

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА УВЕЛИЧЕНИЯ АДГЕЗИИ В СТРУКТУРЕ МЕТАЛЛ-ДИЭЛЕКТРИК

Паранин В. Д.

Научный руководитель – к.ф.-м.н., ассистент Колпаков В. А.
Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика
С.П. Королева

В методах описания адгезионного взаимодействия в структуре металл-диэлектрик исходными для определения энергии адгезии являются: концентрация обобщенных электронов в металле, диэлектрическая проницаемость диэлектрика и параметры металла, определяющие его химическую природу (валентность, тип кристаллической решетки и ее постоянная, а также радиус обрезания Ашкрофта, определяющий радиус Ферми поверхностей и ориентация поверхности). При воздействии низкотемпературной плазмы (НТП) на структуру, основной параметр адгезионного взаимодействия, который будет изменяться - это концентрация обобщенных электронов. Тогда если связать концентрацию первичных электронов НТП, и изменение энергии активации процессов в структуре с концентрацией обобщенных электронов, можно будет направленно изменять адгезионные свойства уже в сформированных структурах металла и диэлектрика воздействием частиц низкотемпературной плазмы.

Предполагается, что энергия адгезии в структуре до облучения и после облучения определяется следующими выражениями:

$$E_{a1} = \frac{1}{N_a} (k_{x1}W_x + k_{c1}W_c)$$

$$E_{a2} = \frac{1}{N_a} (k_{x2}W_x + k_{c2}W_c)$$

где k_{x1} , k_{x2} , k_{c1} , k_{c2} – относительное число атомов межфазной границы (пар атомов) взаимодействующих хемосорбционно и сорбционно до и после облучения соответственно; W_x , W_c – энергия хемосорбционной и сорбционной связи соответственно; N_a - постоянная Авогадро; $N_a = 6,022045(31) \times 10^{23}$ моль⁻¹. После простейших математических преобразований систему можно привести к виду

$$\Delta E_a = \frac{\Delta k \Delta W}{N_a}$$

где Δk - относительное число пар атомов межфазной границы изменивших тип связи с сорбционной на хемосорбционную, м⁻²; ΔW - разность между значениями энергии сорбции и хемосорбции, кДж/моль. Для различных веществ с различной ориентацией поверхностных граней величина ΔW колеблется от 60 кДж/моль до 150 кДж/моль и выше.

Величина ΔW является константой для заданной пары материалов, а Δk зависит от характеристик облучения, в том числе от энергии первичного потока, интенсивности, и времени – то есть от дозы облучения. Варьируя величину дозы можно управлять адгезией в структуре, а для оценки эффективности данного метода можно сравнивать значения изменения адгезии со значениями адгезии в чистой структуре.