

На правах рукописи

Сухоруков Иван Андреевич

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМИЧЕСКИ ИНДУЦИРОВАННЫХ
ПРОЦЕССОВ ДИФФУЗИИ И ФАЗООБРАЗОВАНИЯ
В СЛОИСТЫХ БИНАРНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ**

Специальности: 01.04.07 – физика конденсированного состояния,
05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
Доктор физико-математических
наук, профессор В.С.Русаков

МОСКВА – 2012 г.

Работа выполнена на кафедре общей физики физического факультета Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова.

Научный руководитель:	доктор физико-математических наук, профессор Русаков Вячеслав Серафимович
Официальные оппоненты:	доктор физико-математических наук, профессор Силонов Валентин Михайлович кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Седых Вера Дмитриевна
Ведущая организация	Московский государственный технический университет радиотехники, электроники и автоматики (МГТУ МИРЭА)

Защита состоится « 16 » мая 2012 г. в 15 час. 30 мин. на заседании диссертационного совета Д 501.002.01 при Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова по адресу: 119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д.1, стр.35, Центр коллективного пользования МГУ, конференц-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке физического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.

Автореферат разослан « » апреля 2012 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 501.002.01
кандидат физико-математических наук

Т.В. Лаптинская

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы.

Развитие ядерной энергетики и аэрокосмической техники приводит к необходимости разработки, создания и использования новых конструкционных материалов, работающих в экстремальных условиях высоких температур, больших механических нагрузок, агрессивных сред и облучения. Разработка таких материалов представляет сложную и до сих пор не решенную научно-техническую задачу. Одним из возможных путей решения этой задачи является создание защитных покрытий или модификация поверхности существующих конструкционных материалов с помощью ионно-лучевых технологий. К таким технологиям относятся, в частности, ионно-плазменное осаждение и ионная имплантация с последующей термической обработкой, которая приводит к пространственной направленности процессов диффузии и фазообразования, и в результате к образованию слоистой системы.

Для практического применения слоистых систем важно создать термически стабильное неоднородное распределение фаз по глубине образца. В связи с этим необходимо иметь правильное представление об особенностях термически индуцированных процессов, происходящих в слоистой системе. На протяжении последних нескольких лет методами мессбауэровской спектроскопии с привлечением данных рентгеновского фазового анализа проводятся целенаправленные исследования слоистых бинарных металлических систем. Эти исследования позволили установить последовательность и характерные времена фазовых преобразований в приповерхностных слоях и объеме систем, в ряде из них получить термически стабильное неоднородное по глубине структурно-фазовое состояние.

Для исследования процессов диффузии и фазообразования в слоистых системах представляют интерес бинарные металлические системы на основе железа, содержащие Be, Al, Sn, Zr и Ti, полученные методами ионно-плазменного осаждения, а также имплантационные системы Fe:B⁺, Fe:C⁺, Fe:N⁺ и Fe:O⁺. Для этих систем важно, что железо является основным компонентом многих конструкционных материалов. Другие компоненты слоистых систем могут значительно улучшить их свойства, например, механические свойства (прочность, пластичность, ковкость), радиационную и коррозионную стойкость, жаропрочность, теплопроводность и т. д., что позволит применить данные материалы в ядерной энергетике, аэрокосмической технике, автомобилестроении и других производственных областях.

Одним из эффективных методов исследования слоистых бинарных систем является компьютерное моделирование термически индуцированных процессов диффузии и

фазообразования на основе данных об их термодинамических свойствах и фазовых диаграммах равновесных состояний. Моделирование позволяет до проведения эксперимента на основе физических представлений о процессах, происходящих в неоднородных слоистых системах, предсказать поведение компонентов системы и образующихся фаз при произвольных температурно-временных режимах термического отжига.

Цель работы.

Целью настоящей работы являлась разработка метода моделирования термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования в слоистых системах и его применение при исследовании бинарных металлических систем. В соответствии с поставленной целью в работе решались следующие основные задачи.

1. Разработать физические модели термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования в слоистых бинарных системах металл-металл с двумя и тремя изотопами двух элементов, а также в системах металл-металлоид.

2. Осуществить программную реализацию предложенных моделей, позволяющую количественно описывать термически индуцированные процессы в слоистых бинарных системах с произвольным начальным концентрационным профилем компонентов, с учетом особенностей фазовых диаграмм равновесных состояний при произвольных температурно-временных режимах термических отжигов.

3. Смоделировать термически индуцированные процессы диффузии и фазообразования в модельных слоистых бинарных системах металл-металл для исследования процесса термической стабилизации неоднородного по глубине структурно-фазового состояния слоистой системы.

4. Смоделировать термически индуцированные процессы диффузии и фазообразования в экспериментально исследованных слоистых бинарных системах металл-металл с двумя и тремя изотопами, а также металл-металлоид.

Основные положения, выносимые на защиту.

Физические модели термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования в слоистых бинарных системах металл-металл с тремя изотопами двух элементов и металл-металлоид.

Программная реализация предложенных моделей (программа DIFFUSION), позволяющая количественно описывать кинетику термически индуцированных процессов в слоистых бинарных системах с произвольным начальным концентрационным профилем

компонентов, с учетом особенностей фазовых диаграмм равновесных состояний при произвольных температурно-временных режимах термических отжигов.

Результаты моделирования термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования в модельных двухслойных системах металл-металл, позволившие установить характер и степень влияния особенностей фазовых диаграмм равновесных состояний, коэффициентов диффузии и толщины системы на кинетику процесса термической стабилизации неоднородного по глубине структурно-фазового состояния слоистой системы и термически стабилизированный концентрационный профиль.

Результаты моделирования термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования в экспериментально исследованных слоистых системах: металл-металл с двумя (Fe–Ti, Fe–Zr, Fe–Sn, Cu–Be) и тремя (^{57}Fe –Ti–Fe(Ti)– ^{57}Fe) изотопами, полученных с помощью метода магнетронного распыления, а также металл-металлоид ($^{57}\text{Fe}:\text{O}^+$), полученной методом ионной имплантации.

Вывод о том, что характер фазовых превращений в исследованных слоистых системах определяется изменением локальной концентрации компонентов в процессе их диффузии и соответствует особенностям фазовых диаграмм равновесных состояний.

Достоверность.

Достоверность полученных результатов и сделанных выводов обусловлена адекватностью использованных физических представлений и математических методов при решении поставленных задач, корректностью использованных приближений, результатами проверочных численных экспериментов, а также соответствием полученных в работе результатов расчетов известным экспериментальным данным.

Научная новизна.

Научная новизна работы определяется как предложенными физическими моделями термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования в слоистых бинарных системах, так и их программной реализацией, что позволило впервые получить ряд важных результатов.

При моделировании термически индуцированных процессов в модельных двухслойных бинарных системах металл-металл установлены характер и степень влияния особенностей фазовой диаграммы состояний, коэффициентов диффузии и толщины системы на кинетику процесса термической стабилизации неоднородного по глубине структурно-фазового состояния слоистой системы и термически стабилизированный концентрационный профиль.

Показано, что результаты моделирования процессов термической диффузии и фазообразования в слоистых бинарных системах Fe–Ti, Fe–Zr, Fe–Sn, Cu–Be, ^{57}Fe –Ti–Fe(Ti)– ^{57}Fe и $^{57}\text{Fe}:\text{O}^+$ хорошо описывают экспериментально установленные с помощью методов MS- и SEMS-спектроскопии и рентгеновской дифрактометрии последовательности фазовых превращений и относительное содержание образующихся фаз на всех этапах различных температурно-временных режимов отжига. При этом впервые на каждом этапе рассчитаны локальные концентрации компонентов, относительные содержания образующихся фаз, коэффициенты диффузии и диффузионные потоки компонентов на любой глубине слоистой системы, а также положение границ однофазных областей.

Сделан вывод о том, что характер фазовых превращений в экспериментально и теоретически исследованных слоистых системах определяется изменением локальной концентрации компонентов в процессе их диффузии и соответствует особенностям фазовых диаграмм равновесных состояний.

Научная и практическая значимость.

Предложенные физические модели и их программная реализация (программа DIFFUSION) вносят вклад в разработку методов математического моделирования и могут быть использованы для предсказательных расчетов параметров процессов диффузии и фазообразования в слоистых бинарных металлических системах с произвольным начальным концентрационным профилем компонентов, с учетом особенностей их фазовых диаграмм равновесных состояний при произвольных температурно-временных режимах отжига.

Моделирование с помощью созданной программы DIFFUSION позволяет получить новую, трудно доступную экспериментальными методами исследования, информацию о деталях процессов диффузии и фазообразования в слоистых металлических системах.

Полученные в диссертации результаты моделирования термически индуцированных процессов позволяют дать научно обоснованные рекомендации при разработке методов направленной модификации приповерхностных слоев металлических материалов с целью улучшения их поверхностных свойств.

Личный вклад диссертанта.

Автор настоящей работы принял непосредственное участие в разработке физических моделей. Программная реализация предложенных моделей осуществлена автором диссертационной работы. Автору принадлежит основная роль в проведении всех модельных расчетов. Обсуждение и интерпретация результатов проводилось совместно с научным руководителем, а также с другими соавторами публикаций.

Апробация работы.

Результаты диссертационной работы докладывались на следующих Международных конференциях: "Мессбауэровская спектроскопия и ее применения" (Екатеринбург-2009, Россия); "Взаимодействие излучения с твердым телом" (Минск-2011, Республика Беларусь), "Ядерная и радиационная физика" (Алматы-2009, 2011, Республика Казахстан).

Публикации.

Материалы диссертации опубликованы в 7-и статьях (4-е в изданиях, рекомендованных ВАК РФ), в 5-и материалах и 5-и тезисах Международных конференций, список которых приведен в конце автореферата. Имеется также государственная регистрация созданной программы DIFFUSION.

Благодарности.

Автор выражает глубокую благодарность научному руководителю доктору физико-математических наук, профессору В.С. Русакову за предложенную интересную тему исследований, постановку задачи, помощь и внимательное отношение на всех этапах работы над диссертацией. Автор благодарит сотрудников Института Ядерной Физики Национального ядерного центра Республики Казахстан доктора физико-математических наук, профессора Кадыржанова К.К., кандидата физико-математических наук Жанкадамову А.М., а также Айманова М.Ш., Аргынова А.Б., Верещака М.Ф., Жубаева А.К., Коршиева Б.О., Сергееву Л.С. и Манакову И.А. за предоставленный экспериментальный материал мессбауэровских и рентгеновских исследований слоистых систем.

Структура и объем работы.

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка цитируемой литературы. В заключительных параграфах каждой из глав, посвященных результатам диссертационной работы, формулируются краткие итоги. Объем диссертации составляет 147 страниц, включая 58 рисунков и список цитируемой литературы из 89 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы диссертационной работы, сформулированы цель и задачи исследования, приведены основные положения, выносимые на защиту, обозначена достоверность полученных результатов, показана новизна, научная и практическая значимость проведенных исследований.

В первой главе дается обзор литературы, отражающей современное состояние проблем исследования диффузии в металлических системах, полученных ионно-плазменными методами. Содержится информация по точечным дефектам в кристаллах и их влиянию на

возможные механизмы диффузии. Представлены основы линейной теории неравновесных процессов (теории Онзагера) и их применение для описания диффузии в двух- и трехкомпонентных системах. В главе проанализированы экспериментальные и теоретические работы, в которых впервые были представлены результаты мессбауэровских и рентгеновских исследований термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования в слоистых бинарных металлических системах. В результате проведенного анализа в последнем параграфе главы сформулированы цель и задачи исследования.

Вторая глава посвящена изложению предложенных в работе физических моделей термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования в слоистых бинарных системах металл-металл с тремя изотопами двух элементов и металл-металлоид. В основе физических моделей – линейная термодинамическая теория неравновесных процессов, механизм взаимной диффузии компонентов по непрерывным каналам фаз в двухфазных областях системы [1, 2] и предположение о квазистационарном процессе фазообразования.

В главе показано, что для описания процессов диффузии в слоистых системах металл-металл с тремя изотопами двух элементов А и В необходимо решить систему дифференциальных уравнений в частных производных второго порядка:

$$\begin{cases} \frac{\partial C_A}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\tilde{D} \frac{\partial C_A}{\partial x} \right), \\ \frac{\partial C_1}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left((\tilde{D}_{11} - \tilde{D}_{12}) \frac{\partial C_1}{\partial x} - \tilde{D}_{12} \frac{\partial C_A}{\partial x} \right). \end{cases} \quad (1)$$

Здесь C_A – концентрация элемента А в системе, C_1 – концентрация одного из двух (1 и 2) изотопов элемента В, при этом $C_A + C_B = C_A + C_1 + C_2 = 1$; \tilde{D} – коэффициент взаимной диффузии Даркена; \tilde{D}_{ij} – коэффициенты взаимной диффузии.

В случае однофазных областей системы, коэффициенты диффузии равны:

$$\tilde{D} = D_A(1 - C_A) + D_B C_A, \quad (2)$$

$$\tilde{D}_{11} = D_B + C_1(D_A - D_B). \quad (3)$$

$$\tilde{D}_{12} = C_1(D_A - D_B), \quad (4)$$

где $D_{A,B}$ – парциальные коэффициенты диффузии компонентов А и В друг в друге, которые в соответствии с используемой физической моделью одинаковы для всех однофазных областей, а, следовательно, не зависят от координаты x и времени t .

В случае двухфазных областей ($\alpha+\beta$) слоистой системы, в которых предполагается образование частиц обеих фаз одинакового линейного размера λ , коэффициенты взаимной

диффузии $\tilde{D}(x,t)$, $\tilde{D}_{11}(x,t)$, $\tilde{D}_{12}(x,t)$ в соответствии с механизмом диффузии по непрерывным каналам одной фазы определяются следующим образом:

$$\tilde{D}(x_j) = (D_A(1 - C_A^\alpha) + D_B C_A^\alpha)W_j^\alpha + (D_A(1 - C_A^\beta) + D_B C_A^\beta)W_j^\beta, \quad (5)$$

$$\tilde{D}_{11}(x_j) = D_B(W_j^\alpha + W_j^\beta) + (D_A - D_B) \left(\frac{1 - C_A^\alpha}{1 - C_A} c_1 W_j^\alpha + \frac{1 - C_A^\beta}{1 - C_A} c_1 W_j^\beta \right), \quad (6)$$

$$\tilde{D}_{12}(x_j) = (D_A - D_B) \left(\frac{1 - C_A^\alpha}{1 - C_A} c_1 W_j^\alpha + \frac{1 - C_A^\beta}{1 - C_A} c_1 W_j^\beta \right). \quad (7)$$

Здесь W_j^α и W_j^β – вероятности образования непрерывных каналов α - и β -фазы, по которым происходит взаимная диффузия компонентов от однофазных областей вплоть до j -го слоя с координатой x_j ; C_A^α и C_A^β – граничные концентрации элемента А в фазах α и β соответственно.

Для слоистых систем металл-металл с двумя изотопами двух элементов А и В система уравнений (1) преобразуется в одно хорошо известное дифференциальное уравнение Даркена

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\tilde{D} \frac{\partial C_A}{\partial x} \right). \quad (8)$$

Во второй главе показано также, что для описания процессов диффузии в бинарной слоистой системе металл-металлоид необходимо решить дифференциальное уравнение в частных производных второго порядка относительно локальной концентрации металлоида $n_A(x,t)$:

$$\frac{\partial n_A(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(x,t) \frac{\partial n_A(x,t)}{\partial x} \right), \quad (9)$$

где $D(x,t)$ – коэффициент взаимной диффузии в различных фазовых областях, пространственные границы которых меняются со временем. В случае однофазных областей предполагается, что он постоянен по глубине и равен коэффициенту диффузии металлоида А в металле В – $D(x,t) = D_A$, а в случае двухфазных областей ($\alpha+\beta$) в соответствии с механизмом диффузии по непрерывным каналам одной фазы определяются следующим образом:

$$D(x_j) = D^\alpha(x_j) + D^\beta(x_j) = D_A (W_j^\alpha + W_j^\beta). \quad (10)$$

Здесь $D^\alpha(x_j)$ и $D^\beta(x_j)$ – коэффициенты межзельной диффузии металлоида по каналам, образованным частицами α - и β -фазы соответственно, а W_j^α и W_j^β – как и в случае слоистой системы металл-металл с тремя изотопами двух элементов, – вероятности образова-

ния непрерывных каналов α - и β -фазы, по которым происходит диффузия металлоида от однофазных областей вплоть до j -го слоя с координатой x_j .

Таким образом, для описания процессов диффузии в системах металл-металл с тремя изотопами двух элементов необходимо решить систему дифференциальных уравнений (1), а в системах металл-металл и металл-металлоид с двумя изотопами – дифференциальные уравнения (8) и (9) соответственно. Во всех случаях необходимо решить уравнения с учетом соответствующих выражений для коэффициентов диффузии в различных фазовых областях. При этом начальные и граничные условия, необходимые для решения уравнения, задаются в соответствии с условиями проведения эксперимента.

В соответствии с предположением о квазистационарности процесс фазообразования в слоистых системах определяется локальной концентрацией компонентов систем и соответствующей фазовой диаграммой равновесных состояний.

Задача описания процессов диффузии и фазообразования в слоистых бинарных металлических системах различных типов решена в работе численными методами путем программной реализации. Созданная программа DIFFUSION предназначена для моделирования процессов диффузии и фазообразования в слоистых бинарных металлических системах металл-металл с двумя и тремя изотопами двух элементов и металл-металлоид. В ней реализован специально разработанный алгоритм моделирования процессов диффузии и фазообразования, в том числе алгоритм решения дифференциальных уравнений, описывающих данные процессы. Программа DIFFUSION разработана в среде программирования Microsoft Visual Studio 2010 при помощи языков C++ и C#.

Основные функциональные возможности программы DIFFUSION:

- решение уравнений, описывающих процессы диффузии и фазообразования, для трех видов слоистых бинарных металлических систем (металл-металл с двумя и тремя изотопами двух элементов и металл-металлоид);

- использование произвольной диаграммы равновесных состояний бинарной системы с любыми концентрационными и температурными областями существования любого числа фаз;

- задание произвольных начальных концентрационных профилей компонентов слоистой системы, что позволяет моделировать термически индуцированные процессы диффузии и фазообразования в слоистых системах, полученных методами магнетронного и термического напыления, электролиза и ионной имплантации;

- реализация произвольных температурно-временных режимов термических отжигов исследуемой слоистой системы;

- расчет на каждом температурно-временном этапе процесса локальной концентрации компонентов, относительного содержания фаз, коэффициентов диффузии и диффузионных потоков компонентов на любой глубине слоистой системы, а также положений границ однофазных областей;

- для сравнения результатов моделирования с экспериментальными данными расчет на всех этапах процесса с учетом изотопного состава относительных интенсивностей парциальных мессбауэровских спектров, полученных регистрацией γ -квантов в геометрии на прохождение (MS-спектров), и регистрацией конверсионных электронов в геометрии обратного рассеяния (CEMS-спектров), а также относительного содержания фаз в атомных единицах компонентов в области проникновения в слоистую систему рентгеновского излучения.

- расчет на всех этапах процесса функций распределения концентрации и средней концентрации компонента в растворе другой компоненты исследуемой слоистой системы.

В третьей главе представлены результаты моделирования процессов диффузии и фазообразования в модельных двухслойных бинарных системах металл-металл.

С помощью проверочных расчетов путем сравнения их результатов с результатами, полученными аналитически, показано, что выбранный и реализованный численный метод, а также используемая степень дискретности представления рассматриваемых слоистых систем, обеспечивают достаточную для сравнения с экспериментальными данными точность решения диффузионных уравнений и описания процессов диффузии и фазообразования в этих системах.

Для моделирования термически индуцированных процессов диффузии, фазообразования и стабилизации были взяты три модельные бинарные системы А-В, диаграммы равновесных состояний которых обладают следующими отличительными особенностями.

I. α -Фаза существует в концентрационном интервале 0 – 0.2, β -фаза – в интервале 0.4 – 0.6, γ -фаза – в интервале 0.8 – 1 (эквипозиционное расположение фазовых границ).

II. α -Фаза существует в концентрационном интервале 0 – 0.2, β -фаза – в интервале 0.49 – 0.51, γ -фаза – в интервале 0.8 – 1 (узкая концентрационная область существования промежуточной β -фазы).

III. α -Фаза существует в концентрационном интервале 0 – 0.02, β -фаза – в интервале 0.49 – 0.51, γ -фаза – в интервале 0.8 – 1 (узкие концентрационные области существования α - и β -фазы).

Парциальные коэффициенты диффузии были взяты характерными для металлических систем. При моделировании были рассмотрены следующие случаи: (a) $D_A = 10^{-5}$, $D_B = 10^{-3}$ (мкм²/с); (b) $D_A = 10^{-3}$, $D_B = 10^{-5}$ (мкм²/с) и (c) $D_A = 10^{-3}$, $D_B = 10^{-3}$ (мкм²/с).

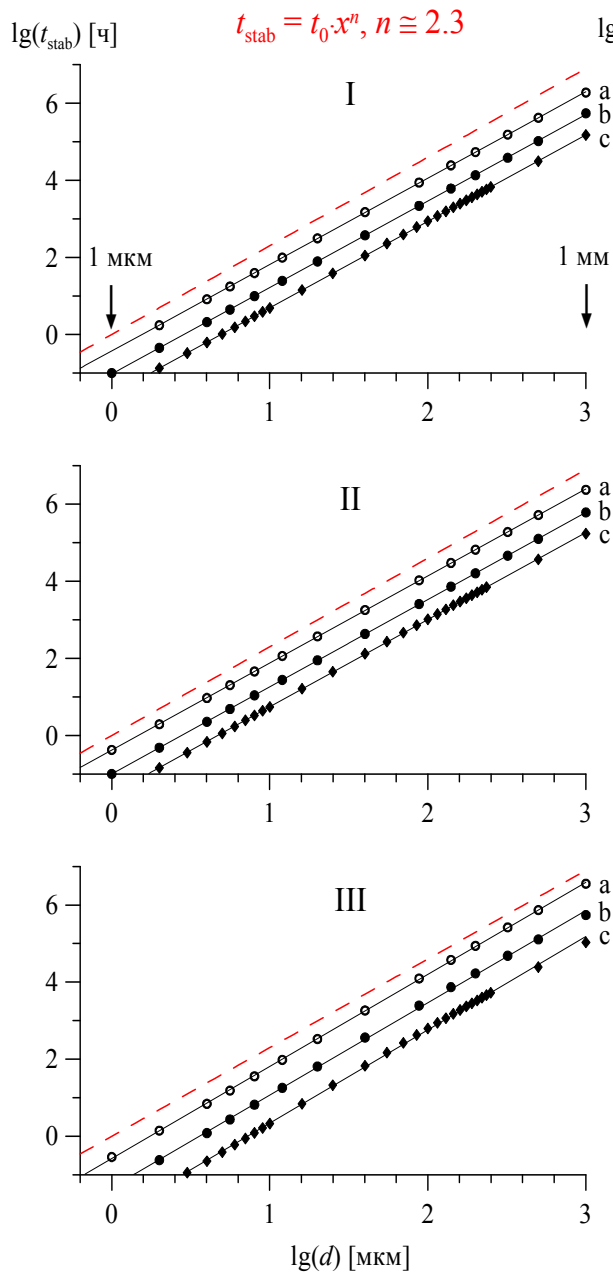


Рис. 1. Зависимость времени термической стабилизации t_{stab} от толщины образца d для рассмотренных модельных бинарных систем

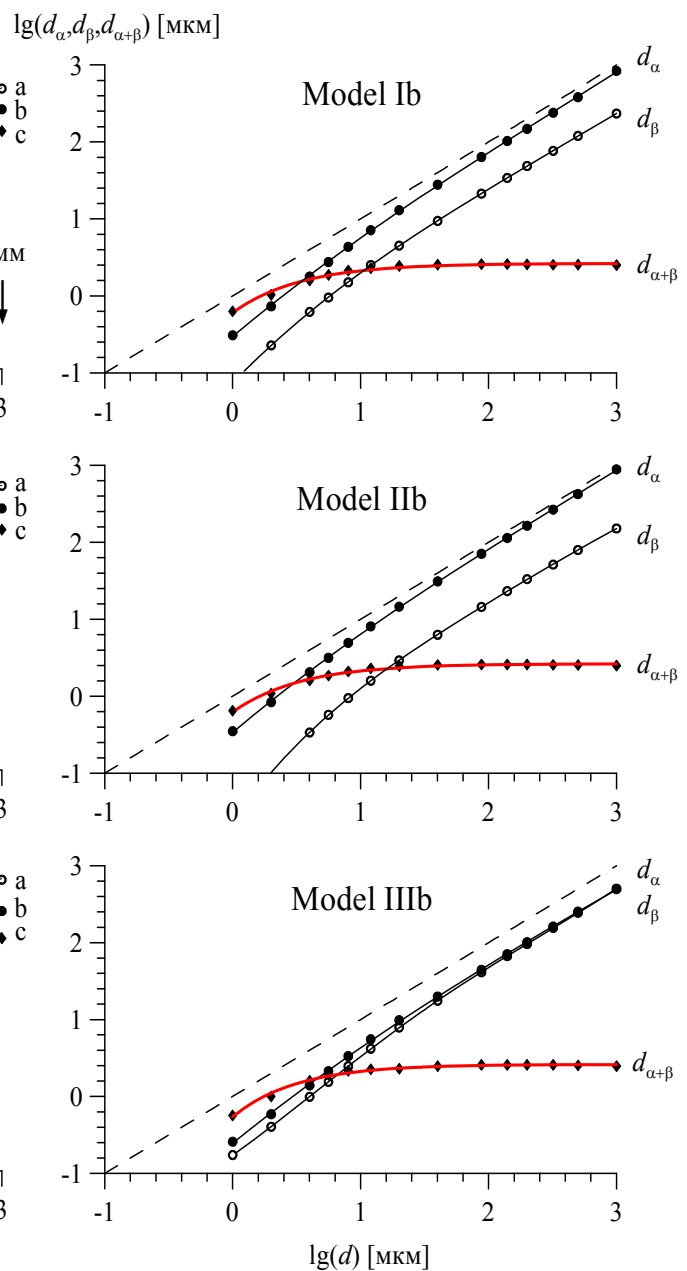


Рис. 2. Зависимости толщин поверхностного (d_α), промежуточного ($d_{\alpha+\beta}$) и объемного (d_β) слоев от толщины образца d для модельных бинарных систем

В результате моделирования установлено следующее:

- предложенная модель термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования описывает процесс термической стабилизации неоднородного по глубине структурно-фазового состояния слоистой системы, при котором система является двухфазной с преимущественным содержанием различных фаз на своих поверхностях;

- уменьшение задаваемого размера однофазных частиц λ в двухфазной области системы приводит к слабому относительному увеличению времени термической стабилизации в широком диапазоне значений λ ;

- фазовая диаграмма существенно влияет на вид концентрационного профиля и время стабилизации при одних и тех же остальных параметрах системы;

- при постоянном соотношении толщин покрытия и подложки получена степенная зависимость времени стабилизации от толщины образца с показателем 2.3 ± 0.1 , который практически не зависит от парциальных коэффициентов диффузии и особенностей фазовой диаграммы (см. рис. 1);

- в случае термической стабилизации при размерах слоистой системы больших ~ 10 мкм толщины поверхностных слоев с преимущественным содержанием различных фаз линейно зависят от толщины системы, при этом толщина промежуточного слоя остается практически постоянной; такое поведение толщин не зависит от парциальных коэффициентов диффузии и особенностей фазовой диаграммы состояний (см. рис. 2).

В наших расчетах в качестве критерия относительного содержания фаз, определяющего свойства слоев, выбрано 95% относительного содержания β -фазы в поверхностном слое и 95% относительного содержания α -фазы в объемном слое образца. Это условие позволило однозначно определить толщины поверхностного (d_α), промежуточного ($d_{\alpha+\beta}$) и объемного (d_β) слоев (рис. 2).

В четвертой главе приводятся результаты моделирования термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования в экспериментально исследованных слоистых системах методами мессбауэровской спектроскопии и рентгеновской дифрактометрии. В качестве таких систем были выбраны системы металл-металл с двумя (Fe–Ti, Fe–Zr, Fe–Sn, Cu–Be) и тремя (^{57}Fe –Ti–Fe(Ti)– ^{57}Fe) изотопами, полученные с помощью метода магнетронного распыления, а также система металл-металлоид ($^{57}\text{Fe}:\text{O}^+$), полученная методом ионной имплантации. Данные системы отличаются в первую очередь многообразием особенностей своих фазовых диаграмм: различными ширинами областей растворимости компонентов, количеством и концентрационными областями гомогенности образующихся фаз в системе при различных температурах и т.д. При этом для выбранных систем характерны разные начальные концентрационные профили компонентов и парциальные коэффициенты диффузии.

Моделирование термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования в слоистых системах осуществлялось с учетом всех особенностей фазовых диаграмм равновесных состояний бинарных систем. Необходимые для моделирования значения ко-

эффициентов диффузии, либо брались из известных литературных данных для массивных образцов, либо подбирались с целью наилучшего описания экспериментальных данных, с которыми сравнивались результаты моделирования. Основанием для подбора оптимальных значений коэффициентов диффузии служило не только их отсутствие в литературе, но и возникающая при магнетронном распылении структура покрытия.

Система Fe-Ti. Для моделирования термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования в слоистых системах Fe-Ti с двумя изотопами были выбраны экспериментально исследованные [3-6] системы с разными начальными концентрационными профилями – α -Fe(10 мкм)-Ti(2 мкм) и $\text{Fe}_{0,966}\text{Ti}_{0,034}$ (10 мкм)-Ti(2 мкм), полученные методом магнетронного распыления и подвергнутые последовательным изохронным и изотермическим отжигам.

В качестве примера на рис. 3 представлены экспериментальные и расчетные зависимости относительных интенсивностей парциальных мессбауэровских спектров (MS), а также зависимости полученных со стороны титанового покрытия относительных интенсивностей рентгеновских дифракционных рефлексов фаз и их относительного содержания в атомных единицах компонентов в области проникновения в систему рентгеновского излучения (X-ray), от температуры T_{ann} последовательных изохронных двухчасовых отжигов слоистых систем α -Fe(10 мкм)-Ti(2 мкм) и $\text{Fe}_{0,966}\text{Ti}_{0,034}$ (10 мкм) – Ti (2 мкм).

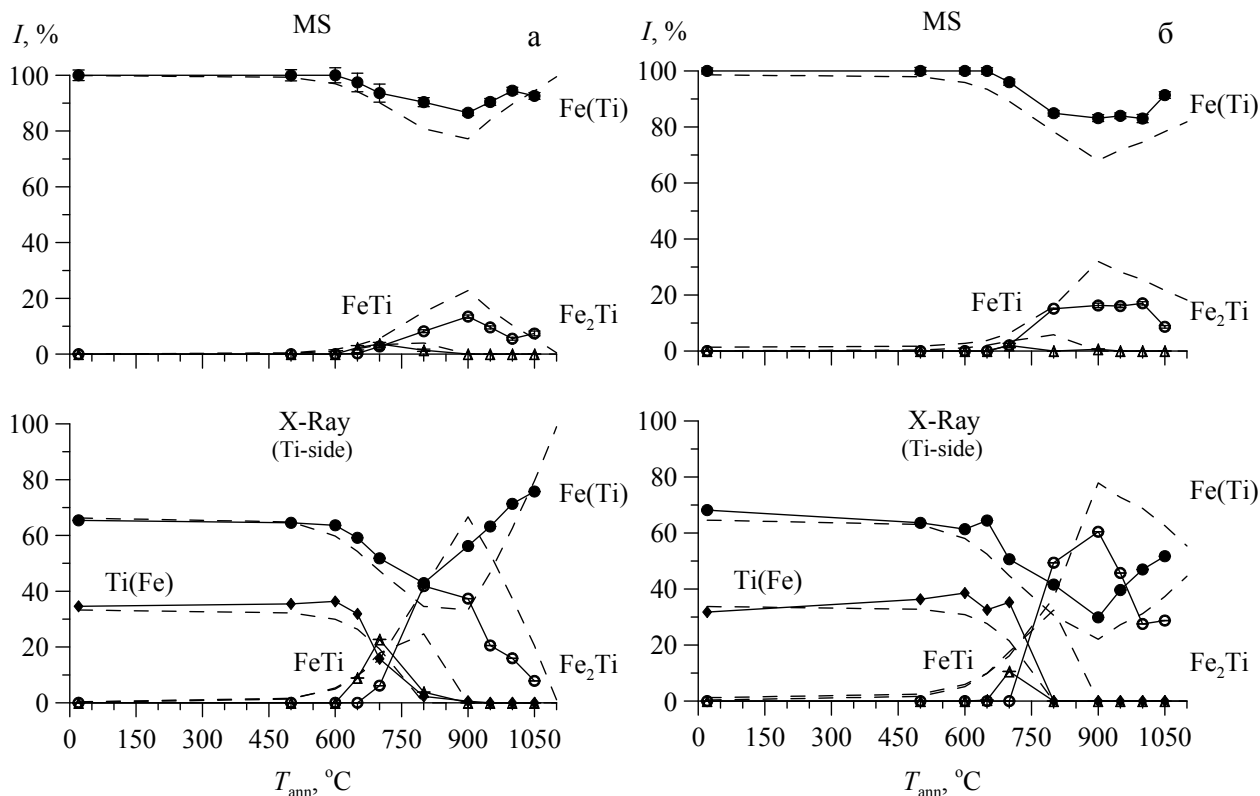


Рис. 3. Известные экспериментальные данные (символы, соединенные линиями) и результаты моделирования (штриховые линии) для последовательных изохронных отжигов слоистых систем Fe(10 мкм)-Ti(2 мкм) (а) и $\text{Fe}_{0,966}\text{Ti}_{0,034}$ (10 мкм)-Ti(2 мкм) (б)

Видно, что все особенности термически индуцированных процессов (температурные последовательности фазообразования, относительные содержания образующихся фаз) в обеих слоистых системах, полученные с помощью методов MS и X-ray, хорошо описываются теоретически в рамках предложенных физических представлений.

Аналогичные расчеты и сравнение с экспериментальными данными были проведены для этих же слоистых систем, подвергнутых последовательным изотермическим отжигам при 700°C. И в этом случае все особенности термически индуцированных процессов фазообразования (временные последовательности фазообразования, относительные содержания образующихся фаз, изменение средней концентрации титана в растворе α -Ti(Fe)) в обеих слоистых системах, наблюдаемые экспериментально при последовательных изотермических отжигам, хорошо описываются теоретически в рамках предложенных физических представлений.

Система Fe-Zr. Для моделирования термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования в слоистых системах Fe-Zr нами выбраны системы α -Fe(10 мкм)-Zr(2 мкм) и α -Fe(5 мкм)-Zr(2 мкм) с существенно различными толщинами подложек из α -Fe при одинаковых толщинах покрытий из Zr. Эти системы были получены методом магнетронного распыления и исследованы ранее методами мессбауэровской спектроскопии и рентгеновской дифрактометрии в процессе последовательных изохронных и изотермических отжигов [7, 8].

На рис. 4 показаны зависимости относительных интенсивностей парциальных мессбауэровских спектров ядер ^{57}Fe в образующихся фазах от температуры последовательных двухчасовых изохронных термических отжигов для системы α -Fe(10 мкм)-Zr(2 мкм), которые получены в результате проведенного эксперимента и численных расчетов.

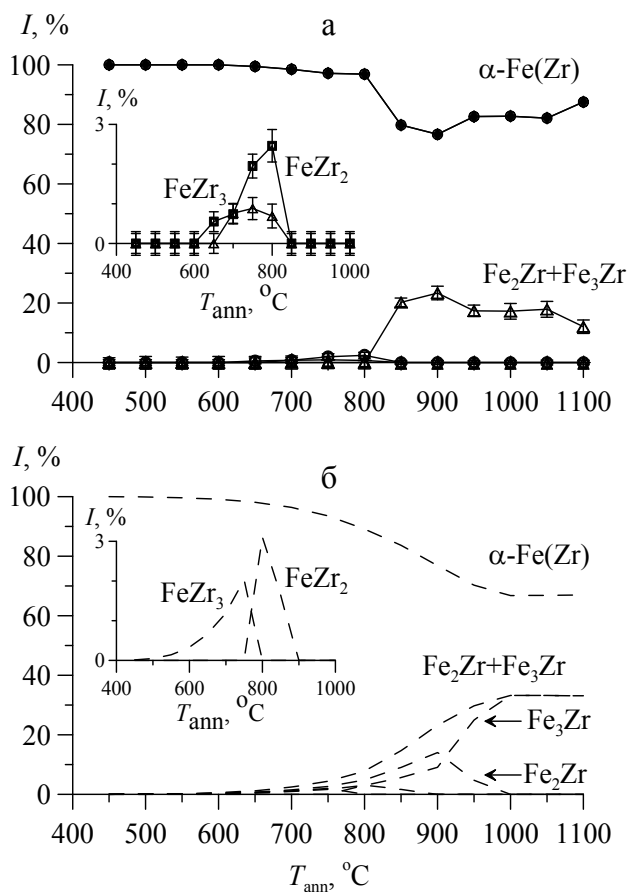


Рис. 4. Экспериментальные (а) и расчетные (б) зависимости относительных интенсивностей I парциальных мессбауэровских спектров для слоистой системы Fe(10 мкм)-Zr(2 мкм) от температуры T_{ann} последовательных изохронных отжигов

На рис. 5 представлены экспериментальные и расчетные зависимости относительных интенсивностей парциальных мессбауэровских спектров (MS), а также зависимости полученных со стороны циркониевого покрытия относительных интенсивностей рентгеновских дифракционных рефлексов фаз и их относительного содержания в атомных единицах компонентов в области проникновения в систему рентгеновского излучения (X-ray) от времени t_{ann} последовательных изотермических отжигов слоистой системы $\alpha\text{-Fe}(5 \text{ мкм})\text{-Zr}(2 \text{ мкм})$ при температуре $T_{\text{ann}} = 900^\circ\text{C}$.

Экспериментально установленные методами мессбауэровской спектроскопии и рентгеновской дифрактометрии последовательности фазовых превращений и относительное содержание интерметаллидов в исследованных слоистых системах Fe–Zr на всех этапах последовательных изохронных и изотермических отжигов показывают хорошее соответствие с результатами расчетов в рамках описанной выше модели, полученных с помощью программы DIFFUSION (см. рис. 4 и 5).

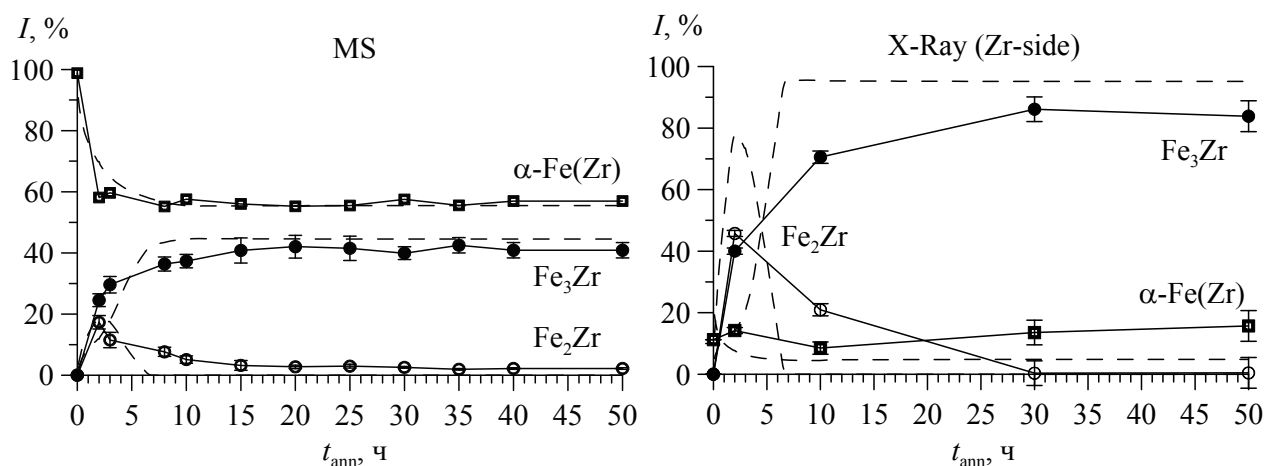


Рис. 5. Известные экспериментальные данные (символы, соединенные линиями) и результаты моделирования (штриховые линии) для последовательных изотермических отжигов слоистой системы $\alpha\text{-Fe}(5 \text{ мкм})\text{-Zr}(2 \text{ мкм})$ при температуре $T_{\text{ann}} = 900^\circ\text{C}$

Это позволяет считать, что результаты расчетов и других физических величин, описывающих кинетику процессов диффузии и фазообразования, близки к реальным значениям. В частности это координаты x границ образующихся однофазных областей с двухфазными областями (см. рис. 6) в зависимости от времени отжига t_{ann} и концентрационные профили циркония и фаз по глубине образца на всех этапах отжига.

Расчет показывает, что система $\alpha\text{-Fe}(5 \text{ мкм})\text{-Zr}(2 \text{ мкм})$ в отличие от системы $\alpha\text{-Fe}(10 \text{ мкм})\text{-Zr}(2 \text{ мкм})$ достигает состояния термической стабилизации при 25 ч отжига, когда координата границы фазы $\alpha\text{-Fe}(Zr)$ достигает граничного значения и вся слоистая система становится двухфазной. В этом состоянии слоистая система неоднородна по глубине – со стороны покрытия образуется в основном интерметаллид Fe_3Zr , а со стороны

подложки – насыщенный раствор α -Fe(Zr). Расчет показал, что система α -Fe(10 мкм)–Zr(2 мкм) достигнет состояния стабилизации при временах отжига, превышающих 150 ч.

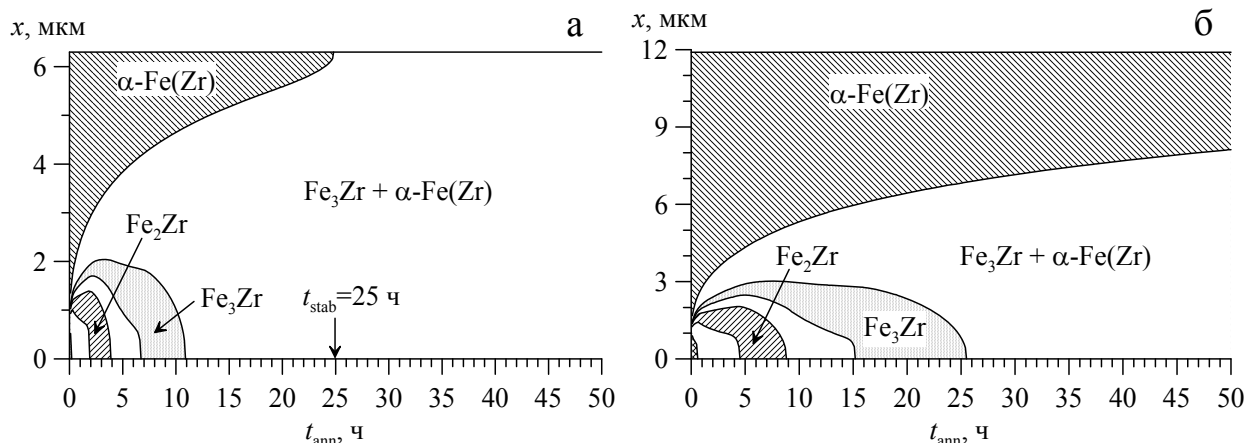


Рис. 6. Координаты x межфазных границ в зависимости от времени t_{ann} последовательного изотермического отжига при температуре $T_{\text{ann}} = 900^\circ\text{C}$ в слоистых бинарных системах: α -Fe(5 мкм)–Zr(2 мкм) (а) и α -Fe(10 мкм)–Zr(2 мкм) (б)

Система Fe-Sn. Для моделирования процессов диффузии и фазообразования в слоистых бинарных системах Fe-Sn была выбрана система α -Fe(10 мкм)–Sn(4 мкм), которая исследовалась ранее [9–11] методами мессбауэровской спектроскопии на ядрах ^{57}Fe и ^{119}Sn в процессе последовательных изохронных и изотермических отжигов.

В качестве примера на рис. 7 показаны экспериментальные и расчетные зависимости относительных интенсивностей парциальных мессбауэровских спектров ядер ^{57}Fe и ^{119}Sn в образующихся фазах от температуры последовательных пятичасовых изохронных отжигов для системы α -Fe(10 мкм)–Sn(4 мкм).

Аналогичные расчеты и сравнение с экспериментальными данными были проведены для этой же слоистой системы, подвергнутой последовательным изотермическим отжигам при 550°C и 700°C до 20 ч.

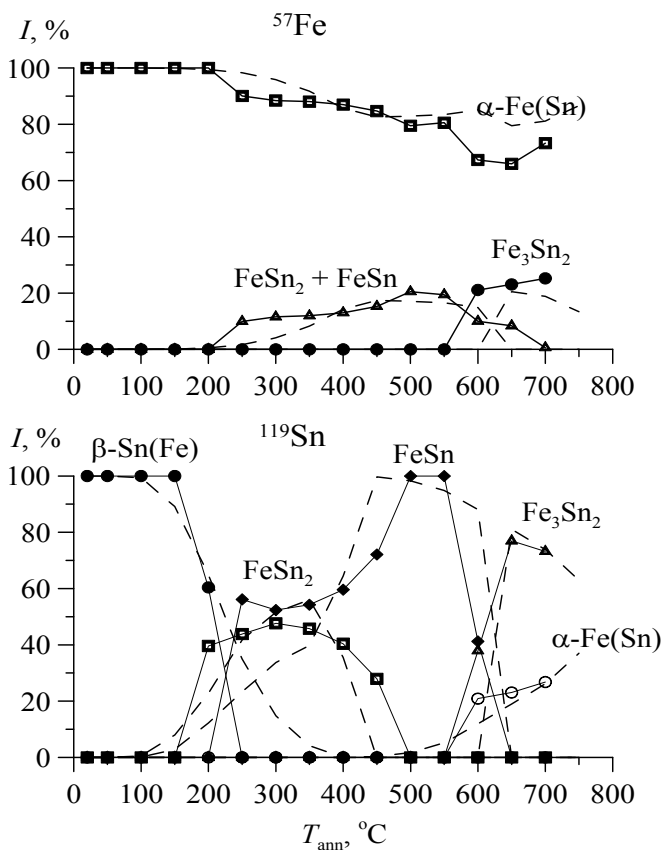


Рис. 7. Экспериментальные и расчетные зависимости относительных интенсивностей I парциальных мессбауэровских ядер ^{119}Sn и ядер ^{57}Fe спектров для слоистой системы Fe(10 мкм)–Sn(4 мкм) от температуры T_{ann} последовательных изохронных отжигов

Во всех случаях отжига в рамках предложенных физических представлений все особенности термически индуцированных процессов фазообразования, наблюдаемые экспериментально методами мессбауэровской спектроскопии, как на ядрах ^{57}Fe , так и ядрах ^{119}Sn , хорошо описываются теоретически.

Расчет показывает, что система $\alpha\text{-Fe}(10\text{ мкм})\text{-Sn}(4\text{ мкм})$ при $T_{\text{ann}} = 700^\circ\text{C}$ достигает состояния термической стабилизации неоднородного по глубине структурно-фазового состояния при 3 ч отжига, когда со стороны покрытия образуется в основном интерметаллид Fe_3Sn_2 , а со стороны подложки – насыщенный раствор $\alpha\text{-Fe}(\text{Sn})$.

В случае изотермического отжига при $T_{\text{ann}} = 550^\circ\text{C}$ система $\alpha\text{-Fe}(10\text{ мкм})\text{-Sn}(4\text{ мкм})$ не достигает состояния термической стабилизации в ходе проведения эксперимента. Расчет показал, что это состояние будет достигнуто при временах отжига, превышающих 40 ч. При этом со стороны покрытия должен образоваться в основном интерметаллид FeSn , а со стороны подложки – насыщенный раствор $\alpha\text{-Fe}(\text{Sn})$.

Система Cu-Be. Для моделирования термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования в слоистых системах Cu-Be была выбрана система $\text{Cu}(10\text{ мкм})\text{-Be}(2.5\text{ мкм})$, исследованная ранее [12] методами рентгеновской дифрактометрии с обеих сторон образца в процессе последовательных изохронных и изотермических отжигов. На рис. 8 представлены экспериментальные зависимости относительных интенсивностей I рентгеновских дифракционных рефлексов образующихся фаз, полученных со стороны бериллия (Be-side) и со стороны меди (Cu-side), а также рассчитанные зависимости относительного содержания фаз в атомных единицах компонентов в области проникновения в слоистую систему рентгеновского излучения для слоистой системы $\text{Cu}(10\text{ мкм})\text{-Be}(2.5\text{ мкм})$ от температуры последовательных двухчасовых изохронных отжигов и от времени t_{ann} последовательного изотермического отжига при $T_{\text{ann}} = 500^\circ\text{C}$.

Экспериментально установленные методами рентгеновской дифрактометрии с обеих сторон образца последовательности фазовых превращений и относительное содержание интерметаллидов в исследованных слоистых системах Cu-Be на всех этапах последовательных изохронных и изотермических отжигов показывают хорошее соответствие с результатами расчетов в рамках описанной выше модели, полученных с помощью программы DIFFUSION (см. рис. 8).

В соответствии с проведенными расчетами, после 14 ч отжига при $T_{\text{ann}} = 500^\circ\text{C}$ система достигнет термически стабильного неоднородного по глубине структурно-фазового состояния, в котором со стороны покрытия образуется в основном интерметаллид CuBe , а со стороны подложки – насыщенный раствор $\text{Cu}(\text{Be})$.

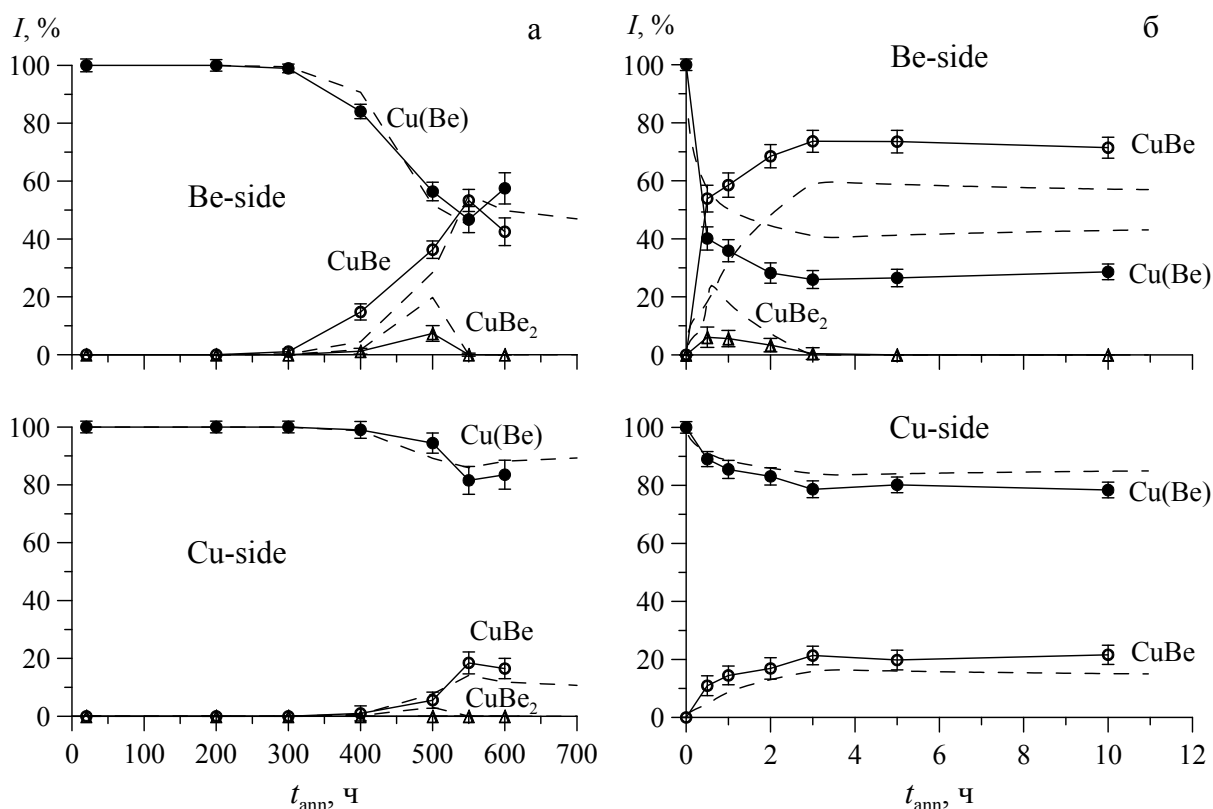
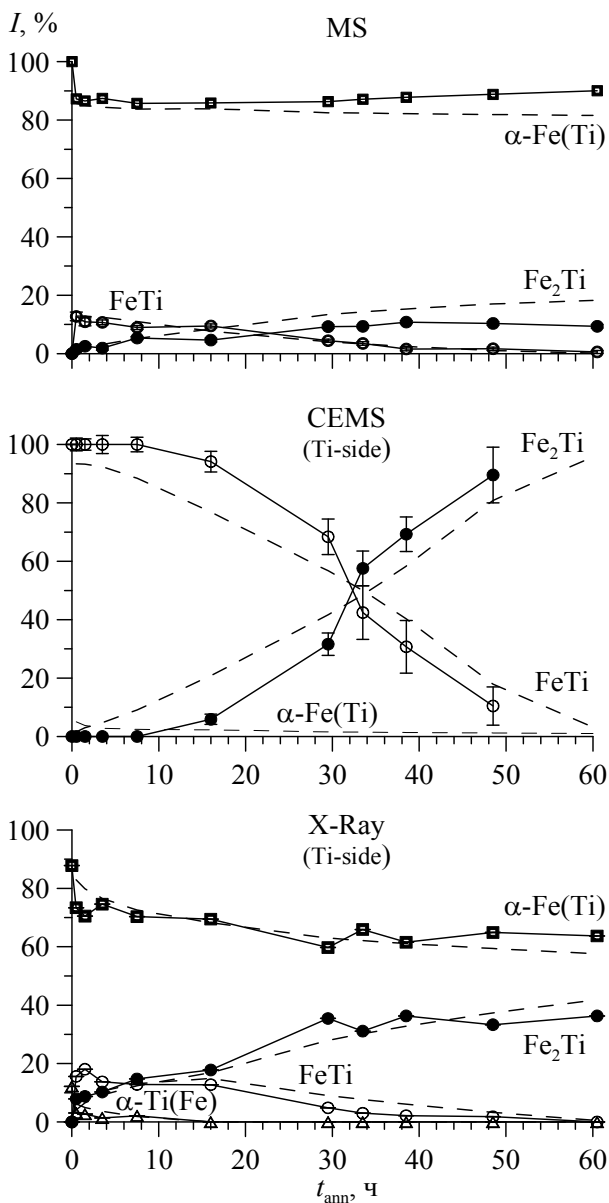


Рис. 8. Известные экспериментальные данные (символы, соединенные линиями) и результаты моделирования (штриховые линии) для последовательных изохронных (а) и изотермических (б) отжигов слоистой системы Cu(10 мкм)–Be(2.5 мкм)

Система с тремя изотопами двух элементов ^{57}Fe –Ti–Fe(Ti)– ^{57}Fe . В качестве слоистой системы с тремя изотопами двух элементов, для которой было проведено моделирование процессов диффузии и фазообразования, была выбрана ранее исследованная [13] методами мессбауэровской спектроскопии (MS и CEMS) и рентгеновской дифрактометрии система $^{57}\text{Fe}(0.07 \text{ мкм})$ –Ti(1 мкм)– $\text{Fe}_{0.96}\text{Ti}_{0.04}(13 \text{ мкм})$ – $^{57}\text{Fe}(0.07 \text{ мкм})$. Эта система была получена с помощью магнетронного распыления титана на подложку из раствора $\text{Fe}_{0.96}\text{Ti}_{0.04}$ с естественным обогащением (2.16 %) железа изотопом ^{57}Fe и последующего термовакуумного напыления железа, обогащенного до 86 ат.% ^{57}Fe .

На рис. 9 представлены экспериментальные и теоретические зависимости относительных интенсивностей парциальных MS- и CEMS-спектров ядер ^{57}Fe , а также зависимости полученных со стороны титанового покрытия относительных интенсивностей рентгеновских дифракционных рефлексов фаз и их относительного содержания в атомных единицах компонентов в области проникновения в систему рентгеновского излучения (X-ray), от времени t_{ann} последовательного изотермического отжига при температуре 650°C для слоистой системы $^{57}\text{Fe}(0.07 \text{ мкм})$ –Ti(1 мкм)– $\text{Fe}_{0.96}\text{Ti}_{0.04}(13 \text{ мкм})$ – $^{57}\text{Fe}(0.07 \text{ мкм})$.

Следует обратить внимание на то, что образец исследовался экспериментально при температурах значительно ниже температуры отжига – при комнатной температуре. При данной температуре коэффициенты диффузии уменьшаются настолько, что диффузией



можно пренебречь. При этом твердый раствор β -Ti(Fe) распадается на α -Ti(Fe) и интерметаллид FeTi. При расчете зависимостей на рис. 9 количество всех фаз, в том числе и количество β -Ti(Fe), пересчитывалось в соответствии с фазовой диаграммой равновесных состояний бинарной системы Fe-Ti с температуры отжига на температуру, при которой проводились экспериментальные исследования.

Рис. 9. Известные экспериментальные данные (символы, соединенные линиями) и результаты моделирования (штриховые линии) для последовательных изотермических отжигов слоистой системы $^{57}\text{Fe}(0.07 \text{ мкм})\text{-Ti}(1 \text{ мкм})\text{-Fe}_{0.96}\text{Ti}_{0.04}(13 \text{ мкм})\text{-}^{57}\text{Fe}(0.07 \text{ мкм})$ при температуре $T_{\text{ann}} = 650^\circ\text{C}$

Экспериментально установленные методами MS- и CEMS-спектроскопии, а также рентгеновской дифрактометрии последовательности фазовых превращений и относительное содержание интерметаллидов в слоистой системе $^{57}\text{Fe}(0.07 \text{ мкм})\text{-Ti}(1 \text{ мкм})\text{-Fe}_{0.96}\text{Ti}_{0.04}(13 \text{ мкм})\text{-}^{57}\text{Fe}(0.07 \text{ мкм})$ на всех этапах последовательного изотермического отжига показывают хорошее соответствие с результатами расчетов (рис. 9) в рамках предложенной нами модели для слоистых систем с тремя изотопами двух элементов.

Для выявления роли напыленных слоев железа, обогащенных изотопом ^{57}Fe , на процессы диффузии и фазообразования в исследуемой системе и их регистрацию с помощью методов мессбауэровской спектроскопии, было проведено дополнительное моделирование термически индуцированных процессов, протекающих в слоистой системе Ti(1 мкм)-Fe_{0.96}Ti_{0.04}(13 мкм). При этом использовались та же фазовая диаграмма бинарной системы Fe-Ti и те же парциальные коэффициенты диффузии. Рассчитанные таким образом относительные интенсивности MS- и CEMS-спектров заметно отличались (особенно на начальных этапах отжига) от экспериментально определенных и расчетных относительных интенсивностей для системы $^{57}\text{Fe}(0.07 \text{ мкм})\text{-Ti}(1 \text{ мкм})\text{-Fe}_{0.96}\text{Ti}_{0.04}(13 \text{ мкм})\text{-}^{57}\text{Fe}(0.07 \text{ мкм})$.

Для выявления роли напыленных слоев железа, обогащенных изотопом ^{57}Fe , на процессы диффузии и фазообразования в исследуемой системе и их регистрацию с помощью методов мессбауэровской спектроскопии, было проведено дополнительное моделирование термически индуцированных процессов, протекающих в слоистой системе Ti(1 мкм)-Fe_{0.96}Ti_{0.04}(13 мкм). При этом использовались та же фазовая диаграмма бинарной системы Fe-Ti и те же парциальные коэффициенты диффузии. Рассчитанные таким образом относительные интенсивности MS- и CEMS-спектров заметно отличались (особенно на начальных этапах отжига) от экспериментально определенных и расчетных относительных интенсивностей для системы $^{57}\text{Fe}(0.07 \text{ мкм})\text{-Ti}(1 \text{ мкм})\text{-Fe}_{0.96}\text{Ti}_{0.04}(13 \text{ мкм})\text{-}^{57}\text{Fe}(0.07 \text{ мкм})$.

В отличие от мессбауэровской спектроскопии для рентгеновской дифрактометрии расчетные зависимости практически повторили результаты, полученные для слоистой системы $^{57}\text{Fe}(0.07 \text{ мкм})\text{--Ti}(1 \text{ мкм})\text{--Fe}_{0.96}\text{Ti}_{0.04}(13 \text{ мкм})\text{--}^{57}\text{Fe}(0.07 \text{ мкм})$, поскольку информация в данном случае собирается со значительной части образца и в нем участвуют как атомы железа (вне зависимости от изотопного состава), так и атомы титана.

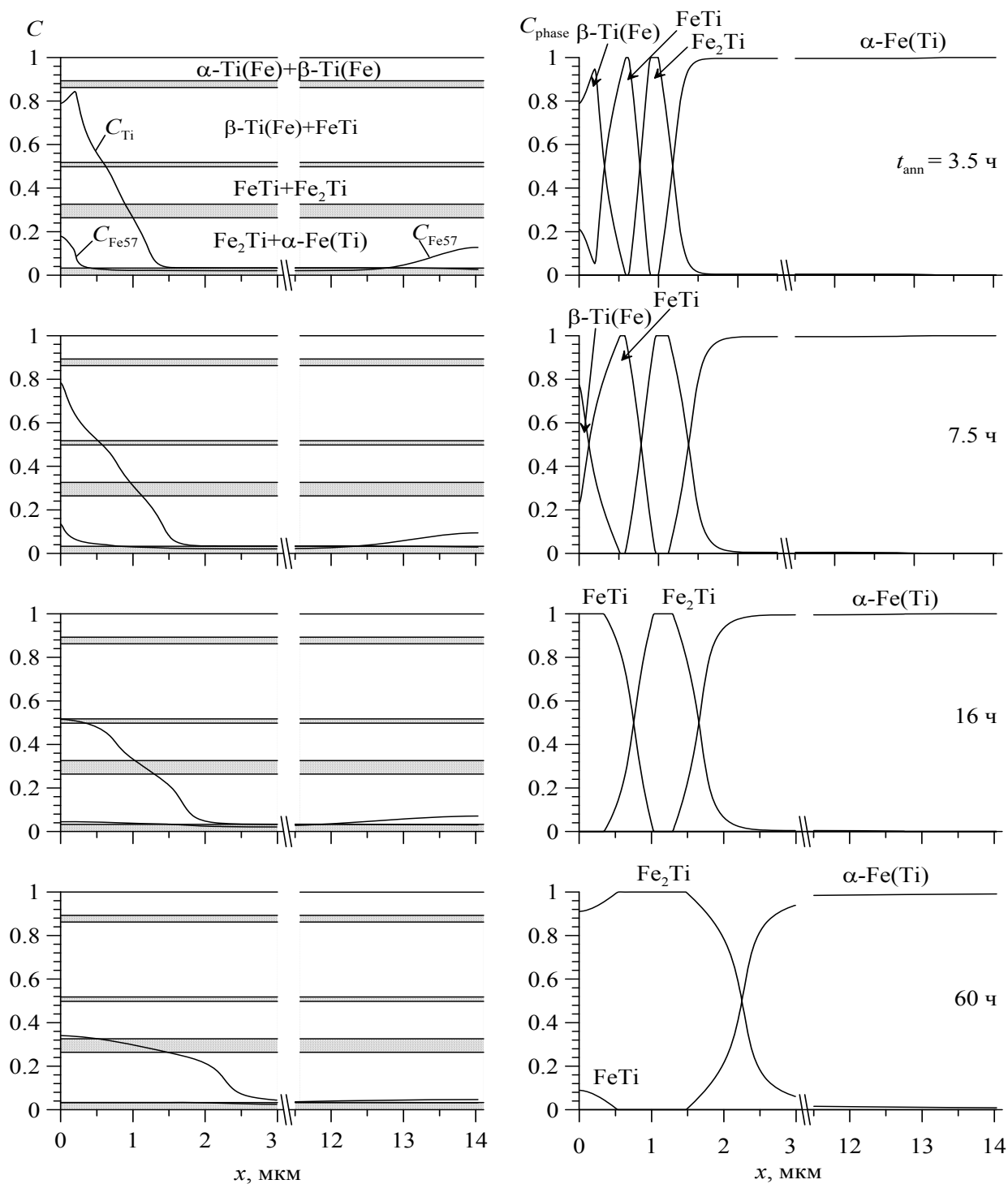


Рис. 10. Концентрационные профили атомов Ti (C_{Ti}), изотопа ^{57}Fe ($C_{\text{Fe}57}$) и относительное содержание фаз (C_{phase}) по глубине слоистой системы $^{57}\text{Fe}(0.07 \text{ мкм})\text{--Ti}(1 \text{ мкм})\text{--Fe}_{0.96}\text{Ti}_{0.04}(13 \text{ мкм})\text{--}^{57}\text{Fe}(0.07 \text{ мкм})$ на различных этапах последовательного изотермического отжига

Хорошее согласие на всех этапах изотермического отжига результатов расчета с экспериментальными данными, полученными с помощью методов мессбауэровской спектроскопии (MS и SEMS) и рентгеновской дифрактометрии, позволяет считать, что результаты расчетов и других физических величин, описывающих кинетику процессов диффузии и фазообразования, близки к реальным значениям. В частности, это концентрационные профили титана $C_{Ti}(x)$, изотопа железа $C_{Fe57}(x)$ и образующихся фаз $C_{phase}(x)$ по глубине образца на всех этапах отжига при температуре $T_{ann} = 650^{\circ}C$ (см рис. 10).

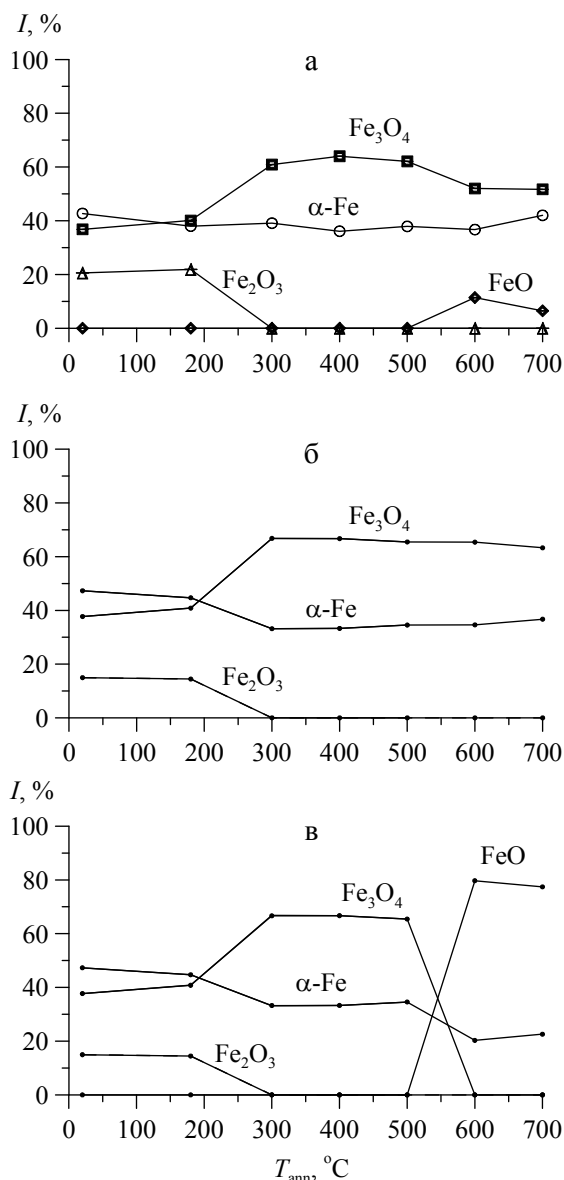
На рис. 10 видно, что на первых этапах отжига в приповерхностном слое образца со стороны титанового покрытия образуются фазы β -Ti(Fe), FeTi и Fe_2Ti . Затем фаза β -Ti(Fe) исчезает и на поверхность выходит фаза FeTi, при этом в остальных частях образца остаются только две фазы – интерметаллид Fe_2Ti и раствор α -Fe(Ti). Заметим, что данная система достигнет состояния термической стабилизации лишь при 154 ч отжига. В этом состоянии слоистая система будет неоднородной по глубине – со стороны покрытия образуется в основном интерметаллид Fe_2Ti , а со стороны подложки – насыщенный раствор α -Fe(Ti).

Концентрационный профиль $C_{Ti}(x)$ атомов титана по глубине образца на первых этапах отжига имеет максимум. После 7.5 ч отжига он становится монотонно убывающим по глубине. К концу отжига концентрационная область титана значительно сокращается, при этом он не проникает в глубину образца более чем на 3 мкм. Концентрационный профиль $C_{Fe57}(x)$ изотопа ^{57}Fe на всех этапах отжига имеет максимальные значения с обеих сторон образца. С увеличением времени отжига этот профиль постепенно выравнивается.

Имплантационная система $^{57}Fe:O^+$. Предлагаемая нами модель процессов диффузии и фазообразования в системах металл-металлоид использовалась при моделировании процессов диффузии и фазообразования в имплантационной системе $^{57}Fe:O^+$, которая была получена методами ионной имплантации ионов кислорода с энергией 50 кэВ и дозой $5 \cdot 10^{17}$ ион/см² в приповерхностные слои фольги из α -железа толщиной 50 мкм, обогащенного до 95т.% ^{57}Fe . Система подвергалась последовательным изохронным получасовым термическим отжигам. После каждого отжига проводились исследования при комнатной температуре методами SEMS-спектроскопии со стороны поверхности α -Fe, подвергнутой имплантации ионами кислорода [14–15].

Начальный концентрационный профиль имплантированных в ^{57}Fe ионов кислорода $n_O(x, t)|_{t=0}$, использованный нами при моделировании, был получен в результате расчета при помощи пакета программного обеспечения SRIM [16], предназначенного для моделирования процессов распыления и перемещения ионов в веществе при их имплантации. При

моделировании нами было сделано допущение, что с обеих поверхностей слоистой системы в процессе имплантации и последующих термических отжигов не происходит заметной потери кислорода.



изохронных термических отжигов для имплантационной системы $^{57}\text{Fe}:\text{O}^+$, которые получены в результате проведенного эксперимента и численных расчетов в рамках предложенной физической модели, изображены на рис. 11.

Расчетные зависимости в случае закалки (рис. 11б) и отсутствия закалки (рис. 11в) образца после отжигов при температурах ниже $T_{\text{ann}} = 500^\circ\text{C}$ хорошо соот-

При вычислении относительных интенсивностей парциальных CEMS-спектров эффективная глубина выхода электронов конверсии также как и в случае системы $^{57}\text{Fe}-\text{Ti}-\text{Fe}(\text{Ti})-^{57}\text{Fe}$ для железа была взята равной 0.04 мкм. Эффективная глубина выхода электронов конверсии для кислорода принималась значительно большей.

Рис. 11. Зависимости относительных интенсивностей I парциальных CEMS-спектров от температуры T_{ann} последовательных изохронных отжигов: экспериментальные (а) и расчетные в случае закалки (б) и отсутствия закалки (в) образца после отжигов для имплантационной системы $^{57}\text{Fe}:\text{O}^+$ со стороны кислорода

Зависимости относительных интенсивностей парциальных мессбауэровских спектров электронов конверсии образующихся фаз от температуры последовательных получасовых

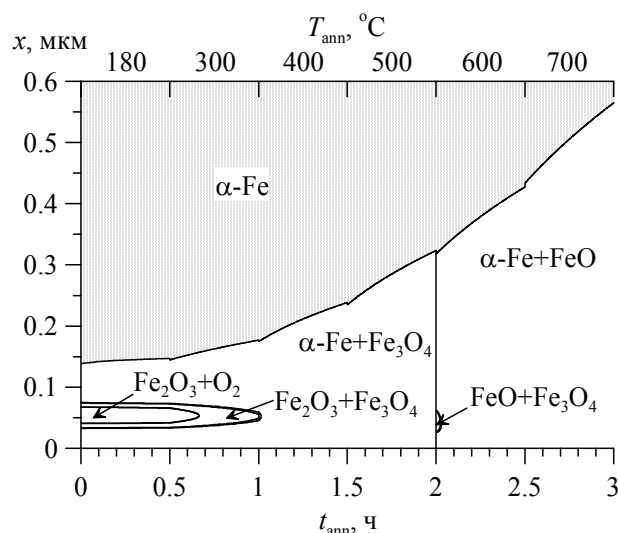


Рис. 12. Координаты x межфазных границ в зависимости от времени t_{ann} последовательных изохронных термических отжигов в имплантационной системе $^{57}\text{Fe}:\text{O}^+$

ветствуют экспериментальным данным, а при температурах выше $T_{\text{ann}} = 500^{\circ}\text{C}$ имеются различия, обусловленные конечной скоростью остывания образца.

Рассчитанные координаты границ однофазных областей образующихся фаз x с двухфазными областями в зависимости от времени изохронных отжигов t_{ann} представлены на рис. 12. Как видим, сразу после имплантации в образце кроме $\alpha\text{-Fe}$ присутствуют различные фазы – Fe_3O_4 , Fe_2O_3 и O_2 , которые располагаются на глубинах не более 0.15 мкм. Первый отжиг при $T_{\text{ann}} = 180^{\circ}\text{C}$ не приводит к заметным изменениям в фазовом составе.

Во время следующего отжига при $T_{\text{ann}} = 300^{\circ}\text{C}$ через ~ 0.15 ч (~ 0.65 ч от общего времени) пропадает фаза O_2 и постепенно сужается двухфазная область $\text{Fe}_2\text{O}_3 + \text{Fe}_3\text{O}_4$. В начале отжига при $T_{\text{ann}} = 400^{\circ}\text{C}$ пропадает фаза Fe_2O_3 и постепенно расширяется двухфазная область $\alpha\text{-Fe} + \text{Fe}_3\text{O}_4$. Фаза FeO появляется в процессе отжига при $T_{\text{ann}} = 600^{\circ}\text{C}$ и сохраняется до конца последовательных отжигов. При этом ее однофазная область исчезает менее чем через 0.05 ч (2.05 ч от общего времени отжига), а двухфазная область $\alpha\text{-Fe} + \text{FeO}$ постепенно расширяется. В результате проведенных последовательных изохронных отжигов граница области проникновения кислорода в матрицу $\alpha\text{-Fe}$ перемещается вглубь образца и при $T_{\text{ann}} = 700^{\circ}\text{C}$ достигает глубины ~ 0.55 мкм.

Основные результаты и выводы.

1. Предложены физические модели термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования в слоистых бинарных системах металл-металл с тремя изотопами двух элементов и металл-металлоид. В основе физических моделей – линейная термодинамическая теория неравновесных процессов, механизм взаимной диффузии компонентов по непрерывным каналам фаз в двухфазных областях системы и предположение о квазистационарном процессе фазообразования.

2. Осуществлена программная реализация предложенных моделей, позволяющая количественно описывать кинетику термически индуцированных процессов в слоистых бинарных системах с учетом особенностей фазовых диаграмм равновесных состояний при произвольных температурно-временных режимах термических отжигов. Для сравнения с результатами экспериментальных исследований на всех этапах процесса в программе предусмотрен расчет относительных интенсивностей парциальных мессбауэровских (MS и SEMS) спектров, а также относительных содержаний образующихся фаз в атомных единицах компонентов в области проникновения в слоистую систему рентгеновского излучения.

3. Проведено моделирование термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования в модельных двухслойных бинарных системах металл-металл, которое

позволило установить характер и степень влияния особенностей фазовых диаграмм равновесных состояний, коэффициентов диффузии и толщины системы на кинетику процесса термической стабилизации неоднородного по глубине структурно-фазового состояния слоистой системы и термически стабилизированный концентрационный профиль.

4. Впервые проведено моделирование процессов термической диффузии и фазообразования с учетом особенностей фазовых диаграмм равновесных состояний для экспериментально исследованных слоистых систем: металл-металл с двумя (Fe–Ti, Fe–Zr, Fe–Sn, Cu–Be) и тремя (^{57}Fe –Ti–Fe(Ti)– ^{57}Fe) изотопами, полученных с помощью метода магнетронного распыления, а также металл-металлоид ($^{57}\text{Fe}:\text{O}^+$), полученной методом имплантации. Результаты моделирования хорошо описывают экспериментально установленные с помощью методов MS- и SEMS-спектроскопии и рентгеновской дифрактометрии последовательности фазовых превращений и относительное содержание образующихся фаз на всех этапах различных температурно-временных режимов отжига исследованных систем, в том числе процессы термической стабилизации в системах Fe–Zr, Fe–Sn и Cu–Be.

5. При моделировании термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования в исследованных слоистых бинарных системах на каждом температурно-временном этапе впервые рассчитаны локальные концентрации компонентов, относительные содержания образующихся фаз, коэффициенты диффузии и диффузионные потоки компонентов на любой глубине слоистой системы, а также положения границ однофазных областей.

6. Согласие численных расчетов с экспериментальными данными указывает на то, что характер фазовых превращений в исследованных слоистых системах в соответствии с предложенными физическими моделями определяется изменением локальной концентрации компонентов в процессе их диффузии и соответствует особенностям фазовых диаграмм равновесных состояний.

Цитируемая литература.

1. *Русаков В.С., Кадыржанов К.К., Туркебаев Т.Э.* Известия РАН, 2005. Т.69. №10. С.1482.
2. *Kadyrzhanov K.K., Rusakov V.S., Turkebaev T.E.* J.Phys.: Condens. Matter, 2006. V.18. P.4113.
3. *Манакова И.А., Верещак М.Ф., Сергеева Л.С. и др.* ФММ, 2010. Т.109. Вып.5. С.483.
4. *Сергеева Л.С. Манакова И.А., Верещак М.Ф. и др.* Известия НАН РК. Серия Физико-математическая, 2010. №5. С. 66.
5. *Манакова И.А., Верещак М.Ф., Сергеева Л.С. и др.* Вестник НЯЦ РК, 2011. Вып. 2. С. 103.
6. *Манакова И.А., Верещак М.Ф., Сергеева Л.С. и др.* Вестник НЯЦ РК, 2012. Вып. 4. С. 110.
7. *Жубаев А. К., Аргынов А.Б., Кадыржанов К.К. и др.* Известия НАН РК, 2005. С.110.

8. *Аргынов А.Б., Жубаев А.К., Русаков В.С., Кадыржанов К.К.* ФММ, 2008. Т.105. №2. С.182.
9. *Жубаев А.К., Аргынов А.Б., Русаков В.С., Кадыржанов К.К.* Известия вузов, «Физика», 2007. Т.50. С.79.
10. *Коршиев Б.О., Кадыржанов К.К., Русаков В.С. и др.* Известия НАН РК. Серия физико-математическая, 2003. Т.2. С.26.
11. *Kadyrzhanov K.K., Rusakov V.S., Korshiyev B.O. et al.* Нур. Int, 2004. V.156-157 (1-4). P623.
12. *Аргынов А.Б., Жанкадамова А.М., Иманбеков Ж.Ж. и др.* Вестник НЯЦ РК, 2007. №3. С.5.
13. *Сергеева Л.С., Верещак М.Ф., Манакова И.А. и др.* Вестник НЯЦ РК, 2006. № 4. С.28.
14. *Русаков В.С., Кадыржанов К.К., Туркебаев Т.Э. и др.* Поверхность, 1995. №7-8. С.28.
15. *Kadyrzhanov K.K., Rusakov V.S., Turkebaev T.E.* Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. **В.** 2000. V.170. P.85.
16. *Ziegler J., Ziegler M., Biersack J.* Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. **В.** 2010. V. 268. P. 1818.

Публикации по теме диссертации.

Статьи

1. Русаков В.С., Сухоруков И.А., Жанкадамова А.М., Кадыржанов К.К. Моделирование процессов диффузии и фазообразования в слоистых бинарных металлических системах. Сравнение с мессбауэровскими и рентгеновскими данными. // ФММ, т.109, вып.5 (2010), с.584-593.
2. Русаков В.С., Сухоруков И.А., Жанкадамова А.М., Кадыржанов К.К. Моделирование термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования в слоистых системах Fe-Sn и Fe-Zr. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. №6, стр. 103–112 (2011).
3. Русаков В.С., Сухоруков И.А., Жанкадамова А.М., Кадыржанов К.К. Моделирование процессов диффузии и фазообразования при изотермических отжигах слоистых систем Fe-Zr. // Вестник Московского университета. Серия 3. Физика. Астрономия, №2 (2011) стр. 49–56.
4. Русаков В.С., Сухоруков И.А., Жанкадамова А.М., Кадыржанов К.К. Физическая модель термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования в слоистых системах с тремя изотопами двух элементов. // Вестник Московского университета. Серия 3. Физика. Астрономия, №6 (2011) стр. 67-74.
5. Сергеева Л.С. Манакова И.А., Верещак М.Ф., Сухоруков И.А., Жанкадамова А.М., Яскевич В.И., Русаков В.С., Кадыржанов К.К. Термически индуцированные процессы диффузии и фазообразования в слоистой системе $Fe_{0.966}Ti_{0.034}-Ti$ при изохронном отжиге // Известия НАН РК. Серия Физико-математическая, 2010. №5. Стр. 66-75.
6. Манакова И.А., Верещак М.Ф., Сергеева Л.С., Сухоруков И.А., Жанкадамова А.М., Русаков В.С., Кадыржанов К.К. Термически индуцированные процессы диффузии и фазообразования в слоистой системе Fe-Ti при изохронном отжиге // Вестник НЯЦ РК, 2011. Вып. 2. С. 103-108.
7. Манакова И.А., Верещак М.Ф., Сергеева Л.С., Яскевич В.И., Антонюк В.И., Тулеушев Ю.Ж., Жанкадамова А.М., Сухоруков И.А., Русаков В.С., Кадыржанов К.К. // Диффузия и фазообразование в слоистой системе Fe(10 мкм)-Ti(2 мкм) при изотермическом отжиге. Вестник НЯЦ РК, 2011. Вып. 4. С. 110-116.

Материалы конференций

8. Жанкадамова А.М., Сухоруков И.А., Сергеева Л.С., Манакова И.А., Верещак М.Ф., Русаков В.С., Кадыржанов К.К. Исследование фазовых превращений при последовательном изохронном отжиге слоистой системы $Fe_{0.96}Ti_{0.04}-Ti$. // 7-я Международная

- конференция "Ядерная и радиационная физика" (ICNRP'09), Алматы, Казахстан, 2009 г. Доклады. Институт ядерной физики НЯЦ РК (2010) с.235-238.
9. Жанкадамова А.М., Сухоруков И.А., Манакова И.А., Верещак М.Ф., Русаков В.С., Кадыржанов К.К. Экспериментальные и теоретические исследования фазовых превращений при последовательном изотермическом отжиге слоистой системы Fe – Ti. // 7-я Международная конференция "Ядерная и радиационная физика" (ICNRP'09), Алматы, Казахстан, 2009 г. Доклады. Институт ядерной физики НЯЦ РК (2010) с.360-364.
 10. Сухоруков И.А., Жанкадамова А.М., Русаков В.С., Кадыржанов К.К. Моделирование процессов диффузии и фазообразования в слоистых системах металл-металлоид. // 8-я Международная конференция «Ядерная и радиационная физика», 2011 г., Алматы, Казахстан. Доклады. С. 94-98.
 11. Сухоруков И.А., Жанкадамова А.М., Русаков В.С., Кадыржанов К.К. Моделирование термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования в слоистых системах с тремя изотопами двух элементов. // 8-я Международная конференция «Ядерная и радиационная физика», 2011 г., Алматы, Казахстан. Доклады. С. 98-102.
 12. Русаков В.С., Сухоруков И.А., Жанкадамова А.М., Кадыржанов К.К. Моделирование процессов диффузии и фазообразования в слоистых бинарных системах на основе железа. // Материалы 9-й Международной конференции «Взаимодействие излучения с твердым телом», Беларусь, Минск, 2011. С. 385-387.

Тезисы конференций

13. Русаков В.С., Сухоруков И.А., Жанкадамова А.М., Кадыржанов К.К. Моделирование процессов диффузии и фазообразования в слоистых бинарных металлических системах. Сравнение с мессбауэровскими и рентгеновскими данными. // XI Международная конференция "Мессбауэровская спектроскопия и ее применения", Екатеринбург. Тез. докл., с.68 (2009).
14. Жанкадамова А.М., Сухоруков И.А., Сергеева Л.С., Манакова И.А., Верещак М.Ф., Русаков В.С., Кадыржанов К.К. Исследование фазовых превращений при последовательном изохронном отжиге слоистой системы $Fe_{0.96}Ti_{0.04}-Ti$. // 7-я Международная конференция "Ядерная и радиационная физика" (ICNRP'09), Алматы, Казахстан. Тез. докл., с.113 (2009).
15. Жанкадамова А.М., Сухоруков И.А., Манакова И.А., Верещак М.Ф., Русаков В.С., Кадыржанов К.К. Экспериментальные и теоретические исследования фазовых превращений при последовательном изотермическом отжиге слоистой системы Fe – Ti. // 7-я Международная конференция "Ядерная и радиационная физика" (ICNRP'09), Алматы, Казахстан. Тез. докл., с.148 (2009).
16. Сухоруков И.А., Жанкадамова А.М., Русаков В.С., Кадыржанов К.К. Моделирование процессов диффузии и фазообразования в слоистых системах металл-металлоид. // 8-я Международная конференция "Ядерная и радиационная физика" (ICNRP'11), Алматы, Казахстан. Тез. докл., с. 69-70.
17. Сухоруков И.А., Жанкадамова А.М., Русаков В.С., Кадыржанов К.К. Моделирование термически индуцированных процессов диффузии и фазообразования в слоистых системах с тремя изотопами двух элементов. // 8-я Международная конференция "Ядерная и радиационная физика" (ICNRP'11), Алматы, Казахстан. Тез. докл., с. 70-71.

Государственная регистрация

18. Свидетельство о государственной регистрации программы DIFFUSION №2012610880 от 20 января 2012 г. Авторы: Русаков В.С., Сухоруков И.А.

Подписно к печати 11.04.12
Тираж 100 Заказ 75

Отпечатано в отделе оперативной печати
физического факультета МГУ