



УДК 621.793.1

Поступила 18.11.2014

И. А. ИВАНОВ, И. В. МИСНИК, БНТУ,
Х. Т. Е. КАРМАЖИ, Zawia University, Libia

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ МАССОПЕРЕНОСА ПРИ ВАКУУМНО-ПЛАЗМЕННОЙ ОБРАБОТКЕ СТАЛЕЙ

В статье обсуждаются базовые принципы и основные результаты численного исследования на основе метода статистических испытаний процессов массо- и энергопереноса при формировании вакуумно-плазменных покрытий.

The basic principles and main results of numerical research on the basis of method of statistical test of the mass and power carry processes at forming vacuum-plasma coverings are discussed in the article.

Значительную роль в технологии поверхностного упрочнения сталей с целью улучшения их эксплуатационных свойств занимают методы получения металлургических покрытий [1]. Например, огнеупорные разделительные покрытия позволяют предотвратить взаимодействие поверхности металлических форм с расплавами черных и цветных металлов, что обеспечивает получение как качественных поверхностей отливок, так и способствует увеличению срока службы металлических форм. Среди методов формирования упрочняющих и защитных покрытий начиная с 70-х годов прошлого века широкое распространение получили технологические методы нанесения покрытий физическим осаждением в вакууме (PVD-методы). Это связано с такими достоинствами методов, как возможность формирования покрытий из любых, в том числе тугоплавких материалов (интерметаллидов, карбидов, нитридов и др.), высокая чистота процесса и высокий коэффициент использования осаждаемого материала, высокая производительность процесса. В ряде случаев PVD-покрытия рассматриваются единственным эффективным технологическим приемом повышения эксплуатационных свойств машиностроительных изделий. Например, исследования показывают, что нанесение вакуумно-плазменных покрытий титан-кремний толщиной 10 мкм резко уменьшает скорость окисления углеродистых конструкционных сталей (ст3, 20, 35). Так, масса образцов из стали ст3 при 950 °С за 5 ч (при отсутствии механических нагрузок) составляет 55,7 г/м² вместо 608 г/м² для образцов без покрытия [2].

Однако, несмотря на существенные преимущества использования вакуумно-плазменных покрытий, проблематичным для их применения остается обеспечение высокой степени повторяемости их свойств. Поэтому для каждого нового изделия требуются производственно-лабораторные испытания, что в ряде случаев является трудоемкой задачей. Возможность теоретической оценки результата процесса нанесения покрытий до подтверждающего эксперимента представляется эффективным путем оптимизации затрат проектных работ.

Цель данной статьи – на примере модельной системы показать возможность численного исследования на основе метода статистических испытаний процессов массо- и энергопереноса при формировании ионно-плазменных покрытий вакуумным электродуговым методом.

Для анализа рассматривается случай формирования покрытий в среде технологического газа (аргона и азота при давлении ниже 10⁻² Па) как результат осаждения титановой плазмы вакуумного дугового разряда с интегрально холодным катодом.

Сравнительный анализ показывает, что описание процесса переноса ионизированного потока в вакууме наиболее перспективно осуществлять с применением метода статистических испытаний [3]. Данный метод полностью адекватен физической природе молекулярного переноса, носящей случайный характер, и дает удовлетворительные результаты при описании движения сильно разреженных газовых потоков.

Для исследования процессов массопереноса разработан численный алгоритм расчета пространственных и энергетических параметров плазменного потока на основе языка программирования *Delphi*. Разработанный численный алгоритм включает в себя следующие этапы [4]:

1. Ввод исходных данных: геометрия вакуумной камеры, размеры эродирующей поверхности катода, размеры изделия, расстояние от катода до изделия, средняя длина свободного пробега, тип (атомные массы) ионов плазмы и молекул технологического газа, значение начальной энергии ионов.

2. Расчет координаты начальной точки траектории иона на поверхности катода и выбор направления вектора скорости иона. Предварительные исследования показывают, что модель «точечного» источника ионов не позволяет рассчитать адекватное пространственное распределение плотности плазмы. Наиболее точный результат получен на модели катода в форме диска [4]. В связи с тем что процесс испарения идет в катодных пятнах, которые хаотично и с большой скоростью перемещаются по поверхности эрозии катода, можно считать, что на этой поверхности все параметры усредняются. Плотность центров эрозии на поверхности катода распределена равномерно и место расположения нового центра испарения является равновероятным. Тогда для задания координаты начальной точки в сферической системе координат необходим угол $\varphi = 2\pi\xi_1$ и радиус $r = R_0\sqrt{\xi_2}$, где ξ_1 и ξ_2 – случайные числа в интервале от 0 до 1; R_0 – радиус катода. Направление вектора скорости иона будет определяться двумя углами $\psi = 2\pi\xi_3$ и $\theta = \arcsin\sqrt{\xi_4}$, где ξ_3 и ξ_4 – также являются случайными числами, генерируемыми в интервале от 0 до 1. Для ионов плазменного потока траектория движения может быть принята соответствующей прямой линии.

3. Расчет длины свободного пробега частицы и определение координаты нового положения иона в пространстве.

4. Определение выполнения условий продолжения расчетов. Если ион остается внутри объема вакуумной камеры, то переходим к следующему расчетному этапу.

5. Расчет нового направления вектора скорости иона. Направление вектора выбирается случайным образом в координатной сетке, в которой старая траектория полета частицы до столкновения принимается в качестве нормали к воображаемой поверхности старта, угол поворота распределен равномерно.

Особенностью предлагаемого алгоритма является возможность расчета потерь энергии кинети-

ческого движения иона. Расчет ведется на основе следующих допущений. Из-за значительных различий в скоростях движения – теплового молекул технологического газа и направленного ионов плазменного потока, движение ионизированных частиц моделируется в поле неподвижных, случайно расположенных частиц технологического газа. Каждая точка парного соударения с молекулой технологического газа является точкой изменения направления траектории иона.

Оценки показывают, что основные неупругие процессы при столкновениях тяжелых частиц (атомов и ионов) существенны лишь при энергиях порядка 1 кэВ и больше. При малых энергиях неупругие процессы при взаимодействии тяжелых частиц не играют заметной роли. Энергия ионов неускоренного плазменного потока технологических плазменных устройств колеблется от 20 до 100 эВ. В таких условиях преимущественно происходят только упругие столкновения ионов и молекул газа и неупругие столкновения с очень малым дефектом энергии ($\Delta E < 1$ эВ) [5].

При упругих взаимодействиях величина энергии, теряемой заряженной частицей в момент ее соударения, будет равна энергии, приобретаемой молекулой газа:

$$E = \mu E_{cp} \sin^2\left(\frac{\varphi}{2}\right),$$

где $\mu = \frac{4m_1m_2}{(m_1 + m_2)^2}$ – приведенная масса сталкивающихся частиц; E_{cp} – средняя энергия иона перед столкновением с молекулой газа; φ – угол рассеивания (между конечным и начальным направлениями движения частицы).

Для ионов титана ($m_{Ti} = 47,87$ а.е.м.) и молекулы азота ($m_{N_2} = 28,004$ а.е.м.) энергия, теряемая ионом титана за однократный акт взаимодействия с молекулой технологического газа, составляет:

$$E = \frac{4m_1m_2}{(m_1 + m_2)^2} \bar{W} \sin^2(\theta/2) = \\ = \frac{4 \cdot 47,87 \cdot 28,014}{(47,87 + 28,014)^2} \cdot 30 \sin^2(0,58521/2) = 0,028 \text{ эВ.}$$

В силу высокой кинетической энергии ионов титановой плазмы угол рассеивания иона φ не может превышать некоторого максимального значения $\sin(\varphi_{Ti}) = \frac{m_{N_2}}{m_{Ti}}$. Оценочные расчеты показывают, что при столкновении иона титана с молекулой азота максимальный угол рассеивания иона Ti чуть больше 30° . $\sin(\varphi_{Ti_{max}}) = 0,58521$, т. е. $\varphi_{Ti_{max}} \approx 30^\circ$. В расчетном алгоритме угол φ изменяется

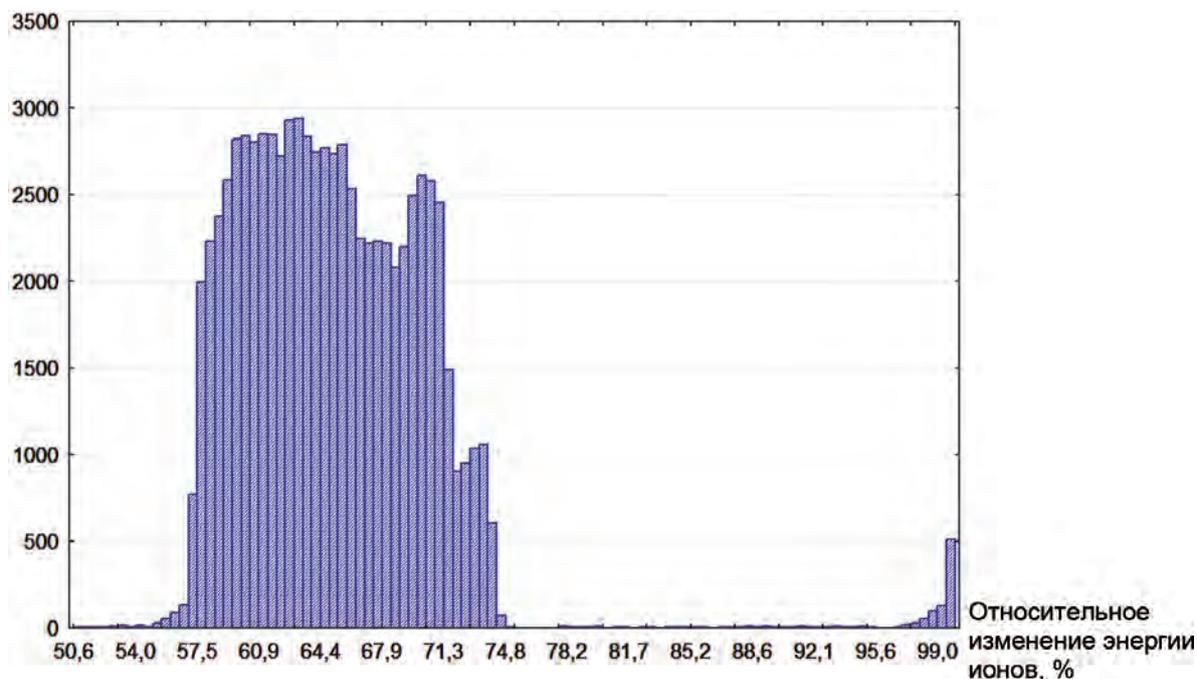


Рис. 1. Распределение значений энергии ионов, достигших изделия (расстояние катод-изделие – 500 мм)

в пределах от 0 до π по нормали к направлению вектора скорости движения иона [4].

Расчеты по предложенному алгоритму показывают, что основное количество ионов, достигших подложки, теряют от 25 до 43% первоначальной энергии, что говорит о значительном вкладе процессов упругих столкновений в потери энергии ионами потока. Среднее расчетное значение энергии иона составляет 65,4% от его первоначальной энергии. Порядка 1,1% ионов не испытывают столкновений в вакуумной камере и достигают подложки, сохраняя свою первоначальную энергию (рис. 1).

Энергия ионов конденсирующегося потока в значительной степени определяет свойства формируемых покрытий. Для ионного потока со средним зарядом ионов q , начальной энергией E_0 осаждаемого на поверхность, к которой приложен отрицательный ускоряющий потенциал U , энергия ионов будет равна: $E = 0,654E_0 + qeU$, где e – заряд электрона. Таким образом, для титановой плазмы со средним зарядом ионов 1,6 и начальной энергией 28 эВ при величине отрицательный ускоряющий потенциал 100 В средняя (наиболее вероятная) энергия ионов потока составляет 178,3 эВ. При этом порядка 1% ионов будут иметь энергию 188 эВ. Минимальная энергия иона в потоке составит 175,9 эВ.

Полученные результаты достаточно хорошо объясняют наблюдаемую многофазность, особенно многокомпонентных, вакуумно-плазменных покрытий. Так, при формировании покрытий Me–Si (где

Me – один из металлов Ti, Mo, Zr) при осаждении двухкомпонентного плазменного потока, при низких значениях ускоряющего потенциала (0–100 В) в покрытии характерно образование низкоэнтальпийных соединений – дисилицидов металлов. В случае осаждения титановой или титан-кремниевой плазмы в среде технологического газа – азота, при тех же величинах ускоряющего потенциала в покрытии установлено наличие соединений Ti_2N и SiO_2 [6]. Увеличение энергии конденсирующихся ионов потока ведет к сдвигу фазового состава в сторону образования высокоэнтальпийных соединений. Однако рентгенофазовый анализ фиксирует образование в покрытиях также и низкоэнтальпийных соединений.

При анализе процессов массопереноса установлены следующие общие закономерности. Распределение плотности ионного тока по поверхности изделия близко к закону косинуса и коррелирует с имеющимися теоретическими представлениями [7] и экспериментальными данными. Результаты численного моделирования позволяют получить осредненные параметры потока на поверхности конденсации с учетом геометрических размеров как изделия, так и испарителя (рис. 2), которые учитывают стохастический характер процессов, протекающих в объеме вакуумной камеры. Возможность учета стохастических колебаний плотности на выделенной элементарной площадке поверхности конденсации позволяет объяснить флуктуационные явления, способные прервать рост кристаллов [8].

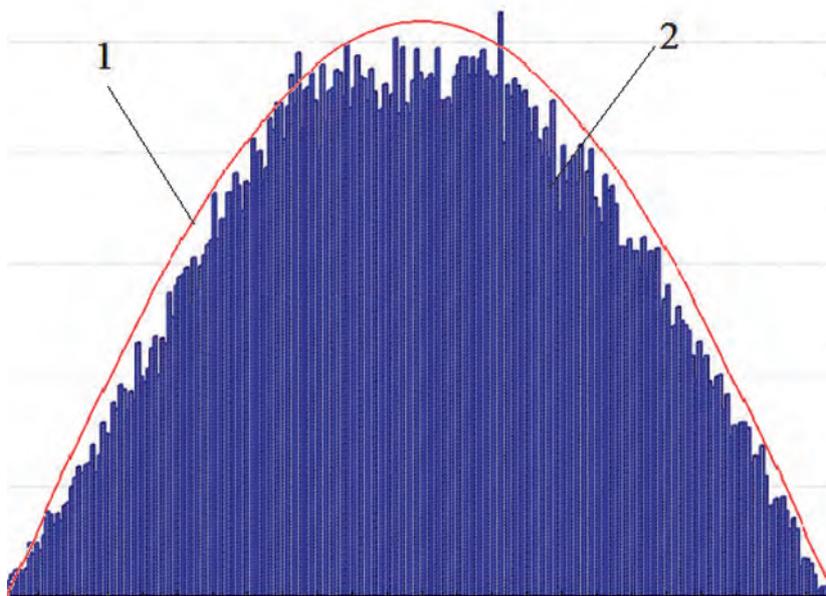


Рис. 2. Распределение плотности потока по поверхности изделия, диаметр катода – 80 мм, диаметр изделия – 240 мм, расстояние катод-изделие – 300 мм: 1 – расчет по теоретическим методикам; 2 – моделирование методом пробной частицы

Выводы

При значительном различии в скоростях движения – направленного ионов и теплового молекул технологического газа – более тяжелые ионы титана практически не изменяют направления движения после столкновения с молекулой газа. Максимальный угол рассеяния ионов титана со-

ставляет 30°. Только около 1% ионов потока сохраняют начальную кинетическую энергию, средняя энергия остальных ионов потока составляет 65,4% от начальной за счет потерь при упругих столкновениях с молекулами технологического газа. Это позволяет объяснить наблюдаемую многофазность осаждаемых вакуумно-плазменных покрытий.

Литература

1. М р о ч е к Ж. А. Современное состояние исследований в области вакуумно-плазменных жаростойких и упрочняющих покрытий / Ж. А. Мрочек, И. А. Иванов, В. А. Соколовский // Весці НАН Беларусі. Сер. фіз.-тэхн. навук. 2002. № 3. С. 121 (Деп. в ВИНТИ № 229 В2002 05.02.02 г.)
2. М р о ч е к Ж. А. Плазменно-вакуумные покрытия / Ж. А. Мрочек, А. К. Вершина, С. А. Иващенко, И. А. Иванов и др. Мн.: УП «Технопринт», 2004. 369 с.
3. И в а н о в И. А. Анализ математических подходов к описанию движения сильно разреженных газов // Материалы междунар. науч.-техн. конф. «Машиностроение и техносфера XXI века». Севастополь, 2009. ДонНТУ. 2009. Т. 1. С. 276–279.
4. И в а н о в И. А. Применение метода пробной частицы к моделированию процессов нанесения вакуумных оптических покрытий / И. А. Иванов, И. В. Мисник // Контенант. 2013. Т. 12. № 4. С. 55–57.
5. Х о р о ш и х В. М. Стационарная вакуумная дуга в технологических системах для обработки поверхностей // ФІП ФІП PSE. 2003. Т. 1. № 1. С. 19–26.
6. И в а н о в И. А. Формирование структуры вакуумных электродуговых многокомпонентных покрытий в среде технологического газа / И. А. Иванов, Х. Т. Е. Кармажи // Прогресивні технології і системи машинобудування: Міжнародний зб. Наукових прац.- Донецьк: ДонНТУ. 2006. Вип. 31. С. 356–364.
7. Д о р о д н о в А. М. Методика инженерно-физического расчета электродугового источника плазмы для процессов нанесения покрытий в вакууме / А. М. Дороднов, А. Н. Кузнецов, С. В. Леонтьев. М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 1999.
8. Т о м а л ь В. С. Исследование процессов формирования структуры вакуумных конденсатов в среде технологического газа / В. С. Томаль, Н. К. Касинский, И. А. Иванов, И. В. Мисник // Контенант. 2013. Т. 12. № 4. С. 16–21.