

DOI: [10.7242/1999-6691/2021.14.1.7](https://doi.org/10.7242/1999-6691/2021.14.1.7)

УДК 536-12:519.633

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ НА ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ТЕПЛОВЫХ, ДИФфуЗИОННЫХ И МЕХАНИЧЕСКИХ ВОЛН В УСЛОВИЯХ ОБРАБОТКИ ПОВЕРХНОСТИ ПОТОКОМ ЧАСТИЦ

Е.С. Парфенова, А.Г. Князева

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Российская Федерация

Предложена связанная неизотермическая математическая модель процесса внедрения материала в поверхность мишени в условиях поверхностной обработки потоком частиц. Учитывается взаимовлияние диффузии примеси, распространения тепла и механических возмущений, а также химическая реакция между внедряемой примесью и материалом подложки. Описан процесс обезрамеривания параметров модели и приведен диапазон числовых значений для каждого из них. На основе построенной модели численно решена задача совместного распространения упругих механических волн, которые генерируются при ударе частиц о поверхность, и диффузии внедряемых частиц с учетом их химического взаимодействия с обрабатываемым материалом и неизотермичности процесса. Для представления производных использована неявная симметричная разностная схема второго порядка аппроксимации как по времени, так и по координате. Решения получены для разных временных интервалов, определяемых характерным временем действия импульса и временами релаксации для диффузии и теплопроводности. Установлено, что взаимосвязь разномасштабных процессов приводит к появлению искажений в характерах волн деформаций и напряжений, а распределения температуры и концентрации примеси приобретают волновой характер. Образование химического соединения вызывает уменьшение концентрации примеси и увеличение температуры, напряжений и деформаций. Показано, что химическая реакция при малом выделении тепла протекает только до тех пор, пока растет температура за счет вводимой энергии. Далее тепла для продолжения реакции оказывается недостаточно. Также установлено, что при медленной генерации продукта в реакции практически отсутствует влияние химического взаимодействия на распространение температуры, деформаций, напряжений и концентрации примеси.

Ключевые слова: связанная модель, поток частиц, распространение волн, нелинейные эффекты, упругие напряжения, диффузия, теплопроводность, релаксация потока тепла, релаксация потока массы, химическая реакция

THE INFLUENCE OF CHEMICAL REACTION PARAMETERS ON THE INTERACTION OF THERMAL, DIFFUSION AND MECHANICAL WAVES UNDER SURFACE TREATMENT BY A PARTICLE BEAM

E.S. Parfenova and A.G. Knyazeva

Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk, Russian Federation

A coupled non-isothermal model of the penetration process of a material into a target surface under conditions of surface treatment with a particle beam is presented. The model takes into account the interaction of impurity diffusion, heat propagation, mechanical disturbances and the chemical reaction between the introduced impurity and the substrate material. The problem is formulated in terms of dimensionless variables. All model parameters and the range of numerical values are given. The problem is solved numerically using an implicit symmetric difference scheme of the second order approximation in time and coordinates. The solutions are obtained for different time intervals determined by the characteristic pulse action time and relaxation times for diffusion and thermal conductivity. It has been established that the interrelation of processes of different scales leads to the appearance of distortions on strain and stress waves, and the distributions of temperature and impurity concentration acquire a wave character. The formation of chemical compound leads to a decrease in the concentration of impurities and to an increase in temperature, stresses and deformation. It is shown that the chemical reaction at low heat generation proceeds only as long as the temperature increases due to the introduced energy. It has been found that, at slow formation of the product in the reaction, the chemical interaction practically does not affect the propagation of temperature, deformation, stresses and impurity concentration.

Key words: coupled model, particle beam, wave propagation, nonlinear effects, elastic stresses, diffusion, heat conduction, relaxation of heat flux, relaxation of mass flux, chemical reaction

1. Введение

Поверхностная обработка металлов потоком заряженных частиц — давно зарекомендовавший себя способ обработки материалов с целью улучшения их механических свойств и износостойкости, а следовательно, увеличения срока эксплуатации деталей различных изделий машиностроения [1, 2]. В частности, образующиеся в результате внедрения частиц в поверхностные слои твердые растворы препятствуют перемещению дислокаций, а также зарождению и распространению микротрещин, что существенно повышает механические и триботехнические характеристики материалов [3]. При столкновении частиц потока с обрабатываемой поверхностью имеет место ряд физических и химических процессов, которые взаимодействуют друг с другом и оказывают влияние на конечный результат. Например, в [4, 5] обнаружено, что при высокоинтенсивной ионной имплантации формируются поверхностные модифицированные слои, содержащие мелкодисперсные интерметаллидные фазы и твердые растворы переменного по глубине состава, а также найдена взаимосвязь между структурнофазовым состоянием модифицированных материалов и условиями имплантации.

В [6] отмечено, что воздействие потока частиц на мишень приводит к ее разогреву, появлению ударных волн и абляции материала со стороны обрабатываемой поверхности. Установлено, что за массоперенос внедренных частиц в поверхностных слоях отвечают термо- и бародиффузионные процессы, тогда как на глубине основной вклад вносит ударная волна. На глубину модифицированного слоя, а также на характер структурно-фазовых превращений в нем оказывают влияние в первую очередь длительность воздействия, параметры и состав потока [7]. Таким образом, управляя внешними параметрами обработки, казалось бы, можно достичь максимальных результатов в улучшении поверхностных свойств, но недостаточное понимание физических процессов, протекающих в твердом теле в процессе обработки, ограничивает возможности данного метода, несмотря на имеющийся экспериментальный и теоретический материал. Поэтому исследования в данной области являются актуальными.

Совместно протекающие процессы, связанные с обработкой поверхности потоком частиц, можно детально изучить на основе математического моделирования. Во-первых, при построении модели и осуществлении параметрического исследования можно выбрать только интересующие явления и отбросить остальные, в то время как эксперимент не предоставляет такой возможности. Во-вторых, можно отследить динамику процессов от момента внедрения и до более поздних времен. В-третьих, нет необходимости в приобретении дорогостоящих материалов и оборудования для эксперимента.

Для описания теплопереноса классическим является закон Фурье. Однако для случаев переноса тепла в быстротекущих процессах на микро-, наномасштабах используются модели, позволяющие учитывать нелинейные эффекты. Подробный обзор законов теплопроводности, не подчиняющихся классическим представлениям, сделан в [8]. Аналогичные изменения для неравновесных условий вносят и в уравнения Фика. В [9, 10] исследуется процесс распространения гармонических возмущений в термоупругой среде с учетом релаксации теплового потока, то есть распространение тепла подчиняется гиперболическому уравнению теплопроводности. Диффузионные процессы здесь не рассматриваются. В [11] обсуждается модель перераспределения примеси в трехкомпонентной системе. Принимаются во внимание механические напряжения, возникающие в диффузионной зоне. Это приводит к изменению как ширины диффузионной зоны, так и качества распределения концентраций. В [12] исследовано влияние термодиффузии на перераспределение компонентов и на механические напряжения в поверхностном слое материала при его обработке потоком частиц. Установлено, что термодиффузия наиболее существенна для материала с большей вязкостью. В [13] представлена модель формирования интерметаллидных фаз в поверхностном слое алюминия при его модификации ионами никеля. Получены данные о преимущественном формировании фаз для разных условий обработки. Однако эта модель не учитывает взаимодействие диффузии и механических возмущений. В работах [14, 15] для исследования задач термоупругой диффузии применяют аналитические методы.

Цель настоящей работы состоит в численном исследовании совместного распространения упругих механических волн (которые генерируются при ударе частиц о поверхность) и диффузии внедряемых частиц с учетом их химического взаимодействия с обрабатываемым материалом и неизотермичности процесса. При построении математической модели учитываются времена релаксации потоков тепла и массы. Таким образом, уравнения теплопроводности и диффузии не соответствуют классическим уравнениям. Кроме этого, в отличие от более ранней работы авторов [16], уравнения теплопроводности и баланса внедряемого компонента учитывают источник/потери тепла вследствие химической реакции и затраты внедряемого элемента на формирование химического соединения.

2. Математическая постановка задачи

Процесс взаимодействия потока заряженных частиц с поверхностью мишени при условии химического взаимодействия частиц с обрабатываемым материалом можно описать в рамках теории термоупругой диффузии [18–20] с учетом нелинейных эффектов, связанных с зависимостью коэффициента диффузии и скорости химической реакции от состава материала и температуры. Предположим, что в поверхностном слое возможна реакция, удовлетворяющая суммарной схеме:



где X_B — элемент основы, с которым внедряемый элемент X_C вступает в реакцию, X_P — продукт реакции, ν_B , ν_C и ν_P — стехиометрические коэффициенты. Скорость такой реакции в общем случае можно записать в виде:

$$\Phi = k_0 [X_C]^{\nu_C} [X_B]^{\nu_B} \phi(T),$$

где k_0 — предэкспоненциальный фактор или константа скорости химической реакции; квадратными скобками обозначена концентрация соответствующего вещества. Далее, для упрощения записи,

квадратные скобки всюду опущены и приняты обозначения: C — массовая концентрация внедряемого элемента; C_p — массовая концентрация продукта реакции.

Поскольку кинетика реакций в твердой фазе неочевидна, для простоты примем, что скорость реакции пропорциональна концентрации внедряемого элемента, а от температуры зависит по закону Аррениуса:

$$\Phi = \rho k_0 \psi(C) \exp\left(-\frac{E_R}{RT}\right).$$

Здесь: ρ — плотность материала мишени; $\psi(C) = C(1 - C - C_p)$ — кинетическая функция; E_R — энергия активации химической реакции; R — универсальная газовая постоянная. Все стехиометрические коэффициенты положим равными единице.

Тогда система уравнений неизоотермической механо-диффузионной модели, описывающей начальную стадию процесса внедрения потока частиц в поверхность мишени [16], дополненная уравнением химической реакции, примет вид:

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (1)$$

$$\rho C_\sigma \frac{dT}{dt} + \alpha_T T \frac{d\sigma_{kk}}{dt} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_q + W_{ch}, \quad (2)$$

$$\rho \frac{dC}{dt} = -\nabla \cdot \mathbf{J} - v_c \Phi, \quad (3)$$

$$\rho \frac{dC_p}{dt} = v_p \Phi, \quad (4)$$

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (5)$$

В уравнениях (1)–(5) приняты обозначения: t — время; T — температура; C_σ — теплоемкость при постоянстве напряжений; α_T — линейный коэффициент теплового расширения; σ_{kk} — первый инвариант тензора напряжений; \mathbf{J}_q — поток тепла; W_{ch} — источник или потери тепла вследствие химической реакции, $W_{ch} = Q\Phi$, где Q — тепловой эффект химической реакции; \mathbf{J} — поток массы; Φ — скорость превращения; \mathbf{v} — среднemasовая скорость; $\boldsymbol{\sigma}$ — тензор напряжений с компонентами σ_{ij} ; $\nabla \cdot \dots = \text{div}(\dots)$. Массовыми силами в уравнениях пренебрегаем.

Приращения компонент тензоров деформаций связаны с приращениями компонент тензора упругих напряжений, приращениями концентрации и температуры обобщенными соотношениями:

$$d\sigma_{ij} = 2\mu d\varepsilon_{ij} + \delta_{ij} (\lambda d\varepsilon_{kk} - K d\omega). \quad (6)$$

Здесь: μ , λ — коэффициенты Ламе (коэффициент μ в линейной теории совпадает с модулем сдвига); K — изотермический модуль всестороннего сжатия, $K = \lambda + 2\mu/3$; ω — функция температуры и концентрации,

$$\omega = 3[\alpha_T (T - T_0) + (\alpha - \alpha_0)(C - C_0) + (\alpha_p - \alpha_0)(C_p - C_{p0})];$$

α , α_p , α_0 — коэффициенты концентрационного расширения внедряемого элемента, продукта реакции и элемента, составляющего основу; T_0 , C_0 , C_{p0} — начальная температура и начальные концентрации компонентов.

В обобщенном соотношении для потока массы учтем перенос под действием напряжений; примем, что времена релаксации потоков тепла и массы различны; явления Сорэ и Дюфора рассматривать не будем. Тогда

$$\mathbf{J} = -\rho D \nabla C + B_\sigma C \nabla \sigma_{kk} - t_D \frac{d\mathbf{J}}{dt}, \quad (7)$$

$$\mathbf{J}_q = -\lambda_T \nabla T - t_q \frac{d\mathbf{J}_q}{dt}. \quad (8)$$

При этом: $D = D^0 f(C)$ — коэффициент диффузии, где $D^0 = D_0 \exp(-E_D/(RT))$ — коэффициент самодиффузии, $f(C)$ — функция, учитывающая зависимость коэффициента диффузии от состава, где D_0 — предэкспонент в законе для коэффициента диффузии, а E_D — энергия активации для процесса диффузии; $B_\sigma = D^0 m \Delta \alpha / (RT)$ — коэффициент переноса массы под действием напряжений, где m — молярная масса, $\Delta \alpha = (\alpha - \alpha_0)$ — разность между коэффициентами концентрационного расширения внедряемого элемента и элемента, составляющего основу; t_D — время релаксации потока массы; λ_T — коэффициент теплопроводности; t_q — время релаксации потока тепла. В настоящем исследовании принято $f(C) = 1$, то есть коэффициент диффузии D равен коэффициенту самодиффузии D^0 .

Введем ряд упрощений по аналогии с работой [16]. Деформации, скорости и ускорения будем считать малыми. Тогда необходимость в уравнении (1) отпадает, а левая часть уравнения движения (5) становится следующей [24]:

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} \approx \rho_0 \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla \cdot \mathbf{v} \right) \approx \rho_0 \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2}.$$

Кроме того, как и в моделях термоупругой диффузии [14, 25–27], вместо соотношений в приращениях (6) можно записать:

$$\sigma_{ij} = 2\mu \varepsilon_{ij} + \delta_{ij} (\lambda \varepsilon_{kk} - K \omega).$$

Поток частиц считаем равномерно распределенным вдоль обрабатываемой поверхности, поэтому можно ограничиться одномерной задачей. В этом случае реализуется условие одноосного нагружения, в соответствии с которым

$$\sigma_{xx} = \sigma, \quad \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = 0, \quad \sigma = E \left(\varepsilon - \frac{\omega}{3} \right), \quad (9)$$

где $\varepsilon = \varepsilon_{xx}$ и E — модуль упругости, $E = \mu \frac{3\lambda + 2\mu}{\lambda + \mu}$. Так как перемещения и деформации малы, имеют место соотношения Коши.

В результате получаем систему одномерных связанных уравнений, в которой векторные обозначения для потоков заменены скалярными:

$$\rho_0 \frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial J}{\partial x} - \Phi; \quad (10)$$

$$\rho_0 C_\sigma \frac{\partial T}{\partial t} + \alpha_T T \frac{\partial \sigma}{\partial t} = -\frac{\partial J_q}{\partial x} + Q\Phi; \quad (11)$$

$$\rho_0 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma}{\partial x}; \quad (12)$$

$$\rho_0 \frac{\partial C_p}{\partial t} = \Phi. \quad (13)$$

Определяющие соотношения (6)–(8) и соотношение Коши принимают вид:

$$J = -\rho_0 D \frac{\partial C}{\partial x} + B_\sigma C \frac{\partial \sigma}{\partial x} - t_D \frac{\partial J}{\partial t}; \quad (14)$$

$$J_q = -\lambda_T \frac{\partial T}{\partial x} - t_q \frac{\partial J_q}{\partial t}; \quad (15)$$

$$\sigma = E(\varepsilon - \alpha_T(T - T_0) - (\alpha - \alpha_0)(C - C_0) - (\alpha_p - \alpha_0)(C_p - C_{p0})); \quad (16)$$

$$\varepsilon = \frac{\partial u}{\partial x}. \quad (17)$$

Для замыкания системы (10)–(13) запишем начальные и граничные условия:

$$\begin{aligned} x = 0: \quad J &= m_0\phi(t); \quad J_q = q_0\phi(t); \quad \sigma = \sigma_0\phi(t); \\ x \rightarrow \infty: \quad T &= T_0, \quad C = C_0, \quad \sigma = 0; \\ t = 0: \quad C &= C_0, \quad \sigma = 0, \quad C_p = C_{p0}; \quad T = T_0, \quad \frac{\partial C}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial \sigma}{\partial t} = 0; \end{aligned} \quad (18)$$

m_0, q_0, σ_0 — параметры внешнего воздействия, связанные с потоком частиц, тепла и напряжениями соответственно.

Из (10), (11) и (14), (15) следуют дифференциальные уравнения второго порядка как по времени, так и по координате для концентрации внедряемой примеси и температуры:

$$\rho_0 \left(\frac{\partial C}{\partial t} + t_D \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_0 D \frac{\partial C}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(B_\sigma C \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right) - \Phi - t_D \frac{\partial \Phi}{\partial t}; \quad (19)$$

$$t_q \rho_0 C_\sigma \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \rho_0 C_\sigma \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_T \frac{\partial T}{\partial x} \right) + Q\Phi + t_q Q \frac{\partial \Phi}{\partial t} - t_q \frac{\partial}{\partial t} \left(\alpha_T T \frac{\partial \sigma}{\partial t} \right) - \alpha_T T \frac{\partial \sigma}{\partial t}. \quad (20)$$

Из (12) и (16) находим:

$$\frac{\rho_0}{E} \frac{\partial^2 \sigma}{\partial t^2} + \rho_0 \alpha_T \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \rho_0 (\alpha - \alpha_0) \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} + \rho_0 (\alpha_p - \alpha_0) \frac{\partial^2 C_p}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \sigma}{\partial x^2}, \quad (21)$$

или

$$\rho_0 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = E \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - E \alpha_T \frac{\partial T}{\partial x} - E (\alpha - \alpha_0) \frac{\partial C}{\partial x} - E (\alpha_p - \alpha_0) \frac{\partial C_p}{\partial x}.$$

Последнее соотношение можно записать в деформациях:

$$\rho_0 \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial t^2} = E \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial x^2} - E \alpha_T \frac{\partial T}{\partial x} - E (\alpha - \alpha_0) \frac{\partial C}{\partial x} - E (\alpha_p - \alpha_0) \frac{\partial C_p}{\partial x}.$$

Кинетическое уравнение (13) остается без изменений.

Заметим, что, как и в классической теории термоупругости [28, 29], уравнение движения в напряжениях содержит производные температуры и концентраций по времени, а уравнение движения в деформациях — производные температуры и концентраций по пространственной координате.

3. Метод решения

По аналогии с работами [16, 30] введем безразмерные переменные для представленной системы уравнений (19)–(21) с начальными и граничными условиями (18):

$$\tau = \frac{t}{t_*}, \quad \xi = \frac{x}{x_*}, \quad S = \frac{\sigma}{\sigma_*}, \quad \Theta = \frac{T - T_0}{T_* - T_0}, \quad e = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_*}.$$

Масштабы определяются выражениями: $t_* = x_* \sqrt{\rho_0/E}$ — время, за которое упругая волна проходит расстояние $x_* = \sqrt{t_* \lambda_T / (\rho_0 C_\sigma)}$ — область прогрева, формируемую за это время; $\sigma_* = E \alpha_T (T_* - T_0)$ — максимальные термические напряжения, возникающие при нагреве до температуры T_* ; $T_* = T_0 + \frac{q_0 x_*}{\lambda_T}$ — температура на глубине x_* при нагреве материала потоком величиной q_0 , $\varepsilon_* = \alpha_T (T_* - T_0)$ — максимальная термическая деформация, достигаемая при нагреве до температуры T_* .

В результате имеем систему уравнений в безразмерных переменных:

$$\frac{\partial^2 S}{\partial \tau^2} + \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \tau^2} + \gamma \frac{\partial^2 C}{\partial \tau^2} + \gamma_P \frac{\partial^2 C_P}{\partial \tau^2} = \frac{\partial^2 S}{\partial \xi^2}, \quad (22)$$

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} + \tau_D \frac{\partial^2 C}{\partial \tau^2} = \text{Le} \frac{\partial}{\partial \xi} \left[F_D(\Theta) f(C) \frac{\partial C}{\partial \xi} \right] - \frac{\omega \gamma M}{(\Theta + \chi)} C \text{Le} \frac{\partial}{\partial \xi} \left[F_D(\Theta) \frac{\partial S}{\partial \xi} \right] - \tau_{ch} \left[\Psi(C) F_{ch}(\Theta) + \tau_D \frac{\partial \Psi(C) F_{ch}(\Theta)}{\partial \tau} \right], \quad (23)$$

$$\tau_q \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \tau^2} + \frac{\partial \Theta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \xi^2} - \tau_q \omega \frac{\partial}{\partial \tau} \left((\Theta + \chi) \frac{\partial S}{\partial \tau} \right) - \omega (\Theta + \chi) \frac{\partial S}{\partial \tau} + \Omega \tau_{ch} \left[\Psi(C) F_{ch}(\Theta) + \tau_q \frac{\partial \Psi(C) F_{ch}(\Theta)}{\partial \tau} \right], \quad (24)$$

$$\frac{\partial C_P}{\partial \tau} = \tau_{ch} \Psi(C) F_{ch}(\Theta), \quad (25)$$

с начальными и граничными условиями:

$$\xi = 0: \quad \mathbf{J} = \tilde{m}_0 \phi(\tau); \quad \mathbf{J}_q = \tilde{q}_0 \phi(\tau); \quad S = \tilde{\sigma}_0 \phi(\tau); \quad (26)$$

$$\xi \rightarrow \infty: \quad C = C_0; \quad \Theta = 0; \quad S = 0; \quad (27)$$

$$\tau = 0: \quad C = C_0; \quad C_P = C_{P0}; \quad S = 0; \quad \Theta = 0; \quad \frac{\partial C}{\partial \tau} = 0; \quad \frac{\partial \Theta}{\partial \tau} = 0; \quad \frac{\partial S}{\partial \tau} = 0, \quad (28)$$

где $F_D(\Theta) = \exp\left(\frac{1}{\beta_D} \frac{(\Theta-1)}{(\Theta+\chi)}\right)$, $F_{ch}(\Theta) = \exp\left(\frac{1}{\beta_{ch}} \frac{\Theta-1}{(\Theta+\chi)}\right)$ — безразмерные коэффициенты диффузии.

Запишем потоки тепла и массы в безразмерном виде:

$$\mathbf{J} = -f(C) F_D(\Theta) \frac{\partial C}{\partial \xi} + \frac{\omega \gamma M C F_D(\Theta)}{(\Theta + \chi)} \frac{\partial S}{\partial \xi} - \tau_D \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial \tau}, \quad (29)$$

$$\mathbf{J}_q = -\frac{\partial \Theta}{\partial \xi} - \tau_q \frac{\partial \mathbf{J}_q}{\partial \tau}. \quad (30)$$

Все параметры модели, фигурирующие в системе уравнений (22)–(25) с условиями (26)–(28), представлены в таблице 1. Там же указан физический смысл параметров.

Таблица 1. Параметры модели

Параметр	Описание
$\gamma = \frac{\Delta \alpha}{\alpha_T (T_* - T_0)}, \quad \gamma_P = \frac{\Delta \alpha_P}{\alpha_T (T_* - T_0)}$	Отношения концентрационных деформаций к термическим для внедряемого материала и продукта химической реакции
$\tau_{ch} = t_* k_0 \exp\left(-\frac{E_0}{RT_*}\right)$	Отношение характерного времени распространения механических возмущений к характерному времени химической реакции
$\Omega = \frac{Q_{ch}}{\rho C_\sigma (T_* - T_0)}$	Отношение тепловыделения в реакции к теплу, которое запасается за счет внешнего нагрева до температуры T_*
$\tau_q = \frac{t_q}{t_*}, \quad \tau_D = \frac{t_D}{t_*}$	Относительные времена релаксации потока тепла и потока массы
$\tilde{m}_0 = \frac{m_0}{J_{q^*}}, \quad \tilde{\sigma}_0 = \frac{\sigma_0}{\sigma_*}, \quad \tilde{q}_0 = \frac{q_0}{J_{q^*}}$	Безразмерные плотность потока частиц, внешнее механическое воздействие и связанная с этим плотность внешнего потока тепла
$\omega = \frac{E \alpha_T^2 (T_* - T_0)}{\rho C_\sigma}$	Коэффициент связанности тепловых и механических полей
$\text{Le} = \frac{D_0 \exp(-E_D/(RT_*))}{\kappa_T}, \quad \kappa_T = \lambda_T / (C_\sigma \rho)$	Отношение коэффициента диффузии при характерной температуре к коэффициенту температуропроводности
$\chi = \frac{T_0}{(T_* - T_0)}, \quad \beta_{ch} = \frac{RT_*}{E_0}, \quad \beta_D = \frac{RT_*}{E_D}, \quad M = \frac{m C_\sigma}{R}$	Вспомогательные параметры

Для полученных параметров модели на основе литературных данных [31] проведена оценка допустимых диапазонов числовых значений для широкого класса металлических материалов. Интервалы изменения основных параметров содержит таблица 2. Из таблицы видно, что многие параметры изменяются в достаточно большом интервале.

Таблица 2. Допустимые интервалы значений параметров модели

Параметр	Интервал изменения	Параметр	Интервал изменения	Параметр	Интервал изменения
γ, γ_P	$[-6 \cdot 10^{-2} \dots 100]$	τ_D	$[0,025 \dots 2,5]$	ω	$[5 \cdot 10^{-5} \dots 0,5]$
τ_{ch}	$[0,2 \cdot 10^{-26} \dots 0,2 \cdot 10^{13}]$	\tilde{m}_0	$[25 \cdot 10^{-5} \dots 200]$	Le	$[6 \cdot 10^{-22} \dots 10^{-2}]$
Ω	$[0,7 \cdot 10^{-6} \dots 200]$	$\tilde{\sigma}_0$	$[0,02 \cdot 10^{-5} \dots 10]$	β_{ch}	$[0,03 \dots 0,3]$
τ_q	$[0,25 \cdot 10^{-2} \dots 0,25]$	\tilde{q}_0	$[3 \cdot 10^{-11} \dots 7]$	β_D	$[0,02 \dots 0,06]$

Система (22)–(25) с условиями (26)–(28) решалась численно с использованием для представления производных неявной симметричной разностной схемы второго порядка как по времени, так и по координате. Коэффициенты при производных вычислялись по значениям с предыдущего слоя по времени. Сходимость исследовалась путем расчетов при уменьшении шага сетки (увеличении числа разбиений расчетной области) и уменьшении шага по времени. Например, первое слагаемое в правой части уравнения диффузии (23) после аппроксимации имело вид:

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left[F_D(\Theta) f(C) \frac{\partial C}{\partial \xi} \right] \rightarrow \frac{1}{\Delta \xi} \left[\frac{F_D(\check{\Theta}_{i+1}) f(\check{C}_{i+1}) + F_D(\check{\Theta}_i) f(\check{C}_i)}{2} \frac{C_{i+1} - C_i}{\Delta \xi} - \frac{F_D(\check{\Theta}_{i-1}) f(\check{C}_{i-1}) + F_D(\check{\Theta}_i) f(\check{C}_i)}{2} \frac{C_i - C_{i-1}}{\Delta \xi} \right].$$

Второе слагаемое (без коэффициентов) полностью расписывалось через величины с предыдущего слоя по времени:

$$\frac{C}{(\Theta + \chi)} \frac{\partial}{\partial \xi} \left[F_D(\Theta) \frac{\partial S}{\partial \xi} \right] \rightarrow \frac{\check{C}_i}{(\check{\Theta}_i + \chi)} \frac{1}{\Delta \xi} \left[\frac{F_D(\check{\Theta}_{i+1}) + F_D(\check{\Theta}_i)}{2} \frac{S_{i+1} - S_i}{\Delta \xi} - \frac{F_D(\check{\Theta}_{i-1}) + F_D(\check{\Theta}_i)}{2} \frac{S_i - S_{i-1}}{\Delta \xi} \right].$$

При построении дискретного аналога уравнения теплопроводности возможны варианты, которые в числовом отношении дают одинаковые результаты: 1. Производные напряжений по времени брать с предыдущего слоя по времени. 2. Вторую производную напряжений заменять выражением из уравнения движения, а появляющуюся вторую производную концентраций, по аналогии с напряжениями, — выражением из уравнения диффузии. Далее все производные не от температуры представлять так же, как на нижнем слое. Вариант 1 оказался более устойчивым.

Итак, производные температуры по времени аппроксимировались следующим образом:

$$\frac{\partial^2 \Theta}{\partial \tau^2} \rightarrow \frac{\hat{\Theta}_i - 2\check{\Theta}_i + \check{\Theta}_i}{\Delta \tau^2}; \quad \frac{\partial \Theta}{\partial \tau} \rightarrow \frac{\hat{\Theta}_i - \check{\Theta}_i}{\Delta \tau}.$$

Источниковые слагаемые брались с предыдущего слоя по времени:

$$\frac{\partial \psi(C) F_{ch}(\Theta)}{\partial \tau} = F_{ch}(\Theta) \frac{\partial \psi(C)}{\partial \tau} + \psi(C) \frac{\partial F_{ch}(\Theta)}{\partial \tau} = F_{ch}(\Theta) \left[(1 - 2C - C_P) \frac{\partial C}{\partial \tau} - C \tau_{ch} \psi(C) F_{ch}(\Theta) \right] + \psi(C) \exp\left(\frac{1}{\beta_{ch}} \frac{\Theta - 1}{\Theta + \chi} \right) \frac{1}{\beta_{ch} (\Theta + \chi)^2} \frac{\partial \Theta}{\partial \tau}.$$

Для аппроксимации уравнения движения также возможны два подобных варианта, дающих близкие результаты. В итоге все уравнения оказывались линеаризованными и «развязанными» и могли решаться численно независимо друг от друга и любым удобным способом. В настоящей работе все уравнения приводились к виду, подходящему для метода прогонки.

Граничные условия записывались в дискретном виде также с помощью разностных схем со вторым порядком аппроксимации. Для этого использовались разложения в ряд Тейлора функций в узлах разностной сетки, ближайших к границе, относительно значений в граничных точках с точностью до величин второго порядка малости. Появляющиеся в разложениях вторые производные находились из основных дифференциальных уравнений, справедливых и в граничных точках.

Уравнение кинетики представлялось следующим образом:

$$\frac{\hat{C}_P - C_P}{\Delta\tau} = \tau_{ch} \exp\left(\frac{1}{\beta_{ch}} \frac{\Theta - 1}{\Theta + \chi}\right) C \left[1 - C - \hat{C}_P\right],$$

откуда

$$\hat{C}_P = \frac{C_P + \Delta\tau \cdot \tau_{ch} F_{ch}(\Theta) C [1 - C]}{1 + \Delta\tau \cdot \tau_{ch} F_{ch}(\Theta) \cdot C}.$$

Заметим, что вследствие решения уравнения кинетики самым «последним», концентрация диффузанта и температура в нем оказываются уже найденными на этом временном слое. Такой подход хорошо зарекомендовал себя при решении задач в макрокинетике.

При уменьшении значений параметров сетки решения сходились к некоторому пределу. Измельчение сетки и уменьшение шага по времени прекращалось, когда результаты переставали изменяться с точностью до 3–5%. Худшая сходимость наблюдалась у диффузионного уравнения. Решение задачи при отсутствии химической реакции согласовывалось с решениями, полученными в предыдущих работах авторов [16].

В целом для численного решения нелинейных связанных задач не существует универсального рецепта, как нет и точной теории сходимости и устойчивости соответствующих разностных методов. Ограничения при решении связанных задач распространяются и на числовые значения используемых физических параметров. Они вызваны условием неотрицательности матрицы коэффициентов Онзагера. Если не принимать его во внимание, могут появиться отрицательные концентрации и другие нефизичные эффекты. Эта проблема известна в химической кинетике, однако редко обсуждается в литературе по численным методам.

4. Анализ результатов

С целью исследования взаимозависимости процессов распространения волн деформаций/напряжений, тепловых и концентрационных волн необходимо детально рассмотреть динамику этих явлений в разных временных интервалах. В сформулированной постановке задачи они определяются следующими параметрами: характерным временем действия импульса τ_{imp} и временами релаксации для диффузии τ_D и теплопроводности τ_q . При этом их значения соотносятся следующим образом: $\tau_q < \tau_D < \tau_{imp}$. Поскольку области изменения многих параметров модели значительны, зависят как от вида конкретных материалов, так и от условий обработки, то представляет интерес параметрическое исследование. Величина ряда параметров фиксировалась. Числовые значения параметров модели для расчетов принимались без привязки к конкретным материалам. Это частично связано с тем, что многие из физических параметров, входящих в безразмерные комплексы, известны с большой погрешностью или данные о них недостоверны и зависят от модели, на основе которой осуществлены оценки. Используемые в настоящей работе значения приведены в таблице 3.

Полагаем, что на поверхность мишени действует одиночный синусоидальный импульс:

Таблица 3. Расчетные значения параметров модели

Параметр	Значение	Параметр	Значение	Параметр	Значение	Параметр	Значение
γ	1,5	Ω	200,0	ω	0,05	M	10,5
γ_P	-0,5	τ_D	0,02	τ_q	0,005	τ_{imp}	0,03
\tilde{m}_0	5,0	$\tilde{\sigma}_0$	0,001	\tilde{q}_0	5,0	χ	0,55
τ_{ch}	200,0	Le	0,0025	β_D	0,027	β_{ch}	0,3

$$\phi(\tau) = \begin{cases} \sin\left(\frac{\pi\tau}{\tau_{imp}}\right), & \tau \leq \tau_{imp}, \\ 0, & \tau > \tau_{imp}. \end{cases}$$

На рисунке 1 представлены результаты решения задачи для разных интервалов времени. Видно, что для выбранного набора параметров в волне концентрации (Рис. 1а, б) отсутствуют видимые искажения, связанные с влиянием тепловой и механической волн. Распространяется диффузионная волна со значительно меньшей скоростью, чем механические возмущения. Скорость распространения волн напряжений, деформаций и температуры близки, однако, без дополнительного изменения величин во фронте; передний фронт волны деформации не виден на графиках (Рис. 1д). На всех последующих рисунках приводится только часть волны деформации у левой границы, на которой просматривается взаимовлияние волн разной физической природы. Вследствие различия скоростей волн на переднем фронте механической волны изменения не наблюдаются. К моментам времени $\tau \leq \tau_{imp}$ (Рис. 1а, б) глубина проникновения имплантируемой примеси увеличивается от $\approx 0,8 \cdot 10^{-3}$ до $\approx 1,2 \cdot 10^{-3}$. Химическая реакция начинается практически сразу при $\tau \approx \tau_q$, но концентрация продукта реакции в начальные моменты времени незначительная: $C_p \approx 1,8 \cdot 10^{-4}$ (Рис. 1в).

С момента времени $\tau < \tau_q$ на волне деформации можно видеть искажение, которое соответствует положению переднего фронта волны концентрации примеси (Рис. 1д-ж, серые кружки). Черными кружками на волне деформации отмечено место пересечения волной оси $O\xi$, то есть здесь происходит смена знака деформации. На волне напряжений в этой области имеет место экстремум (Рис. 1з-к, черные кружки). До момента времени $\tau = 0,02$ (равного τ_D) концентрация примеси на левой границе увеличивается, но затем начинает уменьшаться, что объясняется быстрым ростом концентрации продукта реакции (Рис. 1б, з).

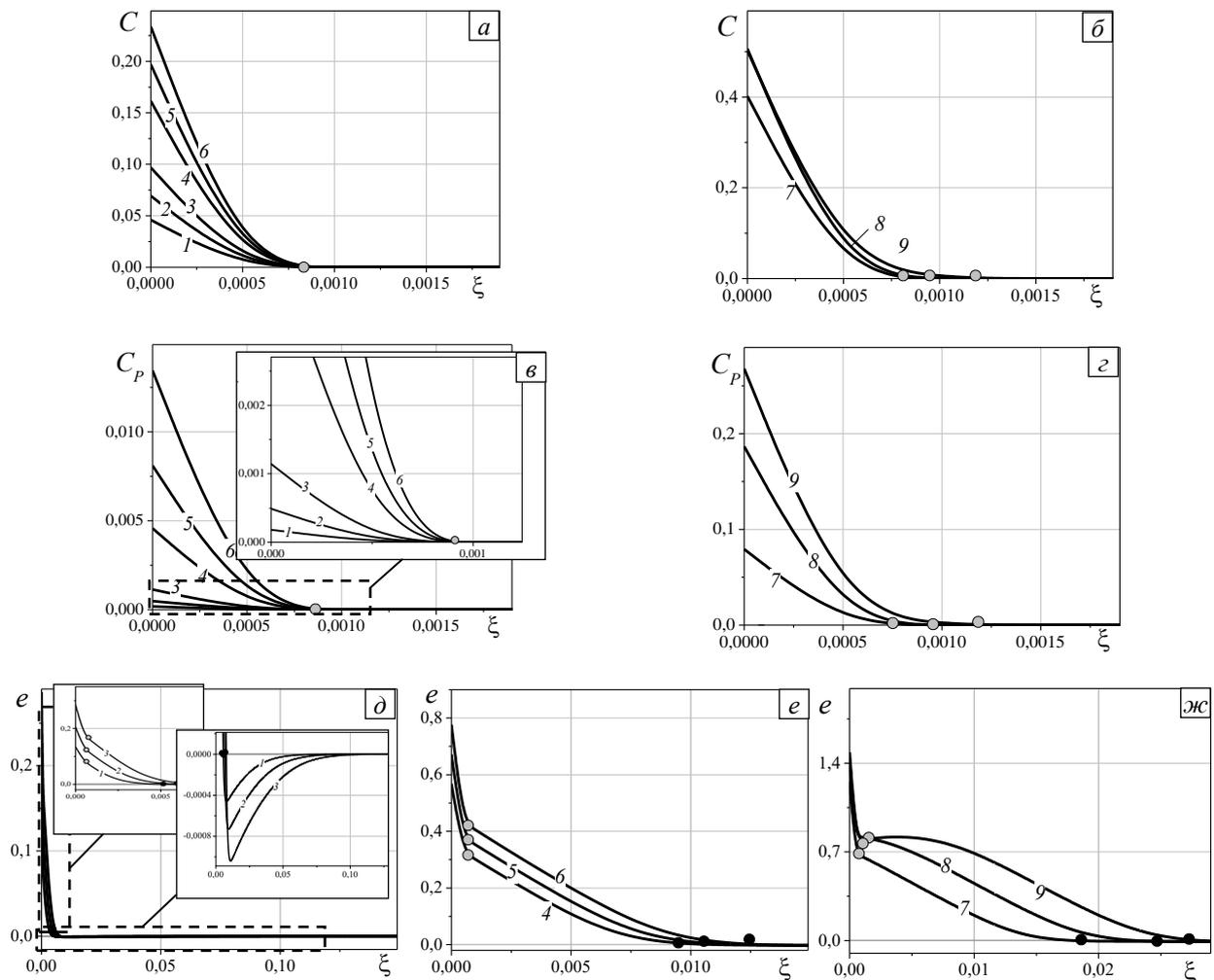


Рис. 1. Результаты решения связанной задачи: распределения концентрации внедренного материала (а, б), массовой доли продукта реакции (в, з), деформаций (д-ж), напряжений (з-к) в различные моменты времени τ : 1 – 0,004; 2 – 0,005; 3 – 0,006; 4 – 0,008; 5 – 0,009; 6 – 0,01; 7 – 0,015; 8 – 0,02; 9 – 0,025; пунктиром выделены фрагменты графиков, которые представлены в увеличенном масштабе

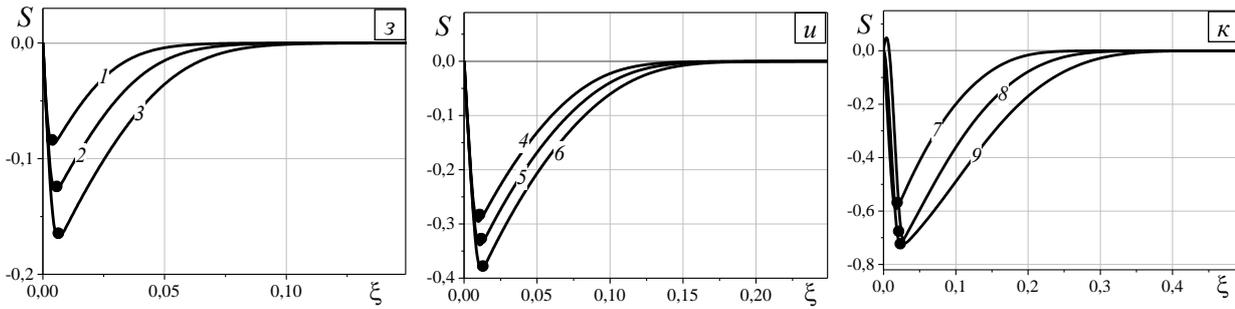
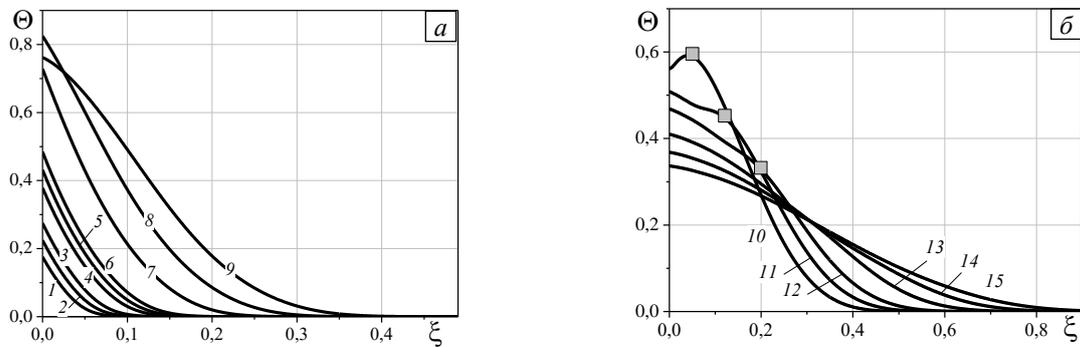
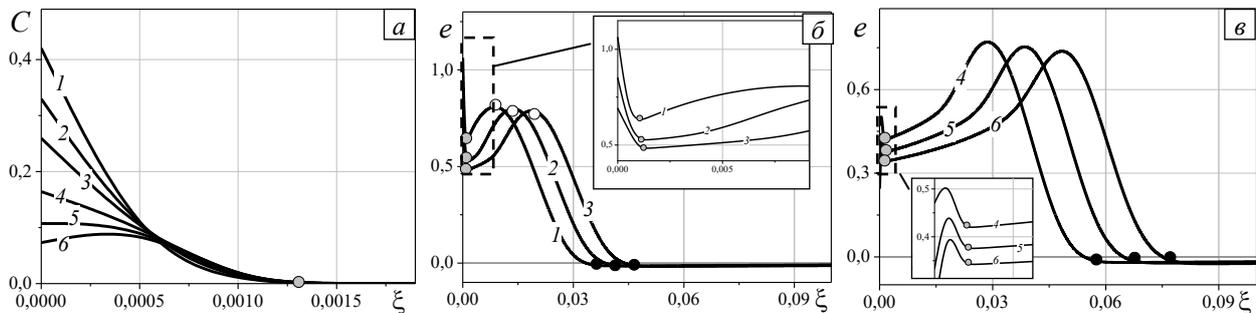


Рис. 1. Продолжение

В моменты времени 1–9, когда $\tau < \tau_{imp}$ (Рис. 1з–к, Рис. 2а), на волнах температуры и напряжений какие-либо особенности не проявляются. Но к моменту времени $\tau = \tau_{imp}$ и для времен, немного больших времени действия импульса (Рис. 2б, кривые 10–12), на тепловой волне наблюдается формирование максимума (серые квадраты, которым соответствуют искажения в волне напряжений (Рис. 3д)). Для более поздних моментов времени (Рис. 2б, кривые 13–15) распределение температуры сглаживается, выраженных экстремумов не имеет; аналогичная картина свойственна и для волны напряжений (Рис. 3е).

Так как в данной работе параметр Ω задан достаточно большим, то химическая реакция протекает до тех пор, пока не будет израсходована внедренная примесь. После окончания действия импульса образование продукта продолжается до времени, когда скорость реакции, вследствие снижения температуры, становится близкой к нулю. Концентрация примеси на левой границе в интервале времен $\tau = [0,03...0,07]$ уменьшается с 42% до 7% (Рис. 3а). Максимальное значение C к моменту $\tau = 0,07$ находится на некотором расстоянии от обрабатываемой поверхности, и ему соответствует экстремум в волне деформации (Рис. 3в, область в большем масштабе). Как отмечено выше, серые кружки иллюстрируют взаимодействие волн концентрации и деформации. Для концентрации примеси во фронте эти точки являются конечными на графике для каждого момента времени. Значит, волна деформации правее этих выделенных точек распространяется независимо от C . Для моментов времени $\tau \geq \tau_D$ (что более явно выражено вблизи $\tau = \tau_{imp}$) на волнах напряжений и деформаций можно заметить дополнительные экстремумы, которые соответствуют друг другу (Рис. 3б, д, белые кружки).

Рис. 2. Распределение температуры в различные моменты времени τ : 1 – 0,004; 2 – 0,005; 3 – 0,006; 4 – 0,008; 5 – 0,009; 6 – 0,01; 7 – 0,015; 8 – 0,02; 9 – 0,025; 10 – 0,03; 11 – 0,035; 12 – 0,04; 13 – 0,05; 14 – 0,06; 15 – 0,07Рис. 3. Пример решения связанной задачи: распределения концентрации внедренного материала (а), деформаций (б, в), массовой доли продукта реакции (з), напряжений (д, е) в моменты времени τ : 1 – 0,03; 2 – 0,035; 3 – 0,04; 4 – 0,05; 5 – 0,06; 6 – 0,07

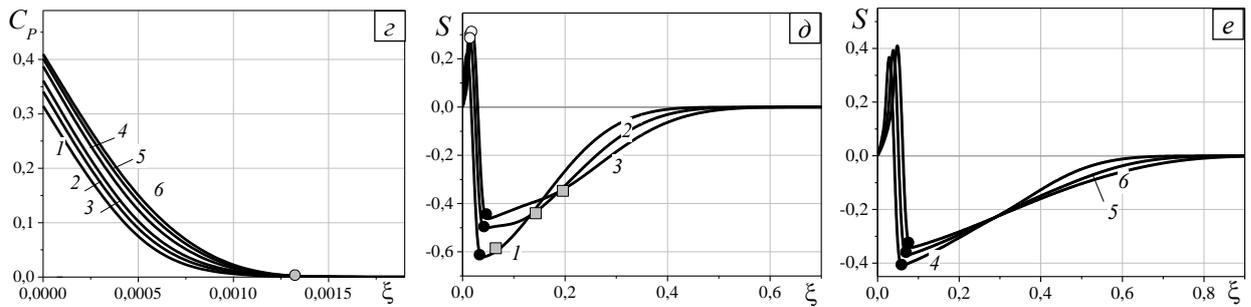


Рис. 3. Продолжение

Параметры, отвечающие в задаче за химическую реакцию, — это Ω , τ_{ch} , β_{ch} . На рисунке 4 показано влияние тепловыделения в реакции Ω на распределения исследуемых величин. Видно, что увеличение Ω приводит к росту массовой доли продукта реакции, именно на его генерирование тратится внедренная примесь (C уменьшается), температура растет, напряжения и деформации увеличиваются в областях экстремумов, но вблизи обрабатываемой поверхности деформации падают вследствие уменьшения C (Рис. 4г, область в большем масштабе).

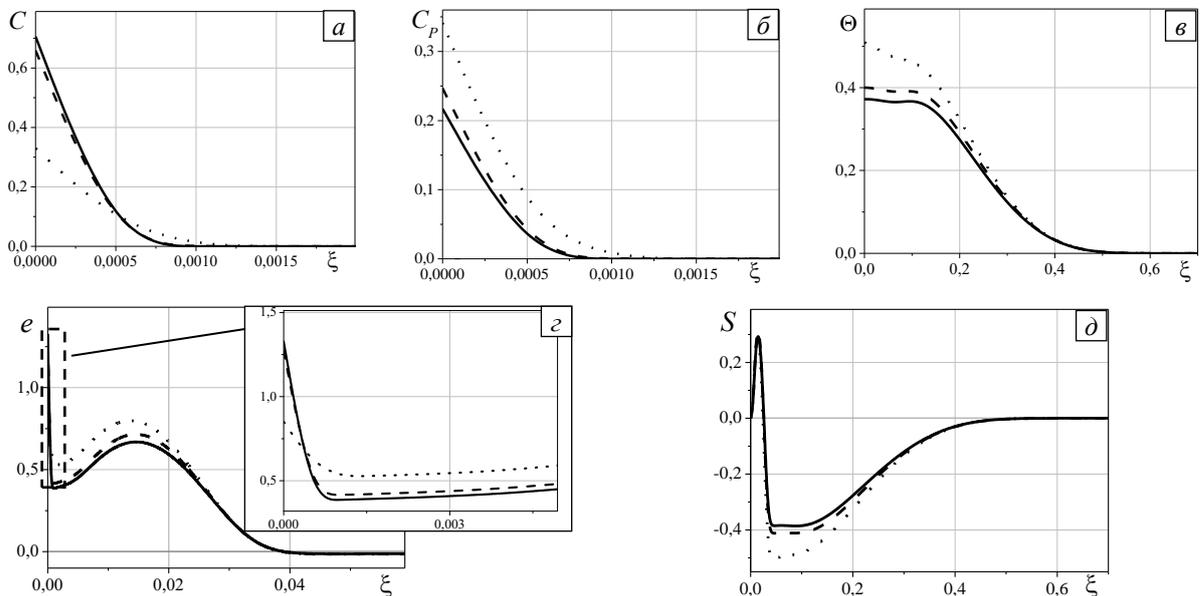


Рис. 4. Влияние величины параметра Ω . Распределения концентрации внедренного материала (а), массовой доли продукта реакции (б), тепловой волны (в), деформаций (з), напряжений (д) при различных значениях Ω : 10,0 (сплошная линия); 100,0 (штриховая); 200,0 (пунктирная); момент времени $\tau = 0,035$

При малом значении Ω , например $\Omega = 10$ (Рис. 4, сплошная линия), химическая реакция протекает до тех пор, пока за счет вводимой энергии растет температура. Далее тепла оказывается недостаточно для продолжения реакции. Таким образом, к моменту времени $\tau = \tau_{imp}$ распределение C_p принимает окончательный вид, больше реакция не идет.

Увеличение значений параметров τ_{ch} , β_{ch} приводит также к росту концентрации продукта реакции, температуры, деформаций и напряжений, а концентрация примеси уменьшается. На величину концентрации массовой доли продукта очень сильно влияет τ_{ch} , и при достаточно малом значении этого параметра C_p также становится незначительной. В этом случае даже максимально большой параметр тепловыделения в реакции Ω не приводит к видимым изменениям на графиках температуры, деформаций, напряжений и концентрации примеси, то есть медленное образование продукта в реакции практически не будет влиять на их распределения.

6. Заключение

Таким образом, в работе представлена связанная неизотермическая модель процесса внедрения материала в поверхность мишени в условиях ее поверхностной обработки потоком частиц. Модель учитывает взаимодействие разномасштабных процессов: диффузии примеси, распространения тепла и

механических возмущений. Кроме этого, она включает химическое взаимодействие внедряемой примеси и материала подложки в процессе обработки. Установлено, что взаимосвязь этих процессов приводит к появлению искажения механической волны. В волне температуры наблюдается максимум на некотором расстоянии от обрабатываемой поверхности при временах, близких и сравнимых со временем действия импульса; в этом временном интервале температура в глубине мишени выше, чем на поверхности. Распределение концентрации примеси не демонстрирует видимых искажений, но, как и поток тепла, обладает волновым характером. Стоит отметить, что большое значение имеет выбранный набор параметров модели, и, возможно, другое их сочетание позволит выявить новые или усилить уже известные взаимодействия рассматриваемых процессов. Область изменения параметров зависит не только от свойств материалов и условий химических реакций, но и от режима обработки.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Госкорпорации «Росатом» в рамках научного проекта № 20-21-00064 Росатом.

Литература

1. Колесников В.И., Кудряков О.В., Забияка И.Ю., Новиков Е.С., Мантуров Д.С. Структурные аспекты износостойкости вакуумных ионно-плазменных покрытий // Физ. мезомех. 2020. Т. 23, № 1. С. 62-77. <https://doi.org/10.24411/1683-805X-2020-11006>
2. Панин В.Е., Наркевич Н.А., Дураков В.Г., Шулепов И.А. Управление структурой и износостойкостью электронно-лучевого покрытия из углеродоазотистой аустенитной стали // Физ. мезомех. 2020. Т. 23, № 2. С. 15-23. <https://doi.org/10.24411/1683-805X-2020-12002>
3. Белый А.В., Кукареко В.А., Кононов А.Г., Биленко Э.Г. Структурные превращения и аморфизация сплава Fe-Zr при облучении интенсивными потоками ионов азота // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2008. № 5. С. 13-16. (English version <https://doi.org/10.1134/S1027451008030026>)
4. Курзина И.А., Попова Н.А., Никоненко Е.Л., Калашников М.П., Савкин К.П., Шаркеев Ю.П., Козлов Э.В. Влияние дозы облучения на структурно-фазовое состояние поверхностных слоев ультрамелкозернистого титана // Изв. вузов. Физика. 2014. Т. 57, № 7-2. С. 74-78.
5. Вершинин Г.А., Грекова Т.С., Геринг Г.И., Курзина И.А., Шаркеев Ю.П. Анализ формирования концентрационных полей в титане при имплантации ионов алюминия через осаждаемую на поверхность мишени газо-металлическую пленку // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2012. № 3. С. 68-71. (English version <https://doi.org/10.1134/S1027451012030226>)
6. Валяев А.Н. Модификация свойств материалов и синтез тонких пленок при облучении интенсивными электронными и ионными пучками. Усть-Каменогорск: ВКТУ, 2000. 345 с.
7. Углов В.В., Черенда Н.Н., Анищик В.М., Астаинский В.М., Квасов Н.Т. Модификация материалов компрессионными плазменными потоками. Минск: БГУ, 2013. 248 с.
8. Жмакин А.И. Теплопроводность за пределами закона Фурье // ЖТФ. 2021. Т. 91, № 1. С. 5-25. <https://doi.org/10.21883/JTF.2021.01.50267.207-20>
9. Babenkov M.B., Ivanova E.A. Analysis of the wave propagation processes in heat transfer problems of the hyperbolic type // Continuum Mech. Thermodyn. 2014. Vol. 26. P. 483-502. <https://doi.org/10.1007/s00161-013-0315-8>
10. Babenkov M.B. Анализ распространения гармонических возмущений в термоупругой среде с релаксацией теплового потока // ПМТФ. 2013. Т. 54, № 2. С. 126-137. (English version <https://doi.org/10.1134/S0021894413020132>)
11. Князева А.Г. Нелинейные модели деформируемых сред с диффузией // Физ. мезомех. 2011. Т. 14, № 6. С. 35-51.
12. Чепак-Гизбрехт М.В., Князева А.Г. Влияние термодиффузии на перераспределение элементов и механические напряжения при обработке поверхности металла потоком частиц // Изв. вузов. Физика. 2013. Т. 56, № 12-2. С. 39-45.
13. Князева А.Г., Хан А. Формирования интерметаллидных фаз в условиях ионной имплантации // Изв. вузов. Физика. 2015. Т. 58, № 6-2. С. 126-130.
14. Давыдов С.А., Земсков А.В., Тарлаковский Д.В. Поверхностные функции Грина в нестационарных задачах термомехано-диффузии // ППП. 2017. Т. 79, № 1. С. 38-47.
15. Вестяк А.В., Земсков А.В., Тарлаковский Д.В. Двумерная нестационарная задача упругой диффузии для ортотропной однокомпонентной полуплоскости // ППП. 2016. Т. 78, № 1. С. 13-21.
16. Парфенова Е.С., Князева А.Г. Неизотермическая механо-диффузионная модель начальной стадии процесса внедрения потока частиц в поверхность мишени // Вычисл. мех. сплош. сред. 2019. Т. 12, № 1. С. 36-47. <https://doi.org/10.7242/1999-6691/2019.12.1.4>
17. Nowacki W. Dynamical problems of thermodiffusion in solids. Part I // Bull. Acad. Pol. Sci. Ser. Sci. Technol. 1974. Vol. 22. P. 55-64.
18. Nowacki W. Dynamical problems of thermodiffusion in solids. Part II // Bull. Acad. Pol. Sci. Ser. Sci. Technol. 1974. Vol. 22. P. 129-135.
19. Nowacki W. Dynamical problems of thermodiffusion in solids. Part III // Bull. Acad. Pol. Sci. Ser. Sci. Technol. 1974. Vol. 22. P. 257-266.
20. Nowacki W. Dynamical problems of thermodiffusion in elastic solids // Proc. Vib. Probl. 1974. Vol. 15. P. 105-128.
21. Sherief H.H., Hamza F., Saleh H. The theory of generalized thermoelastic diffusion // Int. J. Eng. Sci. 2004. Vol. 42. P. 591-608. <https://doi.org/10.1016/j.ijengsci.2003.05.001>
22. Aouadi M. Generalized theory of thermoelastic diffusion for anisotropic media // J. Therm. Stresses. 2008. Vol. 31. P. 270-285. <https://doi.org/10.1080/01495730701876742>
23. Князева А.Г. Диффузия и реология в локально-равновесной термодинамике // Вестник ПГТУ. Математическое моделирование систем и процессов. 2005. № 13. С. 45-60.

24. Седов Л.И. Механика сплошной среды. Том 1. М.: Наука, 1970. 492 с.
25. Aouadi M. A theory of thermoelastic diffusion materials with voids // *Z. Angew. Math. Phys.* 2010. Vol. 61. P. 357-379. <https://doi.org/10.1007/s00033-009-0016-0>
26. Aouadi M. Theory of generalized micropolar thermoelastic diffusion under Lord-Shulman model // *J. Therm. Stresses.* 2009. Vol. 32. P. 923-942. <https://doi.org/10.1080/01495730903032276>
27. Elhagary M.A. Generalized thermoelastic diffusion problem for an infinitely long hollow cylinder for short times // *Acta Mech.* 2011. Vol. 218. P. 205-215. <https://doi.org/10.1007/s00707-010-0415-5>
28. Новацкий В. Динамические задачи термоупругости / Под ред. Г.С. Шапиро. М.: Мир, 1970. 256 с.
29. Подстригач Я.С., Коляно Ю.М. Обобщенная термомеханика. Киев: Наукова думка, 1976. 311 с.
30. Ильина Е.С., Демидов В.Н., Князева А.Г. Особенности моделирования диффузионных процессов в упругом теле при его поверхностной модификации частицами // *Вестник ПНИПУ. Механика.* 2012. № 3. С. 25-49.
31. Физические величины: Справочник / Под ред. А.С. Григорьева, К.З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.

References

1. Kolesnikov V.I., Kudryakov O.V., Zabiya I.Yu., Novikov E.S., Manturov D.S. Structural aspects of wear resistance of coatings deposited by physical vapor deposition. *Phys. Mesomech.*, 2020, vol. 23, pp. 570-583. <https://doi.org/10.1134/S1029959920060132>
2. Panin V.E., Narkevich N.A., Durakov V.G., Shulepov I.A. Control over the structure and wear resistance of an electron beam overlay coating of carbon-nitrogen austenitic steel. *Fiz. mezomekh. – Physical mesomechanics*, 2020, vol. 23, no. 2, pp. 15-23. <https://doi.org/10.24411/1683-805X-2020-12002>
3. Byeli A.V., Kukareko V.A., Kononov A.G., Bilenko E.G. Structure transformations and amorphization of Fe-Zr alloy under irradiation with nitrogen ion intense flows. *J. Synch. Investig.*, 2008, vol. 2, pp. 340-343. <https://doi.org/10.1134/S1027451008030026>
4. Kurzina I.A., Popova N.A., Nikonenko E.L., Kalashnikov M.P., Savkin K.P., Sharkeev Yu.P., Kozlov E.V. Influence of the irradiated dose on structural state and phase composition of surface layers ultrafine-titanium. *Izv. vuzov. Fizika – Russian Physics Journal*, 2014, vol. 57, no. 7-2, pp. 74-78.
5. Vershinin G.A., Grekova T.S., Gering G.I., Kurzina I.A., Sharkeev Yu.P. Analysis of concentration field formation in titanium under aluminum ion implantation via a gas-and-metal film deposited on a target surface. *J. Synch. Investig.*, 2012, vol. 6, pp. 251-254. <https://doi.org/10.1134/S1027451012030226>
6. Valyayev A.N. *Modifikatsiya svoystv materialov i sintez tonkikh plenok pri obluchenii intensivnymi elektronnyimi i ionnymi puchkami* [Modification of material properties and synthesis of thin films by irradiation with intense electron and ion beams]. Ust-Kamenogorsk, VKTU, 2000. 345 p.
7. Uglov V.V., Cherenda N.N., Anishchik V.M., Astashinskiy V.M., Kvasov N.T. *Modifikatsiya materialov kompressionnymi plazmennymi potokami* [Modification of materials by compressive plasma flows]. Minsk, BGU, 2013. 248 p.
8. Zhmakin A.I. Heat conduction beyond the Fourier law. *Tech. Phys.*, 2021, vol. 66, pp. 1-22. <https://doi.org/10.1134/S1063784221010242>
9. Babenkov M.B., Ivanova E.A. Analysis of the wave propagation processes in heat transfer problems of the hyperbolic type. *Continuum Mech. Thermodyn.*, 2014, vol. 26, pp. 483-502. <https://doi.org/10.1007/s00161-013-0315-8>
10. Babenkov M.B. Propagation of harmonic perturbations in a thermoelastic medium with heat relaxation. *J. Appl. Mech. Tech. Phys.*, 2013, vol. 54, pp. 277-286. <https://doi.org/10.1134/S0021894413020132>
11. Knyazeva A.G. Nonlinear diffusion models of deformed media. *Fiz. mezomekh. – Physical mesomechanics*, 2011, vol. 14, no. 6, pp. 35-51.
12. Chepak-Gizbrekht M.V., Knyazeva A.G. Influence of thermal diffusion on the redistribution of elements and mechanical stresses during metal surface treatment with a particle beam. *Izv. vuzov. Fizika – Russian Physics Journal*, 2013, vol. 56, no. 12-2, pp. 39-45.
13. Knyazeva A.G., Han A. Intermetallic phases formation at the conditions of ion implantation. *Izv. vuzov. Fizika – Russian Physics Journal*, 2015, vol. 58, no. 6-2, pp. 126-130.
14. Davydov S.A., Zemskov A.V., Tarlakovskii D.V. Surface Green's function in non-stationary problems of thermomechanical diffusion. *PPP – The Problems of Strength and Plasticity*, 2017, vol.79, no. 1, pp. 38-47.
15. Vestyak A.V., Zemskov A.V., Tarlakovskii D.V. Two-dimensional unsteady problem of elasticity with diffusion for orthotropic one-component half-plane. *PPP – The Problems of Strength and Plasticity*, 2016. vol. 78, no. 1, pp. 13-21.
16. Parfenova E.S., Knyazeva A.G. Non-isothermal mechanodiffusion model of the initial stage of penetration of particle flow in a target surface. *Vychisl. mekh. splosh. sred – Computational continuum mechanics*, 2019. vol. 12, no. 1, pp. 36-47. <https://doi.org/10.7242/1999-6691/2019.12.1.4>
17. Nowacki W. Dynamical problems of thermodiffusion in solids. Part I. *Bull. Acad. Pol. Sci. Ser. Sci. Technol.*, 1974, vol. 22, pp. 55-64.
18. Nowacki W. Dynamical problems of thermodiffusion in solids. Part II. *Bull. Acad. Pol. Sci. Ser. Sci. Technol.*, 1974, vol. 22, pp. 129-135.
19. Nowacki W. Dynamical problems of thermodiffusion in solids. Part III. *Bull. Acad. Pol. Sci. Ser. Sci. Technol.*, 1974, vol. 22, pp. 257-266.
20. Nowacki W. Dynamical problems of thermodiffusion in elastic solids. *Proc. Vib. Probl.*, 1974. vol. 15, pp. 105-128.
21. Sherief H.H., Hamza F., Saleh H. The theory of generalized thermoelastic diffusion. *Int. J. Eng. Sci.*, 2004, vol. 42, pp. 591-608. <https://doi.org/10.1016/j.ijengsci.2003.05.001>
22. Aouadi M. Generalized theory of thermoelastic diffusion for anisotropic media. *J. Therm. Stresses*, 2008, vol. 31, pp. 270-285. <https://doi.org/10.1080/01495730701876742>

23. Knyazeva A.G. Diffuziya i reologiya v lokal'no-ravnesnoy termodinamike [Diffusion and rheology in locally-equilibrium thermodynamics]. *Vestnik PGTU. Matematicheskoye modelirovaniye sistem i protsessov – PNRPU Mechanics Bulletin*, 2005, no. 13, pp. 45-60.
24. Sedov L.I. *Mekhanika sploshnoy sredy. T. 1* [Continuum mechanics. Vol. 1]. Moscow, Nauka, 1970. 492 p.
25. Aouadi M. A theory of thermoelastic diffusion materials with voids. *Z. Angew. Math. Phys.*, 2010, vol. 61, pp. 357-379. <https://doi.org/10.1007/s00033-009-0016-0>
26. Aouadi M. Theory of generalized micropolar thermoelastic diffusion under Lord-Shulman model. *J. Therm. Stresses*, 2009, vol. 32, pp. 923-942. <https://doi.org/10.1080/01495730903032276>
27. Elhagary M.A. Generalized thermoelastic diffusion problem for an infinitely long hollow cylinder for short times. *Acta Mech.*, 2011, vol. 218, pp. 205-215. <https://doi.org/10.1007/s00707-010-0415-5>
28. Nowacki W. *Dynamiczne zagadnienia termosprężystości* [Dynamical problems of thermoelasticity]. Warszawa, 1966. 366 p.
29. Podstrigach Ya.S., Kolyano Yu.M. *Obobshchennaya termomekhanika* [Generalized Thermomechanics]. Kiev, Naukova dumka, 1976. 311 p.
30. Il'ina E.S., Demidov V.N., Knyazeva A.G. The modeling features of diffusion processes in elastic body under particles surface treatment. *Vestnik PNIPU. Mekhanika – PNRPU Mechanics Bulletin*, 2012, no. 3, pp. 25-49.
31. Grigor'yev A.S., Meylikhov K.Z. (ed.) *Fizicheskiye velichiny: Spravochnik* [Physical quantities: Handbook]. Moscow, Energoatomizdat, 1991. 1232 p.

Поступила в редакцию 04.03.2021; после доработки 24.03.2021; принята к опубликованию 29.03.2021