УДК 519.6

DOI: 10.31673/2412-4338.2020.011241

Бабій Н.В., Саланда І.П. Кременецька обласна гуманітарно-педагогічна академія ім. Тараса Шевченка, Кременець

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ КОНЦЕНТРАЦІЙНИХ РОЗПОДІЛІВ FE/TB-МАГНІТНИХ БАГАТОСКЛАДОВИХ СЕРЕДОВИЩ

Важливим напрямом ресурсозбереження та підвищення технологічних характеристик матеріалів є застосування наноплівок та нанопокрить різного призначення. Останні є багатошаровими наносередовищами, що характеризуються неоднорідністю фізичних властивостей (механічних, дифузійних, електричних, магнітних, оптичних). Вони широко використовуються як конструкційні ресурсозберігаючі матеріали в напівпровідниковій та електронній промисловості (для нових поколінь запам'ятовуючих пристроїв та мікросхем), атомній енергетиці, як нанопокриття робочих органів обладнання для виробництва скловолоконних, мікропористих фільтрувальних матеріалів тощо. Це зумовило за останні роки ріст експериментальних та теоретичних досліджень дифузійної кінетики багатошарових нанокомпозитів, що дає можливість одержання на базі матеріалів з відомими властивостями нових матеріалів, створення яких пов'язане зі структурними змінами при агрегатуванні наношарів з різними властивостями. Зокрема, при агрегації (Fe/Tb)-магнітних багатошарових наноплівок виявлені значні ефекти магнетострикції (стискання зразків).

В даній роботі побудована математична модель дифузійного перенесення в багатоскладових Fe/Tb магнітних 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 проведена перевірка на адекватність моделі за результатами натурних експериментів. Здійснено комп'ютерне моделювання та аналіз концентраційних залежностей дифундованих компонентів у шарах наноплівок як функцій від товщини для різних зрізів технологічних поверхонь у діапазоні зміни конструктивних і режимних параметрів.

Ключові слова: перенесення, математична модель, наноплівки, мультишари, концентраційні розподіли, інтегральні перетворення

Babiy N., Salanda I. Ternopil Regional Council Taras Shevchenko Regional Humanitarian-Pedagogical Academy of Kremenets, Kremenets

MATHEMATICAL MODELING OF CONCENTRATION DISTRIBUTIONS OF FE/TB-MAGNETIC MULTILAYER MEDIA

An important area of resource conservation and enhancement of technological characteristics of materials is the use of nanofilms and nanopores for various purposes. The latter are multilayered nanoscale, characterized by the heterogeneity of physical properties (mechanical, diffusion, electrical, magnetic, optical). They are widely used as structural resource-saving materials in the semiconductor and electronics industries (for new generations of storage devices and circuits), nuclear power, as nanocaps for the working bodies of equipment for the production of fiberglass, microporous filter materials and the like. This has led in recent years to the growth of experimental and theoretical studies of the diffusion kinetics of multilayer nanocomposites, which makes it possible to obtain, on the basis of materials with known properties of new materials, the creation of which is related to structural changes in the aggregation of nanolayers with different properties. In particular, the aggregation of (Fe / Tb) -magnetic multilayer nanofilms revealed significant effects of magnetostriction (sample compression).

In this paper, a mathematical model of diffusion transfer in multi-constituent Fe / Tb magnetic nanofilms is constructed. Numerical diffusion transfer simulation was performed and model adequacy was verified by the results of field experiments. Computer simulation and analysis of the concentration dependences of the diffused components in the layers of the nanofilms as a function of the thickness for different sections of the technological surfaces in the range of change of design and mode parameters

© Бабій Н.В., Саланда І.П. 2020

Keywords: mass transfer, mathematical modeling, nano films, concentration distributions, integral transformation

Бабий Н.В., Саланда И.П. Кременецкая областная гуманитарно-педагогическая академия им. Тараса Шевченко, Кременец

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНЦЕНТРАЦИОННЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ Fe/Tb-МАГНИТНЫХ МНОГОСЛОЖНЫХ СРЕД

Важным направлением ресурсосбережения и повышения технологических характеристик материалов является применение нанопленок и нанопокрытий различного назначения. Последние являются многослойными наносредами, которые характеризуются неоднородностью физических свойств (механических, диффузных, электрических, магнитных, оптических). Они широко используются в качестве конструкционных ресурсосберегающих материалов в полупроводниковой и электронной промышленности (для новых поколений запоминающих устройств и микросхем), атомной энергетике, как нанопокрытия рабочих органов оборудования для производства стекловолоконных, микропористых фильтровальных материалов и т.д. Это обусловило в последние годы рост экспериментальных и теоретических исследований диффузионной кинетики многослойных нанокомпозитов, что дает возможность получения на базе материалов с известными свойствами новых материалов, создание которых связано со структурными изменениями при агрегатировании нанослоев с различными свойствами. В частности, при агрегации

(*Fe / Tb*)-магнитных многослойных нанопленок обнаружены значительные эффекты магнитострикции (сжатия образцов).

В данной работе построена математическая модель диффузионного переноса в многосложных Fe / Tb магнитных нанопленках. В частности, обоснована решаемость соответствующих задач и получены их аналитические решения, что в общем виде описывает влияние физических факторов внутренней кинетики переноса. Выполнено численное моделирование диффузионного переноса и проведена проверка на адекватность модели по результатам натурных экспериментов. Осуществлено компьютерное моделирование и анализ концентрационных зависимостей дифундированных компонентов в слоях нанопленок как функции от толщины для различных срезов технологических поверхностей в диапазоне изменения конструктивных и режимных параметров.

Ключевые слова: перенос, математическая модель, нанопленки, мультислои, концентрационные распределения, интегральные преобразования

1. Вступ.

На сьогодні важливим напрямом ресурсозбереження та підвищення технологічних характеристик матеріалів є застосування наноплівок та нанопокрить різного призначення. Останні є багатошаровими наносередовищами, що характеризуються неоднорідністю фізичних властивостей (механічних, дифузійних, електричних, магнітних, оптичних). Вони широко використовуються як конструкційні ресурсозберігаючі матеріали В напівпровідниковій та електронній промисловості (для нових поколінь запам'ятовуючих пристроїв та мікросхем), атомній енергетиці, як нанопокриття робочих органів обладнання для виробництва скловолоконних, мікропористих фільтрувальних матеріалів тощо. Це зумовило за останні роки ріст експериментальних та теоретичних досліджень дифузійної кінетики багатошарових нанокомпозитів, що дає можливість одержання на базі матеріалів з відомими властивостями нових матеріалів, створення яких пов'язане зі структурними змінами при агрегатуванні наношарів з різними властивостями. Зокрема, при агрегації (Fe/Tb)-магнітних багатошарових наноплівок виявлені значні ефекти магнетострикції (стискання зразків).

2. Аналіз останніх досліджень і публікацій. Дослідження процесів дифузійного переносу в неоднорідних середовищах на сьогоднішній день вимагає розвитку нових якісних

методів моделювання, що дозволяють описувати складні механізми системи інтерфейсних взаємодій між усіма складовими переносу та нестаціонарних режимів переносу на масообмінних поверхнях. Так, в роботі [1] сформульовано проблеми ідентифікації модельних параметрів консолідації фільтрації в стислих середовищах мікропористих частинок з використанням залишкових функціоналів з урахуванням змін загального потоку рідини на поверхні спостереження та отримані явні аналітичні вирази компонентів залишкових функціональних градієнтів для ідентифікації параметрів моделі градієнтними методами. В роботах [2, 3, 4], розглянуті задачі переносу для неоднорідних середовищ з урахуванням системи механізмів інтерфейсних взаємодій та нестаціонарних режимів переносу на масообмінних поверхнях.

В ряді досліджень дифузійного переносу отримані концентраційні залежності, що мають складний неоднорідний характер (рис. 1) і для побудови математичного опису концентраційних розподілів та параметрів внутрішньої кінетики (коефіцієнтів дифузії) потребують використання спеціалізованого комплексу диференціальних гібридних операторів.



Рис. 1. Профілі Fe-Tb концентрацій в багатошаровому дифузійному середовищі вздовж товщини зразка (Дані лабораторії фізики матеріалів Руанського університету, Франція)

3. Метою роботи є створення математичної моделі процесів дифузійного перенесення в багатошарових *магнітних* наноплівках для отримання концентраційних розподілів дифундованих компонент (Fe/Tb заліза та тербію) на кожному з шарів.

4. Результати дослідження. Розглянемо процес переносу в обмеженому неоднорідному п- інтерфейсному циліндричному середовищі з різними фізико-хімічними характеристиками і дифузійними властивостями на кожному шарі. Математична модель такого процесу описується у вигляді крайової задачі про побудову обмеженого в області

$$D_{n} = \frac{1}{2} (t, r, x): t > 0, r \hat{I} = \bigcup_{m=1}^{n+1} (R_{m-1}, R_{m}); R_{0} = 0; R_{n+1} \circ R < \Psi, x \hat{I} (0, L) \overset{\text{if}}{\underset{b}{\downarrow}}$$

розв'язку системи рівнянь переносу для обмеженого циліндричного *n*-складового неоднорідного (по координаті *r*) середовища

$$\frac{\partial u_m(t,r,x)}{\partial t} = D_m \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) u_m(t,z,x) + D_L \frac{\partial^2 u_m}{\partial x^2}$$
(1)

за початкових умов:

$$u_m(t,r,x)\Big|_{t=0} = g_m, \ r\hat{1} \ (R_{m-1},R_m); m = \overline{1,n+1}, R_0 = 0,$$
 (2)

крайових умов по радіальній змінній г

$$\frac{\partial}{\partial r}u_{1}(t,r,x) = 0, \qquad (3)$$

$$u_{n+1}(t,r,x)\Big|_{r=R_{n+1}} = q_{R}$$

умов спряження

$$\left(u_{k}(t,r) - u_{k+1}(t,r) \right) \Big|_{r=R_{k}} = 0(t);$$

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(U_{k} - \eta_{k} U_{k+1} \right) \Big|_{r=R_{k}} = 0, \ \eta_{k} = \frac{D_{k+1}}{D_{k}}, \ k = \overline{1,n}^{\cdot}$$

$$(4)$$

та крайових умов по змінній х

$$\frac{\partial u_m(t,r,x)}{\partial x}\Big|_{x=0} = 0, \quad u_m(t,r,x)\Big|_{x=L} = u_{L_m}.$$
(5)

До описаної задачі застосуємо послідовно інтегральні перетворення:

а) інтегральне перетворення cos-Фур'є на сегменті (0,L) по змінній х;

б) по змінній г інтегральне перетворення Ганкеля 1-го роду для *n*-складового обмеженого середовища:

- інтегральний оператор прямої дії

$$\mathbf{B}_{n}\left[u(r)\right] = \int_{0}^{R} u(t,r,x) V_{0}(r,\lambda_{j}) \sigma(r) dr = \sum_{m=1}^{n+1} \int_{R_{m-1}}^{R_{m}} u_{m}(t,r,x) V_{0_{m}}(r,\lambda_{j}) \sigma_{m} r dr \equiv q_{j}(t,\lambda_{j},x), \quad (6)$$

компоненти якого мають вигляд

$$\mathbf{B}_{0,n}[...] = \left[\int_{0}^{R_{1}} ... V_{0_{1}}(r,\lambda_{j}) \sigma_{1} r dr \int_{R_{1}}^{R_{2}} ... V_{0_{2}}(r,\lambda_{j}) \sigma_{2} r dr ... \right]$$
$$...\int_{R_{n-1}}^{R_{n}} ... V_{0_{n}}(r,\lambda_{j}) \sigma_{n} r dr \int_{R_{n}}^{R_{n+1}} ... V_{0_{n+1}}(r,\lambda_{j}) \sigma_{n+1} r dr$$

- інтегральний оператор зворотної дії

$$\mathbf{B}_{n}^{-1}\left[u_{j}\left(t,\lambda_{j},z\right)\right] = \sum_{j=1}^{\infty} u_{j}\left(t,\lambda_{j},x\right) \frac{V_{0}\left(r,\lambda_{j}\right)}{\left\|V_{0}\left(r,\lambda_{j}\right)\right\|^{2}},\tag{7}$$

,

компоненти якого мають вигляд

$$\mathbf{B}_{n}^{-1}[...] = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^{\infty} ... \frac{V_{0_{1}}(r, \lambda_{j})}{\left\|V_{0_{1}}(r, \lambda_{j})\right\|^{2}} \\ \sum_{j=1}^{\infty} ... \frac{V_{0_{2}}(r, \lambda_{j})}{\left\|V_{0_{2}}(r, \lambda_{j})\right\|^{2}} \\ \\ \sum_{j=1}^{\infty} ... \frac{V_{0_{n+1}}(r, \lambda_{j})}{\left\|V_{0_{n+1}}(r, \lambda_{j})\right\|^{2}} \end{bmatrix}$$

та основну тотожність інтегрального перетворення диференціального оператора Бесселя B_0 :

$$\mathbf{B}_{n}^{-1}\left[\left(\frac{\partial^{2}}{\partial r^{2}}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)\left[u_{m}(t,r,x)\right]\right]=-\lambda_{j}^{2}\cdot u_{j}(t,\lambda_{j},x)+R\cdot V_{0_{n+1}}\left(R_{n+1},\lambda_{j}\right)\cdot q_{R}(t,x).$$

Тут компоненти власної вектор-функції $V_0(r, \lambda_j)$, що відповідають власним числам $\lambda_i, \quad j = \overline{0, \infty}$:

$$V_{0_{1}}(r,\lambda_{j}) = \Delta_{0}^{n}(\lambda_{j})J_{0_{1}}(\lambda_{j}r),$$

$$V_{0_{m}}(r,\lambda_{j}) = \left(\prod_{m_{1}=m}^{n}\Delta_{0_{m_{1}+1}}(\lambda_{j})\right)[\omega_{m-1,2}(\lambda_{j})J_{0_{k}}(b_{kj}r) - \omega_{m-1,1}(\lambda_{j})N_{0_{k}}(b_{kj}r), k = \overline{2,n},$$

$$V_{0_{n+1}}(r,\lambda_{j}) = \omega_{n+1,2}(\lambda_{j})J_{0_{n+1}}(b_{n+1j}r) - \omega_{n+1,1}(\lambda_{j})N_{0_{n+1}}(b_{n+1j}r),$$

$$b_{mj}(\lambda_{j}) = \frac{\beta_{j}}{D_{R_{m}}}, m = \overline{1,n+1}.$$

 $\left\{\lambda_{j}\right\}_{1}^{\infty}$ – спектр власних чисел інтегрального перетворення, що є коренями трансцендентного рівняння

$$\delta_0^n(\lambda) \equiv v_{22}^{n+1,1}(b_{n+1}R_{n+1})\omega_{n,2}(\lambda) - v_{22}^{n+1,2}(b_{n+1}R_{n+1})\omega_{n,1}(\lambda) = 0,$$

Тут

$$\Delta_{0_{n}}(\lambda_{j}) = \prod_{i=1}^{n} \Delta_{0_{i+1}}(\lambda_{j}) = \prod_{i=1}^{n} \frac{2}{\pi R_{i} b_{i+1j}},$$

$$\omega_{mi}(\lambda_{j}) = \omega_{m-1,2}(\lambda_{j})\psi_{1i}^{m}(b_{mj}R_{m}, b_{m+1j}R_{m}) - \omega_{m-1,1}(\lambda_{j})\psi_{2i}^{m}(b_{mj}R_{m}, b_{m+1j}R_{m});$$

$$\omega_{1i}(\lambda_{j}) = \psi_{1i}^{1}(b_{1j}R_{1}, b_{2j}R_{2}), \quad i = \overline{1,2}$$

$$\omega_{2i}(\lambda_{j}) = \omega_{22}(\beta)\psi_{1i}^{2}(b_{2j}R_{2}, b_{3j}R_{2}) - \omega_{21}(\lambda)\psi_{2i}^{2}(b_{2j}R_{2}, b_{3j}R_{2})$$

$$\psi_{ji}^{m}(b_{m}R_{m}, b_{m+1j}R_{m}) = v_{11}^{mj}(b_{mj}R_{m})v_{22}^{mi}(b_{m+1j}R_{m}) - v_{21}^{mj}(b_{mj}R_{m})v_{12}^{mi}(b_{m+1j}R_{m});$$

$$v_{ip}^{m1}(b_{sj}R_m) \equiv (\alpha_{ip}^m \frac{d}{dr} + \beta_{ip}^m) J_0(b_{sj}r) \Big|_{r=R_m},$$

$$v_{ip}^{m2}(b_{sj}R_m) \equiv (\alpha_{ip}^m \frac{d}{dr} + \beta_{ij}^m) N_0(b_{sj}r) \Big|_{r=R_m}, s \in \{m, m+1\},$$

де $\alpha_{11}^m = 0, \alpha_{12}^m = 0, \beta_{11}^m = 1, \beta_{12}^m = 1, \alpha_{21}^m = 1, \alpha_{22}^m = \eta, \beta_{11}^m = 0, \beta_{12}^m = 0$ Компоненти вагової функції мають вигляд

$$\sigma_m = \frac{1}{D_{R_m}} \prod_{i=m}^n \frac{R_{i+1}}{R_i}, k = \overline{1, n-1}; \sigma_n = \frac{1}{D_{R_n}}; \sigma_{n+1} = \frac{1}{D_{R_{n+1}}}$$

Квадрат норми власної функції визначається формулою

$$\left\|V_0\left(r,\lambda_j\right)\right\|^2 = \sum_{m=1}^{n+1} \sum_{R_m-1}^{R_m} \left[V_{0_m}\left(r,\lambda_j\right)\right]^2 \sigma_m r dr \cdot$$

В результаті застосування інтегрального оператора до задачі (1)-(5) одержуємо задачу Коші:

$$\frac{d}{dt}u_{ij}(t,\lambda_j) = -\left(D_L\left(\frac{\pi i}{R}\right)^2 + \lambda_j^2\right)u_{ij}(t,\lambda_j) = \mathbf{F}_{ij}(t), \qquad (8)$$
$$u_{ij}(t)_{|t=0} = g_{ij}$$

Розв'язком задачі Коші (8) є функція

$$u_{ij}(t,\lambda_{j}) = e^{-\left(D_{L}\left(\frac{\pi i}{h}\right)^{2} + \lambda_{j}^{2}\right)t} g_{ij} + \int_{0}^{t} e^{-\left(D_{L}\left(\frac{\pi i}{h}\right)^{2} + \lambda_{j}^{2}\right)(t-\tau)} \mathbf{F}_{ij}(\tau) d\tau$$

$$\text{ge } \mathbf{F}_{ij}(t) = q_{R_{j}}(t) + u_{L_{i}}(t), \quad g_{ij} = \sum_{m=1}^{n+1} \int_{R_{m-1}}^{R_{m}} g_{m}(r) V_{0_{m}}(r,\lambda_{j}) \sigma_{m} r dr.$$

Повертаючись до оригіналів, з послідовним застосуванням інтегральних операторів зворотної дії, визначеними формулами (6), (7), отримаємо наступний розв'язок задачі (1)-(5) [5, 6].

$$u_{m}(t,r,x) = \int_{0}^{L} \sum_{m_{1}=0}^{n+1} \int_{R_{m_{1}-1}}^{R_{m_{1}}} Hh_{m,m_{1}}(t;r,\rho;x,\varsigma) g_{m_{1}}(\rho,\varsigma) \sigma_{m_{1}}\rho d\rho d\varsigma + \\ + \int_{0}^{t} \sum_{m_{1}=1}^{n+1} \int_{R_{m_{1}-1}}^{R_{m_{1}}} W_{L_{m,m_{1}}}(t-\tau;r,\rho;x,L) u_{L_{m_{1}}}(\tau,\rho) \sigma_{m_{1}}\rho d\rho d\tau + \\ + \int_{0}^{t} \int_{0}^{L} Wh_{n,m}(t-\tau;r,R;x,\varsigma) q_{R}(\tau,\xi) d\varsigma d\tau, \ m = \overline{1,n+1}$$
(9)

У цій формулі визначені функції впливу, що описуються наступними виразами:

- функції впливу крайової умови по радіальній координаті г (при r=R):

$$W_{R,m}(t;r,R;x,\zeta L) = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\varepsilon_i R}{L} e^{-\left(D_L\left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \lambda_j^2\right)t} \frac{V_{0_{m_i}}(R,\lambda_j)V_{0_m}(r,\lambda_j)}{\left\|V_0(r,\lambda_j)\right\|^2} \cos\left(\frac{i\pi}{L}x\right) \cos\left(\frac{i\pi}{L}x\right)$$

- функції впливу крайової умови по координаті х (при х=L):

$$W_{h_{m,n+1}}(t;r,\rho;x,L) = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \varepsilon_{i} \frac{i\pi}{L^{2}} (-1)^{i+1} e^{-\left(D_{L}\left(\frac{i\pi}{R}\right)^{2} + \lambda_{j}^{2}\right)t} \frac{V_{0_{m_{1}}}(\rho,\lambda_{j})V_{0_{m}}(r,\lambda_{j})}{\left\|V_{0}(r,\lambda_{j})\right\|^{2}} \cos\left(\frac{i\pi}{L}x\right)$$

- функція впливу початкових умов :

$$H h_{m,m_{1}}(t;r,\rho;x,\varsigma) = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\varepsilon_{i}}{L} e^{-\left(D_{L}\left(\frac{i\pi}{L}\right)^{2} + \lambda_{j}^{2}\right)^{t}} V_{0_{m_{1}}}(\rho,\lambda_{j}) V_{0_{m}}(r,\lambda_{j}) \cos\left(\frac{\pi i}{L}\varsigma\right) \cos\left(\frac{\pi i}{L}x\right),$$
$$m,m_{1} = 1, \overline{n+1}$$

5. Обговорення результатів проведеного дослідження. В результаті численного моделювання проведено аналіз модельних і експериментальних концентраційних профілів. На рис.2 та рис.3 подано профілі розподілів коефіцієнтів дифузії для Fe та Tb, відповідно, в багатошаровому Fe/Tb-середовищі як результат розв'язання зворотної задачі на основі аналітичного розв'язку математичної моделі та експериментальних даних [8, 9].



Рис. 2 Профіль коефіцієнту дифузії Fe, [nm²/s]



Рис. 3 Профіль коефіцієнту дифузії для Tb, [nm²/s]

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

Проведемо аналіз концентраційних полів (по компоненті Fe). На рис. 4 та рис. 5 подано порівняльну картину модельних і експериментальних профілів розподілів концентрації для Fe для різних швидкостей напилення [nm/s]. Як видно з наведених рисунків, модельні профілі досить добре узгоджуються з експериментальними даними. При швидкості напилення 0.00237 nm/s (рис. 4) та 0.0039 nm/s (рис. 6) спостерігаємо практично повне співпадання модельного та експериментально профілів концентрації.



Рис. 4. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для Fe (швидкість напилення 0.00237 nm/s)



 5. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для Fe (швидкість напилення 0.00137 nm/s)

Для швидкостей 0.00137 nm/s (рис. 5) та 0.0539 nm/s (рис. 7) спостерігаємо досить добре узгодження, відхилення модельного профілю від експериментального не перевищує 2 %. Для швидкостей 0.00837 nm/s (рис. 8) та 0.0137 nm/s (рис. 9) видно деякі відхилення модельного профілю від експериментального. Проте похибка знаходиться в межах 5 – 10 %.



Рис. 6. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для Fe (швидкість напилення 0.0039 nm/s)



Рис. 7. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для Fe (швидкість напилення 0.00537 nm/s)



Рис. 8. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для Fe (швидкість напилення 0.00837 nm/s)



Рис. 9. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для Fe (швидкість напилення 0.0137 nm/s)

За допомогою комп'ютерного моделювання отримано графічний розв'язок прямої задачі дифузійного переносу в багатошаровому Fe/Tb-середовищі щодо концентраційних полів (по компоненті Fe). Зокрема на рис. 10–12 подано модельні та експериментальні профілі розподілів концентрації Tb для різних швидкостей напилення [nm/s].



Рис. 10. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для Ть (швидкість напилення 0.00237 nm/s)



Рис. 11. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для Ть (швидкість напилення 0.00137 nm/s)



Рис. 12. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для Ть (швидкість напилення 0.00337 nm/s)

ISSN 2412-4338 Телекомунікаційні та інформаційні технології. 2020. № 1 (66)

Як, видно, з рисунків 10–12, модельні профілі досить добре узгоджуються з експериментальними даними. При швидкості напилення 0.00237 nm/s (рис. 10) та 0.00337 nm/s (рис. 12) спостерігаємо практично повне співпадіння модельного та експериментально профілів концентрації.

Висновки. Побудована математична модель дифузійного перенесення в неоднорідних мультикомпозитних середовищах, що описує процес формування мультишарів тонких магнітних наноплівок, що використовуються як термо- і агресивно захисні покриття робочих органів технологічного обладнання, що працює у високо агресивних середовищах. В результаті моделювання було отримано просторово-розподілені концентраційні розподіли структурних складових компонентів наноплівок (заліза, тербію) для різних технологічних зрізів наноплівки та часових тривалостей формування технологічного мультишару наноплівки. Результати можуть бути використані для підвищення ефективності експериментальних досліджень переносу в багатокомпонентних мультикомпозитах та дослідженні властивостей нових наноматеріалів.

Список використаної літератури

1. Петрик М.Р. Математичне моделювання дифузійного масопереносу зі спектральним параметром для п-інтерфейсних неоднорідних і нанопористих необмежених середовищ. Науковий вісник Чернівецького університету: зб. наук. пр. Чернівці: Рута, 2006. Вип. 288. С. 90 – 99.

2. Петрик М.Р., Василюк П.М., Михалик Д.М., Бабій Н.В., Петрик О.Ю. Моделі процесів дифузійного переносу і методи оцінювання параметрів в багатокомпозитних наноплівках. Монографія. Тернопіль: ТНТУ імені Івана Пулюя, 2015. 176 с.

3. Петрик М., Василюк М., Бабій Н. Математичне моделювання концентраційних розподілів багатошарових наноплівок оксидної структури. Вісник ТНТУ, 2013. Том 69. № 1. С. 231 – 243.

4. Дейнека В., Петрик М., Василюк П., Бабій Н. Математичне моделювання дифузійного перенесення в багатошарових наноплівках оксидної структури (дослідження зразка за технологією виробництва базальтового супертонкого волокна). Вісник ТНТУ, 2013. Том 70. № 2. С. 219 – 231.

5. Дейнека В., Петрик М., Василюк П., Бабій Н. Математичне моделювання масопереносу зі змінними коефіцієнтами дифузії для неоднорідних обмежених магнітних середовищ. Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Технічні науки, Кам'янець-Подільський, 2010. Вип. 4. С. 3 – 17.

6. Ленюк М.П., Петрик М.Р. Інтегральні перетворення Фур'є, Бесселя із спектральним параметром в задачах математичного моделювання масопереносу в неоднорідних середовищах. Київ: Наукова думка, 2000. 372 с.

7. Ленюк М.П., Петрик М.Р. Математичне моделювання дифузійного масопереносу зі спектральним параметром для п-інтерфейсних неоднорідних і нанопористих напівобмежених середовищ. Волинський математичний вісник. Серія прикладна математика, 2003. Вип. 1. С. 69 – 76.

8. Deineka V.S., Petryk M.R., Fraissard J. Identifying kinetic parameters of mass transfer in components of multicomponent heterogeneous nanoporous media of a competitive diffusion system. Cybernetics and System Analysis, Springer New York, 2011. Vol. 47, No. 5. P. 705 – 723.

9. Дейнека В.С., Петрик М.Р. Идентификация параметров неоднородных задач диффузии в наномультикомпозитах с использованием градиентных методов. Компьютерная математика, 2012. № 1. С. 41 – 51.

References

1. Petryk M.R. (2006) "Matematychne modeliuvannia dyfuziinoho masoperenosu zi spektralnym parametrom dlia n-interfeisnykh neodnoridnykh i nanoporystykh neobmezhenykh

seredovyshch". Naukovyi visnyk Chernivetskoho universytetu: zb. nauk. pr. Chernivtsi: Ruta, 288. P. 90 – 99.

2. Petryk M.R., Vasyliuk P.M., Mykhalyk D.M., Babii N.V. and Petryk O.Iu. (2015) "Modeli protsesiv dyfuziinoho perenosu i metody otsiniuvannia parametriv v bahatokompozytnykh nanoplivkakh". Monohrafiia. Ternopil: TNTU imeni Ivana Puliuia, 176 p.

3. Petryk M., Vasyliuk M. and Babii N. (2013) "Matematychne modeliuvannia kontsentratsiinykh rozpodiliv bahatosharovykh nanoplivok oksydnoi struktury". Visnyk TNTU, 2013, Vol. 69, No. 1. P. 231 – 243.

4. Deineka V., Petryk M., Vasyliuk P. and Babii N. (2013) "Matematychne modeliuvannia dyfuziinoho perenesennia v bahatosharovykh nanoplivkakh oksydnoi struktury (doslidzhennia zrazka za tekhnolohiieiu vyrobnytstva bazaltovoho supertonkoho volokna)". Visnyk TNTU, Vol. 70, No. 2. P. 219 – 231.

5. Deineka V., Petryk M., Vasyliuk P. and Babii N. (2010) "Matematychne modeliuvannia masoperenosu zi zminnymy koefitsiientamy dyfuzii dlia neodnoridnykh obmezhenykh mahnitnykh seredovyshch". Matematychne ta kompiuterne modeliuvannia. Seriia: Tekhnichni nauky, Kamianets-Podilskyi, No. 4. S. 3 - 17.

6. Leniuk M.P. and Petryk M.R. (2000) Intehralni peretvorennia Furie, Besselia iz spektralnym parametrom v zadachakh matematychnoho modeliuvannia masoperenosu v neodnoridnykh seredovyshchakh. Kyiv, Naukova dumka, 2000. 372 p.

7. Leniuk M.P. and Petryk M.R. (2003) "Matematychne modeliuvannia dyfuziinoho masoperenosu zi spektralnym parametrom dlia n-interfeisnykh neodnoridnykh i nanoporystykh napivobmezhenykh seredovyshch". Volynskyi matematychnyi visnyk. Seriia prykladna matematyka, Vol. 1. P. 69 – 76.

8. Deineka V.S., Petryk M.R. and Fraissard J. (2011) "Identifying kinetic parameters of mass transfer in components of multicomponent heterogeneous nanoporous media of a competitive diffusion system". Cybernetics and System Analysis, Springer New York, Vol. 47, No. 5. P. 705 – 723.

9 Dejneka V.S. and Petrik M.R (2012) "Identifikaciya parametrov neodnorodnyh zadach diffuzii v nanomultikompozitah s ispolzovaniem gradientnyh metodov". Kompyuternaya matematika, No. 1. P. 41 - 51.