

УДК 536-12:519.633

НЕЛИНЕЙНАЯ СВЯЗАННАЯ МОДЕЛЬ ОБРАБОТКИ ПОВЕРХНОСТИ ПОТОКОМ ЧАСТИЦ С УЧЕТОМ ФОРМИРОВАНИЯ НОВОЙ ФАЗЫ

А. Г. Князева, Е. С. Парфенова

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, 634055 Томск, Россия
E-mails: anna-knyazeva@mail.ru, linasergg@mail.ru

Представлена модель поверхностной обработки материала потоком частиц на начальной стадии, в которой учитывается взаимовлияние упругой, тепловой, диффузионной волн, а также формирование новой фазы в поверхностном слое подложки. Приведены примеры решения задачи при различных значениях параметров модели, показана динамика развития процесса при действии двух последовательных импульсов. Приведены некоторые варианты модели.

Ключевые слова: связанная модель, поток частиц, взаимодействие волн, нелинейные эффекты, упругие напряжения, диффузия, теплопроводность, релаксация потока тепла, релаксация потока массы, химическая реакция.

DOI: 10.15372/PMTF20210412

Введение. Существует большое количество работ, в которых исследуются многомасштабные и мультифизические модели. В многомасштабных моделях предполагается наличие разных масштабов у одних и тех же явлений и устанавливаются связи между масштабами (уровнями) описания. Мультифизические модели описывают различные физические явления, сопровождающие наблюдаемые процессы, происходящие независимо как на разных масштабных уровнях (нано-, микро-, мезо- и макро-), так и на одном уровне. В обоих случаях собственно связанные модели (в классическом смысле) не строятся. Классические примеры связанных моделей приведены, например, в работах [1, 2]. Наиболее известными в механике теориями, учитывающими наличие взаимодействующих полей, являются теория термоупругости [3] и более поздняя теория обобщенной термоупругости [4]. В зарубежной литературе первой работой в этой области считается [5].

Другим примером в механике связанных полей является теория упругой диффузии, которая развивалась как механиками, так и физиками. Первые считают, что основополагающими в этой области были работы [6, 7], вторые полагают, что наиболее важной работой является [8]. По этой тематике имеются и более ранние публикации, ссылки на которые приводятся в указанных выше работах. Полная аналогия между термоупругостью и упругой диффузией отсутствует. В теории термоупругой диффузии фактически объединены указанные две теории, но при этом учитываются эффекты, возникающие при взаимодействии тепловых и концентрационных полей. В обобщенной теории термоупругой

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и государственной корпорации “Росатом” (код проекта 20-21-00064 Росатом).

© Князева А. Г., Парфенова Е. С., 2021

диффузии имеется два времени: время релаксации потока тепла и время релаксации потока массы. Анализ некоторых подходов, используемых при построении моделей диффузии в упругих средах как при механических, так и при тепловых воздействиях, проведен, например, в [9]. Поскольку диффузия часто сопровождается образованием растворов, новых соединений и фаз, существуют работы, в которых учитывается роль химических процессов в формировании полей напряжений и деформаций, сопутствующих диффузии.

Как правило, при решении частных задач о взаимодействии волн различной природы и квазистатических задач строятся линейные приближения [10, 11], которые в некоторых случаях позволяют получить аналитические решения. Линеаризация проводится вследствие сложности численной реализации связанных моделей, поскольку в этих моделях описываются физические явления со значительно различающимися пространственными и временными масштабами.

Широкое распространение получили квазистационарные модели, причем, как правило, несвязанные (сначала решается диффузионная задача, а затем определяются соответствующие напряжения и деформации). Такие модели распространены в материаловедении. Для медленных процессов существуют эксперименты, в которых можно проверить непротиворечивость моделей наблюдаемым фактам, в то время как для быстропротекающих процессов провести прямое сравнение теорий (как линейных, так и нелинейных) и эксперимента не удается. Примером многоэтапного процесса обработки поверхностей, в котором основные изменения происходят на малом интервале времени, является ионная имплантация. На всех последующих этапах обработки (отжиг, подготовка образцов для исследования и др.) происходит изменение структуры и состава поверхности, поэтому непосредственно сравнить процесс имплантации с теоретическими данными затруднительно. Метод молекулярной динамики и метод Монте-Карло, как правило, используются для описания идеальных систем, при этом принимаются различные предположения и вводятся параметры, которые необходимо определить в макроскопическом эксперименте.

Ситуация становится еще более сложной, если процесс имплантации сопровождается формированием новых фаз. Образование интерметаллидных фаз в поверхностном слое изучается в работе [12]. В квазистатическом приближении, без учета механических процессов, это явление описывается в [13].

В данной работе на основе модели поверхностной обработки металла потоком частиц иного металла рассматриваются примеры взаимовлияющих процессов с учетом формирования новой фазы.

Постановка задачи. В приближении одноосного нагружения одномерная связанная математическая модель процесса ионной имплантации [14], в которой учитывается формирование новой фазы [15], содержит уравнения

$$\rho_0 \frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial J}{\partial x} - \Phi; \quad (1)$$

$$\rho_0 C_\sigma \frac{\partial T}{\partial t} + \alpha_T T \frac{\partial \sigma}{\partial t} = -\frac{\partial J_q}{\partial x} + Q\Phi; \quad (2)$$

$$\rho_0 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma}{\partial x}; \quad (3)$$

$$\rho_0 \frac{\partial C_P}{\partial t} = \Phi, \quad (4)$$

где ρ_0 — постоянная плотность материала; C — массовая концентрация примеси; t — время; J — компонента вектора плотности потока массы примеси в направлении нагружения; x — пространственная координата; Φ — скорость химической реакции; C_σ — теплоемкость при постоянных напряжениях; T — температура; α_T — линейный коэффициент

температурного расширения; σ — компонента тензора напряжений в направлении нагружения; J_q — компонента вектора плотности потока тепла в направлении нагружения; Q — количество теплоты, выделяющейся в результате химической реакции; u — компонента вектора перемещений в направлении нагружения; C_P — концентрация продукта реакции.

В общем случае определяющие соотношения для потоков тепла \mathbf{J}_q и массы \mathbf{J} следуют из законов термодинамики необратимых процессов. При учете конечных времен релаксации (в случае быстропротекающих процессов) для бинарной системы основной материал — примесь уравнения для потоков без учета массовых сил имеют вид [16]

$$\mathbf{J} = -\rho_0 D \nabla C + CB \nabla \sigma_{kk} + CDS_{T0} \rho_0 \nabla T - t_D \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t},$$

$$\mathbf{J}_q = -\lambda_T \nabla T - DQ^* \nabla C + (\alpha - \alpha_B) CS_{T0} T D \nabla \sigma_{kk} - t_T \frac{\partial \mathbf{J}_q}{\partial t},$$

где $D = D^0(1 + mC/(m_B C_B))$ — коэффициент диффузии; D^0 — коэффициент самодиффузии примеси, зависящий от температуры в соответствии с законом Аррениуса; m — молярная масса примеси; m_B, C_B — молярная масса и концентрация материала, составляющего основу; $B = D^0 m(\alpha - \alpha_B)/(RT)$ — коэффициент переноса материала под действием напряжений; α, α_B — коэффициенты концентрационного расширения примеси и материала, составляющего основу; σ_{kk} — первый инвариант полного тензора напряжений; S_{T0} — коэффициент Соре; t_D — время релаксации потока массы; λ_T — теплопроводность; $Q^* = \rho_0 RT^2 S_{T0}(1 + mC/(m_B C_B))/m$ — количество переносимого тепла; t_T — время релаксации потока тепла.

Как правило, при построении модели предполагается, что для твердых тел коэффициент S_{T0} пренебрежимо мал. Принимая это условие, для рассматриваемой одномерной задачи получаем более простые уравнения для потоков

$$J = -\rho_0 D \frac{\partial C}{\partial x} + CB \frac{\partial \sigma}{\partial x} - t_D \frac{\partial J}{\partial t}; \quad (5)$$

$$J_q = -\lambda_T \frac{\partial T}{\partial x} - t_T \frac{\partial J_q}{\partial t}. \quad (6)$$

При одноосном нагружении единственная отличная от нуля компонента тензора напряжений связана с деформацией $\varepsilon = \partial u/\partial x$ в направлении нагружения соотношением

$$\sigma = E(\varepsilon - \alpha_T(T - T_0) - (\alpha - \alpha_B)(C - C_0) - (\alpha_P - \alpha_B)(C_P - C_{P0})), \quad (7)$$

где индекс “0” соответствует недеформированному состоянию; E — модуль упругости; α_P — коэффициент концентрационного расширения продукта реакции.

Из уравнений (1)–(3) с помощью (5)–(7) получаем три дифференциальных уравнения второго порядка как по времени, так и по координате:

$$\begin{aligned} \rho_0 \left(\frac{\partial C}{\partial t} + t_D \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} \right) &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_0 D \frac{\partial C}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(BC \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right) - \Phi - t_D \frac{\partial \Phi}{\partial t}, \\ t_q \rho_0 C_\sigma \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \rho_0 C_\sigma \frac{\partial T}{\partial t} &= \lambda_T \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + Q\Phi + t_T \frac{\partial}{\partial t} \left(\alpha_T T \frac{\partial \sigma}{\partial t} \right) - \alpha_T T \frac{\partial \sigma}{\partial t}, \\ \frac{\rho_0}{E} \frac{\partial^2 \sigma}{\partial t^2} + \rho_0 \alpha_T \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \rho_0 (\alpha - \alpha_0) \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} + \rho_0 (\alpha_P - \alpha_0) \frac{\partial^2 C_P}{\partial t^2} &= \frac{\partial^2 \sigma}{\partial x^2}. \end{aligned}$$

Кинетическое уравнение (4) остается без изменений.

Начальные и граничные условия имеют вид

$$x = 0: \quad \mathbf{J} = m_0\varphi(t), \quad \mathbf{J}_q = q_0\varphi(t), \quad \sigma = \sigma_0\varphi(t),$$

$$x \rightarrow \infty: \quad \frac{\partial C}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial x} = 0, \quad \sigma = 0,$$

$$t = 0: \quad C = C_0, \quad \sigma = 0, \quad C_P = C_{P0}, \quad T = T_0, \quad \frac{\partial C}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial \sigma}{\partial t} = 0.$$

Введем безразмерные переменные [14, 15]

$$\tau = \frac{t}{t_*}, \quad \xi = \frac{x}{x_*}, \quad S = \frac{\sigma}{\sigma_*}, \quad \Theta = \frac{T - T_0}{T_* - T_0}, \quad e = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_*}.$$

Здесь

$$t_* = x_* \sqrt{\frac{\rho_0}{E}}, \quad x_* = \sqrt{\frac{t_* \lambda_T}{\rho_0 C_\sigma}}, \quad \sigma_* = E \alpha_T (T_* - T_0), \quad T_* = T_0 + \frac{q_0 x_*}{\lambda_T}, \quad \varepsilon_* = \alpha_T (T_* - T_0).$$

В результате задача принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial \tau} + \tau_D \frac{\partial^2 C}{\partial \tau^2} = \text{Le} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(F_D(\Theta) f(C) \frac{\partial C}{\partial \xi} \right) - \\ - \frac{\omega \gamma M \text{Le}}{\Theta + \chi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(F_D(\Theta) C \frac{\partial S}{\partial \xi} \right) - \tau_{ch} \left(W(C, \Theta) + \tau_D \frac{\partial W(C, \Theta)}{\partial \tau} \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Theta}{\partial \tau} + \tau_T \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \tau^2} = \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \xi^2} - \tau_T \omega \frac{\partial}{\partial \tau} \left((\Theta + \chi) \frac{\partial S}{\partial \tau} \right) - \\ - \omega (\Theta + \chi) \frac{\partial S}{\partial \tau} + \Omega \tau_{ch} \left(W(C, \Theta) + \tau_T \frac{\partial W(C, \Theta)}{\partial \tau} \right), \end{aligned}$$

$$\frac{\partial^2 S}{\partial \tau^2} + \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \tau^2} + \gamma \frac{\partial^2 C}{\partial \tau^2} + \gamma_P \frac{\partial^2 C_P}{\partial \tau^2} = \frac{\partial^2 S}{\partial \xi^2},$$

$$\frac{\partial C_P}{\partial \tau} = \tau_{ch} W(C, \Theta),$$

$$\xi = 0: \quad \bar{J} = \tilde{m}_0 \varphi(\tau), \quad \bar{J}_q = \tilde{q}_0 \varphi(\tau), \quad S = \tilde{\sigma}_0 \varphi(\tau),$$

$$\xi \rightarrow \infty: \quad \frac{\partial C}{\partial \xi} = 0, \quad \frac{\partial \Theta}{\partial \xi} = 0, \quad S = 0,$$

$$\tau = 0: \quad C = C_0, \quad S = 0, \quad C_P = C_{P0}, \quad \Theta = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial \tau} = 0, \quad \frac{\partial \Theta}{\partial \tau} = 0, \quad \frac{\partial S}{\partial \tau} = 0,$$

где

$$W(C, \Theta) = \psi(C) F_{ch}(\Theta), \quad F_{ch}(\Theta) = \exp\left(\frac{\Theta - 1}{\beta_{ch}(\Theta + \chi)}\right), \quad F_D(\Theta) = \exp\left(\frac{\Theta - 1}{\beta_D(\Theta + \chi)}\right),$$

$$\bar{J} = -f(C) F_D(\Theta) \frac{\partial C}{\partial \xi} + \frac{\omega \gamma M C F_D(\Theta)}{\Theta + \chi} \frac{\partial S}{\partial \xi} - \tau_D \frac{\partial \bar{J}}{\partial \tau},$$

$$\bar{J}_q = -\frac{\partial \Theta}{\partial \xi} - \tau_T \frac{\partial \bar{J}_q}{\partial \tau}.$$

Модель включает безразмерные параметры

$$\gamma = \frac{\Delta \alpha}{\alpha_T (T_* - T_0)}, \quad \gamma_P = \frac{\Delta \alpha_P}{\alpha_T (T_* - T_0)}, \quad \tau_{ch} = t_* k_0 \exp\left(-\frac{E_0}{RT_*}\right), \quad \tau_T = \frac{t_T}{t_*}, \quad \tau_D = \frac{t_D}{t_*},$$

$$\Omega = \frac{Q_{ch}}{\rho C_{\sigma}(T_* - T_0)}, \quad \text{Le} = \frac{D_0 \exp(-E_D/(RT_*))}{\varkappa_T}, \quad \omega = \frac{E\alpha_T^2(T_* - T_0)}{\rho C_{\sigma}},$$

$$\tilde{m}_0 = \frac{m_0}{J_*}, \quad \tilde{\sigma}_0 = \frac{\sigma_0}{\sigma_*}, \quad \tilde{q}_0 = \frac{q_0}{J_{q*}}, \quad \chi = \frac{T_0}{T_* - T_0},$$

$$\beta_{ch} = \frac{RT_*}{E_0}, \quad \beta_D = \frac{RT_*}{E_D}, \quad M = \frac{mC_{\sigma}}{R},$$

где $\varkappa_T = \lambda_T/(C_{\sigma}\rho)$ — температуропроводность.

Варианты модели. Линеаризуем задачу, полагая, что химическая реакция отсутствует. Для этого примем

$$\langle \Theta + \chi \rangle \approx 1 + \chi = \frac{T_*}{T_* - T_0}, \quad F_D(\Theta) = \exp\left(\frac{\Theta - 1}{\beta_D(\Theta + \chi)}\right) \approx 1,$$

$$\langle F_D(\Theta)f(C) \rangle \approx 1, \quad \langle CF_D(\Theta) \rangle \approx C_*.$$

Тогда, вводя обозначения $\omega_0 = \omega(1 + \chi)$ и $\beta = MC_*/(1 + \chi)^2$, получаем

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} + \tau_D \frac{\partial^2 C}{\partial \tau^2} = \text{Le} \frac{\partial^2 C}{\partial \xi^2} - \omega_0 \gamma \text{Le} \beta \frac{\partial^2 S}{\partial \xi^2},$$

$$\frac{\partial \Theta}{\partial \tau} + \tau_T \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \tau^2} = \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \xi^2} - \tau_T \omega_0 \frac{\partial^2 S}{\partial \tau^2} - \omega_0 \frac{\partial S}{\partial \tau},$$

$$\frac{\partial^2 S}{\partial \tau^2} + \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \tau^2} + \gamma \frac{\partial^2 C}{\partial \tau^2} = \frac{\partial^2 S}{\partial \xi^2}.$$

Эта система уравнений является линейной и связанной. Два ее варианта представляют собой уравнения связанной теории обобщенной термоупругости:

$$\frac{\partial \Theta}{\partial \tau} + \tau_T \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \tau^2} = \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \xi^2} - \tau_T \omega_0 \frac{\partial^2 S}{\partial \tau^2} - \omega_0 \frac{\partial S}{\partial \tau},$$

$$\frac{\partial^2 S}{\partial \tau^2} + \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \tau^2} = \frac{\partial^2 S}{\partial \xi^2} \quad (8)$$

и связанной теории обобщенной упругой диффузии:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} + \tau_D \frac{\partial^2 C}{\partial \tau^2} = \text{Le} \frac{\partial^2 C}{\partial \xi^2} - \omega_0 \gamma \text{Le} \beta \frac{\partial^2 S}{\partial \xi^2},$$

$$\frac{\partial^2 S}{\partial \tau^2} + \gamma \frac{\partial^2 C}{\partial \tau^2} = \frac{\partial^2 S}{\partial \xi^2}. \quad (9)$$

Правые части уравнений систем (8) и (9) различны, что свидетельствует об отсутствии полной аналогии между связанными задачами упругой диффузии и термоупругости. В то же время несвязанные системы уравнений ($\omega_0 = 0$) идентичны.

Будем искать решения систем (8) и (9) в виде

$$\Theta = \theta e^{-i\Omega_0\tau+k\xi}, \quad S = s e^{-i\Omega_0\tau+k\xi}, \quad C = c e^{-i\Omega_0\tau+k\xi}, \quad S = s e^{-i\Omega_0\tau+k\xi}$$

соответственно, где Ω_0 — частота колебаний; $k = -\varkappa + i\delta$, $\varkappa > 0$; \varkappa — коэффициент затухания; δ — волновое число; c, s, θ — амплитуды колебаний. При $\omega_0 = 0$ для систем (8) и (9) имеем независимые незатухающие решения ($\varkappa = 0$):

$$\delta = \pm\Omega_0, \quad \delta = \pm\sqrt{\tau_T} \Omega, \quad \delta = \pm\Omega_0, \quad \delta = \pm\sqrt{\tau_D/\text{Le}} \Omega.$$

В связанных задачах уравнения становятся более сложными. В задаче термоупругости следствием условия разрешимости системы уравнений для амплитуд является система алгебраических уравнений

$$\begin{aligned} \Omega_0^4 \tau_T (1 - \omega_0) + \Omega_0^2 (\tau_T \varkappa^2 - \delta^2 \tau_T + \varkappa^2 - \delta^2) + 2\varkappa \delta \Omega_0 - 6\varkappa^2 \delta^2 + \varkappa^4 + \delta^2 &= 0, \\ \Omega_0^3 (1 - \omega_0) - 2\varkappa \delta \Omega_0^2 (1 + \tau_T) + \Omega_0 (\varkappa^2 - \delta^2) - 4\varkappa^3 \delta + 4\varkappa \delta^3 &= 0. \end{aligned} \quad (10)$$

Рассмотрим приближенное решение. Полагая $\omega_0 \ll 1$, будем искать одно из решений системы (10) в виде

$$\delta = \pm \Omega_0 + \alpha \omega_0 + O(\omega_0^2), \quad \varkappa = \varepsilon \omega_0 + O(\omega_0^2).$$

Подставляя полученные соотношения в (10), находим систему двух линейных уравнений для коэффициентов α , ε . Тогда с точностью до малых слагаемых имеем

$$\delta \approx \Omega_0 + \omega_0 \frac{\Omega_0^3 \tau_T (1 - \tau_T) - \Omega_0}{2[1 + \Omega_0^2 (1 - \tau_T)^2]}, \quad \varkappa \approx \omega_0 \frac{\Omega_0^2}{1 + \Omega_0^2 (1 - \tau_T)^2}.$$

Из системы уравнений упругой диффузии (9) получаем

$$\begin{aligned} \Omega_0^4 \tau_D + \Omega_0^2 (\text{Le} + \tau_D - \gamma^2 \omega_0 \text{Le} \beta) (\varkappa^2 - \delta^2) + 2\varkappa \delta \Omega_0 + \text{Le} (\varkappa^2 - \delta^2)^2 - 4\varkappa^2 \delta^2 \text{Le} &= 0, \\ \Omega_0^3 - \Omega_0^2 (-2\delta \varkappa \gamma^2 \omega_0 \text{Le} \beta + 2\varkappa \delta \text{Le} + 2\tau_D \varkappa \delta) + \Omega_0 (\varkappa^2 - \delta^2) - 4 \text{Le} \varkappa \delta (\varkappa^2 - \delta^2) &= 0. \end{aligned}$$

В этом случае

$$\delta \approx \Omega_0 - \omega_0 \frac{\Omega_0^3 \gamma^2 \text{Le} \beta (\text{Le} - \tau_D)}{2[1 + \Omega_0^2 (\text{Le} - \tau_D)^2]}, \quad \varkappa \approx \omega_0 \frac{\Omega_0^2 \gamma^2 \text{Le} \beta}{2[1 + \Omega_0^2 (\text{Le} - \tau_D)^2]}.$$

В обоих случаях характер зависимости волнового числа и декремента затухания от частоты одинаков. Однако в случае упругой диффузии волновое число уменьшается с уменьшением γ ; характер зависимости величин δ и \varkappa от γ зависит от соотношения параметров Le и τ_D . Таким образом, даже в первом приближении по ω_0 характер этих зависимостей различен.

В общем случае связанная задача является нелинейной. В ней учитываются связанность полей концентраций и напряжений и связанность полей температуры и напряжений. Дополнительная нелинейность обусловлена зависимостью скорости реакции и коэффициента диффузии от температуры. Метод решения данной задачи, так же как и физический смысл безразмерных параметров, описан в [14, 15].

Примеры расчетов. Ниже приводятся примеры численных расчетов.

Пример 1. На рис. 1 приведены распределения деформаций, напряжений и температуры при различных значениях времен релаксации. При $\tau_D < \tau_T$ (штриховые линии) экстремумы деформаций, напряжений и температуры для одних и тех же моментов времени значительно больше, чем при $\tau_D > \tau_T$ (сплошные линии). На рис. 1 видно, что слабовыраженным минимумам на кривых деформации (темные точки на рис. 1,а) соответствуют точки перегиба на кривых напряжений (см. рис. 1,б). Максимумам на температурных кривых соответствуют минимумы на кривых напряжений. В случае $\tau_D > \tau_T$ экстремумы выражены более отчетливо, чем в случае $\tau_D < \tau_T$. Для данного набора параметров смесь частично прореагировала с основным материалом с образованием продукта реакции. Размер зоны реакции приблизительно равен размеру зоны диффузии, который не превышает 0,002. К моментам времени, соответствующим зависимостям, приведенным на рис. 1, волны температуры, напряжений и деформаций покинули зону реакции и не влияют на распределение концентрации (температура в зоне реакции понизилась). Однако наличие примеси привело к искажению волн.

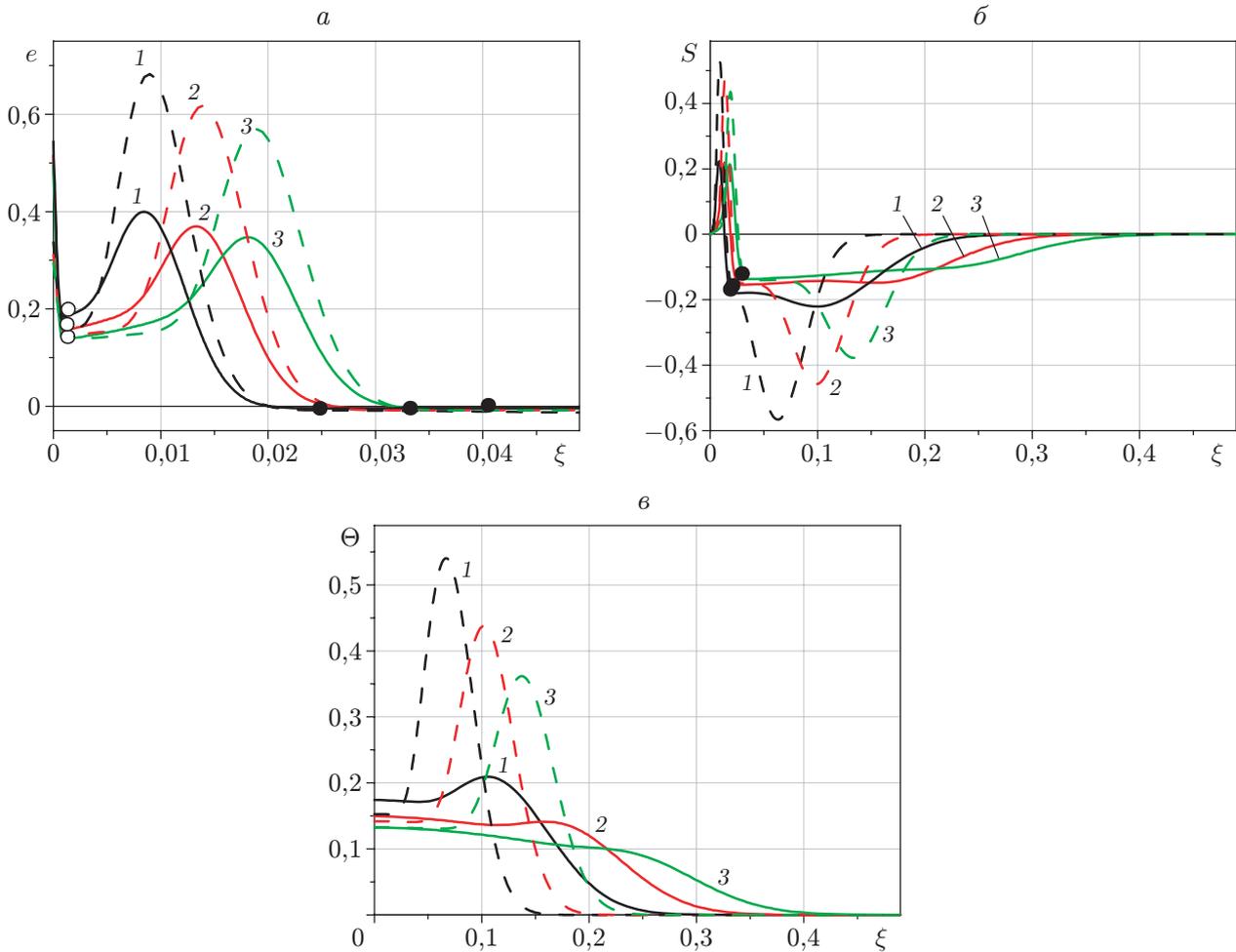


Рис. 1. Распределения деформаций (а), напряжений (б) и температуры (в) при различных значениях времен релаксации ($\gamma = 1,5$, $\gamma_P = -0,5$, $\tilde{m}_0 = 5,0$, $\tau_{ch} = 200,0$, $\Omega = 200,0$, $\tilde{\sigma}_0 = 0,001$, $Le = 0,0025$, $\omega = 0,05$, $\tilde{q}_0 = 5,0$, $\beta_D = 0,027$, $\beta_{ch} = 0,3$, $M = 10,5$, $\chi = 0,55$):

сплошные линии — $\tau_T < \tau_{imp} < \tau_D$, $\tau_T = 0,005$, $\tau_{imp} = 0,01$, $\tau_D = 0,02$, штриховые — $\tau_D < \tau_{imp} < \tau_T$, $\tau_D = 0,005$, $\tau_{imp} = 0,01$, $\tau_T = 0,02$; 1 — $\tau = 0,015$, 2 — $\tau = 0,020$, 3 — $\tau = 0,025$; светлые точки — положение зоны диффузии, темные — минимальные значения деформаций

Следует отметить, что в модели без учета химической реакции значения деформаций и напряжений меньше, чем в модели с учетом реакции. Минимумы на кривых деформации, соответствующие границе диффузионной зоны (светлые точки на рис. 1,а), имеют место в случае использования модели, в которой учитывается наличие примеси и ее взаимодействие с основным материалом. В отсутствие потока массы (в термоупругой модели) максимумы на кривых деформации отсутствуют.

Пример 2. При действии на поверхность материала двух и более импульсов волновая картина становится более сложной. Детально динамика взаимодействия совместно распространяющихся волн показана на рис. 2 при $\tau_D < \tau_T$ ($\tau_D = 0,005$, $\tau_T = 0,02$), $\tau_{imp} = 0,04$. Длительность каждого импульса равна промежутку времени между окончанием действия первого импульса и началом действия второго импульса. В моменты времени, сравнимые со временем релаксации потока массы, распределение концентрации и температуры явля-

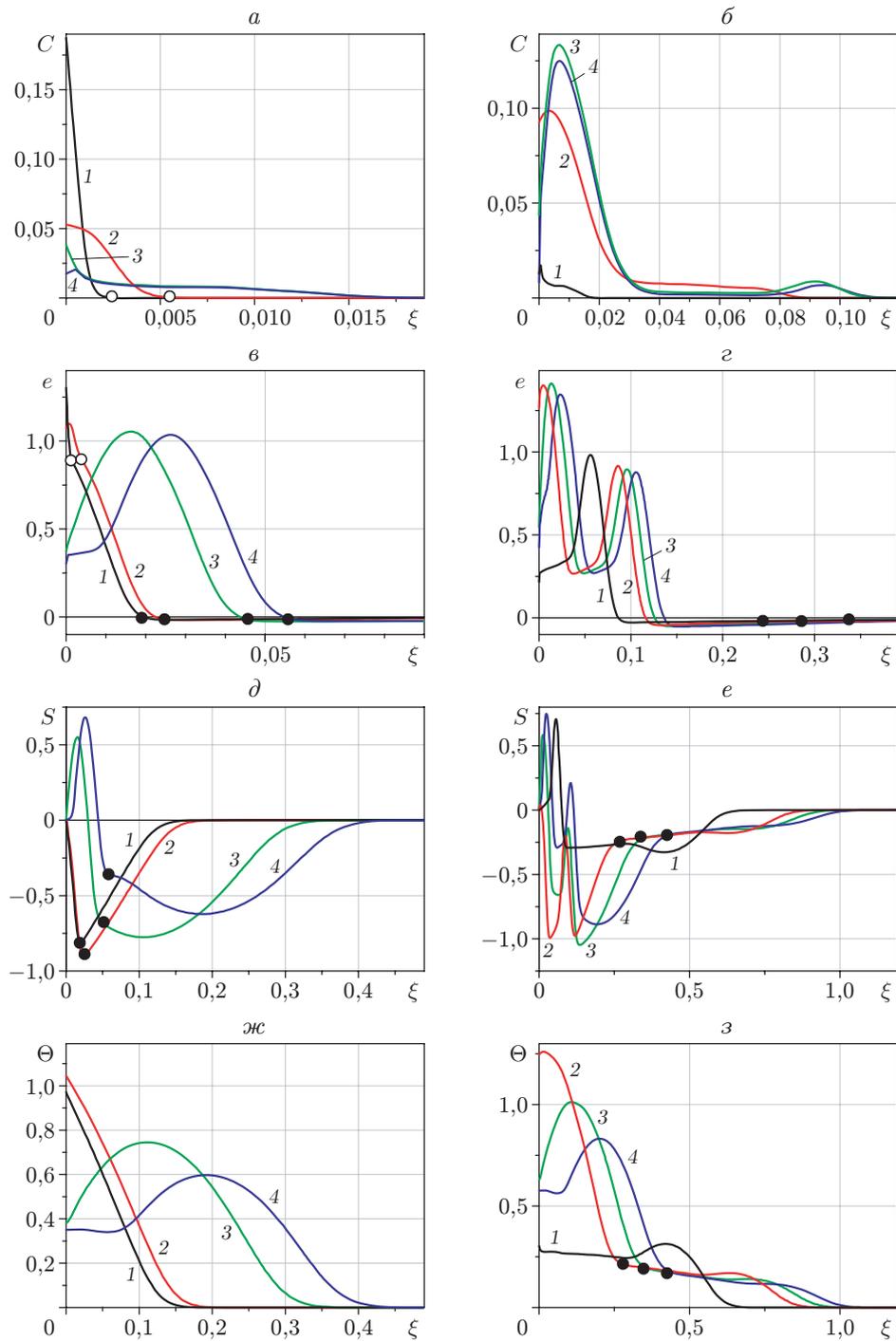


Рис. 2. Распределения концентрации примеси (не вступившей в реакцию) (*а, б*), деформаций (*в, з*), напряжений (*д, е*) и температуры (*ж, з*) в различные моменты времени при обработке поверхности двумя последовательно приложенными импульсами ($\gamma = 1,5$, $\gamma_P = -0,5$, $\tilde{m}_0 = 5,0$, $\tau_{ch} = 100,0$, $\Omega = 0,5$, $\tilde{\sigma}_0 = 0,001$, $Le = 0,003$, $\omega = 0,28$, $\tilde{q}_0 = 5,2$, $\beta_D = 0,025$, $\beta_{ch} = 0,3$, $M = 10,5$, $\chi = 0,55$, $\tau_T = 0,02$, $\tau_D = 0,005$, $\tau_{imp} = 0,04$):
а, в, д, ж — $\tau = 0,017 \div 0,050$ ($1 - \tau = 0,017$, $2 - \tau = 0,02$, $3 - \tau = 0,04$, $4 - \tau = 0,05$), *б, з, е, з* — $\tau = 0,08 \div 0,13$ ($1 - \tau = 0,08$, $2 - \tau = 0,11$, $3 - \tau = 0,12$, $4 - \tau = 0,13$)

ется практически линейным во всем поверхностном слое, за исключением малого участка на переднем фронте (см. рис. 2, *а, ж*). Положению переднего фронта волны концентрации соответствует перегиб на кривых деформаций, а нулевым деформациям — минимум на кривых напряжений.

В последующие моменты времени, близкие к моменту окончания действия первого импульса (кривые 3, 4 на рис. 2, *а, в, д, ж*), примесь быстро расходует на образование нового соединения; кривые температуры становятся более выпуклыми. По окончании действия первого импульса ($\tau = 0,04$) в течение промежутка времени, когда внешнее воздействие отсутствует и примесь не поступает ($0,04 < \tau \leq 0,08$), температура значительно уменьшается, реакция практически прекращается. Данному промежутку времени соответствует линейный участок на кривых температуры (кривая 4 на рис. 2, *ж* и кривая 1 на рис. 2, *з*). Максимумы на кривых температуры соответствуют минимумам на кривых напряжений, на кривых концентрации примеси появляется максимум.

При действии следующего импульса (кривые 2–4 на рис. 2, *б, г, е, з*) возобновляется химическая реакция в узкой области поверхностного слоя, где температура максимальна. Новые волны деформации, обусловленные этим воздействием, накладываются на имеющиеся, на кривых напряжений появляются новые экстремумы. Поскольку в данном случае температура выше, чем по окончании действия первого импульса, реакции продолжают как в течение времени действия импульса, так и после его прекращения. На кривых концентрации появляется небольшой экстремум на переднем фронте, что обусловлено распространением под действием напряжений не вступившей в химическую реакцию порции примеси. По мере удаления от поверхности все волны затухают.

При изменении соотношения между временами релаксации и длительностью импульса волновая картина изменяется. На динамику процесса значительное влияние оказывают также параметры γ , γ_P , Le , Ω , ω_0 .

Заключение. Таким образом, в работе представлена связанная модель обработки поверхности на начальной стадии импульсным потоком частиц с учетом формирования новой фазы в поверхностном слое.

Показано, что даже в нулевом приближении по коэффициенту связанности связанные задачи упругой диффузии и термоупругости не тождественны.

Представлены примеры волновых структур для различных соотношений времен релаксации потоков тепла и массы.

Установлено, что, несмотря на значительное различие характерных времен для разных процессов, от их взаимовлияния существенно зависит процесс взаимодействия волн. Исследована динамика процесса при действии двух последовательно приложенных импульсов.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Механика** связанных полей в элементах конструкций: В 5 т. / Под ред. А. Н. Гузя. Киев: Наук. думка, 1987–1989.
2. **Бардзокас Д. И.** Математическое моделирование в задачах механики связанных полей: В 2 т. / Д. И. Бардзокас, А. И. Зобнин, Н. А. Сенник, М. Л. Фильштинский. М.: КомКнига, 2005.
3. **Boley В. А.** Theory of thermal stresses / В. А. Boley, Н. J. Weiner. N. Y.; L.: Wiley, 1960.
4. **Подстригач Я. С.** Обобщенная термомеханика / Я. С. Подстригач, Ю. М. Коляно. Киев: Наук. думка, 1976.
5. **Lord Н., Shulman Y.** A generalized dynamical theory of thermoelasticity // J. Mech. Phys. Solids. 1967. V. 15. P. 299–309.

6. **Nowacki W.** Dynamical problems of thermodiffusion in solids. 1 // Bull. Acad. Pol. Sci. Ser. Sci. Technol. 1974. V. 22. P. 55–64.
7. **Даринский Б. М., Шермергор Т. Д.** К теории диффузионной релаксации в поликристаллах // ПМТФ. 1965. № 5. С. 84–89.
8. **Larché F., Cahn J. W.** A linear theory of thermochemical equilibrium of solids under stress // Acta Metallurg. 1973. V. 21, iss. 8. P. 1051–1063. DOI: 10.1016/0001-6160(73)90021-7.
9. **Rambert G., Grandidier J.-C., Aifantis E. C.** On the direct interactions between heat transfer, mass transport and chemical processes within gradient elasticity // Europ. J. Mech. A Solids. 2007. V. 26. P. 68–87.
10. **Шарма Дж. Н., Кумари Н., Шарма К. К.** Диффузия в обобщенном термоупругом бесконечном теле с цилиндрической полостью // ПМТФ. 2013. Т. 54, № 5. С. 154–168.
11. **Земсков А. В., Тарлаковский Д. В.** Двумерная нестационарная задача упругой диффузии для изотропного однокомпонентного слоя // ПМТФ. 2015. Т. 56, № 6. С. 102–110.
12. **Вершинин Г. А., Грекова Т. С., Геринг Г. И. и др.** Анализ формирования концентрационных полей в титане при имплантации ионов алюминия через осаждаемую на поверхность мишени газометаллическую пленку // Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исслед. 2012. № 3. С. 68–71.
13. **Букрина Н. В., Князева А. Г., Сергеев В. П.** Экспериментальные и численные исследования формирования переходных зон в процессе бомбардировки нитридного покрытия комбинированным потоком ионов // Поверхность. Рентген., синхротрон. и нейтрон. исслед. 2009. № 1. С. 83–92.
14. **Парфенова Е. С., Князева А. Г.** Неизотермическая механодиффузионная модель начальной стадии процесса внедрения потока частиц в поверхность мишени // Вычисл. механика сплош. сред. 2019. Т. 12, № 1. С. 36–47. DOI: 10.7242/1999-6691/2019.12.1.4.
15. **Парфенова Е. С., Князева А. Г.** Влияние параметров химической реакции на взаимодействие тепловых, диффузионных и механических волн в условиях обработки поверхности потоком частиц // Вычисл. механика сплош. сред. 2021. Т. 14, № 1. С. 77–89. DOI: 10.7242/1999-6691/2021.14.1.7.
16. **Демидов В. Н., Князева А. Г.** Коэффициенты переноса для трехкомпонентного деформируемого сплава // Вестн. Перм. гос. техн. ун-та. Механика. 2011. № 3. С. 84–99.

*Поступила в редакцию 20/IV 2021 г.,
после доработки — 20/IV 2021 г.
Принята к публикации 26/IV 2021 г.*
