

В. И. Г е р д ц и т е л и (Москва, РУДН). **Математическое моделирование диффузионных процессов в наноматериалах.**

Наноструктурные материалы представляют интерес для перспективных направлений современной техники. Об этом свидетельствуют многочисленные публикации и тематические конференции [1–4]. Решение практических задач микро - и нанотехнологии требует осознанного понимания физических механизмов протекающих процессов. Превалирующая роль среди последних принадлежит диффузионным явлениям. Именно они определяют поведения наноструктурных материалов в условиях повышенных температур и облучения. Это обусловлено тем, что характерной особенностью наноструктурных материалов является наличие разветвленной сети границ зерен и их тройных стыков.

Кинетика диффузии атомов примеси в поле внутренних напряжений зависит от первого инварианта их тензора. В общем случае этот параметр имеет сложную координатную зависимость. Такая зависимость приводит к математическим трудностям при решении краевых задач диффузионной кинетики. Исключением из общего правила являются внутренние напряжения с логарифмической зависимостью от радиальной координаты. Эта особенность позволяет получать точное аналитическое решение краевых задач диффузии с учетом полей напряжений. Математическая простота решения связана с тем, что в цилиндрической системе координат логарифмическая функция является гармонической, а ее градиент обратно пропорционален радиальной координате. Упругой моделью тройного стыка границ зерен служит клиновья дисклинация.

Кинетика диффузии атомов примеси в окрестности тройного стыка границ зерен математически формулируется следующим образом

$$\frac{1}{D} \frac{\partial C}{\partial t} = \Delta C + \frac{\nabla(C \nabla V)}{kt}, \quad r_0 < r < R$$

$$C(r, 0) = C_0, \quad C(r_0, t) = C_p^1, \quad C(R, t) = C_p^2,$$

где D — коэффициент диффузии атомов примеси, C_p^1 и C_p^2 — равновесные концентрации атомов примеси на границах области, k — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура, C_0 — средняя концентрация атомов примеси, V — потенциал взаимодействия атома примеси с полем напряжений клиновья дисклинации.

Эта задача для принятого значения потенциала V имеет точное аналитическое решение. Таким образом это позволяет математически моделировать диффузионные процессы в наноструктурных материалах с использованием внутренних напряжений. Логарифмическая координатная зависимость потенциала V упрощает эту задачу.

Если наночастица имеет форму додекаэдра или икосаэдра, то поля внутренних напряжений в их окрестностях также имеют логарифмическую зависимость от радиальной координаты. Поэтому не возникает существенных математических трудностей при моделировании диффузионных процессов в окрестности и таких наночастиц (сферическая симметрия).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Andievski R. A.* Films as Nanostructured Materials with Characteristic Mechanical Properties. — *Materials Transactions*, 2001, v. 42, № 8, p. 1471–1473.
2. *Поздняков В. А., Глезер А. М.* Структурные механизмы разрушения нанокристаллических материалов. — *Физ. тв. тела*, 2005, т. 47, в. 5, с. 793–800.
3. *Губин С. П., Китаева Н. А., Хомутов Г. Б.* Перспективные направления нанонауки: химия наночастиц полупроводниковых материалов. — *Изв. РАН, сер. химич.*, 2005, № 4, с. 811–836.
4. Вторая Всероссийская Конференция по наноматериалам. — Тезисы докладов. Новосибирск: 2007.