

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ДИФфуЗИИ И ФАЗООБРАЗОВАНИЯ В СЛОИСТЫХ БИНАРНЫХ СИСТЕМАХ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА

В.С. Русаков¹⁾, И.А. Сухоруков¹⁾, А.М. Жанкадамова²⁾, К.К. Кадыржанов²⁾

¹⁾Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Ленинские горы, д. 1, стр. 2, 119991, Москва, Россия,

тел. +7(495)939-50-70, e-mail: rusakov@phys.msu.ru, iasias@mail.ru

²⁾Институт ядерной физики НЯЦ РК, 050032, Казахстан, Алматы, ул. Ибрагимова, 1

e-mail: aktorgyn@mail.ru, kadyrzhanov@inp.kz

В работе в рамках сформулированных ранее физических принципов проведено моделирование термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования в бинарных слоистых системах на основе железа с двумя и тремя изотопами двух элементов: Fe–Zr, Fe–Ti и ⁵⁷Fe–Ti–Fe_{0.96}Ti_{0.04}–⁵⁷Fe. Хорошее согласие результатов численных расчетов с экспериментальными данными, полученными методами мессбауэровской спектроскопии и рентгеновской дифрактометрии указывает на то, что характер фазовых превращений в исследованных слоистых системах определяется изменением локальной концентрации компонентов в процессе их взаимной диффузии и соответствует особенностям фазовых диаграмм равновесных состояний бинарных систем.

Введение

Одним из методов улучшения характеристик рабочих поверхностей материалов является нанесение на их поверхность тонких покрытий с последующим термическим отжигом. В настоящее время нами проводятся экспериментальные и теоретические (см., например, [1–10]) исследования термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования при последовательных изотермических и изохронных отжигах слоистых бинарных металлических систем, полученных методами ионно-плазменного распыления.

Для описания процессов диффузии и фазообразования в этих системах авторами была предложена модель термически индуцированных процессов диффузии, фазообразования и стабилизации пространственно неоднородного структурно-фазового состояния в слоистых металлических системах с двумя [1–3, 5–9] и тремя [4, 10] изотопами двух элементов. В основе физической модели – линейная термодинамическая теория неравновесных процессов и механизм взаимной диффузии компонентов по непрерывным каналам фаз в двухфазных областях системы.

Предложенная физическая модель реализована нами в виде компьютерной программы DIFFUSION. Для ее создания была использована среда программирования MS Visual Studio 2005. Основные функциональные возможности программы: использование произвольной диаграммы равновесных состояний бинарной системы; задание любого количества слоев с произвольной концентрацией изотопных компонентов; реализация произвольных температурно-временных режимов термических отжигов; с учетом изотопного состава расчет на всех этапах процесса относительных интенсивностей парциальных мессбауэровских спектров, полученных регистрацией γ -квантов в геометрии на прохождение, и регистрацией конверсионных электронов в геометрии обратного рассеяния, а также относительного содержания фаз в атомных единицах компонентов в

области проникновения в слоистую систему рентгеновского излучения.

Для моделирования термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования нами были выбраны бинарные системы α -Fe(5 мкм)–Zr(2 мкм), α -Fe(10 мкм)–Ti(2 мкм) и ⁵⁷Fe(0.07 мкм)–Ti(1 мкм)–Fe_{0.96}Ti_{0.04}(13 мкм)–⁵⁷Fe(0.07 мкм), полученные с помощью метода магнетронного распыления на железосодержащую подложку. Эти системы подвергались последовательным изохронным и изотермическим отжигам. После каждого этапа отжигов проводились исследования при комнатной температуре методами мессбауэровской спектроскопии и рентгеновской дифрактометрии.

Моделирование термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования в слоистой системе осуществлялось с учетом всех особенностей фазовых диаграмм равновесных состояний бинарных систем Fe–Zr и Fe–Ti. В наших расчетах частотный фактор и энергия активации для парциальных коэффициентов диффузии были подобраны с целью наилучшего описания экспериментальных данных.

Результаты моделирования

Бинарная слоистая система α -Fe(5 мкм)–Zr(2 мкм) подвергалась последовательным изотермическим отжигам при температуре 900°C [5]. На рис. 1 приведены экспериментально определенные (символы, соединенные сплошными линиями) и расчетные (штриховые линии) зависимости относительных интенсивностей парциальных мессбауэровских спектров (MS) и рентгеновских дифракционных рефлексов (X-ray) образующихся фаз в зависимости от времени $t_{\text{анн}}$ последовательного изотермического отжига для слоистой системы α -Fe(5 мкм)–Zr(2 мкм).

Как видно, уже после первого этапа термического отжига появляются фазы Fe₂Zr и Fe₃Zr. Затем содержание интерметаллида Fe₃Zr плавно растет, а количество Fe₂Zr в образце уменьшается. После 10 ч отжига обнаружить соединение Fe₂Zr практически не удается. При дальнейшем

отжиге соотношение количества фаз Fe_3Zr и $\alpha\text{-Fe}(\text{Zr})$ практически не меняется.

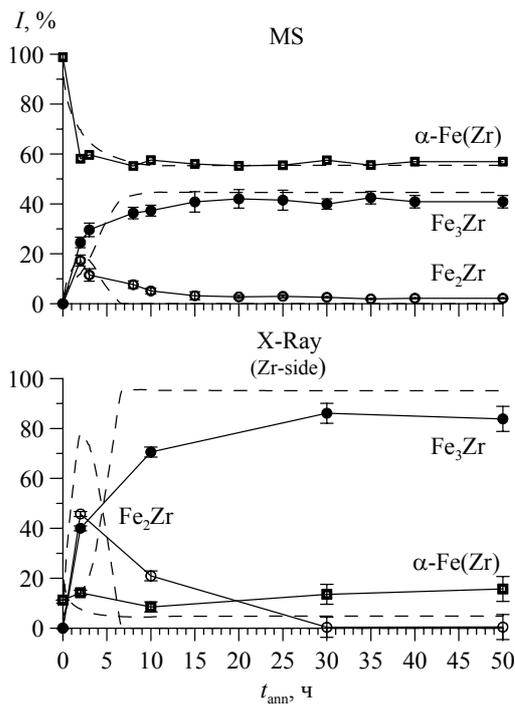


Рис. 1. Относительные интенсивности парциальных мессбауэровских спектров (MS) и рентгеновских дифракционных рефлексов (X-ray) образующихся фаз в зависимости от времени $t_{\text{анн}}$ последовательного изотермического отжига при $T_{\text{анн}} = 900^\circ\text{C}$ для слоистой системы $\alpha\text{-Fe}(5 \text{ мкм})\text{-Zr}(2 \text{ мкм})$.

Наблюдаемая с помощью рентгеновской дифрактометрии последовательность фазообразования и характерные времена существования фаз в процессе изотермического отжига слоистой системы соответствуют результатам, полученным методом мессбауэровской спектроскопии. Наблюдаемое существенное отличие относительных интенсивностей дифракционных рефлексов от относительных интенсивностей парциальных мессбауэровских спектров для образующихся фаз на всех этапах отжига объясняется, главным образом, тем, что рентгеновская дифрактометрия в геометрии Брэгга-Брентано дает информацию о приповерхностном слое образца, определяемом эффективной глубиной проникновения рентгеновского излучения, а мессбауэровская спектроскопия в геометрии на прохождение – обо всем объеме образца. Как видим, система $\alpha\text{-Fe}(5 \text{ мкм})\text{-Zr}(2 \text{ мкм})$ остается слоистой на всех этапах изотермического отжига: последовательность образующихся слоев фаз от напыленного слоя циркония вглубь образца – Fe_2Zr , Fe_3Zr , $\alpha\text{-Fe}(\text{Zr})$.

Результаты теоретических расчетов отражают основные особенности изменения относительных интенсивностей парциальных мессбауэровских спектров и относительных интенсивностей дифракционных рефлексов фаз, полученных экспериментально.

Бинарная слоистая система $\alpha\text{-Fe}(10 \text{ мкм})\text{-Ti}(2 \text{ мкм})$ подвергалась последовательным двухчасовым изохронным отжигам в вакууме, которые

проводились при температурах от 500°C до 1050°C с шагом 50°C [7-8]. Результаты экспериментальных исследований и модельных расчетов показаны в зависимости от конечной температуры $T_{\text{анн}}$ последовательного изохронного отжига на рис. 2.

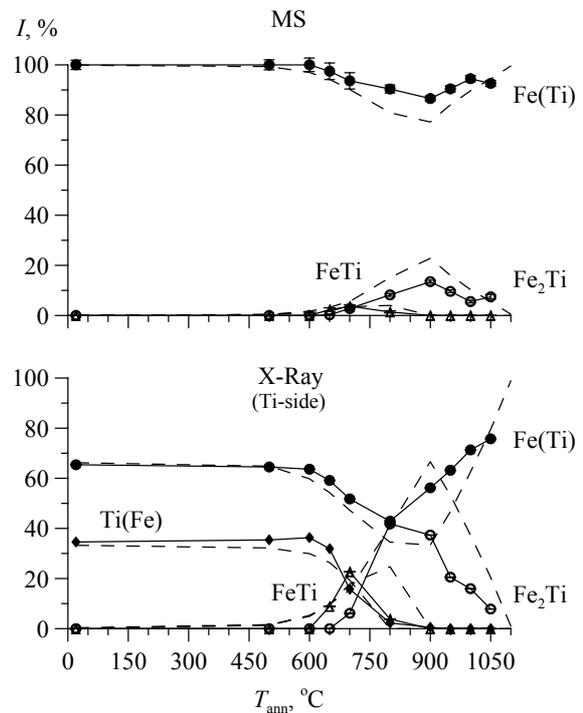


Рис. 2. Относительные интенсивности парциальных мессбауэровских спектров (MS) и рентгеновских дифракционных рефлексов (X-ray) образующихся фаз в зависимости от температуры $T_{\text{анн}}$ последовательного изохронного отжига для слоистой системы $\alpha\text{-Fe}(10 \text{ мкм})\text{-Ti}(2 \text{ мкм})$.

Как видим, все особенности термически индуцированного процесса фазообразования (температурная последовательность фазообразования, относительное содержание образованных фаз) в слоистой системе $\alpha\text{-Fe}(10 \text{ мкм})\text{-Ti}(2 \text{ мкм})$, наблюдаемые экспериментально при последовательных изохронных отжигам, хорошо описываются теоретически в рамках предложенных физических представлений.

Бинарная система $^{57}\text{Fe}(0.07 \text{ мкм})\text{-Ti}(1 \text{ мкм})\text{-Fe}_{0.96}\text{Ti}_{0.04}(13 \text{ мкм})\text{-}^{57}\text{Fe}(0.07 \text{ мкм})$ с тремя изотопами двух элементов [4,10] была получена с помощью магнетронного распыления титана на подложку из раствора $\text{Fe}_{0.96}\text{Ti}_{0.04}$ с естественным обогащением (2.16 %) железа изотопом ^{57}Fe и последующего термовакуумного напыления железа, обогащенного до 86 ат. % ^{57}Fe . Система подвергалась последовательным изотермическим отжигам в вакууме при температуре 650°C .

Зависимости относительных интенсивностей парциальных мессбауэровских спектров и дифракционных рефлексов образующихся фаз от времени $t_{\text{анн}}$ изотермического отжига для слоистой системы $^{57}\text{Fe}(0.07 \text{ мкм})\text{-Ti}(1 \text{ мкм})\text{-Fe}_{0.96}\text{Ti}_{0.04}(13 \text{ мкм})\text{-}^{57}\text{Fe}(0.07 \text{ мкм})$ представлены на рис. 3. Как видим, уже после первого этапа термического отжига ($t_{\text{анн}} = 0.5 \text{ ч}$) появляются фа-

зы FeTi и Fe₂Ti. Затем содержание интерметаллида Fe₂Ti плавно растет, а количество FeTi в образце уменьшается. После 40 ч отжига обнаружить соединение FeTi практически не удается. При дальнейшем отжиге соотношение количества фаз Fe₂Ti и α-Fe(Ti) изменяется незначительно.

Наблюдаемая с помощью рентгеновской дифрактометрии последовательность фазообразования и характерные времена существования фаз в процессе изотермического отжига слоистой системы соответствуют результатам, полученным методом мессбауэровской спектроскопии.

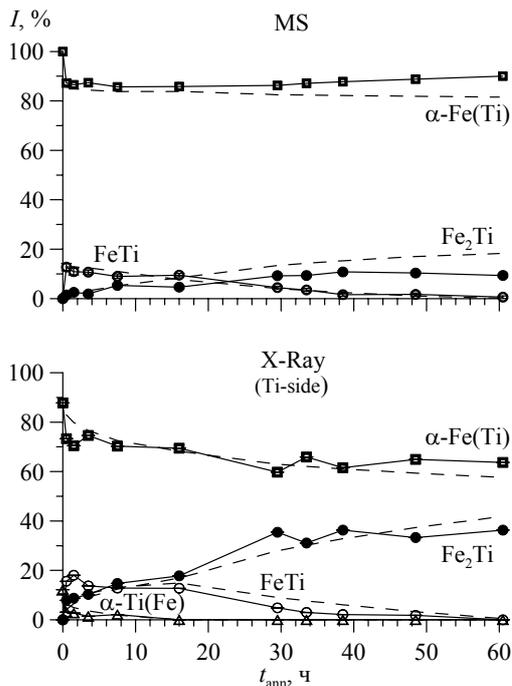


Рис. 3. Относительные интенсивности парциальных мессбауэровских спектров (MS) и рентгеновских дифракционных рефлексов (X-ray) образующихся фаз в зависимости от времени t_{ann} последовательного изотермического отжига при $T_{\text{ann}} = 650^\circ\text{C}$ для слоистой системы $^{57}\text{Fe}(0.07 \text{ мкм})\text{-Ti}(1 \text{ мкм})\text{-Fe}_{0.96}\text{Ti}_{0.04}(13 \text{ мкм})\text{-}^{57}\text{Fe}(0.07 \text{ мкм})$.

Сравнение расчетных зависимостей с экспериментальными данными показывает, что результаты моделирования хорошо описывают кинетику процессов диффузии и фазообразования

в слоистой системе $^{57}\text{Fe}(0.07 \text{ мкм})\text{-Ti}(1 \text{ мкм})\text{-Fe}_{0.96}\text{Ti}_{0.04}(13 \text{ мкм})$, а также соотношение образующихся интерметаллидов на всех этапах термического отжига.

Заключение

Проведено моделирование термически индуцированных процессов в слоистых бинарных системах на основе железа с двумя и тремя изотопами двух элементов. Результаты моделирования хорошо описывают экспериментально установленные последовательности фазовых превращений и относительное содержание образующихся фаз на всех этапах термического отжига исследованных слоистых систем. Хорошее согласие результатов численных расчетов с экспериментальными данными, полученными методами мессбауэровской спектроскопии и рентгеновской дифрактометрии указывает на то, что характер фазовых превращений в исследованных слоистых системах определяется изменением локальной концентрации компонентов в процессе их взаимной диффузии и соответствует особенностям фазовых диаграмм равновесных состояний бинарных систем.

Список литературы

1. Кадыржанов К.К., Керимов Э.А., Плаксин Д.А. и др. // Поверхность. - 2003. - 8. - С. 74-78.
2. Русаков В.С., Кадыржанов К.К., Суслов Е.Е. и др. // Поверхность. - 2004. - 12. - С. 22-30.
3. Русаков В.С., Кадыржанов К.К., Коршиев Б.О. и др. // Поверхность. - 2005. - 1. - С. 60-68.
4. Сергеева Л.С., Верещак М.Ф., Манакова И.А. и др. // Вестник НЯЦ РК. - 2006. - 4. - С. 28-36.
5. Русаков В.С., Кадыржанов К.К., Туркбаев Т.Э. // ФММ. - 2007. - Т. 104. - 4. - С. 387-395.
6. Аргынов А.Б., Жубаев А.К., Русаков В.С., Кадыржанов К.К. // ФММ. - 2008. - Т. 105. - 2. - С. 182-190.
7. Манакова И.А., Верещак М.Ф., Сергеева Л.С. и др. // ФММ. - 2010. - Т. 109. - 5. - С. 584-593.
8. Русаков В.С., Сухоруков И.А., Жанкадамова А.М., Кадыржанов К.К. // ФММ. - 2010. - Т.109. - 5. - С. 584-593.
9. Русаков В.С., Сухоруков И.А., Жанкадамова А.М., Кадыржанов К.К. // Поверхность. - 2011. - 6. - С. 103-112.
10. Русаков В.С., Сухоруков И.А., Жанкадамова А.М., Кадыржанов К.К. // Вестник МГУ. Физика и Астрономия. В печати.

SIMULATION OF PROCESSES OF DIFFUSION AND PHASE FORMATION IN BINARY LAYERED IRON-BASED SYSTEMS

V.S. Rusakov¹, I.A. Sukhorukov¹, A.M. Zhankadamova², K.K. Kadyrzhhanov²

¹Faculty of Physics, M.V.Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia. Tel. +7(495)939-23-88, e-mail: rusakov@phys.msu.ru, iasias@mail.ru

²Institute of Nuclear Physics, National Nuclear Center, Almaty 050032, Kazakhstan e-mail: aktorqyn@mail.ru, kadyrzhhanov@inp.kz

On the basis of physical principles defined previously the simulation thermally induced processes in iron-based layered systems (Fe-Zr, Fe-Ti и $^{57}\text{Fe-Ti-Fe}_{0.96}\text{Ti}_{0.04}\text{-}^{57}\text{Fe}$) with two and three isotopes of two elements is conducted. A Good agreement between the results of the theoretical calculations with the results of the experimental data obtained by methods of Mossbauer spectroscopy and X-ray diffractometry indicates that the character of phase transformations in the investigated layered systems is determined by the change of local concentration of components during their interdiffusion and corresponds to the phase equilibrium diagram of both binary systems according to the proposed physical model.