

УДК 536-12:519.633

DOI 10.17223/19988621/62/9

Е.С. Парфенова

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ИМПЛАНТИРУЕМОЙ ПРИМЕСИ ПРИ ОБРАБОТКЕ ПОВЕРХНОСТИ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫМИ ИМПУЛЬСАМИ¹

Рассмотрено математическое моделирование начальной стадии поверхностной обработки материала потоком частиц с использованием двух последовательных импульсов. Описана математическая постановка задачи в размерных и безразмерных переменных. Модель учитывает конечность времен релаксации потоков тепла и массы, взаимодействие процессов разной физической природы – распространение механических возмущений и диффузии внедряемого материала. Разработанный численный алгоритм основан на неявной разностной схеме. Приведены примеры решения связанной задачи при обработке одним и двумя импульсами, выявлены различия в получаемых распределениях.

Ключевые слова: математическое моделирование, неизотермическая связанная модель, диффузия, напряжения, деформации, время релаксации, поток частиц, последовательные импульсы.

Перспективными методами повышения эксплуатационных характеристик материалов является импульсное воздействие на его поверхность высококонцентрированными источниками энергии – электронными, лазерными, ионными пучками, компрессионными плазменными потоками [1 – 3].

Большое влияние на получаемый результат кроме выбора материалов для проведения эксперимента оказывает правильный подбор параметров обработки. Это относится и к определению количества импульсов, иногда достаточно ограничиться одним импульсом, а порой приходится значительно увеличить число воздействий. В работе [4] рассмотрены случаи обработки стальной подложки разным количеством импульсов, установлено, что увеличение числа импульсов приводит к более однородной обработке поверхности. В [5] показано, что повышение суммарной мощности воздействия на образец (увеличение числа импульсов и уменьшение расстояния между образцом и анодом установки) ведет к уменьшению периода решетки из-за действия остаточных макронапряжений, вызванных импульсным плазменным воздействием. Экспериментально показано, что увеличение количества импульсов до 10 приводит к повышению микротвердости обрабатываемых стальных образцов, но дальнейшее увеличение их количества уже снижает микротвердость [6]. Поэтому теоретические исследования процессов многоимпульсной обработки потоком частиц весьма актуальны, поскольку позволяют дать рекомендации по оптимальному выбору числа импульсов в каждом конкретном случае без значительных затрат.

¹ Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.

Как и любой процесс обработки, модификация поверхности потоком заряженных частиц сопровождается протеканием разных физических и химических явлений. Взаимодействие некоторых из них может качественно сказаться на получаемом результате. Иными словами, в теоретических работах необходимо исследование взаимовлияния всевозможных процессов, протекающих совместно, для выявления особенностей этого взаимодействия. Например, в [7] учитываются напряжения в системе покрытие – подложка, возникающие в процессе осаждения. Это приводит к изменению эффективных коэффициентов переноса и оказывает значительное влияние на распределения химических элементов и их соединений в покрытии. В экспериментальной работе [8] показано, что упругие напряжения оказывают влияние на скорость диффузии бора в кремнии. Многие авторы при теоретическом исследовании взаимодействия напряжений и концентрации (диффузии) используют не связанные модели, то есть рассчитывают поле напряжений по независимо полученным данным о концентрации и наоборот [9]. В некоторых работах встречаются изотермические модели, которые не всегда подходят для описания реальных процессов обработки [10]. Достаточно подробно описан процесс внедрения потока частиц в поверхность подложки при одноимпульсной обработке с покрытием на подложке [11] и без покрытия [12]. Установлена взаимосвязь между процессами распределения напряжений (деформаций) и концентрации внедряемой примеси. В настоящей работе проведены аналогичные расчеты, но для случая обработки двумя последовательными импульсами.

Цель работы заключается в рассмотрении процесса поверхностной обработки двумя последовательными импульсами и сравнения полученных результатов с результатами, полученными при обработке одиночным импульсом. Полагается, что общее время воздействия на поверхность подложки одинаково для обоих случаев.

Математическая постановка задачи

Воспользуемся математической моделью, представленной в [12]. Процесс взаимодействия потока заряженных частиц с поверхностью мишени можно описать в рамках модели, включающей уравнения неразрывности и теплопроводности, а также уравнение баланса компонента и уравнение движения:

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} ; \quad (1)$$

$$\rho C_{\sigma} \frac{dT}{dt} + \alpha_T T \frac{d\sigma_{kk}}{dt} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_q ; \quad (2)$$

$$\rho \frac{dC}{dt} = -\nabla \cdot \mathbf{J} ; \quad (3)$$

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} , \quad (4)$$

где ρ – плотность обрабатываемого материала; C – концентрация имплантируемого материала; $\mathbf{J}$ – поток массы; $\mathbf{J}_q$ – поток тепла; $\boldsymbol{\sigma}$, σ_{kk} – компоненты тензора напряжений в направления облучения и первый инвариант тензора напряжений; T – температура; α_T – коэффициент теплового расширения; C_{σ} – удельная теплоемкость, $\mathbf{v}$ – среднемассовая скорость.

Определяющие соотношения соответствуют теории обобщенной термоупругой диффузии [13 – 15].

В соответствии с термодинамикой необратимых процессов потоки тепла и массы с учетом времен релаксации тепла и массы записываем в виде [13–16]

$$\mathbf{J} = -\rho D \nabla C + BC \nabla \boldsymbol{\sigma}_{kk} - t_D \frac{d\mathbf{J}}{dt}; \quad (5)$$

$$\mathbf{J}_q = -\lambda_T \nabla T - t_q \frac{d\mathbf{J}_q}{dt}, \quad (6)$$

где $B = D^0 m \Delta \alpha / RT$ – коэффициент переноса под действием напряжений; $D^0 = D_0 \exp(-E_a / RT)$ – коэффициент самодиффузии; $D = D^0 f(C)$ – коэффициент диффузии; $f(C)$ – функция, учитывающая зависимость коэффициента диффузии от состава; R – универсальная газовая постоянная, m – молярная масса; t_D – время релаксации потока массы; t_q – время релаксации потока тепла; λ_T – теплопроводность; $\Delta \alpha = \alpha - \alpha_0$ – разность коэффициентов концентрационного расширения внедряемого элемента α и элемента, составляющего основу α_0 (или эффективного коэффициента в случае многокомпонентных материалов).

Функция $f(C)$ для большего класса материалов может быть записана в виде

$$f(C) = a + bC + dC^2 > 0.$$

Если $f(C) = 1$, коэффициент диффузии D равен коэффициенту самодиффузии D^0 .

В случае малых перемещений и малых деформаций имеют место соотношения Коши

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (7)$$

где $u_{i,j}$ – перемещения.

Приращения компонентов тензоров деформаций связаны с приращениями компонентов тензора упругих напряжений, концентраций и температуры обобщенными соотношениями:

$$d\boldsymbol{\sigma}_{ij} = 2\mu d\varepsilon_{ij} + \delta_{ij} (\lambda d\varepsilon_{kk} - K d\omega), \quad (8)$$

где $\omega = 3[\alpha_T(T - T_0) + \Delta \alpha(C - C_0)]$ – функция температуры и концентрации, μ , λ – коэффициенты Ламе (коэффициент μ совпадает с модулем сдвига), K – изотермический модуль всестороннего сжатия, $K = \lambda + 2\mu/3$.

Принимаем ряд упрощений:

- Деформации, скорости и ускорения считаем малыми. Тогда нет необходимости в уравнении (1), а правая часть уравнения движения (4) принимает вид

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} \approx \rho_0 \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla \cdot \mathbf{v} \right) \approx \rho_0 \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2}.$$

- Поток равномерно распределен вдоль обрабатываемой поверхности, поэтому можно ограничиться одномерной задачей.

В результате получаем систему одномерных связанных уравнений

$$\rho \frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial \mathbf{J}}{\partial x}; \quad (9)$$

$$\rho C_\sigma \frac{\partial T}{\partial t} + \alpha_T T \frac{\partial \sigma}{\partial t} = -\frac{\partial \mathbf{J}_q}{\partial x}; \quad (10)$$

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma}{\partial x}; \quad (11)$$

$$\mathbf{J} = -\rho D \frac{\partial C}{\partial x} + BC \frac{\partial \sigma}{\partial x} - t_D \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t}; \quad (12)$$

$$\mathbf{J}_q = -\lambda_T \frac{\partial T}{\partial x} - t_q \frac{\partial \mathbf{J}_q}{\partial t}; \quad (13)$$

$$\sigma = E[\varepsilon - \alpha_T (T - T_0) - \Delta \alpha (C - C_0)]; \quad (14)$$

$$\varepsilon = \frac{\partial u}{\partial x}. \quad (15)$$

Начальные и граничные условия для (9) – (15) имеют вид

$$x = 0: \mathbf{J} = m_0 \Phi(t); \mathbf{J}_q = q_0 \Phi(t); \sigma = \sigma_0 \Phi(t).$$

$$x \rightarrow \infty: C = 0, \sigma = 0.$$

$$t = 0: C = 0, \sigma = 0, T = T_0, \frac{\partial C}{\partial t} = 0, \frac{\partial \sigma}{\partial t} = 0.$$

Используя соотношения (14) и (15), в приближении одноосного нагружения получаем систему трех уравнений: для концентрации внедряемой примеси C , напряжений в направлении нагружения σ и температуры T :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + t_D \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{BC}{\rho} \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right]; \quad (16)$$

$$\frac{\rho}{E} \frac{\partial^2 \sigma}{\partial t^2} + \rho \alpha_T \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \rho \Delta \alpha \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \sigma}{\partial x^2}; \quad (17)$$

$$\rho C_\sigma \left[t_q \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \frac{\partial T}{\partial t} \right] = \frac{\partial}{\partial x} \left[\lambda_T \frac{\partial T}{\partial x} \right] - \alpha_T T \frac{\partial \sigma}{\partial t} - t_q \frac{\partial}{\partial t} \left(\alpha_T T \frac{\partial \sigma}{\partial t} \right). \quad (18)$$

Для численной реализации модели удобнее перейти к безразмерным переменным:

$$\tau = \frac{t}{t_*}; \xi = \frac{x}{x_*}; S = \frac{\sigma}{\sigma_*}; \Theta = \frac{T - T_0}{T_* - T_0}; e = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_*}, \quad (19)$$

где t_* , x_* , σ_* , T_* , ε_* – масштабы для t , x , σ , T , ε соответственно.

Система (16) – (18) в безразмерных переменных (19) примет вид

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} + \tau_D \frac{\partial^2 C}{\partial \tau^2} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[F(\Theta) \frac{\partial C}{\partial \xi} \right] - M \Omega \gamma \frac{\partial}{\partial \xi} \left[C \frac{F(\Theta)}{\Theta + \Psi} \frac{\partial C}{\partial \xi} \right]; \quad (20)$$

$$\tau_q \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \tau^2} + \frac{\partial \Theta}{\partial \tau} = \frac{1}{Le} \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \xi^2} - \Omega (\Psi + \Theta) \frac{\partial S}{\partial \tau} - \tau_q \Omega \frac{\partial}{\partial \tau} \left[(\Theta + \Psi) \frac{\partial S}{\partial \tau} \right]; \quad (21)$$

$$\frac{\partial^2 S}{\partial \tau^2} + \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \tau^2} + \gamma \frac{\partial^2 C}{\partial \tau^2} = \frac{\partial^2 S}{\partial \xi^2}. \quad (22)$$

Граничные и начальные условия:

$$\xi = 0: \mathbf{J} = \mu_0 \varphi(\tau), \mathbf{J}_q = \varphi(t); S = S_0 \varphi(\tau). \quad (23)$$

$$\xi \rightarrow \infty: \frac{\partial \Theta}{\partial \xi} = 0; \frac{\partial C}{\partial \xi} = 0; S = 0, \text{ тогда } e = \Theta + \gamma(C - C_0). \quad (24)$$

$$\tau = 0: C = 0; S = 0; \frac{\partial C}{\partial \tau} = 0; \frac{\partial S}{\partial \tau} = 0; \Theta = \Theta_0. \quad (25)$$

Выражения (12) – (14) в безразмерных переменных принимают вид:

$$\mathbf{J} = -F(\Theta) \frac{\partial C}{\partial \xi} + \frac{F(\Theta)}{(\Psi + \Theta)} \gamma C M \Omega \frac{\partial S}{\partial \xi} - \tau_D \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial \tau}; \quad (26)$$

$$\mathbf{J}_q = -\frac{\partial \Theta}{\partial \xi} - \tau_q \frac{\partial \mathbf{J}_q}{\partial \tau}; \quad (27)$$

$$S = (e - \Theta - \gamma(C - C_0)). \quad (28)$$

Система (19) – (25) была решена численно по неявной разностной схеме второго порядка как по времени, так и по координате.

Результаты и обсуждение

Как и в работе [12], для расчетов выбраны Мо (основа) и Ni (внедряемый материал). Это позволит сравнить полученные решения для случая обработки одним и двумя импульсами. Общее время воздействия принимаем одинаковым для обоих случаев ($\sum \tau_{\text{imp}} = 0.02$). Числовые значения параметров модели приведены в таблице.

Значения параметров модели

Параметр	γ	Le	Ω	M	μ_0
Выражение	$\frac{\alpha - \alpha_0}{\alpha_T (T_* - T_0)}$	$\frac{D(T_*)}{\lambda_T / (\rho C_\sigma)}$	$\frac{\alpha_T^2 E}{\rho C_\sigma} (T_* - T_0)$	$\frac{m C_\sigma}{R}$	$\frac{m_0}{\sqrt{\rho E}}$
Mo(Ni)	-0.003	40.7	0.002	10.5	0.05
Параметр	S_0	τ_D	τ_q	β	Ψ
Выражение	$\frac{\sigma_0 D(T_*) \rho}{\sigma_* E}$	$\frac{t_D E}{D \rho}$	$\frac{t_q E}{D \rho}$	$\frac{R(T_* - T_0)}{E_a}$	$\frac{T_0}{(T_* - T_0)}$
Mo(Ni)	0.001	0.03	0.006	0.0018	110.0

Внешнее воздействие определяется выражениями:

$$\text{Один импульс} - \quad \varphi(\tau) = \begin{cases} 0.02 \sin\left(\frac{\pi \tau}{0.02}\right), & \tau \leq 0.02, \\ 0, & \tau > 0.02. \end{cases}$$

$$\text{Два импульса} - \quad \varphi(\tau) = \begin{cases} 0.02 \sin\left(\frac{\pi \tau}{0.01}\right), & 0 < \tau \leq 0.01, \quad 0.02 < \tau \leq 0.03, \\ 0, & 0.01 < \tau \leq 0.02, \quad \tau > 0.03. \end{cases}$$

Для моментов времени меньших и сравнимых с τ_q по мере проникновения примеси в глубь образца увеличивается как максимум в деформациях, так и минимум. Положение переднего фронта волны концентрации никак не сказывается на профиле деформаций. Получаемые решения на данном этапе аналогичны решениям, представленным в работе [12].

На рис. 1 подставлены распределения концентрации внедряемой примеси и деформаций в моменты времени сравнимые с длительностью первого импульса. На концентрационной волне определяется первый максимум, которому соответствует дополнительный экстремум на волне деформации. Для момента времени $\tau = 0.008$ (кривая 3) на графиках представлены распределения для обработки

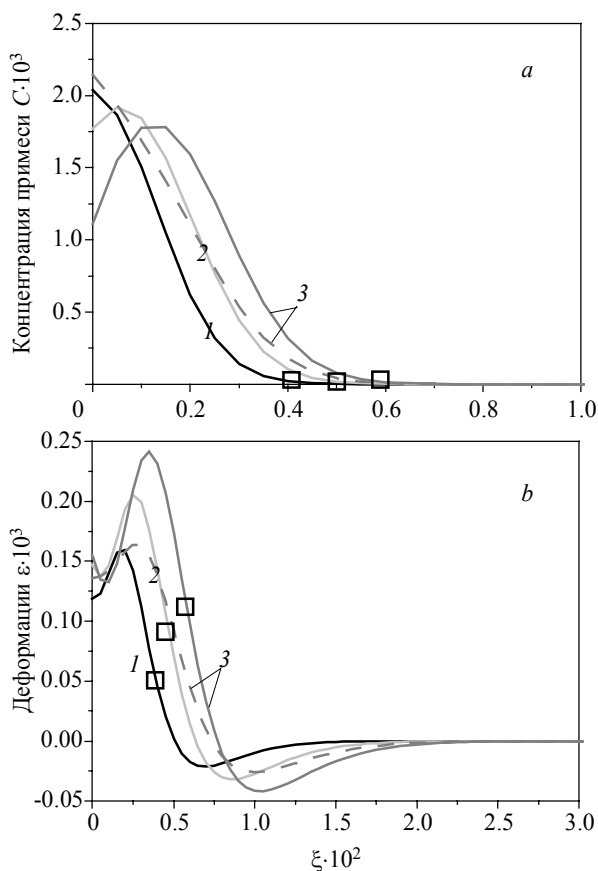


Рис. 1. Пример решения связанной задачи для системы Mo(Ni): *a* – распределение концентрации диффузанта Ni; *b* – профили волн деформации. Пунктирные кривые – обработка одним импульсом; Сплошные – двумя. Моменты времени τ : 1 – 0.005, 2 – 0.0065, 3 – 0.008

Fig. 1. An example of coupled problem solution for system Mo(Ni): profiles of (*a*) Ni concentration and (*b*) deformation waves. The dashed lines indicate the treatment by one pulse; the solid lines, the treatment by two pulses. Time instants: $\tau =$ (1) 0.005; (2) 0.0065; and (3) 0.008

одним (пунктирная линия) и двумя (сплошная линия) импульсами. Видно, что в первом случае на волне концентрации только начинает формироваться максимум, а максимальное и минимальное значения деформаций меньше, чем при двухимпульсной обработке.

На рис. 2 представлены распределения для момента времени $\tau = 0.03$, когда заканчивается внешнее воздействие при двухимпульсной обработке. Вполне очевидно, что основное отличие двух способов обработки – количество экстремумов на волнах.

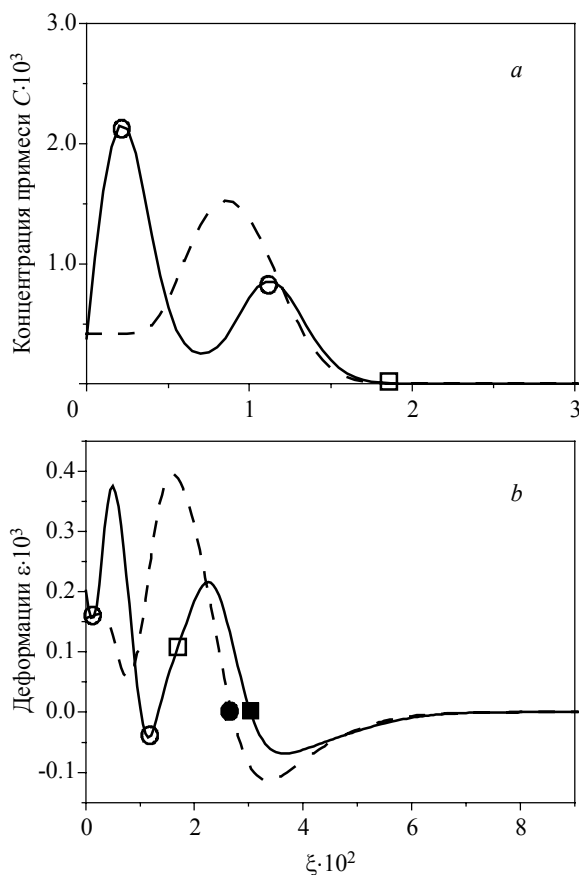


Рис. 2. Пример решения связанной задачи для системы Mo(Ni): *a* – распределение концентрации диффузанта Ni; *b* – профили волн деформации. Пунктирные кривые – обработка одним импульсом; Сплошные – двумя. Момент времени $\tau = 0.03$

Fig. 2. An example of coupled problem solution for system Mo(Ni): profiles of (*a*) Ni concentration and (*b*) deformation waves. The dashed lines indicate the treatment by one pulse; the solid lines, the treatment by two pulses. The time instant is $\tau = 0.03$

Если рассмотреть распределения температуры (рис. 3), то видно, что при обработке одним импульсом профиль более равномерный. На графиках отмечена область смены знака деформаций (рис. 2, *b*) – $\xi = 2.8$ (один импульс, закрашенный круг), $\xi = 3.0$ (два импульса, закрашенный квадрат), на волне температуры в этом месте имеется изгиб (рис. 3 *a, b*).

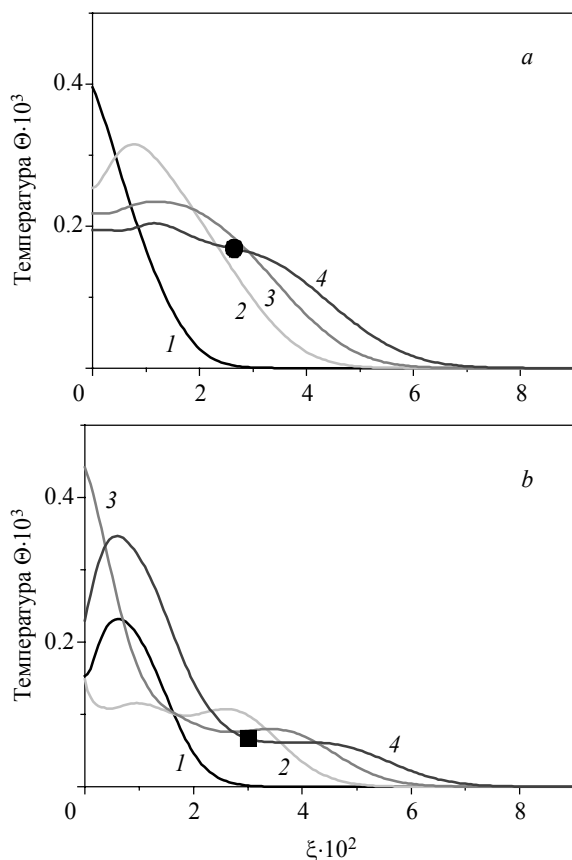


Рис. 3. Пример решения связанной задачи для системы Mo(Ni): *a* – распределение температуры при одноимпульсной обработке; *b* – распределение температуры при двух импульсной обработке. Моменты времени τ : 1 – 0.01, 2 – 0.02, 3 – 0.025, 4 – 0.03

Fig. 3. An example of coupled problem solution for system Mo(Ni): temperature profiles at a treatment by (*a*) one pulse and (*b*) two pulses. Time instants: $\tau = (1)$ 0.01; (2) 0.02; (3) 0.025; and (4) 0.03

Независимо от количества внешних воздействий, механизмы взаимодействия между волнами деформаций и напряжений, отмеченные в [12], сохраняются. На (рис. 4) представлены распределения для моментов времени $\tau > \tau_D, \tau_{imp}, \tau_q$. Видимые изменения появляются на волне деформаций. Искажению формы волны деформаций соответствуют положения переднего фронта волны концентрации.

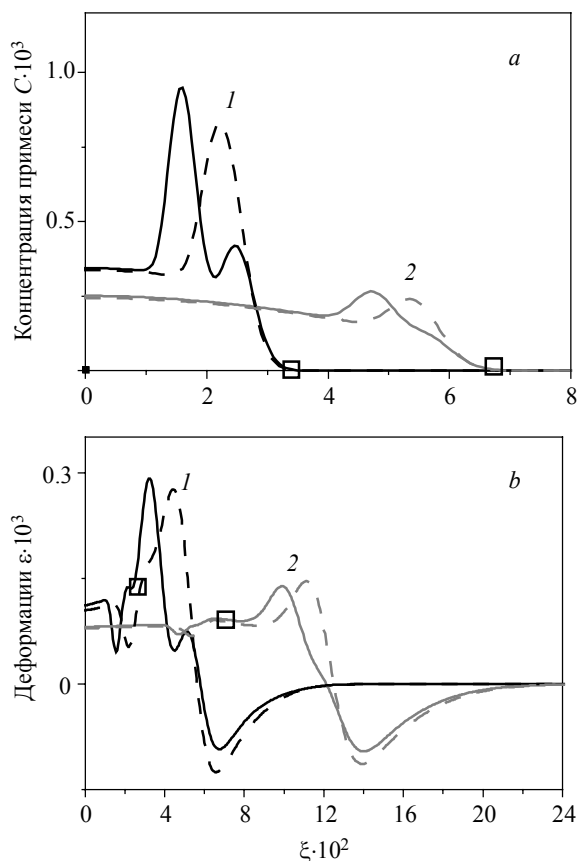


Рис. 4. Пример решения связанной задачи для системы Mo(Ni): *a* – распределение концентрации диффузанта Ni; *b* – профили волн деформации. Пунктирные кривые – обработка одним импульсом; сплошные – двумя. Момент времени τ : 1 – 0.06; 2 – 0.13

Fig. 4. An example of coupled problem solution for system Mo(Ni): profiles of (*a*) Ni concentration and (*b*) deformation waves. The dashed lines indicate the treatment by one pulse; the solid lines, the treatment by two pulses. Times instants: $\tau = (1) 0.06$ and $(2) 0.13$

Для более поздних моментов времени диффузия примеси не вносит никакого вклада в распространение нелинейных волн деформации и температуры (рис. 5).

Волна концентраций значительно отстает от других волн. Температура стремится к исходному значению, после достижения которого (закрашенный квадрат рис. 5, *c*), наблюдается ее незначительное повышение. Видно, что увеличение количества импульсов приводит к уменьшению значений деформаций на глубине, причем, чем больше временной промежуток между воздействиями, тем меньше экстремумы деформаций. На распределениях концентрации внедряемой примеси и температуры значительных изменений не наблюдается.

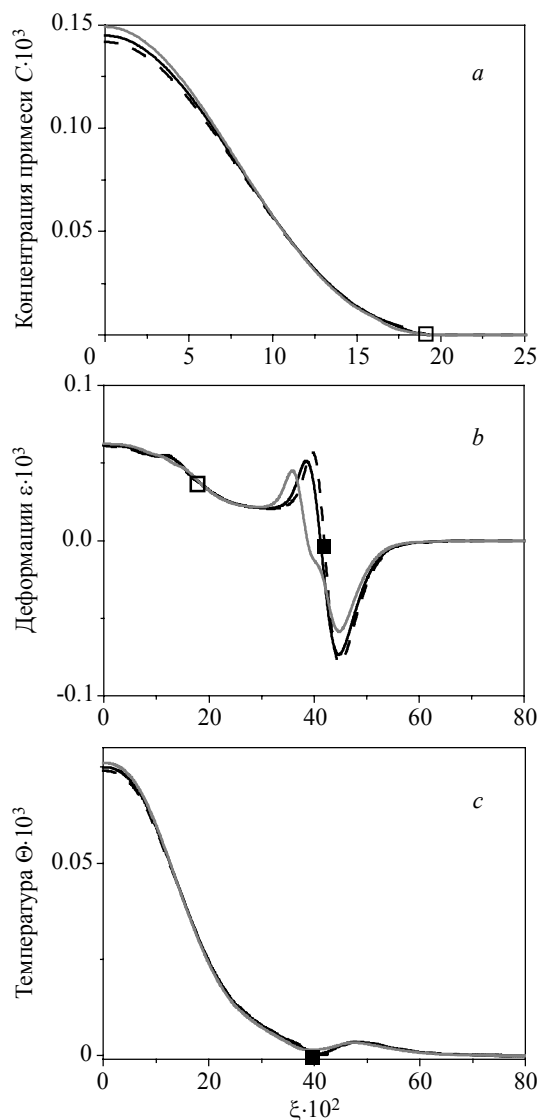


Рис. 5. Пример решения связанной задачи для системы Mo(Ni): *a* – распределение концентрации диффузанта Ni; *b* – профили волн деформации; *c* – распределение температуры. Пунктирные кривые – обработка одним импульсом; черные сплошные – двумя импульсами с интервалом 0.01; серые сплошные – двумя импульсами с интервалом 0.02. Момент времени $\tau = 0.4$

Fig. 5. An example of coupled problem solution for system Mo(Ni): profiles of (a) Ni concentration, (b) deformation waves, and (c) temperature. The dashed lines indicate the treatment by one pulse; the black and gray solid lines, the treatment by two pulses with time interval of 0.01 and 0.02, respectively. The time instant is $\tau = 0.4$

Заключение

Представленная математическая модель для описания начальной стадии процесса внедрения потока частиц в поверхность металла учитывает неизотермичность процесса и взаимодействие разномасштабных процессов – диффузию и деформирование. Взаимодействие волн разной физической природы приводит к искажениям на распределениях температуры и деформации. Увеличение числа воздействий увеличивает количество экстремумов на волнах. Но после прекращения внешнего воздействия с увеличением времени наблюдения профили практически не отличаются, за исключением деформаций – наблюдается понижение уровня деформаций на глубине.

Автор благодарит А.Г. Князеву за обсуждение результатов исследований.

ЛИТЕРАТУРА

1. Cherenda N.N., Uglov V.V., Anishchik V.M., et al. Modification of high-speed steels by nitrogen compression plasma flow: structure, element composition, tribological properties // Surf. Coat. Technol. 2006. V. 200. No. 18–19. P. 5334–5342. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2005.06.007.
2. Углов В.В., Кулешов А.К., Ремнев Г.Е., Салтымаков М.С., Асташинский В.М. Модификация твердого сплава Т15К6 мощными импульсными ионными пучками и компрессионными плазменными потоками // Известия вузов. Порошковая металлургия и функциональные покрытия. 2011. № 3. С. 63–68.
3. Панин А.В., Казаченок М.С., Перевалова О.Б., Синякова Е.А., Круковский К.В., Мартынов С.А. Многоуровневые механизмы деформационного поведения технического титана и сплава Ti–6Al–4V, подвергнутых обработке высокочастотными электронными пучками // Физ. мезомех. 2018. Т. 21. № 4. С. 45–56. DOI 10.24411/1683-805X-2018-14005.
4. Асташинский В.М., Лейви А.Я., Углов В.В., Черенда Н.Н., Яловец А.П. Формирование рельефа поверхности металлической мишени при воздействии компрессионных плазменных потоков // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2014. № 6. С. 12–17. DOI: 10.7868/S0207352814060055.
5. Боровицкая И.В., Никулин В.Я., Бондаренко Г.Г., Михайлова А.Б., Силин П.В., Гайдар А.И., Парамонова В.В., Перегудова Е.Н. Воздействие импульсных потоков азотной плазмы и ионов азота на структуру и механические свойства ванадия // Металлы. 2018. № 2. С. 54–64.
6. Жукешов А.М., Габдуллина А.Т. Влияние режимов обработки импульсными потоками плазмы поверхности стали на ее структуру и микротвердость // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2009. № 11. С. 95–101. DOI: 10.7868/S0207352814060055.
7. Шанин С.А., Князева А.Г. Связанная модель формирования покрытия на подложке цилиндрической формы // ПМТФ. 2014. Т. 55. № 3. С. 192–204.
8. Оджаев В. Б., Плебанович В.И., Тарасик М.И., Челябинский А.Р. О влиянии упругих напряжений на диффузию бора в кремнии // Журнал БГУ. Физика. 2017. № 3. С. 88–94.
9. Fu Zhen Xuan, Shan-Shan Shao, Zhendong Wang, Shan-Tung Tu Coupling effects on chemical stresses and external mechanical stresses on diffusion // J. Phys. D: Appl. Physics. 2009. V.42. P. 1–8.
10. Демидов В.Н., Князева А.Г., Ильина Е.С. Особенности моделирования диффузионных процессов в упругом теле при его поверхностной модификации частицами // Вестник ПНИПУ. Механика, Сборник «Математическое моделирование систем и процессов». 2012. № 3. С. 25–49.
11. Парфенова Е.С., Князева А.Г. Начальная стадия формирования переходного слоя между пленкой и подложкой при нагреве сильнооточным электронным пучком // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2018. № 54. С. 103–117. DOI: 10.17223/19988621/54/9.

12. Парфенова Е.С., Князева А.Г. Неизотермическая механодиффузионная модель начальной стадии процесса внедрения потока частиц в поверхность мишени // Вычисл. мех. сплош. сред. 2019. Т. 12. № 1. С. 36–47. DOI:10.7242/1999-6691/2019.12.1.4
13. Sherief H.H., Hamza F., Saleh H. The Theory of Generalized Thermoelastic Diffusion // Int. J. Eng. Sci. 2004. V. 42. P. 591–608.
14. Aouadi M. Generalized Theory of Thermoelastic Diffusion for Anisotropic Media // J. Thermal Stresses. 2008. V. 31. P. 1–16.
15. Князева А.Г. Диффузия и реология в локально-равновесной термодинамике // Вестник ПНИПУ. Механика. Сборник «Математическое моделирование систем и процессов». 2005. № 13. С. 45–60.
16. Князева А.Г. Нелинейные модели деформируемых сред с диффузией // Физ. мезомех. 2011. Т.14. № 6. С. 35–51.

Поступила 16.05.2019 г.

Parfenova E.S. (2019) DISTRIBUTION OF THE CONCENTRATION OF INJECTED IMPURITY UNDER SURFACE TREATMENT BY CONSECUTIVE PULSES *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika* [Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics]. 62. pp. 105–118

DOI 10.17223/19988621/62/9

Keywords: mathematical modeling, non-isothermal coupled model, diffusion, stress, deformation, relaxation time, particle flux, consecutive pulses.

Surface treatment by particle flux is widely used for improving the operating properties of materials. At the instant of interaction between particles and target surface, various processes occur such as heating, phase formation, mixing, generation of the elastic waves of mechanical disturbances, etc. Experimental study of these processes separately is difficult. However, mathematical modeling allows one to study in detail the treatment process at any stage and to analyze the role of each occurring phenomenon separately.

The paper presents a coupled mathematical model of the initial stage of particles' penetration into a metal surface under non-isothermal conditions. It is assumed that the injected particles possess sufficient energy to generate mechanical disturbances on the target surface at the instant of interaction. The model takes into account the finiteness of relaxation time for heat and mass fluxes and the interaction of the waves of different physical nature – distribution of mechanical disturbances and diffusion of injected material. The developed numerical algorithm is based on the implicit difference scheme. The examples of coupled problem solution are given for the cases of treatment by one and two pulses. The differences between resulting distributions are revealed. The work also demonstrates the distortions in the waves of deformation and temperature which represent the consequences of the interaction of studied processes.

Financial support. This work was carried out in the framework of the Program of Fundamental Research of the State Academies of Sciences for 2013-2020, line of research III.23.

Elena S. PARFENOVA (Institute of Strength Physics and Materials Science of Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Tomsk, Russian Federation). E-mail: linasergg@mail.ru

REFERENCES

1. Cherenda N.N., Uglov V.V., Anishchik V.M., Stalmashonak A.K., Astashynski V.M., Kuzmickii A.M., Punko A.V., Götz Benedikt Thorwarth, Bernd Stritzker (2006) Modification of high-speed steels by nitrogen compression plasma flow: structure, element composition, tribological properties. *Surface and Coatings Technology*. 200(18-19). pp. 5334–5342. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2005.06.007.
2. Uglov V.V., Kuleshov A.K., Remnev G.E., Saltymakov M.S., Astashinsky V.M. (2011) Модификация твердого сплава Т15К6 мoshchnymi impul'snymi ionnymi puchkami i

- kompressionnymi plazmennymi potokami [Modification of the hard alloy T15K6 by high-power pulsed ion beams and compression plasma flows]. *Izvestiya vuzov. Poroshkovaya metallurgiya i funktsional'nye pokrytiya – Universities' Proceedings. Powder Metallurgy and Functional Coatings*. 3. pp. 63–68.
3. Panin A.V., Kazachenok M.S., Perevalova O.B., Sinyakova E.A., Krukovsky K.V., Martynov S.A. (2018) Mnogourovnevnye mekhanizmy deformatsionnogo povedeniya tekhnicheskogo titana i splava Ti–6Al–4V, podvergnutykh obrabotke vysokochastotnymi elektronnyimi puchkami [Multiscale deformation of commercial titanium and alloy Ti–6Al–4V subjected to high-frequency electron beam treatment]. *Fizicheskaya mezomekhanika – Physical Mesomechanics*. 21(4). pp. 45–56. DOI: 10.24411/1683-805X-2018-14005.
 4. Astashynski V.M., Leyvi A.Ya., Uglov V.V., Cherenda N.N., Yalovets A.P. (2014) Formation of metal target surface relief during the action of compression plasma flows. *Journal of Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 6. pp. 12–17. DOI: 10.7868/S0207352814060055.
 5. Borovitskaya I.V., Nikulin V.Ya., Bondarenko G.G., Mikhaylova A.B., Silin P.V., Gaydar A.I., Paramonova V.V., Peregodova E.N. (2018) Vozdeystvie impul'snykh potokov azotnoy plazmy i ionov azota na strukturu i mekhanicheskie svoystva vanadiya [Effect of pulsed nitrogen plasma and nitrogen ion fluxes on the structure and mechanical properties of vanadium]. *Metally – Russian Metallurgy*. 2. pp. 54–64.
 6. Zhukeshov A.M., Gabdullina A.T. (2009) Vliyanie rezhimov obrabotki impul'snymi potokami plazmy poverkhnosti stali na ee strukturu i mikrotverdosť [Effect of steel surface processing by pulsed plasma fluxes on its structure and microhardness] *Poverkhnost'. Rentgenovskie, sinkhrotronnnye i neytronnye issledovaniya – Journal of Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. 11. pp. 95–101. DOI: 10.7868/S0207352814060055.
 7. Shanin S.A., Knyazeva A.G. (2014) Coupled model of coating formation on a cylindrical substrate. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*. 55(3). pp. 192–204. DOI: 10.1134/S0021894414030171.
 8. Odzhaev V.B., Plebanovich V.I., Tarasik M.I., Chelyadinskiy A.R. (2017) O vliyaniy uprugikh napryazheniy na diffuziyu bora v kremnii [About the influence of elastic stresses on the implanted boron diffusion in silicon]. *Zhurnal Belorusskogo gosudarstvennogo universiteta. Fizika – Journal of the Belarusian State University. Physics*. 3. pp. 88–94.
 9. Fu Zhen Xuan, Shan-Shan Shao, Zhendong Wang, Shan-Tung Tu (2009) Coupling effects on chemical stresses and external mechanical stresses on diffusion. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 42. pp. 1–8. DOI: 10.1088/0022-3727/42/1/015401.
 10. Demidov V.N., Knyazeva A.G., Il'ina E.S. (2012) Osobennosti modelirovaniya diffuzionnykh protsessov v uprugom tele pri ego poverkhnostnoy modifikatsii chastitsami [The modeling features of diffusion processes in elastic body under particles surface treatment]. *Vestnik Permskogo natsional'nogo issledovatel'skogo universiteta. Mekhanika – Perm National Research Polytechnic University Mechanics Bulletin*. 3. pp. 25–49.
 11. Parfenova E.S., Knyazeva A.G. (2018) Nachal'naya stadiya formirovaniya perekhodnogo sloya mezhdz plenkoy i podlozhkoy pri nagreve sil'notochnym elektronnyim puchkom [The initial stage of transient layer formation between film and substrate during heating by a high-current electron beam]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 54. pp. 103–117. DOI: 10.17223/19988621/54/9.
 12. Parfenova E.S., Knyazeva A.G. (2019) Neizotermicheskaya mekhanodiffuzionnaya model' nachal'noy stadii protsessa vnedreniya potoka chastits v poverkhnost' misheni [Non-isothermal mechanodiffusion model of the initial stage of introduction process of particles flow in a target surface]. *Vychislitel'naya mekhanika sploshnykh sred – Computational Continuum Mechanics*. 12(1). pp. 36–47. DOI: 10.7242/1999-6691/2019.12.1.4.
 13. Sherief H.H., Hamza F., Saleh H. (2004) The theory of generalized thermoelastic diffusion. *International Journal of Engineering Science*. 42(5-6). pp. 591608. DOI: 10.1016/j.ijengsci.2003.05.001.

14. Aouadi M. (2008) Generalized theory of thermoelastic diffusion for anisotropic media. *Journal of Thermal Stresses*. 31(3). pp. 270–285. DOI: 10.1080/01495730701876742.
15. Knyazeva A.G. (2005) Diffuziya i reologiya v lokal'no-ravnovesnoy termodinamike [Diffusion and rheology in locally-equilibrium thermodynamics]. *Vestnik Permskogo natsional'nogo issledovatel'skogo universiteta. Mekhanika – Perm National Research Polytechnic University Mechanics Bulletin*. 13. pp. 45–60.
16. Knyazeva A.G. (2011) Nelineynye modeli deformiruemykh sred s diffuziey [Nonlinear models diffusion of deformed media with diffusion]. *Fizicheskaya mezomekhanika – Physical Mesomechanics*. 14(6). pp. 35–51.

Received: May 16, 2019