

УДК 531+539

ВЛИЯНИЕ НАПРЯЖЕНИЙ И ДЕФОРМАЦИЙ НА ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЕ ПРИМЕСИ В ПЛАСТИНЕ В УСЛОВИЯХ ОДНООСНОГО НАГРУЖЕНИЯ

М. А. Миколайчук, А. Г. Князева

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, 634021 Томск
E-mail: m.mikolaichuk@gmail.com

Предложена и исследована модель насыщения поверхностного слоя металлической тонкой пластины примесью из окружающей среды в условиях одноосного механического нагружения. Проанализировано влияние напряжений и деформаций на процесс диффузии. Показано, что, во-первых, вследствие деформации кристаллической решетки основы работа напряжений, возникающих в локальных объемах, приводит к изменению энергии активации диффузии; во-вторых, напряжения влияют на перенос примеси (этот эффект аналогичен массопереносу посредством бародиффузии в жидкостях). Численно исследовано совместное влияние двух видов воздействия напряжений и деформаций на поведение системы при различных геометрических и физических параметрах модели.

Ключевые слова: диффузия, одноосное нагружение, плоское напряженное состояние, активационный объем.

Введение. Как известно напряжения и деформации, возникающие в зоне, в которой происходит процесс диффузии (диффузионной зоне), оказывают влияние на диффузионные процессы. Исследованию данного явления посвящено большое количество работ (см., например, [1–3]).

Возникновение концентрационных напряжений в случае бинарной системы обусловлено, в первую очередь, различием атомных размеров диффундирующего вещества и основы, а также неравенством парциальных коэффициентов диффузии примеси и основы, которое приводит к неравенству встречных парциальных потоков и возникновению избыточных вакансий, являющихся источником напряжений [4]. Напряжения, обусловленные появлением в решетке основы атомов другого вещества, называют концентрационными, а напряжения, возникающие вследствие различия диффузионной подвижности атомов основы и атомов примеси, — диффузионными. На практике сложно отделить одни напряжения от других. В конечном счете напряжения и деформации в диффузионной зоне являются следствием неоднородности полей концентраций. Далее концентрационные напряжения и деформации будем рассматривать с этой точки зрения.

Зависимость диффузионных процессов от напряжений обуславливает поиск способов управления перераспределением примеси. Одним из таких способов является создание дополнительной внешней нагрузки. Для того чтобы исследовать роль внешней нагрузки при наличии внутренних напряжений, требуется решить задачу о механическом равновесии образца с учетом возможных обратных связей между диффузией и механическими процессами. В случае когда в условиях квазистатического нагружения силами инерции можно пренебречь (что обусловлено малой скоростью диффузионных процессов), задача разбивается на две: задачу о механическом равновесии и нелинейную задачу диффузии. Целью настоящей работы является исследование влияния различных физических факторов на параметры диффузионной зоны в условиях квазистатического одноосного нагружения.

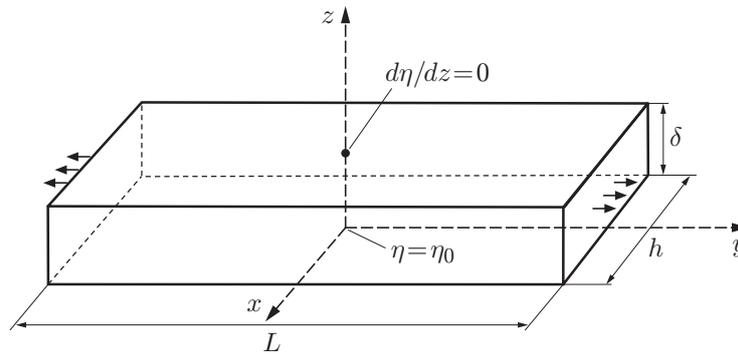


Рис. 1. Схема задачи

Задача о механическом равновесии. Рассмотрим пластину длиной L , шириной h и толщиной δ ($L \gg h \gg \delta$), находящуюся в условиях одноосного механического нагружения. Величина внешней нагрузки p задана. Через одну из поверхностей пластины ($z = 0$) вглубь образца (рис. 1) может проникать примесь из окружающей среды или из предварительно нанесенного слоя, в котором диффундирующий элемент находится в избытке. Перераспределение примеси возможно как вследствие диффузии, так и в результате механического нагружения.

Если в направлении оси z диффузия отсутствует (т. е. образец является однородным по составу), а внешняя нагрузка распределена по поверхностям пластины $y = \pm L/2$ равномерно, можно считать, что образец находится в условиях плоского напряженного состояния.

Если через поверхность $z = 0$ в образец поступает примесь, которая распределяется в поверхностном слое неравномерно, поле напряжений становится трехмерным: $\sigma_{ij} = \sigma_{ij}(x, y, z)$. Как и выше, напряженное состояние можно характеризовать компонентами σ_{xx} , σ_{yy} , τ_{xy} . В этом случае имеет место обобщенное плоское напряженное состояние [5], и граничные условия на поверхностях формулируются для средних величин

$$\bar{\sigma}_{xx} = \frac{1}{\delta} \int_0^{\delta} \sigma_{xx}(x, y, z) dz, \quad \bar{\sigma}_{yy} = \frac{1}{\delta} \int_0^{\delta} \sigma_{yy}(x, y, z) dz, \quad \bar{\tau}_{xy} = \frac{1}{\delta} \int_0^{\delta} \tau_{xy}(x, y, z) dz.$$

В этом случае условия нагружения формулируются следующим образом:

$$\bar{\sigma}_{yy} = p, \quad \bar{\sigma}_{xx} = 0.$$

Поскольку в настоящей работе исследуются только напряжения в диффузионной зоне, удаленной от поверхностей нагружения, будем считать, что $\sigma_{ij} = \sigma_{ij}(z)$, $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}(z)$. Тогда условия нагружения принимают вид

$$p = \frac{1}{\delta} \int_0^{\delta} \sigma_{yy}(z) dz, \quad 0 = \frac{1}{\delta} \int_0^{\delta} \sigma_{xx}(z) dz. \quad (1)$$

Используя условия

$$0 = \frac{1}{\delta} \int_0^{\delta} \sigma_{yy}(z) z dz, \quad 0 = \frac{1}{\delta} \int_0^{\delta} \sigma_{xx}(z) z dz, \quad (2)$$

сдвиговыми напряжениями и деформациями можно пренебречь. Из соотношений закона Дюамеля — Неймана теории массопругости [6] следует

$$\sigma_{ij} = 2\mu\varepsilon_{ij} + \delta_{ij}(\varepsilon_{kk}\lambda - Kw),$$

где

$$w = 3\left(\sum_{k=i}^n \alpha_k(\eta_k - \eta_{k_0})\right),$$

λ, μ — коэффициенты Ламе; K — изотермический модуль всестороннего сжатия; η_k — концентрация компонента k ; α_k — коэффициенты концентрационного расширения; k — номер компонента; n — общее число компонентов; индекс “нуль” соответствует недеформированному состоянию. В этом случае для искомых компонент тензоров напряжений и деформаций получаем

$$\begin{aligned} \varepsilon_{zz} &= -\frac{\lambda}{\lambda + 2\mu}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) + \frac{K}{\lambda + 2\mu}w, \\ \sigma_{xx} &= -\frac{2\mu}{\lambda + 2\mu}[2(\lambda + \mu)\varepsilon_{xx} + \lambda\varepsilon_{yy} - Kw], \\ \sigma_{yy} &= -\frac{2\mu}{\lambda + 2\mu}[2(\lambda + \mu)\varepsilon_{yy} + \lambda\varepsilon_{xx} - Kw]. \end{aligned} \quad (3)$$

Как и в задачах термоупругости [5], для определения компонент тензоров напряжений и деформаций используем уравнения совместности, поскольку в данном случае уравнения равновесия выполняются тождественно и не позволяют решить задачу о нахождении всех компонент тензоров напряжений и деформаций. В рассматриваемой задаче остаются только два уравнения (остальные условия совместности выполняются тождественно)

$$\frac{\partial^2 \varepsilon_{yy}}{\partial z^2} = 0, \quad \frac{\partial^2 \varepsilon_{xx}}{\partial z^2} = 0,$$

решения которых имеют вид

$$\varepsilon_{xx} = Az + B, \quad \varepsilon_{yy} = Cz + D. \quad (4)$$

Подставляя (4) в (3), получаем

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \frac{2\mu}{\lambda + 2\mu}[2(\lambda + \mu)(Az + B) + \lambda(Cz + D) - Kw], \\ \sigma_{yy} &= \frac{2\mu}{\lambda + 2\mu}[2(\lambda + \mu)(Cz + D) + \lambda(Az + B) - Kw]. \end{aligned}$$

Используя условия (1), (2), найдем систему линейных уравнений, позволяющих определить константы интегрирования A, B, C, D :

$$\begin{aligned} \alpha A + \beta B + \gamma C + \lambda\delta D - F_1 &= 0, & \frac{2\mu}{\lambda + 2\mu}[\alpha C + \beta D + \gamma A + \lambda\delta B - F_1] &= p\delta, \\ \omega A + \alpha B + 2\delta\gamma C/3 + \gamma D - F_2 &= 0, & \omega C + \alpha D + 2\delta\gamma A/3 + \gamma B - F_2 &= 0, \end{aligned} \quad (5)$$

где

$$\alpha = (\lambda + \mu)\delta^2 = \beta\delta/2, \quad \beta = 2(\lambda + \mu)\delta, \quad \omega = 2(\lambda + \mu)\delta^3/3 = \beta\delta^2/3, \quad \gamma = \lambda\delta^2/2,$$

$$F_1(t) = K \int_0^\delta w dz, \quad F_2(t) = K \int_0^\delta wz dz.$$

Решение системы (5) имеет вид

$$A = \frac{\lambda p}{K\mu\delta} + \frac{4}{\delta^3 K} F_2 - \frac{2}{K} \frac{1}{\delta^2} F_1, \quad B = -\frac{2}{3} \frac{p}{K\mu} \lambda - \frac{2}{\delta^2 K} F_2 + \frac{4}{3} \frac{1}{K\delta} F_1,$$

$$C = -\frac{2}{K\delta} \frac{\lambda + \mu}{\mu} p + \frac{4}{\delta^3 K} F_2 - \frac{2}{\delta^2 K} F_1, \quad D = \frac{4}{3} \frac{\lambda + \mu}{K\mu} p - \frac{2}{K\delta^2} F_2 + \frac{4}{3\delta K} F_1.$$

Таким образом, задача о механическом равновесии решена. Очевидно, что все коэффициенты зависят от величины внешней нагрузки и характера распределения диффундирующего вещества.

Диффузионная задача. Возможны два вида влияния напряжений на процесс диффузии: 1) изменение коэффициента диффузии, обусловленное изменением активационного объема [7]; 2) изменение подвижности атомов примеси, находящихся в поле напряжений.

Рассмотрим подробно понятие активационного объема. Активационный объем, являющийся одной из важнейших термодинамических характеристик процесса диффузии, играет важную роль в случае, когда необходимо исследовать влияние на поведение системы давления либо напряжений, возникающих в системе. По определению активационный объем равен разности локальных объемов системы в основном и активированном состояниях [8]. По величине активационного объема можно судить о механизме процесса, что часто находит применение в экспериментальных и теоретических работах.

Определить активационный объем можно различными способами. В работе [9] в термодинамических соотношениях, например в уравнении Гиббса, изменение объема отождествляется с изменением активационного объема. По-видимому, в [9] считается, что количество вещества составляет, по крайней мере, не менее 1 моль, и используемый в соотношениях активационный объем соответствует количеству вещества, равному 1 моль. Для простой термодинамической системы имеет место уравнение Гиббса

$$dU = T dS - P dV,$$

где U — внутренняя энергия; S — энтропия; T — температура; P — давление; V — объем. Как и в работе [9], будем полагать, что все величины соответствуют количеству вещества, равному 1 моль. Используя связь

$$G = U - TS + PV,$$

найдем

$$dG = dU - T dS - S dT + P dV + V dP$$

или

$$dG = -S dT + V dP,$$

т. е.

$$V = \left(\frac{\partial G}{\partial p} \right)_T. \quad (6)$$

Полагая, что сумма всех частиц в многокомпонентной системе также соответствует количеству вещества, равному 1 моль, уравнение для изменения внутренней энергии такой системы запишем в виде

$$dU = T dS + P dV + \sum_{k=1}^n g_k dN_k.$$

Очевидно, что определение (6) не меняется:

$$V = \left(\frac{\partial G}{\partial p} \right)_{T, N_k}, \quad (7)$$

однако объем оказывается функцией состава. Выражение (6) или (7) можно считать формальным определением активационного объема в расчете на количество вещества, равное 1 моль.

Полагая, что температурная зависимость коэффициента самодиффузии соответствует закону Аррениуса [10]

$$D^* = D_0 \exp(-\Delta G/(RT)),$$

получаем

$$\Delta G = -RT \ln(D^*/D_0).$$

Следовательно,

$$V = -RT \left(\frac{\partial \ln D^*}{\partial p} \right)_T + RT \left(\frac{\partial \ln D_0}{\partial p} \right)_T, \quad (8)$$

где D_0 — предэкспоненциальный множитель, содержащий энтропийный фактор. Вклад второго слагаемого в уравнение (8), как правило, составляет менее 10 % вклада первого слагаемого, вследствие чего вторым слагаемым часто пренебрегается [10] или оно включается в предэкспоненциальный множитель. Поэтому активационный объем определяется следующим образом:

$$V = -RT \left(\frac{\partial \ln D^*}{\partial p} \right)_T.$$

С учетом сказанного выше выражение для коэффициента самодиффузии можно записать в виде

$$D^* = D_1 \exp(-\Delta F/(RT)),$$

где $F = U - TS = G - PV$; $dF = -S dT - P dV - \sum_{k=1}^n g_k dN_k$. Тогда

$$D^* = D_1 \exp \left(- \frac{(\Delta F)_V - P dV}{RT} \right).$$

В деформируемой системе имеем

$$dG = -S dT + \varepsilon_{ij} d\sigma_{ij} \frac{m_{cp}}{\rho} + \sum_{k=1}^n g_k dN_k,$$

$$dF = -S dT + \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} \frac{m_{cp}}{\rho} + \sum_{k=1}^n g_k dN_k,$$

где все величины являются функциями координаты и времени. Тогда

$$\begin{aligned} D^* &= D_1 \exp \left(- \frac{E_a + \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} \frac{m_{cp}}{\rho}}{RT} \right) = D'_0 \exp \left(- \frac{\sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} \frac{m_{cp}}{\rho}}{RT} \right) \approx \\ &\approx D'_0 \exp \left(- \frac{k_0 \sigma_{kk} d\varepsilon_{kk} \frac{m_{cp}}{\rho}}{RT} \right). \quad (9) \end{aligned}$$

Здесь m_{cp} — средняя молярная масса; ρ — плотность системы. Первый инвариант тензора напряжений есть локальное давление, а величина $(m_{cp}/\rho) d\varepsilon_{kk}$ — изменение локального объема в расчете на количество вещества, равное 1 моль. В выражении (9) k_0 — коэффициент пропорциональности, показывающий, какая часть работы расходуется на уменьшение энергии активации диффузии. Этот коэффициент (будем называть его коэффициентом чувствительности диффузии к работе напряжений) является структурно-зависимой

величиной, т. е. его значение зависит от структуры и физических свойств деформируемой среды. Таким образом, можно учесть влияние напряжений и деформаций на величину коэффициента диффузии. Обобщение (9) представляет собой выражение

$$D^* = D'_0 \exp(-k\Pi/(RT)), \quad (10)$$

где $k = k_0 m_{cp}/\rho$; $\Pi = -(\sigma_{xx}\varepsilon_{xx} + \sigma_{yy}\varepsilon_{yy} + \sigma_{zz}\varepsilon_{zz})$.

Второй вид влияния напряжений на деформацию заключается в непосредственном изменении подвижности атомов примеси, находящихся в поле напряжений, что аналогично явлению бародиффузии в жидкостях.

В соответствии с термодинамической теорией [12] поток компонента в бинарной системе в изотермических условиях можно представить в виде

$$J = -D_2 \frac{\partial \eta}{\partial z} + B_2 \eta \frac{\partial}{\partial z} \sigma_{kk}, \quad (11)$$

где индекс 2 соответствует диффундирующему веществу; η — массовая концентрация диффундирующего вещества; $\sigma_{kk} = \sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}$. Для представления коэффициента D_2 используем формулу (10) и определение, связывающее его с коэффициентом самодиффузии:

$$D_2 = D_2^* f(\eta), \quad D_2^* = D'_0 \exp(-k\Pi/(RT)).$$

Коэффициент переноса под действием напряжений B_2 для диффундирующего вещества определяется равенством

$$B_2 = \alpha_2 D_2^* m_2 / (\rho RT),$$

где α_2 — коэффициент концентрационного расширения диффундирующего вещества; m_2 — молярная масса диффундирующего вещества.

Фактически (11) есть обобщение закона Фика на деформируемую среду. Используя второй закон Фика

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z} J$$

и уравнение для потока (11), получаем

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} D_2 \frac{\partial \eta}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} B_2 \eta \frac{\partial}{\partial z} \sigma_{kk}.$$

Используя полученное выше решение задачи о механическом равновесии для завершения формулировки диффузионной задачи, имеем уравнение

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[\left(D_2 + B_2 \eta \frac{12\mu K \Delta\alpha}{\lambda + 2\mu} \right) \frac{\partial \eta}{\partial z} - B_2 \eta \frac{6\mu K}{\lambda + 2\mu} (A + C) \right] \quad (12)$$

($\Delta\alpha = \alpha_2 - \alpha_1$ — разность коэффициентов концентрационного расширения диффундирующего вещества и материала основы) с граничными условиями

$$z = 0: \quad \eta = \eta_0,$$

$$z = \delta: \quad J = 0 \quad \text{или} \quad D_0 \frac{\partial \eta}{\partial z} = B_0 \eta \frac{\partial \sigma_{kk}}{\partial z}.$$

В начальный момент времени $\eta = 0$.

Переход к безразмерным переменным. Так как цель работы состоит в изучении роли различных физических явлений при изменении условий нагружения, проведем подробное параметрическое исследование. Для этого перейдем к безразмерным переменным

$$\eta, \quad \tau = t \frac{D'_0}{\delta^2}, \quad \xi = \frac{z}{\delta}, \quad s_{ij} = \frac{\sigma_{ij}}{3K\alpha_2}, \quad e_{ij} = \frac{\varepsilon_{ij}}{3\alpha_2}.$$

Тогда уравнение (12) с граничными и начальными условиями принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \eta}{\partial \tau} &= \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\bar{D}_{eff} \frac{\partial \eta}{\partial \xi} \right) - \bar{V}_{eff} \frac{\partial \eta}{\partial \xi}, \\ \xi = 0: \quad \eta &= \eta_0, \quad \xi = 1: \quad J = -\bar{D}_{eff} \frac{\partial \eta}{\partial \xi} - \bar{V}_{eff} \eta = 0, \quad \tau = 0: \quad \eta = 0, \end{aligned} \quad (13)$$

где

$$\bar{D}_{eff} = \varphi(\varkappa) \left(f(\eta) + \frac{2h_1}{2h_2 + 1} \eta \Omega \alpha_c \right), \quad \bar{V}_{eff} = \varphi(\varkappa) \Omega \frac{6}{2h_2 + 1} (-S^e - 2\alpha_c h_1 I_1 + 4\alpha_c h_1 I_2),$$

$$\varphi(\varkappa) = \exp \left(\varkappa \Omega \frac{3}{3 - h_1} \bar{\Pi} \right), \quad \bar{\Pi} = s_{11} e_{11} + s_{22} e_{22},$$

$$I_1 = \int_0^1 \eta d\xi, \quad I_2 = \int_0^1 \eta \xi d\xi,$$

$$h_1 = \frac{2\mu}{\lambda + 2\mu}, \quad h_2 = \frac{\lambda}{\lambda + 2\mu} = 1 - h_1, \quad S^e = \frac{p}{3K\alpha_2},$$

$$\Omega = \frac{9\alpha_2^2 m_2 K^2}{RT\rho(\lambda + 2\mu)}, \quad \alpha_c = \frac{\Delta\alpha}{\alpha_2}, \quad \varkappa = k \frac{\rho}{m_2}.$$

Компоненты тензоров напряжений и деформаций, отличные от нуля, представим в виде

$$\begin{aligned} e_{11} &= x_1 \xi + y_1, \quad e_{22} = x_2 \xi + y_2, \\ e_{33} &= -h_2(x_1 \xi + x_2 \xi + y_1 + y_2) + \frac{1 + 2h_2}{3} \alpha_c \eta, \\ s_{11} &= h_1 \left(\frac{1 + h_2}{1 + 2h_2} (x_1 \xi + y_1) + \frac{3h_2}{1 + 2h_2} (x_2 \xi + y_2) - \alpha_c \eta \right), \\ s_{22} &= h_1 \left(\frac{1 + h_2}{1 + 2h_2} (x_2 \xi + y_2) + \frac{3h_2}{1 + 2h_2} (x_1 \xi + y_1) - \alpha_c \eta \right). \end{aligned}$$

Здесь

$$\begin{aligned} h_2 &= 1 - h_1, \quad x_1 = \frac{2h_2}{h_1} S^e + 4\alpha_c I_2 - 2\alpha_c I_1, \quad y_1 = \frac{4h_2}{3h_1} S^e - 2\alpha_c I_2 + \frac{4}{3} \alpha_c I_1, \\ x_2 &= -2 \frac{1 + h_2}{h_1} S^e + 4\alpha_c I_2 - 2\alpha_c I_1, \quad y_2 = 4 \frac{1 + h_2}{3h_1} S^e - 2\alpha_c I_2 + \frac{4}{3} \alpha_c I_1. \end{aligned}$$

Модель содержит пять параметров: Ω , α_c , \varkappa , S^e и h_1 . Используя терминологию, принятую для коэффициентов классического уравнения массопереноса, \bar{D}_{eff} будем называть эффективным коэффициентом диффузии, а \bar{V}_{eff} — конвективной скоростью. Относительный коэффициент концентрационного расширения α_c характеризует различие атомных объемов диффундирующего вещества и матрицы, поэтому может принимать как положительные, так и отрицательные значения. Значения коэффициента Ω , называемого коэффициентом связности, могут изменяться в широком диапазоне и увеличиваются при повышении температуры вследствие зависимости механических модулей от температуры [13]. Параметр h_1 характеризует механические свойства среды. Коэффициент \varkappa — безразмерный коэффициент чувствительности, при увеличении которого растет и активационный объем системы.

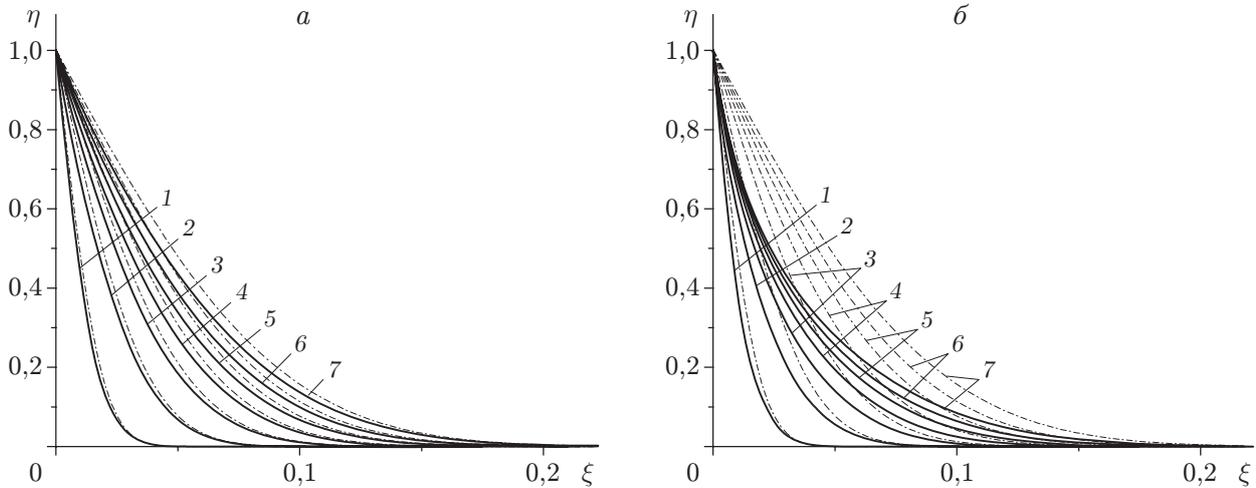


Рис. 2. Зависимость массовой концентрации от параметра ξ в различные моменты времени при $\alpha_c = 0,2$, $S^e = 0$:

a — $\varkappa = 0$, b — $\varkappa = 100$; 1 — $\tau = 0,0001$, 2 — $\tau = 0,0004$, 3 — $\tau = 0,0008$, 4 — $\tau = 0,0012$, 5 — $\tau = 0,0016$, 6 — $\tau = 0,0020$, 7 — $\tau = 0,0025$; сплошные линии — численный расчет, штрихпунктирные — распределения (14)

Задача (13) решалась численно с использованием неявной разностной схемы и метода прогонки. В процессе численных расчетов исследовалось влияние коэффициента чувствительности \varkappa на поведение системы. Варьировались внешняя нагрузка S^e и относительный коэффициент концентрационного расширения α_c , характеризующий различие атомных объемов диффундирующего вещества и матрицы. Коэффициенты Ω и h_1 являются фиксированными ($\Omega = 10$, $h_1 = 0,41$).

Результаты численных расчетов. Типичные распределения концентраций в диффузионной зоне в отсутствие внешней нагрузки при $\alpha_c = 0,2$ (т. е. при условии, что атомный объем диффундирующего вещества больше атомного объема основы) представлены на рис. 2. Если $\varkappa = 0$ (см. рис. 2, a), то при данном наборе параметров качественно распределение концентраций незначительно отличается от решения простейшего уравнения диффузии

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = \frac{\partial^2 \eta}{\partial \xi^2},$$

$$\xi = 0: \quad \eta = 1, \quad \xi \rightarrow \infty, \quad \frac{\partial \eta}{\partial \xi} = 0,$$

которое имеет вид

$$\eta = \operatorname{erfc}(\xi / (2\sqrt{\tau})). \quad (14)$$

Полагая $\varkappa = 100$, получаем качественно иной профиль (см. рис. 2, b). Увеличение коэффициента чувствительности оказывает влияние на поведение системы следующим образом. Несмотря на то что “эффективный коэффициент диффузии” \bar{D}_{eff} увеличивается (рис. 3, a), возникающие вблизи поверхности $\xi = 0$ сжимающие напряжения приводят к тому, что с увеличением \varkappa средняя концентрация диффундирующего вещества в пластине (рис. 3, b), рассчитываемая по формуле

$$\langle \eta \rangle = \int_0^1 \eta(\xi) d\xi,$$

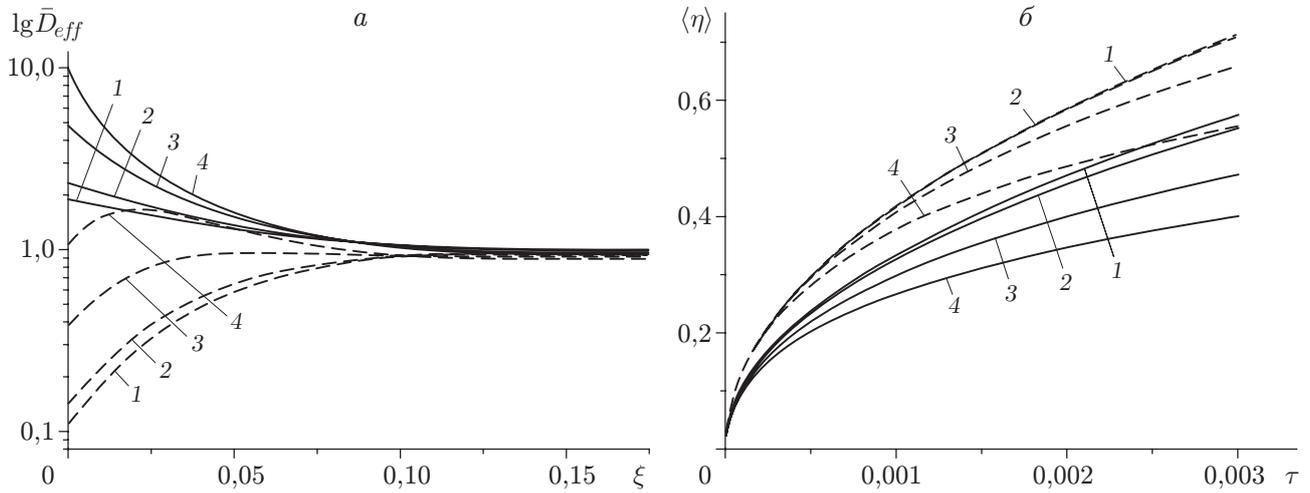


Рис. 3. Зависимости “эффективного коэффициента диффузии” от параметра ξ при $\tau = 0,0016$ (а) и массовой концентрации диффундирующего вещества в пластине от времени (б) при $S^e = 0$ и различных значениях \varkappa :
 1 — $\varkappa = 0$; 2 — $\varkappa = 10$; 3 — $\varkappa = 50$; 4 — $\varkappa = 100$; сплошные линии — $\alpha_c = 0,2$, штриховые — $\alpha_c = -0,2$

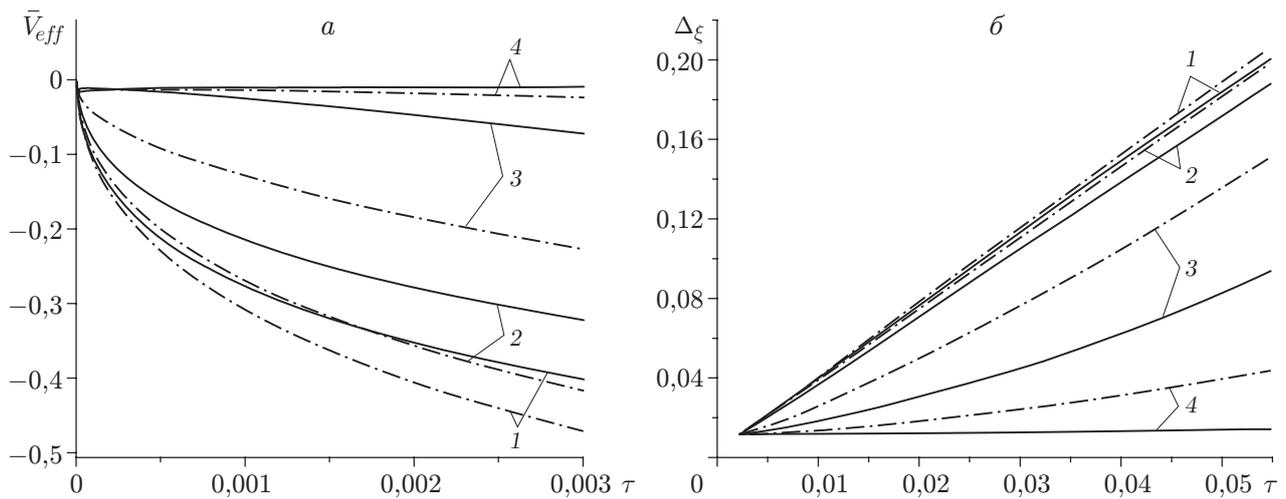


Рис. 4. Зависимости “конвективной скорости” (а) и ширины диффузионного фронта (б) от времени при $\alpha_c = 0,2$ и различных значениях S^e :
 1 — $S^e = 0$, 2 — $S^e = 0,01$, 3 — $S^e = 0,05$, 4 — $S^e = 0,10$; сплошные линии — $\varkappa = 100$, штрихпунктирные — $\varkappa = 0$

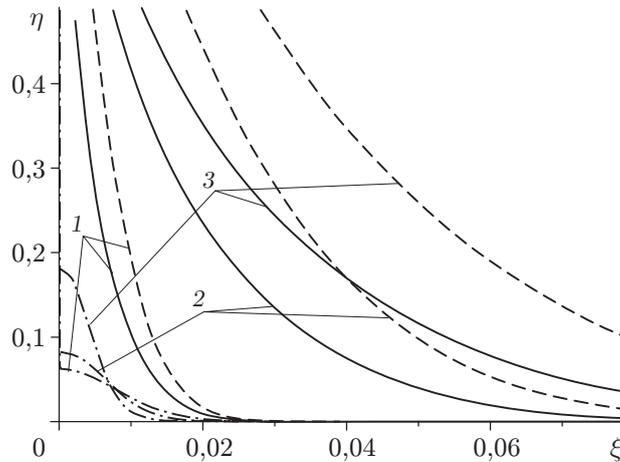


Рис. 5. Зависимость массовой концентрации от параметра ξ при $S^e = 0,1$ в различные моменты времени:
 1 — $\tau = 0,0001$, 2 — $\tau = 0,0012$, 3 — $\tau = 0,0025$; штрихпунктирные линии — $\varkappa = 80$, $\alpha_c = 0,2$, сплошные — $\varkappa = 20$, $\alpha_c = 0,2$, штриховые линии — $\varkappa = 20$, $\alpha_c = -0,2$

уменьшается. Такое поведение интегральной характеристики, по-видимому, обусловлено тем, что уменьшается абсолютное значение конвективной скорости \bar{V}_{eff} (рис. 4,а). Ширина диффузионной зоны Δ_ξ , определяемая по характерному значению концентрации диффундирующего вещества в образце $\eta(\Delta_\xi, \tau) = 0,005$, также уменьшается (рис. 4,б), но незначительно.

Вследствие приложения внешней нагрузки ширина диффузионного фронта увеличивается, а эффективная скорость при $S^e = 0,1$ становится практически равной нулю.

На рис. 5 представлена зависимость массовой концентрации от параметра ξ для двух значений \varkappa при $S^e = 0,1$. Видно, что внешняя нагрузка препятствует проникновению примеси вглубь материала, если атомный объем диффундирующего вещества превышает атомный объем основы ($\alpha_c > 0$), зависимость коэффициента чувствительности диффузии от напряжения фактически приводит к появлению предела растворимости диффундирующего вещества в основе (штрихпунктирные линии на рис. 5). В случае если атомный объем диффундирующего вещества меньше атомного объема основы ($\alpha_c = -0,2$), при увеличении коэффициента чувствительности “эффективный коэффициент диффузии” также увеличивается (штриховые линии на рис. 3), что, в свою очередь, оказывает влияние на поведение $\langle \eta \rangle$ и ширину диффузионной зоны. Если $\alpha_c < 0$, то при выбранном наборе параметров концентрация диффундирующего вещества в основе увеличивается (штриховые кривые на рис. 3,б), а ширина диффузионной зоны при одном и том же значении \varkappa превышает ширину диффузионной зоны для $\alpha_c > 0$ (ср. сплошные и штриховые линии на рис. 5). Поведение “конвективной скорости” и ширины диффузионной зоны остается таким же, что свидетельствует о преимущественной роли второго вида влияния напряжений и деформаций на диффузию в условиях нагружения.

Заключение. Предложена модель перераспределения примеси с учетом влияния напряжений и деформаций на диффузионные процессы в пластине, находящейся в плоском напряженном состоянии. Показано появление предела растворимости диффундирующего вещества в основе вследствие зависимости коэффициента чувствительности диффузии от напряжений. Показан характер влияния напряжений на перераспределение примесей с различными атомными объемами.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Еремеев В. С.** Диффузия и напряжения. М.: Энергоатомиздат, 1984.
2. **Старк Дж. П.** Диффузия в твердых телах. М.: Энергия, 1980.
3. **Гуров К. П.** Взаимная диффузия в многофазных металлических системах / К. П. Гуров, В. А. Карташкин, Ю. А. Угасте. М.: Наука, 1981.
4. **Гегузин Я. Е.** Диффузионная зона. М.: Наука, 1979.
5. **Боли Б.** Теория температурных напряжений / Б. Боли, Дж. Уэйнер. М.: Мир, 1964.
6. **Шермергор Т. Д.** Теория упругости микронеоднородных сред. М.: Наука, 1977.
7. **Aziz Michael J.** Thermodynamics of diffusion under pressure and stress: Relation to point defect mechanisms // Appl. Phys. Lett. 1997. V. 70, N 21. P. 2810–2812.
8. **Страумал Б. Б., Клингер Л. М., Швиндлерман Л. С.** Диффузия индия по одиночным межфазным границам олово — германий при высоких давлениях // Физика твердого тела. 1983. Т. 25, № 7. С. 2085–2089.
9. **Mehrer H.** Diffusion in solids. Berlin: Springer, 2007. (Springer ser. in solid-state sci.; V. 155).
10. **Jeffery Rondo N., Lazarus David.** Calculating activation volumes and activation energies from diffusion measurements // J. Appl. Phys. 1970. V. 41. P. 3186–3187.
11. **Любов Б. Я.** Диффузионные процессы в неоднородных твердых средах. М.: Наука, 1981.
12. **Князева А. Г.** Диффузия и реология в локально-равновесной термодинамике // Мат. моделирование систем и процессов. 2005. № 13. С. 45–60.
13. **Князева А. Г., Донская Я. Г.** Диффузионно-деформационная модель развития зародыша продукта твердофазной реакции // Физика горения и взрыва. 1997. Т. 33, № 2. С. 52–68.

Поступила в редакцию 24/IV 2009 г.
