Двумерная связанная задача перераспределения примеси в условиях внешнего нагружения*

М.А. Миколайчук
ИФПМ СО РАН
e-mail: mihail@mikolaichuk.com

А.Г. Князева
ВПО НИ ТПУ

Исследована двумерная задача о насыщении примесью пластины, находящейся в условиях одноосного механического нагружения. Механическая часть задачи сформулирована в рамках гипотезы Бернулли – Эйлера, исходя из которой, поперечными деформациями пренебрегаем, а осевую компоненту перемещений считаем линейной функцией координат в плоскости поперечного сечения образца. Для формулировки диффузионной части задачи рассмотрены два возможных механизма влияния напряжений и деформаций на процесс диффузии. В результате работа напряжений, возникающих в локальных объемах, явным образом влияет на величину коэффициента диффузии.

Взаимное влияние диффузии и напряжений – предмет давних как экспериментальных, так и теоретических исследований. Первые экспериментальные работы в этой области появились в 60-70х годах прошлого века. В основной своей массе они были посвящены исследованию влияния гидростатического давления на диффузию в бинарных металлических системах [1-3]. Подобные исследования продолжаются и в наши дни [4,5], что свидетельствует о неутихающем интересе к этому вопросу. Существует большое количество исследований в области изучения закономерностей диффузионных процессов в геологических средах под высоким давлением [6]. Активно изучается влияние агрессивных сред на напряженно-деформированное состояние тела [7]. Большое количество работ посвящено изучению влияния напряжений, возникающих в полупроводниках из-за нерегулярного строения кристаллической решетки, на диффузию примеси [8-10]. Изучается даже влияние атмосферного давления на процессы массопереноса в полупроводниках [11].

Попытки теоретического описания явлений чаще всего сводятся к рассмотрению того, как поле напряжений сказывается на величине коэффициента диффузии [7,12,10]. Связанность процессов редко принимается во внимание. Есть примеры работ, в которых взаимовлияние процессов учитывается, но анализируется только поле концентрационных напряжений, а влияние внешней нагрузки не рассматривается [13]. В связи с этим, представляют интерес модели, учитывающие взаимное влияние диффузии и напряжений в условиях внешней нагрузки в достаточно строгой математической постановке.

Рассмотрим пластину длинной $2L$, шириной $2h$ и толщиной δ(Рис. 1). На поверхность пластины $z = 0$ нанесено покрытие из материала, отличного от материала пластины, толщиной δ_1. К боковым поверхностям $y = \pm L$ приложена равномерно распределенная нагрузка P, которая может быть как сжимающей, так и растягивающей.

*Работа выполнена в рамках госконтракта № 16.740.11.0122, и при поддержке гранта РФФИ № 10-01-00034

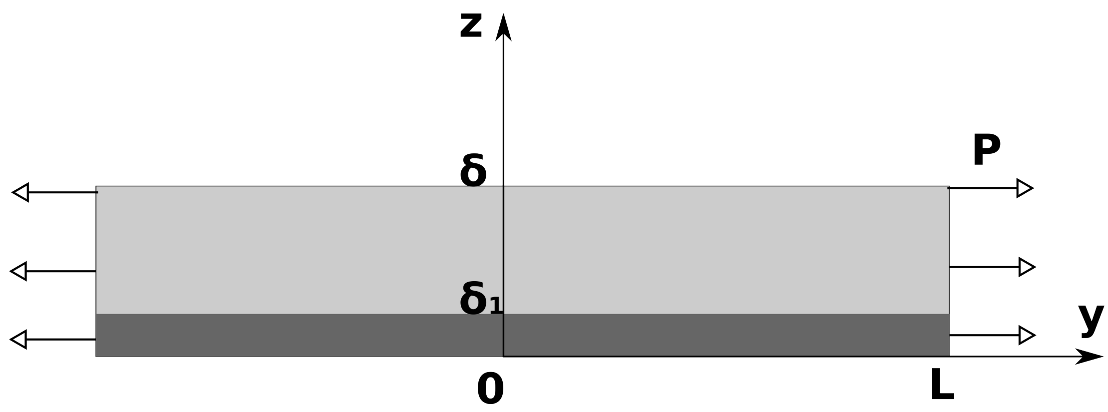

Рис. 1. Рассматриваемая пластина

Вследствие диффузионного отжига примесь проникает вглубь пластины, испытывая влияние внешней нагрузки с одной стороны, и порождая неоднородное поле концентрационных напряжений с другой.

Для описания напряженно деформированного состояния пластины, воспользуемся гипотезой Бернулли – Эйлера, предполагая, что все сечения перпендикулярны осевой линии как до, так и после нагружения, а так же пренебрежем поперечными деформациями. В этом случае компонента перемещения вдоль оси y является линейной функцией координат в произвольной плоскости поперечного сечения [14]

$$u_y = f_0(y) + f_1(y) \cdot x + f_2(y) \cdot z$$

Тогда,

$$\varepsilon_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y} = f_0^{'}(y) + f_1^{'}(y) \cdot x + f_2^{'}(y) \cdot z. \tag{1}$$

В качестве определяющих соотношений воспользуемся соотношениями закона Дюамеля-Неймана

$$\sigma_{ij} = 2\mu\varepsilon_{ij} + \delta_{ij}(\varepsilon_{kk}\lambda - Kw), \tag{2}$$

где w - функция изменения объема,

$$w = 3\sum_{k=i}^{n} \alpha_k \left(\eta_k - \eta_{k0}\right),$$

λ, μ – коэффициенты Ламе, K – изотермический модуль всестороннего сжатия, η_k –концентрация компонента, α_k– коэффициенты концентрационного расширения, k – номер компонента (в дальнейшем индекс «1» будет относиться к области покрытия, «2» к области основы), индекс «0» относится к недеформированному состоянию. Тогда, при условии $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{zz} = 0$ искомые компоненты тензора напряжений следуют из (1):

$$\sigma_{yy} = (\lambda + 2\mu)\varepsilon_{yy} - Kw, \quad \sigma_{xx} = \sigma_{zz} = \lambda\varepsilon_{yy} - Kw. \tag{3}$$

С у четом предположений $\varepsilon_{jj} = \varepsilon_y y$

$$\sigma_{jj} = 2\left[(\lambda + \mu)\varepsilon_{yy} - Kw\right].$$

С помощью условий

$$\frac{1}{S}\int_s \sigma_{yy} dS = P, \int_S \sigma_{yy} x dS = 0, \int_S \sigma_{yy} dS = 0, \tag{4}$$

потребуем, что бы результирующие силы и моменты удовлетворяли условиям равновесия. Подставив выражение для σ_{yy}

$$\sigma_{yy} = (\lambda + 2\mu)\left(f_0^{'}(y) + f_1^{'}(y)\cdot x + f_2^{'}(y)\cdot z\right) - Kw \tag{5}$$

Получим систему трех линейных алгебраических уравнений, разрешив которую, определим неизвестные функции $f_0^{'}, f_1^{'}, f_2^{'}$и как следствие искомые компоненты тензора напряжений.

$$F\cdot f_0^{'} + F_x\cdot f_1^{'} + F_z\cdot f_2^{'} - G = P\cdot S$$

$$F_x\cdot f_0^{'} + F_{x^2}\cdot f_1^{'} + F_{xz}\cdot f_2^{'} - G_x = 0$$

$$F_z\cdot f_0^{'} + F_{xz}\cdot f_1^{'} + F_{z^2}\cdot f_2^{'} - G_z = 0$$

Где

$$F = \int_S (\lambda + 2\mu)\, dS; F_x = \int_S (\lambda + 2\mu)\, xdS; F_z = \int_S (\lambda + 2\mu)\, zdS$$

$$F_{xz} = \int_S (\lambda + 2\mu)\, xzdS; F_{x^2} = \int_S (\lambda + 2\mu)\, x^2 dS; F_{z^2} = \int_S (\lambda + 2\mu)\, z^2 dS$$

$$G = \int_S KwdS; G_x = \int_S KwxdS; G_z = \int_S KwzdS$$

Система решается аналитически,но вследствие громоздкости здесь её решение не приводится. Очевидно, что найденные функции зависят от величины внешней нагрузки, характера распределения примеси и механических свойств как образца, так и примеси.

Для определенности рассмотрим сечение пластины $y = 0$, равноудаленное от поверхностей нагружения (Рис. 2).

В рамках модели[15] рассматривается два механизма влияния напряжений на диффузию. Один из них учитывает влияние работы напряжений, возникающих в образце как вследствие наличия внешней нагрузки, так и вследствие разности атомных размеров основы и примеси, на величину коэффициента диффузии, что приводит к следующей зависимости

$$D^* = D_0 \exp\left(-\frac{k\Pi}{RT}\right), k = k_0\frac{m_1}{\rho_2}, \Pi = -[\sigma_{yy}\varepsilon_{yy} + \sigma_{yx}\varepsilon_{yx} + \sigma_{yz}\varepsilon_{yz}], \tag{6}$$

где k_0– коэффициент чувствительности диффузии к работе напряжений, m_1– молярная масса примеси,ρ_2 – плотность основы, Π– работа напряжений.

Второй механизм воздействия напряжений на диффузию сводится к прямому влиянию напряжений на подвижность атомов. Он подобен явлению массопереноса в жидкостях при наличии градиента давления. Руководствуясь термодинамической теорией [16], запишем выражение для потока компонента в изотермических условиях.

$$\bar{J} = -D\nabla\eta + B\eta\nabla\sigma_{jj} \tag{7}$$

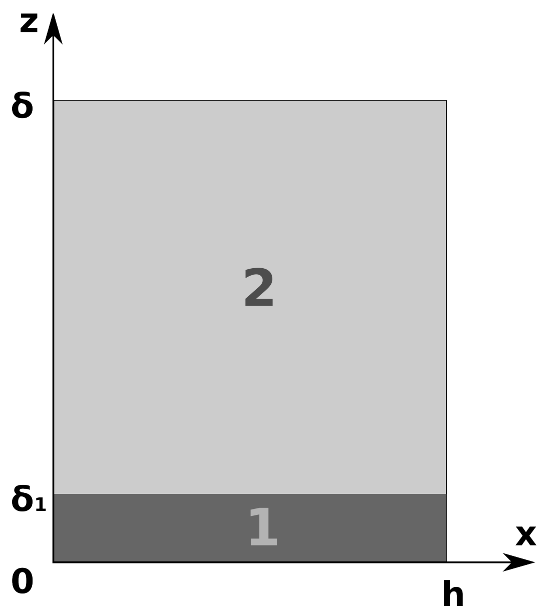

Рис. 2. Сечение $y = 0$

Т.к. смесь – бинарная, нам достаточно следить за концентрацией одного компонента (примеси); концентрацию второго можно узнать исходя из закона сохранения. Коэффициент D в общем случае – функция концентраций

$$D = f(\eta) \cdot D^*$$

где D^* – коэффициент самодиффузии. Коэффициент переноса под действием напряжений Bопределяется следующим образом

$$B = \frac{\alpha_1 D^* m_1}{\rho_2 RT}$$

Воспользовавшись выражением для потока (7), запишем уравнения диффузии для первой и второй областей

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = -\nabla \cdot \bar{J} = \frac{\partial}{\partial x}\left[D\frac{\partial \eta}{\partial x} - B_k \eta \frac{\partial \sigma_{jj}}{\partial x}\right] + \frac{\partial}{\partial y}\left[D\frac{\partial \eta}{\partial y} - B\eta \frac{\partial \sigma_{jj}}{\partial y}\right]$$

В начальный момент времени примесь имеется только в покрытии, следовательно при $t = 0$ имеем

$$\eta = 1, 0 \le x < h; 0 \le z < \delta_1$$
$$\eta = 0, 0 \le x \le h; \delta_1 \le z < \delta$$

Граничные условия имеют вид:

$$z = 0 : \bar{J}_1 = 0$$
$$z = \delta : \bar{J}_2 = 0$$
$$z = \delta_1 : \bar{J}_1 = \bar{J}_2, \eta^- = \eta^+$$
$$x = h : \bar{J}_k = 0$$
$$x = 0 : \bar{J}_k^- = \bar{J}_k^+$$

Здесь знаками плюс и минус обозначены величины с разных сторон границы раздела. Дифузионная задача решалась численно.

Список литературы

[1] Ascoli A., Bollani B., Guarini G. Diffusion of Gold in Lead under Hydrostsic Pressure // Physical Review B. 1977. V.15, N2. P. 507–513.

[2] Decke D. L., Candland C.T., Vanfleet H.B. Diffusion of Pd in Pb at high pressures // Physical Review B. 1975. V.11, N12. P. 4885–4890.

[3] Decke D.L., Ross R.A., Evenson W.E. Pressure effects on the diffusion and solubility of Zn in Pb // Physical Review B. 1977. V.15, N2. P. 507–513.

[4] Erdelyi G., Erdelyi Z., Beke D.L. Pressure dependence of Ni self-diffusion in NiTi // Physical Review B. 2000. V.62, N17. P. 11284–11287.

[5] Knorr P., Jun J., Lojkowski W., Herzig Chr. Pressure dependence of self- and solute diffusion in bcc zirconium // Physical Review B. 1977. V.57, N1. P. 334–340.

[6] Frederic Bejina, Olivier Jaoul, Robert C. Liebermann. Diffusion in minerals at high pressure: a review // Physics of the Earth and Planetary Interiors. 2003, N139. P.3–20.

[7] Ребяков О.Н., Чернявский А.О., Чернявский О.Ф. Деформирование и разрушение материалов и конструкций в условиях диффузии // Вестник ЮрГу. 2010. №10. С. 4-16

[8] Per Kringhoj, Arne Nylandsted Larsen, Sergey Yu. Shirayev. Diffusion of Sb in Strained and Relaxed Si and SiGe // Phys.Rev.Let. 1996. V.76, N18. P.3372-3375.

[9] Moriya N., Feldman L. C. , Luftman H.S. Boron diffusion in Strained Si1-xGex Epitaxial Layers // Phys.Rev.Let. 1993. V.71, N6. P.883-886.

[10] Cowern N.E.B., Zalm P.C., P. van der Sluis. Diffusion in Strained Si(Ge) // Phys.Rev.Let. 1994. V.72, N16. P.2585-2588.

[11] Bal J. K. , Hazra S. Atmospheric pressure induced atomic diffusion into solid crystal // Physical Review B. 2009. V.79, N155405

[12] Aziz Michael J. Thermodynamics of diffusion under pressure and stress: Relation to point defect mechanisms // Appl. Phys. Lett. 1997. V. 70, N 21. P. 2810–2812.

[13] Hamed Haftbaradaran, Jun Song, W.A. Curtin, Huajian Gao. Continuum and atomistic models of strongly coupled diffusion, stress, and solute concentration // Journal of Power Sources. 2011, N196. P.361-370.

[14] Боли Б., Уэйнер Дж. Теория температурных напряжений.—М.: Мир, 1964.— С.510

[15] Миколайчук М.А., Князева А.Г. Влияние напряжений и деформаций на перераспределение примеси в пластине в условиях одноосного нагружения // Прикладная механика и техническая физика. 2010. Т. 51, №3, С. 147-157.

[16] Князева А.Г. Диффузия и реология в локально – равновесной термодинамике // Математическое моделирование систем и процессов, 2005. № 13. С. 45-60