

М. Петрик. Математичне моделювання концентраційних розподілів багат шарових наноплівки оксидної структури / М. Петрик, М. Василюк, Н. Бабій // Вісник ТНТУ. — 2013. — Том 69. — № 1. — С.231-243. — (математичне моделювання. математика. фізика).

УДК 519.6

**М. Петрик, канд. техн. наук;
М. Василюк, канд. техн. наук; Н. Бабій**

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ КОНЦЕНТРАЦІЙНИХ РОЗПОДІЛІВ БАГАТОШАРОВИХ НАНОПЛІВОК ОКСИДНОЇ СТРУКТУРИ

Резюме. Побудовано математичну модель дифузійного перенесення в неоднорідних багат шарових середовищах, що описує процес формування мультишарів тонких оксидних наноплівок. Отримано просторово-розподілені концентраційні розподіли структурних складових компонентів наноплівок для різних технологічних зрізів та часових тривалостей формування технологічного мультишару наноплівки.

Ключові слова: перенесення, математична модель, оксидні наноплівки, мультишари, концентраційні розподіли, інтегральне перетворення Фур'є.

M. Petryk, P. Vasylyuk, N. Babi

MATHEMATICAL MODELING OF CONCENTRATION DISTRIBUTIONS IN MULTILAYER NANO OXIDE FILMS

Summary. Development of modern technologies that integrate a miniaturized physical systems has stimulated a large number of papers on the study of the kinetics of mass transfer processes in multilayer nanofilms that are used in the resource-saving technologies. Alloys of iron-chromium systems are used as a construction material in nuclear engineering while manufacturing mineral fibers. Oxides, multi-layer in particular, are widely used in semiconductor engineering. Chemical composition of oxides is determined by the components such as Cr, Al, Si, Rare-earth metals. If Al content is increased to 3 %, the heat resistance of the alloy dramatically increases, since the formation of the external aluminum oxide prevents the penetration of oxygen into the inner layers. Determination of diffusion characteristics allows to correct the chemical composition of alloys and predict operating life.

The mathematical model of diffusion transference in heterogeneous environments that describes the process of forming thin oxide nano films multilayers used as thermo- and aggressive-protective coverings of the technological equipment operating units in highly corrosive environments have been constructed.

Spatially distributed concentration distributions of nanofilm structural components (aluminium, silicon) for various technological shears of oxide nanofilm and time durations of forming the technological nanofilm multilayer have been obtained in the result of modeling.

The results can be used to encrease the efficiency of experimental researches of transference in multicomponental polycompositions and in researching of new nanomaterials properties.

Key words: mass transfer, mathematical modeling, oxides nano films, concentration distributions, Fourier integral transformation.

Постановка проблеми. Бурхливий розвиток сучасних технологій, які інтегрують в собі мініатюризовані фізичні системи, стимулював велику кількість робіт із вивчення кінетики процесів масопереносу в багат шарових наноплівках, що застосовуються в ресурсозберігаючих технологіях. Сплави системи залізо-хром використовують як конструкційний матеріал в атомній енергетиці при виробництві мінеральних волокон. Оксиди, у тому числі й багат шарові, широко застосовуються в

напівпровідниковій техніці. Хімічний склад оксидів визначається такими компонентами, як Cr, Al, Si, PЗМ. Якщо вміст Al підвищений до 3 %, то при цьому різко зростає жаростійкість сплаву, оскільки утворення зовнішніх оксидів алюмінію перешкоджає проникненню кисню у внутрішні шари. Визначення дифузійних характеристик дозволяє скоригувати хімічний склад сплавів і прогнозувати ресурс їх роботи.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. У працях Василюка П.М., Гаврилюка В.П., Петрика М.Р., Шаблія О.М. експериментально й теоретично вивчалися дифузійні ефекти в багатошарових тонких оксидних плівках $Me-Al_2O_3-FeCr_2O_4$ та $Me-FeCr_2O_4-Al_2O_3$. Вони запропоновані для використання як ефективні термо- та корозійностійкі нанопокриття робочих вузлів обладнання, що працюють у високотемпературних та агресивних середовищах (рідке скло, виготовлення оптоволокна, базальтоволокна тощо), забезпечуючи економію матеріалів [3 – 5]. Завдання вивчення дифузії в багатошарових оксидних плівках вимагають розроблення нових методів моделювання й математичних моделей для опису явищ, які враховують наявність переходів (інтерфейсів) між суміжними шарами. Ефективними методами, які найповніше враховують проаналізовані вище особливості, є методи інтегральних перетворень Фур'є, Лапласа, Фур'є-Бесселя, Вебера, Ганкеля, Конторовича-Лебедева, які знаходять своє використання для розв'язування різних типів крайових задач математичної фізики однорідних структур, у тому числі в задачах дифузії для різних середовищ та математичного моделювання на ПК [7].

Метою роботи є створення математичної моделі процесів дифузійного перенесення в багатошарових наноплівках оксидної структури для отримання концентраційних розподілів дифундованих компонент (кремнію та алюмінію) на кожному з шарів.

Фізична задача і математична модель процесу дифузії в багатошарових плівках. Розглядається середовище, яке складається з n шарів. Схематизація такого середовища наведена на рис. 1.

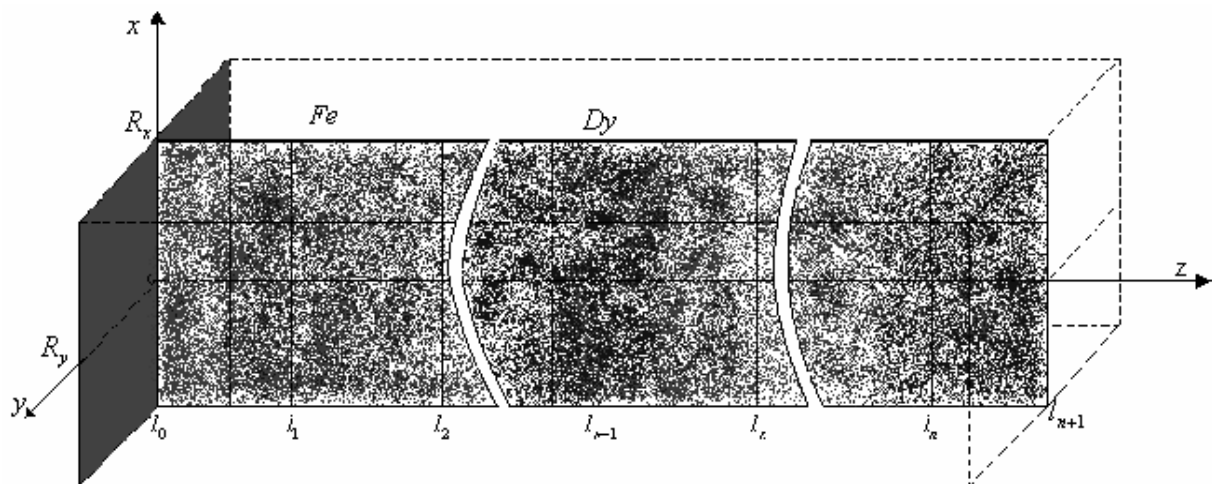


Рисунок 1. Схематичний вигляд плоского багатошарового середовища

Figure 1. Schematic appearance of the multilayer structure

Схематичний вигляд зразка за технологією виробництва базальтового волокна, отриманого вертикальним роздувом повітря (ВРВ), зображено на рис. 2)

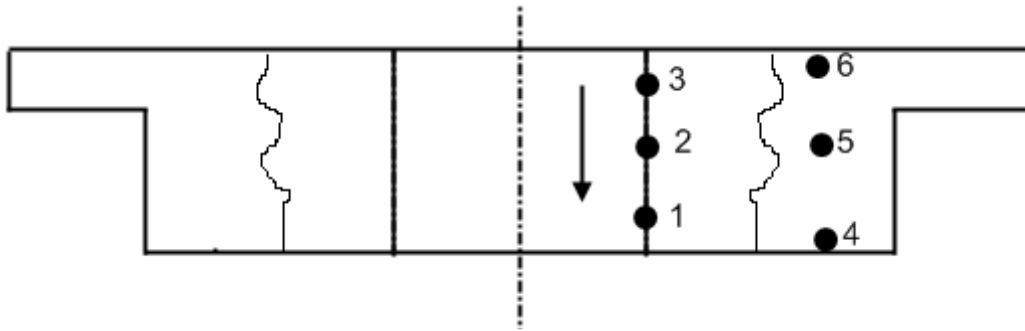


Рисунок 2. Схематичний вигляд зразка

Figure 2. Schematic appearance of the sample

Експериментальні зрізи (заміри) щодо кількісного складу алюмінію та кремнію вивчалися в точках: 1 – межа сплав-повітря-розплав; 2,5 – об'єм сплаву; 4 – межа сплав-повітря; 6 – межа сплав-розплав. Зразок експлуатувався майже 30 діб. Точки для зрізів вибирали з урахуванням ступеня контакту з агресивним робочим середовищем (розплав скла) поверхні, покритої нановлівкою даної оксидної структури.

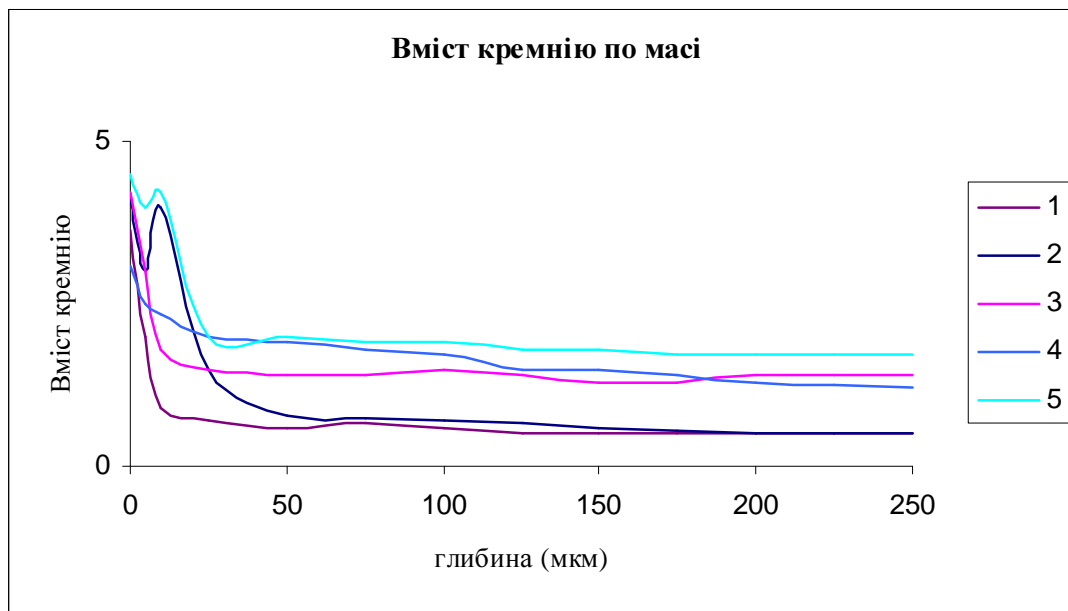


Рисунок 3. Експериментальні концентраційні розподіли для кремнію

Figure 3. Experimental concentration distributions for Si

Точки Т.1 – Т.3 є точками безпосереднього контакту з агресивним середовищем, ранжовані в порядку зменшення ступеня контакту з агресивним середовищем, використані як вхідні параметри для математичного моделювання процесу дифузії.

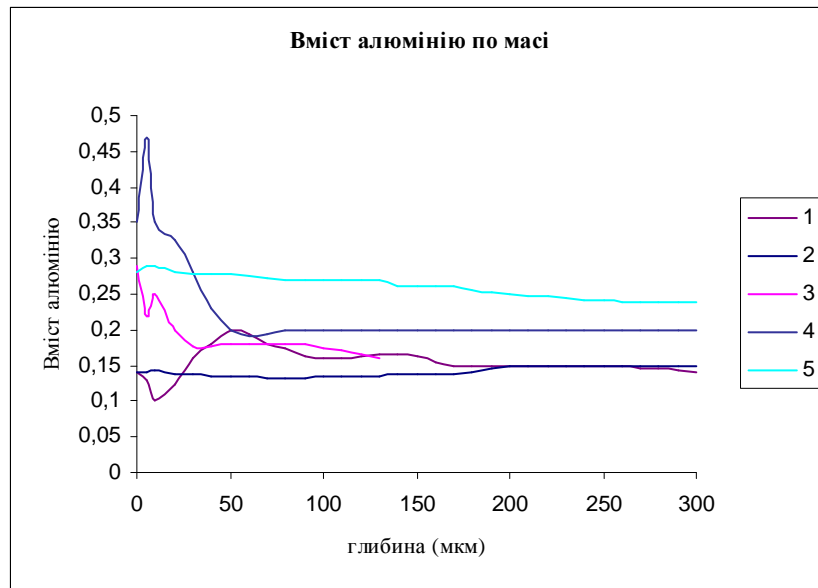


Рисунок 4. Експериментальні концентраційні розподіли для алюмінію
Figure 4. Experimental concentration distributions for Al

Припустивши, що процес дифузії атомів складових компонентів оксидних плівок (алюміній, кремній) – головна причина змішування системи, то концентраційні профілі для такої багатошарової системи можна отримати з рівнянь Фіка в комбінації з крайовими умовами зовнішніх шарів і умовами контакту між послідовними шарами.

Запропоновано математичну модель процесу перенесення шляхом дифузії в плоскому багатошаровому середовищі. Значення місцевої миттєвої концентрації $C_k(t, x, z)$ визначається при $t \rightarrow \infty$ як розв’язок наступної системи диференціальних рівнянь другого порядку

$$\frac{\partial}{\partial t} C_k(t, x, z) + \gamma_k^2 C_k = D_0 \frac{\partial^2 C_k}{\partial x^2} + D_{z_k} \frac{\partial^2 C_k}{\partial z^2} \quad (1)$$

$$\text{в області } I_n = \left\{ t > 0, x \in (0, R), z : z \in \bigcup_{k=1}^{n+1} (l_{k-1}, l_k); l_0 \geq 0; l_{n+1} = \infty \right\},$$

де D_k – коефіцієнти дифузії елемента; а γ_k^2 – коефіцієнт розсіювання маси.

Відповідні початкові умови мають вигляд

$$C_k(t, x, z)|_{t=0} = C_{0k}(x, z) \equiv C_{0k}(z), \quad k = \overline{1, n}. \quad (2)$$

Крайові умови та інтерфейсні умови між суміжними шарами вздовж осі z

$$\left[\alpha_{11}^0 \frac{d}{dz} + \beta_{11}^0 \right] C_1(t, x, z)|_{z=l_0} = C_{l_0}(t, x); \quad \frac{\partial C_{n+1}}{\partial z} \Big|_{z=\infty} = 0$$

$$\left[\left[\alpha_{j1}^k \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j1}^k \right] C_k - \left[\alpha_{j2}^k \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j2}^k \right] C_{k+1} \right]_{z=l_k} = 0, \quad j = \overline{1, 2}; k = \overline{1, n}. \quad (3)$$

Крайові умови по змінній x

$$\frac{\partial C_k}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0, \quad C_k \Big|_{x=R} = C_{1k}(t, z). \quad (4)$$

Тут використані позначення

$\alpha_{ij}^k, \beta_{ij}^k; k = \overline{0, n}; i, j = \overline{1, 2}$ – коефіцієнти, що визначають крайові умови й умови контакту.

У нашому випадку $\alpha_{11}^0 = 0, \beta_{11}^0 = 1; \beta_{11}^k = \beta_{12}^k = 1; \beta_{21}^k = \beta_{22}^k = 0; \alpha_{11}^k = \alpha_{12}^k = 0; \alpha_{21}^k = \alpha_{22}^k = 1; (k = \overline{1, n});$

$C_k, k = \overline{1, n+1}$ – концентрації в k^{my} шарі багат шарового середовища вздовж осі z ; x, y, z – просторові координати (рис. 1); t – час;

γ_k^2 – коефіцієнт розсіювання маси (в першому наближенні $\gamma_k^2 = 0; k = \overline{1, n+1}$);

$D_k, k = \overline{1, n+1}$ – коефіцієнт дифузії в напрямку осі z ; D_0 – коефіцієнт дифузії в напрямку осі x ;

$\Delta l_k = l_k - l_{k-1}; k = \overline{1, n+1}$ – товщина k -го шару;

$l = l_{n+1} - l_0$ – товщина середовища;

R – півширина середовища.

Точний аналітичний розв'язок задачі, описаної рівняннями (1) – (4), можна знайти шляхом застосування інтегральних перетворень Фур'є. Такий розв'язок дозволить визначити профілі коефіцієнтів дифузії для алюмінію та кремнію з експериментальних даних.

Інтегральне перетворення Фур'є визначається такими операторами [7]:

а) інтегральне перетворення косинус - Фур'є по змінній x :

- інтегральний оператор прямої дії

$$F_c [C_k(t, x, z)] = \int_0^R C_k(t, x, z) \cdot \vartheta(x, \eta_m) dx = \int_0^R C_k(t, x, z) \cdot \cos \eta_m x dx \equiv C_{km}(t, z); \quad (5)$$

- інтегральний оператор зворотної дії

$$F_c^{-1} [C_{km}(t, z)] = \sum_{m=0}^{\infty} C_{km}(t, z) \frac{\vartheta(x, \eta_m)}{\|\vartheta(x, \eta_m)\|^2} = \frac{2}{R} \sum_{m=0}^{\infty} C_{km}(t, z) \cdot \cos \eta_m x \equiv C_k(t, x, z); \quad (6)$$

- основна тотожність інтегрального перетворення Фур'є для диференціального оператора Лапласа

$$F_c \left[\frac{\partial C_k}{\partial x^2} \right] = \int_0^R \frac{\partial^2}{\partial x^2} C_k \cdot \vartheta(x, \eta_m) dx = -\eta_m^2 C_{km}(t, z) + (-1)^m \eta_m \cdot C_{1k}(t, z), \quad (7)$$

де $\vartheta(x, \eta_m) = \cos \eta_m x, \eta_m = \frac{2m+1}{2R} \pi, m = \overline{0, \infty}$ – спектральна функція і

спектральні числа інтегрального перетворення;

б) n -складове інтегральне перетворення Фур'є по змінній z :

- інтегральний оператор прямої дії

$$F_{+,n} [C_k(t, z)] = \int_{l_{k-1}}^{l_k} C_k(t, z) V_k(z, \beta) \sigma_k dz \equiv \tilde{C}(t); \quad (8)$$

- інтегральний оператор зворотної дії

$$F_{+,n}^{-1} [\tilde{C}(t, \lambda)] = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \tilde{C}(t, \lambda) V_k(z, \lambda) \Omega_2(\lambda) d\lambda \equiv C_k(t) \quad k = 1, n; \quad (9)$$

- основна тотожність інтегрального перетворення Фур'є для диференціального оператора Лапласа

$$F_{+,n} \left[\sum_{k=1}^n \frac{\partial^2}{\partial z^2} C_k(t, z) \Theta(z - l_{k-1}) \Theta(l_k - z) \right] = -\lambda^2 \cdot \tilde{C}(t, \lambda) - \sigma_1 D_{z_1} [\alpha_{11}^0]^{-1} \cdot V_1(l_0, \lambda) \cdot C_{l_0}(t) - \sum_{k=1}^{n+1} \chi_k^2 \int_{l_{k-1}}^{l_k} C_k(t, z) V_k(z, \lambda) \sigma_k dz.$$

У цих рівностях використовуються такі позначення: $V_k(z, \lambda)$ ($k = \overline{1, n+1}$) – складові власної функції інтегрального перетворення Фур'є:

$$V_k(z, \lambda) = \prod_{k_1=1}^n C_{21, k_1} b_{k_1+1} (\omega_{k-1, 2}(\lambda) \cos b_k z - \omega_{k-1, 1}(\lambda) \sin b_k z);$$

$$V_{n+1}(z, \lambda) = \omega_{n2}(\lambda) \cos b_{n+1} z - \omega_{n1} \sin b_{n+1} z;$$

$$\sigma_k = \prod_{j=k}^n \frac{1}{D_{z_k}} \frac{C_{11, j}}{C_{21, j}}; \quad \sigma_n = \frac{1}{D_{z_n}} \frac{C_{11, n}}{C_{21, n}}; \quad \sigma_{n+1} = \frac{1}{D_{z_{n+1}}};$$

$$\Omega_n(\lambda) = \frac{\lambda}{b_{n+1}} [\omega_{n2}(\lambda)^2 + \omega_{n1}(\lambda)^2]^{-1}; \quad b_k^2 = \frac{\lambda^2 + \chi_k^2}{D_{z_k}}; \quad \chi_k^2 = \gamma_1^2 - \gamma_k^2, \quad k = \overline{1, n+1}.$$

$c_{j1, k} = \alpha_{2j}^k \beta_{1j}^k - \alpha_{1j}^k \beta_{2j}^k$; $m, j = 1, 2$; $k = \overline{1, n+1}$; $\alpha_{mj}^k, \beta_{mj}^k$ – експериментальні константи, які визначають умови переносу на поверхнях масообміну $l_k, k=0, n$ (крайова умови й умови контакту):

$$\omega_{01}(\beta) = -v_{11}^{01}(b, l_0); \quad \omega_{02}(\beta) = -v_{11}^{02}(b, l_0);$$

$$\omega_{jm}(\beta) = \omega_{j-1, 2}(\beta) \Psi_{1m}^j(b_j l_j; b_{j+1} l_j) - \omega_{j-1, 1}(\beta) \Psi_{2m}^j(b_j l_j; b_{j+1} l_j);$$

$$\Psi_{jm}^k(b_k, l_k, b_{k+1} l_k) = v_{11}^{k_j}(b_k l_k) v_{22}^{k_m}(b_{k+1} l_k) - v_{21}^{k_j}(b_k l_k) v_{12}^{k_m}(b_{k+1} l_k);$$

$$v_{jm}^{k1}(b_s l_k) = \alpha_{jm}^k q_s sh \ q_s l_k + \beta_{jm}^k ch \ q_s l_k; \quad v_{jm}^{k2}(b_s l_k) = \alpha_{jm}^k q_s ch \ q_s l_k + \beta_{jm}^k sh q_s l_k$$

$s \in \{k, k+1\} \quad j, m = 1, 2 \quad k = 1, n.$

Як результат застосування інтегральних операторів (8) – (9) до задачі (1) – (3) отримає таку задачу Коші:

$$\frac{d\tilde{C}_m(t, \eta_m, \lambda)}{dt} = -(\chi_1^2 + D_0 \eta_m^2 + \lambda^2) \tilde{C}_m(t, \eta_m, \lambda) - F_m(t, \eta_m) \quad (10)$$

$$\tilde{C}(t, \eta_m, \lambda)|_{t=0} = \tilde{C}_{0m}(\lambda). \quad (11)$$

Розв'язком задачі Коші, описаної рівняннями (10) – (11), є функції [75]

$$\tilde{C}_m(t, \eta_m, \lambda) = e^{-(\chi_1^2 + D_0 \eta_m^2 + \lambda^2)t} \cdot \tilde{C}_{0m}(\eta_m, \lambda) + \int_0^t e^{-(\chi_1^2 + D_0 \eta_m^2 + \lambda^2)(t-\tau)} \cdot F_m(\tau) d\tau, \quad (12)$$

де $F_m(t) = D_0 (-1)^m \eta_m \tilde{C}_1(t, \lambda) + \sigma_1 D_{z_1} [\alpha_{11}^0]^{-1} \cdot V_1(l_0, \lambda) \cdot C_{l_0m}(t).$

Повертаючись до оригіналів, отримаємо

$$W_{l_0,k}^m(t, z) = -\frac{D_{z_1} \cdot \sigma_1}{\alpha_{11}^0} \cdot \frac{2}{\pi} \int_0^\infty e^{-\lambda^2 t} \cdot V_k(z, \lambda) V_1(l_0, \lambda) \Omega_n(\lambda) d\lambda, \quad (13)$$

$$\varepsilon_{k,k_1}^m(t; z, \xi) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty e^{-\lambda^2 t} \cdot V_k(z, \lambda) \cdot V_{k_1}(\xi, \lambda) \Omega_n(\lambda) d\lambda, \quad (14)$$

$$C_{mk}(t, \eta_m, z) = \int_0^t e^{-(\lambda_1^2 + D_0 \eta_m^2)(t-\tau)} \cdot W_{l_0,k}^m(t-\tau, z) \cdot C_{l_0m}(\tau, \eta_m) d\tau + \quad (15)$$

$$+ \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_0^t \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} H_{k,k_1}^m(t-\tau; z, \xi) \cdot \left[C_{0k}(\tau, \xi) \cdot \delta_+(\tau) - D_0 (-1)^m \cdot \eta_m C_{1k_1}(\tau, \xi) \right] \sigma_{k_1} d\xi d\tau.$$

Визначимо основний розв'язок задачі (1) – (4):

- функція Гріна (функція впливу крайової умови для поверхні $z=l_0$) [7]

$$W_{l_0,k}(t, x; z, \xi) = \frac{2}{R} \sum_{m=0}^\infty W_{l_0,k}^m(t-\tau, z) (-1)^m \frac{\cos \eta_m \xi}{\eta_m};$$

- функція Гріна (функція впливу крайової умови для поверхні $x=R$) [7]

$$W_{R,k_1}(t; x, \varsigma; z, \xi) = \frac{2}{R} \sum_{m=0}^\infty e^{-D_0 \eta_m^2 t} D_0 (-1)^{m+1} \eta_m \varepsilon_{k,k_1}^m(t; z, \xi) (-1)^m \cdot \cos \eta_m x; \quad (16)$$

- фундаментальна функція (функція Коші – функція впливу початкових умов)

[7]

$$H_{k,k_1}(t; x, \varsigma; z, \xi) = \frac{2}{R} \sum_{m=0}^\infty \varepsilon_{k,k_1}^m(t, z, \xi) \cdot \cos \eta_m \xi \cdot \cos \eta_m x. \quad (17)$$

У результаті точний аналітичний розв'язок крайової задачі (1) – (4), яка описує процес дифузії для багатосарових середовищ, має такий вигляд:

$$C_k(t, x, z) = \int_0^t \int_0^R W_{l_0,k}(t-\tau; x, \varsigma; z) \cdot C_{l_0}(\tau, \varsigma) d\varsigma d\tau + \quad (18)$$

$$+ \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_0^t \int_0^r \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} H_{k,k_1}(t-\tau; x, \varsigma; z, \xi) \cdot C_{0k}(\varsigma, \xi) \cdot \delta_+(\tau) \sigma_{k_1} d\varsigma d\xi d\tau +$$

$$+ \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_0^t \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} W_{R,k_1}(t-\tau; x; z, \xi) \cdot C_{1k_1}(\tau, \xi) \sigma_{k_1} d\xi d\tau.$$

Результати числового моделювання: аналіз модельних і експериментальних концентраційних профілів. На рис. 5 – 6 показано отримані в результаті реалізації процедури зворотної задачі (результати С.В. Дейнеки, М.Р. Петрика [6, 8, 9]) з використанням аналітичного розв'язку моделі (18) та даних експериментальних спостережень (рис. 2 – 3), розподіли коефіцієнтів дифузії кремнію та алюмінію.

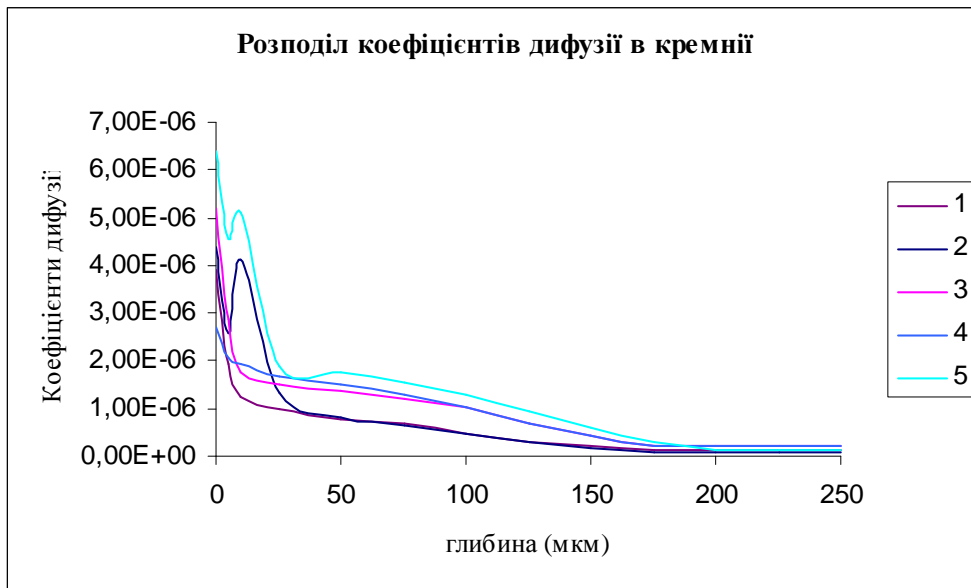


Рисунок 5. Розподіл коефіцієнтів дифузії по кремнію

Figure 5. Diffusion coefficient distribution in Si

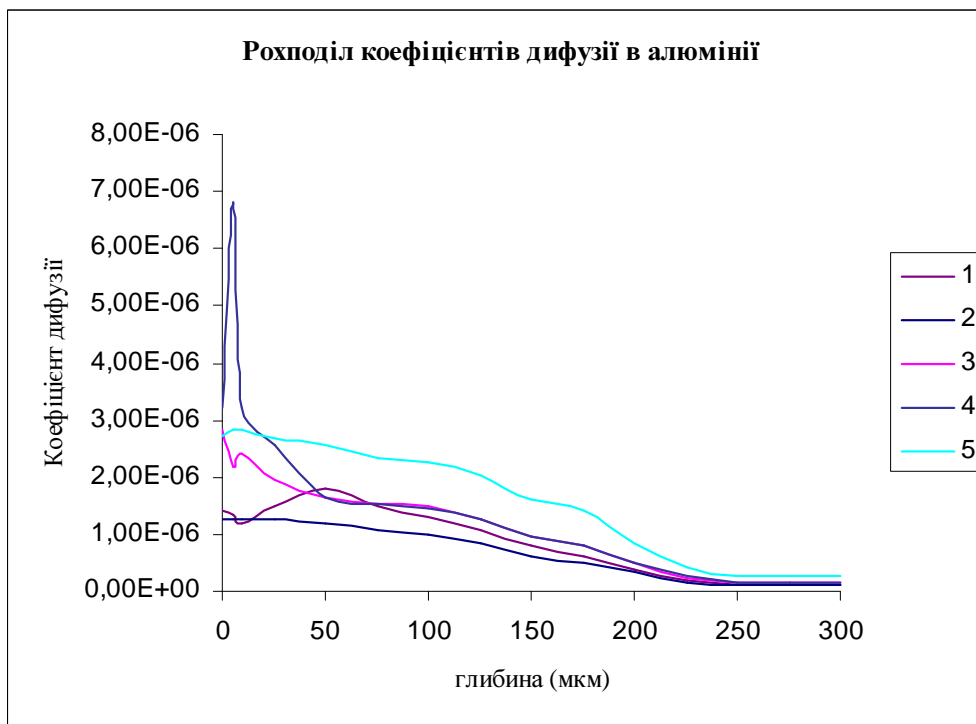


Рисунок 6. Розподіл коефіцієнтів дифузії по алюмінію

Figure 6. Diffusion coefficient distribution Al

На рис. 7 – 11 наведено часово-просторово розподілені модельні концентраційні розподіли кремнію, побудовані за відновленими коефіцієнтами дифузії для 5-ти зрізів оксидної плівки та 5-ти часових тривалостей формування технологічного мультишару наноплівки з урахуванням специфіки технологічних умов експлуатації нанопокриття (характерні точки Т.1 – Т.6, що належним чином враховують різні ступені агресивно-корозійних (деструктивних) та термовпливів середовища).

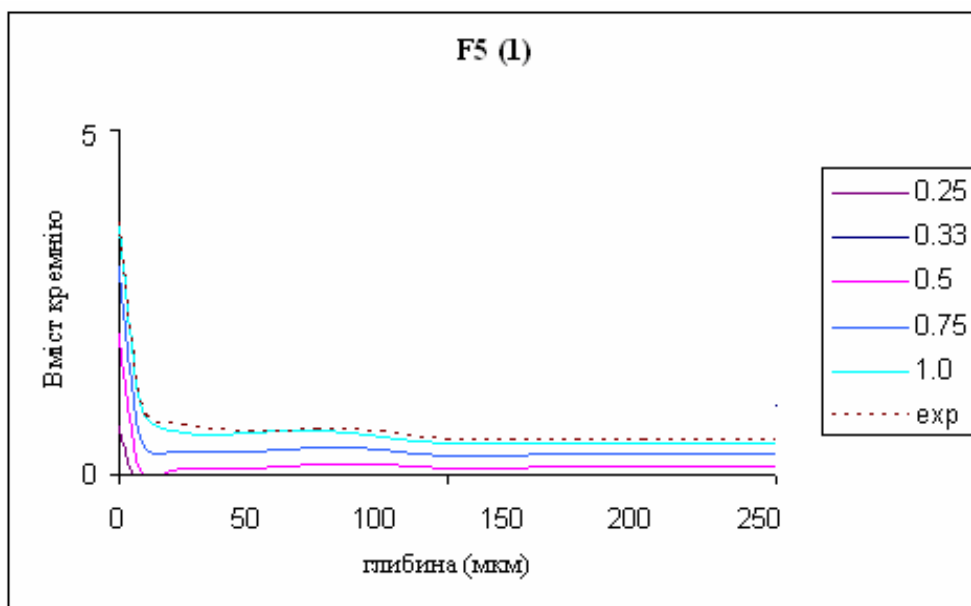


Рисунок 7. Модельні концентраційні розподіли (точка T.1)

Figure 7. Modelling concentration distributions for Si (point 1)

Тривалості формування технологічного мультишару оксидних плівок за рахунок молекулярної дифузії вказаних компонентів розбиті на 5 періодів, що включають час від початкового ($0,25T$) до кінцевого завершення формування захисного мультишару ($1T$) і відповідно заданої компонентної структури плівки, попередньо апробованої експериментами.

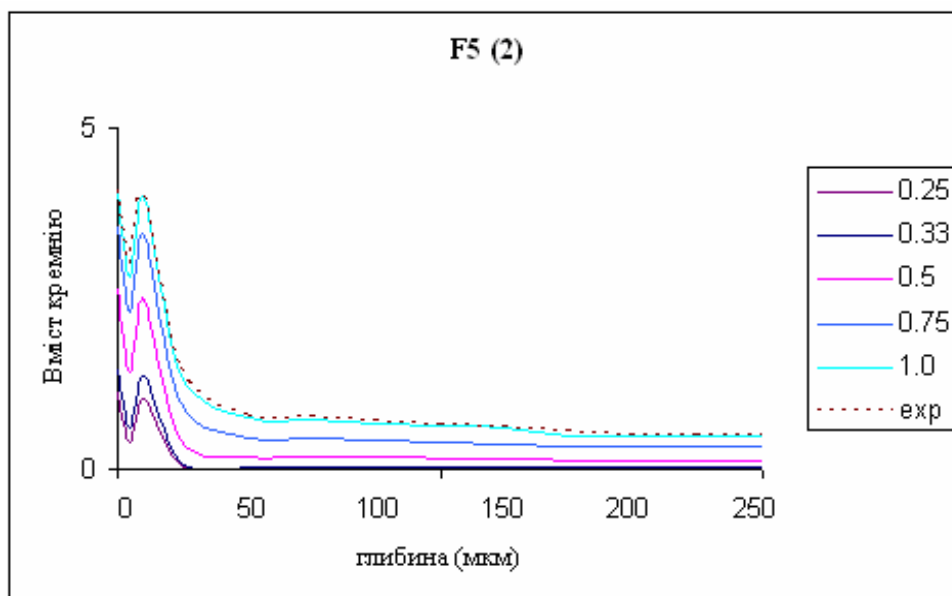


Рисунок 8. Модельні концентраційні розподіли (точка T.2)

Figure 8. Modelling concentration distributions for Si (point 2)

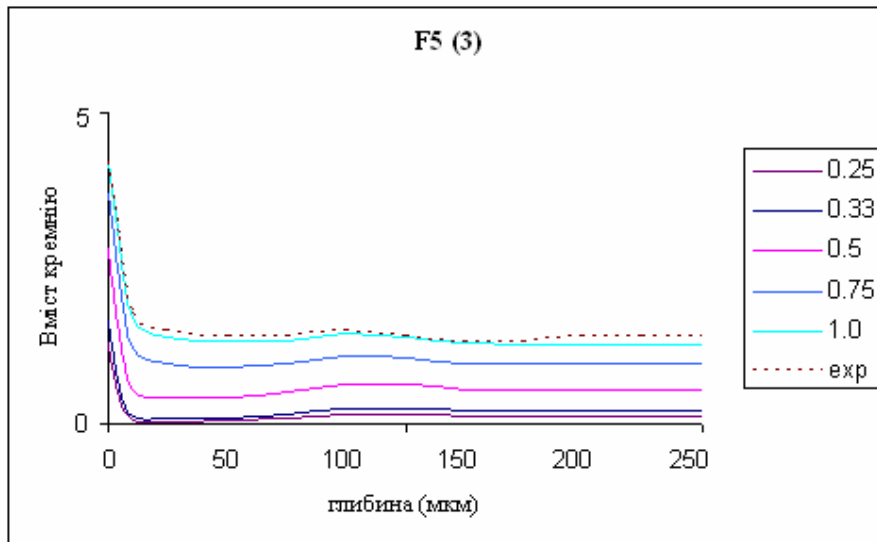


Рисунок 9. Модельні концентраційні розподіли (точка Т.3)

Figure 9. Modelling concentration distributions for Si (point 3)

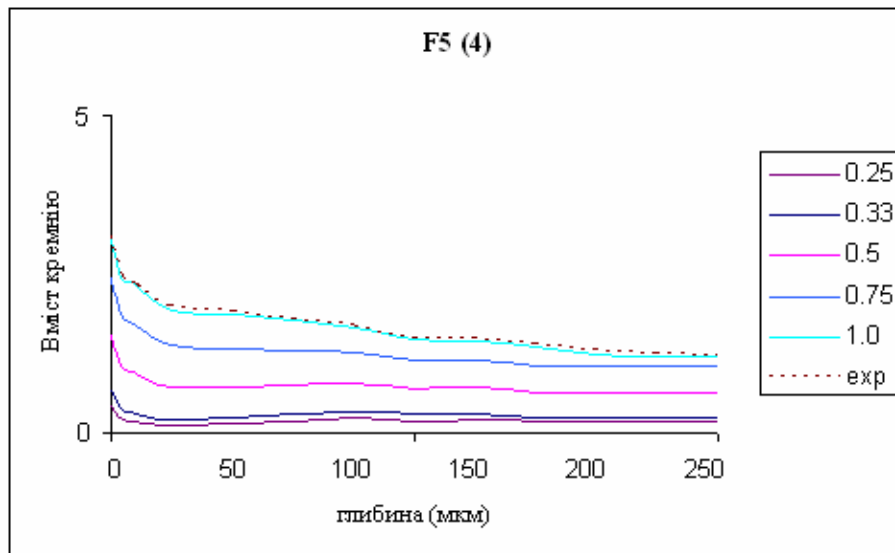


Рисунок 10. Модельні концентраційні розподіли (точка Т.4)

Figure 10. Modelling concentration distributions for Si (point 4)

Як бачимо з рис. 6а – 6d для точок Т.2 – Т.4 характерним є майже повне співпадання вмісту кремнію на глибині більше 50 мкм при приведеному часі 0,25Т та 0,33Т (тобто на першій третині експерименту – до 10-ої доби), причому цей вміст близький до нуля. Найбільший приріст умісту алюмінію спостерігається при приведеному часі від 0,5Т до 1Т. На глибині, більшій 150 мкм, концентрація кремнію практично стала для всіх точок.

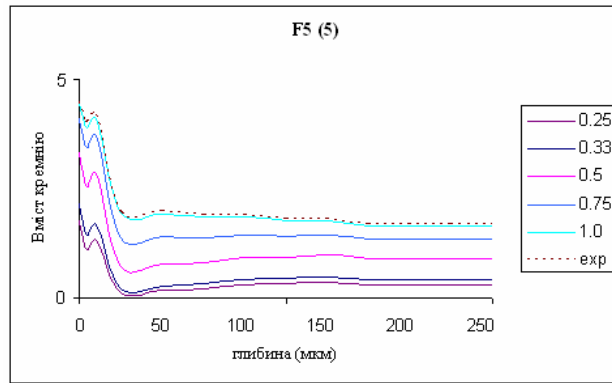


Рисунок 11. Модельні концентраційні розподіли (точка Т.6)

Figure 11. Modelling concentration distributions for Si (point 6)

Рисунки 7 – 11 демонструють, що криві експериментального q модельного розподілів кремнію з достатньої для технологічних застосувань точністю узгоджуються між собою. Максимальне значення величини відносної похибки не перевищує 4 %.

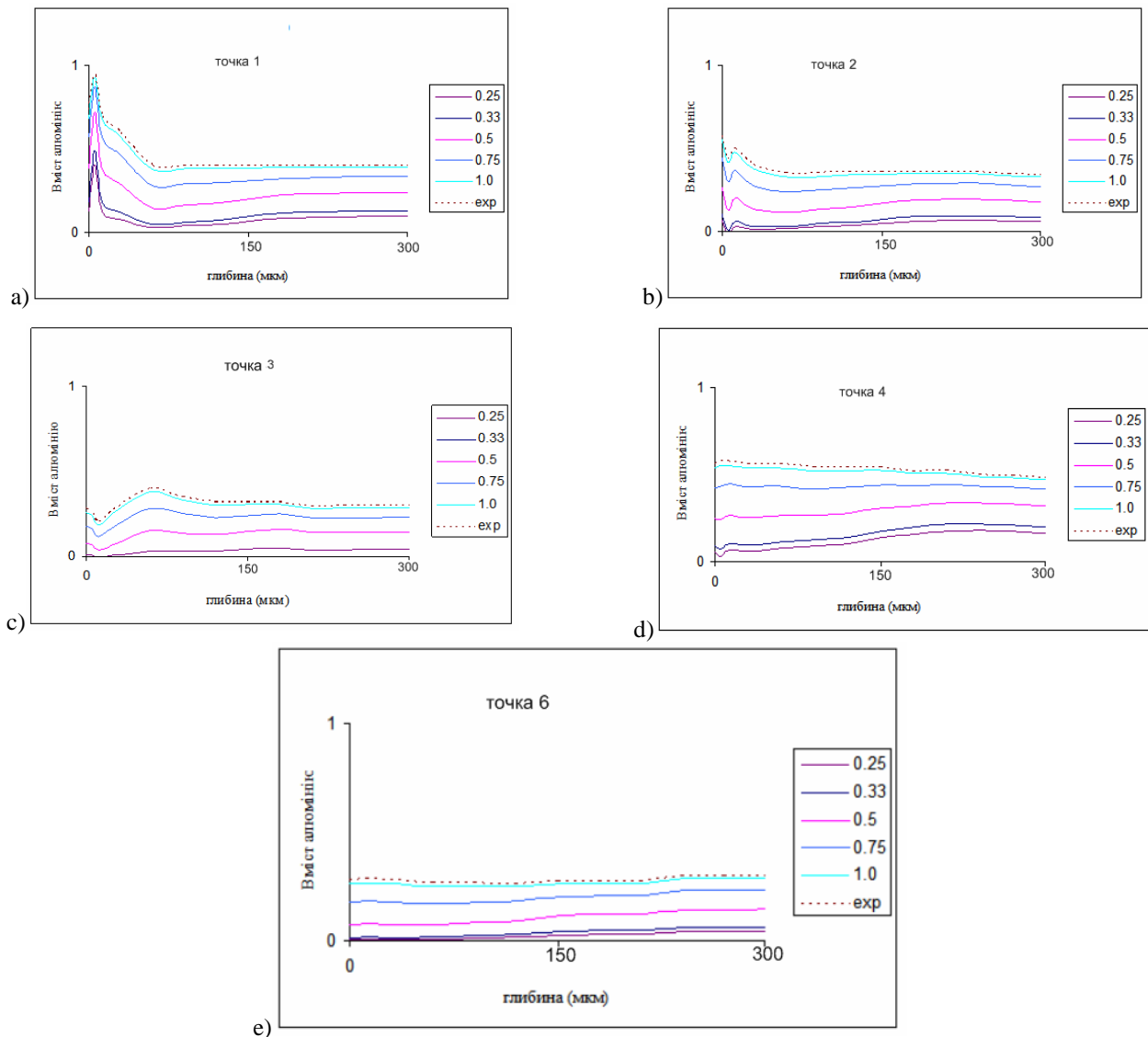


Рисунок 12. Модельні концентраційні розподіли (точки Т.1 – Т.4, Т.6)

Figure 12. Modelling concentration distributions for Al (points 1 – 4,6)

На рис. 12а – 12е спостерігаємо, що на глибині, більшій 140 мкм, від поверхні зразка концентрація алюмінію для кожної з точок Т.1 – Т.4, Т.6 при відповідних періодах часу залишається незмінною. Для всіх точок, що відповідають досліджуванім зрізам оксидної наноплівки, найбільший приріст вмісту алюмінію спостерігається при приведеному часі від 0,33Т (10-а доба) до 1Т (30-а доба). Максимальне відхилення концентрації алюмінію для повного модельного періоду часу від часу проведення експерименту не перевищує 4 %.

Як бачимо з рис. 7 – 12, профілі, отримані шляхом моделювання, є добре узгоджені з відповідним експериментальним профілем при наближенні тривалості формування мультишару до періоду кінцевого завершення формування захисного мультишару наноплівки. Максимальне відхилення не перевищує 3-4 %, що дає змогу оцінити достовірність математичної моделі та можливості практичного використання отриманих результатів.

Висновки. Побудовано математичну модель дифузійного перенесення в неоднорідних мультикомпонентних середовищах, що описує процес формування мультишарів тонких оксидних наноплівок, що використовуються як термо- й агресивнозахисні покриття робочих органів технологічного обладнання, що працює у високоагресивних середовищах. У результаті моделювання було отримано просторово-розподілені концентраційні розподіли структурних складових наноплівок (алюмінію, кремнію) для різних технологічних зрізів оксидної наноплівки та часових тривалостей формування технологічного мультишару наноплівки. Результати можуть бути використані для підвищення ефективності експериментальних досліджень переносу в багатокомпонентних мультикомпонентах та дослідженні властивостей нових наноматеріалів.

Conclusions. The mathematical model of diffusion transference in heterogeneous environments that describes the process of forming thin oxide nano films multilayers used as thermo- and aggressive-protective coverings of technological equipment operating units in highly corrosive environments has been constructed. Spatially distributed concentration distributions of nanofilm structural components (aluminium, silicon) for various technological shears of oxide nanofilm and time durations of forming the technological nanofilm multilayer have been obtained in the result of modeling.

Список використаної літератури

1. Mehrer, H. Diffusion in Solids / H. Mehrer // Springer, 2007. – P. 650.
2. Kärger, J. Diffusion fundamentals / J. Kärger, F. Grinberg, P. Heitjans. – Leipziger Unviersite. – 2005. – 615 p.
3. Petryk, M. Mathematical modeling and research for diffusion processes in multilayer and nanoporous media, Fluid Transport in Nanoporous Materials. / М .Petryk, O. Shabliy, M. Leniuk, P. Vasyluk // Springer Publishers. – 2006. – Volume 219 – P. 639 – 655.
4. Василюк, П. Високотемпературне руйнування залізохромових сплавів [Текст] / П. Василюк // Вісник ТНТУ. – 2011. – Спецвипуск. – частина 2. – С. 173 – 177.
5. Дифузійні процеси в оксидних шарах залізохромових сплавів [Текст] / О. Шаблій, М. Петрик, П. Василюк, І. Катеринюк // Вісник ТДТУ, 2000. – Т. 5 – № 3. – С. 5 – 11.
6. Дейнека, В.С. Идентификация параметров неоднородных задач диффузии в наномультиматериалах с использованием градиентных методов [Текст] / В.С. Дейнека, М.Р. Петрик // Компьютерная математика. – 2012. – № 1. – С. 41 – 51.

7. Ленюк, М.П. Інтегральні перетворення Фур'є, Бесселя із спектральним параметром в задачах математичного моделювання масопереносу в неоднорідних і нанопористих середовищах [Текст] / М.П. Ленюк, М.Р. Петрик. – К.: Наукова думка, 2000. – 372 с.
8. Deineka, V.S. Identifying kinetic parameters of mass transfer in components of multicomponent heterogeneous nanoporous media of a competitive diffusion system / V.S. Deineka, M.R. Petryk, J. Fraissard // Cybernetics and System Analysis, Springer New York – 2011 –Vol. 47, Number 5 – P. 705 – 723.
9. Сергиенко, И.В. Системный анализ многокомпонентных распределенных систем [Текст] / И.В. Сергиенко, В.С. Дейнека. – Киев: Наукова думка, 2009. – 638 с.

Отримано 22.01.2013