

Влияние сорта, заряда и энергии иона на число частиц в нанокластере

Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского ХАИ»

На основе решения совместной задачи теплопроводности и термоупругости получены поля температур и температурных напряжений, в которых выделены зоны, где образуются наноструктуры. Для большого числа различных ионов и их зарядов от одного до трех получены зависимости числа атомов в нанозерне от энергии и заряда ионов.

Ключевые слова: Наноструктура, температура, температурные напряжения, размер зерна.

Введение

Для получения нанокристаллических структур на поверхности, как известно, необходимо создание определенных температур (или скорости ее нарастания), давлений в нужном объеме и наличие атома металла, вокруг которого формируется наноструктура.

Как показано в работах [1–10], действие заряженных частиц на конструкционные материалы приводит к появлению в материале на глубине довольно высоких температур при действии индивидуальных ионов разных сортов, и в зоне теплового воздействия есть вероятность появления температурных напряжений значительной величины, что подтверждает возможность появления локальных зон, где достигаются условия возникновения наноструктур.

Для того чтобы такие условия реализовались в значительном объеме (действие высоких температур и напряжений), также необходимо обеспечить максимальное заполнение поля температур с повышенными температурами и в то же время сохранить зоны с максимальными градиентами температур, когда реализуются высокие значения температурных напряжений. Очевидно, простым увеличением плотностей ионного тока этого достичь будет нельзя, так как с ростом плотности тока градиенты температур в зоне действия соседних частиц снижаются, а следовательно, снижаются величины температурных напряжений и условия образования наноструктур не выполняются.

Работа выполнялась в рамках программы Министерства образования, науки молодежи и спорта Украины "Новые и ресурсосберегающие технологии в энергетике, промышленности и агропромышленном комплексе" (подсекция 13) "Аэрокосмическая техника и транспорт" и по темам "Создание физико-технических основ повышения качества материала аэрокосмических конструкций" и "Разработка технологических основ интегрированных технологий плазменно-ионной обработки деталей аэрокосмической техники", а также в рамках хоздоговорных работ и договоров о сотрудничестве.

1. Состояние вопроса

За счет действия ионов различных сортов, энергий, зарядности, плотностей токов есть возможность сохранения достаточных температур (за счет

соответствующего распределения температур температурного поля по глубине обеспечивается высокая средняя температура), в то же время, выбирая расположение поля по глубине (варьируя энергии, зарядности и сорт частиц), обеспечиваем высокие градиенты температур. Следовательно, в довольно большом объеме материала будут действовать значительные по величине напряжения, т.е. будут выполняться условия для получения кристаллических структур.

Поэтому, несколько модернизировав модель действия индивидуальных частиц на конструкционные материалы [1–10], получим модель, учитывающую необходимые факторы (в частности, в модели не учитывались зарядность иона и характер их сложного взаимовлияния в довольно большом рассматриваемом объеме).

2. Постановка задачи исследования

Приняв в качестве критериев получения наноструктур требуемый диапазон температур, скоростей нарастания температур, давлений (температурных напряжений) и наличие катализатора [1], можем рассмотреть возможность получения наноструктур в зависимости от физических и технологических параметров потоков при обработке, для чего проанализируем ряд теоретических и технических задач (рис. 1):

I. Модель взаимодействия потоков ионов разных сортов, энергий, зарядов и плотностей токов, которая позволяет:

1) получить диапазон глубин, на которых вероятно получение наноструктур для каждого из потоков отдельно, и оценить действие всех потоков по глубине;

2) рассчитать распределение полей температур и температурных напряжений в объеме детали;

3) определить размер зерна;

4) организовать подачу частиц таким образом, чтобы максимальный объем детали был заполнен полями температур и температурных напряжений (теоретически и технически);

5) теоретически определить количество частиц в нанокластере, количество нанокластеров, образующихся в единицу времени.

II. Теория взаимодействия нанокластеров (нанокристаллитов), их размера, энергетической связи между ними и физико-механические характеристики наноструктур, которая позволяет:

1) рассчитать размер нанокластеров энергии связи с соседними нанокластерами (зернами) и физико-механические характеристики наноматериала;

2) получить теоретически зависимости физико-механических характеристик НС от размера зерна, характера их расположения и взаимодействия, полноты заполнения объема наноструктурами.

III. Экспериментально-теоретическая модель связи размера зерна с ФМХ:

1) микротвердость;

2) коэффициент трения;

3) предел текучести;

4) предел прочности;

5) модуль упругости;

6) износостойкость;

7) стойкость режущего инструмента (РИ).

IV Адгезионное взаимодействие нанопокрyтия с основным материалом детали (теория).

V Техническое решение: обеспечение старта потоков ионов разных сортов, энергий, зарядов и плотностей токов.

Решение этих задач позволит найти физические и технологические параметры потоков ионов, которые обеспечат требуемые физико-механические характеристики наноструктур и наноматериалов.

Теперь рассмотрим реальные возможности реализации этих задач.

3. Модель действия индивидуального иона на конструкционный материал

Взаимодействие потоков заряженных частиц и плазменных потоков с конструкционными материалами связано с реализацией широкого круга процессов: столкновительных, теплофизических, термомеханических термоусталостных, диффузионных, термохимических и плазмохимических, но в настоящее время отсутствуют работы, учитывающие эти факторы и тем более их взаимосвязь. Все эти процессы влияют как на характер теплообмена в объеме мишени, так и на поверхности, поэтому учет этих процессов необходим и в балансе энергии в элементарном объеме металлической мишени, и в теплообмене на поверхности мишени, т.е. в граничных условиях.

Задача подробно описана в нашей работе [1].

4. Исследование влияния сорта заряда и энергии иона на число частиц в нанокластере

Число частиц в нанокластере определяет возможность получения нанокластера с обычной решеткой, когда число частиц больше 4, или с деформированной решеткой наноразмеров $n < 4$ (специальные наноструктуры), поэтому такое исследование необходимо.

Результаты расчетов числа частиц в кластере и в зависимости от заряда и энергии ионов представлены на рис. 1–2: для ионов C, B, N (а), Al (б) и Ti, V, Cr(в) на рис. 1, для Fe, Ni, Co (а); Y, Zr, Mo (б) и Hf, Ta, W, Pt (в) на рис. 2. Видно, что с ростом заряда иона повышается число частиц в кластере, что связано с ростом зоны, охваченной температурами, достаточными для получения наноструктур. Скорость повышения температуры практически для всех ионов превышает необходимую – 10^7 К/с, а величины температурных напряжений (необходимых давлений) составляют порядка от $10^7 \dots 10^{10}$ Па.

Видно, что с ростом массы ионов все больше проблемных режимов, где наноструктуры образуются только на поверхности с деформированным зерном, т.е. основной вклад в нанозерно дают падающие ионы, в то же время для легких ионов в энергиях, используемых в технологических установках, есть возможность получать наноструктуры в основном материале детали, в то же время такая возможность есть и для энергий ионов $2 \cdot 10^4$ эВ и меньших энергий, но с зарядовыми числами 3 (а иногда и 2).

Все это говорит о необходимости оценки числа частиц в нанокластере.

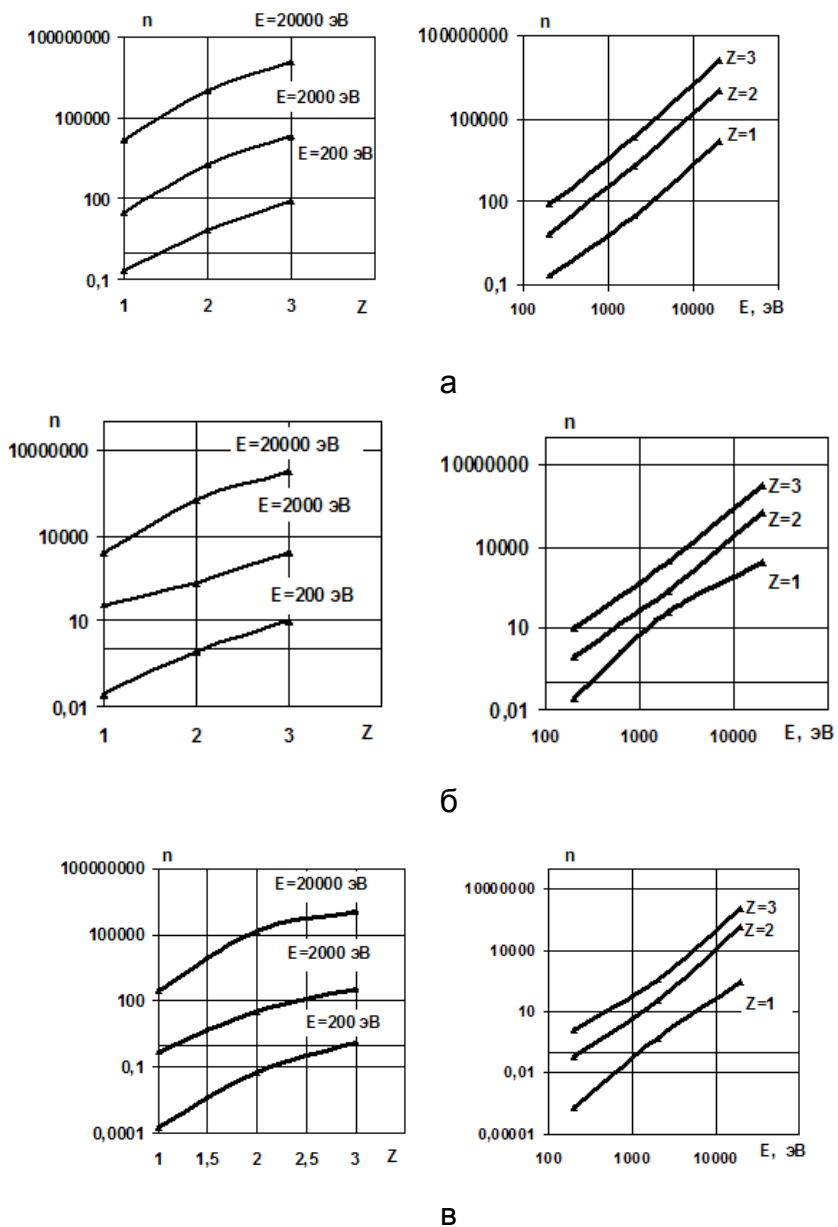


Рис. 1. Зависимость числа частиц в нанокластере от заряда z и энергии иона E_i для ионов: C, B, N – а; Al – б; Ti, V, Cr - в

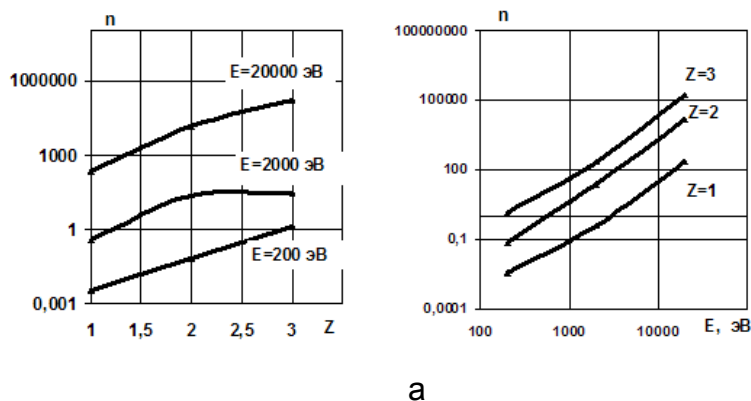
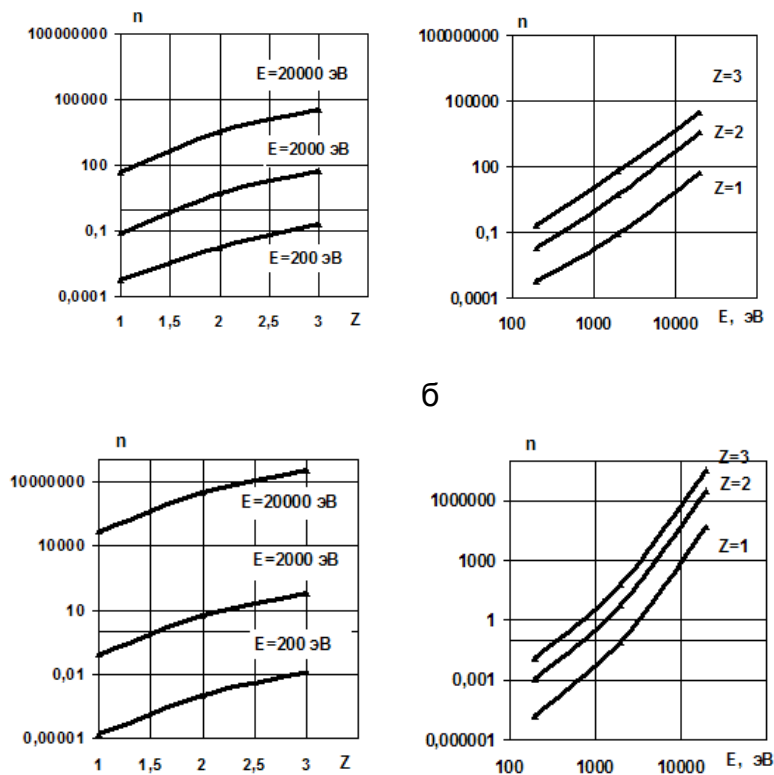


Рис. 2. Зависимость числа частиц в нанокластере от заряда z и энергии иона E_i для ионов: Fe, Ni, Co – а; Y, Zr, Mo – б; Hf, Ta, W, Pt - в



б

в

Рис. 2. Окончание

Вывод

Выявлены энергии, сорта и заряды ионов, при которых реализуются нанокластеры в объеме и создаются наноструктуры в виде поверхностных структур, т.е. когда основной материал детали не участвует в обработке.

Решение задачи позволило найти объем, в котором возможна реализация условий для получения наноструктур. Поэтому есть возможность определить реальное число частиц, которые могут участвовать в создании объемной или плоской наноструктуры.

Список литературы

1. Костюк, Г.И. Нанотехнологии: теория, эксперимент, техника, перспективы [Текст]: моногр./ Г.И. Костюк. –К.: Изд. центр Междунар. академии наук и инновац. технологий, 2012. – 648 с.
2. Костюк, Г.И. Физико-технические основы нанесения покрытий, ионной имплантации и ионного легирования, лазерной обработки и упрочнения, комбинированных технологий [Текст] Кн.1: Физические процессы плазменно-ионных, ионно-лучевых, плазменных, светолучевых и комбинированных технологий / Г.И. Костюк. – К.: Изд-во АИНУ, 2002. — 596 с.
3. Костюк, Г.И. Физико-технические основы нанесения покрытий, ионной имплантации и ионного легирования, лазерной обработки и упрочнения, комбинированных технологий [Текст] Кн. 2: Справочник для расчета основных

физических и технологических параметров, оценки возможностей, выбора типа технологий и оборудования / Г.И. Костюк. – К.: Изд-во АИНУ, 2002. — 482 с.

4. Костюк, Г.И. Наноструктуры и нанопокрyтия: перспективы и реальность [Текст]: учеб. пособие / Г.И. Костюк. – Х.: Нац. аэрокосм. ун-т «Харьк. авиац. ин-т», 2009. – 406 с.

5. Костюк, Г.И. Научные основы создания современных технологий [Текст]: учеб. пособие / Г.И. Костюк. – Х.: Нац. аэрокосм. ун-т «Харьк. авиац. ин-т», 2008. – 552 с.

6. Костюк, Г.И. Эффективный режущий инструмент с покрытием и упрочненным слоем [Текст]: моногр.-справ. / Г.И. Костюк. – Х.: Нац. аэрокосм. ун-т «Харьк. авиац. ин-т», 2007. – 633 с.

7. Костюк, Г.И. Эффективный режущий инструмент с покрытием и упрочненным слоем [Текст]: справ. / Г.И. Костюк. – К.: Вид-во АИНУ, 2003. – 412 с.

8. Костюк, Г.И. Физико-технические основы роботизированного производства [Текст]: учеб. пособие / Г.И. Костюк. – Х.: Нац. аэрокосм. ун-т «Харьк. авиац. ин-т», 2006. – 614 с.

9. Гречихин, Л.И. Физика наночастиц и нанотехнологий [Текст] /Л.И. Гречихин. –М.: УП «Технопринт», 2004. – 397 с.

10. Шнейдер, П. Инженерные проблемы теплопроводности [Текст] / П. Шнейдер. – М.: Иностран. лит.- 1960. – 488 с.

11. Аксенов, И.И. Вакуумная дуга в эрозионных источниках плазмы [Текст] / И.И. Аксенов. – Х.: Изд-во НИИ «ХФТИ», 2005. – 211 с.

12. Хаякава, С. Ядерно-физический аспект [Текст]: в 2 кн. / С. Хаякава. – М.: Мир, 1973. – Кн. 2. – 701 с.

13. Готт, Ю.В. Взаимодействие частиц с веществом в плазменных исследованиях [Текст] / Ю.В. Готт. – М.: Атомиздат, 1978. – 271 с.

14. Гусев, А.И. Нанокристаллические материалы: методы получения и свойства [Текст] / А.И. Гусев. — Екатеринбург: Изд-во РАН, Уральское отд-ние, 1998. – 302 с.

15. Гусев, А.И. Наноматериалы наноструктуры, нанотехнологии [Текст] / А.И. Гусев. – М.: Физматлит, 2005. – 416 с.

16. Решетняк, Е.Н. Синтез упрочняющих наноструктурных покрытий [Текст] / Е.Н. Решетняк, А.И. Стрельницкий // Вопросы атомной науки и техники.– 2008.– № 2. – С. 119 – 130.

17. Андриевский, Р.А. Наноматериалы: концепция и современные проблемы [Текст] / Р.А. Андриевский// Физика металлов и металловедение.- 2003. – Т. 91, № 1. – С.50 – 56.

18. Состав, структура и свойства наноструктурных пленок боридов тантала [Текст] / А.А Гончаров, П.И. Игнатенко, В.В. Петухов и др. // ЖТФ. –2006. – Т. 76, вып. 10.

Рецензент: д-р техн. наук, проф., проф. каф. «А.И. Долматов, Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «Харьковский авиационный институт», Харьков, Украина.

Поступила в редакцию 21.07.12.

Вплив сорту, заряду та енергії іона на число частинок у нанокластері

На основі вирішення сумісної задачі теплопровідності та термопружності одержано поля температур і температурних напружень, у яких вилучено зони, де утворюються наноструктури. Для широкого кола різних іонів таких зарядів від одної до трьох одержані залежності кількості атомів у зерні від енергії та заряду іонів.

Ключові слова: наноструктура, температура, температурні напруження, розмір зерна.

Influence of variety, the charge and the ion energy on the number of particles in a nanocluster

On the basis of the joint decision problem of heat conduction and thermoelasticity obtained temperature field and thermal stresses, which highlighted areas where nanostuctury formed. For a large number of different ions and their charges from 1 to 3 were obtained depending on the number of atoms in nanograin of the energy and ion charge.

Keywords: Nanostructure, temperature, thermal stresses, the grain size.