

УДК 539.3+531+536-1

НЕЛИНЕЙНЫЕ МОДЕЛИ ТЕРМОУПРУГОЙ ДИФФУЗИИ

© 2011 г.

А.Г. Князева

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск
Томский политехнический университет

anna-knyazeva@mail.ru

Поступила в редакцию 15.06.2011

Строятся нелинейные модели упругой диффузии с использованием разных подходов к формулировке определяющих соотношений. В качестве примеров анализируются частные модели процессов поверхностной обработки потоками частиц. Анализируются физические причины возможных нелинейных эффектов.

Ключевые слова: диффузия в твердых телах, напряжения и усилия, термодинамика необратимых процессов, поверхностная обработка, нелинейные эффекты

Введение

Описание технологических процессов поверхностной модификации металлов с учетом взаимовлияния процессов массопереноса и деформирования приводит к появлению связанных моделей, которые позволяют объяснять нелинейные явления перемешивания и образования переходных слоев в динамических условиях, типичных для начальных стадий процессов обработки. Примерами технологий, где эти явления важны, могут быть обработка поверхностей металлов и сплавов потоками частиц высокой энергии. За малые времена возможны динамические эффекты, которые приводят к существенному изменению состава поверхностного слоя, которые не описываются в рамках традиционных представлений. Нелинейные диффузионные эффекты проявляются и в условиях квазистатического нагружения, и без нагрузки в условиях изотермического отжига, при химико-термической обработке и т.д. В настоящем исследовании изучается взаимовлияние процессов переноса примесей, дефектов и эволюции полей напряжений и деформаций на основе классической и обобщенной моделей термоупругой диффузии.

Общие положения

Исследование взаимовлияния диффузии и напряжений имеет довольно длинную историю. Обзор моделей термоупругих сред с диффузией (с единственной «дополнительной» переменной – концентрацией) с теоремами существования и взаимности представлен в [1], а [2] – пожалуй, единственная обстоятельная монография, посвя-

щенная моделированию в механике диффузионных явлений в средах с различными реологическими свойствами. Все частные модели, которые затем используются для описания диффузионных явлений в процессах обработки материалов, строятся на основе уравнений механики многокомпонентного континуума. Определяющие соотношения формулируются различным образом. Например, в рамках классической термодинамики необратимых процессов имеется две группы определяющих соотношений: первые следуют непосредственно из уравнения Гиббса, вторые есть следствие постулатов Онзагера о линейной связи между обобщенными потоками и силами при малом отклонении от равновесия. В обобщенной или расширенной термодинамике [3, 4] соотношения для потоков (в обобщенном смысле) включают времена релаксации для процессов разной физической природы. Известная аналогия между вязкими и упругими напряжениями без труда обобщается на многокомпонентные среды. В любом случае частные модели оказываются нелинейными, например вследствие зависимости свойств от состава, из-за зависимости коэффициентов переноса от структуры и физического механизма диффузии, по причине наличия внутренних границ раздела и т.д.

Пример модели

Для описания перераспределения примесей в трехкомпонентной системе в изотермических условиях требуются два диффузионных уравнения, уравнение движения и соотношения между компонентами тензоров напряжений и деформаций

$$\begin{aligned} \rho \left[\frac{\partial C_1}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla C_1 \right] &= \nabla \cdot [D_{11} \rho \nabla C_1] + \\ &+ \nabla \cdot [D_{12} \rho \nabla C_2] - \nabla \cdot [B_1 C_1 \nabla \sigma_{kk}^e], \\ \rho \left[\frac{\partial C_2}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla C_2 \right] &= \nabla \cdot [D_{21} \rho \nabla C_1] + \\ &+ \nabla \cdot [D_{22} \rho \nabla C_2] - \nabla \cdot [B_2 C_2 \nabla \sigma_{kk}^e], \\ \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} &= \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}^e, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}^e &= 2\mu \varepsilon_{ij} + \delta_{ij} \{ \lambda \varepsilon_{kk} - 3K[(\alpha_1 - \alpha_3) \times \\ &\times (C_1 - C_{10}) + (\alpha_2 - \alpha_3)(C_2 - C_{10})] \}, \end{aligned}$$

где C_i – концентрации компонентов; D_{ij} – парциальные коэффициенты диффузии (функции концентраций); B_i – коэффициенты переноса под действием напряжений, $B_i = 3\alpha_i m_i D_i^0 / RT$ (D_i^0 – коэффициенты самодиффузии, α_i – коэффициенты концентрационного расширения, m_i – молярные массы компонентов); \mathbf{u} , \mathbf{v} – векторы перемещений и скоростей; ε_{ij} , σ_{ij}^e – компоненты тензора малых деформаций и тензора напряжений и деформаций. При изучении медленных процессов на больших временах в уравнении движения можно пренебречь силами инерции, а при исследовании процессов в динамических условиях имеет смысл включить в уравнения для потоков компонентов слагаемые, связанные с релаксацией к состоянию равновесия, что придет к усложнению диффузионных уравнений.

Иллюстрация эффекта

Взаимовлияние диффузионных и механических процессов в динамических условиях иллюстрируется с помощью частных задач, возникающих при описании процессов обработки материалов потоками частиц. На рис. 1 изображены распределения элементов в поверхностном слое в некоторый момент времени в начальной стадии процесса ионной имплантации; а) $\kappa = 0.5$; б) $\kappa = 1$ ($D = D_2^0 / D_1^0 = 2$, $\kappa = m_2 \alpha_2 / m_1 \alpha_1$).

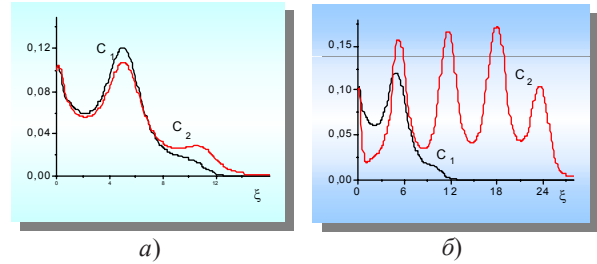


Рис. 1

Оказалось, что в условиях высокочастотной ионной имплантации период колебаний концентраций не совпадает с периодом волны напряжений вследствие взаимовлияния процессов разной физической природы. С одной стороны, чем легче диффузانت, тем он больше подвержен действию напряжений. С другой стороны, коэффициенты переноса под действием напряжений пропорциональны коэффициентам самодиффузии, поэтому второй элемент проникает в материал на большее расстояние.

Результат не сводится к изменению эффективного коэффициента диффузии под действием напряжений: имеет место механизм переноса, которым обычно пренебрегают при построении моделей поверхностной обработки.

Работа выполнена в рамках Государственного контракта №16.740.11.0122 и при финансовой поддержке РФФИ, грант №10-01-00034.

Список литературы

1. Aouadi M. // J. Thermal Stresses. 2008. V. 31. P. 270–285.
2. Kuiken G.D.C. Thermodynamics of irreversible processes. Applications to diffusion and theology. Chichester–NY: J Wiley and sons, 1994. 425 p.
3. Maugin G.A. The thermodynamics of nonlinear irreversible behaviors: An introduction. World Scientific Publishing Co., 1999. 392 p.
4. Жоу Д., Касас-Баскес Х., Лебон Дж. Расширенная необратимая термодинамика: Пер. с англ. М.–Ижевск: ИКИ РХД, 2006. 528 с.

NONLINEAR MODELS OF THERMO-ELASTIC DIFFUSION

А.Г. Князева

Nonlinear models of elastic diffusion are constructed, using various approaches to the formulation of the governing equation. The particular models of the processes of surface treatment by particle beams are analyzed as examples. Physical causes of possible nonlinear effects are discussed.

Keywords: diffusion in solids, stresses and strains, irreversible thermodynamics, surface treatment, nonlinear effects.