

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ САМООРГАНИЗАЦИИ И НАНОСТРУКТУИРОВАНИЯ В МЕТАЛЛАХ И СПЛАВАХ

¹Мрочек Ж.А., ²Терешко И.В., ²Логвин В.А., ²Редько В.П., ²Сотская Л.И.

¹Белорусский национальный технический университет, Минск

²Белорусско-Российский университет, Могилев

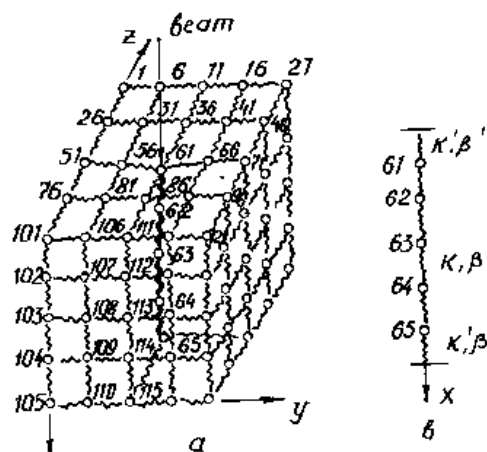
Создание новых упрочняющих технологий поверхностей изделий на основе целенаправленного управления свойствами материалов является важнейшей научной задачей. Наилучшие результаты увеличения долговечности металлов и сплавов получены путем использования ионно-плазменных процессов, в частности, ионно-плазменного осаждения покрытий, ионной имплантацией, а также путем использования мощных высокоэнергетических ионных пучков наносекундной длительности.

Новым направлением в разработке способов упрочнения материалов является создание неравновесных состояний в материалах при обработке их излучением плазмы тлеющего разряда в вакууме [1...5]. Особое значение приобретает знание нелинейных характеристик облучаемых мишеней, в которых можно даже путем слабого воздействия вызвать внутренние процессы усложнения систем с образованием новых метастабильных долгоживущих структур. Способность открытых систем создавать автономные временные и пространственно неоднородные структуры при наличии внешнего потока энергии рассматривается как самоорганизация систем. Следует отметить, что процессы самоорганизации относятся к наиболее ярким явлениям нелинейной физики. Преимущества обработки материалов пучками заряженных частиц перед другими способами очевидны. В плазме тлеющего разряда эти возможности еще дополняются отсутствием необходимости формирования концентрированных ионных пучков, так как мишени подвергаются воздействию «ионного дождя» с широким спектром качества ионов и их энергий. С точки зрения теории самоорганизации – это процесс взаимодействия ионов и общей упорядоченности кристаллических решеток облучаемых мишеней.

В этом случае главной задачей данной работы является исследование основных самоорганизационных процессов в металлах и сплавах, подвергнутых низкоэнергетическому ионному воздействию, с целью разработки новых технологий их упрочнения или пластификации. Эти технологии базируются на знаниях нелинейных параметров, генетически заложенных в потенциальную энергию взаимодействия структурных элементов конкретных кристаллических решеток, и определяющих структуру решеток после воздействия на них низкоэнергетических ионов. Энергия ионов при этом не должна превышать пороговую, требуемую для активного образования точечных дефектов. Основная цель – установить зависимость физико-механических параметров материалов при воздействии плазмы тлеющего разряда от коэффициентов нелинейностей в системе связанных атомных осцилляторов кристаллических решеток различных металлов и сплавов.

В качестве объекта исследований были приняты одномерные нелинейные атомные цепочки, как элементы, выделенные из трехмерных атомных решеток (рис. 1). Внешнее воздействие представлялось в виде единичного ионного удара, а также случайного «ионного дождя», имеющего набор ионов одного сорта, но падающих на элементы цепочек под различными углами и обладающих различной энергией. Интервал величины воздействующих энергий соответствовал классу низкоэнергетических, переданная атомам мишени энергия была меньше пороговой, то есть необходимой для образования точечных дефектов, но достаточной для возбуждения нелинейных колебаний в ионной подсистеме кристаллической решетки.

В качестве потенциала атомного взаимодействия в одномерных кристаллических решетках был принят потенциал Морзе



а – трехмерный вариант,

б – одномерная нелинейная цепочка

Рисунок 1 – Схема взаимодействия ионного пучка с кристаллической решеткой

$$U(r) = J\{\exp[-2\alpha(r-r_0)] - 2\exp[-\alpha(r-r_0)]\}, \quad (1)$$

где J , α – соответственно параметры энергии диссоциации пары атомов и степень ангармонизма потенциала, $\Delta r = (r - r_0)$ – смещение атомов из положения равновесия.

Представив потенциал в виде ряда Тейлора, имеем:

$$F = -\frac{dU(r)}{dr} = -K\Delta r + A\Delta r^2 - B\Delta r^3 + C\Delta r^4; \quad (2)$$

$$K = 2\alpha^2 J; A = 3\alpha^3 J; B = 2,3\alpha^4 J; C = 1,25\alpha^5 J, \quad (3)$$

где K , A , B , C – соответственно коэффициенты упругости, квадратичной, кубической нелинейности и нелинейности четвертого порядка.

Коэффициенты вычислялись с использованием параметров потенциала Морзе для α -Fe. Влияние поверхности учитывалось введением приграничных коэффициентов K' , A' , B' , C' , отличных от объемных коэффициентов K , A , B , C . Анализировали потенциалы Борна-Майера, Тода, Джонсона, Линдхарда, применив ту же схему. Показано, что коэффициенты нелинейности варьируются с изменением потенциала. Однако для строго нелинейной среды такой, как, реальные кристаллы, многоямный потенциал является наиболее применимым (рис. 2).



1, 2, 3 – положение «ям» минимумов потенциальной энергии

Рисунок 2. – Зависимость потенциальной энергии взаимодействия атомов от расстояний между центрами атомов.

Для цепочки из N связанных атомных осцилляторов запишем систему уравнений:

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 x_1}{dt^2} &= -K' x_1 + Ax_1^2 - Bx_1^3 + Cx_1^4 + K(x_2 - x_1) - \\ &- A(x_2 - x_1)^2 + B(x_2 - x_1)^3 - C(x_2 - x_1)^4 - \beta' \frac{dx_1}{dt}; \\ m \frac{d^2 x_i}{dt^2} &= -K'(x_i - x_{i-1}) + A(x_i - x_{i-1})^2 - B(x_i - x_{i-1})^3 + C(x_i - x_{i-1})^4 + \\ &+ K(x_{i+1} - x_i) - A(x_{i+1} - x_i)^2 + B(x_{i+1} - x_i)^3 - C(x_{i+1} - x_i)^4 - \beta \frac{dx_i}{dt}; \\ m \frac{d^2 x_n}{dt^2} &= -K(x_n - x_{n-1}) + A(x_n - x_{n-1})^2 - B(x_n - x_{n-1})^3 + \\ &+ C(x_n - x_{n-1})^4 - K' x_n + Ax_n^2 - Bx_n^3 + Cx_n^4 - \beta \frac{dx_n}{dt}, \end{aligned} \quad (4)$$

где x_1, x_2, \dots, x_n – смещения атомов из положения равновесия; β' , β – коэффициенты затухания соответственно в приграничной и внутренней областях кристалла.

Система уравнений (4) решалась методом Рунге–Кутты при вариации коэффициентов нелинейности и энергии падающих на кристалл ионов.

Модель для вычисления атомного смещения после прямого ионного удара в решетках различной размерности была развита на базе уравнений классической динамики. Изучалась зависимость смещения каждого атома от времени, прошедшего после прекращения внешнего воздействия.

На основе результатов вычислений строились графики для наблюдений процесса релаксации каждого атома после начального воздействия и для наблюдения соответствующей локализации ато-

мов всей решетки, вытянутой в цепочку, для заданного времени. Для одномерной модели x – это продольное смещение атомов в атомной цепочке, но на графиках это представлено для наглядности как поперечное смещение (для наглядности).

В качестве объекта исследования были выбраны материалы: α -Fe, быстрорежущая сталь Р6М5, электролитический никель, шарикоподшипниковые стали типа ШХ-15 и металлокерамические твердые сплавы Т15К6. Твердые сплавы имеют резко гетерогенную структуру и обладают сложным характером химических связей с преимущественно ковалентной и ионной составляющей. Вольфрам растворяется в карбидах титана, формируя сложные карбиды (Ti, W)C во время спекания. Исходная твердость и хрупкость металлокерамического соединения зависит от процентного содержания в сплаве этих сложных карбидов.

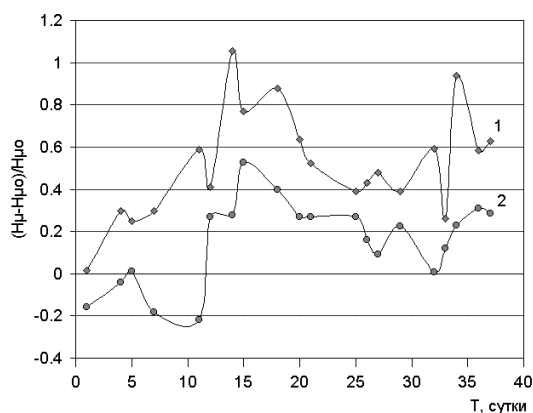
Образцы подвергались обработке излучением плазмы тлеющего разряда с варьированием времени обработки. При этом образцы облучались ионами воздуха (азота, кислорода, водорода и др.) с энергией в пределах 1...2,5 кэВ. Средняя интегральная температура образцов во время облучения не превышала 343 К. Образцы, при облучении, помещались на катоде. Определялась зависимость микротвердости сплавов от времени, прошедшего после прекращения облучения (измерения проводились по суткам в течение двух месяцев).

Тонкая структура всех материалов была изучена послойно, используя электронно-микроскопический метод. Для этого облученные образцы разрезались на тонкие пластины (0,2 мм) на электроискровой машине на разных расстояниях от поверхности облучения. Тонкие фольги исследуемых образцов были подготовлены электролитическим методом, используя стандартную технику, что также исключало создание каких либо термических или механических напряжений во время процесса подготовки образцов к исследованию. Дислокационная структура материалов до и после облучения на разных глубинах от облученной поверхности исследовалась с помощью трансмиссионных электронных микроскопов EM-125 и TESLA-540.

На рис. 3 представлена зависимость микротвердости образцов из быстрорежущей стали Р6М5 от времени, прошедшего после прекращения облучения. На оси ординат представлено относительное изменение микротвердости. Облучение проводилось при напряжении $U = 2,5$ кВ, время обработки составляло 90 минут. Зависимость 1 – соответствует измерениям на облученной поверхности, зависимость 2 – представляет результаты измерений на обратной стороне образцов, не подвергаемой непосредственно воздействию низкоэнергетическими ионами. Высота образцов была 10 мм и обратная сторона образцов плотно прилегала к поверхности катода. При этом можно отметить следующие особенности:

- в течение длительного времени после прекращения облучения наблюдаются сильные осцилляции значений микротвердости. Эти осцилляции ярко выражены как на облученной, так и обратной стороне образцов;

- величина микротвердости на обратной стороне образцов мало отличаются от облученной поверхности (временами значительно превосходят их), что подтверждает наличие эффекта дальнего действия. При этом под “эффектом дальнего действия” понимается значительное превышение глубины структурированного слоя в облученных материалах над величиной проективного пробега ионов в мишенях;



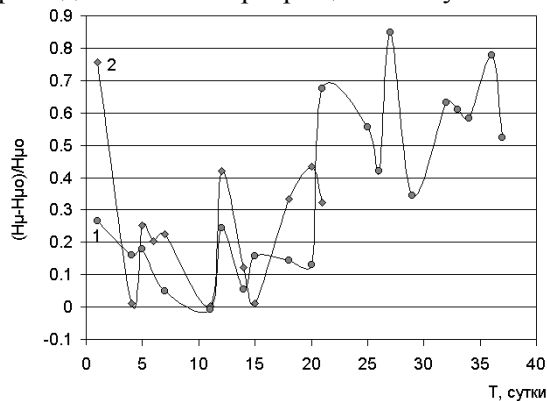
1 – облученная поверхность образца; 2 – обратная сторона образца

H_c – микротвердость образцов после облучения, H_{c0} – исходная микротвердость необлученных образцов

Рисунок 3 – Зависимость относительного изменения микротвердости образцов из быстрорежущей стали Р6М5 от времени, прошедшего после прекращения облучения

- имеется ярко выраженная тенденция к возрастанию микротвердости образцов с увеличением времени, прошедшего после их облучения в плазме тлеющего разряда. Приблизительно через месяц наблюдается возрастание микротвердости на 80-90% относительно исходного уровня необлученных образцов. Этот факт свидетельствует о долгоживущем, сильно неравновесном состоянии образцов после низкоэнергетического ионного облучения.

Наибольшая величина упрочнения получена при облучении металлокерамических твердых сплавов T15K6. На рис. 4 представлена зависимость относительного изменения микротвердости сплавов T15K6 от времени, прошедшего после прекращения облучения.



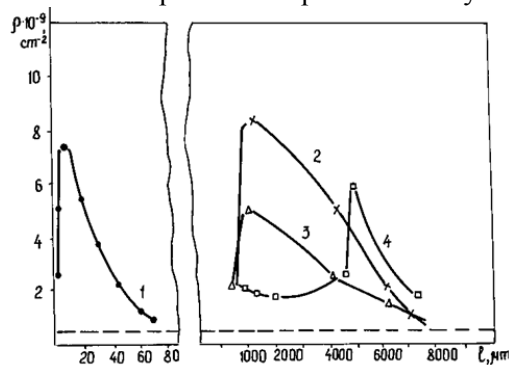
1 – облученная поверхность образца; 2 – обратная сторона образца

Рисунок 4. – Зависимость относительного изменения микротвердости сплава T15K6 от времени, прошедшего после прекращения облучения

Облучение проводилось в течение 15 минут при напряжении $U = 1$ кВ (зависимость – 1) и напряжении $U = 2,5$ кВ (зависимость – 2). Наибольшее упрочнение поверхности получено при $U = 1$ кВ, то есть понижение энергии ионов, усиливает эффект дальнего действия.

Наиболее значимый результат электронно-микроскопического исследования состоит в том, что низкоэнергетическое облучение металлических образцов приводит к повышению плотности дислокаций. Фактически, это почти объемная модификация. Подобный эффект, но в значительно меньших масштабах (глубина структурированного слоя не превышала 100 мкм), наблюдался при имплантации ионов Hf и Ag в α -Fe [6, 7]. Энергия ионов при этом соответствовала 40...70 кэВ, что уже приводит к ионной имплантации. Достаточно большая глубина структурированного слоя в этой работе связывается с напряжениями, полученными при ионной имплантации внедренных ионов. Сверхглубокое проникновение азота и существенное изменение микроструктуры инструментальных сталей на больших глубинах при сравнительно небольших энергиях ионов в процессе плазменно-иммерсионной ионной имплантации наблюдалось в работе [8]. Исследование закономерностей распределения дефектов за пределами зоны торможения ионов при ионном легировании кремния и антимонида индия, а также при ионно-лучевой обработке полупроводникового твердого раствора $Cd_xHg_{1-x}Te$ наблюдалось в [9].

На рис. 5 представлены величины измерений средней скалярной плотности дислокаций с расстоянием от поверхности облучения после различных режимов облучения.



1 – α -Fe, имплантированное ионами гафния с энергией 100кэВ; 2 – α -Fe, энергия ионов 0,8кэВ, время облучения 90мин; 3 – α -Fe, энергия ионов 2кэВ, время облучения 90мин; 4 – α -Fe, энергия ионов 0,8кэВ, время облучения 60мин. Штрихованная линия соответствует начальному состоянию.

Рисунок 5. – Зависимость скалярной плотности дислокаций от расстояния до облученной поверхности.

Зависимости 2 и 4 получены при напряжении в $U = 0,8$ кВ, зависимость 3 – при напряжении 2 кВ. Зависимость 1 представлена для сравнения «дальнодействующего эффекта», наблюдаемого Ю. Шаркеевым для α -Fe, облученного ионами Hf с энергией 100 кэВ. Видно, что «эффект дальнодействия» становится более значительным и наблюдается при существенно больших расстояниях от облученной поверхности, если энергия ионов понижается почти на два порядка. Такой ярко выраженный эффект повышения плотности дислокаций наблюдается только в хорошо отожженных образцах с небольшой исходной плотностью дислокаций в α -Fe и Ni₃Fe. В материалах с исходно повышенной плотностью дислокаций (не отожженная медь и быстрорежущая сталь Р6М5) наиболее значимыми будут происходящие перестройки имеющейся дислокационной структуры, заключающиеся в интенсивном образовании дислокационных фрагментов или измельчении фрагментов с соответствующим увеличением их разориентировок. Причем эти перестройки наблюдаются также на большой глубине от поверхности облучения.

Установлено, что уменьшение энергии облучающих ионов в интервале от 2,5 кэВ до 1 кэВ ведет к увеличению глубины структурированного слоя [10]. Во время облучения образцы не испытывали ни термического, ни механического воздействия, однако, даже на большой глубине от облученной поверхности формировались дислокационные структуры (дислокационные ячейки, сети ячеек, полосовые дислокационные структуры), которые соответствовали глубоко деформированному состоянию материала. При этом макроскопические размеры облученных материалов оставались неизменными.

Используя метод электронной микроскопии установлено, что после низкоэнергетического ионного облучения в приповерхностных слоях 0...1 мкм облученного α -Fe, формируется сложная многослойная нанометрическая структура типа «сэндвич» (рис. 6). Наноразмерностью обладают при этом как формирующиеся в процессе облучения сверхтонкие слои, так и локализованные нанокристаллы железа.

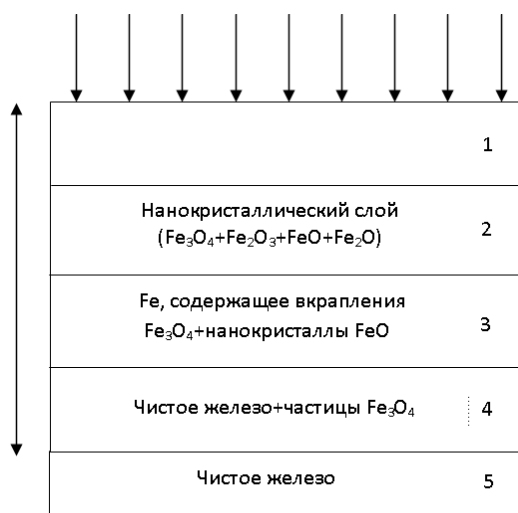
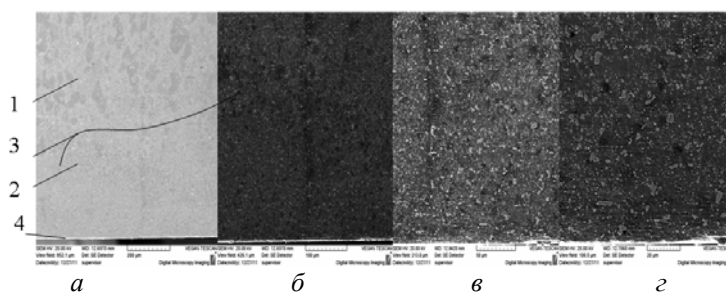


Рисунок 6. – Схема структуры типа «сэндвич» в приповерхностных слоях α -Fe после низкоэнергетического ионного облучения в плазме тлеющего разряда

Первый слой (толщиной 0,15 мкм) имеет двухфазную аморфную структуру, т.е. представляет собой смесь аморфного железа и оксида Fe₃O₄. (заметим, что чистое железо вообще аморфизуется с большим трудом). Следующий слой (слой 2, толщиной 0,20 мкм) имеет нанокристаллическую структуру, т.е. содержит нанокристаллы железа с размером 0,1...0,15 мкм. В этом слое присутствуют оксиды Fe₂O₃, FeO, Fe₃O₄. Слой 3 (толщина 0,15 мкм) состоит из кристаллов железа с малой плотностью дислокаций (соответствует плотности дислокаций хорошо отожженного материала, приблизительно равной 10⁸ см⁻²). Внутри слоя 3 – оксиды железа и нанокристаллическая фаза FeO. Слой 4 (толщина 0,5 мкм) включает микрокристаллы чистого железа с дислокационной плотностью 3,2 × 10⁹ см⁻². В этом слое присутствуют круглые частицы Fe₃O₄, диаметр которых 0,12...0,15 мкм. Слой 5 распространяется в объем основного материала, представленного чистым железом. Более глубокие слои материала – это чистое α -Fe с соответствующей дефектной структурой. Следует заметить, что исследование дефектной структуры поверхностного слоя после низкоэнергетического ионного воздействия следует рассмотреть более детально, так как аморфизация в слое и образование наноструктур требует более пристального внимания. Для анализа результатов воздействия излучения плазмы тлеющего

разряда на образцы из быстрорежущей стали P12 проводилась сканирующая микроскопия. Результаты сканирования изменения структуры по глубине с различным увеличением образца из быстрорежущей стали P12 после обработки излучением плазмы тлеющего разряда представлены на рис. 7.



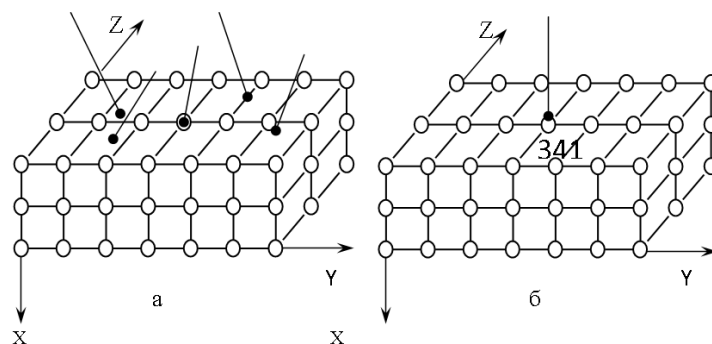
1 – основной материал образца; 2 – поверхностный слой с измененной структурой; 3 – условная граница раздела основного материала и поверхностного слоя с измененной структурой; 4 – облучаемая поверхность
 а – 250 кратное увеличение; б – 500 кратное увеличение; в – 1000 кратное увеличение;
 г – 2500 кратное увеличение

Рисунок 7. – Изменение структуры по глубине образца из быстрорежущей стали P12 после обработки

Неравномерное изменение структуры облучаемого образца по глубине рис.7, а наглядно демонстрирует адекватность принятой схемы взаимодействия ионного пучка с кристаллической решеткой рис.1 и гипотезы, базирующаяся на возбуждении нелинейных колебаний в кристаллических решетках.

Полученные результаты исследований не могут быть объяснены, исходя из традиционных представлений физики радиационных дефектов в твердых телах. Поэтому с помощью программы TRIM рассчитали пробег ионов кислорода, азота и водорода, а также энергетические потери ионов при электронном и ядерном торможении как в однокомпонентном материале α -Fe, так и в многокомпонентных образцах двухкарбидного твердого сплава T15K6. Показано, что ионная имплантация таких низкоэнергетических ионов не может привести к столь далекому изменению структуры материалов. Следовательно, потребовались новые представления о процессах, развиваемых в кристаллических решетках после воздействия на них низкоэнергетическими ионами.

Такие представления [11] основывались на учете нелинейных эффектов нарушения трансляционной симметрии кристаллических решеток во время бомбардировки поверхности твердых тел заряженными частицами. Предложена гипотеза, базирующаяся на возбуждении нелинейных колебаний в кристаллических решетках, которые приводят к развитию процессов самоорганизации в ионной подсистеме кристаллических структур. Проведено компьютерное моделирование процесса самоорганизации в трехмерных кристаллических решетках после внешнего низкоэнергетического воздействия, представленного в виде беспорядочного “ионного дождя”. Атомы на поверхности мишени получают случайные по величине и направлению импульсы от бомбардирующих поверхность ионов. Энергия, переданная атомам мишени, меньше пороговой, необходимой для образования точечных дефектов, но вполне достаточна для возбуждения нелинейных колебаний в ионной подсистеме решетки. На рис. 8 представлена схема локального возбуждения участка кристаллической решетки как результат взаимодействия между падающим ионным “дождем” и поверхностью образцов (атомы на поверхности кристалла получают случайный импульс на поверхности и смещаются вдоль осей X, Y, Z).



а – ионный “дождь”; б – единичный удар.

Рисунок 8. – Предполагаемая схема облучения кристаллической решетки материала

Можно предположить, что в системе связанных осцилляторов возбуждаются нелинейные колебания. Время стабилизации на два-три порядка выше, чем время обычных атомных релаксаций. В результате формируются новые метастабильные долгоживущие структурные состояния кристаллической решетки. Показано, что к моменту времени, когда нелинейные колебания прекращаются, атомы стабилизируются в новых позициях. Конечное состояние атомной решетки, облученной низкоэнергетическими ионами, это высоко фрагментированная структура. Имеется целый спектр новых стабильных коллективных состояний атомов в решетках после затухания нелинейных колебаний. Однако конкретный вид этих новых гетерогенных структур зависит от потенциала, характеризующего связи между атомными осцилляторами и величиной внешнего возбуждения. В частности, для потенциала Морзе с параметрами нелинейности, рассчитанными для α -Fe, можно предположить, что после внешнего низкоэнергетического воздействия в нелинейных решетках образуются блуждающие солитоны. В реальном кристалле аналогом солитонов являются дислокации. Возрастание плотности дислокаций вплоть до очень больших (в масштабе возможных пробегов ионов в металлах) расстояний от облученной поверхности вполне может быть связано с образованием солитонов, пробеги которых вдоль атомных цепочек в кристаллических решетках во много раз больше, чем пробеги внедренных имплантированных ионов.

Результаты аналитического эксперимента показывают, что конечное состояние атомной решетки, облученной низкоэнергетическими ионами, есть высоко фрагментированная структура, и это хорошо согласуется с результатами электронно-микроскопического исследования дислокационной структуры облученных образцов.

На рис. 9 представлена зависимость смещения случайно выбранного атома (№341 рис. 8) вдоль оси X от времени, прошедшего после прекращения внешнего воздействия. Предполагается, что атом решетки, получив исходно малое смещение от внешнего низкоэнергетического воздействия, в результате коллективных нелинейных колебаний всех атомных осцилляторов кристаллической решетки, получает конечное очень большое смещение от исходного положения равновесия в момент времени, значительно превышающий время стандартных атомных релаксаций. Время, прошедшее после прекращения облучения кристалла на три порядка превышает время нормальных атомных релаксаций, а решетка практически не стабилизирована. Анализ расчетов позволяет сделать вывод, что рассматриваемый атом уже никогда не возвращается в исходное положение и представляет собой элемент новых структур (с наноразмерностью) в исходном кристалле.

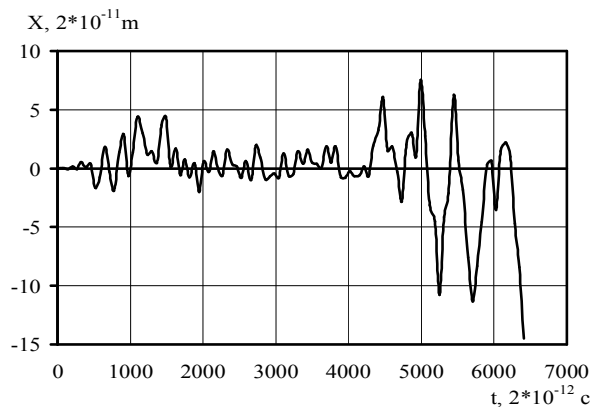


Рисунок 9. – Зависимость смещения атома (№341) вдоль оси X от времени, прошедшего после прекращения облучения

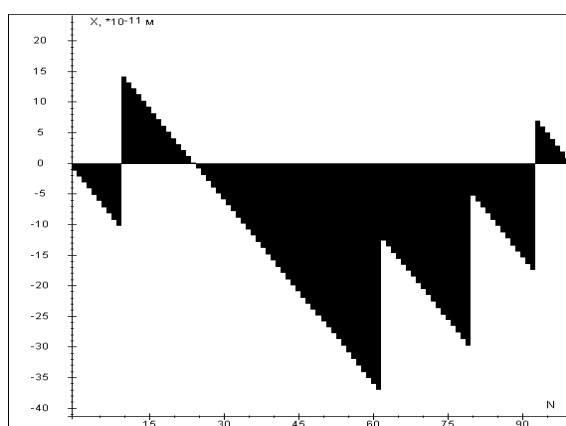
Периоды колебаний рис. 9 очень велики по сравнению с нормальными (Дебаевскими). При изменении временного масштаба (т.е. уменьшении шага по времени на несколько порядков) будут видны и "обычные" колебания. Следует заметить, что "быстрые" колебания происходят уже по отношению к позициям, смещенным относительно исходных.

Доказано, что для случая "дождя" требуется более низкая энергия для развития процессов самоорганизации, чем в случае удара единичного иона. Это достигается быстрым переходом: хаос налетающих ионов → локальный хаос в бывшей упорядоченной структуре → образование новых метастабильных долгоживущих структур в бывшей упорядоченной структуре мишени.

Очень важно, что процесс нелинейных колебаний захватывает весь объем облученных кристаллов. Фактически мы наблюдаем объемную наноструктуризацию материалов после низкоэнергетического ионного облучения.

На рис. 10 представлен результат численного эксперимента по исследованию процесса релаксации в одномерной нелинейной атомной цепочке, в случае, когда ее первый атом получает первоначальный небольшой импульс от внешнего ионного воздействия. В цепочке возбуждаются нелинейные колебания вдоль оси X , в результате которых все атомы стабилизируются в новых положениях, которые можно интерпретировать как образование новых долгоживущих метастабильных групп нанокластеров. Время стабилизации значительное и зависит от жесткости межатомных связей в решетках (на них базируются коэффициенты нелинейности) и величины энергии ионов внешнего облучения. Период решетки внутри кластеров не соответствует периоду в первоначальной цепочке, некоторые кластеры разделены областями с отрицательной плотностью атомов (например, атомы 10 и 11, 93 и 94). Но именно они приносят решеткам (облучаемым материалам) новый комплекс физических и механических свойств.

Для полной интерпретации экспериментальных данных желательно учитывать, что исходный потенциал решетки является постоянно «деформируемым», т.е. новые долгоживущие структуры уже не соответствуют «старому» потенциалу, потому и появляются новые «периоды решеток» внутри кластеров.



Ось Y – смещение атомов, ось X – номер атома в нелинейной цепочке

Рисунок 10. – Смещения первых 100 атомов возбужденной нелинейной атомной цепочки вдоль оси X в момент времени стабилизации.

Результаты расчетов зависят от размерности выбранных объектов и размеров модельного объекта. В частности, это касается величины энергии и дозы внешнего воздействия, необходимого для возбуждения в облучаемых системах нелинейных колебаний. Однако после возбуждения таких колебаний в системе и развития коллективных процессов самоорганизации в нелинейных системах, типы новых структур, образующихся после стабилизации решеток, уже мало зависят от размерности, размера объектов и даже вида потенциала. Эта зависимость будет приблизительно такая: в одномерной решетке образуется одномерный кластер, в трехмерной решетке – трехмерный кластер. Типы образующихся после низкоэнергетического облучения структур можно вполне представить на одномерной модели нелинейных цепочек, выделенных из кристаллической трехмерной решетки.

На рис.11 представлена фазовая диаграмма случайно выбранного из данной нелинейной цепочки атома №2. Его начальное положение соответствует нулевой координате и нулевой начальной скорости на фазовой плоскости.

Анализ показывает, что аттрактор представляет собой сильно смещенное от первоначального положения состояние. Это состояние достигается путем многочисленных нелинейных колебаний и иллюстрирует перенос энергии в нелинейных системах от колеблющейся моды к поступательной.

Таким образом, конечное положение всех атомов решетки, облученной низкоэнергетическими ионами, после длительного процесса релаксации, является сильно смещенным из

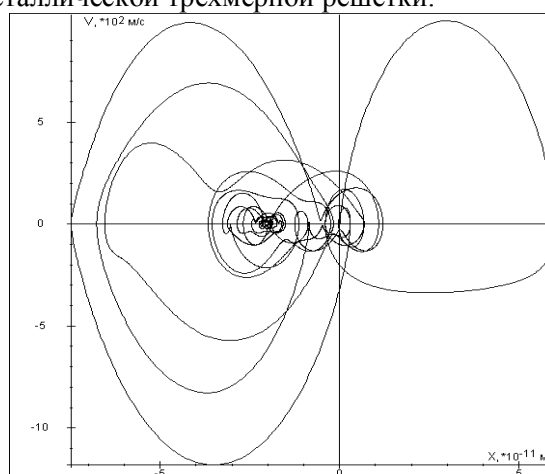


Рисунок 11. – Фазовая диаграмма для атома №2 из атомной цепочки после прекращения облучения

положения равновесия. При этом в облученных материалах происходит формирование широкого спектра новых долгоживущих метастабильностей, в частности, наноструктурных комплексов различной размерности. При низкоэнергетическом ионном облучении в плазме тлеющего разряда в образцах α -Fe возможно формирование наноструктур в виде четырехслойного приповерхностного участка (и кластеров с наноразмерностью даже на достаточно большой глубине от облученной поверхности). Формирование таких слоев и структур можно объяснить возбуждением нелинейных колебаний в ионной подсистеме облучаемых решеток и их синергетическим действием. В результате образуются высокофрагментированные структуры с наноразмерностью. Величина фрагментированных участков должна увеличиваться с расстоянием от облученной поверхности. Тогда логичными становятся переходы «аморфный слой \rightarrow нанокристаллический слой \rightarrow мелкокристаллический слой». Основные методы обработки и исследований образцов после воздействия плазмы тлеющего разряда запатентованы [12...15].

Выводы.

1 Установлено, что обработка плазмой тлеющего разряда (низкоэнергетическими ионами) приводит к изменению дислокационной плотности и типа дислокационных структур в металлах на большой глубине от облученной поверхности. Этот результат определен как эффект «дальнодействия».

2 Доказано, что низкоэнергетическое ионное воздействие на поверхность в плазме тлеющего разряда приводит к нелинейным колебаниям атомных осцилляторов, в результате формируются новые метастабильные долгоживущие структуры решеток, которые приводят к изменению физико-механических свойств облученных материалов.

3. Следует отметить, что наиболее перспективным как в научном, так и в прикладном плане являются технологии создания в кристаллических материалах многоуровневой дефектной структуры, в частности, формирование наноразмерных комплексов и кластеров в процессе воздействия потоков различных энергий на поверхность металлов и сплавов.

4 Установлено, что низкоэнергетическое ионное облучение в плазме тлеющего разряда поверхностей металлов и сплавов может быть использовано для создания технологий целенаправленного управления поведением материалов и созданием элементов элементов новых инженерных конструкций.

Литература

1. Tereshko, I.V. Self Organizing processes in metals by Low-energy ion beams / I.V. Tereshko, V.I. Khodyrev, E.A. Lipsky // Nucl. Instr. And Meth. In Physics Research NIMB. 1993. B 80/81. P. 115-117.
2. Tereshko, I.V. The formation of nanoclusters in metals by the low-energy ion irradiation. Surface and Coatings Technology / I.V. Tereshko, V.V. Abidzina, I.E. Elkin, A.M. Tereshko, V.V. Glushchenko, Semfira Stoye // V.201 (2007), 19-20, P. 8552-8556.
3. Tereshko, I.V. Nanostructural evolution of steel and titanium alloys exposed to glow discharge. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms / I. Tereshko, V. Abidzina, A. Tereshko I. Elkin. // V. 261 (2007), 1-2, P. 678-681.
4. Abidzina, V. Cell adhesion study of the titanium alloys exposed to glow discharge. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms / V. Abidzina, I. Deliloglu-Gurhan, F. Ozdal-Kurt, B.H. Sen, I. Tereshko, I Elkin, S. Budak, C. Muntele, D. Ila // V. 261 (2007) P. 624-626.
5. Abidzina, V. Fabrication of Nanoscale gold Clustrs by Low-Energy Ion Irradiation. Mat. Res. Soc. Symp. Proc. / V. Abidzina, I. Tereshko, I. Elkin, V.Red'ko, S Budak, C Muntele, D.Walker, D. Ila // 1020. P. 183-188.
6. Диденко, А.Н. Эффекты дальнодействия в ионно-имплантированных металлических материалах / А.Н. Диденко, Ю.П. Шаркеев, Э.В. Козлов, А.И. Рябчиков / РАНБ г. Томск, 2004 г., 326 с.
7. Морозов, Н.П. Глубокое проникновение радиационных дефектов из ионно-имплантированного слоя в объем полупроводников. / Н.П. Морозов, Д.И. Тетельбаум // Физика и техника полупроводников.-1983.- Т.17, вып. 3/ 31, С. 95-102.
8. Гольцев, В.П. Радиационное нарушение структуры переходных металлов при ионном облучении / В.П. Гольцев, В.М. Анищик, В.В. Углов // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение.-1983-Вып.1 (24), С. 52-53.

9. Квасов, Н.Т. Термоупругие эффекты в полупроводниках при ионно-лучевом травлении и проблема дальнего действия. / Н.Т. Квасов, К.Ю. Ярашунас, С.Ф. Спизжук, С.Ю. Шилина // Физика и Химия обработки материалов-1990-N5, С. 9-13.
10. Терешко, И.В. Эффект дальнего действия в материалах при низкоэнергетическом ионном облучении / И.В. Терешко, В.И. Ходырев и [др.] // Вестник Нижегородского университета. Серия Физика Твердого Тела. 1998, Выпуск 2. С. 131-139.
11. Терешко, И.В. Модификация материалов после низкоэнергетического ионного облучения в плазме тлеющего разряда / И.В. Терешко, А.А. Руссиян, О.В. Обидина, И.Е. Елькин, В.В. Глущенко, А.М. Терешко // БЫСТРОЗАКАЛЕННЫЕ МАТЕРИАЛЫ И ПОКРЫТИЯ, Сборник трудов 4-й Всероссийской с международным участием научно-технической конференции, Москва, 2005, С. 210-215.
12. Режущее-формаобразующий инструмент, Патент РБ № 7535. заявка u20110009 от 10.01.2010г. зарегистрировано в Гос.реестре изобр. 30.08.2011 МПК В26D 1/00. Авторы Логвин В.А., Мрочек Ж.А., Логвина Е.В., Никитин В.М., Никитин С.В. Патент. обладатель ГУВПО «Белорусско-Российский университет»,
13. Режущая часть инструмента. Патент РБ № 7492. заявка u20101056 от 21.12.2010г. зарегистрировано в Гос.реестре изобр. 30.08.2011 МПК В26D 1/00. Авторы Логвин В.А., Жолобов А.А., Логвина Е.В., Патент. обладатель ГУВПО «Белорусско-Российский университет».
14. Вакуумная установка. Патент РБ № 7491. заявка u20101055 от 21.12.2010г. зарегистрировано в Гос.реестре изобр. 30.08.2011 МПК В26D 1/00. Авторы Логвин В.А., Жолобов А.А., Логвина Е.В., Патент. обладатель ГУВПО «Белорусско-Российский университет».
15. Микроскоп инструментальный. Патент РБ № 7215. заявка u2010066 от 26.07.2010г. зарегистрировано в Гос.реестре изобр. 30.04.2011 МПК G 02B 21/00. Авторы Логвин В.А., Жолобов А.А., Волченков А.В., Логвина Е.В., Патент. обладатель ГУВПО «Белорусско-Российский университет».

Summery

The goal of this paper is to study self-organization processes that cause nanostructural evolution in nonlinear crystal media. The computer simulation was used to investigate the interaction between low-energy ions and crystal lattices. Energy transmitted to target atoms is less than the threshold needed to form point defects but sufficient for nonlinear oscillation excitation in ion subsystem of a lattice. We showed that nonlinear oscillations become excited in the chains after low-energy ion impact and as a result of them the whole atoms become stabilized in new positions, which results in the formation and development of new metastable atomic groups (nanoclusters). It is clusters that provide new complexes of physical and mechanical properties for lattices (irradiated materials). Low-energy ion irradiation may be used to develop new hardening technologies of metals and alloys on the basis of the formation of nanoelements in them.

Поступила в редакцию 25.01.2012