

Л.Г.Ворошнин, докт.техн.наук,  
 Б.М.Хусид, канд.физ.-мат.наук,  
 Б.Б.Хина, аспирант (БПИ)

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ РОСТА СЛОЯ ФАЗЫ ПРИ ХТО

При рассмотрении процессов роста фаз при химико-термической обработке (ХТО) необходимо учитывать как диффузию, так и процессы на границах фаз - кинетику фазового превращения и образования зародышей.

В настоящей работе построена математическая модель роста слоя интерметаллида при ХТО для бинарных систем, в которых на рост диффузионного слоя влияют кинетические факторы. В основу модели положена теория роста бинарного кристалла из расплава [1]. При высокой активности насыщающего элемента А во внешней среде на поверхности образца образуется слой атомов А - фаза 3. В результате взаимодействия фазы 3 с подложкой (фаза 1) возникает слой фазы 2. Для описания процесса роста фаз 2 и 3 разобьем диффузионную зону на слои, параллельные исходной поверхности образца; толщина слоев близка к толщине критического зародыша фазы 2. Считаем, что доля каждой фазы в слое -  $y_i$ ,  $i = 1-3$ ,  $\sum y_i = 1$  - изменяется непрерывно при переходе от одного слоя к другому. Введем скорости перехода атомов из фазы  $i$  в фазу  $j$  -  $P_{ij}$ ,  $i \neq j$  и  $q_{k2}$  - скорости образования зародышей фазы 2 из фазы  $k$ ,  $k = 1, 3$  на неравновесной границе 1 и 3. Изменение  $C_i$  - концентрации атомов А в  $i$ -й фазе,  $i = 1-3$  происходит вследствие диффузии их в каждой фазе и перехода из одной фазы в другую. При рассмотрении диффузионного массопереноса в трехфазной области необходимо учесть эффект Киркендалла. В [2] предлагается не учитывать скорость движения кристаллической решетки в случае, когда зерна отдельных фаз не связаны между собой. В ряде случаев при взаимной диффузии наблюдается ориентированный рост слоя фазы [3], при этом кристаллические решетки растущей и одной из исходных фаз сопрягаются. Будем считать, что в диффузионной зоне есть сопряжение решеток всех трех фаз. В каждой фазе при этом имеет место упругая деформация решеток. Химический потенциал атомов деформированного твердого тела определен в [4]. При сопряжении решеток фаз, находящихся в одном слое диффузионной зоны, скорость их движения можно считать одинаковой. Если считать, что размеры частиц  $i$ -й

фазы в слое малы, то на каждый атом будет действовать сила, изменяющая его скорость диффузии. Для простоты полагаем, что число узлов в единице объема одинаково для всех трех фаз, а вакансии локально квазиравновесны. Изложенная физическая модель приводит к системе уравнений, записанных в матричной форме:

$$\frac{\partial Y}{\partial t} = A \frac{\partial Y}{\partial x}.$$

$$\frac{\partial(ZC)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( ZD \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \Phi, \quad \Phi = LA^{-1} \frac{\partial Y}{\partial x}, \quad (1)$$

где элементы вектора  $Y$  равны  $y_2$  и  $y_3$ ,  $Z$  - диагональная матрица, элементы которой равны соответственно  $y_1, y_2, y_3$ .  $A$  и  $L$  - матрицы размерностью  $2 \times 2$  и  $2 \times 3$  соответственно, элементы которых линейно зависят от  $C_1, C_2, C_3, P_{ij}, i \neq j, i, j = 1-3, q_{k2}, k = 1, 3$  и величин  $y_2/(y_2 + y_3); y_3/(y_2 + y_3)$ . Недиagonальные члены матрицы коэффициентов диффузии  $D$  отражают влияние градиента концентрации атомов  $A$  в  $j$ -й фазе на поток атомов  $A$  в  $i$ -й фазе,  $i \neq j$ , а диагональные - на поток атомов  $A$  в той же фазе.

При переходе к двухфазной системе уравнения (1) сводятся к уравнениям, аналогичным приведенным в [1].

### Л и т е р а т у р а

1. Темкин Д.Е. Кинетические условия на фронте роста смешанного кристалла. - Рост кристаллов, 1980, т. 13, с. 134-142.
2. Гуров К.П., Карташкин Б.А., Чадов А.Н. О некоторых характерных особенностях взаимной диффузии в трехкомпонентной системе. - В кн.: Диффузионные процессы в металлах. Тула: ТПИ, 1980, с. 3-10.
3. Ottaviani G. Review on binary alloy formation by thin film interaction. - J. Vac. Sci. Technol., 1979, v. 16, N 5, p. 1112-1119.
4. Nolfi V.F., jr. Chemical potentials in solids. Scr. Metall., 1980, v. 14, N 12, p. 1323-1330.