

МЕТОДИКА ПРАКТИЧЕСКОГО РАСЧЕТА ДИФФУЗИИ

© 1996, Сухоруков Г.И., Сухоруков Е.Г.

Братский индустриальный институт

Поступила в редакцию 20.04.95

В статье изложены новые подходы к расчету диффузии и теплопроводности, исключающего прямые решения уравнений в частных производных. Для расчетов диффузии и теплопроводности получены простые аналитические соотношения, возможности которых продемонстрированы на конкретных примерах.

I. Введение

Физические явления диффузии и теплопроводности лежат в основе многих экспериментов, связанных с массотеплообменом. Необходимость проведения таких экспериментов вызвана потребностями металлургии, теплоэнергетики, атомной энергетики, космонавтики и других отраслей промышленности. Разработка и внедрение прогрессивных технологий, проектирование и изготовление агрегатов, позволяющих интенсифицировать производственные процессы, невозможны без проведения экспериментальных и теоретических исследований.

Эксперименты могут проводиться как в лабораторных условиях, так и непосредственно на производстве. Для правильной постановки задачи эксперимента и правильной интерпретации результатов исследования нужны методы расчета, результаты которых хорошо коррелируются с практикой, и основанные на разумных теоретических предположениях, адекватно отражающих происходящие процессы. При наличии таких методов можно отказаться от проведения трудоемких и дорогостоящих экспериментов. Теория, достоверно описывающая физические явления, может дать информацию, которую экспериментально получить невозможно.

В общем виде процессы диффузии и теплопроводности, при отсутствии внутренних источников, описываются дифференциальными уравнениями с частными производными второго порядка (законы Фика) [1]:

$$\frac{C}{\tau} = D \nabla^2 C ; \quad \frac{t}{\tau} = a \nabla^2 t,$$

где: C — концентрация, τ — время, D — коэффициент диффузии, ∇^2 — оператор Лапласа, a — коэффициент

теплопроводности, t — температура. Эти уравнения точно описывают процессы только в элементарных объемах. Чтобы описать диффузию и теплопроводность в телах конечных размеров, требуется задать краевые условия.

При решении приведенных дифференциальных уравнений с учетом начальных и граничных условий приходится сталкиваться с большими математическими трудностями. Решения получают или в виде бесконечного ряда, или в виде выражения, содержащего функцию ошибок Гауса [1-4]. Использование первого решения требует вычисления многих членов ряда [2], а использование второго решения дает неточные результаты [5]. При практических расчетах нестационарной теплопроводности пользуются графиками, построенными приблизительно по первому члену ряда. Часто используются и другие приближенные методы расчета или руководствуются опытными данными.

Поскольку существующие методы расчета диффузии и теплопроводности сложны, применяемые формулы громоздки, а результаты расчетов не достаточно точны, при их использовании на практике специалисты сталкиваются с большими математическими трудностями. В связи с этим возникла актуальная необходимость в разработке новых методов расчета диффузии и теплопроводности, которые были бы просты и в то же время позволяли надежно и точно решать сложные задачи физики и техники.

2. Вывод формул для расчета

Процесс диффузии в телах, являющихся источниками, и в телах, являющихся стоками диффундирующего вещества, описывается одними и теми

же уравнениями. Во многих случаях он протекает в несколько стадий. Скорость диффузии на первой стадии определяется внешними условиями, а на последних — свойствами растворителя и диффундирующего вещества. В зависимости от соотношения между удельным потоком, коэффициентом диффузии, концентрацией и размером тела возможны две схемы диффузии. Покажем это на примере диффузии в пластине.

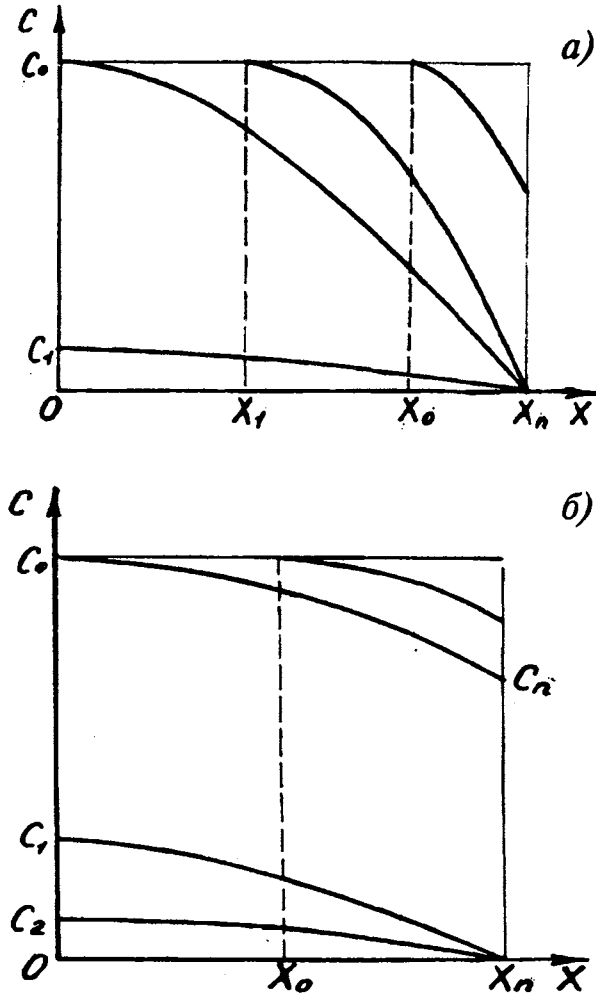


Рис.1. Схемы диффузии. а - первая; б - вторая.

Процесс диффузии будет протекать по первой схеме (рис.1а), если выполняется условие

$$J_n > \frac{2DC_0}{X_n},$$

где: J_n — удельный поток на поверхности тела; C_0 — начальная концентрация; X_n — расстояние от поверхности до середины пластины. Диффузия по первой схеме идет в следующие три стадии:

- диффузия с переменным перепадом концентрации;
- диффузия с постоянным перепадом концентрации;
- выравнивание концентрации по сочетанию.

На первой стадии каждая точка сечения пластины, затронутая процессом диффузии, вносит одинаковый вклад в удельный поток. На расстоянии X от оси

$$J = \delta (X - X_0), \quad (1)$$

где: δ — диффузная мощность единицы объема источника; X_0 — координата фронта диффузии. Принимая во внимание, что на поверхности тел $X = X_n$, а $J = J_n$, находим:

$$\delta = \frac{J_n}{X_n - X_0}.$$

Подставляя значения δ в формулу (1), получим

$$J = \frac{J_n(X - X_0)}{X_n - X_0}$$

Закономерность диффузии в пластине теперь можно выразить уравнением:

$$\frac{J_n(X - X_0)}{X_n - X_0} = -D \frac{dC}{dX}.$$

После интегрирования и нахождения постоянных интегрирования получим:

$$\frac{J_n(X - X_0)^2}{2(X_n - X_0)} = D(C_0 - C).$$

За элементарный промежуток времени dt через единицу поверхности пластины продиффундирует следующее количество вещества:

$$dQ = (C_0 - C)dX$$

Теперь можно определить длительность первой стадии диффузии

$$\tau_1 = \int_{X_1}^{X_n} \frac{dQ}{J_n} = \frac{(X_n - X_1)^2}{6D}$$

где X_1 — координата фронта диффузии в конце первой стадии. Полученная формула позволяет определить также время распространения фронта диффузии до любых точек, находящихся между X_1 и X_n .

Вторая стадия наступает, когда концентрация на поверхности пластины достигает нулевого значения. С этого момента диффузионную мощность в точке X можно выразить формулой:

$$\delta = \frac{\delta_0(X_n - X)}{X_n - X_0},$$

где δ_0 — диффузионная мощность в точке X_0 .

Удельный поток на расстоянии X от оси пластины:

$$J = \int_{X_0}^X \delta(X) dX = \frac{\delta_0 (X - X_0)(2X_n - X - X_0)}{2(X_n - X_0)}.$$

На поверхности пластины $X = X_n$, $J = J_n$, поэтому можно записать:

$$\delta = \frac{2J_n}{X_n - X_0}; \quad J = \frac{J_n (X - X_0)(2X_n - X - X_0)}{(X_n - X_0)^2}$$

Закономерность изменения концентрации по сечению пластины выразится уравнением

$$\frac{J_n (X - X_0)^2 (3X_n - 2X_0 - X)}{(X_n - X_0)^2} = D(C_0 - C).$$

При отсутствии первой стадии время распространения процесса диффузии до точки X_0 будет равно

$$\tau = \int_{X_0}^{X_n} \frac{(C_0 - C) dX}{J_n} = \frac{(X_n - X_0)^2}{4D}.$$

Время распространения фронта диффузии до середины пластины равно

$$t = \frac{X_n^2}{4D}.$$

При наличии первой стадии длительность второй стадии можно определить по формуле

$$t_2 = \frac{X_1(2X_n - X_1)}{4D}.$$

С момента наступления третьей стадии закономерность изменения концентрации по сечению пластины описывается уравнением

$$\frac{J_n X^2 (3X_n - X)}{3X_n^2} = D(C_0 - C) \quad (2)$$

Длительность третьей стадии равна

$$\tau_3 = \int_{C_1}^{C_0} X(C) dC = \frac{5X_n^2}{12D} \ln \frac{C_0}{C_1}, \quad (3)$$

где C_1 — концентрация на оси пластины в конце третьих стадий.

Общее время диффузии по первой схеме составит:

$$t = t_1 + t_2 + t_3.$$

Процесс диффузии будет идти по второй схеме (рис.16), если

$$J_n < \frac{2DC_0}{X_n}.$$

В этом случае наблюдаются следующие три стадии диффузии:

- движение фронта диффузии от поверхности до середины пластины;
- диффузия с постоянным перепадом концентрации по сечению;
- выравнивание концентрации по сечению.

Вторая схема диффузии описывается формулами, выведенными для первой схемы.

Длительность первой стадии равна

$$\tau_1 = \frac{X_n^2}{6D}.$$

На второй стадии диффузии закономерность изменения концентрации по сечению пластины описывается формулой

$$\frac{J_n X^2}{2X_n} = D(C_0 - C).$$

Максимальный перепад концентрации по сечению пластины равен

$$C_0 - C_n = \frac{J_n X_n}{2D}.$$

Длительность второй стадии равна

$$\tau_2 = \frac{X_n^2 C_n}{2D(C_0 - C_n)}.$$

Третья стадия описывается формулами (2) и (3). Её длительность равна

$$\tau_3 = \frac{5X_n^2}{12D} \ln \frac{C_1}{C_2},$$

где C_1 и C_2 — концентрация на оси тела в начале и конце третьих стадий.

Второй закон Фика можно выразить также через количество вещества, продиффундировавшего в единице объема растворителя. Принимая во внимание, что

$$C_0 - C = \frac{dQ}{dX}, \quad a$$

$$J = -D \frac{dC}{dX} = D \frac{d(C_0 - C)}{dX} = \frac{dQ}{d\tau}$$

можно записать

$$\frac{Q}{\tau} = D \frac{Q^2}{X^2}.$$

3. Примеры применения новой методики расчета диффузии

Полученные уравнения позволяют рассчитывать диффузию при различных концентрациях диффундирующего вещества. Расчеты по полученным уравнениям хорошо согласуются с экспериментальными данными. Рассмотрим процесс диффузии в системе медь-никель.

В таблице 1 в первых двух столбцах показано распределение никеля по обе стороны от поверхности стыка двух пластин [3]. Одна пластина была изготовлена из чистой меди, другая — из сплава меди с 5% никеля. За начало координат взята точка, в которой содержание никеля равно 0,1%.

При расчете, ввиду малого содержания никеля в сплаве, концентрационную зависимость коэффициента диффузии можно не учитывать. За начало координат удобнее взять точку, в которой содержание никеля равно 2,5%.

приведены результаты расчета по этой формуле. Расчет произведен для точек, в которых экспериментально определялось содержание никеля. В данном примере $X_0 = 0,38$ мм, $C_0 = 2,5$ % Ni. На рис 2 изменение концентрации согласно той же формуле представлено графически. Точками обозначены экспериментальные данные.

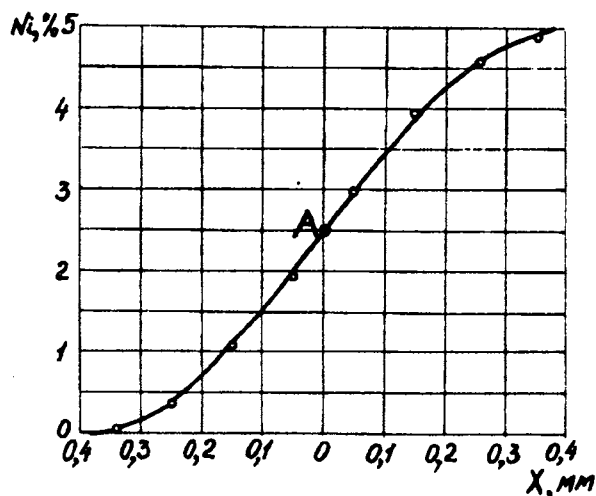


Рис.2 Диффузия никеля в меди.

Таблица 1.

Диффузия никеля в меди

Эксперимент		Расчет	
X, мм	Ni, %	X, мм	Ni, %
-	-	0,380	0,00
0,00	0,10	0,398	0,03
0,10	0,41	0,248	0,40
0,20	1,05	0,148	1,11
0,30	1,96	0,048	2,03
0,40	3,05	0,052	3,01
0,50	4,02	0,152	3,92
0,60	4,63	0,252	4,63
0,70	4,92	0,352	4,98
-	-	0,380	5,00

В этой системе координат уравнение для пластины примет вид

$$\frac{J_n}{3X_0^2} (3X_0^2X - X^3 - 2X_0^3) = D(C_0 - C),$$

а

$$J_n = - \frac{3DC_0}{2X_0}$$

Откуда получим

$$C = \frac{C_0 X}{2X_0} \left(3 - \frac{X^2}{X_0^2} \right) \quad (4)$$

В третьем и в четвертом столбцах таблицы

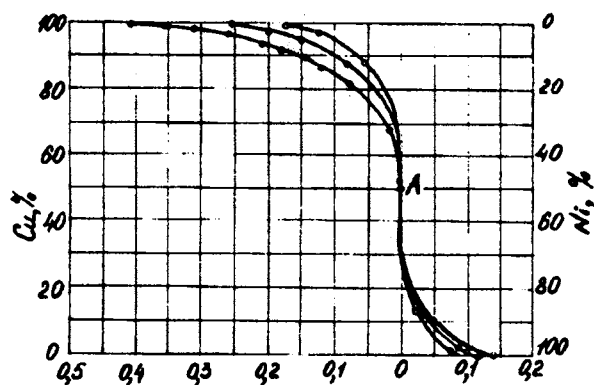


Рис.3 Взаимная диффузия меди и никеля.

На рис.3 показано распределение концентрации по обе стороны от поверхности раздела между медной и никелевой пластинами. Процесс диффузии протекал при температуре 1000°C. Длительность процесса для изображенных кривых равна 12, 33 и 77 часам. Экспериментальные данные, изображенные точками, взяты из [5]. Кривые построены с помощью уравнения

$$C = C_0 \sqrt{\frac{X}{2X_0} \left(3 - \frac{X^2}{X_0^2} \right)}$$

В данном примере коэффициент диффузии зависит от концентрации.

При выводе последнего уравнения было принято

$$D = D_0 \frac{C^2}{C_0^2},$$

где: $C_0 = 50\% \text{ Ni}$, D_0 — коэффициент диффузии при $C = C_0$. Начало координат находится в точке А.

Новая методика расчета диффузии позволила наглядно описать процесс формирования структуры технического алюминия при неравновесной кристаллизации. После проведенных исследований появилась возможность управлять процессом формирования структуры.

IV. Заключение

Расчеты процессов диффузии характеризуются значительной сложностью. Изложенная выше методика существенно упрощает расчеты. Выведенные формулы позволяют определять длительность процесса диффузии, глубину проникновения диффундирующего вещества, значения коэффициента

диффузии, закономерность распределения диффундирующего вещества и изменение величины удельного потока по толщине диффузионного слоя, знание которых крайне важно во многих практических применениях.

Литература

1. Герцижен С.Д., Дехтяр И.Я. Диффузия в металлах и сплавах в твердой фазе. М.: Физматгиз, 1960, 564 с.
2. Шьюман П. Диффузия в твердых телах. М.: Metallurgy, 1966, 196 с.
3. Маннинг Дж. Кинематика диффузии атомов в кристаллах. М.: Мир, 1971, 278 с.
4. Бокштейн Б.С., Бокштейн С.З., Жуховичский А.А. Методы определения коэффициента диффузии металлов. В кн.: Методы испытания, контроля и исследования машиностроительных материалов. Под общей редакцией Туманова А.Т. Т.1. Физические методы исследования металлов. М.: Машиностроение, 1971, с.5 — 25.
5. Котрелл А.Х. Строение металлов и сплавов. М.: Metallurgizdat, 1961, 288 с.

PRACTICAL DIFFUSION CALCULATION PROCEDURE

G.I.Sukhorukov, E.G.Sukhorukov
Bratsk Industry Institute

The paper offers new approaches to calculating diffusion and thermal conductance avoiding direct solutions of partial differential equations. Simple analytical relationships for diffusion and thermal conductance calculations are derived and their possibilities are demonstrated on specify examples.