Секция 1. Процессы взаимодействия излучений и плазмы с твердым телом

# НАЧАЛЬНАЯ СТАДИЯ ВОЗДЕЙСТВИЯ ПОТОКА ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ НА ПРОЦЕССЫ В ДИФФУЗИОННОЙ ЗОНЕ

Е.С. Парфенова<sup>1)</sup>, А.Г. Князева<sup>1, 2)</sup>

<sup>1)</sup>Национальный исследовательский Томский политехнический университет, пр. Ленина 30, 634050 Томск, Россия, linasergg@mail.ru
<sup>2)</sup>ИФПМ СО РАН, пр. Академический 2/4, 634021 Томск, Россия, anna-knyazeva@mail.ru

В работе представлена математическая модель начальной стадии процесса внедрения ионов в поверхность металла в неизотермических условиях. В модели учитывается конечность времен релаксации потоков тепла и массы, взаимодействие разномасштабных явлений. Исследовано взаимовлияние полей концентрации внедряемой примеси, напряжений и деформаций, возникающих вследствие удара частиц о поверхность подложки, а также температуры мишени.

#### Введение

Обработка поверхностей металлов потоками частиц широко используется для модификации их свойств [1]. Такие методы позволяют обрабатывать высокоточные детали сложной формы с меньшими временными затратами, по сравнению с традиционными способами обработки, используемыми в машиностроении [2, 3]. Во многом формирование необходимых свойств поверхностного слоя, подвергнутого ионному воздействию, зависит от множества физических и химических факторов, взаимодействующих между собой. Экспериментально невозможно изучить роль отдельных явлений независимо от других, поэтому важным этапом в их исследование является математическое моделирование. Стоит отметить, что возникающие физико-химические процессы характеризуются различными пространственными и временными масштабами, это вызывает трудность при их совместном исследовании.

При внедрении потока ионов в поверхность подложки одновременно с диффузионными процессами протекают и другие явления [4]. Например, вследствие удара частиц о поверхность генерируются механические возмущения, возникают структурно-фазовые изменения, генерируются точечные дефекты и т.д. Все перечисленные явления оказывают влияние друг на друга, поэтому при моделировании процесса ионной имплантации необходимо учитывать это для получения качественных результатов.

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

#### Математическая постановка

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):

$$\rho \frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial \mathbf{J}}{\partial x} \tag{1}$$

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

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

где  $\rho$  - плотность обрабатываемого материала; C - концентрация имплантируемого материала; **J** - поток массы; **J**<sub>q</sub> - поток тепла;  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{kk}$  - компоненты тензора напряжений в направления облучения (O x) и первый инвариант тензора напряжений; **u** - вектор перемещения; T - температура;  $\alpha_T$  - коэффициент теплового расширения;  $C_{\sigma}$  - удельная теплоемкость.

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

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

$$\mathbf{J}_{q} = -\lambda_{T} \frac{\partial T}{\partial x} - t_{q} \frac{\partial \mathbf{J}_{q}}{\partial t} , \qquad (5)$$

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 массы;  $t_q$  - время релаксации потока тепла;  $\lambda_T$  - теплопроводность;  $\Delta \alpha = \alpha - \alpha_0$  разность коэффициентов концентрационного расширения внедряемого элемента  $\alpha$  и основного  $\alpha_0$ .

Граничные и начальные условия:

$$\begin{aligned} x &= 0: \ \mathbf{J} = m_0 \varphi(t) , \ \mathbf{J}_q = \left(\frac{v^2}{2}m\right) \varphi(t) ,\\ x &\to \infty: \ C = 0, \ \sigma = 0 ,\\ t &= 0: \ C = 0, \ \sigma = 0, \ T = T_0, \ \frac{\partial C}{\partial t} = 0, \ \frac{\partial \sigma}{\partial t} = 0 . \end{aligned}$$

Подробный вывод модели и тестирование ее частных вариантов представлено в работе [6-8].

Для численной реализации удобнее перейти к модели в безразмерных переменных. Тогда имеем систему трех уравнений: для напряжений (6), концентрации примеси (7) и температуры (8):

$$\frac{\partial^2 S}{\partial \tau^2} + \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \tau^2} + \gamma \frac{\partial^2 C}{\partial \tau^2} = \frac{\partial^2 S}{\partial \xi^2},$$
 (6)

12-я Международная конференция «Взаимодействие излучений с твердым телом», 19-22 сентября 2017 г., Минск, Беларусь 12th International Conference "Interaction of Radiation with Solids", September 19-22, 2017, Minsk, Belarus Секция 1. Процессы взаимодействия излучений и плазмы с твердым телом

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} + \tau_r \frac{\partial^2 C}{\partial \tau^2} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ F(\Theta) \frac{\partial C}{\partial \xi} \right] - M \omega \gamma \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ C \frac{F(\Theta)}{\Theta + \sigma} \cdot \frac{\partial S}{\partial \xi} \right], \tag{7}$$

$$\tau_{q} \frac{\partial^{2} \Theta}{\partial \tau^{2}} + \frac{\partial \Theta}{\partial \tau} = \frac{1}{Le} \frac{\partial^{2} \Theta}{\partial \xi^{2}} - \omega (\sigma + \Theta) \frac{\partial S}{\partial \tau} - -\tau_{q} \omega \frac{\partial}{\partial \tau} \left[ \left[ \sigma + \Theta \right] \frac{\partial S}{\partial \tau} \right], \tag{8}$$

Граничные и начальные условия:

 $\xi = 0: \mathbf{J} = \mu \varphi(\tau), \ \mathbf{J}_q = \varphi(\tau), \ S = S_0 \varphi(\tau),$ 

$$\begin{split} \boldsymbol{\xi} & \to \boldsymbol{\infty} \colon \frac{\partial \Theta}{\partial \boldsymbol{\xi}} = \boldsymbol{0}, \ \, \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial \boldsymbol{\xi}} = \boldsymbol{0}, \ \, \boldsymbol{S} = \boldsymbol{0}, \ \, \boldsymbol{e} = \Theta + \boldsymbol{\gamma} \left( \boldsymbol{C} - \boldsymbol{C}_0 \right), \\ \boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{0} \colon \boldsymbol{C} = \boldsymbol{C}_0, \ \, \Theta = \boldsymbol{0}, \ \, \boldsymbol{S} = \boldsymbol{0}, \ \, \frac{\partial \boldsymbol{C}}{\partial \boldsymbol{\tau}} = \boldsymbol{0}, \ \, \frac{\partial \boldsymbol{S}}{\partial \boldsymbol{\tau}} = \boldsymbol{0}. \end{split}$$

где  $\tau$ - безразмерное время,  $\xi$ - безразмерная координата по пространству, *S*- безразмерные напряжения,  $\Theta$ - безразмерная температура, *e*- безразмерные деформации.

Функция  $F(\theta)$  в уравнении (7) имеет вид:

$$F\left(\Theta
ight)\!=\!\exp\!\!\left(\!-rac{1}{eta\!\left(\sigma\!+\!\Theta
ight)}
ight)$$
 - безразмерный коэффи-

циент диффузии.

Параметры модели: отношение скорости частиц в потоке к скорости звуковой волны -  $\mu$ , отношение разности коэффициентов концентрационного расширения -  $\gamma$ , отношение коэффициента диффузии к теплопроводности - Le, отношение квадратов скоростей звуковой и диффузионной волн -  $\tau_q$ ,  $\tau_r$ , коэффициент связанности

## - ω, β, σ.

Задача решена численно по неявной разностной схеме.

## Анализ результатов

При решении связанной задачи важно правильно подобрать значения для параметров модели. Для каждого набора параметров имеется свое решение, которое может противоречить физической природе процесса.

Предположим, что обрабатываемый материал – тантал, имплантируемый – молибден. Используя свойства указанных материалов, вычисляем значения параметров модели:  $\beta = 0.01 \cdot 10^{-2}$ ,  $\omega = 0.001 \cdot 10^{-5}$ ,  $\gamma = 0.05 \cdot 10^3$ , Le = 0.09,  $\sigma = 3000$ ,  $\mu = 0.08$ ,  $\tau_r = 0.15$ ,  $\tau_q = 0.1$ . Время действия импульса  $\tau_{imp} = 0.1$ .

Пример решения связанной задачи представлен на рис. 1.

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

После того, как температура поверхности уменьшается, и тепловая и механическая волны отрываются от концентрационной волны (расстояние после указанных точек), то дальнейшее распространение волн e(S) и  $\Theta$  происходит неза-

висимо от диффузии концентрации примеси.



Рис. 1. Пример решения связанной задачи. Моменты времени  $\tau$ : 1 - 0.14, 2 - 0.25, 3 - 0.4

Диффузия — более медленный процесс, чем теплопроводность, поэтому  $Le=rac{D_0}{\lambda_T/(
ho C_\sigma)}<\!1.0$  .

Т.е. в случае уменьшения *Le*, скорость распространения тепла увеличивается.

На рис. 1б отмечено положение переднего фронта тепловой волны для момента времени  $\tau = 0.4$  (пунктирная линия),  $\xi \approx 4.9$ . При увеличе-

<sup>12-</sup>я Международная конференция «Взаимодействие излучений с твердым телом», 19-22 сентября 2017 г., Минск, Беларусь 12th International Conference "Interaction of Radiation with Solids", September 19-22, 2017, Minsk, Belarus

нии области на рис. 1в, видно, что механическая волна достигает той же глубины, что и тепловая.

Влияние неизотермичности процесса сказывается различным образом. С одной стороны, увеличение температуры приводит к увеличению коэффициента диффузии, т.е. к увеличению роли первого слагаемого в диффузионном уравнении. С другой стороны, влияние напряжений на диффузию более заметно при низких температурах, когда волна напряжений уже удаляется от поверхности.

### Заключение

Таким образом, в работе представлена математическая модель начальной стадии процесса внедрения примеси в поверхность металла в неизотермических условиях. Влияние процесса диффузии на распространение волн деформаций проявляется по-разному и зависит от времени. Наблюдается искажение профиля механической волны, распределение концентрации примеси не соответствует чисто диффузионному процессу, профиль температуры тоже изменяется качественно. Неизотермичность модели приводит к тому, что по мере отрыва тепловой волны от концентрационной, распределение концентрации перестает изменяться. В результате имеется область влияния волн разной природы на разном расстоянии от обрабатываемой поверхности.

#### Список литературы

- 1. Ионная имплантация / Под ред. Дж. К. Хирвонена. М.: Металлургия, 1985. 391 с.
- Диденко А.Н., Лигачев А.Е., Куракин А.Е. Воздействие пучков заряженных частиц на поверхность металлов и сплавоов, М.: Энергоатомиздат, 1987. 184 с.
- Ласковнев А.П. Модификация структуры и свойств эвтектического силумина электронноионоплазменной обработкой. Минск: Белорусская наука, 2013. 287 с.
- Рахимова Г.Р., Раджабов Т.Д. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2004. Т. 5. С. 68-72.
- 5. *Knyazeva A.G.* // PNRPU Mechanics Bulletin. 2005. № 13. C. 45-60.
- Parfenova E.S., Knyazeva A.G. // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. 2016. V. 124. Article number 012085. P. 1-4.
- Парфенова Е.С., Князева А.Г. // Труды X Всероссийской научной конференции «Нелинейные колебания механических систем». Нижний Новгород: Наш дом. 2016. С. 604-609.
- Parfenova E.S., Knyazeva A.G. // Key Engineering Materials. 2016. V. 712. P. 99-104.

## THE INITIAL STAGE OF PARTICLE FLUX ACTION ON THE PROCESSES IN THE DIFFUSION ZONE

Elena S. Parfenova<sup>1)</sup>, Anna G. Knyazeva<sup>1, 2)</sup>

<sup>1)</sup>National Research Tomsk Polytechnic University, 30 Lenin ave., Tomsk, 634050, Russia
<sup>2)</sup>Institute of Strength Physics and Materials Science, 2/4 Akademicheskii ave., 634055 Tomsk, Russia linasergg@mail.ru, anna-knyazeva@mail.ru

Each stage of technological and technical development is directly connected with the improvement of operational properties of materials. Vacuum ion-plasma methods are widely used for enhancing material properties (such as wear resistance, fatigue strength, corrosion resistance and others) and also for modifying the surface layer composition. But the achievement of extensive experimental results requires detailed theoretical studies in this area.

The treatment of a metal surface by ion beam is accompanied by a variety of physical and chemical phenomena. It is known that the particle impact on the target surface leads to the appearance of stresses. The investigations of stress (or strain) propagation can be found elsewhere. But the processes of impurity introduce and stress redistributions are interdependent in these papers. There are a lot studies aimed to investigation of changes of morphology, roughness, surface chemistry and adhesion strength of the system coating/substrate after ion implantation.

The paper is aimed at investigating the initial stage of ion implantation process into target. The model allows considering the processes occurring after interaction of ions flux with target surface. Assume that ions have sufficient energy for generation mechanical perturbations.

The paper presents a non-isothermal model of the initial stage of ion implantation process. The model takes into account the finiteness of heat and mass relaxation times. The model assumes that the implantable impurity generates mechanical perturbations. Examples of the waveform evolution in some time moments are shown.