

Новые технологии, методы обработки и упрочнения деталей

МОДЕЛИРОВАНИЕ
ВОЛЬТСТАТИЧЕСКОГО РЕЖИМА
ОКИСЛЕНИЯ

Авдеев Н.А., Кириенко Д.А., Гуртов В.А.
Петрозаводский государственный университет

В вольтстатическом (ВС) режиме окисления поддерживается постоянное значение напряжения на электрохимической ячейке. При этом наблюдается уменьшение ионных токов, формирующих окисный слой [1]. В чистом виде этот режим используется достаточно редко из-за невозможности контролировать процесс в момент резкого включения напряжения при отсутствии окисной пленки. Обычно применяют смешанный режим окисления, когда пленку выращивают до некоторой толщины в гальваностатическом или

потенциодинамическом режиме, а затем включают ВС режим. При этом согласно теоретическим расчетам закон изменения ионного тока имеет следующий вид [2]

$$\frac{1}{j} - \frac{1}{j_0} = B \cdot \gamma \cdot \frac{U}{L_0^2} \cdot t$$

где U – напряжение, L_0 – толщина, до которой был выращен окисный слой в ГС режиме, j_0 – плотность тока в гальваностатическом режиме.

С помощью системы уравнений (1-5) [3] можно рассчитать динамику изменения концентрации подвижных носителей заряда по толщине анодной окисной пленки в процессе ВС режима. Граничные условия приобретают следующий вид $c(L, 0) U(t) = \text{const}$.

$$j = D \cdot \frac{\partial c(0, t)}{\partial x} + \mu(E - E_u) \cdot c(0, t) = \text{const} \quad (1)$$

$$\frac{\partial c(x, t)}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2} + \mu(E - E_i) \frac{\partial c(x, t)}{\partial x} - \gamma \cdot c(x, t) \cdot c_0 \quad (2)$$

$$D \cdot \frac{\partial c(L, t)}{\partial x} + \mu(E - E_u) \cdot c(L, t) = k \cdot c(L, t) \quad (3)$$

$$\frac{dL}{dt} = \frac{1}{S} \frac{M_{ox}}{n \rho_{ox} N_A} \cdot k_0 A \ln j \cdot c(L, t) \quad (4)$$

$$\frac{\partial E_u}{\partial x} = - \frac{q \cdot (c(x, t) - c_0)}{\epsilon_s \epsilon_0} \quad (5)$$

где $c(x, t)$ – концентрация подвижных ионов, $c_0(x)$ – концентрация неподвижных дефектов решетки, D , μ , – соответственно коэффициент диффузии, подвижность ионов, а E – напряженность электрического поля, k_0 – константа скорости роста окисла, M_{ox} – молярная масса образующегося оксида, ρ_{ox} – плотность оксида, N_A – число Авогадро, n_{ox} – валентность реакции образования окисла, $c(x, t)$ – концентрация подвижных ионов в окисле, E_u – поле заряда подвижных частиц, γ – сечение рекомбинации.

В уравнениях учитывается логарифмическая зависимость скорости реакции на границе металл-окисел от плотности тока и взаимодействие подвижных частиц с дефектами решетки. Результаты решения приведены на рис. 1. Как видно из приведенных зависимостей в окисле после ВС режима остается часть подвижных частиц, не вступивших во взаимодействие с решеткой окисла и не успевших дойти до границы, где образуются новые слои окисла за время 300 с (кривая 4).

Данная модель позволяет находить распределение остаточной концентрации катионов металла по толщине окисной пленки. Эти части-

цы образуют заряд, который является причиной отсутствия модуляции емкости МДП структур сразу после анодного окисления. При меньших токах формирования окисла в ГС система быстрее приходит в равновесное состояние после выдержки при постоянном напряжении.

В вольтстатическом режиме уменьшение тока и соответственно скорости химической реакции приводит к меньшему числу дефектов на межфазной границе Si-Ta₂O₅, таким образом, снижается начальная плотность поверхностных состояний, которая проявляется в измерениях C-V характеристик после отжига МДП структур (200^oC, 10 мин).

Представленные расчеты позволяют получить качественную картину, объясняющую снижение встроенного заряда и плотности поверхностных состояний в системе полупроводник анодный окисел металла.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Л. Юнг. "Анодные окисные пленки" //Л.:Энергия, 1967
2. Л. Л. Одынец, В.М. Орлов. "Анодные окисные пленки", Ленинград, "Наука", 1990.

З. Н.А. Авдеев, Г.С. Сиговцев. "О математических моделях процессов анодного окисления" // Труды Петрозаводского государственного

университета: сер. Прикладная математика и информатика. Вып.9./ Под.науч. ред. Проф. В. И. Чернецкого // ПетрГУ. Петрозаводск, 2000, с 57.

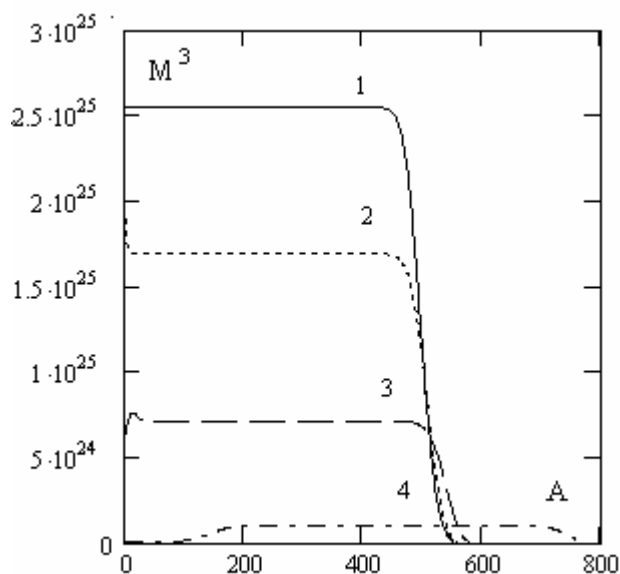


Рис. 1. Распределение концентрации носителей по толщине окисла после перехода системы в ВС режим за интервалы времени: 1 – 1 с; 2 – 2 с; 3 – 10 с; 4 – 300 с.

ИНЖЕНЕРНЫЙ АНАЛИЗ НЕСУЩЕЙ СПОСОБНОСТИ И РЕСУРСА ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ТРУБОПРОВОДА ПРИ НЕСТАЦИОНАРНОМ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОМ НАГРУЖЕНИИ

Дорофеева И.А.

Московский государственный университет инженерной экологии

В химическом машиностроении широко используются тонкостенные цилиндрические конструкции. Это корпуса аппаратов, роторы центрифуг, сепараторов и конечно технологические трубопроводы. До сих пор актуальным остается вопрос об оценке долговечности таких конструкций при меняющихся термомеханических нагрузках. Расчет несущей способности при малоцикловых усталостных нагружениях для тонкостенной цилиндрической оболочки может быть основан на математической модели циклического деформирования элементов конструкции [1].

В качестве объекта рассмотрения берется технологический трубопровод, работающий под действием внутреннего давления - q , осевого усилия - P и температуры - T . Все параметры нагружения меняются по заданной программе нагружения. Физико-механические характеристики конструкционного материала так же меняются во времени в зависимости от параметров нагружения.

Для компьютерной реализации расчета конструкции необходимо программу нагружения разбить на ряд малых этапов, расчет которых

выполняется последовательно. Ей в соответствие ставится параметр *plast* (признак пластичности), который принимает значение 0, если в рассматриваемой точке материал деформируется упруго, или 1, если имеет место пластическое течение.

Расчет рассматриваемой конструкции шаговым методом включает две основных процедуры.

Первая процедура связана с определением приращений напряжений на шаге нагружения. Полагая известными приращения ΔP , Δq и ΔT в начале очередного n -го этапа нагружения, вычисляются физико-механические характеристики конструкционного материала и приращения напряжений в этой точке процесса. Данная задача зависит от вида нагружения конструкции. Рассматриваемая программа нагружения приводит к двухосному напряженно-деформированному состоянию материала. Приращения напряжений рассчитываются по формулам:

$$\Delta \sigma_s = \frac{\Delta P}{F} \quad (1)$$

$$\Delta \sigma_t = \frac{\Delta q r}{h}$$

Затем необходимо определить величину активных напряжений и интенсивность активных напряжений:

$$\alpha_j = s_j - \chi_j \quad (j = s, t, z), \quad (2)$$