

МОДЕЛЮВАННЯ КОНЦЕНТРАЦІЙНИХ ПРОФІЛІВ ПРОЦЕСУ ДИФУЗІЇ В БАГАТОШАРОВИХ ПЛІВКАХ

Розглядається багатошарове середовище, яке складається з n подвійних шарів Fe/Dy. Технологія виготовлення такого середовища і процес дифузії між суміжними шарами приводять до хімічного змішування границь розділу. В припущенні, що процес дифузії атомів Fe і Dy є однією з головних причин змішування системи, концентраційні профілі для такої багатошарової системи можна одержати з рівнянь Фіка, в комбінації з крайовими умовами зовнішніх шарів і умовами контакту між послідовними шарами.

Запропонована нова математична модель процесу масоперенос шляхом дифузії в плоскому багатошаровому середовищі (Рис.1). Значення місцевої миттєвої концентрації $C_k(t, x, z)$ атомів Fe (або Dy) – визначається при $t \rightarrow \infty$ як розв'язок наступної системи диференціальних рівнянь другого порядку:

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

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 елементу, а \square_k^2 - коефіцієнт розсіювання маси.

Відповідні початкові умови мають вигляд:

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

Крайові умови по змінній z :

$$\left[\alpha_{11}^0 \frac{d}{dz} + \beta_{11}^0 \right] C_1(t, x, z) \Big|_{z=l_0} = C_{l_0}(t, x); \quad \frac{\partial C_{n+1}}{\partial z} \Big|_{z=\infty} = 0 \quad (3)$$

Інтерфейсні умови між суміжними шарами вздовж осі z :

$$\left[\alpha_{j1}^k \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j1}^k \right] C_k - \left[\alpha_{j2}^k \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j2}^k \right] C_{k+1} \Big|_{z=l_k} = 0, \quad j = \overline{1, 2}; k = \overline{1, n} \quad (4)$$

Умови неперервності для кожного з інтерфейсів:

$$[C_k - C_{k+1}]_{z=l_k} = 0; \quad \left[\frac{\partial}{\partial z} C_k - \frac{\partial}{\partial z} C_{k+1} \right]_{z=l_k} = 0; \quad k = \overline{1, n} \quad (5)$$

Крайові умови по змінній x :

$$\frac{\partial C_k}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0, \quad C_k \Big|_{x=R} = C_{1k}(t, z). \quad (6)$$

Точний аналітичний розв'язок задачі описаної рівняннями (1)-(6) можна знайти шляхом застосування інтегральних перетворень Фур'є. Такий розв'язок дозволяє визначити профілі коефіцієнтів дифузії для Fe і Dy з експериментальних даних.