

ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЕ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В МЕТАЛЛАХ ПО ГЛУБИНЕ ПРИ ПОСТИМПЛАНТАЦИОННОМ ОТЖИГЕ

И.И.Приходько, В.В.Понарядов

Белорусский государственный университет, г.Минск, пр.Скорины. 4, тел. 226-57-00

Проведено математическое моделирование процессов эволюции дефектной структуры в металлах при отжиге. Показано, что начальная неравномерность распределения точечных дефектов по глубине может стимулировать усиление их диффузии вглубь образцов при температурах порядка 600 - 700K. При определенных условиях может наблюдаться заметное искажение профиля распределения вакансий по глубине и смещение максимума их распределения вглубь образца. Проведено сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными.

Введение

При осаждении защитных покрытий на конструкционные материалы достаточно важной является проблема формирования переходной области на границе раздела "покрытие - подложка". Как показывает опыт, переходная зона определяет не только адгезионные характеристики сформированного покрытия, но и зачастую может оказывать существенное влияние на его твердость, коррозионную стойкость и другие свойства полученной системы. Один из способов формирования переходной области - активация процесса термической диффузии. Для этого нанесение покрытия осуществляется на предварительно нагретую подложку, либо изделие с уже нанесенным покрытием отжигается при необходимых температурах. Для большинства металлов и сплавов при этом требуется нагрев до температур порядка 800 - 1000 K, что зачастую сопровождается заметным разупрочнением материала подложки.

Рассматривая зависимость коэффициента диффузии от температуры, можно отметить, что в общем случае D зависит от двух экспоненциальных членов:

$$D \sim \exp(-E_v^f/kT) \exp(-E_v^m/kT),$$

где E_v^f - энергия образования вакансий, E_v^m - энергия миграции вакансий. Для большинства металлов справедливо $E_v^f > E_v^m$. Следовательно, используя классический подход, мы должны нагреть систему до температур соответствующей активации процессов термической генерации точечных дефектов. В тоже время динамика диффузии определяется в первую очередь миграцией точечных дефектов. Поэтому можно предположить, что, создав в поверхностном слое область с концентрацией точечных дефектов, значительно превышающей равновесную, можно будет создать условия для активного протекания диффузии при температурах порядка 600 K.

Методика расчетов

Поставленная в данной работе задача моделирования эволюции точечных дефектов может быть условно разбита на две:

- перераспределение подвижных точечных дефектов по глубине в результате термической диффузии;

- собственно эволюция дефектной структуры, которая в зависимости от глубины может существенно менять свой ход.

При проведении расчетов принималось, что подвижными являются только вакансии, междоузельные атомы, дивакансии и димеждоузлия. Подвижность всех остальных комплексов размерности 3 и выше принимается равной нулю.

Математическая модель, описывающая эволюцию дефектной структуры, базировалась на следующих предположениях:

- рост и распад комплексов дефектов происходит за счет взаимодействия с подвижными дефектами - вакансиями и междоузельными атомами. Вклад в этот процесс дефектов принят ничтожно малым по сравнению с монодефектами;
- в металле существуют постоянные стоки неограниченной емкости (дислокации, границы зерен, поверхность образца и т.п.), плотность которых не меняется во времени.

Результаты расчетов и их обсуждение

Для того чтобы разделить вклад в полученные результаты различных актов взаимодействия на уровне дефектной структуры, было проведено моделирование отжига в облученном никеле с различной степенью полноты учета протекающих процессов.

Наиболее простой будет модель, рассматривающая только диффузию дефектов по глубине. Она ни в коей степени не может претендовать на адекватность реальным процессам и может рассматриваться только с точки зрения выделения в дальнейших расчетах вклада диффузии в полученные результаты (рис.1). Из полученных зависимостей видно что, как и следовало ожидать, профиль распределения вакансий по глубине достаточно быстро размывается.

Однако уже использование такой предельно примитивной модели показывает, что центр тяжести концентрационного профиля заметно сдвигается вглубь образца. В тоже время концентрация вакансий в поверхностном слое изменяется незначительно. Можно сказать, что происходит своеобразное отражение от поверхности потока вакансий движущихся по левому склону концентрационного профиля. В реальных условиях это маловероятно уже по той причине, что поверхность сама является хорошим стоком для точечных дефектов.

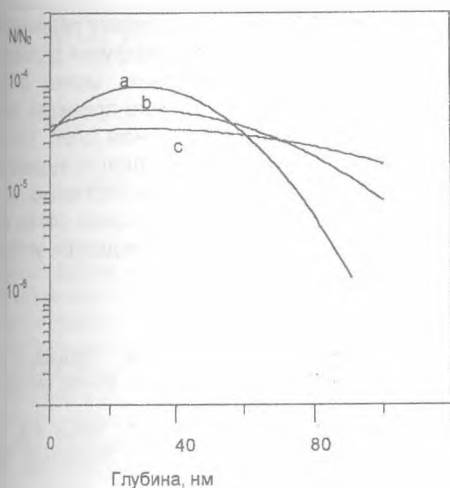


Рис.1. Изменение распределения вакансий по глубине в результате диффузии: а - исходное, б - $5 \cdot 10^{-4}$ с, в - $5 \cdot 10^{-3}$ с. $T=700\text{K}$.

На рис.2 приведены результаты расчетов, в которых кроме диффузии учитывалась аннигиляция дефектов на постоянных стоках и поверхности. При этом плотность дислокаций в объеме задавалась равной 10^8 см^{-2} , что несколько выше, чем в реальных металлах, но по порядку величины соответствует средним значениям, характерным для имплантированных образцов. Расчеты показали, что учет аннигиляции подвижных дефектов на стоках заметно уменьшает их общее количество в объеме образца. При этом повышение скорости аннигиляции дефектов на поверхности образца сопровождается искажением формы распределения точечных дефектов по глубине. Это связано с тем, что поток дефектов, движущийся от максимума распределения к поверхности аннигилирует на последней.

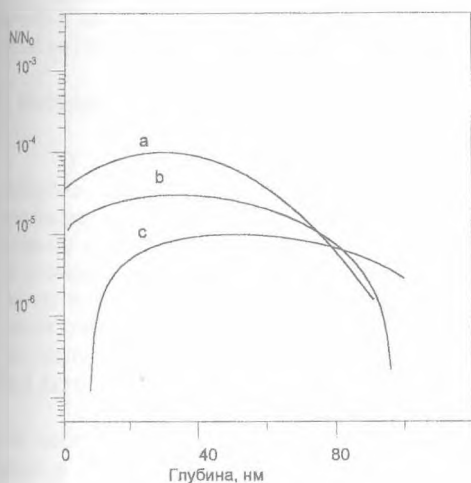


Рис.2. Изменение во времени распределения вакансий по глубине только за счет диффузии с учетом аннигиляции на постоянных стоках: а - исходное, б - $5 \cdot 10^{-4}$ с, в - $5 \cdot 10^{-3}$ с. $T=700\text{K}$.

В результате наблюдается существенное уменьшение плотности вакансий в приповерхностном слое, и как следствие, смещение максимума их распределения вглубь образца. Однако величина этого смещения невелика и составляет не более 10 - 15 %. При этом локальная концентрация вакансий достаточно быстро уменьшается до равновесного значения.

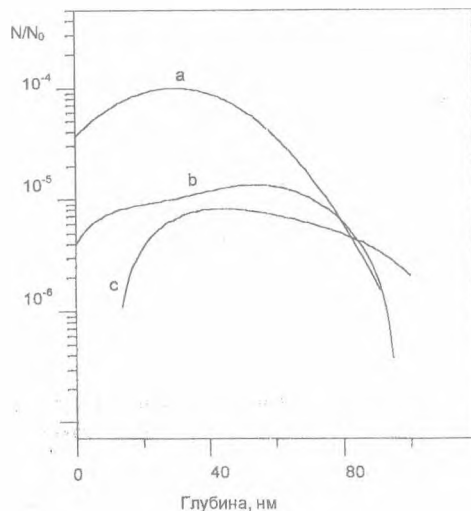


Рис.3. Изменение во времени распределения вакансий по глубине с учетом взаимодействия дефектов и их диффузии: а - исходное, б - $5 \cdot 10^{-4}$ с, в - $5 \cdot 10^{-3}$ с. $T=700\text{K}$.

На рис.3 приведены результаты полного моделирования процессов, протекающих при отжиге облученных образцов. Наибольшую сложность при этом составило задание значений параметров, определяющих вероятность взаимодействия точечных дефектов и их комплексов. При расчете вероятности взаимодействия подвижного дефекта с кластером, важно знать геометрические размеры кластера. В рамках различных существующих моделей это значение может очень сильно варьироваться в зависимости от плотности упаковки точечных дефектов. В проведенных расчетах предполагалось, что кластер имеет сферическую форму с плотностью заполнения на уровне 0,5, т.е. на каждый дефект в кластере приходится один атом матрицы.

Проведенные расчеты показали, что учет взаимодействия на уровне дефектной структуры оказывает существенное влияние на динамику изменения распределения дефектов по глубине. С одной стороны, интенсивно протекает процесс образования неподвижных кластеров, которые в свою очередь являются дополнительными стоками для подвижных точечных дефектов. В результате концентрация вакансий и междоузельных атомов уменьшается заметно быстрее, чем при их аннигиляции только на дислокационной структуре. С другой стороны, наиболее интенсивно образование кластеров происходит вблизи максимума концентрационного профиля. В результате здесь формируется область с максимальной скоростью аннигиляции точечных дефектов. В результате, при определенных условиях форма концентрационного профиля вакансий

претерпевать очень существенные искажения, вплоть, как это видно из рис.3, до образования двухгорбого профиля. При достаточно больших временах отжига профиль вакансий сильно размывается, общее их количество в результате аннигиляции и кластерообразования заметно падает и, как результат, локальная концентрация дефектов стремится к термически равновесному значению.

Заключение

Анализируя полученные результаты и сравнивая их с экспериментальными данными [1,2] можно с уверенностью сказать, что наблюдаемое в эксперименте усиление диффузии после облучения не может быть следствием миграции накопленных при имплантации радиационных дефектов, по крайней мере, в рамках рассматриваемой модели. В ходе отжига профиль распре-

деления дефектов не претерпевает го сдвига вглубь. Поэтому диффузионных дефектов, как следствие, мало влияние на перераспределение при в очень узком приповерхностном слое, толщина сравнима с размерами области энергии при имплантации и существующих порядков, меньше толщины, которых экспериментально наблюдается диффузии.

Список литературы

1. Ходасевич В.В., Солодухин И.А., Приуглов В.В. // Поверхность: физика, химия 1997. - №6. - С.93.
2. Ходасевич В.В., Солодухин И.А., Углоходько И.И. // Вакуумная техника и технологии. - №2. - С.3.

DEPTH REDISTRIBUTION OF POINT DEFECTS IN METALS DURING POSTIMPLANTATION ANNEALING

I.I.Prikhodko, V.V.Ponaryadov
Belorussian State University, 4 Scorina Ave., Minsk, Tel. 226-57-00

The mathematical simulation of processes of a defective structure evolution in metals during annealing is shown, that the initial nonuniformity of depth distribution of point defects can stimulate an amplification of their diffusion into the sample at a temperatures of 600-700 K. Noticeable distortion of depth profile of vacancies distributions and maximum into the deep region can be observed under certain conditions. The comparison of calculation results with experimental data is performed.