



Общероссийский математический портал

Г. Н. Кувыркин, И. Ю. Савельева, А. В. Журавский, Численное моделирование газофазного осаждения с учётом диффузионных процессов, *Матем. моделирование*, 2017, том 29, номер 10, 75–85

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.139.72.210

9 января 2025 г., 00:14:17



ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАЗОФАЗНОГО ОСАЖДЕНИЯ С УЧЁТОМ ДИФФУЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ

© 2017 г. *Г.Н. Кувыркин, И.Ю. Савельева, А.В. Журавский*

Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана
inga.savelyeva@gmail.com

Работа выполнена в рамках государственного задания по проекту 9.2422.2017/ПЧ и государственного задания по проекту 9.7784.2017/БЧ.

Предложена модель теплопроводности, учитывающая особенности тепло- и массообмена в процессе газофазного осаждения на криволинейную поверхность. С использованием интегро-интерполяционного метода построена разностная схема, найдено численное решение поставленной задачи. Исследованы аппроксимация и устойчивость разностной схемы. Представлены примеры численного расчёта для различных материалов.

Ключевые слова: газофазное осаждение, уравнение теплопроводности, криволинейная поверхность, разностная схема.

NUMERICAL MODELLING OF VAPOR PHASE EPITAXY WITH DIFFUSION PROCESSES

G.N. Kuvyrkin, I.Y. Savelyeva, A.V. Zhuravsky

Bauman Moscow State Technical University

The mathematical model of heat conduction with features of heat and mass transfer during vapor phase epitaxy on a curvilinear surface is offered. With use of an integro-interpolation method the differential scheme is constructed, the numerical solution of an objective is found. Approximation and stability of the differential scheme are investigated. Examples of numerical calculation for various materials are provided.

Key words: vapor phase epitaxy, heat equation, curvilinear surface, difference scheme.

1. Введение

Газофазное осаждение является одним из видов аддитивных технологий и представляет собой процесс нанесения на охлаждаемую поверхность плёнки или покрытия, то есть непрерывного слоя материала, имеющего, в том числе, и нанокристаллическую структуру [1,2]. В настоящее время развитие этой и других аддитивных технологий обеспечило возможность нанесения разнообразных покрытий с различными свойствами. Технологии изготовления подобных материалов представляет большой интерес, а потому возникает необходимость моделирования процессов нанесения различных покрытий.

Большое число работ посвящено моделированию и анализу нанесения кремниевых покрытий [3-5], осаждения материала на алюминиевые пластины [6,7] в зависимости от факторов, специфических для конкретных задач. Полученные в результате изделия име-

ют ряд ценных свойств: хорошую обрабатываемость, высокую прочность, износостойкость и поэтому всё шире применяются в различных отраслях современной промышленности.

Однако в большинстве работ этого направления, как правило, не учтены особенности теплообмена газа с поверхностью, в то время как температура поверхности, на которой происходит осаждение, является одним из основополагающих факторов, определяющих структуру плёнки [8]. Кроме того, во многих работах рассмотрены лишь простейшие формы поверхности (плоская пластина, цилиндрическая поверхность, шаровой сегмент). В [9] были учтены граничные условия, наиболее полно соответствующие реальному процессу осаждения на криволинейную пластину, но без учёта диффузионных процессов. В данной работе, помимо условий на границе, рассмотрено изменение температурного поля за счёт диффузионного переноса вещества в материале подложки.

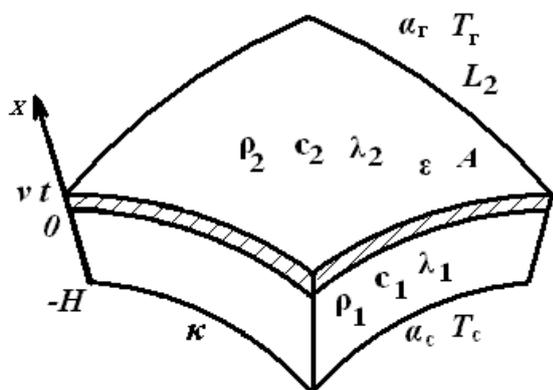


Рис.1.

Наращиваемая криволинейная пластина.

осаждённым материалом – идеальный тепловой контакт; на внутренней поверхности пластины – конвективный теплообмен; на внешней поверхности пластины вследствие высокой температуры газа происходит лучистый и конвективный теплообмен, причём излучает как газ, так и поверхность, на которую происходит осаждение материала. Также примем допущение о постоянстве температур газа T_g и охлаждающей среды T_c и учтём влияние на температурное поле диффузионных процессов переноса вещества в материале подложки и наращиваемом слое.

Для тонкостенной пластины в криволинейной ортогональной системе координат, где ось Ox направлена по нормали к поверхности, справедливо уравнение теплопроводности [10,11]

$$c^{(k)} \rho^{(k)} \frac{\partial T}{\partial t} = - \frac{\partial q^{(k)}}{\partial x} - 2\kappa q^{(k)} + f, \quad k=1,2, \quad (1)$$

и уравнение диффузии

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D^{(k)} \frac{\partial Q}{\partial x} \right) + 2\kappa D^{(k)} \frac{\partial Q}{\partial x}, \quad k=1,2, \quad (2)$$

где $c^{(k)}$ – удельная массовая теплоёмкость; $\rho^{(k)}$ – плотность; $T = T(x, t)$ – температура;

2. Математическая модель

Рассмотрим криволинейную пластину толщиной H и средней кривизны $\kappa = (1/R_1 + 1/R_2)/2$ (здесь R_1 и R_2 – главные радиусы кривизны срединной поверхности пластины), на поверхности которой происходит газофазное осаждение материала с постоянной нормальной скоростью v (рис.1). Положим, что толщина пластины мала по сравнению с радиусом кривизны. Кроме того, примем следующие гипотезы тепловых контактов: между пластиной и

осаждённым материалом – идеальный тепловой контакт; на внутренней поверхности пластины – конвективный теплообмен; на внешней поверхности пластины вследствие высокой температуры газа происходит лучистый и конвективный теплообмен, причём излучает как газ, так и поверхность, на которую происходит осаждение материала. Также примем допущение о постоянстве температур газа T_g и охлаждающей среды T_c и учтём влияние на температурное поле диффузионных процессов переноса вещества в материале подложки и наращиваемом слое.

Для тонкостенной пластины в криволинейной ортогональной системе координат, где ось Ox направлена по нормали к поверхности, справедливо уравнение теплопроводности [10,11]

и уравнение диффузии

$$c^{(k)} \rho^{(k)} \frac{\partial T}{\partial t} = - \frac{\partial q^{(k)}}{\partial x} - 2\kappa q^{(k)} + f, \quad k=1,2, \quad (1)$$

и уравнение диффузии

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D^{(k)} \frac{\partial Q}{\partial x} \right) + 2\kappa D^{(k)} \frac{\partial Q}{\partial x}, \quad k=1,2, \quad (2)$$

где $c^{(k)}$ – удельная массовая теплоёмкость; $\rho^{(k)}$ – плотность; $T = T(x, t)$ – температура;

t – время; x – координата; $q^{(k)}$ – проекция вектора плотности теплового потока $\mathbf{q}^{(k)}$ на ось Ox ; f – источники и стоки теплоты; $Q = Q(x, t)$ – плотность диффундирующего вещества; $D^{(k)}$ – коэффициент диффузии; для пластины $k=1$, $x \in (-H, 0)$; для пленки $k=2$, $x \in (0, vt)$.

Для пластины или плёнки проекции вектора плотности теплового потока определяют соотношением

$$q^{(k)} = -\lambda^{(k)} \partial T / \partial x, \quad k = 1, 2.$$

Для диффундирующих частиц, движущихся со средней скоростью \tilde{v} , проекцию вектора плотности теплового потока определяют соотношением [12]

$$\tilde{q} = -\tilde{\lambda} \partial \tilde{T} / \partial x + \tilde{c} Q \tilde{v} \tilde{T},$$

где $\tilde{\lambda}$ – теплопроводность частиц, \tilde{c} – теплоёмкость частиц, \tilde{T} – температура частиц. Учитывая, что средняя скорость движения частиц – это отношение диффузионного потока $\tilde{\mathbf{j}}$ к плотности $\tilde{v} = \tilde{\mathbf{j}} / Q = -D_i \nabla Q / Q$, перепишем последнее соотношение:

$$\tilde{q} = -\tilde{\lambda} \partial \tilde{T} / \partial x - \tilde{c} \tilde{T} D^{(k)} \partial \tilde{Q} / \partial x.$$

Тогда распределение температуры в пластине, в которой происходит диффузионный перенос вещества, можно описать системой уравнений (1), (2). С учётом выражений для $q^{(k)}$, $k = 1, 2$, и \tilde{q} преобразуем их к следующему виду:

$$\begin{cases} c^{(k)} \rho^{(k)} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda^{(k)} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + 2\kappa \left(\lambda^{(k)} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \tilde{\alpha} (\tilde{T} - T), \\ \tilde{c} Q \frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\tilde{\lambda} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x} + \tilde{c} D^{(k)} \tilde{T} \frac{\partial Q}{\partial x} \right) + 2\kappa \left(\tilde{\lambda} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x} + \tilde{c} D^{(k)} \tilde{T} \frac{\partial Q}{\partial x} \right) - \tilde{\alpha} (\tilde{T} - T), \\ \frac{\partial Q}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D^{(k)} \frac{\partial Q}{\partial x} \right) + 2\kappa D^{(k)} \frac{\partial Q}{\partial x}, \end{cases} \quad (3)$$

где $\tilde{\alpha}$ – коэффициент теплообмена между пластиной и диффундирующими частицами, $k=1, 2$.

В случае интенсивного теплообмена между частицами и пластиной $\tilde{\alpha} \rightarrow \infty$, $\tilde{T} \rightarrow T$. С учётом $Q \ll \rho^{(k)}$, $\tilde{\lambda} \ll \lambda^{(k)}$, $\tilde{c} = c^{(2)}$, преобразуем систему (3) к виду

$$\begin{cases} c^{(k)} \rho^{(k)} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda^{(k)} \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(c^{(2)} D^{(k)} T \frac{\partial Q}{\partial x} \right) + 2\kappa \left(\lambda^{(k)} \frac{\partial T}{\partial x} + c^{(2)} D^{(k)} T \frac{\partial Q}{\partial x} \right), \\ \frac{\partial Q}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D^{(k)} \frac{\partial Q}{\partial x} \right) + 2\kappa D^{(k)} \frac{\partial Q}{\partial x}, \end{cases} \quad (4)$$

при $k=1$ $x \in (-H, 0)$, при $k=2$ $x \in (0, vt)$.

Добавим к уравнениям (4) контактные и граничные условия для температурного и диффузионного переноса [13].

Условия контакта:

$$\left\{ \begin{array}{l} T(t, 0-0) = T(t, 0+0); \\ \lambda^{(1)} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0-0} = \lambda^{(2)} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0+0}; \\ Q(t, 0-0) = Q(t, 0+0); \\ D^{(1)} \frac{\partial Q}{\partial x} \Big|_{x=0-0} = D^{(2)} \frac{\partial Q}{\partial x} \Big|_{x=0+0}. \end{array} \right. \quad (5)$$

Граничные условия:

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda^{(1)} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=-H} = \alpha_c (T(t, -H) - T_c); \\ \lambda^{(2)} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=vt} = \alpha_r (T_r - T(t, vt)) - \varepsilon \sigma_0 T^4(t, vt) + A q_{\text{пл}}^r + c^{(2)} \rho^{(2)} \nu (T_r - T(t, vt)) + \rho^{(2)} \nu L_2; \\ D^{(1)} \frac{\partial Q}{\partial x} \Big|_{x=-H} = \beta_c (Q(t, -H) - 0); \\ D^{(2)} \frac{\partial Q}{\partial x} \Big|_{x=vt} = \beta_r (Q_r - Q(t, vt)), \end{array} \right. \quad (6)$$

где Q_r – плотность вещества в газе; ε – коэффициент излучения; A – коэффициент поглощения излучения осаждаемым материалом; L_2 – удельная теплота фазового перехода для осаждаемого вещества; α_c , α_r – коэффициенты конвективного теплообмена; β_c , β_r – коэффициенты массоотдачи.

Распределение температуры $T_0(x)$ в пластине в начальный момент времени можно получить путём решения уравнения стационарной теплопроводности для неподвижных границ при отсутствии осаждения материала:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dx} \left(\lambda^{(1)} \frac{dT_0}{dx} \right) + 2\kappa \lambda^{(1)} \frac{dT_0}{dx} = 0; \\ \lambda^{(1)} \frac{dT_0}{dx} \Big|_{x=-H} = \alpha_c (T_0(-H) - T_c); \\ \lambda^{(2)} \frac{dT_0}{dx} \Big|_{x=0} = \alpha_r (T_r - T_0(t, vt)) - \varepsilon \sigma_0 T_0^4(t, vt) + A q_{\text{пл}}^r. \end{array} \right. \quad (7)$$

3. Численное решение

Численное решение краевой задачи (4)-(6) может быть найдено путем построения разностной схемы [14-16] интегро-интерполяционным методом. Полагаем, что за каждый шаг по времени τ к внешней поверхности пластины присоединяется слой толщиной $h_2 = \nu \cdot \tau$. Введём сетки по времени и по пространству

$$\omega_\tau = \{t_j = j \cdot \tau\},$$

$$\omega_h = \{x_i = -H + i \cdot h_1, i = 0, \dots, N_1, h_1 = H / N_1; x_i = i \cdot h_2, i = N_1 + 1, \dots, N_1 + N_2, h_2 = \nu\tau\},$$

где h_1, h_2 – шаги по пространству в областях, соответствующих пластине и покрытию; N_1, N_2 – число шагов по пространству в тех же областях. Тогда, интегрируя на интервале $x \in (-H, 0)$ уравнения (4) по отрезкам $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ по пространству и $[t_j, t_{j+1}]$ по времени и переходя от непрерывных функции $T(t, x)$, $Q(t, x)$ к сеточным $u_i^j = T(t_j, x_i)$, $q_i^j = Q(t_j, x_i)$, определённым в узлах сеток ω_τ, ω_h , получим

$$\begin{aligned} c^{(1)}\rho^{(1)} \frac{\hat{u} - u}{\tau} &= \frac{1}{h_1} \left(\lambda^{(1)} \frac{\hat{u}_+ - \hat{u}}{h_1} - \lambda^{(1)} \frac{\hat{u} - \hat{u}_-}{h_1} \right) + 2\kappa\lambda^{(1)} \frac{\hat{u}_+ - \hat{u}_-}{2h_1} + \\ &+ \frac{1}{h_1} \left(c^{(2)}D^{(1)} \frac{\hat{u}_+ + \hat{u}}{2} \frac{\hat{q}_+ - \hat{q}}{h_1} - c^{(2)}D^{(1)} \frac{\hat{u} + \hat{u}_-}{2} \frac{\hat{q} - \hat{q}_-}{h_1} \right) + 2\kappa c^{(2)}D^{(1)} \hat{u} \frac{\hat{q}_+ - \hat{q}_-}{2h_1}; \end{aligned} \quad (8)$$

$$c^{(1)}\rho^{(1)} \frac{\hat{q} - q}{\tau} = \frac{1}{h_1} \left(D^{(1)} \frac{\hat{q}_+ - \hat{q}}{h_1} - D^{(1)} \frac{\hat{q} - \hat{q}_-}{h_1} \right) + 2\kappa D^{(1)} \frac{\hat{q}_+ - \hat{q}_-}{2h_1}. \quad (9)$$

Здесь $u = u_i^j$, $\hat{u} = u_i^{j+1}$, $\hat{u}_+ = u_{i+1}^{j+1}$, $\hat{u}_- = u_{i-1}^{j+1}$, $q = q_i^j$, $\hat{q} = q_i^{j+1}$, $\hat{q}_+ = q_{i+1}^{j+1}$, $\hat{q}_- = q_{i-1}^{j+1}$. Для наращиваемого слоя уравнения (4) аналогично интегрируются на интервале $x \in (0, \nu\tau)$.

Заметим, что если принять коэффициент диффузии независимым от температуры, то сеточную функцию q_i^j можно найти из (9) независимо от u_i^j .

Для разностной схемы (9) справедлив принцип максимума, если выполняется условие положительности коэффициентов $1/h_1 > |\kappa|$. Для схемы (8) условие положительности коэффициентов значительно сложнее:

$$1/h_1 > |\kappa| + c^{(2)}D^{(1)}\hat{q}_{\bar{x}} / (2\lambda^{(1)}), \quad c^{(1)}\rho^{(1)}/\tau + 2\lambda^{(1)}/h_1^2 > c^{(2)}q_t/2 + \kappa c^{(2)}D^{(1)}\hat{q}_x^{\circ},$$

где $\hat{q}_{\bar{x}} = \frac{\hat{q}_i - \hat{q}_{i-1}}{h_1}$, $q_t = \frac{\hat{q}_i - q_i}{\tau}$, $\hat{q}_x^{\circ} = \frac{\hat{q}_{i+1} - \hat{q}_{i-1}}{2h_1}$. В реальных задачах коэффициенты диффузии $D^{(k)}$, $k = 1, 2$, и средняя кривизна κ малы, что, с учётом последних соотношений, исключает появление неустойчивости в схеме.

Аппроксимация левого граничного условия имеет вид [17]

$$\begin{aligned} c^{(1)}\rho^{(1)} \frac{\hat{u}_0 - u_0}{\tau} &= \frac{2}{h_1} \left(\lambda^{(1)} \frac{\hat{u}_1 - \hat{u}_0}{h_1} - \alpha_c (\hat{u}_0 - T_c) \right) + 2\kappa\lambda^{(1)} \frac{\hat{u}_1 - \hat{u}_0}{h_1} + \\ &+ \frac{2}{h_1} \left(c^{(2)}D^{(1)} \frac{\hat{u}_0 + \hat{u}_1}{2} \frac{\hat{q}_1 - \hat{q}_0}{h_1} - c^{(2)}\hat{u}_0\beta_c (\hat{q}_0 - 0) \right) + 2\kappa c^{(2)}D^{(1)}\hat{u}_0 \frac{\hat{q}_1 - \hat{q}_0}{h_1}, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\frac{\hat{q}_0 - q_0}{\tau} = \frac{2}{h_1} \left(D^{(1)} \frac{\hat{q}_1 - \hat{q}_0}{h_1} - \beta_c (\hat{q}_0 - 0) \right) + 2\kappa D^{(1)} \frac{\hat{q}_1 - \hat{q}_0}{h_1}.$$

Аппроксимация условия идеального теплового контакта имеет вид [17]

$$\begin{aligned} & \left(c^{(1)} \rho^{(1)} \frac{h_1}{2} + c^{(2)} \rho^{(2)} \frac{h_2}{2} \right) \frac{\hat{u}_{N_1} - u_{N_1}}{\tau} = \left(\lambda^{(2)} \frac{\hat{u}_{N_1+1} - \hat{u}_{N_1}}{h_2} - \lambda^{(1)} \frac{\hat{u}_{N_1} - \hat{u}_{N_1-1}}{h_1} \right) + \\ & + \kappa \left(\lambda^{(2)} (\hat{u}_{N_1+1} - \hat{u}_{N_1}) + \lambda^{(1)} (\hat{u}_{N_1} - \hat{u}_{N_1-1}) \right) + \\ & + \left(c^{(2)} D^{(2)} \frac{\hat{u}_{N_1+1} + \hat{u}_{N_1}}{2} \frac{\hat{q}_{N_1+1} - \hat{q}_{N_1}}{h_2} - c^{(2)} D^{(1)} \frac{\hat{u}_{N_1} + \hat{u}_{N_1-1}}{2} \frac{\hat{q}_{N_1} - \hat{q}_{N_1-1}}{h_1} \right) + \\ & + \kappa c^{(2)} \hat{u}_{N_1} \left(D^{(2)} (\hat{q}_{N_1+1} - \hat{q}_{N_1}) + D^{(1)} (\hat{q}_{N_1} - \hat{q}_{N_1-1}) \right), \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} & \left(\frac{h_1}{2} + \frac{h_2}{2} \right) \frac{\hat{q}_{N_1} - q_{N_1}}{\tau} = \left(D^{(2)} \frac{\hat{q}_{N_1+1} - \hat{q}_{N_1}}{h_2} - D^{(1)} \frac{\hat{q}_{N_1} - \hat{q}_{N_1-1}}{h_1} \right) + \\ & + \kappa \left(D^{(2)} (\hat{q}_{N_1+1} - \hat{q}_{N_1}) + D^{(1)} (\hat{q}_{N_1} - \hat{q}_{N_1-1}) \right). \end{aligned}$$

Аппроксимация правого граничного условия сопряжена с двумя трудностями: четвёртой степенью температуры в граничном условии и отсутствием точки на предыдущем временном слое (в связи с растущей сеткой):

$$\begin{aligned} & c^{(2)} \rho^{(2)} \frac{\hat{u}_{N_1+N_2} - \tilde{u}}{\tau} = \frac{2}{h_2} \left(\alpha_\Gamma (T_\Gamma - \hat{u}_{N_1+N_2}) - \varepsilon \sigma_0 \tilde{u}^4 + A q_\Gamma + c^{(2)} \rho^{(2)} \nu (T_\Gamma - \hat{u}_{N_1+N_2}) + \rho^{(2)} \nu L_2 - \right. \\ & \left. - \lambda^{(2)} \frac{\hat{u}_{N_1+N_2} - \hat{u}_{N_1+N_2-1}}{h_2} \right) + 2\kappa \lambda^{(2)} \frac{\hat{u}_{N_1+N_2} - \hat{u}_{N_1+N_2-1}}{h_2} + \\ & + \frac{2}{h_1} \left(c^{(2)} \hat{u}_{N_1+N_2} \beta_\Gamma (Q_\Gamma - \hat{q}) - c^{(2)} D^{(1)} \frac{\hat{u}_{N_1+N_2} + \hat{u}_{N_1+N_2-1}}{2} \frac{\hat{q} - \hat{q}_-}{h_2} \right) + \\ & + 2\kappa c_2 D_2 \hat{u}_{N_1+N_2} \frac{\hat{q}_{N_1+N_2} - \hat{q}_{N_1+N_2-1}}{h_2}, \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\hat{q}_{N_1+N_2} - \tilde{q}}{\tau} = \frac{2}{h_2} \left(\beta_\Gamma (Q_\Gamma - \hat{q}_{N_1+N_2}) - D^{(2)} \frac{\hat{q}_{N_1+N_2} - \hat{q}_{N_1+N_2-1}}{h_2} \right) + \\ & + 2\kappa D^{(2)} \frac{\hat{q}_{N_1+N_2} - \hat{q}_{N_1+N_2-1}}{h_2}. \end{aligned} \quad (13)$$

Выбор в качестве \tilde{u}^4 значения $u_{N_1+N_2-1}^4$ может привести к значительным погрешностям, к тому же может плохо отразиться на устойчивости. Поэтому для определения \tilde{u}^4 был организован внутренний итерационный процесс, и в качестве \tilde{u}^4 было выбрано приближение

$$\hat{u}_{N_1+N_2}^4 \approx u_{N_1+N_2-1}^4 + 4(\hat{u}_{N_1+N_2} - u_{N_1+N_2-1}) = \tilde{u}^4. \quad (14)$$

Если после расчёта на j -м шаге по времени \tilde{u}^4 не равно $\hat{u}_{N_1+N_2}^4$ с приемлемой погрешностью, то полученное значение $\hat{u}_{N_1+N_2}^4$ используется в приближении (14) вместо $u_{N_1+N_2-1}$, и так до получения результата с нужной точностью. Практика показывает, что итерационный процесс необходим только на начальных этапах расчёта, когда имеет место сильный скачок температуры. После того, как температура перестанет существенно меняться, можно обойтись без построения итерационного процесса и с учетом формулы (14) положить $\tilde{u}^4 = u_{N_1+N_2-1}^3 (4\hat{u}_{N_1+N_2} - 3u_{N_1+N_2-1})$.

Так как в растущей сетке на предыдущем временном слое не существует точки $u_{N_1+N_2}$, то любой вариант выбора \tilde{u} приведёт к появлению в схеме (13) условной аппроксимации. Так, выбор $\tilde{u} = u_{N_1+N_2-1}$ приведёт к появлению в порядке аппроксимации члена вида $O(h_2/\tau) = O(v)$. Если в качестве \tilde{u} выбрать $2u_{N_1+N_2-1} - u_{N_1+N_2-2}$ или $3u_{N_1+N_2-1} - 3u_{N_1+N_2-2} + u_{N_1+N_2-3}$, то к порядку аппроксимации добавятся слагаемые $O(h_2^2/\tau) = O(h_2v)$ или $O(h_2^3/\tau) = O(h_2^2v)$ соответственно, однако в этом случае нарушается условие положительности коэффициентов, что может привести к потере устойчивости. Аналогичным образом производится выбор \tilde{q} в формуле (13). Практика показывает, что данные формулы можно использовать после того, как температура перестанет существенно меняться.

4. Примеры расчёта

Рассмотрим задачу осаждения нитрида титана на стальную пластину. Исходные данные задачи:

$$\rho^{(1)} = 7800 \text{ кг/м}^3; \quad \rho^{(2)} = 5400 \text{ кг/м}^3; \quad c^{(1)} = 460 \text{ Дж/(кг} \cdot \text{К)}; \quad c^{(2)} = 600 \text{ Дж/(кг} \cdot \text{К)};$$

$$\lambda^{(1)} = 22.4 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}; \quad \lambda^{(2)} = 41.8 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}; \quad \kappa = 1 \text{ м}^{-1}; \quad \alpha_c = 53 \text{ Вт/(м}^2 \cdot \text{К)}; \quad \alpha_r = 72 \text{ Вт/(м}^2 \cdot \text{К)};$$

$$D^{(1)} = 9 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}; \quad D^{(2)} = 8 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}; \quad \beta_c = 2 \cdot 10^{-3} \text{ м/с}; \quad \beta_r = 10^{-2} \text{ м/с}; \quad Q_r = 50 \text{ кг/м}^3; \quad H = 0.05 \text{ м};$$

$$v = 10^{-7} \text{ м/с}; \quad \varepsilon = 0,7; \quad A = 0,7; \quad L_2 = 2 \cdot 10^6 \text{ Дж/кг}; \quad q_{\Gamma}^r = 9.2 \cdot 10^4 \text{ Вт/м}^2; \quad T_c = 300 \text{ К}; \quad T_r = 1400 \text{ К}.$$

Ниже представлены результаты численного расчёта для пластины при различных параметрах. На рис.2 приведены распределения температуры для криволинейной пластины при различных значениях средней кривизны на момент времени $t = 5 \cdot 10^4 \text{ с}$, а на

рис.3 – распределения температуры для криволинейной пластины при различных скоростях осаждения $v = 10^{-6}, 10^{-7}, 10^{-8}$ м/с на моменты времени $t = 5 \cdot 10^3, 5 \cdot 10^4, 5 \cdot 10^5$ с соответственно.

По результатам расчётов можно сделать вывод о том, что зависимость распределения температуры от средней кривизны поверхности κ в математической модели существенна. При больших значениях средней кривизны поверхности различия в значениях температуры могут быть столь существенными, что одномерная задача теплопроводности будет уже некорректна. Зависимость температурного поля от кривизны подчиняется линейному закону.

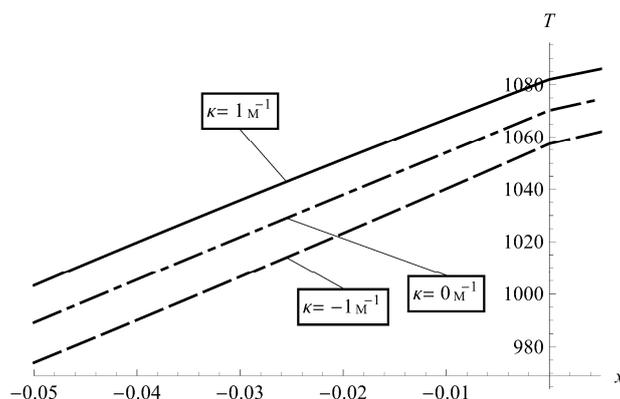


Рис.2. Распределения температуры T по толщине вдоль оси $0x$ для пластины средней кривизны $\kappa = 1, 0, -1 \text{ м}^{-1}$ на момент времени $t = 5 \cdot 10^4$ с. Материалы: сталь, нитрид титана.

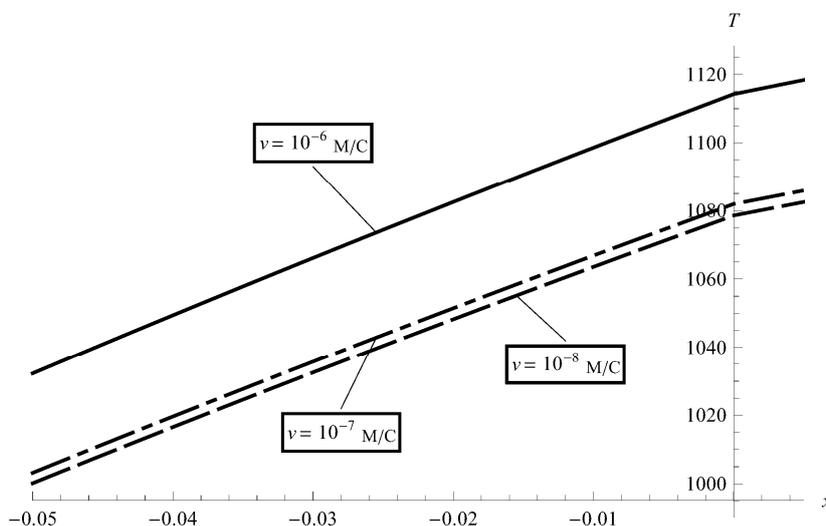


Рис.3. Распределения температурного поля T по толщине вдоль оси $0x$ для скоростей осаждения $v = 10^{-6}, 10^{-7}, 10^{-8}$ м/с на моменты времени $t = 5 \cdot 10^3, 5 \cdot 10^4, 5 \cdot 10^5$ с соответственно. Материалы: сталь, нитрид титана.

Нормальная скорость газофазного осаждения v также оказывает существенное влияние на температурное поле в пластине (рис.3). Большая скорость напыления вызывает значительное изменение температурного поля в пластине, что в реальных задачах приводит к возникновению существенных остаточных температурных напряжений.

Далее приведены результаты расчёта температурного поля для других пар материалов (свойства взяты из [18]). На рис.4 и 5 приведён результат расчёта температурного поля для медной пластины, на которую наносится покрытие нитрида титана. Значение

температуры по глубине медной пластины изменяется слабо вследствие высокой теплопроводности меди.

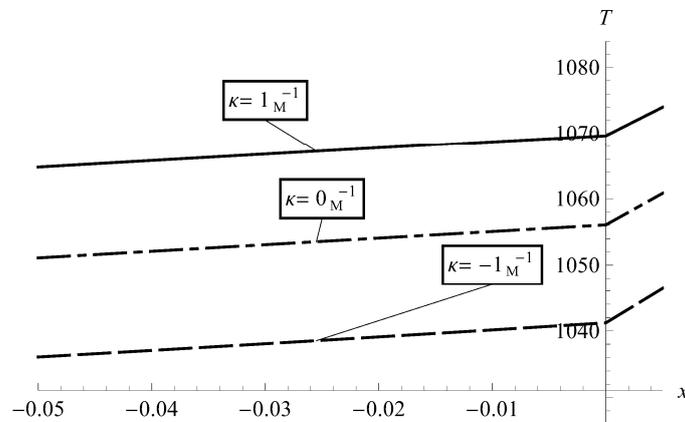


Рис.4. Распределения температурного поля T по толщине вдоль оси Ox для пластины средней кривизны $\kappa=1,0,-1 \text{ M}^{-1}$ на момент времени $t = 5 \cdot 10^4$ с. Материалы: медь, нитрид титана.

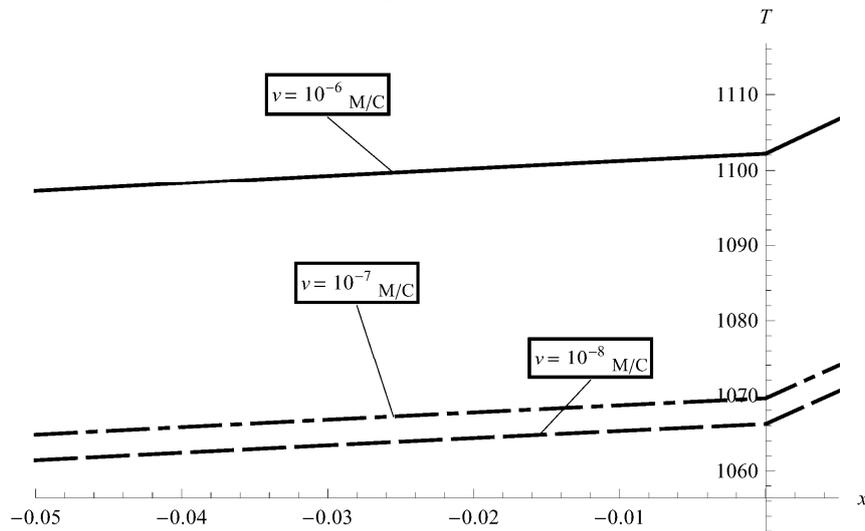


Рис.5. Распределения температурного поля T по толщине вдоль оси Ox для скоростей осаждения $v = 10^{-6}, 10^{-7}, 10^{-8} \text{ M/C}$ на моменты времени $t = 5 \cdot 10^3, 5 \cdot 10^4, 5 \cdot 10^5$ с соответственно. Материалы: медь, нитрид титана.

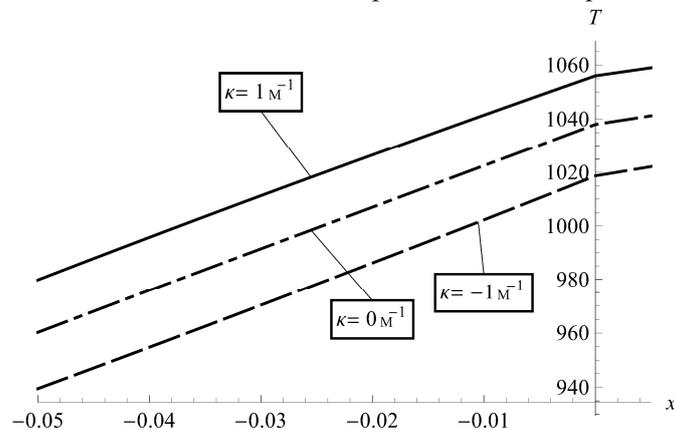


Рис.6. Распределения температурного поля T по толщине вдоль оси Ox для пластины средней кривизны $\kappa = 1,0,-1 \text{ M}^{-1}$ на момент времени $t = 5 \cdot 10^4$ с. Материалы: сталь, оксид цинка.

На рис.6 и 7 приведён результат расчёта температурного поля для стальной пластины, на которую наносится покрытие оксида цинка. Все представленные рисунки демонстрируют линейную зависимость решения от координаты, что связано с параметрами задачи, а именно, с высокой теплопроводностью материала, с малой толщиной пластины.

Проведённые расчёты показывают, что кривизна может существенно влиять на распределение температуры, но большее влияние оказывают свойства материалов и скорость газоподосаждения.

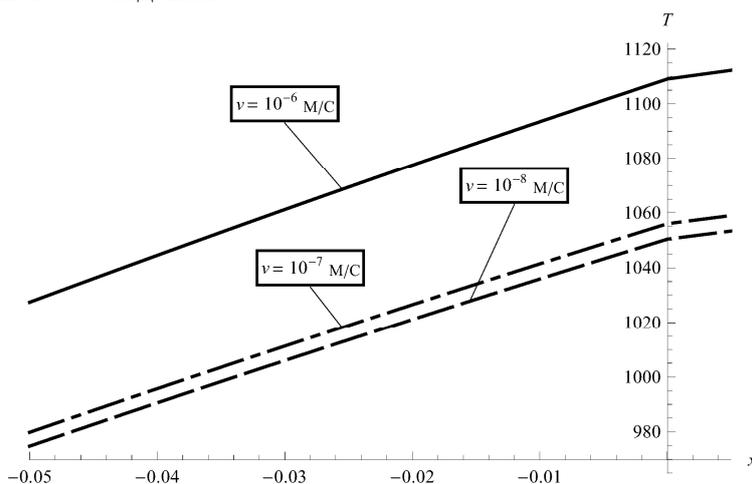


Рис.7. Распределения температурного поля T по толщине вдоль оси $0x$ для скоростей осаждения $v = 10^{-6}, 10^{-7}, 10^{-8}$ м/с на моменты времени $t = 5 \cdot 10^3, 5 \cdot 10^4, 5 \cdot 10^5$ с соответственно. Материалы: сталь, оксид цинка.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. А.И. Гусев. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии. – М.: Физматлит, 2005, 416 с.;
A.I. Gusev. Nanomaterialy, nanostrukturny, nanotekhnologii. – М.: Fizmatlit, 2005, 416 s.
2. Р.А. Андриевский, А.В. Рагуля. Наноструктурные материалы. – М.: Издательский центр Академия, 2005, 192 с.;
R.A. Andrievskii, A.V. Ragulia. Nanostrukturnye materialy. – М.: Izdatelskii tsentr Akademiia, 2005, 192 s.
3. В.Ю. Васильев, С.М. Репинский. Осаждение диэлектрических слоев из газовой фазы // Усп. хим., 2005, т.74, №5, с.452-483;
англ. пер.: V.IU.Vasilev, S.M. Repinsky. Chemical vapour deposition of thin-film dielectrics // Russ. chemical reviews, 2005, v.74, №5, p.413-441.
4. А.В. Тихонравов, И.В. Кочиков, Т.В. Амочкина, Ф.В. Григорьев, О.А. Кондакова, В.Б. Сулимов. Суперкомпьютерное моделирование современных процессов напыления оптических нанопокровов // Выч. мет. и программирование, 2012, т.13, №4, с.491-496;
A.V. Tikhonravov, A.V. Kochikov, T.V. Amochkina, F.V. Grigorev, O.A. Kondakova, V.B. Sulimov. Supercomputernoe modelirovanie sovremennykh protsessov napyleniia opticheskikh nanopokrovov // Vych. met. i programmirovaniye, 2012, t.13, №4, s.491-496.
5. Ф.Ф. Комаров, В.В. Пилько, И.М. Климович. Влияние условий нанесения наноструктурированных покрытий из Ti–Zr–Si–N на их состав, структуру и трибомеханические свойства // Инж.-физич. журнал, 2015, т.88, №2, с.350-354;
англ. пер.: F.F. Komarov, V.V. Pilko, I.M. Klimovich. Influence of conditions employed in application of Ti–Zr–Si–N nanostructured coatings on their composition, structure, and tribomechanical

- properties // J. Eng. Phys. Thermophys., 2015, v.88, №2, p.358-363.
6. *А.В. Костановский, М.К. Гусев.* Осаждение тонких пленок при вакуум-термическом испарении нитрида алюминия // Теплофиз. выс. темп., 1995, т.33, №1, с.163-166;
A.V. Kostanovsky, M.K. Gusev. Osazhdenie tonkikh plenok pri vacuum-termicheskom isparenii nitrída aliuminiia // Teplofiz. Vys. Temp., 1995, t.33, №1, s.163-166.
 7. *Ю.Я. Лукомский, Г.М. Прияткин, Т.В. Мулина, В.Р. Ополовников, В.Л. Киселева, А.В. Кольчугин, О.Л. Носкова.* Электролитическое осаждение металлов на алюминий и его сплавы // Усп. хим. 1991, т.60, №5, с.1077-1103;
англ. пер.: *Yu.Ya. Lukomsky, G.M. Priyatkin, T.V. Mulina, V.R. Opolovnikov, V.L. Kiseleva, A.V. Kolchugin, O.L. Noskova.* Electrolytic deposition of metals on aluminium and its alloys // Russ. chemical reviews, 1991, v.60, №5, p.539-554.
 8. *И.Г. Марченко, И.И. Марченко.* Недиффузионные механизмы атомного упорядочения при низкотемпературном осаждении меди // Письма в ЖЭТФ, 2009, т.89, №7, с.396-401;
I.G. Marchenko, I.I. Marchenko. Nediffuzionnye mekhanizmy atomnogo uporiadocheniia pri nizkotemperaturnom osazhdenii medi // Pisma Zh. Eksp. Teor. Fiz., 2009, t.89, №7, s.396-401.
 9. *Г.Н. Кувыркин, А.В. Журавский, И.Ю. Савельева.* Математическое моделирование газофазного осаждения материала на криволинейную поверхность // Инж.-физич. журнал, 2016, т.89, №6, с.1392-1397;
англ. пер.: *G.N. Kuvyrkin, A.V. Zhuravskii, I.Yu. Savel'eva.* Mathematical modeling of chemical vapor deposition of material on a curvilinear surface // J. Eng. Phys. Thermophys., 2016, v.89, №6, p.1-6.
 10. *Г.Н. Кувыркин.* Термомеханика деформируемого твердого тела при высокоинтенсивном нагружении. – М.: Изд-во МГТУ, 1993, 145 с;
G.N. Kuvyrkin. Termomekhanika deformiruemogo tverdogo tela pri vysokointensivnom nagruzhении. – М.: Izd. MG TU im. N.E. Baumana, 1993, 145 s.
 11. *В.С. Зарубин, Г.Н. Кувыркин, И.Ю. Савельева.* Критическая и оптимальная толщины теплоизоляции при радиационно-конвективном теплообмене // ТВТ, 2016, т.54, №6, с.883-888;
англ. пер.: *V.S. Zarubin, G.N. Kuvyrkin, I.Yu. Savel'eva.* Critical and optimum thickness of thermal insulation at radiation and convective heat exchange // High Temp., 2016, v.54, №6, p.831-836.
 12. *Д.А. Франк-Каменецкий.* Диффузия и теплопередача в химической кинетике. – М.: Наука, 1987, 502 с.;
D.A. Frank-Kamenetskii. Diffuziya i teploperedacha v khimicheskoi kinetike. – М.: Nauka, 1987, 502 s.
 13. *Г.Н. Дульнев.* Теория тепло- и массообмена. – СПб: НИУ ИТМО, 2012, 195 с.;
G.N. Dulnev. Teoriia teplo- i massoobmena. – St. Petersburg: NIU ITMO, 2012, 195 s.
 14. *М.П. Галанин, Е.Б. Савенков.* Методы численного анализа математических моделей. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2010, 591 с.;
M.P. Galanin, E.B. Savenkov. Metody chislennogo analiza matematicheskikh modelei. – М: Izd. MG TU im. N.E. Baumana, 2010, 591 s.
 15. *Н.Н. Калиткин.* Численные методы. – М.: Наука, 1978, 512 с.;
N.N. Kalitkin. Chislennye metody. – М.: Nauka, 1978, 512 s.
 16. *В.С. Рябенский.* Введение в вычислительную математику. – М.: Наука, 1994, 336 с.;
V.S. Ryabenky. Vvedenie v vychislitel'nuiu matematiku. – М.: Nauka, 1994, 336 s.
 17. *А.А. Самарский.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1977, 656 с.;
A.A. Samarskii. Teoriia rasnostnykh skhem. – М: Nauka, 1977, 656 s.
 18. <http://libmetal.ru/>