doi: 10.56761/EFRE2024.N1-P-056502

Компьютерное моделирование тепловых полей системы B-Ti для формирования боридных поверхностных сплавов с помощью низкоэнергетического сильноточного электронного пучка

А.В. Соловьев, А.Б. Марков, Е.А. Пестерев, Е.В. Яковлев, В.И. Петров*

Томский научный центр СО РАН, Томск, Россия
a.solovyov@hq.tsc.ru

Аннотация. Представлены рассчитанные зависимости порогов плавления системы B (пленка)/Ti (подложка) от толщины пленки. Порог плавления подложки Ti при увеличении толщины пленки B монотонно увеличивается от значения порога плавления чистого титана до бесконечности. Порог плавления пленки B при увеличении её толщины до 0.5 мкм монотонно увеличивается, а при дальнейшем увеличении толщины стремится к порогу плавления чистого B. Порог плавления системы при котором в расплавленном состоянии находятся и подложка титана, и плека бора по всей ее толщине монотонно увеличивается от значения порога плавления чистого бора до бесконечности. При значениях пленки молибдена не превышающих 0.8 мкм первой начинает плавится подложка титана. При дальнейшем увеличении толщины пленки, наоборот, первой начинает плавиться пленка бора. Расчитана зависимость толщины расплавленного слоя подложки из титана от плотности энергии НСЭП для системы с толщиной пленки бора 0.5 мкм. При увеличении плотности энергии наблюдается монотонное увеличение толщины расплава. Представлены временные зависимости толщины расплава при плотностях энергии НСЭП 2.5, 3.5, 4.5 и 5.5 Дж/см^2 для системы B/Ti с толщиной пленки 0.5 мкм.

Ключевые слова: моделирование, низкоэнергетический сильноточный электронный пучок, поверхностный сплав, бор, титан.

1. Введение

Титан и титановые сплавы нашли широкое применение в различных областях промышленности благодаря хорошей коррозионной стойкости, хорошей биосовместимости, высокой удельной прочности и сопротивлению усталости. Однако, титан и его сплавы не лишены недостатков. В частности, они характеризуются плохими трибологическими характеристиками, что может ограничивать срок службы изделий из титана. Для улучшения трибологических характеристик изделий, изготовленных из титановых материалов, рассматривают различные методы обработки поверхности. Одним из перспективных способов достижения желаемых свойств является процесс борирования. Борирование формирует поверхностные слои с улучшенной износостойкостью и коррозионной стойкостью за счет увеличения поверхностной твердости подложки. Боридные слои защищают титан от воздействия окружающей среды за счет образования стабильной пассивной пленки, высокой износостойкости и сверхвысокой адгезии к поверхности титана.

Одним из методов формирования боридных слоев является синтез боридных поверхностных сплавов с помощью предварительного напыления боридосодержащей пленки магнетронным способом и последующего перемешивания с подложкой в жидкой фазе низкоэнергетического сильноточного электронного пучка (НСЭП) микросекундной длительности [1, 2]. Последовательность операций при формировании поверхностного сплава следующая: в едином вакуумном цикле на подложку напыляется боридосодержащая пленка толщиной h (μm) затем следует НСЭП обработка с плотностью энергии E_s (Дж/см^2). Плотность энергии и толщина пленки магнетронного напыления в конечном итоге определяют толщину расплава системы пленка-подложка, его время жизни и температуру. Оптимальные параметры плотности энергии НСЭП и толщины пленки B для синтеза B-Ti поверхностного сплава можно определить с помощью компьютерного моделирования температурных полей в системах пленка/подложка.

В настоящей работе исследуется влияние энергетических характеристик электронно-пучкового воздействия на систему B (пленка)/Ti (подложка) на глубину и время жизни расплава.

2. Методика расчетов

Для вычисления температурного поля в системе B (пленка)/Ti (подложка), решалось одномерное уравнение теплопроводности с соответствующими граничным и начальным условиями. Процесс плавления моделировался методом эффективной теплоемкости, а процесс испарения учитывался с помощью модели теплового разрушения [3, 4]. При моделировании импульсного пучка ускоренных электронов использовались реальные осциллограммы тока на коллекторе и ускоряющего напряжения НСЭП. Температурные поля вычислялись для разных плотностей энергии НСЭП, длительность импульса τ была равна 2.5 мкс. Расчеты проводились для одиночного импульса. В таблице 1 представлены теплофизические свойства подложки из циркония и пленки из хрома, используемые при вычислении температурных полей в изучаемых системах. Здесь ρ, c, k, T_m и L_m – это плотность, теплоемкость, теплопроводность, температура плавления и скрытая теплота плавления соответственно. Температурные зависимости теплофизических свойств материалов брались из справочников [5, 6].

Таблица 1. Теплофизические свойства материалов.

Режим	ρ, кг/м^3	c, Дж/(кг К) (при 300 К)	k, Вт/(м К) (при 300 К)	T_m, К	L_m, кДж/кг
Ti	4500	555.5	20.4	1941	8977.036
B	2370	1463	17	2348	47359.171

3. Результаты и обсуждения

Важной энергетической характеристикой электронно-пучкового воздействия является порог плавления. Порогом плавления называют наименьшую величину плотности энергии электронного пучка, при которой происходит начало плавления пленки или подложки. Пороги плавления пленки и подложки зависят от теплофизических свойств материалов, а так же от толщины напыляемой пленки. Практический интерес представляет порог плавления системы, когда оба материала пленки и подложки находятся в расплавленном состоянии. Если первой начинает плавиться пленка, то порог плавления системы связывают с порогом плавления подложки. Расплав подложки при этом происходит на незначительную глубину, но достаточную для начала процесса перемешивания элементов пленки и подложки для формирования поверхностного сплава. Если первой начинает плавиться подложка, то порог плавления системы связывают с порогом плавления пленки. На Рис. 1 представлены рассчитанные зависимости порогов плавления системы B (пленка)/Ti (подложка) от толщины пленки. Пороги плавления чистых металлов бора и титана равны 2.9 и 2.0 Дж/см^2 соответственно. На Рис. 1 они обозначеы штриховыми линиями. Расчеты показали, что порог плавления подложки Ti (кривая 1 на Рис. 1) при увеличении толщины пленки B монотонно увеличивается от значения порога плавления чистого титана до бесконечности. Порог плавления пленки B при увеличении её толщины до 0.5 мкм монотонно увеличивается (кривая 2 на Рис. 1), а при дальнейшем увеличении толщины стремится к порогу плавления чистого B. Расчеты показали, что при значениях толщины пленки бора до 0.8 мкм первой начинает плавится подложка титана. Это можно объяснить более низкой теплопроводностью Ti по сравнению с B. При дальнейшем увеличении толщины пленки, наоборот, первой начинает плавиться пленка бора. Порог плавления системы при котором в расплавленном состоянии находятся и подложка титана и плека бора по всей ее толщине монотонно

увеличивается от значения порога плавления чистого бора до бесконечности (кривая 3 на Рис. 1).

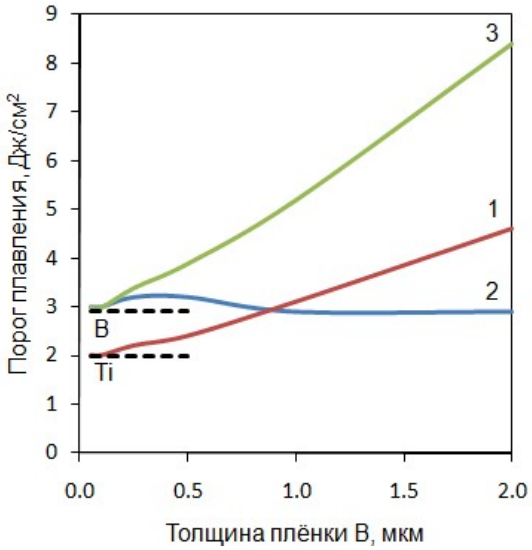

Рис. 1. Зависимость порогов плавления подложки Ti (1), пленки B (2) и системы B/Ti (3) от толщины пленки B.

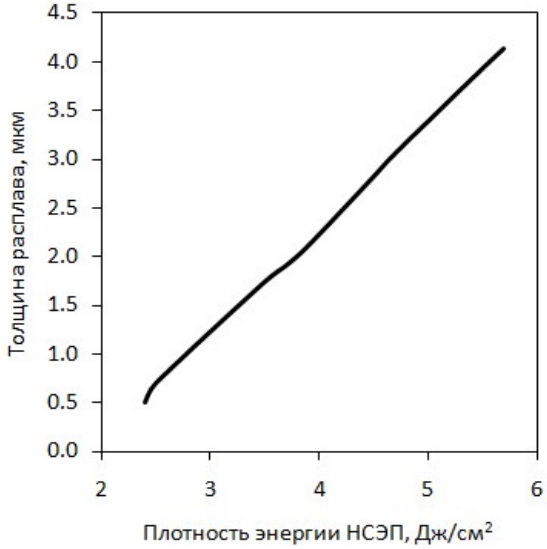

Рис. 2. Зависимость толщины расплава от плотности энергии НСЭП.

На Рис. 2 приведена зависимость толщины расплавленного слоя подложки из титана от плотности энергии НСЭП для системы B/Ti с толщиной пленки бора 0.5 мкм. Для всех рассматриваемых случаев первой начинает плавиться подложка титана. При значениях энергии НСЭП выше порога плавления пленки бора происходит плавление не только пленки, но и подложки и оба элемента системы находится в жидкой фазе. Для эффективного перемешивания элементов системы пленка-подложка плотность энергии НСЭП должна быть больше порога плавления пленки. При увеличении плотности энергии наблюдается монотонное увеличение толщины расплава.

На Рис. 3 представлены временные зависимости толщины расплава при плотностях энергии НСЭП 2.5, 3.5, 4.5 и 5.5 Дж/см^2 для системы B/Ti с толщиной пленки 0.5 мкм. Расплав системы обозначен серыми областями. При облучении системы с плотностью энергии НСЭП 2.5 Дж/см^2 плавится только подложка титана (Рис. 3а). Данная плотность энергии ниже порога плавления пленки. Максимальная толщина расплава Zr наблюдается при 1.4 мкс, а полная кристализация подложки происходит ещё до момента окончания действия импульса. При облучении системы с плотностью энергии НСЭП 3.5 Дж/см^2 сначала плавится подложка Ti и через 1.7 мкс начинает плавиться плёнка B (Рис. 3б). Расплав плёнки B существует до 2.4 мкс. Максимальная толщина расплава Ti наблюдается от 1.6 до 2.3 мкс. Полная кристаллизация системы происходит после 3.1 мкс. При облучении системы с плотностью энергии НСЭП 4.5 Дж/см^2 сначала так же плавится подложка Ti и через 1.2 мкс начинает плавиться плёнка B (Рис. 3в). Расплав плёнки B существует до 2.6 мкс. Максимальная толщина расплава Zr наблюдается от 2.3 до 2.6 мкс. Полная кристаллизация системы происходит после 4.5 мкс. При облучении системы с плотностью энергии НСЭП 5.5 Дж/см^2 так же сначала плавится подложка Ti и через 1.2 мкс начинает плавиться плёнка B (Рис. 3г). Расплав плёнки B существует до 3.1 мкс. Максимальная толщина расплава Zr наблюдается при 3 мкс. Полная кристаллизация системы происходит после 6.1 мкс. Существование расплава пленки больше времени действия импульса можно объяснить меньшей теплопроводностью подложки по сравнению с теплопроводностью плёнки (Таблица 1), что затрудняет отток тепла и увеличивает время жизни расплава.

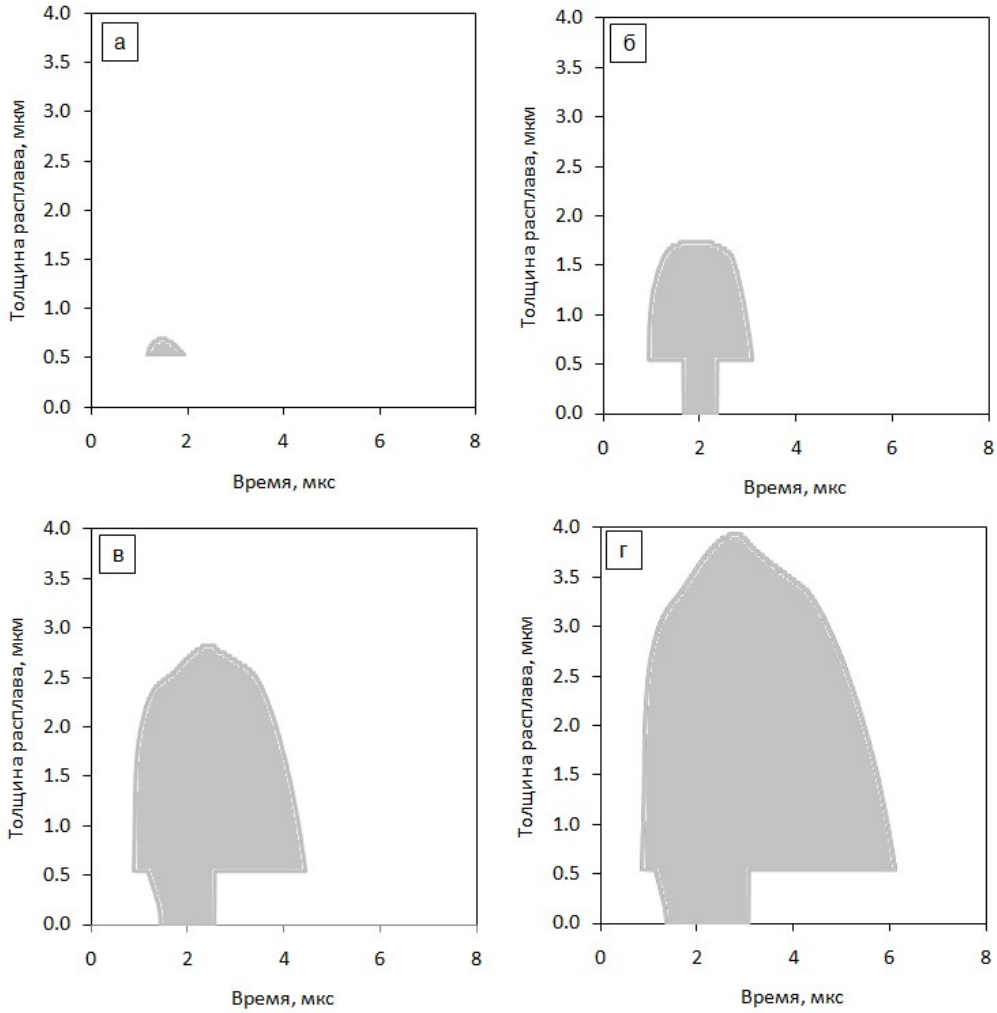

Рис. 3. Временные зависимости толщины расплава системы B/Ti с толщиной пленки 0.5 мкм при плотностях энергии НСЭП 2.5 (а), 3.5 (б), 4.5 (в) и 5.5 (г) Дж/см^2.

4. Заключение

Проведены расчеты температурных полей системы B (пленка)/Ti (подложка) при импульсном электронно-пучковом воздействии. Представлены рассчитанные зависимости порогов плавления системы B (пленка)/Ti (подложка) от толщины пленки. Порог плавления подложки Ti при увеличении толщины пленки B монотонно увеличивается от значения порога плавления чистого титана до бесконечности. Порог плавления пленки B при увеличении её толщины до 0.5 мкм монотонно увеличивается, а при дальнейшем увеличении толщины стремится к порогу плавления чистого B. Порог плавления системы при котором в расплавленном состоянии находятся и подложка титана и пленка бора по всей ее толщине монотонно увеличивается от значения порога плавления чистого бора до бесконечности. При значениях пленки молибдена не превышающих 0.8 мкм первой начинает плавится подложка титана. При дальнейшем увеличении толщины пленки, наоборот, первой начинает плавиться пленка бора. Расчитана зависимость толщины расплавленного слоя подложки из титана от плотности энергии НСЭП для системы с толщиной пленки бора 0.5 мкм. При увеличении плотности энергии наблюдается монотонное увеличение толщины расплава. Представлены временные зависимости толщины расплава при плотностях энергии НСЭП 2.5, 3.5, 4.5 и 5.5 Дж/см^2 для системы B/Ti с толщиной пленки 0.5 мкм. При облучении системы с плотностью энергии НСЭП 2.5 Дж/см^2 плавится только подложка титана.

Благодарности

Работа выполнена в рамках государственного задания ТНЦ СО РАН, проект № FWRF-2024-0006

5. Список литературы

[1] Markov, E. Yakovlev, D. Shepel', M.Bestetti, Synthesis of a Cr-Cu surface alloy using a low-energy high-current electron beam, *Results in Physics*, **12**, 1915, 2019, doi: 10.1016/j.rinp.2019.02.010

[2] A.V. Batrakov, A.B. Markov, G.E. Ozur, D.I. Proskurovsky, V.P. Rotshtein, Surface alloying of metallic substrates with pre-deposited films through a pulsed electron-beam mixing, *Eur. Phys. J. Appl. Phys*., **43**, 283, 2008, doi: 10.1051/epjap:2008070

[3] A.B. Markov, A.V. Mikov, G.E. Ozur, A.G.Padei, A РИТМ-СП facility for the surface alloying, *Instrum. and Experim. Tech.*, vol. **54**, 862, 2011, doi: 10.1134/S0020441211050149

[4] V. Rotshtein, Y. Ivanov, A. Markov, *Materials Surface Processing by Directed Energy Techniques*. Elsevier, 2006.

[5] A.P. Babichev, N.A. Babushkina, A.M.Bratkovskii, I.S. Grigoyev, E.Z .Meilikhova (Eds.), *Physical quantities*. Moscow: Energoatomizdat, 1991.

[6] I.A. Kokin, *Tables of physical quantities. Reference book*. Moscow: Atomizdat, 1976.