

Science / S.G. Selig. – Dalhousie University Halifax, Nova Scotia, March 2012.

14. Modeling the mechanical behavior of pharmaceutical powders during compaction / C.-Y. Wu [et al] // Powder Technology. – 2005. – Vol.152. – № 1-3. – P. 107–117.

15. Kim, K.T. Densification behavior of ceramic powder under cold compaction / K.T. Kim, S.W. Choi, H. Park // Journal of Engineering Materials and Technology. – 2000. – Vol. 122. – P. 238–244.

16. LS-DYNA Keyword User's Manual. – Vol. 1. – Livermore Software Technology Corporation, 2001. – 853 p.

УДК 621.793.18

**И.А. ИВАНОВ, д-р техн. наук,
И.В. МИСНИК (БНТУ)**

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ МАССОПЕРЕНОСА ПРИ НАНЕСЕНИИ PVD-ПОКРЫТИЙ

Широкое распространение технологические методы и оборудование для нанесения покрытий физическим осаждением в вакууме (PVD-методы) получили в 70-х годах прошлого века. Это связано с такими достоинствами методов как возможность формирования покрытий из любых, в том числе тугоплавких материалов, возможность формирования покрытий из соединений (оксидов, нитридов и др.), высокая чистота процесса и высокий коэффициент использования осаждаемого материала, высокая производительность процесса. В последнее время, в ряде случаев, PVD-покрытия рассматриваются единственным эффективным технологическим приёмом повышения эксплуатационных свойств (например, долговечность, износостойкость, коррозионная стойкость) машиностроительных изделий.

Основными показателями, определяющими свойства и функциональное назначение сформированного покрытия, являются состав и качество нанесенного слоя. Если состав покрытия будет задаваться материалом мишени, а также присутствующим в объеме вакуумной

камеры технологическим газом, то качество сформированного покрытия будет определяться составом потока, особенностями его транспортировки через вакуумную камеру и взаимодействия с поверхностью изделия. Как правило, обработка таких технологических процессов является трудоемкой задачей. Для уменьшения объема производственно-лабораторных испытаний наиболее оптимальным представляется предварительный расчетно-теоретический анализ процессов, протекающих в вакуумной камере [1].

Цель работы – разработка численного алгоритма исследования процессов переноса заряженных частиц плазменного потока вакуумного электродугового испарителя на основе метода пробной частицы с учетом парных взаимодействий ион-молекула технологического газа.

В качестве объекта для построения математической модели метода пробной частицы выбрана система с электродуговым источником титановой плазмы с магнитной стабилизацией дугового разряда. Генерируемый плазменный поток движется в среде технологического газа (азот) в условиях нанесения покрытий на плоские подложки, расположенные перпендикулярно оси испарителя.

Как показывает анализ литературы, для данных плазменных потоков характерны следующие свойства [2–5]: ионный поток имеет ярко выраженную осевую направленность при разлете относительно оси испарителя в пределах $\pm 40^\circ$ и его распределение подчиняется закону косинуса; степень ионизации и распределение ионов по заряду и энергиям зависят от материала катода, расстояния от поверхности эрозии и давления технологического газа (степень ионизации 25–100 %, поток многозарядный, электрически нейтральный).

Формирование энергетических и массовых параметров потока электродугового источника плазмы может быть описано системой газодинамических уравнений. Однако достоверность их решения сильно зависит от правильного выбора физических коэффициентов, входящих в систему уравнений. Связано это с существенным отличием условий, реализуемых в катодном пятне и в околоскатодном пространстве, от стандартных. Кроме этого, течение плазменного потока в технологическом объеме вакуумной камеры можно рассматривать бесстолкновительным (свободномолекулярным).

В условиях реализации технологического процесса в среде технологического газа длина свободного пробега молекулы в объеме

вакуумной камеры составит ≈ 5 м (при давлении порядка 10^{-3} Па) при концентрации частиц остаточного газа (при температуре $T = 300$ К):

$$n = \frac{p}{kT} = \frac{10^{-3}}{1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 3 \cdot 10^2} \approx 2 \cdot 10^{17} \text{ м}^{-3}.$$

Концентрация ионов вблизи области катодных пятен составляет около 10^{23} м^{-3} , однако в результате расширения плазмы в вакуумную камеру падает до 10^{18} м^{-3} . Следовательно, движение частиц плазменного потока носит также свободномолекулярный характер. В связи с этим для расчета движения плазменных потоков будут справедливы методики, описывающие состояние разреженного газа.

Для описания процессов осаждения парового или ионизированного потока в вакууме наиболее перспективно применение метода статистических испытаний (метод Монте-Карло пробной частицы). Данный метод полностью адекватен физической природе молекулярного переноса, носящей в конкретном случае случайный характер, и дает удовлетворительные результаты при описании движения сильно разреженных газовых потоков [6].

Поскольку удержание катодных пятен на торцевой поверхности катода в электродуговом испарителе плазмы осуществляется с помощью внешнего магнитного поля, то траектория движения отдельной ионизированной частицы будет определяться величиной и направлением этого поля. Ионы, двигающиеся по оси испарителя, не будут испытывать никакого действия со стороны магнитного поля.

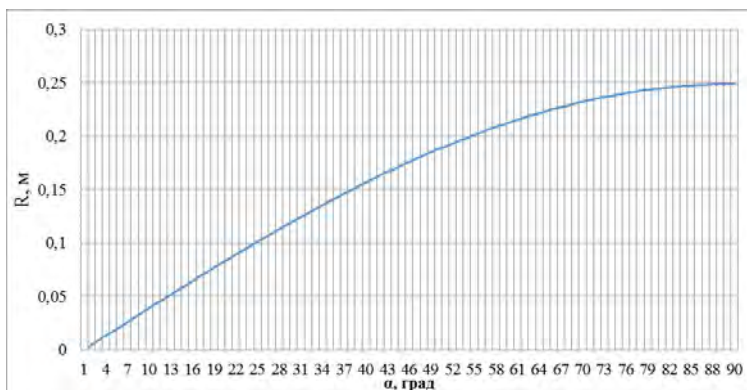
Движение ионизированной частицы в магнитном поле под углом α к оси испарителя можно представить как суперпозицию двух траекторий: движение частицы по окружности вокруг силовых линий

\vec{B} с радиусом $R = \frac{mV}{qB}$ и частотой вращения $\omega = \frac{qV}{m}$; движение час-

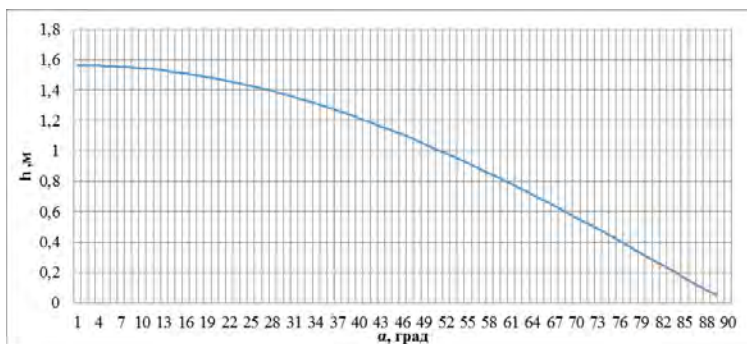
тицы по прямой, параллельной линиям поля \vec{B} , где m , V , q – масса, скорость и заряд ионизированной частицы плазменного потока, соответственно. В результате сложения данных движений возникает движение по спирали, ось которой параллельна магнитному полю

\vec{B} , с шагом спиральной линии $h = T \cdot V_{\tau}$, где $T = \frac{2\pi m}{qB}$ – период вращения частицы. Отсюда $h = \frac{2\pi m V \cdot \cos \alpha}{qB}$.

Принимая для расчета скорость направленного движения ионов равной $V = 2 \cdot 10^4$ м/с и напряженность магнитного поля $B = 2 \cdot 10^{-2}$ Тл, для ионов титановой плазмы ($m = 7,968 \cdot 10^{-26}$ кг, $q = 3,2 \cdot 10^{-19}$ Кл) получим следующие зависимости радиуса (рисунок 1, а) и шага спиральной линии (рисунок 1, б) от угла α .



а



б

Рисунок 1 – Зависимость радиуса (а) и шага (б) спиральной траектории заряженной частицы плазменного потока от угла α

Для ионов плазменного потока, максимально отклоненных от оси испарителя ($\alpha = 40^\circ$), в пределах технологического объема вакуумной камеры траектория ионов может быть принята соответствующей прямой линии [1].

Процесс расчета начинается с ввода исходных данных. Исходными данными являются: геометрические размеры вакуумной камеры, размеры эродирующей поверхности катода, размеры изделия, расстояние от катода до изделия, средняя длина свободного пробега, тип (атомные массы) ионов плазмы и атомов технологического газа, значение начальной энергии ионов, а также количество частиц, достигших поверхности изделия.

Далее происходит расчет координаты начальной точки траектории иона на поверхности катода и выбор направления вектора скорости иона. Исходной точкой траектории будет являться поверхность катода. В связи с тем, что процесс испарения идет в катодных пятнах, которые хаотично и с большой скоростью перемещаются по поверхности эрозии, можно считать, что на его поверхности все параметры усредняются. Плотность центров эрозии на поверхности катода распределена равномерно. В этом случае место расположения нового центра испарения является равновероятным. Тогда для задания координаты начальной точки в сферической системе координат необходим угол, который будет равным $\varphi = 2\pi\xi$ и радиус $r = R_0\sqrt{\xi}$, где ξ – случайное число в интервале $[0, 1]$, R_0 – радиус катода. Направление вектора скорости иона будет определяться двумя углами $\psi = 2\pi\xi$ и $\theta = \arcsin\sqrt{\xi}$.

После выполняется расчет длины свободного пробега частицы $\lambda(\xi) = -\lambda_0 \ln(1 - \xi)$ и определяется координата нового положения иона в пространстве.

Если ион пересек геометрические границы вакуумной камеры, алгоритм начинается заново для новой траектории с этапа расчета координаты начальной точки; если траектория иона пересекла поверхность изделия, определяется координата точки пересечения и сохраняется как выходной параметр. Если ион остался внутри объема вакуумной камеры, моделируется новое направление его движения и координата нового положения.

Новое направление вектора выбирается случайным образом и будет определяться двумя углами ψ и φ . Для определения направления полета частицы после столкновения возможно использовать два типа распределения для моделирования данных углов:

– старая траектория движения частицы до столкновения принимается в качестве оси новой системы координат и таким образом вводится понятие локальной системы координат, принимаемой в каждой новой точке соударения;

– оба угла равномерно распределены, моделирование положения точки в пространстве производится в глобальной системе координат относительно оси катод–изделие.

Для данной модели принимаем второй тип с распределением моделируемых углов в интервале от 0 до π , что обусловлено высокой скоростью и большой кинетической энергией направленного движения ионов в сравнении с взаимодействующими частицами.

Таким образом, моделируемые углы будут определяться следующими формулами: $\varphi = \pi\xi$, $\psi = \pi\xi$.

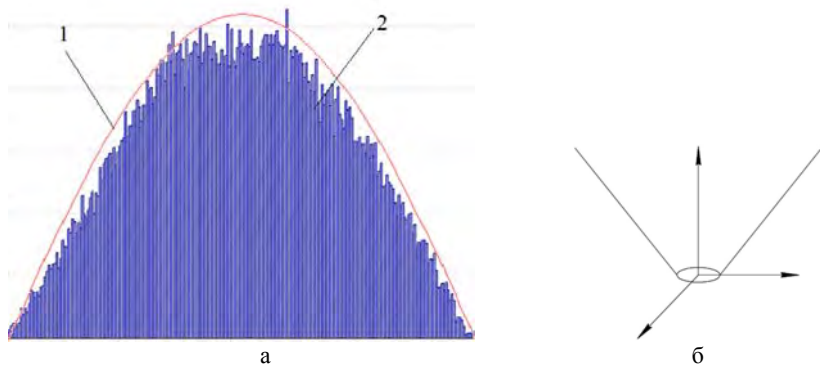
Каждая точка изменения направления траектории иона является точкой его парного соударения с атомом технологического газа. Процесс столкновения, сопровождающийся передачей кинетической энергии от быстрого иона к атому, может быть описан явлениями упругого и неупругого взаимодействия. При упругом столкновении часть кинетической энергии передается всему объему атома, а при неупругих столкновениях часть энергии расходуется на изменение внутренних энергетических состояний.

В процессы неупругих взаимодействий ионов плазменного потока с нейтральными атомами основной вклад вносит процесс перезарядки ($A^+ + B^0 = A^0 + B^+$). При разлете плазмы имеются несущественные потери ионов вследствие процессов двойной ($i + e \rightarrow a + hv$) и тройной ($i + e + e \rightarrow a + e$) рекомбинации, в результате которых также образуются возбужденные нейтральные атомы.

При упругих взаимодействиях величина энергии, теряемой заряженной частицей в момент ее соударения, будет равна энергии, приобретаемой атомом $E = \mu \bar{W} \sin^2(\chi/2)$, где $\mu = 4m_1m_2/(m_1 + m_2)^2$ – приведенная масса; \bar{W} – средняя энергия налетающей частицы перед взаимодействием; χ – угол рассеивания (между конечным направлением движения частицы и начальным).

Для рассматриваемого случая разлета ионов однокомпонентной титановой плазмы угол рассеивания χ будет изменяться в пределах от 0 до π по нормали к направлению вектора скорости иона, так как кинетическая энергия направленного движения иона на порядок превышает кинетическую энергию теплового движения молекулы газа [4, 7].

Результаты численного моделирования позволяют получить осредненные параметры потока на поверхности конденсации (рисунок 2), которые учитывают стохастический характер процессов, протекающих в объеме вакуумной камеры, а также оценить потери энергии ионов при транспортировке в объеме вакуумной камеры в зависимости от расстояния, пройденного ионом от катода до рассматриваемого сечения плазменного потока (рисунок 3). Анализ показывает, что основное количество ионов, достигших подложки, обладают энергией в диапазоне 57–75 % от их первоначальной энергии, что говорит о значительном вкладе процессов упругих столкновений в потери энергии ионами потока. В данной области среднее значение энергии иона составляет 65,4 % от его первоначальной энергии. Только около 1 % ионов, достигших подложки, сохраняют свою первоначальную энергию.



1 – расчет по теоретическим методикам; 2 – моделирование методом пробной частицы

Рисунок 2 – Распределение плотности потока по поверхности изделия (а) и схема для модели катода в форме диска (б)

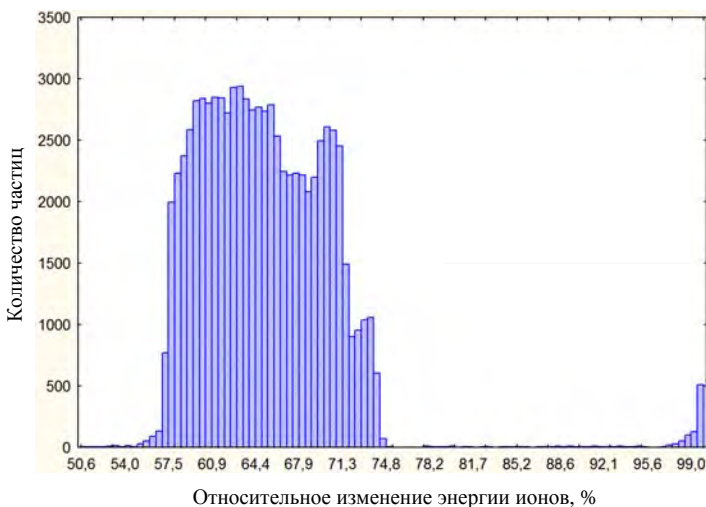


Рисунок 3 – Распределение значений энергии ионов, достигших изделия (расстояние катод-изделие – 500 мм)

Следовательно, наличие технологического газа в объеме вакуумной камеры оказывает влияние на величину энергии конденсирующихся ионов. Сравнение распределений плотности ионного тока по поверхности изделия, рассчитанной при помощи теоретических методов [8] с моделированием методом пробной частицы (рисунок 2, кривая 1) для аналогичных технологических конфигураций (диаметр катода – 80 мм, диаметр изделия – 240 мм, расстояние катод-изделие – 300 мм), позволяет сделать вывод об адекватности данной модели.

Заключение

1. Показано, что в пределах технологического объема вакуумной камеры траектория ионов может быть принята соответствующей прямой линии. На основании анализа литературных источников заданы состав и параметры плазменного потока электродуговых испарительных устройств.

2. Разработан численный алгоритм и составлена программа расчета движения заряженных частиц плазменного потока на основе метода пробной частицы электродугового испарителя с учетом пар-

ных упругих взаимодействий с атомами технологического газа, что позволяет определить изменение плотности потока у поверхности конденсации с учетом геометрических размеров, как изделия, так и испарителя. Сопоставление методов теоретического расчета потока с результатами численного моделирования показало адекватность предложенной модели.

3. Анализ потерь энергии ионов на упругие столкновения показывает, что основное количество ионов, достигших подложки, имеют энергии в диапазоне 57–75 % от их первоначальной энергии. Это говорит о значительном вкладе процессов упругих столкновений в потери энергии ионами потока. Только около 1 % ионов, достигших подложки сохраняют свою первоначальную энергию. Следовательно, наличие технологического газа в объеме вакуумной камеры оказывает влияние на величину энергии конденсирующихся ионов.

Литература

1. **Иванов, И.А.** Применение метода пробной частицы к моделированию процессов нанесения вакуумных оптических покрытий / И.А. Иванов, И.В. Мисник // Технологии обработки оптических элементов и нанесения вакуумных покрытий : сб. тез. докладов науч.-практ. конф., Минск, 26, 27 сентября 2013. – Красногорск: Академия «Контенант», 2013. – С. 17–18.

2. **Хороших, В.М.** II. Капельная фаза эрозии катода стационарной вакуумной дуги / В.М. Хороших // ФП ФИП PSE, 2004. – Т. 2, № 4. – Vol. 2, No. 4. – С. 200–213.

3. **Хороших, В.М.** Стационарная вакуумная дуга в технологических системах для обработки поверхностей / В.М. Хороших // ФП ФИП PSE, 2003. – Т. 1, № 1. – Vol. 1, No. 1. – С. 19–26.

4. **Хороших, В.М.** Плазма вакуумной дуги в присутствии газов разрядном промежутке / В.М. Хороших // ФП ФИП PSE, 2005. Т. 3, № 1–2. Vol. 3, No.1–2. – С. 82–96.

5. **Хороших, В.М.** О структуре плазменных струй, генерируемых катодным пятном вакуумной дуги / В.М. Хороших, И.И. Аксенов, И.И. Коновалов // ЖТФ. – 1988. – Т. 58, Вып. 6. – С. 1220– 1221.

6. **Иванов, И.А.** Анализ математических подходов к описанию движения сильно разряженных газов / И.А. Иванов // Машино-

строение и техносфера XXI века : материалы Междунар. науч.-техн. конф., Севастополь, 2009. – ДонНТУ, 2009. – Т. 1. – С. 276–279.

7. Плазменно-вакуумные покрытия: Монография / Ж.А. Мрочек [и др.]. – Минск: УП «Технопринт», 2004. – 369 с.

8. Дороднов, 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. МГТУ им. Н.Э. Баумана, 1999. – 35 с.

УДК 621.78

В.Г. ДАШКЕВИЧ, канд. техн. наук,
В.Г. ЩЕРБАКОВ,
А.А. БАКИНОВСКИЙ (БНТУ)

СРАВНИТЕЛЬНАЯ ОЦЕНКА ИСКРОБЕЗОПАСНЫХ ДИФфуЗИОННЫХ ПОКРЫТИЙ И НАПЛАВОК

На предприятиях химической, нефтегазовой, горнодобывающей промышленности применяют множество легковоспламеняющихся газов и смесей. Образование фрикционных искр на подобных производствах недопустимо. Искры, образующиеся при ударе, например, стального стержня, охлаждаясь от 1630 °С до 1430 °С, отдают в окружающую среду $38 \cdot 10^{-3}$ Дж, тогда как минимальная энергия поджигания при температурах 20–25 °С бензола и метана почти в 10 раз меньше [1]. Температура искр, возникающих при трении, также достаточно высокая (1640–1660 °С при трении стали о сталь) [2]. Поэтому все детали механизмов, при работе которых возможно искрение, а так же весь инструмент, при помощи которого проводятся ремонтные работы в помещениях с наличием легковоспламеняющихся газов, должны быть изготовлены из искробезопасных неискрящих материалов. На данный момент основным материалом для изготовления искробезопасного инструмента является бериллиевая бронза типа БрБ2 или БрБ2,5 [3]. На рисунке 1 представлена классификация решений по обеспечению фрикционной искробезопасности инструмента.