УДК 517

ДИФФУЗИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ В НЕОДНОРОДНЫХ ТЕЛАХ

© Е.В. Алвес

Ключевые слова: диффузия, полимерные материалы.

Исследуется процесс диффузии в твердых телах, состоящих, например, из полимерных материалов, при идеальном диффузионном контакте. По крайней мере, одно из рассматриваемых тел содержит активное вещество, которое может проникать путем диффузии в другое тело. Даны формулы для расчета полей концентрации активного вещества, изложен метод определения коэффициента диффузии.

Среди большого количества самых разнообразных полимерных материалов, применяемых в современной технике, термопластичные полимеры выделяются своей возможностью легко принимать требуемую форму при переработке на литьевых машинах. Это достигается путем добавления к полимерной основе специальных веществ – пластификаторов.

Из термопластичных материалов изготавливаются многочисленные изделия – от детских игрушек до деталей космических кораблей. Однако наличие в составе термопластичных материалов пластификаторов приводит иногда к нежелательным экологическим последствиям, т. к. пластификаторы, как правило, являются веществами вредными для живых организмов. Поэтому изделие из термопластичных материалов для улучшения экологических свойств или для увеличения термостойкости покрывают слоем безвредных полимеров, термозащитными или декоративными покрытиями. С течением времени пластификаторы из изделия путем диффузии проникают в покрытия и при достижении достаточной концентрации могут вывести покрытия из строя. В связи с этим теоретический расчет концентрационных полей активного вещества может помочь рассчитать допустимое время эксплуатации изделия (время, при котором концентрация изделия в покрытии не превысит допустимых пределов).

Рассматривается полуограниченное тело (тело *А*), содержащее диффузионно-активное вещество. Поверхность тела покрыта слоем вещества, первоначально не содержащего активного компонента (тело *Б*), слой имеет толщину h, малую по сравнению с линейными размерами тела *А*. С момента времени $t = 0$ тела находятся в идеальном диффузионном контакте.

Процесс распространения активного вещества в телах *А* и *Б* описывается согласно [1]:

а) системой уравнений

$$\begin{cases} \dfrac{\partial C_1}{\partial t} = D_1 \dfrac{\partial^2 C_1}{\partial x^2}, \ 0 < x < h, \\ \dfrac{\partial C_2}{\partial t} = D_2 \dfrac{\partial^2 C_2}{\partial x^2}, \ h < x < \infty; \end{cases} \tag{1}$$

б) граничными условиями 4 рода (условиями идеального диффузионного контакта):

$$C_1\big|_{x=h} = C_2\big|_{x=h}, \tag{2}$$

$$D_1 \frac{\partial C_1}{\partial x}\bigg|_{x=h} = D_2 \frac{\partial C_2}{\partial x}\bigg|_{x=h}; \tag{3}$$

в) граничными условиями:

$$\lim_{x\to\infty} C_2 = C_0, \tag{4}$$

$$\frac{\partial C_1}{\partial x}\bigg|_{x=0} = 0; \tag{5}$$

г) начальными условиями:

$$C_1\big|_{t=0} = 0 \tag{6}$$

$$C_2\big|_{t=0} = C_0. \tag{7}$$

Здесь $C_1(t,x)$ и $C_2(t,x)$ и – концентрации активного вещества соответственно в *Б* и *А*, D_1 и D_2 – коэффициенты диффузии активного вещества в этих телах, C_0 – начальная концентрация вещества в теле *А*.

После применения преобразования Лапласа уравнения системы (1) с учетом условий (6) и (7) примут вид:

$$\begin{aligned} &Y_2'' - \frac{s}{D_2} Y_2 = -\frac{C_0}{D_2}, \\ &Y_1'' - \frac{s}{D_1} Y_1 = 0 . \end{aligned} \tag{8}$$

Здесь

$$Y_1(s,x) = \int_0^\infty C_1(t,x) e^{-st} dt$$

и

$$Y_2(s,x) = \int_0^\infty C_2(t,x) e^{-st} dt$$

– изображения по Лапласу функций $C_1(t,x)$ и $C_2(t,x)$. Уравнения (8) имеют решения:

$$Y_1 = A_1 e^{-\mu_1 x} + A_2 e^{\mu_1 x},$$
$$Y_2 = A_3 e^{-\mu_2 x} + A_4 e^{\mu_2 x} + \frac{C_0}{s}, \quad (9)$$

где

$$\mu_1 = \sqrt{\frac{s}{D_1}}, \quad \mu_2 = \sqrt{\frac{s}{D_2}}, \quad A_i \ (i = 1,2,3,4)$$

– произвольные константы.

Из граничных условий (4) и (5) следует: $A_4 = 0$, $A_1 = A_2$. Для нахождения A_1 и A_3 также воспользуемся условиями (4) и (5), которые, учитывая (9), принимают вид:

$$2A_1 ch\left(\frac{h\mu_2}{m}\right) = A_3 e^{-h\mu_2} + \frac{C_0}{s},$$
$$2A_1 sh\left(\frac{h\mu_2}{m}\right) = mA_3 e^{-h\mu_2}. \quad (10)$$

Здесь

$$m = \sqrt{D_1 / D_2}.$$

После подстановки в (9) найденных значений A_1 и A_3 получим:

$$Y_1 = \frac{2C_0 \, ch(h\mu_2 \bar{X}/m)\, e^{-h\mu_2/m}}{s(1+m)\left(1+ke^{-2h\mu_2/m}\right)},$$
$$Y_2 = \frac{C_0}{s}\left[1 - \frac{2m \, sh(h\mu_2/m)\, e^{-(h\mu_2/m)\cdot(1-m(1-\bar{X}))}}{(1+m)\left(1+ke^{-2h\mu_2/m}\right)}\right].$$

Здесь

$$\bar{X} = \frac{x}{h}, \quad k = \frac{(1-m)}{(1+m)}.$$

Для перехода от изображений к оригиналам представим выражение $1/\left(1+ke^{-2h\mu_2/m}\right)$ в виде степенного ряда, и тогда, после преобразований, получим:

$$Y_1 = \frac{C_0}{s(1+m)} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n k^n \times \left\{ e^{-\frac{h\mu_2}{m}\left(2n+1-\bar{X}\right)} + e^{-\frac{h\mu_2}{m}\left(2n+1+\bar{X}\right)} \right\},$$
$$Y_2 = \frac{C_0}{s}\left[1 - \frac{m}{1+m} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n k^n \times \left\{ e^{-\frac{h\mu_2}{m}\left(2n-m(1-\bar{X})\right)} + e^{-\frac{h\mu_2}{m}\left(2n+2-m(1-\bar{X})\right)} \right\} \right]. \quad (11)$$

Обозначим

$$ertc(y) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^y e^{-z^2} dz$$

Так как при любом a величина

$$\frac{e^{-a\sqrt{s}}}{s}$$

является изображением функции

$$erfc\left(\frac{a}{2\sqrt{t}}\right),$$

то из (11) следует:

$$C_1 = \frac{C_0}{(1+m)} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n k^n \times \left\{ erfc\left(\frac{2n+1-\bar{X}}{2mFo}\right) + erfc\left(\frac{2n+1+\bar{X}}{2mFo}\right) \right\},$$
$$C_2 = C_0 \left(1 - \frac{m}{1+m} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n k^n \times \left\{ erfc\left(\frac{2n+m(\bar{X}-1)}{2mFo}\right) - erfc\left(\frac{2n+2+m(\bar{X}-1)}{2mFo}\right) \right\} \right) \quad (12)$$

Здесь

$$Fo = \frac{\sqrt{D_2 t}}{h}$$

– диффузионный критерий Фурье.

Функции $C_1(t,x)$ и $C_2(t,x)$ удовлетворяют системе (1), а также условиям (2)–(7). Формулы (12) полностью решают поставленную задачу расчета концентрации активного вещества в неоднородном теле. В частном случае равенства коэффициентов диффузии активного вещества в телах *А* и *Б*, т.е. при $D_1 = D_2 = D$, $m = 1$, $k = 0$ получаем

$$C_1(t,x) = \frac{C_0}{2}\left[erfc\frac{h(1-\bar{X})}{2\sqrt{Dt}} + erfc\frac{h(1+\bar{X})}{2\sqrt{Dt}} \right]$$

– известное решение задачи диффузии (теплопроводности) о выравнивании концентраций (температур) в полуограниченном однородном теле [2].

Для практических нужд нет необходимости в исследовании распределения активного вещества в слое вещества *Б*, обычно необходимо знать его среднюю концентрацию

$$\bar{C}_1(Fo) = \int_0^1 C_1(\bar{X}, Fo)\, d\bar{X}, \quad (13)$$

которую в тонких слоях вещества только и можно определить экспериментально методами химического анализа. Подставив в (13) первое из выражений (12), после интегрирования получим:

$$\overline{C}_1(Fo) = \frac{2C_0}{1+m} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n k^n \left\{ \begin{aligned} &(n+1)\, erfc\left(\frac{n+1}{mFo}\right) - \\ &- n\, erfc\left(\frac{n}{mFo}\right) + \frac{mFo}{\sqrt{\pi}} \Theta(n,m,F_o) \end{aligned} \right\},$$

где

$$\Theta(n, m, F_o) = e^{-\left(\frac{n}{mFo}\right)^2} - e^{-\left(\frac{n+1}{mFo}\right)^2}.$$

Полученную формулу можно использовать также для экспериментального определения коэффициента диффузии активного вещества в одном из тел, если он известен в другом. При $Fo \to 0$ это выражение принимает вид:

$$\overline{C}_1(Fo) \cong \frac{2C_0 mFo}{\sqrt{\pi}(1+m)}, \tag{14}$$

т. е. при малых временах контакта тел концентрация активного вещества в теле *Б* линейно зависит от критерия F_O. Если через замеренные промежутки времени произвести замеры величины $\overline{C}_1$, построить зависимость

$$\frac{\overline{C}_1}{C_0} = B \cdot Fo$$

и определить коэффициент *B*, то, согласно (14), получим

$$D_1 = D_2 \left(\frac{B\sqrt{\pi}}{2 - B\sqrt{\pi}} \right)^2.$$

ЛИТЕРАТУРА

1. *Франк-Каменецкий Д.А.* Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М., 1987.
2. *Лыков А.В.* Теория теплопроводности. М., 1967.

Поступила в редакцию 5 сентября 2008 г.

Alves E.V. Diffusion processes in heterogeneous bodies. Diffusion process in solid bodies consisting, for example, from polymeric materials, with ideal diffusion contact is studied. At least, one of the considered bodies contains active substance which can get by diffusion into another body. Formulas for calculation of fields of active substance concentration and a method of diffusion factor definition are given.

Key words: diffusion, polymeric materials.