

TRANSPORT ENERGII W PROCESACH OBRÓBKI CIEPLNEJ ORAZ W CZASIE FORMOWANIA CIENKICH WARSTW

JACEK RONDA, RYSZARD B. PĘCHERSKI, BOGUSŁAW RAJCHEL

THE ENERGY FLOW IN THE COURSE OF THERMAL PROCESSING AND DURING FORMATION OF THIN FILMS

Abstract

Introduction to the modelling of the energy flow from electrodes through ionized gas to a heat affected zone (HAZ) during thermal processing and welding as well as the Ion Beam Assisted Deposition technique applied to formation of thin films is presented in this paper. A multiscale approach to the description of the problem is studied afresh. In particular, the multiscale deterministic model of the phenomenon of the transmission of energy in plasma processes and numerical simulation of the interaction with the surface of two ion beams: of low and high energy, which is typical for the IBAD technique are considered. Some problems related with numerical modelling of plasma-liquid metal interaction are also discussed.

1. WSTĘP

Celem pracy jest próba unifikacji modelowania procesów plazmowej oraz jonowej obróbki powierzchni biorąc za podstawę zjawisko przepływu energii wspólne dla obu procesów. Umożliwi to, naszym zdaniem, wyznaczenie parametrów procesów formowania warstw i powłok przy użyciu technik plazmowych oraz jonowych w skali mikroskopowej i nanometrycznej. W szczególności jest to ważne dla określenia parametrów procesu IBAD (Ion Beam Assisted Deposition) łączącego w szczególności obie metody obróbki powierzchni. Przegląd zaawansowanych modeli stosowanych w technologii spawania plazmowego oraz obróbki powierzchni przedstawiono w pracach Pie-

trzyka i in. (1996), Rondy i in. (2002a), (2002b) oraz Rondy (2002). Prace te oraz cytowana w nich literatura są podstawą do obecnej dyskusji.

Omówiono zagadnienia związane z transportem energii, który występuje w trakcie formowania cienkich warstw i powłok zarówno wiązkami jonów, jak i strumieniem plazmy. W technikach jonowych gęstość energii wiązek jonów jest zazwyczaj mniejsza od gęstości energii strumienia plazmy, chociaż energia pojedynczego jonu jest znacznie wyższa od średniej energii cząstek w plazmie. Oba procesy powodują jednak podobne zmiany w modyfikowanym ośrodku w skali mikroskopowej i umożliwiają formowanie podobnych struktur. Obie techniki obróbki powierzchni są wykorzystywane do formowania mikro i nanostruktur o

pożądanych parametrach użytkowych. Przykładem mogą być struktury węglowe typu DLC - Diamond Like Carbon, por. Robertson (2002), gdzie przedstawiono szczegółową dyskusję różnych technik otrzymywania struktur węglowych oraz wpływu parametrów stosowanych technik na ich mikrostrukturę oraz własności. Techniki te mogą być stosowane także do formowania struktur metali. Jako przykład przedstawiono wyniki numerycznej symulacji działania na powierzchnię amorficznego Ni dwóch wiązek jonów: Cr+ o energii 20 eV i Fe+ o energii 1000 eV.

2. TRZY POZIOMY OPISU PLAZMY

Według Reeda (1969), termin „plazma” został wprowadzony w 1928 roku przez Irvinga Langmuira z osrodka badawczego General Electric w kontekście badań niskociśnieniowych wyładowań elektrycznych, które doprowadziły do późniejszych zastosowań w obszarze oświetlenia neonowego. Obecnie słowo „plazma” obejmuje szeroki zakres zjawisk zachodzących w gazach przewodzących elektrycznie - od wyładowań niskociśnieniowych do całkowicie zjonizowanych plazm o bardzo wysokiej temperaturze. Bardziej precyzyjnie plazmą nazywamy układ quasi-neutralny, zawierający dodatnio i ujemnie naładowane, swobodne cząstki. Cząstkami dodatnimi są zawsze jony, a ujemnymi - zwykle elektrony. Układ quasi-neutralny oznacza plazmę elektrycznie obojętną w dostatecznie dużej objętości lub w dostatecznie długich przedziałach czasu, które określone są przez przestrzenną i czasową wielkość rozdzielania ładunku.

Ścisły opis zachowania plazmy jako statystycznego układu wielu ciał zastępuje się w wielu podejściach aplikacyjnych zredukowanym opisem stanu plazmowego, por. np. Frank-Kamieniecki (1968). Najbardziej zredukowany opis odnosi się to makroskopowej teorii płynowej. Za pomocą tego modelu można zbadać wiele zjawisk oraz problemów związanych ze stanami równowagi, procesami propagacji fal oraz niestabilnościami. Opisem mniej zredukowanym jest opis mikroskopowy, który oparty jest na koncepcji ciągłej funkcji rozkładu w przestrzeni fazowej, tzn. przestrzeni prędkości i przestrzeni konfiguracyjnej. Opisy te są przybliżone i nie uwzględniają takich zjawisk, jak korelacje, fluktuacje czy promieniowanie, które powstają wskutek dyskretnej struktury plazmy. Dyskretną strukturę plazmy, na poziomie molekularnym, uwzględnia się w ramach formalizmu cząstek próbnych.

Analiza równań kinematycznych zdefiniowanych dla plazmy na poziomie molekularnym opiera się na koncepcji gęstości prawdopodobieństwa określonego w sześciowymiarowej przestrzeni fazowej. Podejście takie stosowane jest w fizyce nuklearnej; nie jest jed-

nak praktyczne dla symulacji komputerowej spawania i plazmowej obróbki powierzchniowej, gdzie precyzja obliczeń strumieni energii może być mniejsza. Z tego powodu stosuje się w technice makroskopowy opis plazmy. Transport energii z poziomu molekularnego do poziomu makroskopowego można przedstawić w sposób następujący.

A. Na poziomie molekularnym stan cząstki określony jest przez:

1. Liczby kwantowe $\hat{n}_j = \{n_{jx}, n_{jy}, n_{jz}\}$, określone

przez dozwolone wartości pędu cząstki $p_j = \hat{n}_j \frac{h}{2L}$, gdzie L jest długością charakterystyczną dla kontrolnej objętości, h jest stałą Plancka.

2. Poziomy energetyczne, które określone są przez różne wartości \hat{n}_j^2 wyprowadzone z wyrażenia na

$$\text{energię kinetyczną } E_{ij} = \frac{p_j^2}{2m} = \hat{n}_j^2 \frac{h^2}{8mL^2}.$$

3. Przedział, który można rozpatrywać jako zbiór cząstek o różnych stanach, ale o tej samej energii.

4. Stany energii, które można przedstawić jako zbiór przedziałów dla każdego poziomu energetycznego.

5. Degeneracja g_j poziomu energetycznego j , która odpowiada liczbie przedziałów dla poszczególnych poziomów energetycznych.

B. Na poziomie mikroskopowym określa się mikrostan, który jest specyfikacją całkowitej liczby cząstek w każdym stanie energii.

C. Na poziomie makroskopowym określa się makrostan, który jest specyfikacją całkowitej liczby cząstek N_j dla każdego poziomu energetycznego.

Szczegółowe informacje dotyczące pojęć właściwych dla różnych poziomów modelowania plazmy podane są w pracy Rondy i in. (2002a) oraz Rondy (2002).

W celu opisu własności i zachowania strumienia plazmy opracowano następujące modele.

2.1. Fenomenologiczny model strumienia plazmy – prosty model kolumny łuku

Prosty model łuku elektrycznego przedstawili w latach trzydziestych Elenbaas (1934) i Heller (1935). Model ten wywodzi się z założenia, że produkcja ciepła, reprezentowana przez $\text{div}(-\kappa^{(e)}\nabla T)$ wywołana

jest przez generację pola elektrycznego σE^2 . Dyfuzja termiczna i efekty radiacyjne są natomiast pominięte, jako efekty drugorzędne. Podstawowe równanie dla osiowo-symetrycznej kolumny łuku, ułożonej wzdłuż osi z o promieniu r , przyjmuje postać:

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \kappa^{(e)} \frac{dT}{dr} \right) + \sigma E_z^2 = 0 \quad (1)$$

Dla potencjału strumienia ciepła $S = \int_0^T \kappa^{(e)} dT$ równanie kolumny łuku wyraża się następująco:

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dS}{dr} \right) + \sigma E_z^2 = 0, \quad (2)$$

gdzie $S(T)$ jest tylko funkcją temperatury. Tak otrzymane równanie można całkować metodą charakterystyk, Elenbaas (1934). Po zastosowaniu prawa Ohma

$I = 2\pi E_z \int_0^R \sigma r dr$, pole elektryczne można przedstawić w postaci:

$$E = \frac{1,08}{R} \sqrt{\frac{2fS_0}{\sigma_0}} \exp\left(\frac{1}{2zf}\right) \quad (3)$$

$$I = 7,27R \sqrt{\frac{2fS_0}{\sigma_0}} \exp\left(-\frac{1}{2zf}\right), \quad (4)$$

gdzie $f = \frac{S_0}{\sigma_0 S_0}$. Z powyższych zależności oraz ana-

lize przeprowadzonej w (Choo i in. 2000) wynika, że istnieje jednoznaczna zależność między mocą wejściową EI na jednostkę długości kolumny łuku L , a jego temperaturą maksymalną T_{max} . Oznacza to, że maksymalna temperatura plazmatronu określona jest jedynie przez moc wejściową. Warto w tym miejscu zauważyć, że w spawaniu gazowym maksymalna temperatura jest ograniczona przez wewnętrzną entalpię spalane go gazu.

2.2. Model plazmy spawalniczej

Posługując się wynikami Wendelstorfa i in. (1997) oraz Wendelstorfa (2000) oraz dyskusją przedstawioną w (Ronda i in. 2002a, 2002b, Ronda 2002) można przedstawić następujący wielopoziomowy model plazmy, która występuje w procesach spawania. Dla powłoki katodowej z ładunkiem przestrzennym całkowita gęstość prądu wynosi:

$$J_{tot} = J_{emi} + J_{ion} + J_{rep} \quad (5)$$

gdzie:

$$J_{emi} = J_R(T_c, \Phi_c) = A_R T_c^2 \left(-\frac{\Phi_c}{k_B T_c} \right) \text{ pochodzi od}$$

elektronów emitowanych z powierzchni katody,

$$J_{ion} = en_{ed}^{(e)} u_{Bohm} = en_{ed}^{(e)} \left(\frac{k_B T_{ed}^{(e)}}{m_{ion}} \right)^{1/2} \text{ pochodzi od jonów}$$

przyspieszanych w kierunku katody,

$$J_{rep} = -en_{ed}^{rep} \sqrt{\frac{k_B T_{ed}^{(e)}}{2\pi m_e}} \exp\left(-\frac{eV_{ed}}{k_B T_{ed}^{(e)}}\right) \text{ pochodzi od}$$

elektronów odpychanych.

Energia związana z całkowitą gęstością prądu powłoki katodowej przekazywana jest do *katodowej warstwy przysiennej (podpowłoki katodowej)*, w której dla określonego strumienia elektronów:

$$\begin{aligned} \check{A}^{(e)} = n^{(e)} \mathbf{u}^{(e)} = & \\ & - \left(\frac{D^{(e)}}{m^{(e)} T^{(e)}} + \frac{m^{(e)} n n^{(e)} D_{ee}}{\rho T^{(e)}} \right) \nabla T^{(e)} - \\ & \frac{m^{(e)} n}{\rho} D_{ee} \nabla n^{(e)} + \frac{m^{(e)} n n^{(e)}}{\rho k_B T^{(e)}} e D_{ee} \nabla V \end{aligned}, \quad (6)$$

musi być spełniony bilans energii elektronów

$$\begin{aligned} e \check{A}^{(e)} \cdot \nabla V = -\nabla \cdot \left(\lambda^{(e)} \nabla T^{(e)} \right) + \frac{5}{2} k_B \alpha \check{A}^{(e)} \cdot \nabla T^{(e)} \\ + \left(\frac{5}{2} k_B T^{(e)} \alpha + E_{ion} \right) i^{(e)} + W_{eh} \end{aligned} \quad (7)$$

oraz bilans energii jonów:

$$-e \check{A}^{(i)} \cdot \nabla V + W_{eh} = -\nabla \cdot \left(k^{(h)} \nabla T^{(h)} \right). \quad (8)$$

Z *katodowej warstwy przysiennej* energia przekazywana jest do *kolumny łuku*, w której muszą być spełnione następujące równania bilansu:

(i) ciągłości masy

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{i}) = 0, \quad (9)$$

które dla liczb Macha $Ma = \frac{|\mathbf{i}|}{v_c} \leq 0.3$, ze względu na

$\nabla \mathbf{i} = 0$, sprowadza się do $\rho = const$

(ii) zachowania pędu

$$\rho \frac{D}{Dt} \mathbf{i} = -\nabla P - \nabla \cdot \mathbf{r} + \mathbf{J} \times \mathbf{B} + \rho \mathbf{g}, \quad (10)$$

(iii) zachowania energii elektronów

$$\rho^{(e)} \frac{D}{Dt} H^{(e)} = \nabla \cdot \mathbf{q}^{(e)} + \mathbf{J} \cdot \mathbf{E} - S_R - \dot{E}_{eh}, \quad (11)$$

gdzie strumień ciepła $\mathbf{q}^{(e)}$ jest zadany następująco:



$$\mathbf{q}^{(e)} = \frac{k}{c_p} \nabla H^{(e)} + \frac{5k_B}{2e} \frac{\mathbf{J}}{c_p} H^{(e)}, \quad (12)$$

(iv) równowagi energii dla jonów:

$$\rho \frac{D}{Dt} H^{(i)} = \nabla \cdot \mathbf{q}^{(i)} + \dot{E}_{ei}, \quad (13)$$

gdzie strumień ciepła $\mathbf{q}^{(i)}$ jest zadany następująco:

$$\mathbf{q}^{(i)} = \frac{k_s}{c_p} \nabla H^{(i)} + \nabla \cdot \left[\sum_i \left(\rho D - \frac{k}{c_p} \right) \left(H^{(i)} \right) \nabla C^{(i)} \right], \quad (14)$$

(v) równanie dyfuzji par metali do gazu ochronnego

$$\rho \frac{D}{Dt} C^{(i)} = \nabla \cdot [D \nabla (\rho C^{(i)})], \quad (15)$$

(vi) równania Maxwella: odpowiednio prawo Ohma, równanie ciągłości prądu i prawo Ampera:

$$\mathbf{J} = \sigma \cdot \left[\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B} - \frac{1}{en^{(e)}} \mathbf{J} \times \mathbf{B} + 0.41 \frac{k_B}{2e} \nabla T \right], \quad (16)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = 0, \quad (17)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \delta \mathbf{A} = -\mu_0 \mathbf{J}, \quad \nabla \cdot \mathbf{A} = 0, \quad (18)$$

(vii) równanie Sahy opisujące równowagę termiczną jonizacji:

$$n^{(e)} \frac{n^{(h)} T^{(h)}}{n_a T^{(e)}} = \frac{2g^{(i)}}{g_a} \left(\frac{m^{(e)} k_B T^{(e)}}{2\pi H^2} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{E_{ion} - \Delta E_{ion}}{k_B T^{(e)}} \right). \quad (19)$$

Proponujemy zastosować do opisu wiązki jonów powyższe dwa modele. Ze względu na brak elektronów w wiązce dodatnich jonów pominąć należy równania: (6), (7) oraz (11).

3. PROCESY TERMO-MECHANO-METALURGICZNE W STREFIE WPŁYWU CIEPŁA

Najważniejszymi zjawiskami obserwowanymi w strefie wpływu ciepła (SWC) są:

- nagrzewanie i chłodzenie,
- rozszerzalność termiczna,
- odkształcenia sprężyste i niesprężyste,
- krzepnięcie jeziora spawalniczego,
- przemiany fazowe w ciele stałym,
- uplastycznienie podobszarów w następstwie odkształceń objętościowych spowodowanych przemianami fazowymi, które określa się w literaturze jako TRIP (Transformation Induced Plasticity).

Modelowanie procesów termo-mechano-mechanicznych (TMM) w strefie wpływu ciepła spawanego złącza omówiono szczegółowo w (Godarzi i in. 1998),

oraz (Ronda i Oliver 2000). Stan materiału w procesie TMM jest określony przez zmienne konstytutywne: tensor prędkości odkształcenia, tensor naprężenia, temperaturę i odpowiednie udziały fazowe. Zmienne konstytutywne określa się w punkcie materialnym kontinuum, który odpowiada reprezentatywnej objętości materiału zawierającej kilka ziaren i posiadającej strukturę wielofazową. SWC lub złącze spawane pokryte jest takimi reprezentatywnymi objętościami. Zmienne stanu są sprzężone przez system równań równowagi sił wirtualnych i energii wewnętrznej oraz równań ewolucji dla udziałów fazowych. Reakcja materiału spawanego w procesie TMM jest określona przez równania ewolucji dla udziałów fazowych, parametry wzmocnienia, równania konstytutywne dla termo-sprężystości, równania klasycznej plastyczności oraz równania dla płynięcia materiału indukowanego zmianami objętościowymi spowodowanymi przejściami fazowymi. Równania te ukazują wpływ naprężeń, odkształceń, prędkości odkształcenia i temperatury na kinetykę przemian fazowych oraz odwrotnie wpływ składu wielofazowego materiału na reakcje materiału poddanego złożonemu obciążeniu termo-mechanicznemu. Prawa ewolucji mikrostruktury wyprowadzono z podstawowego założenia proporcjonalności przyrostu nowej fazy do ubytku „siły napędowej” transformacji, (Sansonnens i in. 2000) oraz (Ronda i Oliver 2000).

4. TRANSPORT ENERGII W JONOWYCH TECHNIKACH KSZTAŁTOWANIA POWIERZCHNI

Metody jonowe, wykorzystujące wiązki jonów, umożliwiają formowanie cienkich warstw oraz powłok o zadanej mikrostrukturze, a zatem i o określonych własnościach użytkowych. W odróżnieniu od metod plazmowych następuje wtedy modyfikacja warstwy powierzchniowej dzięki lokalnym oddziaływaniom poszczególnych jonów z atomami modyfikowanego ośrodka. Kontrolowanie mikrostruktury formowanych układów jest możliwe dzięki zapewnieniu, przez odpowiednie sterowanie wiązkami jonów, niezbędnych warunków termodynamicznych. W szczególności w metodzie IBAD (Ion Beam Assisted Deposition) formowana powłoka (lub cienka warstwa) jest bombardowana wiązką jonów o określonej liczbie atomowej, krotności jonizacji, masie oraz energii. Jony, poruszając się w bombardowanej substancji, zderzając się z elektronami oraz jądrami stopniowo tracą energię. Funkcję opisującą straty energetyczne naładowanych cząstek ds. $[E(x)]/dx$, (czyli wielkość traconej energii na jednostkę przebytej drogi) można przedstawić jako sumę strat energetycznych „elektronowych” oraz strat energetycznych „jądrowych”.



$$S[E(x)] = S[E(x)]_e + S[E(x)]_n \quad (20)$$

Dominujące na ogół elektronowe straty energetyczne, przez poruszającą się naładowaną cząstkę, zależą głównie od liczb atomowych poruszającej się cząstki oraz atomów ośrodka a także od energii poruszającej się cząstki i gęstości atomowej ośrodka. Zderzając się z atomami bombardowanego ośrodka, cząstka przekazuje im energię i pęd, wybijając je z zajmowanych położeń. W wyniku zderzeń w bombardowanym ośrodku lokalnie wzrasta temperatura. W wielowarstwowych i wielopierwiastkowych układach, które są bombardowane wiązkami energetycznych naładowanych cząstek, modyfikacji ulega mikrostruktura układu oraz może dojść do uformowania warstwy przejściowej pomiędzy warstwami penetrowanymi przez bombardujące jony. Ta przejściowa warstwa odpowiada między innymi za wzajemną adhezję obu stykających się warstw.

W odróżnieniu od wiązek plazmowych powodujących podniesienie temperatury naświetlanego ośrodka i lokalne przejście ośrodka do fazy ciekłej, wiązki bombardujących jonów mogą spowodować przemieszczanie się atomów wewnątrz ośrodka bez lokalnej zmiany stanu skupienia. Przemieszczenia te dodatkowo wpływają na zmianę mikrostruktury modyfikowanego układu. Wiązka jonów może być także używana do wybijania atomów z bombardowanej powierzchni. Wybite atomy oraz jony mogą być następnie osadzone na powierzchni modyfikowanego przedmiotu. Strumień atomów wybitych wiązką bombardujących jonów może być traktowany jako wiązka energetycznych atomów, których energia zależy między innymi od energii i masy bombardujących jonów oraz masy wybitych atomów. Współpracujące wiązki energetycznych jonów lub atomów mogą, zatem być wykorzystane do formowania powłok lub do modyfikacji składu pierwiastkowego oraz mikrostruktury warstw powierzchniowych ciał stałych.

Zarówno wprowadzanie dodatkowych atomów do bombardowanego ośrodka jak i lokalne deponowanie energii powoduje:

- lokalny szybki wzrost temperatury a następnie jej spadek w wyniku przekazu energii sąsiadującym atomom;
- tworzenie defektów radiacyjnych (zarówno punktowych jak i liniowych).

Z lokalnym wzrostem temperatury oraz tworzeniem defektów radiacyjnych związane jest powstawanie naprężeń. W rezultacie w nano obszarach chwilowo występują bardzo wysokie temperatury oraz ciśnienia, które mogą powodować przemiany fazowe. W wyniku zapoczątkowanych przemian fazowych dochodzi do odkształceń sprężystych i niesprężystych.

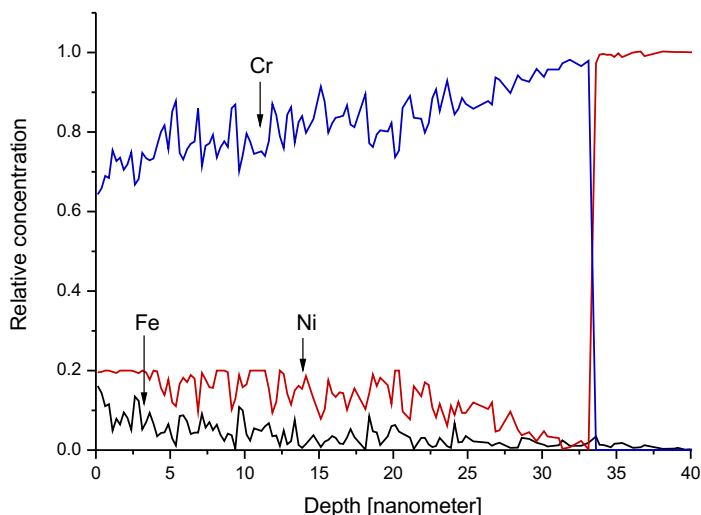
Są to, więc analogiczne zjawiska do zachodzących w procesach termo-mechano-metalurgicznych w strefie wpływu ciepła. Uzasadnia to potrzebę unifikacji opisu wpływu zarówno strumienia plazmy jak i wiązek jonów na strukturę formowanych warstw.

Proces formowania powłok techniką IBAD może być w szczególności zrealizowany tak, że strumieniem plazmy osadzana jest powłoka i jednocześnie jest bombardowana wiązką jonów. Rozwiązanie to zapewnia dużą szybkość narastania powłoki oraz dobrą adhezję do pokrywanego podłoża. Plazma ta może być uzyskana między innymi przy użyciu wiązki laserowej. Do opisu tej konkretnej realizacji techniki IBAD niezbędne jest zbudowanie zunifikowanego modelu. Próbę taką podjęto w tej pracy.

Oddziaływanie wiązek jonów oraz cząstek plazmy z ciałem stałym może być modelowane przy użyciu metod dynamiki molekularnej, metody Monte Carlo oraz obliczeń ab initio. Najpopularniejszymi programami do modelowania oddziaływania wiązek jonów są programy: SRIM 2003, TriDyn oraz TrimCascade wykorzystujące w szczególności metody Monte Carlo i model zderzeń binarnych. Programy te umożliwiają między innymi wyznaczenie takich wielkości jak: zasięg jonów w bombardowanej substancji, straty energetyczne w bombardowanej substancji, przekaz energii od bombardującego jonu do wybitego atomu, itp. niezbędnych do obliczenia bilansu cieplnego w bombardowanej warstwie, bilansu mas oraz przekazu pędu i energii od bombardujących cząstek do atomów ośrodka. Dzięki temu programy te można zastosować do opisu oddziaływania zarówno wiązek jonów jak i strumienia cząstek z jednorodnym ośrodkiem. Umożliwia to symulację procesu formowania powłok na powierzchni ciał stałych.

Jako przykład zastosowano program TriDyn (Möller 2002) do modelowania procesu formowania powłoki chromowo-żelazowej na powierzchni amorficznej płytki Ni. Przyjęto, że na amorficzną płytkę Ni pod kątem 45° do normalnej pada strumień jonów Cr o energii 20 eV. Formująca się powłoka jest jednocześnie bombardowana wiązką jonów Fe⁺ o energii 1000 eV. Założono, że wiązka jonów Fe⁺ bombarduje powłokę pod kątem 0° do normalnej do powierzchni Ni. Końcowe rozkłady koncentracji Fe, Cr oraz Ni w uformowanej powłoce, w warstwie przejściowej oraz w modyfikowanym podłożu przedstawiono na rysunku 1. Wymienione programy: SRIM 2003, TriDyn oraz TrimCascade mogą również być wykorzystane do modelowania procesu formowania warstw przejściowych oraz pośrednich pomiędzy poszczególnymi warstwami.





Rys. 1. Rozkład głębokościowy względnej koncentracji chromu, żelaza oraz niklu w powłoce formowanej metodą IBAD. Modelowanie wykonane programem TriDyn.

Fig. 1. The depth distribution of relative concentrations of chromium, iron and nickel in coating layer formed by IBAD method. Simulation performed by the TriDyn computer code.

5. PODSUMOWANIE

W rzeczywistości formując powłokę lub modyfikując warstwę wierzchnią musimy określić takie zasadnicze parametry procesu jak: gęstość prądu wiązki jonów i_{jon} , krotność jonizacji jonu q_{jon} , energia jonu E_{jon} , rozmiar wiązki jonów na powierzchni modyfikowanego ośrodka, całkowity czas bombardowania wiązką jonów itp. Mając te parametry można wyznaczyć: całkowity ładunek elektryczny deponowany wiązką jonów w bombardowanym ośrodku oraz całkowitą energię zdeponowaną wiązką bombardujących jonów w penetrowanej przez jony warstwie ośrodka. Znając krotność jonizacji jonów wiązki można określić liczbę bombardujących jonów (Littmark i Ziegler 1980). Gęstość prądu wiązki i_{jon} odpowiada strumieniowi jonów w plazmie zdefiniowanemu równaniem (5).

Proponuje się zastosować do wyznaczenia początkowych parametrów wiązek jonów model opisany równaniami (1)-(19) i przyjęcie następnie uzyskanych wartości jako początkowych do numerycznych symulacji procesu oddziaływania wiązek jonowych modyfikujących bombardowany ośrodek lub formujących powłokę. Przykład takiej symulacji zilustrowano na rysunku 1.

Zaproponowana unifikacja modelowania procesu plazmowej oraz jonowej obróbki powierzchni stanowi podstawę do wyznaczania parametrów technik formowania wielopierwiastkowych i wielowarstwowych powłok opracowywanych w laboratoriach Centrum Doskonałości „Krakowskie Centrum Badawcze Inżynierii Jonowej IONMED”.

Praca powstała w ramach projektu badawczego KBN 096/T08/2003/25.

6. LITERATURA

- Choo, R.T.C., Szekely, J., 1992, Vaporization kinetics and surface temperature in a mutually coupled spot gas tungsten arc weld and weld pool, *Welding Research Supplement*, March, 77-93.
- Choo, R.T.C., Szekely, J., Westhoff, R.C., 2000, Modelling of high-current arcs with emphasis on free surface phenomena in the weld-pool, *Welding Research Supplement*, September, 346-361.
- Elenbaas, W., 1934, Die Quecksilber-Hochdruckenladung, *Physica*, 1, 673-688.
- Frank-Kamieniecki, D.A., 1968, *Wykłady z Fizyki Plazmy*, PWN, Warszawa.
- Godarzi, R., Choo, R., Takasu, T., Toguri, J.M., 1998, The effect of cathode tip angle on the gas tungsten arc welding and the pool, Part. II. The mathematical model for the weld pool, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 31, 569-583.
- Heimann, R.B., 1996, Plasma-spray coating, VCH, Weinheim.
- Heller, G., 1935, Dynamical similarity laws of the mercury high pressure discharge, *Physics*, 6, 389-394.
- Littmark, U., Ziegler, J. F., 1980, Handbook of Range Distributions for Energetic Ions in All Elements, vol. 6, *Stopping and Ranges of Ions in Matter*, Pergamon Press, New York.
- Möller, W., Posselt, M., 2002, *TRIDYN-FZR User Manual*.
- Pietrzyk, M., Krzyżanowski, M., Okara, S., Parchomenko, V., 1996, Thermal Diffusion Finite-Element Analysis of Nitriding Process for Arc Plasma Surface Hardening of Steel, *J. Mat. Proc. Techn.*, 56, 412-421.
- Reed, T.B., 1969, Palniki plazmowe, w: *Najnowsze Osiągnięcia Nauki i Techniki*, R. Colborn (ed.), PWN, Warszawa, 424-432.
- Robertson, J., 2002, Diamond-like amorphous carbon, *Mat. Sci. Eng.*, R37, 129-281.
- Ronda, J., Murakawa, H., Nogi, K., Ushio, M., 2002a, Enhanced Methods of Heat Sources in Welding and Plasma Spraying (1st Report) – Overview of Simple Plasma Models, *Trans. of Japan Welding Research Institute*, 31, No. 1, 1-11.
- Ronda, J., Murakawa, H., Nogi, K., Ushio, M., 2000b, Enhanced Models of Heat Sources in Welding and Plasma Spraying (2nd Report) – Examples of Thermal Plasma Models, *Trans. Japan Welding Research Institute*, 31, No. 2, 107-128.
- Ronda, J., 2002, Modele plazmy termicznej w spawaniu I plazmowej obróbce powierzchniowej, *Informatyka w Technologii Materiałów*, 2, No. 2-3, 81-97.
- Ronda, J., Oliver, G.J., 2000, Consistent thermo-mechano-metalurgical model of welded steel with unified approach to derivation of phase evolution laws and transformation induced plasticity, *Comput. Methods Appl. Mech. Engn.*, 189, 361-417.
- Sansonnens, L., Haidar, J., Lowke, J.J., 2000, Prediction of properties of free burning arcs including effects of ambipolar diffusion, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 33, 148-157.
- Wendelstorf, J., Decker, I., Wohlfahrt, H., Simon, G., 1997, TIG and plasma arc modelling. A survey, w Cerjak, H. (ed.), *Mathematical Modelling of Weld Phenomena*, *The Institute of Materials*, London, 848-897.
- Wendelstorf, J., 2000, Ab initio modelling of thermal plasma gas dischargers (electric arcs), Ph.D. Thesis, TU Braunschweig, 2000.

Artykuł otrzymano do druku2006 r.