

PACS: 05.70.-a, 62.50.-p

И.Р. Венгеров

ТЕПЛОФИЗИКА ДЕФОРМИРУЕМЫХ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

(Обзор)

I. СТРУКТУРА ПАРАДИГМЫ

Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины
ул. Р. Люксембург, 72, г. Донецк, 83114, Украина

Статья поступила в редакцию 27 января 2006 года

Работа представляет собой обзор по проблеме математического моделирования процессов тепломассопереноса в деформируемых твердых телах. В данной, первой части обзора рассмотрена структура парадигмы, охарактеризованы ее компоненты – объекты, процессы и модели микро-, мезо- и макроуровней описания.

1. Введение

1.1. Актуальность проблемы

Из фундаментальных монографий [1–8] и работ по физике твердого тела (ФТТ) современных авторов [9–15] видно, что она включает в себя практически все разделы физики. В настоящее время актуальны и активно развиваются фундаментальные и прикладные исследования ФТТ в экстремальных условиях по направлениям: физика и техника высоких давлений; получение и исследование перспективных материалов; наносистемы и нанотехнологии.

Большую роль при этом играют теоретические исследования динамического поведения сложных систем во внешних полях, свойств и структуры твердых тел. К внешним воздействиям относятся высокие давления, высокие и низкие температуры, интенсивное пластическое деформирование, концентрированные потоки энергии и частиц, электромагнитные поля. Как следует из [1–15], определяющее влияние на ход процессов часто оказывают температура тел и концентрация в них примесей и дефектов.

Известные математические модели однотипных процессов в микро-, мезо- и макросистемах (т.е. описания процессов на различных структурных уровнях) слабо связаны между собой [13]. На микроуровне процессы моделируют в рамках микрофизики (квантовая механика, молекулярная (решеточная) динамика, физическая кинетика) [1–5,9,16–22]. Адекватного мезоуровню специфического «мезоаппарата» нет [23,24], поэтому используют методы микро- и макрофизики (и их комбинации) [2,6–10,14–20]. Модели макроуровня (по-

левое описание процессов переноса) в ФТТ используются нечасто: их считают относящимися к другим дисциплинам – механике сплошной среды, теории тепломассопереноса (теплофизике), макроскопической электродинамике.

Эти дисциплины (некоторые авторы включают их в термодинамику неравновесных процессов, т.е. в теорию процессов переноса импульса, массы, энергии, заряда в сплошных средах [25–30]) действительно давно отпочковались от теоретической физики (а заодно и от ФТТ), и, возможно, поэтому модели процессов переноса в деформируемых телах рассматриваются в их рамках редко [11,31,32]. Исключением является теория термоупругости (и ее «отростки» – теории термо- и массопластичности). Большинство рассматриваемых здесь задач относится к так называемым статическим несвязанным задачам, в которых температурное поле влияет на поле деформаций, а обратное влияние не учитывается [33–36].

Это противоречит давно известной сильной двусторонней взаимосвязи свойств твердых тел и их механического поведения с температурными и концентрационными полями [6,10–15,37–48]. Такое взаимовлияние обусловлено природой твердых тел и должно учитываться в расчетах, при планировании экспериментов и интерпретации их результатов, в особенности для мезо- и наноразмерных систем [15,49].

Недостаточность развития парадигмы теплофизики деформируемых твердых тел (ТФДТ) заключается также в слабой связи теоретических и экспериментальных исследований. Многие предлагаемые модели сред (Коссера и нелинейных, нелокальных, с «памятью», «многоуровневых», «вложенных континуумов» и др.) настолько сложны (по числу используемых неизвестных параметров и по математической структуре), что практически «не существуют» для экспериментаторов, технологов и инженеров. Эта сложность моделей не позволяет ставить, решать и реализовывать в эксперименте обратные задачи (задачи идентификации), что препятствует применению современных экспериментальных методик [32,41,50,51].

В связи с изложенным актуальны работы по развитию методов математического моделирования совместно протекающих процессов деформирования, массо- и теплопереноса в мезо- и макросистемах, или, иначе говоря, парадигмы ТФДТ. При этом необходима разработка моделей и методов их исследования (решения краевых задач), достаточно точных и обоснованных, но приемлемых для экспериментаторов и технологов. Это возможно на основе существующей парадигмы, анализу которой (с целью выявления в ней «лакун», неточностей и неоправданно усложненных построений) и посвящена настоящая работа.

1.2. Методология анализа парадигмы

Анализ парадигмы (а в нашем случае – фактически нескольких) кажется задачей невыполнимой (по любому ключевому термину в Интернете можно найти сотни, если не тысячи, публикаций). Воспользуемся возможностью, на которую указывается в [52,53]. Анализ парадигмы предлагается осуществлять по относительно небольшой случайной выборке [54] из фундаментальных монографий, учебников и статей научной периодики.

Понятие парадигмы толкуем в духе [52,55–57], выделяя частные парадигмы процессов деформирования, переноса массы и энергии, рассматриваемых на микро-, мезо- и макроуровнях. Как общая парадигма ТФДТ, так и частные, ее составляющие, структурно состоят из ядра, базиса и оболочки [57]. Далее будем рассматривать только ядро и базис ТФДТ, т.е. соответственно теоретические основы и математический аппарат моделей процессов переноса на различных уровнях.

Деформируемые твердые тела являются сложными, неоднородными, иерархически организованными объектами [10,12,13,]. Объяснение свойств и поведения соответствующих систем в экстремальных условиях, их математическое описание и прогностические расчеты требуют построения и исследования сложных математических моделей. Декомпозиция систем и факторизация моделей в таких ситуациях неизбежны [55–60], что требует знакомства с автономными моделями всех рассматриваемых процессов, т.е. с частными парадигмами для всех уровней описания. Каждую частную парадигму можно охарактеризовать [57] по схеме: изучаемые объекты – исследуемые системы – протекающие в них процессы – математические модели процессов. Поскольку огромное многообразие технологических процессов (и обозначающих их терминов типа «закалка», «отжиг», «легирование») отображается на небольшое число физических процессов (из которых нас интересуют только деформирование, массо- и теплоперенос), далее будем анализировать только физические процессы (а именно указанные выше).

1.3. Цели, задачи, структура работы

Настоящая работа преследует две укрупненные цели: 1) проанализировать парадигму ТФДТ и выявить ее слабые места; 2) предложить пути устранения последних, или, иначе говоря, пути развития (модернизации, частичной замены) парадигмы. Каждая из этих двух целей делится на ряд частных, которые именуем задачами исследования. В данной работе решены следующие задачи: 1) дана характеристика структуры парадигмы (т.е. охарактеризованы объекты и системы всех трех уровней описания, процессы, протекающие в этих системах, их математические модели); 2) рассмотрены математические модели процессов на микроуровне; 3) рассмотрены модели мезоуровня; 4) рассмотрены модели макроуровня; 5) сделаны выводы из проведенного анализа и намечены идеология и пути развития ТФДТ.

2. Объекты и системы

2.1. Твердотельные технологии

К этим, базирующимся на достижениях ФТТ, технологиям относим традиционные технологии (ТТ) – металлургию, металлообработку и машиностроение, электронику и приборостроение, а также «высокие» технологии (ВТ) – твердотельный синтез и нанотехнологии. Заметим, что в настоящее время ВТ активно проникают в ТТ, так что указанная классификация является достаточно условной.

ТТ опираются на ряд прикладных (технических) наук, «отпочковавшихся» от ФТТ, в рамках которых строятся и исследуются математические модели, описывающие типовые технологические процессы. В металлургии: плавление металла; нагрев и охлаждение слитков; очистка жидких металлов от примесей; получение отливок; конвертирование; обогащение руд; сушка концентратов и оборудования [46,48,61–66]. В металлообработке и машиностроении: прокатка; ковка и штамповка; прессование порошков; гидроэкструзия и обработка давлением; термообработка; механическая обработка (резание, сверление, шлифовка); сварка (диффузионная, электросварка, контактная); обработка электромагнитными полями и потоками частиц [46,62,66–81]. В электронике и приборостроении моделируют: регулирование теплового режима элементов и приборов, работы (с учетом термомеханических эффектов) стоек, шасси, подложек; процессы синтеза гетерогенных и слоистых структур; выращивание кристаллов и пленок; диффузионную и физико-химическую обработку поверхностей; обработку лазерным излучением и потоками частиц [69,77,78,82–87].

«Перевод» этих технологических процессов на физический язык показывает, что во многих случаях речь идет о процессах механических (упругое и пластическое деформирование материалов), процессах переноса массы и тепла и их комбинациях. Если, как это часто делается, «включить» механику сплошной среды в теплофизику, то можно утверждать, что теоретической базой ТТ являются парадигмы: металлургической теплофизики [46,63–65,68,88–90]; теплофизики металлообработки и машиностроения [46,62,66,69,72,79,81,91–95]; теплофизики электронных устройств [35,39,83,85,96–101].

Бурно развивающиеся ВТ используют многие из перечисленных технологических процессов ТТ, адаптированные для микро- и нанообъектов, а также специфические. При твердотельном синтезе осуществляются: эллипсометрия и формирование требуемых свойств поверхностей; выращивание монокристаллов и эпитаксиальных пленок; разделение газовых смесей и абсорбция; микросварка трением; обработка электрическими разрядами, ионными и электронными пучками; плазмохимические воздействия; лазерная обработка; синтез гетерогенных структур [14,39,42,49,69,78,85,102]. В нанотехнологии, кроме указанных, применяют метод сильных пластических деформаций для получения наноструктур, компактирование нанопорошков и др. Этими методами получают нанокompозиты (для источников электропитания, хранения водорода, в частности), наномаркеры и нанотрубки, нанопорошки и наночастицы, пористые наноструктурные пленки [14,15,48,103–107].

В ВТ, как и в ТТ, совместно протекающие процессы деформирования и тепломассопереноса играют важную роль, однако сложившихся парадигм «теплофизики твердотельного синтеза» и «нанотеплофизики» нет. Нам не известны монографии и учебники такого профиля, хотя отдельные публикации в научной периодике имеются [105–111]. Заполнение этих «лакун» парадигмы ТФДТ является важнейшим компонентом ее развития.

2.2. Объекты и системы ФТТ

Объектами ФТТ являются твердые тела конечных размеров, произвольного строения (кристаллические и аморфные, сплошные и пористые, однородные и различного состава, содержащие то или иное количество дефектов различного рода и размера). Объекты ФТТ иногда классифицируют по физическим свойствам (чаще всего по виду атомно-ионных связей) [4,5]. Выделяют: металлы (сплавы), ионные кристаллы (большинство диэлектриков), ковалентные кристаллы (полупроводники) [16,32,37–41,93,112]. В отличие от систем, которыми они моделируются, физические объекты всегда трехмерны и не бывают «идеальными», «симметричными», «неограниченными». Экспериментаторами исследуются объекты (образцы) различного размера, в том числе и нанообъекты (т.е. имеющие характерные размеры от 1 до 10^3 nm) [49,103,104,113].

Во всяком макрообразце всегда можно выделить мысленно (и часто физически) «подобласти» микро- или мезоразмеров. Они могут быть созданы искусственно на поверхностях (подложках) или в объеме образца [42,49,112]. Таким образом, объекты ФТТ могут быть микро-, мезо- и макроразмеров, как показано в табл. 1.

Таблица 1

Объекты ФТТ, их размеры и классификация [14]

| № п/п | Наименование объектов | Размеры | Классификация |
|-------|---|---------------|---------------------|
| 1 | Атом, вакансия | 2–3 Å | Объекты микроуровня |
| 2 | Перегиб, порог | 5–50 Å | |
| 3 | Дислокация, уступ на границе зерна, краудион | 100 Å | |
| 4 | Группа дислокаций, сплетение, полоса скольжения, зона сдвига, дислокационная стенка, дислокационные образования, границы зерен; доменные границы; вакансионные, атомные и смешанные кластеры, сегрегации, частицы другой фазы | 100–1000 Å | |
| 5 | Ячейка, дислокационные петля и диполь, полоса в полосовой субструктуре, микрополоса сброса, микродвойники, группы дисклинаций; пластины и рейки мартенсита; блоки мозаики, фрагменты, субзерна | 100–1000 nm | Объекты мезоуровня |
| 6 | Дислокационный ансамбль; участок зерна или монокристалла; пакет реек мартенсита; зона сдвига; система скольжения | 1000–20000 nm | |
| 7 | Зерно; дендрит; зона сдвига | 10–200 μm | Уровень зерна |
| 8 | Группа зерен; волокно композита | 0.2–0.5 mm | Объекты макроуровня |
| 9 | Участок образца | 1 mm | |
| 10 | Образец в целом | mm–cm | |

Известны и другие классификации объектов ФТТ в зависимости от их размеров. Некоторые из них приведены в табл. 2, дополняющей табл. 1.

Дополнение к таблице 1

| № п/п | Авторы | Источ-ник | Объекты различных уровней | Характерные размеры |
|-------|--|-----------|--|--|
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |
| 1 | В.И. Архаров | [23] | Межзеренные границы (межкристаллические сочленения) | 1. Медь чистоты 99.99% – 40–50 nm 2. Серебро чистоты 99.999% – 8–10 nm |
| 2 | В.М. Даниленко | [18] | 1. Однородные изотропные тела (нуль-мерные модели) – макроуровень 2. Однородные и неоднородные тела (одно- и многомерные модели) – континуальный уровень 3. То же – поликристаллический уровень 4. Кристаллиты – доменный уровень 5. Атомы, их комплексы – атомный уровень 6. Электроны – электронный уровень | $(10^{-2})^1 m = 1 \text{ cm}$ $(10^{-2})^2 m = 0.1 \text{ mm}$ $(10^{-2})^3 m = 10^3 \text{ nm}$ $(10^{-2})^4 m = 10 \text{ nm}$ $(10^{-2})^5 m = 0.1 \text{ nm}$ $(10^{-2})^6 m = 1 \text{ pm}$ |
| 3 | В.Д. Дорфман | [49] | Структуры, получаемые твердо-тельным синтезом в кристаллах: 1. Тонкие приповерхностные слои 2. Слои и пленки, деформируемые в направлении роста кристалла 3. Микрозерна | $1-10^4 \text{ nm}$ $1-10^3 \text{ nm}$ 10^3-10^4 nm 10^2-10^4 nm |
| 4 | В.И. Владимиров, В.Н. Иванов, В.Д. Приемский | [24] | 1. Отдельные дефекты решетки – микроуровень 2. Скопления дислокаций, полосы скольжения, дислокационные стенки, микро- и субмикроскопические трещины, границы фрагментов кристалла – мезоуровень 3. Ансамбли дефектов, области однородной сплошной среды – макроуровень | $1-10 \text{ nm}$ $10-10^4 \text{ nm}$ 10^4-10^6 nm |
| 5 | Б.С. Бокштейн | [41] | 1. Зерно крупного размера 2. Граница зерна 3. Дислокационная трубка | 10^5 nm 10^3 nm 1 nm |
| 6 | М.А. Колобов, Н.М. Самохвалов | [39] | Пленка окисла на поверхности кристалла | 50 nm |
| 7 | М.А. Колобов | [114] | Пленка окисла кремния максимальной толщины | $2 \cdot 10^3 \text{ nm}$ |
| 8 | Т.Д. Джафаров | [42] | 1. Промежуточный слой ZnS на подложке из сапфира 2. Подслой серебра 3. Слои многослойной эпитаксиальной структуры | 150 nm 30 nm 150 nm |

Окончание Таблицы 2

| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |
|----|--|---------------|--|---|
| 9 | В. Хармель, Т. Кийбак, В. Шатт и др. | [48] | 1. Порошки вольфрама 2. Порошки диборида титана 3. Ультрадисперсные порошки: а) нитрида алюминия б) нитрида титана в) карбида титана 4. Сверхмелкие поры в прессовке | 500–3·10 ⁴ nm 1.1·10 ³ nm 10–45 nm 10–70 nm 10–80 nm 10–100 nm |
| 10 | В.С. Вавилов, А.Е. Кив, О.Р. Ниязова | [112] | 1. Слой диффузанта на поверхности кристалла в эксперименте 2. Диффузионная зона в кристалле при его облучении с энергией 10 keV 3. То же, при энергии облучения 50 keV | 60 nm 300 nm 10 ³ nm |
| 11 | Я.Е. Бейгельзимер, В.Н. Варюхин, Б.М. Эфрос | [115] | Масштабные уровни пластической деформации твердых тел: 1. Микроскопический (атомы, вакансии, внедренные атомы, дислокации) 2. Мезоскопический (дисклинации, заторможенные полосы скольжения, поры, трещины) 3. Структурный – совпадающий с размером зерна в поликристалле (зерна, их границы, поры, трещины) 4. Макроскопический | (1–30) <i>a</i> , <i>a</i> – постоянная решетки 10 ³ –3·10 ³ nm 2·10 ⁴ –2·10 ⁵ nm > 2 mm |
| 12 | Г.Г. Спирын | [116] | Напыляемый резистивный элемент (тонкая проводящая пленка) | 10 nm |
| 13 | Р. Берман, Дж. Драбл, Г. Голдсмит, Г.Ф. Мучник, И.Б. Рубашов | [6,16, 25] | Критическая (по размерному эффекту теплопроводности) толщина пленки или волокна | 10 ² –10 ³ nm |
| 14 | И.Р. Венгеров | [117] | Кубические объемы с ребрами <i>l_i</i> , для которых относительные флуктуации температуры пренебрежимо малы ($\epsilon = \Delta T/T = 10^{-5}$) из материалов: 1. Стали (0.1% С) 2. Меди 3. Алюминия | <i>l</i> ₁ = 330 nm <i>l</i> ₂ = 340 nm <i>l</i> ₃ = 390 nm |

Из табл. 1, 2 заключаем: микро- и мезообъекты (структурные элементы) в таблицах частично совпадают, а их совокупность в целом – представительная (но, конечно, не исчерпывающая); в отношении тех или иных объектов к определенному масштабному уровню и в классификациях этих уровней (по их числу, названиям, характерным для них размерам объектов) имеются различия; в табл. 1 имеются три уровня – микро-, мезо- и макроуровни, а в

табл. 2 есть аналогичная классификация (в позиции 4 табл. 2) и другие (в позиции 2 – 6 уровней, в 11 – 4 уровня); по данным табл. 1, 2 характерные размеры объектов находятся в диапазонах: 10^{-3} – 10^2 nm (микроуровень); 10 – 10^4 nm (мезоуровень); свыше 10^4 nm (макроуровень).

Согласно принятой [113] классификации к наносистемам относятся имеющие характерные размеры от 1 до 10^3 nm, что означает принадлежность наносистем с размерами от 10 до 10^3 nm к мезосистемам. Представляется целесообразным далее принять трехуровневую классификацию, относя все объекты ФТТ (и соответствующие им системы) к трем масштабным уровням: микро-, мезо- и макроуровню.

К характеристикам систем, которыми моделируем объекты, относим:

- 1) масштабный уровень – микро-, мезо- и макросистемы;
- 2) уровень описания (моделирования) – микро-, мезо- и макромоделли;
- 3) форму системы – куб, сфера, цилиндр и т.п.;
- 4) размерность системы – число пространственных координат (в непрерывных моделях);
- 5) поведение параметров системы со временем – системы стационарные и нестационарные;
- 6) однородность – неоднородность системы (включая в последнюю и анизотропию свойств).

2.3. Размерные эффекты

В научной периодике часто упоминаются так называемые «размерные эффекты» – зависимость различных физических свойств от размеров системы (характерные в основном для систем малых размеров). Эти эффекты в области теплопроводности, как и их механизмы, известны давно [6,16,118]. Еще Казимиром была получена (в низкотемпературном диапазоне) формула $\lambda = BT^3r$ для теплопроводности образца с температурой T и радиусом r (B – константа, выражающаяся через упругие постоянные) [118]. Вне низкотемпературной области Херрингом была предсказана зависимость теплопроводности от размера образца при рассеивании фотонов, а Джебол и Хал экспериментально обнаружили зависимость $\lambda = A - Bd^{-1/2}$ (где A, B – константы, d – диаметр образца) [6]. Для тонких металлических пленок и проволок была получена (и подтверждена экспериментально) зависимость $\lambda = \lambda(d)$, близкая к $\lambda \sim \sqrt{d}$ [119].

Известно также большое число размерных эффектов, сопровождающих процессы диффузии в твердых телах [7,8,15,43]. Изучение диффузионной гомогенизации в тонких пленках показало [43], что эффективные коэффициенты диффузии D_{\perp} (по толщине пленки) и D_{\parallel} (для потока вдоль пленки) существенно превышают объемный коэффициент диффузии в соответствующем кристалле. В ряде других экспериментов показано, что диффузия в приповерхностных тонких слоях кристаллов, наоборот, замедляется [7]. Увеличение коэффициентов диффузии в нано-

структурном никеле по сравнению с крупнозернистым составило 4–5 порядков [15].

Известны размерные эффекты при мартенситных превращениях различных материалов [120], причем наблюдались они для образцов как наноразмерных (100–200 nm), так и более крупных (1–100 μm) [120].

Влияние размерного эффекта на результаты микромеханических испытаний было отмечено еще в первой половине прошлого века [37]. Особенную чувствительность к уменьшению размеров образцов, т.е. к возрастанию роли поверхностного слоя, обнаружили характеристики пластичности. Большое влияние масштабного фактора (так называют размерный эффект в прикладной механике [37,121,122] и в геофизике [123,124]) было обнаружено для неравновесных структур высокопрочных сталей: после закалки и отпуска рост относительного сужения растягиваемого образца при уменьшении его диаметра от 5 до 0.8 mm достигал 30–50% [37]. С уменьшением размеров образцов повышались их предел текучести и сопротивление разрушению. При исследованиях механизмов прочности твердых тел [20] обнаружилось возрастание прочности при уменьшении диаметра образца [125,126]. Для тонких приповерхностных слоев твердых тел были найдены меньшие (по сравнению с объемными) значения упругих констант, большие коэффициенты термического расширения, уменьшенные величины прочности [127].

Описаны и другие размерные эффекты: зависимость от размера частиц дисперсной системы ее термодинамического потенциала (флуктуационные возникновения и исчезновения малых частиц, уменьшение и увеличение их размеров) [128]; возрастание удельного электрического сопротивления (уменьшение электропроводности) в металлических монокристаллических пленках при уменьшении их толщины до $\delta < \delta_*$ ($\delta_* = 20$ nm для золота, $\delta_* > 20$ nm для других металлов) [49]; зависимость каталитической активности пленок окиси хрома от их толщины [129].

Практически все размерные эффекты объясняются структурными особенностями малых объектов: флуктуациями числа частиц и температуры в малых объемах (с наиболее характерным линейным масштабом $d \lesssim 10^{-6}$ cm = 10 nm) [14,25,26,49] и сильным влиянием на ход процессов дефектов, межзеренных границ и поверхностей [7,8,15,43,49,116,119,129]. Таким образом, имеем два критерия прогнозирования размерных эффектов: флуктуационный [117] и влияния границ $\chi = SL/V$ [129]. Здесь S , V – площадь поверхности (границы) и объем системы, L – длина экранирования (предельная «глубина» влияния границы на процессы в объеме). На наш взгляд, размерные эффекты не отражают некие «глубинные» свойства тел, а являются характерными для особого класса систем – малых (микро- и мезосистем). При математическом моделировании процессов в этих системах нельзя (в то время как для макросистем это часто делается) пренебрегать их нестационарностью и неоднородностью.

3. Процессы и модели

3.1. Уровни моделирования

Процессы деформирования (переноса импульса) и тепломассопереноса в твердых телах протекают одновременно на трех масштабных уровнях: микро-, мезо- и макроскопическом [5,9,10,13,18]. Выбор же уровня моделирования (описания) определяется конкретной задачей исследования. Построение системы моделей различных уровней, связанных между собой и в совокупности дающих более полное понимание физической реальности, – задача актуальная, но пока не решенная [10,13,18]. Попыткой ее решения является относительно новый, так называемый структурно-аналитический метод [10,12], остающийся, ввиду его математической сложности, малодоступным для экспериментаторов.

Между уровнями моделирования и масштабными уровнями нет однозначной связи: применение макромоделей (например, уравнения теплопроводности) к микросистемам некорректно, тогда как микромодель (уравнение Шредингера, в частности) может быть, в принципе, использована для описания процесса в макросистеме (образце). Другое дело, что часто это весьма сложно, а потому – нецелесообразно.

Как уже упоминалось, общепринятый (парадигмальный) подход к моделированию процессов переноса в мезосистемах отсутствует. В построении и исследовании моделей микро- и макроскопического уровней давно сложились и автономно развиваются различные (что отражается и в терминах) парадигмы. При построении моделей микроуровня говорят о «физической механике», «диффузии в твердых телах», «теплофизике конденсированного состояния» [2,5,7,13,40,44]. Соответствующие модели макроуровня строятся в рамках «механики сплошной среды» и «теории тепломассопереноса» [11,25–31]. Это обстоятельство будет учтено в дальнейшем в частях II–IV данного обзора.

3.2. Процессы переноса и их модели

Рассматриваемые в рамках ТФДТ процессы переноса импульса (деформирование), массы и тепла (как протекающие автономно, так и в сочетаниях) играют ключевую роль в большинстве технологических процессов. Данные процессы, как и экспериментально-лабораторные, как правило, нестационарны. Это требует использования математических моделей, содержащих время: нуль-мерных (на основе алгебраических или обыкновенных дифференциальных уравнений); одномерных (на основе уравнений в частных производных с одной пространственной переменной); многомерных (предыдущий случай при двух или трех пространственных переменных).

Кроме размерности (числа пространственных переменных), модель фиксируется (классифицируется) и другими признаками – уровнем модели (микро-, мезо-, макро-), видом процесса переноса (импульса, массы, тепла) и

др. Рассмотрим кратко виды процессов переноса и дадим общую характеристику соответствующих моделей.

Перенос импульса. На микроуровне изменение импульса в пространстве и времени описывается механическими моделями – классической и квантовой [1,3–5,18,19,22,47], на мезоуровне – моделями классической механики системы частиц и механики сплошных сред [9,13,14,17–20,47]. Модели макроуровня – модели механики сплошной среды [18,26,28,33–36]. Модели классической механики базируются на обыкновенных дифференциальных уравнениях с независимой переменной – временем (или системах таких уравнений). Квантово-механические модели используют специфический математический аппарат, математической структурой которого интересоваться не будем (эти модели не входят в парадигму ТФДТ). Модели механики сплошной среды разнообразны и соответствуют процессам деформирования (упругим, вязкоупругим, пластичности, текучести и т.д.) [33,37,38]. Базируются эти модели на уравнениях в частных производных (локальных), интегро-дифференциальных уравнениях (нелокальных) и их системах.

Перенос массы. Осуществляется в твердых телах диффузией (эффекты «канализования» частиц [130] не рассматриваем). Разные авторы насчитывают различное (порой большое) количество видов диффузии [2,7,8,14,32,41]. В [14], в частности, говорится о самодиффузии, диффузии объемной, поверхностной, граничной, дислокационной, химической, восходящей, реакционной, радиационно-стимулированной, термо- и электродиффузии. Все эти термины достаточно условны, поскольку в реальных условиях такие виды диффузии «в чистом виде» не встречаются, а перенос массы осуществляется за счет различных, одновременно действующих механизмов.

Математические модели диффузии микроуровня описывают элементарные диффузионные акты (скачки и смещения атомов и вакансий) и являются кинетическими моделями (рассматривается также и квантовая диффузия) [2,17,21,22,47]. Модели диффузии макроуровня используют относительно небольшое число базисных уравнений в частных производных параболического типа [7,8,32,39,41–43,131]. На мезоуровне, как и в случае переноса импульса, используют модели обоих типов и их комбинации.

Перенос тепла. На микроуровне моделируют процессы теплопроводности в кристаллах и аморфных телах, в металлах, диэлектриках и полупроводниках, в дефектных, неоднородных и композитных материалах [2,3,5,6,16,92,118]. Используются методы физической кинетики, позволяющие, с тем или иным приближением, получать формулы для коэффициентов теплопроводности λ ; особое внимание обычно уделяется выявлению зависимости $\lambda = \lambda(T)$ [6,16,21,22,25,118].

Модели теплопереноса макроуровня весьма многочисленны, как легко убедиться, обратившись к ранее указанным источникам, характеризующим различные прикладные «теплофизики». В общетеплофизическом плане достаточное представление об «ассортименте моделей» теплопереноса можно

составить на основе [11,25,28–31,117,132–137]. Модели мезоуровня, как и ранее, своей специфики не имеют и сводятся к двум указанным типам моделей и их комбинациям.

3.3. Классификация математических моделей

Если «вынести за скобки» вероятностные и квантовомеханические модели микроуровня, то большинство моделей мезо- и макроуровней базируется на краевых задачах математической физики. Желательно использовать достаточно простую, единую для всех процессов переноса (импульса, массы, тепла) и их комбинаций классификацию, которая, абстрагируясь от физических деталей процессов, характеризовала бы основные классы моделей (краевых задач) по чисто математическим признакам.

На основе работ Л.А. Коздобы [135–137] такая классификация (названная «список 7НЕ») была предложена в [57] и апробирована на массиве около 800 публикаций в [138]. Она охватывает практически все многообразие известных моделей переноса (за исключением – по принципиальным соображениям – тех, в которых используются стохастические и (или) интегральные уравнения). Классификация «7НЕ» использует 7 признаков-антагонистов, характеризующих математические модели (краевые задачи): 1) корректные – некорректные; 2) локальные – нелокальные; 3) ординарные – неординарные; 4) одномерные – неодномерные; 5) линейные – нелинейные; 6) однородные – неоднородные; 7) стационарные – нестационарные.

Кратко поясним смысл некоторых признаков. Некорректные (обратные) задачи лежат в основе многих методов постановки экспериментов и интерпретации их результатов [51,52,102,136]. Нелокальными называют задачи (уравнения), которые содержат интегральные операторы (в частности, типа свертки). Встречаются также редуцированные нелокальные уравнения, содержащие вместо интегральных операторов производные по времени или по координатам более высокого порядка, чем в соответствующих локальных уравнениях, и константы с размерностью времени или (и) длины соответственно [29–31,139,140]. Неординарные модели – основные в ТФДТ – содержат несколько искомых функций, т.е. описывают взаимодействующие поля различной природы.

1. Ч. Уэрт, Р. Томсон, Физика твердого тела, Мир, Москва (1966).
2. Дж. Маннинг, Кинетика диффузии атомов в кристаллах, Мир, Москва (1971).
3. Дж. Рейсленд, Физика фононов, Мир, Москва (1975).
4. Ю.И. Сиротин, П.М. Шаскольская, Основы кристаллофизики, Наука, Москва (1975).
5. Ч. Киттель, Введение в физику твердых тел, Наука, Москва (1978).
6. Р. Берман, Теплопроводность твердых тел, Мир, Москва (1979).
7. Дж.П. Старк, Диффузия в твердых телах, Энергия, Москва (1980).
8. Б.Я. Любов, Диффузионные процессы в неоднородных твердых телах, Наука, Москва (1981).

9. *К. Теодосиу*, Упругие модели дефектов в кристаллах, Мир, Москва (1985).
10. *В.А. Лихачев, А.Е. Волков, В.Е. Шудегов*, Континуальная теория дефектов, Изд-во ЛГУ, Ленинград (1986).
11. *Э.М. Карташов*, Аналитические методы в теории теплопроводности твердых тел, Высшая школа, Москва (1985).
12. *В.А. Лихачев, В.Г. Калинин*, Структурно-аналитическая теория прочности, Наука, Санкт-Петербург (1993).
13. *Я.Е. Бейгельзимер, В.Н. Варюхин, Б.М. Эфрос*, Физическая механика гидростатической обработки материалов, ДонФТИ НАНУ, Донецк (2000).
14. *Ю.М. Буравлев*, Атомно-эмиссионная спектрометрия металлов и сплавов, ДонГУ, Донецк (2000).
15. *Ю.Р. Колобов, Р.З. Валиев, Г.П. Грабовицкая и др.*, Зернограничная диффузия и свойства наноструктурных материалов, Наука, Новосибирск (2001).
16. *Дж. Драбл, Г. Голдсмит*, Теплопроводность полупроводников, Изд-во иностр. лит., Москва (1963).
17. *А.М. Косевич*, Физическая механика реальных кристаллов, Наукова думка, Киев (1981).
18. *В.М. Даниленко*, Модели реальных кристаллов, Наукова думка, Киев (1983).
19. *Дефекты в кристаллах и их моделирование на ЭВМ*, Ю.А. Осипьян (ред.), Наука, Ленинград (1980).
20. *Физика прочности и пластичности*, С.Н. Журков (ред.), Наука, Ленинград (1986).
21. *К.П. Гуров*, Основания кинетической теории, Наука, Москва (1966).
22. *Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский*, Физическая кинетика, Наука, Москва (1979).
23. *В.И. Архаров*, в кн.: Проблемы современной физики, Наука, Ленинград (1980), с. 357–382.
24. *В.И. Владимиров, В.Н. Иванов, Н.Д. Приемский*, в кн.: Физика прочности и пластичности, С.Н. Журков (ред.), Наука, Ленинград (1986), с. 69–80.
25. *Г.Ф. Мучник, И.Б. Рубашов*, Методы теории теплообмена, ч. 1, Высшая школа, Москва (1970).
26. *И. Дьярмати*, Неравновесная термодинамика. Теория поля и вариационные принципы, Мир, Москва (1974).
27. *К.П. Гуров*, Феноменологическая термодинамика необратимых процессов. Физические основы, Наука, Москва (1978).
28. *Дж.С. Слеттери*, Теория переноса импульса, энергии и массы в сплошных средах, Энергия, Москва (1978).
29. *П.М. Колесников*, Методы теории переноса в нелинейных средах, Наука и техника, Минск (1981).
30. *Н. Петров, Й. Бранков*, Современные проблемы термодинамики, Мир, Москва (1986).
31. *Н.И. Никитенко*, Теория тепломассопереноса, Наукова думка, Киев (1987).
32. *Л.Н. Лариков, В.И. Исайчев*, Диффузия в металлах и сплавах, Наукова думка, Киев (1987).
33. *Н.И. Безухов*, Основы теории упругости, пластичности и ползучести, Высшая школа, Москва (1968).
34. *А.Д. Коваленко*, Основы термоупругости, Наукова думка, Киев (1970).

35. Ю.М. Коляно, А.Н. Кулик, Температурные напряжения от объемных источников, Наукова думка, Киев (1983).
36. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, Теория упругости, Наука, Москва (1987).
37. В.М. Савицкий, Влияние температуры на механические свойства металлов и сплавов, Изд-во АН СССР, Москва (1957).
38. В.М. Розенберг, Основы жаропрочности металлических материалов, Металлургия, Москва (1973).
39. Н.А. Колобов, Н.М. Самохвалов, Диффузия и окисление полупроводников, Металлургия, Москва (1975).
40. Н.В. Березникова, А.И. Борзяк, Ю.Д. Лепешкин и др., Физико-механические и теплофизические свойства металлов, Наука, Москва (1976).
41. Б.С. Бокштейн, Диффузия в металлах, Металлургия, Москва (1978).
42. Т.Д. Джафаров, Дефекты и диффузия в эпитаксиальных структурах, Наука, Ленинград (1978).
43. Я.Е. Гегузин, Диффузионная зона, Наука, Москва (1979).
44. И.И. Новиков, в кн.: Теплофизика конденсированных сред, Наука, Москва (1985), с. 18–27.
45. С. Тайра, Р. Отани, Теория высокотемпературной прочности материалов, Металлургия, Москва (1986).
46. И.И. Новиков, Теория термической обработки металлов, Металлургия, Москва (1986).
47. И.М. Лифшиц, Избранные труды. Физика реальных кристаллов и неупорядоченных систем, Наука, Москва (1987).
48. В. Хермель, Т. Кайбак, В. Шатт и др., Процессы массопереноса при спекании, Наукова думка, Киев (1987).
49. В.Д. Дорфман, Синтез твердотельных структур, Металлургия, Москва (1986).
50. Ф.М. Гольцман, Физический эксперимент и статистические выводы, Изд-во ЛГУ, Ленинград (1982).
51. Некорректные задачи естествознания, А.Н. Тихонов, А.В. Гончарский (ред.), Изд-во МГУ, Москва (1987).
52. Т. Кун, Структура научных революций, Прогресс, Москва (1977).
53. Д.В. Скобельцын, в кн.: Проблемы современной физики, Наука, Ленинград (1980), с. 339–356.
54. Л.А. Растринин, Случайный поиск, Знание, Москва (1979).
55. Б.Я. Брусиловский, Теория систем и система теорий, Вища школа, Киев (1977).
56. Е.Н. Елисеев, Н.В. Белов, Г.Б. Бокий и др., Методология исследования развития сложных систем (естественнонаучный подход), Наука, Ленинград (1979).
57. И.Р. Венгеров, Препринт ДонФТИ-2004-3, ДонФТИ НАНУ, Донецк (2004).
58. Г. Крон, Исследование сложных систем по частям – диакоптика, Наука, Москва (1972).
59. М.А. Лаврентьев, Б.В. Шабат, Проблемы гидродинамики и их математические модели, Наука, Москва (1973).
60. Н.А. Картвелишвили, Ю.И. Галактионов, Идеализация сложных динамических систем, Наука, Москва (1976).
61. Г.А. Фаркасов, А.Г. Фридман, В.М. Каринский, Плазменная плавка, Металлургия, Москва (1968).

62. *В.С. Немков, Б.С. Полеводов*, Математическое моделирование на ЭВМ устройств высокочастотного нагрева, Машиностроение, Ленинград (1980).
63. *В.Г. Лисиенко, В.И. Лобанов, Б.И. Китаев*, Теплофизика металлургических процессов, Металлургия, Москва (1982).
64. *Ю.И. Розенгарт, Б.Б. Потапов, В.М. Ольшанский, А.В. Бородулин*, Теплообмен и тепловые режимы в промышленных печах, Вища школа, Киев–Донецк (1986).
65. *В.П. Цымбал*, Математическое моделирование металлургических процессов, Металлургия, Москва (1986).
66. *Г.Ф. Головин, Н.В. Зимин*, Технология термической обработки металлов с применением индукционного нагрева, Машиностроение, Ленинград (1990).
67. *И.В. Крагельский, М.М. Михин*, Узлы трения машин. Справочник, Машиностроение, Москва (1984).
68. *Л.М. Анищенко, С.Ю. Лавринюк*, Математические основы проектирования высокотемпературных технологических процессов, Машиностроение, Москва (1986).
69. *Модифицирование и легирование поверхности лазерными, ионными и электронными пучками*, Машиностроение, Москва (1987).
70. *К.А. Кочергин*, Контактная сварка, Машиностроение, Ленинград (1987).
71. *В.К. Лебедев, И.А. Черненко, Р. Михальски и др.*, Сварка трением. Справочник, Машиностроение, Ленинград (1987).
72. *В.С. Мешков, В.Б. Демидович*, Теория и расчет устройства индукционного нагрева, Энергоиздат, Ленинград (1988).
73. *А.В. Болотов, Г.А. Шепель*, Электротехнологические установки, Высшая школа, Москва (1988).
74. *Л.Ш. Шустер*, Адгезионное взаимодействие режущего инструмента с обрабатываемым материалом, Машиностроение, Москва (1988).
75. *В.А. Пейсахович*, Оборудование для высокочастотной сварки металлов, Машиностроение, Ленинград (1988).
76. *Г.Г. Немзер*, Теплотехнология кузнечно-прессового производства, Машиностроение, Ленинград (1988).
77. *Промышленное применение лазеров*, Г. Кебнер (ред.), Машиностроение, Москва (1988).
78. *А.Г. Артамонов, В.М. Володин, В.Г. Авдеев*, Математическое моделирование и оптимизация плазмохимических процессов, Химия, Москва (1989).
79. *И.И. Перелетов, Л.А. Бровкин, Ю.И. Розенгарт и др.*, Высокотемпературные теплотехнологические процессы и установки, Энергоиздат, Москва (1989).
80. *А.Г. Кобелев, И.Н. Потапов, Е.В. Кузнецов*, Технология слоистых металлов, Металлургия, Москва (1991).
81. *А.М. Кручинин, К.М. Махмудов, Ю.Н. Миронов и др.*, Автоматическое управление электротермическими установками, Энергоиздат, Москва (1990).
82. *Е.Н. Маквецов, А.М. Тартаковский*, Дискретные модели приборов, Машиностроение, Москва (1982).
83. *А.И. Исакеев, И.Г. Кисилев, В.В. Филатов*, Эффективные способы охлаждения силовых полупроводниковых приборов, Энергоиздат, Ленинград (1982).
84. *В.А. Бачин*, Диффузионная сварка стекла и керамики с металлами, Машиностроение, Москва (1986).

85. *В.Н. Черняев*, Физико-химические процессы в технологии РЭА, Высшая школа, Москва (1987).
86. *В.А. Коваль, Д.В. Федосюк, В.В. Маслов, В.Ф. Тарновский*, Автоматизация теплового проектирования микроэлектронных устройств средствами САПР, Вища школа, Львов (1988).
87. *В.Я. Кремлев*, Физико-топологическое моделирование структур элементов БИС, Высшая школа, Москва (1990).
88. *Л.П. Филиппов*, Измерение тепловых свойств твердых и жидких металлов при высоких температурах, Изд-во МГУ, Москва (1968).
89. *В.А. Михайлов, Д.Д. Богданова*, Электроперенос в жидких металлах. Теория и приложения, Наука, Новосибирск (1978).
90. *В.А. Кривандин, Б.А. Арутюнов, Б.С. Мастрюков и др.*, Металлургическая теплотехника, т. 1, Metallurgia, Москва (1986).
91. *А.В. Самойлов*, Тепловые расчеты червячных и валковых машин, Машиностроение, Москва (1978).
92. *Н.С. Охотин, Р.П. Боровикова, Т.В. Нечаева, А.С. Пушкарский*, Теплопроводность твердых тел. Энергоатомиздат, Москва (1984).
93. *П.П. Кузьменко*, Электроперенос, термоперенос и диффузия в металлах, Вища школа, Киев (1983).
94. *А.Н. Резников, Л.А. Резников*, Тепловые процессы в технологических системах, Машиностроение, Москва (1990).
95. *А.В. Якимов, П.Т. Слободяник, А.В. Усов*, Теплофизика механической обработки, Лыбидь, Киев–Одесса (1991).
96. *П.Д. Давидов*, Анализ и расчет тепловых режимов полупроводниковых приборов, Энергия, Москва (1967).
97. *П.В. Пошехонов, Э.И. Соколовский*, Тепловой расчет электронных приборов, Высшая школа, Москва (1977).
98. *А.М. Архаров, И.В. Марфенина, Е.И. Микулин*, Теория и расчет криогенных систем, Машиностроение, Москва (1978).
99. *Д.И. Закс*, Параметры теплового режима полупроводниковых микросхем, Радио и связь, Москва (1984).
100. *Г.Н. Дульнев*, Тепло- и массообмен в радиоэлектронной аппаратуре, Высшая школа, Москва (1984).
101. *Я.С. Подстригач, Ю.М. Коляно, М.М. Семерак*, Температурные поля и напряжения в элементах электровакуумных приборов, Наукова думка, Киев (1981).
102. *В.К. Громов*, Введение в эллипсомерию, Изд-во ЛГУ, Ленинград (1986).
103. *Наносистеми*, наноматеріали, нанотехнології, Академперіодика, Київ (2004), т. 2, вип. 2, с. 339–750.
104. *Наносистеми*, наноматеріали, нанотехнології, Академперіодика, Київ (2004), т. 2, вип. 3, с. 751–1101.
105. *В.А. Поздняков, А.М. Глезер*, ФТТ **47**, 793 (2005).
106. *Б.И. Смирнов, В.В. Шлейзман, В.И. Николаев*, ФТТ **47**, 816 (2005).
107. *Ю.И. Головин, С.Н. Дуб, В.И. Иволгин, В.В. Коренков, А.И. Тюрин*, ФТТ **47**, 961 (2005).
108. *G. Chen, D. Borca-Tasuica, R.G. Yang*, Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology, H.S. Nalwa (ed.), American Scientific Publishers (2004), vol. 7, p. 229–259.

109. *А.П. Шпак, Л.А. Булавин, Ю.А. Куницький. та ін*, в кн.: Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии, Академперіодика, Київ (2004), т. 2, вип. 2, с. 563–569.
110. *А.П. Шпак, В.Л. Карбовський, С.С. Смоляк, С.Г. Кобзенко*, в кн.: Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии, Академперіодика, Київ (2004), т. 2, вип. 3, с. 927–933.
111. *О.В. Клявин, Б.А. Мамырин, Л.В. Хабарин, Ю.М. Чернов*, ФТТ **47**, 837 (2005).
112. *В.С. Вавилов, А.Е. Кив, О.Р. Ниязова*, Механизмы образования и миграции дефектов в полупроводниках, Наука, Москва (1981).
113. *Перспективные технологии (наноструктуры, полупроводники, фуллерены)*, Информационный бюллетень РАН **11**, вып. 22, 6 (2004).
114. *Н.А. Колобов*, в кн.: Математическое моделирование процессов теплопереноса, Маслов В.П., Данилов В.Г., Волосов К.А. (ред.), Наука, Москва (1987), с. 280–335.
115. *Я.Е. Бейгельзимер, В.Н. Варюхин, Б.М. Эфрос*, ФТВД **9**, № 3, 6 (1999).
116. *Г.Г. Спириин*, ИФЖ **38**, 403 (1980).
117. *И.Р. Венгеров*, Хроноартефакты термодинамики, Норд-Пресс, Донецк (2005).
118. *Дж. Робертс*, Тепло и термодинамика, Гостехтеоретиздат, Москва–Ленинград (1950).
119. *В.М. Абросимов, Б.Н. Егоров, Н.С. Лидоренко, И.Б. Рубашов*, ФТТ **11**, 530 (1969).
120. *В.А. Лободюк*, ФММ **99**, № 2, 29 (2005).
121. *К.В. Руппенейт, Ю.М. Либерман*, Введение в механику горных пород, Госгортехиздат, Москва (1960).
122. *А.И. Берон, Е.С. Ватолин, Е.И. Койфман и др.*, Свойства горных пород при разных видах и режимах нагружения, Недра, Москва (1984).
123. *Ю.П. Доронин*, Взаимодействие атмосферы и океана, Гидрометеиздат, Ленинград (1981).
124. *Р.В. Озмидов*, Диффузия примесей в океане, Гидрометеиздат, Ленинград (1986).
125. *С.Н. Журков*, в кн.: Физика прочности и пластичности, С.Н. Журков (ред.), Наука, Ленинград (1986), с. 5–11.
126. *В.А. Петров*, в кн.: Физика прочности и пластичности, С.Н. Журков (ред.), Наука, Ленинград (1986), с. 11–17.
127. *В.Е. Кореуков*, в кн.: Физика прочности и пластичности, С.Н. Журков (ред.), Наука, Ленинград (1986), с. 28–33.
128. *М. Фольмер*, Кинетика образования новой фазы, Наука, Москва (1986).
129. *Ф.Ф. Волькенштейн*, в кн.: Проблемы современной физики, Наука, Ленинград (1980), с. 222–233.
130. *Е.-Х. Оцуми*, Взаимодействие заряженных частиц с твердыми телами, Мир, Москва (1985).
131. *А.И. Райченко*, Математическая теория диффузии в приложениях, Наукова думка, Киев (1981).
132. *А.В. Лыков*, Теория теплопроводности, Высшая школа, Москва (1967).
133. *А.В. Лыков, Ю.Л. Михайлов*, Теория тепло- и массопереноса, Госэнергоиздат, Москва–Ленинград (1963).
134. *Г. Карслоу, Д. Егер*, Теплопроводность твердых тел, Наука, Москва (1964).

135. Л.А. Коздоба, Методы решения нелинейных задач теплопроводности, Наука, Москва (1975).
136. Л.А. Коздоба, П.Г. Круковский, Методы решения обратных задач теплопереноса, Наукова думка, Киев (1982).
137. Л.А. Коздоба, Вычислительная теплофизика, Наукова думка, Киев (1992).
138. И.Р. Венгеров, Препринт ДонФТИ-2005-6, ДонФТИ НАНУ, Донецк (2005).
139. Р. Кристенсен, Введение в теорию вязкоупругости, Мир, Москва (1974).
140. И.А. Кунин, Теория упругих сред с микроструктурой, Наука, Москва (1975).

I.R. Vengerov

THERMAL PHYSICS OF SOLIDS

(Review)

I. PARADIGM STRUCTURE

The paper presents a review on the problem of mathematical simulation of heat-mass transfer processes in deformable solids. In the first part of the review we consider the paradigm structure, characterize its components – objects, processes and models of the micro-, meso- and macrolevel description.