



Wybrane problemy modelowania głębokościowych profili pierwiastków, implantowanych do narzędzi wykorzystywanych w obróbce materiałów drzewnych

The selected problems of the modelling of the depth profiles of the elements implanted to the tools used in wood material machining

Marek Barlak^{a,*}, ORCID iD: 0000-0003-1416-7461
Jacek Wilkowski^b, ORCID iD: 0000-0001-5798-6761
Zbigniew Werner^a, ORCID iD: 0000-0003-1172-0268

^aNarodowe Centrum Badań Jądrowych Świerk w Otwocku, Departament Fizyki Materiałów, Zakład Technologii Plazmowych i Jonowych, ul. Andrzeja Sołtana 7, 05-400 Otwock, Polska

^bSzkoła Główna Gospodarstwa Wiejskiego w Warszawie, Wydział Technologii Drewna, Katedra Mechanicznej Obróbki Drewna, ul. Nowoursynowska 159, 02-787 Warszawa, Polska

*Osoba do korespondencji: marek.barlak@ncbj.gov.pl

Streszczenie

W artykule przedstawiono wybrane problemy modelowania głębokościowych profili azotu, implantowanego do narzędzi WC-Co do obróbki materiałów drzewnych. Przedstawiono wpływ rodzaju programu modelującego, jego ustawień, właściwości materiału podłoża i rodzaju wiązki jonów na uzyskiwane wyniki. Najmniejszy wpływ zaobserwowano dla różnej zawartości kobaltu i gęstości materiału podłoża, a największy - dla różnego rodzaju implantowanych jonów.

Abstract

The paper presents the selected problems with the modeling of the depth profiles of nitrogen implanted to WC-Co tools, used to wood-based material machining. The influence of the kind of the modeling program and its setup, the properties of the substrate material and the kind of the ion beam on the obtained results were presented. The weakest influence was observed for different content of cobalt and the substrate material density, and the largest - for different kinds of the implanted ions.

Słowa kluczowe: węgiel spiekany WC-Co, implantacja jonów azotu, modelowanie, SUSPRE, SRIM

Keywords: WC-Co cemented carbide, nitrogen ion implantation, modelling, SUSPRE code, SRIM code

Wprowadzenie

Implantacja jonów jest metodą modyfikacji powierzchni materiałów (próbek badawczych, narzędzi, gotowych elementów maszyn itp.), poprzez wprowadzenie do jej warstwy wierzchniej atomów obcych, dzięki energii kinetycznej, którą nabywają po ich uprzednim zjonizowaniu i przyspieszeniu w polu elektrycznym. Energia implantowanych jonów zawiera się zwykle w przedziale od kilku kiloelektronowoltów do kilku megaelektronowoltów. W praktyce przemysłowej, zakres ten jest zawężony i wynosi od kilkudziesięciu do kilkuset kiloelektronowoltów, co przekłada się na prędkość implantowanych jonów od setek do tysięcy kilometrów na sekundę. Rozpędzone i uformowane w wiązkę jony obce są wbijane (implantowane) w warstwę wierzchnią modyfikowanego materiału na głębokość od ułamka do pojedynczych mikrometrów, zależnie od ich masy, energii i kąta padania oraz od rodzaju modyfikowanego podłoża. W wyniku wielu skomplikowanych zjawisk zachodzących podczas implantacji, zmianie ulegają fizyko-chemiczne właściwości powierzchni modyfikowanego materiału, w tym właściwości tribologiczne, szczególnie istotne w przypadku narzędzi oraz części maszyn.

Implantacja jonów nie powoduje zmiany kształtu i wymiarów modyfikowanych materiałów. Dodatkowo, modyfikowany obszar nie jest powłoką, a więc nie występuje problem adhezji warstwy do podłoża (Barlak i in. 2016, Barlak i in. 2017, Pysznik 2015).

Wyniki wcześniejszych prac autorów niniejszej publikacji wskazują, że w wyniku implantacji jonów, wzrost trwałości narzędzi stosowanych do obróbki materiałów drzewnych może wynosić ponad 100% (Wilkowski i in. 2018, Wilkowski i in. 2019, Barlak 2019). Wzrost trwałości zależy od wielu czynników, w tym parametrów procesu implantacji. W publikacji (Wilkowski i in. 2018) pokazano np. wyraźny wpływ energii implantowanych jonów na trwałość modyfikowanych narzędzi.

Procesy implantacji jonów są zwykle poprzedzone modelowaniem głębokościowych profili pierwiastków wprowadzanych do modyfikowanego podłoża. Modelowanie pozwala na poznanie charakteru modyfikacji, zawężenie obszaru prac badawczych i ich ukierunkowanie, poprzez zaproponowanie parametrów procesu, a przez to - na skrócenie czasu badań i obniżenie nakładów finansowych.

Jednakże, nieprawidłowe założenia wstępne, źle dobrane parametry modelowania, błędne wartości właściwości materiałów czy nieuwzględnienie zjawisk towarzyszących procesowi głównemu, mogą spowodować, że uzyskane wyniki modelowania będą dalekie od rzeczywistości. W związku z tym, użytkownik programów do modelowania, powinien na

każdym etapie prowadzonych prac zdawać sobie sprawę z ograniczeń i potencjalnych błędów, które mogą wpływać na końcowy wynik modelowania.

Cel i zakres pracy

W niniejszym artykule zostały przedstawione wybrane problemy modelowania głębokościowych profili pierwiastków, na przykładzie implantacji jonów azotu do narzędzi WC-Co, stosowanych np. w obróbce materiałów drzewnych. Do problemów tych mogą być zaliczone np.: wybór odpowiedniego oprogramowania komputerowego i dobór jego ustawień, dobór właściwości modyfikowanego podłoża oraz modyfikujących jonów.

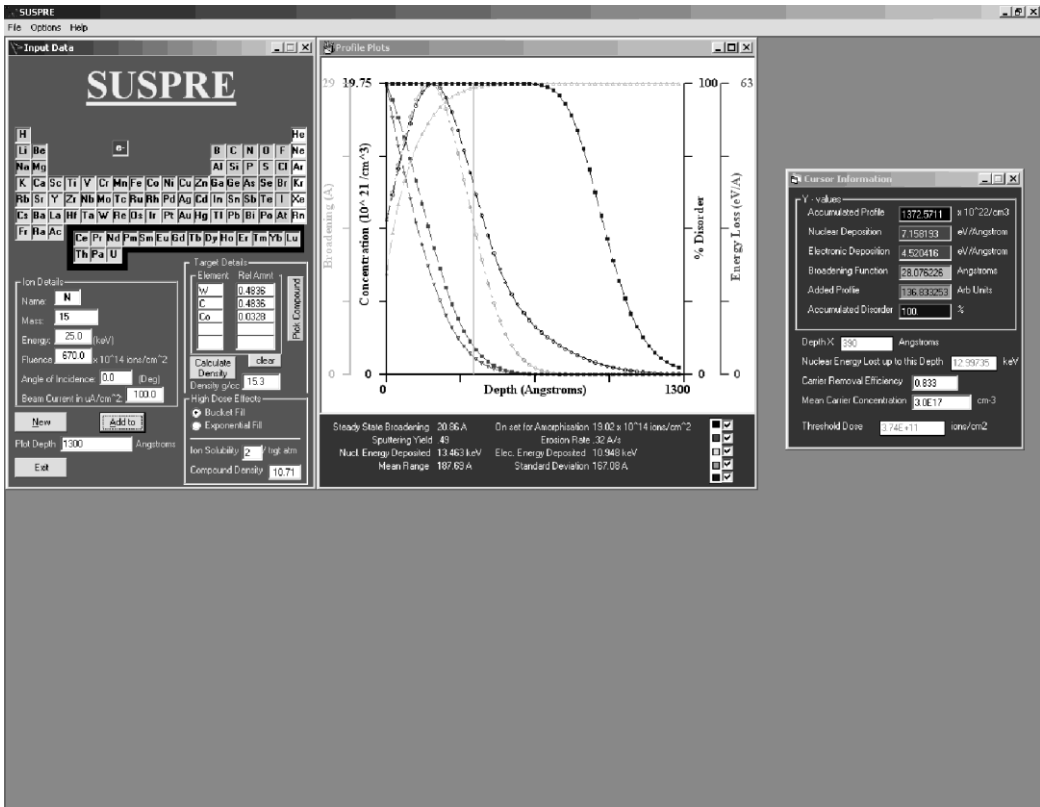
Materiały i metodyka badań

Wybór programu modelującego

Do modelowania procesów implantacji stosowanych jest obecnie kilka programów komputerowych. Do najpopularniejszych należą SUSPRE (SUSPRE 2019) i SRIM (SRIM 2019). Obydwa są programami na licencji *freeware*, a dostęp do nich jest możliwy poprzez strony internetowe ich twórców.

Program SUSPRE jest szybkim kalkulatorem implantacji jonów, przeznaczonym do obliczania głębokościowych profili dowolnego pierwiastka wprowadzanego do dowolnego podłoża. Wykorzystuje on numeryczne rozwiązanie równania transportu Boltzmann'a i jest oparty na algorytmie PRAL - Projected Range ALgorithm (Biersack 1981). Wartość energii deponowanej przez jony jest kalkulowana w oparciu o modele zaproponowane w publikacjach (Gibbons 1972, Fritzsche 1977, Webb i in. 1986). Współczynniki rozpylania są obliczane na podstawie energii zdeponowanej w obszarze powierzchni materiału przy wykorzystaniu wzoru Sigmund'a (Sigmund 1969).

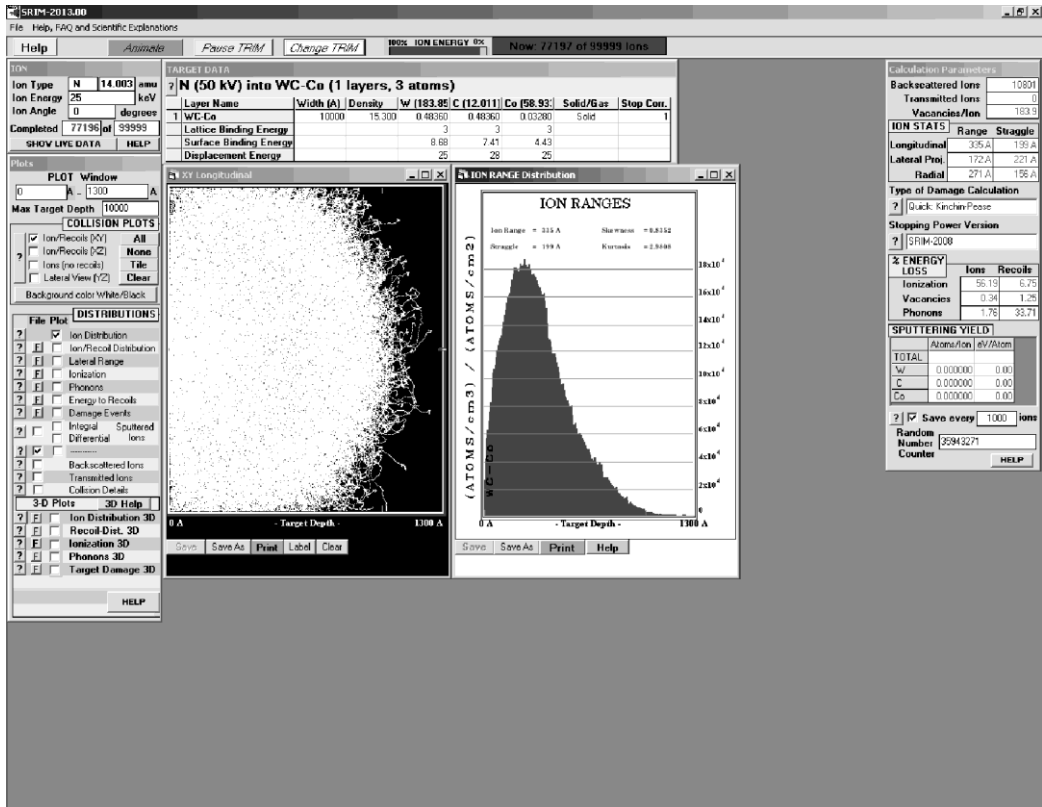
Przykładowe okno (interfejs graficzny użytkownika) programu SUSPRE zostało przedstawione na Rys. 1.



Rys. 1. Okno programu do modelowania SUSPRE
Fig. 1. The graphical user interface of SUSPRE code

SRIM (Stopping and Range of Ions in Matter) jest pakietem oprogramowania opartym o symulacyjną metodę Monte Carlo. Metoda ta jest stosowana do matematycznego modelowania procesów na tle złożonych, aby można było przewidzieć ich wyniki za pomocą podejścia analitycznego. Istotą tej metody jest losowanie (przypadkowy wybór) wielkości, które charakteryzują modelowany proces, przy czym losowanie dokonywane jest zgodnie z rozkładem, który musi być znany (MCM 2019).

Przykładowe okno programu SRIM zostało przedstawione na Rys. 2.



Rys. 2. Okno programu do modelowania SRIM
Fig. 2. The graphical user interface of SRIM code

Program SUSPRE służy do szybkich obliczeń, podczas gdy program SRIM jest przydatniejszy do bardziej zaawansowanych kalkulacji. Obliczenia głębokościowego profilu pierwiastka przy użyciu pierwszego z programów na komputerze PC średniej klasy trwają kilkadziesiąt sekund, podczas gdy te same obliczenia, w przypadku drugiego - kilkadziesiąt minut.

Oprócz modelowania typowych profili, obydwa programy umożliwiają również modelowanie wyników procesów koimplantacji, czy implantacji z użyciem implantatorów bez separacji masowej implantowanych jonów.

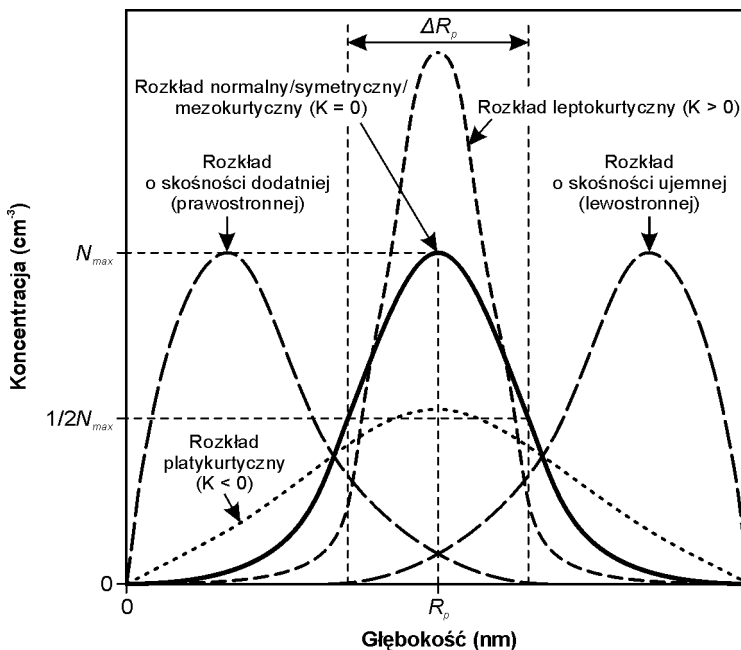
Wyniki modelowania przy użyciu obydwu programów są podawane w postaci wykresu (w modelowaniu SUSPRE wykres jest krzywą gładką) oraz zestawu wartości kilku bądź kilkunastu parametrów.

W przypadku klasycznej implantacji jonów, w celu poprawy właściwości tribologicznych modyfikowanego materiału, najistotniejsze są wartości: maksymalnej koncentracji objętościowej implantowanego pierwiastka (ang. *peak volume dopant concentration*) N_{max} , zasięgu rzutowanego (ang. *projected range*) R_p oraz rozrzutu zasięgu (ang. *range*

straggling) ΔR_p . Mniej istotnymi parametrami są: kurtoza, będąca miarą koncentracji i spłaszczenia rozkładu oraz skośność, będąca miarą asymetrii rozkładu (Skewness vs. Kurtosis 2019) - Rys. 3.

SUSPRE umożliwia szybkie wyznaczenie wielkości trzech pierwszych parametrów, natomiast SRIM podaje *explicite* wartości zasięgu, rozrzutu, kurtozy i skośności. W tym przypadku wartość koncentracji objętościowej implantu jest wyznaczana pośrednio, poprzez pomnożenie wartości rzędnych zamodelowanego profilu (SRIM generuje tylko kształt profilu w funkcji głębokości modyfikowanej warstwy) i wartości zadanej dawki implantowanych jonów.

Choć obydwa opisywane programy generują widok głębokościowych profili do bezpośredniego wykorzystania, to choćby ze względu na jakość reprodukcji (są to raczej rysunki poglądowe), lepszym rozwiązaniem jest przeniesienie wygenerowanych danych do wybranego arkusza kalkulacyjnego i wykreślenie wykresów wg uznania użytkownika. Należy przy tym pamiętać, że w obydwu przypadkach dane na osi głębokości podane są w angstromach, które nie są jednostkami układu SI.



Rys. 3. Graficzna definicja podstawowych parametrów piku, kurtozy i skośności
Fig. 3. The graphical definitions of the main peak parameters, the kurtosis and the skewness

Dobór ustawień programu

Przykładem problemów związanych z zagadnieniem właściwego doboru ustawień programu modelującego może być ustalenie zakresu skali głębokości. Każdy z programów

modelujących dzieli oś odciętych na kilkadziesiąt odcinków. W przypadku SUSPRE jest to 49 odcinków (50 punktów), w przypadku programu SRIM - 99 odcinków (100 punktów). W przypadku źle dobranej skali, wykres profilu głębokościowego „nie zmieści się” w przyjętej skali lub będzie zajmował zbyt małą jej część. W pierwszym przypadku, użytkownik otrzyma tylko fragment profilu, w drugim - profil będzie mniej dokładny.

Definiowanie modyfikowanego podłoża

Definiowanie materiału podłoża wymaga w najprostszym przypadku wprowadzenia do programu jego składu chemicznego, udziałów poszczególnych pierwiastków oraz gęstości. W przypadku obydwu omawianych programów, udziały składowych pierwiastków muszą być podane w procentach atomowych, określających stosunek liczby atomów danego pierwiastka do całkowitej liczby atomów w układzie. Problemem może być tu to, że producenci materiałów, zazwyczaj podają ich skład w procentach wagowych i nie określają stopnia porowatości. W Tabeli 1 przedstawiono kilka przykładowych przeliczeń udziałów wagowych na udziały atomowe pierwiastków wchodzących w skład komercyjnie dostępnych wymiennych ostrzy WC-Co, przy założeniu braku porowatości.

Tabela 1. Gęstość i procentowy udział pierwiastków w materiale wybranych narzędzi WC-Co (Ceratzit, Austria)

Table 1. The density and the percentage content of the elements in the material of the selected WC-Co tools (by Ceratzit, Austria)

Oznaczenie ostrzy	Gęstość (g/cm ³)	Udział wagowy (%)			Udział atomowy (%)		
		Co	W	C	Co	W	C
UMG04	15,30	2,0	91,99	6,01	3,28	48,36	48,36
SMG05	15,25	2,4	91,62	5,98	3,92	48,04	48,04
KCR08	15,20	3,2	90,87	5,93	5,20	47,40	47,40
MG06	15,20	3,3	90,77	5,93	5,36	47,32	47,32
HC05	15,15	4,0	90,11	5,89	6,48	46,76	46,76
Wartości podane przez producenta		Wartości obliczone					

Choć programy modelujące umożliwiają zazwyczaj wprowadzenie również związków pierwiastków, np. WC, należy pamiętać, że modelowanie odbywa się dla mieszaniny pierwiastków np. W+C.

Niektóre z programów do modelowania, jak np. SRIM, umożliwiają zamodelowanie budowy implantowanego materiału w postaci nałożonych na siebie warstw.

W szczególnych przypadkach dopuszcza się modelowanie profili dla uproszczonego składu podłoża, np. dla WC, zamiast dla WC-Co. Uproszczenie można wprowadzić np. w przypadku wstępnych lub szacunkowych obliczeń, gdy nie jest znany dokładny skład materiału podłoża, bądź udział pominiętych pierwiastków jest niewielki.

Definiowanie implantowanych jonów

Definiowanie rodzajów implantowanych jonów jest jednym z najważniejszych etapów modelowania. Punktem wyjścia jest odpowiedź na pytanie jakiego rodzaju implantator będzie użyty w procesie modyfikacji. W przypadku implantatorów z separacją masową, generowana wiązka jonów będzie homogeniczna zarówno pod względem rodzaju atomów, jak również pod względem stopnia ich jonizacji. Definiowanie tego procesu jest stosunkowo proste, wystarczy zdefiniować rodzaj i energię implantowanych jonów. Większe trudności pojawiają się w przypadku definiowania jonów w wiązce nieseparowanej masowo. W Tabeli 2 przedstawione zostały przykłady składu wiązek jonowych dla różnych pierwiastków. Odzworowanie składu rzeczywistej wiązki w procesie modelowania wymaga sumowania kilku implantacji jonów o ich różnym udziale i różnej energii. Kolejność zadawania różnych jonów jest dowolna, jednakże należy pamiętać, że jony o najwyższej energii wyznaczają zakres skali głębokości, definiowanej na etapie doboru ustawień programu.

Tabela 2. Procentowy rozkład jonów w wiązce wybranych pierwiastków i ich średnia krotność jonizacji (Krivonosienko 2001)

Table 2. The percentage charge state distribution and average charge state of the selected elements (Krivonosienko 2001)

Implantowane jony	Procentowy rozkład jonów (%)					Średnia krotność jonizacji
	1+	2+	3+	4+	5+	
Sb ⁺	-	100	-	-	-	1,0
N ₂ ⁺ + N ⁺	67	33	-	-	-	0,67
Nb ²⁺ + Nb ³⁺	-	-	83	17	-	2,2
Ni ⁺ + Ni ²⁺ + Ni ³⁺	-	43	50	7	-	1,6
Ti ⁺ + Ti ²⁺ + Ti ³⁺ + Ti ⁴⁺	-	11	76	12	1	2,0
Mo ⁺ + Mo ²⁺ + Mo ³⁺ + Mo ⁴⁺ + Mo ⁵⁺	-	7	30	40	20	3

Aby uniknąć pracochłonnego definiowania implantacji jonów o różnym stopniu jonizacji, często stosuje się ekwiwalent wiązki, wyznaczony przy użyciu średniej krotności jonizacji (ang. *average charge state*, ACS). W przypadku jonów metali, średnia krotność jonizacji wyznaczana jest przez sumowanie iloczynów udziału procentowego i stanu ładunkowego poszczególnych jonów. Przykładowo dla molibdenu jest to:

$$0,07 \cdot 1 + 0,3 \cdot 2 + 0,4 \cdot 3 + 0,2 \cdot 4 + 0,03 \cdot 5 = 2,82 \approx 2,8 \quad (1)$$

Nieco inaczej jest w przypadku jonów azotu. Wiązka jonów azotu składa się z dwóch rodzajów jonów jednokrotnie naładowanych, tj. N₂⁺ i N⁺, w proporcji ~1:1. W związku z tym, na trzy jony azotu, przypadają dwa ładunki elementarne, a zatem średnia krotność jonizacji wynosi 0,67.

Definiowanie parametrów implantacji

Dwoma głównymi parametrami implantacji są: zadana dawka jonów i ich energia. W przypadku SUSPRE, obydwa te parametry muszą być zdefiniowane na etapie wprowadzania danych. Jak już wspomniano wcześniej, program SRIM generuje tylko kształt profilu w funkcji głębokości modyfikowanej warstwy, a więc na początkowym etapie prac, konieczne jest tylko zdefiniowanie energii jonów.

Dla typowych implantacji, pozostałe parametry, jak prąd wiązki czy model dla dużych dawek, można przyjąć wartości domyślne, proponowane przez program.

Ograniczenia

Programy modelujące zazwyczaj nie uwzględniają różnych typowych zjawisk fizyko-chemicznych jak np. dyfuzja, rozpylenie, zachodzenie reakcji chemicznych, czy segregacja lub aglomeracja atomów (Kelly i Miotello 1996). Ponadto, implantacja jonów należy do metod nierównowagowych, a zatem, w implantowanych materiałach istnieje możliwość wystąpienia różnorodnych dodatkowych mechanizmów, jak np. mechanizmy radiacyjnie wzmożonej dyfuzji (ang. *radiation-enhanced diffusion*) lub mechanizmy ostrzy termicznych (ang. *thermal spike*) (McHargue i in. 1994).

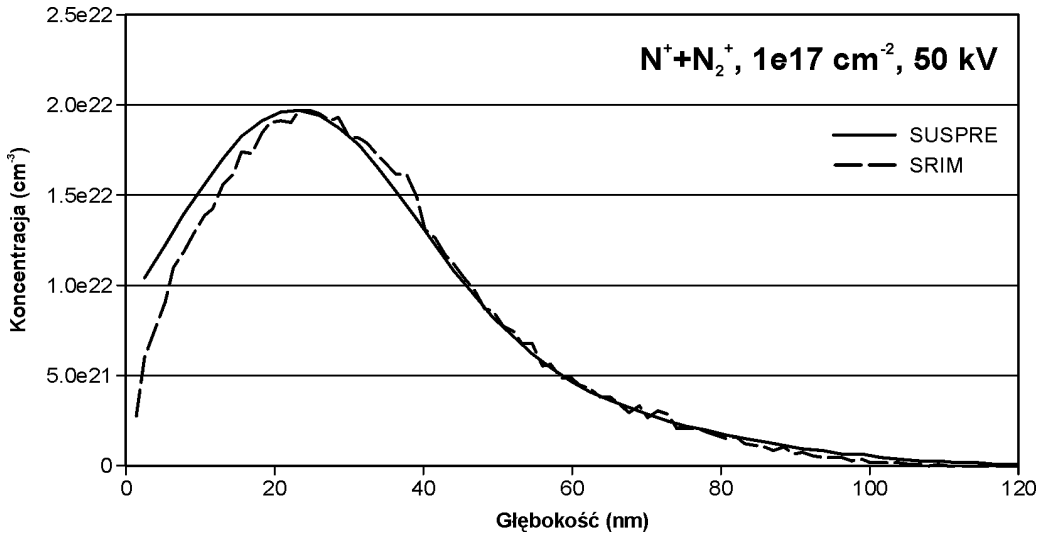
Choć, jak już wspomniano, programy zazwyczaj nie uwzględniają zjawiska rozpylenia, to często pozwalają wyznaczyć wartość współczynnika rozpylenia. Użytkownik może więc w takim przypadku, samodzielnie oszacować wartość dawki zatrzymanej jonów, posługując się prostą zależnością na maksymalną zatrzymaną frakcją atomową C_{max} :

$$C_{max} = 1/(1 + Y_s) \quad (2)$$

gdzie: Y_s - wydajność rozpylenia (ang. *sputtering yield*), czyli ilość atomów rozpylonych na jeden implantowany jon (Ryssel 1982).

Wyniki badań i analiza

Na Rys. 4 i w Tabeli 3 przedstawione zostały wyniki procesu modelowania z użyciem programów SUSPRE i SRIM, profilu głębokościowego azotu w podłożu W-C-Co o gęstości 15,3 g/cm³ i składzie atomowym: 48,36% wolframu, 48,36% węgla i 3,28% kobaltu (odpowiednik ostrzy UMG04), implantowanego wiązką N⁺ + N₂⁺. Dawka zadana wynosiła 1e17 jonów azotu na cm², a napięcie przyspieszające - 50 kV. Obydwa przypadki nie uwzględniają zjawiska rozpylenia jonowego.



Rys. 4. Głębokościowe profile azotu implantowanego bez separacji mas w podłożu W-C-Co modelowane z użyciem programów SUSPRE i SRIM

Fig. 4. The depth profiles of no mass-separated nitrogen implanted into W-C-Co substrate modelled with the use SUSPRE and SRIM codes

Łatwo zauważyć różnice pomiędzy modelowanymi profilami. Profil obliczony przez SUSPRE jest krzywą gładką, w przeciwieństwie do profilu generowanego w programie SRIM. Wartości maksymalnej koncentracji objętościowej domieszki są takie same dla obydwu programów. Występują natomiast różnice w wartościach zasięgu rzutowanego i rozrzutu zasięgu.

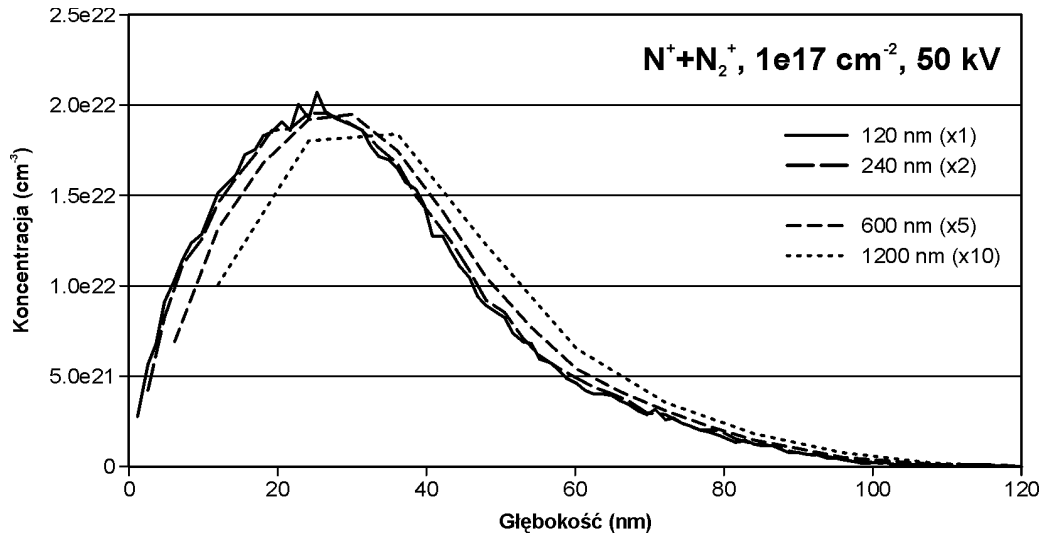
Tabela 3. Szczegółowe wyniki modelowania parametrów głębokościowych profili w podłożu W-C-Co z użyciem programów SUSPRE i SRIM

Table 3. The detailed results of the modeling of depth profile parameters in W-C-Co substrate by SUSPRE and SRIM codes

Parametr / Zmienna	Maksymalna koncentracja objętościowa domieszki N_{max} (cm ⁻³)	Zasięg rzutowany R_p (nm)	Rozrzut zasięgu ΔR_p (nm)	Kurtoza	Skośność
SUSPRE	1,97e22	24,7	44,2	brak danych	brak danych
SRIM	1,97e22	31,6	37,8	3,3721	0,9227

Rys. 5 i Tabela 4 przedstawiają wyniki modelowania z użyciem programu SRIM, profili głębokościowych azotu w podłożu W-C-Co o gęstości 15,2 g/cm³ i składzie atomowym: 47,4% wolframu, 47,4% węgla i 5,2% kobaltu (odpowiednik ostrzy KCR08), implantowanego wiązką $N^+ + N_2^+$. Dawka zadana wynosiła 1e17 jonów azotu na cm², a napięcie przyspieszające - 50 kV. Obliczenia nie uwzględniają zjawiska rozpylania jonowego. Wyniki

przedstawiono dla 4 różnie dobranych skali głębokości - wyjściowej oraz rozciągniętych: dwukrotnie, pięciokrotnie i dziesięciokrotnie.



Rys. 5. Głębokościowe profile azotu w podłożu W-C-Co zamodelowane dla różnego zakresu skali głębokości

Fig. 5. The depth profiles of nitrogen in W-C-Co substrate modelled for the different range of the depth scale

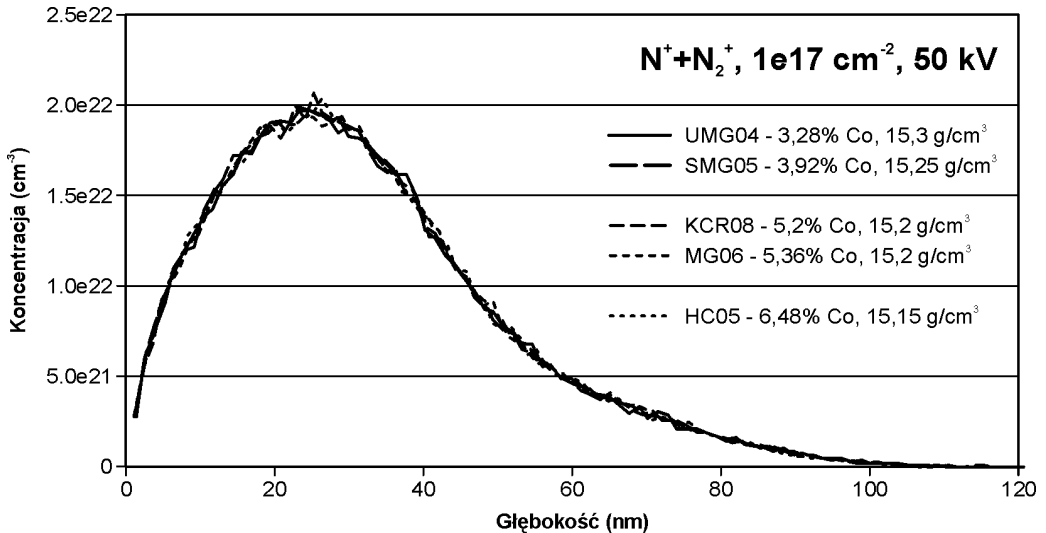
Im większa skala, tym mniejsza wartość maksymalnej koncentracji objętościowej domieszki oraz mniej dokładne odwzorowanie głębokościowego profilu. Wyznaczone przez program wartości zasięgu rzutowanego i rozrzutu zasięgu są tożsame. Pewne różnice widoczne są w przypadku wartości kurtozy i skośności, ale nie obserwuje się tu jakiegokolwiek wyraźnej zależności tych parametrów od zmiany długości skali głębokości.

Tabela 4. Szczegółowe wyniki modelowania parametrów głębokościowych profili w podłożu W-C-Co dla różnego zakresu skali głębokości

Table 4. The detailed results of the modeling of depth profile parameters in W-C-Co substrate for the different range of the depth scale

Parametr / Zmienna	Maksymalna koncentracja objętościowa domieszki N_{max} (cm ⁻³)	Zasięg rzutowany R_p (nm)	Rozrzut zasięgu ΔR_p (nm)	Kurtoza	Skośność
120 nm (x1)	2,07e22	31,6	37,8	3,6229	0,8573
240 nm (x2)	1,96e22	31,6	37,8	3,3721	0,9227
600 nm (x5)	1,95e22	31,7	37,8	3,5960	0,8436
1200 nm (x10)	1,84e22	31,6	37,8	3,6005	0,8499

Na Rys. 6 i w Tabeli 5 przedstawione zostały wyniki procesu modelowania z użyciem programu SRIM, profilu głębokościowego azotu w podłożu W-C-Co o różnym udziale kobaltu i różnej gęstości, wg danych z Tabeli 1 (odpowiedniki ostrzy UMG04, SMG05, KCR08, MG06 i HC05), implantowanego wiązką $N^+ + N_2^+$. Dawka zadana wynosiła $1e17$ jonów azotu na cm^2 , a napięcie przyspieszające - 50 kV. Obliczenia nie uwzględniają zjawiska rozpylania jonowego.



Rys. 6. Głębokościowe profile azotu w podłożu W-C-Co zamodelowane dla różnych wartości zawartości kobaltu i gęstości materiału podłoża

Fig. 6. The depth profiles of nitrogen in W-C-Co substrate modelled for the different content of cobalt and the density of substrate material

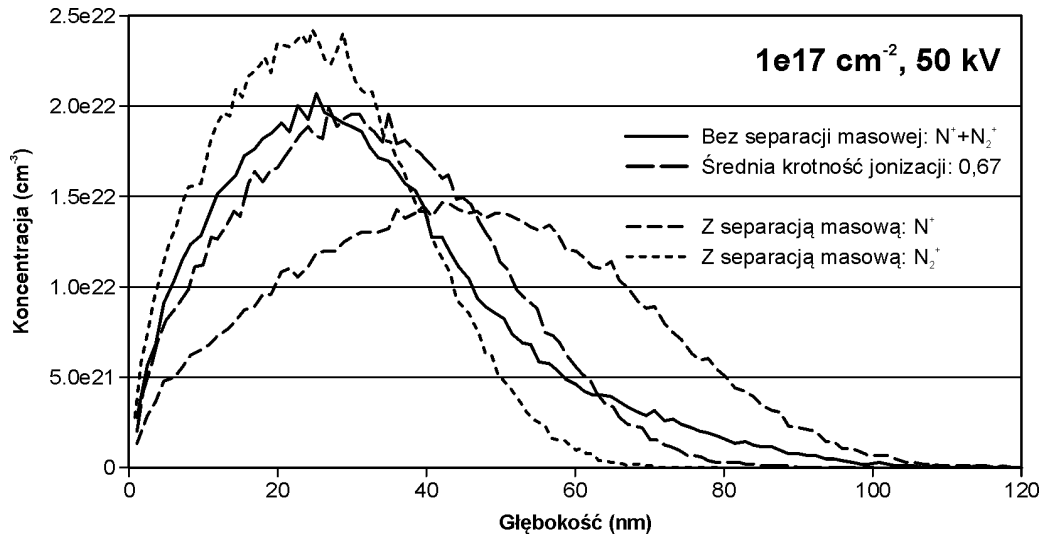
Łatwo zauważyć, że dla zaproponowanych składów materiałów i ich gęstości praktycznie nie ma różnic w przebiegu profili oraz ich podstawowych parametrów, jedynie pewne różnice widoczne są w przypadku wartości kurtozy i skośności, ale i w tym przypadku nie obserwuje się wyraźnej zależności tych parametrów w funkcji zmian gęstości materiału podłoża czy zawartości kobaltu.

Tabela 5. Szczegółowe wyniki modelowania parametrów głębokościowych profili w podłożu W-C-Co dla różnych wartości zawartości kobaltu i gęstości materiału podłoża

Table 5. The detailed results of the modeling of depth profile parameters in W-C-Co substrate for the different content of cobalt and the density of the substrate material

Parametr / Zmienna	Maksymalna koncentracja objętościowa domieszki N_{max} (cm^{-3})	Zasięg rzutowany R_p (nm)	Rozrzut zasięgu ΔR_p (nm)	Kurtoza	Skośność
UMG04	1,97e22	31,6	37,8	3,3721	0,9227
SMG05	1,99e22	31,5	38,0	3,3559	0,9410
KCR08	2,07e22	31,6	37,8	3,6229	0,8573
MG06	1,96e22	31,6	38,0	3,5809	0,8497
HC05	2,04e22	31,5	37,6	3,5521	0,8329

Rys. 7 i Tabela 6 przedstawiają wyniki modelowania z użyciem programu SRIM, profili głębokościowych azotu w podłożu W-C-Co o gęstości $15,2 \text{ g/cm}^3$ i składzie atomowym: 47,4% wolframu, 47,4% węgla i 5,2% kobaltu (odpowiednik ostrzy KCR08), implantowanego wiązkami N^+ , N_2^+ i $\text{N}^+ + \text{N}_2^+$. Dodatkowo, przedstawiony został profil wyznaczony dla średniej krotności jonizacji. Dawka zadana wynosiła $1\text{e}17$ jonów azotu na cm^2 , a napięcie przyspieszające - 50 kV. Obliczenia nie uwzględniają zjawiska rozpylania jonowego.



Rys. 7. Głębokościowe profile azotu w podłożu W-C-Co zamodelowane dla różnego rodzaju wiązki implantowanych jonów

Fig. 7. The depth profiles of nitrogen in W-C-Co substrate modelled for the different kind of the beam of the implanted ions

Zamodelowane profile wyraźnie różnią się między sobą. Najbardziej zbliżone do siebie są profile dla wiązki $N^+ + N_2^+$ i jej ekwiwalentu ACS. Profil wyznaczony dla wiązki N_2^+ jest węższy i wyższy w porównaniu do profilu dla wiązki bez separacji jonów, a maksymalna wartość koncentracji znajduje się bliżej powierzchni modyfikowanego materiału (różnica jest rzędu 20%). Odwrotnie jest w przypadku profilu wyznaczonego dla wiązki N^+ . W tym przypadku, łatwo zauważyć mniejszą wysokość pikę (spadek o ok. 25%), wzrost jego szerokości o ponad 15% i przesunięcie maksimum koncentracji w głąb implantowanego materiału (rzędu 40%). Wartość kurtozy oraz skośności dla profilu $N^+ + N_2^+$ jest wyraźnie większa w porównaniu z wartościami tych wielkości dla pozostałych profili. Jest to związane z tym, że profil $N^+ + N_2^+$ jest sumą profili N^+ i N_2^+ , uzyskanych dla odpowiednio mniejszych dawek zadanych implantowanych jonów.

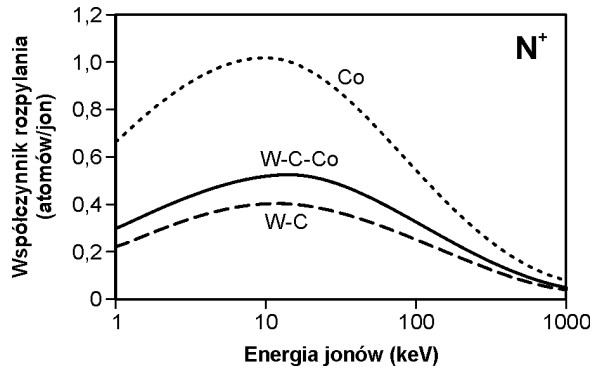
Tabela 6. Szczegółowe wyniki modelowania parametrów głębokościowych profili w podłożu W-C-Co dla różnego rodzaju wiązki implantowanych jonów

Table 6. The detailed results of the modeling of depth profile parameters in W-C-Co substrate for the different kind of the beam of the implanted ions

Parametr / Zmienna	Maksymalna koncentracja objętościowa domieszki N_{max} (cm^{-3})	Zasięg rzutowany R_p (nm)	Rozrzut zasięgu ΔR_p (nm)	Kurtoza	Skośność
$N^+ + N_2^+$	2,07e22	31,6	37,8	3,6237	0,8576
Średnia krotność jonizacji	1,99e22	31,8	32,4	2,4251	0,3096
N^+	1,46e22	44,4	43,8	2,4435	0,1964
N_2^+	2,43e22	25,0	26,0	2,5837	0,3286

Na Rys. 8 przedstawione zostały wyniki modelowania SUSPRE wartości współczynnika rozpylania w funkcji energii implantowanych jonów N^+ dla podłoża W-C-Co, W-C i Co. Łatwo zauważyć, że charakter zmian wykreślonych funkcji jest zbliżony dla wszystkich trzech przypadków, natomiast wartość współczynnika silnie zależy od rodzaju zdefiniowanego podłoża.

Choć, jak już wspomniano wcześniej, programy do modelowania profili zazwyczaj nie uwzględniają zjawiska rozpylania, należy mieć świadomość możliwości jego wystąpienia, zwłaszcza w przypadku większych wartości dawek zadanych implantowanych jonów, gdyż różnice mogą być rzędu kilkudziesięciu i więcej procent.



Rys. 8. Wartość współczynnika rozpylania dla podłoży W-C-Co w funkcji energii jonów N^+
Fig. 8. The value of the sputtering yield coefficient vs. N^+ ion energy

Wnioski

Na podstawie wyników modelowania głębokościowych profili azotu w materiale W-C-Co można wyciągnąć następujące wnioski:

1. Obydwa zastosowane do modelowania programy wygenerowały zbliżone do siebie profile, jednak użycie programu SRIM umożliwia dodatkowo automatyczne określenie głównych ich parametrów.
2. Niewłaściwy dobór skali może spowodować zmianę kształtu i szczegółowości profilu. Zmiana wartości maksymalnej koncentracji objętościowej domieszki może być rzędu kilkunastu procent przy dziesięciokrotnym wydłużeniu skali głębokości. Wartości zasięgu rzutowanego i rozrzutu zasięgu nie ulegają zmianie.
3. Zmiana udziału atomowego kobaltu w podłożu w zakresie od 3,28 do 6,48% i gęstości materiału podłoża w zakresie od 15,15 do 15,3 g/cm³ nie wywołują znaczących zmian w kształcie profilu i w wartościach jego podstawowych parametrów.
4. Niewłaściwy dobór rodzaju implantowanych jonów może spowodować istotne różnice w kształcie profilu oraz rozbieżności rzędu kilkudziesięciu procent w wartościach jego parametrów. Profil zastępczy wyznaczony dla średniej krotności jonizacji może być dobrym ekwiwalentem dla implantacji bez separacji masowej.
5. Nieuwzględnienie zjawiska/współczynnika rozpylania może prowadzić do dużych rozbieżności pomiędzy dawką zadaną implantowanych jonów a dawką zatrzymaną.

Pomimo pewnych ograniczeń i uproszczeń, modelowanie głębokościowych profili implantowanych pierwiastków może pomóc w doborze parametrów procesu implantacji, o ile użytkownik będzie świadomy ich wpływu na ostateczny wynik.

Literatura

Barlak M., Wilkowski J., Werner Z., 2016: Ion implantation changes of tribological and corrosion resistance properties of materials used in wood industry. *Annals of Warsaw University of Life Science - SGGW, Forestry and Wood Technology* 94, 19-27.

Barlak M., Wilkowski J., Boruszewski P., Werner Z., Pałubicki B., 2017: Changes of functional properties of materials used in wood industry after ion implantation process. *Annals of Warsaw University of Life Science - SGGW, Forestry and Wood Technology* 97, 133-139.

Barlak M., Wilkowski J., Szymanowski K., Czarniak P., Podziewski P., Werner Z., Zagórski J., Saszkiewicz B., 2019: Influence of the ion implantation of nitrogen and selected metals on the lifetime of WC-Co indexable knives during MDF machining. *Annals of Warsaw University of Life Science - SGGW, Forestry and Wood Technology*, w druku.

Biersack J.P., 1981: Calculation of projected ranges - analytical solutions and a simple general algorithm. *Nuclear Instruments and Methods* 182-183, 199-206. [https://doi.org/10.1016/0029-554X\(81\)90688-1](https://doi.org/10.1016/0029-554X(81)90688-1)

Fritzsche C.R., 1977: A simple method for the calculation of energy deposition profiles from range data of implanted ions. *Applied Physics* 12, 347-353. <https://doi.org/10.1007/BF00886037>

Gibbons J.F., 1972: Ion implantation in semiconductors - Part II: Damage production and annealing. *Proceedings of the IEEE* 60(9), 1062-1096. 10.1109/PROC.1972.8854

Krivosienko A.W., Nikolaev A.G., Li S., 2001: Техническое описание и инструкция по эксплуатации ионного источника "Титан-3". Российская Академия Наук - Институт Сильноточной Электроники, Tomsk, po rosyjsku.

Kelly R., Miotello A., 1996: Metal-ceramic ion-beam mixing: a quest for general principles. *Surface and Coatings Technology* 83, 134-145. [https://doi.org/10.1016/0257-8972\(95\)02782-3](https://doi.org/10.1016/0257-8972(95)02782-3)

McHargue C.J., Jospin D.L., White C.W., 1994: Ion beam mixing in insulator substrates. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 91, 549-557. [https://doi.org/10.1016/0168-583X\(94\)96284-7](https://doi.org/10.1016/0168-583X(94)96284-7)

Pyszniak K., 2015: Wykorzystanie zjawisk towarzyszących bombardowaniu jonowemu w diagnostyce procesu implantacji. Rozprawa doktorska. Narodowe Centrum Badań Jądrowych Świerk.

Ryssel H., 1982: Range distributions, w: *Ion Implantation Techniques*, ed. H. Glawischnig, Springer, Berlin, 177-193.

Sigmund P., 1969: Theory of sputtering. I. Sputtering yield of amorphous and polycrystalline targets. *Physical Review* 184(2) 383-416. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.184.383>

Webb R.P., Wilson I.H., w: Board K., Owen D.R.J. (Eds.), 1986: *Simulation of Semiconductor Devices and Processes*, Pineridge Press, Swansea.

Wilkowski J., Barlak M., Werner Z., Bottger R., Konarski P., Pisarek M., 2018: The effect of nitrogen ion implantation on the properties of WC-Co composites used in wood-based materials machining. Poster presentation at Yucomat 2018 Conference, Herceg Novi, Montenegro, 3-7 September, 2018

Wilkowski J., Barlak M., Werner Z., Zagórski J., Czarniak P., Podziewski P., Szymanowski K., 2019: Lifetime improvement and the cutting forces in nitrogen-implanted drills during wood-based material machining. Wood and Fiber Science 51(2), 209-220. <https://doi.org/10.22382/wfs-2019-021>

Źródła internetowe

Skewness vs. Kurtosis - <https://keydifferences.com/differences-between-skewness-and-kurtosis.html> (dokument elektroniczny, stan na dzień 24.10.2019)

MCM - <https://www.sciencedirect.com/topics/engineering/monte-carlo-method> (dokument elektroniczny, stan na dzień 24.10.2019)

SUSPRE - <https://www.surrey.ac.uk/ion-beam-centre/research-areas/interactions-energetic-particles> (dokument elektroniczny, stan na dzień 24.10.2019)

SRIM - <http://www.srim.org/> (dokument elektroniczny, stan na dzień 24.10.2019)

Artykuł recenzowany / Reviewed paper

Zgłoszony / Submitted: 05.11.2019

Opublikowany online / Published online: 16.12.2019