

3. Нурминская Ю.В., Малков Ф.С., Бахвалов С.В. Автоматизация исследований морфологии листьев растений. Журнал «Известия вузов. Прикладная химия и биотехнология», 2016. [в печати]
4. Максимова Л.А., Нурминская Ю.В., Петров А.Н. Применение цифровых технологий в морфометрии растений. Методическое обеспечение. Иркутск: Изд-во ГОУ ВПО «ИГУ», 2013. – 40 с.
5. Code128 Implementation for Qt. URL: <https://github.com/promixis/Code128> (дата обращения: 03.04.2016)

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИИ АЗОТА В ТИТАНЕ

*Р.А. Манаков*

*(г. Томск, Томский политехнический университет)*

*e-mail: ram290495@gmail.com*

## MATHEMATICAL MODELING OF DIFFUSION IN TITANIUM

*R.A. Manakov*

*(Tomsk, Tomsk Polytechnic University)*

In work carried out mathematical modeling of diffusion of nitrogen in the surface layer of titanium at various temperatures. A comparison of the simulation results with the experimental results and the study confirmed the efficiency of the mathematical model.

Nitriding, titan, diffusion, modeling, hardness.

**Введение.** Существует множество деталей и механизмов, требующих материалы со специальными свойствами. Например, важным параметром, характеризующим ресурс работы, является поверхностная прочность материала, из которого изготовлена деталь. Для увеличения поверхностной прочности применяется процесс азотирования. Титан применяется в медицине, авиа- космической промышленности и других областях, где необходима высокая поверхностная прочность, поэтому данная задача является актуальной и требует исследования.

В Институте сильноточной электроники азотирование технически чистого титана VT1-0 осуществляется в плазме газового разряда низкого давления (<1 Па) [1-3]. В вакуумной камере создается азотная плазма с концентрацией ( $10^9$ - $10^{11}$ ) см<sup>-3</sup>. В камеру помещается обрабатываемая деталь и подается на нее отрицательный потенциал, ионы азота из плазмы ускоряются в направлении обрабатываемой поверхности и, попадая на нее с энергией равной поданному отрицательному электрическому смещению, разогревают обрабатываемую деталь. После того, как атомы захватываются поверхностью образца, они начинают миграцию вглубь поверхности. Вследствие высокой концентрации азота образуются нитридные слои TiN, Ti<sub>2</sub>N, Ti<sub>3</sub>N и диффузионная зона твердого раствора азота, которые определяют твердость поверхностного слоя титана [1-4].

В данной работе проводится математическое моделирование диффузии азота в технически чистый титан. Модель учитывает зависимость коэффициента диффузии от температуры образца и концентрации азота. Проводится сравнение результатов эксперимента и численного моделирования.

**Математическая модель.** Азотирование-это технологический процесс химико-термической обработки, при которой поверхность металла насыщают азотом в специальной азотирующей среде. При этом происходят процессы диффузии в поверхностном слое. Для моделирования этих процессов используется уравнение диффузии:

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} D(C,T) \frac{\partial C(x,t)}{\partial x}, \quad (1)$$

где  $C(x, t)$  – функция относительной концентрации азота в титане, зависящая от координаты и времени;  $D$  – коэффициент диффузии, в общем случае зависящий от температуры  $T$  и концентрации азота.

Температурная зависимость коэффициента диффузии хорошо описывается полуэмпирической формулой:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right), \quad (2)$$

где  $D_0$  – фактор диффузии, называемый также предэкспоненциальным множителем ( $\text{м}^2/\text{с}$ );  $E$  – энергия активации (Дж);  $R$  – постоянная Больцмана (Дж/К);  $T$  – температура (К).

Для моделирования процесса диффузии используются начальное условие

$$C(0, t) = 0 \quad (3)$$

и третье граничное условие:

$$-D \frac{\partial C(x=0, t)}{\partial x} = \alpha(C_S - C), \quad -D \frac{\partial C(x=l, t)}{\partial x} = 0, \quad (4)$$

где  $\alpha$  – эффективный коэффициент массообмена;  $C_S$  – концентрация атомов азота у поверхности титана.

**Параметры моделирования.** Для исследования диффузии азота в титан для параметров эксперимента [2] были использованы известные в литературе данные коэффициента диффузии азота в титан ВТ1-0:  $D(T=550 \text{ }^\circ\text{C}) = 3 \times 10^{-15} \text{ мкм}^2/\text{с}$ ,  $D(T=650 \text{ }^\circ\text{C}) = 3 \times 10^{-14} \text{ мкм}^2/\text{с}$ ,  $D(T=850 \text{ }^\circ\text{C}) = 9 \times 10^{-14} \text{ мкм}^2/\text{с}$ . Построенная температурная зависимость коэффициента диффузии (рис. 1) использовалась для получения значений  $D(T)$  при экспериментальных значениях температуры:  $T = 550, 650, 850 \text{ }^\circ\text{C}$ . Концентрация  $C_S$  на границе поверхности титана выбрана из условия, что в эксперименте выявлены фазы  $\text{TiN}$  и  $\text{Ti}_2\text{N}$ : относительное значение  $C_S = 0.5$ ;

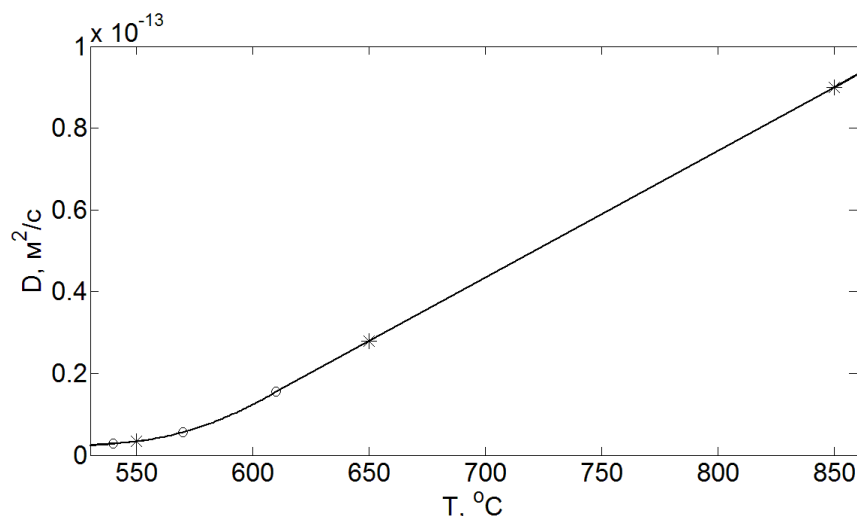


Рис. 1. Температурная зависимость коэффициента диффузии титана.  $^\circ$  - литературные данные [2], \* - экстраполированные данные для моделирования

**Моделирование диффузии азота в титан.** Моделирование процесса диффузии проводилось на временном промежутке длительностью 5 часов. Рассматривался поверхностный слой толщиной  $l = 100 \text{ мкм}$ . Результаты моделирования показаны на рис. 2 и рис. 3 для трех значений температуры  $T = 550, 650$  и  $850 \text{ }^\circ\text{C}$ . Распределение относительной концентрации, установившейся в последний момент времени, показано на рис. 3, зависимость концентрации от времени на левой границе расчетной области представлена на рис. 3.

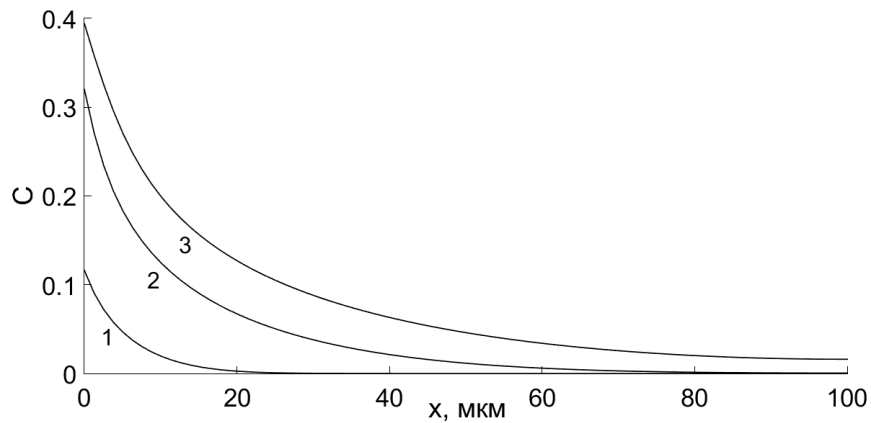


Рис. 2. Расчетные профили концентрации азота в титане при температурах при температурах °С: 1 – 550; 2 – 650; 3 – 850

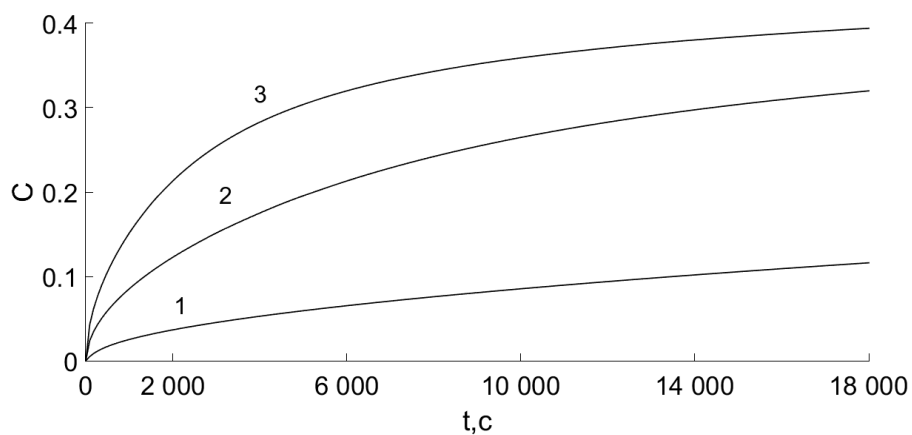


Рис. 3. Распределение концентрации на поверхности титана при температурах °С: 1 – 550; 2 – 650; 3 – 850

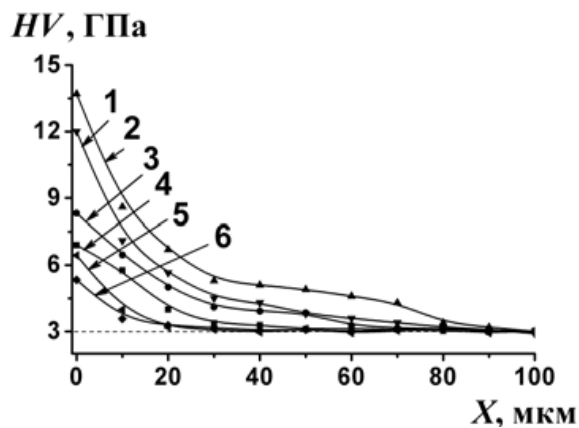


Рис. 4. Экспериментальные профили микротвердости приповерхностных слоев титана ВТ1-0, подвергнутого азотированию при разных температурах [2]

На рис. 4 показаны экспериментальные профили микротвердости приповерхностных слоев титана, подвергнутого азотированию в плазме несамостоятельного тлеющего разряда с полым катодом при низких давлениях и температурах (°С) 850 (кривые 1 и 2), 650 (3, 4) и 550 (5, 6) [2]. Кривые 1, 3, 5 – тыльная; 2, 4, 6 – лицевая стороны образца. Пунктирной линией обозначена величина микротвердости образца до азотирования. В эксперименте тыльная сторона образца (пластинки) толщиной 4,5 мм и размерами (15×15) мм располагалась у по-

верхности камеры на расстоянии 5 мм, исследовались микротвердость с обеих сторон пластинки.

Анализ экспериментальных результатов, представленных на рис. 4, показывает, что упрочнение поверхностного слоя технически чистого титана зависит от температуры, и от времени азотирования. При температуре 500 °С упрочнение поверхностного слоя не выявляется, что свидетельствует о низком уровне насыщения поверхностного слоя азотом. При температурах выше 600 °С наблюдается упрочнение поверхностного слоя и лицевой и тыльной сторон образца.

Сравнение экспериментальных результатов и результатов численного моделирования диффузии показывает, что распределение микротвёрдости поверхностного слоя титана и концентрации азота имеют одинаковые зависимости от времени и температуры. Это означает, что математическая модель (1) – (4) достаточно хорошо описывает диффузию атомов азота в титан и может быть использована для исследования процесса азотирования технически чистого титана и изучения возможности ее применения для других металлов и сплавов.

**Заключение.** В работе проведено моделирование диффузии азота в технически чистый титан при различных температурах образца. Получено, что распределение микротвёрдости поверхностного слоя титана и концентрации азота имеют одинаковые зависимости от времени и температуры. Исходя из результатов моделирования, можно сказать, что данная модель хорошо описывает эксперимент и может быть использована для получения параметров, требуемых для нужного результата азотирования.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Yu.N. Akhmadeev, I.V. Lopatin, N.N. Koval, P.M. Schanin, Yu.R. Kolobov, D.S. Vershinin, and M.Yu. Smolyakova//Influence of Plasma-Forming Gas Composition on Nitriding in Non-Selfsustained Glow Discharge with Large Hollow Cathode//10th Intern. Conference on Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flow/ Tomsk, 19-24 September 2010. P. 526-529.
2. Ахмадеев Ю.Х. Несамостоятельный тлеющий разряд с полым катодом для азотирования титана. Автореферат диссертация 2007.
3. И.В. Лопатин, Ю.Х. Ахмадеев, Н.Н. Коваль и др. Генераторы плазмы на основе несамостоятельного тлеющего разряда низкого давления с полым катодом большого объема // Приборы и техника эксперимента. - №1. – 2011. – С. 151 – 156.
4. И.М. Пастух Теория и практика безводородного азотирования в тлеющем разряде. – Харьков: ННЦ ХФТИ. - 2006. – 364 с.

#### МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕНЕРАЦИИ ПЛАЗМЫ В ЭЛЕКТРОННОМ ИСТОЧНИКЕ С СЕТОЧНОЙ СТАБИЛИЗАЦИЕЙ ПЛАЗМЕННОЙ ГРАНИЦЫ

*Нгуен Бао Хынг*

*(г. Томск, Томский политехнический университет)*

*baohung.ng@gmail.com*

#### MODELLING OF PLASMA GENERATION IN THE ELECTRON SOURCE WITH A GRID-STABILIZED PLASMA EMISSION BOUNDARY

*Nguyen Bao Hung*

*(Tomsk, Tomsk Polytechnic University)*

The paper demonstrates the dependencies of discharge plasma characteristics and the voltage between cathode and emission electrodes on discharge current and gas pressure in the electron source based on a low-pressure arc discharge with a grid-stabilized plasma emission boundary.