

На правах рукописи

ЖУРАВСКИЙ Александр Владимирович

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ГАЗОФАЗНОГО ОСАЖДЕНИЯ МАТЕРИАЛА
НА ОХЛАЖДАЕМУЮ КРИВОЛИНЕЙНУЮ ПОВЕРХНОСТЬ**

Специальность 05.13.18 — Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук



Москва – 2020

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)»

Научный руководитель: **доктор технических наук, профессор Кувыркин Георгий Николаевич**

Официальные оппоненты:

Карташов Эдуард Михайлович, Заслуженный деятель науки РФ, доктор физико-математических наук, профессор кафедры высшей и прикладной математики, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования Российской технический университет МИРЭА (институт тонких химических технологий им. Н.В. Ломоносова).

Савенков Евгений Борисович, кандидат физико-математических наук, Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук», ведущий научный сотрудник сектора № 3 отдела № 11.

Ведущая организация:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского Российской академии наук

Защита состоится « » 2020 г. в __ час. __ мин. на заседании диссертационного совета Д212.141.15 при Московском государственном техническом университете имени Н.Э. Баумана по адресу: 105005, г. Москва, ул. 2-я Бауманская, д. 5, стр. 1, зал Ученого совета.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Московского государственного технического университета имени Н.Э. Баумана и на сайте <http://www.bmstu.ru>.

Автореферат разослан « » 2020 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
кандидат технических наук,
доцент



Атлетков
Александр
Владимирович

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Аддитивные технологии, т. е. технологии наращивания различных твёрдых тел, являются перспективным, постоянно развивающимся направлением в современной промышленности. Эти технологии обладают определёнными преимуществами по сравнению с традиционными методами производства деталей: возможностью изготовления изделий произвольно сложной формы и единичных изделий без изготовления специальной технологической оснастки, эффективностью использования осаждаемого сырья.

Процесс газофазного осаждения проводят в вакууме или в атмосфере рабочего газа при достаточно низком давлении. Нанесение покрытий методом физического газофазного осаждения осуществляется при относительно низкой температуре, что позволяет снять многие ограничения по материалам, используемым в качестве подложки или покрытия. Если температура процесса осаждения меньше температуры отпуска закалённой стали, тогда метод может быть использован для нанесения износостойких покрытий на быстрорежущую сталь.

Важным направлением в промышленности является нанесение защитных покрытий из оксида алюминия, нитрида титана, карбида кремния и других соединений газофазными методами. Механические и изолирующие свойства таких покрытий существенно лучше свойств покрытий, полученных классическими методами.

Метод физического газофазного осаждения также применяется в промышленности для получения железа и никеля путём термического разложения карбонилов соответствующих веществ, для получения циркония и гафния для атомной промышленности путём химического транспортирования иодидов и для получения полупроводниковых многослойных структур, используемых в различных электронных приборах. Нитрид алюминия находит применение при формировании на подложке диэлектрического слоя для создания активных приборов полупроводниковой техники. Слоистые композиции полупроводниковых, диэлектрических и металлических материалов находят применение в современной электронике, в частности, при получении твердотельных интегральных микросхем. В настоящее время такие слои получают, используя различные варианты метода осаждения из газовой фазы. Указанные достоинства газофазной металлургии, а также свойства материалов, полученных этим методом, представляют большой интерес для конструкторов и производственников различных отраслей промышленности, открывая широкие возможности.

Для моделирования распределения температуры в различных изделиях используются конечноэлементные программные комплексы, такие как ANSYS, Nastran, AbAqus, Code_Aster и др. Коммерческие пакеты, та-

кие как ANSYS, Nastran отличаются простотой и надёжностью в использовании. Однако закрытый программный код не позволяет модифицировать задачу в соответствие с более сложными математическими моделями. Использование открытых пакетов, таких как Code_Aster, позволяет проще модифицировать постановку задачи. Однако возможность модифицировать имеющийся код затрудняется из-за, в большинстве своём, сложностей самого кода и отсутствия хорошо проработанных справочных материалов. Одним из вариантов решения данной проблемы является написание собственного программного комплекса на интерпретируемом (Wolfram, MATLAB) или компилируемом (C++) языке программирования.

Цель диссертационной работы состоит в разработке математических моделей, алгоритмов и численных методов, а также разработке программ для моделирования газофазного осаждения с учётом особенностей процесса тепло- и массопереноса.

Для достижения поставленной цели потребовалось решение следующих основных задач.

1. Разработка математических моделей газофазного осаждения материала на криволинейную поверхность с учётом тепло- и массообмена газовой среды с поверхностью, учитывающих диффузию осаждаемого материала и переменность кривизны сечения подложки.

2. Разработка определяющих соотношений математической модели газофазного осаждения с учётом эффекта нелокальности по пространству в осаждаемом материале.

3. Проведение численного анализа процессов тепло- и массообмена при газофазном осаждении на основе построенного вычислительного алгоритма определения температурного поля и поля концентрации в наращиваемом теле.

4. Разработка программы для ЭВМ «BSTA_1D» (Build-up surface thermal analysis) для моделирования теплообмена при газофазном осаждении материала на охлаждаемую подложку.

Методы исследования. При разработке математических моделей в диссертационной работе использовались классические методы теории тепло- и массопереноса при газофазном осаждении материала на твёрдую криволинейную поверхность. Для различных моделей численные алгоритмы были построены на основе интегро-интерполяционного метода.

Достоверность и обоснованность научных результатов гарантирована применением классических положений теории тепло- и массообмена, теоретически обоснованного математического аппарата, непротиворечивостью результатов, полученных с использованием различных математических моделей.

Научная новизна. Известные к настоящему времени работы рассматривают решение задачи тепло- и массообмена для плоской пластины или для классических канонических тел (сфера, цилиндр), но не для по-

верхности произвольной кривизны. В работах также не учитывались особенности теплообмена, связанные с излучением поверхности и излучением газа. Как правило, при решении задач наращивания не рассматривалось влияние диффузионных процессов на распределение температуры, а также не рассматривались структурно-чувствительные материалы. Указанные особенности процесса наращивания учтены в диссертационной работе.

На защиту выносятся следующие положения диссертации:

1. Математические модели тепло- и массопереноса при осаждении материала на криволинейную подложку с учётом особенностей её теплообмена с газовой средой.

2. Определяющие соотношения модели осаждения с учётом эффекта нелокальности по пространству в осаждаемом материале.

3. Вычислительный алгоритм определения температурного поля и поля концентрации в наращиваемом теле и разработанная на его основе программа «BSTA_1D» для моделирования теплообмена при газофазном осаждении материала на охлаждаемую подложку.

Практическая значимость диссертационной работы. Полученные в диссертационной работе результаты могут способствовать повышению качества изготовления покрытия на металлической подложке криволинейной формы.

Разработана и зарегистрирована программа для ЭВМ «BSTA_1D» (Build-up surface thermal analysis), представляющая собой программную платформу для моделирования газофазного осаждения и позволяющая находить температурное поле в наращиваемой криволинейной оболочке.

Личный вклад соискателя. Все изложенные в диссертационной работе исследования в области создания математических моделей, их численной и программной реализации проведены лично соискателем в процессе научной деятельности.

Апробация результатов диссертационной работы. Основные положения и результаты диссертационной работы докладывались на следующих конференциях: «Nano-Design, Technology, Computer Simulations» (Минск, 2017), «Фундаментальные и прикладные проблемы тепломассообмена» (Санкт-Петербург, 2017), «Современные проблемы теплофизики и энергетики» (Москва, 2017), «Фундаментальные и прикладные задачи механики» (Москва, 2017), «Седьмая российская национальная конференция по теплообмену (РНКТ-7)» (Москва, 2018), «Проблемы газодинамики и тепломассообмена в энергетических установках» (Москва, 2019), «Physical and Numerical Simulation of Materials Processing» (ICPNS'2019) (Москва, 2019).

Диссертация является составной частью фундаментальных исследований, проводимых в рамках гранта Президента РФ по государственной поддержке молодых российских ученых-кандидатов наук (проекта МК-1069.2018.8) «Разработка математических моделей новых структурно-

чувствительных материалов с учетом особенностей их производства», гранта РФФИ №18-38-00618 «Разработка математических моделей и численных методов исследования термомеханических процессов в структурно-чувствительных материалах», госзадания проекта 9.7784.2017/БЧ «Разработка методов оценки термомеханических и электрофизических характеристик структурно-чувствительных наноматериалов», госзадания проекта 9.2422.2017/ПЧ «Разработка математических моделей, изготовление и исследование экспериментальных образцов новых структурно-чувствительных материалов при воздействии физических полей различной природы», гранта РФФИ 18-38-20108 «Разработка математических моделей функционирования структурно-чувствительных материалов на основе численных решений и асимптотических представлений определяющих уравнений» и гранта РФФИ 19-38-90178 «Математическое моделирование газофазного осаждения материала на криволинейную поверхность».

Публикации. Основные результаты диссертационной работы отражены в 11 научных статьях, в том числе в 6 статьях в изданиях, индексируемых в базах данных Scopus и Web of Science.

Структура и объём работы. Диссертация состоит из введения, 5 глав, выводов, списка литературы и приложения; изложена на 102 страницах, включая 43 рисунка. Список литературы содержит 118 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении проведён обзор литературы по методам газофазного осаждения, обоснована актуальность темы, её научная новизна и практическая значимость, сформулированы цели исследования, основные положения, выносимые на защиту, приведены данные о структуре и объёме диссертационной работы.

В первой главе сформулирована общая математическая постановка задачи наращивания твёрдого тела, представлен вывод дифференциальных уравнений теплопроводности и диффузии в криволинейных координатах, показан переход от трёхмерной задачи к одномерной, обоснованы основные допущения модели.

Для тонкостенной оболочки в криволинейной ортогональной системе координат (Рис. 1.), где ось Ox направлена по нормали к поверхности, справедливо одномерное уравнение теплопроводности и диффузии

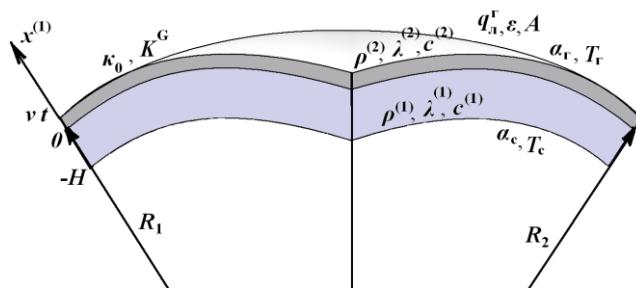


Рис. 1. Нарашиваемая криволинейная оболочка

$$\begin{aligned}
c^{(k)} \rho^{(k)} \frac{\partial T}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(-q^{(k)} + c^{(2)} D^{(k)} T \frac{\partial Q}{\partial x} \right) + 2\kappa(x) \left(-q^{(k)} + c^{(2)} D^{(k)} T \frac{\partial Q}{\partial x} \right); \\
\frac{\partial Q}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(D^{(k)} \frac{\partial Q}{\partial x} \right) + 2\kappa(x) \left(D^{(k)} \frac{\partial Q}{\partial x} \right),
\end{aligned} \tag{1}$$

где $c^{(k)}$ — удельная массовая теплоёмкость материала подложки ($k = 1$) или плёнки ($k = 2$); $\rho^{(k)}$ — плотность материала; T — температура в сечении оболочки; t — время; x — пространственная координата; $\kappa(x)$ — средняя кривизна сечения оболочки; $q^{(k)}$ — проекция вектора плотности теплового потока на ось Ox ; $D^{(k)}$ — коэффициент диффузии частиц; Q — плотность диффундирующего вещества; $\kappa(x)$ — средняя кривизна оболочки.

Условия идеального контакта для системы (1) имеют вид

$$\begin{aligned}
T(t, 0-0) &= T(t, 0+0); \\
q^{(1)} \Big|_{x=0-0} &= q^{(2)} \Big|_{x=0+0}; \\
Q(t, 0-0) &= Q(t, 0+0); \\
D^{(1)} \frac{\partial Q}{\partial x} \Big|_{x=0-0} &= D^{(2)} \frac{\partial Q}{\partial x} \Big|_{x=0+0}.
\end{aligned}$$

Краевые условия для системы уравнений (1):

$$\begin{aligned}
T(0, x) &= T_0(x); \\
Q(0, x) &= 0; \\
-q^{(1)} \Big|_{x=-H} &= \alpha_c (T(t, -H) - T_c); \\
-q^{(2)} \Big|_{x=vt} &= \alpha_r (T_r - T(t, vt)) - \varepsilon \sigma_0 T^4(t, vt) + A q_{\text{II}}^r + \\
&\quad + c^{(2)} \rho^{(2)} v (T_r - T(t, vt)) + \rho^{(2)} v L^{(2)}; \\
D^{(1)} \frac{\partial Q}{\partial x} \Big|_{x=-H} &= \beta_c (Q(t, -H) - 0); \\
D^{(2)} \frac{\partial Q}{\partial x} \Big|_{x=vt} &= \beta_r (Q_r - Q(t, vt)),
\end{aligned}$$

где $T_0(x)$ — начальное распределение температуры; H — толщина пластины; v — скорость осаждения материала; T_r — температура газа, из которого происходит осаждение материала; T_c — температура охлаждающей среды; ε — коэффициент излучения поверхности; A — коэффициент поглощения излучения осаждаемого материала; σ_0 — постоянная Стефана — Больцмана; $q_\text{л}^r$ — лучистый тепловой поток газа; α_r — коэффициент конвективного теплообмена газа с поверхностью оболочки; α_c — коэффициент конвективного теплообмена пластины с охлаждающей средой; $L^{(2)}$ — удельная теплота фазового перехода для осаждаемого вещества; Q_r — плотность газа, из которого происходит осаждение материала; β_c — коэффициент массоотдачи для охлаждающей среды; β_r — коэффициент массоотдачи для газа.

Обоснован выбор начального распределения температуры. Получено распределение температуры в пластине в начальный момент времени (до начала процесса осаждения) путём решения уравнения стационарной теплопроводности

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left(\lambda^{(1)}(T) \frac{dT}{dx} \right) &= 0; \\ \lambda^{(1)}(T) \frac{dT}{dx} \Big|_{x=-H} &= \alpha_c (T(-H) - T_c); \\ \lambda^{(1)}(T) \frac{dT}{dx} \Big|_{x=0} &= \alpha_r (T_r - T(0)) - \varepsilon \sigma_0 T^4(0) + A q_\text{л}^r, \end{aligned}$$

где $\lambda^{(k)}$ — теплопроводность материала подложки или наносимого покрытия, ($k = 1, 2$). По результатам моделирования сделаны выводы о возможности считать параметры материала не зависящими от температуры.

Обоснован выбор постоянной скорости осаждения. Получена скорость газофазного осаждения

$$v = \left(\lambda^{(2)} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{\text{п}} - \lambda' \frac{T_r - T_{\text{п}}}{h'} \right) \Big/ \left(\lambda' \frac{T_r - T_{\text{п}}}{h'} + \rho' L^{(2)} \right),$$

где c' — удельная массовая теплоёмкость газа; ρ' — плотность газа; λ' — теплопроводность газа; $T_{\text{п}}$ — температура поверхности покрытия;

$h' = \lambda^{(2)}/\alpha_r$. По результатам моделирования сделаны выводы о возможности использования в численных расчётах постоянной скорости осаждения.

Построенная математическая модель позволяет рассчитывать температурное поле в наращиваемой криволинейной оболочке. Трёхмерная, в общем случае, модель может быть сведена к одномерной с сохранением информации о геометрии оболочки. Использование в модели не зависящих от температуры свойств материала обосновано отсутствием существенных перепадов температуры после нагрева заготовки.

Во второй главе приведена базовая математическая модель наращивания криволинейной поверхности. Построен численный алгоритм для модели, приведены результаты вычислительных экспериментов.

В данной модели средняя кривизна принята постоянной

$$\kappa(x) \approx \kappa(0) = \kappa_0, \quad (2)$$

где κ_0 — средняя кривизна внешней поверхности оболочки.

Вектор плотности теплового потока

$$\mathbf{q}^{(k)} = -\lambda^{(k)} \nabla T, \quad (3)$$

где $\lambda^{(k)}$ — теплопроводность материала подложки или наносимого покрытия; ∇ — дифференциальный оператор Гамильтона. В данной постановке влияние диффузионных процессов не учитывается.

Уравнение теплопроводности (1) с учётом допущений (2), (3) в базовой постановке задачи получено в виде

$$c^{(k)} \rho^{(k)} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda^{(k)} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + 2\kappa_0 \left(\lambda^{(k)} \frac{\partial T}{\partial x} \right). \quad (4)$$

В соответствии с допущениями краевые условия имеют вид

$$\begin{aligned} T(0, x) &= T_0(x); \\ \lambda^{(1)} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=-H} &= \alpha_c (T(t, -H) - T_c); \\ \lambda^{(2)} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=vt} &= \alpha_r (T_r - T(t, vt)) - \varepsilon \sigma_0 T^4(t, vt) + A q_{\text{н}}^r + \\ &+ c^{(2)} \rho^{(2)} v (T_r - T(t, vt)) + \rho^{(2)} v L^{(2)}. \end{aligned} \quad (5)$$

Условия идеального контакта

$$T(t, 0-0) = T(t, 0+0);$$

$$\lambda^{(1)} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0-0} = \lambda^{(2)} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0+0}. \quad (6)$$

Построен численный алгоритм нахождения распределения температуры в оболочке в любой момент времени. Введены следующие обозначения: $u_i^j = T(t_j, x_i)$, $u = u_i^j$, $\hat{u} = u_i^{j+1}$, $\hat{u}_+ = u_{i+1}^{j+1}$, $\hat{u}_- = u_{i-1}^{j+1}$. Для решения уравнения нестационарной теплопроводности (4) построена разностная схема интегро-интерполяционным методом

$$c^{(k)} \rho^{(k)} \frac{\hat{u} - u}{\tau} h_k = \left(\lambda^{(k)} \frac{\hat{u}_+ - \hat{u}}{h_k} - \lambda^{(k)} \frac{\hat{u} - \hat{u}_-}{h_k} \right) + 2\kappa_0 \lambda^{(k)} \frac{\hat{u}_+ - \hat{u}_-}{2}.$$

Разностная схема имеет порядок аппроксимации $O(\tau + h_k^2)$. Условия устойчивости разностной схемы: $|\kappa_0| < \min(1/h_1, 1/h_2)$, где h_1, h_2 — величины шагов по пространству в подложке и покрытии; τ — величина шага по времени. Аналогично интегро-интерполяционный метод был применён к граничным условиям (5) и условиям идеального контакта (6).

Результаты моделирования для стальной подложки и покрытия из нитрида титана представлены на Рис. 2 и 3. Зависимость профиля температуры от средней кривизны поверхности в математической модели существует

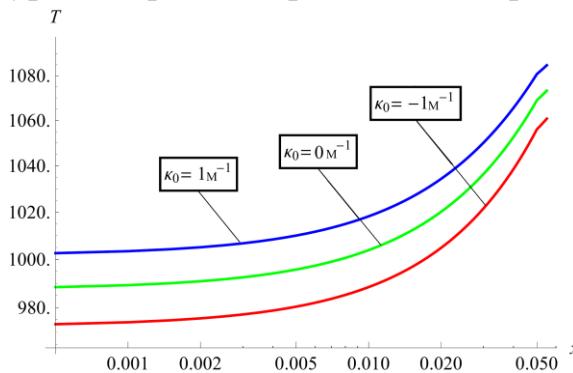


Рис. 2. Распределение температуры T по толщине вдоль оси Ox для оболочки средней кривизны $\kappa_0 = 1, 0, -1 \text{ м}^{-1}$ на момент времени $t = 5 \cdot 10^4 \text{ с}$ ($v = 10^{-7} \text{ м/с}$)

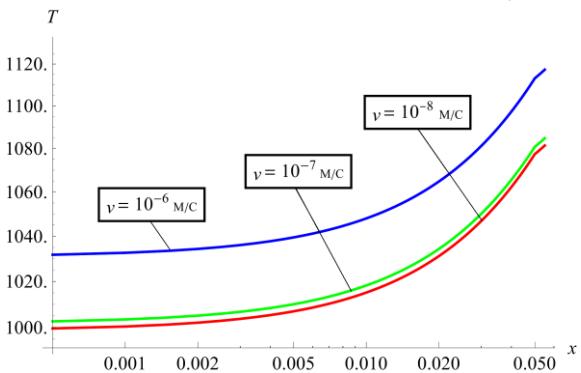


Рис.3. Распределение температуры T по толщине вдоль оси Ox для различных скоростей осаждения $v = 10^{-6}, 10^{-7}, 10^{-8} \text{ м/с}$ при нанесении покрытия толщиной $h = 5 \cdot 10^{-3} \text{ м}$

венна. На графике (Рис. 2) видно, что с уменьшением средней кривизны уменьшается температура в каждом сечении оболочки. При больших различиях значений средней кривизны поверхности различие профиля температуры может быть столь существенным, что одномерная задача теплопроводности будет уже некорректна. Зависимость температурного поля от кривизны подчиняется закону, близкому к линейному.

Скорость осаждения материала на подложку оказывает существенное влияние на распределение температуры в оболочке (Рис. 3). Большая скорость газофазного осаждения вызывает значительное повышение температуры в подложке.

Моделирование также было проведено для других пар материалов подложка- покрытие. Результаты моделирования для медной подложки и покрытия из нитрида титана представлены на Рис. 4 и 5.

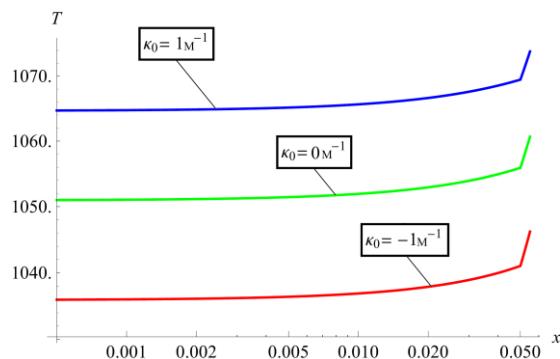


Рис. 4. Распределение температуры T по толщине вдоль оси Ox для оболочки средней кривизны $\kappa_0 = 1, 0, -1 \text{ м}^{-1}$ на момент времени $t = 5 \cdot 10^4 \text{ с}$ ($v = 10^{-7} \text{ м/с}$)

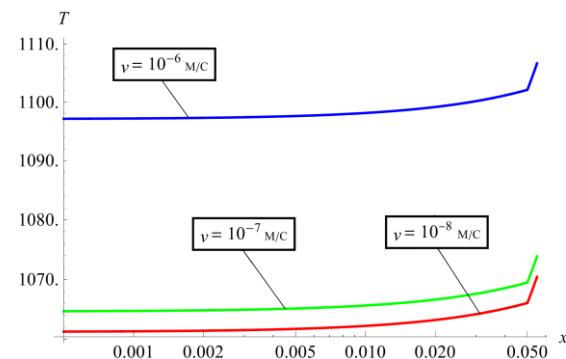


Рис. 5. Распределение температуры T по толщине вдоль оси Ox для различных скоростей осаждения $v = 10^{-6}, 10^{-7}, 10^{-8} \text{ м/с}$ при нанесении покрытия толщиной $h = 5 \cdot 10^{-3} \text{ м}$

Как видно на Рис. 4 и 5, градиент температуры в подложке значительно меньше градиента температуры в покрытии. Это объясняется тем, что высокая теплопроводность меди способствует быстрому отводу теплоты от нагреваемой поверхности. Однако качественно зависимость значения температуры от кривизны и скорости осаждения осталась справедлива.

В третьей главе приведена математическая модель, учитывающая влияние тепло- и массопереноса осаждаемых частиц в наращиваемой криволинейной оболочке на распределение температуры. Далее принято, что в модели средняя кривизна сечения оболочки равна кривизне поверхности $\kappa_0 = \text{const.}$

С учётом принятых допущений система (1) принимает вид

$$\begin{aligned}
c^{(k)} \rho^{(k)} \frac{\partial T}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda^{(k)} \frac{\partial T}{\partial x} + c^{(2)} D^{(k)} T \frac{\partial Q}{\partial x} \right) + 2\kappa_0 \left(\lambda^{(k)} \frac{\partial T}{\partial x} + c^{(2)} D^{(k)} T \frac{\partial Q}{\partial x} \right); \\
\frac{\partial Q}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(D^{(k)} \frac{\partial Q}{\partial x} \right) + 2\kappa_0 \left(D^{(k)} \frac{\partial Q}{\partial x} \right).
\end{aligned} \tag{7}$$

Решение системы уравнений (7) при условиях идеального контакта и соответствующих краевых условиях позволяет учесть влияние диффузионного массопереноса на распределение температуры.

Представлены результаты сравнения двух математических моделей. На Рис. 6 и 7 показаны распределения температуры, получаемые при использовании базовой модели «1» и модели с учётом диффузионных процессов «2» при различных значениях средней кривизны.

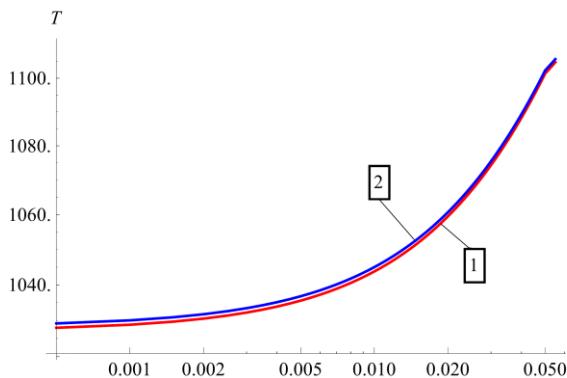


Рис. 6. Распределения температуры T по толщине вдоль оси Ox для оболочки средней кривизны $\kappa_0 = 3 \text{ м}^{-1}$ на момент времени $t = 5 \cdot 10^4 \text{ с}$

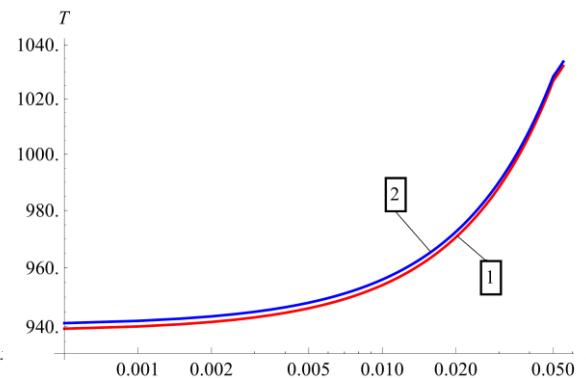


Рис. 7. Распределения температуры T по толщине вдоль оси Ox для оболочки средней кривизны $\kappa_0 = -3 \text{ м}^{-1}$ на момент времени $t = 5 \cdot 10^4 \text{ с}$

В результате численного анализа установлено, что диффузионный тепло- и массоперенос несущественно влияет на распределение температуры.

В четвёртой главе построена математическая модель, учитывающая изменение средней кривизны эквидистантного сечения по толщине подложки. Диффузионные процессы в построении модели не учитывались.

Рассмотрено линейное изменение кривизны эквидистантного сечения в виде

$$\kappa(x) = \left(\frac{1}{R_1 + x} + \frac{1}{R_2 + x} \right) / 2 \approx \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} - x \left(\frac{1}{R_1^2} + \frac{1}{R_2^2} \right) \right) / 2 = \kappa_0 - x \kappa_x, \tag{8}$$

где $\kappa_x = (2\kappa_0^2 - K^G)$ — линейная часть функции $\kappa(x)$, взятая с обратным знаком, K^G — гауссова кривизна внешней поверхности оболочки.

Уравнение теплопроводности с учётом линейного изменения кривизны (8) имеет вид

$$c^{(k)} \rho^{(k)} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda^{(k)} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + 2(\kappa_0 - x\kappa_x) \left(\lambda^{(k)} \frac{\partial T}{\partial x} \right). \quad (9)$$

Учёт переменной кривизны сечения позволяет рассматривать в модели подложки различной не только средней, но и гауссовой кривизн. Результаты моделирования для стальной подложки и покрытия из нитрида титана представлены на Рис. 8 и 9.

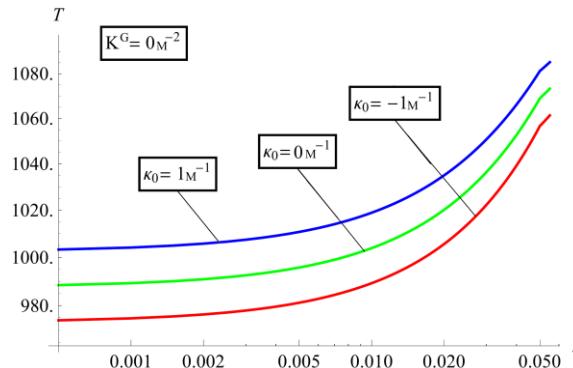


Рис. 8. Распределения температурного поля T по толщине вдоль оси Ox для оболочки средней кривизны $\kappa_0 = 1,0,-1\text{m}^{-1}$ при гауссовой кривизне $K^G = 0\text{m}^{-2}$

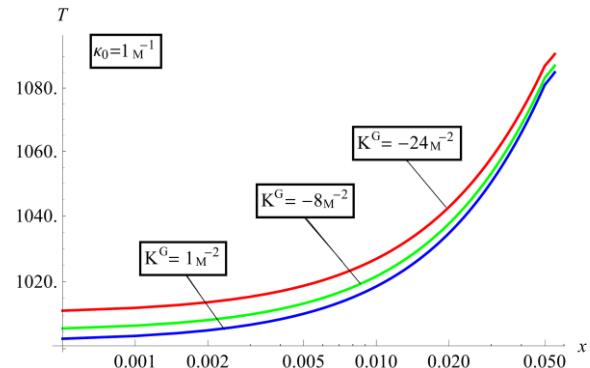


Рис. 9. Распределения температурного поля T по толщине вдоль оси Ox для оболочки гауссовой кривизны $K^G = 1,-8,-24\text{m}^{-2}$ при средней кривизне $\kappa_0 = 1\text{m}^{-1}$

При фиксированном значении средней кривизны κ_0 и равенству главных радиусов кривизны $R_1 = R_2$ гауссова кривизна K^G принимает максимальное значение. Для этого значения K^G значение температуры в подложке ниже, чем в других рассмотренных случаях (Рис. 9). Уменьшение значения гауссовой кривизны подложки приводит к возрастанию температуры в каждом сечении оболочки.

Зависимости температурного поля от внутренней геометрии оболочки и скорости осаждения, установленные для базовой модели, справедливы и для модели с переменной по толщине кривизной. Учёт линейного изменения кривизны сечения оболочки позволяет увеличить область применимости исходной математической модели, а также более полно описывать процесс наращивания подложки с различной внутренней геометрией.

В пятой главе построена математическая модель, позволяющая учесть в модели структурно-чувствительные материалы. В предыдущих математических моделях принималось допущение о том, что материал покрытия подчиняется принципу локальности, т. е. температура в частице сплошной среды определяется состоянием среды в бесконечно малой окрестности этой частицы. Однако наносимый материал может быть структурно-чувствительным, т. е. характеристики материала в точке могут испытывать влиянию окружающих элементов.

Для построения модели нелокальной среды были использованы подходы обобщённой термомеханики, позволяющие проводить моделирование на основе соответствующих интегро-дифференциальных уравнений.

С целью учёта структурно-чувствительных свойств материала в модели вместо закона теплопроводности Фурье было использовано модифицированное интегро-дифференциальное соотношение, связывающее тепловой поток в точке с потоком в её окрестности.

Для учёта нелокальных свойств осаждаемого материала в модели введена функция влияния $\phi(x)$ такая, что $\int_{-a}^{+a} \phi(x)dx = 1$, причём, $\phi(x) = 0$ если $x \notin (-a, a)$, где a — характерный размер зоны влияния.

Для осаждаемого структурно-чувствительного материала проекция вектора плотности теплового потока введена следующим образом:

$$q^{(2)} = -p_1 \lambda^{(2)} \frac{\partial T(x)}{\partial x} - p_2 \int_{x-a}^{x+a} \lambda^{(2)} \phi(|x' - x|) \frac{\partial T(x')}{\partial x'} dx', \quad (10)$$

где p_1, p_2 — весовые коэффициенты, характеризующие долю эффекта нелокальности свойств материала и $p_1 + p_2 = 1$.

Построено уравнение нелокальной теплопроводности для наращиваемой криволинейной оболочки, учитывающее структурно-чувствительный материал (10) покрытия:

$$\begin{aligned} c^{(1)} \rho^{(1)} \frac{\partial T}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda^{(1)} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + 2\kappa_0 \left(\lambda^{(1)} \frac{\partial T}{\partial x} \right); \quad x \in (-H, 0); \\ c^{(2)} \rho^{(2)} \frac{\partial T}{\partial t} &= p_1 \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda^{(2)} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + 2\kappa_0 \left(\lambda^{(2)} \frac{\partial T}{\partial x} \right) \right) + \\ &+ p_2 \left(\frac{\partial}{\partial x} \int_{x-a}^{x+a} \lambda^{(2)} \frac{\partial T(x')}{\partial x'} \phi(|x' - x|) dx' + 2\kappa_0 \int_{x-a}^{x+a} \lambda^{(2)} \phi(|x' - x|) \frac{\partial T(x')}{\partial x'} dx' \right); \quad x \in (0, vt). \end{aligned} \quad (11)$$

Для уравнения нелокальной теплопроводности (11) условия идеального контакта имеют вид

$$T(t, 0-0) = T(t, 0+0);$$

$$\lambda^{(1)} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0-0} = \left(p_1 \lambda^{(2)} \frac{\partial T(x)}{\partial x} + p_2 \int_x^{x+a} \lambda^{(2)} \phi(|x'-x|) \frac{\partial T(x')}{\partial x'} dx' \right) \Big|_{x=0+0},$$

краевые условия определяются как

$$\begin{aligned} T(0, x) &= T_0(x); \\ \lambda^{(1)} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=-H} &= \alpha_c (T(t, -H) - T_c); \\ \left. \left(p_1 \lambda^{(2)} \frac{\partial T(x)}{\partial x} + p_2 \int_{x-a}^x \lambda^{(2)} \phi(|x'-x|) \frac{\partial T(x')}{\partial x'} dx' \right) \right|_{x=vt} &= \alpha_\Gamma (T_\Gamma - T(t, vt)) - \\ &\quad - \varepsilon \sigma_0 T^4(t, vt) + A q_\Gamma + c^{(2)} \rho^{(2)} v (T_\Gamma - T(t, vt)) + \rho^{(2)} v L^{(2)}. \end{aligned}$$

Разностный аналог нелокальной части проекции вектора плотности теплового потока (10) имеет вид

$$\begin{aligned} \int_{x-a}^{x+a} \lambda^{(2)} \phi(|x'-x|) \frac{\partial T(x')}{\partial x'} dx' &= \sum_{l=-n}^n \lambda^{(2)} \int_{x+x_l-h_2/2}^{x+x_l+h_2/2} \phi(|x'-x|) \frac{\partial T(x')}{\partial x'} dx' \approx \\ &\approx \sum_{l=-n}^n \lambda^{(2)} \frac{\partial T(x')}{\partial x'} \Big|_{x+x_l} \int_{x+x_l-h_2/2}^{x+x_l+h_2/2} \phi(|x'|) dx' = \lambda^{(2)} \sum_{l=-n}^n \Phi_l \frac{\partial T(x')}{\partial x'} \Big|_{x+x_l}, \end{aligned}$$

где $\Phi_l = \int_{x_l-h_2/2}^{x_l+h_2/2} \phi(|x'|) dx'$ — среднее интегральное значение функции влияния на отрезке $(x_l - h_2/2, x_l + h_2/2)$, помноженное на длину этого отрезка h_2 ; n — максимальное целое число, удовлетворяющее условию $\Phi_n \neq 0$.

Уравнению теплопроводности соответствует разностный аналог:

$$c^{(2)} \rho^{(2)} \frac{\hat{u}_i - u_i}{\tau} h_2 = p_1 \left(\lambda^{(2)} \left(\frac{\hat{u}_+ - \hat{u}_-}{h_2} \right)_i - \lambda^{(2)} \left(\frac{\hat{u} - \hat{u}_-}{h_2} \right)_i + 2\kappa_0 \lambda^{(2)} \left(\frac{\hat{u}_+ - \hat{u}_-}{2} \right)_i \right) +$$

$$\begin{aligned}
& + p_2 \left(\sum_{l=N_1}^{N_1+N_2-1} \Phi_{l-i} \left(\lambda^{(2)} \left(\frac{\hat{u}_+ - \hat{u}}{h_2} \right)_l + 2\kappa_0 \lambda^{(2)} \left(\frac{\hat{u}_+ - \hat{u}}{2} \right)_l \right) + \right. \\
& \left. + \sum_{l=N_1+1}^{N_1+N_2} \Phi_{l-i} \left(-\lambda^{(2)} \left(\frac{\hat{u} - \hat{u}_-}{h_2} \right)_l + 2\kappa_0 \lambda^{(2)} \left(\frac{\hat{u} - \hat{u}_-}{2} \right)_l \right) \right).
\end{aligned}$$

Построен численный алгоритм решения уравнения теплопроводности для материала с нелокальными свойствами.

На Рис. 10-12 представлены результаты моделирования для медной подложки и покрытия из нитрида титана. Для Рис. 10 и 11 функция влияния выбрана в виде $\phi(x) = \frac{1}{2a} \exp\left(-\frac{|x|}{a}\right)$.

На Рис. 10 показано распределение температуры в медной пластине при различных долях нелокальности p_2 . Увеличение коэффициента влияния нелокального температурного переноса в модели уменьшает теплоотдачу покрытия.

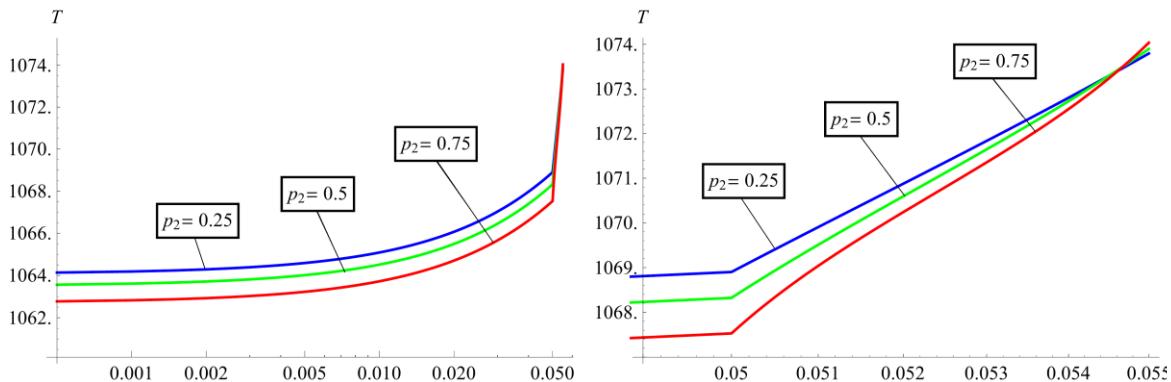


Рис. 10. Распределения температуры T в (а) подложке и (б) покрытии по толщине вдоль оси Ox для различных долей нелокальности теплового потока в покрытии при $p_2 = 0.25, 0.5, 0.75$, $a = 6.25 \cdot 10^{-4}$ м.

На Рис. 11 показано значение температуры в медной пластине при различных характерных размерах зоны влияния a . Увеличение зоны влияния нелокального температурного переноса в модели уменьшает теплоотдачу покрытия.

На Рис. 12 показано значение температуры в медной пластине для другой функции влияния. Зависимости, установленные для функции влияния-экспоненты сохраняются и для функции влияния-модуля.

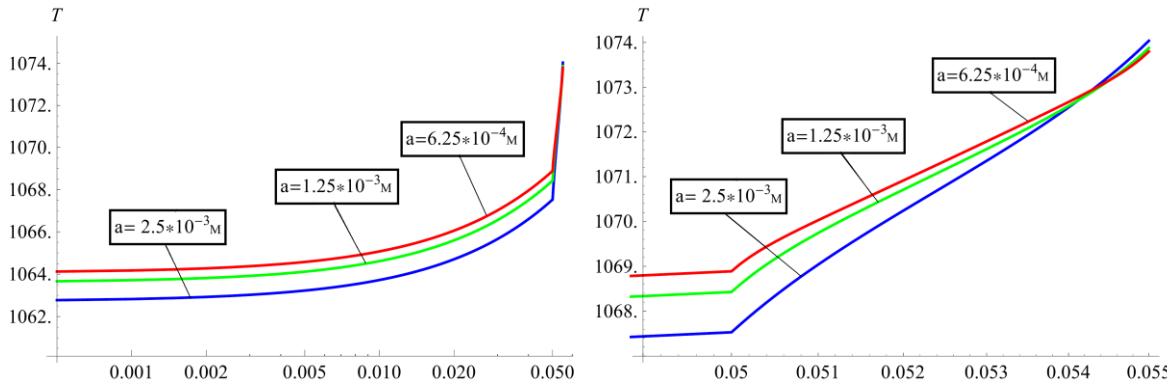


Рис. 11. Распределение температуры в (а) подложке и (б) покрытии по толщине оболочки для зоны влияния размера $a = 6.25 \cdot 10^{-4}, 1.25 \cdot 10^{-3}, 2.5 \cdot 10^{-3}$ м при $p_2 = 0.75$

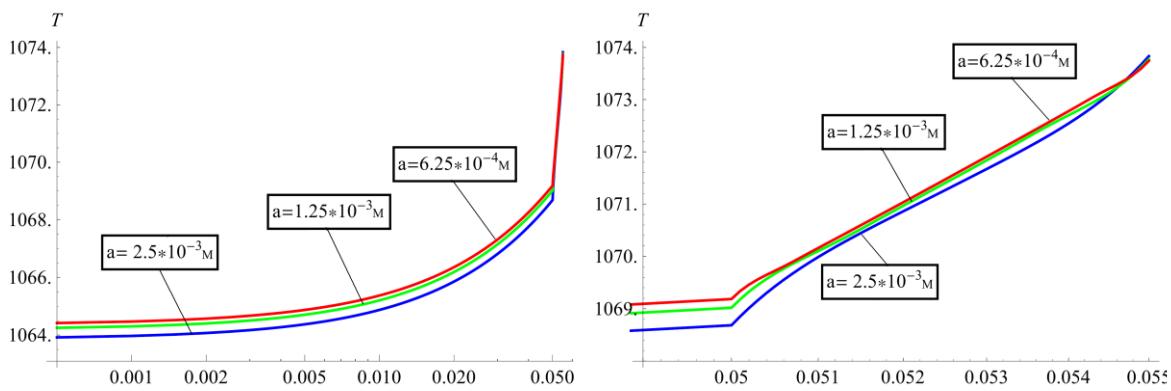


Рис. 12. Распределение температуры в (а) подложке и (б) покрытии по толщине оболочки для зоны влияния размера $a = 6.25 \cdot 10^{-4}, 1.25 \cdot 10^{-3}, 2.5 \cdot 10^{-3}$ м при $p_2 = 0.75$ и функции влияния $\phi(x) = 1/a(1-|x|/a)$

Зависимости температурного поля от геометрии оболочки и скорости осаждения, установленные для базовой модели, справедливы и для материала с нелокальными свойствами. Увеличение доли p_2 , определяющей нелокальную часть теплового потока, ухудшает отвод теплоты от нагреваемой поверхности. Увеличение характерного размера a приводит к искажениям теплового потока вблизи границы покрытия, что осложняет отвод теплоты. Зависимости справедливы для различных функций влияния.

Основные результаты диссертационной работы

1. Разработаны математические модели тепло- и массопереноса при осаждении материала на криволинейную подложку с учётом особенностей её теплообмена с газовой средой.
2. Разработаны определяющие соотношения математической модели, учитывающей эффект нелокальности в осаждаемом материале.
3. Реализован численный алгоритм определения температурного поля и поля концентрации при газофазном осаждении. Проведён сравнительный анализ распределения температуры для представленных математических моделей.
4. Создана программа «BSTA_1D» для моделирования теплообмена при газофазном осаждении материала на охлаждаемую подложку.

Основные результаты диссертации отражены в работах:

1. **Kuvyrkin G.N., Zhuravskii A.V., and Savel'eva I.Yu.** Mathematical modeling of chemical vapor deposition of material on a curvilinear surface // *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*. 2016. V. 89. No. 6. P. 1374-1379. (WoS; Scopus, Q2; 0,6 п.л./0,2 п.л.)
2. **Savel'eva I.Yu., Zhuravskii A.V.** Modelling of thermal processes during vapor deposition of material on curvilinear surface // *Journal of Physics: Conference Series*. 2017. V. 891. Art. 891012134. (WoS; Scopus, Q3; 0,7 п.л./0,3 п.л.)
3. **Журавский А.В.** Математическое моделирование теплообмена при газофазном осаждении // *Известия высших учебных заведений. Машиностроение*. 2017. №11. С. 10-17. (ВАК; 0,8 п.л.)
4. Кувыркин Г.Н., Журавский А.В., Савельева И.Ю. Математическая модель наращивания материала на криволинейную поверхность // Необратимые процессы в природе и технике: Труды IX Всероссийской конференции. М., 2017. С. 219-222. (0,3 п.л./0,1 п.л.)
5. Журавский А.В., Савельева И.Ю. Температурное поле в наращиваемой пластине с учётом нелокальных свойств материала // Актуальные проблемы механики сплошной среды: Труды V Международной конференции. М., 2017. С. 119-120. (0,2 п.л./0,1 п.л.)
6. **Kuvyrkin G.N., Savel'eva I.Yu., Zhuravsky A.V.** Numerical modelling of vapor phase epitaxy with diffusion processes // *Mathematical Models and Computer Simulations*. 2018. V. 10. No. 3. P. 229–307. (Scopus, Q3; 1,1 п.л./0,4 п.л.)
7. **Savel'eva I.Yu., Zhuravskii A.V.** Modeling heat transfer in built-up curvilinear plate // *Materials Physics and Mechanics*. 2018. V. 39 No. 1. P. 120-127. (WoS; Scopus, Q3; 0,4 п.л./0,2 п.л.)
8. Журавский А.В. Моделирование тепловых процессов при наращивании криволинейной поверхности с учётом особенностей её геометрии // Труды VII Российской национальной конференции по теплообмену. Т.3. М., 2018. С. 369-372. (0,3 п.л.)
9. Журавский А.В. Математическое моделирование тепловых процессов при нанесении покрытия на криволинейную пластину // Труды XXII Школы-семинара молодых ученых и специалистов под руководством академика РАН А.И. Леонтьева. М., 2019. С. 354-357. (0,3 п.л.)
10. **Zhuravskii A.V., Savel'eva I.Yu.** Numerical simulation of heat transfer in built-up surface // *Procedia Manufacturing*. 2019. V. 37. P. 571-577. (Scopus, Q2; 0,4 п.л./0,2 п.л.)
11. **Kuvyrkin G.N., Savelyeva I.Yu., Zhuravskii A.V.** Heat conduction in a shell with gas-phase deposition of material on its surface // *Heat and Mass Transfer*. 2020. V. 56. No. 2. P. 423–427. (WoS, Q3; Scopus, Q1; 1,0 п.л./0,4 п.л.)
12. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2019616217. «BSTA_1D» (Build-up surface thermal analysis) — программа для моделирования физического газофазного осаждения и нахождения температурного поля в наращиваемой криволинейной оболочке / А. В. Журавский, И. Ю. Савельева. Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 20.05.2019.