ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

INTERNATIONAL WORKSHOP

«Multiscale Biomechanics and Tribology of Inorganic and Organic Systems»

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

«Перспективные материалы с иерархической структурой для новых технологий и надежных конструкций»

VIII ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ, ПОСВЯЩЕННАЯ 50-ЛЕТИЮ ОСНОВАНИЯ ИНСТИТУТА ХИМИИ НЕФТИ

«Добыча, подготовка, транспорт нефти и газа»

Томск Издательский Дом ТГУ 2019

Секция 4. Научные основы разработки материалов с многоуровневой иерархической структурой, в том числе для экстремальных условий эксплуатации

DOI: 10.17223/9785946218412/212

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗЕРНОГРАНИЧНОЙ ДИФФУЗИЯ С УЧЕТОМ ФОРМЫ ЗЕРНА Чепак-Гизбрехт М.В.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

В настоящее время ведутся разработки в области создания новых материалов для работы в экстремальных условиях. Определение физико-механических свойств материалов, полученных различными методами измельчения структуры, является актуальным. Известно, что в условиях воздействия экстремальных нагрузок меняется не только структура, но и свойства. В условиях нагрева до температур, близких к температурам плавления, в сплавах возникают такие процессы как ползучесть, рекристаллизация, рост зерен, ускорение диффузии. По мере измельчения структуры возрастает роль зернограничной диффузии в таких процессах как ползучесть, сегрегация. Ускоренный перенос примесей в структурированном материале существенным образом сказывается на проводимости. Таким образом, значительный фундаментальный интерес представляет исследование зернограничной диффузии в иерархически структурированном материале.

Впервые оценки распределения концентрации из поверхности в монокристалл, содержащий изолированную границу, осуществил Фишер в 1951 году [1]. Частные решения, полученные на основе этой модели зернограничной диффузии, заложили основу для экспериментальных исследований, поскольку появилась возможность оценить ряд параметров, характеризующих зернограничную диффузию. Прошло еще около сорока с лишним лет исследований, результатом которых стала книга Каура И. и Густа В. [2]. В этой работе содержатся теоретические и экспериментальные данные, показывающие возможности и ограничения модели Фишера и её многочисленных модификаций. В частности, показано, что диффузия в материалах с микроструктурой не может быть описана в рамках упрощенной модели изолированной границы, поскольку пересечение диффузионных потоков из соседних границ вносит существенную погрешность не только при измерениях диффузионных параметров, но и при их теоретических оценках, следовательно, требуются дополнительные исследования. И по сей день идут активные исследования по решению этой проблемы.

В настоящей работе представлены расчеты распределения концентрации с учетом формы зерна в рамках двумерной модели зернограничной диффузии, предложенной в [3]. Модель включает уравнения диффузии в объемной и граничной фазах, начальные и граничные условия. Учитываются нагрев и перенос диффузанта из постоянного источника на поверхности вдоль границ и объемной фазы материала. Предполагается, что коэффициенты диффузии в объемной и граничной фазах зависят от температуры на основе уравнения Аррениуса. Решение задачи получено численно с использованием неявной разностной схемы и метода покоординатной прогонки. Численные расчеты показывают, что форма зерна существенным образом влияет на распределение концентрации в объемной фазе.

Работа выполнена в рамках программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.1.4.

^{1.} Fisher J.C. Calculation of Diffusion Penetration Curves for Surface and Grain Boundary Diffusion // Journal of Applied Physics. 1951. Vol. 22. P. 74-77.

^{2.} Kaur I., Gust W. Fundamentals of grain and interphase boundary diffusion. Stuttgart: Ziegler Press. 1989. 422 p.

^{3.} Chepak-Gizbrekht M.V., Knyazeva A.G. Modeling of grain-boundary diffusion under nonstationary heating conditions // Computational continuum mechanics. 2019. Vol. 12. Iss. 1. P. 57.