СТРУКТУРА, ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И ДИФФУЗИЯ

УДК 539.219.3.001

К ТЕОРИИ ФОРМИРОВАНИЯ ДИФФУЗИОННОЙ ЗОНЫ ПРИ ПОВЕРХНОСТНОЙ МОДИФИКАЦИИ МАТЕРИАЛОВ. УЧЕТ ТЕРМОДИФФУЗИОННЫХ ЭФФЕКТОВ

© 2021 г. А. Г. Кесарев^{*a*}, В. В. Кондратьев^{*a*}, И. Л. Ломаев^{*a*}, *

^аИнститут физики металлов УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620108 Россия

*e-mail: ilya.lomaev@imp.uran.ru Поступила в редакцию 28.05.2020 г. После доработки 30.09.2020 г. Принята к публикации 05.10.2020 г.

Используя асимптотические методы в теории дифференциальных уравнений, получено аналитическое приближенное решение задачи диффузии атомов внедрения в ограниченной среде при условии постоянного градиента температуры. Как следует из проведенного анализа, это решение применимо для пластинчатых образцов, испытывающих тепловую и ионную модификацию одной из поверхностей, толщина которых не превышает глубину диффузионного проникновения примесей при условии установления стационарного распределения температуры по толщине. Для аттестации предложенного метода проведено сравнение приближенного решения с численным расчетом задачи термодиффузии. Получены условия, при которых вклад термодиффузионных эффектов в общий диффузионный массоперенос примеси является существенным.

Ключевые слова: атомная диффузия, термодиффузия, эффект Соре, поверхностная модификация материалов

DOI: 10.31857/S0015323021020066

введение

Проблема описания атомной диффузии в приграничной области твердых тел, характеризующейся неоднородностью структуры, а также изменяющимися в ней условиями диффузионного процесса, тесно увязана с многочисленными методами поверхностной модификации материалов, направленными на получение необходимых физико-механических свойств. Современные методы модификации поверхности преимущественно основаны на создании неоднородных температурных условий (лазерный нагрев, сварка трением, использование магнитных, электрических полей и потоков заряженных частиц [1-3]), при которых вклад от термодиффузионных эффектов в общий массоперенос становится значительным. Множество практических исследований в этом направлении можно найти в журнале "Упрочняющие Технологии и Покрытия" (см., напр., статьи [4] и [5])

Кроме того, термодиффузионные модели могут успешно применяться к анализу процессов деградации защитных и упрочняющих покрытий на деталях с модифицированной поверхностью, работающих в высокотемпературных условиях, где градиент температур возникает естественным образом в процессе эксплуатации изделий. Развитие этих новых технологий обуславливает теоретический интерес к описанию приграничной диффузии в условиях неоднородной температуры, которое для реальных процессов поверхностной обработки материалов оказывается весьма сложным даже для численного моделирования. Поэтому развитие аналитических подходов в этом направлении представляет несомненный интерес.

Линеаризованные решения задачи массопереноса с учетом термодиффузии (эффекта Соре) были получены недавно в работах Князевой с сотр. [6-8]. Следует отметить, что такие решения, при которых не учитывается зависимость коэффициента диффузии от градиента теплового поля, пригодны при кратковременном воздействии на границу материала. При достаточно больших временах процесса (длительная обработка поверхности или деградация поверхностного слоя в условиях эксплуатации изделий) может быть реализован режим, когда диффузионный фронт уже достигает области, в которой температура заметно меняется с расстоянием. Получение аналитических решений именно для этих диффузионных задач представляется на сегодня актуальным.

Ранее, используя асимптотические методы в теории дифференциальных уравнений [9], нами

были получены аналитические решения задачи диффузии в полубесконечной неоднородной среде, когда коэффициент диффузии D(x) характеризуется координатной зависимостью от расстояния до границы x, для постоянного [10] и истощаемого [11] источников диффузанта. В работе [12] этот подход был обобщен при учете дрейфа диффузанта, вызванного неоднородным распределением неравновесных вакансий, и использован для интерпретации работ [1–3].

Как следует из проведенного анализа, во всех случаях полученные решения оказались удачными при условии, что диффузионная длина $l_d = 2\sqrt{D(x)t}$ не превосходит $L = |D(x)/D'(x)|_{x=0}$ — характерного масштаба изменения D(x). Это выполняется для широкой области времен диффузионного процесса

~ /

$$t < L^2/4D(0)$$
. (1)

Цель данной работы состоит в применении разработанного нами ранее аналитического подхода к решению диффузионной задаче, учитывающей дрейф атомов в поле градиента температуры (эффект Соре) и влияние этого градиента на координатную зависимость коэффициента диффузии D(x).

РЕШЕНИЕ ДИФФУЗИОННОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ СТАЦИОНАРНОГО ПОЛЯ ТЕМПЕРАТУРЫ

Ввиду сложности общей задачи возникает необходимость в максимальном ее упрощении. Ограничимся здесь рассмотрением диффузии атомов внедрения, что позволяет пренебречь вакансиями. Эффект сопутствующих диффузии внутренних напряжений можно учесть, вводя соответствующие поправки в термодинамический множитель в D(x, t) [13]. Пренебрежем также диффузионной теплопроводностью, вклад которой незначителен [8]. При однородных граничных условиях на поверхности материала приходим к одномерной задаче, в которой выражение для потока примеси J и потока тепла J_T в разбавленных растворах можно записать в следующем виде [14]:

$$J(x,t) = -D(x,t)\frac{\partial C}{\partial x} + Q^* \frac{D(x,t)C}{RT^2} \frac{\partial T}{\partial x},$$
 (2)

$$J_T(x,t) = -\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x}$$
, (b). (3)

Здесь C(x, t) — объемная концентрация, Q^* — тепло переноса (тепло, переносимое единичным потоком примеси в отсутствии градиента температуры [14]), R — газовая постоянная, λ — коэффициент теплопроводности, который, строго говоря, зависит от температуры T(x, t). Отсюда видно, что задачу для распространения тепла можно решать независимо от диффузионной задачи. Рассмотрим, как пример, случай поверхностной обработки металлической пластины. Подобный выбор геометрии связан, с одной стороны, с простотой математического анализа, с другой стороны — он позволяет качественно оценить характерные времена процессов и выявить условия, в которых нужно учитывать термодиффузионные явления. Локальный поверхностный нагрев, как отмечалось во введении, может быть осуществлен трением, различными потоками энергии или частиц (лазерный, индукционный нагрев, имплантация, плазменная обработка и т.п.).

Предположим, что толщина *h* пластины намного больше, чем характерная глубина диффузионного проникновения примеси ($h \ge 2\sqrt{Dt}$), но достаточно мала, чтобы в ней за короткое время устанавливался стационарный температурный режим. Это выполняется в большинстве материалов, так как скорость распространения тепла значительно превосходит скорость диффузии атомов. Тогда диффузионную часть задачи можно решать как для полубесконечного пространства с независящим от времени коэффициентом D(x), а распределение температуры считать по линейному закону:

$$T(x) = T_0 - (T_0 - T_h)(x/h),$$

$$T_0 = T(0), \quad T_h = T(h).$$
(4)

Далее будем считать, что на границе пластины с координатой h выполняется условие теплового равновесия, т.е. T_h – температура окружающей среды.

В данной работе мы предполагаем, что примесь проникает через одну из внешних поверхностей пластины. Источником диффузанта может быть слой, нанесенный на поверхность (при цементации), или атмосфера (при азотировании). Рассмотрим область x > 0, начальную концентрацию в которой положим равной нулю. Для постоянного источника при $t \ge 0$ концентрация поддерживается равной C_0 на поверхности пластины (x = 0). С учетом вышесказанного от выражения для потока (2) приходим к уравнению диффузии при некотором стационарном распределении температуры

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D(x) \frac{\partial C}{\partial x} - Q^* D(x) \frac{C(x)}{RT^2} \frac{\partial T}{\partial x} \right], \quad (5)$$

которое нужно решать при следующих начальных и граничных условиях:

$$C(x,0) = 0, \ C(0,t) = C_0, \ C(x \to \infty, t) \to 0.$$
 (6)

Решение диффузионной задачи (5), (6) подобно приведенному в работе [10] решению задачи для постоянного источника. Следуя ему, введем безразмерные переменные:

$$\xi = \frac{x}{L}, \quad \tau = \frac{D(0)t}{\left(\beta L\right)^2}, \quad \tilde{D} = D/D(0),$$

$$f = Q^*/RT, \quad n = C/C_0$$
(7)

и параметр β , причем величина βL имеет смысл диффузионной длины для атомов диффузанта. В рамках асимптотического метода полагается, что $\beta L \ll L$, т.е. $\beta \ll 1$ — малый параметр. Применим к уравнению (5) и условиям (6) преобразование Лапласа по времени [15]. В результате приходим к следующей краевой задаче:

$$p\overline{n} = \beta^2 \frac{d}{d\xi} \tilde{D}(\xi) \left[\frac{d\overline{n}}{d\xi} + \overline{n} \frac{df}{d\xi} \right]; \tag{8}$$

$$\overline{n}(\xi=0) = 1/p; \quad \overline{n}(\xi\to\infty)\to 0. \tag{9}$$

Решение уравнения (8) ищем в виде

$$\overline{n}(\xi) = K \exp[G(\xi, p)/\beta], \qquad (10)$$

где искомую функцию $G(\xi, p)$ представим в виде разложения по малому параметру β :

$$G(\xi, p) = G_0(\xi, p) + \beta G_1(\xi, p) + \dots$$
(11)

Подставляя (10) и (11) в выражение (8), приравнивая члены разложения при одинаковых степенях β и ограничиваясь двумя первыми членами разложения, находим уравнения для главного члена и первой поправки. С учетом условий (9), получаем приближенное решение задачи:

$$\overline{n}(\xi, p) = \frac{1}{p\sqrt[4]{\tilde{D}(\xi)}} \exp\left[\frac{f(0) - f(\xi)}{2}\right] \times \\ \times \exp\left[-\frac{1}{\beta}\int_{0}^{\xi} \sqrt{\frac{p}{\tilde{D}(\xi')}} d\xi'\right].$$
(12)

Наконец, используя формулу для обратного преобразования Лапласа [15]

$$\frac{e^{-\alpha\sqrt{p}}}{p} = \operatorname{erfc}\left(\frac{\alpha}{2\sqrt{\tau}}\right), \qquad (13)$$

возвращаемся к оригиналу изображения концентрации (12):

$$n(\xi) = \frac{1}{\sqrt[4]{\tilde{D}(\xi)}} \exp\left[\frac{f(0) - f(\xi)}{2}\right] \times \\ \times \operatorname{erfc}\left[\int_{0}^{\xi} \frac{d\xi'}{2\beta\sqrt{\tilde{D}(\xi')\tau}}\right].$$
(14)

После перехода к исходным переменным приходим к окончательному выражению для распределения концентрации:

$$C(x,t) = C_0 \exp\left[-\frac{(2Q^* - Q)}{4R}\left(\frac{1}{T(x)} - \frac{1}{T_0}\right)\right] \times \\ \times \operatorname{erfc}\left[\int_{0}^{x} \exp\left[\frac{Q}{2RT(x')}\right]\frac{dx'}{2\sqrt{D_0t}}\right],$$
(15)

в котором была использована аррениусовская зависимость $D(x) = D_0 \exp(-Q/RT(x))$, где Q – энергия активации диффузии. Выражение (15) можно записать в компактном виде:

$$n(x,u) = \exp\{-q[\eta(x) - \eta_0]\}\operatorname{erfc}(u), \quad (16)$$

где

$$q = \left(\frac{Q^*}{Q} - \frac{1}{2}\right), \quad \eta(x) = \frac{Q}{2RT(x)}, \quad \eta_0 = \eta(0),$$
$$u = \int_0^x \exp\left[\frac{Q}{2RT(x')}\right] \frac{dx'}{(2\sqrt{D_0 t})}.$$
(17)

Из выражения (16) видно, что за эффект Соре (дрейф атомов примеси) отвечает только экспоненциальный множитель. Зависимость коэффициента диффузии от координаты вследствие убывающей с расстоянием до границы температуры приводит к усилению крутизны концентрационного профиля. Более детальный анализ условий применимости выражения (15) и проявления термодиффузионных эффектов будет дан ниже.

УСЛОВИЯ ПРИМЕНИМОСТИ ПОЛУЧЕННОГО РЕШЕНИЯ

Приведем далее качественный анализ решения (15) для случая постоянного градиента температуры в пластине. Как уже отмечалось, выражение (15) было получено при условиях установления стационарной температуры и толщине пластины, значительно превышающей характерную диффузионную длину для примеси. Введем характерные времена t_T и t_L , при которых температура выходит на стационарный режим, и диффузионная длина достигает L – характерного масштаба изменения D(x), соответственно. Тогда при временах теплового и ионного воздействия t на границу материала, удовлетворяющих двойному неравенству

$$t_T < t < t_L, \tag{18}$$

выражение (15) можно использовать для описания концентрации в диффузионной зоне.

Для определения времени *t*_T рассмотрим задачу о распространении тепла в пластине толщиной

ФИЗИКА МЕТАЛЛОВ И МЕТАЛЛОВЕДЕНИЕ том 122 № 2 2021



Рис. 1. Решение задачи (5), (6) для $\overline{Q}^* = -10$ для времен: $t/t_L = 0.25$ (1), 1 (2), 2.5 (3), 5 (4).

h при граничных условиях (4) и начальном условии $T(x, t = 0) = T_h$:

$$c\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right].$$
(19)

Здесь ρ — плотность, *с* — удельная теплоемкость. Далее считаем $\lambda(T(x)) = \text{const}$, и введем $\kappa = \lambda/(c\rho)$ — температуропроводность. Решение этой задачи хорошо известно [16] и для нашего случая имеет вид:

$$T(x,t) = T_0 - (T_0 - T_h) \times \left\{ \frac{x}{h} + \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \sin\left(\frac{\pi n x}{h}\right) \exp\left[-\frac{\pi^2 n^2 \kappa t}{h^2}\right] \right\}.$$
 (20)

Определим t_T из условия, что максимальное значение 1-го члена в сумме на порядок меньше 1-го слагаемого в фигурной скобке (20) при x = h/2. В результате получим

$$t_T = \frac{\ln(40/\pi)}{\pi^2} \left(\frac{h^2}{\kappa}\right) = 0.26 \left(\frac{h^2}{\kappa}\right).$$
(21)

В пределе $x \to 0$ для t_T имеем близкое к (21) значение: $t_T = \pi^{-2} \ln(20) (h^2/\kappa) \simeq 0.3 (h^2/\kappa)$. Так как t_T определена нами по порядку величины, то численный коэффициент в (21) для всех x можно считать равным 0.3.

Характерное время t_L определим, заменяя неравенство (1) равенством. В случае постоянного градиента температуры в пластине величина Lравна

$$L = \left(\frac{RT_0}{Q}\right) \left(\frac{T_0}{T_0 - T_h}\right) h.$$
 (22)

Следует заметить, что при обычных значениях энергии активации Q и температур T_0 масштаб L оказывается значительно меньше толщины пластины h. Поэтому при

$$t < t_L = \left(\frac{RT_0}{Q}\right)^2 \left(\frac{T_0}{T_0 - T_h}\right)^2 \frac{h^2}{4D(0)}$$
(23)

диффузионную задачу в пластине можно считать как для полубесконечного пространства.

При выводе выражения для концентрации (15) использовалось разложение в ряд (11). Следуя нашим предыдущим работам [10–12], критерием корректности этого разложения является условие (см. (16)):

$$\left|q\frac{d\eta}{dx}\right| = \left|\frac{d}{dx}\left\{\frac{2Q^* - Q}{4RT(x)}\right\}\right| \ll \left|\frac{d}{dx}\ln\left[\operatorname{erfc}\left(u\right)\right]\right|.$$
(24)

Используя далее представление

$$\operatorname{erfc}(u) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-u^2\right) \left[u + \sqrt{u^2 + \alpha(u)}\right]^{-1}, \quad (25)$$

где $\alpha(u)$ — некоторая функция, удовлетворяющая неравенству: $4/\pi < \alpha(u) < 2$, можно показать, что условие (24) выполняется при достаточно малых временах диффузионного отжига. В частности, для линейного изменения T(x) отсюда получаем неравенство

$$t \ll t_M = \left(\frac{2RT_0}{2Q^* - Q}\right)^2 \left(\frac{T_0}{T_0 - T_h}\right)^2 \frac{h^2}{D(0)}.$$
 (26)

Так как t_L и t_M одного порядка малости (при $|Q^*| \approx Q$ отношение $t_L/t_M \approx 2$), то использование условий (23) и (26) практически эквивалентно.

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ПОЛУЧЕННОГО РЕШЕНИЯ

Для численного анализа полученного решения введем безразмерные координаты следующим образом:

$$\overline{T} \to \frac{T}{1000[K]}, \quad \overline{Q} \to \frac{Q}{1000R}, \quad \overline{Q}^* \to \frac{Q^*}{1000R},$$

$$\overline{x} \to \frac{x}{h}, \quad \overline{D}(x) \to \frac{D(x)}{D_0}, \quad \overline{t} \to t\frac{D_0}{h^2}.$$
(27)

Для типичных примесей внедрения в α -железе $\overline{Q} \approx 10, \ \overline{Q}^* \approx -12...-8$ (для С и N см., например, [14]). Численное решение задачи (5), (6) для случая $\overline{Q} = 10, \ \overline{Q}^* = -10, \ T(0,\overline{t}) = 1, \ T(1,\overline{t}) = 0.8, C(0) = 0$ и dC(1)/dx = 0 приведено на рис. 1 вместе с решением (15). Ошибка аппроксимации точного решения приведена на рис. 2. Видно, что для выбранных значений \overline{Q} и \overline{Q}^* уравнение (15) хорошо аппроксимирует точное решение в области

 $C > 10^{-5}$ практически на всем интервале 0 < x < 1 кроме области вблизи правой границы. Последнее, очевидно, связано с тем, что решение (15) получено для полупространства, в то время при численном решении поток на правой границе полагался равным нулю. Однако из рис. 1 видно, что даже при $t > t_L$ уравнение (15) хорошо аппроксимирует решение уравнения (5) вблизи левой границы.

На рис. 3 и 4 приведено решение задачи (5) для случая $\overline{Q} = 10$, $\overline{Q}^* = 10$. Видно, что в этом случае область применимости решения (15) ограничена временами порядка t_L . В результате серии расчетов было выяснено, что наибольшую область применимости решение (15) имеет для значений $\overline{Q}^* \approx -15...-5$, что обычно соответствует энергии термодиффузии примесей внедрения.

ОЦЕНКА ТЕРМОДИФФУЗИОННЫХ ЭФФЕКТОВ

В рамках полученного нами решения (15), (16) проанализируем теперь условия, при которых можно использовать две часто употребляемые аппроксимации: 1) Эффект Соре, обусловленный дрейфом диффузанта, пренебрежимо мал; 2) эффект Соре учитывается, но коэффициент диффузии считается постоянным. Первое приближение нами обсуждалось в похожей задаче [12], а второе является стандартным при малых временах поверхностной модификации материалов (см. [8]).

В первом случае, следуя обозначениям (17), введем $n^{(0)}$ – относительную концентрацию в отсутствие эффекта Соре ($Q^* = 0$). Тогда условие, когда можно пренебречь этим эффектом, можно записать в виде

$$\left|\frac{n}{n^{(0)}} - 1\right| = \left|\exp\left(-\frac{Q^*}{Q}(\eta - \eta_0)\right) - 1\right| < \delta,$$
(28)

где δ — некоторый малый параметр. Так как $\delta \ll 1$, то неравенство (28) выполняется только, если под знаком экспоненты стоит малая величина. Разлагая экспоненту в ряд и ограничиваясь первым членом разложения, приходим к условию, при котором эффект Соре можно не учитывать:

$$x < x_{\rm C} = \delta \frac{2RT_0}{|Q^*|} \left(\frac{T_0}{T_0 - T_h} \right) h.$$
 (29)

Здесь $x_{\rm C}$ — предельное значение координаты. Обратим внимание, что согласно (16) эффект Соре достигает максимума в области диффузионного фронта, когда $x_{\rm C} \approx 2\sqrt{D(0)t_{\rm C}}$ (здесь при малых *x* пренебрегаем координатной зависимостью D(x)).



Рис. 2. Ошибка аппроксимации точного решения выражением (15) для $\overline{O}^* = -10$ в разные моменты времени.



Рис. 3. Решение задачи (5), (6) для $\overline{Q}^* = 10$ для времен: $t/t_L = 0.1$ (1), 0.25 (2), 0.5 (3), 1 (4).



Рис. 4. Ошибка аппроксимации точного решения выражением (15) для $\overline{Q}^* = 10$ в разные моменты времени.

Диффузионные данные			Характерные времена			
<i>D</i> ₀ [17]	Q [17]	<i>Q</i> * [14]	t_L	t_M	t _C	t_D
$3.94 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{c}$	80.13 кДж/моль	—100.4 кДж/моль	50 ч	65 ч	45 c	0.7 c

Таблица 1. Диффузионные данные для углерода в α-железе и характерные времена процессов

Тогда условие (28) можно переписать для предельного времени $t_{\rm C}$:

$$t < t_{\rm C} = \left(\frac{RT_0}{Q^*}\right)^2 \left(\frac{T_0}{T_0 - T_h}\right)^2 \frac{(\delta h)^2}{D(0)}.$$
 (30)

Рассмотрим теперь случай, когда можно пренебречь координатной зависимостью коэффициента диффузии. Введем $n^{(1)}$ – относительную концентрацию в этом приближении, которое справедливо, если выполняется неравенство

$$\left|\frac{n}{n^{(1)}} - 1\right| < \delta,\tag{31}$$

аналогичное (28). Используя представление функции ошибок в виде (25), после серии преобразований приходим к следующему условию:

$$t \le t_D = \frac{\delta^2}{|\ln \delta|^3} \left(\frac{RT_0}{Q}\right)^2 \left(\frac{T_0}{T_0 - T_h}\right)^2 \frac{h^2}{D(0)},$$
 (32)

где t_D — предельное время, до которого можно не учитывать координатную зависимость D(x).

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Рассмотрим в качестве примера диффузию углерода в железной пластине и оценим характерные времена процессов, полученные в работе: t_T – время установления стационарного температурного поля (21); времена t_L (23) и t_M (26), до которых можно считать полученное нами выражение для концентрации удовлетворительным; а также предельных времен $t_{\rm C}$ (30) и t_D (32), когда можно пренебречь эффектом Соре и координатной зависимостью D(x), соответственно. Примем толщину пластины равной 1 см, а значения температур на поверхностях – $T_0 = 800^{\circ}$ С, $T_h = 600^{\circ}$ С. Используем следующие данные для железа [17]: плотность $\rho = 7.87 \times 10^3$ кг/м³ (тепловым расширением пренебрегаем) и средние для данного температурного интервала значения теплопроводности $\overline{\lambda}$ = 34.3 Вт/м/К, теплоемкости \overline{c} = 745 Дж/кг/К и температуропроводности $\overline{\kappa} = 5.85 \times 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с. Вна$ чале по формуле (21) находим время установления температурного поля $t_T \simeq 5c$. Так как времена отжига, как будет показано ниже, исчисляются часами, то можно утверждать, что диффузионная зона

формируется в условиях стационарного поля распределения температуры.

Диффузионные данные для углерода в ОЦКжелезе приведены в табл. 1. Значение малого параметра примем равным $\delta = 0.1$. Используя эти данные по формулам (23), (26), (30) и (32), находим характерные времена задачи (см. табл. 1).

Поскольку $\overline{Q}^* = -12$, то можно считать, что решение удовлетворительно работает до времен порядка 2.5 t_L (см. рис. 1). Таким образом, решение термодиффузионной задачи (15) для данного конкретного случая должно быть применимым при временах, превосходящих 5 с и не превосходящих 2.5 $t_L = 125$ ч. Из табл. 1 также видно, что время, в течение которого можно пренебречь координатной зависимостью коэффициента диффузии, оказываются значительно меньше, чем время установления температурного поля. Следовательно, использование этого приближения при стационарном тепловом режиме не корректно.

выводы

Используя асимптотические методы в теории решения дифференциальных уравнений, получено приближенное аналитическое решение задачи термодиффузии атомов внедрения в пластине при стационарном распределении температуры.

Найдены условия, при которых приближенное решение задачи термодиффузии (15) применимо. Эти условия проиллюстрированы на конкретном примере диффузии углерода в ОЦК-железе. Показано, что диффузионный процесс практически сразу протекает в стационарном температурном поле. Из проведенных численных расчетов также следует, что аналитическое решение задачи (15) является удачным в широком интервале времен отжига.

Показано, что при стационарном распределении температуры следует учитывать все термодиффузионные эффекты. Если тепло переноса и энергия активации диффузии величины одного порядка, то нельзя пренебрегать эффектом Соре, также нельзя пренебрегать координатной зависимостью коэффициента диффузии.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме Давление № АААА-А18-118020190104-3.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. *Iton T., Inada T., Kanekawa K.* Doping of silicon by ion implantation // Appl. Phys. Lett. 1968. V.12. № 8. P. 244–246.
- Iton T., Ohdomari I. Analysis of radiation–enhanced diffusion of aluminium in silikon // J. Appl. Phys. 1970. V. 41. № 1. P. 434–436.
- 3. *Kurata M., Morikawa Y., Nagami K., Kuroda H.* Remarks on the vacancy mechanisms in ion implantation // Japan J. Appl. Phys. 1973. V. 12. № 3. P. 472–473.
- 4. Белашова И.С., Тарасова Т.В. Исследование кинетики массопереноса при лазерном легировании конструкционных сталей углеродом и кремнием в режиме оплавления поверхности // Упрочняющие технологии и покрытия. 2007. № 4. С. 34–38.
- 5. *Гурка А., Коцаньда Д.* Массоперенос в высокоградиентном тепловом поле при сварке трением и модификации верхнего слоя // Phys. Mechan. Mater. 2011. № 2. P. 93–98.
- 6. *Князева А.Г., Чепак-Гизбрехт М.В.* Неизотермическая диффузия в бинарной системе // Изв. вузов. Физика. 2011. Т. 54. № 11/3. С. 39–46.
- 7. *Князева А.Г., Чепак-Гизбрехт М.В.* Влияние термодиффузии на перераспределение легирующего элемента между покрытием и подложкой в условиях поверхностного нагрева // Изв. вузов. Физика. 2013. Т. 56. № 12/2. С. 46–51.
- 8. Чепак-Гизбрехт М.В. Моделирование процессов в диффузионной зоне в условиях поверхностной

термообработки с учетом эффекта Соре / Автореферат диссертации на соискание ученой степени к. ф.-м. н., на правах рукописи. Национальный исследовательский Томский политехнический университет. Томск. 2017. 24 с.

- 9. *Найфе А*. Введение в методы возмущений. М.: Мир, 1984. 535 с.
- Кесарев А.Г., Кондратьев В.В. К теории диффузии в неоднородных средах. Малые времена процесса // ФММ. 2008. Т. 106. № 4. С. 341–345.
- Кесарев А.Г., Кондратьев В.В., Ломаев И.Л. К теории диффузии в неоднородных средах. Тонкопленочный источник диффузанта // ФММ. 2017. Т. 118. № 9. С. 917–923.
- Кесарев А.Г., Кондратьев В.В., Ломаев И.Л. К теории атомной диффузии после ионной имплантации // ФММ. 2018. Т. 119. № 11. С. 1160–1165.
- Процессы взаимной диффузии в сплавах / Под редакцией К.П. Гурова М.: Наука, 1974. 360 с.
- 14. Бокштейн Б.С., Бокштейн С.З., Жуховицкий А.А. Термодинамика и кинетика диффузии в твердых телах. М.: Металлургия, 1974. 280 с.
- 15. Диткин В.А., Прудников А.П. Справочник по операционному исчислению. М.: Высшая школа, 1965. 466 с.
- 16. *Карслоу Т., Егер Д*. Теплопроводность твердых тел. М.: Наука, 1964. 488 с.
- 17. Смитлз К.Дж. Металлы. М.: Металлургия, 1980. 446 с.