

УДК 538.931:53.043

DOI: 10.17223/00213411/64/4/50

*М.В. ЧЕПАК-ГИЗБРЕХТ***ВЛИЯНИЕ ТРОЙНЫХ СТЫКОВ И РАЗМЕРА ЗЕРЕН НА ДИФФУЗИЮ КИСЛОРОДА
В ПОВЕРХНОСТНЫЙ СЛОЙ МАТЕРИАЛА ***

Рассмотрена модель зернограничной диффузии, которая может быть использована для описания процесса проникновения кислорода с поверхности в объем материала при окислении. Полагаем, что температура образца может регулироваться во времени. Материал образца в модели представлен чередующимися зёрнами с явным выделением тройных стыков между ними. Модель включает параметр отношения размеров зёрен и расстояния между ними так, что позволяет исследовать диффузию в материале с микро- и наноструктурой.

Ключевые слова: зернограничная диффузия, накопление кислорода, математическое моделирование.

Введение

Физико-химические механизмы коррозии металлов и сплавов контролируются диффузионными процессами. Особенности диффузии определяются структурой материалов – размером зёрен, характером межзёренных границ, наличием примесей и др. Совершенно неочевидно, что при уменьшении размеров зёрен упрочнение материала будет сопровождаться повышением его сопротивляемости действию агрессивной среды [1]. Например, с уменьшением размеров зёрен возможно [2, 3] ускорение проникания кислорода из окружающей среды в поверхностный слой материала, что способствует формированию оксидной пленки, накоплению повреждений, генерации локальных напряжений [4, 5] вследствие различия свойств основного материала и его оксида. Одной из причин выхода из строя элементов микроэлектроники является повышение температуры, сопровождающееся активацией зернограничной диффузии. Известно, что диффузия по границам зёрен и фаз влияет на проводимость [6–8], коэрцитивную силу ферромагнетиков [9], способствует вытеснению примесей из объема зёрна в границы [10, 11], что, в конечном счете, приводит к усилению анизотропии свойств и существенно влияет на срок службы деталей и устройств.

Для вычисления диффузионных параметров и измерения скоростей диффузии в материалах с разной структурой и размером зёрен используют сопоставление данных эксперимента с решениями, полученными в рамках модели Фишера или ее модификаций [11–14]. Однако сама формулировка модели и предположения, на которых основаны частные аналитические решения, не позволяют использовать ее для исследования диффузии в материалах с микро- и наноструктурой. В ряде работ для исследования траекторий движения примеси на атомарном уровне используют метод Монте-Карло [15–17] или первопринципные модели [18, 19]. Аналогичным образом диффузию моделируют и для структур, состоящих из нескольких зёрен, предварительно сгенерированных случайным образом. В таком случае для сопоставления с экспериментом используют концентрационные профили, осредненные по данным численных расчетов.

Однако невыясненными остаются вопросы о влияниях на процесс диффузии обмена примесью между границей и зёрном, стыков границ зёрен на динамику процесса, изменения температуры образца со временем на зернограничную диффузию и, наконец, о существовании прямой зависимости между зернограничной диффузией и характерным размером структуры или ее связи с поверхностными эффектами, составом, дислокациями и другими факторами. Такие вопросы могут быть исследованы при двумерном и трехмерном моделировании [20–23].

Цель настоящей работы – продемонстрировать влияние тройных стыков зёрен и размеров зёрен на диффузию атомарного кислорода из окружающей среды в поверхностный слой поликристаллического материала.

Постановка задачи

Полагаем, что образец подвергается воздействию регулируемой температуры. Тогда

$$T = T_0 + Q \int_0^t f(z) dz. \quad (1)$$

* Работа выполнена в рамках госзадания ИФПМ СО РАН, тема номер FWRW-2019-0035.

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>