

Міністерство освіти і науки України
Тернопільський національний технічний університет
імені Івана Пулюя

Бабій Надія Василівна

УДК 681.3: 519.4

**МОДЕЛІ ПРОЦЕСІВ ДИФУЗІЙНОГО ПЕРЕНЕСЕННЯ І МЕТОДИ
ОЦІНЮВАННЯ ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПАРАМЕТРІВ В
БАГАТОШАРОВИХ НАНОПЛІВКАХ**

01.05.02 - математичне моделювання та обчислювальні методи

Автореферат
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата технічних наук

Тернопіль 2013

Дисертацією є рукопис.

Роботу виконано в Тернопільському національному технічному університеті імені Івана Пулюя Міністерства освіти і науки України

Науковий керівник

кандидат технічних наук, доцент
Петрик Михайло Романович,
Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя,
професор кафедри програмної інженерії, м. Тернопіль.

Офіційні опоненти:

доктор технічних наук, професор
Бомба Андрій Ярославович,
Рівненський державний гуманітарний університет,
професор кафедри інформатики та прикладної математики, м.Рівне;
доктор технічних наук, професор
Малачівський Петро Стефанович,
Центр математичного моделювання
Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України, м. Львів,
провідний науковий співробітник відділу математичних методів обчислювального експерименту, м.Львів.

Захист відбудеться „___” _____20_р. о __ годині на засіданні спеціалізованої вченої ради **K58.052.01** в Тернопільському національному технічному університеті імені Івана Пулюя, 46001,м. Тернопіль, вул. Руська, 56, ауд. 79

З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя, 46001, м. Тернопіль, вул. Руська, 56

Автореферат розісланий „___” _____20_р.

*Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради K58.052.01*

Шелестовський Б. Г.

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Важливим напрямом ресурсозбереження та підвищення технологічних характеристик матеріалів є застосування наноплівки та нанопокриттів різного призначення. Останні є багатошаровими наносередовищами, що характеризуються неоднорідністю фізичних властивостей (механічних, дифузійних, електричних, магнітних, оптичних). Наноплівки та нанопокриття широко використовуються як конструкційні ресурсозберігаючі матеріали в напівпровідниковій та електронній промисловості (для нових поколінь запам'ятовуючих пристроїв та мікросхем), атомній енергетиці, як покриття робочих органів обладнання для виробництва скловолоконних, мікропористих фільтрувальних матеріалів тощо. Це зумовило за останні роки ріст експериментальних та теоретичних досліджень дифузійної кінетики багатошарових наноконкомпозитів, що дає можливість одержання на базі матеріалів з відомими властивостями нових матеріалів, створення яких пов'язане зі структурними змінами при агрегуванні шарів із різними властивостями. Зокрема, при агрегації (Fe/Dy), (Fe/Tb)-магнітних багатошарових наноплівки виявлені значні ефекти магнетострикції (стискання зразків). Цей фізичний ефект спричинений системою інтерфейсних взаємодій між складовими елементами (наночарами) середовища та дисиметрією дифузійного перенесення в середовищі атомів для різних шарів. Обмінний зв'язок між Fe і Dy шарами є негативним, що дає можливість сформулювати нові феромагнітні структури з властивостями, які можуть мати нове практичне застосування (Д. Блавет, Е. Кадель, А. Таміон).

У працях Василюка П. М., Гаврилюка В. П., Петрика М. Р., Шаблія О. М. експериментально і теоретично вивчалися дифузійні ефекти в багатошарових тонких оксидних плівках $\text{Me-Al}_2\text{O}_3\text{-FeCr}_2\text{O}_4$ та $\text{Me-FeCr}_2\text{O}_4\text{-Al}_2\text{O}_3$, які запропоновані для використання як ефективні термо- та корозійностійкі нанопокриття робочих вузлів обладнання, що працюють у високотемпературних та агресивних середовищах (рідке скло, виготовлення оптоволокну, базальтоволокну тощо), забезпечуючи економію матеріалів.

Основними висновками з цих робіт є те, що виявлені структурні зміни при агрегації шарів та зумовлені ними концентраційні перерозподіли компонентів (Fe, Dy, Tb) зумовили отримання нових характеристик створених наноконкомпозитів. Проте вказаними авторами такі концентраційні профілі отримані за рахунок дороговартісних експериментальних досліджень.

Підвищення якості оцінки технологічних параметрів багатошарових наноплівки вимагає наукового підходу, зокрема для визначення концентраційних розподілів дифундованих компонент у наночарах. Для цього необхідне вдосконалення існуючих підходів до моделювання дифузійного перенесення.

Таким чином, виникає актуальна наукова задача розроблення моделей процесів дифузійного перенесення і методів оцінювання технологічних параметрів багатошарових наноплівки

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота спрямована на раціональне використання матеріальних і енергетичних ресурсів у сучасних нанотехнологіях, що відповідає Закону України „Про ресурсозбереження”, Закону України „Про пріоритетні напрями розвитку науки і

техніки”, Постанові Кабінету Міністрів України від 28.10.2009р. №1231 „Про затвердження Державної цільової науково-технічної програми „Нанотехнології та наноматеріали” на 2010-2014 роки”, Постанові Кабінету Міністрів України від 7.11.2011р. №942 „Про затвердження переліку пріоритетних тематичних напрямів наукових досліджень і науково-технічних розробок на період до 2015 року” (Створення та застосування нанотехнологій і технологій наноматеріалів). Робота пов’язана з науково-дослідною тематикою Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя, зокрема темою: ДІ № 176-11 „Параметрична ідентифікація систем компетитивної дифузії і адсорбції вуглеводневих сполук в нанопористих цеолітних каталізаторах” (номер державної реєстрації №0111U002585). Автор безпосередньо брала участь у виконанні етапів роботи, пов’язаних із розрахунком концентраційних полів дифузійного перенесення багатокомпонентних неоднорідних нанонаноплівки на основі ідентифікованих кінетичних параметрів (коефіцієнтів дифузії для різних компонентів та наночарів).

Мета і задачі дослідження. Метою дослідження є побудова та вдосконалення математичних моделей процесів дифузійного перенесення та розроблення методів достовірного визначення концентраційних розподілів дифундованих компонентів на кожному з шарів на основі ідентифікованих кінетичних параметрів для оцінювання технологічних параметрів багаточарових наноплівки. Для досягнення поставленої мети визначено такі задачі:

- проаналізувати відомі математичні моделі дифузійного перенесення та методи опису концентраційних розподілів дифундованих компонентів;
- модифікувати відомі математичні моделі дифузійного перенесення у багаточарових наноплівках з урахуванням результатів експериментальних нанофізичних досліджень багаточарових нанокомпозитів, багаточаровості переносу та взаємодій на поверхнях контактів між шарами наноплівки для одержання концентраційних розподілів їх компонентів;
- отримати розв’язки крайових задач переносу, сформульованих у рамках отриманих моделей (розподіли концентрацій дифундованих компонентів для кожного із шарів наноплівки з урахуванням структури та конструктивних характеристик середовищ переносу), що описують досліджувані моделі на базі методів інтегральних перетворень (Фур’є, Бесселя, Конторовича-Лебедева);
- здійснити комп’ютерне моделювання та чисельні розрахунки полів розподілу концентрацій дифузійного переносу за розробленими математичними моделями;
- верифікувати моделі за відомими даними фізичних експериментів (розподілами дифундованих компонентів у наночарах);
- оцінити режимні та конструктивні характеристики досліджуваних технологічних процесів;
- провести аналіз кінетичних профілів розподілів концентрацій для дифундованих шарів досліджуваних наномультиматриксів у широкому діапазоні змін конструктивних та режимних параметрів, дослідити функціональні залежності концентрацій дифундованих компонентів від конструктивних параметрів робочих каналів, товщин шарів та фізичних властивостей компонентів з метою оцінки параметрів для використання в матеріало- та ресурсозбереженні.

Об'єктом дослідження є процеси дифузійного перенесення в багатошарових наноплівках та нанопокриттях.

Предметом дослідження є математичні моделі процесів дифузійного перенесення в багатошарових наноплівках і нанопокриттях.

Методи дослідження. При розв'язуванні поставленої наукової задачі використано методи інтегральних перетворень Фур'є, Бесселя, Конторовича-Лебедева, перетворення Лапласа та методи теорії крайових задач. Алгоритми (у вигляді програмного забезпечення) були реалізовані з використанням мови програмування Java. Для реалізації процедур перевірки математичних моделей на адекватність використані результати ідентифікації на базі методів теорії оптимального керування багатокомпонентними системами та окремі практичні підходи, розроблені академіком НАН України Дейнекою В.С., як розвинення його наукової школи, за що дисертант висловлює йому щиро подяку.

Наукова новизна одержаних результатів. Проведені дослідження дозволили отримати низку нових результатів, а саме:

- вперше здійснено модифікацію відомих математичних моделей дифузійного перенесення в багатошарових наноплівках у плоскій і циліндричній постановках з урахуванням результатів експериментальних нанофізичних досліджень багатошарових наноконкомпозитів та наноплівки різної природи, які зробили можливим дослідження стаціонарних та нестаціонарних процесів дифузійного перенесення в мультинанокомпозитах з урахуванням багатошаровості переносу та взаємодій на поверхнях контактів між шарами наноплівки;

- вперше отримано (з використанням апарату інтегральних перетворень Фур'є, Бесселя, Конторовича-Лебедева, методу функцій впливу) та досліджено точні аналітичні розв'язки задач, сформульованих на базі розглянутих математичних моделей;

- побудовано математичні моделі дифузійного перенесення та одержано, з використанням отриманих інтегральних зображень, просторово-розподілені поля розподілів концентрацій дифундованих компонентів для багатошарових дифузійних наноплівки різної конфігурації та з різними фізико-хімічними характеристиками;

- вперше здійснено чисельне моделювання полів розподілу концентрацій для процесів дифузійного перенесення відповідно до теоретичних залежностей, отриманих за розробленими математичними моделями;

- розроблено обчислювальні методи перевірки моделей на адекватність для оцінки їх верифікації на відповідність даним фізичних експериментів (розподілів дифундованих компонентів у нанощарах), оцінено режимні та конструктивні характеристики досліджуваних технологічних процесів;

- проведено аналіз функціональних залежностей концентрацій для дифундованих шарів досліджуваних наномультікомкомпозитів у широкому діапазоні змін конструктивних та режимних параметрів, що дозволило здійснювати оцінки режимно-технологічних параметрів (розподіли концентрацій дифундованих компонент переносу для кожного шару, товщини нанощарів, їх кількості, тривалості дифузії) для їх подальшого використання в матеріало- та ресурсозбереженні (магнітні наноплівки, плівки для термопокриттів).

Практичне значення одержаних результатів. Одержані результати роботи

дали можливість оцінити конструктивні (товщини робочих шарів, радіуси та інші розміри мультишарових наноплівки) і режимно-технологічні параметри (необхідні розподіли визначальних елементів у шарах, тривалості технологічних стадій тощо), які можуть бути використані для одержання оптимальних вихідних продуктів, економії дорогокоштовних матеріалів та скорочення енерговитрат.

Результати роботи впроваджено в приватному малому підприємстві „Інформаційні і інноваційні технології” (в рамках угоди про спільну науково-дослідну лабораторію „Математичного моделювання і дослідження масопереносу в неоднорідних і нанопористих середовищах” між ТНТУ і ПМП „І. І. Т.”) та підприємстві електронної промисловості ВАТ „Квантор” (м. Збараж) у вигляді моделей, алгоритмів і програм, пов’язаних із проектуванням нанопористих мембран для сенсорів контролю загазованості шкідливими сполуками.

Матеріали дисертаційної роботи використовуються в навчальному процесі під час викладання дисциплін – ”Математичні моделі в інженерних розрахунках на ЕОМ”, ”Основи САПР” та науково-дослідній роботі зі студентами в Лабораторії математичного моделювання і дослідження масопереносу в неоднорідних і нанопористих середовищах та кафедрі програмної інженерії Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя.

Більшість результатів, отриманих в процесі дослідження, подано у вигляді формул, алгоритмів і графіків, які можуть бути включені в різні посібники та довідники і використані в інженерній практиці.

Особистий внесок здобувача. Всі результати, що складають основний зміст дисертаційної роботи, отримані автором самостійно. У публікаціях, написаних у співавторстві здобувачеві належить: у роботах [1–5, 11, 12, 17] – уточнення моделі, побудова аналітичного розв’язку моделі, розробка процедури комп’ютерного моделювання кінетики процесу перенесення та побудови концентраційних профілів; у роботах [6,13] – отримання аналітичного розв’язку моделі процесів дифузійного перенесення з використанням інтегрального перетворення типу Конторовича-Лебедева.

Апробація основних результатів дослідження на конференціях, симпозіумах. Основні результати роботи доповідались на Всеукраїнській науковій конференції ”Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів” (Рівне, 2013), Всеукраїнських наукових конференціях ТНТУ імені Івана Пулюя (Тернопіль, 2009, 2011, 2012), наукових семінарах лабораторії Математичного моделювання масопереносу в неоднорідних і нанопористих середовищах та кафедри програмної інженерії Тернопільського державного технічного університету імені Івана Пулюя (2006-2012), X-XII Наукових конференціях Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя (Тернопіль, 2006-2008), Міжнародній конференції, присвяченій 60-річчю кафедри диференціальних рівнянь Чернівецького НУ ім. Ю. Федьковича (Чернівці, 2006), Міжнародній конференції, присвяченій 125 річниці від дня народження Ганса Гана (Чернівці, 2004.), Конференції молодих учених із сучасних проблем механіки і математики імені академіка Я.С. Підстригача (Львів, 2004), IX, X Міжнародних Наукових Конференціях імені академіка М. Кравчука (Київ, 2002, 2004).

У повному обсязі результати дисертаційної роботи обговорювалися на науковому семінарі з проблем математичного моделювання та обчислювальних методів Рівненського державного гуманітарного університету; на семінарі Відділу математичних методів обчислювального експерименту Центру математичного моделювання Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України; на науковому семінарі "Математичне моделювання та обчислювальні методи" Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя.

Публікації. За основними результатами дисертації опубліковано 21 наукову працю, у тому числі 10 статей, з яких 6 – у фахових виданнях [1-6], 3 – у наукових виданнях, включених до міжнародних наукометричних баз, 11 публікацій у матеріалах конференцій [11-21].

Структура та обсяг дисертації. Дисертаційна робота складається зі вступу, трьох розділів, висновків, викладених на 121 сторінці машинописного тексту, списку використаних джерел із 204 бібліографічних найменувань на 20 сторінках та 2 додатків. Загальний обсяг роботи – 146 сторінок.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми дисертації, сформульовано мету та завдання, визначено об'єкт і предмет дослідження, з'ясовано наукову новизну та практичне значення одержаних результатів, окреслено методи дослідження, подано інформацію про особистий внесок здобувача, апробацію результатів дисертації, публікації, а також структуру й обсяг роботи.

У **першому розділі** проведено аналіз сучасних експериментальних та теоретичних досліджень дифузійної кінетики багат шарових нанокомпозитів, міститься огляд праць за темою дисертації. Зокрема, подано фізико-математичні постановки основних задач дифузійного перенесення в багат шарових дифузійних середовищах, виконано аналіз методів математичного моделювання та алгоритмічних процедур застосування основних аналітичних методів моделювання з використанням інтегральних перетворень Фур'є, Фур'є-Бесселя.

Методологія математичного формування фізико-технологічних процесів перенесення в неоднорідних та багатоскладових дифузійних середовищах і дослідження ефективних числових методів, їх моделювання на ПК, у тому числі побудова методом скінченних елементів високоточних обчислювальних схем розрахунку полів розв'язків моделей, розглянуті в працях Сергієнка І.В., Дейнеки В.С., Скопечького В.В., Ляшка І.І.

Проблеми формулювання крайових задач дифузійного перенесення в багатоскладових середовищах для різних технологічних застосувань розглядалися в роботах Ликова А.В., Бомби А.Я., Власюка А.П., Булавацького В.М., Федоткіна І.М., Петрика М.Р., С. Леклера, Д. Кане, Д. Каргера та ін. У цих працях для математичного моделювання як стаціонарних, так і нестаціонарних процесів дифузійного перенесення поряд із чисельними методами також використовуються аналітичні та асимптотичні методи одержання розв'язків математичних моделей. Останні надають змогу розробникам та аналізаторам технологічних процесів оперативно здійснювати якісний аналіз (як числових так і символічних) взаємодій

різних кінетичних режимних та конструктивних параметрів та ефективні оцінки перебігу процесів тощо.

Як показує ряд досліджень у галузі переносу в неоднорідних та багатоскладових середовищах зі змінними фізико-хімічними характеристиками, характер перенесення має чітко виражений неоднорідний характер вздовж основних напрямів переносу в силу як змінних фізико-хімічних характеристик, так і впливу нестационарностей між шарами середовищ.

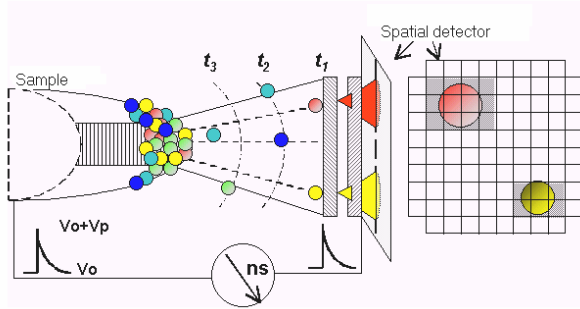


Рис. 1. Принцип дії томографічно-атомного зондування

Базовий принцип застосування такого виду досліджень полягає у використанні іонізації і випарювання атомів з поверхні за допомогою електричного поля: імпульс високої напруги, що прикладається до наконечника, випаровує з поверхні атоми, які в подальшому збираються на детекторі, що здійснює аналіз досліджуваної області.

У результаті експерименту були отримані концентраційні профілі для диспрозію, тербію та заліза.

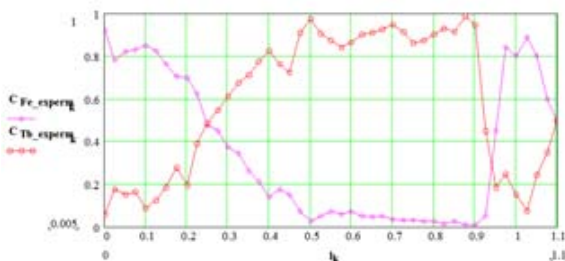


Рис. 2. Профілі Fe/Tb концентрацій в багатшаровому дифузійному середовищі вздовж товщини зразка

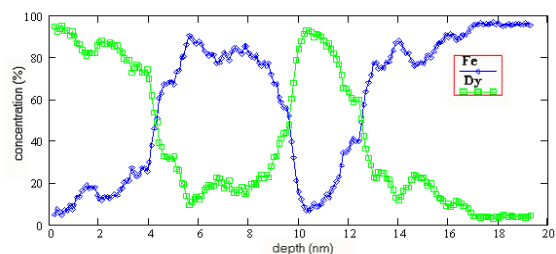


Рис. 3. Профілі Fe/Dy концентрацій в багатшаровому дифузійному середовищі вздовж товщини зразка

При вивченні дифузійних ефектів у багатшарових тонких оксидних плівках (Василук П.М., Гаврилук В.П., Петрик М.Р., Шаблій О.М., Катеринюк І.) експериментально досліджувалися зразки, запропоновані для використання як ефективні термо- та корозійностійкі нанопокриття робочих вузлів обладнання, за результатами яких було отримано профілі концентрацій компонентів наноплівки.

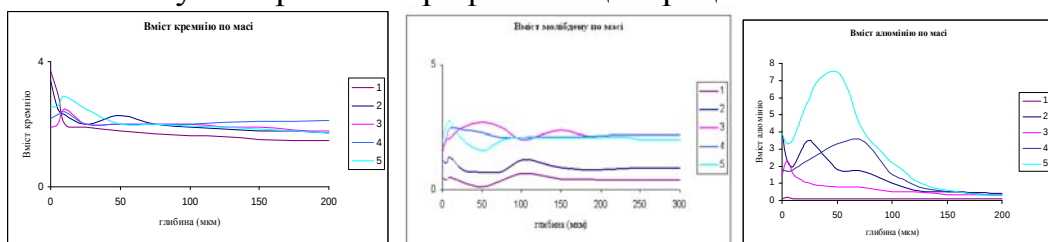
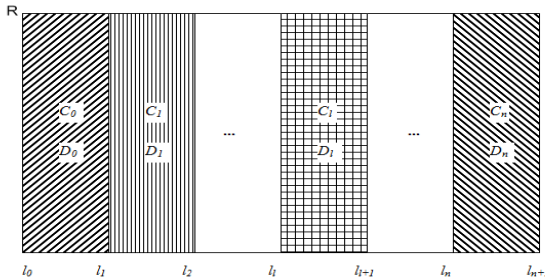


Рис. 4. Розподіл кремнію (а), молібдену (б), алюмінію (в) в зоні метал-оксид

У результаті проведеного аналізу було визначено, що виявлені структурні зміни при агрегації шарів та зумовлені ними концентраційні перерозподіли цих компонент (Fe, Dy, Tb, Si, Mo, Cr, Al) зумовили отримання нових характеристик створених нанокомпозитів. Підвищення якості оцінки технологічних параметрів багат шарових наноплівочок вимагає нових підходів, зокрема для визначення концентраційних розподілів дифундованих компонентів у нанощарах. Для цього необхідне вдосконалення існуючих підходів до моделювання дифузійного перенесення в багат шарових плівках.

У **другому розділі** розроблено математичні моделі переносу в загальній постановці для середовищ, описаних у попередньому розділі та побудовано їх просторово-розподілені розв'язки.

Властивості багатокомпонентних середовищ різної конфігурації буде визначати перенос уздовж товщини, який, у свою чергу, визначається багатокомпонентною структурою. Зокрема, розглянуто постановки крайових задач математичних моделей багатоскладового перенесення та викладено алгоритмічні схеми побудови їх розв'язку на основі застосування інтегральних перетворень Фур'є, Фур'є-Бесселя, Конторовича-Лебедева.



• Рис. 5. Декартове напівобмежене n-складове

Розглянута схематизація перенесення в області $z = \left\{ z : z \in \bigcup_{k=1}^{n+1} (l_{k-1}, l_k), 0 \leq l_0 < l_{n+1} < \infty \right\}$

(рис. 5), що описує багатокомпонентне середовище зі встановленими n рівномірними шарами, згідно з якою, для кожного j-го спряження $z = l_j, j = \overline{1, n}$ у сформованому мультикомполіті відбувається взаємодифузія

компонентів між двома сусідніми шарами. Механізми такого взаємопереносу визначаються наявністю градієнтів концентрацій на межах між сусідніми шарами, моделювання яких можна здійснювати поряд із використанням основних рівнянь переносу в різних постановках шляхом врахування крайових умов та умов спряження, що описують баланс маси дифундованої компоненти між суміжними шарами. Таким чином, необхідно побудувати обмежений у двовимірній області $D_n = \{(t, x, z) : t \geq 0; x(0, R), z \in I_n\}$ розв'язок системи диференціальних рівнянь з частинними похідними 2-го порядку, що описує дифузійний перенос в обмеженому (n+1)-складовому неоднорідному середовищі

$$\frac{\partial u_m(t, x, z)}{\partial t} = D_R \frac{\partial^2 u_m(t, x, z)}{\partial x^2} + D_m \frac{\partial^2 u_m(t, x, z)}{\partial z^2} + f_m(t, z), z \in (l_{m-1}, l_m), m = \overline{1, n+1} \quad (1)$$

$$\text{за початкових умов } u_m(t, x, z)|_{t=0} = g_m(x, z), z \in (l_{m-1}, l_m), m = \overline{1, n+1}, \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \left[\alpha_{11}^0 \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{11}^0 \right] u_1(t, x, z) \Big|_{z=l_0} &= g_{l_0}(t, x) \\ \left[\alpha_{22}^{n+1} \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{22}^{n+1} \right] u_{n+1}(t, x, z) \Big|_{z=l_n} &= g_{l_n}(t, x) \end{aligned} \quad (3)$$

крайових умов по змінній z:

умов спряження $\left\{ \left[\alpha_{j1}^m \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j1}^m \right] u_m(t, x, z) - \left[\alpha_{j2}^m \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j2}^m \right] u_{m+1}(t, x, z) \right\} \Big|_{z=l_m} = 0, \quad j = \overline{1, 2}; \quad m = \overline{1, n}, (4)$

крайових умов по змінній x : $\frac{\partial u_m(t, x, z)}{\partial x} \Big|_{x=0} = u_{0_m}(t, z)$ (5)
 $u_m(t, x, z) \Big|_{x=R} = u_{R_m}(t, z), x \in (0, R), m = \overline{1, n+1}$

Тут D_R – коефіцієнт дифузії по координаті x , D_m – коефіцієнти дифузії по координаті z для m -того шару середовища ($m = \overline{1, n+1}$).

Умови (3)-(5) тут подані в загальному вигляді і через вибір необхідних коефіцієнтів $\alpha_{js}^m, \beta_{js}^m, j, s = \overline{1, 2}$ уточнюються для кожної конкретної постановки моделі. Також є можливість враховувати і вплив просторово розподілених джерел маси $f_m(t, z)$. До розглядуваного класу задач, зокрема до задачі (1), застосовуються алгоритмічні схеми побудови аналітичного розв'язку з використанням інтегрального перетворення Фур'є:

а) інтегральне перетворення Фур'є на сегменті $(0, R)$ по змінній x , визначене:

-інтегральним оператором прямої дії $F_i[u_m(t, x, z)] = \int_0^R u_m(t, x, z) \sin\left(\frac{i\pi}{R}x\right) dx \equiv u_{mi}(t, z);$

-інтегральним оператором зворотної дії $F_i^{-1}[u_{mi}(t, z)] = \frac{2}{R} \sum_{i=1}^{\infty} u_{mi}(t, z) \sin\left(\frac{i\pi}{R}x\right) \equiv u_m(t, x, z);$

-основною тотожністю інтегрального перетворення Фур'є для диференціального оператора Лапласа $F_i\left[\frac{\partial^2 u_m(t, x, z)}{\partial x^2}\right] = -\left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 u_{mi}(t, z) + \frac{i\pi}{R} [u_{0_m}(t, z) - (-1)^i u_{R_m}(t, z)];$

б) по змінній z скінченне інтегральне перетворення Фур'є для обмеженого неоднорідного $n+1$ – складового середовища з урахуванням змінних градієнтів у крайових та інтерфейсних умовах має вигляд:

-інтегральний оператор прямої дії $F_n[[u_m(t, z)]] = \sum_{m=1}^{n+1} \int_{l_{m-1}}^{l_m} u_m(z) V_m(z, \beta_k) \sigma_m dz \equiv u_k(t);$

-інтегральний оператор зворотної дії $F_n^{-1}[u_k(t)] = \sum_{k=1}^{\infty} u_k(t) \frac{V_m(z, \beta_k)}{\|V(z, \beta_k)\|^2} \equiv u_m(t, z);$

- основна тотожність інтегрального перетворення

$$F_n\left[L_n[[u_m(t, z)]]\right] = -\beta_k^2 u_k + D_{n+1} \frac{\sigma_{n+1}}{\alpha_{22}^{n+1}} V_{n+1}(l, \beta_k) \cdot g_l - D_1 \frac{\sigma_1}{\alpha_{11}^1} V_1(l_0, \beta_k) \cdot g_{l_0}.$$

У результаті низки перетворень побудовано розв'язок двовимірної математичної моделі (1)-(5), що визначає просторово розподілену залежність концентрацій:

$$\begin{aligned}
u_m(t, x, z) = & \int_0^t \int_0^R \left[\mathcal{W}_{l_{0,m}}(t-\tau; x, \varsigma; z, l_0) g_{l_0}(\tau, \varsigma) + \mathcal{W}_{l_m}(t-\tau; x, \varsigma; z, l) g_l(\tau, \varsigma) \right] d\varsigma d\tau + \\
& + \int_0^t \sum_{m_1=1}^{n+1} \int_{l_{m_1-1}}^{l_{m_1}} \left[\mathcal{W}_{0,m,m_1}(t-\tau; x, 0; z, \xi) u_{o_{m_1}}(\tau, \xi) + \mathcal{W}_{R,m,m_1}(t-\tau; x, R, z, \xi) u_{R_{m_1}}(\tau, \xi) \right] d\xi d\tau + \\
& \int_0^R \sum_{m_1=0}^{n+1} \int_{l_{m_1-1}}^{l_{m_1}} \mathcal{H}_{m,m_1}(t; x, \varsigma; z, \xi) g_{m_1}(\varsigma, \xi) \sigma_{m_1} d\xi d\varsigma + \\
& + \int_0^t \int_0^R \sum_{m_1=0}^{n+1} \int_{l_{m_1-1}}^{l_{m_1}} \mathcal{H}_{m,m_1}(t-\tau; x, \varsigma; z, \xi) f_{m_1}(\tau, \varsigma, \xi) \sigma_{m_1} d\xi d\varsigma d\tau, \quad m = \overline{1, n+1}
\end{aligned} \tag{6}$$

У формулі (6) беруть участь функції впливу:

- функції впливу крайових умов по просторовій змінній z :

$$\begin{aligned}
\mathcal{W}_{l_{0,m}}(t; x, \varsigma; z, l_0) = & -D_1 \frac{\sigma_1}{\alpha_{11}^1} \frac{2}{R} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} e^{-\left(D_R \left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \beta_k^2\right)t} \cdot \frac{V_1(l_0, \beta_k) \cdot V_m(z, \beta_k)}{\|V(z, \beta_k)\|^2} \sin\left(\frac{i\pi}{R}x\right), \\
\mathcal{W}_{l_m}(t; x, \varsigma; z, l) = & D_{n+1} \frac{\sigma_{n+1}}{\alpha_{22}^1} \frac{2}{R} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} e^{-\left(D_R \left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \beta_k^2\right)t} \cdot \frac{V_{n+1}(l, \beta_k) \cdot V_m(z, \beta_k)}{\|V(z, \beta_k)\|^2} \sin\left(\frac{i\pi}{R}x\right);
\end{aligned} \tag{7}$$

- функції впливу крайових умов по просторовій змінній x :

$$\begin{aligned}
\mathcal{W}_{0,m,m_1}(t; x, 0; z, \xi) = & \frac{2}{R} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{i\pi}{R} e^{-\left(D_R \left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \beta_k^2\right)t} \frac{V_1(\xi, \beta_k) \cdot V_m(z, \beta_k)}{\|V(z, \beta_k)\|^2} \sin\left(\frac{i\pi}{R}x\right), \\
\mathcal{W}_{R,m,m_1}(t; x, R; z, \xi) = & \frac{2}{R} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{i\pi}{R} (-1)^{i+1} e^{-\left(D_R \left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \beta_k^2\right)t} \frac{V_{m_1}(\xi, \beta_k) \cdot V_m(z, \beta_k)}{\|V(z, \beta_k)\|^2} \sin\left(\frac{i\pi}{R}x\right);
\end{aligned} \tag{8}$$

- функція впливу початкових умов та неоднорідностей системи:

$$\mathcal{H}_{m,m_1}(t, x, \varsigma; z, \xi) = \frac{2}{R} \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{m_1=1}^{\infty} e^{-\left(D_R \left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \beta_k^2\right)t} \frac{V_m(z, \beta_k) V_{m_1}(\xi, \beta_m)}{\|V(z, \beta_m)\|^2} \sin\left(\frac{\pi i}{R}\varsigma\right) \sin\left(\frac{\pi i}{R}x\right); \tag{9}$$

$$m, m_1 = \overline{1, n+1}.$$

Аналогічно подані інші типи постановок крайових задач та алгоритмічні схеми їх розв'язання з використанням інтегральних перетворень Фур'є, Фур'є-Бесселя, Вебера, Конторовича-Лебедева.

Третій розділ присвячено застосуванню розробленої у попередньому розділі методології для математичного моделювання дифузійного переносу в багат шарових Fe/Tb, Dy/Fe магнітних та оксидних наноплівках. Зокрема, обґрунтовано розв'язність відповідних задач та отримано їх аналітичний розв'язок, що в узагальненому вигляді описує вплив фізичних чинників внутрішньої кінетики переносу. Виконано числове моделювання дифузійного переносу та проведено перевірку на адекватність моделі за результатами натурних експериментів.

У п.3.1. розглянуто математичне моделювання дифузійного перенесення в багатошарових Fe/Dy-магнітних наноплівках. Запропоновано нову математичну модель процесу переносу шляхом дифузії у плоскому багатошаровому середовищі. Схематизація такого середовища представлена на рис.6.

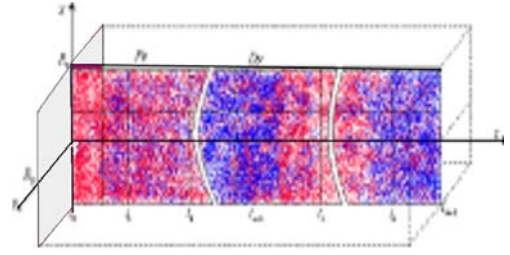


Рис.6. Схематичний вигляд плоского багатошарового середовища

Значення концентрації $C_k(t, x, z)$ атомів Fe (або Dy) – визначається як розв'язок наступної системи диференціальних рівнянь другого порядку:

$$\frac{\partial}{\partial t} C_k(t, x, z) = D_0 \frac{\partial^2 C_k}{\partial x^2} + D_{z_k} \frac{\partial^2 C_k}{\partial z^2} \quad (10)$$

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

за наступних початкових умов: $C_k(t, x, z)|_{t=0} = C_{0k}(z)$, $k = \overline{1, n}$,

крайових умов по змінній x : $\frac{\partial C_k}{\partial x}|_{x=0} = 0$, $C_k|_{x=R} = C_{Rk}$,

крайових умов по змінній z : $C_1(t, x, z)|_{z=l_0} = C_{l_0}(t, x)$; $\frac{\partial C_{n+1}}{\partial z}|_{z=\infty} = 0$

та інтерфейсних умов між суміжними шарами вздовж осі z : $[C_k - C_{k+1}]_{z=l_k} = 0$;

$$\left[\frac{\partial}{\partial z} C_k - \xi_k \frac{\partial}{\partial z} C_{k+1} \right]_{z=l_k} = 0; \quad k = \overline{1, n}.$$

Це класичні умови, оскільки ми вважаємо, що досліджена область є півплита, паралельна до (x, z) площини, як зображено на рис. 6.

Тут прийняті умовні позначення $C_k, k = \overline{1, n+1}$ – Fe (чи Dy) концентрації в k -му шарі багатошарового середовища вздовж осі z ; x, y, z – просторові координати; t – час; $D_k, k = \overline{1, n+1}$ – коефіцієнт дифузії в напрямку осі z ; $\xi_k = \frac{D_{k+1}}{D_k}$; D_0 – перша

складова коефіцієнта дифузії по координаті 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 плівки. У результаті розв'язання був отриманий аналітичний розв'язок даної крайової задачі:

$$C_k(t, x, z) = C_{l_0} \int_0^t \int_0^R W_{l_0, k}(t - \tau; x, \zeta; z, l) d\zeta d\tau + \int_0^t \sum_{k_1=1}^{n+1} C_{R_{k_1}} \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} W_{R_{k_1}, k_1}(t - \tau; x, R; z, \xi) \sigma_{k_1} d\xi d\tau +$$

$$+ \int_0^t \int_0^R \sum_{k_1=1}^{n+1} C_{0_{k_1}} \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} H_{k, k_1}(t - \tau; x, \zeta; z, \xi) \sigma_{k_1} d\zeta d\xi d\tau, \quad (11)$$

що дає можливість описувати концентрацію для k -того шару наноплівки. За рахунок результатів ідентифікації з використанням теорії управління станом

багатокомпонентних систем (результати С.В.Дейнеки, М.Р.Петрика) та на основі (11) були побудовані концентраційні профілі.

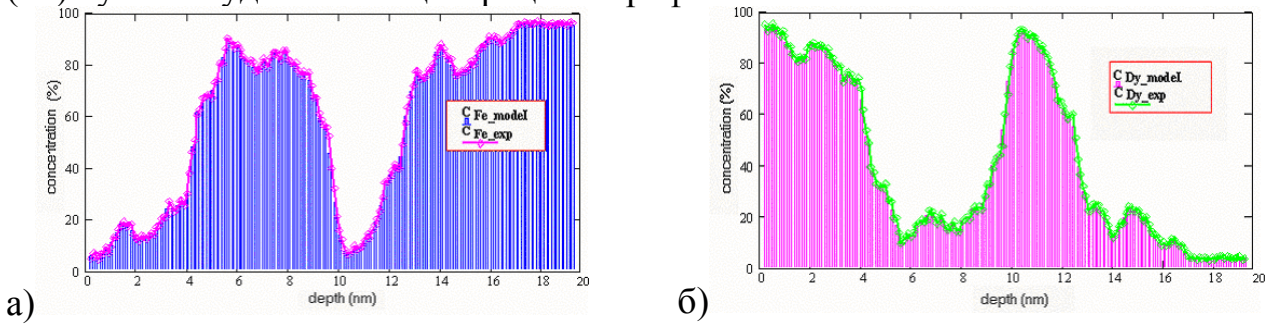


Рис.7. Модельні і експериментальні концентрації Fe (а) та Dy (б) як функції глибини в шарі середовища

Як видно з рис.7, профіль, одержаний шляхом моделювання, узгоджується з відповідним експериментальним профілем. Максимальне відхилення не перевищує 2-3%. Отже, можна вважати, що профілі коефіцієнтів дифузії для Fe і Dy, одержані з даної математичної моделі, є чисельно коректними.

У п. 3.2. проведено математичне моделювання концентраційних розподілів Fe/Tb - магнітних багатоскладових циліндричних середовищ. При цьому розглянуто процес переносу в обмеженому неоднорідному n- інтерфейсному циліндричному середовищі з різними фізико-хімічними характеристиками і дифузійними властивостями на кожному шарі. Математична модель такого процесу описується системою переносу для обмеженого осесиметричного n-складового неоднорідного (по координаті r) середовища в області

$$D_n^+ = \left\{ (t, r, x) : t > 0, r \in \bigcup_{m=1}^{n+1} (R_{m-1}, R_m); R_0 = 0; R_{n+1} \equiv R < \infty, x \in (0, l) \right\} :$$

$$\frac{\partial u_m(t, r, x)}{\partial t} = D_m B_0 [u_m] + D \frac{\partial^2 u_m}{\partial x^2} \quad (B_0 = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr}) \quad (12)$$

за початкових умов $u_m(t, r, x)|_{t=0} = g_m, r \in (R_{m-1}, R_m); m = \overline{1, n+1}, R_0 = 0,$

крайових умов по координаті r: $\frac{\partial}{\partial r} u_1(t, r, x) = 0, u_{n+1}(t, r, x)|_{r=R_{n+1}} = q_R,$

умов спряження: $(u_k(t, r, x) - u_{k+1}(t, r, x))|_{r=R_k} = 0; \frac{\partial}{\partial r} (D_k u_k) - \frac{\partial}{\partial r} (D_{k+1} u_{k+1}) = 0, k = \overline{1, n}$

та крайових умов по змінній x: $\frac{\partial u_m(t, r, x)}{\partial x}|_{x=0} = 0, u_m(t, r, x)|_{x=l} = u_{l_m}.$

В результаті послідовного застосування інтегрального перетворення, визначеного операторами:

$$H_n[u(r)] = \int_0^{R_{n+1}} u(t, r) \cdot V_0(r, \beta_j) \sigma dr = \sum_{k=1}^{n+1} \int_{R_{k-1}}^{R_k} u_k(t, r) V_{0,k}(r, \beta_j) \sigma_k r dr = u_j(t),$$

$$H_n^{-1}[u_j] = \sum_{j=1}^{\infty} u_j \frac{V_0(r, \beta_j)}{\|V_0(r, \beta_j)\|^2} \equiv u(r) \text{ та інтегрального перетворення Фур'є на } (0, l),$$

отримано розв'язок математичної моделі (12):

$$\begin{aligned}
u_m(t, r, x) = & u_{l_m} \int_0^t \int_0^R W_{l,m}(t-\tau; r, \rho; x, l) d\rho d\tau + \int_0^t \sum_{m_1=1}^{n+1} q_{R_{m_1}} \int_{R_{m_1-1}}^{R_{m_1}} W_{R_{m_1}, m_1}(t-\tau; r, R; x, \zeta) \sigma_{m_1} d\zeta d\tau + \\
& + \int_0^t \sum_{m_1=1}^{n+1} g_{0_{m_1}} \int_{R_{m_1-1}}^{R_{m_1}} H_{m, m_1}(t-\tau; r, \rho; x, \zeta) \sigma_{m_1} d\rho d\zeta d\tau, \quad m = \overline{1, n+1}.
\end{aligned}
\tag{13}$$

Структура функцій впливу розв'язку (13) має вигляд, подібний до (7)-(9).

З використанням спеціально розробленого Java-програмного забезпечення була реалізована математична модель (12). Отримано графічний розв'язок прямої задачі дифузійного переносу в багатошаровому Fe/Tb-середовищі.

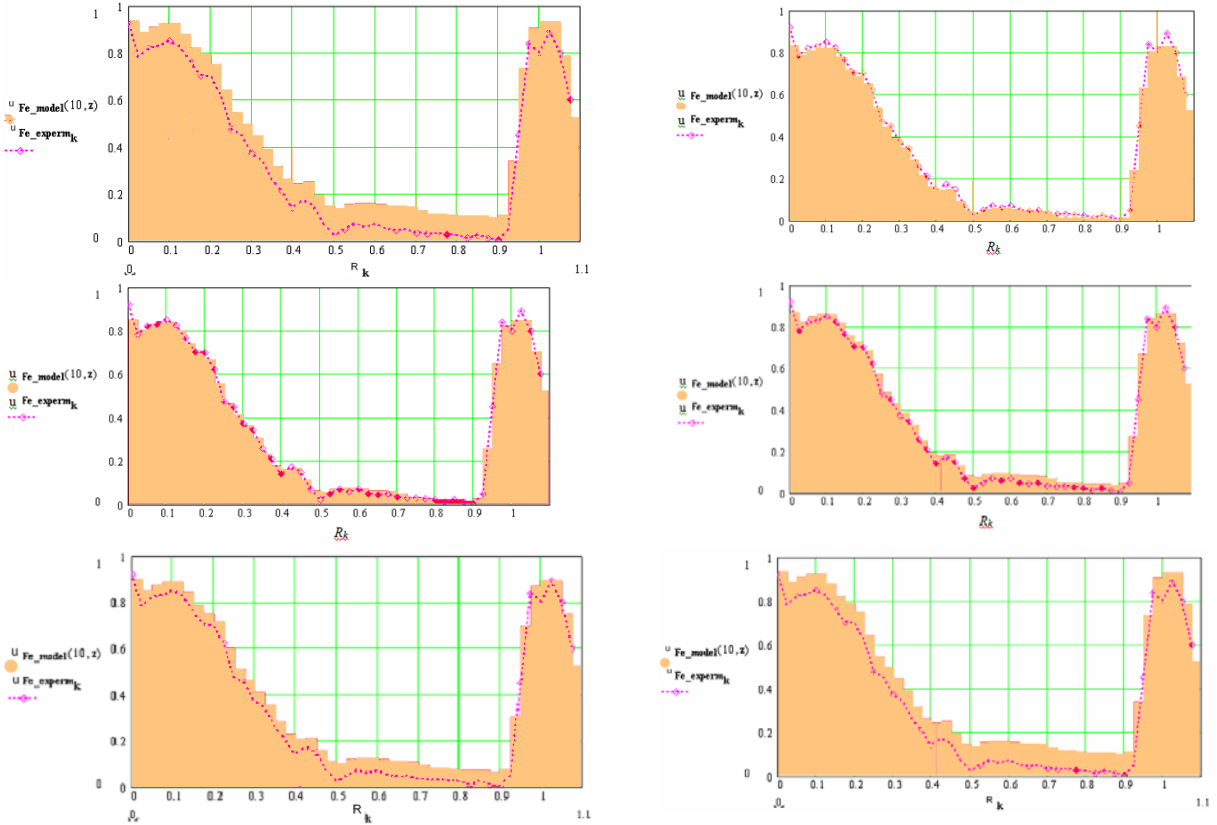
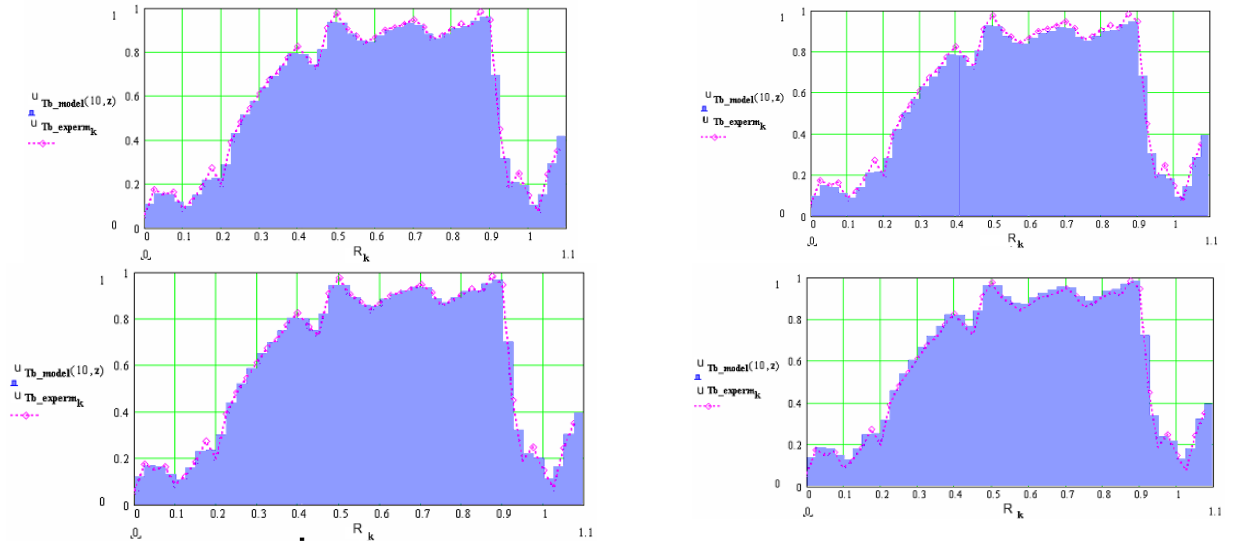


Рис. 8. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для Fe (швидкість наплення 0.00237 nm/s, 0.00137 nm/s, 0.0039 nm/s, 0.00537 nm/s, 0.00837 nm/s, 0.0137 nm/s)



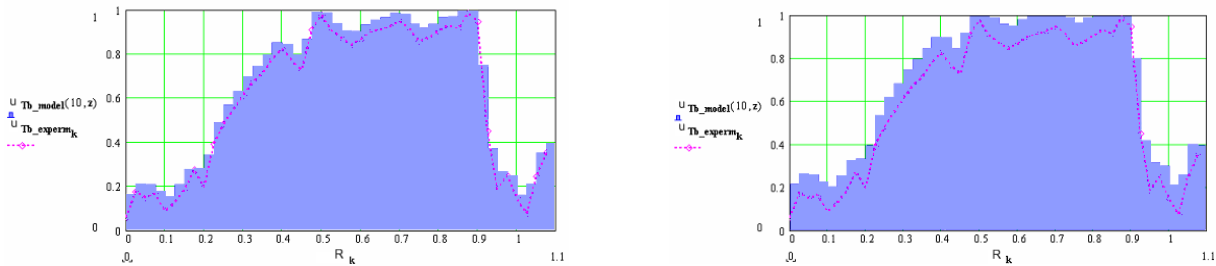


Рис. 9. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для Tb (швидкість напilenня 0.00237 nm/s, 0.00137 nm/s, 0.00537 nm/s, 0.00337 nm/s, 0.00837 nm/s, 0.0137 nm/s)

Проведено аналіз концентраційних полів. На рис. 8 подано порівняльну картину модельних і експериментальних профілів розподілів концентрації для Fe для різних конструкційних зразків наноплівки, отриманих при різних режимах формування шарів, що визначаються різними швидкостями напilenня маси. Як видно з наведених рисунків, модельні профілі досить добре узгоджуються з експериментальними даними. Для режиму з швидкостями напilenня 0.00237 nm/s та 0.0039 nm/s спостерігається практично повне співпадання модельного та експериментально профілів концентрації. Для швидкостей 0.00137 nm/s та 0.0539 nm/s видно досить добре узгодження концентраційних розподілів. Відхилення модельного профілю Fe від експериментального не перевищує 2-3%. Для швидкостей 0.00837 nm/s та 0.0137 nm/s спостерігається незначні відхилення модельного профілю від експериментального, проте похибка знаходиться в межах 5-9%. Як видно з рис.9, модельні профілі розподілів концентрації Tb узгоджуються з експериментальними даними з максимальною похибкою в межах 6-9%.

Підпункт 3.4. відображає результати моделювання процесу формування мультишарів тонких оксидних наноплівок. З метою одержання повноти картини аналізу вибрано шість позицій (точок), у яких здійснювались експериментальні зрізи (заміри) щодо кількісного складу означених вище компонентів.

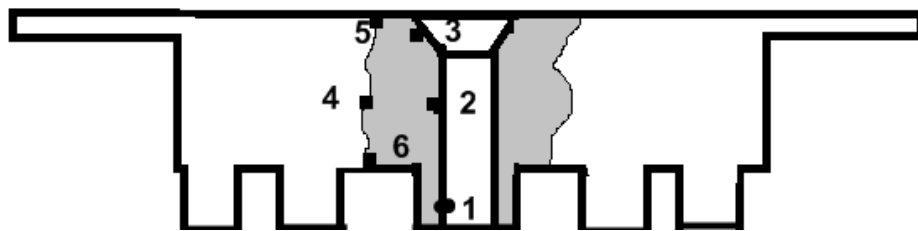


Рис.10. Схематичний вигляд зразка (1 – межа сплав-повітря-розплав; 2,3,4 – об'єм сплаву; 6 – межа сплав-повітря; 5 – межа сплав-розплав)

Точки для зрізів вибиралися з урахуванням ступеня контакту з агресивним робочим середовищем (розплав скла) поверхні, покритої наноплівкою даної оксидної структури, та були використані як вхідні параметри для математичного моделювання процесу дифузії на основі отриманого математичного розв'язку (11) моделі (10).

Як жаро-, так і корозійна стійкість сплавів визначається вмістом, у першу чергу, алюмінію, який забезпечує утворення захисних поверхневих оксидів. На

рис. 11 подано результати числового моделювання та використані сліди експериментальних спостережень (ехр), що відображають вміст алюмінію.

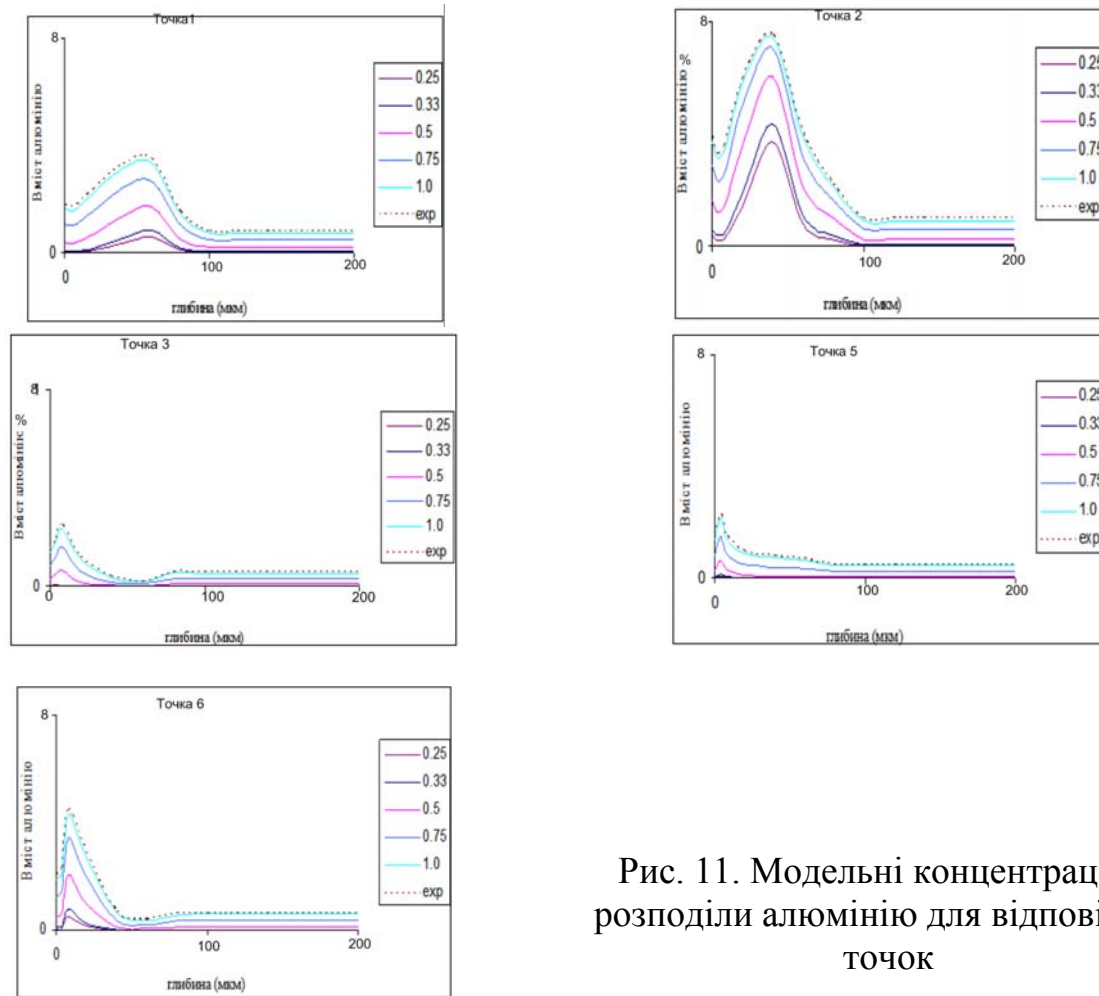
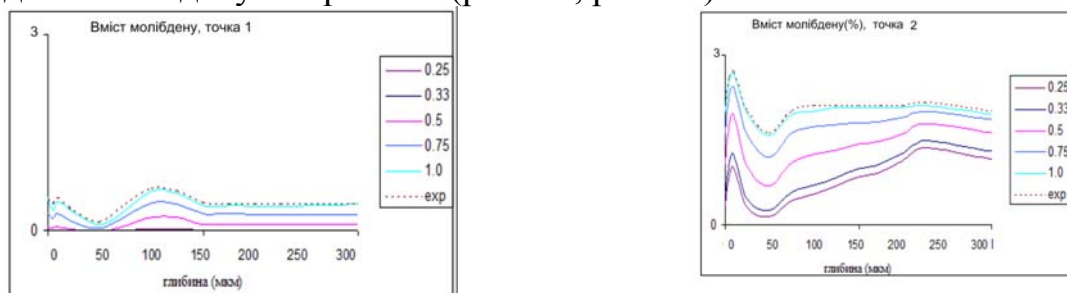


Рис. 11. Модельні концентраційні розподіли алюмінію для відповідних точок

Ці концентраційні розподіли побудовані для різних часових тривалостей формування технологічного мультишару наноплівки. Як видно з рис. 11, профілі, одержані шляхом моделювання, є узгодженими з відповідним експериментальним профілем (з відхиленням 3%) при наближенні тривалості формування мультишару до періоду кінцевого завершення формування захисного мультишару наноплівки.

Розглянуто результати комп'ютерного моделювання концентраційних розподілів молибдену та кремнію (рис. 12, рис. 13).



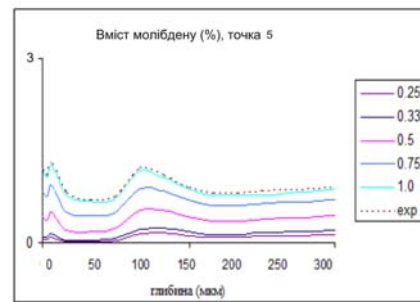
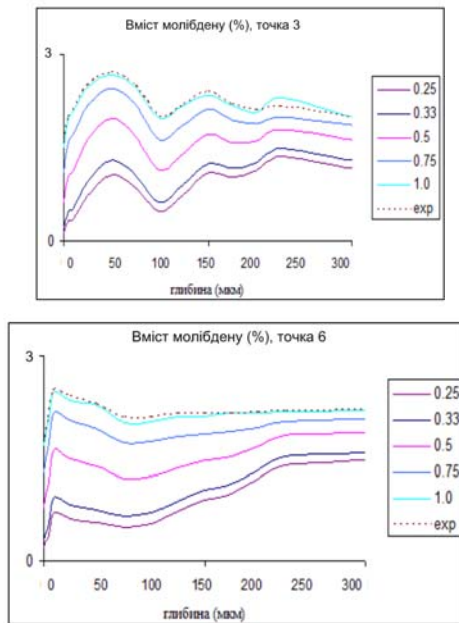


Рис. 12. Модельні концентраційні розподіли молибдену

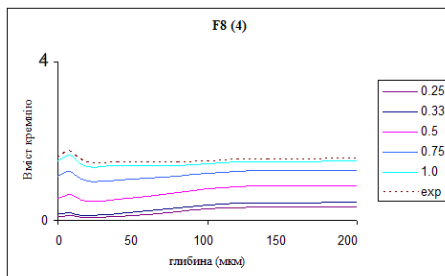
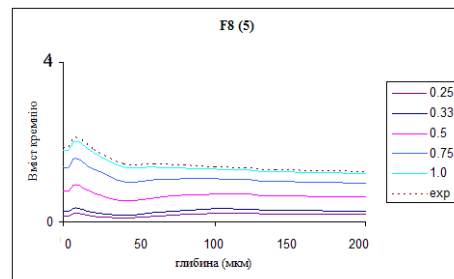
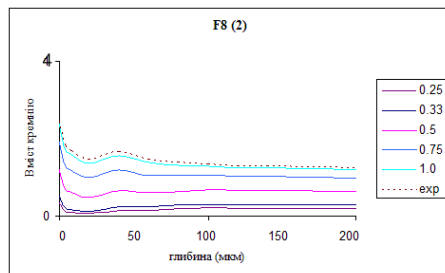
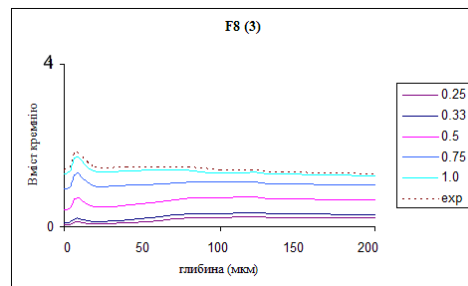
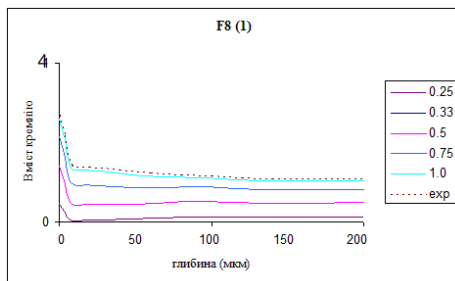


Рис. 13 Модельні концентраційні розподіли кремнію

У точках Т.1.-Т.3. зростання вмісту кремнію починається при експлуатації протягом більше 6 діб (0,33Т). На глибині, більший від 100 мкм (для Т.1.), більший 130 мкм (для Т.2.), більший 110 мкм (для Т.3.), більший 160 мкм (для Т.5.), більший 130 мкм (для Т.6.), концентрація кремнію практично стала. Як видно з рис. 12, профілі, одержані шляхом моделювання концентраційних розподілів кремнію добре узгоджуються з відповідним експериментальним профілем при наблизненні тривалості формування мультишару до періоду кінцевого завершення формування захисного мультишару наноплівки. При цьому максимальне відхилення не перевищує 2-5%, що дає змогу говорити про достовірність математичної моделі та

можливості практичного використання отриманих результатів. Результати моделювання можуть бути використані для підвищення ефективності експериментальних досліджень переносу в багатокомпонентних мультикомпозицях та дослідженні властивостей нових наноматеріалів.

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ РОБОТИ ТА ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі вирішено наукову задачу розробки методів та моделей процесів дифузійного перенесення для оцінювання технологічних параметрів багат шарових наноплівки, а також розроблено алгоритми комп'ютерної реалізації створених моделей. Найбільш важливі наукові та практичні результати, висновки полягають у наступному:

1. Побудовано математичні моделі фізико-технологічних процесів перенесення в багат шарових плівках декартового та циліндричного типу щодо різних конфігурацій багатокомпонентних середовищ.

2. Побудовано, з використанням інтегральних перетворень Фур'є, Фур'є-Бесселя та Конторовича-Лебедева для різних середовищ, аналітичні розв'язки досліджуваних математичних моделей

3. Розроблено математичну модель дифузійного переносу в багат шарових оксидних та Fe/Tb, Dy/Fe - магнітних наноплівках різної конфігурації з урахуванням взаємодій між окремими шарами плівок та отримано її аналітичний розв'язок.

4. Здійснено комп'ютерне моделювання та аналіз концентраційних залежностей дифундованих компонентів у шарах наноплівок як функцій від товщини для різних зрізів технологічних поверхонь у широкому діапазоні зміни конструктивних і режимних параметрів для їх подальшого використання для комплексної оцінки ресурсозбереження, зокрема показників корозійностійкості та жаростійкості оксидних плівок при виробництві тонких скловолокон.

5. Виконано перевірку на адекватність параметрів моделювання і фізичного експерименту. Встановлено, що максимальне значення величини відносної похибки експериментального і модельного розподілів концентрацій відповідних елементів не перевищує 9% для магнітних наноплівок та 5% для оксидних. Запропонована методика, застосована до розв'язання задачі процесу дифузії, може бути поширена на випадок більш складних багат шарових середовищ, так само як і для нелінійних систем, для яких коефіцієнт дифузії є функцією концентрації, що складатиме предмет подальших досліджень.

6. Створено програмне забезпечення для аналізу концентраційних розподілів дифундованих компонентів у різних шарах наноплівок магнітної та оксидної природи.

7. Встановлено суттєву відмінність концентрацій заліза і диспрозію на різній глибині середовища за рахунок різної інтенсивності їх дифузії в шарах. Зокрема, на глибині до 4 nm і від 10 до 12 nm спостерігається мінімальна концентрація заліза (до 20%) та максимальна концентрація диспрозію (80-95%), а на глибині 14-20 nm – заліза 65-85%, диспрозію 15-35%, що впливає на збільшення перпендикулярної магнітної анізотропії та намагнічуваності в цілому. При дослідженні оксидних плівок виявлено, що на межі сплав-повітря-розплав спостерігається 4% концентрація алюмінію при 0,5%-ому вмісту молібдену, що вказує на можливість

технологічного формування захисного антикорозійного мультишару покриття із наперед заданими параметрами.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Дейнека В.С. Математичне моделювання дифузійного перенесення в багат шарових наноплівках оксидної структури (дослідження зразка за технологією виробництва базальтового волокна) / В.С.Дейнека, М. Р. Петрик, П.М. Василюк, Н. В. Бабій // Вісник ТНТУ ім. І.Пулюя. – 2013. – Т.70, №2. – С. 219-231.
2. Петрик М. Р. Математичне моделювання концентраційних розподілів багат шарових наноплівок оксидної структури / М. Р. Петрик, П. М. Василюк, Н. В. Бабій, О. Ю. Петрик // Вісник ТНТУ ім. І.Пулюя. – 2013. – Т.69, №1. – С. 231-243.
3. Бабій Н. В. Математичне моделювання динамічних процесів дифузійного переносу в неоднорідних напівобмежених плоских магнітних середовищах. / Н. В. Бабій, О. Ю. Петрик, М. Р. Петрик // Вісник ТНТУ ім. І.Пулюя. – 2011. – Т.16, №2. – С. 187-195.
4. Бабій Н. В. Математичне моделювання масопереносу зі змінними коефіцієнтами дифузії для неоднорідних обмежених магнітних середовищ / Н. В. Бабій, М. Р. Петрик // Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія : Технічні науки. – Кам'янець-Подільський. – 2010. – Вип. 4 – С. 3-17.
5. Скакальська (Бабій) Н. В. Математичне моделювання процесу дифузії в багат шарових плівках (Fe/Dy) / Н. В. Скакальська (Бабій), М. Р. Петрик // Вісник Херсонського національного технічного університету. – 2008. – №1 (31). – С. 443-448.
6. Ленюк М. П. Узагальнені гібридні інтегральні перетворення типу Конторовича-Лебєдєва 1-го роду – Лежандра 2-го роду із спектральним параметром / М. П. Ленюк, Н. В. Скакальська (Бабій) // Вісник ТДТУ ім. І.Пулюя. – 2006. – Т.11, №1. – С. 163-172.
7. Скакальська (Бабій) Н. В. Інтегральне перетворення типу Конторовича-Лебєдєва із спектральним параметром на трискладовому сегменті / Н. В. Скакальська (Бабій) // Крайові задачі для диференціальних рівнянь. Зб. наук. праць. Випуск 7. – 2001. – С. 222-237.
8. Скакальська (Бабій) Н.В. Інтегральне перетворення типу Конторовича-Лебєдєва із спектральним параметром на тришаровій полярній вісі / Н. В. Скакальська (Бабій) // Крайові задачі для диференціальних рівнянь. Зб. наук. праць. Випуск 8 – 2002. – С. 134-150.
9. Скакальська (Бабій) Н.В. Інтегральне перетворення типу Конторовича-Лебєдєва із спектральним параметром на двоскладовому сегменті / Н. В. Скакальська (Бабій) // Вісник ТДТУ ім. І.Пулюя. – 2002. – Т.7, № 3. – С. 115-121.
10. Скакальська (Бабій) Н.В. Інтегральне перетворення типу Конторовича-Лебєдєва із спектральним параметром на двоскладовій полярній вісі / Н. В. Скакальська (Бабій) // Вісник ТДТУ ім. І.Пулюя. – 2003. – Т.8, № 2. – С. 127-136.
11. Петрик М.Р. Визначення дифузійних характеристик Al в багат шарових оксидних наноплівках / М. Р.Петрик, Н. В. Бабій // Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів : матеріали всеукр. наук. конф. – Рівне, 2013. – С.121

12. Бабій Н. В. Математичне та чисельне моделювання систем багатокomпонентного переносу в багатошарових плівках (Fe/Dy) / Н. В. Бабій, О. Ю. Петрик // Матеріали І науково-технічної конференції ТДТУ імені Івана Пулюя – Тернопіль. – 2011. – С. 53.
13. Ленюк М.П. Інтегральне перетворення типу Конторовича-Лебєдєва із спектральним параметром на кусково-однорідній полярній вісі / М.П. Ленюк, Н. В Скакальська (Бабій) // Матеріали ІХ Міжнародної Наукової Конференції імені академіка М. Кравчука. – К. – 2002. – С. 116-117.
14. Скакальська (Бабій) Н. В. Інтегральне перетворення типу Конторовича-Лебєдєва із спектральним параметром на кусково-однорідному сегменті / Н. В. Скакальська (Бабій) // Матеріали Х Міжнародної Наукової Конференції імені академіка М. Кравчука. – К. – 2004. – С. 233.
15. Скакальська (Бабій) Н. В. Інтегральне перетворення типу Конторовича-Лебєдєва із спектральним параметром на сегменті $[r_0, r]$ з n точками спряження / Н. В. Скакальська (Бабій) // Конференція молодих учених із сучасних проблем механіки і математики імені академіка Я. С. Підстригача. – м.Львів. – 2004. – С. 146-148.
16. Скакальська (Бабій) Н. В. Інтегральне перетворення типу Конторовича-Лебєдєва із спектральним параметром на полярній вісі $R \geq R_0 > 0$ з n точками спряження / Н. В. Скакальська (Бабій) // Міжнародна конференція, присвячена 125 річниці від дня народження Ганса Гана. – м. Чернівці. – 2004. – С.99.
17. Скакальська (Бабій) Н.В. Математичне та чисельне моделювання процесу дифузії в багатошарових плівках (Fe/Dy) / Н. В. Скакальська (Бабій), О. Ю. Петрик // Матеріали Всеукраїнської наукової конференції ТДТУ імені Івана Пулюя. – 2009. – С. 306.
18. Скакальська (Бабій) Н. В. Моделювання концентраційних профілів процесу дифузії в багатошарових плівках / Н. В. Скакальська (Бабій) // Матеріали 12 Наукової конференції ТДТУ імені Івана Пулюя. – 2008. – С.250.
19. Скакальська (Бабій) Н. В. Моделювання процесу дифузії методом гібридного диференціального оператора Лежандра-Бесселя-Бесселя в необмеженому кусково-однорідному середовищі з м'якими межами / Н. В. Скакальська (Бабій) // Міжнародна конференція, присвячена 60-річчю кафедри диференціальних рівнянь Чернівецького НУ ім. Ю Федьковича. – м.Чернівці. – 2006. – С.152-153.
20. Скакальська (Бабій) Н. В. Моделювання процесу дифузії методом гібридного диференціального оператора Лежандра-Бесселя-Бесселя в кусково-однорідному середовищі з м'якими межами / Н. В. Скакальська (Бабій) // Матеріали 10 наукової конференції ТДТУ імені Івана Пулюя. – 2006. – С. 298.
21. Скакальська (Бабій) Н. В. Моделювання процесу дифузії методом гібридного диференціального оператора (Конторовича-Лебєдєва)-Лежандра-Лежандра / Н. В. Скакальська (Бабій) // Матеріали 11 Наукової конференції ТДТУ імені Івана Пулюя. – 2007. – С. 280.

АНОТАЦІЯ

Бабій Н.В. Моделі процесів дифузійного перенесення і методи оцінювання технологічних параметрів в багатошарових наноплівках. – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи. – Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, Тернопіль, 2013.

У дисертаційній роботі вирішено важливе наукове завдання, яке полягає в розробці моделей процесів дифузійного перенесення в багатошарових наноплівках та комп'ютерній реалізації алгоритмів створених моделей.

Обґрунтовано розв'язність математичних моделей дифузійного перенесення в багатошарових оксидних, Fe/Tb, Dy/Fe - магнітних наноплівках різної конфігурації, які описуються складним гібридним диференціальним оператором, та отримано аналітичний розв'язок, що в узагальненому вигляді описує вплив фізичних чинників внутрішньої кінетики переносу.

Здійснено комп'ютерне моделювання та чисельні розрахунки полів розподілу концентрацій дифузійного переносу за розробленими математичними моделями. Проведено аналіз кінетичних профілів розподілів концентрацій для дифундованих шарів досліджуваних наномультимікомпозитів в широкому діапазоні змін конструктивних та режимних параметрів, досліджено функціональні залежності концентрацій дифундованих компонентів від конструктивних параметрів робочих каналів, товщин шарів та фізичних властивостей компонентів з метою оцінки параметрів для використання в матеріало- та ресурсозбереженні.

Ключові слова: математичне моделювання, наноплівка, інтегральні перетворення, комп'ютерне моделювання, дифузійне перенесення, концентраційні розподіли.

АННОТАЦИЯ

Бабий Н.В. Модели процессов диффузионного переноса и методы оценки технологических параметров в многослойных нанопленках. – Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 01.05.02 – математическое моделирование и вычислительные методы. Тернопольский национальный технический университет имени Ивана Пулюя, Тернополь, 2013.

В диссертационной работе решена важная научная задача, которая заключается в разработке моделей процессов диффузионного переноса в многослойных нанопленках и компьютерной реализации алгоритмов созданных моделей.

Выполнены математические постановки физико-технологических моделей переноса в магнитных многослойных средах декартового и цилиндрического типа относительно разных конфигураций многокомпонентных сред, проведено обоснование внедрения гибридных интегральных преобразований для моделирования массопереноса в ограниченных, полуограниченных и неограниченных однородных и многосложных средах. С использованием интегральных преобразований Фурье, Фурье-Бесселя, Конторовича-Лебедева для различных сред разработаны алгоритмические схемы построения точных аналитических решений.

Обоснованы решаемость математических моделей диффузионного переноса в многослойных оксидных, Fe/Tb, Dy/Fe - магнитных нанопленках различной

конфигурации, которые описываются сложным гибридным дифференциальным оператором, и получено аналитическое решение, которое в обобщенном виде описывает влияние физических факторов внутренней кинетики переноса.

Выполнено компьютерное моделирование и многочисленные расчеты полей распределения концентраций диффузионного переноса по разработанным математическим моделям.

Это дало возможность осуществить проверки на адекватность параметров моделирования и физического эксперимента, в частности максимальное значение величины относительной погрешности экспериментального и модельного распределений концентраций соответствующих элементов не превышает 5-7%.

Проведен анализ кинетических профилей распределений концентраций для дифундированных слоев исследуемых наномультислойных композиций в широком диапазоне изменений конструктивных и режимных параметров, исследованы функциональные зависимости концентраций дифундированных компонентов от конструктивных параметров рабочих каналов, толщин слоев и физических свойств компонентов с целью оценки параметров для использования в материало- и ресурсосбережении.

Аналитическое решение математической модели, которое получено в общем виде, позволяет исследовать параметры многослойных сред, с различными начальными условиями и разной толщиной.

Математическая методика, примененная к решению задачи процесса диффузии, может быть распространена на случай неплоских многослойных сред, так же как и для нелинейных систем, для которых коэффициент диффузии является функцией концентрации.

Ключевые слова: математическое моделирование, нанопленка, интегральные преобразования, компьютерное моделирование, диффузный перенос, концентрационные распределения.

ABSTRACT/ ANNOTATION

Babiy N.V. Models of diffusion transference processes and methods of evaluation of technological parameters in multilayer nanofilms. – Manuscript.

Dissertation for Academic Degree of Candidate of Engineering Sciences by specialty 01.05.02 – mathematical modelling and numerical methods. – Ternopil National Ivan Pulu'y Technical University, Ternopil, 2013.

The important scientific task of developing the models of diffusion transference processes in multilayer nanofilms and computer implementation of the created models algorithms has been fulfilled in the thesis.

Denouement of the mathematical diffusion transference models in the multilayer oxide, Fe / Tb, Dy / Fe - magnetic nanofilms of different configurations described by a complex hybrid differential operator has been founded and the analytical solution, which, in generalized way, describes the impact of internal transference kinetics physical factors has been obtained.

The computer modelling and numeral calculations of the fields of distributing the concentration of the diffusion transference according to the developed mathematical models have been carried out. The kinetic profiles of concentration distributions for diffused layers of the under investigation nanomulticomposites in a wide range of the changes of constructive and operational parameters have been analysed, the functional

dependence of concentrations of the diffused components on the constructive parameters of working channels, the layer thickness and physical properties of components in order to estimate the parameters for using in the materials and resources preservation have been investigated.

Key words: mathematical modelling, nanofilms, integral transformation and computer modelling, diffusion transference, concentration distributions.