью получения заранее заданных свойств поверхности материалов [13-17].

Облучение пучками низкоэнергетических ионов (1-3 кэВ) и ионно-плазменная обработка позволяют получать сверхстойкие покрытия металлических поверхностей. Сильноточная имплантация ионов азота низкой энергии имеет приоритетное значение для реализации механизма, ответственного за формирования глубоких азотосодержащих слоев [1,3,4]. Разработка ионного

источника [11,12] с подобными характеристиками позволяет провести комплекс исследований закономерностей формирования ионного пучка [18,19] и определение механизмов массопереноса примеси при высокоинтенсивной имплантации ионов низкой энергии, а также изучить особенности и закономерности изменения элементного состава.

Теоретические методы исследований, в том числе моделирование является эффективным средством для установления закономерностей физических процессов и связи с его технологическими параметрами.

1.1. Экспериментальные источники низкоэнергетических высокоинтенсивных электронных и ионных пучков

1.1.1. Электронный источник с плазменным катодом

Импульсная электронно-пучковая установка «СОЛО» [20], разработанная и изготовленная в Институте сильноточной электроники СО РАН, используется для модификации поверхности различных материалов и изделий. В ее основе лежит электронный источник с плазменным катодом на основе импульсного дугового разряда низкого давления. Воздействие импульсного электронного пучка на поверхность металлического материала позволяет достигать скоростей нагрева поверхностного слоя – 10^8 К/с, охлаждения – $10^6...10^7$ К/с, что ведет к выглаживанию поверхности, импульсной закалке из расплавленного состояния и, как следствие, к существенному улучшению физико-химических и эксплуатационных свойств материалов и изделий в целом. Основные параметры источника «СОЛО» показаны в таблице 1.1 и его принципиальная схема отражена на рисунке 1.1.

Описания структуры и принципов работы и также управления электронного источника «СОЛО» представлены в работах [20,21,24].

Таб. 1.1. Основные параметры электронного источника «СОЛО»

Ток разряда, А	20 – 500
Энергия электронов, кэВ	5 – 25
Длительность импульса, мкс	20 – 500
Частота следования импульсов, Гц	0.3 – 20
Рабочее давление, Па	0.01 – 1
Плотность энергии в импульсе, Дж/см ²	До 100
Максимальная мощность, кВт	2.5 – 10
Рабочий газ	Аргон, гелий, азот
Диаметр пучка, см	1 – 3

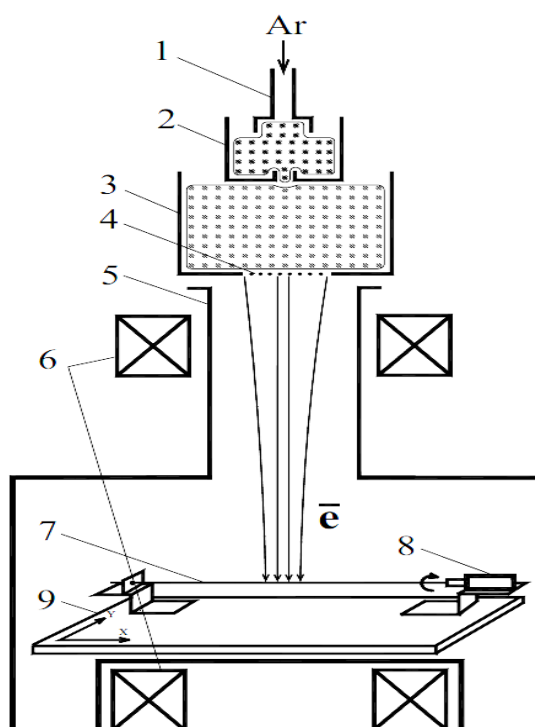


Рис. 1.1. Схема эксперимента установки «СОЛО».

1 – полый анод поджигающего разряда; 2 – полый катод; 3 – полый анод основного разряда; 4 – эмитсионная сетка; 5 – труба дрейфа; 6 – катушки магнитного поля; 7 – обрабатываемая спица; 8 – электродвигатель, вращающий спицу; 9 – двухкоординатный манипулятор [24]

Характерной особенностью электронного источника с плазменным катодом и сеточной стабилизацией границы эмитсионной плазмы является режим

существенного (до 2х раз) увеличения тока эмиссии, обусловленного вторичной ионно-электронной эмиссией с поверхности сеточного электрода [22,23,25,26]. Извлекаемый из плазменного катода электронный пучок в неоднородном магнитном поле транспортируется в трубе дрейфа до коллектора, установленного на расстоянии 250...500 мм от сеточного электрода (рисунок 1.1). При этом плазма в трубе дрейфа нарабатывается самим пучком.

На рисунке 1.2 показаны характерные осциллограммы токов разряда, в ускоряющем промежутке, на коллекторе и на трубе дрейфа.



Рис. 1.2. Осциллограммы токов.

Ток разряда (1); ток в ускоряющем промежутке (2); ток на коллектор (3); ток на трубу дрейфа (4); $p = 4 \dots 10^{-2}$ Па; $U_{\text{уск}} = 15$ кВ, масштаб: 100 А/дел., 25 мкс/дел.; магнитное поле $B_z = 30$ мТл [27]

1.1.2. Экспериментальные измерения температуры поверхности при импульсном высокоскоростном электронно-пучковом воздействии

Механические и эксплуатационные свойства материалов во многом определяются режимом электронно-пучкового воздействия, а также такими характеристиками материала, как величина максимальной температуры нагрева, термический цикл, скорости плавления и кристаллизации [28]. Поэтому измерение температуры поверхности при высокоскоростном воздействии электронного пучка [13,15,17] открывает возможности, как изучение процессов

нагрева, плавления, испарения материалов, так и управления технологическими параметрами модификации с целью получения заранее заданных свойств материалов после электронно-пучкового воздействия.

В качестве материала для импульсных температурных измерений использовались образцы из технически чистого титана ВТ1-0, алюминия А7, алюминий с титановым покрытием размерами 15×15×4 мм. Образцы фиксировались на поверхности стола-манипулятора и помещались в вакуумную камеру импульсной электронно-пучковой установки «СОЛО» (рисунок 1.1).

Для импульсного измерения температуры на поверхности образцов применялся высокоскоростной инфракрасный пирометр Kleiber KGA 740-LO, соединенный гибким волноводом с объективом LVO 25 с возможностью настройки фокусировки и расстояния до поверхности излучения [13,15,17]. На рисунке 1.3 показана схема измерения.

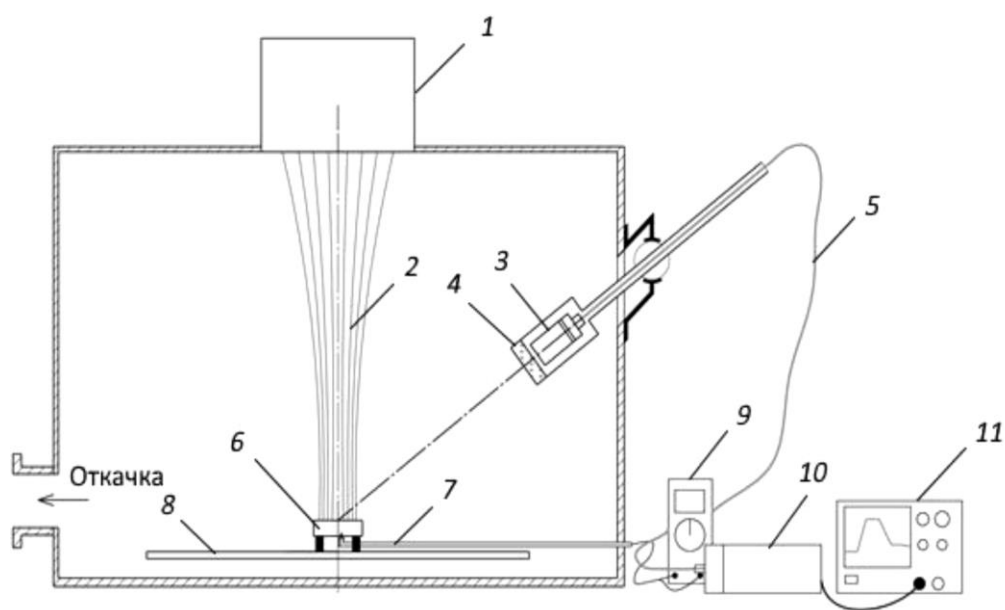


Рис. 1.3. Схема импульсного измерения температуры поверхности образца.

- 1 – электронный источник; 2 – импульсный электронный пучок; 3 – объектив;
 4 – кварцевое стекло; 5 – оптический волновод; 6 – облучаемый образец;
 7 – термопара; 8 – подвижный стол; 9 – мультиметр; 10 – высокоскоростной
 инфракрасный пирометр; 11 – осциллограф [15]

Кроме значений импульсной температуры с помощью поясов Роговского одновременно фиксировались осциллограммы токов в разрядной ячейке и ускоряющем промежутке, а также ускоряющее напряжение. Характерные импульсы тока имеют форму трапеции с фронтами 25 мкс, длительностью 100 мкс на полувывоте, при ускоряющем напряжении 13 кВ. На рисунке 1.4 показаны типичные осциллограммы токов разряда и электронного пучка и температуры поверхности образца, которая после калибровки для титанового сплава ВТ1-0 вычисляется, как $298 + 199 \cdot U$, где U – величина напряжения (2 В/дел.).

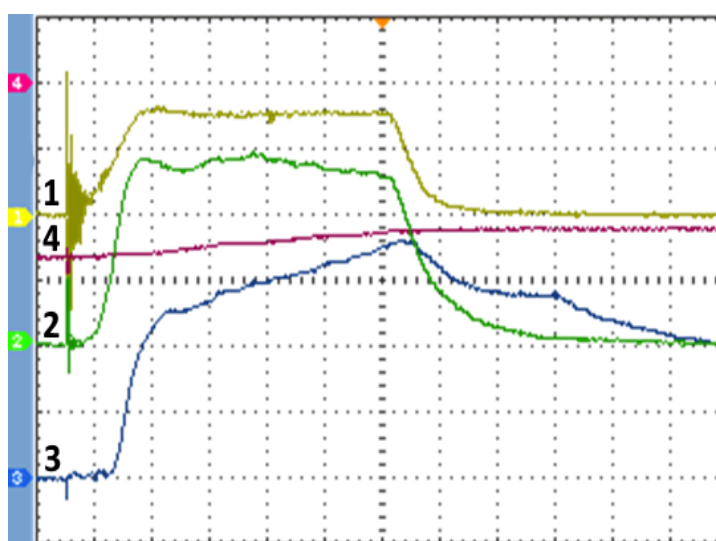
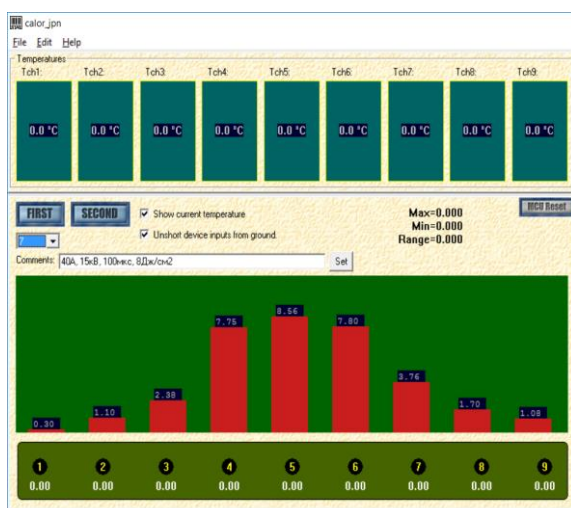


Рис. 1.4. Осциллограммы токов разряда (1) и электронного пучка (2) (40 А/дел.), ускоряющего напряжения (4) (5кВ/дел.) и температуры поверхности образца (3) (2 В/дел.) [15]

Для измерения распределения плотности энергии электронного пучка по сечению у поверхности образца использовался секционированный калориметр, состоящий из 9 линейно расположенных датчиков, соединенных с терморезисторами и системой автоматического считывания показаний с них непосредственно после импульса электронного воздействия. Распределение плотности энергии на коллекторе, снятое с помощью секционированного калориметра для 2 значений тока, показано на рисунке 1.5.



(a)



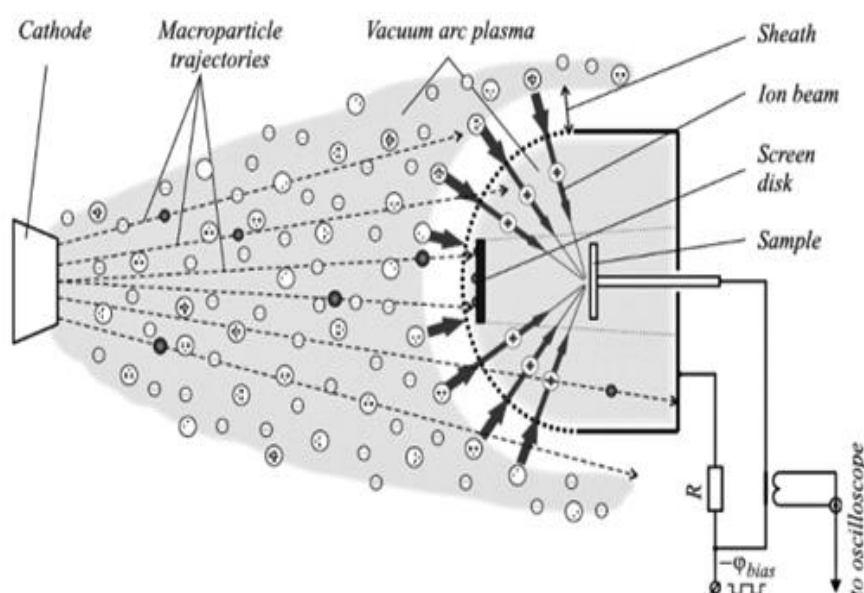
(б)

Рис.1.5. Гистограмма распределения плотности энергии по сечению электронного пучка: $E = 8 \text{ Дж/см}^2$ (a) и $E = 15 \text{ Дж/см}^2$ (б)

1.1.3. Ионный источник с плазменно-иммерсионным формированием

В работе [11] авторы впервые экспериментально показали возможность и описали новый подход к формированию интенсивных пучков ионов металлов и газов с высокой плотностью ионного тока на мишени при использовании газовой плазмы дугового источника с накалимым катодом и металлической вакуумно-дуговой плазмы. Упрощенная схема экспериментальной конфигурации представлена на рисунке 1.6.

Рис. 1.6. Схема экспериментальной установки ионного источника с плазменно-иммерсионным формированием [11]



Плазменно-иммерсионный режим извлечения ионного потока из плазмы осуществляется с помощью сеточного электрода (с размерами ячейки сетки 1.8×1.8 мм), выполненного в форме части сферы (с радиусом $R_c = 7.5$ см), электрически связанного с цилиндрическими электродами, образующими эквипотенциальное пространство для транспортировки и баллистической фокусировки ионного пучка.

Представленный ионный источник предполагает простой и низкзатратный подход к формированию импульсных и импульсно-периодических очищенных от макрочастиц пучков ионов металлов и газов с очень высокой плотностью тока. Очистка от макрочастиц осуществляется с помощью металлического диска, установленного на внутренней поверхности сеточного электрода по оси системы. Экспериментально показана возможность формирования ионных пучков со средней энергией ионов азота 2.6 кэВ и ионов титана 5.5 кэВ (с учетом зарядового состояния) с плотностью ионного тока до 1000 мА/см^2 и импульсной плотностью мощности до 2.6 кВ/см^2 при средней плотности мощности в ионном пучке более 1 кВ/см^2 [11,12].

Инжекция плазмы в область дрейфа пучка осуществляется в паузах между импульсами отрицательного смещения на сеточном электроде. Частота импульсов смещения 10^5 Гц. Длительность импульсов значительно влияет на нейтрализацию пространственного заряда ионного пучка. Необходимое время для предварительной инъекции плазмы и заполнения ею всего эквипотенциального пространства в случае непрерывного вакуумного дугового разряда оценивается по формуле [12]

$$\left(\frac{1}{f} - \tau \right) v_{dr} \geq R_c, \quad (1.1)$$

где f – частота следования импульсов, τ – длительность импульса смещения, v_{dr} – скорость расширения плазмы, R_c – радиус сеточного электрода.

На рисунке 1.7 показаны осциллограммы ионного тока алюминия при различных длительностях импульса смещения в пределах от $\tau = 2$ мкс до $\tau = 8$ мкс и максимальной амплитуде отрицательного потенциала смещения $U = 3$ кВ,

частота следования 10^5 Гц, расстояние от сетки до коллектора $L = 7.5$ см, диаметр коллектора $d = 12$ см и $d = 4$ см.

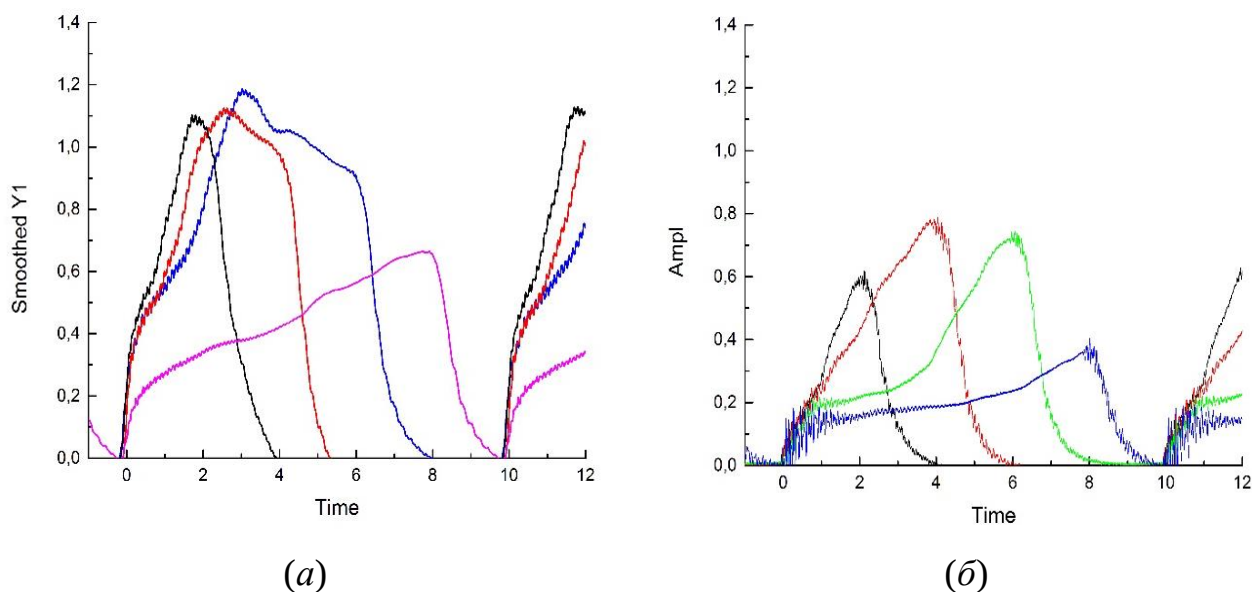


Рис. 1.7. Осциллограммы ионного тока на коллектор при различных длительностях ускоряющего напряжения, $d = 12$ см (а) и 4 см (б) [18]

С ростом длительности импульса ускоряющего напряжения наблюдается характерная для всех длительностей задержка импульса ионного тока относительно импульса смещения. Эта задержка связана с конечным временем динамического формирования высоковольтного слоя разделения зарядов вблизи сеточного электрода и временем пролета ионов пучка в пространстве дрейфа. От длительности потенциала смещения зависят также форма и максимальная амплитуда тока ионов. Максимальные амплитуды токов на коллектор диаметром 12 см для длительностей импульса $\tau = 2$ мкс, $\tau = 4$ мкс и $\tau = 6$ мкс примерно равны 1.1 А (рисунок 1.7а).

Амплитуда импульсно-периодического потенциала смещения влияет и на процессы транспортировки и фокусировки ионного потока, на форму и амплитуду токового сигнала. Распределение плотности ионного тока по сечению пучка, измеренное при разных напряжениях и фиксированной длительности импульса смещения $\tau = 4$ мкс в геометрическом фокусе системы представлены на рисунке 1.8.

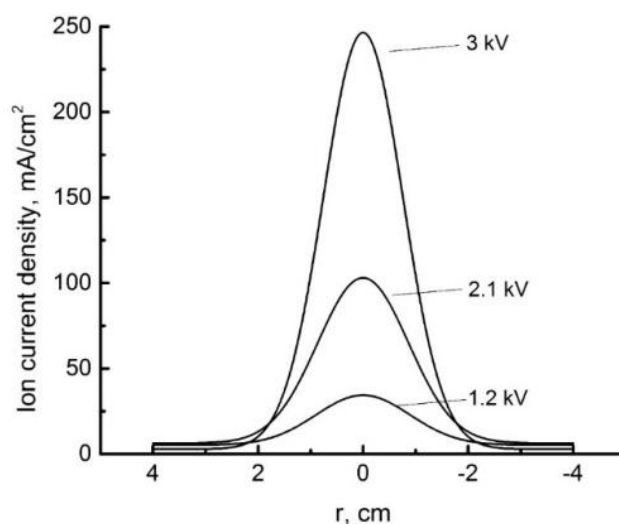


Рис. 1.8. Распределение плотности ионного тока алюминия по сечению пучка в геометрическом фокусе системы при различных потенциалах смещения и длительности импульса $\tau = 4$ мкс [18]

Экспериментально и методами численного моделирования, исследованы закономерности формирования ионных пучков с длительностью импульса от $\tau = 2$ мкс до $\tau = 8$ мкс при частоте следования импульсов $f = 10^5$ Гц из непрерывной вакуумно-дуговой плазмы алюминия, в зависимости от напряжения смещения в диапазоне от $U = 1.2$ кВ до $U = 3$ кВ [18].

1.1.4. Экспериментальное исследование азотирования материала высокоинтенсивным сфокусированным ионным пучком

Ионная имплантация азота в сталь 40Х проводилась на экспериментальной установке (рисунок 1.6) при давлении остаточной атмосферы 10^{-3} Па [29,30]. Формирование высокоинтенсивного потока ионов азота низкой энергии осуществлялось методом плазменно-иммерсионной экстракции ионов с последующей баллистической фокусировкой. Сеточный электрод устанавливался по оси системы на расстоянии 10 см от выхода генератора газоразрядной плазмы, на расстоянии 7.5 см от него устанавливались образцы для облучения. Сеточный электрод и облучаемые образцы подключались к высокочастотному импульсному генератору напряжения смещения отрицательной полярности. Амплитуда

потенциала смещения 1.2 кВ, при частоте следования импульсов 10^5 Гц и длительности импульсов 4 мкс.

Нагрев мишени осуществлялся за счет энергии ионного пучка, с помощью сменных радиаторов выбирался температурный режим в диапазоне от 450°C до 650°C. Время ионной имплантации составляло 80 мин с учетом предварительного нагрева мишени ионным пучком в течение (~ 20 мин).

Высокоинтенсивная имплантация ионов с энергией 1.2 кэВ азота характеризуется значительным ионным распылением поверхности обрабатываемой мишени. После 80 мин обработки на поверхности образца из стали 40Х сформирован кратер с максимальной глубиной в центре, максимальная глубина которого совпадает с максимумом распределения плотности тока ионного пучка (рисунок 1.9).

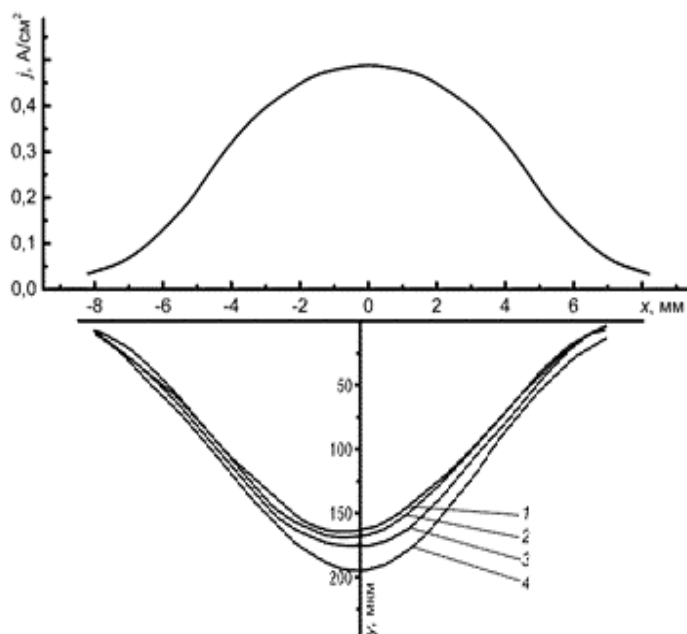


Рис. 1.9. Распределение плотности ионного тока (j) по сечению ионного пучка азота и сечение поверхности модифицированных образцов в области максимальной глубины кратера после ионного распыления при различных температурах процесса: 1 – 450°C; 2 – 500°C; 3 – 580°C; 4 – 650°C [29]

Максимальная плотность ионного тока 0.5 A/cm^2 на образце на оси симметрии пучка при ионном токе 0.6 А. Конфигурация кратера и распределение плотности тока коррелируют между собой.

Микроструктура и концентрация азота. В эксперименте [30] были измерены концентрационные профили распределения примеси азота (рисунок 1.10) в центре распыленного кратера ($r = 0$ мм) и на расстояниях $r = 2, 4, 6$ и 8 мм. Максимальная ширина азотированного слоя 180 мкм соответствует температуре 500°C и расстоянию от центра 4 мм. Плотность тока в этой области мишени ~ 0.3 А/см².

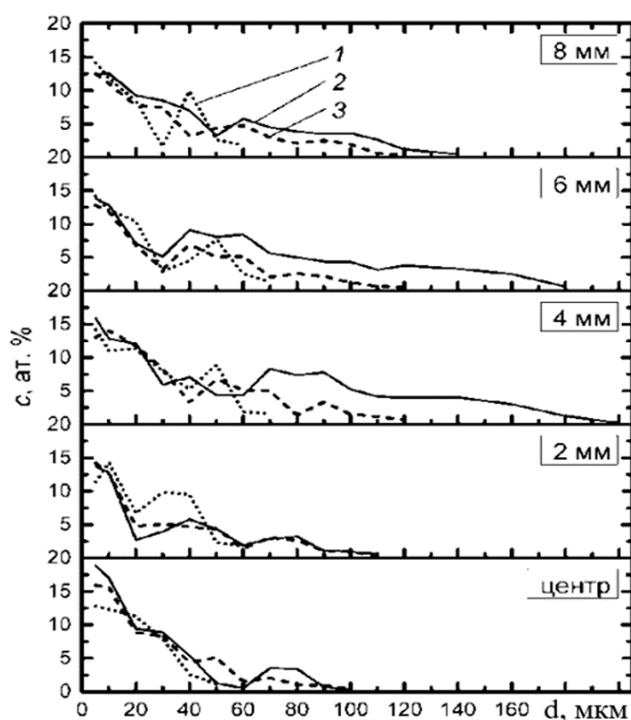
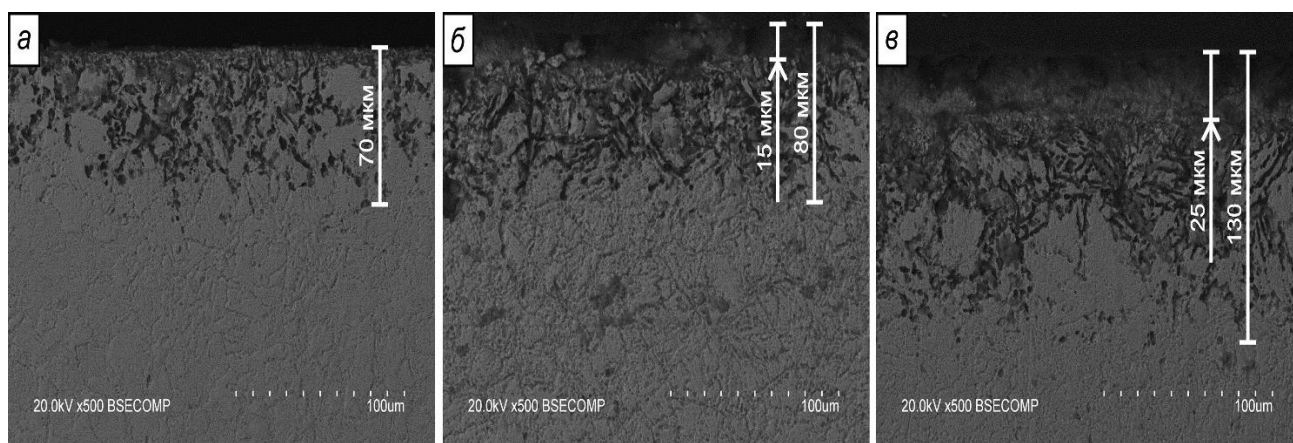


Рис 1.10. Концентрационные профили распределения примеси азота по глубине, полученные на различных расстояниях от центра кратера распыления, для образцов, модифицированных при температурах:

1 – 450°C ; 2 – 500°C ; 3 – 580°C [30]

На рисунке 1.11 представлены микрофотографии металлографических шлифов образца стали 40Х после высокоинтенсивной имплантации азота при температуре 500°C . Ширина ионно-модифицированного слоя увеличивается 70 мкм до 130 мкм при увеличении расстояния от центра от 0 до 4 мм. При дальнейшем увеличении расстояния от центра кратера ширина слоя слабо изменяется до значений примерно 120 мкм. Наблюдается двухслойная структура (рисунок 1.11), при этом сплошной слой отсутствует в центре кратера. Максимальная ширина сплошного слоя у поверхности составляет 25 мкм.



(a)

(б)

(в)

Рис. 1.11. Микрофотографии металлографических шлифов образца, модифицированного при температуре 500°C, полученные в центре (а) и на расстояниях от центра кратера: (б) – 2 мм, (в) – 4 мм [30]

Аналогичные структуры формируются в результате высокоинтенсивного ионного облучения мишени при температуре 450°C и 580°C.

На рисунке 1.12 представлена зависимость твердости от расстояния от поверхности образца азотированного слоя мишени, обработанного при температуре 450°C. Эта зависимость коррелирует с результатами исследования распределения концентрации азота по глубине (рисунк 1.10). Максимальное значение твердости 8.9 ± 0.5 ГПа наблюдается на глубине около 10 мкм в центре кратера распыления. При увеличении глубины до 50 мкм твердость уменьшается до значений 4.1 ± 0.3 ГПа и на глубине 100 мкм уже наблюдается твердость соответствующая необработанной стали 40Х 3.6 ± 0.3 ГПа [30].

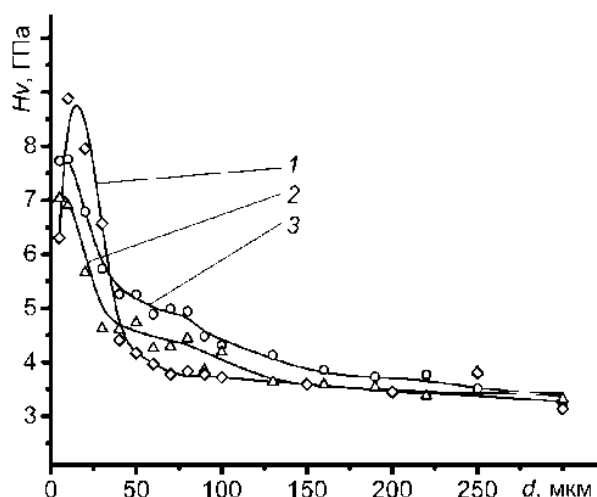


Рис. 1.12. Зависимость твердости (H_v) модифицированного слоя при температуре 450°C от глубины (d) на различных расстояниях от центра кратера распыления: 1 – 0 мм; 2 – 4 мм; 3 – 8 мм [30]

1.2. Математическое моделирование формирования электронных и ионных пучков

Математическое моделирование позволяет установить основные закономерности и механизмы процессов, протекающих в плазменных и электронных источниках. В общем случае процессы генерации плазмы описываются кинетическими и электромагнитными уравнениями, учитывающими собственные и внешние поля, реакции между частицами и сечения ионизации.

Для определения характеристик плазмы плазменного катода используются уравнения баланса ионов, непрерывности тока, баланса энергии и условие нейтральности плазмы [8].

В дрейфово-диффузионной модели газовых разрядов [31-33] транспортные коэффициенты и коэффициентов разряда зависят от функции распределения электронов по энергии и вычисляются из данных о поперечных сечениях столкновений решением электронного уравнения Больцмана

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla f - \frac{e}{m} \vec{E} \cdot \nabla_v f = C[f] \quad (1.2)$$

где f – функция распределение электронов в шестимерном фазовом пространстве, $\vec{v}$ – скоростные координаты, m – масса электрона, $\vec{E}$ – электрическое поле, ∇_v – оператор скоростного градиента, C – скорость изменения f из-за столкновений.

Закономерности процесса генерации плазмы полом катоде исследуются в работах [33-37]. С применением трехмерной дрейфово-диффузионной модели в плазменном источнике на основе полого катода исследуются характеристики разряда (концентрации, температуры и потенциала плазмы) в зависимости от давления и сорта газа, количества деталей в полости катода [38]. При плазменной обработке деталь, расположенная внутри полого катода, имеет потенциал катода. Между плазмой и деталью формируется слой пространственного заряда. Ионы плазмы, ускоренные в электрическом поле слоя, воздействуя на поверхность детали, осуществляют распыление, азотирование и нагрев детали [39].

Генерация разрядной плазмы в плазменном катоде электронного источника СОЛО (рисунок 1.1) исследуется в работе [33]. На рисунке 1.13 показано

расчетное распределение концентрации разрядной плазмы в плазменном катоде, неоднородность распределения связана с конфигурацией разрядной системы и магнитного поля. Это определяет радиальное распределение плотности тока электронного пучка, эмитируемого из плазменного катода и транспортируемого в трубе дрейфа.

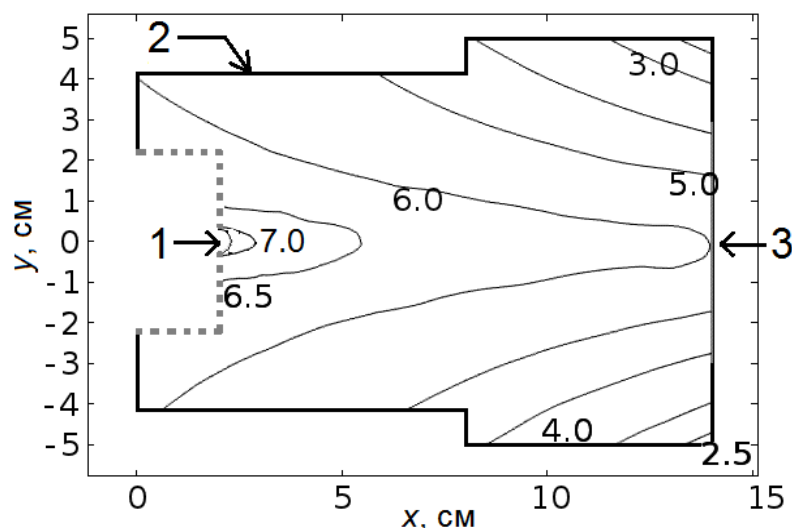


Рис. 1.13. Распределение плотности плазмы (10^{11} см^{-3}) в плазменном катоде при $I_d = 150 \text{ А}$, $p = 0.11 \text{ Па}$; 1 – катод, 2 – анод, 3 – эмиссионный сеточный электрод [33]

Неоднородность радиального распределения потенциала в плоскости эмиссионного отверстия обуславливает наличие разброса электронов тока эмиссии по скоростям и поперечной составляющей скорости. В работах [40,41] проведен расчет углового разброса электронов низкоэнергетического (10...15 кэВ) пучка формируемого в диоде с сеточным плазменным катодом, извлеченных через сетку плазменного катода. Показано, что разброс может приводить к существенным (до 40...50%) токовым потерям пучка при транспортировке его в пространстве дрейфа в слабых (3.6 мТ) магнитных полях или в отсутствие внешнего магнитного поля.

Теоретическое исследование транспортировки низкоэнергетического (10...30 кэВ) электронного пучка при низких давлениях рабочего газа ($< 1 \text{ Па}$) в трубе дрейфа с учетом нарабатываемой пучком плотности плазмы и уровня токовой нейтрализации проведено в работах [26,42-44] при построении

нестационарных моделей, учитывающих баланс частиц и токов в плазменном канале, создаваемом электронным пучком. Показано, что динамика зарядовой нейтрализация, связанная со скоростью роста тока пучка, зависит от внешнего магнитного поля, энергии электронов и давления рабочего газа.

Движение заряженных частиц во внешнем и собственном полях описывается системой уравнений [45]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \vec{u}_\alpha}{\partial t} + (\vec{u} \text{grad})_\alpha \vec{u}_\alpha = \frac{eZ_\alpha}{m_\alpha} \vec{E} + \frac{eZ_\alpha}{cm_\alpha} [\vec{u}_\alpha \times \vec{B}] \end{array} \right. \quad (1.3)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + \text{div}(\rho_\alpha \vec{u}_\alpha) = 0 \end{array} \right. \quad (1.4)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta \Phi = -4\pi(\rho_i + \rho_e + \rho_b) \end{array} \right. \quad (1.5)$$

здесь $\alpha = i, e, b$; $Z_{e,b} = -1$ – для электронов, $Z_i = 1$ для ионов, $\rho_\alpha(t, r, z)$ – плотность заряда частиц сорта α ($\rho_i > 0$, $\rho_e < 0$, $\rho_b < 0$), Φ – потенциальное поле, $\vec{E} = -\text{grad}\Phi$ – некомпенсированное поле пучка, обусловленное запаздыванием выхода частиц плазмы из области транспортировки.

В электронном источнике СОЛО (рисунок 1.1) транспортировка пучка происходит в условиях зарядовой нейтрализации во внешнем неоднородном $\{B_r, B_z\}$ и собственном B_θ магнитных полях [26,42,45]. Движение электронов пучка складывается из двух вращений на частотах, на циклотронной частоте Ω_0 и частоте колебаний электронов Ω в собственном магнитном поле. Электроны пучка в трубе дрейфа совершают вращение с высокой циклотронной частотой Ω_0 и малым радиусом вращения вокруг ведущего центра, и медленное вращение с частотой Ω вокруг оси пучка радиусом r_b [26,42].

Характерной особенностью электронного источника с плазменным катодом СОЛО является режим усиления тока эмиссии, обусловленный ионно-электронной эмиссией с поверхности эмиссионного электрода [22,40].

Ток в ускоряющей промежутке I_g определяется суммой токов: $I_g = I_e + (1+\gamma)I_i$, где I_e – ток электронов пучка (ток эмиссии из плазменного катода); I_i – обратный ток ионов на эмиссионный электрод; γ – эффективный коэффициент

ионно-электронной эмиссии. В соответствии условием непрерывности токов в системе ток в ускоряющем промежутке I_g равен сумме токов коллектора $I_c = \gamma I_i + I_o + I_e$ и на трубу дрейфа – I_{it} ; I_e – ток электронов плазмы на мишень. Коэффициент усиления $K = I_g/I_o$ зависит от параметров системы (ускоряющего напряжения, материала эмиссионного электрода, от сорта и давления газа, геометрической прозрачности эмиссионного электрода) и уменьшается с ростом тока разряда [26].

Для исследования самосогласованного движения пучков заряженных частиц в пространстве транспортировки применяется метод макрочастиц. Транспортировка низкоэнергетических (10...30 кВ) электронных пучков в плазменном канале исследовалась в работах [26,33] методом крупных частиц, реализованном в пакете КАРАТ [46]. Математическая модель состоит из уравнения Пуассона, модели крупных частиц (PIC) для ионов, плазменных и пучковых электронов, уравнений движения и законов сохранения, включая самосогласованные электрические поля, связанные с плазмой.

Метод крупных частиц (КАРАТ) [46] используется в настоящей работе при исследовании формирования электронного пучка в источнике СОЛО (рисунок 1.1) и ионного пучка в системе с баллистической фокусировкой (рисунок 1.6). Моделирование полного процесса в источнике заряженных частиц, включающего генерацию плазмы, формирование и транспортировку пучка заряженных частиц, является затруднительным из-за разных пространственных и временных масштабов (ширина слоя разделения заряда и пространство дрейфа пучка, генерация пучковой и разрядной плазмы и динамика быстрых частиц и т.п.). Поэтому изучаются отдельно процесс генерации разрядной плазмы и процесс формирования и транспортировки пучков быстрых заряженных частиц (электронов и ионов).

На рисунке 1.14 показаны траектории отдельных частиц электронного пучка энергией 13 кВ в плазменном канале источника СОЛО (рисунок 1.1) с концентрацией 10^{10} см^{-3} и током 100 А, в неоднородном ведущем магнитном поле с $B_{\max} = 500 \text{ Гс}$ (2D модель).

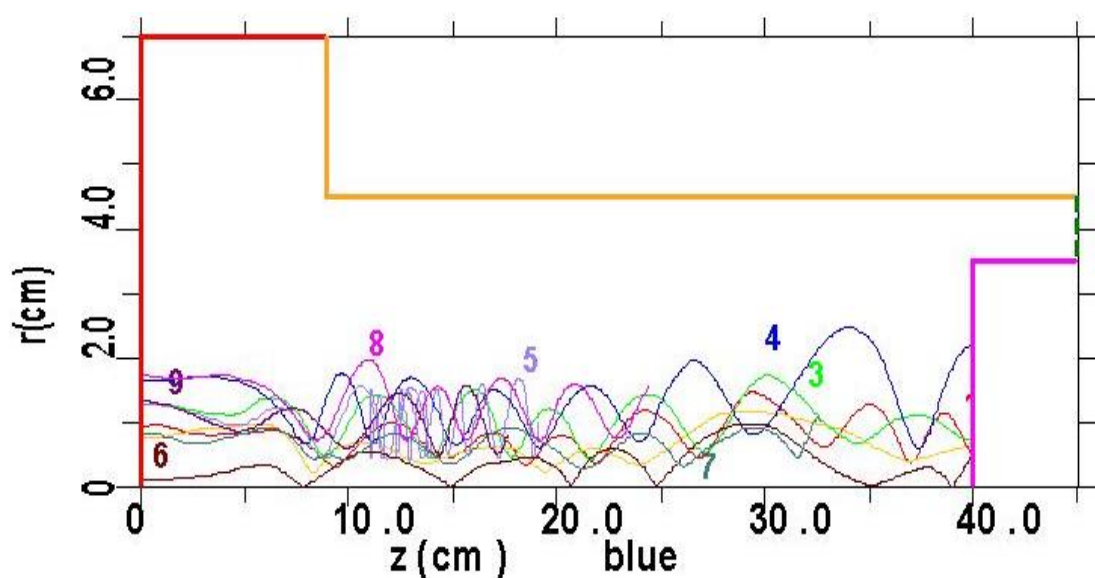


Рис. 1.14. Траектории отдельных электронов пучка в цилиндрической трубе дрейфа

На рисунке 1.15 показаны отдельные траектории ионов титана в экспериментальной системе с баллистической фокусировкой (рисунок 1.6), концентрация плазмы $2 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$, ток 1 А, энергия ионов 3 кВ.

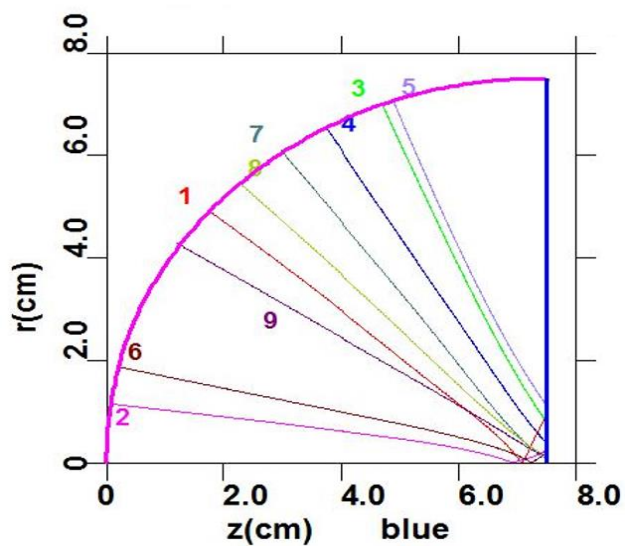


Рис. 1.15 Траектории отдельных ионов пучка в полусферическом эквипотенциальном пространстве

Плазма и ионный пучок моделируются количеством частиц порядка 10^5 в аксиально-симметричной r - z геометрии.

1.3. Математическое моделирование взаимодействия электронных и ионных пучков с материалами

1.3.1. Моделирование тепловых процессов

Тепловые процессы в металле, обрабатываемом интенсивным низкоэнергетическим электронным пучком, описываются уравнением теплопроводности с учетом фазового перехода, температурной зависимости теплофизических коэффициентов и граничных условий на поверхности образца Γ :

$$c(T)\rho(T)\frac{\partial T(x,y,z,t)}{\partial t} = \text{div}[\lambda(T)\text{grad}T(x,y,z,t)] \quad (1.6)$$

$$-\lambda(\nabla T)_\Gamma + [\alpha_c(T - T_c) + \sigma\varepsilon_0(T^4 - T_w^4)]_\Gamma = p(r,z,t)|_\Gamma \quad (1.7)$$

где $c(T)$, $\rho(T)$ и $\lambda(T)$ – теплоемкость, плотность и теплопроводность, зависящие в общем случае от температуры, α_c – коэффициент внешнего теплообмена; T_c – температура окружающей среды; T_w – температура стенок камеры (для вакуума); σ – постоянные Стефана-Больцмана; ε_0 – коэффициент черноты; $p(r,z,t)$ – функция, характеризующая внешний источник нагрева.

Часто реальные условия воздействия импульсных потоков заряженных частиц на вещество таковы, что можно использовать в расчетах одномерное приближение, которое существенно упрощает задачу. В одномерном приближении уравнение теплопроводности будет иметь следующий вид:

$$c(T)\rho(T)\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left[\lambda(T)\frac{\partial T(x,t)}{\partial x}\right] \quad (1.8)$$

В узком диапазоне температур, когда плотность, коэффициенты теплопроводности и теплоемкости вещества меняются незначительно уравнение теплопроводности (1.8) линейное. При большом диапазоне температур, особенно при наличии фазового перехода плотность, коэффициенты теплопроводности и теплоемкости вещества зависят от свойств состояний вещества (Приложение А), поэтому следует учитывать зависимости их от температуры в каждой точке и от положения рассмотренной точки (координаты). На границе раздела фаз

(твердость, жидкость или газообразность) выполняется условие равенства потоков тепла с учетом его потерь на фазовые превращения [47]:

$$\lambda \frac{\partial T(z_{m-0}, t)}{\partial x} - \lambda \frac{\partial T(z_{m+0}, t)}{\partial x} = L_m \rho \frac{\partial z_m}{\partial t} \quad (1.9)$$

Скорость движения фазовой границы z_m определяется потоком тепла, поглощаемым или выделяемым на этой границе из-за объемной теплоты фазового перехода $L_m \rho$. Кроме этого на межфазной границе задается еще одно условие, связанное с кинетикой фазового перехода. В задаче плавления или затвердевания обычно принимается, что на границе раздела фаз температура непрерывна и равна равновесной температуре перехода T_m , которую во многих случаях можно считать постоянной величиной.

Авторы работы [48] вместе с решением задачи Стефана применяют, предложенную в работе А. А. Самарского [49], методику сглаживания. Вместо температуры плавления и испарения используются интервалы температур, в которых материал находится в двухфазных состояниях. Тогда зависимость произведения плотности и удельной теплоемкости, а также коэффициента теплопроводности от температуры можно записать в виде:

$$c(T)\rho(T) = \begin{cases} \frac{L_s \rho_s}{\Delta T_s}, & T_s \leq T < T_s + \Delta T_s \\ \frac{L_L \rho_L}{\Delta T_L}, & T_L \leq T < T_L + \Delta T_L \end{cases} \quad (1.10)$$

$$\lambda(T) = \begin{cases} \frac{\lambda_s + (\lambda_L - \lambda_s)(T - T_s)}{\Delta T_s}, & T_s \leq T < T_s + \Delta T_s \\ \frac{\lambda_L + (\lambda_v - \lambda_L)(T - T_L)}{\Delta T_L}, & T_L \leq T < T_L + \Delta T_L \end{cases} \quad (1.11)$$

где T_s , T_L – температуры плавления и кипения, ΔT_s , ΔT_L – температурные интервалы, в котором вещество находится в двухфазном состоянии, λ_s , λ_L и λ_v – коэффициент теплопроводности твердой, жидкой и газообразной фазы.

В работах [50-53] при фазовых переходах объемная теплоемкость описываются с помощью дельта-функции Дирака:

$$c(T)\rho(T) = L_m \rho_s \delta(T - T_m) + \begin{cases} (c\rho)_s, & T < T_m \\ (c\rho)_L, & T \geq T_m \end{cases} \quad (1.12)$$

где индекс S относится к твердой фазе, а L – жидкости.

В расчетах дельта-функция Дирака заменяется δ -образной функцией Φ_0 :

$$\Phi_0(x) = \frac{1}{s\sqrt{\pi}} \exp\left[-\frac{(T - T_m)^2}{s^2}\right] \quad (1.13)$$

В работе [54] в рамках одномерной модели проведены расчеты диффузионного массопереноса в многослойных мишенях при облучении мощным потоком энергии (электронного пучка или плазмы) с учетом процессов плавления и испарения. Если температура элемента смеси достигает температуры плавления, то она не меняется до тех пор, пока количество теплоты, поступившего в этот элемент, станет равным теплоте, необходимой для плавления выделенного всего объема. Фазовый переход при кристаллизации рассчитался аналогично.

Температуры плавления и скрытая теплота плавления в области двухфазового состояния определялись приближенно как

$$T_{melt} = \frac{n_1 T_1^{melt} + n_2 T_2^{melt}}{n} \quad \text{и} \quad L_{melt} = \frac{m_1 L_1^{melt} + m_2 L_2^{melt}}{m} \quad (3.14)$$

где T_i^{melt} и L_i^{melt} температура плавления и скрытая теплота плавления чистого i -го вещества, n_i – плотность i -го вещества, $n = n_1 + n_2$, m_i – масса i -го компонента в элементе среды; m – масса элемента среды.

При выполнении закона сохранения энергии для каждого компонента и условия непрерывности теплового потока на границах фаз записаны соотношения для бинарной смеси:

$$\begin{cases} c\rho = \frac{n_1 \mu_1 + n_2 \mu_2}{N_A} \\ \lambda = \lambda_1 \nu_1 n_1 + \lambda_2 \nu_2 n_2 \end{cases} \quad (3.15)$$

где μ_i и ν_i – молярная масса и объем занимаемой одной молекулой i -го компонента. Диффузионный массоперенос в материале с покрытием рассматривался в работе [52].

1.3.2. Моделирование азотирования

Моделированию азотирования материалов посвящено множество работ и монографий [55-65]. В работе [56] модель ионного азотирования аустенитных сталей, учитывающая диффузию азота, процессы распыления поверхности с некоторой скоростью v и образования примесных комплексов азота, позволяет прогнозировать свойства поверхностных слоев при различных условиях высокодозной ионной имплантации. В отличие от других подходов процесс моделирования азотирования отражает образование комплексов азот–атом примеси в движущейся системе координат, связанной с поверхностью обрабатываемого материала с помощью системы дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\partial C_n}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C_n}{\partial x^2} + v \frac{\partial C_n}{\partial x} + G - \alpha C_n (C_0 - C_p) + \beta C_p \\ \frac{\partial C_p}{\partial t} = v \frac{\partial C_p}{\partial x} + \alpha C_n (C_0 - C_p) - \beta C_p \end{cases} \quad (1.16)$$

где C_n – концентрация свободных атомов азота; C_p – концентрация комплексов азота с атомами растворенного компонента; D – коэффициент диффузии азота в материале. Считается, что примесные атомы равномерно распределены по объему материала с некоторой плотностью C_0 . Диффундирующий азот может захватываться атомом примеси с образованием примесного комплекса. Коэффициенты α и β характеризуют эффективность создания и распада примесных комплексов. Скорость движения поверхности v определялась распылением поверхностных атомов. Предложенная модель не учитывает процесс формирования фаз и соединений.

В работе [57] полагается, что общая концентрация азота $C(x,t)$ состоит из фракции растворенного вещества C_s и захваченной фракции C_t : $C(x,t) = C_s(x,t) + C_t(x,t)$, ионное азотирование нержавеющей стали описывается системой уравнений диффузии для соответствующих фракций.

Процесс азотирования является диффузионно-контролируемым и связан с фазовыми переходами и формированием соединений. Диффузия в разных фазах описывается дифференциальными уравнениями в частных производных второго

порядка относительно локальной концентрации диффундирующего элемента (по второму закону Фика) [57-60]:

$$\frac{\partial c_i(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D_i(x,t) \frac{\partial c_i(x,t)}{\partial x} \right] \quad (1.17)$$

при выполнении закона сохранения массы (условие Стефана) на границах между слоями

$$(c_+ - c_-)n \cdot v = -n \cdot (D \nabla c|_+ - D \nabla c|_-) \quad (1.18)$$

где n – единичная нормаль к границе, v – скорость движения границы, t – время, $D_i(x,t)$ – коэффициенты диффузии, которые оцениваются из экспериментальных данных.

Коэффициент диффузии записывается по закону Аррениуса:

$$D_i = D_{0,i}(x,t) \exp\left(\frac{-E_i}{RT}\right) \quad (1.19)$$

где $D_{0,i}$ – предэкспоненциальный множитель для i -той фазы, E_i – энергия миграции азота в i -той фазе, $R = 8.314$ – универсальная газовая постоянная.

Температура азотирования через коэффициент диффузии оказывает свое значительное влияние на скорость диффузионного процесса. Но так как азотирование проводится при постоянной температуре, то задача теплопроводности и диффузии, как правило, решаются независимо. В большинстве работ принимают коэффициенты диффузии постоянными значениями, но на самом деле он зависит от состояния вещества, от концентрации примеси и от ряда других параметров, например, от предварительной обработки материала.

Существенное влияние на распределение примеси по глубине поверхностного слоя изделия оказывает радиационно-стимулированная диффузия. Экспериментально показано, что при радиационных воздействиях кинетика различных активационных процессов в твердых телах может значительно отличаться от кинетики таких процессов в отсутствие облучений, особенно в ускорении диффузии, которое связано с увеличением коэффициента

диффузии собственных и примесных атомов в металлах, полупроводниках и широкозонных диэлектриках в $10^2 \dots 10^{10}$ раз [62].

При рассмотрении радиационно-стимулированной диффузии используются различные механизмы переноса примеси [63]. Азот диффундирует в объем материала, преимущественно вдоль границ зерен, двойников и дислокаций, радиационно-стимулированная диффузия зависит от числа свободно мигрирующих дефектов, созданных облучением, и параметров облучения, которые влияют на миграцию дефектов. Причины радиационно-ускоренного глубинного переноса внедренных при ионной имплантации атомов могут быть также упругие напряжения, возникающие в имплантированном слое [64]. Из-за большого числа и универсальности параметров, влияющих на кинетику роста слоев, трудно создать модель, включающую в себя все важные факторы кинетики и, следовательно, формирования составных слоев. Идеальное условие для формирования фаз имеет система Fe-N.

Авторы работы [65] полагают, что насыщение стали азотом в процессе плазменного азотирования приводит к увеличению ее удельного объема. Кроме того, вблизи поверхности образца происходит образование и взаимодействие различных дефектов кристаллической решетки, накопление атомов азота, образование новых фаз и интенсивное ионное распыление. Совокупность этих эффектов приводит к возникновению сжимающих внутренних напряжений в азотированном слое. С применением закона сохранения массы авторами было получено уравнение диффузии для концентрации азота:

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} - \frac{DV_N}{RT} \left[\frac{\partial C(x,t)}{\partial x} \frac{\partial \sigma(x,t)}{\partial x} + C(x,t) \frac{\partial^2 \sigma(x,t)}{\partial x^2} \right] \quad (1.20)$$

где V_N – парциальный молярный объем азота в стали; $\sigma(x,t)$ – внутренние напряжения.

Уравнение (1.20) с соответствующими начальными и граничными условиями и с принятием нескольких предположений, например, $\sigma(x,t)$ линейно зависит от концентрации азота, т.е. $\sigma(x,t) = -X \cdot C(x,t)$, где X – коэффициент пропорциональности, а производная $\partial^2 \sigma(x,t) / \partial x^2$ достаточно мала, описывает

процесс диффузии азота. Если коэффициент диффузии зависит от концентрации, то уравнение (1.20) записывается в виде:

$$\frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} = \frac{1}{D(C)} \left[\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} - \frac{\partial D(C)}{\partial C} \left(\frac{\partial C(x,t)}{\partial x} \right) \right] \quad (1.21)$$

Азотирование в результате воздействия плазмы и ионных пучков на обрабатываемый металл является диффузионным процессом, ответственным за формирование соединений и фаз [57-60]. В работе [58] проводится исследование плазменного азотирования железа с образованием нитридных фаз ε , γ' и диффузионной α -зоны. Процесс диффузии азота описывается отдельно в каждой фазе первым законом Фика с выполнением закона сохранения массы на границах между фаз. Коэффициенты диффузии азота D_ε , D_γ и D_α в каждой фазе считаются постоянными. Рост составных фаз (слоев) следует параболическому закону:

$$\lambda_i = b_i \sqrt{t} \quad (1.22)$$

в соответствии, которого получены формулы для вычисления коэффициентов:

$$\begin{cases} b_\varepsilon \approx \sqrt{(4D_\varepsilon - 0.2D_{\gamma'})} \\ b_{\gamma'} \approx 0.5 \left[-(b_\varepsilon + 0.02\sqrt{D_\alpha}) + \sqrt{(b_\varepsilon + 0.02\sqrt{D_\alpha})^2 + 0.2D_{\gamma'}} \right] \end{cases} \quad (1.23)$$

Динамика роста фаз железа не учитывает распыление поверхности ионами, которое становится существенным при азотировании интенсивными пучками ионов (при $j > 10 \text{ мА/см}^2$)

1.4. Выводы по главе 1

Экспериментальные исследования показывают эффективное использование интенсивных низкоэнергетических электронных (10...30 кэВ) и ионных (1...3 кэВ) пучков для поверхностной модификации материалов и изделий. Теоретические исследования позволяют выяснить основные закономерности физических процессов при взаимодействии интенсивных потоков заряженных частиц с материалами и определить пути управления технологическими процессами.

Для подтверждения возможности формирования высокоинтенсивного сфокусированного ионного пучка, показанной экспериментально, необходимо провести математическое моделирование физических процессов в системе с плазменно-иммерсионным формированием и баллистической фокусировкой ионного пучка и определить условия его устойчивой транспортировки.

Для исследования закономерностей модификации стали 40Х высокоинтенсивными пучками ионов азота низкой энергии необходимо построение математической модели формирования ионно-модифицированных слоев с учетом распыления поверхности ионами пучка.

Для управления основными технологическими параметрами электронно-пучкового воздействия на металлические материалы (с целью получения заранее заданных свойств поверхности материалов) необходимо провести численное исследование динамики тепловых полей в импульсе высокоскоростного воздействия низкоэнергетического электронного пучка.

ГЛАВА 2. ИССЛЕДОВАНИЕ ПЛАЗМЕННО-ИММЕРСИОННОГО ФОРМИРОВАНИЯ ИОННЫХ ПУЧКОВ С БАЛЛИСТИЧЕСКОЙ ФОКУСИРОВКОЙ

Экспериментально [11] показана возможность импульсно–периодического формирования высокоинтенсивных пучков металлических и газовых ионов низкой энергии, с плотностями тока достигающими сотен мА/см². Ионные пучки получены методом плазменно-иммерсионной экстракции ионов и их последующей баллистической фокусировкой в эквипотенциальном дрейфовом пространстве потенциального электрода.

Цель данной главы – теоретически с применением численного моделирования исследовать основные закономерности плазменно-иммерсионного формирования ионного пучка с баллистической фокусировкой, условия устойчивой транспортировки ионного пучка в пространстве дрейфа и формирования виртуального анода. Результаты численных расчетов сравниваются с экспериментами.

Результаты главы представлены в работах [18,66-69].

2.1. Формирование слоя разделения заряда

В экспериментальной системе (рисунок 1.6) ионы извлекаются из плазмы и ускоряются в высоковольтном слое пространственного разделения зарядов, формирующемся перед полусферическим сеточным электродом под отрицательным потенциалом. Ионы, проходя через ячейки сетки, транспортируются к мишени в пространстве дрейфа, заполненном разрядной плазмой. Концентрация плазмы и ее распределение зависят от промежутка времени между импульсами смещения, в течение которого она проникает через сеточный электрод в пространство дрейфа и определяет условия нейтрализации ионов пучка плазменными электронами [11]. Формирование высоковольтного слоя пространственного разделения зарядов обусловлено выходом из него плазменных электронов, формированием матричного слоя шириной $s(t)$ и его

динамическим расширением [70]. Стабилизация слоя разделения заряда происходит при выполнении условия ограничения тока эмиссия ионов с плазменной границы пространственным зарядом, а ширина слоя s будет соответствовать закону Чайлда-Ленгмюра. В сферическом вакуумном диоде плотность ионного тока на единицу расширяющейся площади

$$\begin{cases} j_c = \frac{4}{9} \varepsilon_0 \left(\frac{2e}{M} \right)^{1/2} \frac{\varphi^{3/2}}{r^2 \alpha^2} \\ \alpha = \gamma - \frac{3}{10} \gamma^2 + \frac{3}{40} \gamma^3 - \frac{63}{4400} \gamma^4 + \dots \\ \gamma = \ln[r/(r-s)] \end{cases} \quad (2.1)$$

зависит от радиуса кривизны поверхности электродов диода, разности потенциалов φ между ними и ширины ускоряющего промежутка $s = r\alpha$; ε_0 – диэлектрическая проницаемость свободного пространства, e and M – заряд и масса иона.

Ширину слоя разделения заряда s можно получить [70] при интегрировании уравнения (2.1):

$$s = s_0 \left(1 + \frac{2}{3} \omega_{pl} t \right)^{1/3} \quad (2.2)$$

где $\omega_{pl} = \frac{u_0}{s_0} = \left(\frac{(Ze)^2 n}{\varepsilon_0 M} \right)^{1/2} = 5.56 \cdot 10^4 Z \left(\frac{m}{M} \right)^{1/2} n^{1/2}$, $[n] = \text{см}^{-3}$, $[\omega_{pl}] = \text{рад/с}$ – ионная

плазменная частота, $s_0 = (2\varepsilon_0 \varphi / Zen)^{1/2}$ – толщина ионного матричного слоя, $u_B = (eZkT_e / M)^{1/2}$ – скорость Бома, $u_0 = (2eZ\varphi / M)^{1/2}$ – скорость иона, Z – зарядовое число иона, $n_e = Zn_i = n$ – концентрация равновесной плазмы.

С учетом вклада в ток ионов, приближающихся к оболочке со скоростью Бома u_B [70], а также дрейфовой скорости металлической плазмы v_{dr} , можно записать изменение во времени ширины слоя (2.2)

$$s = s_0 \left(1 + \frac{2}{3} \omega_{pl} t \right)^{1/3} - u_B t - v_{dr} t \quad (2.3)$$

и ионного тока на сеточный электрод $j = \frac{4}{9} \frac{\varepsilon_0 u_0 \varphi}{\left(s_0 \left(1 + \frac{2}{3} \omega_{pl} t \right)^{1/3} - (v_{dr} + u_B) t \right)^2} .$

Ширина слоя (2.3) уменьшается с ростом дрейфовой скорости плазмы, увеличивается с увеличением амплитуды потенциала смещения и уменьшением концентрации плазмы.

Время выхода на стационарный режим t_c и ширина слоя s_c в стационарном режиме оценивается из соотношений:

$$t_c \approx \frac{\sqrt{2}}{9} \frac{1}{\omega_{pl}} \left(\frac{u_0}{v_{dr}} \right)^{3/4}, \quad (2.4)$$

$$s_c = s_0 \frac{\sqrt{2}}{3} \left(\frac{u_0}{v_{dr} + u_B} \right)^{1/2}. \quad (2.5)$$

Оценки показывают, что при концентрации плазмы $n = 4 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$, энергии дрейфа ионов плазмы $\varepsilon_{dr} = 30 \text{ эВ}$ и амплитуде потенциала смещения $1 \dots 3 \text{ кВ}$ время выхода на стационар для плазмы титана составляет $t_c \sim 56 \div 128 \text{ нс}$, $(M/N)^{1/2} = 295$ и $Z = 2$ (75% двухзарядных ионов).

На рисунке 2.1 показаны изменение стационарной ширины слоя разделения заряда s_c и ширины матричного слоя s_0 в зависимости от амплитуды напряжения смещения, вычисленные по формуле (2.5).

Методом крупных частиц проведены исследования формирования слоя разделения заряда в системе с плоскими электродами (для наглядности процесса). Для потенциала смещения на электроде -2.6 кВ ширина слоя положительного заряда при $n = 2 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$ и отсутствии дрейфовой скорости составляет $s_c \sim 0.8 \text{ см}$. Если плазма имеет дрейфовую скорость (соответствующая энергии 30 эВ) в направлении электрода, то $s_c \sim 0.6 \text{ см}$. Численные расчеты согласуются с аналитическими оценками (рисунок 2.1, 2.5). На рисунках 2.2 и 2.3 представлены конфигурационные портреты плазменных ионов и распределение по энергии, показывающие влияние скорости дрейфа плазмы на формирование слоя разделения заряда при потенциале смещения на электроде (E).

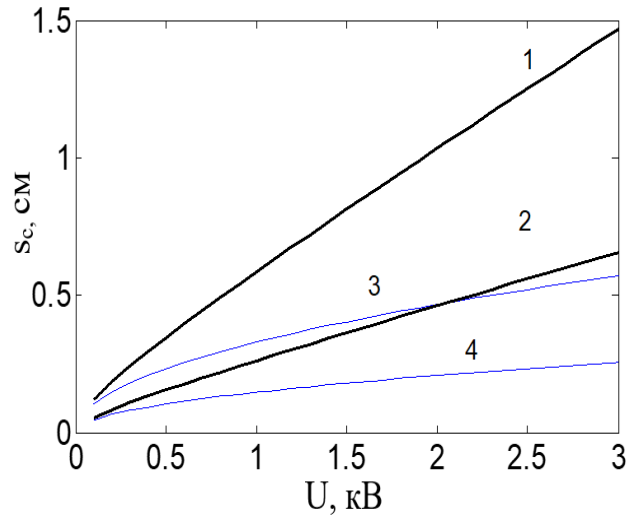


Рис. 2.1. Зависимость стационарной ширины слоя разделения заряда (1, 3) и матричного слоя (2, 4) от амплитуды напряжения смещения; 1, 3 – $n = 10^{10} \text{ см}^{-3}$, 2, 4 – $5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$

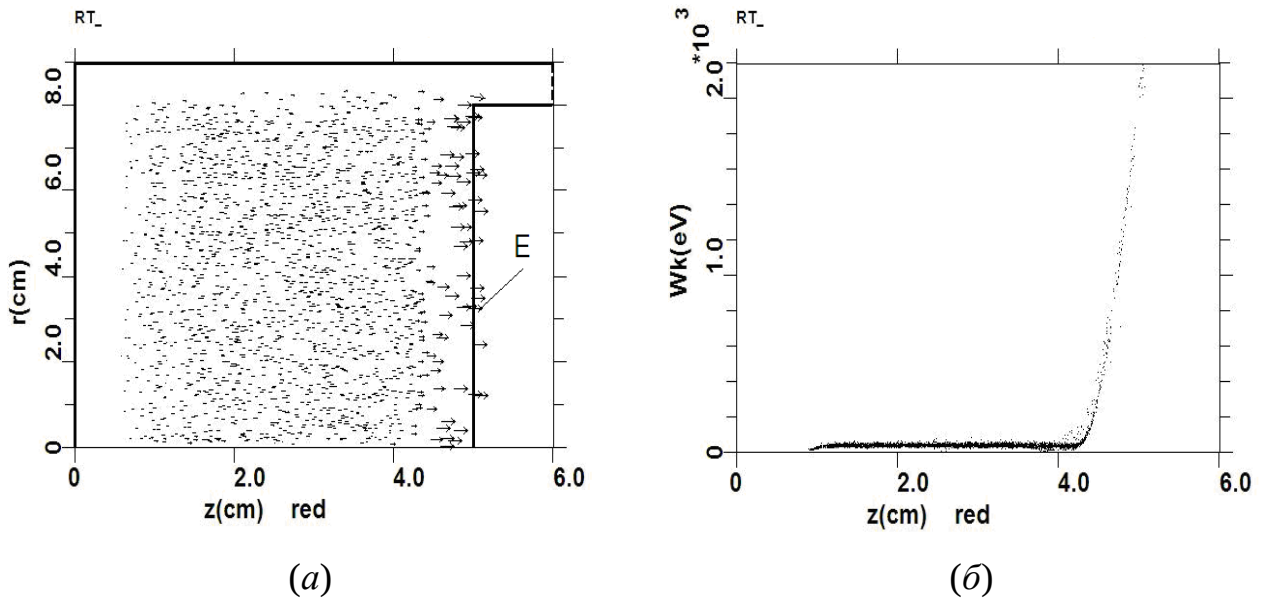


Рис. 2.2. Конфигурационный портрет плазменных ионов (а) и распределение энергии плазменных ионов (б), $\varepsilon_{dr} = 30 \text{ эВ}$

На рисунке 2.4 показано распределение энергии ионов при формировании виртуального анода в пространстве дрейфа. Поступившие из пространства дрейфа ионы отражаются в двойном слое и теряются на сеточном электроде (с прозрачностью $\chi = 0.5$) после нескольких осцилляций в потенциальной яме, сформированной между виртуальным анодом и границей плазмы.

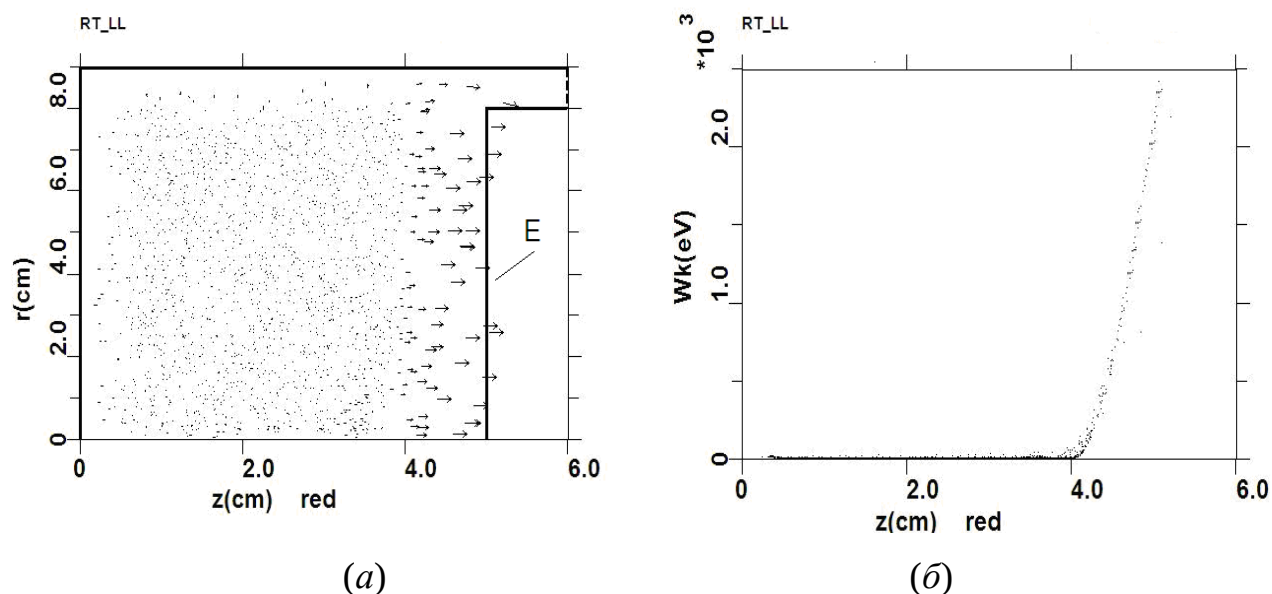


Рис. 2.3. Конфигурационный портрет плазменных ионов (а) и распределение энергии плазменных ионов (б), $\varepsilon_{dr} = 0$ эВ

Ширина слоя разделения заряда не зависит от массы ионов плазмы, их зарядового числа, является функцией концентрации плазмы n , потенциала смещения φ , скорости дрейфа плазмы v_{dr} : $s = s(n, \varphi, v_{dr})$, время стабилизации слоя $t_c = t_c(n, \varphi, M/m, Z)$. При рабочих параметрах эксперимента [$n = 10^{10} \dots 10^{11}$, $\varphi = -1, \dots, 3$ кэВ] ширина слоя разделения заряда не превышает 1.5 см.

Заполнение плазмой пространства дрейфа в эксперименте (рисунок 1.6) происходит в условиях сеточной стабилизации границы плазмы, поэтому средняя плотность плазмы, проникающей через ячейки сетки в промежутки между импульсами напряжения смещения, зависит от прозрачности сеточного электрода.

Ток ионов пучка в пространстве дрейфа определяется прозрачностью сеточного электрода и не зависит от ускоряющего напряжения, так как является током насыщения, и зависит от концентрации плазмы и ее дрейфовой скорости.

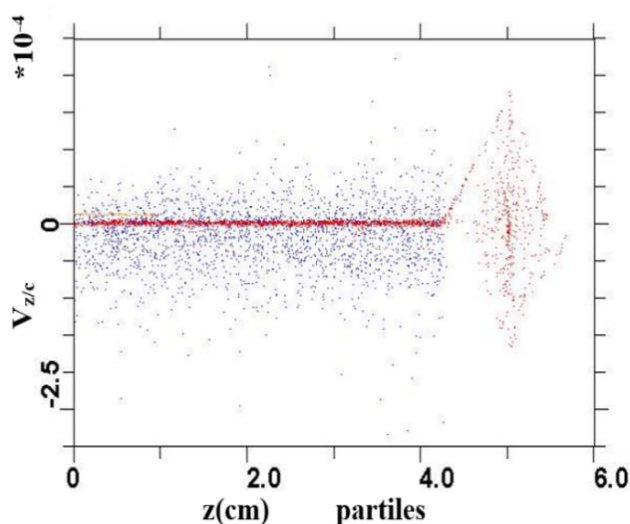


Рис. 2.4. Распределение энергии ионов при формировании виртуального анода в пространстве дрейфа: ионы – красные точки, электроны – синие точки

Исследование транспортировки ионного пучка с баллистической фокусировкой в эквипотенциальном пространстве проводится аналитически и численно методом крупных частиц.

2.2. Аналитическая модель формирования низкоэнергетического сфокусированного ионного пучка

В системе с полусферическим эмиттером с радиусом кривизны R_c (рисунок 1.6) движение ионов компенсированных по заряду в собственных полях можно описать в сферической системе координат (r, θ) системой уравнений

$$\begin{cases} r'' - r\theta'^2 = 0 \\ r\theta'' + 2\theta'r' = \frac{e}{M} E_\theta \end{cases} \quad (2.6)$$

Собственное магнитное поле (B_θ) для низкоэнергетических ионов является пренебрежимо малым. Собственное электрическое поле, с учетом того, что плотность тока пучка $j_r(r) = j_0(R_c/r)^2(1 - \gamma)$ обратно пропорциональна квадрату радиуса и зависит от коэффициента нейтрализации пространственного заряда γ , записывается в виде:

$$E_\theta(\rho, \theta) = 4\pi(1 - \gamma) \frac{j_0}{v_0} \frac{\cos \theta - 1}{\sin \theta} \rho \frac{R_c^2}{\rho^2} \quad (2.7)$$

где j_0 – плотность тока инжекции ионов в эквипотенциальное пространство.

Результаты решения системы уравнений (2.6) представлены на рисунках 2.5 – траектории некоторых ионов пучка ($j_0 = 5$ и 1.5 мА/см², $\gamma = 0.995$, энергия ионов 1.2 кВ) и на рисунке 2.6 – распределение относительной плотности тока j/j_c на мишени и зависимость плотности тока j_c на мишени от степени зарядовой нейтрализации γ .

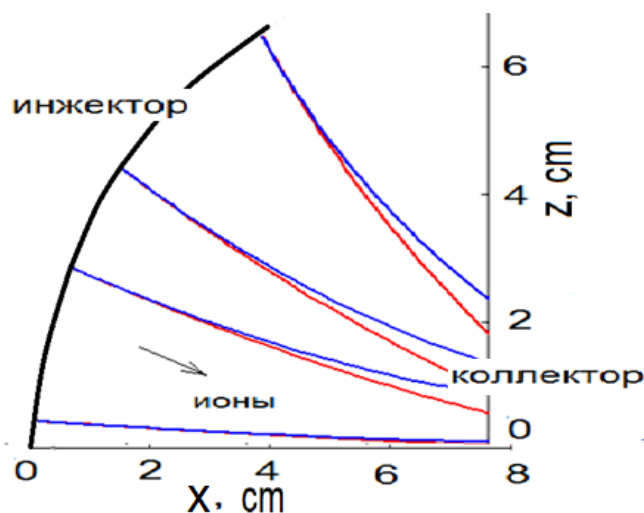


Рис. 2.5. Траектории ионов пучка $j_0 = 5$ мА/см² (синяя линия), $j_0 = 1.5$ мА/см² (красная линия), $\gamma = 0.995$, энергия ионов титана 1.2 кэВ

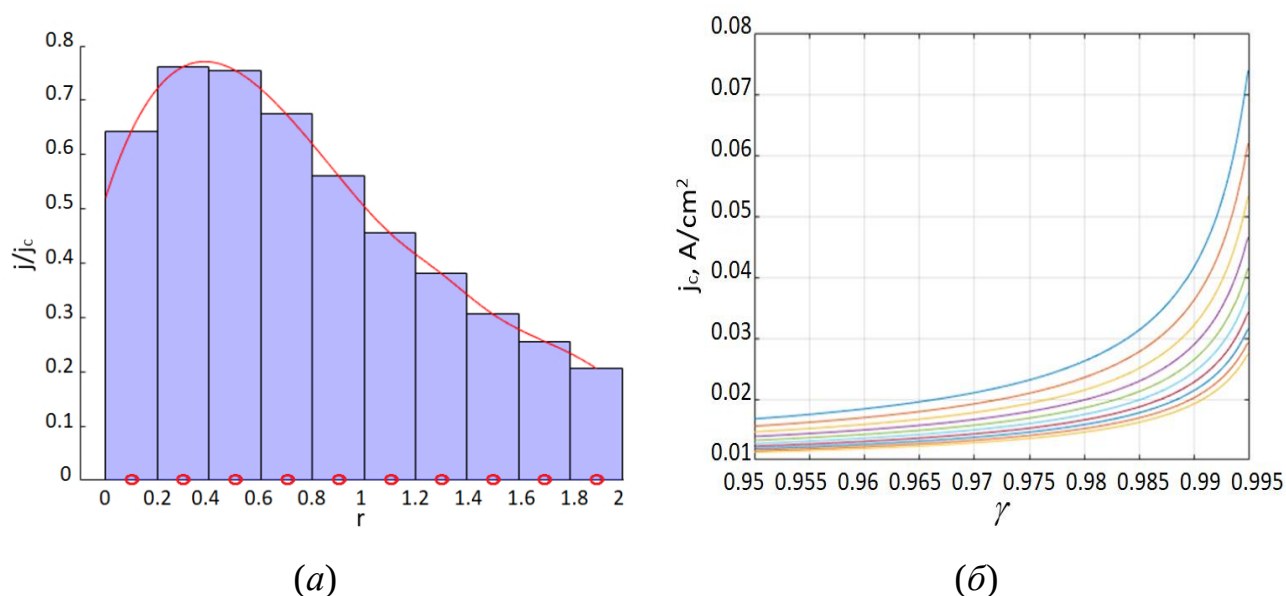


Рис. 2. 6. Распределение относительной плотности тока j/j_c на мишени ($\gamma = 0.99$) (а) и зависимость плотности тока j_c на мишени от степени зарядовой нейтрализации γ (б)

Система уравнений (2.6) позволяет определить влияние параметров системы и пучка на траектории частиц пучка в приближении ламинарного движения. Поэтому следует рассматривать задачу, учитывающую самосогласованную динамику заряженных частиц (пучка и плазмы) и полей, для этого используется метод крупных частиц.

2.3. Численное исследование транспортировки ионного пучка с баллистической фокусировкой (метод макрочастиц)

Вычислительный процесс методом крупных частиц для транспортировки ионного пучка требует больших временных затрат из-за большой массы ионов металла. Вычисления, проведенные при различных модельных значениях массы $M/m = 900, 1980, 13500$ (при соблюдении соответствующих эмиссионного тока пучка и масштаба времени), позволяют сделать заключение о несущественном влиянии массы иона на закономерности транспортировки пучка.

В численной модели предполагалось, что ионы пучка с энергией, соответствующей напряжению смещения $U = -3...-1.2$ кВ, инжектируются с электрода (E) (рисунок 2.7), выполненного в форме полусферы радиусом R_c , с плотностью тока $j_0 = 5$ мА/см² и транспортируются в условиях баллистической фокусировки к коллектору (C). Начальные параметры плазмы: функция распределения энергии электронов максвелловская, плотность плазмы $n = 10^9...10^{10}$ см⁻³, температура плазменных электронов $T_e = 10$ эВ и ионов $T_i = 1$ эВ, Энергия плазменных ионов, направленных вдоль оси симметрии, 20...30 эВ. Пространство транспортировки пучка эквипотенциально и ограничено поглощающими заряд стенками. Глубина заполнения плазмой (с плотностью n_{pl}) области транспортировки пучка определялась временем предварительной инжекции плазмы, среднее значение плотности n определялось по всему объему пространства дрейфа.

На рисунке 2.7 показаны расчетные геометрии и конфигурационные портреты пучка ионов алюминия при полном заполнении плазмой области

транспортировки (частицы плазмы не показаны), стрелками показаны вектора скорости ионов.

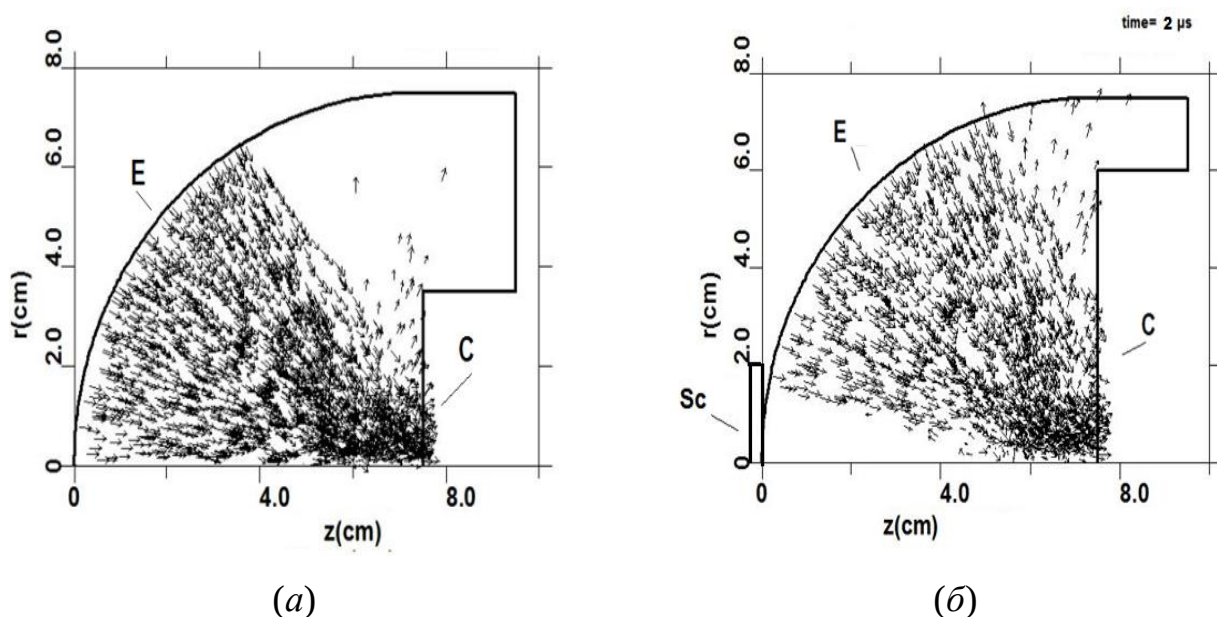


Рис. 2.7. Геометрии расчетных областей (a) и конфигурационный портрет ионного пучка (б); $\tau = 4$ мкс, $n = 10^{10} \text{ см}^{-3}$, E – сеточный электрод, C – коллектор, S_c – экран

Численные расчеты показали, что наличие затеняющего электрода (экрана диаметром 4 см) на сеточном электроде (рисунок 27б) не существенно уменьшает эффективность использования плазмы и энергетическую эффективность генерации ионного пучка, так как при транспортировке пучка без затеняющего электрода осевые ионы частично экранируются краевыми ионами в собственном поле пучка.

При длительности импульса потенциала смещения $\tau = 4$ мкс и частоте повторения импульсов $f = 10^5$ Гц время предварительной инжекции плазмы составляет 6 мкс. Этого времени достаточно для полного заполнения пространства дрейфа предварительно инжектируемой разрядной плазмой.

Плотность разрядной плазмы при $U = -30$ кВ на порядок превышает плотность ионов пучка на входе в пространство дрейфа $n/n_b \sim (\varepsilon/\varepsilon_{dr})^{1/2}$, ε_{dr} – энергия дрейфа плазменных ионов, ε – энергия иона, соответствующая потенциалу сеточного электрода. В пространстве дрейфа с полусферической геометрией сеточного электрода при движении ионного пучка к коллектору

плотность его тока увеличивается $\sim 1/r^2$. Поэтому по мере транспортировки и фокусировки пучка на определённом расстоянии от коллектора, где плотность ионов начинает превышать плотность электронов, формируется неоднородная потенциальная яма, глубина которой зависит от количества плазменных электронов, захваченных ионами пучка. При формировании неоднородной потенциальной ямы в пространстве дрейфа, ионы плазмы, ускоряясь в некомпенсированном поле пучка, вытесняются из нее, тем самым определяя перераспределение плотности пучка и динамику заряженных частиц (ионов и электронов).

На рисунке 2.8 показаны конфигурационные портреты ионов и электронов плазмы в момент времени 2 мкс.

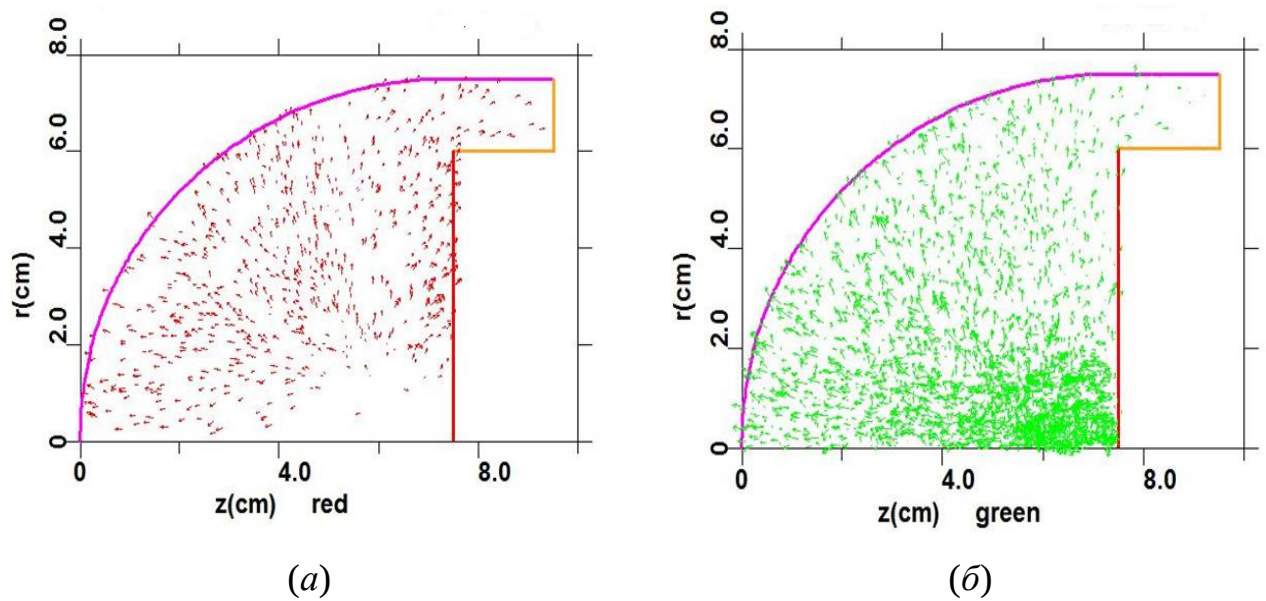


Рис.2.8. Конфигурационные портреты ионов (a) и электронов (б) плазмы;

$$\tau = 2 \text{ мкс}, n = 10^{10} \text{ см}^{-3}$$

Рисунок 2.9 демонстрирует изменение количества заряженных частиц в пространстве дрейфа во времени при средней по пространству дрейфа пучка плотности плазмы $n = 10^{10} \text{ см}^{-3}$ и длительности импульса смещения $\tau = 4 \text{ мкс}$.

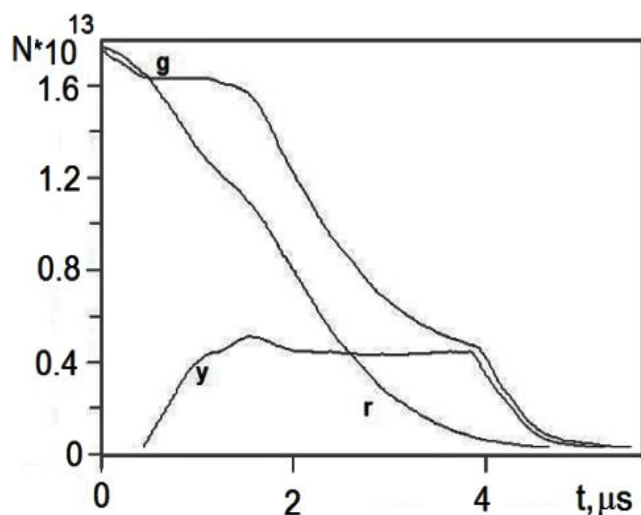


Рис. 2.9. Динамика числа
заряженных частиц в пространстве
дрейфа пучка: g и r – плазменные
электроны и ионы, y – ионы пучка;
 $\tau = 4$ мкс, $n = 10^{10} \text{ см}^{-3}$

На рисунке 2.10 показано распределение продольной компоненты плотности ионного тока j_z вдоль оси симметрии и по радиусу на разных расстояниях L от сеточного электрода. Как видно из рисунка 2.10, радиус пучка на коллекторе не превышает 2 см, что согласуется с экспериментом (рисунки 1.8-1.9).

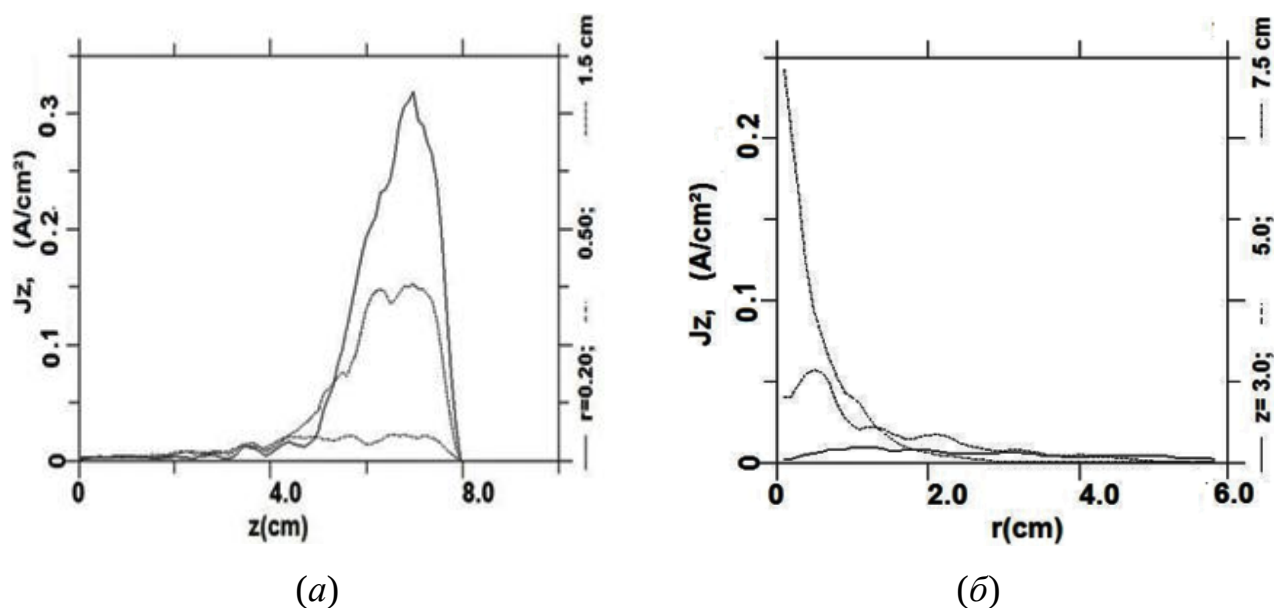


Рис. 2.10. Распределение плотности ионного тока пучка вдоль оси симметрии (а) и по радиусу на различных расстояниях от сеточного электрода (б); $n = 10^{10} \text{ см}^{-3}$,
 $U = -3 \text{ кВ}$, $L = 7.5 \text{ см}$

При увеличении длительности импульса потенциала смещения до $\tau = 8$ мкс, время предварительной инжекции плазмы 2 мкс и оказывается недостаточным

для полного заполнения плазмой пространства дрейфа пучка. Рисунок 2.11 демонстрирует конфигурационный портрет ионов пучка и распределение их энергии в условиях существенного дефицита плазменных электронов, в момент времени $t = 4$ мкс (средняя плотность плазмы $n = 4 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3}$).

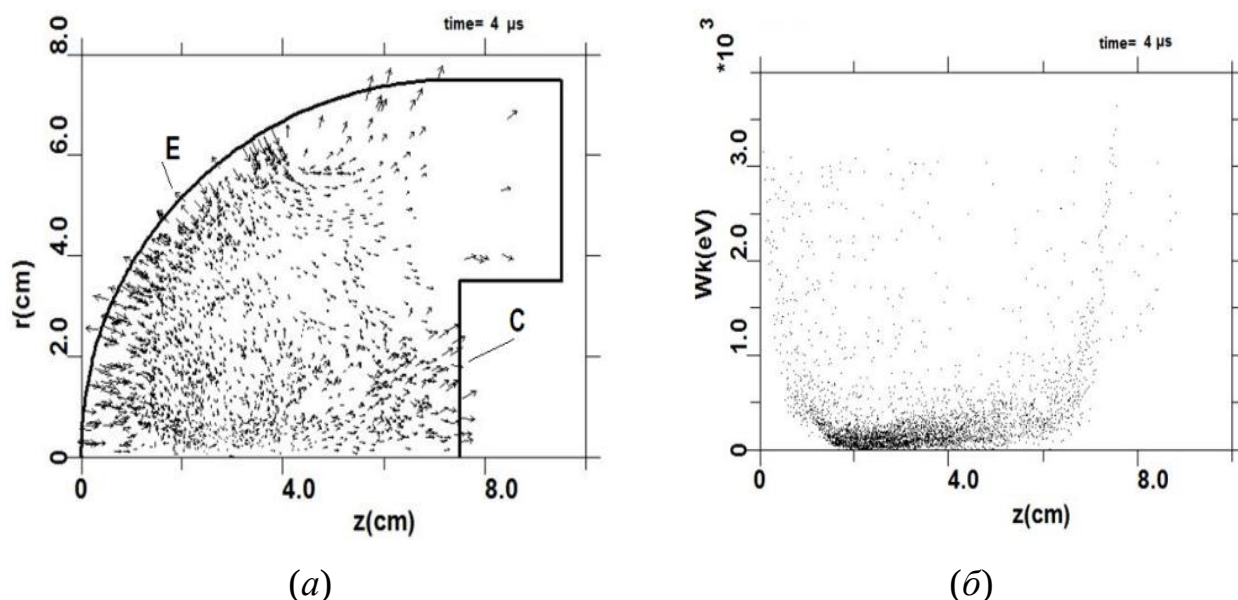


Рис. 2.11. Конфигурационный портрет ионного пучка (а) и распределение энергии (б); $\tau = 4$ мкс, $n = 4 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3}$, E – сеточный электрод, C – коллектор

Видно, что условия транспортировки и фокусировки ионного пучка нарушаются. Большинство ионов тормозятся в пространстве дрейфа и на коллектор доходит лишь малая часть ионов с энергией, соответствующей ускоряющему напряжению. Результаты численного моделирования указывают на возникновение избыточного положительного заряда в лишь частично нейтрализованном пучке, что приводит к существенному провисанию потенциала, вплоть до образования виртуального анода.

На рисунке 2.12 показаны токи заряженных частиц (пучка и плазмы) на сеточном электроде при этой же длительности потенциала смещения. Колебательный характер тока на электроде, так же указывает на формирование виртуального анода, отражение ионов пучка от него и их осцилляцию вблизи сеточного электрода.

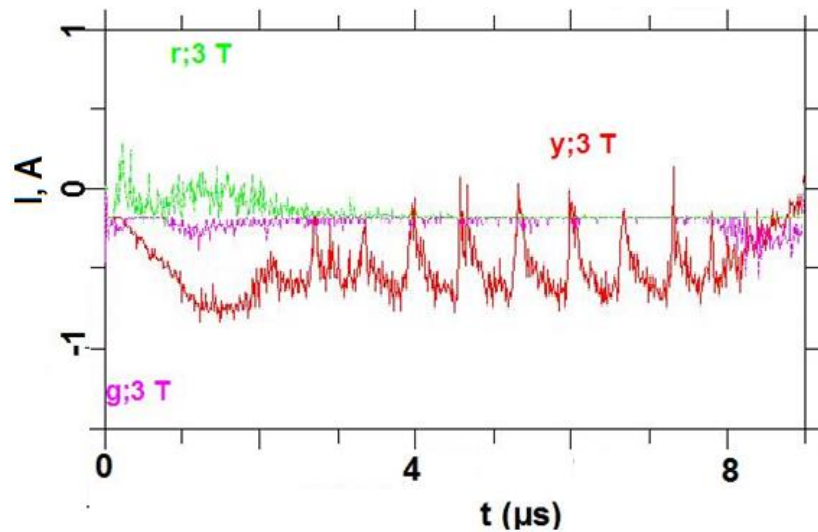


Рис. 2.12. Токи заряженных частиц на сеточный электрод:

g и r – плазменные электроны и ионы, y – ионы пучка; $\tau = 8$ мкс

На рисунке 2.13 показаны траектории некоторых ионов пучка и изменение их кинетической в пространстве дрейфа при длительности импульса потенциала смещения $\tau = 6$ мкс. Из рисунка 2.13 видно, что ионы пучка транспортируются в неоднородном потенциальном поле, а на коллекторе ионный пучок имеет энергетический разброс.

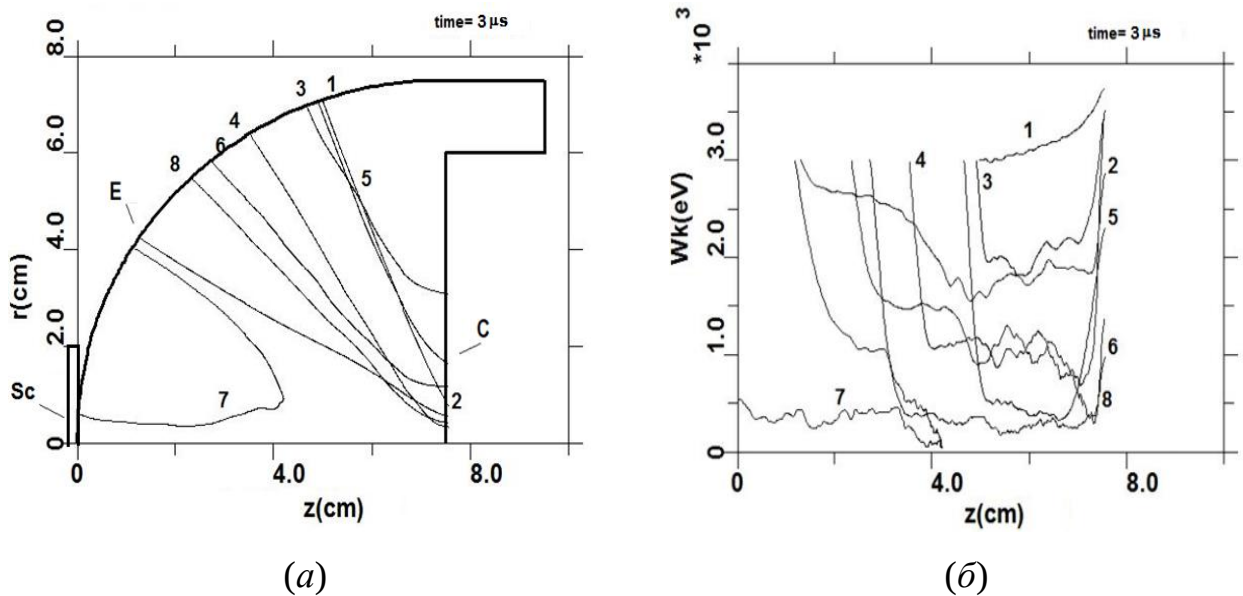


Рис. 2.13. Траектории некоторых ионов пучка (а) и кинетическая энергия этих ионов (б)

На рисунке 2.14 показаны импульсы ионного тока (b), токи плазменных ионов (r) и вторичных электронов (c) на коллектор при длительности импульса

смещения $\tau = 2, 4, 6, 8$ мкс. Первый максимум на кривых ионного тока связан с фокусировкой пучка ионов, его амплитуда зависит от плотности плазменных частиц и крутизны фронта тока пучка. Ток вторичных электронов, обусловленный ионно-электронной эмиссией с металлических поверхностей коллектора и электродов, зависит от тока ионного пучка.

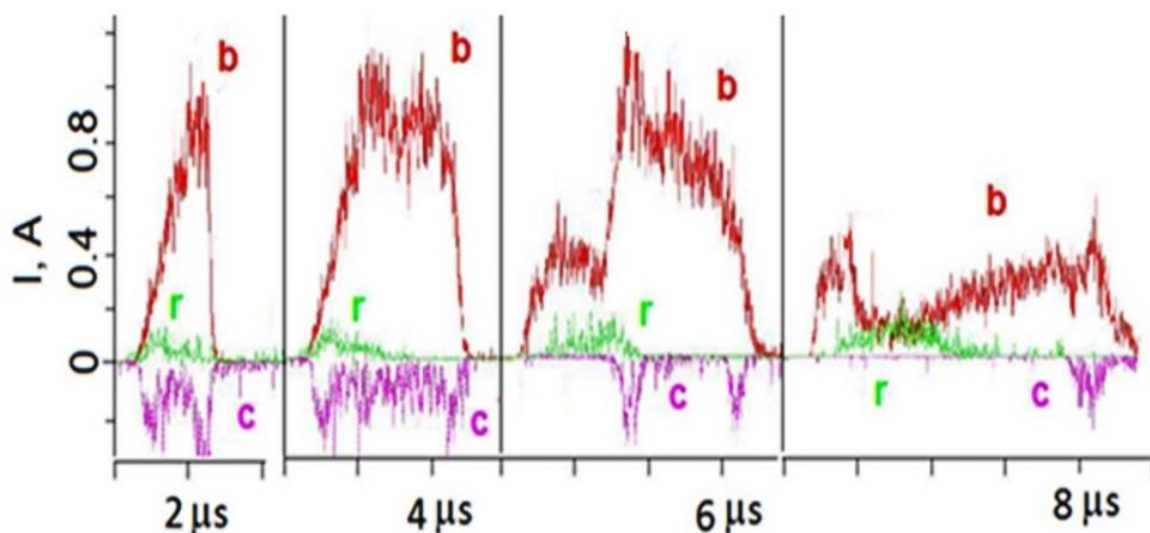


Рис. 2.14. Ток на коллекторе ионов пучка (b), плазменных ионов (r) и вторичных электронов (c) при различных длительностях импульсах смещения

Постепенное увеличение амплитуды ионного тока при $\tau = 8$ мкс свидетельствует о дополнительном механизме компенсации пространственного заряда пучка с течением времени. Одним из механизмов, как показывают расчеты, может быть ионно-электронная эмиссия с поверхности мишени.

При длительности импульса смещения $\tau = 8$ мкс, транспортировка пучка происходит в условиях формирования виртуального анода (рисунок 2.11), ограничивающего ионный ток на коллектор. Частота колебания местоположения виртуального анода зависит от плотности тока пучка, аналогично колебаниям виртуального катода в виркаторах. Экспериментально наблюдаемый интенсивный разогрев сеточного электрода [18], вплоть до расплавления при длительности импульса $\tau = 8$ мкс указывают на проявление виртуального анода с отражением значительной части ионов пучка от положительного потенциального барьера в пространстве дрейфа и их осцилляции относительно сеточного анода.

Задние фронты импульсов тока коллектора (рисунок 2.14) обусловлены направленным движением, как ионов пучка, так и частиц плазмы, которые ускорились в электрическом поле пучка. Расчетные импульсы тока пучка на коллекторе (рисунок 2.14) согласуются с экспериментом (рисунок 1.7).

Плотность ионов в пучке на коллекторе зависит не только от изменяющейся в условиях фокусировки плотности тока ионного пучка, но и от амплитуды ускоряющего напряжения U . Так как плотность ионов в пучке $n_b \sim 1/|U|^{1/2}$, то с уменьшением напряжения U возрастает плотность ионов, меняется соотношение плотностей n/n_b и, соответственно, изменяются условия формирования пучка из-за ухудшения условий нейтрализации его объемного заряда. Численные расчеты показали, что при напряжении смещения до -1.2 кВ плотность тока ионного пучка уменьшается в 4 раза по сравнению с $U = -3$ кВ, что согласуется с экспериментом (рисунок 1.8)

Кривизна поверхности сеточного электрода и длина пространства дрейфа L во многом определяют распределение плотности тока пучка на мишени. При радиусе кривизны 7.5 см фокусное расстояние находится в центре окружности радиуса $L = 7.5$ см. Однако изменение кривизны поверхности электрода (особенно у края пучка) может изменить фокусное расстояние пространства дрейфа.

Изменению условий транспортировки и фокусного расстояния могут способствовать процессы на поверхности мишени (ионизация адсорбированного газа с поверхности мишени, ионно-электронная эмиссии, перезарядка ионов) при высокоинтенсивном воздействии ионного пучка, а также ионизация остаточного газа плазменными и вторичными электронами, захваченными в потенциальную яму. Это может иметь место при формировании и транспортировке газовых ионных пучков. Формирование которых происходит при давлении ($p = 0.6$ Па) на порядок превышающем давление для металлических ионных пучков ($p = 0.06$ Па). Кроме того, металлическая плазма имеет практически 100% ионизацию, что обуславливает отсутствие механизма наработки плазмы в канале транспортировки ионного пучка за счет ионизации вторичными электронами остаточного газа.

2.4. Транспортировка ионного пучка в узком пространстве дрейфа

Проведено численное моделирование транспортировки ионного пучка для узкого пространства дрейфа (рисунок 2.15). Параметры численного эксперимента: расстояние между эмиссионным электродом (E) и коллектором (C) 1.5 см, энергия инжектируемых ионов титана 2600 эВ, ток пучка 0.8 А, радиус кривизны эмиссионного электрода (E) $R_c = 7.5$ см. Начальные параметры плазмы: плотность плазмы $n = 10^{10}$ см $^{-3}$, температура плазменных электронов и ионов $T_e = 2.5 \dots 10$ эВ и $T_i = 1$ эВ, дрейфовая скорость плазмы вдоль оси симметрии $v_{dr} \sim 1.5 \cdot 10^6$ см/с. На рисунке 2.15 показаны конфигурационные портреты пучка в разные моменты времени, когда эмиссионный ток равен току коллектора ($t = 10$ мкс), и когда происходит частичное прохождение ионов пучка ($t = 19$ мкс), обусловленное формирование виртуального анода.

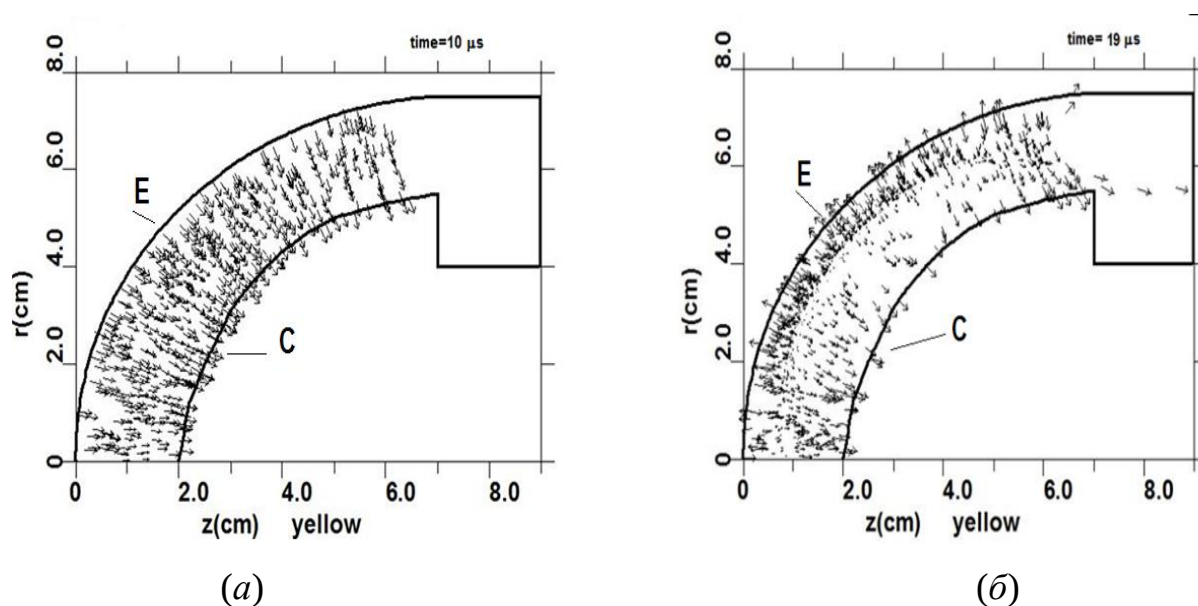


Рис. 2.15. Конфигурационные портреты ионного пучка, E – эмиссионная поверхность, C – коллектор: (a) – $t = 10$ мкс, (б) – $t = 19$ мкс

Уменьшение величины ионного тока на коллекторе (рисунке 2.16) связано с формированием неоднородного (по радиусу) виртуального анода и отражением от него ионов пучка. Ток коллектора в этом является предельным током для данной системы (рис. 2.16).

В численных расчетах прослеживалась связь между током ионов на коллекторе, амплитудой напряжения смещения U , плотностью плазмы и временем t_i , при котором происходит скачок тока коллектора. С уменьшением амплитуды напряжения смещения и увеличением плотности разрядной плазмы ширина слоя разделения заряда и длины пространства дрейфа могут стать сравнимыми по величине, что приведет к полному замыканию ионного тока на сеточный электрод.

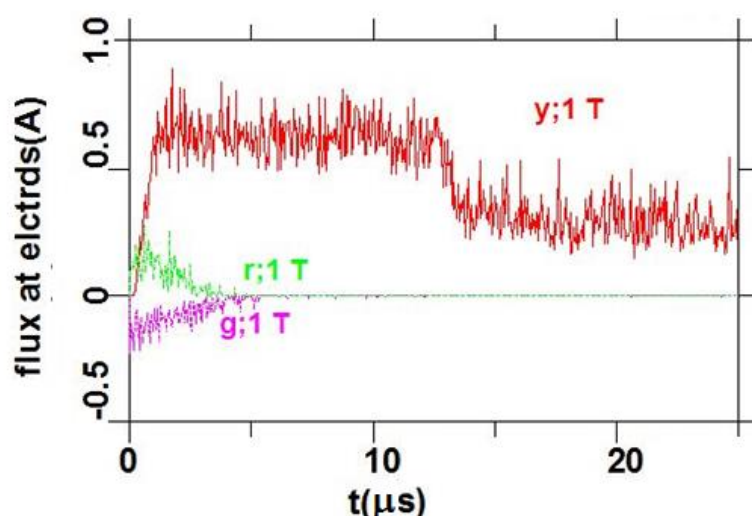


Рис. 2.16. Токи заряженных частиц на коллектор:

g и r – плазменные электроны и ионы, y – ионы пучка, $n = 2 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$, $U = -2.6 \text{ кВ}$

При уменьшении длины пространства дрейфа $L < R_c$ уменьшается плотность пучка на коллекторе, увеличивается время выхода заряженных частиц плазмы из канала транспортировки и соответственно, увеличивается время t_i .

Следует заметить, что характеристики пучка и плазмы, угловое распределение ионов пучка, неоднородность плотности его тока на входе в пространство дрейфа, а также неоднородность пространства транспортировки, могут оказывать влияние на длительность импульса тока коллектора.

2.5. Аналитические оценки

При неполном заполнении плазмой пространства дрейфа транспортировка ионного пучка происходит в условиях формирования виртуального анода. Существенная часть ионов пучка, отражаясь от потенциального барьера,

осциллирует в потенциальной яме (рисунки 2.4 и 2.11), формируемой между границей слоя и виртуальным анодом. Бомбардируя сеточный электрод, ионы обуславливают ионно-электронную эмиссию с коэффициентом ионно-электронной эмиссии $\chi(U)$. В этом случае ток пучка на сеточном электроде определяется током разряда I_p , предельным током пространства транспортировки пучка I_l и прозрачностью сетки χ :

$$I_f = \frac{\chi}{1-\chi^2} (I_p - I_l), \quad (2.8)$$

а ток вторичных электронов равен

$$I_{ee} = \gamma(I_p - I_l)(1 - \chi) \quad (2.9)$$

Тогда количество вторичных электронов N_{ef} в потенциальной яме пропорционально времени t : $N_{ef} = I_{ee}t/e$, а количество быстрых ионов $N_b = I_f k R / e v_b$. Здесь v_b – средняя скорость иона пучка в промежутке сетка-виртуальный анод; $k(M, I_p)$ – коэффициент, характеризующий накопление медленных ионов в минимуме потенциальной ямы, зависящий от массы иона M и тока разряда I_p .

Из условия компенсации пространственного заряда ионов пучка $N_b \leq N_{ef}$ можно получить оценку времени, которое необходимо для накопления вторичных электронов, и исчезновения виртуального анода:

$$t_r \geq \frac{\chi}{1-\chi} \frac{R}{v_b} \frac{k}{\gamma} \quad (2.10)$$

Время t_r зависит от прозрачности сетки, массы ионов, напряжения смещения, тока разряда и геометрических размеров пространства транспортировки пучка.

Для $\chi = 0.64$, $(M_{Al}/m_e) = 221$ (алюминий) при амплитуде смещения 3 кВ, t_r :

$$t_r \geq \frac{k}{\gamma} \frac{\chi}{1+\chi} \frac{R}{v_b} \sim \frac{k}{\gamma} \frac{0.65}{1.65} 7.5 \frac{2}{3 \cdot 10^{10}} \sqrt{\frac{500}{2 \cdot 3}} \cdot 2.2 \cdot 10^2 \approx 4 \frac{k}{\gamma} [\text{мкс}] \quad (2.11)$$

Полагая, $\gamma = 0.5$ и $k = 1$ получим, оценку $t_r \approx 8$ мкс, что количественно согласуется с расчетами (рисунок 2.14) и экспериментальным током для случая

длительности импульса смещения 2 мкс. С уменьшением напряжения смещения пучка время t_r увеличивается за счет уменьшения скорости v_b и коэффициента γ .

Следует заметить, при практически 100% ионизации металлической плазмы и низких рабочих давлениях основным механизмом наработки недостающего количества электронов, нейтрализующих объемный заряд ионов пучка, является ионно-электронная эмиссия с сеточного электрода, стенок пространства дрейфа и мишени.

Аналитическая модель (2.11), отражает основные закономерности влияния параметров системы на динамику тока коллектора, согласующиеся с результатами численного моделирования.

2.6. Выводы по главе 2

Теоретически с применением численного моделирования показано, что:

- ширина слоя разделения заряда уменьшается с ростом дрейфовой скорости плазмы, не зависит от массы ионов плазмы и их зарядового числа. Для параметров эксперимента при амплитуде напряжения смещения 0.5...3 кВ и концентрации плазмы 10^{10} см^{-3} стационарная ширина слоя разделения заряда составляет $s_c = 0.4...1.5 \text{ см}$, время стабилизации слоя t_c менее 0.2 мкс; ток ионов пучка на входе в пространство дрейфа не зависит от амплитуды напряжения смещения, является током насыщения, и определяется прозрачностью сеточного электрода и концентрацией плазмы.

- при плазменно-иммерсионном формировании импульсных пучков ионов металла (алюминия и титана) и баллистической фокусировкой достигаются плотности тока до 500 мА/см^2 (при радиусе кривизны поверхности пространства дрейфа 7.5 см), что находится в хорошем согласии с экспериментами [11,12,18], подтверждает устойчивое формирование и транспортировку пучков металлических ионов (алюминия и титана) при длительностях импульса смещения не превышающих $\tau = 6 \text{ мкс}$ (при частоте импульсов напряжения смещения 10^5 Гц);

- максимальная длительность ионного тока ограничивается процессами нейтрализации пространственного заряда пучка, неполная компенсация быстрых ионов в канале транспортировки пучка приводит к провисанию потенциала, а при определенных условиях (определяемых геометрией пространства дрейфа, параметрами плазмы, амплитудной и частотой отрицательного потенциала смещения) к формированию виртуального анода.

- одним из дополнительных механизмов компенсации пространственного заряда пучка металлических ионов в условиях эксперимента может быть ионно-электронная эмиссия с поверхности электродов пространства дрейфа.

Согласие результатов численных расчетов с экспериментальными данными [11,12,18] и позволяют интерпретировать основные закономерности транспортировки ионного пучка с плазменно-иммерсионной экстракцией и баллистической фокусировкой в пространстве дрейфа, а также определить оптимальные условия формирования сфокусированных ионных пучков и необходимых режимов для высокоскоростного глубинного ионного легирования материалов.

ГЛАВА 3. МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ ПРИ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОМ ПЛАЗМЕННО-ПУЧКОВОМ ВОЗДЕЙСТВИИ НА МЕТАЛЛЫ

Получение низкоэнергетических (0.5...3 кэВ) ионных пучков с плотностью тока до $j_b = 0.5 \text{ А/см}^2$ в системе с плазменно-иммерсионного формированием и баллистической фокусировкой [11] позволило начать исследования закономерностей высокоинтенсивной импульсной имплантации азота в металлические мишени, которая имеет преимущества перед другими типами азотирования:

- существенное понижение (на 100...300°C) температуры,
- достижение предельно возможных приповерхностных концентраций внедряемой примеси ($\leq 40 \text{ ат.}\%$),
- возможность формирования переходных многофазных слоев.

При высокоинтенсивной импульсной имплантации азота ($j_b > 10 \text{ мА/см}^2$) в поверхностном слое обрабатываемой детали развиваются процессы радиационно-стимулированной диффузии, обеспечивающие высокую скорость и глубину насыщения ($\sim 10...150 \text{ мкм}$), энергия ионов перестает быть параметром и доминирующим процессом становится распыление поверхности ионным пучком, приводящее к уменьшению легированного слоя, верхний предел имплантированной примеси ограничен 20...50 ат.% (6...20 масс.%) [63,64,71].

Цель данной главы – построить математическую модель формирования ионно-модифицированных слоев многофазного твердого тела с учетом распыления поверхности ионами пучка и провести исследование закономерностей модификации металла стали 40Х высокоинтенсивными пучками ионов азота низкой энергии.

Результаты главы представлены в работах [29,66,72-74].

3.1. Моделирование диффузии в многофазном твердом теле

В общем случае решается задача Стефана, возникающая при моделировании диффузии элемента A в многофазном твердом теле M . Поверхностный состав твердого тела может быть предсказан с учетом бинарной фазовой диаграммы $M-A$, на основании которой могут быть теоретически сформированы несколько фаз и соединений во время диффузионного процесса. На границах между слоями (фазами) выполняется условие сохранения масс. Процесс формирования фаз зависит от времени, коэффициента диффузии и скорости распыления поверхности.

Диффузионная задача формулируется для образца, который для процесса диффузии может рассматриваться, как бесконечно большой в математическом смысле. Геометрия модели в общем виде состоит из n слоев и диффузионной зоны. На рисунке 3.1 представлена изменение концентрации диффундирующего элемента по глубине.

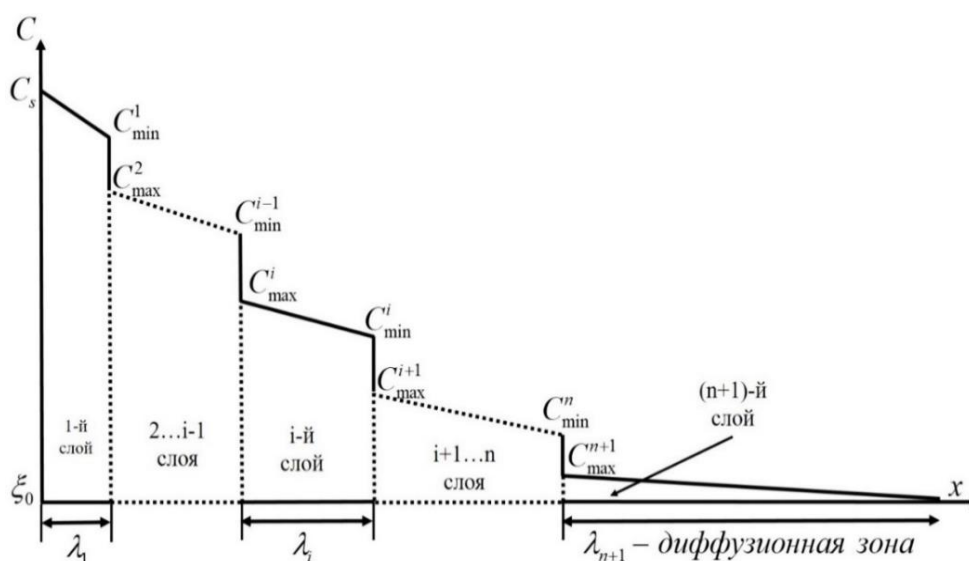


Рис. 3.1. Геометрия задачи

Распределение концентрации $C_i(x,t)$ диффундирующего элемента на глубине x в момент времени t в каждом слое (фазе) i ($i = 1 \dots n+1$) определяется из решения уравнения диффузии:

$$\frac{\partial C_i(x,t)}{\partial t} = D_i \frac{\partial^2 C_i(x,t)}{\partial x^2}, \quad i = 1 \dots n+1 \quad (3.1)$$

при выполнении условия сохранения масс (условие Стефана) на границах ($i = 1 \dots n$) между слоями:

$$(C_{\min}^i - C_{\max}^{i+1}) \left[\frac{d}{dt} \left(\sum_{m=1}^i \lambda_m \right) + \frac{d\xi_0}{dt} \right] = - \left[D_{i+1} \frac{\partial C_{i+1}(x,t)}{\partial x} - D_i \frac{\partial C_i(x,t)}{\partial x} \right]_{x=\xi_0 + \sum_{m=1}^i \lambda_m} \quad (3.2)$$

здесь D_i – коэффициент диффузии элемента в слое i шириной λ_i , v – скорость распыления поверхности.

Граничные условия задаются в зависимости от условий задачи:

$$C(x,t)|_{x=\xi_0} = C_s \text{ или } -D \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} \Big|_{x=\xi_0} = \theta [C_s - C(x,t)] \quad (3.3)$$

$$-D \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} \Big|_{x=L} = 0 \quad (3.4)$$

где θ – эффективный коэффициент массообмена.

Начальные условия в общем случае заданы функцией зависимости концентрации диффундирующего элемента от координат $C(x,0) = f(x)$, а в рассмотренной задаче принимается:

$$C(x,t) = \begin{cases} C_s & x = 0 \\ 0 & x \neq 0 \end{cases} \quad (3.5)$$

Общее решение задачи вынужденной диффузии из постоянного источника для тела конечных размеров со связывающими границами (для слоев $i = 1, \dots, n$) имеет вид:

$$C(x,t) = C_0 + A \operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}} \right), \quad (3.6)$$

$$\text{где } C_0 \text{ и } A - \text{константы, функция ошибок } - \operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt. \quad (3.7)$$

Используя условия на границах фаз, получим распределение элемента в слоях и в диффузионной зоне:

$$C_i(x,t) = C_{\max}^i + \frac{C_{\min}^i - C_{\max}^i}{\operatorname{erf} \left(\frac{\lambda_i}{\sqrt{4D_i t}} \right)} \operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sqrt{4D_i t}} \right), \quad i = 1 \dots n \quad (3.8)$$

$$C_{n+1}(x, t) = C_{\max}^{n+1} - C_{\max}^{n+1} \operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sqrt{4D_{n+1}t}} \right) \quad (3.9)$$

Введем обозначения:

$$\begin{cases} \Delta C_i = C_{\max}^i - C_{\min}^i \\ \Delta C_{i,i+1} = C_{\min}^i - C_{\max}^{i+1} \end{cases} \quad i = 1 \dots n \quad (3.10)$$

Поток диффундирующего элемента

$$J_i = -D_i \frac{\partial C_i}{\partial x}, \quad i = 1 \dots n+1 \quad (3.11)$$

с использованием (3.8)-(3.10), (3.11) запишется в виде:

$$J_i = \begin{cases} D_i \frac{\Delta C_i}{\lambda_i}, & i = 1 \dots n \\ C_{\max}^{n+1} \sqrt{\frac{D_{n+1}}{\pi t}}, & i = n+1 \end{cases} \quad (3.12)$$

Из (3.2), (3.10) и (3.12) скорости движения n границ слоев определяются решением системы n дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \lambda_i = \frac{1}{\Delta C_{i,i+1}} \left(D_i \frac{\Delta C_i}{\lambda_i} - D_{i+1} \frac{\Delta C_{i+1}}{\lambda_{i+1}} \right) - \sum_{m=1}^{i-1} \frac{d}{dt} \lambda_m - \frac{d\xi_0}{dt}, & i = 1, \dots, n-1 \\ \frac{d}{dt} \lambda_n = \frac{1}{\Delta C_{n,n+1}} \left(D_n \frac{\Delta C_n}{\lambda_n} - D_{n+1} \frac{C_{\max}^{n+1}}{\sqrt{\pi} \sqrt{D_{n+1}t}} \right) - \sum_{m=1}^{n-1} \frac{d}{dt} \lambda_m - \frac{d\xi_0}{dt}, \end{cases} \quad (3.13)$$

где скорость распыления поверхности:

$$\frac{d\xi_0}{dt} = v \quad (3.14)$$

Система уравнений (3.13) описывает взаимосвязанный рост n слоев, доминирующими параметрами которого являются время, коэффициенты диффузии и скорость распыления.

При высокоинтенсивной ионной имплантации большое значение приобретает рассеяние поверхности ионами потока, приводящее к уменьшению

легированного слоя. Скорость распыления образца v и глубина кратера ($h = vt$) пропорциональны плотности тока пучка j и коэффициенту распыления Y :

$$v = 3.75 \cdot 10^{-4} \frac{YAD_{\tau}j}{\rho} \text{ (мкм/ч)} \quad (3.15)$$

здесь ρ – плотность распыляемого материала (г/см^3), A – атомная масса (у), j (мкА/см^2). Экспериментально $Y = 10^{-3} \dots 10^{-1}$ ат/часть.

Увеличение температуры приводит к увеличению коэффициента диффузии легирующего элемента во всех фазах:

$$D_i = D_{0,i} \exp\left(\frac{-E_i}{RT}\right) \quad (3.16)$$

где $D_{0,i}$ – предэкспоненциальный множитель для i -той фазы, E_i – энергия миграции элемента в i -той фазе, $R = 8.314$ – универсальная газовая постоянная.

Уравнения (3.1)-(3.5) и система уравнений (3.13) образуют полную диффузионную модель, позволяющую моделировать развитие составного слоя при воздействии потока ионов легирующего элемента.

3.2. Формирование ионно-модифицированных слоев при азотировании стали 40Х высокоинтенсивным ионным пучком

Азотирование, которое является одним из наиболее эффективных способов поверхностного упрочнения инструментальных материалов, повышающего твердость и износостойкость, коррозионную стойкость, получило широкое развитие [4,6,7,75-77] в последние годы.

Несмотря на низкую энергию ионов (1 кэВ) и соответствующую ей глубину проникновения (несколько нанометров), в поверхностном слое достигается высокая концентрация азота ($\sim 5 \cdot 10^{22}$ ат/см² при $j = 1$ мА/см²), обуславливающая диффузионный процесс. За счет кинетической энергии ионов идет разогрев ($\sim 400 \dots 500^\circ\text{C}$) в этой области и возрастание скорость миграции [64].

Процесс ионного азотирования можно представить следующим образом. Пучок ионов, состоящий из атомов и молекул азота ($\sim 70\%$), взаимодействует с поверхностью твердого тела. Так как энергия связи молекулы азота существенно ниже энергии пучка, то на поверхности происходит диссоциация молекул N_2 .

Часть атомов азота отражается от образца, уменьшая, таким образом, поток внедренных атомов, остальные проникают в глубину материала. При взаимодействии азота с поверхностью происходит распыление атомов мишени. Вследствие распыления происходит травление образца, поэтому поверхность смещается с некоторой скоростью v . Имплантированные атомы азота имеют некое первоначальное распределение по глубине образца, определяемое процессами взаимодействия ионов азота с атомами мишени (сотни Ангстрем при энергии ионов азота 1.2 кэВ). В дальнейшем атомы азота проникают в объем материала в результате процессов диффузии. Азот, взаимодействуя с атомами растворенного элемента, способен образовывать примесные комплексы, которые могут распадаться под воздействием температуры [56,57,78].

Теоретическое исследование формирования глубоких ионно-модифицированных слоев включает моделирование нагрева образца ионным потоком и диффузионно-кинетических процессов в образце с учетом распыления ионами пучка. Под воздействиями плазмы и ионных пучков на металлы процесс диффузии азота происходит при одинаковых температурах, значения и время достижения которых определяются решением задачи нагрева, из-за этого можно считать процесс азотирования изотермическим.

При высокоинтенсивной импульсной имплантации азота в поверхностном слое обрабатываемой детали развиваются процессы радиационно-стимулированной диффузии, обеспечивающие высокую скорость и глубину насыщения ($\sim 10...150$ мкм) [63]. Нитриды могут существовать в виде твердого раствора и находиться в свободном состоянии, располагаясь в дефектах, трещинах [30,63]. При этом глубина азотированного слоя контролируется диффузионной подвижностью и зависит от дозы и длительности обработки, температуры поверхности образца. С увеличением плотности ионного тока до $5...10$ мА/см² глубина проникновения примеси азота в поверхность обрабатываемой детали при имплантации ионов азота низкой энергии увеличивается [71]. Причины радиационно-ускоренного глубинного переноса внедренных при ионной имплантации атомов могут быть также упругие

напряжения, возникающие в имплантированном слое [64]. Из-за числа и универсальности параметров, влияющих на кинетику роста слоев, трудно создать модель, включающую в себя все важные факторы кинетики и, следовательно, формирования составных слоев. Идеальное условие для формирования фаз имеет система Fe-N [58-60].

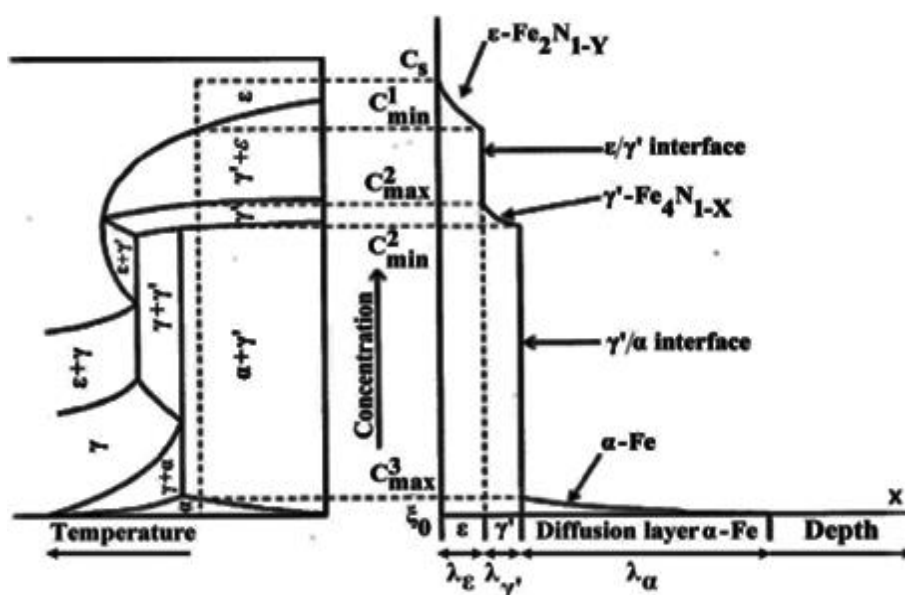
Математическая модель азотирования стали 40X построена на основе уравнения диффузии с учетом бинарной фазовой диаграммы Fe-N (рисунок 3.2) при выполнении условия сохранения масс на границах между слоями (соединениями). Численные расчеты проведены для сравнения с экспериментальными данными и проверки адекватности модели.

3.2.1. Формирование ионно-модифицированных слоев железа высокоинтенсивным ионным пучком

Из экспериментальных работ [4,58,79-85] следует, что в результате имплантации азота, в азотированном слое железа и сталей, образуются твердый раствор азота в α -железе, низкоазотистый нитрид γ' и высокоазотистый гексагональный нитрид ε , соотношение которых определяется температурой имплантации и способом предварительной подготовки поверхности.

Поэтому поверхностный состав азотированной стали 40X может быть предсказан с учетом фазовой диаграммы Fe-N (рисунок 3.2).

Рис. 3.2. Фазовая диаграмма Fe-N и схема распределения концентрации азота [79]



Математическая модель азотирования построена на основе уравнения диффузии (3.1) при выполнении условия сохранения масс на границах между слоями (соединениями) (3.2), где $i = 1$ соответствует слою ε -Fe₃N, $i = 2$ – слою γ' -Fe₄N.

На рисунке 1.10 показаны схема распределения концентрации азота в железе в слоях ε и γ' , а также α -диффузионной зоне, аналитические выражения, которой записываются в виде:

$$\begin{cases} C_{\varepsilon}(x,t) = C_S + \frac{C_{\min}^1 - C_S}{\operatorname{erf}\left(\frac{\lambda_{\varepsilon}}{\sqrt{4D_{\varepsilon}t}}\right)} \cdot \operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{4D_{\varepsilon}t}}\right) \\ C_{\gamma'}(x,t) = C_{\max}^2 + \frac{C_{\min}^2 - C_{\max}^2}{\operatorname{erf}\left(\frac{\lambda_{\gamma'}}{\sqrt{4D_{\gamma'}t}}\right)} \cdot \operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{4D_{\gamma'}t}}\right) \\ C_{\alpha}(x,t) = C_{\max}^3 - C_{\max}^3 \operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{4D_{\alpha}t}}\right) \end{cases} \quad (3.17)$$

Динамика ширины ε - и γ' -слоев определяется системой дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \frac{d\lambda_{\varepsilon}}{dt} = \frac{1}{\Delta C_{12}} \left(D_{\varepsilon} \frac{\Delta C_1}{\lambda_{\varepsilon}} - D_{\gamma'} \frac{\Delta C_2}{\lambda_{\gamma'}} \right) - v \\ \frac{\partial \lambda_{\gamma'}}{\partial t} = \frac{1}{\Delta C_{23}} \left(D_{\gamma'} \frac{\Delta C_2}{\lambda_{\gamma'}} - C_{\max}^3 \sqrt{\frac{D_{\alpha}}{\pi t}} \right) - \frac{d\lambda_{\varepsilon}}{dt} - v \end{cases} \quad (3.18)$$

здесь $D_{\varepsilon, \gamma', \alpha}$ – коэффициенты диффузии азота, $\lambda_{\varepsilon, \gamma'}$ – толщина слоев и диффузионной зоны, и $\Delta C_{12} = C_{\min}^1 - C_{\max}^2$, $\Delta C_{23} = C_{\min}^2 - C_{\max}^3$, $\Delta C_1 = C_{\max}^1 - C_{\min}^1$,

$$\Delta C_2 = C_{\max}^2 - C_{\min}^2.$$

В системе Fe-N максимальная концентрация азота в ε -слое (Fe₂₋₃N) достигает 11.15 масс.%, концентрация азота в γ' -слое (Fe₄N) в диапазоне 5.76...5.91 масс.%, максимальная растворимость азота в α железе ~ 0.1 масс.% [58], т.е.

$$\left\{ \begin{array}{l} C_S \approx 11.5 \text{ масс.}\% \\ C_{\min}^1 \approx 7.71 \text{ масс.}\% \end{array} \right\}, \left\{ \begin{array}{l} C_{\max}^2 \approx 5.91 \text{ масс.}\% \\ C_{\min}^2 \approx 5.76 \text{ масс.}\% \end{array} \right\} \text{ и } C_{\max}^3 \approx 0.1 \text{ масс.}\%.$$

Увеличение температуры азотирования приводит к увеличению коэффициента диффузии азота во всех фазах $D_{\varepsilon, \gamma', \alpha} = D_{0, \varepsilon, \gamma', \alpha} \exp\left(-\frac{E_{\varepsilon, \gamma', \alpha}}{RT}\right)$, где

$$\left\{ \begin{array}{l} D_{0, \varepsilon} = 2.1 \cdot 10^{-8} \frac{\text{м}^2}{\text{с}}, \quad E_{\varepsilon} = 93517 \frac{\text{Дж}}{\text{моль}} \\ D_{0, \gamma'} = 1.7 \cdot 10^{-9} \frac{\text{м}^2}{\text{с}}, \quad E_{\gamma'} = 64000 \frac{\text{Дж}}{\text{моль}} \\ D_{0, \alpha} = 6.6 \cdot 10^{-7} \frac{\text{м}^2}{\text{с}}, \quad E_{\alpha} = 77900 \frac{\text{Дж}}{\text{моль}} \end{array} \right. \quad (3.19)$$

При увеличении температуры азотирования увеличивается коэффициент диффузии азота во всех фазах, что приводит к уменьшению соотношения $D_{\alpha}/D_{\varepsilon}$ и $D_{\gamma'}/D_{\varepsilon}$, в то время как увеличивается отношение $D_{\alpha}/D_{\gamma'}$. С ростом плотности тока коэффициент радиационно-стимулированной диффузии возрастает за счет уменьшения энергии активации.

Система (3.18) описывает взаимосвязанный рост ε и γ' слоев, динамика которого зависит от времени, коэффициента диффузии и скорости распыления. При отсутствии распыления и в предположении, что ширина слоя является функцией квадратного корня времени $\lambda_{\varepsilon, \gamma'} \sim \sqrt{t}$, решение системы (3.18) допускает аналитические оценки для ширины слоев, совпадающие с формулами работы [58].

Система уравнений (3.18) и формулы (3.17) образуют полную диффузионную модель для азотирования чистого железа и нелегированных сталей, позволяющую моделировать развитие составного слоя во время азотирования независимо от способа азотирования (плазменное, низкоэнергетическая имплантация азота). Для легированных сталей следует рассматривать важную реакцию - осаждение нитрида в диффузионной зоне. При высокоинтенсивной имплантации азота нитриды могут существовать в виде

твёрдого раствора и находиться в свободном состоянии, располагаясь в дефектах, трещинах [30,63].

Численные расчеты системы (3.18) проведены для сравнения с экспериментальными данными и проверки адекватности модели.

3.2.2. Плазменное азотирование стали

В экспериментах, проведенных в работах [39,76], плазма формируется в полом цилиндрическом катоде, внутри которого располагается деталь (детали). Во время обработки деталь служит катодом, между плазмой и деталью формируется слой пространственного заряда, в электрическом поле которого ускоряются ионы плазмы. Благодаря ионной бомбардировке осуществляется нагрев деталей и процесс азотирования.

Анализ экспериментальных результатов [76] показывает, что азотирование стали 4140 в атмосфере чистого азота в течение 2 часов приводит к увеличению микротвердости на поверхности и по глубине образца (более чем в 3 раза), формируется нитридный слой (Fe_4N), который имеет толщину 4...10 мкм в зависимости от состава газовой смеси.

На рисунке 3.3 показаны экспериментальные зависимости распределения азота в стали 4140 (состав: Fe ~ 96%, Cr ~ 0.75...1%, Mn ~ 0.75...1%, C ~ 0.38...0.43%, ...), здесь же показаны расчетные зависимости (3.17) при $T = 500^\circ\text{C}$, полученные для железа (3.19) и для стали с учетом того, что в ней помимо железа содержатся примеси, которые влияют на коэффициенты диффузии азота и концентрацию фазы насыщенного α -раствора C_α . Кроме того, формирование устойчивых соединений азота с примесями приводит к размытию фазовых границ. Результаты модели (3.17-3.18) согласуются с результатами других авторов [55] и экспериментом [76].

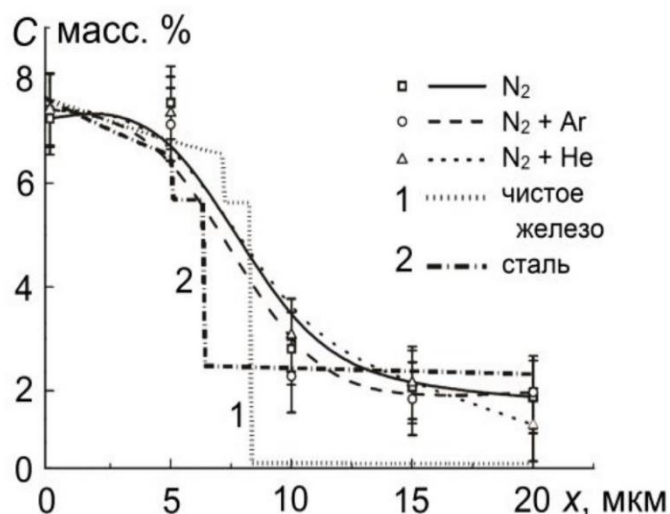


Рис. 3.3. Экспериментальные [76] и численные распределения азота в чистом железе (1) и стали (2)

Азотирование стали 4140 в плазме несамостоятельного тлеющего разряда с полным катодом приводит к образованию многослойной структуры с твердостью 10...12 ГПа на поверхности и резко спадающей до 2.5 ГПа (исходная микротвердость) на глубине 150 мкм [76]. Поверхностный слой (рисунок 3.3) включает в себе нитридные фазы $Fe_{2-3}N$ и Fe_4N .

В работе [39] показано, что методы азотирования сталей 40X (состав: Fe ~ 97%, Cr ~ 0.8...1.1%, Mn ~ 0.5...0.8%, C ~ 0.36...0.44%, ...) и 12X18H10T (состав: Fe ~ 67%, Ni ~ 9...11%, Mn ~ 2%, Si ~ 0.8%, C ~ 0.12%, ...) в плазме несамостоятельного дугового разряда с накалимым катодом и в плазме тлеющего разряда с полым катодом большой площади близки по своей эффективности и при температуре обработки ~ 520°C позволяют получать модифицированные слои глубиной до нескольких сотен микрометров за 2...4 часа. При параметрах эксперимента (энергия ионов 400...250 эВ, плотность ионного тока 1...5 мА/см²) распыление поверхности не является существенным по сравнению с шириной модифицированного слоя. Микротвердость поверхности, при этом, может варьироваться в зависимости от типа обрабатываемой стали от ~ 9 ГПа (для стали 40X) до ~ 16 ГПа (для стали 12X18H10T) (рисунок 3.4). Присутствие никеля в стали 12X18H10T обуславливает формирование соединений ($FeNi$) с азотом, ответственных за распределение и величину микротвердости в приповерхностном слое.

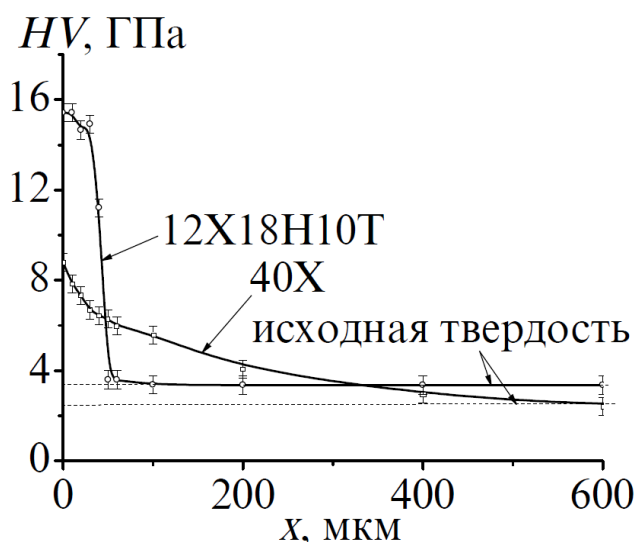


Рис. 3.4. Распределение микротвердости по глубине для образцов из стали 40X и 12X18H10T после азотирования в плазме несамостоятельного тлеющего разряда при $U_{мл} = 370$ В, $I_{мл} = 30$ А в течении 4 часов при температуре 520°C [39]

3.2.3. Формирование ионно-модифицированных слоев стали 40X при низкоэнергетической импульсной имплантации азота

Низкоэнергетическая имплантация азота осуществляется в импульсном режиме. Характеристики импульсного ионного пучка: плотность ионного тока j , энергия ионов W , коэффициент заполнения импульсов $D_{\tau} = \tau/T$, частота следования импульсов $f = 1/T$, T_{tot} – время обработки мишени ионным пучком. Задача решается для усредненных по T параметров: плотности тока, скорости распыления поверхности образца ионами.

На рисунке 3.5 показаны расчетные толщины слоев ε и γ' стали 40X в зависимости от времени азотирования при разных условиях экспериментов.

В экспериментальной работе [86] получено, что при импульсной имплантации азота с дозой ионов $3 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-2}$ ($T_{tot} = 2$ ч, $j = 2 \text{ мА/см}^2$, $W = 3 \text{ кэВ}$) в азотированном слое стали 40X образуются: твердый раствор азота в α -железе, слой γ' -Fe₄N и слой ε -Fe₃N, азотированный слой достигает 200 мкм. Кривые 1 соответствуют условиям эксперимента [86], в котором при 450°C микротвердость 5 ГПа соответствует глубине 20 мкм, а при 500°C – 40 мкм.

Кривые 2 и 3 получены при постоянной интегральной дозе и показывают, что с уменьшением скорости набора дозы толщина глубоких слоев увеличивается за счет слоя γ' . Эти результаты имеют согласие с экспериментом [87] по

азотированию стали 40Х ионным пучком ($j = 1 \dots 2$ мА/см², $W = 1$ кэВ, $T = 400^\circ\text{C}$), в котором получено, что при минимальной плотности тока образуется в поверхностном слое стали большее количество нитридной γ' -фазы с низкой концентрацией азота и высокой твердостью (9.0...9.5 ГПа).

Кривая 4 отражает динамику формирования слоя γ' -фазы при радиационно-стимулированной диффузии азота и существенном распылении поверхности ионами, обуславливающим отсутствие ε -фазы.

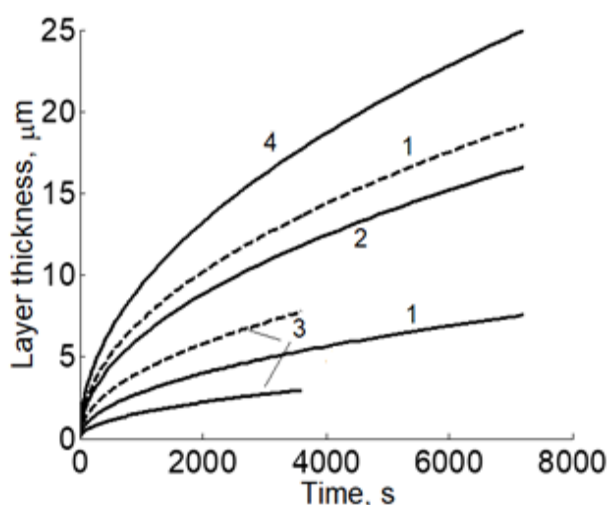


Рис. 3.5. Толщина слоев ε (---) и γ' (—) в зависимости от времени азотирования при разной концентрации на границе поверхности:

1 – 7 масс.%, 2 – 6.5 масс.%, 3 – 12 масс.%, 4 – 5 масс.%

В эксперименте [29,30] радиальная неоднородность плотности тока ионного пучка использовалась для исследования влияния плотности тока ионов азота (в диапазоне от 0.05 А/см² до 0.5 А/см²) на формирование кратера ионным распылением, глубину азотирования, изменение микроструктуры и свойств модифицированных слоев на образце из стали 40Х в диапазоне температур 450...650°C. Напряжение смещения $U = -1.3$ кВ (энергия ионов пучка 1.3 кэВ), длительность импульса смещения $\tau = 4$ мкс, $D_\tau = 0.4$, $T_{\text{tot}} = 80$ мин. В эксперименте с дозой ионов $10^{20} \dots 2 \cdot 10^{21}$ см⁻² концентрация азота на поверхности не превышает 20 ат.%. При плотности тока 0.05...0.5 А/см² существенную роль на формирование слоев играет рассеяние поверхности ионами азота. С увеличением плотности тока, с одной стороны, увеличивается доза ионов, поступающих в

приповерхностные слои образца, а с другой стороны, растет скорость рассеяния поверхности образца бомбардирующими ионами. На рисунке 3.6 показано расчетное радиальное распределение плотности тока ионов азота пучка на образец (полученное методом крупных частиц) и соответствующая ему глубина распыления поверхности (зависимость h от расстояния до центра кратера). При увеличении температуры образца с 450°C до 680°C , глубина кратера изменяется с 160 до 210 мкм, что связано с увеличением коэффициента распыления $Y(T)$.

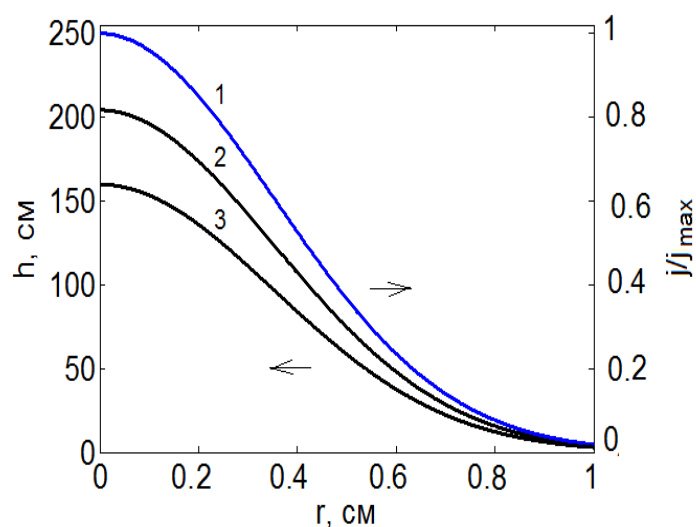


Рис. 3.6. Распределение относительной плотности тока пучка (1) и глубины распыления поверхности: 2 – $T = 650^{\circ}\text{C}$, 3 – $T = 450^{\circ}\text{C}$

Двухслойная структура облученной мишени (рисунок 1.11) указывает на то, что в этих областях диффузионные процессы протекают с разной скоростью, (диффузия вдоль границ зерен, внутри зерна). При моделировании учитывалось, что первый слой (шириной l) формируется в режиме насыщения с концентрацией нижней границы 12 ат.%, коэффициенты радиационно-стимулированной диффузии оценивались из результатов эксперимента. На рисунке 3.7 показаны экспериментальное и расчетное распределение концентрации азота при $T = 500^{\circ}\text{C}$.

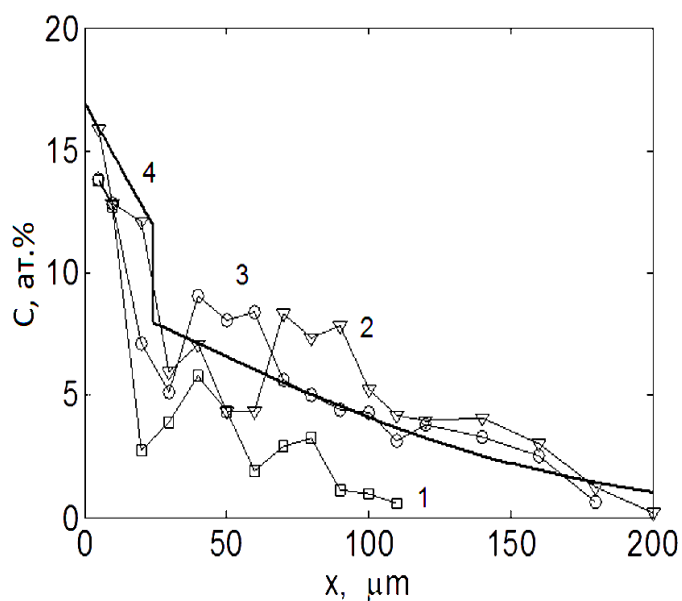


Рис. 3.7. Экспериментальное (1, 2, 3) и расчётное (4) распределение концентрации азота при $T = 500^{\circ}\text{C}$; 1 – $r = 0.2$ см; 2 и 4 – 0.4 см; 3 – 0.6 см

На рисунке 3.8 показаны зависимости ширины первого слоя l от времени на разных расстояниях от центра кратера $r = 0, 0.2, 0.4, 0.6$ и 0.8 см для разных значений плотности тока (рисунок 3.6) при температуре 500°C , коэффициенты диффузии $D_{\gamma'} = 9 \cdot 10^{-13}$ м/с² и $D_{\alpha} = 1.8 \cdot 10^{-12}$ м/с². Влияние температуры отражено кривыми 3 ($T = 500^{\circ}\text{C}$), 6 ($T = 580^{\circ}\text{C}$) и 7 ($T = 450^{\circ}\text{C}$). Оптимальная температура азотирования – 500°C . Наибольшая скорость роста первого слоя и его ширина в конце времени азотирования имеют место на расстоянии $r = 0.4$ см (т.е. при токе пучка 0.3 А/см²).

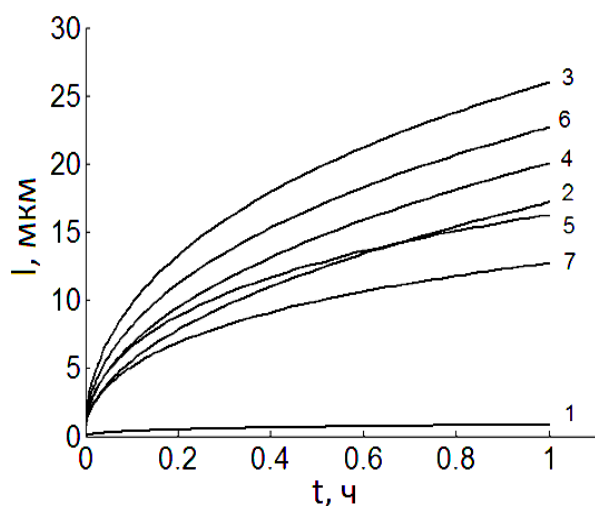


Рис. 3.8. Изменение ширины слоя l от времени: 1 – $r = 0$ см; 2 – 0.2 см; 3, 6 и 7 – 0.4 см; 4 – 0.6 см; 5 – 0.8 см; 1, ..., 5 – $T = 500^{\circ}\text{C}$; 6 – 580°C ; 7 – 450°C

В центре кратера ($r = 0$) отсутствует первый слой (рисунки 1.11 и 3.6). В том случае распределение концентрации в образце описывается решением уравнения диффузии $C(x) = C_s \operatorname{ierf}(x/4Dt)^{0.5}$, коэффициент диффузии азота $D = 10^{-13}$ м²/с при T

= 500°C. Значение концентрации на поверхности образца $C_s = 18.9$ ат.% превышает минимальное значение (18.3 ат.%) для формирования γ' фазы (Fe_4N), следует заметить, что зона гомогенности соединения фазы Fe_3N начинается с 17 ат.% [4].

На рисунке 3.9 представлены зависимости концентрации в поверхностном слое и ширины слоя l от расстояния до центра образца и плотности тока пучка. Величина концентрации азота в поверхностном слое коррелирует с шириной слоя l и не превышает 19 ат.%. Микротвердость 5 ГПа соответствует глубине $x = l$.

Максимум ширины слоя l при плотности тока 300 mA/cm^2 (рисунок 1.9) и глубины проникновения азота (рисунок 1.10) связан с конкуренцией скоростей распыления поверхности и радиационно-стимулированной диффузии.

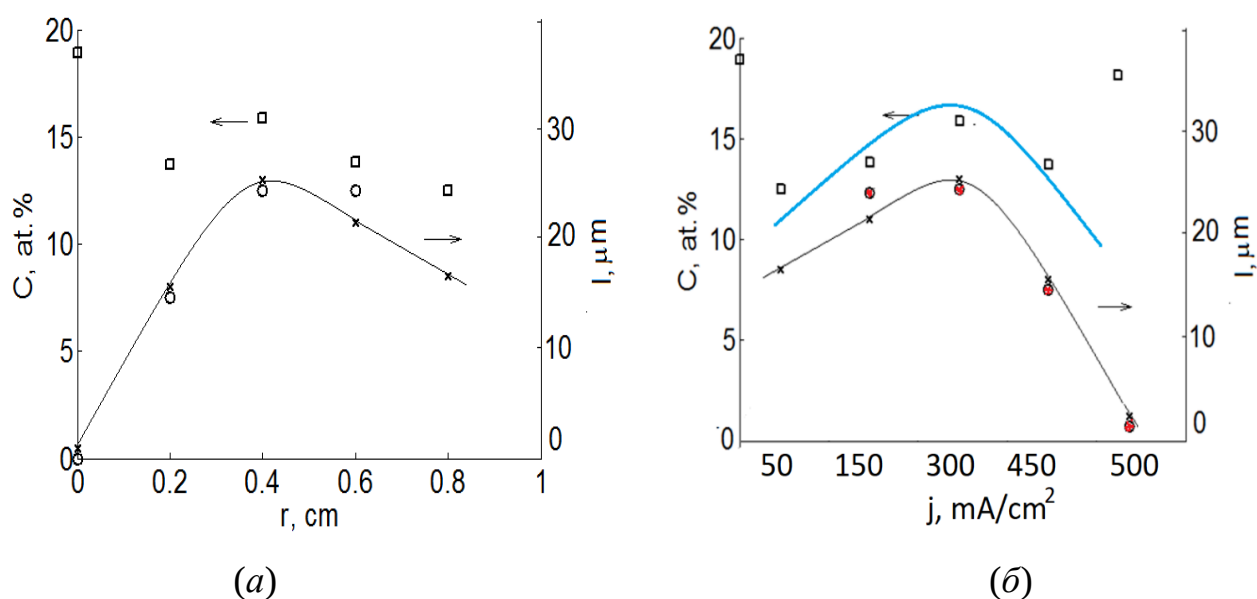


Рис. 3.9. Изменение концентрации ($\square$) и ширины слоя l ($\circ$, $\times$) от расстояния до центра образца (а) от плотности тока пучка (б);
($\circ$, $\square$) – эксперимент, ($\times$) – расчет, $T = 500^\circ\text{C}$

С увеличением плотности тока пучка увеличивается коэффициент диффузии и скорость распыления, при плотности тока ионного пучка $j_b > 300$ mA/cm^2 глубина модифицированного слоя уменьшается и при $j_b = 500$ mA/cm^2 становится сравнимой с величиной распыленного слоя (рисунки 1.10 и 3.6).

Увеличение ширины азотированной зоны при изменении плотности тока от 50 до 300 мА/см² происходит за счет увеличения коэффициента радиационно-стимулированной диффузии азота. Дальнейшее увеличение плотности тока обуславливает формирование поверхностного азотосодержащего слоя, который состоит из нитридов, имеющих низкую диффузионную подвижность, и препятствует дальнейшему насыщению объемных слоев азотом. Увеличение скорости набора дозы при высокоинтенсивной имплантации азота приводит к уменьшению способности формирования высокой концентрации нитридных фаз, Fe₂N и Fe₃N [64]. Взаимодействие ионного пучка с распыленными частицами поверхности может также способствовать образованию нитрида FeN, молекулы которого под воздействием направленного к поверхности падающего потока адсорбируются поверхностью.

Анализ экспериментальных результатов показывает, что как при импульсном ионно-пучковом азотировании ($\Phi = 3 \cdot 10^{19}$ см⁻² [86], $\Phi = (2 \dots 20) \cdot 10^{20}$ см⁻² [29,30]), так и при плазменном азотировании (непрерывный режим, $\Phi = (5 \dots 10) \cdot 10^{19}$ см⁻² [39,76]) ширина слоя l_H , где микротвердость превышает исходную, не зависит практически от дозы частиц ($l_H \sim 100$ мкм при одинаковом температурном режиме). Это связано с процессом распыления ионами поверхности образца. С одной стороны, распыление способствует формированию окисного слоя или нитридной фазы с низкой скоростью диффузии, которые препятствуют объемной диффузии. С другой стороны, однонаправленный рост скоростей диффузии и распыления поверхности не позволяет эффективно использовать преимущество радиационно-стимулированной диффузии (при увеличении плотности ионного тока).

Совокупность полученных результатов указывает на многофакторное влияние высокоинтенсивной имплантации ионов азота низкой энергии на изменение элементного состава и микроструктуры слоев стали 40Х на глубинах многократно превышающих пробег ионов.

Одним из решения вопроса увеличения глубины азотированной области при высокоинтенсивной низкоэнергетической имплантации азота является

уменьшение энергии ионного пучка на поверхности образца, способствующее уменьшению распыления поверхностных слоев и формированию фаз, отвечающих за высокую микротвердость (Fe_{2-3}N). Кроме того, вероятно, что с помощью управления скважностью импульсов напряжения смещения можно повлиять на динамику формирования фаз и диффузионной зоны.

Моделирование нагрева образца. Моделирование азотирования образца высокоинтенсивным ионным пучком включает задачу нагрева мишени за счет бомбардировки ионов, которую в условиях эксперимента (постоянная температура процесса азотирования) можно решать независимо от уравнения диффузии. Для определения динамики температуры решалось уравнение теплопроводности для аксиально-симметричной геометрии эквивалентной экспериментальной [30].

На рисунке 3.10 показана геометрия расчетной области и на рисунке 3.11 – динамика температуры в центре поверхности образца ($r = 0$) и $r = 1$ см при двух радиусах коллектора $R_{\text{колл}} = 1.5$ и 4 см.

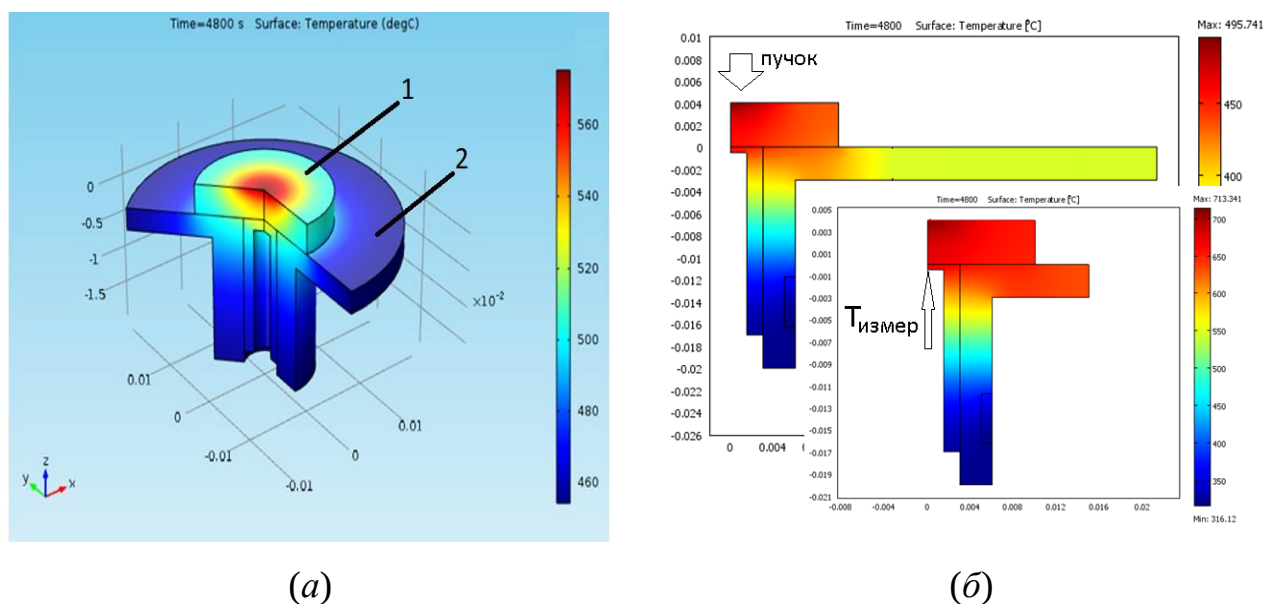


Рис. 3.10. 3-х мерная (а) и 2-х мерная (б) геометрия расчетной области,
1 – образец, 2 – коллектор

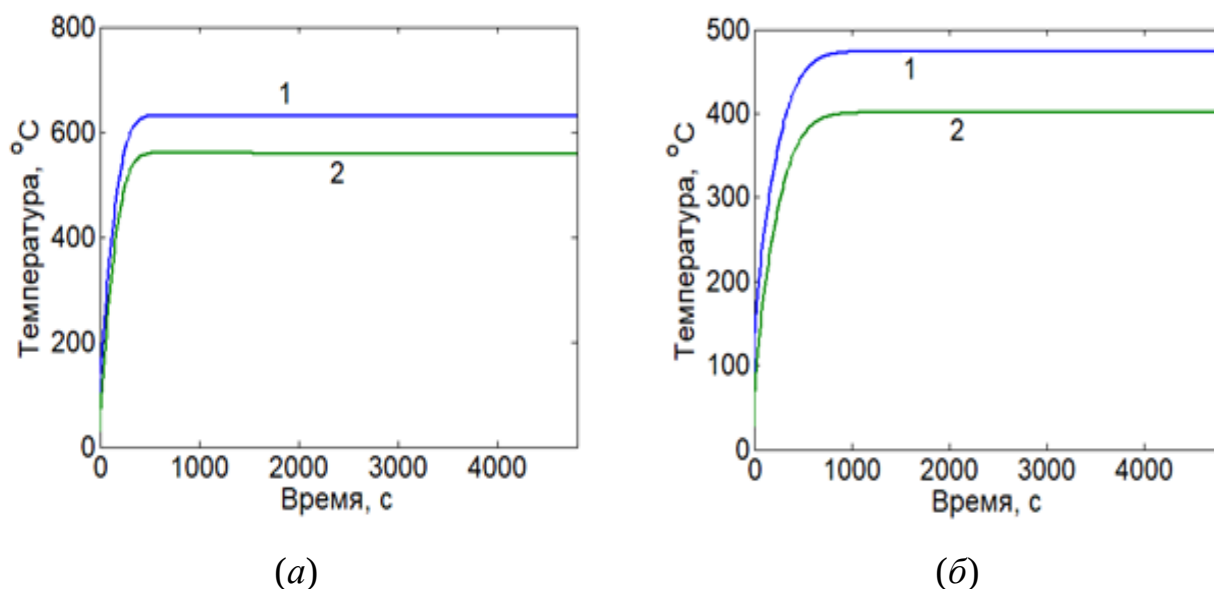


Рис. 3.11. Динамика температуры в центре поверхности образца $r = 0$ (1) и $r = 1$ см (2); (a) – $R_{колл} = 1.5$ см, (б) – $R_{колл} = 4$ см

Численные расчеты показали, что равновесная температура образца достигается, когда перенос тепловой энергии через электрическое соединение, держатель и потери излучаемой энергии на стенку вакуумной камеры соответствует среднему вкладу энергии ионов. Как в эксперименте [30], так и в расчетах варьирование температурой обеспечивается за счет излучения тепловой энергии при изменении диаметра коллектора (рисунок 3.10б).

3.3. Выводы по главе 3

Построена диффузионная модель многофазного твердого тела с учетом распыления поверхности ионами пучка, позволяющая определить динамику роста фаз и соединений. Построена диффузионная модель в терминах параметров азотирования, описывающая взаимосвязанный рост нитридных (Fe_{2-3}N) ε - и (Fe_4N) γ' -слоев, доминирующими параметрами которого являются время, коэффициенты диффузии и скорость распыления; показано, что модель может описывать динамику формирования фаз стали 40X, 4010.

Проведено исследование воздействия на сталь 40X низкоэнергетического (1...3 кэВ) пучка ионов азота с плотностью тока (0.001...0.5 А/см²); получено, что скорость роста ионно-модифицированных слоев высокая на первичных стадиях

азотирования и уменьшается с увеличением плотности тока пучка и временем азотирования; ширина слоев зависит от дозы имплантируемых ионов и температуры поверхности образца; толщина глубоких слоев увеличивается за счет слоя γ' при уменьшении скорости набора дозы.

Сравнение результатов расчета и эксперимента по воздействию на сталь 40Х импульсно-периодического пучка ионов азота (с энергией ионов 1.2 кэВ в диапазоне плотности тока 0.05-0.5А/см²) указывает на конкуренцию скоростей распыления поверхности и радиационно-стимулированной диффузии, которая определяет экспериментальные профили распределения примеси азота по глубине, максимальное значение глубины (180 мкм) при $j = 0.3\text{А/см}^2$ и формирование приповерхностного γ' слоя шириной 25 мкм.

Моделирование процесса азотирования в системе с баллистической фокусировкой пучка, предполагающее решение задач формирования пучка ионов азота, теплопроводности и диффузионно-кинетических процессов, позволяют прогнозировать структуру поверхностных слоев при изменении геометрии системы и параметров высокоинтенсивного низкоэнергетического пучка ионов азота.

ГЛАВА 4. ИССЛЕДОВАНИЕ НАГРЕВА МЕТАЛЛОВ В ИМПУЛЬСЕ ВЫСОКОСКОРОСТНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА

Механические и эксплуатационные свойства материалов во многом определяются режимом электронно-пучкового воздействия, а также такими характеристиками материала, как величина максимальной температуры нагрева, термический цикл, скорости плавления и кристаллизации [28]. Поэтому измерение температуры поверхности при высокоскоростном воздействии электронного пучка открывает возможности, как изучение процессов нагрева, плавления, испарения материалов, так и управления технологическими параметрами модификации с целью получения заранее заданных свойств материалов после электронно-пучковой модификации. С помощью высокоскоростного инфракрасного пирометра проведены измерения температуры поверхности металлических образцов в импульсе высокоскоростного воздействия электронного пучка с разной плотностью энергии в импульсе и толщине покрытия [13-17].

Методика измерения импульсной температуры и использование численного моделирования тепловых полей в образце открывает возможность управления основными технологическими параметрами электронно-пучкового воздействия с целью получения заранее заданных свойств поверхности материалов.

Цель данной главы – теоретически с применением численного моделирования исследовать процесс высокоскоростного (50...200 мкс) нагрева мишеней (алюминий, титан, алюминий с титановым покрытием) в импульсе тока низкоэнергетического (8...20 кэВ) электронного пучка.

Результаты главы представлены в работах [13-17].

4.1. Моделирование импульсного высокоскоростного воздействия низкоэнергетического электронного пучка на металлические материалы

Математическое моделирование тепловых процессов включает в себя построение физико-математической модели, адекватной условиям эксперимента. Совместная работа экспериментаторов и теоретиков позволяет осуществить предварительный анализ технологического процесса и исследовать отдельные его стадии. Численное моделирование позволяет провести детальный анализ процессов теплового воздействия, использующего энергию электронного пучка.

При энергии электронов пучка 13 кэВ, длительности импульса $\tau = 50 \dots 200$ мкс и радиусе пучка 2 см [13,15] можно считать источник энергетического воздействия поверхностным, а тепловые процессы рассматривать в одномерном приближении.

Тепловые процессы в металле, при воздействии интенсивного низкоэнергетического электронного пучка, описываются уравнением теплопроводности, с учетом фазового перехода, температурной зависимости теплофизических коэффициентов и граничных условий на поверхности образца:

$$\begin{cases} \rho(x,T)c(x,T)\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \lambda(x,T) \frac{\partial T}{\partial x}, \\ -\lambda(x,T) \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0} = p(r,x,t), & -\lambda(x,T) \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right) \Big|_{x=L} = 0, \end{cases} \quad (4.1)$$

где $c(x,T)$, $\rho(x,T)$ и $\lambda(x,T)$ – теплоемкость, плотность и теплопроводность, зависящие в общем случае от температуры и координат, $K(x,T) = \{c(x,T), \rho(x,T), \lambda(x,T)\}$; $p(r,x,t)$ – функция, характеризующая внешний источник нагрева.

Начальные условия: $T(x,0) = T_0$.

Если образец состоит из основы и покрытия (разных металлов), то коэффициенты $K(x,T)$ и граничное условие записываются в виде [51,89]:

$$\begin{cases} K(x, T) = K_1(x, T), & x < h_1 \\ K(x, T) = K_2(x, T), & x > h_1 \\ -\lambda_2(x, T) \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=h_1} = p(r, x, t) - h_1 [c_1(x, T) \rho_1(x, T)] \frac{\partial T}{\partial t}, \end{cases} \quad (4.2)$$

где $K_1(T)$ – теплофизические коэффициенты покрытия; $K_2(T)$ – теплофизические коэффициенты основы. Зависимости теплофизических коэффициентов от температуры аппроксимируются линейными полиномами (Приложение Б).

При фазовых переходах (плавление (S) и кристаллизация (L)) объемная теплоемкость покрытия и основы описываются с помощью дельта функции Дирака

$$c\rho = L_m \rho_s \delta(T - T_{ph}) + \begin{cases} (c\rho)_S, & T < T_{ph} \\ (c\rho)_L, & T \geq T_{ph} \end{cases} \quad (4.3)$$

При решении уравнения теплопроводности (4.1) плотность мощности источника $p(r, x, t)$ не является экспериментально измеряемой величиной. Из эксперимента известен импульс мощности электронного пучка $P(t) = U(t)I(t)$ в ускоряющем промежутке, т.е. на входе в пространство дрейфа пучка (на расстоянии 40 см от мишени). На рисунке 4.1 показаны экспериментальные импульсы токов пучка для алюминия (а) и титана (б), напряжение $U(t)$ практически не изменяется во времени.

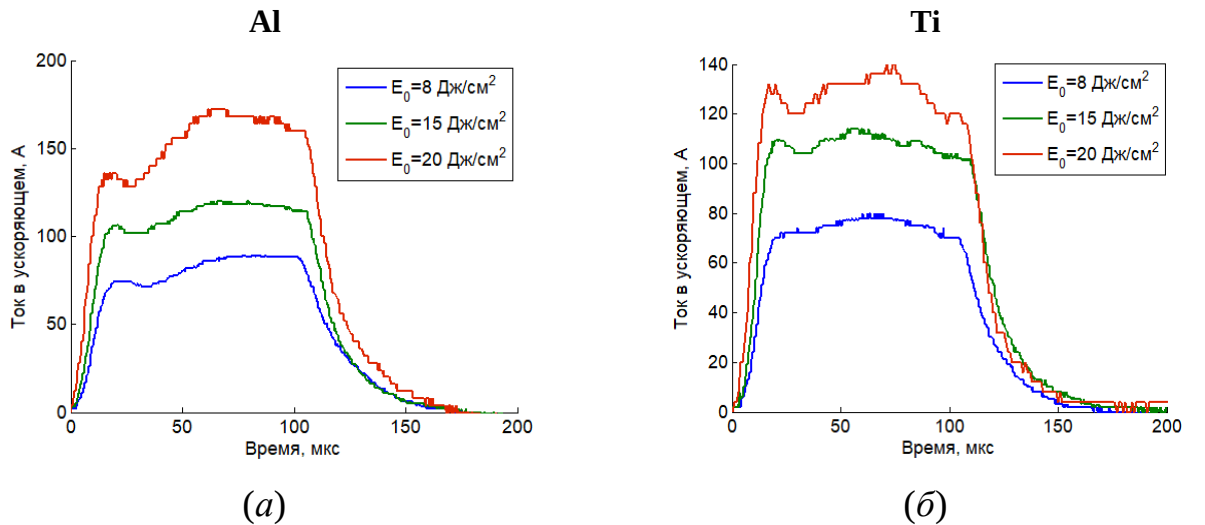


Рис. 4.1. Осциллограммы электронного пучка

Из эксперимента известно также радиальное распределение полной плотности энергии пучка $E(r)$ (рисунок 4.2). Поэтому плотность мощности $p(t)$ определяется, как $p(t)=U(t)I(t)/(\pi r_0^2)$, где r_0 – средний радиус пучка.

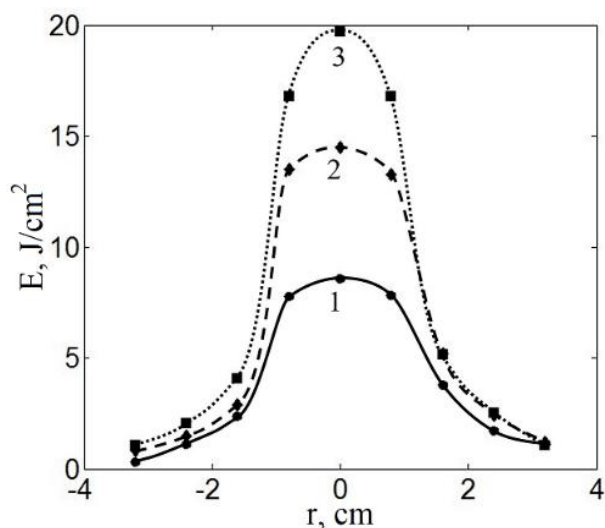


Рис. 4.2. Распределение плотности энергии электронного пучка по сечению у поверхности образца; 1 – $E=8$ Дж/см²; 2 – $E=15$ Дж/см²; 3 – $E=20$ Дж/см²

Отсутствуют данные о динамике радиального распределения плотности мощности электронов на мишени в импульсе тока пучка и о влиянии высокоскоростного воздействия (вклада энергии) электронного пучка на теплофизические коэффициенты мишени. Поэтому критерием соответствия результатов расчета и экспериментальных измерений является совпадение на мишени температуры и суммарного энергетического вклада.

Численное решение задачи теплопроводности осуществлялось по неявной консервативной разностной схеме с использованием метода прогонки [90-94] и с применением компьютерного программного пакета Matlab, решателя обыкновенных дифференциальных уравнений [95].

Решение уравнения теплопроводности проводились, как при постоянных теплофизических коэффициентах $K = \text{const}$, так и с учетом их зависимостей от температуры $K(T)$, для экспериментальных $p(t)=U(t)I(t)/(\pi r_0^2)$ и модельных прямоугольных $p(t) = E/\tau$ импульсов мощности тока пучка.

Численные расчеты сравниваются с экспериментальными измерениями температуры поверхности образцов [16,17] в центре мишени при плотности энергии пучка $E = 8, 15, 20 \text{ Дж/см}^2$ ($\tau = 100 \text{ мкс}$) и 20 Дж/см^2 ($\tau = 200 \text{ мкс}$). Использовались образцы из технически чистого алюминия марки А7 (99.7% Al), титана ВТ1-0 (99.2...99.7% Ti) или алюминия А7 с покрытым плёнкой из титана ВТ1-0, теплофизические параметры алюминия и титана представлены в Приложение В.

4.2. Высокоскоростной нагрев алюминиевого и титанового образцов

При решении уравнения теплопроводности при электроннолучевом воздействии на мишень используются в основном (например, [96,97]) постоянные теплофизические коэффициенты и прямоугольные импульсы мощности пучка, что может быть достаточно для получения общих зависимостей по усредненным (подобранным под эксперимент) параметрам. Однако такой подход не оправдан при исследовании высокоскоростного нагрева. Рассмотрим, как влияют форма импульса и теплофизические коэффициенты на температуру и полную энергию воздействия на мишени, сравним с экспериментальными измерениями.

Вычисления, проведенные при постоянных теплофизических коэффициентах $K = \text{const}$ [$c = 1000 \text{ Дж/(кг.К)}$, $\rho = 2600 \text{ кг/м}^3$, $\lambda = 93 \text{ Вт/(м.К)}$] показали, что соответствие экспериментальной и расчетной температуры алюминия для плотности энергии ($8, 15, 20 \text{ Дж/см}^2$ ($\tau = 100 \text{ мкс}$) и 20 Дж/см^2 ($\tau = 200 \text{ мкс}$)) имеет место при средних радиусах $r_0 = 1.7, 1.65, 1.47$ и 1.5 см , соответственно.

На рисунке 4.3 для случая плотности энергии $E = 8 \text{ Дж/см}^2$ показана экспериментальная и расчетная температура поверхности для модельного прямоугольного импульса мощности ($E = 8 \text{ Дж/см}^2$ при $t \leq t_{\text{имп}} = 100 \text{ мкс}$, $p = E/t_{\text{имп}}$) и экспериментального импульса мощности пучка $p(t) = U(t)I(t) / (\pi r_0^2)$, при постоянных теплофизических коэффициентах $K = \text{const}$ (сплошные линии) и с учетом их зависимости от температуры $K = K(T)$ (пунктирные линии). Из рисунка 4.3 видно, что температура для прямоугольного импульса при $E = 8 \text{ Дж/см}^2$ и $\tau =$

100 мкс значительно отличается от экспериментальной, как при $K = \text{const}$, так и при $K = K(T)$. При этом, при $K = \text{const}$ средний радиус пучка $r_0 = 1.65$ см для экспериментального импульса мощности пучка $p(t) = U(t)I(t)/(\pi r_0^2)$, а при $K = K(T)$ радиус $r_0 = 1.35$ см, т.е. требуется большая плотность мощности воздействия для соответствия экспериментально и расчетной температуры поверхности, кроме того расчетная полная энергия пучка на мишени превышает экспериментальную почти в 2 раза.

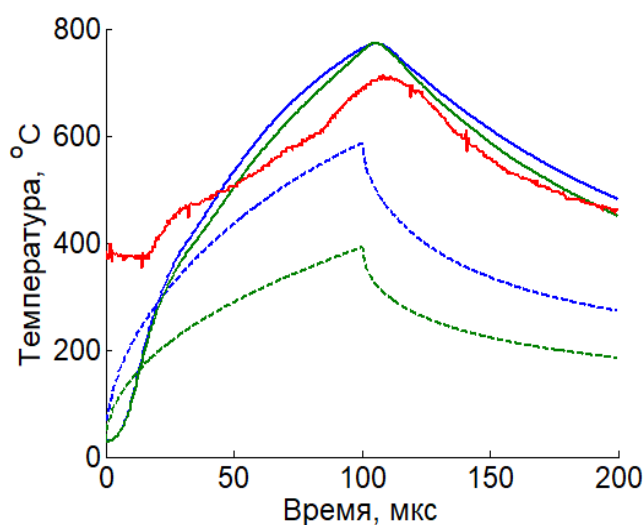


Рис. 4.3. Расчетные и экспериментальная (красная линия) температура поверхности алюминия при $E = 8$ Дж/см²; $p = E/t_{\text{умн}}$ (---); $p(t) = U(t)I(t)/(\pi r_0^2)$ (—); $r_0 = 1.65$ см, $K = \text{const}$ (синие линии); $r_0 = 1.35$ см, $K = K(T)$ (зеленые линии)

Как видно из рисунка 4.3, расчетная скорость роста температуры на фронте тока пучка ниже экспериментальной, как для прямоугольного импульса плотности мощности ($p = E/t_{\text{умн}}$), так и для импульса с плотностью мощности $p(t) = U(t)I(t)/(\pi r_0^2)$.

На рисунке 4.4 показана экспериментальная и расчетная температура поверхности в центре титановой мишени для случая $E = 8$ Дж/см² для прямоугольного и экспериментального импульсов энергии воздействия; теплофизические параметры K : $c = 680$ Дж/(кг·К), $\rho = 4505$ кг/м³ и $\lambda = 22.3$ Вт/(м·К). Скорость роста расчетной температуры на фронте тока пучка ниже экспериментальной, также как для алюминиевой мишени (рисунке 4.3), что

указывает на присутствие общего механизма, отвечающего за энергетический вклад на фронте тока пучка.

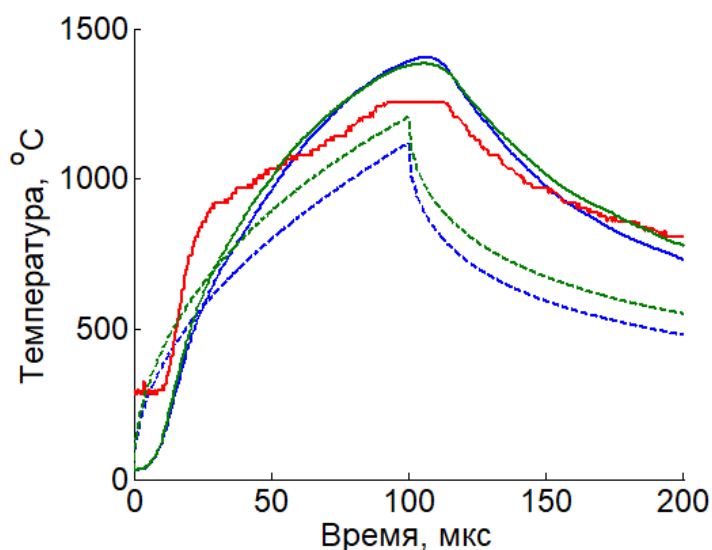


Рис. 4.4. Расчетные и экспериментальная (красная линия) температура поверхности титана при $E = 8 \text{ Дж/см}^2$; $p = E/t_{\text{имп}}$ (---); $p(t) = U(t)I(t)/(\pi r_0^2)$ (—); $r_0 = 1.65 \text{ см}$, $K = \text{const}$ (синие линии); $r_0 = 1.7 \text{ см}$, $K = K(T)$ (зеленые линии)

Более высокая скорость роста экспериментальной температуры поверхности $(4...6) \cdot 10^7 \text{ град/с}$, чем в расчете, может быть связана с динамикой радиального распределения плотности тока пучка (среднего радиуса пучка $r_0 = r_0(t)$). При решении уравнения теплопроводности (4.1) граничное условие

$$-\lambda(T) \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=0} = \frac{I(t)U(t)}{\pi r_0^2(t)} \quad (4.4)$$

зависит, как от теплопроводности $\lambda(T)$, так и от плотности мощности пучка $p(t) = U(t)I(t)/(\pi r_0^2)$ на мишени, и оказывает существенное влияние на скорость роста температуры и полную энергию пучка на мишени.

Особенностью электронного источника с сеточным плазменным катодом (рисунок 1.1) является усиление тока эмиссии (тока разряда) [22,23] за счет вторичных электронов, связанных с ионно-электронной эмиссией с поверхности сеточного электрода и границы разрядной плазмы плазменного катода [26]. На рис. 496 показаны импульсы тока разряда I_p и тока пучка I_b , отношение $(I_b - I_p)/I_p$ –

коэффициент усиления тока эмиссии в электронном источнике с плазменным катодом.

Поэтому динамика радиального распределения плотности тока пучка на фронте тока пучка может быть связана с нестационарными процессами генерации разрядной плазмы и пучка, а также с полем пространственного заряда, обуславливающим запаздывание выхода плазменных частиц пучка в сильном магнитном поле. Появление ионного тока на боковой стенке трубы дрейфа (рисунок 1.2) в конце переднего фронта тока пучка связано с движением ионов плазмы поперек силовых линий неоднородного магнитного поля и, соответственно, с расширением плазменного канала. Поэтому расширение радиального распределения плотности тока электронного пучка может происходить за счет вторичных электронов, обусловленных ионно-электронной эмиссией с поверхности эмиссионного электрода. Из рисунка 4.9б можно видеть, что доля вторичных электронов в токе пучка (коэффициент усиления тока эмиссии) увеличивается с уменьшением тока разряда.

На рисунке 4.5 показано изменение $r_0(t)$ и плотности мощности $p(t)$ электронного пучка от времени при разной плотности энергии пучка на алюминиевой мишени. Зависимость среднего радиуса $r_0(t)$ включает в себя, как динамику радиального распределения плотности мощности пучка, так и ошибки при задании табличных значений $\lambda(T)$.

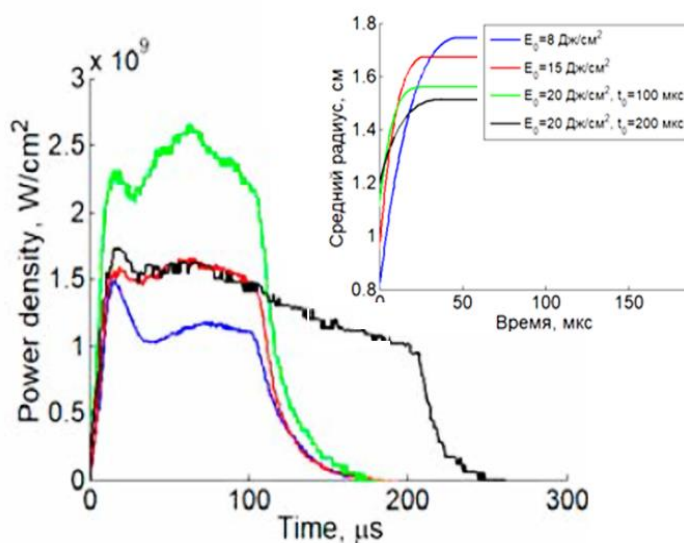


Рис. 4.5. Динамика среднего радиуса $r_0(t)$ и плотности мощности электронного пучка на алюминиевой мишени ($r = 0$): $E = 8$ Дж/см² (синяя); $E = 15$ Дж/см² (красная); $E = 20$ Дж/см² (зеленая), $\tau = 100$ мкс; $E = 20$ Дж/см² (черная), $\tau = 200$ мкс

Экспериментальные и расчетные зависимости температуры поверхности алюминиевой и титановой мишеней с учетом изменения $r_0(t)$ показаны на рисунках 4.6 и 4.7.

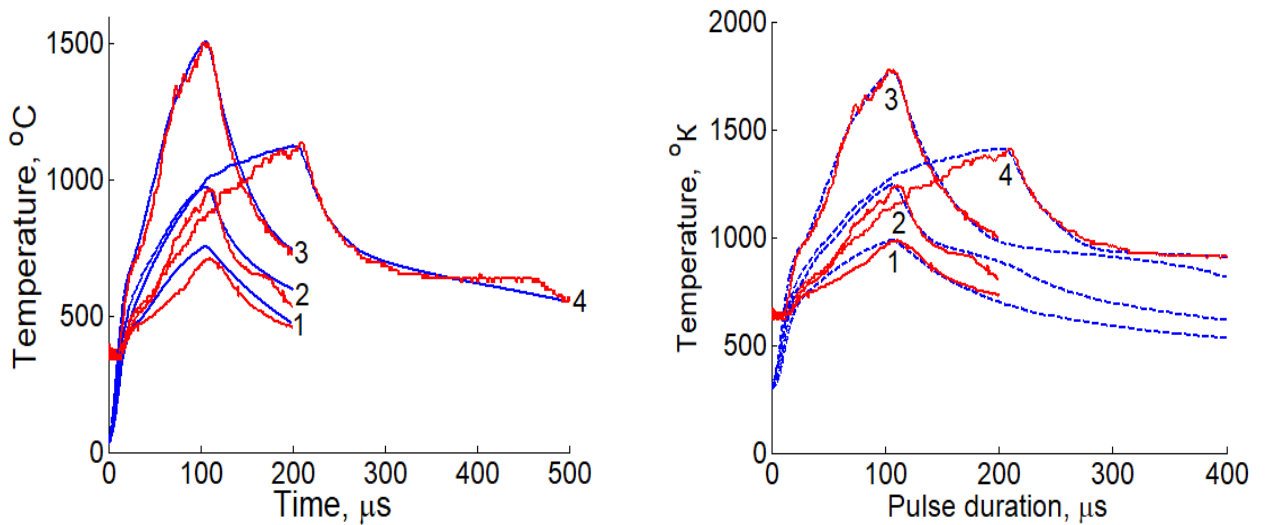


Рис. 4.6. Экспериментальная (красная) и расчетная (синяя) температура поверхности алюминия; 1 – $E = 8 \text{ Дж/см}^2$; 2 – $E = 15 \text{ Дж/см}^2$; 3, 4 – $E = 20 \text{ Дж/см}^2$; $\tau = 100 \text{ мкс}$ (1, 2, 3), $\tau = 200 \text{ мкс}$ (4)

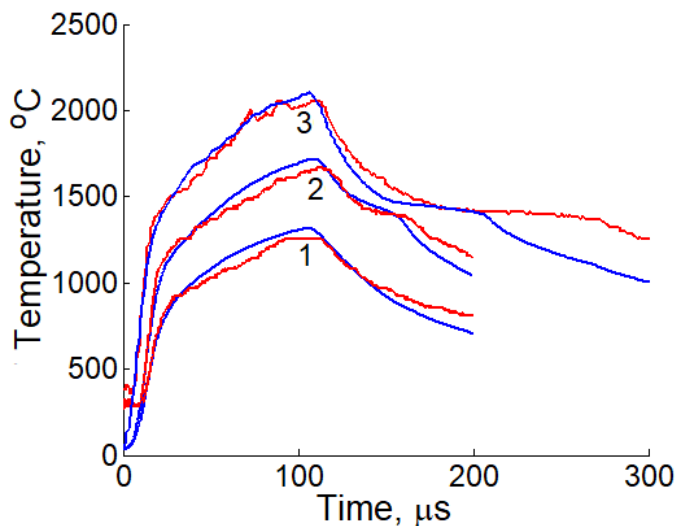


Рис.4.7. Экспериментальная (красная) и расчетная (синяя) температура поверхности титана; 1 – $E = 8 \text{ Дж/см}^2$; 2 – $E = 15 \text{ Дж/см}^2$; 3 – $E = 20 \text{ Дж/см}^2$, $\tau = 100 \text{ мкс}$

Пики на кривой зависимости температуры от времени соответствуют окончанию импульсов, плато – фазовому переходу при кристаллизации. Следует

отметить, что имеет место согласие расчета и эксперимента, как температуры, так плотности энергии пучка на мишени (рисунок 4.8):

$$E(r,t) = \int p(r,t)dt = \int_0^{\tau} \frac{P(t)dt}{\pi r_0^2(t)} \quad (4.5)$$

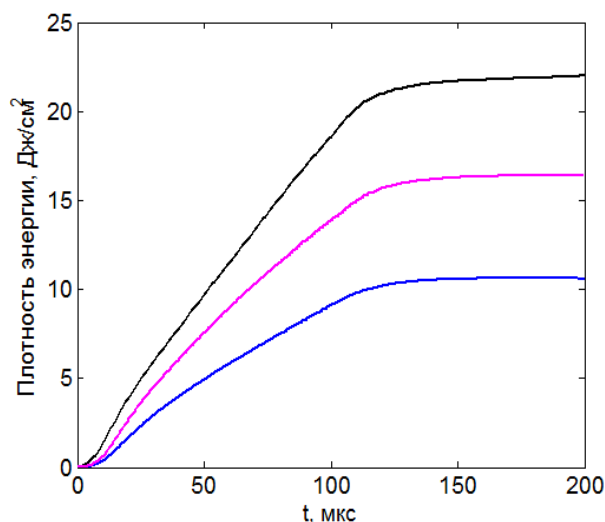


Рис. 4.8. Изменение плотности энергии в импульсе (100 мкс) воздействия электронного пучка:

$$E = 8 \text{ Дж/см}^2 \text{ (синяя); } 15 \text{ Дж/см}^2 \text{ (фиолетовая); } 20 \text{ Дж/см}^2 \text{ (черная)}$$

Плавление и кристаллизация приводят к появлению особенностей в характере температурных кривых, связанных с фазовым переходом первого рода и наличием теплоты перехода. Чем выше скорость охлаждения, тем длиннее полочка на зависимости $T(t)$. Расхождение расчета и эксперимента (рисунки 4.6 и 4.7) связано с тем, что в расчетах не учитывалась низкоэнергетическая составляющая на заднем фронте тока пучка, обусловленная плазменными ионами. Как видно из рисунков 4.6 и 4.7, в условиях эксперимента температура кристаллизации алюминия составляет $\sim 639^\circ\text{C}$, а титана $\sim 1387^\circ\text{C}$.

При обработке титана интенсивным импульсным низкоэнергетическим электронным пучком высокая степень переохлаждения и процесс кристаллизации может протекать при температурах значительно ниже температуры плавления. Это связано с переходом одной кристаллической модификации в другую, температурный порог этого процесса зависит от длительности нагрева, степени предварительной деформации, величины зерна до деформации и т. д. [98].

4.3. Высокоскоростной нагрев алюминия с титановым покрытием

Эксперименты и расчеты проведены для четырех случаев плотности энергии пучка: $E = 8, 15, 20$ Дж/см² ($\tau = 100$ мкс) и 20 Дж/см² ($\tau = 200$ мкс). На рисунке 4.9 представлены импульсы тока электронного пучка I_b в ускоряющем промежутке для системы Ti/Al. Для системы Ti(3.5 мкм)/Al на рисунке 4.9б показаны также ток разряда I_p .

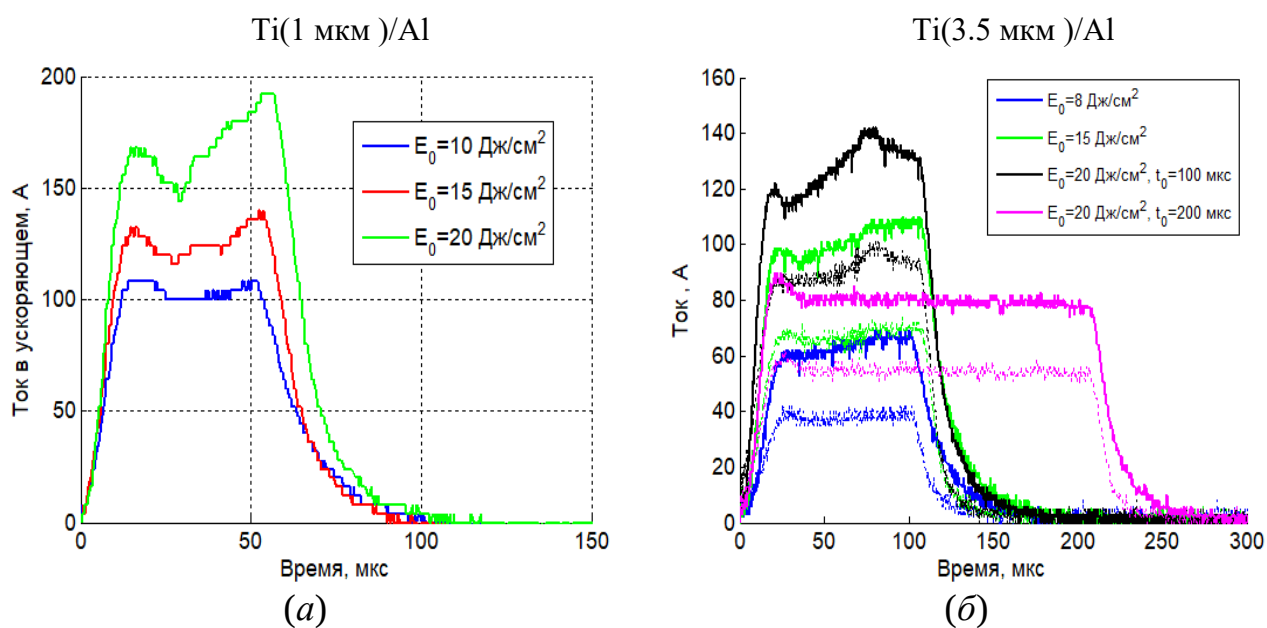


Рис. 4.9. Экспериментальные импульсы тока пучка в ускоряющем промежутке (сплошная линия) и тока разряда (пунктирная) для системы Ti/Al

На рисунке 4.10 показаны зависимости температуры поверхности образцов (титан, алюминий и алюминий с покрытием титана) от плотности мощности электронно-лучевого воздействия в конце переднего фронта импульса тока пучка. Нелинейная зависимость температуры поверхности от плотности мощности пучка $T(p)$ при $p < 0.2$ МВт/см² связана с теплопроводностью $\lambda(T)$ алюминия, влияющей на энерговклад пучка в мишень. Температура поверхности мишени зависит от свойств материала основы и покрытия, а также его толщины, при высокоскоростном нагреве на фронте тока пучка температура поверхности алюминия с титановым покрытием толщиной 3.5 мкм достигает 1400 К.

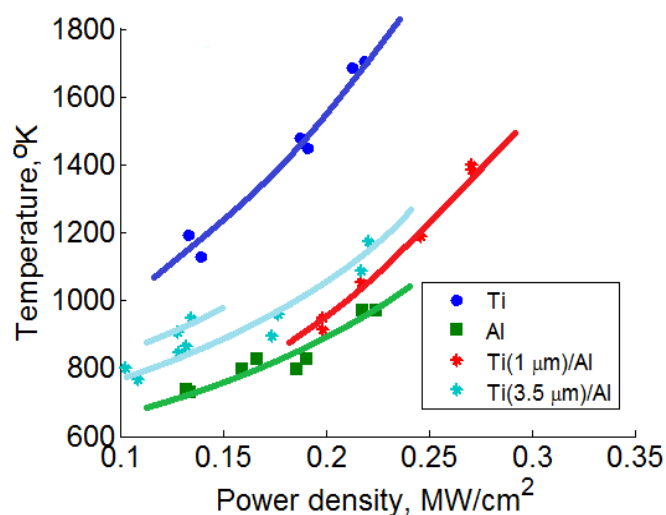


Рис. 4.10. Экспериментальные зависимости температуры поверхности мишени от плотности мощности электронного пучка в конце фронта тока пучка

На рисунках 4.11 и 4.12 показана зависимость от времени экспериментальной и расчетной температуры поверхности алюминия с титановым покрытием толщиной 1 и 3.5 мкм.

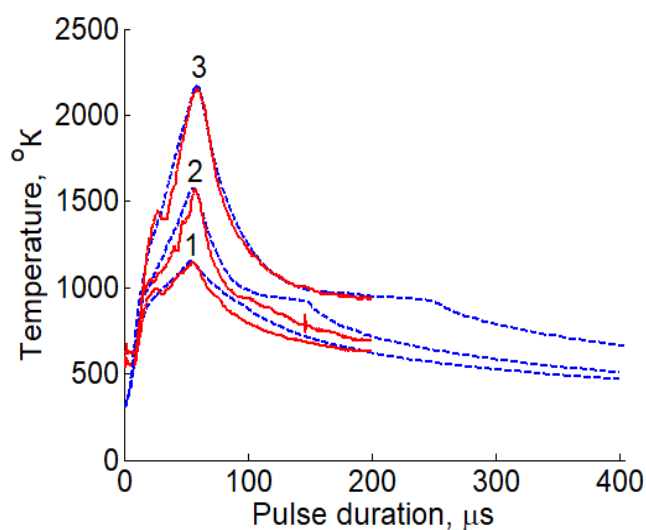


Рис. 4.11. Расчетная (---) и экспериментальная (—) температура поверхности алюминия с титановым покрытием ($h_{\text{Ti}} = 1$ мкм); 1 – $E = 8$ Дж/см²; 2 – $E = 15$ Дж/см²; 3 – $E = 20$ Дж/см²; $\tau = 50$ мкс

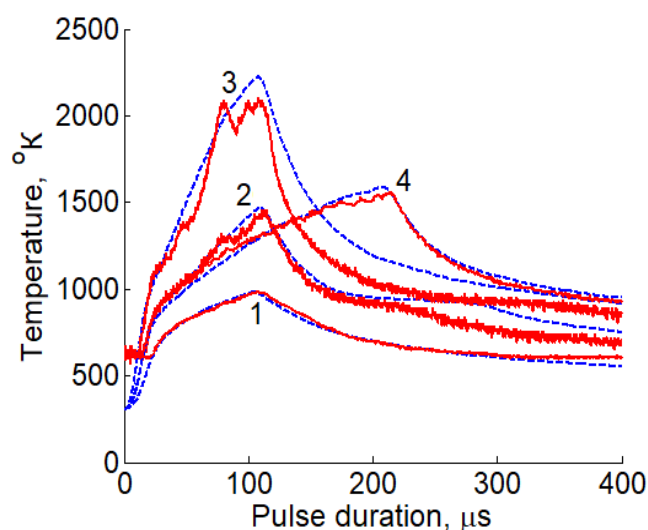


Рис.4.12. Расчетная (---) и экспериментальная (—) температура поверхности алюминия с титановым покрытием ($h_{\text{Ti}} = 3.5$ мкм); 1 – $E = 8$ Дж/см²; 2 – $E = 15$ Дж/см²; 3, 4 – $E = 20$ Дж/см²; $\tau = 100$ мкс (1, 2, 3), $\tau = 200$ мкс (4)

Как показали эксперименты, при плотности энергии $E = 8$ Дж/см² и длительности импульса выше 50 мкс структура покрытия не нарушается. При $E = 15$ Дж/см² температура поверхности не превышает 1500 К, происходит расплав алюминия (основы). При плотности энергии пучка $E = 20$ Дж/см² жидкофазная диффузия не обеспечивает существенное перераспределение концентрации покрытия и основы в приповерхностном слое. Происходит вплавление покрытия (частично расплавившегося титана) в расплав алюминия, преимущественно за счет силы тяжести. Характерная зависимость $T(t)$ при длительности импульса 100 мкс (рисунок 4.12) связана с эрозией поверхности за счет взаимодействия интенсивного пучка с расплавленным алюминием, обуславливающей направленное движение к плазменному катоду металлической плазмы. Из осциллограмм тока пучка и разряда (рисунок. 4.9) видно, что эти процессы влияют не только на конфигурацию импульса тока пучка (за счет увеличения концентрации плазмы в трубе дрейфа), но и на ток разряда (рис. 4.9), а также могут влиять на измерения температуры. Температура кристаллизации алюминия с титановым покрытием толщиной 1 и 3.5 см при 20 Дж/см² составляет 939 К и 942 К, соответственно (рисунок 4.11 и 4.12).

4.4. Выводы по главе 4

Проведено численное решение тепловой задачи и сравнение результатов численных расчетов с измерениями температуры поверхности мишени (алюминия, титана и алюминия с титановым покрытием) в импульсе высокоскоростного воздействия на нее энергии электронного пучка (диапазоне плотности энергий 8...20 Дж/см²). Показано, что скорость нагрева поверхности зависит не только от основных характеристик электронного пучка, а также от динамики радиального распределения плотности мощности пучка на мишени, обусловленной процессами формирования плазменного канала и транспортировки пучка в неоднородном магнитном поле.

При обработке металлов интенсивным импульсным низкоэнергетическим электронным пучком процесс кристаллизации может протекать при более низких температурах, чем температура плавления. Температура кристаллизации поверхности алюминия совпадает с температурой плавления, а кристаллизация поверхности титанового сплава BT1-0 протекает при температуре на ~ 280 К ниже температуры его плавления. Температура кристаллизации поверхности алюминия с титановым покрытием ($h_{\text{Ti}} = 1, \dots, 3.5$ мкм) изменяется на диапазоне – 6...9 градусов по сравнению с температурой кристаллизации чистого алюминия.

Процессы, связанные с эрозией поверхности за счет взаимодействия интенсивного пучка с расплавленным алюминием, оказывают влияние на ток пучка, температуру поверхности и ее измерение при плотности энергии пучка $E > 15$ Дж/см²: для алюминия и системы Ti(3.5 мкм)/Al при длительности импульса $\tau \leq 100$ мкс, для системы Ti(1 мкм)/Al при $\tau \leq 50$ мкс.

Методика измерения импульсной температуры и использование численного моделирования тепловых полей в образце открывает возможность управления основными технологическими параметрами электронно-пучкового воздействия с целью получения заранее заданных свойств поверхности материалов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате выполнения диссертационной работы теоретически с применением численного моделирования исследованы основные закономерности физических процессов при формировании и взаимодействии интенсивных пучков заряженных частиц с металлами. Теоретически с применением численного моделирования получено подтверждение экспериментальных результатов плазменно-иммерсионного формирования высокоинтенсивных низкоэнергетических ионных (металлических и газовых) пучков с баллистической фокусировкой. Получено, что, также как и в эксперименте, устойчивое формирование и транспортировка сфокусированных пучков металлических ионов (алюминия и титана) с плотностью тока на мишени до 500 мА/см^2 (в системе с $R_c = 7.5 \text{ см}$), осуществляется при длительности импульсов смещения менее 6 мкс (при их периоде 10 мкс). Получено, что конфигурация и амплитуда импульса тока ионного пучка на коллекторе, связаны с динамикой заряженных частиц (плазмы и пучка) в пространстве транспортировки пучка; геометрия пространства дрейфа, параметры плазмы, амплитуда и частота отрицательного потенциала смещения определяют условия компенсации пространственного заряда быстрых ионов и формирования виртуального анода, ответственного за срыв тока пучка (наблюдаемый в эксперименте), одним из механизмов компенсации пространственного заряда виртуального анода является ионно-электронная эмиссия с поверхности электродов.

Построена диффузионная модель многофазного твердого тела с учетом распыления поверхности ионами пучка, построена диффузионная модель в терминах параметров азотирования, описывающая взаимосвязанный рост нитридных $(\text{Fe}_{2-3}\text{N}) \ \varepsilon$ - и $(\text{Fe}_4\text{N}) \ \gamma'$ -слоев; проведено исследование воздействия на сталь 40Х низкоэнергетического ($1 \dots 3 \text{ кэВ}$) пучка ионов азота с плотностью тока ($0.001 \dots 0.5 \text{ А/см}^2$); получено, что скорость роста ионно-модифицированных слоев высокая на первичных стадиях азотирования и уменьшается с увеличением плотности тока пучка и временем азотирования; ширина слоев зависит от дозы

имплантируемых ионов и температуры поверхности образца; толщина глубоких слоев увеличивается за счет слоя γ' при уменьшении скорости набора дозы.

Сравнение результатов расчета и эксперимента по воздействию на сталь 40Х импульсно-периодического пучка ионов азота (с энергией ионов 1.2 кэВ в диапазоне плотности тока $0.05 \dots 0.5 \text{ А/см}^2$) указывает на конкуренцию скоростей распыления поверхности и радиационно-стимулированной диффузии, которая определяет экспериментальные профили распределения примеси азота по глубине, максимальное значение глубины (180 мкм) при $j = 0.3 \text{ А/см}^2$ и формирование приповерхностного γ' слоя шириной 25 мкм.

Для управления параметрами электронно-пучкового воздействия на металлические материалы проведено численное исследование динамики температурных полей мишени (алюминий, титан и алюминий с титановым покрытием) в импульсе высокоскоростного воздействия ($50 \dots 200 \text{ мкс}$) электронного пучка ($8 \dots 20 \text{ Дж/см}^2$). Показано, что в источнике с плазменным катодом СОЛО при вычислении температуры следует учитывать динамику радиального распределения плотности мощности электронного пучка на мишени и соответствие расчетной и экспериментальной плотности энергии электронного пучка на мишени. Численные расчеты и сравнение с экспериментальными измерениями температуры поверхности показывают, что кристаллизация протекает при более низких температурах, чем температура плавления, ($\Delta T_{\text{Al}} = 11$, $\Delta T_{\text{Ti}} = 280$ градусов). С увеличением толщины титанового покрытия от 1 до 3.5 мкм при одной и той же температуре поверхности требуется увеличение мощности пучка ($\sim$ в 1.5 раза); процессы, связанные с эрозией поверхности за счет взаимодействия интенсивного электронного пучка с расплавленным алюминием, влияют на ток пучка, температуру поверхности и ее измерение при плотности энергии пучка $E > 15 \text{ Дж/см}^2$: для алюминия и системы Ti(3.5 мкм)/Al при длительности импульса $\tau \leq 100 \text{ мкс}$, для системы Ti(1 мкм)/Al при $\tau \leq 50 \text{ мкс}$. Рассмотренные эффекты представляют интерес при разработке технологии модификации поверхностей материалов и изделий концентрированными потоками энергии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Углов А. А. Лазерная и электронно-лучевая обработка материалов / А. А. Углов, Н. Н. Рыкалин, И. В. Зуев, А. Н. Кокора // Справочник. М.: Машиностроение, 1985. – 496 с., ил.
2. Белый А. В. Инженерия поверхностей конструкционных материалов с использованием плазменных и пучковых технологий : [монография] / А. В Белый, А. С Калиниченко, О. Г. Девойно, В. А. Кукареко // Национальная академия наук Беларуси, Физико-технический институт, Национальная академия наук Беларуси, Объединенный институт машиностроения, Белорусский национальный технический университет. - Минск : Беларуская навука, 2017. - 457 с.
3. Рогов, В. А. Технология конструкционных материалов. Обработка концентрированными потоками энергии : учеб. пособие для бакалавриата и магистратуры / В. А. Рогов, А. Д. Чудаков, Л. А. Ушомирская. — 2-е изд., испр. и доп. — М. : Издательство Юрайт, 2018. — 252 с.
4. Берлин Е. В Плазменная химико-термическая обработка поверхности стальных деталей / Берлин Е. В., Коваль Н. Н., Сейдман Л. А. // – М : Техносфера, 2012. – 462с.
5. Эволюция структуры поверхностного слоя стали, подвергнутой электронно-ионно-плазменным методам обработки / [Денисова Ю. А., Иванов Ю. Ф., Иванова О. В. и др.]; под общ. ред. Н. Н. Коваля, Ю. Ф. Иванова; Федер. агентство науч. орг., Ин-т сильноточной электроники СО РАН, Нац. исслед. Томский госуд. университет. - Томск : Изд-во научно-технической литературы, 2016. - 303 с.
6. Современные тенденции модифицирования структуры и свойств материалов [Текст] : к 60-летию профессора Ю. В. Иванова / [Алсараева К. В. и др.] ; под общ. ред. Н. Н. Коваля и В. Е. Громова ; Сибирское отд-ние Российской акад. наук, Ин-т сильноточной электроники, М-во образования и науки Российской Федерации, Нац. исслед. Томский политехнический ун-т, Сибирский гос. индустриальный ун-т. - Томск : Изд-во НТЛ, 2015. - 378 с.

7. Модификация материалов компрессионными плазменными потоками / В. В. Углов [и др.]. – Минск : БГУ, 2013. – 248 с. : ил.
8. Окс, Е. М. Источники электронов с плазменным катодом: физика, техника, применения / Е. М. Окс. – Томск: Изд-во НТЛ, 2005. – 216 с.
9. Озур, Г.Е. Источник широкоапертурных низкоэнергетических сильноточных электронных пучков с плазменным анодом на основе отражательного разряда / Г.Е. Озур, Д.И. Проскуровский, К.В. Карлик // Приборы и техника эксперимента. – 2005. – № 5. – С. 1–8.
10. Девятков В.Н., Коваль Н.Н., Щанин П.М. Получение сильноточных низкоэнергетических электронных пучков в системах с плазменным эмиттером // Известия вузов. Физика. Томск: ТГУ, 2004. № 9. С. 36–43.
11. Ryabchikov A I, Ananin P S, Dektyarev S V, Sivin D O and Shevelev A E // Vacuum. 2017. V. 143. P. 447–453.
12. Рябчиков А. И. Плазменно-иммерсионное формирование высокоинтенсивных ионных пучков / Рябчиков А. И., Ананьин П. С., Дектярев С. В., Сивин Д. О., Шевелев А. Э // Письма в Журнал технической физики. 2017. Т. 43. № 23. С. 3-10.
13. Коваль Т. В. Экспериментальное и численное исследование температуры поверхности титана при импульсном электронно-пучковом воздействии / Коваль Т. В., Тересов А. Д., Москвин П. В., Чан Ми Ким Ан, Коваль Н. Н. // Взаимодействие излучений с твердым телом. Материалы 12-й Междунар. конф., Минск, Беларусь, 19—22 сент. 2017 г. / редкол.: В.В. Углов (отв. ред.) [и др.]. — Минск: Изд. центр БГУ, 2017. — С. 458-460.
14. Коваль Т. В. Моделирование процессов импульсной электронно-ионно-плазменной обработки поверхности алюминия / Коваль Т. В., Чан Ми Ким Ан // Всероссийская (с международным участием) конференция «Физика низкотемпературной плазмы» ICPLTP 2017, 5 – 9 июня 2017 г. г. Казань, С. 192.
15. Коваль Т. В. Экспериментальное и численное исследование импульсного воздействия электронного пучка на металлические мишени / Коваль Т. В., Тересов А. Д., Чан Ми Ким Ан, Москвин П. В. // Труды VI международного

Крейнделевского семинара «Плазменная эмиссионная электроника». г. Улан-Удэ, 3–8 августа 2018 г. С. 76-81.

16. Teresov A. Dynamics of surface heating and quenching of titanium by a submillisecond intense electron beam / Teresov A., Koval T., Moskvina P., Chan Mi Kim An, Koval N. // Key Engineering Materials. 2018, Vol. 781, pp. 82-87.

17. Teresov A. High-Speed Surface Temperature Measurement in Ti-Coated Aluminum During Electron Beam Irradiation / Anton Teresov, Tamara Koval, Pavel Moskvina, Tran My Kim An, Nikolay Koval. // 20th International Symposium on High-Current Electronics (ISHCE) – Tomsk, 16-22 Sept. 2018, Page(s):10-14.

18. Ryabchikov, A. I. High intensity, macroparticle-free, aluminum ion beam formation / Ryabchikov, A. I., Shevelev, A. E., Sivina, D. O., Koval, T. V., & An, T. M. K. // Journal of Applied Physics. 2018. T. 123. № 23. С. 233301.

19. Koval, T. V. Formation of high intensity ion beams with ballistic focusing / Koval, T. V., Ryabchikov, A. I., Shevelev, A. E., An, T. M. K., & Tarakanov, V. P. // Journal of Physics: Conference Series 16. Сер. "International Conference "The Physics of Low Temperature Plasma", PLTP 2017" 2017. С. 012082.

20. Koval N.N. Effect of Intensified Emission During the Generation of a Submillisecond Low-Energy Electron Beam in a Plasma-Cathode Diode / Koval N N, Grigoryev S V, Devyatkov V N, Teresov A D, Schanin P M // IEEE Transactions on Plasma Science (2009) V. 37 № 10. P. 1890–1896.

21. Коваль, Н. Н. Плазменный источник электронов «СОЛО» / Н. Н. Коваль, В. Н. Девятков, С. В. Григорьев, Н. С. Сочугов // Плазменная эмиссионная электроника : Труды II Международного Крейнделевского семинара, Улан-Удэ, 17-24 июня 2006 г. - Улан-Удэ : Изд-во БНЦ СО РАН, 2006. - С. 65-71.

22. Григорьев, С.В. Эффект усиления эмиссии при генерации низкоэнергетического субмиллисекундного электронного пучка в диоде с сеточным плазменным катодом и открытой границей анодной плазмы / С. В. Григорьев, В. Н. Девятков, Н. Н. Коваль, А. Д. Тересов // Письма в ЖТФ. – 2010. – Т. 36. – Вып. 4. – С. 23–31.

23. Devyatkov V N. Generation of high-current low-energy electron beams in systems with plasma emitters / Devyatkov V N, Koval N N and Schanin P M // J Russian Physics Journal (2001) 44 No.9 937.
24. Коваль Н.Н. Полировка поверхности спицы аппарата чрескостного остеосинтеза с помощью импульсного электронного пучка субмиллисекундной длительности с последующей их заточкой / Коваль Н. Н., Тересов А. Д., Штейнле А. В. // Известия Томского политехнического университета. 2011. Т. 318. № 2. С. 116-120.
25. Ле Х.З. Токопрохождение электронов в источнике с плазменным эмиттером при отсутствии тормозящего потенциала коллектора / Х.З. Ле, Т.К. Фам // Международный научно-исследовательский журнал ISSN 2303-9868. – №7(14) 2013. – С. 37–40.
26. Ле Х. З. Численное моделирование формирования и транспортировки интенсивных низкоэнергетических электронных пучков в плазменном канале: дис. ... канд. физ.-мат. наук 01.04.20 / Ле Ху Зунг. – Томск, 2013. – 132 с.
27. Москвин П. В. Исследование потерь импульсного электронного пучка при транспортировке в газе низкого давления //Ученые записки Петрозаводского государственного университета. – 2009. – №. 11. – С. 104-108.
28. Rotshtein V, Ivanov Yu, Markov A 2006 Materials surface processing by directed energy techniques (Paris: Elsevier) 763.
29. Ryabchikov, A. I. Nitriding of steel 40x with a high-intensity ion beam / Ryabchikov, A. I., An, T. M. K., Koval, T. V., Sivin, D. O., Anan'in, P. S., & Korneva, O. S. // In Journal of Physics (2018, November).: Conference Series (Vol. 1115, No. 3, p. 032019). IOP Publishing.
30. Рябчиков, А. Модификация стали 40Х при высокоинтенсивной имплантации ионов азота / Рябчиков, А., Сивин, Д. О., Ананьин, П. С., Иванова, А. И., Углов, В. В., & Корнева, О. С. // Известия высших учебных заведений. Физика (2018), 61(2), 60-66.

31. Berezin, A. V. Numerical modeling of plasma generation in a hollow cathode triggered discharge / Berezin, A. V., Vorontsov, A. S., Markov, M. B., Parotkin, S. V., & Zakharov, S. V. // *Mathem. Montisnigri* (2012), 25, 51-64.
32. Hagelaar, G. J. M. Solving the Boltzmann equation to obtain electron transport coefficients and rate coefficients for fluid models / G. J. M. Hagelaar, L. C. Pitchford // *Plasma Sources Sci. Technol.* – 2005. – V. 14. – P. 722–733.
33. Нгуен Б. Х. Моделирование генерации плазмы и электронного пучка в источниках с плазменным катодом : дис. ... канд. физ.-мат. наук 01.04.20 / Нгуен Бао Хынг. – Томск, 2016. – 106 с.
34. Метель, А. С. Тлеющий разряд с электростатическим удержанием электронов. Физика-Техника-Применение / А. С. Метель, С. Н. Григорьев // М: ИЦ ГОУ МГТУ "Станкин". 2005. – 294 с.
35. Korolev, Yu. D. High-current stages in a low-pressure glow discharge with hollow cathode / Yu. D. Korolev, Yu. D. O. B. Frants, N. V. Landl, I. A. Shemyakin, V. G. Geyman // *IEEE Trans. Plasma Sci.* – 2013. – V. 41. – Iss. 8. – P. 2087-2096.
36. Жаринов, А. В. Роль быстрых электронов в разряде с полым катодом / А. В. Жаринов, Коваленко Ю. А. // *Известия вузов. Физика.* – 2001. – Т. 44 – № 9. – С. 44-47.
37. Никулин, С. П. Влияние эмиссии заряженных частиц на характеристики тлеющих разрядов с осциллирующими электронами / С. П. Никулин // *Известия вузов. Физика.* – 2001. – Т. 44 – № 9. – С. 63-68.
38. Koval, T. V. Low Pressure Discharge Characteristics in a Large Sized Hollow Cathode / T. V. Koval, I. V. Lopatin, B. H. Nguen, A. S. Ogorodnikov // *Advanced Materials Research: Radiation and nuclear techniques in material science : Scientific Journal.* – 2015. – Vol. 1084: Physical-Technical Problems of Nuclear Science, Energy Generation, and Power Industry. – P. 196-199.
39. Лопатин И. В. Генерация объемной плазмы в разрядах низкого давления с полым катодом для азотирования поверхности металлов : дис. ... канд. тех. наук : 05.27.02 / Лопатин Илья Викторович; [Место защиты: Ин-т сильноточ. электроники].- Томск, 2013.- 161 с.: ил. РГБ ОД, 61 14-5/1429.

40. Григорьев, С. В. Исследование генерации и транспортировки субмиллисекундного электронного пучка, формируемого в диоде с плазменным катодом с сеточной стабилизацией плазменной границы и плазменным анодом с открытой подвижной границей / С. В. Григорьев, В. Т. Астрелин, И. В. Кандауров, Н. Н. Коваль, А. В. Козырев, П. В. Москвин, А. Д. Тересов // Труды IV Международного семинара «Плазменная эмиссионная электроника», г. Улан-Удэ, 25–30 июня, 2012. – С. 81–87.

41. Teresov, A. D. Investigation of characteristics of sub-millisecond electron source with the plasma cathode and the opened boundary of anode plasma / A. D. Teresov, V. T. Astrelin, V. N. Devjatkov, N. V. Gavrilov, S. V. Grigoriev, I. V. Kandaurov, N. N. Koval // in Proc. 16th Symposium on High Current Electronics, Tomsk, Russia, 2010. – P. 92–95.

42. Григорьев, В. П. Исследование транспортировки и фокусировки низкоэнергетического электронного пучка в ионизованном аргоне низкого давления / В. П. Григорьев, Т. В. Коваль, В. Р. Кухта, П. Рахарджо, К. Уемура // Журнал технической физики. – 2008. – Вып. 1. – Т. 78. – С. 104–108.

43. Zvigintsev, I. L. Leading Edge Erosion of Low-Energy Electron Beam during Transport into Neutral Gas / I. L. Zvigintsev, V. P. Grigoriev // Известия Вузов. Физика. – 2012. – Т. 55. – № 10/3.

44. Григорьев, В. П.. Модель образования плазменного канала низкоэнергетическим пучком в аргоне низкого давления / В. П. Григорьев, И. Л. Звигинцев // Известия Томского политехнического университета. – 2011. – Т. 319. – № 2. – С. 88–93.

45. Голант, В. Е. Основы физики плазмы / В. Е. Голант, А. П. Жилинский, И. Е. Сахаров / – М.: Атомиздат. – 1977. – 384 с.

46. Tarakanov, V. P. User's manual for code KARAT. – Springfield, VA: Berkley Research, 1992.

47. Блейхер Г. А., Кривобоков В. П. Теоретические основы обработки материалов импульсными электронными и ионными пучками: Учебное пособие. – Томск: Изд-во ТПУ, 2009. – 219 с.

48. Сарычев В. Д. Математическая модель воздействия электронных пучков на металлическую поверхность / Сарычев В. Д., Алсараева К. В., Райков С. В., Иванов Ю. Ф., Невский С. А. // Известия Волгоградского государственного технического университета. 2014. № 23 (150). С. 106-109.

49. Самарский, А. А. Вычислительная теплопередача / А. А. Самарский, П. Н. Вабищевич. – М. : Едиториал УРСС, 2003. – 784 с.

50. Букрина, Н. В. Модель взаимодействия атомарного азота с поверхностью металлокерамического сплава в процессе импульсной электронно-лучевой обработки [Электронный ресурс] / Н. В. Букрина, А. Г. Князева, В. Е. Овчаренко // Физика и химия обработки материалов : научно-технический журнал / Российская академия наук (РАН), Институт металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова (ИМЕТ). – 2011. – № 1. – С. 55-60

51. Букрина, Н. В. Моделирование формирования диффузионной зоны при импульсной электронно-лучевой обработке материала с покрытием [Электронный ресурс] / Н. В. Букрина, А. Г. Князева // Известия Томского политехнического университета [Известия ТПУ] / Томский политехнический университет (ТПУ). — 2007. — Т. 310, № 1. — [С. 91-95].

52. Букрина, Н. В. Алгоритм численного решения задач неізотермической диффузии, встречающихся в процессах поверхностной обработки / Н. В. Букрина, А. Г. Князева // Физическая мезомеханика / Институт физики прочности и материаловедения ; Российская академия наук (РАН), Сибирское отделение (СО), Институт физики прочности и материаловедения (ИФПМ). — 2006. — Т. 9, № 2. — с. 55-62.

53. Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики. – М.: Наука, 1972. – 735 с.

54. Лейви А. Я. Диффузионный массоперенос в многослойной мишени при воздействии интенсивных потоков энергии / Лейви А. Я., Талала К. А., Яловец А. П. // Физика и химия обработки материалов. 2011. № 4. С. 13-19.

55. Яловец А. П. Диффузионный массоперенос при плазменной обработке металлов / Яловец А. П., Лейви А. Я., Талала К. А. // 11-я Международная

конференция «Взаимодействие излучений с твердым мелом», 23-25 сентября 2015 г. Минск, Беларусь. – С. 65-66.

56. Марченко И. Г. Высокодозовая низкоэнергетичная ионная имплантация азота в сплавах / И. Г. Марченко, И. И. Марченко, И. М. Неклюдов // Вопросы атомной науки и техники. — 2006. — № 4. — С. 182-184.

57. Möller, W. Surface processes and diffusion mechanisms of ion nitriding of stainless steel and aluminium / Möller, W., Parascandola, S., Telbizova, T., Günzel, R., & Richter, E. // Surface and Coatings Technology (2001), 136(1-3), 73-79.

58. Hosseini, S. R. Calculation and experimentation of the compound layer thickness in gas and plasma nitriding of iron / Hosseini, S. R.; Ashrafizadeh, F.; Kermanpur // Iranian Journal of Science & Technology (2010), Transaction B: Engineering, Vol. 34, No. B5, pp 553-566.

59. León Cázares, F. Modeling surface processes and kinetics of compound layer formation during plasma nitriding of pure iron / León Cázares, F., Jiménez Ceniceros, A., Oseguera Peña, J., & Castillo Aranguren, F. // Revista mexicana de física (2014), 60(3), 257-268.

60. Sun, Y., Bell, T. A numerical model of plasma nitriding of low alloy steels. Materials Science and Engineering (1997): A, 224(1-2), 33-47.

61. Пастух И. М. Теория и практика безводородного азотирования в тлеющем разряде. – Харьков: ННЦ ХФТИ, 2006. - 361 с.

62. Степанов В. А. Радиационно-стимулированная диффузия в твердых телах. Журнал технической физики. 1998. Т. 68. № 8. С. 67-72.

63. Анищик В. М. Модификация инструментальных материалов ионными и плазменными пучками / Анищик В. М., Углов В. В. // Минск: изд-во БГУ, 2003. 191 с.

64. Углов В. В. // Радиационные эффекты твердых телах. Минск: изд-во БГУ, 2001. 207 с.

65. Спевак, Л. Ф., et al. Математическое моделирование плазменного азотирования аустенитной нержавеющей стали. Diagnostics, resource and mechanics of materials and structures, 2015, 6: 68-79.

66. Koval T. V. Numerical simulation of discharge plasma generation and nitriding the metals and alloys / Koval T. V., Manakov R. A., Nguyen Bao H., Tran My K. A. // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering – "XII International Conference Radiation-Thermal Effects and Processes in Inorganic Materials" 2016. Volume 168, conference 1. С. 012044.

67. Коваль Т. В. Формирование высокоинтенсивных ионных пучков с баллистической фокусировкой / Коваль Т. В., Кулигин С. М., Рябчиков А. И., Чан Ми Ким Ан // Всероссийская (с международным участием) конференция «Физика низкотемпературной плазмы» ICPLTP 2017, 5 – 9 июня 2017 г. г. Казань. С. 151.

68. Чан М. К. А. Моделирование транспортировки высокоинтенсивного ионного пучка с баллистической фокусировкой / Чан Ми Ким Ан, Коваль Т. В., Янюшкин Н.А. // Труды VI международного Крейнделевского семинара «Плазменная эмиссионная электроника». г. Улан-Удэ, 3–8 августа 2018 г. С. 58-64.

69. Koval, T. V. Numerical simulation of high-intensity metal ion beam generation / Koval, T. V., Ryabchikov, A. I., An, T. M. K., Shevelev, A. R., Sivin, D. O., Ivanova, A. I., & Paltsev, D. M. // In Journal of Physics: Conference Series (2018) (Vol. 1115, No. 3, p. 032007). IOP Publishing.

70. Anders, André, et al. (ed.). Handbook of plasma immersion ion implantation and deposition. New York etc.: Wiley, 2000.

71. Wei R // Surf. Coat. Technol. 1996. V. 83. P. 218–227.

72. Nguyen B. H. Mathematical Modeling of Discharge Plasma Generation and Diffusion Saturation of Metals and Alloys / Nguyen Bao Hung, T. V. Koval, Tran My Kim An // III International Scientific Conference on Information Technologies in Science, Management, Social Sphere and Medicine (ITSMSSM 2016), Tomsk, Russia 23-26 May 2016, P. 39-44.

73. Коваль Т. В. Моделирование диффузионного насыщения металлов и сплавов в полом катоде в плазме тлеющего разряда / Коваль Т. В., Нгуен Б. Х., Чан М. К. А. // Известия высших учебных заведений. Физика. 2016. Т. 59. № 9-2. С. 232-235.

74. Чан М. К. А. Моделирование азотирования стали 40X высокоинтенсивным сфокусированным ионным пучком / Чан Ми Ким Ан, Коваль Т. В. // Труды VI международного Крейнделевского семинара «Плазменная эмиссионная электроника». г. Улан-Удэ, 3–8 августа 2018 г. С. 173-177.
75. Zagonel L. F., Figueroa C. A., Droppa Jr. R., Alvarez F. // Surf. Coat. Tech. – 2006. – V. 201(1-2). – P. 452-457.
76. Akhmadeev Yu. H., Lopatin I. V., Koval N. N., Schanin P. M., Kolobov Yu. R., Vershinin D. S., Smolyakova M. Yu. // Proc. Of 10th Int. Conf. (Tomsk: Russia, 19-24 September 2010), – P. 228-231.
77. Lopatin I. V., Schanin P. M., Akhmadeev Y. H., Kovalsky S. S., Koval N. N. // Plasma Phys. Rep. – 2012. – V. 38(7). – P. 583-589.
78. Riviere J. P. High current density nitrogen implantation of an austenitic stainless steel / J. P. Riviere, P. Meheust, J. P. Villain et. al. // Surf. Coat. Technol. 2002, v. 158–159, p. 99–104.
79. Torchane, L. Control of iron nitride layers' growth kinetics in the binary Fe-N system / Torchane, L., Bilger, P., Dulcy, J., & Gantois, M. // Metallurgical and Materials Transactions A (1996), 27(7), 1823-1835.
80. Yang, Mei. Nitriding-Fundamentals, Modeling and Process Optimization. Diss. Worcester Polytechnic Institute, 2012.
81. Газизова М. Ю. Исследование закономерностей и механизмов формирования тонких модифицированных слоев в сталях при ионно-плазменном азотировании: автореферат дис. ... канд. тех. наук 01.04.07 / Газизова, Марина Юрьевна // Белгородский государственный национальный исследовательский университет. Белгород, 2014. 22 с.
82. Рамазанов К. Н. Исследование структурно-фазовых превращений и свойств поверхностных слоев сталей при ионном азотировании в тлеющем разряде низкого давления. Автореферат дис. ... доктора тех. наук / Ин-т физики прочности и материаловедения СО РАН. Томск, 2016.
83. Хусаинов Ю. Г. Исследование структуры, фазового состава и механических свойств поверхности сталей 16х3нвфмб-ш и 38хмюа при локальном

азотировании в тлеющем разряде с полым катодом. Автореферат дис. ... кандидата технических наук / Магнитог. гос. техн. ун-т им. Г.И. Носова. Уфа, 2015.

84. Кукареко В. А. Влияние высокоинтенсивной имплантации ионов азота на структуру и поведение стали 40х в условиях трения и износа / Кукареко В. А., Белый А. В., Панин С. В., Шаркеев Ю. П., Легостаева Е. В., Калиновский Д. М., Байбулатов Ш. А. // Физическая мезомеханика. 2002. Т. 5. № 1. С. 71-80.

85. Лахтин Ю. М., Коган Я. Д. Азотирование стали. М., «Машиностроение», 1976. 256 с, с ил.

86. Ковалевская Ж. Г., Кукаренко В. А. // Известия Томского политехнического университета. 2014. Т.324. №2. С.118-127.

87. Kukarenko V. A., Bueli A. V. // Surf. And Coat.Technolol. 2000. V.127. №2-3. P.174-178.

88. Сорокин В. Г. Марочник сталей и сплавов / В. Г. Сорокин, А. В. Волосникова, С. А. Вяткин и др // Под общ. ред. В. Г. Сорокина. — М.: Машиностроение, 1989. — 640 с.

89. Князева А. Г. Моделирование теплофизических и физико-химических процессов, сопровождающих формирование покрытий в электронно-лучевых технологиях модификации поверхностей металлических материалов / Князева А. Г., Поболь И. Л., Гордиенко А. И., Демидов В. Н., Крюкова О. Н., Олещук И. Г. // Физическая мезомеханика. 2007. Т. 10. № 3. С. 105-119.

90. Самарский А. А. Введение в теорию разностных схем. М.: Наука, 1971. - 553 с.

91. Самарский А. А. Теория разностных схем. учебное пособие, Главная редакция физико-математической литературы изд-ва «Наука», М., 1977.

92. Ковеня В. М. Разностные методы решения многомерных задач. Новосибирск: Новосиб. гос. ун-т, 2004. — 146 р. — ISBN 5-94356-203-6.

93. Ковеня В. М., Чирков Д. В. Методы конечных разностей и конечных объемов для решения задач математической физики. Новосибирск: Новосиб. гос. ун-т, 2013. — 87 р.

94. Кузнецов Г. В. Разностные методы решения задач теплопроводности: учебное пособие. / Г. В. Кузнецов, М. А. Шеремет // Томск: Изд-во ТПУ, 2007. – 172 с.
95. Дьяконов В. П. MATLAB. Полный самоучитель. – М.: ДМК Пресс, 2012. – 768 с.: ил.
96. Иванов Ю. Ф. Численное моделирование температурного поля силумина, облученного интенсивным электронным пучком / Иванов Ю. Ф., Петрикова Е. А., Иванова О. В., Иконникова И. А., Ткаченко А. В // Известия высших учебных заведений. Физика. 2015. Т. 58. № 4. С. 46-51.
97. Ivanov Y. F. Numerical Simulation of Thermal Processes Involved in Surface Alloying of Aluminum with Titanium by an Intense Pulsed Electron Beam / Ivanov Y. F., Kry'sina O. V., Petrikova E. A., Ikonnikova I. A. Numerical //Key Engineering Materials. 2016. Vol. 683. P. 569-575.
98. Лахтин Ю. М., Леонтьева В. П. Материаловедение. М.: Машиностроение. 1990. 528 с.
99. Чиркин В. С. Теплофизические свойства материалов ядерной техники. Справ. изд. М: Атомиздат, 1968. 484 с.
100. Зиновьев В. Е. Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. Справ. изд. М.: Металлургия, 1989. 384 с.

Приложение А. Теплофизические параметры алюминия и титана

Таб. А1. Теплофизические параметры алюминия [99]

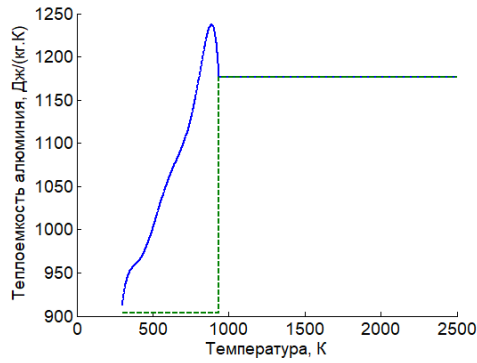
T, K	$d, \text{г/см}^3$	$c_p, \text{Дж/(кг} \cdot \text{К)}$	$\alpha \cdot 10^6, \text{м}^2/\text{с}$	$\lambda, \text{Вт/(м} \cdot \text{К)}$ *2	$\rho \cdot 10^3, \text{Ом} \cdot \text{м}$ *3	$\frac{L}{L_0}$
50	—	—	358 *	1350	0,0478/0,0476	—
100	2,725	483,6	228 *	300,4/302	0,442/0,440	—
200	2,715	800,2	109 *	236,8/237	1,587/1,584	0,77
300	2,697	903,7	93,8	235,9/237	2,733/2,733	0,88
400	2,675	951,3	93,6	238,2/240	3,866/3,875	0,94
500	2,665	991,8	88,8	234,7/236	4,995/5,020	0,96
600	2,652	1036,7	83,7	230,1/230	6,130/6,122	0,95
700	2,626	1090,2	78,4	224,4/225	7,350/7,322	0,96
800	2,595	1153,8	73,6	220,4/218	8,700/8,614	0,97
900	2,560	1228,2	69,2	217,6/210	10,18/10,005	0,99
933,61 _s	2,550 *1	1255,8	68,0 *1	217,7 *1/208 *1	10,74 *1/10,565*	1,0 *2
933,61 _l	2,368	1176,7	35,2 *1	98,1—	—24,77	1,06
1000	2,350	1176,7	36,4 *1	100,6—	—25,88	1,06
1200	2,290	1176,7	39,5 *1	106,4—	—28,95	1,04
1400	—	1176,7	42,4 *1	—	—31,77	—
1600	—	1176,7	44,8 *1	—	—34,40	—
1800	—	1176,7	46,8 *1	—	—36,93	—

Таб. А2. Теплофизические параметры титана [99]

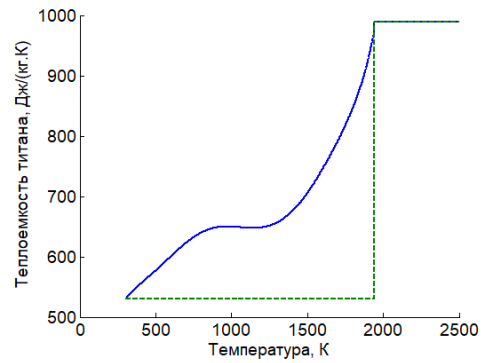
T, K	$d, \text{г/см}^3$	$c_p, \text{Дж/(кг} \cdot \text{К)}$	$\alpha \cdot 10^6, \text{м}^2/\text{с}$	$\lambda, \text{Вт/(м} \cdot \text{К)}$	$\rho \cdot 10^3, \text{Ом} \cdot \text{м}$			$\left(\frac{L}{L_0}\right)_{cp}$
					ρ_{cp}	$\rho_{ }$	$\rho_{\perp}$	
100	—	—	—	—	8,3	—	—	—
200	—	—	—	—	26,6	—	—	—
300	4,50	530,8	9,3	22,3	48,3	51,1	46,9	1,36
400	4,49	555,5	8,3	20,7	63,2	70,1	62,5	1,34
500	4,47	576,2	7,6	19,7	81,5	89,3	78,3	1,32
600	4,46	604,7	7,3	19,7	99,3	108,8	94,3	1,32
700	4,45	626,8	7,1	19,8	116,1	125,9	109,0	1,32
800	4,43	637,0	7,0	19,8	131,2	140,5	124,2	1,32
900	4,42	647,8	6,9	19,8	143,0	152,1	137,3	1,28
1000	4,40	646,9 *1	6,9	19,6	152,1	157,5	147,5	1,21
1156 _α	4,37	666,9 *1	6,9	20,1	161,5	—	—	1,15
1156 _β	4,38	617,5 *1	7,8	20,0	146,3	—	—	1,05
1200	4,37	633,9 *1	7,9	21,9	147	—	—	1,10
1400	4,35	663,7	8,3	23,9	151	—	—	1,1
1600	4,32	729,1	8,8	27,7	156	—	—	1,1
1800	4,29	799,8	9,0	30,9	160	—	—	1,1
1944 _s	4,26	854,1	9,1	33,1	164	—	—	—
1944 _l	4,12 *2	989,2	—	—	168	—	—	—
2000	—	989,2	—	—	170	—	—	—

Приложение Б. Иллюстрация теплофизических параметров алюминия и титана по разным подходам включения фазового перехода в расчетах

Обозначение: Пунктирная линия – параметры зависят только от состояния вещества (твердого или жидкого), сплошная – зависят от температуры.

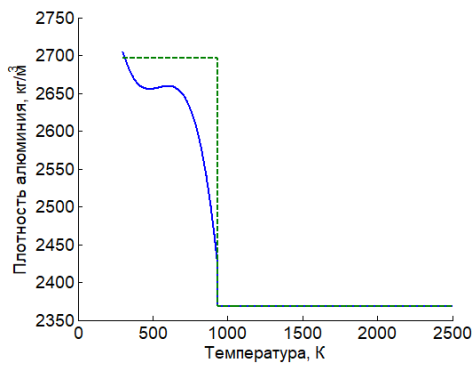


(а)

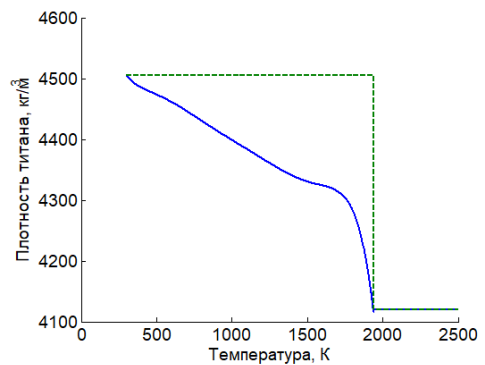


(б)

Рис. Б1. Теплоемкости алюминия (а) и титана (б)

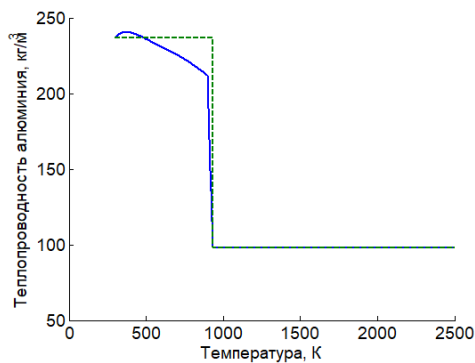


(а)

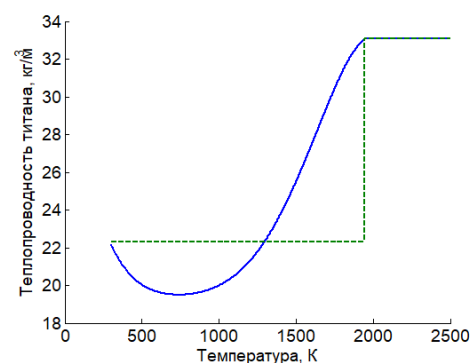


(б)

Рис. Б2. Плотность алюминия (а) и титана (б)



(а)



(б)

Рис. Б3. Теплопроводности алюминия (а) и титана (б)

Приложение В. Теплофизические параметры Al и Ti

Таб. В. Теплофизические параметры использованных материалов [99,100]

Параметры	Алюминий А7		Титан BT1-0	
	Твердое состояние (при 300 °K)	Жидкое состояние (при температуре плавления)	Твердое состояние (при 300 °K)	Жидкое состояние (при температуре плавления)
Теплоемкость, Дж/(кг.К)	903.7	1176.7	530	989
Плотность, кг/м ³	2697	2368	4505	4120
Теплопроводность, Вт/(м.К)	237	98	22.3	33.1
Температура плавления, К	933		1941	
Температура испарения, К	2793		3533	
Удельная теплота плавления, кДж/кг	397		358	
Удельная теплота испарения, кДж/кг	10444		8970	