УДК 621.865.6

Костюк Г.И., Миргородская Е.В., Матвеев А.А.

# Оценка числа частиц в нанокластере в алюминиевом сплаве при действии ионов

Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «ХАИ»

На основе решения совместной задачи теплопроводности и термоупругости получены поля температур и температурных напряжений, в которых выделены зоны, где образуются наноструктуры (HC). Для алюминиевого сплава при действии большого числа различных ионов и их зарядов от 1 до 3 получены зависимости числа атомов в нанокластере от энергии. *Ключевые слова:* Наноструктура, температура, температурные напряжения, размер зерна, нанокластер, число частиц.

#### Введение

Благодаря малому удельному весу и достаточно высоким физикомеханическим характеристиками в авиационно-космической технике широко применяются алюминиевые сплавы. Но из-за относительно низкой микротвердости они не позволяют обеспечить требуемую износостойкость. Применение же традиционных плазменно-ионных покрытий может в некоторой степени решить проблему, но координального улучшения свойств достичь не получается. Создание наноструктурных слоев в алюминиевых сплавах позволит значительно увеличить микротвердость поверхностного слоя и в тоже время снизить модуль упругости, что позволит деталям работать успешно при ударных и знакопеременных нагрузках. Все это говорит о важности рассматриваемой задачи создания наноструктур в алюминиевых сплавах.

Для получения нанокристаллических структур на поверхности, как известно, необходимо создание определенных температур и скорости ее нарастания, давлений в нужном объеме и наличие атома металла, вокруг которого формируется наноструктура-катализатора.

Как показано в работах [1–10], действие заряженных частиц на конструкционные материалы приводит к появлению в материале на глубине довольно высоких температур при действии индивидуальных ионов разных сортов, и в зоне теплового воздействия есть вероятность появления температурных напряжений значительной величины, что подтверждает возможность появления локальных зон, где достигаются условия возникновения наноструктур (HC).

Для того чтобы такие условия реализовались в значительном объеме (действие высоких температур и напряжений), также необходимо обеспечить максимальное заполнение поля температур зоной с повышенными температурами и в то же время сохранить зоны с максимальными градиентами температур, когда реализуются высокие значения температурных напряжений. Очевидно, простым увеличением плотностей ионного тока этого достичь будет нельзя, так как с ростом плотности тока градиенты температур в зоне действия соседних частиц снижаются, а следовательно, снижаются величины температурных напряжений и условия образования наноструктур не выполняются.

Работа выполнялась в рамках программы Министерства образования и науки Украины «Новые и ресурсосберегающие технологии в энергетике, промыш-

ленности и агропромышленном комплексе» (подсекция 13 «Аэрокосмическая техника и транспорт») и по темам: «Создание физико-технических основ повышения качества материалов аэрокосмических конструкций» и «Разработка технологических основ интегрированных технологий плазменно-ионной обработки деталей аэрокосмической техники», «Концепция создания наноструктур, нано– и традиционных покрытий с учетом влияния адгезии на эффектность и работоспособность деталей АТ, АД и РИ», хоздоговорных работ и договоров о сотрудничестве.

# 1. Состояние вопроса

За счет действия ионов различных сортов, энергий, зарядности, плотностей токов есть возможность сохранения достаточных температур (за счет соответствующего распределения температур температурного поля по глубине обеспечивается высокая средняя температура), в то же время, выбирая расположение поля по глубине (варьируя энергии, зарядности и сорта частиц), обеспечиваем высокие градиенты температур. Следовательно, в довольно большом объеме материала будут действовать значительные по величине напряжения, т.е. будут выполняться условия для получения нанокристаллических структур.

Поэтому, несколько модернизировав модель действия индивидуальных частиц на конструкционные материалы [1–10], получим модель, учитывающую необходимые факторы (ранее, в модели не учитывались зарядность иона и характер их сложного взаимовлияния в довольно большом рассматриваемом объеме, а также энергия образования HC и др.).

## 2. Постановка задачи исследования

Приняв в качестве критериев получения наноструктур требуемый диапазон температур, скоростей нарастания температур, давлений (температурных напряжений) и наличие катализатора [1], можем рассмотреть возможность получения наноструктур в зависимости от физических и технологических параметров потоков при обработке, для чего проанализируем ряд теоретических и технических задач (рис. 1):

I. Модель взаимодействия потоков ионов разных сортов, энергий, зарядов и плотностей токов, которая позволяет:

1) получить диапазон глубин, на которых вероятно получение наноструктур для каждого из потоков отдельно, и оценить действие всех потоков по глубине;

2) рассчитать распределение полей температур и температурных напряжений в объеме детали;

3) определить размер зерна;

4) организовать подачу частиц таким образом, чтобы максимальный объем детали был заполнен полями температур и температурных напряжений (теоретически и технически);

5) теоретически определить количество частиц в нанокластере, количество нанокластеров, образующихся в единицу времени.

II. Теория взаимодействия нанокластеров (нанокристаллитов), их размера, энергетической связи между ними и физико-механические характеристики наноструктур, которая позволяет:

1) рассчитать размер нанокластеров, энергии связи с соседними нанокластерами (зернами) и физико-механические характеристики наноматериала; 2) получить теоретически зависимости физико-механических характеристик НС от размера зерна, характера их расположения и взаимодействия, полноты заполнения объема наноструктурами.

III. Экспериментально-теоретическая модель связи размера зерна с ФМХ:

- 1) микротвердость;
- 2) коэффициент трения;
- 3) предел текучести;
- 4) предел прочности;
- 5) модуль упругости;
- 6) износостойкость;
- 7) стойкость режущего инструмента (РИ).

IV Адгезионное взаимодействие нанопокрытия с основным материалом детали (теория).

V Техническое решение: обеспечение старта потоков ионов разных сортов, энергий, зарядов и плотностей токов.

Решение этих задач позволит найти физические и технологические параметры потоков ионов, которые обеспечат требуемые физико-механические характеристики наноструктур и наноматериалов.

Теперь рассмотрим реальные возможности реализации этих задач.

## 3. Модель действия индивидуального иона на конструкционный материал

Взаимодействие потоков заряженных частиц и плазменных потоков с конструкционными материалами связано с реализацией широкого круга процессов: столкновительных, теплофизических, термомеханических термоусталостных, диффузионных, термохимических и плазмохимических, но в настоящее время отсутствуют работы, учитывающие эти факторы и тем более их взаимосвязь. Все эти процессы влияют как на характер теплообмена в объеме мишени, так и на поверхности, поэтому учет этих процессов необходим и в балансе энергии в элементарном объеме металлической мишени, и в теплообмене на поверхности мишени, т.е. в граничных условиях.

Задача подробно описана в нашей работе [1].

# 3.1. Баланс тепла в элементарном объеме детали

Изменение количества тепла в единичном объеме (первое слагаемое в левой части равенства) реализуется за счет: перемещения потока частиц вдоль обрабатываемой поверхности или перемещения мишени относительно потока плазмы со скоростью Vn (второе слагаемое), теплофизических процессов: влияние на теплообмен конечной скорости распространения тепла (третье слагаемое), теплопроводности (первое слагаемое справа), смещения фронта испарения (второе слагаемое), плавления (третье слагаемое); столкновительных процессов: объемного источника тепла за счет действия частицы (четвертое слагаемое), затраты энергии на смещение атомов (пятое слагаемое); термоупругих, термопластических и термоусталостных процессов, определяющих энергию деформирования материала элементарного объема (шестое слагаемое); диффузионных процессов, определяющих теплоперенос диффундирующим материалом (седьмое слагаемое); термохимических процессов, связанных с реализацией химических реакций между материалом мишени и бомбардирующими ионами или же между компонентами сплавов и композитных материалов и ленц-джоулев нагрев (восьмое слагаемое) за счет растекания ионного тока и энергия образования кристалла (девятое слагаемое).

$$C[T] \cdot \gamma[T] \frac{dT(x, y, z, t)}{dt} + C[T] \cdot \gamma[T] \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial y} \cdot V_n + C[T] \cdot \gamma[T] \cdot \tau_p \frac{d^2 T(x, y, z, t)}{dt^2} = \nabla \lambda [T \cdot \nabla T](x, y, z, t) + C[T] \cdot \gamma[T] \cdot V_{TM} \frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial x} - A \cdot L_v \cdot \gamma[T] \frac{dV_v}{dt} + B \cdot j_{i,e} \cdot \mu_{i,e} \frac{\partial E_{i,e}}{\partial x} - E_{,,M} \cdot S_{,,M} \frac{j_{i,e}}{\lambda_{cpi,e}} \pm D \frac{dW(x, y, z, t)}{dt} \pm m_a \cdot C_a[T_a] \frac{dn_a}{dt} (T_a - T(x, y, z, t)) \pm E_{T,x.} (n_A, n_B, T, t_{e}) \frac{dn_{A(B)}}{dt} L_{T,x,P} + \rho[T] \cdot j^2 (x, y, z, t) + E_{kp}$$

$$(1)$$

где *C[T]* и *γ*[*T*] – теплоемкость и плотность материала мишени, соответствующие температуре Т;

*т*<sub>р</sub> – время релаксации температуры на один Кельвин;

*V<sub>n</sub>* – скорость перемещения ионного потока или мишени относительно него; *L<sub>пл</sub>* и *L<sub>т.х.P</sub>* – удельные теплота плавления и термохимической реакции;

*V*<sub>ф</sub>[*T*] – скорость смещения фронта испарения;

*V<sub>пл</sub>* – объем расплавленного металла;

*j*<sub>*i*,e</sub> – плотность тока ионов, электронов или плазменного потока;

*µ*<sub>*i*,*e*</sub> – коэффициент аккомодации иона и электрона;

$$\partial E_{i}$$

*i* - *i*,*e i* - потери энергии иона и электрона на глубине мишени;
 *i x*

*Е*<sub>см</sub> – энергия смещения атомов;

**S**<sub>см</sub> – число смещенных атомов в результате действия иона или электрона;

**λ**<sub>*cp*</sub> *i*,*e* – средняя линейная длина свободного пробега ионов и электронов в материале мишени;

*W*(*x*, *y*, *z*, *t*) – энергия деформирования единичного объема мишени;

*m*<sub>a</sub> – масса диффундирующего атома;

 $C_a[T_a]$  – теплоемкость диффундирующего материала при температуре  $T_a$ ;

 $P_{T.X}(n_A, n_B, T, t_{B3})$  — вероятность термохимической реакции, зависящая от концентрации реагентов  $n_A$  и  $n_B$ , температуры T и времени взаимодействия  $t_{B3}$ ;

*n*<sub>A</sub> и *n*<sub>B</sub> – концентрация реагента, определяющего возможность реакции;

*р***[***T***]** – удельное электрическое сопротивление при температуре *T*;

j(x, y, z, t) – плотность тока с учетом растекания тока;

*Е<sub>кр</sub>* – удельная энергия образования кристалла.

Определить число атомов, находящихся на границе вблизи атомов другого зерна и взаимодействующих энергетически, можно оценить приняв зерно виде сферы радиусом R, тогда площадь поверхности определим как  $4\pi R^2$ , а число атомов на единице поверхности в монослое можно определить использовав зависимость числа атомов –  $N_M$  в монослое от атомного номера (рис. 4.2 из [19]), тогда число атомов одного зерна, взаимодействующих с атомами соседних зерен  $N_{e3}$ , определим так:

$$N_{\rm e3} = 4\pi R^2 \cdot N_{\rm MOH} \tag{2}$$

Зная число взаимодействующих атомов и приняв, что существуют только взаимодействия между пограничными атомами соседних зерен, можно оценить энергию образования нанострукруры, которая должна быть равна или больше

этой энергии.

Энергию связи кристалла можно определить при квантовомеханическом подходе как:

$$E_{ce} = \frac{1}{2} \sum_{i=j} \frac{q_i q_j}{H_{ij}} - \sum_i q_i \int \frac{\rho(\overline{r})}{|\overline{R} - \overline{r}|} dr + \frac{1}{2} \int \frac{\rho(\overline{r}_1) \cdot \rho(\overline{r}_2)}{r_{12}} - \sum_i q_i \int \frac{\rho_i^o(\overline{r})}{|\overline{R}_i - \overline{r}|} dr - \frac{1}{2} \int \frac{\rho_i^o(\overline{r}_1) \cdot \rho_i^o(\overline{r}_2)}{r_{12}} dr_1 dr_2$$
(3)

где  $\boldsymbol{R}_{ij} = \left| \boldsymbol{\bar{R}}_i - \boldsymbol{\bar{R}}_j \right|$  – межатомное расстояние;

 $r_{12} = \left| \overline{r}_1 - \overline{r}_2 \right|$  – расстояние между электронами;

**R**<sub>i</sub> и **q**<sub>i</sub> – радиус-вектор и заряд і- атомного остова;

 $\rho$  – плотность валентных электронов в кристалле;

 $\rho_1^o$  – распределение валентной электронной плотности і-нейтрального ато-

Первый член описывает отталкивание остовов, второй – притяжение электронного облака р к атомным остовам, третий взаимное отталкивание электронов, четвертый – притяжение валентных электронов и нейтральных атомов, пятый – отталкивание электронов в нейтральном атоме.

Решением уравнения (3) можно определить энергию образования кристалла, которая должна быть больше суммарной энергии связи кристалла в материале. Все это позволяет после оценки числа частиц в нанокластере оценить энергию образования кристалла, которая рассматривается в балансе тепла и после оценки зоны вероятного образования наноструктуры пересчитываются все величины: температура, скорости нарастания температур, температурные напряжения, размеры зерна и места их образования и уточняется число частиц в нанокластере. С учетом этого эффекта и энергии деформирования были проведены расчеты.

Энергию деформирования единичного объема определим как:

$$W = G\left[\varepsilon_{xx}^{2} + \varepsilon_{yy}^{2} + \varepsilon_{zz}^{2} + 2\left(\varepsilon_{xy}^{2} + \varepsilon_{yz}^{2} + \varepsilon_{zx}^{2}\right) + \frac{\mu}{1-\mu}\ell^{2} - \frac{2(1+\mu)\alpha_{1}}{1-2\mu}\ell\left(T(x,y,z,t) - T_{1}\right)\right], (4)$$

где 
$$2\varepsilon_{ik} = 2\varepsilon_{ki} = \frac{\partial u_k}{\partial i} + \frac{\partial u_i}{\partial k}$$
 (k, i = x, y, z);  $\ell = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}$ ,

*ɛxx, ɛyy,**ɛzz* **– удлинения;** 

*ε<sub>xy</sub>, ε<sub>yz</sub>, ε<sub>zx</sub>* – сдвиги относительно соответствующих осей;

*u<sub>x</sub>, u<sub>y</sub>, u<sub>z</sub>* – перемещение относительно соответствующих осей;

*а*<sub>!</sub> – коэффициент линейного расширения материала мишени;

 µ – коэффициент Пуассона (отношение поперечной деформации к про-дольной, значения µ заключены между 0 и 0,5);

**G** – модуль сдвига (модуль второго рода);

 $T_{\mu}$  — начальная температура. Для железа  $G = 3,5...5,3\cdot 10^{10}$  H/м<sup>2</sup>,  $\mu = 0,23...0,31$ .

Деформация сдвигов *ε<sub>ik</sub>* не могут задаваться произвольно, они связаны дифференциальными соотношениями – условиями совместности:

$$\frac{\partial^{2} \varepsilon_{xx}}{\partial y^{2}} + \frac{\partial^{2} \varepsilon_{yy}}{\partial x^{2}} = 2 \frac{\partial^{2} \varepsilon_{xy}}{\partial x \partial y}; \qquad \frac{\partial^{2} \varepsilon_{xx}}{\partial y \partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ -\frac{\partial \varepsilon_{yz}}{\partial x} + \frac{\partial \varepsilon_{zx}}{\partial y} + \frac{\partial \varepsilon_{xy}}{\partial z} \right]$$

$$\frac{\partial^{2} \varepsilon_{yy}}{\partial z^{2}} + \frac{\partial^{2} \varepsilon_{zz}}{\partial y^{2}} = 2 \frac{\partial^{2} \varepsilon_{xy}}{\partial z \partial y}; \qquad \frac{\partial^{2} \varepsilon_{yy}}{xy \partial z} = \frac{\partial}{\partial y} \left[ -\frac{\partial \varepsilon_{zx}}{\partial y} + \frac{\partial \varepsilon_{xy}}{\partial z} + \frac{\partial \varepsilon_{yz}}{\partial x} \right] \qquad (5)$$

$$\frac{\partial^{2} \varepsilon_{xx}}{\partial z^{2}} + \frac{\partial^{2} \varepsilon_{zz}}{\partial x^{2}} = 2 \frac{\partial^{2} \varepsilon_{zx}}{xz}; \qquad \frac{\partial^{2} \varepsilon_{zz}}{\partial y \partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ -\frac{\partial \varepsilon_{yx}}{\partial z} + \frac{\partial \varepsilon_{yz}}{\partial z} + \frac{\partial \varepsilon_{xz}}{\partial x} \right]$$

Этими условиями проверяется правильность определения удлинений и сдвигов, а их корректировка – вводом дополнительных напряжений.

Для определения удлинений  $\varepsilon_{xx}$ ,  $\varepsilon_{yy}$ ,  $\varepsilon_{zz}$  и сдвигов  $\varepsilon_{xy}$ ,  $\varepsilon_{yz}$ ,  $\varepsilon_{zx}$  воспользуемся выражением термоупругого потенциала перемещений  $\phi$ .

$$\Delta \Phi - \frac{1-2\mu}{2(1-\mu)} \cdot \frac{\gamma}{G} \cdot \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = \frac{1+\mu}{1-\mu} \cdot \alpha_1 \cdot \left[ T(x, y, z, t) - T_{\cdot} \right], \tag{6}$$

где у – плотность материала мишени.

Учитывая, что решение задачи проводится в подвижной системе координат и при выходе на стационарный или близкий к нему режим, второе слагаемое в левой части уравнения (4) становится незначительным, получим:

$$\Delta \boldsymbol{\Phi} = \frac{1+\mu}{1-\mu} \cdot \boldsymbol{\alpha}_{1} \cdot \left[ T(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{t}) - T \right].$$
(7)

По величине термоупругого потенциала перемещений и по известным соотношениям находим величины удлинений и сдвигов:

$$\varepsilon_{ik} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial i \partial k}, \text{ (i, k = x, y, z)}.$$
(8)

Величины температурных напряжений определим по выражению:

$$\sigma_{ik} = 2G \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial i \partial k} - \Delta \Phi \cdot \delta_{ik} \right), \tag{9}$$

где  $\delta_{ik}$  подчиняется условиям:  $\delta_{ik} = 0$  при  $i \neq k$  (i, k = x, y, z)  $\delta_{ik} = 1$  при i = k.

В седьмом слагаемом формулы (1), учитывающем теплоперенос диффундирующим материалом, масса диффундирующего атома определяется как:

$$\boldsymbol{m}_{a} = \boldsymbol{M} \cdot \boldsymbol{m}_{p}, \qquad (10)$$

где *М* – атомный вес наносимого материала;

*m*<sub>p</sub> – масса протона.

Изменение концентрации диффундирующих атомов в единицу времени можно при  $t < t_k$  определить как:

$$\frac{dn_a}{dt} = \frac{j}{\mathbf{e} \cdot \mathbf{z} \cdot \sqrt{\alpha \tau}}.$$

При  $t \ge t_k$ 

$$\frac{dn_a}{dt} = \frac{j}{\mathbf{e} \cdot \mathbf{z} \cdot \mathbf{L}_D},\tag{11}$$

где *ј* – плотность тока;

е – заряд электрона;

*z* – зарядовое число наносимого материала;

*L*<sub>D</sub> – толщина детали;

 $t_k$  – время, за которое деталь прогреется на всю толщину,  $t_k = L_D^2/\alpha$ ;

*а* – коэффициент температуропроводности.

Формула для расчета коэффициента диффузии:

$$K_{\partial u\phi} = a_d \cdot d_{\mathfrak{s}^2} \cdot V_0 \cdot \exp(-U/(kT))$$
(12)

где *a*<sub>d</sub> – множитель порядка 0,1, определяемый типом кристаллической решетки;

*d*<sub>э</sub> – расстояние между ближайшими эквивалентными положениями вакансий в кристалле;

 $V_0$  – величина порядка частоты атомных колебаний в кристалле  $(10^{12}-10^{14}c^{-1});$ 

*U* – потенциальный барьер, который необходимо преодолеть вакансии при смещении в соседнее положение;

*k* – постоянная Больцмана;

*Т* – абсолютная температура.

#### 3.2. Теплообмен на поверхности детали

Тепловой поток на поверхности мишени создается за счет:

1. Столкновительных процессов: тепла, выделяемого на поверхности вследствие действия иона (первое слагаемое справа), отводится тепловой поток с распыленными частицами (второе слагаемое), с термоэлектронами (третье слагаемое), для ионов - отводится тепловой поток с ионно-ионной эмиссией или вторичной ионной эмиссией (пятое слагаемое), потенциальной ионно-электронной эмиссией (шестое слагаемое), кинетической ионно-электронной эмиссией (седьмое слагаемое), характеристическим рентгеновским излучением (восьмое слагаемое), тормозным рентгеновским излучением (девятое слагаемое), переходным излучением (десятое слагаемое).

2. Теплофизических процессов: отводится тепловой поток с испаренным материалом (одиннадцатое слагаемое), с ушедшим материалом в жидкой фазе, если создаются условия для его выброса (двенадцатое слагаемое), с тепловым излучением нагретой поверхности (тринадцатое слагаемое) и с конденсированными атомами, ранее испаренными (четырнадцать первое слагаемое).

3. Плазмохимических процессов, реализующихся за счет реакций потока плазмы или потока ионов с распыленным и испаренным материалом мишени или с адсорбированными газами (пятнадцатое слагаемое), эта энергия передается излучением.

Передача энергии также осуществляется за счет излучения потока ионов, электронов или плазмы (последнее слагаемое):

$$-\lambda[T]\frac{\partial I(x,y,z,t)}{\partial x} = F_{i,e} - F_{pacn} - F_{M.3.} - \left[F_{uu.e} + F_{u.\phi.3} + F_{u.3.3} + F_{ku3} + F_{x.pu} + F_{mpu} + F_{nu}\right]_{i} - F_{ucn} - F_{nn} - \sigma \varepsilon T^{*}(0,y,z,t) \pm F_{kohd} + F_{nx} + \sigma \varepsilon_{c} T_{c}^{*}, \qquad (11)$$

где *о* – постоянная Стефана-Больцмана;

Для решения вопроса эффективного заполнения объема наноструктурами необходимо определить энергии, заряды и сорта ионов, при которых это условие выполняется. Оно должно выполняться для каждого из потоков ионов, причем желательно, чтобы диапазоны глубин, где реализуются наноструктуры, дополняли друг друга.

# 4. Исследование влияния сорта заряда и энергии иона на число частиц в нанокластере

Число частиц в нанокластере определяет возможность получения нанокластера с обычной решеткой, когда число частиц больше 4, или с деформированной решеткой наноразмеров *n* < 4 (специальные наноструктуры), поэтому такое исследование необходимо.

На рис. 1 представлены зависимости числа частиц от энергии для ионов  $B^{+}(a)$ ,  $C^{+}(6)$ ,  $N^{+}(B)$ ,  $AI^{+}(\Gamma)$ ,  $V^{+}(d)$ ,  $Cr^{+}(e)$  при зарядах z = 1, 2, 3 действующих на алюминиевый сплав Д16Т, видно, что для ряда групп ионов таких как B, C, N, V, Cr значение числа частиц в нанокластере близки, но число их падает (пусть и незначительно) с ростом атомной массы иона.





На рис 2 даны зависимости числа частиц в нанокластере от энергии 200-20000 эВ и зарядов 1–3. Видно, что число частиц в нанокластере уменьшается с ростом массы иона и растет с ростом энергии и заряда иона (O<sup>+</sup>, Fe<sup>+</sup>, N<sup>+</sup>, Co<sup>+</sup>, Y<sup>+</sup>, Zr<sup>+</sup>).





Видно, что с ростом сплошной массы иона, число частиц в нанокластере уменьшается, но для всех режимов есть возможность получения объемных наноструктур. Размер и число частиц в наноструктуре увеличивается с ростом энергии иона и его заряда. Проведенный анализ аналогичных зависимостей для ионов Mo<sup>+</sup>(a), Hf<sup>+</sup>(б), Ta<sup>+</sup>(в), W<sup>+</sup>(г) и Pt<sup>+</sup>(д) (рис. 3) показал, что характер зависимостей числа частиц в нанокластере сохранился, но значения уменьшились незначительно.



Рис. 3. Зависимость частиц в нанокластере от энергии иона а – Mo<sup>+</sup>; б – Hf<sup>+</sup>; в – Ta<sup>+</sup>; г – W<sup>+</sup>; д – Pt<sup>+</sup> при различных зарядах z – 1...3 (алюминиевые сплавы)

Видно, что с ростом заряда иона повышается число частиц в кластере, что связано с ростом зоны, охваченной температурами, достаточными для получения наноструктур. Скорость повышения температуры практически для всех ионов превышает необходимую – 10<sup>7</sup> К/с, а величины температурных напряжений (необходимых давлений) составляют порядка от 10<sup>7</sup>...10<sup>10</sup> Па.

## Выводы

Учет энергии образования наноструктуры позволил существенно приблизить модель к реальным условиям их получения.

Выявлены энергии, сорта и заряды ионов, при которых реализуются нанокластеры в объеме и создаются наноструктуры в виде поверхностных структур, т.е. когда основной материал детали не участвует в обработке.

Решение задачи позволило найти объем, в котором возможна реализация условий для получения наноструктур. Поэтому есть возможность определить реальное число частиц, которые могут участвовать в создании объемной или плоской наноструктуры.

Получены диапазоны критических энергий ионов, при которых объемные наноструктуры не образуются.

## Список литературы

1. Костюк, Г.И. Нанотехнологии: теория, эксперимент, техника, перспективы [Текст]: моногр./ Г.И. Костюк. –К.: Изд. центр Междунар. академии наук и инновац. технологий, 2012. – 648 с.

2. Костюк, Г.И. Физико-технические основы нанесения покрытий, ионной имплантации и ионного легирования, лазерной обработки и упрочнения, комбинированных технологий [Текст] Кн.1: Физические процессы плазменно-ионных, ионно-лучевых, плазменных, светолучевых и комбинированных технологий / Г.И. Костюк. – К.: Изд-во АИНУ, 2002. — 596 с.

3. Костюк, Г.И. Физико-технические основы нанесения покрытий, ионной имплантации и ионного легирования, лазерной обработки и упрочнения, комбинированных технологий [Текст] Кн. 2: Справочник для расчета основных физических и технологических параметров, оценки возможностей, выбора типа технологий и оборудования / Г.И. Костюк. – К.: Изд-во АИНУ, 2002. — 482 с.

4. Костюк, Г.И. Наноструктуры и нанопокрытия: перспективы и реальность [Текст]: учеб. пособие / Г.И. Костюк. – Х.: Нац. аэрокосм. ун-т «Харьк. авиац. ин-т», 2009. – 406 с.

5. Костюк, Г.И. Научные основы создания современных технологий [Текст]: учеб. пособие / Г.И. Костюк. – Х.: Нац. аэрокосм. ун-т «Харьк. авиац. ин-т», 2008. – 552 с.

6. Костюк, Г.И. Эффективный режущий инструмент с покрытием и упрочненным слоем [Текст]: моногр.-справ. / Г.И. Костюк. – Х.: Нац. аэрокосм. ун-т «Харьк. авиац. ин-т», 2007. – 633 с.

7. Костюк, Г.И. Эффективный режущий инструмент с покрытием и упрочненным слоем [Текст]: справ. / Г.И. Костюк. – К.: Вид-во АІНУ, 2003. – 412 с.

8. Костюк, Г.И. Физико-технические основы роботизированного производства [Текст]: учеб. пособие / Г.И. Костюк. – Х.: Нац. аэрокосм. ун-т «Харьк. авиац. инт», 2006. – 614 с.

9. Гречихин, Л.И. Физика наночастиц и нанотехнологий [Текст] /Л.И. Гречихин. – М.: УП «Технопринт», 2004. – 397 с.

10. Шнейдер, П. Инженерные проблемы теплопроводности [Текст] / П. Шнейдер. – М.: Иностр. лит.- 1960. – 488 с.

11. Аксенов, И.И. Вакуумная дуга в эрозионных источниках плазмы [Текст] / И.И. Аксенов. – Х.: Изд-во НИИ «ХФТИ», 2005. – 211 с.

12. Хаякава, С. Ядерно-физический аспект [Текст] в 2 кн. / С. Хаякава. – М.: Мир, 1973. – Кн. 2. – 701 с.

13. Готт, Ю.В. Взаимодействие частиц с веществом в плазменных исследованиях [Текст] / Ю.В. Готт. – М.: Атомиздат, 1978. – 271 с.

14. Гусев, А.И. Нанокристаллические материалы: методы получения и свойства [Текст] / А.И. Гусев. – Екатеринбург: Изд-во РАН, Уральское отд-ние, 1998. – 302 с.

15. Гусев, А.И. Наноматериалы наноструктуры, нанотехнологии [Текст] / А.И. Гусев. – М.: Физматлит, 2005. – 416 с.

16. Решетняк, Е.Н. Синтез упрочняющих наноструктурных покрытий [Текст] / Е.Н. Решетняк, А.И. Стрельницкий // Вопросы атомной науки и техники.– 2008.– № 2. – С. 119 – 130.

17. Андриевский, Р.А. Наноматериалы: концепция и современные проблемы [Текст] / Р.А. Андриевский// Физика металлов и металловедение.- 2003. – Т. 91, № 1. – С.50 – 56.

18. Состав, структура и свойства наноструктурных пленок боридов тантала [Текст] / А.А Гончаров, П.И. Игнатенко, В.В. Петухов и др. // ЖТФ. –2006. – Т. 76, вып. 10.

19. Коваленко, В.Ф. Теплофизические процессы и электровакуумные приборы [Текст] / В.Ф. Коваленко. – М.: Сов. Радио, 1976. – 216 с.

Рецензент: д-р техн. наук, проф., зав. каф. А.И.Долматов Национальный аэрокосмический университет «ХАИ» им. Н.Е. Жуковского, Харьков

Поступила в редакцию 04.02.2014

# Оцінка числа частинок в нанокластері в алюмінієвому сплаві при дії іонів

На основі вирішення сумісної задачі теплопровідності і термопружності отримані поля температур і температурних напружень, в яких виділені зони, де утворюються наноструктури (НС). Для алюмінієвого сплаву при дії великої кількості різних іонів і їх зарядів від 1 до 3 отримані залежності числа атомів в нанокластері від енергії.

*Ключові слова:* наноструктури, температура, температурні напруження, розмір зерна, нанокластер, число частинок.

# Estimation of the number of particles in the nanocluster aluminum alloy under the action of ions

On the basis of a joint decision problem of heat conduction and thermoelasticity obtained temperature field and thermal stresses, in which the zones where formed nanostructures (NS). For aluminum alloy under the action of a large number of different ions and their charges from 1 to 3 obtained according to the number of atoms for the nanocluster in energy.

*Keywords:* Nanostructure, temperature, thermal stresses, grain size, nanocluster, the number of particles.