

## МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ МАСОПЕРЕНОСЕННЯ В МУЛЬТИКОМПОЗИТНИХ ПЛІВКАХ

Перспективним напрямом розвитку в галузі ресурсозбереження є підвищення технологічних характеристик матеріалів за рахунок застосування наноплівочок та нанопокриттів, при цьому постає проблема аналізу та прогнозування дифузійних процесів перенесення в таких багатошарових покриттях.

На сьогодні широко застосовуються багатошарові оксиди, до складу яких входять такі компоненти, як Cr, Al, Si та інші. Проте особливу цікавість викликають сплави системи залізо-хром, що використовують як конструкційний матеріал в атомній енергетиці, при виробництві мінеральних волокон.

Задачі вивчення дифузії в багатошарових плівках вимагають розроблення нових методів моделювання і математичних моделей для опису явищ, що враховують наявність переходів (інтерфейсів) між суміжними шарами. Для опису фізичної задачі і математичної моделі процесу дифузійного переносу в багатошарових плівках розглянуто багатошарове середовище, що складається з  $n$  шарів (рис. 1).

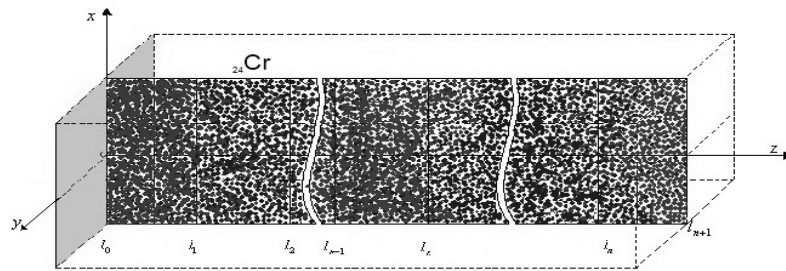


Рис. 1. Конструктивна схема багатошарових наноплівочок

Математична модель системи переносу описується у вигляді змішаної крайової задачі: побудувати розв'язок системи диференціальних рівнянь переносу параболічного типу для напівобмеженого  $n$ -шарового неоднорідного середовища при нестационарності масообміну на межах масообміну.

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

за початкових умов

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

крайових умов по змінній  $z$

$$\left[ \alpha_{11}^0 \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{11}^0 \right] u_1(t, x, z) \Big|_{z=l_0} = u_{l_0}(t, x); \quad \frac{\partial u_{n+1}(t, x, z)}{\partial z} \Big|_{z=\infty} = 0; \quad (3)$$

інтерфейсних умов по змінній  $z$

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

та крайових умов по змінній  $x$

$$\frac{\partial u_m(t, x, z)}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0; \quad \frac{\partial u_m(t, x, z)}{\partial x} \Big|_{x=h} = 0, \quad x \in (0, h), m = \overline{1, n+1}. \quad (5)$$