

А.М. Гусак, О.М. Подолян

Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

ОБЕРНЕНИЙ ЭФФЕКТ КИРКЕНДАЛА В МОДЕЛИ ДИФУЗИОННОЙ ПОВЗУЧОСТИ

Розглядається модель дифузійної повзучості в двокомпонентних системах. У цьому випадку виникатиме сегрегація та обернений ефект Кіркендала в зернах. Проаналізовано справедливість припущення, що в режимі стаціонарної повзучості сегрегація досягає насичення. Ефективний коефіцієнт в'язкості залежить від відношення коефіцієнтів дифузії мічених атомів компонентів.

Рассматривается модель диффузионной ползучести в двухкомпонентных системах. В этом случае возникает сегрегация и обратный эффект Киркендала в зёрнах. Проведён анализ справедливости предположения, что в режиме стационарной ползучести сегрегация достигает насыщения. Эффективный коэффициент вязкости зависит от отношения коэффициентов диффузии меченых атомов компонентов.

Creep in binary alloy is analyzed. Segregation and inverse Kirkendal effect are arising in this case. Analysis of validity of the assumption that segregation reaches saturation in steady-state creep conditions is given. Effective viscosity depends on the ratio of diffusivities.

Ключові слова: дифузія, повзучість, обернений ефект Кіркендала, сегрегація.

Стандартна модель Набарро-Херрінга (дифузійної повзучості) була створена для пояснення механізму високотемпературної текучості чистого металу [1,2]. Вона зводиться до опису потоку вакансій, які йдуть від області розтягу до області стиснення. Ясно, що у випадку повзучості бінарного сплаву цей процес буде ускладнюватися, а саме: потік вакансій викликає зворотні потоки атомів А і В різної величини, внаслідок різної рухливості атомів. Тому в області розтягу слід очікувати збагачення на швидкий компонент. Отже, в зернах виникнуть градієнти концентрацій, які в свою чергу вплинуть на величину потоку вакансій (обернений ефект Кіркендала) [3-5]. Отже, слід очікувати наступне:

- 1) сегрегацію в зернах при повзучості сплавів;
- 2) залежність ефективного коефіцієнта в'язкості від концентрації сплаву і від відношення парціальних коефіцієнтів дифузії компонентів.

Розглядається зерно бінарного сплаву, що складається з компонентів А і В. Основні рівняння для потоків враховують неоднорідний розподіл вакансій у зерні [6,7]. Як і в стандартній моделі Набарро-Херрінга, ми «розправляємо» лінії потоків компонентів і вакансій між боковими і торцевими границями зерна. Отже, дифузійну задачу спрощуємо, розглядаючи дифузію як квазіодновимірну.

$$\frac{1}{n} j_v = -D_v \frac{\partial c_v}{\partial x} + (D_B - D_A) \frac{\partial c_B}{\partial x}. \quad (1)$$

$$\frac{1}{n} j_B = -D_B \frac{\partial c_B}{\partial x} + \frac{c_B D_B^*}{c_v} \frac{\partial c_v}{\partial x}. \quad (2)$$

$$J_B = j_B + n c_B u_k. \quad (3)$$

$u_k = \frac{1}{n} j_v$, $c_A = 1 - c_B$. (n – повна концентрація атомів; $\frac{1}{n} = \Omega$ – атомний об'єм).

Як і в стандартній моделі, приймаємо, що різниця концентрацій вакансій між боковими і торцевими границями зерна рівна $\Delta c_v = \frac{p\Omega}{kT}$.

Підставимо рівняння (1) і (2) в (3). Отримаємо наступне:

$$J_B = n \left(-\frac{\partial c_B}{\partial x} (c_A D_B + c_B D_A) + \frac{\partial c_v}{\partial x} \frac{c_B D_B^* - c_B D_v c_v}{c_v} \right) \quad (4)$$

Зробимо припущення, що в режимі стаціонарної повзучості сегрегація досягає насичення (тобто $J_B = 0$). Аналіз справедливості цього припущення поданий у Додатку.

В цьому випадку градієнт концентрації компонента В буде пропорційний градієнту концентрації вакансій:

$$\frac{\partial c_B}{\partial x} = \frac{\partial c_v}{\partial x} \frac{c_A c_B (D_B^* - D_A^*)}{\varphi c_v (c_A D_B^* + c_B D_A^*)} \quad (5)$$

Підставимо рівняння (5) в (1) і отримаємо вираз для потоку вакансій лише через градієнт їхньої концентрації

$$j_v = -n \frac{\partial c_v}{\partial x} \frac{D_B^* D_A^*}{c_v (c_A D_B^* + c_B D_A^*)} \quad (6)$$

З іншого боку $j_v = -n \frac{dh}{dt}$ ($\frac{dh}{dt}$ – швидкість руху торця). Тоді

$$\frac{dh}{dt} = \frac{\partial c_v}{\partial x} \frac{D_B^* D_A^*}{c_v (c_A D_B^* + c_B D_A^*)} \quad (7)$$

Визначимо швидкість повзучості:

$$\dot{\epsilon} = \frac{1}{l} \frac{dh}{dt} = \frac{D\Omega p}{kTl^2} \quad (8)$$

(l – характерний розмір зерна). Підставимо рівняння (7) у (8). Враховуючи, що відхилення концентрації вакансій від рівноваги незначне, $c_v \approx c_{v0}$, маємо:

$$\dot{\epsilon} = \frac{1}{l} \frac{D_B^* D_A^*}{c_v (c_A D_B^* + c_B D_A^*)} = \frac{D_B^* D_A^*}{(c_A D_B^* + c_B D_A^*)} \frac{c_{v0} p\Omega}{c_v l^2 kT} = \frac{D_B^* D_A^*}{(c_A D_B^* + c_B D_A^*)} \frac{p\Omega}{l^2 kT} = D_{eff}^* \frac{p\Omega}{l^2 kT}, \text{ де}$$

$$D_{eff}^* = \frac{D_B^* D_A^*}{(c_A D_B^* + c_B D_A^*)} = D_A^* \frac{1}{1 + c_B \left(\frac{D_A^*}{D_B^*} - 1 \right)}, \quad (9)$$

$$\frac{1}{D_{eff}^*} = \frac{1}{D_A^*} \left[1 + c_B \left(\frac{D_A^*}{D_B^*} - 1 \right) \right]. \quad (10)$$

Саме ефективний коефіцієнт дифузії D_{eff}^* і визначатиме швидкість течії матеріалу. Залежність $\frac{1}{D_{eff}^*}$ („опору” повзучості) від c_B має різний характер для

випадків $\frac{D_A^*}{D_B^*} > 1$ (зростання з ростом c_B) і $\frac{D_A^*}{D_B^*} < 1$ (спадання з ростом c_B).

Залежність приведеної швидкості деформації $\dot{\epsilon} / \left(\frac{p\Omega}{l^2 kT} \right) = D_{eff}^*$ від $\frac{D_A^*}{D_B^*}$ при фіксованих D_A^* і c_B зображена на Рис.1.

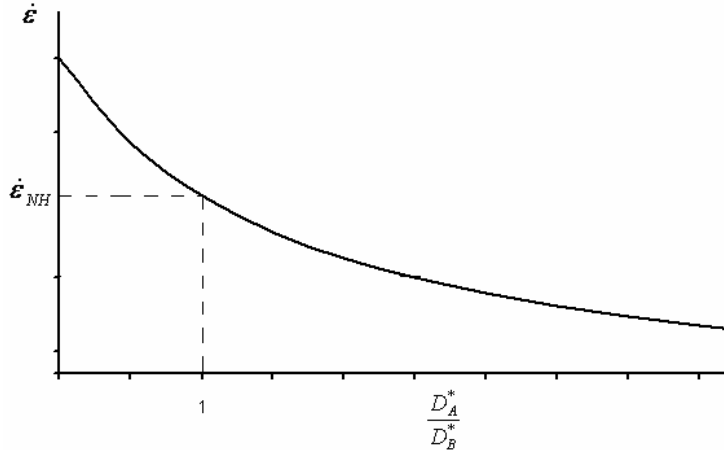


Рис.1. Залежність $\dot{\epsilon}$ від $\frac{D_A^*}{D_B^*}$ при $c_B = 0,6$.

Висновки. Добавка «повільного» компонента В ($\frac{D_A^*}{D_B^*} > 1$) збільшує в'язкість сплаву, тобто зменшує швидкість його течії, не лише за рахунок зменшення коефіцієнта дифузії вакансій, але і внаслідок сегрегації і оберненого ефекту Кіркендала.

Подяки. Робота частково підтримана Державним фондом фундаментальних досліджень України № Ф25.4/162 за договором Ф25/133-2008 „Фазоутворення в умовах швидкісної пластичної деформації і струму” від 14.05.2008 та Міністерством освіти та науки України, № державної реєстрації 0106U004021 „Вплив нерівноважних дефектів на кінетику наноструктурних перетворень”.

Додаток

Запишемо вираз для визначення потоку компонента В:

$$\Omega J_B = \left(-\frac{\partial c_B}{\partial x} (c_A D_B + c_B D_A) + \frac{c_B c_A}{c_v} (D_B^* - D_A^*) \frac{\partial c_v}{\partial x} \right). \quad (D1)$$

Гradient концентрації вакансій приблизно постійний і рівний

$$\frac{\partial c_v}{\partial x} = \frac{c_v \Omega p}{kT l}. \quad (D2)$$

Тому його дивергенція (в квазіодновимірній моделі – похідна) приймається нульовою. Тоді зміна концентрації компоненту визначається як:

$$\frac{\partial c_B}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} (\Omega J_B) = \frac{\partial}{\partial x} \left((c_A D_B + c_B D_A) \frac{\partial c_B}{\partial x} \right). \quad (D3)$$

Розв'язуємо рівняння (Д3) методом кінцевих різниць, розбиваючи інтервал L у квазіодновимірній моделі на N малих частин. Потік на границях дорівнює нулю,

$$J_B(0) = 0, \quad J_B(N) = 0.$$

Тоді граничні умови отримуємо з урахуванням (Д1) і (Д2):

$$c_B(0) = c_B(1) - \Delta x \left[c_A c_B \frac{D_B^* - D_A^*}{c_A D_B + c_B D_A} \frac{p\Omega}{kTl} \right],$$

$$c_B(N) = c_B(N-1) - \Delta x \left[c_A c_B \frac{D_B^* - D_A^*}{c_A D_B + c_B D_A} \frac{p\Omega}{kTl} \right]. \quad (Д4)$$

В результаті моделювання отримуємо профіль потоку, який швидко прямує до нуля (Рис.2).

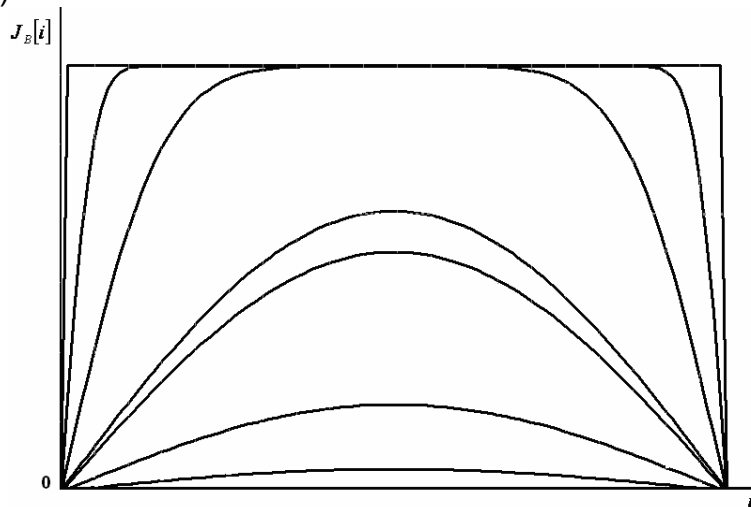


Рис.2. Характерна еволюція профілю потоку компонента В в квазіодновимірній моделі повзучості бінарного сплаву.

1. Б.С. Бокштейн. Диффузия в металлах. М.:«Металлургия», 1978. – 250с.
2. К.-N. Tu, J.W. Mayer, L.C. Feldman. Electronic thin film science for electrical engineers and materials scientists.
3. A D Marwick. "Segregation in irradiated alloys: The inverse Kirkendall effect and the effect of constitution on void swelling", 1978 J. Phys. F: Met. Phys. 8 1849-1861.
4. A.M.Gusak, S.V.Kornienko, G.V.Lutsenko, "Nonequilibrium vacancies in nanosystems". Defects and Diffusion Forum, Vol. 264(2007), pp109-116.
5. A.M. Gusak, G.V. Lutsenko, and K.N. Tu, "Ostwald Ripening with Non-equilibrium Vacancies". Acta Materialia, v.54, 3 (2006) pp.785-791.
6. К.П. Гуров, Б.А. Карташкин, Ю.Є. Угасте. Взаимная диффузия в многокомпонентных металлических системах. М.: Наука, 1981. – 352с.
7. Я.Е. Гегузин. Диффузионная зона. М.: Наука, 1979. – 344с.

Одержано редакцією 27.11.2008
 Прийнято до публікації 29.11.2008