

ВЛИЯНИЕ АНИЗОТРОПИИ ЗЕРНОГРАНИЧНОЙ ДИФфуЗИИ НА ПРОЦЕССЫ ПЕРЕНОСА ПРИМЕСЕЙ И ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ

Львов П.Е.,^{1,2*} Сибатов Р.Т.^{3,4}

¹Ульяновский государственный университет, Ульяновск, Россия

²Институт нанотехнологий микроэлектроники РАН, Москва, Россия

³Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия

⁴НПК «Технологический центр», Москва, Россия

* LvovPE@sv.uven.ru

Транспорт примесей и точечных дефектов по границам зерен характеризуется высокими значениями коэффициента диффузии, который может превышать коэффициент диффузии в объеме зерна на восемь порядков $\gamma \sim 10^8$ [1]. При этом коэффициент диффузии является анизотропным, т.к. его значения вдоль границы зерна может превышать на порядок значение в поперечном направлении [1].

Для описания динамики концентрационного поля примеси в поликристаллическом материале предложено модифицированное уравнение Кана-Хилларда, учитывающее анизотропию подвижности и связанных с ней флуктуаций. С помощью моделирования установлено влияние анизотропии подвижности на процесс зернограничной диффузии в режимах А, В и С (рис. 1), а также на формирование вторых фаз по механизму нуклеации (рис. 2). Показано, что транспорт растворенного компонента в поликристаллах носит субдиффузионный характер. Анизотропия подвижности примеси в системе плоскопараллельных зерен приводит к опережению диффузионного фронта, а в поликристалле к замедлению его движения по сравнению со случаем изотропной подвижности. Уменьшение подвижности в поперечном направлении приводит к уменьшению скоростей зарождения и роста вторых фаз.

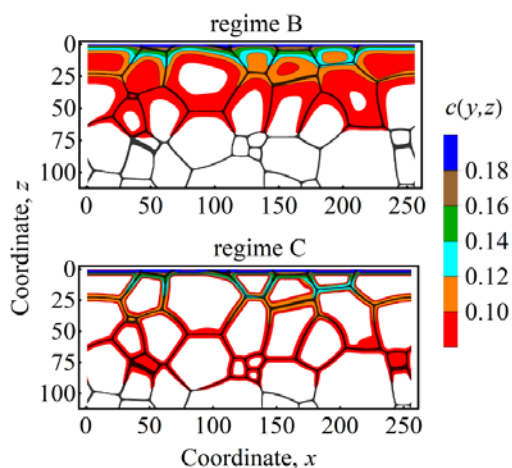


Рис. 1. Распределение концентрационного поля в процессе диффузии из источника с постоянной концентрацией ($z = 0$) для режимов В ($\gamma \sim 10^3$) и С ($\gamma \sim 10^5$) при температуре $T = 0.65T_C$.

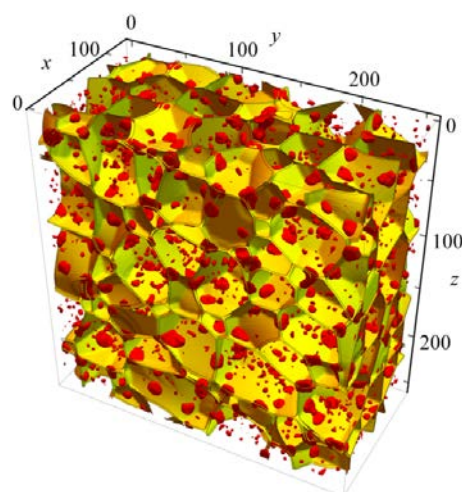


Рис. 2. Распределение фаз в процессе распада пересыщенного бинарного сплава ($c = 18\text{at.}\%$, $T = 0.65T_C$) при $\gamma \sim 10^3$ (режим В на рис 1.).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект № 22-11-00036).

1. I. Kaur, Y. Mishin, W. Gust, Fundamentals of Grain and Interphase Boundary Diffusion, John Wiley & Sons LTD, Chichester, 1995.