

УДК 621.315.592

**ЧИСЛЕННО-АНАЛИТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ДИФфуЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В ОГРАНИЧЕННЫХ
МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ***

© 2018 г.

**Игумнов Л.А.¹, Грезина А.В.²,
Метрикин В.С.¹, Панасенко А.Г.²**

¹*Научно-исследовательский институт механики
Национального исследовательского Нижегородского государственного
университета им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Российская Федерация*
²*Национальный исследовательский Нижегородский государственный
университет им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Российская Федерация*

v.s.metrikin@mail.ru

Поступила в редакцию 28.06.2018

Изложены методология численно-аналитического и экспериментального определения физических характеристик легированного материала и технология эксперимента по исключению влияния границы материала на интерпретацию результатов эксперимента. Приведены алгоритмы обработки результатов измерений, проведенных с помощью компьютерного моделирования для различных технологических условий (распределения примеси по объему прямоугольной пластины, когда источник примеси частично покрывает поверхность пластины по ее длине и целиком по ширине, с симметричным расположением источника примеси; трехмерная модель пластины, где источником примеси является прямоугольная пленка, которая покрывает часть поверхности пластины). Проанализировано влияние технологических условий на границе твердых тел и их размеров на характер протекания диффузионных процессов. Найдены функции распределения концентраций примесей в материале, что позволяет решить ряд практических задач по определению структуры диффузионного покрытия, времени гомогенизации, количества вещества, прошедшего через границу композиционного материала, и т.д. Установлено, что для определения характеристик диффузионного процесса предпочтительнее использовать не медленно изменяющиеся, а быстро изменяющиеся функции распределения по координате материала. Численный эксперимент проведен с помощью пакета программ ANSYS для ограниченной прямоугольной пластины и различных граничных и начальных условий. Аналитические зависимости функций распределения концентраций примесей при различных краевых и начальных условиях были получены с использованием математического пакета аналитических вычислений MAPLE. Сравнение результатов численных и численно-аналитических расчетов функций распределения концентраций примесей по этим двум пакетам показало, что при определенных граничных

* Выполнено при финансовой поддержке РНФ (проект №16-19-10237).

условиях (постоянная концентрация на границе или постоянный поток) эти результаты близки.

Ключевые слова: численно-аналитическое моделирование, распределение концентраций, диффузионные процессы, нанокристалл, наноструктурные материалы.

Введение

Технический прогресс определяется внедрением высокотехнологических процессов, которые требуют применения материалов с заданными физико-техническими свойствами, зависящими не только от структуры материала, его химического состава, но и от вида и технологических особенностей обработки (термической, механической, химической и т.д.), которая формирует микроструктуру (распределение и ориентацию компонентов, фаз, всякого рода дефектов и т.п.) [1, 2].

Изучению диффузионных процессов в легированных и многокомпонентных средах посвящено достаточно много публикаций [3–21]. Так, для однокомпонентной пластины в статье [3] представлены алгоритм и результаты численных расчетов по определению напряженно-деформированного состояния ортотропной пластины при воздействии объемных упругодиффузионных возмущений. Определены поля перемещений и приращения концентраций компонентов среды в зависимости от упругого диффузионного возмущения. В монографиях [4–8] исследуются явления, протекающие при контакте двух материалов, полностью растворимых друг в друге при высоких температурах. В области контакта может формироваться диффузионная зона, состоящая из непрерывного ряда твердых растворов. Она образуется и развивается за счет атомной диффузии, протекающей между контактирующими материалами. Примером такого процесса может служить формирование покрытия при цементации изделий из углеродистых сталей.

Технические материалы, как правило, содержат несколько фаз и являются поликристаллическими. Диффузия по границам фаз и зерен происходит быстрее, чем в объеме, что увеличивает скорость протекания процессов, определяющих фазовый состав и структуру материалов: ползучесть [9], спекание [10], рекристаллизацию и рост зерен [11].

В качестве примера можно привести роль диффузии по границам зерен в жаропрочных сплавах при высоких температурах. Как правило, лопатки газовых турбин при эксплуатации разрушаются по границам зерен. Замедление диффузии по границам зерен с помощью введения специальных примесей позволяет увеличить рабочую температуру и время до разрушения [12].

Даже при комнатных температурах ускоренная диффузия некоторых примесей по межкуристаллитным границам в тонких металлических пленках приводит к их деградации и к искажению их функций в элементах микроэлектроники [13, 14].

Повышенный интерес к изучению диффузии по границам зерен стимулируется созданием в последние годы нового класса материалов с ультрамелкозернистой структурой – нанокристаллических материалов, для которых характерна большая протяженность границ зерен [15, 16].

1. Постановка задачи

В предлагаемой статье основное внимание уделено диффузионным процессам, которые проявляются при термической обработке твердых тел. Известно [1], что

при этом в результате диффузии в материале формируется определенное концентрационное распределение дефектов и примесей. Следует отметить, что в настоящее время численно-аналитическому и экспериментальному изучению диффузионных процессов в ограниченных многокомпонентных твердых телах уделяется значительное внимание. Нахождение их функций распределения позволяет решать ряд практических задач, например таких, как определение структуры диффузионного покрытия, оценка количества вещества, прошедшего через границу материала, время гомогенизации и т.д. [2]. Формируя определенное распределение примесей, например в полупроводниках, создают элементы микроэлектроники с нужными свойствами, наноструктуры и т.п. [17].

Фундаментом для изучения и управления большинством процессов, относящихся к фазовым превращениям и другим явлениям в твердых телах, связанным с массопереносом, является континуальная теория [1]. В отсутствие внешних полей диффузионные процессы в однородной изотропной среде определяются одним коэффициентом диффузии D . Несмотря на различные механизмы диффузии, в первом приближении D можно представить в виде [2]:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E_0}{RT}\right), \quad (1)$$

где E_0 – энергия активации, T – температура среды, R – универсальная газовая постоянная.

Изменяя температуру, можно контролировать процесс установления стационарного распределения примесей в кристалле, а также управлять диффузионно-контролируемыми процессами, имеющими большое значение, например, для технологии создания наноструктурных жаропрочных сплавов [9, 10, 16].

Часто геометрические условия, реализуемые на практике, позволяют свести решение задачи диффузии к одномерному случаю. Так бывает, например, при диффузии примеси в плоской пластине при ее поступлении через поверхность пластины, причем все точки поверхности находятся в одинаковых физических условиях, а боковая поверхность пластины изолирована. В настоящей статье рассматривается именно этот вариант. Источником примеси может быть однородная металлическая пленка, целиком покрывающая пластину [18], а также газ, поступающий из окружающего образца [19], и т.п.

При рассматриваемых условиях концентрация примеси в металле будет зависеть только от одной координаты x , перпендикулярной к границе раздела металл–диэлектрик, направленной вглубь пластины. Движение примеси из источника вглубь твердого тела происходит в два этапа [17]. На первом этапе атомы пленки переходят (растворяются) в пластину, а затем по закону диффузии перераспределяются в область пластины с меньшей концентрацией.

Если скорость диффузии мала по сравнению со скоростью поступления примеси из пленки в пластину, то на верхней поверхности пластины будет поддерживаться постоянная концентрация примеси, определяемая ее предельной растворимостью при данной температуре [17].

При быстрой диффузии лимитирующей фазой будет фаза растворения примеси. Однако при практическом определении скорости диффузионного процесса часто без достаточного анализа предполагается, что скорость растворения примеси настолько велика, что на границе раздела поддерживается постоянное значение концентрации $C(0, t) = C_0$ [18–20]. Более того, иногда пренебрегают ограниченностью

твердого тела по толщине [18, 20], представляя тело полуограниченным пространством, решение для которого имеет вид:

$$C(x, t) = C_0 \left(1 - \operatorname{erf} \frac{x}{\sqrt{4Dt}} \right), \quad (2)$$

где erf – функция ошибок. Решение вида (2) может быть использовано для численного моделирования, например, такого важного процесса, как цементация (науглероживание) поверхности массивных плоских изделий из углеродистых сталей с тонкими диффузионными слоями, но для исследования реального диффузионного процесса с правильно вычисленным коэффициентом диффузии D необходимо выполнение условий

$$t \ll \frac{l^2}{D} \text{ и } C(0, t) = C_0 \quad (3)$$

(t – время, l – характерный линейный размер пластины), что не всегда возможно реализовать.

2. Компьютерный эксперимент

В том случае когда условия (3) не выполняются, для исследования диффузионного процесса возможен только численный эксперимент. Приведем результаты компьютерных экспериментов, полученные с помощью пакета программ ANSYS при $D = 5 \cdot 10^{-9} \text{ см}^2/\text{с}$.

На рис. 1 представлены результаты расчета распределения концентрации примеси по глубине прямоугольной пластины в момент времени $t = 10^5 \text{ с}$, когда источник примеси частично перекрывает поверхность пластины по ее длине и целиком по ширине. Остальная поверхность изолирована. В этих условиях задача распределения концентрации примеси в пластине становится плоской.

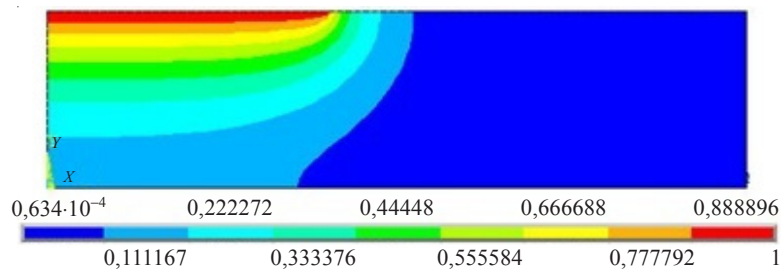


Рис. 1

На рис. 2 представлено распределение концентрации примеси для случая симметричного относительно пластины расположения источников примеси (в момент времени $t = 10^5 \text{ с}$), которое, однако, не сводится к наложению распределений, представленных на рис. 1, так как при больших временах проявляется интерференция потоков от разных источников.

Рассмотрена задача о концентрации примеси в трехмерной пластине. На рис. 3 приведено распределение концентрации примеси по объему пластины в момент времени $t = 10^5 \text{ с}$. Источником примеси является прямоугольная пленка, которая покрывает часть поверхности пластины. В связи с симметрией задачи представлена одна четвертая часть пластины.

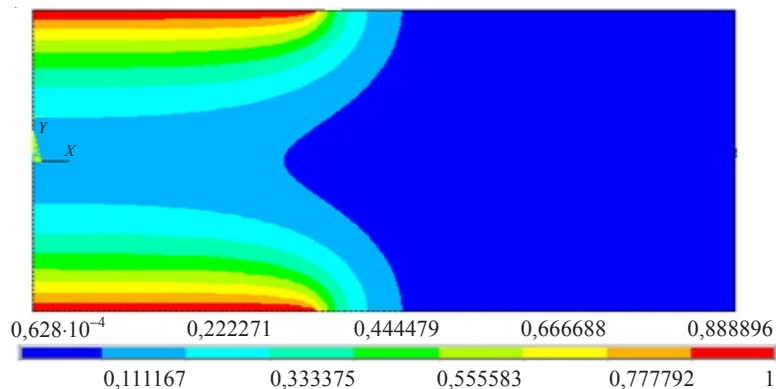


Рис. 2

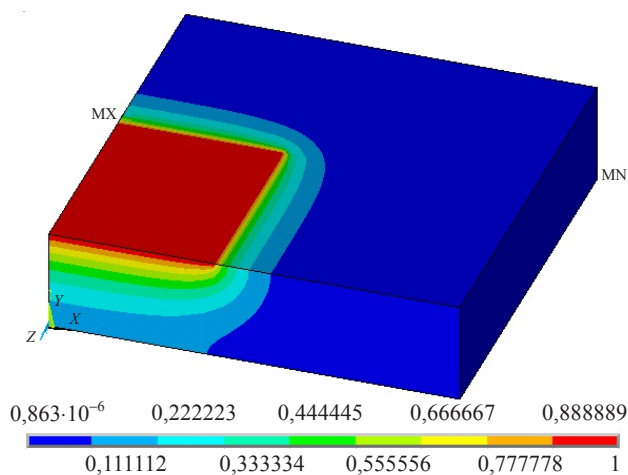


Рис. 3

Таким образом, при заданной скорости протекания диффузионного процесса, соответствующей температуре эксперимента, появляется возможность расчета распределения концентрации примеси.

3. Методика проведения эксперимента и интерпретация результатов

С целью исключения влияния границы твердого тела на результаты эксперимента диффузионный процесс реализуется в два этапа.

На первом этапе диффузионный профиль распределения концентрации примеси $C_1(x, t_1)$ формируется при наличии источника примеси. $C_1(x, t_1)$ измеряется после удаления остатков пленки – источника примеси с пластины. Координату x отсчитываем от верхней поверхности очищенной пластины. Таким образом избавляемся от неопределенности в положении границы раздела и в значении C_0 [20]. Первый этап нужен только для формирования профиля распределения концентрации примеси $C_1(x, t_1)$, а свойства границы и температура процесса не важны.

На втором этапе при температуре, для которой нужно определить коэффициент диффузии D , в течение времени t_2 продолжается диффузионный процесс в изолированной пластине, в результате которого получается новый экспериментальный профиль распределения концентрации примеси $C_2(x, t_2)$. Коэффициент D находим

из сравнения спектров разложения $C_1(x, t_1)$ и $C_2(x, t_2)$ по собственным функциям задачи диффузии с соответствующими граничными условиями.

Для отработки методики численного эксперимента в качестве экспериментальных данных используем результаты расчетов, выполненных с помощью системы ANSYS (см. п. 2).

Принималось, что образец, в который диффундирует примесь, представляет собой пластину толщиной $l = 1,25$ мм. На поверхности пластины задавалась концентрация примеси, которая изменялась по закону $C(0, t) = C_0 t / t_1$, кроме того, полагалось, что $C_0 = 1 \text{ см}^{-3}$ и $D = 5 \cdot 10^{-9} \text{ см}^2/\text{с}$.

На боковой поверхности и основании задавалось условие $C'_n = 0$, где C'_n – производная по нормали к поверхности. На первом этапе в течение времени $t_1 = 5 \cdot 10^5$ с формируется профиль концентрации примеси в пластине $C_1(x, t_1)$. Граничное значение $C(0, t)$ выбиралось в виде линейной функции от t , и анализировалось влияние границы на определение значения D .

На втором этапе граничное условие на поверхности ($x = 0$) изменялось на $C'_x(0, t) = 0$, то есть пластина изолировалась от источника примеси, и в течение времени $t_2 = 2 \cdot 10^5$ с в результате диффузионного процесса формировался профиль $C_2(x, t_2)$.

Чтобы оценить практические возможности метода расчета D , второй этап диффузионного процесса проводился также в течение времени $t_3 = 2 \cdot 10^4$ с, и формировался профиль $C_3(x, t_3)$. Результаты расчетов представлены на рис. 4.

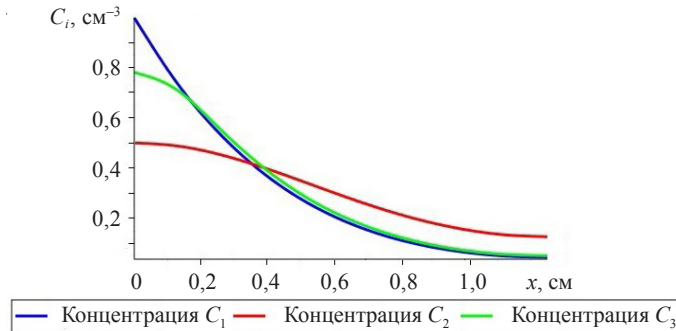


Рис. 4

Для обработки экспериментальных данных был использован пакет MAPLE. С его помощью применением процедуры полиномиальной интерполяции табличное представление распределения примеси $C_i(x)$ заменялось соответствующей непрерывной функцией $f_i(x)$.

Известно [22], что функции $f_2(x)$ и $f_3(x)$ являются решениями дифференциального уравнения

$$C'_i(x, t) = DC''_{xx}(x, t), \quad 0 < x < l, \quad 0 < t < +\infty, \quad (4)$$

для времен диффузии $t = t_2$ и $t = t_3$ соответственно с граничными

$$C'_x(0, t) = C'_x(l, t) = 0, \quad 0 < t < +\infty, \quad (5)$$

и начальным условиями

$$C(x, 0) = f_1(x), \quad 0 < x < l. \quad (6)$$

Решение дифференциального уравнения (4) с граничными и начальными условиями (5) и (6) можно представить в виде

$$C(x,t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \exp\left(-\frac{\pi^2 D t}{l^2} n^2\right) \cos \frac{n\pi x}{l}, \quad (7)$$

где

$$a_n = \frac{2}{l} \int_0^l f_1(x) \cos \frac{n\pi x}{l} dx, \quad n = 0, 1, 2. \quad (8)$$

Совокупность коэффициентов a_n , определяемых выражением (8), является спектром разложения функции $f_1(x)$ – профиля распределения примеси, полученного после первого этапа диффузионного процесса. Если заменить в уравнении (8) $f_1(x)$ на $f_2(x)$, то получим спектр разложения профиля распределения примеси, сформированного в результате двух этапов. Из сравнения этих спектров имеем соотношение

$$a_{n2} = a_{n1} \exp\left(-\frac{\pi^2 D t}{l^2} n^2\right), \quad (9)$$

откуда следует, что

$$D_n = \frac{l^2}{n^2 \pi^2 t} \cdot \ln \frac{a_{n1}}{a_{n2}}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (10)$$

В идеальном случае (проведение всех расчетов без ошибок) результат вычисления по формуле (10) не зависит от номера гармоники n . Однако в процессе выполнения вычислений могут возникать ошибки. Точность вычислений можно контролировать с помощью соотношения

$$\varphi_n = \frac{\ln(a_{n1}/a_{n2})}{\ln(a_{11}/a_{12})} = n^2. \quad (11)$$

Результаты расчетов a_{n1} , a_{n2} , D_n и φ_n для времени $t_1 = 2 \cdot 10^5$ с, выполненные с помощью пакета MAPLE, представлены в таблице 1.

Таблица 1

n	$a_{n1}, \text{см}^{-3}$	$a_{n2}, \text{см}^{-3}$	φ_n	$D_n \cdot 10^9, \text{см}^2/\text{с}$
0	0,60178	0,60617		
1	0,34679	0,18675	1,00	5,00
2	0,13030	0,01076	4,03	4,94
3	0,06118	0,00022	9,09	4,95
4	0,03500	$0,87541 \cdot 10^{-6}$	17,12	5,24
5	0,02256	0		

Результаты аналогичного расчета для $t_2 = 2 \cdot 10^4$ с представлены в таблице 2.

Таблица 2

n	$a_{n1}, \text{см}^{-3}$	$a_{n2}, \text{см}^{-3}$	φ_n	$D_n \cdot 10^9, \text{см}^2/\text{с}$
l	2	3	4	5
0	0,60178	0,60168		
1	0,34679	0,32559	1,00	4,99
2	0,13030	0,10112	4,02	5,02

Таблица 2 (продолжение)

1	2	3	4	5
3	0,06118	0,03467	9,00	4,99
4	0,03500	0,01265	16,12	5,03
5	0,02256	0,00468	24,94	4,98
6	0,01574	0,00154	36,80	5,11
7	0,01158	0,00055	48,24	4,92
8	0,00889	0,00010	71,44	5,58

В таблицах 1 и 2 коэффициенты a_{01} и a_{02} представляют собой среднюю концентрацию примеси в образце перед вторым этапом диффузионного процесса и после его окончания. Так как общее количество примеси не изменяется, то степень отличия a_{01} от a_{02} говорит о точности эксперимента и проведенных вычислений с помощью пакета MAPLE.

Результаты, полученные для времени t_2 (в этом случае, как видно из рис. 4, профиль будет крутым), оказываются более точными (различие a_{01} и a_{02} меньше, чем для $t_2 = 5 \cdot 10^3$ с). Если для более пологого профиля отклонение значений φ_n от n^2 наблюдается уже у 4-й гармоники и, соответственно, наблюдается отклонение вычисляемого значения D_n (на 5%), то для более крутого профиля существенные отклонения для φ_n и D_n (на 10%) наблюдаются только с 8-й гармоники (см. таблицу 2).

Возможен другой вариант определения D по одному этапу диффузионного процесса. Он реализуется, если есть возможность установить границу, на которой поддерживается постоянное значение концентрации примеси. Решение дифференциального уравнения (4) с граничными

$$C(0,t) = C_0, \quad C'_x(l,t) = 0 \quad (12)$$

и с начальными условиями

$$C(x,0) = 0 \quad (13)$$

можно представить в виде [22]:

$$\frac{C(x,t)}{C_0} = 1 - \frac{4}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2k+1} \exp\left(-\frac{(2k+1)^2 \pi^2 Dt}{4l^2}\right) \sin \frac{(2k+1)\pi x}{2l}. \quad (14)$$

Зададим коэффициенты b_n , которые в этой задаче отражают распределение примеси, равенством:

$$b_n = \int_0^l \hat{C}(x,t) \sin \frac{n\pi x}{2l} dx, \quad (15)$$

где $n = 2k + 1$, $k = 0, 1, 2, \dots$, $\hat{C}(x,t) = C(x,t)/C_0$.

Набор коэффициентов b_n является спектром распределения примеси при граничных и начальном условиях (12), (13). Подставив $\hat{C}(x,t)$ в интеграл (15) и произведя интегрирование, получим равенство

$$b_n = \frac{2l}{\pi n} \left(1 - \exp\left(-\frac{n^2 \pi^2 Dt}{4l^2}\right) \right), \quad (16)$$

из которого следует

$$D_n = -\frac{4l^2}{n^2 \pi^2 t} \ln \left(1 - \frac{n\pi}{2l} b_n \right). \quad (17)$$

Для имитации эксперимента проведен численный расчет $C(x, t)$ с помощью системы ANSYS с граничными условиями $C(0, t) = C_0 = 1$, $C'_x(l, t) = 0$ для двух вариантов $t_1 = 5 \cdot 10^5$ с – $C_3(x, t_1)$ и $t_2 = 5 \cdot 10^4$ с – $C_4(x, t_2)$. Результаты расчетов (здесь $\hat{C}(x, t)$ численно совпадает с $C(x, t)$) представлены на рис. 5.

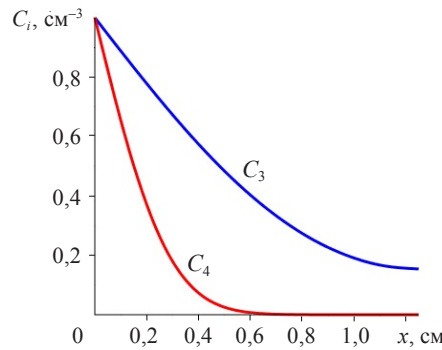


Рис. 5

Используя найденные функции распределения примеси $C_3(x, t_1)$ для $t_1 = 5 \cdot 10^5$ с и $C_4(x, t_2)$ для $t_2 = 5 \cdot 10^4$ с, по формуле (15) находим спектр распределения примеси b_n . В нашем случае доступная точность вычисления (для $t = 5 \cdot 10^5$ с) позволяет определить фактически только пятый порядок коэффициента разложения (b_n , $n = 5$). Для $t = 5 \cdot 10^4$ с результат расчета b_n (и соответственно D) хорошо согласуется с экспериментальными значениями для $n = 11$.

По вычисленным коэффициентам b_n (спектру распределения) находим по формуле (17) величину D .

Чтобы проанализировать роль границы раздела источник примеси – образец, определим D по описанной выше методике по распределению концентрации $C_3(x, t)$, представленному в таблице 1, а также по распределению концентрации $C_3(x, t_1)$, полученному при граничном условии $C(0, t) = 1$ и времени диффузии $5 \cdot 10^5$ с, и $C_4(x, t_2)$ при условии $C(0, t) = 1$ и времени диффузии $5 \cdot 10^4$ с. Результаты расчетов представлены в таблице 3.

Таблица 3

n	$D(C_1) \cdot 10^9, \text{см}^2/\text{с}$	$D(C_3) \cdot 10^9, \text{см}^2/\text{с}$	$D(C_4) \cdot 10^9, \text{см}^2/\text{с}$
1	2,42	5,00	5,00
3	1,82	5,40	5,00
5	1,16	5,00	5,00
7	0,77	3,56	5,00
9	0,54	2,05	4,98
11			5,00

Анализируя результаты расчетов, представленные в таблице 3, видим, что для определения коэффициента диффузии D желательно иметь более крутой профиль распределения примеси, получаемый при меньших временах диффузии (см. рис. 5).

Результат определения коэффициента D по его гармоникам не зависит от порядка гармоники n в широком интервале. Если возьмем более пологий профиль, полученный за большее время диффузии (рис. 5), то истинное значение D можно получить только по первым трем гармоникам. Далее с ростом номера гармоники ошибка быстро нарастает.

Заключение

Изложены методология численно-аналитического и экспериментального определения физических характеристик легированного материала и технология эксперимента по исключению влияния границы материала на интерпретацию результатов эксперимента.

Приведены алгоритмы обработки результатов измерений, проведенных с помощью компьютерного моделирования, для различных технологических условий (распределения примеси по глубине прямоугольной пластины, когда источник примеси частично покрывает поверхность пластины по ее длине и целиком по ширине, с симметричным расположением источника примеси). Проанализировано влияние технологических условий на границе твердых тел и размеров тел на характер протекания диффузионных процессов.

Найдены функции распределения концентраций примесей в материале, которые позволяют решить ряд практических задач: определение структуры диффузионного покрытия, времени гомогенизации, количества вещества, прошедшего через границу композиционного материала, и т.д. Установлено, что для определения характеристик диффузионного процесса предпочтительнее использовать не медленно изменяющиеся, а быстро изменяющиеся функции распределения по координате материала.

Проведен численный эксперимент с помощью пакета программ ANSYS для ограниченной прямоугольной пластины и различных граничных и начальных условий. Аналитические зависимости функций распределения концентраций примесей при различных краевых и начальных условиях были получены с использованием математического пакета аналитических вычислений MAPLE. Сравнение результатов компьютерных экспериментов и численных расчетов функций распределения концентраций примесей с использованием этих двух пакетов показало, что при определенных граничных условиях (постоянная концентрация на границе или постоянный поток) эти результаты близки.

Список литературы

1. Готтштайн Г. *Физико-химические основы материаловедения*. М.: БИНОМ, 2011. 400 с.
2. Мерер Х. *Диффузия в твердых телах*. М.: Интеллект, 2011. 536 с.
3. Земсков А.В., Тарлаковский Д.В. Полярно-симметричная задача упругой диффузии для многокомпонентной среды. *Проблемы прочности и пластичности*. 2018. Т. 80. №1. С. 5–14.
4. Лахтин Ю.М., Коган Я.Д., Шпис Г.И., Бемер З. *Теория и технология азотирования*. М.: Металлургия, 1991. 320 с.
5. Лахтин Ю.М., Арзамасов Б.Н. *Химико-термическая обработка металлов*. М.: Металлургия, 1985. 256 с.
6. Боровский И.Б., Гуров К.П., Марчукова И.Д., Угасте Ю.Э. *Процессы взаимной диффузии в сплавах*. М.: Наука, 1973. 360 с.
7. Гуров К.П., Карташкин Б.А., Угасте Ю.Э. *Взаимная диффузия в многофазных металлических системах*. М.: Наука, 1981. 350 с.
8. Попов А.А. *Теоретические основы химико-термической обработки стали*. М.: Металлургиздат, 1962. 120 с.
9. Coble R.L. A model for boundary diffusion controlled creep in polycrystalline materials. *Journal of Applied Physics*. 1963. Vol. 34. No 6. P. 1679–1682. DOI: 10.1063/1.1702656.
10. Гегузин Я.Е. *Физика спекания*. М.: Наука, 1976. 252 с.

11. Горелик С.С., Добаткин С.В., Капуткина Л.М. *Рекристаллизация металлов и сплавов*. М.: Metallurgy, 2005. 432 с.
12. Бокштейн С.З., Гинзбург С.С., Кишкин С.Т., Разумовский И.М., Строганов Б.Г. *Авторадиография поверхностей раздела и структурная стабильность сплавов*. М.: Metallurgy, 1987. 272 с.
13. Поут Дж., Ту К., Мейер Дж. *Тонкие пленки. Взаимная диффузия и реакции*. М.: Мир, 1982. 338 с.
14. Glickman E.E., Nathan M. On the kinetic mechanism of grain boundary wetting in metals. *Journal of Applied Physics*. 1999. Vol. 85. P. 3185–3191. <http://doi.org/10.1063/1.369659>
15. Gleiter H. Nanocrystalline materials. *Progress in Materials Science*. 1989. Vol. 33. Iss. 4. P. 233–315.
16. *Зернограничная диффузия и свойства наноструктурных материалов*. Под ред. Ю.Р. Колобова, Р.З. Валиева. Новосибирск: Наука, 2001. 232 с.
17. Болтакс Б.И. *Диффузия в полупроводниках*. М.: Физматлит, 1961. 462 с.
18. Ваксман Ю.Ф., Ницук Ю.А., Яцун В.В., Насибов А.С., Шапкин П.В. Оптическое поглощение и диффузия железа в монокристаллах ZnSe. *Физика и техника полупроводников*. 2010. Т. 44. Вып. 4. С. 463–466.
19. Umit Demirbas, Alphan Sennaroglu, Mehmet Somer. Synthesis and characterization of diffusion-doped Cr²⁺: ZnSe and Fe²⁺: ZnSe. *Optical Materials*. 2006. Vol. 28. P. 231–240.
20. Ильичев Н.Н., Шапкин П.В., Гулямова Э.С., Кулевский Л.А., Насибов А.С. Определение коэффициента диффузии Fe²⁺ в монокристаллическом ZnSe. *Неорганические материалы*. 2010. Т. 46. №2. С. 149–153.
21. Русаков Г.М., Лобанов М.Л., Ларионова К.В. Расчет коэффициентов примесной диффузии методом разложения концентрационного профиля в ряд Фурье. *Физика металлов и металловедение*. 2001. Т. 91. №1. С.14–16.
22. Тихонов А.Н., Самарский А.А. *Уравнения математической физики*. М.: Наука, 1966. 724 с.

References

1. Gottstein G. *Physical Foundation of Materials Science*. Berlin. Heidelberg. Springer-Verlag. 2004. 510 p.
2. Mehrer H. *Diffusion in Solids*. Springer. 2007. 645 p.
3. Zemskov A.V., Tarlakovskii D.V. Polyarno-simmetrichnaya zadacha uprugoy diffuzii dlya mnogokomponentnoy sredy [Polar-symmetric problem of the elastic diffusion for a multi-component medium]. *Problemy prochnosti i plastichnosti [Problems of Strength and Plasticity]*. 2018. Vol. 80. No 1. P. 5–14 (In Russian).
4. Lakhtin Yu.M., Kogan Ya.D., Shpis G.I., Bemmer Z. *Teoriya i tekhnologiya azotirovaniya [Theory and Technology of Nitriding]*. Moscow. Metallurgia Publ. 1991. 320 p. (In Russian).
5. Lakhtin Yu.M., Arzamasov B.N. *Khimiko-termicheskaya obrabotka metallov [Chemical-heat Treatment of Metals]*. Moscow. Metallurgia Publ. 1985. 256 p. (In Russian).
6. Borovskii I.B., Gurov K.P., Marchukova I.D., Ugaste Yu.E. *Protsessy vzaimnoy diffuzii v splavakh [The Process of Mutual Diffusion in Alloys]*. Moscow. Nauka Publ. 1973. 360 p. (In Russian).
7. Gurov K. P., Kartashkin B.A., Ugaste Yu.E. *Vzaimnaya diffuziya v mnogofaznykh metallicheskiykh sistemakh [Mutual Diffusion in Multiphase Metallic Systems]*. Moscow. Nauka Publ. 1981. 350 p. (In Russian).
8. Popov A.A. *Teoreticheskie osnovy khimiko-termicheskoy obrabotki stali [Theoretical Bases of Chemical and Thermal Treatment of Steel]*. Moscow. Metallurgizdat Publ. 1962. 120 p. (In Russian).
9. Coble R.L. A model for boundary diffusion controlled creep in polycrystalline materials. *Journal of Applied Physics*. 1963. Vol. 34. No 6. P. 1679–1682. DOI: 10.1063/1.1702656.
10. Geguzin Ya.E. *Fizika spekaniya [Physics of Sintering]*. Moscow. Nauka Publ. 1976. 252 p. (In Russian).
11. Gorelik S.S., Dobatkin S.V., Kaputkina L.M. *Rekristallizatsiya metallov i splavov [Recrystallization of Metals and Alloys]*. Moscow. Metallurgia Publ. 2005. 432 p. (In Russian).

12. Bokshtein S.Z., Ginzburg S.S., Kishkin S.T., Razumovskiy I.M., Stroganov B.G. *Avto-radiografiya poverkhnostey razdela i strukturnaya stabilnost splavov* [Autoradiography of Interfaces and Structural Stability of the Alloys]. Moscow. Metallurgia Publ. 1987. 272 p. (In Russian).
13. Poate J.M., Tu K.N., Meyer J.W. *Thin Films – Interdiffusion and Reactions*. New York. Chichester. Brisbane. Toronto. John Wiley. Inc. 1978. 578 p.
14. Glickman E.E., Nathan M. On the kinetic mechanism of grain boundary wetting in metals. *Journal of Applied Physics*. 1999. Vol. 85. P. 3185–3191. DOI: /10.1063/1.369659
15. Gleiter H. Nanocrystalline materials. *Progress in Materials Science*. 1989. Vol. 33. Iss. 4. P. 233–315.
16. *Zernogranichnaya diffuziya i svoystva nanostrukturnykh materialov* [Grain Boundary Diffusion and Properties of Nanostructured Materials]. Eds. Yu.R. Kolobov, R.Z. Valiev. Novosibirsk. Nauka Publ. 2001. 232 p. (In Russian).
17. Baltex B.I. *Diffuziya v poluprovodnikakh* [Diffusion in Semiconductors]. Moscow. Fizmatlit Publ. 1961. 462 p (In Russian).
18. Waksman Y.F., Nitsuc Y.A., Yatsun V.V., Nasibov A.S., Shapkin P.V. Optical absorption and diffusion of iron in ZnSe single crystals. *Semiconductors*. 2010. Vol. 44. No 4. P. 444–447.
19. Umit Demirbas, Alphan Sennaroglu. Mehmet Somer. Synthesis and characterization of diffusion-doped Cr²⁺: ZnSe and Fe²⁺: ZnSe. *Optical Materials*. 2006. Vol. 28. P. 231–240.
20. Il'ichev N.N., Shapkin P.V., Gulyamova E.S., Kulevsky L.A., Nasibov A.S. Diffusion coefficient of Fe²⁺ in single-crystal ZnSe. *Inorganic Materials*. 2010. Vol. 46. No 2. P. 112–115.
21. Rusakov G.M., Lobanov M.L., Larionova K.V. Raschet koeffitsientov primesnoy diffuzii metodom razlozheniya kontsentratsionnogo profilya v ryad Furiye [Calculation of impurity diffusion coefficients by decomposition of the concentration profile in the Fourier series]. *Физика металлов и металловедение* [Physics of Metals and Metallography]. 2001. Vol. 91. No 1. P. 14–16 (In Russian).
22. Tikhonov A.N., Samarskii A.A. *Uravneniya matematicheskoy fiziki* [Equations of Mathematical Physics]. Moscow. Nauka Publ. 1966. 724 p. (In Russian).

SYMBOLIC AND NUMERICAL MODELING OF DIFFUSION PROCESSES IN MULTI-COMPONENT SOLIDS OF FINITE DIMENSION

Igumnov L.A.¹, Grezina A.V.², Metrikin V.S.¹, Panasenko A.G.²

¹*Research Institute for Mechanics, National Research Lobachevsky State University
of Nizhny Novgorod, Nizhny Novgorod, Russian Federation*

²*National Research Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod,
Nizhny Novgorod, Russian Federation*

Results are presented of a symbolic and numerical modeling as well as experimental identification of the material properties of an alloy. A methodology is also proposed for an experiment that allows to exclude the effect of the boundaries of the alloy on the identification of the material properties. Results of the data processing are presented, which are obtained by means of numerical modelling of the experiments under various technological conditions. Considered were (1) a distribution of the impurities in the volume of a rectangular plate, (2) a distribution of impurities on the plate surface with the length covered partly and width fully, (3) a symmetric distribution of impurities, (4) a partially covered by a film plate, with the former being serving as the source of impurities. The influence was analyzed of the technological conditions at the boundary of the solids on the character of the diffusive processes. Distribution functions were found of the concentration of impurities in the material. This allows to solve a set of practically relevant problems such as the determination of the geometry of the diffusive coating, the time of homogenization, the amount of matter diffused through a boundary of a composite material, etc. It was found that for the identification of the characteristics of the diffusive process, it is advantageous to use fast

varying distribution functions rather than slow ones. A numerical experiment was conducted using the commercially available package ANSYS. A rectangular plate was considered with various boundary and initial conditions. Analytical expressions for the distribution functions of the impurities under various boundary and initial conditions were obtained using the symbolic MAPLE software. A comparison of the symbolic and numerical simulations showed that there is a class of the boundary conditions for which the results of these simulations agree well.

Keywords: symbolic and numerical modeling, distribution of concentration, diffusive processes, nano-crystals, nano-materials.