

УДК 539.3:534.1

© 1999 г. Н.Ф. МОРОЗОВ, М.В. ПАУКШТО, П.Е. ТОВСТИК

**О ВЛИЯНИИ ОБЪЕМНОЙ ДИФФУЗИИ НА ПОТЕРЮ
 УСТОЙЧИВОСТИ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ
 ПРИ ТЕРМОНАГРУЖЕНИИ**

Исследуется механизм образования регулярных структур на поверхности твердого тела под действием быстрого нагрева поверхностного слоя с учетом объемной диффузии в приповерхностном слое. Работа является продолжением статьи [1].

1. Основные предположения. Пусть твердое тело занимает полупространство $z \leq 0$ с первоначально плоской поверхностью $z = 0$. Имеется поверхностный слой $0 \geq z \geq -h$ толщины h , содержащий точечные дефекты одного сорта (вакансии или включения) с заданной средней по толщине концентрацией C_0 и имеющий заданную (абсолютную) температуру $T(z)$, распределенную по толщине от значения T_1 на поверхности до значения T_0 при $z = -h$. Это же значение температуры сохраняется и при $z < -h$. Такой нагрев может быть вызван, например, лазерным излучением [2, 3]. Диффузионный процесс (объемная, решеточная диффузия) локализован в слое $0 \geq z \geq -h$.

Предположим (см., например, [4]), что плотность свободной гелмгольцевой энергии равна

$$\rho\Psi = \frac{1}{2}(\lambda\varepsilon_{kk}^2 + 2\mu\varepsilon_{ij}\varepsilon_{ij}) - (3\lambda + 2\mu)(\beta C + \alpha\Theta)\varepsilon_{kk} + \eta\Theta C + \frac{1}{2}m\Theta^2 + \frac{1}{2}\delta C^2 + \rho kTC(\ln C - 1) + \text{const}, \quad \Theta = T - T_0 \quad (1.1)$$

Здесь λ и μ – упругие постоянные, ρ – плотность, k – постоянная Больцмана, C – концентрация дефектов. Значения других постоянных (α , β , η , m , δ) будут далее уточнены.

Для компонент тензора напряжений и химического потенциала имеем по определению

$$\sigma_{ij} = \partial(\rho\Psi) / \partial\varepsilon_{ij} = \mu(\omega - 1)\delta_{ij}\varepsilon_{kk} + 2\mu\varepsilon_{ij} - \mu(3\omega - 1)\delta_{ij}(\beta C + \alpha\Theta) \quad (1.2)$$

$$\chi = \partial\Psi / \partial C = kT \ln C - \mu(3\omega - 1)\beta V\varepsilon_{kk} + \delta VC + \eta V\Theta$$

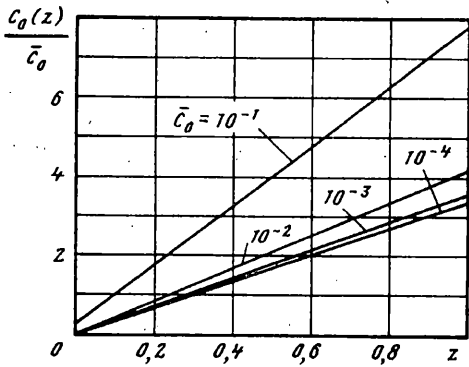
где V – атомный объем основной структуры, $\omega = (\lambda + \mu)/\mu$.

Анализ соотношений (1.2) позволяет найти (см. [5]) необходимые условия корректности модели $\delta = 3\mu(3\omega - 1)\beta^2$, $\eta = 3\alpha\beta\mu(3\omega - 1)$. Поэтому с учетом соотношения

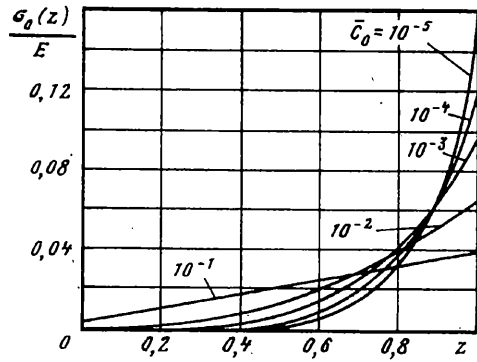
$$\sigma_{kk} = \mu(3\omega - 1)(\varepsilon_{kk} - 3\beta C - 3\alpha\Theta) \quad (1.3)$$

непосредственно следующего из (1.2), химический потенциал запишется в виде

$$\chi = kT \ln C - \beta V\sigma_{kk} \quad (1.4)$$



Фиг. 1



Фиг. 2

Диффузионный поток дается классической формулой: $\mathbf{J} = -M C \text{ grad } \chi$, $M = D/(kT)$, где D – постоянная диффузии.

Основное (равновесное) состояние упругого полупространства характеризуется функцией концентрации дефектов $C_0(z)$ и вектором малых упругих смещений $\mathbf{u}^0(z) = (u_1^0(z), u_2^0(z), u_3^0(z))$. Это состояние определяется из системы уравнений

$$\text{div } \mathbf{J} = -D \text{ div} \left(\frac{C_0}{T} \text{ grad} \left(T \ln C_0 - \frac{\beta V}{k} \sigma_{kk}^0 \right) \right) = 0$$

$$\frac{\partial \sigma_{ij}^0}{\partial x_i} = \mu \left(\Delta u_i^0 + \frac{\partial}{\partial x_i} (\omega \text{ div } \mathbf{u}^0 - (3\omega - 1)(\alpha \Theta + \beta C_0)) \right) = 0, \quad x_3 = z > -h$$

$$\Delta \mathbf{u}^0 + \omega \text{ grad div } \mathbf{u}^0 = 0, \quad x_3 = z < -h \quad (1.5)$$

при граничных условиях

$$\sigma_{ij}^0 n_j |_{z=0} = 0, \quad \mathbf{Jn} |_{z=0} = \mathbf{Jn} |_{z=-h} = 0 \quad (i, j = 1, 2, 3)$$

$$\sigma_{ij}^0 n_j |_{z=-h+0} = \sigma_{ij}^0 n_j |_{z=-h-0}, \quad u_i^0 |_{z=-h+0} = u_i^0 |_{z=-h-0} \quad (1.6)$$

$$\sigma_{ij}^0, u_i^0 \rightarrow 0, \quad z \rightarrow -\infty$$

и условия нормировки

$$\frac{1}{h} \int_{-h}^0 C_0(z) dz = \bar{C}_0 \quad (1.7)$$

Предполагается, что $C_0(z) = 0$ при $z < -h$.

Решение задачи (1.5)–(1.7) при произвольном распределении температуры $T(z)$ может быть получено численно. Такое решение в случае линейного по толщине распределения температуры представлено на фиг. 1, 2, где приведены распределения концентрации дефектов и сжимающих напряжений при различных значениях средней концентрации \bar{C}_0 .

Далее рассматривается случай ступенчатого распределения температуры, причем $T(z) = T_1$ при $0 > z > -h$. В этом случае решение задачи имеет вид

$$u_1^0 = u_2^0 = 0, \quad u_3^0 = \frac{(3\omega - 1)[\alpha(T_1 - T_0) + \beta C_0](h + z)}{\omega + 1}$$

$$\epsilon_{33}^0 = \frac{(3\omega - 1)[\alpha(T_1 - T_0) + \beta C_0]}{\omega + 1} = \frac{1 + \nu}{1 - \nu} (\alpha \Theta + \beta C_0) \quad (1.8)$$

$$\sigma_{11}^0 = \sigma_{22}^0 = -\sigma_0, \quad \sigma_0 = 2\mu\varepsilon_{33}^0, \quad C_0 = \bar{C}_0$$

а остальные ε_{ij}^0 и σ_{ij}^0 равны нулю.

2. Задача бифуркации. Рассмотрим задачу о бифуркации в окрестности основного состояния (1.8). В качестве параметра нагружения примем $\Theta = T_1 - T_0$. Решение задачи

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \left(\frac{C}{T} \operatorname{grad} \left(T \ln C - \frac{\beta V}{k} \sigma_{kk} \right) \right) &= 0, \quad -h < z < 0 \\ \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\sigma_{ij}^1 + \delta_{i3} \frac{\partial u_3^0}{\partial x_3} \sigma_{j3}^1 + \sigma_{jk}^0 \frac{\partial u_i^1}{\partial x_k} \right) &= 0, \quad -h < z < 0 \\ \Delta \mathbf{u}^1 + \omega \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{u}^1 &= 0, \quad z < -h \quad (i, j, k = 1, 2, 3) \end{aligned} \quad (2.1)$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^0(z) + \mathbf{u}^1(x_1, x_2, z) = \mathbf{u}^0(z) + \varepsilon \mathbf{w}(x_1, x_2, z), \quad \varepsilon > 0$$

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^0 + \sigma_{ij}^1, \quad C = C_0 + C^1(x_1, x_2, z)$$

будем искать в классе (l, l) -периодических по переменным x_1, x_2 функций $\mathbf{u}^1(x_1, x_2, z)$, $C^1(x_1, x_2, z)$ при граничных условиях, аналогичных условиям (1.6)

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} n_j |_{z=0} &= 0, \quad \mathbf{Jn} |_{z=0} = \mathbf{Jn} |_{z=0, -h} = 0 \quad (i, j = 1, 2, 3) \\ \sigma_{ij} n_j |_{z=-h+0} &= \sigma_{ij} n_j |_{z=-h-0}, \quad u_i |_{z=-h+0} = u_i |_{z=-h-0} \\ \sigma_{ij}, u_i &\rightarrow 0, \quad z \rightarrow -\infty \end{aligned} \quad (2.2)$$

Заметим, что решение первого из уравнений (2.1) с граничными условиями $\mathbf{Jn} = 0$ при $z = 0, -h$ дается формулой

$$C = \exp \left(\frac{\beta V}{kT} (\sigma_{kk} + \sigma^*) \right), \quad -h < z < 0 \quad (2.3)$$

причем постоянная σ^* находится из условия

$$\int_{-h}^0 \int_0^l \int_0^l C(x_1, x_2, z) dx_1 dx_2 dz = l^2 h \bar{C}_0 \quad (2.4)$$

С учетом равенства (1.3) находим

$$\frac{1}{3\beta} \varepsilon_{kk} - \frac{\alpha}{\beta} \Theta + \frac{\sigma^*}{3\beta\mu(3\omega - 1)} = F(C) \equiv C + \frac{kT}{3\beta^2 V \mu (3\omega - 1)} \ln C \quad (2.5)$$

Коэффициент при логарифме в (2.5) положителен, поэтому функция $F(C)$ монотонна на промежутке $(0, \infty)$ и принимает на этом промежутке все значения из интервала $(-\infty, \infty)$. Таким образом, уравнение (2.5) всегда разрешимо относительно C :

$$C = F^{-1} \left(\frac{1}{3\beta} \varepsilon_{kk} - \frac{\alpha}{\beta} \Theta + \frac{\sigma^*}{3\beta\mu(3\omega - 1)} \right) \quad (2.6)$$

Учитывая вид основного состояния (1.8), запишем второе уравнение (2.1) в виде

$$\Delta u_i^1 + \omega \frac{\partial}{\partial x_i} \operatorname{div} \mathbf{u}^1 = \frac{\sigma_0}{\mu(1 + \delta_{3i} \varepsilon_{33}^0)} \Delta^1 u_i^1 + (3\omega - 1) \beta \frac{\partial C}{\partial x_i} \quad (i = 1, 2, 3) \quad (2.7)$$

где Δ^1 – оператор Лапласа по переменным x_1, x_2 .

Из равенства (2.5) имеем

$$\frac{1}{3\beta} \nabla \varepsilon_{kk} = \left(1 + \frac{k_0(T_0 + \Theta)}{C} \right) \nabla C, \quad k_0 = \frac{k}{3\beta^2 V \mu (3\omega - 1)} \quad (2.8)$$

Теперь уравнение (2.7) запишется в виде

$$\Delta u_i^1 + \omega \frac{\partial \operatorname{div} \mathbf{u}^1}{\partial x_i} = \frac{(3\omega - 1)C}{3(C + k_0(T_0 + \Theta))} \frac{\partial \operatorname{div} \mathbf{u}^1}{\partial x_i} + \frac{\sigma_0 \Delta^1 u_i^1}{\mu(1 + \delta_{3i} \varepsilon_{33}^0)} \quad (2.9)$$

причем концентрация C определяется равенством (2.6), а постоянная σ^* находится из условия

$$\int_{-h}^0 \int_0^l \int_0^l F^{-1} \left(\frac{1}{3\beta} \operatorname{div} \mathbf{u} - \frac{\alpha}{\beta} \Theta + \frac{\sigma^*}{3\beta\mu(3\omega - 1)} \right) dx_1 dx_2 dz = l^2 h \bar{C}_0 \quad (2.10)$$

так что средняя концентрация точечных дефектов постоянна.

Из равенства (2.10) следует, что σ^* – функционал, зависящий от $\operatorname{div} \mathbf{u}$. Обычным путем найдем линейную часть этого функционала в окрестности основного состояния. Вычисляя вариацию от обеих частей (2.10), получим

$$\frac{C_0}{C_0 + k_0(T_0 + \Theta)} \int_{-h}^0 \int_0^l \int_0^l \left(\frac{\operatorname{div} \mathbf{w}}{3\beta} + \frac{\sigma_{\varepsilon=0}^* (\operatorname{div} \mathbf{w})}{3\beta\mu(3\omega - 1)} \right) dx_1 dx_2 dz = 0 \quad (2.11)$$

где $\sigma_{\varepsilon=0}^*$ (v) – линейный непрерывный функционал, являющийся линейной частью функционала σ^* в окрестности основного состояния. Из последнего равенства находим для этого функционала выражение

$$\sigma_{\varepsilon=0}^* (v) = -\mu(3\omega - 1) \frac{1}{l^2 h} \int_{-h}^0 \int_0^l \int_0^l v(x_1, x_2, z) dx_1 dx_2 dz \quad (2.12)$$

Линейная часть первого слагаемого в правой части (2.9) в окрестности основного состояния запишется в виде

$$\frac{C_0 \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{w}}{C_0 + k_0(T_0 + \Theta)} + \frac{C_0 k_0 (T_0 + \Theta) \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{u}^0}{(C_0 + k_0(T_0 + \Theta))^3} \left(\frac{\operatorname{div} \mathbf{w}}{3\beta} + \frac{\sigma_{\varepsilon=0}^* (\operatorname{div} \mathbf{w})}{3\beta\mu(3\omega - 1)} \right) \quad (2.13)$$

Таким образом, в случае линеаризации в окрестности решения (1.8) второе слагаемое в (2.13) обращается в нуль и уравнение бифуркации, соответствующее (2.1), запишется в виде

$$\Delta w_i + \Lambda \frac{\partial}{\partial x_i} \operatorname{div} \mathbf{w} = \frac{\sigma_0}{\mu} \Delta^1 w_i, \quad \Lambda = \frac{3\omega k_0 (T_0 + \Theta) + C_0}{3(C_0 + k_0(T_0 + \Theta))} \quad (2.14)$$

Очевидно, что физическая область значений параметра ω лежит в интервале $(1/3, \infty)$, следовательно, $\Lambda > 1/3$ при любых значениях температуры T_1 и концентрации C_0 . Таким образом, параметр Λ соответствует некоторому физически допустимому коэффициенту Пуассона.

Найдем линейные части компонент тензора напряжений в окрестности основного состояния. Вычисляя напряжения (1.1) для поля перемещений $\mathbf{u}^0 + \varepsilon \mathbf{w}$ и дифференцируя по ε , при $\varepsilon = 0$ получим

$$(\sigma_{ij})'_{\varepsilon=0} = \mu(\Lambda - 1) \delta_{ij} \operatorname{div} \mathbf{w} + 2\mu \varepsilon_{ij}(\mathbf{w}) - \frac{C_0 \delta_{ij}}{3(C_0 + k_0(T_0 + \Theta))} \sigma_{\varepsilon=0}^* (\operatorname{div} \mathbf{w}) \quad (2.15)$$

Таким образом, если среднее значение $\text{div } w$ обращается в нуль, что справедливо для периодических по переменным (x_1, x_2) полей перемещений w , то напряженное состояние слоя вблизи невозмущенного состояния с учетом объемной диффузии эквивалентно напряженному состоянию без учета диффузии, но с другим коэффициентом Пуассона, равным $\nu^0 = (1 - 1/\Lambda)/2$.

Следовательно, рассматриваемая задача сводится к уже рассмотренной в [1]. Основываясь на результатах этой работы, найдем зависимость критического напряжения σ_0 от коэффициента Пуассона ν^0 . Эта зависимость представлена ниже

ν^0	-0,99	-0,9	-0,7	-0,5	-0,3	-0,2	0,0	0,1	0,2	0,5
σ_0/E	23,8	2,4	0,9	0,6	0,5	0,4	0,4	0,4	0,3	0,3

Таким образом, критическое значение в рассматриваемой задаче бифуркации равно

$$\min_{\nu^0} \sigma_0 / E \approx 0,3 \quad (2.16)$$

Теперь температура, необходимая для потери устойчивости поверхностного слоя, определяется из соотношения

$$(\alpha\Theta + \beta\bar{C}_0)/(1 - \nu) \approx 0,3 \quad (2.17)$$

Замечание 1. Выше в качестве невозмущенного состояния использовалось состояние (1.8), соответствующее $T(z) = T_1$ при $0 > z > -h$, причем $C_0(z) = \bar{C}_0$. Аналогично может быть рассмотрен и случай произвольного распределения температуры $T(z)$ по толщине. Так, например, в случае линейного по толщине распределения температуры решения $C_0(z)$ и $\sigma_0(z)$ представлены на фиг. 1, 2 при различных значениях начальной концентрации \bar{C}_0 . Значения постоянных взяты из работ [6, 7] и соответствуют диффузии водорода в металле. В этом случае уравнение (2.17) служит хорошим приближением для определения критической температуры.

Замечание 2. Выкладки, связанные с линеаризацией системы (2.1), могут быть значительно упрощены. В частности, для получения линеаризованных уравнений в окрестности состояния (1.8) нет необходимости в явной форме решения (2.3), однако, это решение используется для нахождения начального состояния в случае произвольного распределения температуры по толщине.

Таким образом, очевидно, что учет объемной диффузии понижает значение критической температуры, однако, по-прежнему (см. [1]) плавление металла предшествует потере устойчивости поверхностного слоя.

Авторы признательны Ю.В. Судьенкову за плодотворные дискуссии и представленные экспериментальные данные.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (98-01-001010), (97-01-01164), (96-01-01334) и научного фонда (95 IN-RU-481).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Морозов Н.Ф., Паукито М.В., Товстик П.Е. Устойчивость поверхностного слоя при термонагрузении // Изв. РАН. МТТ. 1998. № 4. С. 130–139.
2. Емельянов В.И., Шлыков Ю.Г. Нелинейная многомодовая теория генерации поверхностных структур под действием мощного лазерного излучения // Изв. РАН. Сер. физич. 1993. Т. 57. № 12. С. 18–38.
3. Судьенков Ю.В., Балашин Ю.А., Юревич В.И. Особенности разрушения оптических поверхностей металлов при воздействии коротких лазерных импульсов // VIII всес. конф. "Взаимодействие оптического излучения с веществом" (тезисы). Ленинград, 1990. Т. 1. С. 116.

4. *Belova I.V., Murch G. E.* Thermal and diffusion-induced stresses in crystalline solids // *J. Appl. Phys.* 1995. V. 77(1). P. 127–134.
5. *Paukshito M.* Stresses in presence of diffusion and void growth // *Proc. 5 Int. Symp. Dynamics of Continua.* Bad Honef. Germany. 1996. P. 1–9.
6. *Lufrano J., Sofronis P., Birnbaum H.K.* Modeling of hydrogen transport and elastically accommodated hydride formation near a crack tip // *J. Mech. Phys. Solids.* 1996. V. 44. No. 2. P. 179–205.
7. *Yokoboti A.T., Nemoto Jr.T., Yamada T.* Numerical analysis on hydrogen diffusion and concentration in solid with emission around the crack tip // *Eng. Fracture Mech.* 1996. V. 55. No. 1. P. 47–60.

С.-Перебур

Поступила в редакцию
24.09.1997