

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАЧАЛЬНОЙ СТАДИИ ПРОЦЕССА
ВНЕДРЕНИЯ ИОНОВ В ПОВЕРХНОСТЬ МЕТАЛЛА В НЕИЗОТЕРМИЧЕСКОМ
ПРИБЛИЖЕНИИ**

Е.С. Парфенова, А.Г. Князева

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. А.Г. Князева
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050
E-mail: linasergg@mail.ru

Среди многочисленных методов поверхностной обработки металлов, значительное внимание уделяется ионной имплантации. Данный метод имеет ряд преимуществ: возможность работать в широком диапазоне температур, точный контроль количества внедряемой примеси, возможность получения соединений, которые достаточно сложно получить другими способами и т.д. Но все же стоит отметить, что возможности этого способа модификации поверхности не реализованы в полной мере. Это связано с нехваткой детальных исследований, объясняющих ряд процессов и явлений, протекающих в материале при поверхностной обработке.

При внедрении потока ионов в поверхность подложки, одновременно с диффузионными процессами протекают и другие явления. Например, вследствие удара частиц о поверхность генерируются механические возмущения, возникают структурно-фазовые изменения, генерируются точечные дефекты и т.д. А ведь все процессы взаимосвязаны, оказывают порой существенное влияние друг на друга и на конечный результат. Экспериментально достаточно сложно выявить значение конкретного процесса, поскольку как уже отмечалось, протекают они совместно. Математическое моделирование позволяет выделить интересующие процессы и отбросить остальные. Таким образом, именно математическое моделирование дает возможность выявить роль каждого процесса независимо от остальных. Но для этой цели необходимо разрабатывать связанные модели, учитывающих взаимовлияние некоторых совместно протекающих процессов.

Цель работы состоит в исследовании характера взаимовлияния процессов диффузии примеси, распространения механических напряжений и деформаций в неизотермических условиях.

Предположим, что генерируемые напряжения упругие, скорости, ускорения и деформации малы, тогда для описания процесса внедрения примеси в поверхностный слой металла в случае одноосного нагружения необходимы уравнение баланса массы (1), уравнение теплопроводности (2) и уравнение движения (3):

$$\rho \frac{\partial C}{\partial t} = - \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial x}, \quad (1)$$

$$\rho C_{\sigma} \frac{\partial T}{\partial t} + \alpha_T T \frac{\partial \sigma_{kk}}{\partial t} = - \frac{\partial \mathbf{J}_q}{\partial x}, \quad (2)$$

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x}, \quad (3)$$

где ρ - плотность обрабатываемого материала; C - концентрация имплантируемого материала;

\mathbf{J} - поток массы; \mathbf{J}_q - поток тепла; σ_{xx} , σ_{kk} - компоненты тензора напряжений в направлении облучения (Ox) и первый инвариант тензора напряжений; \mathbf{u} - вектор перемещения; T - температура; α_T - коэффициент теплового расширения; C_{σ} - удельная теплоемкость.

Потоки тепла (5) и массы (4) (учитывая конечность времен релаксации) можно получить на основе теории неравновесных процессов:

$$\mathbf{J} = -\rho D_0 \frac{\partial C}{\partial x} + BC \frac{\partial \sigma_{kk}}{\partial x} - t_r \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t}, \quad (4)$$

$$\mathbf{J}_q = -\lambda_T \frac{\partial T}{\partial x} - t_q \frac{\partial \mathbf{J}_q}{\partial t}, \quad (5)$$

где $B = \frac{D_0 m}{RT\rho} \Delta\alpha$ - коэффициент переноса массы под действием напряжений; D_0 - коэффициент самодиффузии; R - универсальная газовая постоянная, m - молярная масса; t_r - время релаксации потока массы; t_q - время релаксации потока тепла; λ_T - теплопроводность; $\Delta\alpha = \alpha - \alpha_0$ - разность коэффициентов концентрационного расширения внедряемого элемента α и основного α_0 .

Граничные и начальные условия:

$$x=0: \mathbf{J} = m_0\varphi(t), \mathbf{J}_q = q_0\varphi(t),$$

$$x \rightarrow \infty: C=0, \sigma=0,$$

$$t=0: C=0, \sigma=0, T=T_0, \frac{\partial C}{\partial t}=0, \frac{\partial \sigma}{\partial t}=0.$$

Подробный вывод модели и тестирование ее частных вариантов представлено в работах [1,2].

Пример решения связанной задачи представлен на рис. 1.

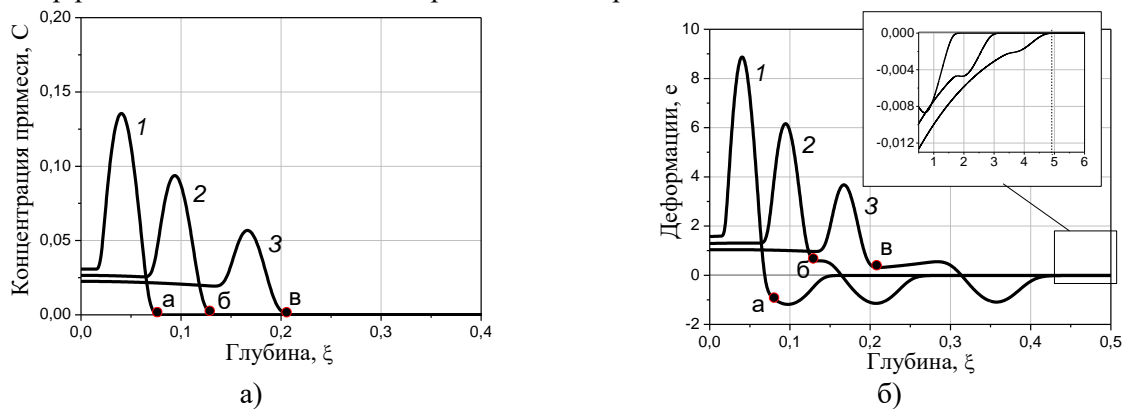


Рис. 1. Пример решения связанной задачи. Моменты времени: τ : (1) 0.14, (2) 0.25, (3) 0.4

На графиках отмечена координата переднего фронта волн концентрации (точки *a*, *b*, *v*). На профиле волны деформаций (и напряжений) отчетливо видны особенности, связанные со взаимодействием разных процессов. Переднему фронту концентрации C соответствует искажение профиля волны деформаций. При малых временах ($\tau=0.14$), точка *a* на упругой волне – минимальное значение деформаций. С течением времени ($\tau=0.25$ и $\tau=0.4$), в точках *b* и *v* на рис 1,б) заметно искажение профиля деформационной волны. Видно, что диффузия примеси более медленный процесс.

После того, как температура поверхности уменьшается и механическая волна отрывается от концентрационной (расстояние после указанных точек), то дальнейшее распространение волны e (S) происходит независимо от диффузии концентрации примеси.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Парфенова Е.С., Князева А.Г. // Труды X Всероссийской научной конференции «Нелинейные колебания механических систем». – Нижний Новгород: Наш дом, 2016. – С. 604-609.
2. Parfenova E.S., Knyazeva A.G. // Key Engineering Materials. – 2016. – V.712. – P. 99-104.