

## О НОВОМ ПОДХОДЕ К НАНЕСЕНИЮ МНОГОСЛОЙНЫХ СВЕРХТОНКИХ ПОКРЫТИЙ. ЭФФЕКТЫ ПЕРЕМЕШИВАНИЯ

С. Г. Псахье, К. П. Зольников, Т. Ю. Уваров

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, 634021 Томск

В рамках молекулярно-динамического моделирования показано, что взаимодействие нелинейного импульса со свободной поверхностью может приводить к отрыву атомной плоскости. Согласно полученным результатам при налете на мишень оторвавшиеся фрагменты могут формировать многослойное покрытие. Это легло в основу предложенного подхода к послойному нанесению тонких покрытий. Показано, что изменение числа импульсов и времени их выхода на поверхность «источника» может существенно изменить структуру и состав покрытия на мишени.

Нелинейный характер отклика материала на высокоэнергетическое импульсное воздействие может приводить к формированию уединенных нелинейных волн [1–6], распространяющихся в бездефектном кристалле без диссипации энергии с сохранением формы и амплитуды. К таким волнам можно отнести уединенные импульсы сжатия (УИС) [6], характеризующиеся плоским фронтом с длиной волны, составляющей несколько параметров решетки. Взаимодействие УИС со свободной поверхностью кристаллита приводит либо к отражению УИС вглубь образца, либо к отрыву части материала. При этом толщина отрывающихся фрагментов составляет от одного до нескольких межплоскостных расстояний, а их скорость может достигать нескольких километров в секунду [7, 8].

В настоящей работе теоретически исследована возможность использования данного эффекта для обоснования нового метода нанесения сложных тонкослойных покрытий.

Расчеты проводили на основе молекулярно-динамического подхода с использованием потенциалов межатомного взаимодействия, рассчитанных в рамках метода погруженного атома [9, 10]. Моделировалась система, состоящая из двух разнесенных в пространстве блоков (кристаллитов) Си с различной ориентацией (рис. 1). Каждый из блоков включал в себя более 3000 атомов. По аналогии с методикой, предложенной в [7], в блоке-источнике (кристаллите I) генери-

ровались УИС (с амплитудой 2600 м/с), взаимодействие которых с тыльной поверхностью кристаллита приводило к отрыву фрагментов (см. рис. 1,а).

Расчеты показали, что налет оторвавшегося фрагмента на свободную поверхность мишени (кристаллит II) приводит к инициированию интенсивных процессов перемешивания и структурных перестроек. Происходит установление химических связей между атомами налетевшего фрагмента и кристаллита (см. рис. 1,б). Переданный импульс приводит к генерации УИС в кристаллите II. В результате релаксационных процессов в системе «налетевший фрагмент — кристаллит II» устанавливается структура, в целом соответствующая исходной структуре мишени (см. рис. 1,б).

Характер процесса формирования покрытия существенно изменяется, если на неотрелаксированную после столкновения фрагмента с мишенью поверхность мишени налетает новый фрагмент. Это может иметь место при генерации в кристаллите I пакета уединенных волн (см. рис. 1,в). В приповерхностной области будет формироваться структура, заметно отличающаяся от структуры мишени и содержащая большое количество вакансионных комплексов и других структурных дефектов (см. рис. 1,г). При этом структура формирующегося покрытия существенно зависит от интервала между налетами фрагментов

Степень перемешивания атомов налетающих фрагментов и мишени отражена на гисто-

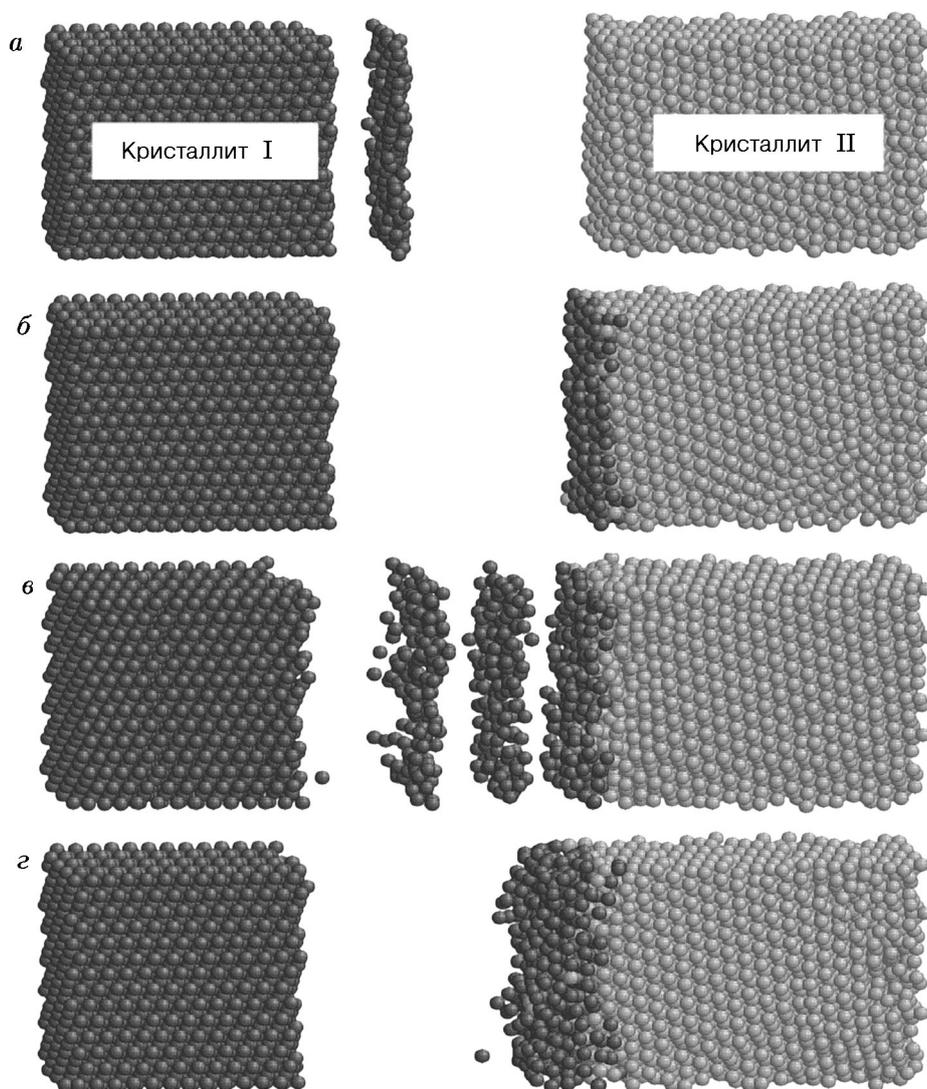


Рис. 1. Отрыв одного фрагмента от свободной поверхности кристаллита I (*a*); структура монослойного покрытия кристаллита II (*б*); последовательный отрыв трех фрагментов от тыльной поверхности кристаллита I (*в*); структура покрытия кристаллита II после налета на него трех фрагментов (*г*)

грамме, показанной на рис. 2. Из рисунка видно, что с ростом числа налетающих фрагментов глубина перемешивания растет.

Результаты расчетов, могут быть положены в основу нового подхода к нанесению тонкослойных покрытий. Варьируя такие параметры, как величина, частота и продолжительность импульсного нагружения, угол налета фрагментов отрыва на подложку, можно получать различные по толщине и структуре тонкослойные покрытия. Отметим также, что предлагаемый метод позволяет менять структуру нанофрагментов, отрывающихся от мате-

риала источника, при изменении его ориентации относительно направления нагружения [8]. Кроме того, на основе данного подхода можно формировать многослойные покрытия, используя в качестве источника разные материалы. Оценка оптимального режима и параметров системы может быть проведена на основе молекулярно-динамических расчетов. Полученные результаты позволяют также предположить возможность инициирования химических реакций, в том числе и неравновесных, при перемешивании атомов налетающих фрагментов и мишени.

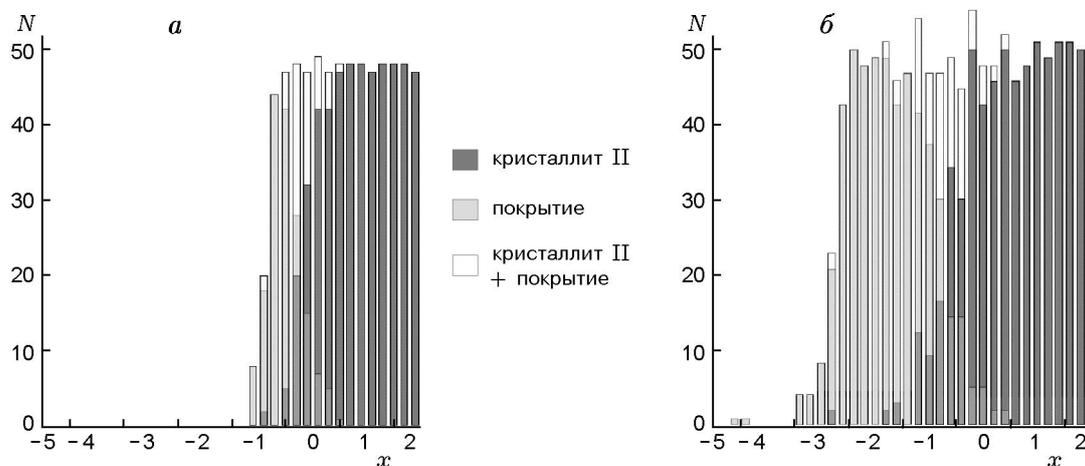


Рис. 2. Распределение атомов в приповерхностной области кристаллита II:

*a* — после налета одного фрагмента, *б* — после налета трех фрагментов; расстояния вдоль оси  $x$  приведены в параметрах решетки, начало координат вдоль оси  $x$  соответствует поверхности мишени до налета фрагментов;  $N$  — число атомов

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **Тода М.** Теория нелинейных решеток. М.: Мир, 1984.
2. **Tasi J.** Perturbation solution for growth of nonlinear shock waves in lattice // *J. Appl. Phys.* 1972. V. 43, N 10. P. 4016–4022.
3. **Betteh J., Powel J.** Shock propagation in one-dimensional lattice at a nonzero initial temperature // *J. Appl. Phys.* 1978. V. 49, N 7. P. 3933–3941.
4. **Псахье С. Г., Зольников К. П., Коростелев С. Ю.** О нелинейном отклике материала при высокоскоростной деформации. Атомный уровень // *Письма в ЖТФ.* 1995. Т. 21, вып. 13. С. 1–5.
5. **Псахье С. Г., Зольников К. П., Сараев Д. Ю.** Нелинейные эффекты при динамическом нагружении материала с дефектными областями // *Письма в ЖТФ.* 1998. Т. 24, вып. 3. С. 42–46.
6. **Псахье С. Г., Зольников К. П., Кадыров Р. И. и др.** О возможности формирования солитообразных импульсов при ионной имплантации // *Письма в ЖТФ.* 1999. Т. 25, вып. 6. С. 7–12.
7. **Псахье С. Г., Зольников К. П., Кадыров Р. И. и др.** Особенности взаимодействия уединенных импульсов, инициированных высокоскоростным нагружением, со свободной поверхностью // *Физика горения и взрыва.* 1999. Т. 35, № 4. С. 106–108.
8. **Зольников К. П., Уваров Т. Ю., Липницкий А. Г. и др.** Об особенностях отскольного разрушения при взаимодействии нелинейных волн со свободной поверхностью монокристалла меди // *Письма в ЖТФ.* 1999. Т. 25, вып. 23. С. 22–27.
9. **Берч А. В., Липницкий А. Г., Чулков Е. В.** Поверхностная энергия и многослойная релаксация поверхности ГЦК — переходных металлов // *Поверхность.* 1994. № 6. С. 23–31.
10. **Eremeev S. V., Lipnitskii A. G., Potekaev A. I. and Chulkov E. V.** Diffusion activation energy of point defects at the surfaces of FCC metals // *Phys. Low-Dimensional Structures.* 1997. N 3/4. P. 127–133.

Поступила в редакцию 3/IV 2000 г.