УДК 536.2

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ПРИ НАНЕСЕНИИ ПОЛУПРОЗРАЧНОГО ПОКРЫТИЯ НА ОХЛАЖДАЕМУЮ КРИВОЛИНЕЙНУЮ ПОДЛОЖКУ

© 2022 г. Г. Н. Кувыркин, И. Ю. Савельева, А. В. Журавский*

Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

**E-mail: zhuravskii_a@bmstu.ru* Поступила в редакцию 13.05.2021 г. После доработки 10.06.2021 г. Принята к публикации 28.09.2021 г.

Построена модель теплообмена при осаждении полупрозрачного материала на охлаждаемую криволинейную подложку. В модели учтены все основные теплофизические процессы: конвективный теплообмен, тепло- и массоперенос при осаждении частиц на подложку, а также теплообмен излучением с учетом оптических свойств наносимого полупрозрачного покрытия. Для разработанной математической модели приведено численное решение, позволяющее получить распределение температуры по толщине подложки и покрытия в любой момент времени. Представлены и проанализированы результаты численного расчета с использованием построенного вычислительного алгоритма. Выявлено влияние формы подложки и скорости осаждения на распределение температуры в покрытии. Показана зависимость температуры наращиваемого покрытия от его оптических характеристик. Проведено сравнение результатов моделирования с известными экспериментальными данными.

DOI: 10.31857/S0040364422020120

ВВЕДЕНИЕ

Газофазное осаждение является одной из аддитивных технологий и представляет собой нанесение покрытия на охлаждаемую поверхность путем осаждения материала покрытия из газовой фазы в результате физических или химических процессов [1]. Процесс газофазного осаждения проводится в вакууме или в атмосфере рабочего газа при достаточно низком давлении. По сравнению с традиционными методами нанесения покрытий газофазное осаждение обладает такими преимуществами, как возможность изготовления изделий произвольно сложной формы без создания специальной технологической оснастки и эффективность использования осаждаемого сырья. Изначально метод применялся для осаждения чистых металлов из их паров в вакууме. В настоящее время метод получил широкое развитие и активно используется для нанесения покрытий различной структуры, в том числе и многослойной. Важно отметить, что физические свойства полученных композиций сушественно отличаются как от характеристик исходных материалов [2], так и от характеристик покрытий, наносимых традиционными методами. Газофазный метод позволяет получать материалы и покрытия без структурных дефектов, которые оказывают значительное влияние на теплофизические характеристики, как показано в работе [3]. Поэтому технология газофазного осаждения получила широкое распространение в тех отраслях промышленности, в которых требуется нанесение максимально однородных и качественных покрытий.

Одной из важных областей применения газофазных методов является нанесение различных оптических пленок, так как высокая однородность получаемых покрытий позволяет свести к минимуму их дефекты. В работах [4, 5] рассмотрено химическое осаждение из паровой фазы тонких пленок оксида цинка, проведено исследование оптических свойств полученных покрытий различными методами. Многие работы посвящены исследованию теплообмена в полученных, в том числе и газофазным методом, многослойных композитах. В [6] изучены тепловые процессы в многослойном композите с учетом анизотропии материала. В [7] температурное состояние многослойного композита рассмотрено с учетом сложного теплообмена на свободной границе. Моделированию и анализу процессов осаждения посвящены работы [8-10]. В [8] исследуются свойства полученных магнетронным напылением покрытий. В [9] рассмотрено формирование металлических кластеров при осаждении из паровой фазы. В [10] представлен процесс осаждения покрытия, проведено сравнение теоретических данных с результатами эксперимента.



Рис. 1. Наращиваемая криволинейная подложка толщиной H₁, на которую наносится покрытие толщиной H_2 – (а) и (б) – излучение газа, падающее на поверхность подложки (поглощенное, пропущенное, отраженное), и излучение подложки.

Свойства полученных газофазным методом покрытий зависят не только от свойств исходных материалов, но и от условий нанесения. Оптические и механические характеристики полученных изделий могут существенно отличаться в зависимости от метода и условий осаждения. Поэтому возникает необходимость в создании новых математических моделей, описывающих процесс газофазного осаждения с учетом всех наиболее существенных особенностей процесса.

Во многих работах 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 пленки. В работе [11] приведены граничные условия, наиболее полно соответствующие реальному процессу осаждения на криволинейную подложку для локальной модели теплопроводности. В [12] учтено влияние диффузионных процессов на распределение температуры в подложке. В данной работе составлена математическая модель осаждения на подложку полупрозрачного покрытия и рассмотрено влияние оптических свойств материала на распределение температуры.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Рассматривается криволинейная подложка (рис. 1) толщиной H_1 и главными радиусами

кривизны поверхности R_1, R_2 , на поверхность которой осаждается из газовой фазы полупрозрачный материал с постоянной скоростью v, создавая покрытие толщиной $H_2 = H_2(t) = vt$. Принято допущение о постоянстве температур газа T_m и охлаждающей среды T_g.

Вводится криволинейная ортогональная система координат так, чтобы ось Ох была направлена по нормали к поверхности подложки. Начало координат x = 0 соответствует внешней поверхности подложки в начальный момент времени.

На внутренней поверхности подложки $x = -H_1$ происходит конвективный теплообмен с охлаждающей средой. На внешней поверхности x = $= H_2(t)$ из-за высокой температуры газа необходимо помимо конвективного теплообмена и тепло- и массопереноса учитывать теплообмен излучением, причем излучает как газ, так и поверхность, на которую осаждается материал. Так как наносимое покрытие является полупрозрач-

ным, то излучение газа q_l^g , падающее на подложку, распадается на поглощенное, пропущенное и отраженное с коэффициентами A_g , D_g , R_g соответственно, причем $A_g + D_g + R_g = 1$. В силу принятых допущений переизлучение, связанное с отражением теплового потока в газовую среду, не учитывается.

Принимается гипотеза идеального теплового контакта между подложкой и полупрозрачным покрытием, имеющими, в общем случае, различную теплопроводность $\lambda^{(k)}$ (k = 1 для подложки, k = 2 для покрытия). В точке контакта также необходимо учесть излучение материала подложки $\varepsilon_s \sigma_0 T_c^4$ в полупрозрачную среду. Здесь ε_s – коэффициент излучения подложки; $T_c = T_c(t) = T(t, 0)$ – температура в точке контакта.

Для тонкостенной подложки справедливо уравнение теплопроводности [13]

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

где $c^{(k)}$ – удельная массовая теплоемкость, $\rho^{(k)}$ – плотность, T = T(t, x) – температура, t – время, x – координата, $q^{(k)}$ – проекция вектора плотности теплового потока на ось Ох.

Уравнение (1) справедливо для материала подложки (k = 1) и наносимого покрытия (k = 2) при условии, что толщина подложки значительно меньше радиуса кривизны $H_1 \ll |1/\kappa(x)|$. В этом случае можно принять среднюю кривизну эквидистантного сечения подложки постоянной по толщине:

$$\kappa(x) \approx \kappa(0) = \kappa_0 = (1/R_1 + 1/R_2)/2.$$
 (2)

Тепловой поток в подложке находится по закону Фурье

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР том 60 № 6

2022

.

$$q^{(1)} = -\lambda^{(1)} \frac{\partial T}{\partial x}.$$
 (3)

В тепловом потоке в полупрозрачном покрытии учитываются теплопроводность и лучистый тепловой поток, который изменяется по толщине покрытия по закону Бугера [14], причем излучает как газ, так и поверхность подложки:

$$q^{(2)} = -\lambda^{(2)} \frac{\partial T}{\partial x} - D_g q_l^g \exp(-\gamma (H_2 - x)) +$$

+ $\varepsilon_s \sigma_0 T_c^4 \exp(-\gamma x),$ (4)

где γ — показатель поглощения полупрозрачного покрытия.

Учитывая (1)–(4), получаем уравнения теплопроводности для подложки и покрытия

$$\begin{cases} c^{(1)}\rho^{(1)}\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda^{(1)}\frac{\partial T}{\partial x}\right) + 2\kappa_0 \left(\lambda^{(1)}\frac{\partial T}{\partial x}\right); \\ x \in (-H_1, 0); \quad c^{(2)}\rho^{(2)}\frac{\partial T}{\partial t} = \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda^{(2)}\frac{\partial T}{\partial x} + D_g q_l^{\ g} \exp\left(-\gamma(H_2 - x)\right) - \\ - \varepsilon_s \sigma_0 T_c^{\ 4} \exp\left(-\gamma x\right)\right) + \\ + 2\kappa_0 \left(\lambda^{(2)}\frac{\partial T}{\partial x} + D_g q_l^{\ g} \exp\left(-\gamma(H_2 - x)\right) - \\ - \varepsilon_s \sigma_0 T_c^{\ 4} \exp\left(-\gamma x\right)\right); \quad x \in (0, H_2). \end{cases}$$
(5)

Для системы (5) условие теплового контакта представляется в виде

$$\begin{cases} T(t,0-0) = T(t,0+0); \\ \lambda^{(1)} \frac{\partial T}{\partial x}\Big|_{x=0-0} = \\ = \left(\lambda^{(2)} \frac{\partial T(x)}{\partial x} + D_g q_l^g \exp(-\gamma H_2)\right) - \varepsilon_s \sigma_0 T_c^4 \right)\Big|_{x=0+0}. \end{cases}$$
(6)

Граничные условия:

$$\begin{cases} \lambda^{(1)} \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=-H_1} = \alpha_m \left(T \left(t, -H_1 \right) - T_m \right); \\ \lambda^{(2)} \frac{\partial T \left(x \right)}{\partial x} \Big|_{x=H_2} = \alpha_g \left(T_g - T \left(t, H_2 \right) \right) - \\ - \varepsilon_g \sigma_0 T^4 \left(t, H_2 \right) + A_g q_l^g + \\ + c^{(2)} \rho^{(2)} v \left(T_g - T \left(t, H_2 \right) \right) + \rho^{(2)} v L^{(2)}, \end{cases}$$
(7)

где ε_g – коэффициент излучения покрытия; $L^{(2)}$ – удельная теплота фазового перехода для осаждае-

мого вещества; α_g , α_m — коэффициенты конвективного теплообмена газа с поверхностью подложки и подложки с охлаждающей средой.

Распределение температуры в подложке в начальный момент времени можно получить решением стационарного уравнения теплопроводности для неподвижных границ при отсутствии осаждения вещества:

$$\left| \frac{d}{dx} \left(\lambda^{(1)} \frac{dT_0}{dx} \right) + 2\kappa_0 \lambda^{(1)} \frac{dT_0}{dx} = 0; \quad x \in (-H_1, 0); \\ \lambda^{(1)} \frac{dT_0}{dx} \Big|_{x=-H_1} = \alpha_m \left(T_0 \left(-H_1 \right) - T_m \right); \quad (8) \\ \lambda^{(2)} \frac{dT_0}{dx} \Big|_{x=0} = \alpha_g \left(T_g - T_0 \left(0 \right) \right) - \varepsilon_g \sigma_0 T_0^4 \left(0 \right) + A_g q_l^g.$$

В результате решения системы (8) получается начальное распределение температуры $T_0(x)$ в подложке.

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ

Численный алгоритм решения уравнения теплопроводности (5) с граничными условиями (6), (7) построен с использованием интегро-интерполяционного метода [15–17]. Сетка по пространству вводится таким образом, что за каждый промежуток времени τ на внешнюю сторону подложки наносится слой вещества толщиной $h_2 = v\tau$:

$$\omega_h = \{ x_i = -H + ih_1, i = 0...N_1, h_1 = H/N_1; x_i = (i - N_1)h_2, i = N_1 + 1...N_1 + N_2, h_2 = v\tau \}.$$

Проинтегрируем первое уравнение системы (5) на отрезке $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ по пространству и $[t_j, t_{j+1}]$ по времени (здесь $t_{j+1} - t_j = \tau$). Перейдем от непрерывной функции T(t, x) к сеточной u_i^j . Введем обозначения $u = u_i^j$, $\hat{u} = u_i^{j+1}$, $\hat{u}_+ = u_{i+1}^{j+1}$, $\hat{u}_- = u_{i-1}^{j+1}$. Обозначим $u_c = u_{N_1}^j$ и $u_g = u_{N_1+N_2}^j$ температуру контакта двух сред и температуру внешней поверхности покрытия, контактирующей с газовой средой, соответственно. Толщина покрытия вычисляется на каждом шаге по формуле $H_2 = v\tau N_{\tau}$, (N_{τ} – число шагов по времени).

После интегрирования первого уравнения системы (5) получаем

$$c^{(1)}\rho^{(1)}\frac{\hat{u}_{i}-u_{i}}{\tau}h_{l} = \\ = \left(\lambda^{(1)}\frac{\hat{u}_{+}-\hat{u}}{h_{l}} - \lambda^{(1)}\frac{\hat{u}-\hat{u}_{-}}{h_{l}}\right)_{i} + 2\kappa_{0}\lambda^{(1)}\left(\frac{\hat{u}_{+}-\hat{u}_{-}}{2}\right)_{i}.$$

Второе уравнение системы (5) имеет следующий разностный аналог:

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

$$c^{(2)}\rho^{(2)}\frac{\hat{u}_{i}-u_{i}}{\tau}h_{2} = \lambda^{(2)}\left(\frac{\hat{u}_{+}-\hat{u}}{h_{2}}\right)_{i} - \lambda^{(2)}\left(\frac{\hat{u}-\hat{u}_{-}}{h_{2}}\right)_{i} + D_{g}q_{l}^{g} \times \times \left(\exp\left(-\gamma\left(H_{2}-x_{i+1/2}\right)\right) - \exp\left(-\gamma\left(H_{2}-x_{i-1/2}\right)\right)\right) - \varepsilon_{s}\sigma_{0}\hat{u}_{c}^{4}\left(\exp\left(-\gamma x_{i+1/2}\right) - \exp\left(-\gamma x_{i-1/2}\right)\right) + 2\kappa_{0}\left(\lambda^{(2)}\left(\frac{\hat{u}_{+}-\hat{u}_{-}}{2}\right) + \left(D_{g}q_{l}^{g}\exp\left(-\gamma\left(H_{2}-x_{i}\right)\right) - \varepsilon_{s}\sigma_{0}\hat{u}_{c}^{4}\exp\left(-\gamma x_{i}\right)\right)h_{2}\right).$$

Данная разностная схема является нелинейной из-за слагаемого, содержащего \hat{u}_c^4 . Для упрощения численных расчетов разностную схему можно линеаризовать следующим образом [14]:

$$\hat{u}_{c}^{4} \approx u_{c}^{4} + 4u_{c}^{3}(\hat{u}_{c} - u_{c}) =$$

$$= u_{c}^{4} + 4u_{c}^{3}\hat{u}_{c} - 4u_{c}^{4} = u_{c}^{3}(4\hat{u}_{c} - 3u_{c}).$$
(9)

Такая линеаризация применима на поздних этапах расчета, когда температура выходит на стационарное значение и слабо зависит от времени. На начальных этапах обычно требуется построение внутреннего итерационного процесса.

Аппроксимация условия идеального теплового контакта [16] такова:

$$\left(c^{(1)}\rho^{(1)}\frac{h_{1}}{2} + c^{(2)}\rho^{(2)}\frac{h_{2}}{2}\right)\frac{\hat{u}_{N_{1}} - u_{N_{1}}}{\tau} = \lambda^{(2)}\left(\frac{\hat{u}_{+} - \hat{u}}{h_{2}}\right)_{N_{1}} - \lambda^{(1)}\left(\frac{\hat{u} - \hat{u}_{-}}{h_{1}}\right)_{N_{1}} + D_{g}q_{l}^{g}\exp\left(-\gamma\left(H_{2} - x_{N_{1}+1/2}\right)\right) - \epsilon_{s}\sigma_{0}\hat{u}_{c}^{4}\exp\left(-\gamma x_{N_{1}+1/2}\right) + 2\kappa_{0}\left(\lambda^{(1)}\left(\frac{\hat{u} - \hat{u}_{-}}{2}\right)_{N_{1}} + \lambda^{(2)}\left(\frac{\hat{u}_{+} - \hat{u}}{2}\right)_{N_{1}} + \left(D_{g}q_{l}^{g}\exp\left(-\gamma H_{2}\right) - \epsilon_{s}\sigma_{0}\hat{u}_{c}^{4}\right)\frac{h_{2}}{2}\right).$$

$$(10)$$

Аппроксимация левого граничного условия:

$$c^{(1)}\rho^{(1)}\frac{\hat{u}_{0}-u_{0}}{\tau}\frac{h_{1}}{2} = \\ = \left(\lambda^{(1)}\frac{\hat{u}_{1}-\hat{u}_{0}}{h_{1}}-\alpha_{m}(\hat{u}_{0}-T_{m})\right) + 2\kappa_{0}\lambda^{(1)}\frac{\hat{u}_{1}-\hat{u}_{0}}{2}.$$

При построении разностной схемы для аппроксимации правого граничного условия важно обратить внимание на две сложности: нелинейность по температуре из-за учета излучения подложки и движение границы покрытия:

$$\begin{aligned} c^{(2)} \rho^{(2)} \frac{u_{N_1+N_2} - u_g}{\tau} \frac{h_2}{2} &= \alpha_g \left(T_g - \hat{u}_{N_1+N_2} \right) - \varepsilon_g \sigma_0 \hat{u}_g^4 + \\ &+ A_g q_l^g + c^{(2)} \rho^{(2)} v \left(T_g - \hat{u}_{N_1+N_2} \right) - \\ &- \lambda^{(2)} \left(\frac{\hat{u} - \hat{u}_-}{h_2} \right)_{N_1+N_2} + 2\kappa_0 \lambda^{(2)} \left(\frac{\hat{u} - \hat{u}_-}{2} \right)_{N_1+N_2} + \\ &+ D_g q_l^g \left(1 - \exp\left(-\gamma \left(H_2 - x_{N_1+N_2-1/2} \right) \right) \right) - \quad (11) \\ &- \varepsilon_s \sigma_0 \hat{u}_c^4 \left(\exp\left(-\gamma H_2 \right) - \exp\left(-\gamma x_{N_1+N_2-1/2} \right) \right) + \\ &+ 2\kappa_0 \left(\lambda^{(2)} \left(\frac{\hat{u} - \hat{u}_-}{2} \right)_{N_1+N_2} + \\ &+ \left(D_g q_l^g - \varepsilon_s \sigma_0 \hat{u}_c^4 \exp\left(-\gamma H_2 \right) \right) \frac{h_2}{2} \right). \end{aligned}$$

В нелинейных слагаемых \hat{u}_c^4 в формулах (10), (11) используется приближение (9).

В качестве \hat{u}_{g}^{4} можно взять приближение, аналогичное приближению (9):

$$\hat{u}_{g}^{4} \approx u_{N_{1}+N_{2}-1}^{4} + 4u_{N_{1}+N_{2}-1}^{3} \left(\hat{u}_{g} - u_{N_{1}+N_{2}-1} \right) = u_{N_{1}+N_{2}-1}^{3} \left(4\hat{u}_{g} - 3u_{N_{1}+N_{2}-1} \right).$$

В растущей сетке на предыдущем временном слое не существует точки $u_g = u_{N_1+N_2}$, поэтому любой вариант выбора соответствующей точки в формуле (11) приведет к появлению условной аппроксимации. Так, выбор $u_g = u_{N_1+N_2-1}$ приведет к появлению в порядке аппроксимации члена вида $O(h_2/\tau) = O(v)$. Если в качестве u_g взять $2u_{N_1+N_2-1} - u_{N_1+N_2-2}$ 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.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Рассмотрим задачу осаждения покрытия оксида цинка на стальную подложку. Исходные данные задачи [18, 19]:

$$ρ^{(1)} = 7800 \text{ Kr/m}^3, ρ^{(2)} = 5600 \text{ Kr/m}^3;$$

 $c^{(1)} = 460 \text{ Дж/ (Kr K)}, c^{(2)} = 500 \text{ Дж/ (Kr K)};$
 $\lambda^{(1)} = 22.4 \text{ Br/ (M K)}, \lambda^{(2)} = 54.0 \text{ Br/ (M K)};$
 $\kappa_0 = 1 \text{ m}^{-1}; \alpha_m = 53 \text{ Br/ (M}^2 \text{ K)},$
 $\alpha_g = 72 \text{ Br/ (M}^2 \text{ K)}; H_1 = 0.005 \text{ M},$
 $v = 10^{-7} \text{ M/c}, L^{(2)} = 2 \times 10^6 \text{ Дж/Kr},$
 $q_l^g = 4 \times 10^4 \text{ Br/m}^2; T_m = 300 \text{ K}, T_g = 1400 \text{ K};$
 $\epsilon_g = 0.3, D_g = 0.9,$
 $A_r = 0.1, \gamma = 10^3 \text{ M}^{-1}, \epsilon_r = 0.3.$

A_g = 0.1, γ = 10 м , ε_s = 0.3. На рис. 2 представлено распределение температуры в подложке при различных значениях средней кривизны. Результаты численного расчета показы-

2022



Рис. 2. Распределение температуры по толщине подложки на момент времени $t = 5 \times 10^3$ с при различной средней кривизне: $1 - \kappa_0 = -1$ м, 2 - 0, 3 - 1.



Рис. 3. Распределение температуры по толщине подложки для различных скоростей осаждения: $1 - v = 2 \times 10^{-7}$ м/с, $t = 2.5 \times 10^3$ с; $2 - 10^{-7}$, 5×10^3 ; $3 - 5 \times 10^{-8}$, 10^4 .



Рис. 4. Распределение температуры по толщине подложки (а) при различных коэффициентах пропускания и поглощения ($A_g = 1 - D_g$): $1 - D_g = 0.1$, 2 - 0.5, 3 - 0.9; (б) – увеличенный фрагмент графика.



Рис. 5. Распределение температуры по толщине подложки при различных значениях натурального показателя поглощения покрытия: $1 - \gamma = 5 \times 10^2 \text{ м}^{-1}$, $2 - 10^3$, $3 - 2 \times 10^3$.

вают, что температура в подложке возрастает с увеличением положительной средней кривизны κ_0 .

На рис. 3 приведена зависимость температуры подложки и покрытия от различных скоростей осаждения *v*. Из графика видно, что большая скорость наращивания приводит к существенному увеличению температуры во всей заготовке.

Рассмотрим влияние оптических характеристик материала осаждаемого покрытия на распределение температуры.

На рис. 4 показано значение температуры в подложке при различных значениях коэффициентов пропускания D_g и поглощения A_g теплового излучения газовой среды. Градиент температуры в покрытии уменьшается с увеличением коэффициента пропускания. Можно сделать вывод, что полупрозрачное покрытие благодаря теплообмену излучением нагревается равномернее.

На рис. 5 показано значение температуры в подложке при различных значениях натурального показателя поглощения покрытия. Как видно из рисунка, большему показателю поглощения соответствует более высокая температура покрытия.

Рис. 6 демонстрирует результаты расчета для различных коэффициентов излучения подложки.



Рис. 6. Распределение температуры по толщине подложки при различных значениях коэффициента излучения подложки: $1 - \varepsilon_s = 0.2, 2 - 0.3, 3 - 0.4$.



Рис 7. Температура поверхности покрытия YSZ на подложке из Inconel 718; точки – экспериментальные результаты из [20].

Увеличение интенсивности излучения подложки приводит к уменьшению температуры подложки. Оптические характеристики материала подложки также оказывают существенное влияние на распределение температуры.

В заключение приводится сравнение результатов численного моделирования с известными экспериментальными данными. На рис. 7 представлены результаты моделирования нанесения покрытия YSZ (иттрий-стабилизированного диоксида циркония) на подложку из Inconel 718 (никель-хромового сплава). Показана температура подвижной границы покрытия (x = vt) в различные моменты времени. Результаты численного моделирования согласуются с экспериментальными данными.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Температурное поле в подложке, на которую наносится полупрозрачное покрытие, зависит от геометрии подложки, скорости осаждения, а также от термодинамических и оптических свойств материалов покрытия и подложки. Различные доли пропускаемого и поглощаемого излучения влияют на перепад температуры в покрытии. Показатель поглощения излучения оказывает существенное влияние на распределение температуры в покрытии и подложке. Излучение подложки также существенно влияет на результаты расчетов.

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ № 19-38-90178 и в рамках госзадания Министерства науки и высшего образования РФ (проект 0705-2020-0032).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Андриевский Р.А., Рагуля А.В. Наноструктурные материалы. М.: Академия, 2005. 192 с.
- 2. *Пул Ч., Оуэнс Ф*. Нанотехнологии. М.: Техносфера, 2005. 336 с.
- 3. Лугуева Н.В., Лугуев С.М. Влияние дефектов структуры на теплопроводность поликристаллов ZnS, ZnSe, CdTe // TBT. 2004. Т. 42. № 1. С. 58.
- 4. Nebatti A., Pflitsch C., Curdts B., Atakan B. Using the Acetylacetonates of Zinc and Aluminium for the

Metalorganic Chemical Vapour Deposition of Aluminium Doped Zinc Oxide Films // Mater. Sci. Semicond. Proc. 2015. V. 39. P. 467.

- 5. Romero-Gómez P., Toudert J., Sánchez-Valencia J.R., Borrás A., Barranco A., Gonzalez-Elipe A.R. Tunable Nanostructure and Photoluminescence of Columnar ZnO Films Grown by Plasma Deposition // J. Phys. Chem. C. 2010. V. 114. № 49. P. 20932.
- 6. Формалев В.Ф., Колесник С.А., Чипашвили А.А. Численное моделирование теплопереноса в анизотропных телах с разрывными характеристиками // Матем. моделирование. 2004. Т. 16. № 5. С. 94.
- 7. Формалев В.Ф., Колесник С.А., Миканев С.В. Моделирование теплового состояния композиционных материалов // ТВТ. 2003. Т. 41. № 6. С. 935.
- Костановский А.В., Пронкин А.А., Кириченко А.Н. Формирование тонкой пленки, содержащей αкарбин, при магнетронном распылении графитовой мишени и воздействии внешнего источника фотоактивации // ТВТ. 2013. Т. 51. № 5. С. 787.
- 9. Воронцов А.Г., Коренченко А.Е., Гельчинский Б.Р. Анализ стабильности малых металлических кластеров при конденсации паров металла // ТВТ. 2019. Т. 57. № 3. С. 404.
- Картушинский А.И., Крупенский И.А., Тислер С.В., Хусаинов М.Т., Щеглов И.Н. Осаждение твердых частиц в ламинарном пограничном слое на плоской пластине // ТВТ. 2009. Т. 47. № 6. С. 927.
- Кувыркин Г.Н., Журавский А.В., Савельева И.Ю. Математическое моделирование газофазного осаждения материала на криволинейную поверхность // ИФЖ. 2016. Т. 89. № 6. С. 1392.
- 12. *Kuvyrkin G.N., Savel'eva I.Yu., Zhuravsky A.V.* Numerical Modelling of Vapor-phase Epitaxy with Allowance for Diffusion Processes // Mathematical Models and Computer Simulations. 2018. V. 10. № 3. P. 229.
- Кувыркин Г.Н. Термомеханика деформируемого твердого тела при высокоинтенсивном нагружении. М.: Изд-во МГТУ, 1993. 145 с.
- Галанин М.П., Савенков Е.Б. Методы численного анализа математических моделей. 2-е изд. М.: Издво МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2018. 592 с.
- 15. Макаров А.Н. Теория и практика теплообмена в электродуговых и факельных печах, топках, камерах сгорания. Ч. 1. Основы теории теплообмена излучением в печах и топках. Тверь: ТГТУ, 2007. 184 с.
- Рябенький В.С. Введение в вычислительную математику. М.: Наука, 1994. 336 с.
- Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1977. 656 с.
- 18. http://libmetal.ru/ (дата обращения: 12.04.2017).
- Головчук В.И., Гумаров А.И., Бумай Ю.А. Модификация оптических свойств оксида цинка имплантацией ионов кобальта. В кн.: Взаимодействие излучений с твердым телом – Interaction of Radiation with Solids. Матер. 12-й Междунар. конф. Минск, Беларусь, 19–22 сент. 2017 г. / Под ред. Углова В.В. и др. Минск: Изд. центр БГУ, 2017. С. 225.
- 20. Zhe Lu, Guanlin Lyu, Abhilash Gulhane, Hyeon-Myeong Park, Jun Seong Kim, Yeon-Gil Jung, Jing Zhang. Experimental and Modeling Studies of Bond Coat Species Effect on Microstructure Evolution in EB-PVD Thermal Barrier Coatings in Cyclic Thermal Environments // Coatings. 2019. V. 9. № 10. 626.

ТЕПЛОФИЗИКА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР том 60 № 6 2022