

Моделирование температурных полей в мишенях при совмещении импульсно-периодической высокоинтенсивной имплантации ионов и энергетическом воздействии на поверхность

А. Иванова, Д. Сивин, О. Корнева, Г. Блейхер*

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

**bai@tpu.ru*

Аннотация. Методы модификации поверхностных и приповерхностных слоев материалов и покрытий ионными пучками находят применение во многих областях науки и техники. Метод высокоинтенсивной имплантации пучками ионов высокой плотности мощности субмиллисекундной длительности предполагает значительный импульсный разогрев приповерхностного слоя, облучаемой мишени, с последующим быстрым его охлаждением за счет отвода тепла внутрь материала благодаря теплопроводности и реализацию импульсно-периодической радиационно-усиленной диффузии атомов на глубины, превышающие проективный пробег ионов. В работе методом численного моделирования исследуется динамика изменения температурных полей в мишенях при одноимпульсном и импульсно-периодическом воздействиях пучков ионов субмиллисекундной длительности с импульсной плотностью мощности до 35 кВт/см². При моделировании используются различные материалы мишени, существенно отличающиеся по своим характеристикам. Определены условия, при которых в ионно-легируемом слое значение температуры будет соответствовать условиям радиационно-стимулированной диффузии имплантируемого элемента, а температура в матричном материале не приведет к ухудшению его микроструктуры и свойств.

Ключевые слова: низкоэнергетический ион, высокоинтенсивная имплантация, температурные градиенты.

1. Введение

Импульсные ионные пучки различной мощности находят широкое применение в исследованиях по модификации поверхностных свойств материалов методами ионной имплантации, ионно-плазменного осаждения покрытий и энергетического воздействия на поверхность.

Ионная имплантация является важным инструментом для модификации поверхностей широкого круга материалов для значительного спектра применений в областях фундаментальных исследований и прикладных технологий [1–4]. Облучение высокоинтенсивными пучками ионов низкой энергии может быть использовано в качестве потенциального метода для создания глубоких ионно-легированных приповерхностных слоев по сравнению с традиционными методами имплантации. Этот метод основан на использовании ионных пучков высокой интенсивности с плотностями тока, достигающими нескольких десятков или даже сотен мА/см². Такая высокая плотность тока приводит к радиационно-усиленной диффузии имплантируемых атомов и при одновременном повышении температуры облучаемого материала. Это обеспечивает формирование протяженных ионно-легированных слоев с толщиной от нескольких единиц до десятков и даже сотен мкм [5, 6]. Метод высокоинтенсивной имплантации ионов сверхнизкой и низкой энергии имеет хорошие перспективы технологического использования применительно к формированию протяженных слоев, легированных ионами, имеющими малый радиус и обладающими высоким коэффициентом диффузии. Однако во многих практических применениях для формирования глубоких ионно-легированных слоев при высокоинтенсивной имплантации ионов требуется нагрев обрабатываемого изделия до температур, при которых наблюдается ухудшение микроструктуры. В этой связи, необходим другой подход, при котором приповерхностный слой обрабатываемого изделия будет ионно-модифицирован при облучении, а основная часть материала не подвергнется воздействию

высоких температур. Такой метод можно реализовать за счет синергии высокоинтенсивной ионной имплантации, обеспечивающей ионное легирование металлов и сплавов на глубинах, на порядки превышающие проективные пробеги ионов за счет радиационно-усиленной диффузии атомов, и импульсно-периодического энергетического воздействия на приповерхностный слой, способствующего управляемому изменению структурно-фазового состояния ионно-легированных слоев с сохранением структуры и свойств матричного материала [7]. Для реализации метода высокоинтенсивной имплантации ионов с одновременным энергетическим воздействием на приповерхностный слой предполагается использовать импульсный или импульсно-периодический пучок субмиллисекундной длительности. Каждый импульсный ионный пучок обеспечивает нагрев облучаемой поверхности до температур, способствующих радиационно-усиленной диффузии примеси. Такой импульсный нагрев приповерхностного слоя может быть осуществлен мощным пучком ионов субмиллисекундной длительности. Импульсный характер ионного пучка приводит к тому, что после быстрого нагрева приповерхностного слоя материала в течение импульса имеет место последующее быстрое охлаждение, благодаря отводу тепла внутрь облучаемого материала. Высокоскоростное охлаждение ионно-легируемого слоя обеспечивает улучшение микроструктуры поверхности образца.

Настоящая работа посвящена исследованию динамики изменения температурных полей в мишенях при одноимпульсном и импульсно-периодическом воздействии на поверхность пучков ионов с плотностью мощности до 35 кВт/см².

2. Численное моделирование эволюции температуры образцов при высокоинтенсивном ионном облучении

Расчёт температуры в металлических образцах под действием высокоинтенсивного импульсно-периодического ионного пучка выполнялся с использованием математической модели, построенной на основе уравнения теплопроводности, записанного в цилиндрических координатах с азимутальной симметрией. Расчётная область задачи показана на Рис.1. Металлический образец выполнен в виде диска радиусом R и толщиной Z_1 .

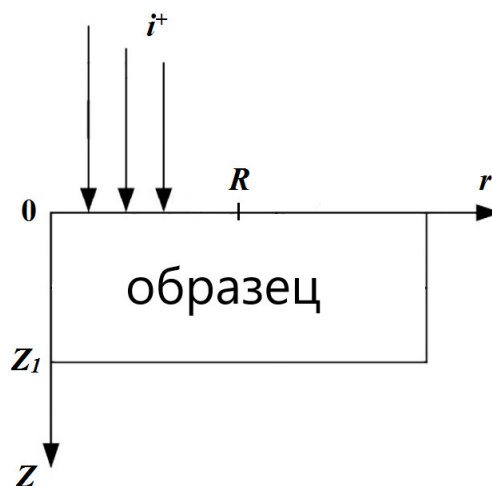


Рис.1. Расчётная область: R и Z_1 – радиус и толщина образца, соответственно.

Уравнение имеет следующий вид:

$$\frac{\partial T(z, r, t)}{\partial t} = a \left(\frac{1}{r} \frac{\partial T(z, r, t)}{\partial r} + \frac{\partial^2 T(z, r, t)}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 T(z, r, t)}{\partial z^2} \right)$$

Здесь $T(z, r, t)$ – пространственно-временная функция, описывающая распределение температуры в облучаемом образце, a – коэффициент температуропроводности облучаемого материала.

Граничные условия на облучаемой поверхности образца:

$$\lambda(z) \frac{\partial T}{\partial z} \bigg|_{\substack{z=0, \\ 0 \leq r \leq R}} = -q(r, t) + \varepsilon_p (T^4 - T_{ch}^4).$$

Здесь $q(r, t)$ – плотность мощности ионного пучка, усреднённая по периоду, R – радиус поперечного сечения пучка, T_{ch} – температура стенок вакуумной камеры, ε_p – приведённая степень черноты поверхности образца, рассчитываемая с учётом отражения теплового излучения от стенок вакуумной камеры,

$$\varepsilon_p = \frac{1}{\frac{1}{\varepsilon} + \frac{1}{\varepsilon_{ch}} - 1}$$

где ε и ε_{ch} – степень черноты поверхности образца и стенок вакуумной камеры, соответственно. В расчётах $T_{ch} = 300$ К, $\varepsilon_{ch} = 1$. На облучаемой поверхности вне зоны действия пучка и на боковой поверхности образца задан сток тепла за счёт теплового излучения, на оси ($r = 0$):

$$\lambda(z) \frac{\partial T}{\partial r} \bigg|_{r=0} = 0.$$

Расчёты выполнялись с использованием функции плотности мощности $q(r, t)$, построенной по осциллограммам плотности тока и энергии ионов, измеренным в экспериментах.

Численные расчеты выполнены для образцов из алюминия, титана и нержавеющей стали радиусом 11.29 мм и толщиной 3 мм. Энергетическое воздействие на поверхность различных материалов осуществлялось с помощью моделирования высокоинтенсивного импульсного и импульсно-периодического пучков.

На Рис.2 представлена зависимость температуры мишени из титана толщиной 3 мм от длительности импульсов ионного пучка при разной плотности мощности.

Данные рисунка показывают, что при плотности мощности ионного пучка $2 \cdot 10^8$ Вт/м² максимальная температура в приповерхностном слое мишени не превышает 974 К даже при длительностях импульсов энергетического воздействия 500 мкс. По данным экспериментальных исследований высокоинтенсивной имплантации ионов алюминия в титан при низких энергиях ионов при такой температуре не наблюдается значительной радиационно-усиленной диффузии [8]. Очевидно, что такая температура не обеспечит глубокого ионного легирования и при ионной имплантации в режиме импульсного разогрева приповерхностного слоя материала. Увеличение плотности мощности ионного пучка до $5 \cdot 10^8$ Вт/м² обеспечивает достижение уже даже температуры плавления к концу импульса длительностью 500 мкс. Таким образом, используя такой мощный ионный пучок, можно управлять максимальной температурой при энергетическом воздействии за счет выбора длительности импульса. Дальнейшее увеличение плотности мощности ионного пучка, вплоть до $1.5 \cdot 10^9$ Вт/м² приводит к тому, что уже при длительности импульса менее 100 мкс достигается расплавление поверхности.

Для метода высокоинтенсивной ионной имплантации, совмещенного с энергетическим воздействием на поверхность образца, обязателен импульсный нагрев образцов до температуры, обеспечивающей усиленную радиационно-стимулированную диффузию имплантируемых атомов. Принимая во внимание тот факт, что нагревание образцов до

температуры в несколько сотен градусов (например, для титана меньше 870 К, для алюминия – 600 К) не меняет существенно микроструктуру, можно рассматривать вариант, когда весь образец нагревается до высоких температур, при которых не меняется структура и свойства обрабатываемого материала. В этом случае для импульсного нагрева образца до требуемых температур понадобится существенно меньшая плотность мощности ионного пучка. На Рис.3 представлены данные расчета изменения температуры образца из титана в зависимости от времени облучения при воздействии импульсно-периодического ионного пучка алюминия со средней плотностью мощности в диапазоне от $3 \cdot 10^4$ Вт/м² до 10^5 Вт/м².

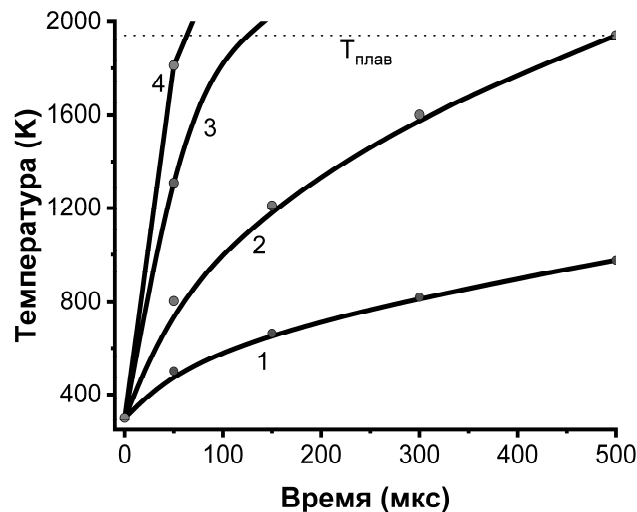


Рис.2. Зависимость температуры мишени из титана толщиной 3 мм от длительности импульсов при разной импульсной плотности мощности пучка: 1 – $q_{\text{имп}} = 2 \cdot 10^8$ Вт/м²; 2 – $q_{\text{имп}} = 5 \cdot 10^8$ Вт/м²; 3 – $q_{\text{имп}} = 1 \cdot 10^9$ Вт/м²; 4 – $q_{\text{имп}} = 1.5 \cdot 10^9$ Вт/м².

Из Рис.3 видно, что увеличение усредненной по периоду плотности мощности ионного пучка способствует более быстрому выходу на стабилизацию температуры образца. Усредненная плотность мощности, при которой еще не наблюдается рост зерна в титановом образце, не превышает $5 \cdot 10^4$ Вт/м², что соответствует температуре стабилизации 848 К.

Результаты численного моделирования показывают, что, принимая во внимание данные Рис.3, для импульсного нагрева приповерхностного слоя образца до температуры, обеспечивающей радиационно-ускоренную диффузию, требуемая импульсная плотность мощности в ионном пучке может быть существенно уменьшена. На Рис.4 представлены зависимости динамического изменения температуры титанового образца, предварительно разогретого до температуры 848 К, при облучении высокоинтенсивным пучком ионов алюминия с различной плотностью мощности с длительностью импульса 500 мкс. Из графиков виден значительный импульсный разогрев приповерхностного слоя, облучаемой мишени, с последующим быстрым его охлаждением за счет отвода тепла внутрь материала благодаря его теплопроводности. При импульсной плотности мощности $2 \cdot 10^8$ Вт/м² и начальной температуре образца 848 К максимальная температура поверхности к концу импульса достигает 1522 К. Дальнейшее увеличение импульсной плотности мощности до $3 \cdot 10^8$ Вт/м² приводит к импульсному разогреву поверхности до температуры 1859 К. Моделирование также показало, что температура поверхности достигает состояния расплава при плотности мощности ионного пучка $3.5 \cdot 10^8$ Вт/м².

Численное моделирование имплантации титана в алюминий показало на некоторое совпадение и отличие формирования температурных полей в сравнении с имплантацией

алюминия в титан. Учитывая, что соотношение теплоёмкости материалов алюминия и титана примерно обратно пропорционально удельной плотности вещества, оказывалось, как показали расчеты, что динамика нагрева образцов одинаковой формы примерно совпадает в зависимости от плотности мощности ионного пучка.

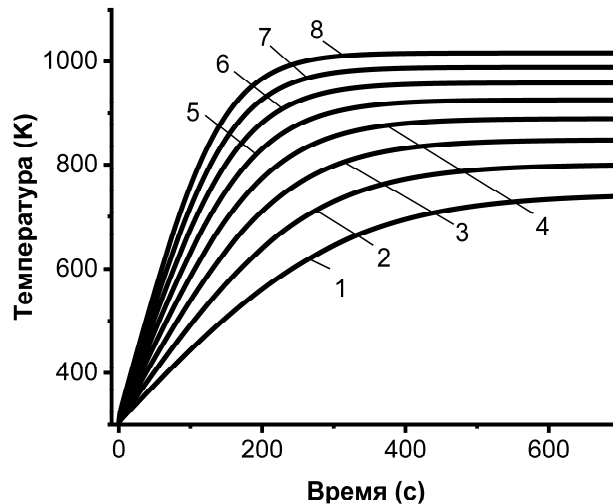


Рис.3. Зависимость температуры мишени из титана толщиной 3 мм от времени его облучения пучком ионов алюминия с плотностью мощности, усредненной по периоду: 1 – $q_{\text{уср}} = 3 \cdot 10^4 \text{ Вт/м}^2$; 2 – $q_{\text{уср}} = 4 \cdot 10^4 \text{ Вт/м}^2$; 3 – $q_{\text{уср}} = 5 \cdot 10^4 \text{ Вт/м}^2$; 4 – $q_{\text{уср}} = 6 \cdot 10^4 \text{ Вт/м}^2$; 5 – $q_{\text{уср}} = 7 \cdot 10^4 \text{ Вт/м}^2$; 6 – $q_{\text{уср}} = 8 \cdot 10^4 \text{ Вт/м}^2$; 7 – $q_{\text{уср}} = 9 \cdot 10^4 \text{ Вт/м}^2$; 8 – $q_{\text{уср}} = 10^5 \text{ Вт/м}^2$.

Отличительная особенность динамического нагрева алюминия обусловлена существенно большей его теплопроводностью, что приводит к значительно меньшему импульсному нагреву приповерхностного слоя по сравнению с титаном при одинаковой плотности мощности и энергии ионного пучка.

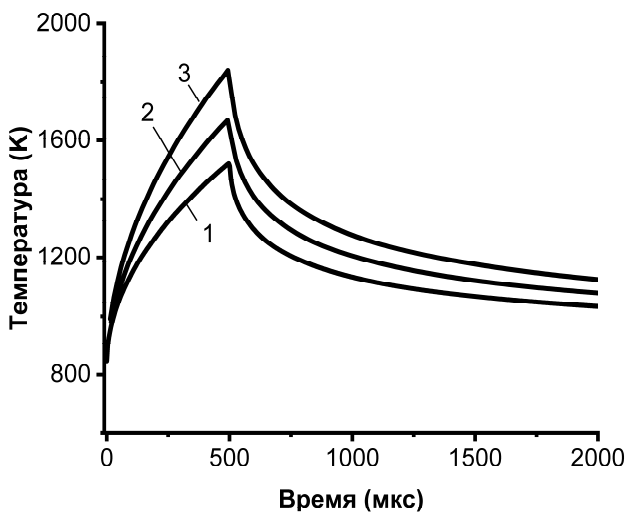


Рис.4. Зависимость температуры от времени в установившемся режиме облучения поверхности титана высокоинтенсивным пучком ионов алюминия с импульсной плотностью мощности: 1 – $q_{\text{имп}} = 2 \cdot 10^8 \text{ Вт/м}^2$; 2 – $q_{\text{имп}} = 2.5 \cdot 10^8 \text{ Вт/м}^2$; 3 – $q_{\text{имп}} = 3 \cdot 10^8 \text{ Вт/м}^2$.

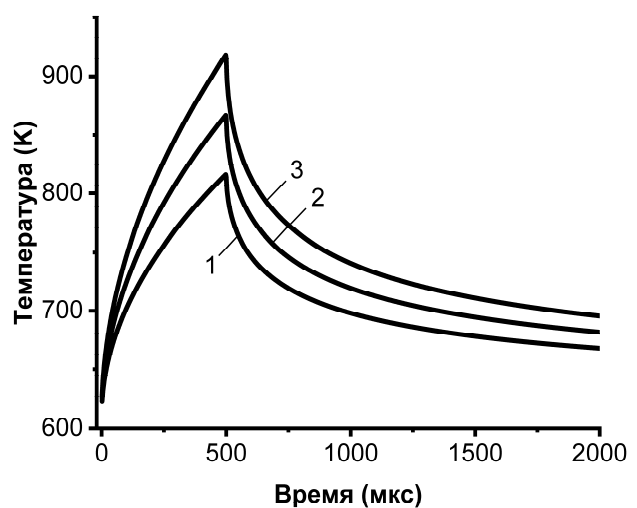


Рис.5. Зависимость температуры от времени в установившемся режиме облучения поверхности алюминия высокоинтенсивным пучком ионов титана с импульсной плотностью мощности: 1 – $q_{\text{имп}} = 2 \cdot 10^8 \text{ Вт/м}^2$; 2 – $q_{\text{имп}} = 2.5 \cdot 10^8 \text{ Вт/м}^2$; 3 – $q_{\text{имп}} = 3 \cdot 10^8 \text{ Вт/м}^2$.

Для сохранения микроструктуры всего объема алюминиевого образца его температура не должна превышать 600 К [6]. Необходимая усредненная плотность мощность ионного пучка должна быть, в этом случае, на уровне $4 \cdot 10^4$ Вт/м². Динамика импульсного нагрева приповерхностного слоя при воздействии пучка длительностью 500 мкс с импульсной плотностью мощности в диапазоне от $2 \cdot 10^8$ Вт/м² до $3 \cdot 10^8$ Вт/м² представлена на Рис.5. Как видно из рисунка, максимальная температура в импульсе варьируется от 818 К при плотности мощности $2 \cdot 10^8$ Вт/м² до 920 К при $3 \cdot 10^8$ Вт/м². Численным моделированием также получено, что при импульсной плотности мощности ионного пучка титана $3.5 \cdot 10^8$ Вт/м² температура поверхности алюминия достигает расплава.

Аналогичные особенности и закономерности были выявлены при моделировании динамики изменения температурных полей в нержавеющей стали, стали 40Х, а также Zr-1Nb сплав. Результаты показали, что динамика нагрева и охлаждения образцов определяются плотностью, теплоемкостью и удельной теплопроводностью материала.

3. Заключение

Численным моделированием исследована динамика изменения температурных полей в различных материалах в зависимости от их свойств и плотности мощности ионного пучка субмиллисекундной длительности в диапазоне от $2 \cdot 10^8$ Вт/м² до $3.5 \cdot 10^8$ Вт/м². Определены условия облучения, обеспечивающие импульсный нагрев приповерхностного слоя до высоких температур с обеспечением сверхвысоких скоростей охлаждения и прогревом матричного материала до температур, при которых не происходит существенного ухудшения микроструктуры и эксплуатационных свойств.

Благодарности

Исследование выполнено за счет средств гранта Российского научного фонда (проект № 22-79-10061), <https://rscf.ru/project/22-79-10061/>

4. Список литературы

- [1] Poate J.M., Foti G., Jacobson D.C., *Surface Modification and Alloying by Laser, Ion, and Electron Beams*. (Berlin: Springer, 2013).
- [2] Williams J.S., Poate J.M., *Ion Implantation and Beam Processing*. (Orlando: Academic, 1984).
- [3] Sharkeev Yu.P., Girsova N.V., Ryabchikov A.I., Kozlov E.V., Perevalova O.B., Brown I.G., Yao X.Y., *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B*, **106**, 532, 1995; doi: 10.1016/0168-583X(96)80034-6
- [4] Ryabchikov A.I., Sivin D.O., Korneva O.S., Bozhko I.A., Ivanova A.I., *Surf. Coat. Technol.*, **388**, 125557, 2020; doi: 10.1016/j.surfcoat.2020.125557
- [5] Ryabchikov A.I., Kashkarov E.B., Pushilina N.S., Syrtanov M.S., Shevelev A.E., Korneva O.S., Sutygina A.N., Lider A.M., *Appl. Surf. Sci.*, **439**, 106, 2018; doi: 10.1016/j.apsusc.2018.01.021
- [6] Ryabchikov A.I., Kashkarov E.B., Shevelev A.E., Obrosova A., Sivin D.O., *Surf. Coat. Technol.*, **372**, 1, 2019; doi: 10.1016/j.surfcoat.2019.05.020
- [7] Ryabchikov A.I., *IEEE Trans. Plasma Sci.*, **49** (9), 2529, 2021; doi: 10.1109/TPS.2021.3073942
- [8] Ryabchikov A.I., Shevelev A.E., Sivin D.O., Bozhko I.A., Kashkarov E.B., Bleykher G.A., Stepanov I.B., Ivanova A.I., *J. Alloys Compd.*, **793**, 604, 2019; doi: 10.1016/j.jallcom.2019.04.179