

**МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДИФУЗІЇ ДОМІШКОВИХ КОМПОНЕНТ ЗА ЇХ КАСКАДНОГО РОЗПАДУ**

\*Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України, Львів, Україна

\*\*Інститут хімії та хімічних технологій Національного університету «Львівська політехніка», Львів, Україна

**Анотація.** Досліджено процеси дифузії домішок за їх каскадного розпаду у багатокомпонентному тілі. Для конкретної схеми розпаду сформульовані зв'язані крайові задачі дифузії каскадного типу, розв'язки яких отримані з використанням функцій Гріна. Створено програмні модулі та проведено числовий аналіз функцій концентрацій розпадних частинок та потоків маси розпадних речовин. Показано, що функція концентрації речовини, яка поступає з поверхні шару, на 0-му кроці розпаду є монотонно спадною на всьому проміжку, зростаючи з часом, доки не вийде на ustalений режим. У випадку розподілів концентрації на подальших етапах розпаду спостерігається приповерхневе зростання функції, максимум якої з часом зростає і зсувається у гліб тіла.

**Ключові слова:** дифузія, каскадний розпад, математична модель, функція Гріна, пакет програм.

**Аннотация.** Исследованы процессы диффузии примесей при их каскадном распаде в многокомпонентном теле. Для конкретной схемы распада сформулированы связанные краевые задачи диффузии каскадного типа, решения которых получены с использованием функций Грина. Созданы программные модули и проведен числовой анализ функций концентраций распадающихся частиц и потоков массы распадающихся веществ. Показано, что функция концентрации вещества, которое поступает с поверхности слоя, на 0-ом шаге распада – монотонно убывающая функция, возрастающая со временем, пока не выйдет на стационарный режим. В случае распределений концентраций на последующих этапах распада наблюдается приповерхностное возрастание функции, максимум которой со временем растет и сдвигается в глубину тела.

**Ключевые слова:** диффузия, каскадный распад, математическая модель, функция Грина, пакет программ.

**Abstract.** Admixture diffusion processes with their cascade decay in a multicomponent body is investigated. For the specific scheme of decay, coupled initial-boundary value problems of diffusion of the cascade type are formulated, their solutions using Green functions are obtained. Software modules are developed and numerical analysis of functions of both decaying particle concentration and mass flows of decaying substances is carried out. It is shown that on the zero stage of decay the function of substance concentration incoming from the layer surface is a monotonically decreasing function those time-increases till gets on the steady-state regime. In the case of concentration distributions on next stages of decay, near-surface increase of the function is observed; its maximum grows up and shifts to depth of the body.

**Keywords:** diffusion, cascade decay, mathematical model, Green function, software.

**1. Вступ**

Відомо, що процес дифузії суттєво впливає на функціональні властивості матеріалів, які використовуються у різних галузях техніки. Так, часто дифузія складових компонент тіла визначає механізм та кінетику хімічних реакцій і фізико-хімічних процесів і явищ, зокрема, таких як конденсація, кристалізація, розчинення та набухання, технології спікання порошків, хіміко-термічної обробки металів (азотування і цементування сталей), гомогенізації сплавів тощо [1–6]. Крім цього, оцінка ролі процесів дифузії є важливою при створенні матеріалів із заданими властивостями, які повинні підтримуватися на протязі тривалого часу в реальних умовах експлуатації. У певних випадках необхідно враховувати деградацію технологічних субстанцій.

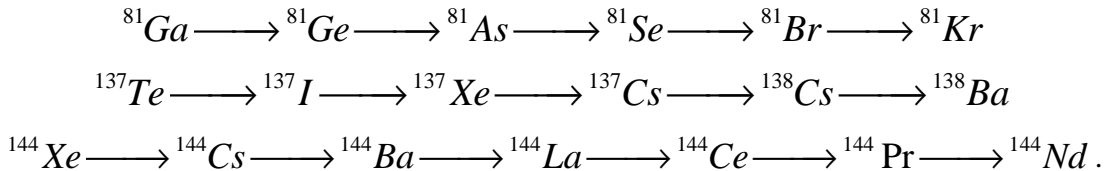
Окремою важливою проблемою є прогнозування поширення розпадних токсичних забруднень у природному середовищі дифузійним шляхом. Прикладом таких агресивних

субстанцій можуть бути пестициди, гербіциди, інсектициди, а також радіонукліди. Так, наприклад, схема розпаду дихлордифенілтрихлорметилметану (ДДТ) є такою:



тут ДДД – дихлордифенілдіхлоретан, ДДЕ – дихлордифенілдіхлоретилен. Період піврозпаду ДДТ – 12–16 років [7].

У випадку радіонуклідів відомі схеми розпаду [8], наприклад:



Причому у результаті розпаду радіоактивних речовин можуть виникати як більш, так і менш токсичні речовини. Так, у результаті розпаду плутонію-241 з періодом піврозпаду 14,4 років утворюється дуже токсичний америцій-241 з періодом піврозпаду 432,6 років. В той же час результатом розпаду дуже шкідливого стронцію-90 з періодом піврозпаду 28,8 років є радіоактивний ітрій-90 з періодом піврозпаду 64 години.

Зазначимо, що в літературі такі розпади субстанцій часто називають каскадними [8]. Ці розпади матеріальних компонент сформалізуємо у вигляді схеми (рис. 1):

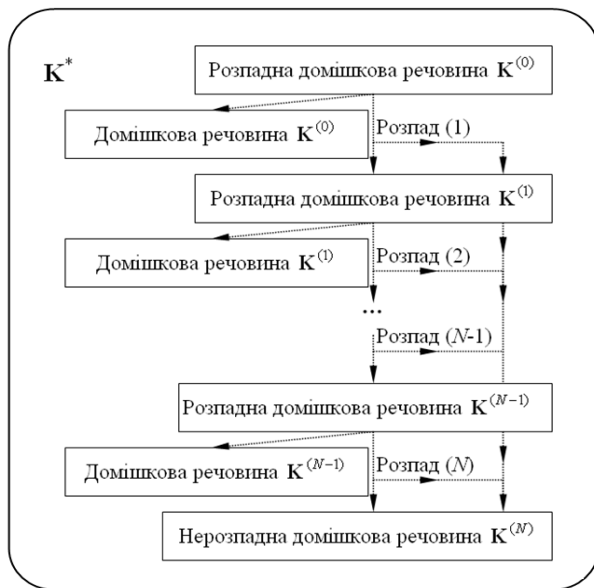


Рис. 1. Схема розпаду дифундуючих речовин

у тіло  $K^*$  поступає домішкова речовина  $K^{(0)}$ , частина якої розпадається і утворюються речовини  $K^{(1)}$  і  $K^{(N)}$ . Частинки речовини  $K^{(N)}$  є нерозпадними (нешкідливими). Субстанція  $K^{(1)}$  теж розпадається і утворює речовину  $K^{(2)}$ , яка у свою чергу розпадається, і нерозпадні частинки, які відносимо до  $K^{(N)}$ , і т.п.

У роботі вивчається процес дифузії домішкових речовин за їх каскадного розпаду в багатокомпонентному тілі, отримано формули для концентрації та потоків маси розпадних домішкових компонент, що мігрують у шарі, і проведено числовий аналіз.

## 2. Математична модель дифузії з урахуванням каскадного розпаду речовини

При отриманні рівнянь дифузії домішки, яка супроводжується каскадним розпадом частинок, використовувався континуально-термодинамічний підхід механіки твердих розчинів [9]. Кожній компоненті розчину ставиться у відповідність континуум  $K^{(j)}$ , з допомогою якого описуються кінематичні та деформаційні властивості компонент, а також формулюються відповідні балансові співвідношення, які відображають закони збереження маси, імпульсу, енергії та ентропії. З використанням концепції локальної термодинамічної рівноваги будуються рівняння стану та кінетичні рівняння. Вибравши як розв'язуючі функції концентрації домішкових компонент, вектор переміщення, густину та температуру тіла, сформульовано ключову систему рівнянь, яка в подальшому лінеаризується.

У даному випадку деформація середовища і теплові процеси не розглядаються, і за ізотермічних умов, нехтуючи конвективними складовими масоперенесення та деформацією в лінійному наближенні [9], отримуємо такі рівняння дифузії за каскадного розпаду мігруючих частинок (рис. 1):

для кроку розпаду  $i = 0$ :

$$\frac{\partial c^{(0)}}{\partial t} = D^{(0)} \Delta c^{(0)} - [\lambda^{(1)} + \lambda^{(0N)}] c^{(0)};$$

для кроків розпаду  $i = \overline{1, N-1}$ :

$$\frac{\partial c^{(i)}}{\partial t} = D^{(i)} \Delta c^{(i)} + \lambda^{(i-1)} c^{(i-1)} - [\lambda^{(i+1)} + \lambda^{(iN)}] c^{(i)};$$

для кроку  $i = N$ :

$$\frac{\partial c^{(N)}}{\partial t} = D^{(N)} \Delta c^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \lambda^{(iN)} c^{(i)}, \quad (1)$$

де  $c^{(i)}$  – концентрація домішкових частинок  $K^{(i)}$  ( $i = \overline{0, N}$ ),  $D^{(i)}$  – коефіцієнт дифузії речовини  $K^{(i)}$  ( $i = \overline{1, N}$ ) на  $i$ -му кроці розпаду,  $\lambda^{(i)}$  – коефіцієнт інтенсивності розпаду речовини  $K^{(i-1)}$  ( $i = \overline{1, N}$ ),  $\lambda^{(iN)}$  – коефіцієнт, який визначає частку нерозпадної (або нешкідливої) речовини, що утворилася внаслідок розпаду на  $i$ -му кроці  $K^{(i)}$  ( $i = \overline{1, N-1}$ ).

Природними безрозмірними змінними, що дозволяють проаналізувати вплив розпаду на процес дифузії, є такі [10]:

$$\xi_\alpha = (\lambda/D^{(0)})^{1/2} x_\alpha, \quad t = \lambda\tau, \quad \lambda = \lambda^{(1)} + \lambda^{(0N)}, \quad \alpha = \overline{1, 3}. \quad (2)$$

Для одновимірного за просторовою координатою випадку рівняння дифузії (1) у безрозмірних змінних (2) мають вигляд:

для кроку розпаду  $i = 0$ :

$$\frac{\partial c^{(0)}}{\partial \tau} = d^{(0)} \frac{\partial^2 c^{(0)}}{\partial \xi^2} - a^{(0)} c^{(0)}; \quad (3a)$$

для кроку розпаду  $i = \overline{1, N-1}$ :

$$\frac{\partial c^{(i)}}{\partial \tau} = d^{(i)} \frac{\partial^2 c^{(i)}}{\partial \xi^2} + a_\lambda^{(i-1)} c^{(i-1)} - a^{(i)} c^{(i)}; \quad (3б)$$

для  $i = N$ :

$$\frac{\partial c^{(N)}}{\partial \tau} = d^{(N)} \frac{\partial^2 c^{(N)}}{\partial \xi^2} + \sum_{i=0}^{N-1} a_\lambda^{(iN)} c^{(i)}. \quad (3в)$$

Прийmemo нульові початкові умови:

$$c^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} = 0, \quad i = \overline{0; N} \quad (4)$$

і такі граничні умови:

$$c^{(0)}(\xi, \tau)\Big|_{\xi=0} = c_0 \equiv const, \quad c^{(0)}(\xi, \tau)\Big|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad (5a)$$

$$c^{(i)}(\xi, \tau)\Big|_{\xi=0} = 0, \quad c^{(i)}(\xi, \tau)\Big|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad i = \overline{1; N}. \quad (5b)$$

Тут  $d^{(i)} = D^{(i)}/D^{(0)}$  ( $i = \overline{0; N}$ ),  $a_\lambda^{(i)} = \lambda^{(i-1)}/\lambda$  ( $i = \overline{0; N}$ ),  $a_\lambda^{(iN)} = \lambda^{(iN)}/\lambda$  ( $i = \overline{0; N-1}$ ),  $a^{(i)} = (\lambda^{(i+1)} + \lambda^{(iN)})/\lambda$  ( $i = \overline{0; N-1}$ ).

Безрозмірні коефіцієнти інтенсивності розпаду у рівняннях (3) повинні підпорядковуватись обмеженням:  $a_\lambda^{(i-1)} \leq a^{(0)}$ ,  $a^{(i-1)} \leq a_\lambda^{(i-1)}$ .

### 3. Побудова розв'язку крайових задач каскадного типу

Розв'язок крайової задачі (3a), (4), (5a) для  $i=0$  знайдений з допомогою інтегральних перетворень Лапласа за часом і  $\sin$ -перетворення Фур'є за просторовою координатою [11]. В результаті маємо

$$\frac{1}{c_0} c^{(0)}(\xi, \tau) = 1 - \frac{\xi}{\xi_0} + \frac{a^{(0)}}{d^{(0)}} \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh } \eta(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \eta \xi_0} \right] - \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} y_k \frac{\sin y_k \xi}{y_k^2 + \eta^2} e^{-(d^{(0)} y_k^2 + a^{(0)})\tau}, \quad (6)$$

де  $\eta = \sqrt{a^{(0)}/d^{(0)}}$ ,  $y_k = k\pi/\xi_0$ .

Зазначимо, що врахування розпаду дифундуючої речовини призводить до появи нелінійного доданку типу  $\text{sh } \eta(\xi_0 - \xi)/\text{sh } \eta \xi_0$  в асимптотиці функції концентрації. При цьому, якщо покласти  $a^{(0)} = 0$  (нерозпадна речовина), то одержимо відомий вираз [10].

У загальному випадку для  $i = 1, \dots, N-1$  розв'язок крайових задач (3b), (4), (5b) подамо через функцію Гріна:

$$c^{(i)}(\xi, \tau) = a_\lambda^{(i)} \int_0^\tau \int_0^{\xi_0} G^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') c^{(i-1)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (7)$$

де  $G^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$  - функція Гріна задачі (3b), (4), (5b) для  $i = 2, \dots, N-1$ , тобто є розв'язком відповідної задачі дифузії на  $i$ -му кроці розпаду з точкового джерела на  $i$ -му кроці розпаду за нульових крайових умов, а саме:

$$\frac{\partial G^{(i)}}{\partial \tau} - d^{(i)} \frac{\partial^2 G^{(i)}}{\partial \xi^2} + a^{(i)} G^{(i)} = \delta(\tau - \tau')(\xi - \xi'); \quad (8)$$

$$G^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')\Big|_{\tau=0} = G^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')\Big|_{\xi=0} = G^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')\Big|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad i = \overline{2, N-1}. \quad (9)$$

Після застосування оберненого  $\sin$ -перетворення Фур'є отримаємо формулу для визначення функції Гріна на  $i$ -му кроці розпаду ( $i = 2, \dots, N-1$ ):

$$G^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') = \theta(\tau - \tau') \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \sin(y_n \xi) \sin(y_n \xi') e^{-(d^{(i)} y_n^2 + a^{(i)}) (\tau - \tau')}. \quad (10)$$

Тут  $\theta(\tau)$  – одинична функція Хевісайда. Отже, знайшовши функцію Гріна за формулою (10) і визначивши концентрацію розпадних домішкових частинок на кроці  $i-1$ , за співвідношенням (7) знайдемо концентрацію розпадної речовини на  $i$  етапі.

Для випадку  $i = N$  (нерозпадні або нешкідливі домішки) процес масоперенесення описується крайовою задачею (3в), (4), (5б). Її розв’язок також подамо через відповідну функцію Гріна аналогічно до (7), тобто:

$$c^{(N)}(\xi, \tau) = \int_0^\tau \int_0^{\xi_0} G^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \sum_{i=0}^{N-1} a_\lambda^{(iN)} c^{(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (11)$$

де  $G^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$  – функція Гріна задачі (3в), (4), (5б) і задовольняє відповідну крайову задачу з точковим джерелом:

$$\frac{\partial G^{(N)}}{\partial \tau} - d^{(N)} \frac{\partial^2 G^{(N)}}{\partial \xi^2} = \delta(\tau - \tau')(\xi - \xi'); \quad (12)$$

$$G^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\tau=0} = G^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\xi=0} = G^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\xi=\xi_0} = 0. \quad (13)$$

Розв’язок крайової задачі (12), (13) має вигляд

$$G^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') = \theta(\tau - \tau') \sum_{n=1}^{\infty} \sin(y_n \xi) \sin(y_n \xi') e^{-d_{ef}^{(N)} y_n^2 (\tau - \tau')}. \quad (14)$$

Тоді, послідовно визначивши концентрації  $c^{(0)}(\xi, \tau)$ ,  $c^{(1)}(\xi, \tau)$ , ...,  $c^{(N-1)}(\xi, \tau)$ , за формулою (11) з урахуванням виразу (14) знайдемо концентрацію нерозпадних або нешкідливих домішкових частинок у тілі.

#### 4. Схема модуля пакета програми. Числовий аналіз

На основі формул (6), (7), (11), а також розв’язків крайових задач (8), (9) і (12), (13) розроблено пакет програм для комп’ютерного моделювання процесів дифузії за каскадного розпаду мігруючих частинок. Схему алгоритму модуля пакета для розрахунку концентрацій розпадних мігруючих частинок для всіх кроків  $i = 0, N$  наведено на рис. 2.

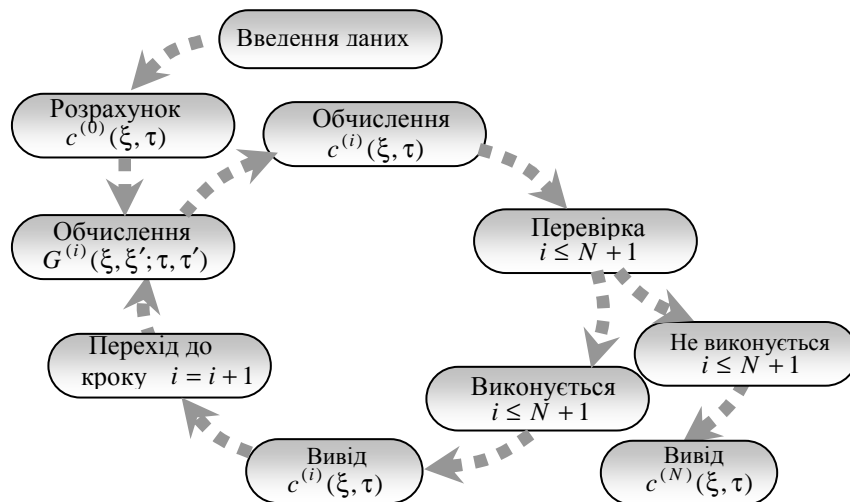


Рис. 2. Схема алгоритму модуля пакета для розрахунку концентрацій домішкових речовин за каскадного розпаду частинок

Зазначимо, що підінтегральні функції (7) і (11) не мають стрибків і нескінченностей, і інтегрування відбувається по обмеженій області. Приклади поверхонь, які утворює функція Гріна (8) на кроці  $i=1$ , наведені на рис. 3 в точках  $(\xi, \tau) = (0,125; 0,125)$  (рис. 3а),  $(\xi, \tau) = (1,375; 5,375)$  (рис. 3б),  $(\xi, \tau) = (2,375; 9,875)$  (рис. 3в) при  $d^{(1)} = 0,3$ ,  $a^{(1)} = 0,2$ ,  $a_{\lambda e} = 0,8$ ,  $\xi_0 = 10$ .

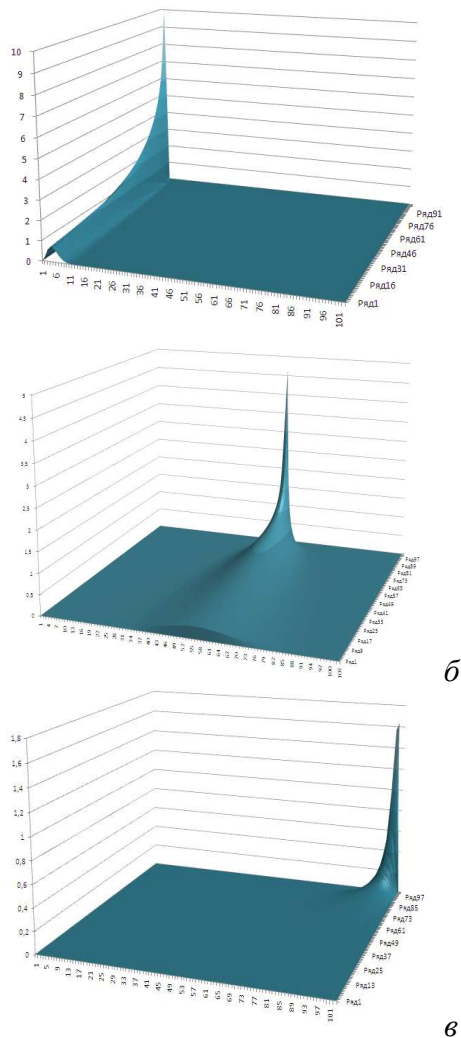


Рис. 3. Функція Гріна

Вздовж осі абсцис відкладена просторова координата  $\xi'$ , вздовж осі ординат – часова  $\tau'$ . Підінтегральна функція (7) має подібні розподіли, незначно відрізняючись характером спадання.

На рис. 4–8 наведено характерні розподіли концентрацій домішкової речовини за товщиною та поверхні  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  на площині  $O\xi\tau$ . За базові параметри прийнято  $a^{(1)} = 0,2$ ,  $a_{\lambda}^{(0)} = 0,8$ ,  $\xi_0 = 10$ , при цьому  $d^{(0)} \equiv 1$ ,  $a^{(0)} \equiv 1$ . На рис. 4 показано розподіли концентрацій розпадних частинок на кроці  $i=0$ , обчисленого за формулою (6),  $c^{(0)}(\xi, \tau)/c_0$  (рис. 4а) і на кроці  $i=1$ , розрахованого за формулою (7),  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  (рис. 4б) в різні моменти безрозмірного часу. Криві 1–6 на рис. 4а відповідають моментам  $\tau = 0,05; 0,125; 0,6; 0,9; 2,5; 5$ , криві 1-8 на рис. 4 б –  $\tau = 0,125; 0,6; 0,9; 2,5; 18; 25; 300; 400$ . На рис. 5 наведені порівняльні розподіли концентрації  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  для різних значень відношення коефіцієнтів дифузії  $d^{(1)} = 0,01; 0,1; 0,5; 2; 5; 10$  (криві 1–6), а на рис. 6 – для різних значень  $a^{(1)} = 0,1; 0,2; 0,4; 0,5; 0,7$  в момент часу  $\tau = 0,125$ .

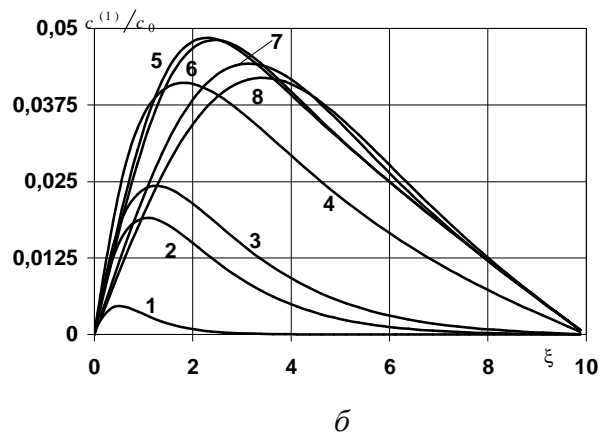
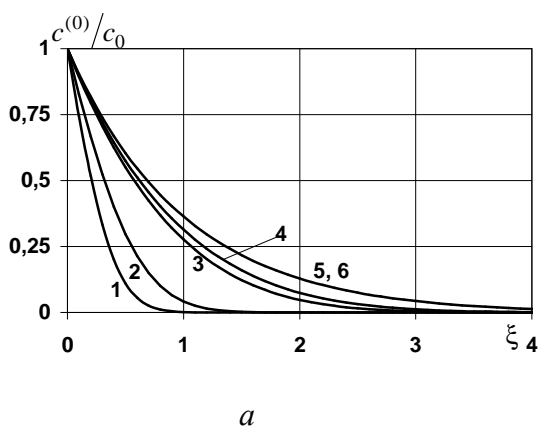


Рис. 4. Розподіли концентрацій  $c^{(0)}(\xi, \tau)/c_0$  (а) та  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  (б) в різні моменти безрозмірного часу

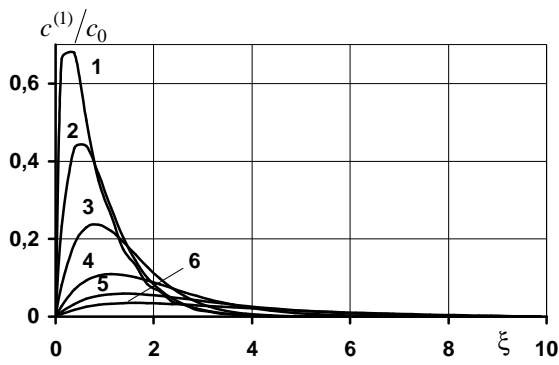


Рис. 5. Розподіли концентрації  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  для різних значень відношення коефіцієнтів дифузії  $d^{(1)}$

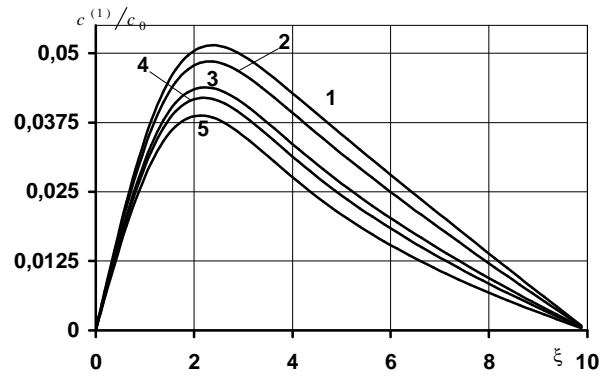


Рис. 6. Розподіли концентрації  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  для різних значень  $a^{(1)}$

На рис. 7 показані графіки функції  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  в залежності від значення безрозмірного коефіцієнта  $a_{\lambda}^{(0)}$ , який визначає частку речовини  $K^{(0)}$ , яка розпалась і потрапила на крок  $i=1$ . Тут криві 1–5 відповідають значенням  $a_{\lambda e} = 0,25; 0,4; 0,6; 0,8; 0,95$  для малих (рис. 7 а) і великих (рис. 7 б) значень відношень коефіцієнтів дифузії.

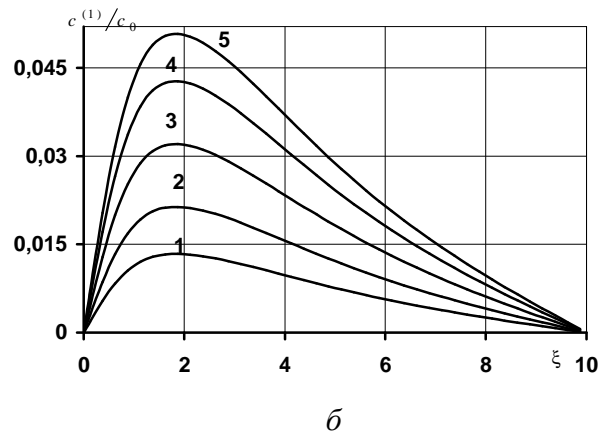
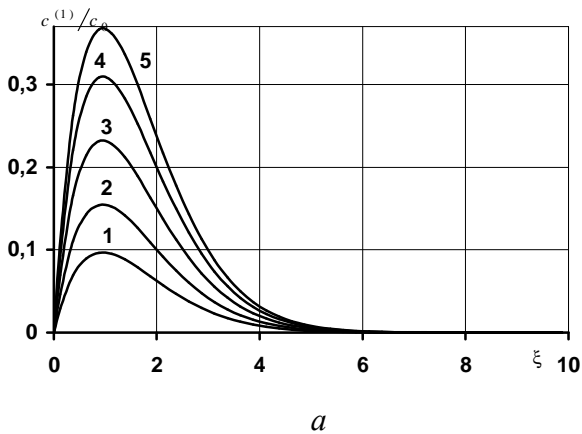


Рис. 7. Розподіли концентрації  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  для різних значень  $a_{\lambda}^{(0)}$  при  $d^{(1)} = 0,5$  (а) та  $d^{(1)} = 10$  (б)

Зауважимо, що функція концентрації  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  є монотонно спадною на всьому проміжку (рис. 4а), зростаючи з часом, доки не вийде на усталений режим (криві 5, 6 на рис. 4а). Стационарний розподіл концентрації на 0-му кроці розпаду суттєво відрізняється від лінійного, що характерно для нерозпадної мігруючої речовини. У випадку розподілів  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  спостерігається приповерхнєве зростання функції (крива 1 на рис. 4б), максимум якої з часом зростає і зсувається у глиб тіла (криві 1–5 на рис. 4б). З подальшим збільшенням часу протікання процесу дифузії концентрація  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  зменшується, що обумовлюється розпадом вже речовини  $K^{(1)}$  (криві 6–8 на рис. 4б). При цьому максимум функції продовжує зсуватись у глиб тіла. Така поведінка функції  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  характерна до її виходу на усталений режим (безрозмірний час  $\tau = 400$ , крива 8 на рис. 4б, є близьким до стационарного). Відзначимо, що часи виходу на стационарний режим функцій концентрацій на 0-му і 1-му кроках розпаду різняться на 2 порядки.

Коефіцієнт дифузії речовини  $K^{(1)}$  може бути як більшим, так і меншим за коефіцієнт дифузії домішки  $K^{(0)}$ , тобто можливі випадки  $d^{(1)} > 1$  і  $d^{(1)} < 1$ . При цьому, чим менше відношення коефіцієнтів дифузії  $d^{(1)}$ , тим більшого максимуму досягає концентрація частинок на кроці  $i = 1$  (крива 1 на рис. 5а) і тим ближче до поверхні шару, де діє джерело маси речовини  $K^{(0)}$ , відбувається локалізація розпадних частинок речовини  $K^{(1)}$ . Зміна безрозмірних коефіцієнтів розпаду  $a_\lambda^{(0)}$ ,  $a^{(1)}$  впливає тільки на значення функції концентрації  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$ , не змінюючи її поведінку (рис. 6, 7). При цьому її значення зростають пропорційно до збільшення коефіцієнта  $a_\lambda^{(0)}$  (рис. 7) і зменшуються при зростанні коефіцієнта  $a^{(1)}$ , який характеризує інтенсивність розпаду речовини  $K^{(1)}$  по відношенню до інтенсивності розпаду частинок  $K^{(0)}$  (рис. 6).

На рис. 8 ілюструються характерні 3D-розподіли концентрації  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  на площині  $O\xi\tau$  на малому  $\tau \in [0; 10]$  і великому  $[0; 200]$  часових проміжках протікання процесу розпадної дифузії домішки  $K^{(1)}$ , джерелом якої є розпад речовини  $K^{(0)}$ .

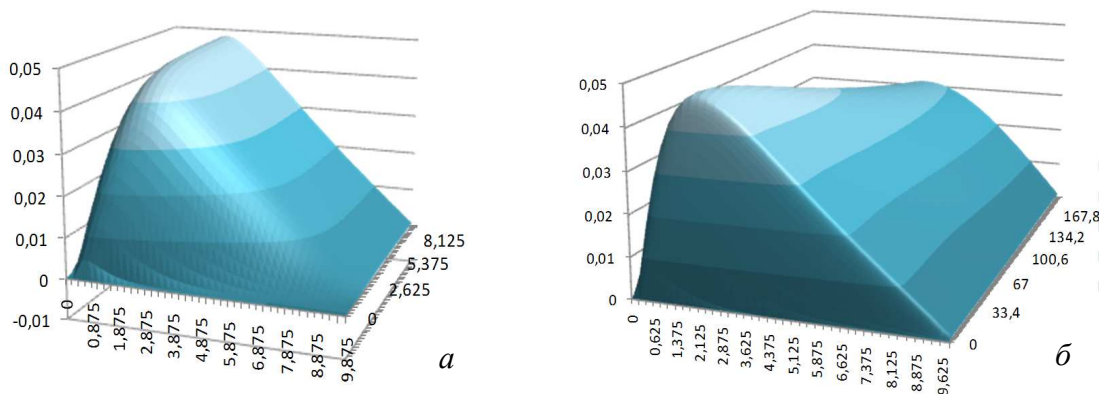


Рис. 8. Поверхні розподілів концентрації  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  на різних часових проміжках протікання процесу дифузії  $\tau_{\max} = 10$  (а) та  $\tau_{\max} = 200$  (б)

На наступному  $i = 2$  і на подальших кроках каскадного розпаду концентрації  $c^{(i)}(\xi, \tau)$  приймають дедалі менші значення. Проте поведінка цих функцій аналогічна до  $c^{(1)}(\xi, \tau)$ , продемонстрована на рис. 4б, 5–8.

## 5. Потoki маси розпадних домішкових речовин

В одновимірному за просторовою координатою випадку потоки маси частинок, що розпадаються, через переріз тіла  $\xi = \xi_*$  знайдемо за формулою

$$J_{*e}^{(i)}(\tau) = -d_{ef}^{(i)} \left. \frac{\partial c_{ef}^{(i)}(\xi, \tau)}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_*}, \quad i = \overline{0; N}. \quad (15)$$

Підставляємо вирази концентрацій  $c_{ef}^{(i)}(\xi, \tau)$  (6), (7), (11) у співвідношення (15). Тоді отримаємо:

для  $i = 0$ :



$$\frac{1}{c_0 d_{ef}^{(0)}} J_{*e}^{(0)}(\tau) = \eta \frac{\text{ch } \eta(\xi_0 - \xi_*)}{\text{sh } \eta \xi_0} + \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\cos y_k \xi_*}{y_k^2 + \eta^2} y_k^2 e^{-(d^{(0)} y_k^2 + a^{(0)})\tau}; \quad (16a)$$

для  $i = 1, \dots, N-1$ :

$$J_{*e}^{(i)}(\tau) = -a_{ef}^{(i)} d_{ef}^{(i)} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \frac{\partial G^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} c_{ef}^{(i-1)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (16б)$$

$$\frac{\partial G^{(i)}}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} = \theta(\tau - \tau') \sum_{n=1}^{\infty} y_n \cos(y_n \xi_*) \sin(y_n \xi') e^{-(d_{ef}^{(i)} y_n^2 + a_{ef}^{(i)}) (\tau - \tau')};$$

для  $i = N$ :

$$J_{*e}^{(N)}(\tau) = -d_{ef}^{(N)} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \frac{\partial G^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda e}^{(iN)} c_{ef}^{(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (16в)$$

$$\frac{\partial G^{(N)}}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} = \theta(\tau - \tau') \sum_{n=1}^{\infty} y_n \cos(y_n \xi_*) \sin(y_n \xi') e^{-d_{ef}^{(N)} y_n^2 (\tau - \tau')}.$$

Запишемо також вирази для потоків розпадних речовин через нижню границю шару  $\xi = \xi_0$  як частковий випадок формул (16):

для  $i = 0$ :

$$\frac{J_{0e}^{(0)}(\tau)}{c_0 d_{ef}^{(0)}} = \frac{\eta}{\text{sh } \eta \xi_0} + \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k y_k^2}{y_k^2 + \eta^2} e^{-(d^{(0)} y_k^2 + a^{(0)})\tau};$$

для  $i = 1, \dots, N-1$  справджується формула (16б), в якій

$$\frac{\partial G^{(i)}}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_0} = \theta(\tau - \tau') \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n y_n \sin(y_n \xi') e^{-(d_{ef}^{(i)} y_n^2 + a_{ef}^{(i)}) (\tau - \tau')};$$

для  $i = N$  справджується формула (16в), в якій

$$\frac{\partial G^{(N)}}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_0} = \theta(\tau - \tau') \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n y_n \sin(y_n \xi') e^{-d_{ef}^{(N)} y_n^2 (\tau - \tau')}.$$

На рис. 9 подані розподіли потоків розпадних частинок  $J_{*e}^{(0)}(\tau)$  на кроці розпаду  $i = 0$  (рис. 9а) і  $J_{*e}^{(1)}(\tau)$  на етапі  $i = 1$  (рис. 9б) через різні перерізи  $\xi_* = 0,75; 1; 1,5; 2; 3; 5; 10$  (криві 1–7).

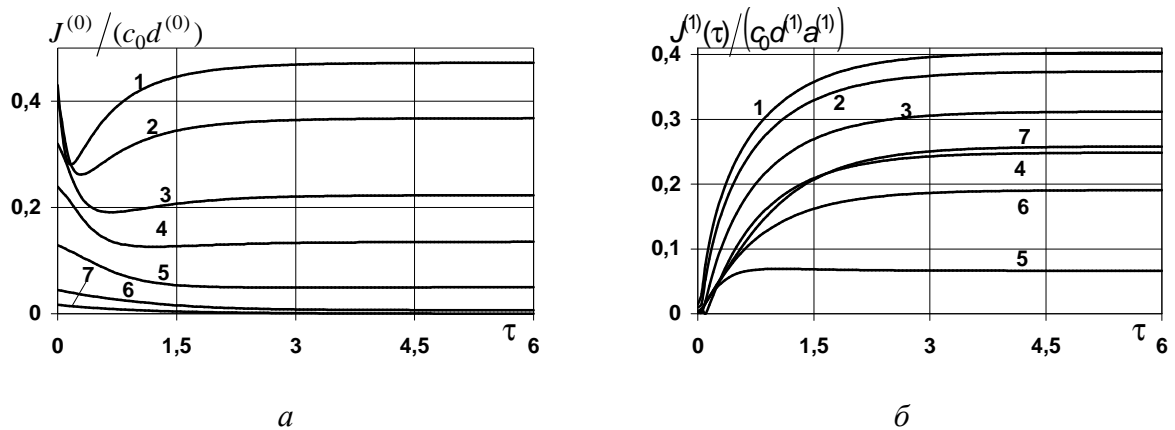


Рис. 9. Розподіли потоків розпадних частинок  $J_*^{(0)}(\tau)$  (а) і  $J_*^{(1)}(\tau)$  (б) на різних глибинах

Зазначимо, що для  $i=0$  чим даліше від поверхні тіла, де діє джерело маси, знаходиться поверхня  $\xi = \xi_*$ , тим менших значень досягають дифузійні потоки  $J_*^{(0)}(\tau)$  через цей переріз (рис. 9а). На кроці розпаду  $i=0$  від початку процесу дифузії відбувається суттєве зниження інтенсивності потоків маси (рис. 9а) в усьому тілі. Проте в околі поверхні  $\xi=0$  функція  $J_*^{(0)}(\tau)$ , досягши свого мінімуму, починає зростати, доки не вийде на стаціонарний режим (криві 1–3, рис. 9а). На більших глибинах досягнення мінімальних значень відбувається пізніше, причому цей мінімум відповідає стаціонарному значенню потоку  $J_*^{(0)}(\tau)$  (криві 5–7, рис. 9а).

Для кроку розпаду  $i=1$  характерне значне зростання значень потоку розпадної речовини до досягнення усталеного режиму (рис. 9б). Проте, на відміну від попереднього випадку з віддаленням від поверхні  $\xi=0$  дії джерела маси речовини  $K^{(0)}$  величина  $J_*^{(1)}(\tau)$  спочатку зменшується (криві 1–5, рис. 9б), а потім зростає (криві 5–7, рис. 9б). Найменші значення дифузійного потоку спостерігаються через поверхню  $\xi_* = 3$  (крива 5, рис. 9б), причому функція  $J_*^{(1)}(\tau)$  у цьому випадку найшвидше виходить на стаціонарний режим.

## 6. Висновки

Таким чином, для опису процесів дифузії домішкових речовин за їх каскадного розпаду запропонована математична модель масоперенесення, в рамках якої концентрація частинок на певному кроці розпаду є джерелом маси розпадної речовини, яка дифундує, на наступному кроці. Розв'язки відповідних крайових задач дифузії каскадного типу побудовані за ітераційною процедурою з використанням функцій Гріна. Таке подання розв'язків дозволяє не тільки проводити кількісний та якісний аналіз концентрації мігруючих речовин, а й знайти їхні потоки маси, як і визначити кількість відповідних речовин, що за певний проміжок часу пройшли через одиницю площі деякої поверхні, наприклад, через нижню границю шару.

На основі отриманих формул розроблений пакет для комп'ютерного моделювання дифузійних процесів за каскадного розпаду домішкових речовин. Встановлено, що час виходу на стаціонарний режим функцій концентрацій зростає на порядки зі збільшенням кроку розпаду.

## СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Coble R.I. Sintering crystalline solids II. Experimental test of diffusion models in powder compact / R.I. Coble // J. of Appl. Phys. – 1961. – Vol. 32, N 5. – P. 793 – 799.

2. Физико-химия и технология дисперсных порошков / Ред. В.В. Скороход; ИПМ АН УССР. – Киев, 1984. – 190 с.
3. Скороход В.В. Химические, диффузионные и реологические процессы в технологии порошковых материалов / Скороход В.В., Солонин Ю.М., Уваров И.Д. – Киев: Наукова думка, 1990. – 248 с.
4. Лариков Л.Н. Залечивание дефектов в металлах / Лариков Л.Н. – Киев: Наукова думка, 1980. – 279 с.
5. Nicolet M-A. Diffusion barriers in layered contact structure / M-A. Nicolet, M. Bartur // J. of Vacuum Science and Tech. – 1981. – Vol. 19, Issue 3. – P. 786 – 793.
6. Шоршоров М.Х. Теория неравновесной кристаллизации плоского слитка / М.Х. Шоршоров, А.И. Манохин. – М.: Наука, 1992. – 105 с.
7. Мельников Н.Н. Пестициды. Химия, технология и применение / Мельников Н.Н. – М.: Химия, 1987. – 712 с.
8. Радиационные характеристики облученного ядерного топлива / [Колобашкин В.М., Рубцов П.М., Ружанский П.А., Сидоренко В.Д.]. – М.: Энергоатомиздат, 1983. – 384 с.
9. Бурак Я.Й. Континуально-термодинамічні моделі механіки твердих розчинів / Бурак Я.Й., Чапля Э.Я., Чернуха О.Ю. – Київ, Наукова думка, 2006. – 272 с.
10. Чапля Є.Я. Фізико-математичне моделювання гетеродифузного масопереносу / Є.Я. Чапля, О.Ю. Чернуха. – Львів: СПОЛОМ, 2003. – 128 с.
11. Снеддон И. Преобразования Фурье / Снеддон И. – М.: Изд-во иностр. литературы, 1955. – 667 с.

*Стаття надійшла до редакції 23.12.2014*