

Павлюк Я.О., Павлюк Д.В.  
(НТУУ «КПІ», м. Київ)

**МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ЛОКАЛЬНОГО РОЗПЛАВЛЕННЯ МЕТАЛУ ДЛЯ ПЕРСПЕКТИВИ ОТРИМАННЯ АМОРФНОГО СТАНУ НА ПОВЕРХНІ**

E-mail: [janusichkaa@mail.ru](mailto:janusichkaa@mail.ru)

Використання металів в аморфному стані досить розповсюджене, оскільки таким матеріалам притаманний ряд унікальних властивостей, обумовлених їх структурою. Перспектива отримання локальних приповерхневих аморфних областей досліджувалась моделюванням процесу обробки тонкої металевої плівки поодиноким імпульсом лазеру в режимі модульованої добротності.

Як зазначено в [1], зменшення області опромінювання ( $r_0$ ) до величини  $r_0 < r_T$  (де  $r_T$  – деяке граничне значення, яке залежить від тривалості імпульсу) призводить до сильного бічного тепловідводу в плівку. Тому в моделі для зменшення діаметру лазерного пучка застосована умовна апертурна діафрагма. На бічних гранях розрахункової комірки зразка Au діяли періодичні умови Борна – Кармана, нижні шари плівки нерухомо закріплені. Такі параметри передбачали високошвидкісне охолодження плівки на підкладці в радіальному напрямі, достатнє для запобігання кристалізації розплавленої області по закінченні дії імпульсу.

Моделювання здійснювали в програмі XMD з використанням методу зануреного атома [2]. Щоб параметри моделювання відповідали натурному експерименту, обрана температура поверхні опромінюваної області  $T_{пов} = 0,9T_{пл}$  для Au. Розрахунок розподілів об'ємної густини, потужності та температури по глибині в області впливу електромагнітної хвилі проводився, виходячи з закону Бугера – Ламберта – Бера:

$$\psi(z) = \exp(-\mu z) = \exp(-z/z_{ef}) \quad (1)$$

де  $z$  – змінна координата по глибині речовини;

$\mu$  – показник поглинання речовини [ $\text{см}^{-1}$ ];

$z_{ef} = 1/\mu$ .

Для зручності моделювання провели апроксимацію температурного розподілу прямокутниками.

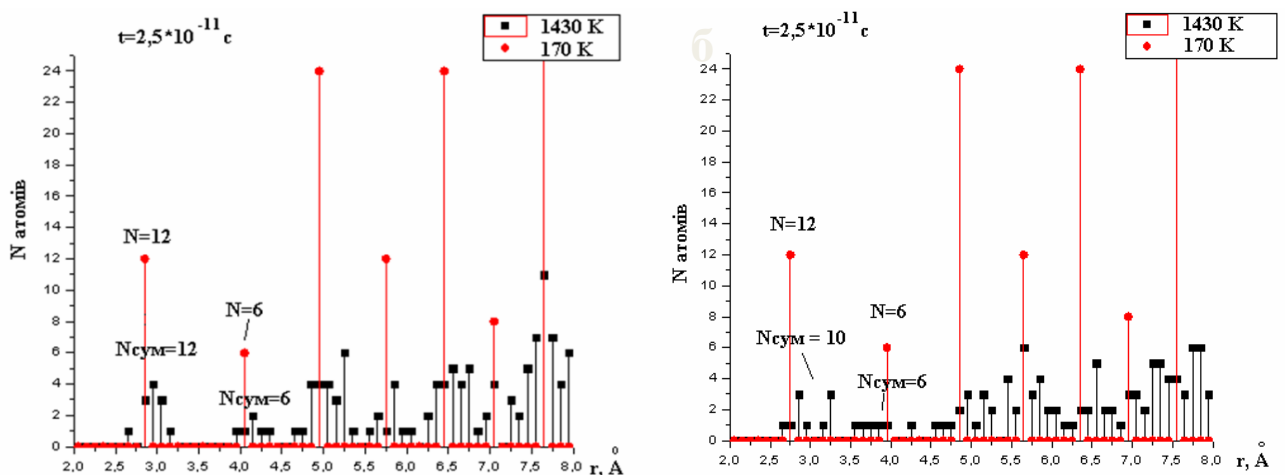


Рис 1. Функція радіального розподілу атомів для Au в приповерхневій зоні, зміщеної від центру області випромінювання на 10 Å (а); в приповерхневій зоні по центру області випромінювання (б)

З отриманих в результаті програмного розрахунку координат атомів побудовані функції радіального розподілу атомів (ФРПА) для різних областей зразка (рис. 1).

Як видно з рис. 1, а, розподіл кількості атомів по координаційним сферам в вихідному стані (170 К) відповідає кристалічній структурі ГЦК решітки. Після впливу опромінювання тривалістю  $\frac{1}{4}$  імпульсу спостерігається порушення періодичності. Виходячи з неповної кількості атомів у першій координаційній сфері деяких областей (рис. 1, б), можна допустити утворення таких дефектів, як вакансії.

Загалом, ФРРА демонструє відсутність далекого порядку при збереженні ближнього. Така структура подібна до структури розплаву, а отже і до аморфної структури. Тобто, забезпечивши необхідні для швидкого охолодження умови, є перспектива отримати матеріал з локальними аморфними ділянками на поверхні.

Література:

1. Вейко В.П. Лазерная обработка пленочных элементов / В.П. Вейко. – Л.: Гр. ЛИТМО, 1980. – С.14.
2. Johnson R.A. Analytic nearest-neighbor model for fcc metals / R.A. Johnson // Phys. Rev B, 1988. – V. 37 (8). – P. 3924...3931.