

*А. С. КУЦЕНКО*, д-р тех. наук, профессор НТУ;  
*И. И. МАРЧЕНКО*, ассистент НТУ «ХПИ»

## **МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ ТОЛЩИНЫ ОКСИДНОГО ПЛЕНКИ ПРИ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОМ ИОННОМ АЗОТИРОВАНИИ**

Сформульована математична модель зміни товщини оксидного шару при іонному азотуванні металів і сплавів в залишковій атмосфері вакуумної камери. Отримано розрахунки характерних часів розпилення оксидних плівок при іонному азотуванні.

Сформулирована математическая модель изменения толщины оксидного слоя при ионном азотировании металлов и сплавов в остаточной атмосфере вакуумной камеры. Получены расчеты характерных времен травливания оксидных пленок при ионном азотировании.

A mathematical model of thickness variation of the oxide layer during ion nitriding of metals and alloys in the vacuum chamber's residual atmosphere was formulated. Estimates of characteristic times of oxide films dissipation during ion nitriding were obtained.

**Введение.** На эффективность формирования нитридных слоев металлов и сплавов под воздействием ионного облучения влияют такие параметры, как температура образца, энергия пучка, плотность ионного тока. Одним из важных параметров технологического процесса является наличие и толщина оксидных слоёв на поверхности материала.

В работе [1] было показано, что наличие окисной пленки приводит к тому, что ионы азота не достигают поверхности обрабатываемого материала, из-за чего эффективность процесса ионной обработки падает.

На данный момент не существует математических моделей, описывающих изменение толщины оксидного слоя во время ионного облучения.

Целью данной работы являлось построение математической модели изменения толщины оксидного слоя при низкоэнергетическом ионном азотировании.

**Математическая модель изменение толщины оксидной плёнки.** Толщина оксидной пленки изменяется вследствие двух конкурирующих процессов. С одной стороны при ионном облучении с поверхности материала кислород удаляется вследствие процессов распыления, с другой – адсорбируется поверхностью из остаточной атмосферы.

Как известно из экспериментальных данных [2], оксидные плёнки могут образовываться из остаточной атмосферы. Скорость образования оксидного слоя можно оценить, исходя из кинетической теории газов [3]:

$$V_{od} = \frac{pN_A}{\rho\sqrt{2\pi\mu RT}}, \quad (1)$$

где  $p$  – парциальное давление кислорода,  $N_A$  – постоянная Авогадро,  $\rho$  – атомарная плотность кислорода,  $\mu$  – атомарная масса кислорода,  $R$  – универсальная газовая постоянная,  $T$  – температура.

Ионная обработка помимо имплантации вызывает распыление мишени, тем самым уменьшая толщину оксидного слоя. Скорость стравливания поверхности определяется распылением поверхностных атомов:

$$V_{спит} = \frac{j_a \cdot S_a(h, e_v)}{\rho}, \quad (2)$$

где  $j_a$  – плотность ионного тока,  $S_a(h, e_v)$  – интегральный коэффициент распыления, который зависит от текущей толщины оксидного слоя  $h$  и энергии пучка  $e_v$ .

Тогда изменение толщины оксидного слоя со временем можно описать следующим уравнением:

$$\frac{dh}{dt} = \psi \left( \frac{pN_A}{\rho\sqrt{2\pi\mu RT}} - \frac{j \cdot S_a(h, e_v)}{\rho} \right), \quad (3)$$

где  $t$  – время, прошедшее от начала эксперимента. Толщина оксидной плёнки не может принимать отрицательные значения, для учета этого ограничения вводится функция  $\psi(q)$ :

$$\psi(q) = x\theta(q), \quad (4)$$

где  $\theta(q)$  – тэта-функция Хевисайда, заданная в форме

$$\theta(q) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ 1, & x \geq 0 \end{cases}. \quad (5)$$

Начальное условие для уравнения (3) может быть введено в виде

$$h(0) = h_0, \quad (6)$$

что соответствует наличию оксидной плёнки толщиной  $h_0$  вначале проведения эксперимента.

**Компьютерное моделирование изменения толщины оксидной плёнки.** В качестве материала, который подвергался ионной обработки, был

выбран алюминий ( $\rho = 50 \text{ ат/нм}^3$ ,  $\mu = 1.661 \cdot 10^{-27} \text{ кг}$ ). Уравнение (3) решалась численно методом Рунге-Кутты четвертого порядка [4]. Значения интегрального коэффициента распыления  $S_a(h, e_v)$  вычислялись методом парных столкновений [5] для различных толщин оксидного слоя  $h$  для энергии осаждаемых ионов  $1 \text{ кэВ}$ . Из экспериментальных данных известно, что толщина оксида алюминия составляет  $5\text{-}10 \text{ нм}$  на начальном этапе облучения [6], поэтому при моделировании  $h_0$  было выбрано равным  $10 \text{ нм}$ .

На рис. 1 представлено изменение во времени толщины оксидного слоя в алюминии. Как видно из рисунка, за время порядка нескольких минут оксидный слой полностью стравливается, что соответствует экспериментальным данным [7].

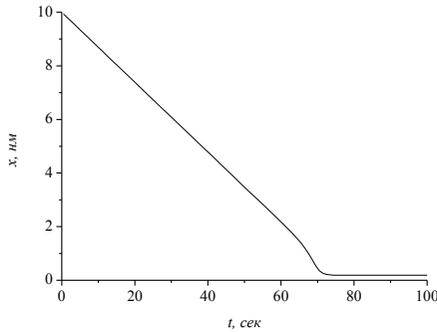


Рис 1 – Изменение толщины оксидного слоя в алюминии с ходом времени.

$$e_v = 1 \text{ кеВ} , j = 0.2 \text{ мА/см}^2 , T = 500 \text{ К} .$$

На рис. 2 приведена зависимость времени полного стравливания оксидного слоя от давления остаточной атмосферы. Как видно из рисунка, при давлении остаточной атмосферы более  $1.2 \cdot 10^{-3} \text{ Па}$  оксидный слой не стравливается в процессе ионного облучения, что может приводить к уменьшению эффективности азотирования материалов. В то же время, при давлении менее  $10^{-4} \text{ Па}$ , значение времени, необходимого на стравливание оксидного слоя, меняется незначительно и составляет порядка четверти минуты.

В работе [8] были предложены математические модели ионного азотирования металлов и сплавов, заданные в виде систем дифференциальных уравнений в частных производных. Эти модели могут быть уточнены путем учета влияния оксидного слоя на эффективность азотирования с помощью введения дополнительного уравнения, предложенного в данной работе (3).

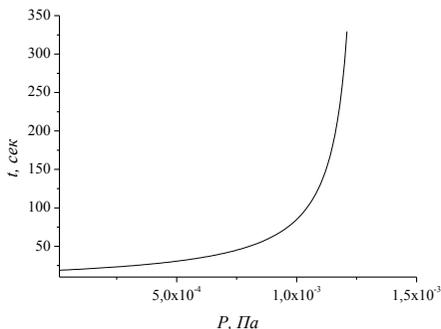


Рис. 2 – Время полного стравливания оксидного слоя в зависимости от давления остаточной атмосферы.  $e_v = 1keV$  ,  $j = 0.2mA/cm^2$  ,  $T = 500K$  .

**Выводы.** В настоящей работе сформулирована математическая модель изменения толщины оксидного слоя при ионном азотировании металлов и сплавов в остаточной атмосфере вакуумной камеры. Проведены расчеты времени стравливания оксидного слоя алюминия для различных давлений остаточной атмосферы вакуумной камеры. Показано, что уменьшение парциального давления ниже определенных значений не будет оказывать значительного влияния на эффективность ионного азотирования.

Полученные результаты могут быть использованы для развития математических моделей низкоэнергетического высокодозового ионного азотирования.

**Список литературы:** 1. Марченко И. И. Влияние условий ионного облучения на эффективность азотирования алюминия / И. И. Марченко // Вестн. нац. техн. ун-та «ХПИ». – 2008. – № 26 : Темат. вып. : «Системный анализ, управление и информационные технологии». – С. 62–67. 2. Manova D. Oxygen behaviour during during PIII-nitriding of aluminium / D. Manova, S. Mandl, B. Rauschenbach // Nucl. Instr. and Methods in Phys. Res. – 2001. – V. 178. – P. 291–296. 3. Лифшиц Е. М. Физическая кинетика / Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский. – М. : Наука, 1979. – 528 с. 4. Бахвалов Н. С. Численные методы. / Н. С. Бахвалов, Н. П. Жидков, Г. М. Кобельков. – М. : Бином, 2001. – 720 с. 5. Biersak J. P. Computer Simulations of Sputtering / J. P. Biersak // Nucl. Instr. and Methods in Phys. Res. – 1987. – B27. – P. 21–36. 6. Surface modification of aluminium by plasma immersion ion implantation / D. Manova, P. Hube, S. Mandl, B. Rauschenbach // Surf. Coat. Technol. – 2000. – V. 128-129. – P. 249–255. 7. Surface processes and diffusion mechanisms of ion nitriding of stainless steel and aluminium / W. Moller, S. Parascondola, T. Telbisova et. al. // Surf. Coat. Tech. – 2001. – V. 136. – P. 73-79. 8. Марченко И. И. Математическое моделирование влияния плотности ионного тока на эффективность ионного азотирования Fe, Cr и Fe-Cr-сплавов / И. И. Марченко, А. С. Мазманишвили // Вестн. нац. техн. ун-та «ХПИ». – 2007. – № 41 : Темат. вып. : «Системный анализ, управление и информационные технологии». – С. 9–16.

Надійшла до редакції 27.04.2012