

О квантово-механическом подходе к определению возможности получения наноструктур при действии ионов

*Национальный аэрокосмический университет им. Н. Е. Жуковского
«Харьковский авиационный институт»*

Приведены результаты сравнения полученных максимальных температур, объема нанокластера (НК) и глубин его залегания при действии ряда различных ионов при квантово-механическом рассмотрении процессов и при использовании классических понятий о тепловом действии ионов. Показано, что значения максимальной температуры отличаются на 50 %, объема нанокластера в 2–10 раз, глубины залегания НК – на 1,05 – 2,5 раза, что свидетельствует о необходимости экспериментальной проверки этих результатов. Показана возможность прогнозирования качественных характеристик наноструктур.

Ключевые слова: квантово-механический подход, наноструктуры, ионы, заряд иона.

Введение

Ввиду малости объемов материала, в котором выделяется энергия, на первый взгляд кажется, что необходимо рассматривать тонкое взаимодействие частиц, а значит, использовать квантово-механический подход к процессу выделения энергии ионов. Но, как показали исследования, зачастую и при классическом рассмотрении выделения энергии иона удается получить результаты по размеру зерна и объему нанокластера (НК), близкие к экспериментальным. Поэтому, на наш взгляд, можно оценить технологические параметры, при которых используют классический подход, а при которых необходимо применять квантово-механический подход при оценке технологических параметров потоков ионов для получения наноструктур (НС). Следовательно, последнее проводимое исследование является своевременным и актуальным.

Работа выполнена в рамках программы Министерства образования и науки Украины «Новые и ресурсосберегающие технологии в энергетике, промышленности 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» (подсекция 6 «Физико-технические проблемы материаловедения»), «Концепция создания наноструктур, нано- и традиционных покрытий с учетом влияния адгезии на эффективность и работоспособность деталей АТ, АД и РИ», «Экспериментально-теоретическое исследование получения наноструктур при действии ионных и светолучевых потоков на конструкционные материалы и РИ», хозяйственных работ и договоров о сотрудничестве.

Состояние вопроса

Исследованию наноструктур посвящено значительное количество оригинальных работ, которые обобщены в монографиях [1–11], теории получения наноструктур рассмотрены в работах [1, 2] и частично в работе [11], где представлены результаты оценок механических характеристик, например, модуля упругости с использованием квантово-механического подхода. В работе [2] на основе обра-

ботки результатов эксперимента есть возможность прогноза стойкости РИ, снимаемого объема материала за период стойкости РИ и других качественных характеристик материалов.

В настоящее время не исследовано влияние квантово-механического подхода на определение физических и механических характеристик материалов при оценке возможности получения наноструктур. Все это свидетельствует об актуальности статьи.

Постановка задачи

В настоящее время уже опубликовано много работ, анализ которых приведен в наших монографиях [1–2], в которых использована классическая задача теплопроводности и термоупругости с интегральными физико-механическими характеристиками материала, где не учтены особенности электронной и фонон-фононной (решетчатой) теплопроводности и зависимость модуля упругости, коэффициента линейного расширения, теплоемкости и других физико-механических характеристик от характера теплового и механического воздействия на материалы. В предлагаемой работе учтены все возможные влияния внешних и внутренних воздействий и квантово-механическое описание строения материала.

Далее приведен расчет размера зерна, объема нанокластера и глубин его залегания по классической задаче теплопроводности и термоупругости с учетом энергии, затраченной на образование нано- или субмикроструктурного зерна [1].

Теплофизические и механические характеристики материалов рассчитаны с использованием квантово-механического подхода.

Теплоемкость электронов проводимости в металлах

Выражение для электронной теплоемкости имеет вид

$$C_V^{эл} = \pi^2 Nk \frac{kT}{2E_F} = \frac{1}{2} \pi^2 R \frac{T}{T_F} = \gamma T \quad (1)$$

Теплоёмкость решётки

При температурах выше температуры Дебая теплоемкость решетки при постоянном объеме будет рассчитана следующим образом:

$$C_V = \frac{3RT}{T} = 3R \approx 25 \text{ Дж} / (\text{моль} \cdot \text{К}). \quad (2)$$

При температурах значительно ниже температуры Дебая смещение центра равновесия колебания атома будет стремиться к бесконечности, теплоемкость определяется следующей зависимостью:

$$C_V = \frac{12}{5} \pi^4 R \left(\frac{T}{Q_D} \right)^3. \quad (3)$$

Эта приближенная зависимость в области низких температур известна как закон T^3 Дебая.

Теплопроводность металлов в общем случае складывается из теплопроводности решетки (теплопроводности, обусловленной фононами) и теплопроводности, обусловленной свободными электронами:

$$\lambda = \lambda_{реш} + \lambda_{эл} \quad (4)$$

Теплопроводность электронного газа:

$$\lambda_{эл} = \frac{l_{эл} C_{эл} v_F}{3}. \quad (5)$$

Коэффициент теплопроводности решетки:

$$\lambda_{реш} = \frac{l_{\phi} C_V v_{36}}{3} \quad (6)$$

Фонон-фонная теплопроводность

Фонон-фонной теплопроводностью, в которой явно учитываются резистивные и нормальные процессы рассеяния фононов, является известное выражение Каллуэя:

$$\lambda = \lambda_1 + \lambda_2, \quad (7)$$

$$\lambda_1 = \frac{k}{2\pi^2 v} \left(\frac{k}{\hbar}\right)^3 T^3 \int_0^{\theta_D} \frac{1}{\tau_R^{-1} + \tau_N^{-1}} \cdot \frac{x^4 e^x dx}{(e^x - 1)^2}, \quad (8)$$

$$\lambda_2 = \frac{k}{2\pi^2 v} \left(\frac{k}{\hbar}\right)^3 T^3 \frac{\left[\int_0^{\theta_D/T} \frac{\tau_N^{-1}}{\tau_R^{-1} + \tau_N^{-1}} \cdot \frac{x^4 e^x dx}{(e^x - 1)^2} \right]^2}{\int_0^{\theta_D/T} \frac{\tau_N^{-1} \tau_R^{-1}}{\tau_R^{-1} + \tau_N^{-1}} \cdot \frac{x^4 e^x dx}{(e^x - 1)^2}}, \quad (9)$$

где k – постоянная Больцмана; \hbar – постоянная Планка; $x = \hbar\omega / kT$; τ_R – суммарное время релаксации; τ_N – время релаксации, отражающие вклад в резистивное рассеяние нормальных процессов.

Модуль Юнга

Модуль Юнга, обусловленный межкластерным взаимодействием, связан с внутренними параметрами кристаллической решётки следующим образом:

$$E_{ca рез} = \frac{|2\Delta E|}{21.21d_0^3 e^2}. \quad (10)$$

Выражение (10) определяет модуль Юнга через микропараметры кристаллического твёрдого тела. Внутри координационная сфера формирует основной кластер. Выполненный расчёт модуля Юнга для атомов основного кластера приведён в таблице модуль Юнга для атомов второй координационной сферы определяется из потенциала взаимодействия атомов второй координационной сферы с основным кластером. Аналогичная ситуация наблюдается и для третьей координационной сферы. В соответствии с выполненным расчётом для алюминия при $e = 0,1\%$ с учётом потенциалов взаимодействия в нормальных условиях получено значение $5,54 \cdot 10^{10}$ Па.

Значения модуля Юнга в Па для монокристаллов алюминия и железа в нормальных условиях для разных координационных сфер

Вещество	Номер координационной сферы			Результирующий потенциал
	1	2	3	
Алюминий	$1,7 \cdot 10^{13}$	$9,3 \cdot 10^{12}$	$2,0 \cdot 10^{12}$	$6,9 \cdot 10^{13}$
Железо	$3,0 \cdot 10^{12}$	$2,2 \cdot 10^{12}$	$1,3 \cdot 10^{12}$	$4,6 \cdot 10^{13}$

Поскольку коэффициент линейного расширения определяется энергией межатомного взаимодействия, то существует ряд корреляционных соотношений, связывающих α с другими физическими характеристиками твердого тела. Пределы объемного расширения в твердом состоянии определяются критерием Линдемана, согласно которому при температуре плавления среднее смещение атома из положения равновесия составляет определенную долю межатомного расстояния

$$\alpha = \frac{C_0}{T_{пл}}, \quad (11)$$

где $C_0 \approx 0,06 - 0,076$, $T_{пл}$ – температура плавления материала.

Результаты расчета размера зерна, объема нанокластера и глубин его залегания

Проводили сравнение результатов расчета параметров структуры: размера (радиуса) зерна, объема нанокластера (НК) и глубин его залегания, полученных с использованием теплофизических и механических характеристик при их расчете по квантово-механической теории и по экспериментальным справочным данным [16] для алюминиевого сплава Д16Т.

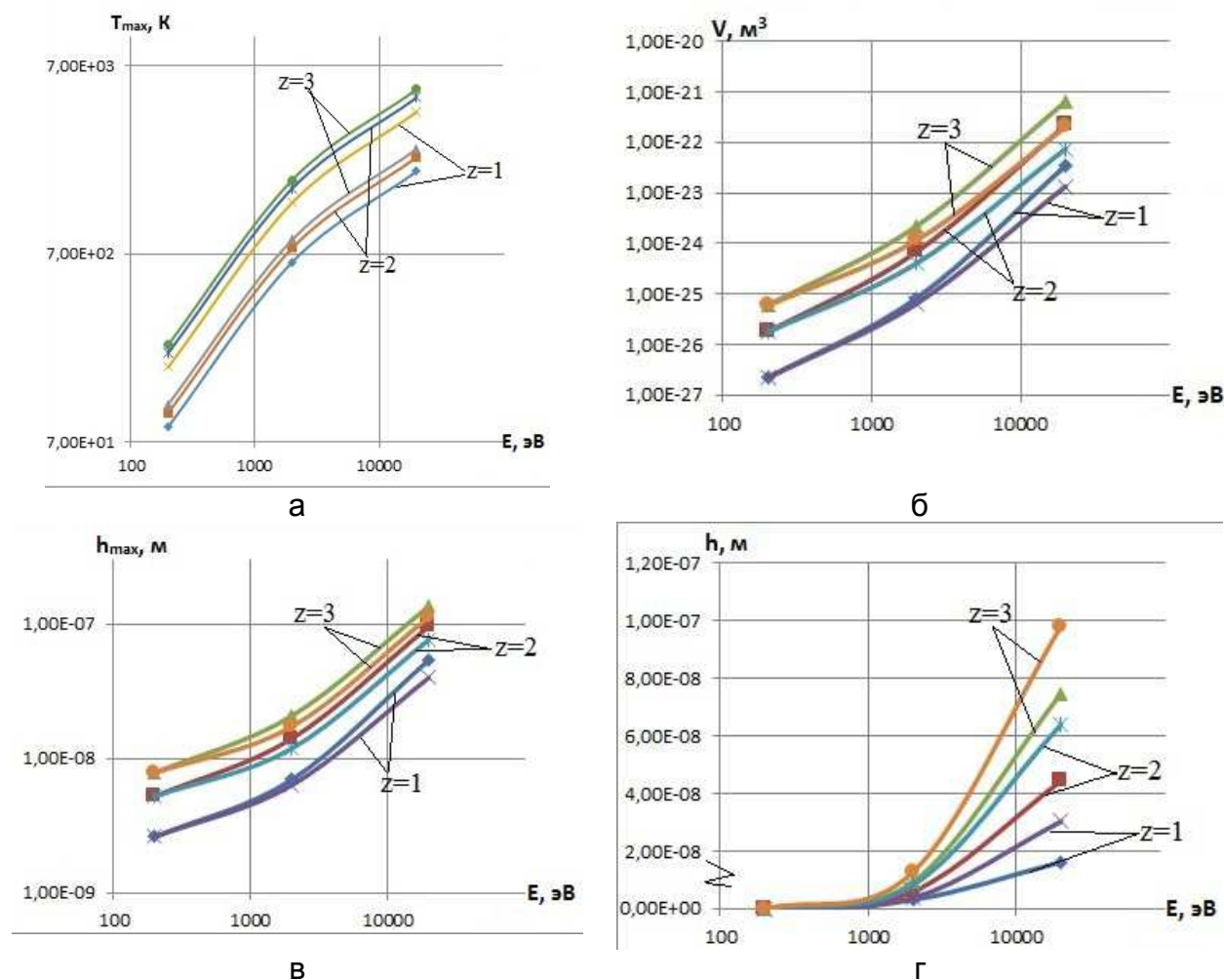


Рис. 1. Сравнение зависимостей максимальной температуры (а), объема нанокластера НК (б), максимальной (в) и минимальной (г) глубин залегания НК от энергии ионов B^+ при разных зарядах иона ($z = 1, 2, 3$) (алюминиевый сплав Д16Т)

Так, на рис. 1–4 показаны зависимости максимальной температуры (а), объема нанокластера (б), максимальной (в) и минимальной (г) глубин залегания НК от энергии ионов B^+ , Zr^+ , Hf^+ и W^+ при разных зарядах ионов ($z = 1, 2, 3$). Видно, что характер зависимостей сохранился [1], но при квантово-механическом рассмотрении значения максимальной температуры возрастают при действии ионов бора от 10 до 50%, объем нанокластера – от 20 до 10 раз, максимальная глубина залегания увеличивается максимально в 2,5 раза, а минимальная – максимум на 18% (рис. 1).

Анализ аналогичных зависимостей для ионов циркония (рис. 2) показал, что температура возрастает на 15...70%, объем нанокластера – на 45%, максимальная глубина залегания возрастает на 40%, а минимальная в обоих случаях лежит на поверхности.

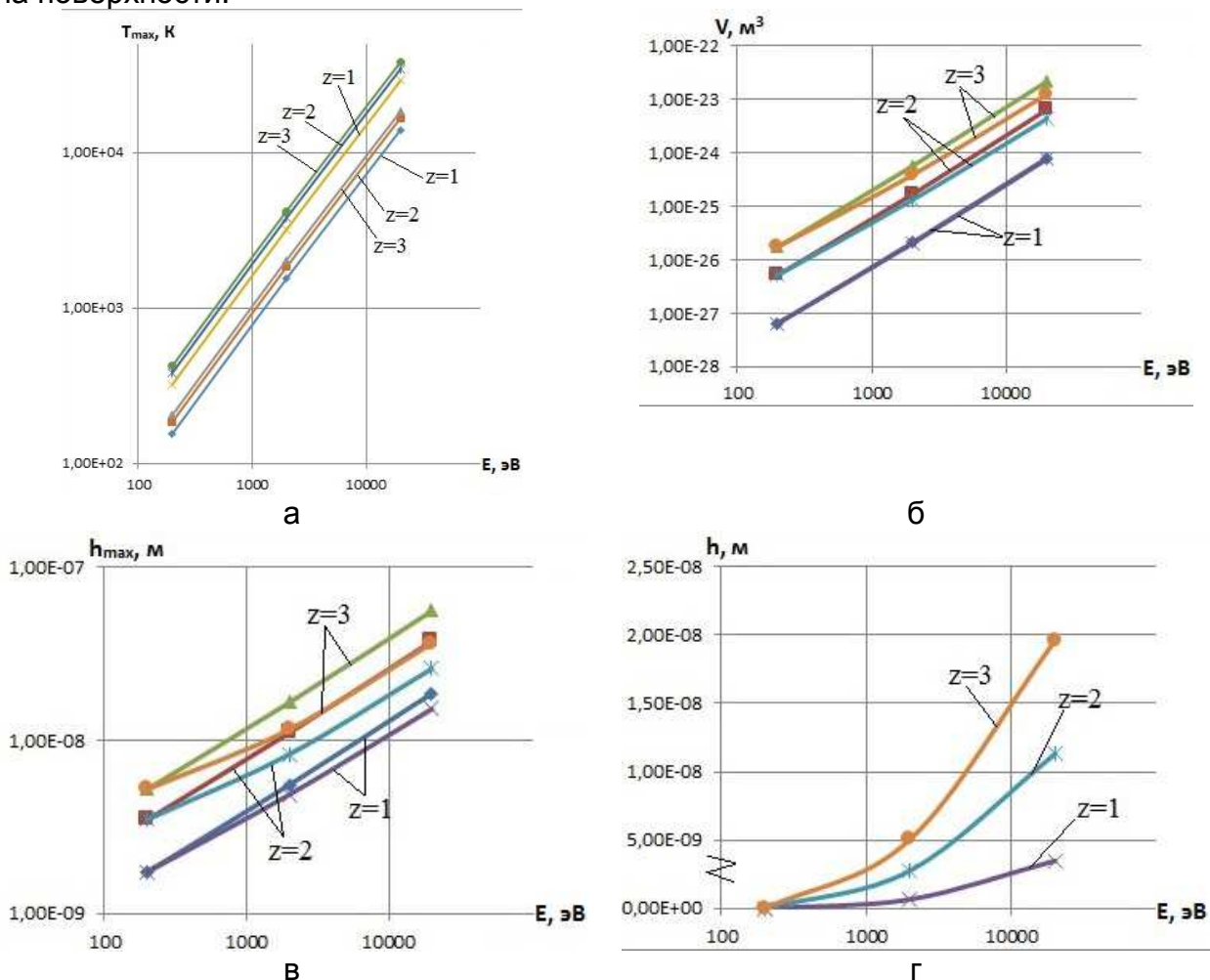


Рис. 2. Сравнение зависимостей максимальной температуры (а), объема нанокластера НК (б), максимальной (в) и минимальной (г) глубин залегания НК от энергии ионов Zr^+ при разных зарядах иона ($z = 1, 2, 3$) (алюминиевый сплав Д16Т)

Для случая действия ионов гафния (рис. 3) максимальные температуры повышаются на 8...53%, снимаемый объем – на 5...48%, а максимальная глубина залегания НК увеличивается на 35%, а минимальная находится на поверхности в обоих случаях.

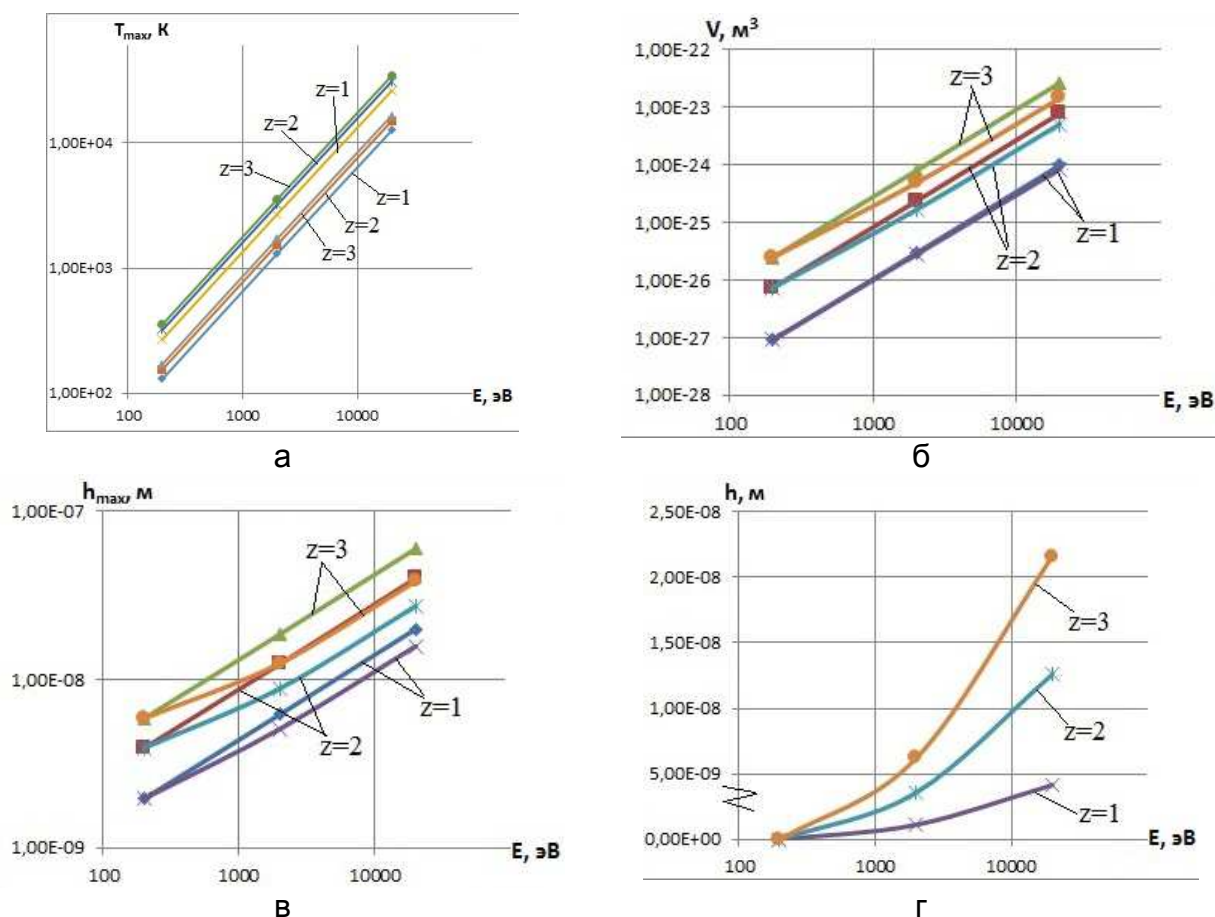


Рис. 3. Сравнение зависимостей максимальной температуры (а), объема нанокластера НК (б), максимальной (в) и минимальной (г) глубин залегания НК от энергии ионов Hf^+ при разных зарядах иона ($z = 1, 2, 3$) (алюминиевый сплав Д16Т)

При действии ионов вольфрама (рис. 4) максимальная температура возрастает практически в 0,01–2 раза, объем нанокластера – на 3...25%, максимальная глубина залегания – на 39%, минимальная для классического варианта составляет $2,7 \cdot 10^{-8}$ м, а для квантово-механического лежит на поверхности. Причем, большие значения всех исследованных величин реализуются для квантово-механического варианта описания теплофизических и механических характеристик. Сравнение рассчитанных максимальной температуры, объема нанокластера и глубин его залегания при использовании теплофизических и механических характеристик, полученных экспериментально и рассчитанных по квантово-механической теории, показано, что для малых энергий иона (вблизи 200 эВ) отличие результатов незначительно, тогда как при энергиях 2000 эВ отличие существенно увеличивается, а при энергии $2 \cdot 10^4$ эВ результаты кардинально отличаются.

Все это свидетельствует о том, что при нанесении покрытий (энергий 110...500 эВ) можно пользоваться как классическим, так и квантово-механическим представлением физических и механических характеристик материалов.

При ионной очистке (энергии 1...2 кэВ) необходимо оценить влияние квантово-механических эффектов при расчетах.

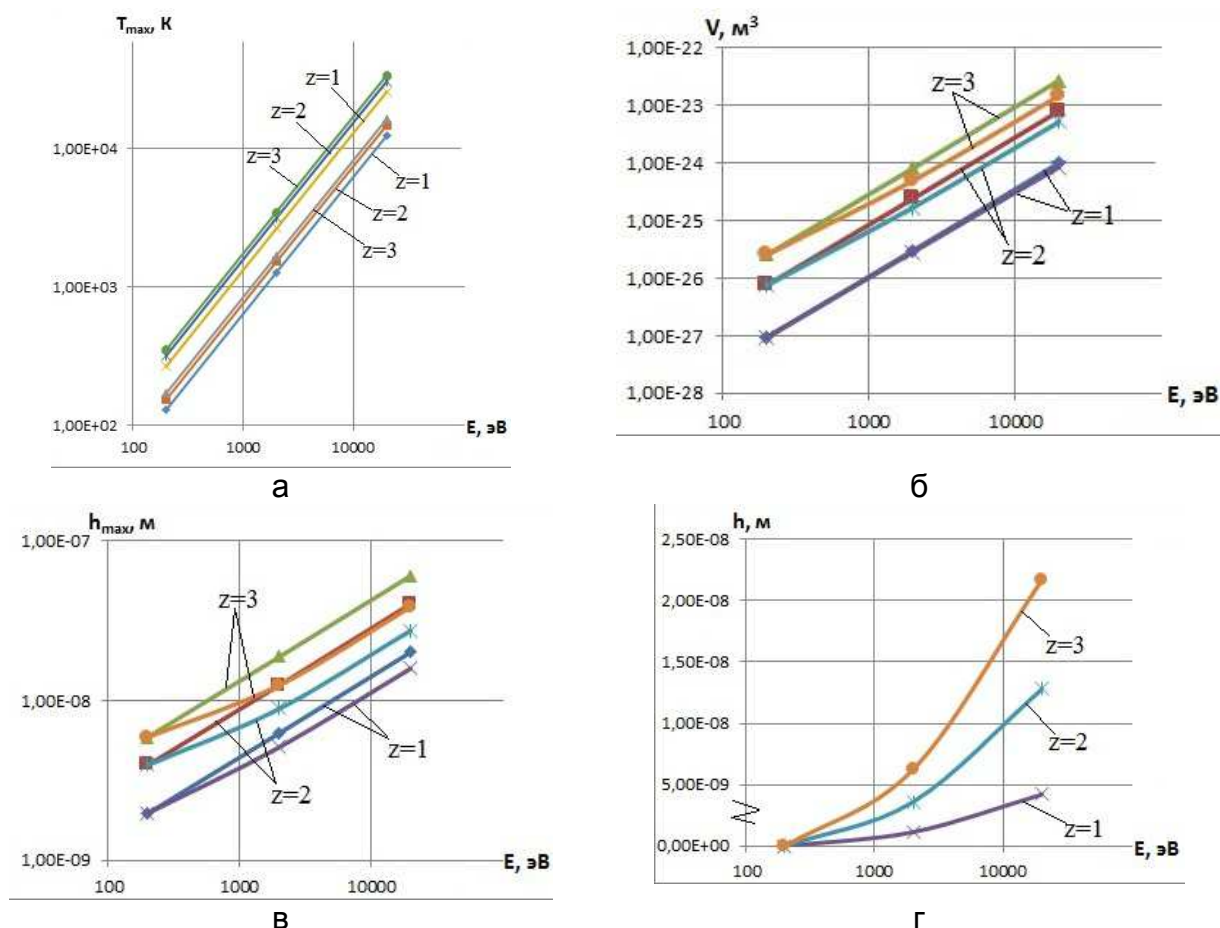


Рис. 4. Сравнение зависимостей максимальной температуры (а), объема нанокластера НК (б), максимальной (в) и минимальной (г) глубин залегания НК от энергии ионов W^+ при разных зарядах иона ($z = 1, 2, 3$) (алюминиевый сплав Д16Т)

При ионной имплантации и ионном легировании необходимо проводить расчёты как по классической, так и квантово-механической теории и после выполнения контрольного эксперимента и его сравнения с результатами обоих вариантов теоретического рассмотрения выбрать нужный вариант теории.

Выводы

1. Показано, что при малых энергиях ионов (100...500 эВ), соответствующих реализации нанесения покрытий, неважно, какие значения покрытий теплофизических и механических характеристик используются при расчете параметров наноструктур.
2. При энергиях ионов в диапазоне 1000...2000 эВ необходимо учитывать квантово-механические эффекты.
3. При энергиях порядка 15...40 кэВ необходимо сравнить результаты расчетов по двум вариантам представления свойств материала и после нормирования по результатам эксперимента использовать наиболее близкий вариант теории с соответствующим нормирующим коэффициентом.

4. После выбора теории можно приступить к прогнозированию технологических параметров обработки для получения необходимого слоя наноструктур и, определив размер зерна по объему НК, можно оценить физико-механические характеристики используя их зависимости от размера зерна [1, 2].

Список литературы

1. Костюк, Г. И. Нанотехнологии: выбор технологических параметров и установок, производительность обработки, физико-механические характеристики наноструктур [Текст]: моногр. / Г. И. Костюк. – К.: Изд. центр Междунар. академии наук и инновац. технологий, 2014. – 472 с.
2. 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.
3. Костюк, Г. И. Физико-технические основы нанесения покрытий, ионной имплантации и ионного легирования, лазерной обработки и упрочнения, комбинированных технологий [Текст] / Г. И. Костюк. – К.: Изд-во АИНУ, 2002.– Кн.1: Физические процессы плазменно-ионных, ионно-лучевых, плазменных, светолучевых и комбинированных технологий. – 596 с.
4. Костюк, Г. И. Физико-технические основы нанесения покрытий, ионной имплантации и ионного легирования, лазерной обработки и упрочнения, комбинированных технологий [Текст] / Г. И. Костюк. – К.: Изд-во АИНУ, 2002. – Кн. 2: Справочник для расчета основных физических и технологических параметров, оценки возможностей, выбора типа технологий и оборудования. – 482 с.
5. Костюк, Г. И. Наноструктуры и нанопокрyтия: перспективы и реальность [Текст]: учеб.пособие / Г. И. Костюк. – Х.: Нац. аэрокосм. ун-т «Харьк. авиац. ин-т», 2009. – 406 с.
6. 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.
7. 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.
8. Костюк, Г. И. Эффективный режущий инструмент с покрытием и упрочненным слоем [Текст]: справ. / Г. И. Костюк. – К.: Изд-во АИНУ, 2003. – 412 с.
9. Костюк, Г. И. Физико-технические основы роботизированного производства [Текст]: учеб.пособие / Г. И. Костюк. – Х.: Нац. аэрокосм. ун-т «Харьк. авиац. ин-т», 2006. – 614 с.
10. Гречихин, Л. И. Физика наночастиц и нанотехнологий [Текст] / Л. И. Гречихин. – М.: УП «Технопринт», 2004. – 397 с.
11. Аксенов, И. И. Вакуумная дуга в эрозионных источниках плазмы [Текст] / И. И. Аксенов. – Х.: Изд-во НИИ «ХФТИ», 2005. – 211 с.
12. Калина, Б. А. Теплоемкость электронов проводимости в металлах [Текст] / Б. А. Калина. – Физика твердого тела. Физическое материаловедение. К. – 2006. – Т. 1.
13. Брандт, Н. Б. Квазичастицы в физике конденсированного состояния. – М.: Физматлит, 2006. – 250 с.

14. Сверхтвердые материалы [Текст]: моногр. / под общей ред. Н. В. Новикова: в 6 т. – 2004. Т. 2. – С. 177 – 199.

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

16. Свойства элементов [Текст] / под редакцией Г. А. Самсонова. – М.: Физматлит, 1978, Т. 1. – 571 с.

Поступила в редакцию 15.09.2015

Про квантово-механічний підхід до визначення можливості отримання наноструктур при дії іонів

Наведено результати порівняння отриманих максимальних температур, об'єму нанокластера (НК) і глибин його залягання при дії ряду різних іонів при квантово-механічному розгляді процесів і при використанні класичних понять про тепловій дії іонів. Показано, що значення максимальної температури відрізняються на 50%, об'єму нанокластера в 2–10 рази, глибини залягання НК – на 1,05–2,5 рази, що свідчить про необхідність експериментальної перевірки цих результатів. Показана можливість прогнозування якісних характеристик наноструктур.

Ключові слова: квантово-механічний підхід, наноструктури, іони, заряд іона.

On the quantum mechanical approach to determining the possibility of obtaining nanostructures under the influence of ions

The results of a comparison of the maximum temperature, the volume of the nanocluster (NC) and its depth under the action of a number of different ions in the quantum-mechanical processes of race-watching and using the classical concepts of the thermal effect of the ions. It is shown that the maximum temperature differ by 50% in volume nanocluster 2–10 times the depth of the NC – 1.05–2.5 times, indicating a need for experimental verify these results. The possibility of forecasting the qualitative characteristics of nanostructures.

Keywords: quantum-mechanical approach, nanostructures, ions, ion charge.