

ЛИТЕРАТУРА

1. Волосова, М.А. Технологические принципы осаждения износостойких нанопокровтий для применения в инструментальном производстве / М.А. Волосова, С.Н. Григорьев // Упрочняющие технологии и покрытия. – 2010. – № 6. – С. 37-42.

2. Мушегян, В.О. Технология нанесения износостойких покрытий нитрида хрома на чеканочные инструменты с помощью магнетронного распыления / В.О. Мушегян // Научные труды Донецкого национального технического университета. – 2010. – №. 12. – С. 260-268.

3. Пилипцов, Д.Г. Морфология композиционных покрытий на основе углерода, подвергнутых обработке ионами азота / Д.Г. Пилипцов, А.С. Руденков, Р.В. Бекаревич // Проблемы физики, математики и техники. – 2010. – №3. – С. 31.

УДК 621.793

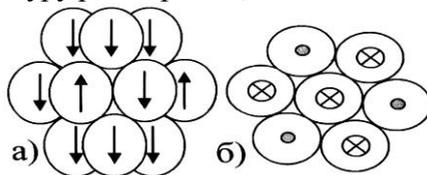
Комаровская В.М., Гречихин Л.И., Боровок О.А.
**РАСЧЕТ ЭНЕРГИИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЧАСТИЦ
ВАКУУМНО-ПЛАЗМЕННОГО ПОКРЫТИЯ
С ПОВЕРХНОСТЬЮ ИЗДЕЛИЙ ИЗ СТЕКЛА**

БНТУ, Минск

В молекуле SiO_2 взаимодействие атома кислорода О с радикалом SiO определяется ковалентной и ионной связями [1]. Средний ковалентный радиус молекулы SiO_2 равен $\sim 1,49 \text{ \AA}$. Рассчитанная на основании этих данных энергия ковалентной связи составила 0,743 эВ. Доля ионной связи, определенная по методу Коулсона [124], равна 71 %. Следовательно, энергия ионной связи имеет величину 4,898 эВ. Результирующая энергия разрыва связи O–SiO равна 5,64 эВ, а экспериментальная величина – 5,66 эВ [2].

Угол между связями кислорода в молекуле SiO_2 изменяется от 130° до 160° с наиболее вероятным значением 144° [3].

Кремнеземное стекло (кварцевый песок) пребывает в виде β -модификации (см. рисунок 1), которая представляет собой гексагональную структуру размером $4,913\text{--}5,405 \text{ \AA}$ [4].



а) вертикальное направление; б) горизонтальное направление

Рисунок 1 – Структура β -модификации кремнеземного стекла

Центральная молекула взаимодействует с шестью молекулами в горизонтальном и в вертикальном направлениях на удалениях соответственно $4,913 \text{ \AA}$ и $3,917 \text{ \AA}$. Для наиболее вероятного угла между связями атомов кислорода – 144° результирующая энергия связи частиц в вертикальном направлении (см. рисунок 1 а) составит $E_{\text{рез1}} = 0,006 + 0,384 = 0,39 \text{ эВ}$, а в горизонтальном направлении (см. рисунок 1 б) $E_{\text{рез2}} = 0,001 + 0,205 = 0,206 \text{ эВ}$. Результирующая энергия связи частиц в кластере, то есть энергия образования кластера равна $3,576 \text{ эВ}$ [1].

Молекулярные кластеры представляют собой макромолекулы, ковалентная и ионная связи между которыми пренебрежимо малы вследствие их больших размеров. Поэтому для большинства веществ, в том числе и для кремнезема, связь между кластерами определяется в основном диполь-дипольным взаимодействием.

Кластерная решеточная структура кварцевого стекла, построенная на основе минимума потенциальной энергии взаимодействия, изображена на рисунке 2 [1].

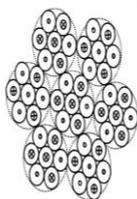


Рисунок 2 – Кластерная решеточная структура кварцевого стекла

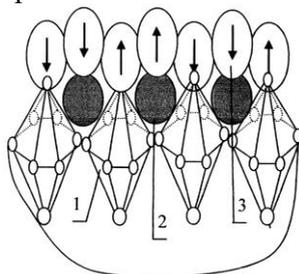
Для β -модификации (рисунок 2) энергия связи бинарного взаимодействия в горизонтальном направлении составляет 0,355 эВ, а в вертикальном направлении – 0,879 эВ [1]. Межкластерные пустоты являются столбообразными и представляют собой чередующиеся ромбоэдрические пирамиды размером у основания 7,08 Å с усеченными вершинами до размера 4,26 Å. Внешняя поверхность состоит из чередующихся гексагональных пирамид со знакопеременными электрическими зарядами дипольных электрических моментов [1].

Если заполнить столбообразные пустоты другими атомами, молекулами или кластерами, то кремнеземное стекло резко улучшит свои эксплуатационные и качественные характеристики. Вследствие этого может быть рассмотрена возможность заполнения столбообразных пустот посредством нанесения вакуумно-плазменных покрытий.

В процессе формирования вакуумно-плазменного покрытия на стекле вначале происходит заполнение межкластерных пустот, а затем на поверхности, вследствие конденсации, происходит формирование сплошной пленки из атомов титана. Последующий напуск в вакуумную камеру реакционного газа (азота) приводит к образованию молекул нитрида титана. Технология вакуумно-плазменного осаждения покрытий позволяет преобразовать моноатомную пленку титана в моноатомную пленку нитрида титана. В результате, можно обеспечить заполнение межкластерных пустот на поверхности атомами титана, а затем нанести моноатомную пленку титана

и преобразовать ее в моноатомную пленку нитрида титана. Структура такого модифицированного поверхностного слоя изображена на рисунке 3.

Титан, заполняя углубления между пирамидами, в β -модификации одновременно взаимодействует с тремя кластерами SiO_2 . Ковалентная связь $9 \cdot 10^{-4}$ эВ. Интеграл перекрытия равен $1,3 \cdot 10^{-5}$. Используя метод Коулсона [2] получаем, что доля ионной связи равна 82,5 %, а энергия ионной связи имеет величину 1,94 эВ. Результирующая энергия связи атомов титана с окружающими кластерами в β -модификации SiO_2 равна 5,823 эВ. Таким образом, атомы титана, находящиеся в межкластерных углублениях, настолько прочно связаны с основой, что величина этой связи превосходит связь молекул SiO_2 внутри кластерного образования.



1 – кластеры SiO_2 ; 2 – атомы титана; 3 – молекулы TiN

Рисунок 3 – Структура кремнеземного стекла β -модификации после осаждения TiN покрытия вакуумно-плазменным методом

Молекулы TiN с атомами титана связаны ковалентной связью, имеющей величину энергии 0,129 эВ и ионной связью, энергия которой равна 3,163 эВ [1]. Результирующая энергия связи составляет 3,292 эВ. Молекула TiN с кластером β -модификации SiO_2 связана только диполь-дипольным взаимодействием, энергия которого равна 0,326 эВ [1]. Латеральное взаимодействие молекул TiN для β -модификации в мономолекулярном слое равно 0,143 эВ [1].

Энергия связи между молекулами TiN в вертикальном направлении (рисунок 3) составляет 0,978 эВ. Таким образом, в направлении от поверхности покрытия к основе соблюдается принцип положительного градиента, что обеспечивает формирование износостойких покрытий.

ЛИТЕРАТУРА

1. Мрочек, Ж.А. Формирование наноструктурных металл-силикатных материалов вакуумно-плазменным методом / Ж.А. Мрочек [и др.] // Вестник Полоцкого государственного университета, Серия С, Полоцк. – 2006. – №4. – С. 2-6.
2. Коулсон, Ч. Валентность / Ч. Коулсон. – М.: Мир, 1965. – 426 с.
3. Радциг, А.А. Справочник по атомной и молекулярной физике / А.А. Радциг, Б.М. Смирнов. – М.: Атомиздат, 1980. – 240 с.
4. Химическая энциклопедия: в 5 т. / редкол.: И.Л. Кнунянц [и др.]. – М.: Большая Российская энциклопедия, 1998. – 623 с.

УДК 621.793

Комаровская В.М., Терещук О.И., Белоцкий А.П., Гладкий В.Ю.

КОНСТРУКЦИИ ЗАЩИТНОГО УСТРОЙСТВА ОТ ЗАПЫЛЕНИЯ СМОТРОВЫХ ОКОН ВАКУУМНЫХ СИСТЕМ

БНТУ, Минск

На рисунке изображена конструкция защитного лентопотяжного механизма.

На двери вакуумной камеры (1) располагается съемное смотровое окно (2), на котором болтом закреплен кольцевой кронштейн (4). На кронштейне с помощью планки закреплен диффузионный датчик (3). Шаговый электродвигатель (6) расположен на приваренном к двери кронштейне (5). Через