

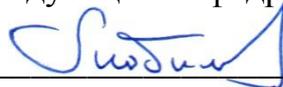
МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Тульский государственный университет»

Институт *Политехнический*  
Кафедра «*Электро- и нанотехнологии*»

Утверждено на заседании кафедры  
«Электро- и нанотехнологий»  
«19» января 2021 г., протокол №5

Заведующий кафедрой



В.В. Любимов

**МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ**  
**по проведению практических занятий**  
**по дисциплине**  
**«Теоретические основы обработки**  
**концентрированными потоками энергии»**

**основной профессиональной образовательной программы**  
**высшего образования – программы бакалавриата**

по направлению подготовки  
***15.03.01 Машиностроение***

с направленностью (профилем)  
***Машины и технологии высокоэффективных процессов***  
***обработки материалов***

Форма обучения: *очная*

Идентификационный номер образовательной программы: 150301-01-21

Тула 2021 год

**Разработчик методических указаний**

Гнидина И.В., доцент, канд.техн.наук, доцент  
(ФИО, должность, ученая степень, ученое звание)

  
(подпись)

## ОРГАНИЗАЦИЯ И МЕТОДИКА ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ

**1.1. Цель и задачи практических занятий**

Целью практических занятий является закрепление и углубление знаний студентов, полученных на лекциях при изучении курса «Теоретические основы обработки концентрированными потоками энергии», а также приобретение практических навыков проведения исследований на основе компьютерного моделирования процессов обработки, основанных на использовании концентрированных потоков энергии (КПЭ).

**1.2. Объекты проектирования и программное обеспечение**

В качестве объектов исследования в ходе занятий используются конкретные процессы обработки (ЭЭО, лазерная обработка, ионная имплантация, вакуумное нанесение покрытий, электролитическое осаждение металлов и сплавов, газотермическое нанесение покрытий), основанные на воздействии КПЭ на материал. Используя математические модели процессов, в ходе исследований необходимо выявить влияние параметров КПЭ на результаты обработки и дать рекомендации по проведению конкретного процесса обработки.

**1.3. Порядок выполнения:**

- ознакомиться с теоретическими сведениями к очередному занятию (см. раздел 2);
- ознакомиться с руководством по использованию программного обеспечения для моделирования процесса воздействия КПЭ;
- произвести моделирование конкретного процесса обработки с исходными данными соответствующего варианта заданий (Приложение 1);
- представить в графическом виде результаты моделирования;
- проанализировать полученные результаты и разработать рекомендации по проведению конкретного вида обработки, основанного на КПЭ.

**1.4. Отчет о выполнении задания.**

Отчет по каждому практическому занятию составляется в произвольной форме и должен содержать:

- указание цели занятия;
- описание математической модели процесса обработки, основанного на КПЭ;
- результаты моделирования в виде графиков, схем или диаграмм;
- анализ результатов моделирования;
- выводы и рекомендации.

**1.5. Литература, рекомендуемая для практических занятий**

1. Гнидина И.В. Концентрированные потоки энергии и физические основы их генерации: Учебное пособие. – Тула: ТулГУ, 2011. – 152 с.
2. Гнидина И.В. Теоретические основы обработки концентрированными потоками энергии: Учебное пособие. – Тула: ТулГУ, 2005. – 122 с.

К занятию №1

1. Немилев Е.Ф. Справочник по электроэрозионной обработке материалов. – Л.: Машиностроение, 1989. – 164с.
2. Справочник по электрофизическим и электрохимическим методам обработки / Г. Л. Амитан, И. А. Байсупов, Ю. М. Барон и др.; Под общ. ред. В. А. Волосатова. Л.: Машиностроение. Ленингр. отд., 1988. – 719 с.

К занятию №2

1. Григорьянц А.Г. Основы лазерной обработки материалов. – М.: Машиностроение, 1989. – 304с.
2. Коваленко В.С. Лазерная технология: Учебник. - К.: Выща шк. Головное изд-во, 1989. - 280 с.: ил.
3. Воздействие лазерного излучения на материалы/ Р. В. Арутюнян, В. Ю. Баранов, Л. А. Большов и др.; Отв. ред. Е. П. Велихов. – М.: Наука, 1989. – 367 с.: ил.

К занятию №3

1. Барвинок В.А., Богданович В.И. Физические основы и математическое моделирование процессов вакуумного ионно-плазменного напыления. М.: Машиностроение, 1999. – 309с.

К занятию №4

1. Оборудование для ионной имплантации/ В.В. Симонов, Л.А. Корнилов, А.В. Шашелев, Е.В. Шокин. – М.: Радио и связь, 1988. – 184с.
2. Х. Риссел, И. Руге. Ионная имплантация: Пер. с нем. В.В. Климова, В.Н. Пальянова./ Под ред. М.И. Гусевой. – М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1983. – 360с.
3. Кумахов М.А., Комаров Ф.Ф. Энергетические потери и пробеги ионов в твердых телах. – Мн.: Изд-во БГУ, 1979.-320с.

К занятию №5

1. Нанесение покрытий плазмой / В.В. Кудинов, П.Ю. Пекаев, В.В. Белашенко и др. – М.: Наука, 1990. – 408с.

К занятию №6

1. Ньюмен Дж. Электрохимические системы. – М.: Мир, 1977.- 463 с.
2. Скорчеллетти В.В. Теоретическая электрохимия. - Л.: Химия, Ленингр. отд-е, 1969. - 608с.
3. Давыдов А.Д., Козак Е. Высокоскоростное электрохимическое формообразование. - М.: Наука, 1990. - 272с.
4. Костин Н.А., Лабяк О.В. Математическое моделирование процессов импульсного электроосаждения сплавов // Электрохимия. - 1995. - т.31, №5. - с.510-516.

## УКАЗАНИЯ К ВЫПОЛНЕНИЮ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ

**2.1. К практическому занятию №1 «Моделирование распределения температурного поля в зоне воздействия КПЭ при электроэрозионной обработке»**

На практическом занятии №1 исследуется процесс распространения тепла в электродах при электроэрозионном воздействии КПЭ, используя модель которого необходимо рассмотреть влияние параметров КПЭ (энергии и длительности импульса) на распределение температуры на поверхности электродов, изготовленных из различных материалов.

При электроэрозионном воздействии концентрированного потока энергии (КПЭ) на поверхность материала наряду с процессами передачи энергии необходимо рассматривать процесс распространения тепла в зоне воздействия. От этого процесса во многом зависит объем лунки, полученной в результате действия импульса и состояние поверхности электрода, что, в конечном итоге, определяет производительность обработки и качество полученной поверхности. Процесс распространения тепла в электроде определяется с одной стороны теплофизическими свойствами материала, из которого он изготовлен, а с другой – энергией выделяющейся на нем. Для обоих электродов способы решения тепловой задачи одинаковы и сводятся к отысканию распределения температуры в окрестности электродного пятна, где источники вводят теплоту в материал электрода. Причем происхождение тепловых потоков значения не имеет.

Рассмотрим составляющие теплового потока, поступающего на электроды (рис. 2.1.1).

Основная доля теплового потока доставляется поверхностным источником непосредственно из канала разряда (на рис. 2.1.1 для анода обозначено  $q_a$ ).

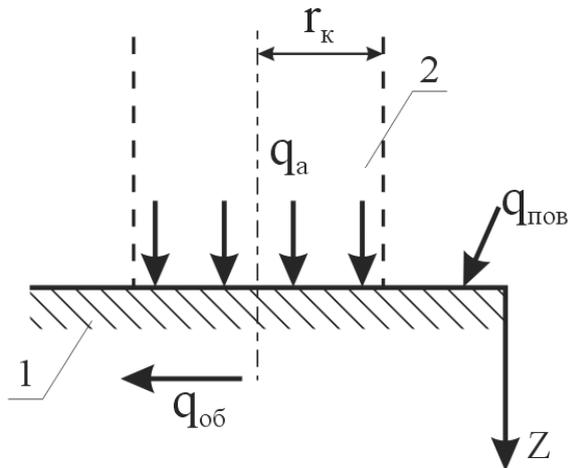
При быстросменяющихся токах резко проявляется поверхностный эффект, благодаря которому ток в электроде сосредоточен в тонком слое вблизи его поверхности. При резком изменении тока разряда, особенно на переднем и заднем фронте импульса тока, в приповерхностном слое электродов согласно закону электромагнитной индукции наводятся вихревые э.д.с. Возникают вихревые токи и вследствие этого джоулев нагрев приповерхностного слоя в области электродного пятна. Тепловой поток, вызванный вихревыми токами, обозначим  $q_{пов}$ . В типовых условиях электроэрозионного воздействия КПЭ мощность нагрева вихревыми токами невелика и повышение температуры от этой составляющей имеет порядок 100 К.

При установившемся токе разряда могут возникать также объемные источники джоулевой теплоты, которая выделяется в электроде при большой местной плотности тока, растекающегося в глубь пятна (объемная составляющая энергии). Если обозначить через  $\sigma_{эл}$  удельную электропроводность материала электрода, то в единице объема мощность подобного источника равна

$$q_{об} = \frac{I_{эл}^2}{\sigma_{эл}} \quad (2.1.1)$$

Эту составляющую теплового потока необходимо учитывать для материалов с высоким электрическим сопротивлением (графита). Для электропроводных материалов электро-

дов (медь) величиной  $q_{об}$  пренебрегают.



**Рис. 2.1.1. Составляющие теплового потока при электроэрозионном воздействии КПЭ: 1 – электрод (анод); 2 – канал разряда**

При рассмотрении тепловой задачи, как правило, вводят некоторые допущения. Во-первых, свойства материала электрода считаются не зависящими от температуры, а тепловой источник стационарным, действующим в течение импульса, т.е. при  $0 < t < \tau_n$ .

Во-вторых, рассматривается распространение тепла вдоль координаты  $z$ , перпендикулярной плоской поверхности электрода в пределах канала разряда (см. рис. 2.1.1).

Распределение температуры  $T_{эл}(z, t)$  в электроде подчиняется уравнению теплопроводности, описывающему распространение теплоты от поверхности вглубь электрода. Источниками  $q_{пов}$  и  $q_{об}$  пренебрегают и учитывают только поверхностный источник мощностью  $q_a$  для анода или  $q_k$  для катода. При необходимости объемные источники могут быть представлены равносильными дополнительными поверхностными источниками.

Считается, что в течение разряда на поверхности анода и катода поступает теплота в количестве  $W_a$  и  $W_k$ , величина которой составляет некоторую часть от общей энергии импульса:

$$W_a = \beta_a W_u; W_k = \beta_k W_u, \quad (2.1.2)$$

где  $\beta_a, \beta_k$  - некоторые эмпирические коэффициенты, зависящие от условий обработки.

Энергиям  $W_a$  и  $W_k$  соответствуют усредненные по времени удельные тепловые потоки к поверхностям электродов:

$$q_a^{cp} = \frac{W_a}{\pi \cdot r_{кр}^2 \tau_u}; \quad q_k^{cp} = \frac{W_k}{\pi \cdot r_{кр}^2 \tau_u}, \quad (2.1.3)$$

где  $r_{кр}$  – средний радиус канала разряда за время  $\tau_u$ .

В настоящее время существует несколько подходов к решению тепловой задачи для электродов. Рассмотрим двумерную модель распределения температуры в поверхностном слое электрода при электроэрозионном воздействии КПЭ.

Сформулируем допущения, принятые при математической постановке задачи.

1. Температурное поле рассматривается в пределах единичной лунки и в ее окрестности (твердая фаза).

2. Теплофизические константы материала принимаются постоянными и их значения усредняются для интервала температур  $20\text{ }^{\circ}\text{C} - T_{\text{пл}}$ .

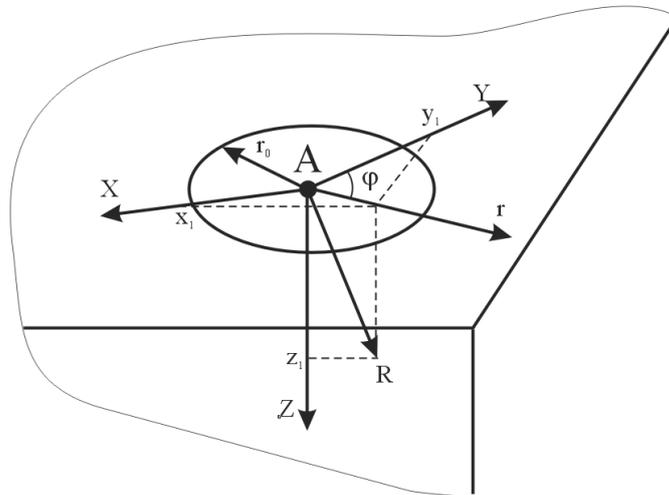
3. Скрытая теплота плавления не учитывается.

Двумерная модель основывается на применении метода источников Томсона, то есть решение задачи получается путем суперпозиции действия мгновенных точечных источников тепла. Для температурного поля от мгновенного точечного источника, в котором выделяется количество тепла  $Q$ , для полуограниченного тела с адиабатической границей распределение температурного поля будет описываться уравнением:

$$T(R, t) = \frac{2Q}{C \cdot \rho (4 \cdot \pi \cdot a \cdot t)^{3/2}} \cdot e^{\frac{-R^2}{4 \cdot a \cdot t}} \quad (2.1.4)$$

где  $R$  – полярная координата;  $C$  – теплоемкость материала электрода;  $\rho$  – плотность материала электрода;  $a$  – коэффициент температуропроводности;  $t$  – время.

Система координат, используемая при решении задачи, представлена на рис. 2.1.2.



**Рис. 2.1.2. Система координат при решении двумерной тепловой задачи**

Декартовы координаты точки  $A$ , в которой рассчитывается температура, обозначены  $x, y, z$ ;  $r, \varphi, z$  – цилиндрические координаты точки  $A$ ,  $r_0$  – эффективный радиус источника. Из рис. 2 очевидно, что:

$$\begin{aligned} x_1 &= r \cdot \cos \varphi; & y_1 &= r \cdot \sin \varphi \\ r^2 &= x_1^2 + y_1^2; & R^2 &= r^2 + z^2 \end{aligned} \quad (2.1.5)$$

Использование цилиндрических координат более удобно, поскольку задача имеет осевую симметрию. При решении задачи значение  $Q$  заменяется эффективным значением, что вполне допустимо, так как рассматриваются не начальные этапы развития температурного поля, а его состояние к концу импульса и после его окончания:

$$Q = q_{\text{эф}} \cdot e^{-kr^2} \quad (2.1.6)$$

При решении методом суперпозиции Томсона выражение (1) интегрируется по времени и координатам. Таким образом, для источника, имеющего эффективный радиус  $r_0$ , действующего в течение времени  $\tau_{\text{и}}$ , справедливо выражение:

$$T_1(R, t) = \int_0^{t_H} \int_0^{2\pi r_0} \int_0^R \frac{2q_{ЭФ} \cdot e^{-kr^2}}{c \cdot \rho [4\pi \cdot a(t-t_1)]^{3/2}} \cdot e^{-\frac{R^2}{4a(t-t_1)}} \cdot r_1 dr_1 d\varphi dt \quad (2.1.7)$$

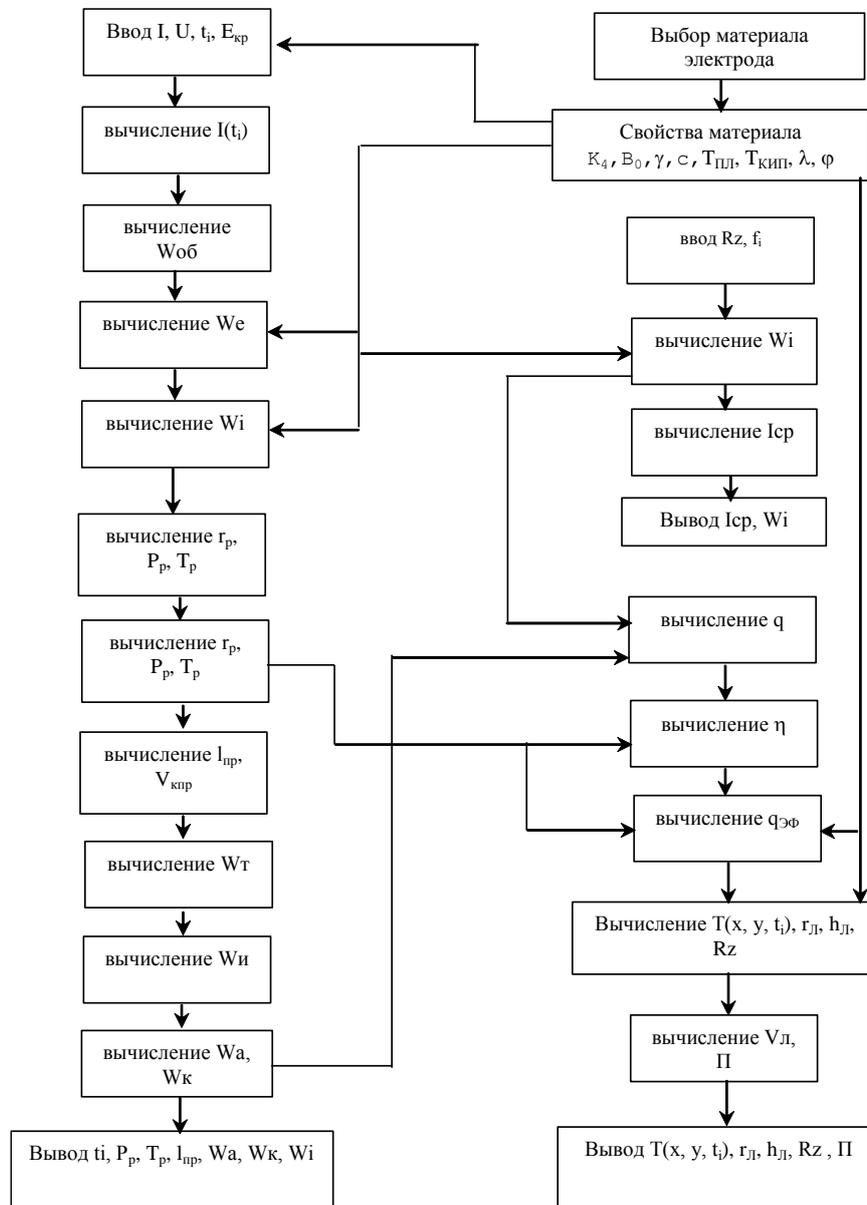
Интегрируя по  $\gamma$  и  $\varphi$ , в конечном виде получаем:

$$T(r, z, t) = \frac{8q_{ЭФ} \cdot a \cdot k}{c \cdot \rho (4\pi \cdot a)^{3/2}} \left[ \int_0^t \frac{1}{\sqrt{t}(4akt+1)} \cdot e^{-\left(\frac{kr^2}{4akt+1} + \frac{z^2}{4at}\right)} dt - \int_0^{t-t_H} \frac{1}{\sqrt{t}(4akt+1)} \cdot e^{-\left(\frac{kr^2}{4akt+1} + \frac{z^2}{4at}\right)} dt \right], \quad (2.1.8)$$

где  $k = \frac{h_{Л}}{r_{Л}^2 \sqrt{a\tau_{II}}}$ .

Второй член в скобке в уравнение (8) позволяет рассчитать температурное поле для момента времени, более позднего, чем длительность импульса.

Для реализации двумерной модели распределения температуры на кафедре ФХИТ разработано программное обеспечение, алгоритм работы которого представлен на рис. 2.1.3.

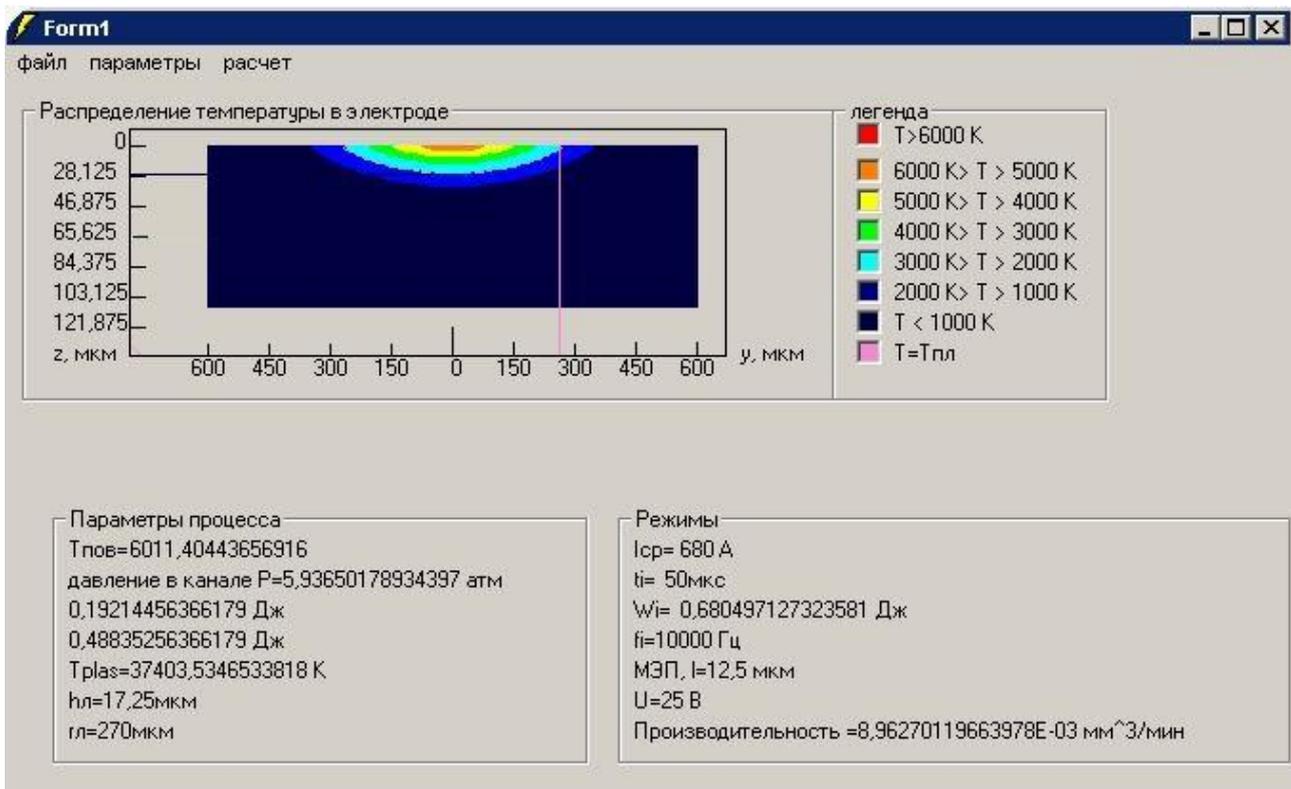


**Рис. 2.1.3.** Алгоритм работы программного обеспечения для реализации двумерной модели распределения температуры при электроэрозионном воздействии КПЭ

На рис. 2.1.4 представлен пример расчета температурного поля для следующих исходных данных: материал электрода Сталь 45, заданная шероховатость  $R_z = 15$  мкм, частота рабочих импульсов  $f_i = 10000$  Гц.

По полученным данным можно сделать выводы:

- об отклонении величины шероховатости, полученной в результате расчета, от заданной;
- о температуре на поверхности электрода, при заданных условиях и, в частности сопоставить ее с температурой кипения материала;
- об отношении радиуса лунки к ее глубине.



**Рис. 2.1.4. Пример расчета температурного поля при ЭО**

### 2.1.1. Задание на практическое занятие №1

В качестве исходных данных для выполнения исследования задается материал и шероховатость поверхности электрода, достигаемая в процессе обработки (см. Приложение). Параметры КПЭ (энергия и частота импульса) для заданного материала и шероховатости выбираются по справочной литературе [1,2]. Для заданного варианта исследуется влияние параметров КПЭ на распределение температуры в поверхностном слое электрода. По результатам моделирования делаются выводы о влиянии параметров КПЭ на процесс распространения тепла, а также выдаются технологические рекомендации по проведению процесса обработки с целью получения более качественного изделия.

## 2.2. К практическому занятию №2 «Моделирование температурных полей при воздействии лазерного излучения»

На практическом занятии №2 рассматривается процесс лазерного воздействия на материал на примере лазерного упрочнения. Исследования выполняются с использованием САПР COSMOSWorks.

Лазерное излучение при падении на поверхность твердого тела частично отражается. Интенсивность отражения энергии определяется значением коэффициента отражения, который зависит от рода материала и длины волны излучения. С ростом температуры поверхности поглотательная способность существенно увеличивается. Поглотательная способность неокисленной металлической поверхности при длине волны лазерного излучения 10,6 мкм определяется уравнением Хагена – Рубенса:

$$A = 112.2(\sigma_0^{-1})^{1/2} \quad (2.2.1)$$

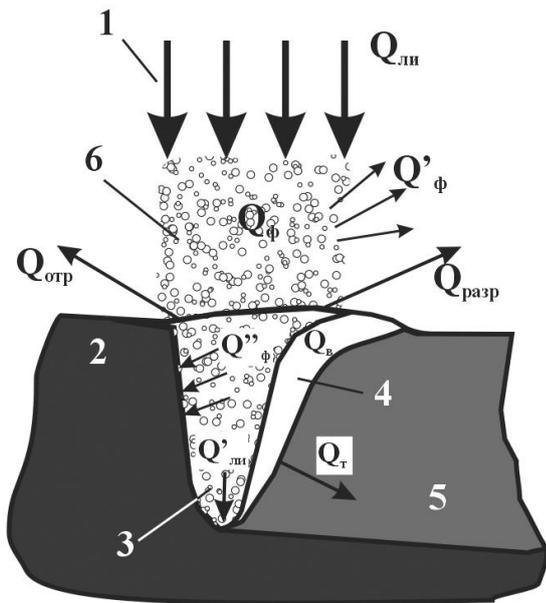
где  $A = 1-R$  – коэффициент поглощения;  $R$  – коэффициент отражения;  $\sigma_0$  – удельная электрическая проводимость металла для постоянного тока, См/м.

Электрическая проводимость металлов уменьшается с ростом температуры, соответственно возрастают коэффициенты поглощения. Кроме этого важным фактором является состояние поверхности. В частности, если воздействие лазерного излучения осуществляется в воздушной или какой-либо другой окислительной среде, то происходят рост окисной пленки на поверхности образца и увеличение поглотательной способности. Таким образом, энергетическая эффективность процессов лазерной обработки может быть значительно повышена соответствующей обработкой поверхности.

Кроме состояния и формы поверхности на поглотательную способность металлов влияют характер распределения плотности мощности в фокальном пятне, направленность облучения, угол сходимости лазерного луча и др. Однако решающее влияние на поглотательную способность оказывает уровень плотности мощности лазерного излучения в зоне воздействия КПЭ.

В зависимости от плотности мощности лазерное излучение может приводить к нагреву, плавлению и испарению материала. Количественной границей между этими процессами является критическая интенсивность излучения. Качественный анализ процессов можно провести с общих теплофизических позиций.

Рассмотрим распределение энергии лазерного излучения для наиболее общего случая установившегося режима проплавления (рис. 2.2.1).



**Рис. 2.2.1.** Схема энерготрат при воздействии лазерного излучения (установившийся режим): 1 – луч лазера; 2 – основной материал; 3 – испарившийся материал; 4 – расплав; 5 – переплавленный металл; 6 – плазменный факел

Связь между основными источниками энергии и различными видами энерготрат может быть установлена с помощью следующих уравнений баланса:

$$\left. \begin{aligned} Q_{ли} - (Q_{ф} + Q_{отр} + Q_{разр}) &= Q'_{ли}; \\ Q_{ф} &= Q'_{ф} + Q''_{ф}; \\ Q'_{ли} + Q''_{ф} &= Q_{в} + Q_{т} \end{aligned} \right\} \quad (2.2.2)$$

где  $Q_{ли}$  – энергия сфокусированного лазерного излучения;  $Q_{ф}$  – энергия, поглощенная в объеме плазменно-парового факела внутри кратера и над его поверхностью;  $Q'_{ф}$  – энергия, рассеиваемая в окружающую среду излучением из плазменного факела;  $Q''_{ф}$  – часть энергии  $Q_{ф}$  факела, поглощаемая стенками канала в результате конвективного и лучистого теплообмена;  $Q_{отр}$  – энергия лазерного луча, отраженная от поверхности основного металла и дна кратера;  $Q_{разр}$  – полная энергия продуктов разрушения, уносимая реактивной парогазовой струей;  $Q'_{ли}$  – энергия лазерного луча, поглощенная в процессе фотон-электронных соударений на стенках канала;  $Q_{в}$  – полное теплосодержание жидкого металла в сварочной ванне;  $Q_{т}$  – энергия, отводимая в глубь основного и переплавленного металла вследствие теплопроводности (см. рис. 14.1).

Эффективность передачи энергии лазерного излучения обрабатываемому материалу определяется значением эффективного коэффициента поглощения, приближенное значение которого может быть получено из системы уравнений (2):

$$A_{эф} = \eta_{эф} = (Q'_{ли} + Q''_{ф}) / Q_{ли} \quad (2.2.3)$$

Дальнейший анализ тепловых процессов можно проводить по известным теплофизическим моделям, используя полученное значение эффективной тепловой мощности источника теплоты.

В простейшем случае задача расчета температурных полей сводится к нахождению

решения линейных дифференциальных уравнении теплопроводности с принятием ряда допущений.

В теоретических расчетах тепловых процессов обычно рассматривают три типа распределения удельного теплового потока — точечное, гауссово и равномерное по пятну нагрева. Для расчетов используется дифференциальное уравнение теплопроводности, решение которого отыскивается при соответствующих данной задаче краевых условиях:

$$\nabla^2 T(x, y, z, t) - \left(\frac{1}{a}\right) \partial T(x, y, z, t) / \partial t = -A(x, y, z, t) / K, \quad (2.2.4)$$

где  $T$  – температура, являющаяся функцией координат  $x, y, z$  и времени  $t$ ;  $K$  – коэффициент теплопроводности;  $A$  – количество тепла, выделяющегося в единице объема за единицу времени, которое зависит от координат и времени;  $a$  – коэффициент температуропроводности.

Коэффициент температуропроводности показывает, как быстро материал воспринимает и передает тепловую энергию. Скорость нагрева пропорциональна теплопроводности и обратно пропорциональна удельной теплоемкости, рассчитанной на единицу объема материала –  $\rho C$  ( $\rho$  – плотность материала,  $C$  – удельная теплоемкость). Таким образом, коэффициент температуропроводности:

$$a = K / \rho C. \quad (2.2.5)$$

Общую формулу для температуры как функции координат и времени в явном виде получить невозможно, поэтому ее выводят для конкретных случаев.

В настоящее время теория теплопроводности получила значительное развитие, тем не менее во многих случаях, представляющих практический интерес, не удается получить решение уравнения теплопроводности в аналитическом виде. Поэтому используют численные методы решения уравнения на ЭВМ.

### *2.2.1. Моделирование тепловых процессов при лазерном упрочнении с помощью САПР COSMOSWorks*

COSMOSWorks – приложение к SolidWorks, предназначенное для решения различных инженерных задач методом конечных элементов. Программа использует геометрическую модель детали или сборки SolidWorks для формирования расчетной модели. Интеграция с SolidWorks дает возможность минимизировать операции, связанные со специфическими особенностями конечно-элементной аппроксимации. Назначение граничных условий производится в привязке к геометрической модели. Такими же особенностями обладают и процедуры представления результатов. Развитие программы происходит как в направлении увеличения вычислительных возможностей, так и, в значительной степени, за счет расширения функциональности, связанной с имитацией расчетных ситуаций, возникающих в по-

вседневной инженерной практике. COSMOSWorks способен принимать результаты аэрогидродинамического или теплового расчетов, а также нагрузки движения, полученные в результате динамического анализа. Более того, рациональный интерфейс и разумно ограниченная функциональность дают возможность сосредоточиться на проектировании, не отвлекаясь на присущие "универсальным" пакетам подробности. Применение инструментов, интегрированных в конструкторские программы, позволяет перебирать варианты с минимальными потерями времени на выполнение рутинных операций.

В общем случае процесс моделирования распределения температурных полей при лазерном воздействии на материал с помощью САПР COSMOSWorks включает в себя следующие этапы:

1. Создание трехмерной модели исследуемого объекта. Модель может быть как создана непосредственно в САПР SolidWorks, так и передана из других САПР с помощью специальных обменных форматов.
2. Задание материала объекта.
3. Выбор начальных условий процесса (мощности лазерного излучения, диаметра пятна лазера, времени воздействия).
4. Расчет теплового потока по формуле:

$$q=4P/\pi d^2 \quad (2.2.6)$$

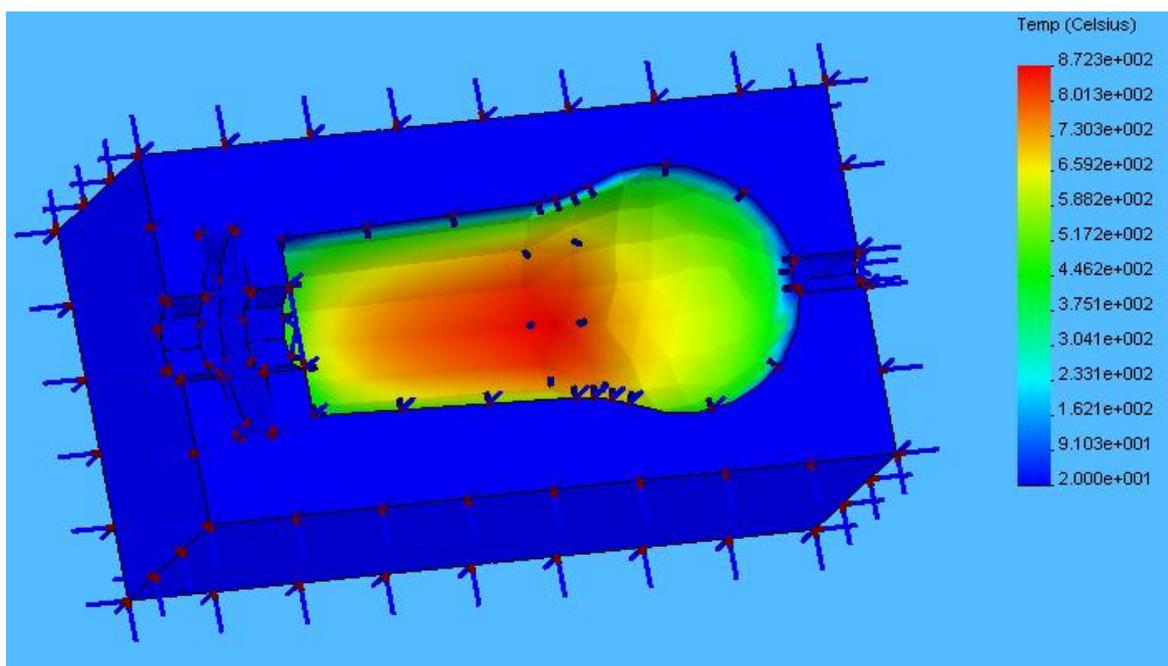
где  $P$  – мощность лазера,  $d$  – диаметр пятна.

5. Построение сетки на трехмерной модели объекта.
6. Задание начальных и граничных условий (температуры и теплового потока).
7. Собственно расчет распределения температуры.
8. Анализ полученных результатов.

Результатом расчетов в системе COSMOSWorks является автоматическое построение температурной диаграммы, подобной представленной на рис. 2.2.2. С помощью данной диаграммы можно:

1. Проанализировать значение температуры на обрабатываемых поверхностях и оценить, достигается ли температура закалки и не превышает ли температура плавления, т.е. достигаются ли цели обработки (упрочнение поверхности).
2. Построив сечение по соответствующей плоскости, оценить глубину упрочненного слоя.

На основании результатов моделирования можно дать рекомендации по проведению процесса.



**Рис. 2.2.2. Пример результатов расчета температурного поля с использованием САПР COSMOSWorks**

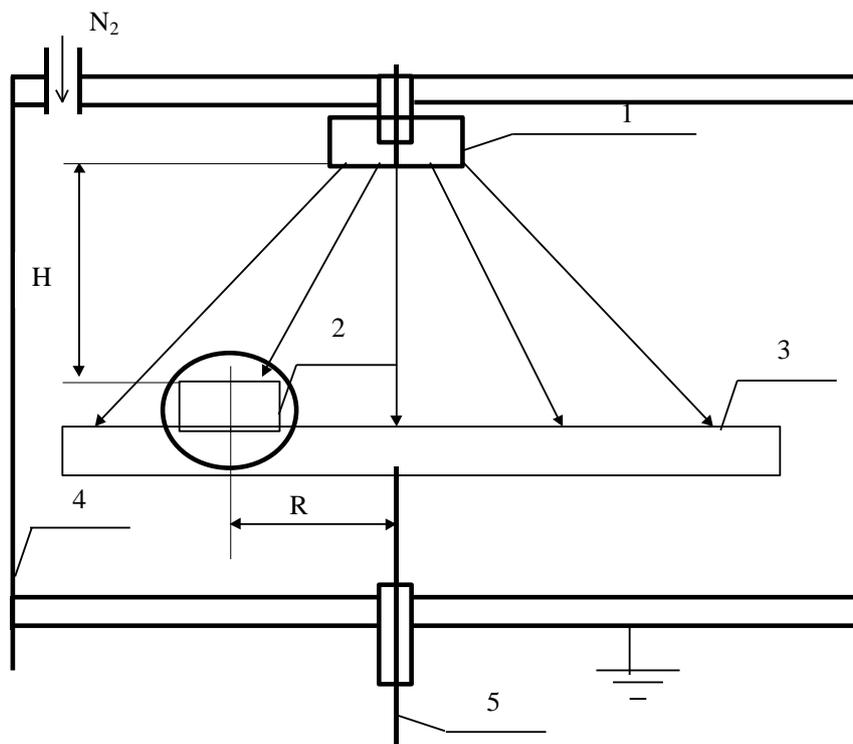
### 2.2.2. Задание на практическое занятие №2

В качестве исходных данных для исследования задается трехмерная модель конкретного объекта, подвергающегося воздействию лазерного излучения, материал, из которого он изготовлен, режимы обработки: мощность лазера и диаметр фокального пятна (см. Приложение). Трехмерная модель объекта задается в виде файла специального обменного формата \*.stp, распознаваемого стандартными САПР. Для заданного объекта исследуется распределение температурного поля в зоне воздействия излучения. По результатам моделирования проводится анализ, и делаются выводы о возможности достижения температуры закалки для конкретного материала при заданных условиях, а также о глубине упрочненной зоны. На основании проведенного моделирования даются рекомендации по проведению процесса лазерного упрочнения.

### 2.3. К практическому занятию №3 «Моделирование воздействия КПЭ при вакуумном напылении на металлические и неметаллические подложки»

На практическом занятии №3 исследуется процесс электродугового осаждения ионно-плазменных покрытий в вакууме, реализуемый на оборудовании ВУ-1Б и ВУ-2МБС и его имитационная модель на ЭВМ. Для компьютерного моделирования процесса используется программа *ipc.exe*.

Моделирование воздействия КПЭ при вакуумном нанесении покрытий будет рассматриваться на примере ионно-плазменного осаждения (ИПО) с электродуговым испарением в вакуумной камере (метод КИБ). Принципиальная схема процесса приведена на рис. 2.3.1.



**Рис. 2.3.1. Схема процесса ионно-плазменного испарения: 1- катод-испаритель; 2 – образец; 3 – подложка; 4 – стенка камеры; 5- место подвода отрицательного смещающего потенциала**

При ИПО протекают следующие физические процессы:

- устанавливается электродуговой разряд между катодом и стенками вакуумной камеры;
- материал катода испаряется под действием тепла, выделяемого в электрической дуге, и частично ионизируется;
- испаренные частицы кА тогда и атомы подаваемого в камеру газа движутся в направлении подложки;
- при прибытии частиц на подложку происходит формирование слоя покрытия, его частичное распыление, внедрение в него ионов и выделение тепла на поверхности подложки.

Управление перечисленными процессами возможно путем изменения технологических параметров процесса осаждения (ТПО): тока электрической дуги  $I$ , давления газа в камере  $P$ , потенциала подложки  $U$ , времени осаждения  $t$ , индукцией  $B$ .

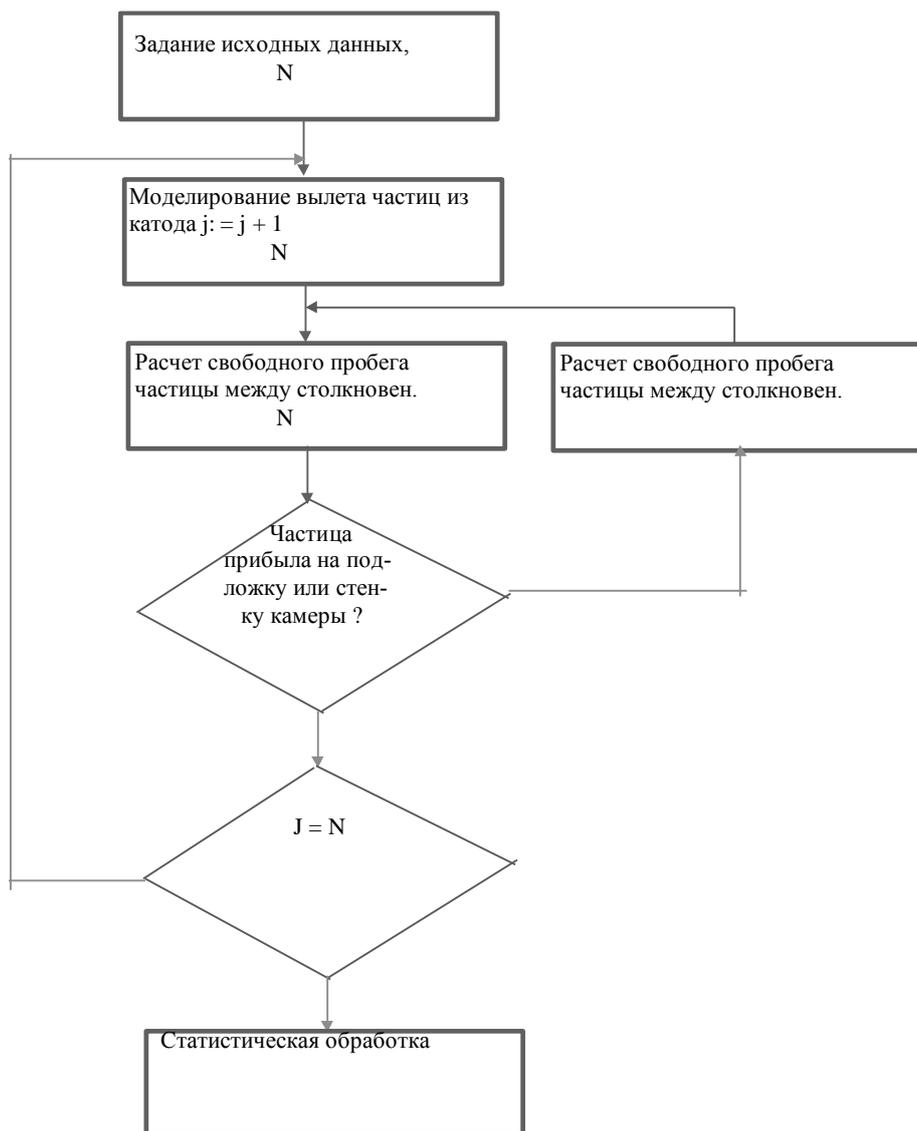
В падающем потоке присутствует около 80% ионов. 1-3,5% от общего количества выхода металла составляют капли. Ионы и атомы вылетают с поверхности катода, подчиняясь закону косинуса относительно нормали. Благодаря существованию ионного облака существует скачок потенциала в электродной области. Энергия ионов после прохождения ионного облака составляет 20-30 эВ. На атомы металла скачок потенциала не действует, поэтому их средняя энергия 0,3-0,4 эВ.

Для получения покрытий, состоящих из нитридов, карбидов или оксидов в камеру подают реакционно-способные газы. При этом молекулы газов, сталкиваясь с ионами плазменного потока, диссоциируют и частично ионизируются. Таким образом, атомы газов пре-

терпевают процесс возбуждения и ионизации. При этом часть энергии безвозвратно теряется. Следовательно, столкновения отличаются от упругих.

### 2.3.1. Моделирование движения потока частиц

Для моделирования используем метод Монте-Карло (рис. 2.3.2). Будем рассматривать движение отдельных частиц. Принимаем количество частиц для моделирования не менее одной тысячи. Моделирование завершается статистической обработкой результатов по всем частицам.



**Рис. 2.3.2. Блок-схема алгоритма расчета движения частиц методом Монте-Карло**

Принимается, что поток состоит из атомов и ионов разной зарядности. Содержанием частиц капельной фазы пренебрегается. Тип вылетающей из катода частицы принимается случайным образом с вероятностью, соответствующей степени ионизации потока  $\gamma_{\text{ion}}$  и распределению ионов по зарядам  $n_i$  (табл. 2.3.1).

Выбор типа вылетающей частицы определяется при помощи случайного числа  $\gamma$   $[0; 1]$ . Кроме того, для расчета движения частицы должны быть известны  $m_1$  - масса частицы,  $r_1$  -

атомный или ионный радиус,  $E_1^*$  - энергия возбуждения,  $E_1^i$  - энергия ионизации,  $z_1$  - заряд частицы. Эти данные являются табличными. Моделирование вылета частицы проводится в соответствии со схемой электродугового испарения. Предполагается, что частица выходит из центра катода с координатами  $x=y=z=0$ .

Таблица 2.3.1

### Распределение ионов по зарядам в плазменном потоке

| Материал | Заряд иона |     |     |
|----------|------------|-----|-----|
|          | +1         | +2  | +3  |
| Ti       | 27%        | 63% | 10% |
| Al       | 72%        | 28% | -   |

$\gamma_{\text{ион}} \approx 80\%$ .

Результатом моделирования процесса осаждения  $N$  частиц является распределение прибывших на подложку частиц по радиусу подложки и по энергиям прибытия. Функции распределения вероятности находятся, например, путем построения статистических полигонов распределения и применения сплайн-интерполяции и аппроксимации полиномами. Условиями нормировки функций  $p(R)$  и  $p(E)$  являются

$$\int_0^R p(R) dR = 1; \quad \int_0^{\infty} p(E) dE = 1. \quad (2.3.1)$$

Функции  $p(R)$  и  $p(E)$  и средняя энергия прибытия используются для расчета толщины покрытия, концентрации примесей внедрения и температуры осаждения.

#### 2.3.2. Моделирование роста слоев покрытия

Принимая во внимание, что  $Q$  (плотность потока осаждающихся частиц) неравномерно распределена по радиусу подложки используем для расчета толщины покрытия на расстоянии от центра подложки следующее выражение:

$$h(R) = \frac{M}{N_a} \cdot [1 - S(\bar{E})] \cdot Q(R) \cdot t \quad (2.3.2)$$

где  $M$  - молекулярная масса материала покрытия;  $\rho$  - плотность материала покрытия;  $Q(R)$  - плотность потока частиц, прибывающих на подложку на расстоянии  $R$  от ее центра;  $t$  - время осаждения;  $S(\bar{E})$  - коэффициент распыления покрытия ионами с энергией  $\bar{E}$ .

$$S(\bar{E}) = \frac{1}{72 \cdot \sqrt{3}} \cdot \sigma(E_0) \cdot N^{2/3} \cdot \frac{(\bar{E} - E_0)^2}{E_0^2} \quad (2.3.3)$$

где  $\sigma(E_0)$  - сечение столкновения ионов и атомов - величина постоянная для заданных типов атомов;  $N$  - атомная плотность покрытия,  $E_0$  - пороговая энергия распыления.

При  $S(\bar{E}) \geq 1$  осаждения не происходит из-за интенсивного распыления поверхности подложки. Такие режимы ионно-плазменного осаждения используются для проведения

очистки поверхности детали путем ионной бомбардировки, т.е. выбирается энергия ионов, при которой  $S(\bar{E}) > 1$ . Например для Ti  $S(\bar{E}) = 1000$  эВ, для Al  $S(\bar{E}) = 600$  эВ.

Плотность потока частиц  $Q(R)$  может быть найдена из выражения

$$Q(R) = \frac{S_k}{S_p} \cdot K^0 \cdot p(R) \cdot Q_0, \quad (2.3.4)$$

где  $S_k$  - площадь испаряемого катода;  $S_p$  - площадь подложки;  $K^0$  - доля частиц, попавших на подложку;  $p(R)$  - функция распределения частиц по радиусу подложки;  $Q_0$  - плотность потока частиц на выходе из испарителя, которая определяется типом и мощностью испарителя.

$$Q_0 = \frac{\Delta m_k}{m \cdot S_k}, \quad (2.3.5)$$

где  $\Delta m_k$  - массовая скорость эрозии катода;  $\Delta m_k = \chi \cdot I$ , где  $I$  - ток электрической дуги;  $\chi$  - коэффициент электропереноса материала катода.

С учетом (2.3.1), (2.3.2) для толщины покрытия имеем:

$$h(R) = \frac{\chi \cdot K^0}{\rho \cdot S_p} \cdot [1 - S(\bar{E})] \cdot p(R) \cdot I \cdot t \quad (2.3.6)$$

### 2.3.3. Задание на практическое занятие №3

Используя исходные данные одного из вариантов (см. Приложение) смоделировать процесс осаждения ионно-плазменных покрытий при различном давлении газа в камере. Построить графики функции  $p(R)$  (распределения частиц по радиусу подложки) при различном давлении газа в камере.

Используя исходные данные одного из вариантов (см. Приложение) смоделировать процесс осаждения ионно-плазменных покрытий при различном давлении газа в камере. Построить график зависимости  $n_p/N$  (отношение количества частиц, прибывших на подложку к общему количеству моделируемых частиц) от давления газа в камере.

Рассчитать толщину покрытия в центре подложки и на периферии, используя результаты имитационного моделирования. При расчетах использовать следующие данные:

$s(E) = 0.1 - 0.35$  при изменении напряжения от 10 до 200 В;

$t = 5$  мин;

$\gamma_{\text{ион}} \sim 80\%$ ;

$R_{\text{камеры}} = 0,5$  м;

$R_{\text{подложки}} = 0,3$  м.

| Материал катода | Ток электрической дуги, А | Коэффициент электропереноса материала катода, $\text{кг} \cdot \text{с}^{-1} \cdot \text{А}^{-1}$ | Плотность материала покрытия, $\text{кг}/\text{м}^3$ |
|-----------------|---------------------------|---|--|
| Ti,             | 100                       | $53 \cdot 10^{-9}$  | 4500   |
| Zr              | 160                       | $79 \cdot 10^{-9}$  | 6440   |
| Cr              | 90                        | $42 \cdot 10^{-9}$  | 7100   |

Остальные исходные данные соответствуют выбранному варианты (см. Приложение).

#### 2.4. К практическому занятию №4 «Моделирование воздействия КПЭ при ионной имплантации азота в инструментальные стали»

На практическом занятии №4 исследуется процесс ионной имплантации, используя модель которого необходимо провести расчет характеристик распределения (средний процированный пробег  $R_p$ , отклонение пробега  $\Delta R_p$ , распределение концентрации по глубине внедрения  $N(x)$ ) ионов азота для встречающихся в инструментальных материалах фаз при различных значениях энергии ионов.

При взаимодействии ионного пучка с поверхностью происходит два взаимосвязанных процесса: внедрение иона в кристаллическую решетку материала и образование в результате этого различных дефектов.

Эффекты, возникающие при бомбардировке твердых тел тяжелыми заряженными частицами, способствующие их торможению или рассеянию, классифицируют следующим образом:

1. Неупругие соударения со связанными электронами тормозящего вещества. Потеря энергии при таких соударениях обусловлена возбуждением или ионизацией атомов или молекул.

2. Неупругие соударения с ядрами. Они вызывают тормозное излучение, возбуждение ядра или ядерные реакции.

3. Упругие соударения со связанными электронами.

4. Упругие соударения с ядрами или атомами. При этом часть кинетической энергии передается атомам поверхности материала (мишени).

5. Черенковское излучение. Оно возбуждается частицами, которые движутся в среде со скоростью, большей фазовой скорости света.

При торможении частиц неупругие соударения с ядрами и упругие столкновения с электронами не играют большой роли по сравнению с неупругими соударениями с электронами (электронное торможение) и упругими соударениями с ядрами (ядерное торможение). Какой из этих эффектов будет преобладать, зависит от энергии и массы ускоренных частиц и массы и порядкового номера атомов вещества. В диапазоне энергий, важных для ионной имплантации, следует рассматривать обе составляющие. Для расчета торможения первичных ионов в веществе вводя понятие сечения электронного и ядерного торможения  $S_{e,n}$ :

$$S_{e,n} = \frac{1}{N} \left( \frac{dE}{dx} \right)_{e,n}, \quad (2.4.1)$$

где  $N$  – число атомов в единице объема мишени;  $dE/dx$  – потери энергии при торможении заряженных частиц.

Полный пробег частицы определяется из соотношения:

$$R = \frac{1}{N} \int_0^E \frac{dE}{S_n(E) + S_e(E)}, \quad (2.4.2)$$

где  $R$  – средняя общая длина пути частицы с начальной энергией  $E$ .

Таким образом, для определения пробега частицы необходимо знать электронное и ядерное сечение торможения.

**Ядерное торможение.** Потери энергии  $dE$  ионом, обусловленные ядерным взаимодействием в слое  $dx$ , пропорциональны числу атомов в единице объема  $N$  и полной энергии, передаваемой всем частицам мишени в этом слое:

$$S_n(E) = \frac{1}{N} \left( \frac{dE}{dx} \right)_n = \int_0^\infty T_n(E, \rho) 2\pi\rho d\rho = \int_0^{T_m} T_n d\sigma(E, T_n), \quad (2.4.3)$$

где  $d\sigma$  – дифференциальное поперечное сечение взаимодействия ( $d\sigma = 2\pi\rho d\rho$ );  $\rho$  – прицельное расстояние;  $T_n$  – энергия, передаваемая движущимся атомом атомам мишени при столкновении;  $T_m$  – максимальная энергии, передаваемая при любом столкновении.

**Электронное торможение.** В высокоэнергетической области с уменьшением скорости частиц возрастает роль электронного торможения. Считается, что электроны образуют свободный электронный газ, и сечение электронного торможения пропорционально скорости ионов, т.е. пропорционально корню квадратному из их энергии:

$$S_e(E) = \frac{1}{N} \left( \frac{dE}{dx} \right)_e = k' E^{1/2},$$

или, если рассчитать энергию  $T_e$ , которая теряется при парном столкновении частиц с зарядами  $z_1$  и  $z_2$  за счет электронного взаимодействия:

$$S_e(E) = \int_0^{\infty} T_e(E, \rho) 2\pi\rho d\rho \quad (2.4.4)$$

Используя рассчитанные по формулам (3) и (4) значения  $S_e(E)$  и  $S_n(E)$ , можно с помощью уравнения (2) рассчитать средний пробег иона. Распределение пробегов имплантированных ионов определяется средним пробегом  $R_p$ , стандартным отклонением  $\Delta R_p$  и дозой облучения  $N_0$ :

$$N(x) = \frac{N_0}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} \exp\left[-\frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right]. \quad (2.4.5)$$

Максимальная концентрация внедренной примеси выражается соотношением:

$$N_{\max} = \frac{N_0}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} \quad (2.4.6)$$

Существуют два метода расчета распределения концентрации имплантированных атомов – метод имитационного моделирования (Монте-Карло) и метод аналитического расчета. Метод Монте-Карло более полно отражает физику процесса и позволяет получить более точные результаты, но требует большего объема вычислений.

Для определения среднего проецированного пробега  $R_p$  и его отклонения  $\Delta R_p$  воспользуемся методом имитационного моделирования Монте-Карло. При этом случайными величинами при моделировании каждого взаимодействия будут прицельное расстояние  $\rho$ , а также характеристики очередного атома мишени ( $M_2, Z_2$ ). Такой метод имитационного моделирования позволяет учитывать неоднородность химического состава обрабатываемого материала.

#### 2.4.1. Расчет пробегов ионов методом Монте-Карло

Модель расчета пробегов ионов разработана со следующими допущениями:

1. Мишень считается аморфной (не учитывается кристаллическая решетка). В случае кристаллической мишени возможен эффект каналирования ионов. Каналирование не учитывается, так как при реальном процессе имплантации быстро накапливаются дефекты решетки, которые препятствуют каналированию.

2. Изменение химического состава материала в процессе имплантации не учитывается.

3. Учитываются потери энергии только при неупругих взаимодействиях с электронами и упругих взаимодействиях с ядрами

$$T = T_e + T_n, \quad (2.4.7)$$

где  $T$  – общие потери энергии при одном взаимодействии;  $T_e$  – электронные потери;  $T_n$  – ядерные потери.

Электронные потери рассчитываются по формуле:

$$T_e = \frac{(z_1 + z_2)^{5/3} 4,3 \cdot 10^{-8} \cdot u}{\left[1 + 3,1(z_1 + z_2)^{1/3} \cdot 10^7 \rho\right]^{1/2}}, \quad (2.4.8)$$

где  $u$  – скорость налетающего иона;  $z_2$  – атомный номер элемента вещества мишени (разыгрывается в соответствии с таблицей вероятности встречи данного вещества).

Прицельное расстояние  $\rho$  разыгрывается как равномерно распределенная случайная величина в пределах половины минимального межатомного расстояния.

Ядерные потери рассчитываются по формуле

$$T_n(E, \rho) = E \frac{2M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} (1 - \cos \varphi), \quad (2.4.9)$$

где  $M_1$  – масса налетающей частицы;  $M_2$  – масса атома мишени;  $\varphi$  – угол отклонения в системе центра масс рассчитывается как:

$$\varphi = \pi - 2p \int_0^{u_{\max}} \frac{du}{\left[1 - V(u)/E_r - p^2u^2\right]^{1/2}}. \quad (2.4.10)$$

где  $u = 1/r$ ,  $r = r_1 + r_2$  – расстояние между частицами в системе центра масс;  $V(u)$  – потенциал взаимодействия (для его расчета используются аппроксимации Зоммерфельда, Гаспара, Тейтца, Видефола);  $E_r = EM_2/(M_1 + M_2)$  – энергия иона в системе центра масс;  $u_{\max}$  – величина, обратная минимальному расстоянию, на которое сближаются частицы.

Величина  $M_2$  разыгрывается в соответствии с таблицей вероятности встречи данного элемента.

Схема алгоритма расчета среднего проецированного пробега приведена на рис. 2.4.1.

Последовательность действий для расчета среднего проецированного пробега следующая:

1. Разыгрывается прицельный параметр  $\rho$ , характеристики очередного атома мишени (атомный номер  $Z_2$  и атомная масса  $M_2$ ).
2. По формулам (7)–(9) определяются величины  $T_e$ ,  $T_n$  и  $T$ .
3. По формуле  $E_i = E_{i-1} - T$  рассчитывается текущая энергия частицы.
4. При условии  $E_i > 0$  текущее значение пробега рассчитывается по формуле:  
 $R_i = R_{i-1} + \Delta R$ .
5. По формуле  $Rp_i = Rp_{i-1} + \Delta R \cos \varphi$  определяется значение проецированного пробега.
6. Если  $E_i \leq 0$  то  $Rp_i$  принимается в качестве значения пробега, в противном случае пункты 1–5 повторяются.
7. Для расчета распределения количества ионов по глубине  $p$ . 1-6 повторяются необходимое число раз.
8. Обработывается полученный массив значений  $Rp_i$ , при этом рассчитывается средний проецированный пробег и среднее квадратичное отклонение пробега.

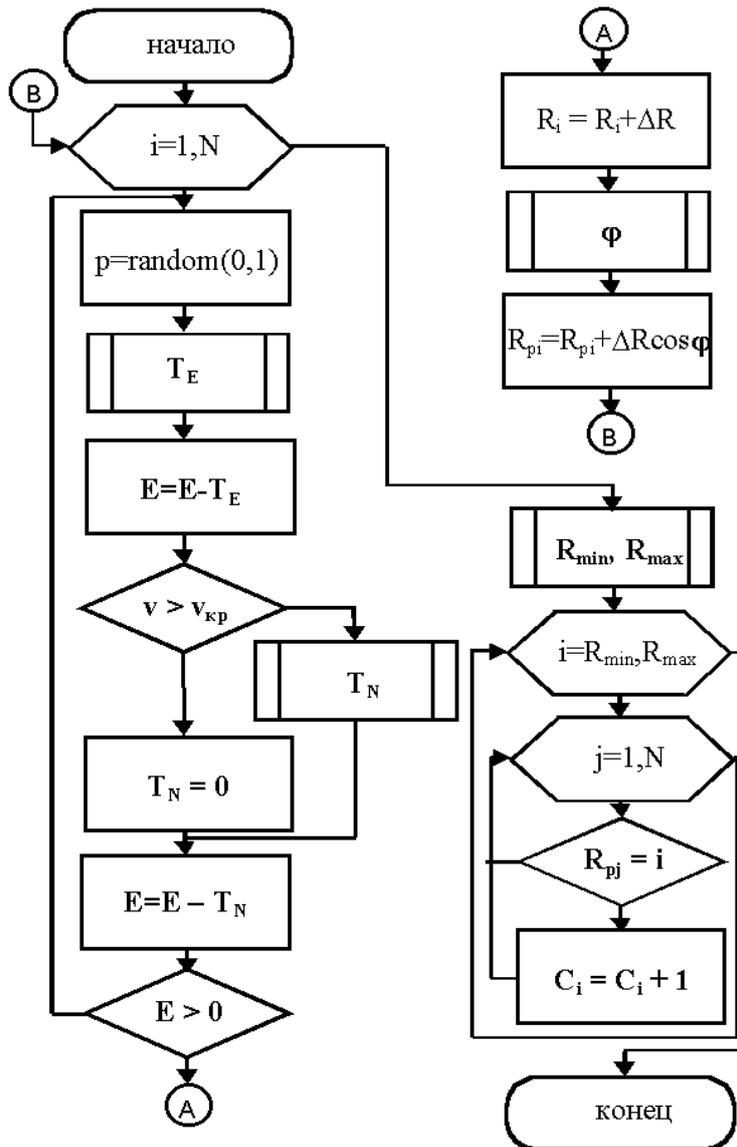


Рис. 2.4.1. Алгоритм расчета пробегов ионов

Расчет среднего проецированного пробега ведется по известной формуле:

$$\bar{R}_p = \sum_{i=1}^N R_{p_i} / N, \quad (2.4.11)$$

где  $N$  – количество элементов массива,  $i$  – номер элемента,  $R_{p_i}$  – проецированный пробег, рассчитанный по приведенному выше алгоритму.

Расчет дисперсии пробега производится по формуле:

$$DR_p = \frac{\sum_{i=1}^N (\bar{R}_p - R_{p_i})^2}{N}, \quad (2.4.12)$$

Среднее квадратичное отклонение пробега (страгглинг пробега) рассчитывается по формуле:

$$\Delta R_p = \sqrt{DR_p}. \quad (2.4.13)$$

Химический состав инструментальных материалов не является однородным – химические элементы распределены не равномерно. При этом размер фазовых зерен в материале мишени, как правило, значительно превышает длину среднего проецированного пробега. В

связи с этим, для дальнейшего расчета распределения концентрации внедренных ионов по глубине мишени будем проводить расчеты пробегов для фаз, входящих в состав инструментальных сталей.

#### 2.4.2. Расчет распределения концентрации внедренных ионов по глубине мишени

Расчет распределения концентрации внедренных ионов по глубине мишени проводится в следующей последовательности:

1. Получим зависимости среднего проецированного пробега  $R_p$  и страгглинга пробега  $\Delta R_p$  ионов для данной фазы материала мишени от энергии ионов. Для получения этих зависимостей необходимо провести расчет распределения количества внедренных ионов по глубине мишени в соответствии с алгоритмом, приведенным на рис. 1, и определить характеристики полученного распределения – его математическое ожидание и среднеквадратическое отклонение.

2. Расчет распределения концентрации внедренных ионов будем проводить, исходя из аналитической формулы (5), с использованием полученных зависимостей. Для учета химического состава и фазовой структуры материала введем весовые коэффициенты для фаз, которые можно получить из процентного содержания каждой фазы в материале мишени:

$$k_i = \frac{P_i}{100}, \quad (2.4.14)$$

где  $P_i$  – процентное содержание каждой фазы в материале мишени.

С учетом весовых коэффициентов соотношение (5) примет вид:

$$N(x) = \frac{N_0}{\sqrt{2\pi}} \sum_{i=1}^n \frac{1}{\Delta R_{p_i}} \exp \left[ -\frac{(x - R_{p_i})^2}{2\Delta R_{p_i}^2} \right], \quad (2.4.15)$$

где  $n$  – количество фаз в материале мишени;  $i$  – номер фазы;  $x$  – глубина проникновения ионов.

#### 2.4.3. Задание на практическое занятие №4

В качестве исходных данных на практическом занятии задается материал фазы в инструментальной стали и начальная энергия ионов азота (см. Приложение). Для заданного варианта рассчитываются значения среднего пробега и распределения концентрации по глубине внедрения. По результатам моделирования делаются выводы о распределении концентрации ионов в различных фазах инструментальных сталей.

### 2.5. К практическому занятию №5 «Моделирование процесса генерации плазмы при газотермическом плазменном нанесении покрытий»

На практическом занятии №5 исследуется является процесс газотермического плазменного нанесения покрытий и, в частности, процесс движения частиц в плазме.

Исследование динамики движения частицы в струе включает в себя расчет траектории и скорости движения частицы.

Плазма служит источником энергии не только для нагрева, плавления и распыления наносимого материала – она сообщает ему еще и энергию в виде скорости движения напыляемых частиц. Вследствие того, что температура и скорость плазмы распределены по сечению струи неравномерно, скорость частиц на оси струи выше, чем на ее периферии. Движение частицы вещества в потоке газа определяется суммарным действием на нее ряда сил, направление и величина которых различна. К этим силам можно отнести: силу, возникающую

вследствие градиента давления в потоке; силу, обусловленную нестационарностью процесса и зависящую от характера движения частицы за прошедший отрезок времени; силу, обусловленную вращением частиц, которое возникает вследствие градиента скорости в поперечном сечении струи плазмы, обтекающей частицу; силу тяжести и другие силы. Однако основной силой, действующей на напыляемую частицу в потоке плазмы, является сила аэродинамического сопротивления.

На траекторию частиц и их нагрев в плазменном потоке влияют размер частиц, свойства распыляемого материала, скорость ввода частиц в камеру плазмотрона и режим работы последнего. Приблизительно скорость напыляемых частиц можно определить по формуле

$$v = v_{nl} \left[ 1 - \exp \left( - \sqrt{2Al / v_{nl}} \right) \right], \quad (2.5.1)$$

где  $v_{nl}$  - скорость потока плазменной струи;  $l$  - путь частицы;  $A = 4,5\eta / r^2\rho$ ;  $\eta$  - вязкость среды.

Скорость частиц определяется скоростью плазменного потока и зависит от расхода плазмообразующего и транспортирующего газа, а также от тока дуги. Аналитические расчеты позволяют рассчитать скорость частиц в момент удара об основу, однако из-за невозможности точного учета ряда факторов надежность этих расчетов ухудшается.

Для решения задачи о движении частицы в плазме принимаются допущения:

- 1) частицы являются сферическими и имеют одинаковый диаметр;
- 2) распределение частиц по сечению канала сопла равномерное;
- 3) частицы не взаимодействуют между собой и со стенкой сопла;
- 4) присутствие частиц конденсированной фазы в плазме не влияет на термодинамические и теплофизические свойства газа;
- 5) испарение частиц не происходит.

С учетом этих допущений уравнение движения частиц в потоке газа за счет сил вязкости и динамического напора записывается в виде

$$v_1 \frac{dv_1}{dx} = \frac{3\gamma_{II}c_x}{4\gamma_1 d} (v_{II} - v_1)^2, \quad (2.5.2)$$

где  $x$  - путь, пройденный частицей;  $v_1$  - скорость частицы;  $v_{II}$  - скорость плазмы;  $\gamma_1$  - плотность материала частицы;  $\gamma_{II}$  - плотность плазмы;  $d$  - диаметр частицы;  $C_x$  - коэффициент аэродинамического сопротивления частицы.

Интегрирование выражения (2.5.2) осуществляется в предположении, что  $\gamma_{II}$ ,  $v_{II}$ ,  $C_x$  - постоянным и равны соответствующим средним по длине и по сечению потока параметрам. Из практики напыления известно, что, несмотря на высокую скорость истечения плазменных струй из плазмотронов (1000-2000 м/с), частицы напыляемого материала в современных установках разгоняются до 50 - 200 м/с и только в некоторых установках их скорость может достигать 400 - 600 м/с в зависимости от плотности их материала. Большая разница между скоростью частицы и скоростью плазмы объясняется большими размерами частиц, низким коэффициентом сопротивления  $C_x$ , малой протяженностью зоны разгона, понижением плотности плазмы при увеличении ее температуры и другими факторами. Поэтому, если пренебречь  $v_1$  по сравнению с  $v_{II}$  в скобках, то (2.5.2) можно представить в виде:

$$v_1 \frac{dv_1}{dx} = \frac{3\gamma_{II} C_x}{4\gamma_1 d} v_{II}^2. \quad (2.5.3)$$

После интегрирования этого выражения и преобразований получаем

$$v_1 = v_0 + v_{II} \sqrt{\frac{3\gamma_{II} C_x}{2\gamma_1 d} x}, \quad (2.5.4)$$

где  $v_0$  - начальная скорость частицы вдоль потока. Очевидно, что при  $v_0 = 0$  имеем:

$$v_1 = v_{II} \sqrt{\frac{3\gamma_{II} C_x}{2\gamma_1 d} x} \quad (2.5.5)$$

### 2.5.1. Задание на практическое занятие №5

Для проведения исследований в качестве наносимого материала зададимся тугоплавкими и высокопрочными частицами порошка: вольфрама (W), применяемого для защиты от износа в условиях высокотемпературной коррозии; и оксида алюминия ( $Al_2O_3$ ) – применяемого для защиты от ржавчины и окалина. Напыление данных частиц размером 10 – 50 мкм ведется аргонно-азотной плазмой мощностью 35 кВт при диаметре сопла плазмотрона 5,54 мм [1].

В качестве плазмообразующего газа примем: инертный газ - аргон (Ar); и активный газ - азот ( $N_2$ ).

Оценка результатов будет вестись с точки зрения максимальной скорости.

В таблице 2.5.1 приведены физические свойства плазмообразующих газов, используемых для моделирования.

Таблица 2.5.1

#### Физические свойства плазмообразующих газов

| Параметры                         | Аргон | Азот |
|-----------------------------------|-------|------|
| $v_{II}$ , м/с                    | 1000  | 600  |
| $\gamma_{II}$ , кг/м <sup>3</sup> | 1,784 | 1,25 |
| $C_x$ , Н                         | 0,05  | 0,05 |

Для частиц порошка вольфрама и оксида алюминия исходные данные приведены в таблице 2.5.2.

Таблица 2.5.2

#### Свойства частиц порошка

| Параметр                       | Вольфрам | Оксид алюминия |
|--------------------------------|----------|----------------|
| $\gamma_1$ , кг/м <sup>3</sup> | 19300    | 3600           |

На практическом занятии создается программное обеспечение с использованием приложения **Visual Basic**, которое затем используется для исследования процесса.

В результате моделирования должны быть получены зависимости: скорости частиц от их размера и расстояния между соплом и подложкой.

## 2.6. К практическому занятию №6 «Моделирование воздействия КПЭ при электролитическом осаждении металлов»

На практическом занятии №6 исследуется процесс импульсного электролитического осаждения микрорельефов из сульфатного электролита никелирования, содержащего в качестве добавки борную кислоту, используя модель которого необходимо исследовать влияние параметров КПЭ (плотности тока, длительности и частоты следования импульсов) на выходные характеристики (значение электродного потенциала, произведение растворимости, выход по току).

Процесс электролитического осаждения представляет собой электрохимическое восстановление ионов на поверхности раздела «электрод–электролит», приводящее к образованию металла или сплава. Процесс электролитического осаждения с использованием КПЭ можно разделить на несколько стадий:

- химические реакции в глубине раствора;
- массоперенос из объема раствора к поверхности электродов;
- электрохимические реакции (перенос заряда) на поверхности электродов;
- образование новой фазы (кристаллизация на катоде).

В глубине раствора происходят **реакции электролитической диссоциации** компонентов электролита. Эти реакции являются источником свободных ионов, участвующих в процессе осаждения.

Образовавшиеся в результате диссоциации свободные ионы **упорядоченно перемещаются** в направлении электродов под действием следующих механизмов:

- миграции под действием электрического поля;
- диффузии под действием градиентов концентрации;
- конвекции под действием движущегося электролита.

С учетом трех названных выше механизмов массопереноса поток каждого из растворенных компонентов многокомпонентной системы описывается уравнением:

$$N_i = -D_i \text{grad} c_i - D_i \frac{z_i F}{RT} c_i \text{grad} \varphi + c_i \vec{v}, \quad (2.6.1)$$

где  $N_i$  – поток растворенного  $i$ -го компонента;  $D_i$  – коэффициент диффузии;  $c_i$  – концентрация;  $z$  – заряд иона;  $F$  – число Фарадея;  $R$  – универсальная газовая постоянная;  $T$  – температура;  $E$  – потенциал;  $\vec{v}$  – скорость движения электролита.

На поверхности электрода происходит собственно **электрохимическая реакция**, заключающаяся в том, что ион изменяет свой заряд (восстанавливается) и превращается в атом, являясь источником выделяемого металла.

Плотность тока разряда  $i$ -го компонента (фарадеевский ток) определяется уравнением:

$$i^F(t) = i^0 \frac{C_i(0,t)}{C^0} e^{-\alpha \frac{ZF}{RT}(E-E_p)} - e^{(1-\alpha) \frac{ZF}{RT}(E-E_p)}, \quad (2.6.2)$$

где  $i^0$  – ток обмена;  $C(0,t)$  – концентрация ионов металла на поверхности электрода;  $C^0$  – концентрация ионов металла в объеме электролита;  $\alpha$  – коэффициент переноса;  $E$  – потенциал электрода;  $E_p$  – равновесный потенциал;  $F$  – число Фарадея;  $Z$  – заряд иона металла,  $R$  – универсальная газовая постоянная;  $T$  – температура электролита.

Образовавшийся в результате электрохимической реакции атом **встраивается в кристаллическую решетку металла**. Этот процесс может происходить двумя путями: перенос заряда и встраивание в кристаллическую решетку происходят одновременно в так называемом месте роста кристалла или перенос заряда осуществляется в произвольной точке электрода и образовавшийся атом (ад-атом) путем поверхностной диффузии перемещается к месту роста.

В настоящее время существует несколько моделей процесса электролитического осаждения, разработанных для различных частных случаев. Общим для всех является тот факт, что в силу локализации процессов в приэлектродных областях авторы, как правило, в качестве противоиэлектрода рассматривают внешнюю границу диффузионного слоя. Одна из моделей разработана на кафедре ФХПТ и описывает процесс электролитического осаждения на примере формирования микрорельефов с использованием сульфатных электролитов никелирования в условиях импульсного электролиза.

Модель позволяет определить:

- изменение кислотности электролита в приэлектродном слое в процессе обработки и на этой основе возможность выпадения труднорастворимых соединений, приводящих к получению некачественных осадков;
- значение плотности тока, выше которого получают осадки неудовлетворительного качества;
- долю общего тока, идущую на параллельное выделение водорода в процессе обработки, и на этой основе выход по току;
- значение потенциала катода, позволяющее прогнозировать структуру получаемого осадка;
- распределение плотности тока, скорости осаждения и толщины осажденного слоя металла по профилю поверхности катода;
- среднее значение скорости осаждения и на этой основе производительность процесса электролитического осаждения.

Математическая модель процесса электролитического осаждения построена в рамках распределения поля, связанного с изменением концентраций реагирующих компонентов в приэлектродном слое. Вместо величины межэлектродного зазора используется толщина диффузионного слоя, внешняя граница которого рассматривается в качестве противоиэлектрода.

При разработке математической модели приняты следующие допущения:

1. Рассмотрение проводится в рамках теории разбавленных электролитов, что позволяет использовать вместо активности концентрацию компонентов и не рассматривать взаимную диффузию компонентов.
2. Поскольку в практике осаждения используются плотности тока порядка  $1\text{А/дм}^2$ , нагрев электролита за счет прохождения электрического тока не учитывается. Температура электролита считается заданной и постоянной в течение всего времени электролиза.
3. Рассматривается ламинарное течение электролита, характерное для режима перемешивания всего объема электролита.

Для решения задачи использована многоуровневую модель, основанная на известной модели Ибла двойного диффузионного слоя, состоящего из стационарной и пульсирующей части.

На рис. 2.6.1 представлена схема предлагаемой многоуровневой модели.

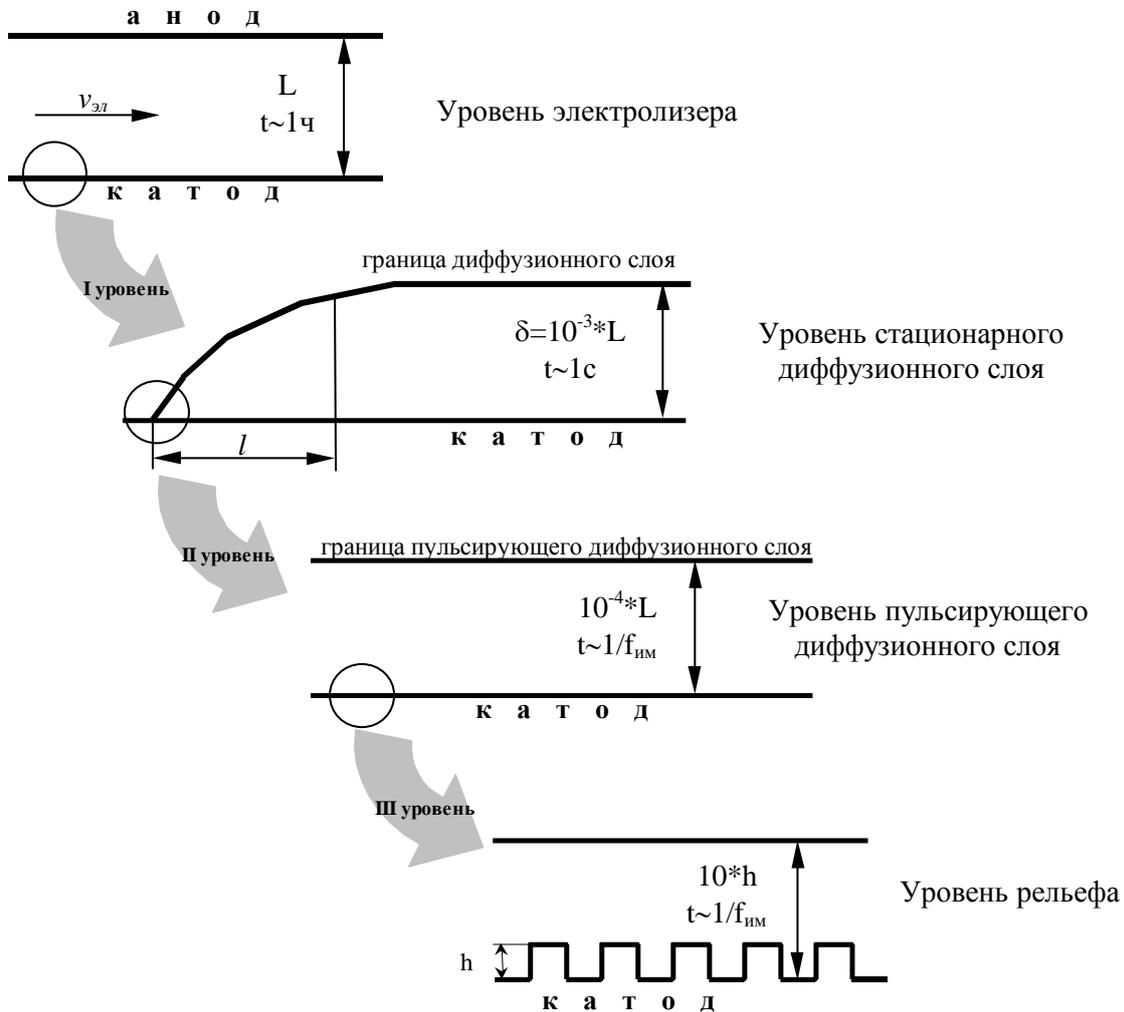


Рис. 2.6.1. Схема многоуровневой модели процесса электролитического осаждения

На **уровне электролизера** анод и катод рассматриваются как две плоскопараллельные абсолютно гладкие поверхности. В такой ячейке электрическое поле является однородным (линии поля параллельны электродам) и не оказывает заметного влияния на формирование геометрии микрорельефа. Поэтому этот уровень в модели не рассматривается, а сразу осуществляется переход на **уровень стационарного диффузионного слоя** (I уровень).

Поскольку при разработке модели принято, что высота микрорельефа на несколько порядков меньше толщины всего диффузионного слоя, можно принять, что поверхность катода является плоской. Распределение концентраций в стационарной части диффузионного слоя не зависит от времени, поэтому рассматриваются уравнения стационарной диффузии, позволяющие найти распределение концентраций и потенциала катода в стационарном диффузионном слое при заданном значении средней плотности тока, а также потенциал электрода. После этого осуществляется переход на **уровень пульсирующего диффузионного слоя** (II уровень).

Толщина пульсирующей части диффузионного слоя определяется частотой импульсного тока и имеет порядок:  $\delta_n = 2\sqrt{D_{cp}T_n/\pi}$ , где  $T_n$  – период импульсного тока. Изменение концентраций в этой области происходит по механизму нестационарной диффузии. В качестве начальных данных используются значения концентраций компонентов раствора и потенциала катода, полученные при расчете в стационарном слое. Поверхность катода также рассматривается как плоскость, а влияние микрорельефа учитывается коэффициентом, представляющим собой отношение площади поверхности с МР к площади соответствующей плоской поверхности.

Принятое на первых двух уровнях моделирования допущение, что поверхность катода представляет собой плоскость, позволяет свести задачу к одномерному случаю.

После вычисления распределения концентраций и потенциала в пульсирующем диффузионном слое осуществляется переход на III уровень – **уровень микрорельефа**, где рассматривается двумерная задача, позволяющая уточнить данные, полученные на первых двух уровнях, и определить распределение осадка по профилю рельефа.

Для реализации математической модели процесса электролитического осаждения разработан комплекс программ *ElectroForm*, алгоритм работы которого представлен на рис.2.

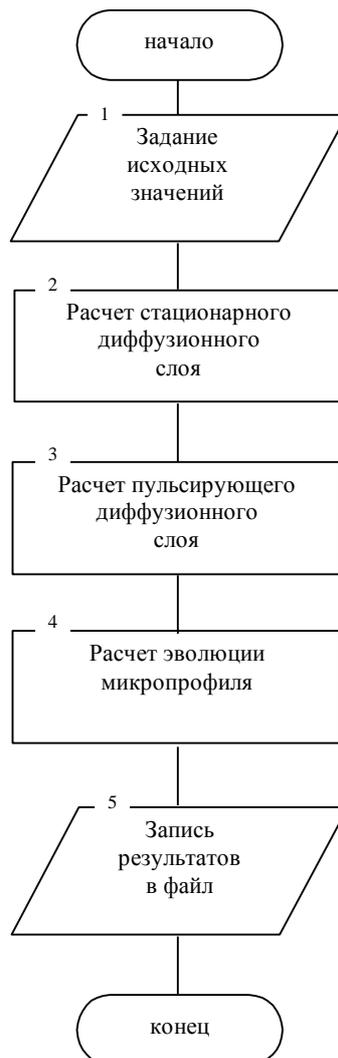


Рис. 2.6.2. Блок-схема алгоритма работы программного комплекса *ElectroForm*

В качестве входных задаются следующие величины:

- параметры среды ( $C^0_i$  - начальные концентрации основных компонентов электролита,  $T_{эл}$  - температура, pH);
- параметры электрического режима ( $i_{cp}$  - средняя плотность тока,  $f$  - частота;  $q$  - длительность импульсов);
- $(x_i, y_i)$  - координаты профиля микрорельефа исходной поверхности;
- $t_{ос}$  - время осаждения или  $h_{кон}$  - конечная толщина осадка.

В результате работы программного комплекса определяются:

- произведение растворимости  $L$ , величина которого указывает на выпадение труднорастворимой гидроокиси никеля ( $L \geq 1$ ), что приводит к резкому изменению условий протекания процесса и снижению качества получаемых осадков;
- значение электродного потенциала, по которому можно прогнозировать структуру получаемого осадка;
  - толщина осажденного слоя металла;
  - распределение толщины осажденного слоя по профилю исходной поверхности;
  - величина средней скорости осаждения;
  - величина выхода по току.

Результаты расчетов записываются в файл, который может быть в дальнейшем использован для анализа полученных данных с точки зрения качества получаемых деталей, производительности и энергоемкости процесса.

### *2.6.1. Задание на практическое занятие №6*

В качестве исходных данных на практическом занятии задаются значения начальной концентрации компонентов электролита; значения параметров электрического тока: частота, длительность импульсов, плотность тока (см. Приложение). Для заданного варианта исследуется влияние параметров процесса на величину произведения растворимости, величину электродного потенциала, толщину и равномерность слоя металла, выход по току. По результатам моделирования делаются выводы о влиянии параметров процесса на возможность получения плотных компактных осадков с мелкозернистой структурой при максимальной величине выхода по току.

В процессе моделирования входные параметры изменяются в указанных пределах, при этом фиксируются значения произведения растворимости, выхода по току и потенциала катода. По результатам моделирования строятся зависимости выходных параметров от концентрации компонентов электролита и электрического тока.

### Варианты заданий для проведения практических занятий

#### Для занятия №1

| № варианта | Материал электрода | Шероховатость поверхности электрода, мкм |
|------------|--------------------|--|
| 1          | Сталь 45           | Rz 20                                    |
| 2          | ЭИ-437             | Ra 6,3                                   |
| 3          | сплав ВК 6         | Ra 2,5                                   |
| 4          | сплав ВК 15        | Ra 1,25                                  |
| 5          | вольфрам           | Rz 40                                    |
| 6          | медь               | Ra 0,63                                  |

#### Для занятия №2

| № варианта | Материал детали | Температура закали, °С | Режимы обработки              | Исходный файл трехмерной модели |
|------------|-----------------|------------------------|-------------------------------|---------------------------------|
| 1          | Сталь 40        | 820-860                | P=0,1; 20; 100 Вт<br>d=0,2 мм | 1.stp                           |
| 2          | Сталь У8А       | 780-800                | P=1; 5; 10 кВт;<br>d=1 мм     | 2.stp                           |
| 3          | Сталь X18H10T   | 1050-1100              | P=10; 100; 1000 Вт;<br>d=4 мм | 3.stp                           |
| 4          | Сталь ХГВ       | 830                    | P=1; 5; 10кВт;<br>d=0,2 мм    | 4.stp                           |

#### Для занятия №3

| № варианта | Материал катода | Наименование газа в камере | Давление газа в камере P, Па | Потенциал подложки U, В | Расстояние от катода до подложки H, м | Радиус подложки R, м |
|------------|-----------------|----------------------------|------------------------------|-------------------------|---------------------------------------|----------------------|
| 1          | Ti              | N                          | 0.001<br>0.1<br>0.01         | 100                     | 0.5                                   | 0.3                  |
| 2          | Zr              | N                          | 0.001                        | 100<br>10<br>200        | 0.4                                   | 0.25                 |
| 3          | Cr              | N                          | 0.001<br>0.1<br>0.01         | 100                     | 0.3                                   | 0.2                  |
| 4          | Ti              | Ar                         | 0.001<br>0.1<br>0.01         | 100                     | 0.4                                   | 0.3                  |

## Для занятия №4

| № варианта | Фазы               | Энергия ионов азота, кэВ |
|------------|--------------------|--------------------------|
| 1          | Fe, V, Mo          | 5, 20,40                 |
| 2          | W, Cr, Co          | 10, 20, 30               |
| 3          | Fe, Cr, сплав W-Co | 5, 15, 30                |
| 4          | Fe, Co, Mo         | 10, 20, 30               |
| 5          | Fe, Cr, Co         | 5, 20,40                 |
| 6          | W, V, сплав W-Co   | 5, 10, 20                |

## Для занятия №6

| № варианта | Состав электролита                                 | Параметры импульсного тока  | Время осаждения, мин | Имя файла с координатами рельефа |
|------------|--|---|----------------------|----------------------------------|
| 1          | $C_{Ni(NH_2SO_3)}=100$ г/л<br>$C_{H_3BO_3}=10$ г/л | $i_{cp}=2,0 \div 7,0$ А/дм <sup>2</sup> ;<br>$f=10$ Гц;<br>$q=10$ .     | 30                   | 1.txt                            |
| 2          | $C_{Ni(NH_2SO_3)}=300$ г/л<br>$C_{H_3BO_3}=10$ г/л | $i_{cp}=2,0$ А/дм <sup>2</sup> ;<br>$f=10 \div 10000$ Гц;<br>$q=2$ .    | 45                   | 2.txt                            |
| 3          | $C_{Ni(NH_2SO_3)}=600$ г/л<br>$C_{H_3BO_3}=10$ г/л | $i_{cp}=4,0$ А/дм <sup>2</sup> ;<br>$f=100$ Гц;<br>$q=2 \div 100$ .     | 60                   | 3.txt                            |
| 4          | $C_{Ni(NH_2SO_3)}=100$ г/л<br>$C_{H_3BO_3}=20$ г/л | $i_{cp}=2,0 \div 7,0$ А/дм <sup>2</sup> ;<br>$f=1000$ Гц;<br>$q=2$ .    | 90                   | 4.txt                            |
| 5          | $C_{Ni(NH_2SO_3)}=300$ г/л<br>$C_{H_3BO_3}=20$ г/л | $i_{cp}=7,0$ А/дм <sup>2</sup> ;<br>$f=10 \div 10000$ Гц;<br>$q=100$ .  | 120                  | 5.txt                            |
| 6          | $C_{Ni(NH_2SO_3)}=600$ г/л<br>$C_{H_3BO_3}=20$ г/л | $i_{cp}=5,0$ А/дм <sup>2</sup> ;<br>$f=10000$ Гц;<br>$q=2 \div 100$ .   | 30                   | 6.txt                            |
| 7          | $C_{Ni(NH_2SO_3)}=100$ г/л<br>$C_{H_3BO_3}=30$ г/л | $i_{cp}=2,0 \div 7,0$ А/дм <sup>2</sup> ;<br>$f=10000$ Гц;<br>$q=100$ . | 45                   | 7.txt                            |
| 8          | $C_{Ni(NH_2SO_3)}=300$ г/л<br>$C_{H_3BO_3}=30$ г/л | $i_{cp}=5,0$ А/дм <sup>2</sup> ;<br>$f=10 \div 10000$ Гц;<br>$q=10$ .   | 60                   | 8.txt                            |
| 9          | $C_{Ni(NH_2SO_3)}=600$ г/л<br>$C_{H_3BO_3}=30$ г/л | $i_{cp}=7,0$ А/дм <sup>2</sup> ;<br>$f=100$ Гц;<br>$q=2 \div 100$ .     | 120                  | 9.txt                            |

**ВНИМАНИЕ!!!** Для работы в программном обеспечении необходимо указанную концентрацию компонентов перевести в моль/м<sup>3</sup>. Для этого концентрацию в г/л необходимо разделить на молекулярную массу вещества и умножить на 10<sup>3</sup>.