Индейцев Д. А., Мочалова Ю. А.
D. A. Indeitsev, Yu. A. Mochalova

ПОВЕРХНОСТНАЯ ДИФФУЗИЯ ВОДОРОДА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ДИНАМИЧЕСКИХ НАГРУЖЕНИЙ ОБРАЗЦА

SURFACE DIFFUSION OF HYDROGEN UNDER DYNAMIC LOADS

Индейцев Дмитрий Анатольевич – член-корреспондент Российской академии наук, профессор, доктор физико-математических наук, научный руководитель Института проблем машиноведения Российской академии наук (Россия, Санкт-Петербург); 199178, г. Санкт-Петербург, Васильевский остров, Большой пр., 61; тел.: + 7 (812) 321-47-78. E-mail: Dmitry.Indeitsev@gmail.com.

Mr. Dmitry A. Indeitsev – Corresponding member Russian Academy of Sciences, Professor, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Scientific Director of Institute of Problems of Engineering Science Russian Academy of Sciences (Russia, Saint-Petersburg); 199178, Saint-Petersburg, Vasilievsky island, Bolshoy pr., 61; tel.: + 7 (812) 321-47-78. E-mail: Dmitry.Indeitsev@gmail.com.

Мочалова Юлия Александровна – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Института проблем машиноведения Российской академии наук (Россия, Санкт-Петербург); 199178, г. Санкт-Петербург, Васильевский остров, Большой пр., 61; тел.: + 7 (812) 321-47-78. E-mail: Dmitry.Indeitsev@gmail.com.

Ms. Yulia A. Mochalova – PhD in Physics and Mathematics, Senior Researcher, Institute of Problems of Mechanical Engineering, Russian Academy of Sciences (Russia, Saint-Petersburg); 199178, Saint-Petersburg, Vasilievsky island, Bolshoy pr., 61; tel.: + 7 (812) 321-47-78. E-mail: Dmitry.Indeitsev@gmail.com.

Аннотация. В рамках двухконтинуумной модели упругой среды изучается взаимовлияние процессов диффузии примеси и деформаций основной структуры. Полагается, что частицы примеси встраиваются в последнюю и изменяют её механические свойства. На примере модельной задачи о перераспределении примеси в одномерном стержне, находящемся под действием циклической нагрузки, указаны особенности локализации примеси и с этим связанное падение обобщённой жесткости образца. Исследован процесс диффузионного роста поверхностной плёнки, вызываемый упругими напряжениями; оценено взаимовлияние диффузионного роста и параметров волн напряжений, распространяющихся в плёнке.

Summary. The authors study the mutual influence of diffusion of impurities and deformations of the basic structures within the framework of the two-path model of an elastic medium. It is believed that the impurity particles are built into the latter and change its mechanical properties. On the example of the model problem of the redistribution of an impurity in a one-dimensional rod under the action of a cyclic load, the features of impurity localization and the drop in the generalized stiffness of the sample are indicated. The process of diffusion growth of a surface film, caused by elastic stresses is focused on; mutual influence of diffusion growth and parameters of stress waves in a film is investigated.

Ключевые слова: упругость, диффузия примеси, вибрационная локализация примеси, напряжения и прочность многокомпонентных тел.

Key words: elasticity, impurity diffusion, vibrational impurity localization, stresses and strength of multicomponent bodies.

УДК 539.3

Работа выполнена при поддержке Программы фундаментальных исследований президиума Российской академии наук на 2018 г. № 31 «Фундаментальные исследования физико-технических проблем энергетики».

Введение

В данной статье мы будем рассматривать проблему взаимного влияния диффузии примеси и деформации упругой среды под действием растягивающих и сжимающих напряжений. Известно, что нестационарные механические нагрузки приводят к перераспределению примеси в материале, что может оказать значительное влияние на механические свойства образца [9]. Исследование диффузии примеси в твёрдых телах, как правило, проводится в рамках феноменологических моделей, которые позволяют учитывать только влияние напряжённого состояния среды на диффузию примеси [3]. При этом остаётся открытым вопрос: какое влияние на механические свойства материала оказывают кинетические процессы (диффузия примеси, осаждение частиц примеси на основную структуру), происходящие в нём? Для описания материала, содержащего примесь, в работах [6; 8] была предложена двухкомпонентная континуальная модель. Взаимодействие между примесью и основной структурой определялось внутренними силами взаимодействия. Было сделано предположение, что внутренние силы взаимодействия зависят от деформации материала (напряжённого состояния) и массообмена между частицами примеси и основной структуры. С помощью этого подхода в работе [8] было описано получение системы определяющих уравнений и исследовано статическое напряжённое состояние материала с примесью. В работе [6] предложена модель для описания процесса структурной перестройки в одномерном образце под действием динамической нагрузки. В ней использовались упрощённые балансовые уравнения, не содержащие конвективной диффузионной части, и изменение механических свойств материала было вызвано структурной перестройкой – абсорбцией примеси на основную структуру (массообменом между частицами примеси и основной структурой). В работе [5] напряжённо-деформируемое состояние материала с примесью было исследовано с помощью методов статистической физики. Было получено хорошее качественное совпадение результатов с результатами, которые даёт двухкомпонентная механическая модель (см. раб. [6; 8]). В работе [7] выведено уравнение движения примеси – обобщённое уравнение диффузии, позволяющее учитывать влияние деформации основной структуры на перераспределение примеси. Рассмотрен одномерный стержень под действием циклической нагрузки; показано, что если не учитывать массообмен между компонентами среды, то частицы примеси локализуются в центральной части образца.

Данная статья, целями которой являются описание с помощью двухкомпонентной модели динамики материала, содержащего примесь; исследование взаимного влияния диффузии примеси и деформации основной структуры, представляет собой продолжение исследований, начало которых отражено в работах [7; 8]. В пункте 1 приведены уравнения двухкомпонентной среды в общем виде. В пункте 2 выводится обобщённое уравнение диффузии и рассматривается модельная задача о перераспределении примеси в одномерном стержне под действием циклической нагрузки. Здесь предполагается, что свободные частицы примеси могут встраиваться в основную структуру и, таким образом, влиять на её механические свойства. В данной работе мы ограничимся исследованием частных (предельных) случаев, которые качественно описывают два важнейших явления, экспериментально наблюдаемых при воздействии вибрации на материалы с примесью, – локализацию концентрации примеси и падение обобщённой жёсткости образца. При работе над обеими задачами получены приближённые аналитические решения, которые хорошо согласуются с проведёнными ранее численными исследованиями и экспериментальными данными. Эти модельные задачи позволяют качественно исследовать особенности диффузионных процессов при нестационарном внешнем воздействии и могут являться тестовыми для анализа сложных задач о взаимном влиянии диффузионных и динамических процессов в многокомпонентных средах и связанных с ними проблем механики прочности материалов.

В пункте 3 с помощью предложенного двухкомпонентного подхода рассматривается другой класс диффузионных задач, а именно изменение поверхности тонкой плёнки, вызванное диффузионным переносом вещества под действием механической нагрузки. Известно, что диффузионные процессы в образце происходят наиболее активно в поверхностном слое (все неприятности происходят именно там – изменение формы поверхности, образование

микротрещин и т. д.). Здесь будем рассматривать тонкий поверхностный слой материала как двумерную структуру и получим уравнение изменения поверхности плёнки, которое позволяет описывать как диффузионный рост плёнки, вызванный упругими напряжениями, так и распространение волн в ней, а также их взаимное влияние.

1. Общие уравнения двухкомпонентной среды

Будем считать, что плёнка состоит из двух подсистем (компонент), то есть в каждой пространственной точке $(\mathbf{x}, t)$ имеют место две материальные компоненты со своими плотностями ρ_1 , ρ_2 и скоростями движения $\mathbf{v}_1$, $\mathbf{v}_2$. Плотность среды ρ_m и скорость $\mathbf{v}_m$ среды в целом в точке $(\mathbf{x}, t)$ удовлетворяют следующим соотношениям: $\rho_m(\mathbf{x}, t) = \rho_1(\mathbf{x}, t) + \rho_2(\mathbf{x}, t)$, $\rho_m(\mathbf{x}, t)\mathbf{v}_m(\mathbf{x}, t) = \rho_1(\mathbf{x}, t)\mathbf{v}_1(\mathbf{x}, t) + \rho_2(\mathbf{x}, t)\mathbf{v}_2(\mathbf{x}, t)$.

Закон сохранения массы для среды в целом выглядит так: $\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{v}_m) = 0$, а для каждой материальной компоненты он будет иметь следующий вид:

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_1 \mathbf{v}_1) = -J, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_2 \mathbf{v}_2) = J, \quad (2)$$

где J – функция источника плотности одной материальной компоненты (источниковый член). Напряжённое состояние каждой компоненты среды выражается тензорами $\boldsymbol{\sigma}_1$, $\boldsymbol{\sigma}_2$, и напряжённое состояние среды в целом $\boldsymbol{\sigma}_m$ выражается $\boldsymbol{\sigma}_m = \boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2$, $\boldsymbol{\sigma}_1 = \boldsymbol{\sigma}_1(\epsilon_1, \dots)$, $\boldsymbol{\sigma}_2 = \boldsymbol{\sigma}_2(\epsilon_2, \dots)$. Для внешних сил $\mathbf{F}_1$, $\mathbf{F}_2$, действующих на первую и вторую компоненты, справедливо

$$\rho_m \mathbf{F}_m = \rho_1 \mathbf{F}_1 + \rho_2 \mathbf{F}_2,$$

где $\mathbf{F}_m$ – внешняя сила, действующая на среду в целом.

Закон сохранения количества движения для среды в целом будет иметь вид

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_m + \rho_m \mathbf{F}_m = \rho_1 \frac{d\mathbf{v}_1}{dt} + \rho_2 \frac{d\mathbf{v}_2}{dt} + J(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1),$$

а для каждой материальной компоненты он будет выглядеть таким образом:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_1 + \rho_1 \mathbf{F}_1 + \mathbf{R} = \rho_1 \frac{d\mathbf{v}_1}{dt} - J\mathbf{v}_1, \quad (3)$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 + \rho_2 \mathbf{F}_2 - \mathbf{R} = \rho_2 \frac{d\mathbf{v}_2}{dt} + J\mathbf{v}_2, \quad (4)$$

где $\mathbf{R}$ – сила взаимодействия между компонентами среды.

2. Уравнение движения примеси. Обобщённое диффузионное уравнение

В рамках двухкомпонентного подхода [8] будем рассматривать две взаимопроникающие среды: динамически деформируемую основную структуру тела (например, решётку металла) и подвижную примесь в теле. Будем предполагать, что возможен массообмен между диффундирующим веществом и основной структурой. Совместное движение и связь этих двух сред описываются в абсолютной системе координат следующей системой уравнений:

- уравнением движения основной структуры

$$\nabla \cdot \sigma = \rho_1 \frac{\partial \mathbf{v}_1}{\partial t} - J\mathbf{v}_1 - \mathbf{R}; \quad (5)$$

- уравнением движения подвижной примеси

$$-\nabla p = \rho_2 \frac{\partial \mathbf{v}_2}{\partial t} + J\mathbf{v}_2 + \mathbf{R}; \quad (6)$$

- уравнением баланса масс основной структуры

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_1 \mathbf{v}_1) = -J; \quad (7)$$

- уравнением баланса масс подвижной примеси

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_2 \mathbf{v}_2) = J; \quad (8)$$

- уравнением состояния основной структуры

$$\sigma = \sigma(\varepsilon); \quad (9)$$

- уравнением состояния подвижной примеси

$$p = p(\rho_2). \quad (10)$$

Здесь ρ_1 , $\mathbf{v}_1$, σ , ε – плотность, вектор скорости, тензор напряжений и деформация первой компоненты соответственно; ρ_2 , $\mathbf{v}_2$, p – плотность, вектор скорости и давление подвижной примеси (вторая компонента). Взаимодействие между компонентами было определено в работе [8], и внутренняя сила взаимодействия основной структуры и подвижной примеси определяется как

$$\mathbf{R} = \mu(\varepsilon)\rho_2(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1). \quad (11)$$

Здесь $\mu(\varepsilon)$ – коэффициент сопротивления. Далее реактивными силами $J\mathbf{v}_1$ и $J\mathbf{v}_2$ в уравнениях (5) и (6) будем пренебрегать.

Система уравнений (5)–(11), дополненная начальными и граничными условиями, описывает динамику среды, содержащей примесь. Введём относительную скорость движения примеси $\mathfrak{V} = \mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1$. Подставляя $\mathbf{v}_2$, выраженную через относительную скорость движения примеси, в (6) и предполагая, что переносные силы инерции много больше относительных, получим

$$\mathfrak{V} = -\frac{1}{\mu(\varepsilon)\rho_2} \left(\nabla p + \rho_2 \frac{\partial \mathbf{v}_1}{\partial t} \right). \quad (12)$$

Подставляя $\mathfrak{V}$ в выражение (8), получим диффузионное уравнение, учитывающее влияние деформации и силы инерции:

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} - \nabla \cdot \left[\frac{1}{\mu(\varepsilon)} \left(\nabla p + \rho_2 \frac{\partial \mathbf{v}_1}{\partial t} \right) - \rho_2 \mathbf{v}_1 \right] = J. \quad (13)$$

Дифференцируя уравнение состояния (10) по ρ_2 и предполагая, что скорость звука в примеси $c_2^2 = \partial p / \partial \rho$ мало меняется, уравнение (13) можно переписать в виде

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} - \nabla \cdot \left[D(\varepsilon) \left(\nabla \rho_2 + \frac{\rho_2}{c_2^2} \frac{\partial \mathbf{v}_1}{\partial t} \right) - \rho_2 \mathbf{v}_1 \right] = J, \quad (14)$$

где $D(\varepsilon) = c_2^2 / \mu(\varepsilon)$ – коэффициент диффузии, который пропорционален характерному размеру проницаемости основной структуры и зависит от сферической деформации [7].

Таким образом, полученное уравнение определяет движение примеси. Первое слагаемое

$$\nabla \cdot \left[D(\varepsilon) \left(\nabla \rho_2 + \frac{\rho_2}{c_2^2} \frac{\partial \mathbf{v}_1}{\partial t} \right) \right] \quad (15)$$

определяет диффузионный перенос примеси. Второе слагаемое $\nabla \cdot [\mathbf{v}_1 \rho_2]$ определяет перенос примеси за счёт движения основной структуры (ранее это слагаемое не учитывалось в [7]). Заметим, что полученное обобщённое уравнение диффузии (14) отличается от известных адвективно-диффузионных уравнений зависимостью коэффициента диффузии от деформации основной структуры, а также наличием в первом «диффузионном» слагаемом (15) члена, определяемого вибрацией основной структуры.

Если нет деформации основной структуры, то уравнение (14) сводится к классическому уравнению диффузии с коэффициентом диффузии $D_0 = D(0)$. Поэтому в первом приближении D определяется экспериментальными значениями [7]. Для малых деформаций можно считать, что значение коэффициента диффузии D линейно зависит от ε и $D(\varepsilon) = D_0 - D_1 \varepsilon$, где $D_1 > 0$.

Система уравнений (5), (7), (9) и (14) позволяет нам определить динамику перераспределения примеси при деформации материала. Заметим, что при решении конкретных задач уравнения должны быть дополнены начальными и граничными условиями.

2.1. Постановка задачи. Система определяющих уравнений

В качестве примера рассмотрим одномерный стержень длиной $2L$, содержащий примесь и находящийся под воздействием циклической нагрузки $F_0 \sin \omega t$, где ω – частота нагрузки.

Обозначим ρ_1^+ плотность частиц примеси, осаждённых на основную структуру, и $\rho_1 = \rho_1^0 + \rho_1^+$, где $\rho_1^0 = \text{const}$. Тогда для плотности осаждённых частиц из уравнения (7) получим

$$\frac{\partial \rho_1^+}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho_1^+ v_1) = -J. \quad (16)$$

Заметим, что $\rho_1^+ \ll \rho_1$ и в уравнении динамики стержня (5) можно считать $\rho_1 = \text{const}$. Кроме того, в большинстве случаев влиянием внутренней силы взаимодействия R на движение основной структуры в уравнении (5) можно пренебречь.

Согласно материалам работы [8], напряжённое состояние основной структуры зависит от плотности осаждённой примеси ρ_1^+ и уравнение состояния для первой компоненты (9) может быть записано в виде

$$\sigma = E(\rho_1^+) \varepsilon, \quad (17)$$

где $E(\rho_1^+)$ – обобщённый модуль Юнга.

Источниковые члены запишем в следующем виде: $J = -\alpha \rho_2$, то есть будем считать, что возможно только встраивание частиц в основную структуру. Коэффициент α характеризует скорость осаждения частиц примеси на кристаллическую решётку и определяется из экспериментальных данных. Более подробно об этом изложено в работах [6; 8].

Переходя в уравнениях (5), (14) и (16) к перемещениям u ($v_1 = \partial u / \partial t$, $\varepsilon = \partial u / \partial x$), получим следующую систему определяющих соотношений для рассматриваемого одномерного стержня:

$$\frac{\partial \sigma}{\partial x} = \rho_1 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}, \quad \sigma = E(\rho_1^+) \varepsilon, \quad (18)$$

$$\frac{\partial \rho_1^+}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_1^+ \frac{\partial u}{\partial t} \right) = \alpha \rho_2, \quad (19)$$

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left[(D_0 - D_1 \frac{\partial u}{\partial x}) \left(\frac{\partial \rho_2}{\partial x} + \frac{\rho_2}{c_2^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right) - \rho_2 \frac{\partial u}{\partial t} \right] = -\alpha \rho_2 \quad (20)$$

со следующими граничными и начальными условиями:

$$u|_{x=0} = 0, \quad \sigma|_{x=L} = F_0 \sin \omega t, \quad (21)$$

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial x}|_{x=0} = 0, \quad (D_0 - D_1 \frac{\partial u}{\partial x}) \left[\frac{\partial \rho_2}{\partial x} + \frac{\rho_2}{c_2^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right] - \rho_2 \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{x=L} = 0, \quad (22)$$

$$\rho_2|_{t=0} = \rho_0(x), \quad \rho_1^+|_{t=0} = 0.$$

Введём безразмерные величины (параметры) следующим образом:

$$t_1 = \frac{D_0}{L^2} t, \quad x_1 = \frac{x}{L}, \quad \bar{u} = \frac{u}{L}, \quad \bar{\rho}_2 = \frac{\rho_2}{\rho_1}, \quad \Omega = \frac{L^2}{D_0} \omega, \quad \bar{\sigma} = \frac{L^2}{\rho_1 D_0^2} \sigma, \\ \bar{E}_0 = \frac{L^2}{\rho_1 D_0^2} E_0, \quad \bar{\alpha} = \frac{\alpha L^2}{D_0}, \quad \beta = D_1 / D_0, \quad \eta = \frac{D_0^2}{c_2^2 L^2}.$$

Тогда система уравнений (18)–(20) принимает вид

$$\frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial x_1} = \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial t_1^2}, \quad \bar{\sigma} = \bar{E}(\bar{\rho}_1^+) \varepsilon, \quad (23)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}_2}{\partial t_1} - \frac{\partial}{\partial x_1} \left[(1 - \beta \frac{\partial \bar{u}}{\partial x_1}) \left(\frac{\partial \bar{\rho}_2}{\partial x_1} + \eta \bar{\rho}_2 \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial t_1^2} \right) - \bar{\rho}_2 \frac{\partial \bar{u}}{\partial t_1} \right] = -\bar{\alpha} \bar{\rho}_2, \quad (24)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}_1^+}{\partial t_1} + \frac{\partial}{\partial x_1} \left[\bar{\rho}_1^+ \frac{\partial \bar{u}}{\partial t_1} \right] = \bar{\alpha} \bar{\rho}_2; \quad (25)$$

с граничными условиями:

$$\bar{u}|_{x_1=0} = 0, \quad \bar{\sigma}|_{x_1=1} = \bar{F}_0 \sin \Omega t_1, \\ \frac{\partial \bar{\rho}_2}{\partial x_1} \Big|_{x_1=0} = 0, \quad (1 - \beta \frac{\partial \bar{u}}{\partial x_1}) \left(\frac{\partial \bar{\rho}_2}{\partial x_1} + \eta \bar{\rho}_2 \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial t_1^2} \right) - \bar{\rho}_2 \frac{\partial \bar{u}}{\partial t_1} \Big|_{x_1=1} = 0, \quad (26)$$

где $\bar{F}_0 = L^2 F_0 / \rho_1 D_0^2$ и начальные условия

$$\bar{\rho}_2|_{t_1=0} = \bar{\rho}_0(x), \quad \bar{\rho}_1^+|_{t_1=0} = 0. \quad (27)$$

Система уравнений (23)–(27) сложна для прямого математического анализа, так как описывает взаимосвязь динамических процессов, имеющих разные временные масштабы: волновые процессы в основной структуре, диффузию примеси и массообмен между компонентами. Поэтому мы рассмотрим ряд частных случаев. Далее черту над величинами (верхнее подчеркивание) опускаем.

2.2. Локализация диффузионного процесса

Пусть $J = 0$, то есть нет массообмена между компонентами. В этом случае частицы примеси не оседают на решётку, $\rho_1^+ = 0$ и модуль Юнга материала остаётся постоянным $E = E_0$. Таким образом, система уравнений (23)–(27) распадается на две задачи. Первая задача определяет колебания стержня под действием вибрационной нагрузки, приложенной на его концах:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c_0^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (28)$$

$$u|_{x=0} = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial x}|_{x=1} = F_0 \sin \Omega t_1. \quad (29)$$

Здесь $c_0^2 = (cL/D_0)^2$, $c = \sqrt{E_0/\rho_1}$ – скорость звука в стержне. Естественно считать колебания стержня установившимся процессом и, таким образом, решение задачи (28), (29) будет иметь следующий вид:

$$u(x, t) = \frac{c_0 F_0}{\Omega \cos(\Omega / c_0)} \sin \Omega t \sin(\Omega x / c_0).$$

Заметим, что $\Omega / c_0 \ll 1$, тогда

$$u(x, t) = F_0 x \sin \Omega t. \quad (30)$$

Вторая задача описывает перераспределение примеси в стержне под действием вибрационной нагрузки:

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left[(1 - \beta \frac{\partial u}{\partial x}) \left(\frac{\partial \rho_2}{\partial x} + \eta \rho_2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right) - \rho_2 \frac{\partial u}{\partial t} \right] = 0, \quad (31)$$

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial x}|_{x=0} = 0, \quad (1 - \beta \frac{\partial u}{\partial x}) \left(\frac{\partial \rho_2}{\partial x} + \eta \rho_2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right) - \rho_2 \frac{\partial u}{\partial t} |_{x=1} = 0, \quad (32)$$

$$\rho_2|_{t=0} = \rho_0(x). \quad (33)$$

Обратимся к исследованию обобщённого уравнения диффузии. Заметим, что если деформации основной структуры нет, то уравнение (31) превращается в классическое уравнение диффузии. Решение соответствующей задачи Коши известно, и диффузия приводит к равномерному распределению плотности примеси по длине стержня:

$$\rho_2 = \int_0^1 \rho_0 dx \quad \text{для} \quad t \rightarrow \infty.$$

Если в начальный момент времени распределение примеси постоянная величина $\rho_0 = \text{const}$, то диффузии примеси не происходит.

Если считать, что коэффициент диффузии не зависит от деформации стержня, то задача (31)–(33) сводится к следующей:

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial \rho_2}{\partial x} - \rho_2 \frac{\partial u}{\partial t} \right] = 0,$$

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0, \quad \frac{\partial \rho_2}{\partial x} - \rho_2 \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{x=1} = 0,$$

$$\rho_2 \Big|_{t=0} = \rho_0(x).$$

Здесь $u(x, t)$ определяется (30). Это так называемое адвективно-диффузионное уравнение с переменным (периодическим) коэффициентом, которое подробно исследовано и хорошо поддается численному анализу. Диффузия приводит к перераспределению примеси с последующими колебаниями концентрации примеси около среднего значения, которые вызваны вибрационным воздействием. Максимальные значения концентрации примеси достигаются на концах и в центральной части образца. Обратимся к общему случаю (31)–(33). Будем предполагать, что при вибрации стержня с частотой Ω плотность примеси ρ_2 , а также производные $\partial \rho_2 / \partial x$, $\partial^2 \rho_2 / \partial x^2$ мало меняются за период колебаний, то есть $\langle \rho_2(x, t) \rangle = \frac{\Omega}{2\pi} \int_0^{2\pi/\Omega} \rho_2(x, t) dt = \rho_2(x, t)$. Тогда, подставляя (30) в (31)–(33) и усредняя полученную систему по интервалу $[t, t + 2\pi / \Omega]$, получим следующую задачу Коши:

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial \rho_2}{\partial x} + \gamma x \rho_2 \right], \quad (34)$$

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial x} + \gamma x \rho_2 \Big|_{x=1} = 0, \quad \frac{\partial \rho_2}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0, \quad (35)$$

$$\rho_2 \Big|_{t=0} = \rho_0, \quad (36)$$

где $\gamma = \beta \eta A_0^2 \Omega^2 / 2$. Решение задачи (34)–(36) будем искать с помощью метода разделения переменных. Поэтому сначала решим соответствующую задачу Штурма – Лиувилля, а именно определим те значения параметра λ , при которых существуют нетривиальные решения уравнения

$$L\varphi = -\lambda\varphi, \quad L\varphi = (\varphi_x + \gamma x\varphi)'_x, \quad (37)$$

удовлетворяющие граничным условиям

$$\varphi_x \Big|_{x=0} = 0, \quad \varphi_x + \gamma\varphi \Big|_{x=1} = 0. \quad (38)$$

Заметим, что преобразованиями $\varphi = \exp(-\gamma\zeta^2/4)\psi$ и $x = \sqrt{\gamma}\zeta$ уравнение (37) приводится к уравнению параболического цилиндра стандартной формы $v_{\zeta\zeta} - [\frac{1}{4}\zeta^2 - \frac{1}{2} - \lambda]\psi = 0$, решение которого удобно записать через вырожденные гипергеометрические функции [2]. Тогда решение (37) может быть представлено в виде

$$\varphi(x) = \left[a {}_1F_1\left(-\frac{\lambda}{2\gamma}, \frac{1}{2}, \frac{\gamma x^2}{2}\right) + b x {}_1F_1\left(\frac{\gamma - \lambda}{2\gamma}, \frac{3}{2}, \frac{\gamma x^2}{2}\right) \right] e^{-\gamma x^2/2}, \quad (39)$$

где ${}_1F_1$ – вырожденная гипергеометрическая функция; a , b – неизвестные постоянные.

Дифференцируя (39) по x и подставляя полученные результаты в граничные условия (38), получим $b = 0$, и уравнение для определения собственных чисел λ имеет вид

$$\gamma {}_1F_1\left(-\frac{\lambda}{2\gamma}, \frac{1}{2}, \frac{\gamma}{2}\right) - (\gamma + \lambda) {}_1F_1\left(-\frac{\lambda}{2\gamma}, \frac{3}{2}, \frac{\gamma}{2}\right) = 0. \quad (40)$$

Исследуя (40) для различных значений параметра γ , получим, что оператор L имеет простой дискретный спектр собственных чисел, начинающийся с $\lambda_0 = 0$:

$$0 < \lambda_1 < \lambda_2 < \dots$$

Соответствующие собственные функции определяются выражением

$$\varphi_k(x) = {}_1F_1\left(-\frac{\lambda_k}{2\gamma}, \frac{1}{2}, \frac{\gamma x^2}{2}\right) \exp(-\gamma x^2/2) / N_k, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (41)$$

где $N_k = [\int_0^1 {}_1F_1(-\frac{\lambda_k}{2\gamma}, \frac{1}{2}, \frac{\gamma x^2}{2}) e^{-\gamma x^2/2} dx]^{1/2}$ ($k = 0, 1, \dots$) – нормирующие коэффициенты.

Заметим, что при $\gamma \rightarrow 0$ собственные числа спектральной задачи (37) и (38) $\lambda_k \rightarrow (\pi k)^2$, а соответствующие собственные функции $\varphi_k \rightarrow \cos \pi k x$, $k = 0, 1, \dots$. При $\gamma < 1$ это даёт хорошее приближение собственных чисел и собственных функций оператора L .

Будем искать решение исходной задачи Коши (34)–(36) в виде разложения по найденным собственным формам:

$$\rho_2(x, t) = \varphi_0(x) q_0(t) + \sum_{k=1}^{\infty} \varphi_k(x) q_k(t). \quad (42)$$

Подставляя (42) в (34)–(36), получим для определения обобщённых функций $q_k(t)$ следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} \dot{q}_0 &= 0, \\ \dot{q}_k + \lambda_k q_k &= 0, \quad k = 1, \dots, \\ q_k|_{t=0} &= (\varphi_k, \rho_0(x)), \quad k = 0, 1, \dots \end{aligned}$$

Здесь $(\varphi_k, \rho_0(x)) = \int_0^1 \rho_0(x) \varphi_k(x) dx$. Тогда решение задачи Коши (34)–(36) имеет вид

$$\begin{aligned} \rho_2(x, t) &= c_0 \exp(-\gamma x^2/2) + \sum_{k=1}^{\infty} c_k {}_1F_1\left(-\frac{\lambda_k}{2\gamma}, \frac{1}{2}, \frac{\gamma x^2}{2}\right) \exp(-\lambda_k t - \gamma x^2/2), \\ c_k &= \frac{1}{N_k} \int_0^1 \rho_0(x) \varphi_k(x) dx, \quad k = 0, 1, \dots \end{aligned} \quad (43)$$

Собственные числа λ_k определяются из уравнения (40). Если $\rho_0 = \text{const}$, то при больших t плотность $\rho_2(x, t)$ стремится к стационарному решению (34), которое имеет вид

$$\rho_2(x, t) \rightarrow \sqrt{\frac{2\gamma}{\pi}} \frac{\rho_0}{\text{erf} \sqrt{\gamma/2}} \exp(-\gamma x^2/2), \quad t \rightarrow \infty.$$

Таким образом, полученное приближённое аналитическое решение задачи показывает, что влияние колебаний приводит к накоплению примеси в центральной части стержня. Если рассматривать в качестве примеси растворённый в металле водород, то полученное решение качественно описывает экспериментально наблюдаемое явление перераспределения водорода

в стальном образце под действием длительной циклической нагрузки [4; 9]. Кроме того, решение согласуется с численными результатами, описанными в работе [7].

2.3. Структурные изменения в материале

Рассмотрим второй частный случай. Будем пренебрегать конвективной диффузионной частью в уравнениях баланса масс (19) и (20), то есть будем предполагать, что плотности компонент почти не меняются по длине стержня $\rho_2(x, t) = \rho_2(t)$, $\rho_1^+(x, t) = \rho_1^+(t)$. Тогда решение уравнений (24) и (25) имеет вид

$$\rho_2 = \rho_0 \exp\{-\alpha t\}, \quad \rho_1^+ = \rho_0(1 - \exp\{-\alpha t\}).$$

Модуль упругости в соответствии с моделью, предложенной в работе [8], принимает вид $E(\rho_1^+) = 1/[1 + \kappa(1 - \exp\{-\alpha t\})]$, и уравнение движения основной структуры (23) можно записать в виде

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = [1 + \kappa(1 - \exp\{-\alpha t\})] \frac{\partial^2 u}{\partial t^2},$$

$$u|_{x=0} = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial x}|_{x=1} = \bar{F}_0[1 + \kappa(1 - \exp\{-\alpha t\})] \sin \Omega t,$$

где κ – безразмерный коэффициент, определяющий отношение модуля Юнга «чистого» материала к модулю Юнга материала со встроенными частицами примеси.

Считая $\alpha/\Omega \ll 1$ (малый параметр), будем решать задачу, используя метод многих масштабов. Введём два масштаба времени – t и $\tau = \alpha t$ – и для нулевого приближения получим следующую задачу:

$$\frac{\partial^2 u_0}{\partial x^2} = [1 + \kappa(1 - \exp\{-\tau\})] \frac{\partial^2 u_0}{\partial t^2},$$

$$u_0|_{x=0} = 0, \quad \frac{\partial u_0}{\partial x}|_{x=1} = \bar{F}_0[1 + \kappa_2(1 - \exp\{-\tau\})] \sin \Omega t,$$

решение которой имеет вид

$$u_0(x, t, \tau) = \frac{\bar{F}_0 \Omega_0(\tau)}{\Omega^2 \cos \Omega_0(\tau)} \sin \Omega_0(\tau) x \sin \Omega t,$$

где $\Omega_0(\tau) = \Omega \sqrt{1 + \kappa(1 - e^{-\tau})}$. Таким образом, в предположении, что $\alpha \ll 1$, получим «медленное» падение жёсткости конструкции и увеличение амплитуды колебаний. Если $\alpha \ll 1$, то свободный водород встраивается в решётку со скоростью, превышающей скорость звука в материале, и структурная перестройка в материале (изменение обобщённой жёсткости конструкции) происходит почти мгновенно. Из экспериментальных данных известно, что скорость таких изменений действительно может быть выше скорости звука в материале [6].

В данной модели мы считали α постоянной величиной, но, по всей видимости, α , как и коэффициент диффузии, должна зависеть от деформации основной структуры, а возможно и концентрации примеси.

В конце данного раздела сделаем несколько замечаний. Предложенная двухкомпонентная модель, которая позволяет описать диффузию примеси в деформируемом материале и изменения структуры материала (в частности, водородного охрупчивания металла) и сводится к взаимодействию трёх конкурирующих процессов:

- диффузии примеси, скорость которой может зависеть от деформации основной структуры;

- осаждения примеси на основную структуру, которое, в общем случае, также зависит от деформации тела;
- нестационарно-волновых процессов в материале.

При решении конкретных задач определяющим является то, что эти процессы имеют различные масштабы во времени.

Мы рассмотрели два частных случая. Первый, когда массообменом примеси и основной структурой можно пренебречь (источниковые члены $J = 0$). Показано, что в этом случае влияние циклической нагрузки приводит к локализации примеси в центральной части образца. Во втором предельном случае предполагается, что скорость осаждения примеси на основную структуру много выше скорости диффузии и диффузионно-конвективными членами в балансовых уравнениях можно пренебречь. Показано, что это приводит к структурным изменениям в материале, а именно к падению обобщённой жёсткости образца.

В общем случае процессы диффузии и массообмена невозможно разделить, однако при анализе задач о взаимном влиянии диффузии примеси и напряжённо-деформируемого состояния среды можно понять, как соотносятся скорости этих процессов. Например, если скорость диффузии примеси больше скорости её осаждения на основную структуру, то можно ожидать, что под действием вибрации примесь сначала локализуется в некоторой области образца и частицы примеси встраиваются в основную структуру именно в этой локальной области, что приводит к локальному изменению структуры образца. Если же скорость осаждения примеси значительно превосходит скорость диффузии, тогда примесь встраивается в основную структуру, не успевая локализоваться, и структурная перестройка, а также изменение механических свойств происходят по всей длине образца.

3. Модель тонкой плёночной структуры

Целью данного раздела является получение на основе предложенного двухкомпонентного подхода эволюционного уравнения, описывающего изменение поверхности тонкой плёнки, вызванное диффузионным переносом вещества. Многочисленные экспериментальные данные свидетельствуют об образовании на поверхности тонких плёнок периодических структур, которые возникают в результате диффузионного переноса вещества, вызванного упругими напряжениями и силами поверхностного натяжения, действующими в плёнках. Между тем теоретического обоснования, позволяющего выявить соотношения параметров соответствующих образованию той или иной периодической структуры, получено не было.

Физическая модель. Конденсация плёнок и их рост – это очень сложный многостадийный процесс, сопровождающийся различными нелинейными явлениями. Будем рассматривать стадию образования зародышей островков и их сепаратного роста, то есть тот момент времени, когда на поверхности тонких плёнок образуются и растут островки новой фазы. Зарождение происходит из атомов самой плёнки в результате диффузионного переноса вещества под действием упругой энергии:

1. Вначале при конденсации на твёрдую подложку плёнка растёт послойно, «растекаясь» по подложке и образуя так называемый смачивающий слой.

2. Материалы подложки и плёнки имеют различные параметры кристаллических решёток, и поэтому упругая энергия увеличивается с ростом плёнки. Энергия смачивания при этом уменьшается, так как атомы располагаются всё дальше и дальше от подложки.

3. Когда упругая энергия увеличивается настолько, что начинает превышать энергию смачивания, становится возможной релаксация упругой энергии. Один из путей – образование зародышей на поверхности плёнки, то есть уменьшение упругой энергии за счёт диффузии атомов от более напряжённых участков к менее напряжённым. В результате образовавшиеся зародыши растут, уменьшая упругую энергию плёнки; смачивающий слой уменьшается, снабжая растущие островки атомами.

Образование зародышей островков и их дальнейший рост вызваны упругими напряжениями, возникающими в смачивающем слое (материалы подложки и плёнки имеют различные параметры кристаллических решёток, и поэтому упругая энергия увеличивается

с ростом плёнки). Упругие напряжения в смачивающем слое вызывают диффузию атомов к островку, так как в островке напряжения слабее, чем в слое [1], и, следовательно, можно говорить о возникновении в плёнке диффузионного потока вещества (см. рис. 1).

Рис. 1. Диффузия примеси в кристаллической решётке

В качестве математической модели тонкой плёнки рассмотрен двумерный упругий слой переменной толщины $h = h_0 + \tilde{h}$ со свободной поверхностью, лежащий на абсолютно твёрдой подложке (h_0 – толщина недеформируемой плёнки).

Декартова система координат (x, y) выбрана так, что ось x связана с твёрдой подложкой, а ось y направлена вертикально вверх.

Как и в пункте 1, будем считать, что плёнка состоит из двух подсистем (компонент): движущейся компоненты вещества (диффузионный поток с плотностью ρ_2 и скоростью v_2 в данной точке пространства) и свободного слоя (недиффундирующее вещество) с плотностью ρ_1 и скоростью v_1 .

Сделаем ряд упрощающих предположений:

- будем пренебрегать обменом масс между компонентами среды, то есть $J = 0$;
- будем считать, что отсутствуют внутренние и внешние источники притока/стока массы;
- будем пренебрегать физико-химическими превращениями;
- будем считать, что отсутствуют объёмные силы $\mathbf{F} = 0$.

Тогда уравнения движения [см. (3), (4)] первой компоненты для плёночной 2D-структуры принимают вид

$$\frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \frac{\partial \tau}{\partial y} + R_x = \rho_1 \frac{\partial v_{1x}}{\partial t}, \quad (44)$$

$$\frac{\partial \tau}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_y}{\partial y} + R_y = \rho_1 \frac{\partial v_{1y}}{\partial t}, \quad (45)$$

а для второй компоненты

$$-\frac{\partial p}{\partial x} - R_x = \rho_2 \frac{\partial v_{2x}}{\partial t}, \quad (46)$$

$$-\frac{\partial p}{\partial y} - R_y = \rho_2 \frac{\partial v_{2y}}{\partial t}. \quad (47)$$

Заметим, что закон сохранения массы для первой компоненты выполняется автоматически. Закон сохранения массы для диффузионного потока имеет вид

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_2 \mathbf{v}_2) = 0.$$

Внутреннюю силу взаимодействия основной структуры материала и диффузионного потока R определим следующим образом:

$$R_x = Q_x + \lambda_x \frac{\rho_2}{h} [v_{2x} - v_{1x}],$$

$$R_y = Q_y + \lambda_y \frac{\rho_2}{h} [v_{2y} - v_{1y}].$$

Здесь Q_x, Q_y – силы упругого взаимодействия между компонентами среды, которые будут определены ниже; λ_x, λ_y – коэффициенты сопротивления. Вторые слагаемые в последних формулах (как и при выводе обобщённого уравнения диффузии) имеют смысл гидравлического сопротивления, то есть считаем, что диффузионный поток, проходя через кристаллическую решётку, испытывает невязкое сопротивление.

Граничные условия можно поставить только для среды в целом. Динамические краевые условия имеют вид

$$\sigma_{my} - \tau_m \frac{\partial h}{\partial x} = \gamma K - m \frac{\partial v_{my}}{\partial t}, \quad \tau_m - \sigma_{mx} \frac{\partial h}{\partial x} = -\gamma K \frac{\partial h}{\partial x}, \quad y = \tilde{h}(x, t).$$

Здесь γ – поверхностное натяжение; K – кривизна; m – массовая плотность поверхностного слоя плёнки.

Кинематические краевые условия можно записать в виде

$$v_{my} = \frac{\partial h}{\partial t} + v_{mx} \frac{\partial h}{\partial x}, \quad y = \tilde{h}(x, t),$$

$$v_{mx} = 0, \quad v_{my} = 0, \quad y = -h_0.$$

Итак, получили уравнения динамики каждой компоненты, но граничные условия записаны для среды в целом. Разделим краевые условия. Для этого сделаем ряд предположений. Будем считать, что нет напряжений на свободной поверхности несущей конструкции (на кристаллической решётке) и напряжения на свободной поверхности определяются второй компонентой. Тогда при $y = \tilde{h}(x, t)$ получим

$$\sigma_y - \tau \frac{\partial h}{\partial x} = 0, \tag{48}$$

$$\tau - \sigma_x \frac{\partial h}{\partial x} = 0. \tag{49}$$

Так как предполагалось, что вторая компонента – жидкость с инерционной свободной поверхностью (γ, m), то

$$p = -\gamma K + m \frac{\partial^2 h}{\partial t^2}, \quad y = \tilde{h}(x, t). \tag{50}$$

Естественно считать, что для первой компоненты скорость на твёрдой подложке равна нулю, то есть $v_{1x} = v_{1y} = 0$, $y = -h_0$, а для второй компоненты – это условие непротекания на твёрдой подложке $v_{2y} = 0$, $y = -h_0$ и условие, что все частицы остаются на свободной поверхности $v_{2y} = \frac{\partial h}{\partial t} + v_{2x} \frac{\partial h}{\partial x}$, $y = \tilde{h}(x, t)$. Таким образом, удалось разделить краевые условия.

Проведём осреднение по толщине слоя уравнений (первая компонента) с учётом краевых условий, при этом предполагая, что силами инерции можно пренебречь. Тогда получим

$$\frac{\partial}{\partial x} [h\bar{\sigma}_x] - \tau(x, -h_0) + h\bar{Q}_x + h\bar{D}_x = \rho_1 \frac{\partial}{\partial t} [h\bar{v}_{1x}], \quad (51)$$

а также

$$\frac{\partial}{\partial x} [h\bar{\tau}] - \sigma_y(x, -h_0) + h\bar{Q}_y + h\bar{D}_y = \rho_1 \frac{\partial}{\partial t} [h\bar{v}_{1y}], \quad (52)$$

где $\bar{f} = \frac{1}{h} \int_{-h_0}^{\tilde{h}} f dy$. Пусть исходное статическое напряжённое состояние первой компоненты – равномерное одноосное сжатие, которое определяется как $\sigma_0, \tau_0 = 0$.

Будем искать решения в виде

$$\bar{\sigma}_x = \sigma_0 + \tilde{\sigma}_x, \quad \bar{\sigma}_y = \tilde{\sigma}_y, \quad \bar{\tau} = \tilde{\tau}. \quad (53)$$

Подставляя (53) в осреднённые уравнения движения (51) и (52), получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} [h\tilde{\sigma}_x] &= \tilde{\tau}(x, -h_0) - \sigma_0 \frac{\partial h}{\partial x} - h\bar{Q}_x, \\ \frac{\partial}{\partial y} [h\tilde{\tau}] &= \tilde{\sigma}_y(x, -h_0) - h\bar{Q}_y. \end{aligned}$$

Отсюда находим упругую силу взаимодействия между компонентами

$$\begin{aligned} \bar{Q}_x &= -\frac{\sigma_0}{h} \frac{\partial h}{\partial x}, \\ \bar{Q}_y &= 0. \end{aligned}$$

Итак, из уравнений движения первой компоненты мы получили выражение силы $\bar{Q}$.

Перейдём ко второй компоненте. Осредняя (4) по толщине слоя с учётом кинематических граничных условий на твёрдой подложке (или в приближении мелкой воды), получим

$$\begin{aligned} -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x} &= \rho_2 \frac{\partial \bar{v}_{2x}}{\partial t} - \frac{\sigma_0}{h} \frac{\partial h}{\partial x} + \frac{\lambda_x \rho_2}{h_0} \bar{v}_{2x}, \\ \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [h\bar{v}_{2x}] &= 0. \end{aligned}$$

Осреднённое давление имеет вид $\bar{p} = -\gamma K + m \frac{\partial^2 h}{\partial t^2}$.

В силе взаимодействия между компонентами мы оставили только скорость движения диффузионного потока, считая, что она много выше скорости движения основной структуры. Подставляя $\bar{p}$ в первое уравнение, мы получаем два уравнения, которые определяют нашу

поверхность: $\gamma \frac{\partial K}{\partial x} - m \frac{\partial^3 h}{\partial x \partial t^2} + [\frac{\sigma_0}{h} - \rho_2 g] \frac{\partial h}{\partial x} = \rho_2 \frac{\partial \hat{v}_{2x}}{\partial t} + \frac{\lambda_x \rho_2}{h_0} \hat{v}_{2x}$ и $\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [h \hat{v}_{2x}] = 0$. Отсюда при

$m = 0, \frac{\partial \hat{v}_{2x}}{\partial t} = 0$ мы получим эволюционное уравнение, описывающее диффузионный рост плёнки:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{1}{\lambda_x \rho_2} \frac{\partial}{\partial x} \{ h [\sigma_0 \frac{\partial h}{\partial x} + \gamma h \frac{\partial K}{\partial x}] \} = 0.$$

Пренебрегая силами взаимодействия между компонентами среды, получаем в приближении мелкой воды уравнение, описывающее линейные воды на поверхности жидкости:

$$\frac{\partial^2 h}{\partial t^2} + \frac{h_0}{\rho_2} \{ \gamma \frac{\partial^4 h}{\partial x^4} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} [m \frac{\partial h}{\partial t} + \rho_2 g h] \} = 0.$$

Линейное эволюционное уравнение имеет вид

$$\frac{\lambda \rho_2}{h_0^2} \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\rho_2}{h_0} \frac{\partial^2 h}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} [m \frac{\partial^2 h}{\partial t^2}] + \gamma \frac{\partial^4 h}{\partial x^4} + [\frac{\sigma_0}{h_0} - \rho_2 g] \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} = 0.$$

Таким образом, полученное уравнение поверхности позволяет описывать как диффузионный рост плёнки, вызванный упругими напряжениями, так и распространение волн на поверхности плёнки (если учитывать инерционные силы), а также их взаимное влияние.

Численные результаты. Уравнение решалось методом Галеркина. В точках спектра этого оператора происходит смена форм периодических структур, «ветвление» которых происходит с потерей устойчивости предыдущей формы на более сложную (с добавлением двух симметрично расположенных «впадин» и «бугорков»). Были проведены численные эксперименты, подтверждающие такой механизм рождения устойчивых периодических структур.

Предложенная модель качественно правильно указывает на характер потери устойчивости, ибо существование спектра точек бифуркации зависит от значений напряжений. Более того, отказ от использования химического потенциала позволяет оперировать параметром демпфирования, который может быть связан с коэффициентом диффузии. Это делает модель более определяемой.

ЛИТЕРАТУРА

1. Кукушкин, С. А. Зарождение когерентных островков при росте по механизму Странского – Крастанова, индуцированное упругими напряжениями / С. А. Кукушкин, А. В. Осипов, Ф. Шмитт, П. Хесс // Физика и техника полупроводников. – СПб.: ИПМ РАН, 2002. – Т. 36. – №. 10. – С. 1177-1184.
2. Abramowitz, M. Handbook of mathematical functions with formulas, graphs and mathematical tables Stegun I. A. / M. Abramowitz // New York: Dover Publ., Inc., 1972. – P 1044.
3. Aifants, E. C. On the problem of diffusions in solids / E. C. Aifants // Acta Mechanica. – 1980. – Vol. 37. – P. 265-296.
4. Belyaev, A. K. Stresses in pipeline affected by hydrogen / A. K. Belyaev, V. A. Polyanskiy, Yu. A. Yakovlev // Acta Mechanica. – 2012. – Vol. 223. – P. 1611-1619.
5. Indeitsev, D. A. Hydrogen embrittlement under load as a first-order phase transition / D. A. Indeitsev, E. V. Osipova // Doklady Physics. – 2009. – Vol. 51. – P. 1901-1906.
6. Indeitsev, D. A. Thermoelastic waves in a continuum with complex structure / D. A. Indeitsev, V. N. Naumov, B. N. Semenov, A. K. Belyaev // Zeitschrift fur Angewandte Mathematik und Mechanik. – 2009. – Vol. 89. – P. 279-287.
7. Indeitsev, D. A. The phenomenon of localization of diffusion process in a dynamically deformed solid / D. A. Indeitsev, B. N. Semenov, M. D. Sterlin // Doklady Physics. 2012. – Vol. – 57. – P. 171-173.
8. Indeitsev, D. A. Mechanics of multi-component media with exchange of mass and non-classical supplies. In Dynamics of Mechanical Systems with Variable Mass / D. A. Indeitsev, Yu. A. Mochalova // Springer. – P. 165-194.
9. Polyanskiy, A. M. Diagnostics of mechanical condition of structural material by method of high-temperature hydrogen vacuum-extraction / A. M. Polyanskiy, V. A. Polyanskiy, D. B. Popov-Diumin // In Proceedings of the Sixth International Congress on Thermal Stresses. – Vienna, Austria, 2005. – P. 589-592.