

**ИНСТИТУТ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИХ ПРОБЛЕМ И
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ НАН КР и КРСУ им. Б. ЕЛЫЦИНА**

Диссертационный совет Д. 01.14.002

На правах рукописи

УДК:538.93+539.2+
548.0 (043.3)

Мамытбеков Жайлоо Кыдырович

**ПРОЦЕССЫ МАССОПЕРЕНОСА В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ
ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ПОЛИЭНЕРГЕТИЧЕСКИМИ ИОННЫМИ
ПУЧКАМИ**

Специальность 01.04.07-Физика конденсированного состояния

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Бишкек 2015

Работа выполнена в Институте физико-технических проблем и материаловедения НАН КР, лаборатория Кристаллофизики; в Омском государственном университете им. Ф.М. Достоевского

Научный руководитель:

член-корреспондент НАН КР,
доктор физико-математических наук,
профессор **Кидибаев М.М.**
(ИФТПиМ НАН КР)

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук
Касмамытов Н.К.
(КРСУ им. Б. Ельцина)

кандидат физико-математических
наук **Утемисов К.У.**
(КНУ им. Ж. Баласагына)

Ведущая организация:

Евразийский национальный
университет им. Л. Н. Гумилева
(г. Астана, Казахстан)

Защита состоится «27» февраля 2015 г. в 16-00 на заседании диссертационного совета Д.01.14.002 при Институте физико-технических проблем и материаловедения НАН КР и КРСУ им. Б. Ельцина по адресу: г. Бишкек, 720071, проспект Чуй, 265-а

С диссертацией можно ознакомиться в Центральной научной библиотеке Национальной Академии Наук Кыргызской Республики.

Автореферат разослан «20» января 2015 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
доктор технических наук



Алымкулов С.А.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы диссертации. Эффективным методом для улучшения физико-механических характеристик поверхности металлических материалов является высоко-дозовая ионная имплантация (ВИИ). Эффективность ВИИ достигается с помощью вакуумно-дугового источника, которая позволяет излучать полиэнергетический пучок положительных ионов в частотно-импульсном режиме напыления. Вакуумно-дуговой источник при частотно-импульсных режимах генерирует ионы с различными зарядами от +1 до +6, причём их относительное зарядовое соотношение в массовых % зависит от типа катода.

В научной литературе отсутствуют как экспериментальные так и теоретические результаты по ВИИ материалов при воздействии высоко- и полиэнергетического ионного пучка. Имеются только отдельные работы где анализируются экспериментальные результаты ВИИ только по средним значениям энергий ионов. Показано, что в ускорителях ВИИ "Радуга-5", "Диана-2" в зависимости от комбинации "ион-мишень" концентрационные профили внедряемых частиц по глубине поверхности мишени имеют широкие максимумы с аномально глубоким проникновением ионов в приповерхностную область материала по сравнению с табличными значениями проективного пробега ионов в материал. В рамках существующих теоретических моделей наблюдаемые экспериментально аномальные концентрационные профили объяснить не удастся. В связи с этим проблема разработки теоретического подхода, учитывающего имплантацию при высоких ($\geq 10^{17}$ ион/см²) дозах полиэнергетическими пучками становится актуальным.

Подавляющее большинство экспериментальных исследований по ВИИ осуществлялось на материалах с крупнозернистой (≥ 15 мкм) структурой, но в последние годы имеется повышенный интерес по влиянию ВИИ на материалы с мелкозернистой (< 15 мкм), а также на нано- и ультразернистой структурой в связи с перспективой их широкого применения. В работах, проведенных с помощью ВИИ вакуумно-дуговым источником "Диана-2", установлено, что формирование концентрационных профилей зависят от величины зернистой структуры материала и от сорта налетающих ионов, но не дается этим результатам адекватного теоретического объяснения. Поэтому анализ особенностей формирования концентрационных профилей при воздействии ВИИ на материалы с различной вариацией размеров зёрен от наноструктурированных до мелкозёрненных размеров также является актуальной задачей.

Таким образом, разработка общего теоретического подхода для интерпретации массопереноса при воздействии ВИИ позволит качественно прогнозировать эксплуатационные свойства материалов после облучения их полиэнергетическими пучками в зависимости от режимов обработки и структурного состояния материала мишени.

Цель диссертационной работы заключается в теоретическом анализе формирования концентрационных профилей внедряемых ионов в приповерхностную область металлических материалов различного структурного состояния при воздействии ВИИ частотно-импульсными полиэнергетическими пучками вакуумно-дугового источника.

Для достижения указанной цели были сформулированы следующие **задачи**:

1. Предложить физико-математическую модель формирования концентрационных профилей ионов в приповерхностной области металлических материалов при воздействии высокодозовыми ионными пучками.

2. Разработать модель для описания формирования концентрационных профилей внедряемых ионов при воздействии полиэнергетическими частотно-импульсными пучками вакуумно-дуговых источников.

3. Исследовать влияние статистических процессов, термической и радиационно-стимулированной диффузии на формирование концентрационных профилей внедряемых ионов в зависимости от режимов имплантации и структурного состояния материала мишени при воздействии пучками источников "Радуга-5" и "Диана-2".

4. Провести теоретический анализ формирования концентрационных профилей при облучении материалов в ионно-плазменном режиме при непрерывном росте осаждаемой "газо-металлической" пленки на поверхности материала мишени в процессе ВИИ.

Научная новизна работы заключается в том, что в ней **впервые**:

1. Предложена физико-математическая модель формирования концентрационных профилей внедряемых ионов в металлические материалы при воздействии ВИИ, в котором учитывается вклад статистических и диффузионных процессов на различных временных этапах облучения.

2. Развита модель для описания формирования концентрационных профилей при имплантации металлических материалов полиэнергетическими ионными пучками.

3. Продемонстрировано, что формирование широких глубинных максимумов концентрационных профилей в металлических материалах при облучении пучками вакуумно-дуговых источников ("Радуга-5", "Диана-2") обусловлено, преимущественно, статистическими процессами на первоначальных этапах имплантации полиэнергетическими ионами, а диффузионные процессы вносят вклад на заключительном этапе ВИИ, которые приводят их к дополнительному уширению.

4. Выявлено, что наблюдаемые максимумы концентрационных кривых ионов никеля у поверхности структурированных образцов титана при облучении ионным пучком источника "Диана-2" обусловлены диффузионными процессами.

5. Установлено, что пространственные центральные моменты функции распределения внедряемых ионов по глубине мелкозернистых (со средним

размером зерен <15 мкм) мишеней могут отличаться от известных табличных значений не более чем на 25%.

6. В рамках предложенной модели показано, что в мелкозернистых образцах (со средним размером зерен 0,1 и 1,4 мкм) основным механизмом массопереноса на заключительном этапе ВИИ является радиационно-стимулированная в том числе и зернограницная диффузия внедряемого иона примеси, а в крупнозернистых (со средним размером зерен 15 и 38 мкм) – массоперенос иона примеси преимущественно протекает механизмом объемной диффузии.

7. Установлено, что в ионно-плазменном режиме облучения с осаждением "газо-металлической" пленки на поверхности материала мишени при относительно высоких температурах концентрационные профили внедряемых ионов алюминия формируются путем статистических и термодиффузионных процессов одновременно как в напыленной пленке, так и у поверхности материала подложки. Имплантация атомов отдачи ответственна за неоднородное распределение примеси вблизи границы раздела пленки с подложкой.

Научная и практическая значимость результатов работы.

В диссертационной работе предложена обобщенная теоретическая модель, позволяющая описать закономерности формирования концентрационных профилей в металлических материалах в зависимости от набираемой дозы легируемых частиц материалом подложки при облучении частотно-импульсным полиэнергетическим ионным пучком, а также структурного состояния мишени. Проведённые исследования на основе разработанной модели способствуют углублению представлений о механизмах массопереноса в твердых телах (в т.ч. полупроводниковых материалах) при воздействии на них высокоинтенсивными потоками тяжелых частиц, а также стимулируют дополнительное развитие методов исследования состояния вещества в процессе ВИИ.

Достоверность полученных результатов подтверждается физической обоснованностью развитой модели массопереноса при воздействии ВИИ, ее внутренним единством и соответствием существующим представлениям о радиационно-стимулированных процессах в приповерхностных слоях твердых тел, непротиворечивостью полученных результатов и удовлетворительным согласием их с экспериментальными данными.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. При интерпретации наблюдаемых закономерностей массопереноса в металлических системах при ВИИ рекомендуется учитывать, по крайней мере, две стадии во времени формирования концентрационных профилей внедряемой примеси по глубине мишени: статистическую на первоначальном этапе и диффузионную - на завершающем.

2. Наблюдаемые широкие глубинные максимумы концентрационных профилей ионов Al, Ti, Ni, W в металлических системах при высокодозовой имплантации полиэнергетическими пучками вакуумно-дуговых источников обусловлены, главным образом, статистическими процессами на

первоначальном этапе внедрения и последующей радиационно-стимулированной диффузией.

3. При имплантации ионами алюминия источником "Радуга-5" образующаяся "газо-металлическую" пленка путем осаждения на поверхность мишени алюминиевой плазмы в промежутках между импульсами пучка, концентрационные профили внедряемых ионов, как в образующейся пленке, так и на поверхности материала подложки формируются одновременно статистическим, термодиффузионным процессами, а также распределением атомов отдачи. Последнее влияет на неоднородный характер формирования кривых концентрационных профилей иона примеси вблизи границы раздела образующейся пленки с материалом подложки.

4. В мелкозернистых образцах титана на этапе интенсивного диффузионного перераспределения примеси в формировании концентрационных профилей внедряемых ионов по глубине существенный вклад вносит радиационно-стимулированная диффузия, в том числе и зернограничная, а в крупнозернистых – диффузия по объему зерна.

Апробация работы. Материалы диссертационной работы докладывались и обсуждались на: IV Всероссийской научной молодежной конференции "Под знаком Сигма" (Омск, 29-31 мая 2007 г.); VI Международной научной конференции "Радиационно-термические эффекты и процессы в неорганических материалах" (Томск, 8-15 августа 2008 г.); XIV Международной конференции «Радиационная физика и химия неорганических материалов» (Томск-2009), VIII Иссык-Кульская международная конференция по инновационным материалам посвященная 60-летию чл.-корр. НАН КР М.М. Кидибаева. (SCORPh-2010); XII международной научной конференции «Физика твердого тела», II-съезд физико-технического общества Республики Казахстан (Астана 25-27 июня 2014 г.); XXIV международной конференции «Радиационная физика твердого тела» (Севастополь, 7 -12 июля 2014 г.).

Личный вклад автора. Автором развита модель формирования концентрационных профилей внедряемых ионов в металлические материалы при высокодозовой имплантации полиэнергетическими ионными пучками вакуумно-дуговых источников, в которой учитывается вклад статистических и диффузионных процессов в зависимости от режимов облучения и структурного состояния мишени. Представлен анализ большого числа экспериментальных результатов. Лично автором разработаны алгоритмы и составлены вычислительные программы для проведения модельных расчетов.

Публикации. Всего по теме диссертации опубликовано 11 работ, 4 из которых в изданиях из перечня ВАК, и 7 в сборниках трудов региональных российских и международных конференций.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения. Объем диссертации составляет 109 страниц машинописного текста, включая 27 рисунков, 25 таблиц и библиографию из 161 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении дается краткое обоснование актуальности исследования, формулируется цель и решаемые задачи, изложены новизна работы, её научная и практическая значимость, основные положения, выносимые на защиту, приведены данные об апробации работы, указан личный вклад автора, описана структура диссертации.

Первая глава «Массоперенос при ионном облучении твердых тел и способы его описания» носит обзорный характер по анализу теорий и подходов, посвященных интерпретации массопереноса в металлических материалах при радиационном воздействии пучками заряженных частиц. Обсуждаются основные возможные механизмы формирования концентрационных профилей при ионной имплантации в зависимости от дозы внедряемых частиц и структуры исходных образцов. На основании литературного обзора сформулированы задачи исследования.

Во второй главе «Модель формирования концентрационных профилей при воздействии ионными пучками вакуумно-дуговых источников» предлагается физико-математическая модель для описания формирования концентрационных профилей при воздействии полиэнергетическими ионными пучками высокой дозы. Сущность модели заключается в следующем.

На первоначальном этапе имплантации, когда доза введенной в образец примеси ещё относительно мала и концентрация генерируемых ионным пучком дефектов структуры невысокая, профили формируются преимущественно статистическим образом, определяемым случайными процессами упругих и неупругих столкновений внедряемых ионов с атомами мишени. На втором этапе имплантации, с увеличением концентрации дефектов и при достижении дозы легируемой примеси $> 5 \cdot 10^{16} - 10^{17}$ ион/см², перераспределение уже внедренных атомов и окончательное формирование концентрационных профилей происходит за счет различных диффузионных механизмов. Используя предположения о справедливости одномерного описания и об аддитивности процессов при высокодозовой ионной имплантации полиэнергетическим пучком, итоговый профиль представляется в виде суммы вкладов каждой энергетической компоненты пучка:

$$n(x) = \sum_i \Phi_i n(x, E_i), \quad (1)$$

где

$$n(x, E_i) = n_s(x, E_i) + n_d(x, E_i). \quad (2)$$

Функция $n_s(x, E_i)$ описывает статистическое распределение, а $n_d(x, E_i)$ учитывает различные диффузионные процессы для пучка с энергетической компонентой E_i . Доза Φ_i внедряемых ионов с долей P_i в составе ионного пучка, соответствующая энергии E_i , через полную дозу Φ определяется выражением $\Phi_i = \Phi P_i$. Профиль внедряемых ионов по глубине мишени за счет статистических

процессов $n_s(x, E_i)$ для фиксированной энергии E (далее индекс i опущен) описывается выражением:

$$n_s(x, E) = \frac{10^7}{\sqrt{2\pi}\Delta Rp} F_p(x, E), \quad (3)$$

где $F_p(x, E)$ – функция Пирсона IV типа:

$$F_p(x, E) = K \left[1 + \left(\frac{x}{a} \right)^2 \right]^{-q} \cdot \exp \left[-v \cdot \arctg \left(\frac{x}{a} \right) \right], \quad (4)$$

В выражении (4) нормировочный множитель K и другие параметры (a , q , v) функции определяются через моменты Rp (пробег ионов), ΔRp (страгглинг) и Sk (коэффициент асимметрии), соответствующие энергии E_i .

Распределение примеси по глубине мишени вследствие диффузионных процессов $n_d(x)$ для каждой энергетической компоненты учитывается в рамках радиационно-стимулированной диффузии имплантируемых частиц:

$$\frac{\partial n_d(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} D(x) \frac{\partial n_d(x, t)}{\partial x} + V \frac{\partial n_d(x, t)}{\partial x} + f(x, t), \quad (5)$$

где x – расстояние от поверхности, распыляемой со скоростью $V = Sj/N_0$, S – коэффициент распыления; j – плотность потока ионов; N_0 – концентрация атомов мишени; $f(x, t)$ – функция источника.

Уравнение (5) на полупрямой решается при следующих начальном и граничных условиях (полагается, что образцы достаточно толстые):

$$n_d(x, 0) = g(x), \quad \frac{\partial n_d(0, t)}{\partial x} = 0, \quad \lim_{x \rightarrow \infty} n_d(x, t) = 0, \quad (6)$$

где $g(x)$ – профиль, сформированный на первоначальных этапах имплантации статистическим образом.

При больших временах легирования и коэффициенте распыления больше единицы диффузионное распределение ионов по глубине мишени может быть описано стационарным решением краевой задачи (5) – (6), которое имеет следующий вид:

$$n_d(x) = \frac{1}{V} \int_x^\infty f(y) dy + \frac{1}{V} \int_0^x f(y) \exp \left[-V \int_y^x \frac{dz}{D(z)} \right] dy. \quad (7)$$

Коэффициент диффузии $D(x)$ представляется в виде суммы термического $D_t(x)$ и радиационно-стимулированного $D^*(x)$ коэффициентов, причем $D^*(x)$ пропорционален концентрации радиационных дефектов $C(x)$. Выражение для концентрации дефектов $C(x)$ выбрано в виде:

$$C(x) = \exp \left(-\frac{xV}{2D_d} \right) \cdot \left\{ B_1 \operatorname{ch}(kx) + B_2 \operatorname{sh}(kx) + \frac{1}{k} \int_0^x h(\xi) \operatorname{sh}[k(x-\xi)] d\xi \right\}, \quad (8)$$

которое является решением стационарного уравнения диффузии для дефектов. В выражении (8) введены обозначения:

$$k = \sqrt{\frac{1}{D_d \tau_d} + \frac{V^2}{4D_d^2}}, \quad h(x) = -f_d(x) \exp\left(\frac{xV}{2D_d}\right). \quad (9)$$

Коэффициенты B_1 и B_2 находятся из соответствующих граничных условий. Параметр $L_d = \sqrt{D_d \tau_d}$ – длина диффузии дефектов, зависит от свойств мишени и является варьируемым параметром; D_d – коэффициент диффузии дефектов.

При высокой температуре мишени формирование профилей сопровождается также термическим перераспределением, представляемым

в виде:

$$n_r(x, t) = \int_0^\infty n_s(\xi) G(x, \xi, t) d\xi + \int_{t_0}^t \int_0^\infty f(\xi, t) G(x, \xi, t - \tau) d\tau d\xi, \quad (10)$$

где $n_s(x)$ – профиль, сформированный на первом этапе имплантации статистическим образом, t – общее время имплантации, t_0 – время начала термического перераспределения, $G(x, \xi, t)$ – функция Грина для заданной краевой задачи.

При имплантации через растущую с постоянной скоростью пленку на поверхности мишени профиль распределения внедряемых частиц в такой слоистой системе представим в виде:

$$n(x) = \begin{cases} n_1(x) & \text{при } 0 \leq x \leq h(t); \\ \beta n_2 \left(\left(\frac{x - h(t)}{R_p_2 - R_p_1} \right) \right) & \text{при } x > h(t), \end{cases} \quad (11)$$

где $n_1(x)$ и $n_2(x)$ – профили распределения примеси в пленке и в подложке, соответственно. Здесь $\eta = h(t) \cdot \left(\frac{x - h(t)}{R_p_2 - R_p_1} \right)$ – координата, трансформирующая шкалу глубин при переходе во второй слой; $h(t)$ – толщина пленки в момент времени t ; R_p_1 – проективный пробег ионов в пленке; R_p_2 – проективный пробег ионов в подложке. Постоянная β выбирается из условия нормировки общего профиля. Поскольку в различных режимах имплантации могут достигаться относительно высокие температуры образцов (~ 1000 K), то имеет место термическое перераспределение примеси. Поэтому в точке $x(t)$ в момент времени t концентрационный профиль в пленке и подложке представляется в виде суммы трех слагаемых:

$$n_i(x, t) = n_s(x, t) + n_r(x, t) + n_t(x, t), \quad i = 1, 2 \quad (12)$$

где $n_s(x, t)$ – определяет вклад статистических процессов; $n_r(x, t)$ – учитывает эффекты баллистического перемешивания внедряемых частиц с атомами подложки; $n_t(x, t)$ – задает вклад термического перераспределения внедряемых частиц. Выражения для $n_1(x)$ и $n_2(x)$ получаются интегрированием формулы (12) по времени:

$$n_i(x) = \int_0^t n_i(x, \tau) d\tau. \quad i = 1, 2 \quad (13)$$

Если коэффициент диффузии не зависит от концентрации дефектов и пространственных координат (является константой), то уравнение (5) примет вид:

$$\frac{\partial n_d(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n_d(x,t)}{\partial x^2} + V \frac{\partial n_d(x,t)}{\partial x} + f(x,t) \quad (14)$$

с теми же начальным и граничными условиями (6).

Решение уравнения (14) с условиями (6) представимо в виде:

$$n_d(x,t) = \int_0^\infty G(x,\xi,t) g(\xi) d\xi + \int_0^t \int_0^\infty f(\xi,\tau) G(x,\xi,t-\tau) d\xi d\tau, \quad (15)$$

где t – общее время имплантации, функция $G(x,\xi,t)$ – функция Грина для заданной краевой задачи.

В третьей главе «Анализ массопереноса при высокодозовой имплантации металлических материалов пучком источника "Радуга-5"» анализируется перенос внедряемых ионов в результате облучения пучком источника "Радуга-5". В работах приведены результаты исследования микроструктуры, элементного и фазового состава технически чистого поликристаллического никеля со средним размером зерен ~ 25 мкм, имплантированного пучком ионов титана и алюминия. Основные режимы имплантации представлены в таблице 1. Концентрационные профили титана (рис.1) характеризуются наличием широких максимумов, положение и вид которых зависят от параметров ионного пучка. Профили алюминия (рис. 2) плавно спадают с поверхности. Ионный пучок вакуумно-дугового источника "Радуга-5" является полиэнергетическим,

Таблица 1

Условия имплантации никелевых образцов

Система	Режим	Температура образцов, К	Доза облучения Φ , 10^{18} ион/см ²
Ti – Ni	1	850	0,3
	2	920	0,8
	3	970	2,9
	4	1000	2,9
Al – Ni	1	450	0,4
	2	500	2,0
	3	1600	10

содержание компонент титана и алюминия при этом составляет: 11% – Ti^{1+} , 76% – Ti^{2+} , 12% – Ti^{3+} , 1% – Ti^{4+} ; 38% – Al^{1+} , 51 % – Al^{2+} , 11% – Al^{3+} . Энергетический состав пучка при имплантации титаном представлен компонентами с энергиями 20, 40, 60, 80 кэВ (при ускоряющем напряжении 20 кВ), а при имплантации алюминием – 40, 80 и 120 кэВ (ускоряющее напряжение 40 кВ). Время имплантации для титана составило 120 мин, а для алюминия – 20 мин. Доля α_i вкладов статистического и диффузионного механизмов установлена путем моделирования и составляет для системы Ti-Ni: 1) статистические – 0,58 (режим 1); 0,50 (режим 2); 0,42 (режим 3, 4). 2) диффузионные – 0,42 (режим 1); 0,50 (режим 2); 0,58 (режим 3, 4); для системы Al-Ni: 1) статистические – 0,95 (режим 1); 0,15 (режим 2); 0,4 (режим 3). 2) диффузионные – 0,05 (режим 1); 0,85 (режим 2); 0,6 (режим 3).

Результаты моделирования в рамках представленного во второй главе алгоритма приведены на рис. 1 и рис. 2 для всех режимов облучения. Теоретические кривые относительно хорошо согласуются с экспери-

ментальными данными. На рис. 1 г представлены теоретические расчеты с учетом только механизмов радиационно-стимулированной диффузии (кривая 3). Как видно, учет только диффузионных механизмов не позволяет описать распределение примеси вблизи поверхности. Путем моделирования установлено, что вклад диффузионных процессов в распределение имплантируемых частиц по глубине образцов увеличивается с ростом дозы и температуры мишени. При облучении никелевых образцов ионами титана с дозой $\sim 10^{19}$ ион/см² вклад диффузионных процессов несколько снижается, что может быть связано с протеканием интенсивных процессов распыления поверхности. Таким образом, модель позволяет описать наличие широких максимумов, глубокое проникновение примеси и достичь хорошего качественного и в отдельных случаях количественного согласия теории с экспериментом.

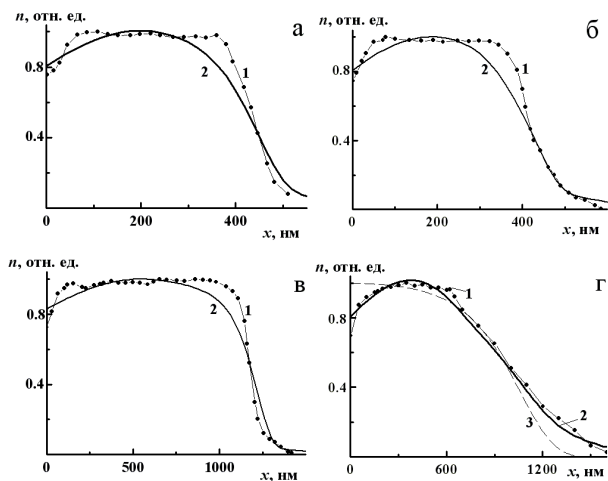


Рис.1. Экспериментальные (1) и теоретические (2) концентрационные профили ионов титана в никеле для режимов: а – 1, б – 2; в – 3, г – 4.

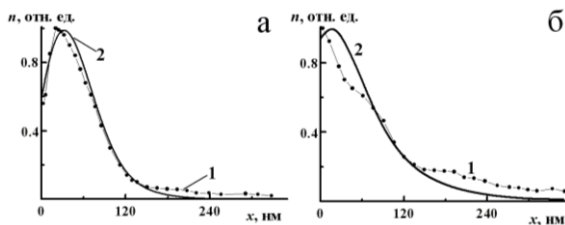


Рис.2. Экспериментальные (1) и теоретические (2) концентрационные профили ионов алюминия в никеле для режимов: а – 1, б – 2; в – 3.

связана с осаждением алюминиевой плазмы на

Поверхности
Параметры
моделирования для
никелевых образцов
приведены в табл. 2.
При расчетах ис-
пользованы значения
пространственных мо-
ментов из работы для
соответствующих
значений энергии
ионов. Коэффициент
усиления диффузии за
счет вакансий был
выбран $d_v=100$. Коэф-
фициент распыления S
рассчитывался по из-
вестной формуле Зиг-
мунда для каждой
компоненты энергии

ионов в пучке.

Экспериментальные
результаты при им-
плантации титана
марки ВТ1-0 ионами
алюминия приведены
в работах.

Специфическая осо-
бенность режимов
облучения в указан-
ных экспериментах
поверхности мишени

в промежутках между воздействием частотно-импульсным пучком ускоренных ионов. Одновременно с этим атомы кислорода, углерода и азота из остаточной атмосферы вакуумной системы тоже осаждаются и перемешиваются в поверхностных слоях ионным пучком и вместе с частицами осажденного алюминия в виде атомов отдачи внедряются вглубь модифицируемого материала. При таких условиях облучения содержание титана в пленке близко к нулю. Режимы имплантации представлены в таблице 3.

Таблица 2

Модельные параметры для описания концентрационных профилей титана и алюминия в никеле

Параметры	Система	Режим	Энергия ионов, кэВ				
			20	40	60	80	120
Коэффициент распыления S , атом/ион	Ti-Ni	1-4	1,31	1,86	2,72	2,61	
	Al-Ni	1,2		4,02		5,65	6,89
		3		6,1		7,5	8,4
Диффузионная длина дефектов L_d , мкм	Ti-Ni	1	3,7	4,75	8,85	9,16	
		2		4,63	5,31	6,87	
		3	7,55	8,38	8,85	10,31	
		4	9,84	9,88	9,91		
	Al-Ni	1-3		0,8		1,2	1,4
	Коэффициент термической диффузии D_p , 10^{-13} см ² /с	Ti-Ni	1	0,85	0,9	1,0	1,3
2			0,9	1,25	1,3	1,35	
3,4			6,9	7,25	7,35	7,75	
Al-Ni		1		0,3		0,5	0,6
		2		0,4		0,6	0,7
		3		1,2		1,6	1,7

Из анализа экспериментальных данных следует, что примерно через 8-10 минут облучения толщина пленки превышает проективный пробег ионов, соответствующий средней энергии (40 кэВ) частиц в пучке. При дальнейшем увеличении времени облучения (до 20 мин) ионы алюминия даже с максимальной энергией 60 кэВ в модели статистического распределения не способны проникнуть в мишень через пленку. Поэтому можно предположить, что глубинные концентрационные профили алюминия формируются в течение первых минут имплантации полиэнергетическим пучком. В это время на результирующий профиль оказывают

Таблица 3

Условия имплантации ионами алюминия образцов титана марки ВТ1-0

Режим	Доза облучения Φ , 10^{18} ион/см ²	Толщина пленки, нм	Время имплантации, мин
1	0,22	50	12
2	0,62	100	35
3	1,1	180	60
4	2,2	400	125

влияние, по-видимому, такие процессы, как распыление поверхности пленки,

радиационно-стимулированная и термическая диффузия, а также другие эффекты с различной степенью интенсивности. Формирование концентрационных профилей в титановой матрице в этом случае осуществляется преимущественно за счет возникающих атомов отдачи между исходным образцом и растущей пленкой, а также термической диффузии.

Энергетический состав пучка алюминия при ускоряющем напряжении 20 кВ соответствует энергиям 20, 40, 60 кэВ. Для анализа концентрационных профилей используем предложенную модель, которая учитывает имплантацию через растущую пленку

на поверхности мишени.

Профиль в такой системе определяется выражением (11). При теоретическом описании пред-полагалось, что пучок ионов падает перпендикулярно поверхности исходного образца вдоль оси x , а пленка равномерно растет в противоположном направлении.

Вклад статистического распределения $n_s(x, t)$ описывается функцией Пирсона - IV типа.

Таблица 4
Вклады механизмов в формирование концентрационных профилей алюминия в титане

Слой	Режим	Механизмы	
		статистические (включая атомы отдачи)	Диффузионные (включая атомы отдачи)
Пленка	1	0,20	0,80
	2	0,15	0,85
	3	0,10	0,90
	4	0,08	0,92
Подложка	1	0,25	0,75
	2	0,17	0,83
	3	0,08	0,92
	4	0,04	0,96

Вклад атомов отдачи $n_r(x, t)$ в формирование профилей оценивается по алгоритму работы. Доля α_i вкладов указанных механизмов установлена путем моделирования и представлена в таблице 4.

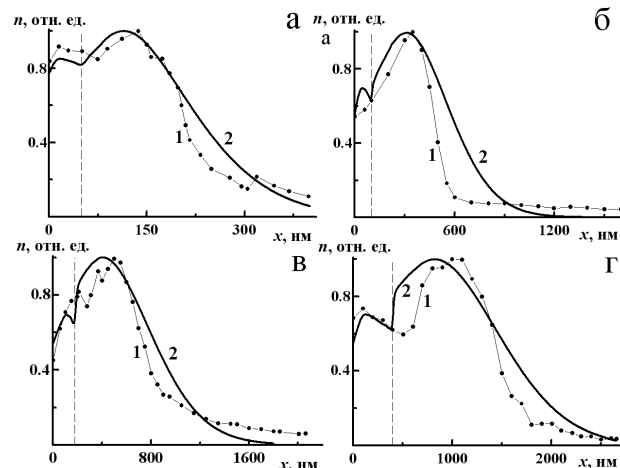


Рис.3. Экспериментальные (1) и теоретические (2) концентрационные профили ионов алюминия для режимов облучения титана: а – 1, б – 2, в – 3, г – 4. Нормировочный множитель β соответствует: а – 0,6; б – 0,65, в – 0,67, г – 0,76.

Теоретические кривые сопоставляются с экспериментальными данными для всех режимов на рис. 3. Граница области "пленка-подложка" обозначена вертикальной пунктирной линией. В модели без учета растущей пленки удается вос-

произвести концентрационные кривые только на больших глубинах, на поверхности и на границе раздела качественного согласия получить не удастся.

Таким образом, теоретические расчеты позволяют утверждать, что глубинные концентрационные профили алюминия в титане, имплантированного импульсно-периодическим пучком источника "Радуга-5" через растущую "газо-металлическую" пленку, формируются путем статистического распределения внедряемых ионов на первоначальном этапе (в течение ~25 минут) и последующего термического перераспределения в оставшееся время. Варьируемым параметром при моделировании являлся коэффициент термической диффузии D_p , который подбирался из требования лучшего согласия теории с экспериментом. Моменты пространственных распределений представлены в таблице 5 для каждой компоненты энергии ионов алюминия. Для описания прохождения частиц в "газо-металлической" пленке моменты рассчитывались как для многокомпонентной среды.

В четвертой главе «Анализ формирования концентрационных профилей внедряемых ионов при имплантации пучком источника "Диана-2" металлических материалов с различным структурным состоянием» анализируются концентрационные профили алюминия и никеля при облучении титана марки ВТ1-0 с различным структурным состоянием. Содержание компонент никеля в пучке составляет: 30% – Ni^{1+} , 64% – Ni^{2+} , 6% – Ni^{3+} со значениями энергий ионов как никеля, так и алюминия 60, 120, 180 кэВ при ускоряющем напряжении 60 кВ. Температура образцов в процессе имплантации не превышала 450 К. Время имплантации составляло 80 минут. Характерная особенность мелкозернистых (со средним размером зерен < 15 мкм) и наноструктурированных материалов – большая протяженность внутренних поверхностей раздела. С уменьшением размеров зерен происходит облегченная диффузия легирующей примеси по границам зерен материала. Коэффициенты зернограницной диффузии в наноструктурированных металлах и сплавах на несколько порядков превышают соответствующие коэффициенты в крупнозернистых. Малый размер зерен, возможность перекрытия друг

Таблица 5

**Модельные параметры для описания
концентрационных профилей алюминия в
титане**

Параметры	Ре- жим	Энергия ионов алю- миния, кэВ		
		20	40	60
Проективный пробег R_p в пленке, нм	1-4	11,32	22,37	33,46
Страгглинг ΔR_p в пленке, нм	1-4	7,73	14,78	19,98
Коэффициент асимметрии Sk	1-4	0,23	0,11	-0,14
Коэффициент термической диффузии D_p $10^{-13} \text{ см}^2/\text{с}$	1	0,85	0,9	1,0
	2	0,9	1,25	1,3
	3	6,9	7,25	7,35
	4	6,9	7,25	7,35

с другим диффузионных потоков атомов от соседних границ, релаксация и миграция границ зерен в ходе диффузионных отжигов и, сверх того, неоднородность структуры объема зерен значительно влияют на кинетику

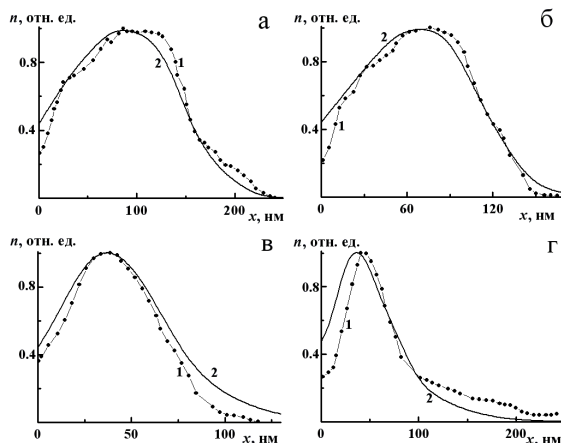


Рис.4. Экспериментальные (1) и теоретические (2) концентрационные профили ионов алюминия в титане в зависимости от размеров зерен d : а – 0,1 мкм; б – 1,4 мкм; в – 15 мкм; г – 38 мкм.

высокой, то при теоретическом анализе влияние термических эффектов не учитывалось.

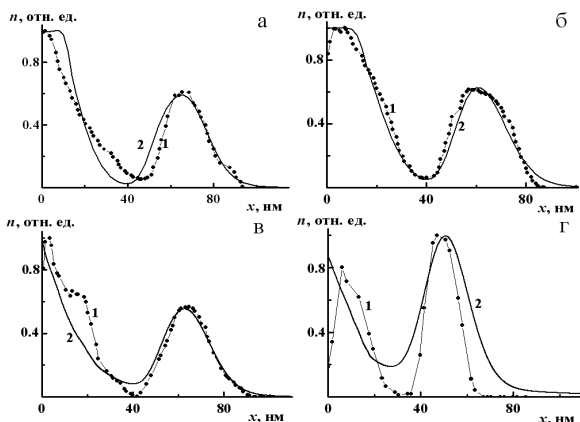


Рис.5. Экспериментальные (1) и теоретические (2) концентрационные профили ионов никеля в титане в зависимости от размеров зерен d : а – 0,1 мкм; б – 1,4 мкм; в – 15 мкм; г – 38 мкм.

диффузионных процессов. Поэтому доминирующая роль состояния границ зерен данного класса материалов наблюдается при размерах зерен порядка 0,1 – 2 мкм.

Сформулированная выше модель формирования концентрационных профилей при высокодозовой имплантации была применена и в этом случае.

Поскольку при облучении температура образцов поддерживалась относительно не-

Доля α_i вкладов механизмов установлена путем моделирования и составляет для системы Al-Ti: 1) статистические – 0,44 (образцы 1-4); 2) диффузионные – 0,56 (образец 1-4); для системы Ni-Ti: 1) статистические – 0,44 (образцы 1-3); 0,63 (режим 4); 2) диффузионные – 0,56 (образцы 1-3); 0,37 (образец 4).

Для мелкозернистых образцов титана (с размером зерен 0,1 и 1,4 мкм) при облучении

ионами алюминия вклад диффузионных процессов учитывали по формуле (7). При описании концентрационных профилей никеля и алюминия в крупнозернистых образцах титана (со средним размером зерен ≥ 15 мкм) исходили из краевой задачи (15)-(16). Диффузия в объеме зерна для соответствующих образцов является одним из доминирующих механизмов.

Результирующие концентрационные профили с учетом вкладов статистических и диффузионных процессов представлены при имплантации алюминия на рис. 4 и никеля - на рис.5. Из сопоставления результатов следует, что качественно описать положение максимума на глубине для образцов никеля позволяет учет статистических процессов. Анализ экспериментальных данных при имплантации никеля показал, что положение глубинного максимума

Таблица 9

Модельные параметры для описания концентрационных профилей алюминия и никеля в образцах титана

Параметры	Образец	Энергия ионов алюминия, кэВ			Энергия ионов никеля, кэВ		
		60	120	180	60	120	180
Проективный пробег R_p , нм	1	53,3	108,2	163,6	57,1	69,3	76,9
	2					65,3	
	3					68,3	
	4				28,3	52,1	
Страгглинг ΔR_p , нм	1	26,1	44,4	59,3	7,1	9,7	31,6
	2						
	3						
	4				13,3	22,7	
Коэффициент асимметрии Sk	1	0,17	-0,23	-0,40	0,41	0,27	0,17
	2						
	3						
	4	0	0,23	0,40			
Диффузионная длина дефектов L_d , мкм	1	0,28	0,28	0,28	0,57	0,69	0,77
	2	0,125	0,125	0,125		0,78	0,92
Коэффициент распыления S , атом/ион	1	1,5	1,5	1,5	2,59	3,65	4,56
	2						
	3	10,5	15	20			
	4						
Коэффициент объемной диффузии D , 10^{-15} см ² /с	3	1,5	1,7	1,9	2,7	2,8	2,9
	4				2,9	3,0	3,1
Коэффициент термической диффузии D_T , 10^{-15} см ² /с	1	1,8	1,8	1,8	1,3	1,3	1,3
	2	1,6	1,6	1,6	1,2	1,2	1,2

соответствует табличным значениям пробегов для образца с размерами зерен 38

мкм. Для мелкозернистых образцов максимумы расположены на относительно большей глубине по сравнению с крупнозернистыми. По-видимому, это связано с тем, что проективные пробеги ионов и страгглинг зависят от зеренной структуры мишени. По результатам моделирования установлено, что наилучшее согласие теории с экспериментом достигается при выборе модельных пробегов и страгглингов, отличающихся от табличных на 25-30%. В образцах мелкозернистого титана в формирование профилей внедряемых ионов по глубине мишени на втором этапе существенный вклад вносит радиационно-стимулированная диффузия (в том числе и зернограничная), а в крупнозернистых – диффузия в объеме зерна. В качестве варьируемых параметров, которые представлены в таблице 9, были выбраны коэффициент объемной диффузии и диффузионная длина дефектов. Коэффициент распыления S рассчитывался по формуле Зигмунда для каждой компоненты энергии ионов в пучке. Коэффициент усиления диффузии за счет вакансий γ принят равным $d_v=40$.

Предложенная модель была применена также для анализа наблюдаемых концентрационных профилей при имплантации крупнозернистых материалов "тяжелыми" (порядковый номер которых > 60) элементами – ионами вольфрама. Отмечено качественное согласие теоретических и экспериментальных кривых.

В заключении сформулированы основные результаты и выводы диссертационной работы, которые заключаются в следующем:

1. Предложена физико-математическая модель для описания формирования концентрационных профилей внедряемых ионов в металлических материалах при высоких дозах имплантации частотно-импульсными пучками вакуумно-дуговых источников, в которой учитывается вклад статистических и диффузионных процессов на различных временных этапах облучения.
2. Путем моделирования показано, что наблюдаемые широкие глубинные максимумы концентрационных профилей внедренных частиц при высокодозовой имплантации пучками вакуумно-дуговых источников, таких как "Радуга-5", "Диана-2", обусловлены преимущественно статистическим распределением в приповерхностном слое мишени ионов с разными начальными энергиями.
3. Различные диффузионные процессы, интенсивно проявляющиеся на заключительном этапе имплантации, приводят к дополнительному уширению глубинных максимумов у концентрационных профилей и в зависимости от комбинации мишень-ион к формированию дополнительного максимума у поверхности.
4. В результате моделирования установлено, что в мелкозернистых образцах титана на этапе интенсивного диффузионного перераспределения примеси в формирование профилей внедряемых ионов по глубине существенный вклад вносит радиационно-стимулированная диффузия, в том числе и зернограничная, а в крупнозернистых – диффузия в объеме зерна.

5. При имплантации через растущую "газо-металлическую" пленку, обусловленную осаждением на поверхность мишени алюминиевой плазмы в промежутках между импульсами пучка, концентрационные профили внедряемых ионов как в пленке, так и в подложке формируются путем статистических, термодиффузионных процессов и распределения атомов отдачи. Последние ответственны за неоднородный характер поведения концентрационных профилей примеси вблизи границы раздела пленки с подложкой.

Основные результаты работы опубликованы в следующих научных трудах:

1. **Мамытбеков, Ж.К.** Роль радиационно-термических процессов в формировании концентрационных полей в металлах при воздействии полиэнергетическими ионными пучками [Текст] / Г.А. Вершинин, Г.И. Геринг, Ж.К. Мамытбеков, С.Н. Поворознюк // Труды VI международной научной конференции «Радиационно-термические эффекты и процессы в неорганических материалах». - Томск, Россия. 2008. - С. 798-801.

2. **Мамытбеков, Ж.К.** Интерпретация наблюдаемых закономерностей массопереноса в металлических системах при воздействии полиэнергетическими ионными пучками [Текст] / Ж.К. Мамытбеков // Тезисы докладов IV Всероссийской научной молодежной конференции «Под знаком Σ ». -Омск, Россия. 2007. -С. 312-313.

3. **Mamytbekov, Zh.K.** Analysis mass transfer in metallic system at influence flow of the charged particles of ion source «Raduga-5» [Text] / Zh.K. Mamytbekov // V International Conference of students and young scientists «Prospects of fundamental sciences development». -Tomsk, Russia. 2008. -P. 30-32.

4. **Мамытбеков, Ж.К.** Интерпретация наблюдаемых закономерностей массопереноса в металлических системах при воздействии полиэнергетическими ионными пучками [Текст] / М.М. Кидибаев, Ж.К. Мамытбеков, Г.А. Вершинин // Физика. –Бишкек: Ин-т физико-технических проблем и материаловедения НАН КР, 2010. -№1. -С. 40-45.

5. **Мамытбеков, Ж.К.** Вывод уровня коэффициента распределения примеси на границе раздела фаз с учетом пространственной-временной нелокальности при высокоскоростной перекристаллизации бинарных сплавов [Текст] / Ж.К. Мамытбеков, М.М. Кидибаев, Г.А. Вершинин // Известия НАН КР. 2011. -№1. -С. 28-31.

6. **Мамытбеков, Ж.К.** Формирование микроструктуры при кристаллизации из расплава, образованного высокоэнергетическими импульсными потоками заряженных частиц [Текст] / Ж.К. Мамытбеков // Физика. –Бишкек: Ин-т физико-технических проблем и материаловедения НАН КР, 2011. - №1. -С. 29-33.

7. **Мамытбеков, Ж.К.** Локально-неравновесный массоперенос в бинарных системах при воздействии концентрационными потоками энергии [Текст] / Ж.К. Мамытбеков, М.М. Кидибаев, Г.А. Вершинин // Известия НАН КР. 2012. - №2. -С. 114-121.

8. **Мамытбеков, Ж.К.** Структурно-фазовое состояние поверхностных слоев никеля, имплантированных ионами никеля [Текст] / Ж.К. Мамытбеков // Известия НАН КР. 2013. -№1. -С. 41-45.

9. **Мамытбеков, Ж.К.** Изменение структурно-фазового состояния системы железо-кремний при воздействии концентрационными потоками энергии [Текст] / Ж.К. Мамытбеков // Наука и новые технологии. 2013. -№1. -С. 5-7.

10. **Мамытбеков, Ж.К.** Формирование концентрационных профилей имплантируемых ионов в титане и никеле в зависимости от структуры образцов и режимов облучения [Текст] / М.М. Кидибаев, Ж.К. Мамытбеков // Материалы XII международной научной конференции «Физика твердого тела». -Астана, Казахстан. 2014. - С. 122-126.

11. **Мамытбеков, Ж.К.** Влияние размера зерен поликристаллического состояния металла в формировании концентрационных профилей [Текст] / М.М. Кидибаев, Ж.К. Мамытбеков // Труды XXIV международной конференции «Радиационная физика твердого тела». -Севастополь, Россия. 2014. -С. 135-145.

«Полиэнергетикалык иондук шоолалардын тутамы менен таасир кылганда металл материалдарындагы массаташымалдоо процесстери»

темасындагы 01.04.07 конденсирленген абалдын физикасы адистиги боюнча физика-математика илимдеринин кандидаты окумуштуулук даражасына көрсөтүлгөн диссертациясынын

РЕЗЮМЕСИ

Урунттуу сөздөр: Массаташымалдоо, бийик-дозалык иондук имплантация (БИИ), вакуумдук жаа булагы, синдирилүүчү бөлүкчөлөрдүн концентрациялык профили, «Радуга-5» жана «Диана» тездеткичтери, диффузия процесстери, полиэнергетикалык иондук шоолалардын тутуму.

Изилдөө объекттери: Түрдүү тартипте шоолаландырылган Ti-Ni, Al-Ni системасындагы синдирилүүчү бөлүкчөлөрдүн концентрациялык профили.

Иштин максаты: Вакуумдук жаа булагынын импульстук-жыштыгынын полиэнергетикалык шоолаларынын тутуму менен БИИге таасир көрсөткөндөгү түрдүү структуралык абалдагы металл материалдарынын бет жагындагы синдирилүүчү бөлүкчөлөрдүн концентрациялык профилдеринин түзүлүшүн теориялык анализдөө.

Изилдөө методдору: БИИнин таасири менен металл материалдарына сиңирилүүчү иондордун концентарциялык профилдеринин түзүлүшүнүн физика-математикалык модели иштелип чыккан. Бул учурда шоолалантуунун ар түрдүү убактагы этаптарындагы статистикалык жана диффузиялык процесстердин салымы эске алынат.

Илимий жаңылыгы: Бул иште жаа булагынын импульстук-жыштыгынын полиэнергетикалык иондор тутуму менен шоолалантканда металл

материалдарындагы концентрациялык профилдердин түзүлүшүнүн материалдын үлгүсүнө синдирилүүчү бөлүкчөлөрдүн дозасынан, ошондой эле бутанын структуралык абалынан көз каранды экендигинин мыйзамченемдүүлүгүн сүрөттөгө мүмкүнчүлүк берүүчү жалпыланган теориялык модель биринчи болуп сунушталган. Иштелип чыккан моделдин негизинде жүргүзүлгөн изилдөөлөр оор бөлүкчөлөрдүн жогорку интенсивдүү үзгүлтүксүз агыны менен таасир кылганда катуу телолордогу (анын ичинде жарым өткөргүч материалдары) массаташымалдын механизмдери жөнүндөгү пикирлерди тереңдетүүгө түрткү берет. Ошондой эле БИИ процессиндеги нерселердин абалын изилдөөнүн методдорун кошумча өнүктүрүүнү стимулдаштырат.

Колдонуу тармагы: Жүргүзүлгөн теориялык изилдөөлөрдүн натыйжасы металл материалдарынын эксплуатациялык касиеттерин сапаттуу прогноздоого мүмкүндүк берет жана бинардык системалардагы массаташымал процесстеринин механизмдерин терең түшүнүү үчүн колдонсо болот.

РЕЗЮМЕ

диссертации Мамытбекова Жайлоо Кыдыровича на тему:

«Процессы массопереноса в металлических материалах при воздействии полиэнергетическими ионными пучками»

на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07-физика конденсированного состояния

Ключевые слова: Массоперенос, высоко-дозовая ионная имплантация (ВИИ), вакуумно-дуговой источник, концентрационные профили внедряемых частиц, ускорители «Радуга-5» и «Диана», процессы диффузии, полиэнергетический ионный пучок.

Объекты исследования: Концентрационные профили внедряемых частиц системы Ti-Ni, Al-Ni при разных режимах облучения.

Цель работы: Теоретический анализ формирования концентрационных профилей внедряемых ионов в приповерхностную область металлических материалов различного структурного состояния при воздействии ВИИ частотно-импульсными полиэнергетическими пучками вакуумно-дугового источника.

Методы исследования: Разработана физико-математическая модель формирования концентрационных профилей внедряемых ионов в металлические материалы при воздействии ВИИ, в котором учитывается вклад статистических и диффузионных процессов на различных временных этапах облучения.

Научная новизна: В работе впервые предложена обобщенная теоретическая модель, позволяющая описать закономерности формирования концентрационных профилей в металлических материалах в зависимости от набираемой дозы легируемых частиц материалом подложки при облучении частотно-импульсным полиэнергетическим ионным пучком, а также

структурного состояния мишени. Проведённые исследования на основе разработанной модели способствуют углублению представлений о механизмах массопереноса в твердых телах (в т.ч. полупроводниковых материалах) при воздействии на них высокоинтенсивными потоками тяжелых частиц, а также стимулируют дополнительное развитие методов исследования состояния вещества в процессе ВИИ.

Область применения: Результаты проведенных теоретических исследований позволит качественно прогнозировать эксплуатационные свойства металлических материалов и могут быть использованы для глубокого понимания механизмов процессы массопереноса в бинарных системах.

SUMMARY

of the research dissertation of Mamytbekov Zhayloo Kydyrovich on
«Mass transfer processes in metallic material by polyenergetic ion beams influence»

*for competition of a scientific degree of candidate of physical-mathematical sciences
Speciality: 01.04.07-physics of condensed state*

Key words: Mass transfer, high-dose of ion implantation (HII), vacuum-arc source, concentration profiles of assimilated parts, accelerative machines “Raduga-5” and “Diana”, diffusion process, polyenergetic ion beam.

Objects of research: Concentration profiles of assimilated parts of Ti-Ni, Al-Ni system by various regime radiation treatment.

The research objective: Theoretical study of concentration profiles forming of assimilated ions into metallic material surficial region of the various structural conditions by influence HII pulse-frequency of polychromatic beams of the vacuum-arc source.

Research methods: It is worked out by physic-mathematical models of concentration profiles forming of the assimilated ions into metallic material by influence HII, wherein it is taken into consideration statistical and diffusion process contribution on various temporary stages of radiation treatment.

Scientific novelty: For the first time at the work it has been suggested the generalized theoretical model, allowing describing regularities of the concentration profiles forming in metallic material depending on accumulate dose of alloy parts by the backing material under irradiation by pulse-frequency polyenergetic ion beam, as well as target structural condition. The done research on the basis of worked out model contribute to view deepening about mass transfer mechanisms in solid body (including the semiconducting materials) by action on them with high-intensity stream of heavy particle, also

inspire additional development of substance matter condition research methods in the HII progress.

The field of application: The results done during theoretical research allow making qualitatively a forecast of metallic material service characteristics and they can be used for deep insight into process of mass transfer mechanisms in the binary systems.

Подписано к печати 19.01.2015 г.
Бумага офсет. Формат 60×84 ¹/₁₆
Объём 1,4 п.л. Тираж 100 экз

Отпечатано в типографии “Университет” КНУ им Ж. Баласагына
Г.Бишкек, просп. Манаса, 101
тел.: +996 (312) 32 31 75; 32 31 91