ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

**МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Перспективные материалы с иерархической структурой
для новых технологий и надежных конструкций»**

**X МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Химия нефти и газа»**

Томск

Издательский Дом ТГУ

2018

DOI: 10.17223/9785946217408/156

ЗЕРНОГРАНИЧНАЯ ДИФфуЗИЯ КРЕМНИЯ В НИКЕЛИД ТИТАНА ПРИ ВНЕШНЕМ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

¹Маслов А.Л., ^{1,2}Князева А.Г., ¹Крюкова О.Н., ¹Букрина Н.В.

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

²НИИ Томский политехнический университет, Томск, Россия

Никелид титана находит широкое применение как материал с эффектом памяти формы. При этом часто возникает проблема защиты поверхности изделия из TiNi, при одновременном сохранении его механических свойств. Одним из возможных способов решения такой проблемы может быть ионная имплантация [1]. Процессы, имеющие место при ионной обработке поверхности сложно исследовать непосредственно ввиду большой скорости процессов и малых пространственных масштабов. Несмотря на то, что в такой ситуации особенно актуально математическое моделирование, исследований такого рода относительно немного.

В настоящей работе поставлена задача исследования диффузии кремния из покрытия в образец из никелида титана под воздействием потока электронов. Особенностью данной работы является выделение индивидуальной границы зерна никелида титана.

Рис. 1. Иллюстрация к постановке задачи

Использована простая кинетическая схема вида «реагенты» – «продукт»:

Диффузия кремния в никелиде титана описывается двумерным уравнением

$$\rho_{Me} \frac{\partial y_{Si}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_k \rho_{Me} \frac{\partial y_{Si}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_k \rho_{Me} \frac{\partial y_{Si}}{\partial y} \right) - m_{Si} \varphi$$

где ρ_{Me} – плотность никелида титана, y_{Si} – концентрация кремния, D_k , $k = v, b$ – коэффициент диффузии, различный в границе зерна (D_b) и самом зерне (D_v), φ – скорость химической реакции (1), t – время, x, y – пространственные переменные. Кремний поступает в образец из поверхностного слоя, где его концентрация считается заданной. Считая, что скорость химической реакции описывается законом Аррениуса, а титан и никель в данной задаче эквивалентны с точки зрения кинетики, скорость химической реакции можно представить следующим образом:

$$\varphi = k_0 \exp \left(-\frac{E_a}{RT} \right) y_{Si} y_{Me}^2,$$

где k_0 – предэкспонент, E_a – энергия активации, R – газовая постоянная. Концентрация продукта реакции определяется из кинетического уравнения.

$$\rho_{Me} \frac{dy_p}{dt} = m_{Me} \varphi.$$

Концентрация оставшихся металлов рассчитывается по формуле

$$y_{Me} = 1 - y_{Si} - y_p.$$

Секция 3. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

Граничные условия имеют вид:

$$x = 0: \quad y_{Si} = y_{Si_0}, \quad x \rightarrow \infty: \quad \frac{\partial y_{Si}}{\partial x} = 0;$$

$$y = 0, \quad y = h_g + \Delta: \quad \frac{\partial y_{Si}}{\partial y} = 0.$$

В начальный момент времени в области, занятой никелидом титана, кремний отсутствует. Температура образца с покрытием изменяется за счет внешнего нагрева, тепловых эффектов химических реакций, и потерь тепла излучением по закону Стефана-Больцмана:

$$(C_{Si}\rho_{Si}h_A + C_{Me}\rho_{Me}h_B)\frac{\partial T}{\partial t} = q + \frac{2}{(h_g + \Delta)} \int_0^{h_D} \int_0^{(h_g + \Delta)/2} Q_{ch} \varphi dx dy - 2\sigma\varepsilon_{eff}(T^4 - T_0^4),$$

где h_g – полуширина зерна, Δ – полуширина границы зерен, h_A, h_B – толщина пленки кремния, толщина образца из никелида титана; h_D – ширина диффузионной зоны, где происходит химическая реакция. Решение поставленной задачи осуществлялось численно. Некоторые примеры расчетов показаны ниже, где принято $X=x/\Delta$; $Y=y/\Delta$.

Рис. 2. Распределения концентрации Si в сечениях (показаны пунктиром на рис. 1), а) – $y = h_g / 2$, б) – $x = h_a + h_g / 10$; 1 – $t = 10^{-8}$ с, 2 – $t = 2 \cdot 10^{-7}$ с, 3 – $t = 5 \cdot 10^{-7}$ с, 4 – $t = 10^{-6}$ с, 5 – $t = 2 \cdot 10^{-6}$ с, 6 – $t = 10^{-4}$ с. Плотность потока энергии $E = 5$ Дж/см²

Ввиду сильного различия в скорости межзеренной и объемной диффузии, вблизи границы зерна происходит быстрое накопление кремния, а наиболее интенсивное образование продукта имеет место в межзеренной границе вблизи покрытия.

Литература

1. Xuanyong Liu, Paul K.Chu, Chuanxian Ding. Surface modification of titanium, titanium alloys, and related materials for biomedical applications // Materials Science and Engineering: R: Reports. 2004. Vol. 47, № 3–4. P. 49–121.
2. Yu X., Shen J., Qu M., Zhong H., Zhang J., Zhang Y., Yan S., Zhang G., Zhang X., Le X. Distribution and evolution of thermal field formed by intense pulsed ion beam on thin metal target // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. 2015. Vol. 365. P. 225–229.
3. Asfandyar K., Knyazeva A. G.. Features of Difference Scheme for the Diffusion-Kinetic Problem of Ion Implantation with Intermetallic Phases Formation. // Key Engineering Materials. 2016. Vol. 685. P. 195–199.
4. Wu D., Liu C., Zhu X., Lei M. Numerical study on modification of ceramic coatings by high-intensity pulsed ion beam // Vacuum. 2009. Vol. 83. P. 198–200.