

УДК 539.3+531+536-1

**М.А. Миколайчук^{1,2}, А.Г. Князева^{1,2},
Г.П. Грабовецкая¹, И.П. Мишин¹**

¹Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

²Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ МЕХАНИЧЕСКИХ НАПРЯЖЕНИЙ НА ДИФФУЗИЮ В ПЛАСТИНЕ С ПОКРЫТИЕМ

Проанализировано и выделено два основных механизма влияния поля напряжений на диффузию примеси в твердом теле. На основании анализа математической модели процесса сделан вывод о том, что в случае симметричного нанесения покрытия, по сути, работает только один из них. Вывод подтвержден экспериментально на примере системы Ni(Cu). Методика и результаты эксперимента изложены в работе наряду с результатами расчета. Описаны некоторые возможные обобщения диффузионной модели для структурно-неоднородной среды.

Ключевые слова: диффузия, напряжения, внешнее нагружение, моделирование, эксперимент, структурно-неоднородная среда.

**M.A. Mikolaychuk^{1,2}, A.G. Knyazeva^{1,2},
G.P. Grabovetskaya¹, I.P. Mishin¹**

¹Institute of Strength Physics and Material Science, Tomsk, Russian Federation,

²National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russian Federation

RESEARCH OF THE STRESS INFLUENCE ON THE DIFFUSION IN THE COATING PLATE

Two basic mechanisms of stress influence on the solid phase diffusion are revealed and analyzed. On the base of the analysis of presented mathematical model, the conclusion is formulated that only one of mechanisms works at the condition of symmetry deposition of the coating. It was confirmed experimentally for the Ni (Cu) system as example. The experiment technique and its results are presented in this paper. The possible generalization of the model for structure heterogeneous material and the ways of next development of the model are described.

Keywords: diffusion, stresses, external loading, modeling, experiment, structure heterogeneous medium.

Введение

Задачи диффузии в условиях влияния поля напряжений имеют важное прикладное значение и богатую историю исследования. В последнее время можно наблюдать большое количество публикаций, посвященных как экспериментальному, так и теоретическому изучению диффузии в деформированных системах. Теоретические исследования в основном оперируют методами молекулярной динамики [1] и континуальной механики [2]. При построении в рамках механики сплошной среды моделей, учитывающих влияние механических напряжений на перераспределение примеси в образце, в основном используют два подхода. В первом случае это влияние учитывается непосредственно через изменение коэффициента диффузии, которое является следствием локального изменения энергетических характеристик системы. Во втором случае влияние напряжений связывают с появлением новой движущей силы в уравнении для потока диффундирующего компонента – градиента первого инварианта тензора напряжений. Существуют работы, в которых применяют оба подхода [3], что может являться более разумным решением, так как, по сути, имеют место два различных механизма влияния напряжений на диффузию. Первый есть следствие механической работы, совершаемой в системе, второй является аналогом явления барродиффузии в жидкостях. Их действие может быть как совместным, так и конкурирующим (явление восходящей диффузии). Открытым остается вопрос, всегда ли эти два механизма имеют место. Вообще говоря, в изотермических условиях есть еще и конвективный перенос, отличный от барродиффузии, который приводит к наблюдаемому экспериментально эффекту Киркендалла, но в данной работе он не обсуждается.

В [4] на основе аналитического решения задачи о равновесии пластины с покрытием было высказано предположение, что степень влияния внешней нагрузки зависит от характера нанесения покрытия на образец. В настоящей работе с целью проверки этой гипотезы был поставлен эксперимент по изучению влияния растягивающей внешней нагрузки на диффузию меди в никеле. Проведены дополнительные расчеты.

1. Экспериментальные исследования

В качестве образца рассматривается пластина поликристаллического никеля, к торцам которой приложена растягивающая нагрузка, а примесь (медь) нанесена либо на одну из поверхностей пластины, свободную от нагрузки, либо на две стороны – симметрично относительно срединной плоскости пластины. В качестве материала для исследования использовали поликристаллический никель технической чистоты (99,98 мас.% никеля), средний размер зерен которого составлял 14 мкм. Методом травимости границ зерен, разработанным в [5], было установлено, что ~90% границ зерен никеля являются границами общего типа. Толщина пластины никеля ~600 мкм. Медь наносилась электролитическим способом в конфигурациях, показанных на рис. 1. Толщина медного покрытия составляла ~9 мкм. Перед нанесением покрытия пластины никеля были отожжены при температуре 1273 К в течение 1 часа. Диффузионный отжиг проводился при температуре 1073 К в течение 5 часов. Величина растягивающего напряжения составляла 25 МПа (предел текучести никеля 75 МПа). При выбранном напряжении величина деформации образца за время отжига не превышала 0,5%. Эта величина находится в пределах ошибки измерения деформации. Для сравнения были подготовлены образцы, отожженные без приложения нагрузки. Концентрационные профили распределения меди по глубине в никеле снимались в поперечном сечении пластины методом оже-спектроскопии. Запись энергетических спектров оже-электронов осуществлялась в режиме зондирования электронным пучком без сканирования. Диаметр пучка составлял 1–1,5 мкм.

Расчет концентрации меди в никеле проводили исходя из определения концентраций пяти элементов: меди, никеля, кислорода, водорода и азота. Ошибка в определении концентрации меди в точке составляла 20 %.

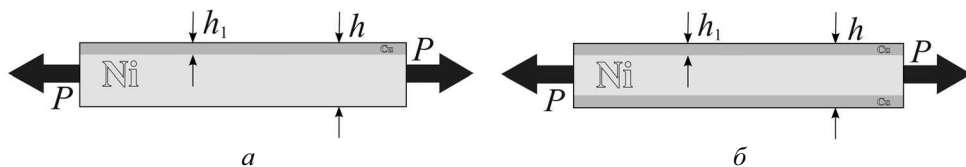


Рис. 1. Схематическое изображение рассматриваемой пластины: а – асимметричный случай; б – симметричный; h – толщина пластины, h_1 – толщина покрытия, P – растягивающая нагрузка

При выбранной температуре диффузионного отжига коэффициент объемной диффузии меди в никеле ($2,25 \cdot 10^{-17}$ м²/с [6]) существенно ниже коэффициента зернограницной диффузии меди в никеле ($1,1 \cdot 10^{-11}$ м²/с [7]). За время эксперимента медь проникает в объем зерен не более чем на $6,3 \cdot 10^{-7}$ м. Поэтому диффузия меди в никеле осуществляется в основном по границам зерен. Согласно классификации режимов диффузии в границе зерна [8] при выбранных температуре и времени диффузионного отжига диффузия меди в границах зерен никеля проходит либо в режиме диффузии **C** (отток диффундирующей примеси из границы в объем зерна отсутствует), либо в режиме типа **V₁** (отток диффундирующей примеси из границы в объем зерна минимален). С учетом погрешности метода в определении концентрации меди можно предположить, что при рассматриваемых временах диффузия идёт только по границам зерен, что отмечено на представленных распределениях концентрации меди (рис. 2) в случае, когда отжиг проводился с нагрузкой и без неё. Каждая точка на графике отражает концентрацию меди в границах зерен никеля. Начальные участки профилей соответствуют области покрытия, в которой концентрация снималась, и в объемной фазе.

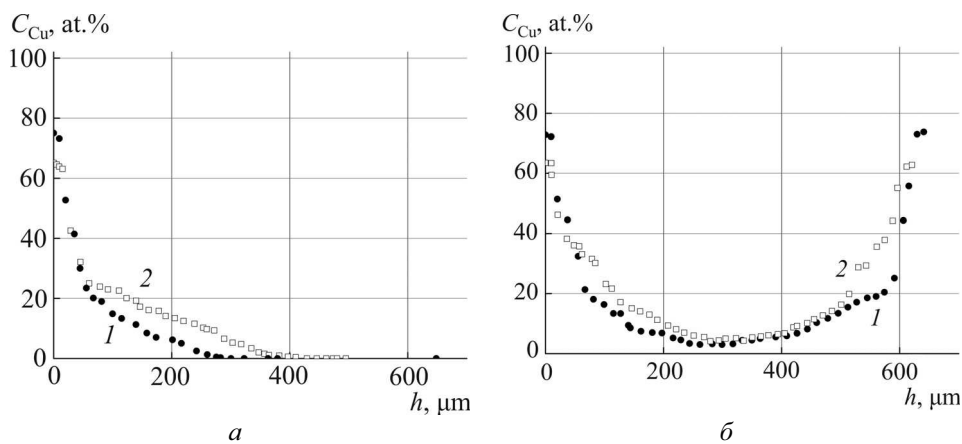


Рис. 2. Экспериментальные распределения концентрации меди в границах зерен никелевой пластины: *а* – асимметричный случай; *б* – симметричный; *1* – в отсутствие нагрузки, *2* – с приложением нагрузки

Видно, что в асимметричном случае растягивающая нагрузка способствует проникновению меди в никель, а также сильно сказывается на качественном поведении зависимости концентрации примеси

от глубины проникновения. Для количественного анализа был осуществлен расчет средней концентрации меди образце по формуле

$$\langle C \rangle = 100 - \frac{1}{h_1} \int_0^{h_1} C_{\text{Cu}} dx, \quad (1)$$

где C_{Cu} – концентрация меди в атомных процентах; h_1 – толщина покрытия. Таким образом, средняя концентрация примеси в пластине оценивалась исходя из её расхода в покрытии. Это продиктовано тем, что экспериментальный профиль нельзя интерполировать по представленным точкам. Оказалось, что значения величины $\langle C \rangle$ в случае с нагрузкой и без таковой отличаются на 53 %. Для симметричной конфигурации наблюдается иная картина (рис. 2, б). Качественное отличие концентрационных профилей для деформированной и недеформированной систем не очевидно, но величина $\langle C \rangle$, рассчитанная для этих случаев, отличается на 14 %. То есть нагрузка оказывает не такое заметное влияние, как в случае первой конфигурации.

2. Расчеты в рамках модели с эффективными коэффициентами диффузии

Исходя из постановки эксперимента и сделанных допущений был проведен расчет на основе численной реализации модели процесса [4, 9], в рамках которой, к сожалению, невозможно полностью воспроизвести натуральный эксперимент, так как она явно не включает в себя описание диффузии в структурно-неоднородных средах. Однако, предполагая, что механизмы влияния механических напряжений на зернограничную и объемную диффузию одинаковы, можно исследовать влияние нагрузки на протекание диффузии в идеализированном материале.

Уравнение диффузии, которое получается после решения задачи о механическом равновесии, содержит эффективные коэффициенты

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial z} [\mathbf{J}],$$

где

$$\mathbf{J} = -D_{\text{eff}} \frac{\partial C}{\partial z} + V_{\text{eff}} C,$$

$$D_{\text{eff}} = \left(D_0 + B_0 C \frac{12\mu K \Delta\alpha}{\lambda + 2\mu} \right), \quad V_{\text{eff}} = B_0 \frac{6\mu K}{\lambda + 2\mu} (A + Q).$$

Здесь $K = \lambda + \frac{2}{3}\mu$ – изотермический модуль всестороннего сжатия; λ, μ – коэффициенты Ламе; D_0 – коэффициент самодиффузии; B_0 – коэффициент бародиффузии, $B_0 = \frac{\alpha_1 D_0 m_1}{\rho_2 RT}$; C – концентрация диффузанта; z – пространственная координата (на рисунках использована глубина h); $\Delta\alpha$ – разность коэффициентов концентрационного расширения матрицы α_2 и диффузанта α_1 .

В симметричной задаче

$$A = Q = \frac{6}{\delta^3} F_2(t) = 0.$$

В несимметричной

$$A = \frac{\lambda p}{K\mu\delta} + \frac{4}{\delta^3 K} F_2 - \frac{2}{K} \frac{1}{\delta^2} F_1, \quad Q = -\frac{2}{K\delta} \frac{\lambda + \mu}{\mu} p + \frac{4}{\delta^3 K} F_2 - \frac{2}{\delta^2 K} F_1,$$

$$F_1(t) = K \int_0^\delta w dz, \quad F_2(t) = K \int_0^\delta w(z - z_s) dz \neq 0,$$

где δ – толщина пластины с покрытием; p – приложенная нагрузка; $w = 3\Delta\alpha C$.

Если все физические свойства постоянны и возникающие в пластине механические напряжения не влияют непосредственно на коэффициент диффузии, то под действием напряжений возможен дополнительный поток массы, связанный непосредственно с наличием внутреннего момента сил, вызванного неоднородным распределением концентраций.

Коэффициент диффузии может непосредственно зависеть от работы напряжений [9], что отражает формула

$$D^* = D_0 \exp\left(-\frac{k\Pi}{RT}\right),$$

где $k = k_0 \frac{m_1}{\rho_2}$; k_0 – коэффициент чувствительности диффузии к работе напряжений; m_1 – молярная масса примеси; ρ_2 – плотность основы; Π – работа напряжений; $\Pi = -\sigma_{ij} \cdot \varepsilon_{ij}$.

Граничные условия в симметричном случае имеют вид

$$z = \pm \frac{\delta}{2}, C = C_0; z = 0, \frac{\partial C}{\partial z} = 0.$$

В несимметричной задаче имеем

$$z = 0, C = \eta_0; z = \delta, \mathbf{J} = 0 \text{ или } D_{\text{eff}} \frac{\partial C}{\partial z} = V_{\text{eff}} C.$$

В начальный момент времени $C = 0$.

Результаты расчета представлены на рис. 3. Поскольку коэффициент зернограницной диффузии на несколько порядков больше коэффициента диффузии в объеме, для обеспечения нужной глубины проникновения примеси в численном эксперименте время отжига было увеличено до 600 ч, а толщина пластины уменьшена до 200 мкм. Из рис. 3, а видно, что нагрузка оказывает заметное влияние, в случае когда примесь нанесена с одной стороны. Значения средних концентраций по толщине пластины в отсутствие нагрузки и при её наличии отличаются на 63 %. Для варианта симметричного нанесения примеси (рис. 3, б) эта разница составляет 20 %, что полностью соответствует тенденциям поведения концентрационных профилей в поставленном эксперименте.

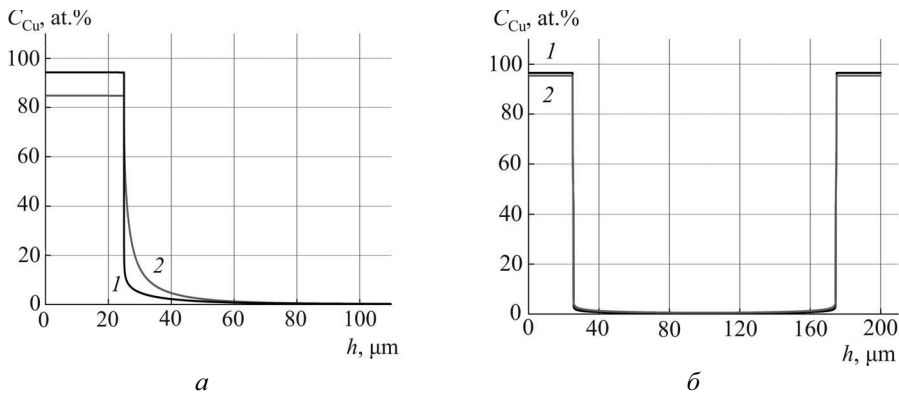


Рис. 3. Концентрационные профили меди в никеле, полученные в результате численного счета: а – асимметричный случай; б – симметричный; 1 – в отсутствие нагрузки; 2 – с приложением нагрузки

В работе [4] было продемонстрировано, что в случае симметричного нанесения примеси влияние напряжений на концентрационные профили должно быть менее интенсивным, так как механизм, отвечающий за перенос примеси под действием градиента механических напряжений, в рассматриваемом приближении никакого влияния на диффузию не оказывает. В ходе численного расчета в данной работе это проявлялось в том, что слагаемые, отвечавшие за перенос примеси под действием напряжений, отсутствовали.

3. Возможные обобщения

Еще раз подчеркнем, что образец, в котором изучалась диффузия, представляет собой поликристалл, содержащий, помимо обычных для кристаллов дефектов – вакансий, дислокаций и т.п., границы зерен, обладающие особыми свойствами. В случае примесей, плохо растворимых в объеме, границы являются основным каналом для диффузии. На величине эффективного коэффициента диффузии сказывается характер границ, их энергия, площадь границ, приходящаяся на единицу количества вещества, что никак не отражено в использованной выше модели. Все известные к настоящему времени феноменологические модели диффузии в материалах с внутренними поверхностями – обобщения классической модели Фишера [10]. Не стали исключением работа [11], где анализируется модель с координатно-зависимым коэффициентом диффузии вблизи межзеренной границы, а также работа [12], где предполагается, что равновесная концентрация устанавливается не на границе, как в [10], а в некоторой прилегающей к ней области. Говоря о влиянии напряжений на диффузию, авторы [13], однако, избегают, к сожалению, подобные модели невозможно использовать при описании напряженно-деформированного состояния образцов реальных размеров при варьировании условий нагружения. Для этой цели можно предложить несколько разных подходов.

Например, естественным «обобщением» модели Фишера можно считать модель [14], где учитывается реальная зеренная структура материала на основе EBSD-карты образца никеля. Подобный подход используется и в [15], но только в [14] предпринята попытка учета влияния характера напряженно-деформированного состояния по разным каналам и в объеме, и по границам зерен.

Иной способ учета неоднородной структуры образца, находящегося под нагрузкой, – учет конечности времени релаксации потока массы, различного для элементов структуры разных размеров и зависящего от различных термодинамических переменных состояния. Время релаксации может быть различным и для различных компонентов, что приводит к немонотонным концентрационным профилям [16]. Это аналогично идеям, используемым в моделях расширенной термодинамики [17].

С другой стороны, нелишне вспомнить, что линейная связь между потоком массы и вызывающей его силой (в изотермических условиях – градиентом химического потенциала g с обратным знаком) – есть лишь гипотеза, основанная на представлении потока в ряд Тейлора по степеням малого отклонения силы от равновесного значения. Например, с точностью до слагаемых второго порядка малости найдем

$$\mathbf{J} = L\mathbf{X} + M\mathbf{X}^2 + \dots,$$

где $\mathbf{X} = -\nabla g(C)$. В этом случае появляются новые феноменологические коэффициенты и требуются дополнительные условия на соответствие второму закону термодинамики. Учитывая фрактальную природу внутренних границ раздела, можно получить более серьезные обобщения диффузионных моделей.

Возможно, что в некоторых случаях будет эффективным подход, позволяющий рассчитать эффективный коэффициент диффузии в зависимости от конкретной структуры, эволюция которой описывается на основе специальной микрозадачи, подобно тому как в макрокинетике для описания кинетики химических превращений используется задача для «реакционной ячейки» [18] или в биофизических приложениях растворение, лимитируемое диффузией в структурных элементах [19].

Еще один вариант модели, на который стоит обратить внимание при дальнейших исследованиях, – это модели диффузии в двухфазных системах с коэффициентом массообмена между ними. Поскольку область границ раздела и объемная фаза различаются по свойствам принципиально, двухфазная модель в рамках механики гетерогенных сред может быть вполне эффективной. Но проблемы определения размеров граничной фазы и коэффициента массообмена подобны проблемам определения параметров классических моделей зернограничной диффузии.

И наконец, поскольку с диффузией связаны разнообразные явления неупругого деформирования материалов, проявляющиеся на различных структурных уровнях, в дальнейшем требуется принять во внимание многоуровневые модели, например [20].

Заключение

Таким образом, теоретически и экспериментально показано, что менее интенсивное влияние нагрузки на диффузию в образце, примесь на который изначально нанесена симметрично, связано с отсутствием в этом случае одного из механизмов воздействия механических напряжений на диффузию. На основе этого эффекта можно предложить способ изучения влияния только одного из механизмов, связанного с непосредственным изменением величины коэффициента диффузии. Намечены пути дальнейшего развития теории диффузии в структурно-неоднородных средах.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 10-01-00034 и в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России», госконтракт № 16.740.11.0122.

Библиографический список

1. Vollenweider Kilian, Sahli Beat, Fichtner Wolfgang Ab initio calculations of arsenic in silicon: Diffusion mechanism and strain dependence // Phys. Rev. B. – 2010. – Vol. 81, no. 17. – P. 174–119.
2. Diffusion in strained Si(Ge) / N.E.B. Cowern, P.C. Zalm, P. van der Sluis, D.J. Gravesteijn, W.B. de Boer // Phys. Rev. Lett. – 1994. – Vol. 72, no. 16. – P. 2585–2588.
3. Continuum and atomistic models of strongly coupled diffusion, stress, and solute concentration / Hamed Haftbaradaran, Jun Song, W.A. Curtin, Huan-jian Gao // Journal of Power Sources. – 2011. – No. 196. – P. 361–370.
4. Князева А.Г., Миколайчук М.А. Насыщение пластины примесью из окружающей среды в условиях механического нагружения // Изв. РАН. Механика твердого тела. – 2011. – № 5. – С. 43–57.
5. Сухомлин Г.Д., Копецкий Ч.В., Андреева А.В. Специальные множественные стыки границ зерен в ГЦК-материалах // Физика металлов и металловедение. – 1986. – Т. 62. – Вып. 2. – С. 349–357.
6. Лариков Л.Н., Исайчев В.И. Диффузия в металлах и сплавах. – Киев: Наукова думка, 1986. – 520 с.

7. Сравнительные исследования зернограничной диффузии меди в субмикро- и крупнокристаллическом никеле / Г.П. Грабовецкая, И.В. Раточка, Ю.Р. Колобов, Л.Н. Пучкарева // *Физика металлов и металловедение*. – 1997. – Т. 83, № 3. – С. 112–116.

8. Мишин Ю.М., Разумовский И.М. Математические модели и методы определения диффузионных параметров индивидуальных границ // *Структура и свойства внутренних поверхностей раздела в металлах*. – М.: Наука, 1988. – С. 96–132.

9. Миколайчук М.А., Князева А.Г. Влияние напряжений и деформаций на перераспределение примеси в пластине в условиях одноосного нагружения // *Прикладная механика и техническая физика*. – 2010. – Т. 51, № 3. – С. 147–157.

10. Fisher J.C. Calculation of diffusion penetration curves for surface and grain boundary diffusion // *J.Appl. Phys.* – 1951. – Vol. 22, no. 1. – P. 74–77.

11. Кесарев А.Г., Кондратьев В.В., Ломаев И.Л. К теории зернограничной диффузии в наноструктурных материалах в условиях насыщения диффузантом приграничной области // *Физика металлов и металловедение*. – 2011. – Т. 112, № 1. – С. 47–55.

12. Определение параметров зернограничной диффузии и сегрегации Со в W с использованием уточненной модели зернограничной диффузии / В.В. Попов, А.В. Сергеев, Н.К. Архипова, А.Ю. Истомина // *Физика металлов и металловедение*. – 2011. – Т. 112, № 3. – С. 273–294.

13. Кесарев А.Г., Кондратьев В.В. О влиянии внутренних напряжений на диффузию в наноструктурных сплавах // *Физика металлов и металловедение*. – 2007. – Т. 104, № 3. – С. 5–11.

14. Миколайчук М.А., Князева А.Г. Модель диффузии примеси в структурно-неоднородной деформируемой среде // *Известия вузов. Физика*. – 2012. – Т. 55. – Т 5/2. – С. 74–80.

15. Christopher S.A., Kumar M., King W.E. Analysis of grain boundary networks and their evolution during grain boundary engineering // *Acta Materialia*. – 2003. – Vol. 5, no. 3. – P. 687–700.

16. Князева А.Г., Миколайчук М.А. Об одной задаче диффузии в трехкомпонентной системе с двумя временами релаксации // *Известия вузов. Физика*. – 2011. – № 11. – С. 46–52.

17. Жоу Д., Касас-Баскес Х., Лебон Дж. Расширенная необратимая термодинамика: пер. с англ. / Институт компьютерных исследований: регулярная и хаотическая динамика. – М.; Ижевск, 2006. – 528 с.

18. Алдушин А.П., Мержанов А.Г., Хайкин Б.И. О некоторых особенностях горения конденсированных систем с тугоплавкими продуктами реакции // Докл. АН СССР. – 1972. – Т. 204, № 5. – С. 1139–1142.

19. Назаренко Н.Н., Князева А.Г. Механические напряжения в сферолитах в процессе растворения кальций-фосфатов в биологических жидкостях // Физическая мезомеханика. – 2010. – Т. 13, № 3. – С. 95–99.

20. Многоуровневые модели неупругого деформирования материалов и их применение для описания эволюции внутренней структуры / П.В. Трусков, А.И. Швейкин, Е.С. Нечаева, П.С. Волегов // Физическая мезомеханика. – 2012. – Т. 15, № 1. – С. 33–56.

References

1. Vollenweider Kilian, Sahli Beat, Fichtner Wolfgang Ab initio calculations of arsenic in silicon: Diffusion mechanism and strain dependence. *Phys. Rev. B*, 2010, vol.81, no. 17, pp. 174–119.

2. Cowern N.E.B., Zalm P.C., van der Sluis P., Gravesteijn D.J., de Boer W.B. Diffusion in strained Si(Ge). *Phys. Rev. Lett.* 1994, vol. 72, no. 16, pp. 2585–2588.

3. Haftbaradaran Hamed, Song Jun, Curtin W. A., Gao Huajian. Continuum and atomistic models of strongly coupled diffusion, stress, and solute concentration. *Journal of Power Sources*. 2011, no. 196, pp. 361–370.

4. Knyazeva A.G., Mikolaychuk MA. Saturation of a plate with an environmental impurity under mechanical loading conditions. *Mech. Solids*. 2011, 46(5), pp. 692–704.

5. Sukhomlin G.D., Kopetskii Ch.V., Andreeva A.V. Specialnye mnozhestvennye styki granits zeren v GCK materialakh [Special multiple grain boundary junction in fcc lattice materials]. *Fizika metallov i metallovedenie*. 1986, vol. 62, is. 2, pp. 349–357.

6. Larikov L.N., Isaychev V.I. Diffuziya v metallakh i splavakh [Diffusion in metals and alloys]. Kiev: Naukova dumka, 1986, 520 p.

7. Grabovetskaya G.P., Ratochka I.V., Kolobov Yu.R., Puchkareva L.N. Sravnitelnye issledovaniyu zernogranichnoy diffusii v submikro- i krupnokristallicheskih materialakh [Comparative investigation of grain boundary diffusion of copper in sub micro- and macrocrystalline nickel], *Fizika metallov i metallovedenie*, 1997, vol. 83, no. 3, pp. 112–116.

8. Mishin Yu.M., Razumovskii I.M. Matematicheskie modeli i metody opredeleniya diffusionnykh parametrov individualnykh granits [Mathemati-

cal model and methods of determination of diffusion parameters of individual boundaries]. *Struktura i svoistva vnutrennikh poverhnostey razdela v metallakh* [The structure and properties of internal interfaces in metals]. Moscow: Nauka, 1988, pp. 96–132.

9. Mikolaychuk M.A., Knyazeva A.G. Vliyanie napryazhenii i deformatsii na pereraspredelenie promesi v plastine v usloviyakh odnoosnogo nagruzheniya [Stress and strain influence on the admixture redistribution at the conditions of one axis loading]. *Prikladnaya mekhanika i tekhnicheskaya fizika*, 2010, vol. 51, no. 3, pp. 147–157.

10. Fisher J.C. Calculation of diffusion penetration curves for surface and grain boundary diffusion. *J.Appl. Phys.* 1951, vol. 22, no. 1, pp. 74–77.

11. Kesarev A.G., Kondrati'ev V.V., Lomaev I.L. K teorii zernogranichnoi diffusii v nanostrukturnykh materialakh v usloviyakh nasyscheniya diffuzantom prigranichnoi oblasti [To theory of grain boundary diffusion in nano structure materials at the condition of duffusant saturation of surface region]. *Fizika metallov i metallovedenie*, 2011, vol. 112, no. 1, pp. 47–55.

12. Popov V.V., Sergeev A.V., Arkhipova N.K., Istomina A.Yu. Opredelenie parametrov zernogranichnoy diffusii i segregatsii Co v W s ispolzovaniem utochnennoi modeli zernogranichnoy diffusii [The parameter determination for grain boundary diffusion and segregation for Co in W using the corrected models of grain boundary diffusion]. *Fizika metallov i metallovedenie*, 2011, vol. 112, no. 3, pp. 273–294.

13. Kesarev A.G., Kondrati'ev V.V. O vliyanii vnutrennikh napryazhenii na diffuziyu v nanostrukturnykh splavakh [On the internal stress influence in nanostructure alloys]. *Fizika metallov i metallovedenie*, 2007, vol. 104, no. 3, pp. 5–11.

14. Mikolaychuk M.A., Knyazeva A.G. Model diffusii promesi v strukturno-neodnorodnoy deformiruемой srede [The model of admixture diffusion in structure inhomogeneous deformable medium]. *Izvestiya vuzov, serija Fizika*, 2012, vol. 55, no. 5/2, pp. 74–80.

15. Christopher S.A., Kumar M., King W.E. Analysis of grain boundary networks and their evolution during grain boundary engineering. *Acta Materialia*, 2003, vol. 5, no 3, p. 687–700.

16. Knyazeva A.G., Mikolaychuk M.A. Ob odnoi zadache diffusii v trekhkomponentnoi sisteme s dvumya vremenami relaxatsii [On the one of diffusion problem for three component system with two relaxation time]. *Izvestiya vuzov, serija Fizika*, 2011, vol. 54, no. 11, pp. 46–52.

17. Jou D., Casas-Vazquez J., Lebon G. *Extended Irreversible Thermodynamics*. – New York: Springer, 1993, pp. 319.

18. Aldushin A.P., Merzhanov A.G., Khaikin B.I. O nekotorykh osobennostyakh goreniya kondensirovannykh system s tugoplavkimi produktami reakcii [On some features of the condensed systems combustion with refractory reaction products]. *Doklady AN SSSR*, 1972, vol. 204, no. 5, pp. 1139–1142.

19. Nazarenko N.N., Knyazeva A.G. Mechanicheskie napryazheniya v sferolitakh v processe rastvoreniya kalcio-fosfatov v biologicheskikh zhidkostyakh [Mechanical stresses in spherulites during dissolution of calcium-phosphates in biological liquids]. *Physical mesomechanics*, 2010, vol. 13, no. 3, pp. 95–99.

20. Trusov P.V., Shveikin A.I., Nechaeva E.S., Volegov P.S. Mnogourovnevye modeli neuprugogo deformirovaniya materialov i ikh primeneniye dlya oposaniya evolyucii vnutrenney struktury [Multilevel models of inelastic deformation of materials and their using for internal structure evolution description]. *Physical mesomechanics*, 2012, vol. 15, no. 1, pp. 33–56.

Об авторах

Миколайчук Михаил Александрович (Томск, Россия) – ассистент кафедры физики высоких технологий в машиностроении Национального исследовательского Томского политехнического университета (634050, г. Томск, пр. Ленина, 30, e-mail: mishas@sibmail.com).

Князева Анна Георгиевна (Томск, Россия) – доктор физ.-мат. наук, профессор, завлабораторией моделирования физико-химических явлений в современных технологиях Национального исследовательского Томского политехнического университета (634050, г. Томск, пр. Ленина, 30), главный научный сотрудник Института физики прочности и материаловедения СО РАН (634021, Томск, Академический пр. 2/4, e-mail: anna-knyazeva@mail.ru).

Грабовецкая Галина Петровна (Томск, Россия) – доктор физ.-мат. наук, главный научный сотрудник Института физики прочности и материаловедения СО РАН (634021, Томск, Академический пр. 2/4, e-mail: grabg@ispms.tsc.ru).

Мишин Иван Петрович (Томск, Россия) – младший научный сотрудник Института физики прочности и материаловедения СО РАН (634021, Томск, Академический пр. 2/4; e-mail: mishinv1@yandex.ru).

About the authors

Mikolaychuk Mikhail Alexandrovich (Tomsk, Russian Federation) – assistant of the department of Physic of High Technologies in Mechanical engineering of National Research Tomsk Polytechnic University (Institute of Physics of High Technologies) (30, Lenina av., Tomsk, 634050, Russian Federation, e-mail: mishas@sibmail.com).

Knyazeva Anna Georgievna (Tomsk, Russian Federation) – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, head of laboratory of Modeling of physical-chemical processes in modern technologies National Research Tomsk Polytechnic University (30, Lenina av., Tomsk, 634050, Russian Federation, e-mail: anna-knyazeva@mail.ru); principal researcher of Institute of Strength Physics and Material Science (2/4, Academichesky av., Tomsk, 634021, Russian Federation).

Grabovetskaya Galina Petrovna (Tomsk, Russian Federation) – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, principal researcher of Institute of Strength Physics and Material Science (2/4, Academichesky av., Tomsk, 634021, Russian Federation, e-mail: grabg@ispms.tsc.ru).

Mishin Ivan Petrovich (Tomsk, Russian Federation) – junior researcher of of Institute of Strength Physics and Material Science (2/4, Academichesky av., Tomsk, 634021, Russian Federation, e-mail: mishinv1@yandex.ru).

Получено 14.09.2012