

- [1] *Иоффе И.В., Калинин Т.В., Эйдельман Е.Д.* // Письма ЖТФ. 1976. Т. 2. Вып. 9. С. 395–396.
- [2] *Эйдельман Е.Д.* // ЖТФ. 1987. Т. 57. Вып. 6. С. 1145–1147.
- [3] *Эйдельман Е.Д.* // ЖТФ. 1993. Т. 63. Вып. 10. С. 193–196.
- [4] *Chandrasekhar S.* Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability. Oxford: University Press, 1961. 659 p.
- [5] *Гершуни Г.З., Жуловицкий Е.М.* Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. М.: Наука, 1972. 389 с.
- [6] *Миркин Л.И.* // ДАН СССР. 1966. Т. 186. № 2. С. 305–308.
- [7] *Рыкалин Н.Н., Углов А.А., Кокора А.Н.* // Физ. и хим. обработки материалов. 1972. № 6. С. 14–21.
- [8] *Бетанелли А.И., Даниленко Л.П., Лоладзе Т.Н. и др.* // Физ. и хим. обработки материалов. 1972. № 6. С. 22–25.
- [9] *Карпов С.П., Ковальчук Ю.В., Погорельский Ю.В.* // ФТП. 1986. Т. 2. Вып. 11. С. 1945–1949.
- [10] *Александров Л.Н.* Кинетика кристаллизации и перекристаллизации полупроводниковых пленок. Новосибирск: Наука, 1985. 289 с.

Санкт-Петербургский
химико-фармацевтический
институт

Поступило в Редакцию
27 января 1993 г.

01
© 1993 г.

Журнал технической физики, т. 63, в. 10, 1993

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ПЕРВОГО РОДА МЕТОДОМ ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ В СЛУЧАЕ РАВНОМЕРНО ПЕРЕМЕЩАЮЩЕГОСЯ ПОВЕРХНОСТНОГО ИСТОЧНИКА

С.А.Некрасов

Введение

Существует ряд причин, объясняющих повышенный интерес исследователей к проблеме редукции задачи Стефана к эквивалентному интегральному уравнению минимальной размерности $[1-4]$. По сравнению с обычными краевыми задачами (КЗ) для параболического уравнения второго порядка задача Стефана отличается наличием так называемой стефановской нелинейности уравнения, имеющей особенность типа дельта-функции. Производная первого порядка от решения задачи Стефана является разрывной функцией.

Перечисленные обстоятельства вызывают дополнительные трудности при решении задачи Стефана конечно-разностными и конечно-элементными методами, предъявляющими определенные требования гладкости к уравнению и его решению $[3,4]$.

В случае многомерной постановки КЗ использование данных методов сопряжено с большими затратами оперативной памяти. От некоторых из этих недостатков свободен метод граничных интегральных уравнений.

В научной литературе достигнут реальный прогресс только для одномерной постановки краевой задачи Стефана.

Подробнее обоснование алгоритма редукции и вычислительной схемы решения задачи Стефана методом интегральных уравнений для нестационарного случая проведено автором в [1].

В работе рассматривается практически важный случай стационарно-го равномерно перемещающегося поверхностного источника. На практике с подобными постановками КЗ приходится сталкиваться при моделировании термического воздействия электродуговых разрядов или лазерного луча на массивные тела и оболочки [1,5,6].

Термическое воздействие поверхностного источника на массивный электрод

Рассмотрим установившийся температурный режим при воздействии электрической дуги, опорное пятно которой движется равномерно и прямолинейно вдоль оси абсцисс, так что координаты точки привязки дуги к поверхности электрода имеют вид $(x - vt, y, z = 0)$, где v — скорость движения дуги; x, y, z — декартовы координаты.

Если ввести локальные координаты, связанные с центром опорного пятна дуги, то формулировка КЗ примет вид [1]

$$-\operatorname{div}(\lambda \operatorname{grad} u) - \rho c v \frac{\partial u}{\partial x} = f + \rho \alpha v \frac{\partial \eta}{\partial x} (u - u_f), \quad M \in R_-^3,$$

$$\lambda \frac{\partial u}{\partial z} = q_s, \quad z = 0; \quad \lambda, \rho, c, \alpha, v = \text{const},$$

где $R_-^3 = \{(x, y, z) | z < 0\}$, u — температура, λ — теплопроводность, ρ — массовая плотность, c — теплоемкость, α — энтальпия фазового перехода, u_f — температура плавления (кристаллизации), f — плотность объемных, q_s — поверхностных источников тепла, $\eta(x)$ — единичная функция Хевисайда.

Процедура, изложенная в [1], приводит к следующему выражению для температурного распределения:

$$u(M) = H(M) - \rho \alpha v \int_{R_-^3} \frac{\partial G}{\partial x_N} (M, N) \eta(u(N) - u_f) dV_N, \quad M \in R_-^3,$$

где $H(M)$ — функция, описывающая температурное поле при отсутствии скрытой теплоты плавления; $G(M, N)$ — функция Грина для полупространства

$$G(M, N) = \exp[\rho c v (x_M - x_N)/2\lambda] \left\{ \exp[-\rho c v r_{MN}/2\lambda] / r_{MN} + \right. \\ \left. + \exp[-\rho c v r_{MN}^*/2\lambda] / r_{MN}^* \right\} / (4\pi\lambda),$$

$$r_{MN}^* = \sqrt{(x_M - x_N)^2 + (y_M - y_N)^2 + (z_M + z_N)^2}.$$

Если ввести в рассмотрение априорно неизвестную функцию $z = z_0(x, y)$, описывающую в декартовой системе координат поверхность

фазового перехода, то интегральное представление температуры $u(x, y, z)$ примет вид

$$u(x, y, z) = H(x, y, z) - \rho\alpha v \int_{R^2} \int_{z_0(x_N, y_N)}^0 \frac{\partial G}{\partial x_N}(x - x_N, y - y_N, z - z_N) dV_N.$$

В силу равенства

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_N} \left\{ \int_{z_0(x_N, y_N)}^0 G(x - x_N, y - y_N, z - z_N) dz_N \right\} &= \\ &= \int_{z_0(x_N, y_N)}^0 \frac{\partial G}{\partial x_N}(x - x_N, y - y_N, z - z_N) dz_N - \\ &\quad - \frac{\partial z_0}{\partial x_N} G(x - x_N, y - y_N, z - z_0(x_N, y_N)) \end{aligned}$$

трехмерный интеграл в последнем выражении для $u(x, y, z)$ преобразуется в двумерный

$$\begin{aligned} u(x, y, z) = H(x, y, z) - \rho\alpha v \int_{R^2} G(x - x_N, y - y_N, z - z_0(x_N, y_N)) \times \\ \times \frac{\partial z_0}{\partial x_N} dx_N dy_N, \quad M \in R^3_-. \end{aligned}$$

Положив $z = z_0(x, y)$, получим искомое нелинейное интегральное уравнение относительно $z_0(x, y)$

$$\begin{aligned} u_f = H(x, y, z_0(x, y)) - \rho\alpha v \int_{R^2} G(x - x_N, y - y_N, z_0(x, y) - z_0(x_N, y_N)) \times \\ \times \frac{\partial z_0}{\partial x_N} dx_N dy_N, \quad (x, y) \in R^2. \end{aligned}$$

Практическое решение данного уравнения рационально осуществлять методом квадратур, предварительно осуществив переход к сферической системе координат.

Конкретный пример решения модельной задачи рассматривается в следующем разделе.

Термическое воздействие поверхностного источника на тонкий металлический слой

Соответствующее выражение для температурного распределения имеет вид

$$u(x, y) = H(x, y) - \rho\alpha v \int_{-\infty}^{\infty} dx_N \int_{-y_0(x_N)}^{y_0(x_N)} \frac{\partial G}{\partial x_N}(x - x_N, y - y_N) dy_N, \quad (x, y) \in R^2,$$

где $y_0(x) = r_0(\varphi) \sin \varphi$, $0 \leq \varphi < 2\pi$, $G(M, N) = \exp[\rho cv(x_M - x_N)/2\lambda] K_0(\rho cv r_{MN}/2\lambda)$, $K_0(x)$ — функция Макдональда.

Учитывая равенство

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_N} \int_{-y_0(x_N)}^{y_0(x_N)} G(x - x_N, y - y_N) dy_N = & \left[G(x - x_N, y - y_0(x_N)) + \right. \\ & \left. + G(x - x_N, y + y_0(x_N)) \right] y'_0(x_N) + \int_{-y_0(x_N)}^{y_0(x_N)} \frac{\partial G}{\partial x_N}(x - x_N, y - y_N) dy_N, \end{aligned}$$

получаем представление $u(x, y)$ через одномерный интеграл

$$\begin{aligned} u(x, y) = H(x, y) + \rho\alpha v \int_{-\infty}^{\infty} & \left[G(x - x_N, y - y_0(x_N)) + \right. \\ & \left. + G(x - x_N, y + y_0(x_N)) \right] y'_0(x_N) dx_N, \end{aligned}$$

откуда имеем одномерное нелинейное интегральное уравнение относительно $y_0(x)$ или $r_0(\varphi)$

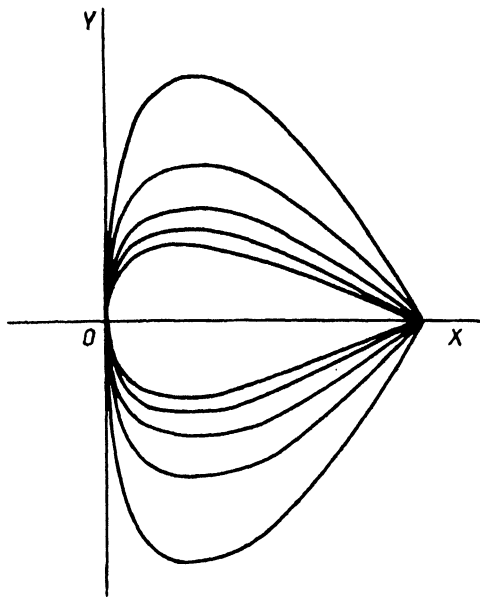
$$\begin{aligned} u_f = \frac{P}{2\pi\lambda h} K_0(br_0) \exp(bx) + \rho\alpha v \int_{-r_0(\pi)}^{r_0(0)} & \left[G(x - x_N, y_0(x) - y_0(x_N)) + \right. \\ & \left. + G(x - x_N, y_0(x_N) + y_0(x)) \right] y'_0(x_N) dx_N, \quad -r_0(\pi) \leq x \leq r_0(0), \end{aligned}$$

где P — мощность дуги; h — толщина слоя металла; b — параметр, равный $b = \rho cv/2\lambda$.

Выражение для $H(x, y)$ соответствует случаю движущегося точечного источника.

Для численного интегрирования преобразуем интегральное уравнение методом квадратур

$$u_f = \frac{P}{2\pi\lambda h} k_0(br_k) \exp(bx_k) + \rho\alpha v \sum_{j=1}^{m-1} \left[G(x_k - x_{j+1/2}, y_k - y_{j+1/2}) + \right.$$



Изотермы плавления слоя при различных режимах нагрева.

$$+G(x_k - x_{j+1/2}, y_k + y_{j+1/2}) \Big] (y_{j+1} - y_j), \quad k = 1, \dots, m;$$

$$x_{j+1/2} = (x_j + x_{j+1})/2, y_{j+1/2} = (y_j + y_{j+1})/2, \quad x_j = r_j \cos \varphi_j,$$

$$y_j = r_j \sin \varphi_j, r_j \approx r_0(\varphi_j), \varphi_j = \pi(m - j)/(m - 1), \quad j = 1, \dots, m.$$

Вычисление неизвестных значений r_1, \dots, r_m осуществляется по итерационной процедуре неявного метода Зейделя $F_k(r_1^{(n+1)}, \dots, r_{k-1}^{(n+1)}, r_k^{(n+1)}, r_{k+1}^{(n)}, \dots, r_m^{(n)}) = 0, \quad k = 1, \dots, m.$

Результаты решения отражены на серии компьютерных графиков. Каждая изотерма на рисунке представлена в относительном масштабе, в котором за единицу принята большая полуось изотермы плавления.

С увеличением скорости перемещения опорного пятна дуги по очевидным причинам изотермы принимают более вытянутую форму. Аналогичный эффект имеет место при уменьшении толщины металлического листа или увеличении мощности дуги.

Таким образом, на качественном уровне характер основных зависимостей соответствует известным данным теории сварочных и электроэрозионных процессов. Однако в количественном плане по данным автора учет скрытой теплоты плавления при расчетах во многих случаях необходим, так как существенно влияет на абсолютные геометрические размеры зоны плавления (для большинства металлов в пределах 20–50%).

В силу небольших требований к памяти ЭВМ вышеописанный метод особенно эффективен при реализации на персональных компьютерах.

Список литературы

- [1] Некрасов С.А. Канд. дис. Новочеркасск, 1992.
- [2] Данилюк И.И., Салей С.В. // ДАН УССР. 1975. № 1. С. 972–976.
- [3] Каменомостская С.Л. // Матем. сб. 1961. Т. 53. № 4. С. 211–223.

- [4] Sage K. // Вычислительные методы в прикладной математике. Новосибирск: Наука, 1982. С. 72–86.
[5] Абрамов Н.Р. и др. // Электричество. 1986. № 11. С. 22–27.
[6] Гутман М.Б. и др. // Электротехника. 1987. № 12. С. 4–8.

Новочеркасский политехнический институт

Поступило в Редакцию
3 декабря 1992 г.

06;07;12
© 1993 г.

Журнал технической физики, т. 63, в. 10, 1993

ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ СЛОЕВ Si_3N_4 НА ПОВЕРХНОСТИ КРЕМНИЯ ПРИ ЛАЗЕРНОМ ВОЗБУЖДЕНИИ

А.П.Барабан, В.В.Булавинов, Ю.А.Степанов

Аморфный нитрид кремния (Si_3N_4) широко используется в современной микроэлектронике в качестве активного диэлектрического слоя в МНОП элементах памяти [1]. Это обстоятельство обусловлено наличием в Si_3N_4 глубоких ($\gtrsim 1$ эВ) центров захвата инжектированных в диэлектрик электронов и дырок. Несмотря на значительное количество сведений относительно феноменологических параметров центров захвата (концентрация, глубина залегаения, сечение захвата и т.д.), физико-химическая природа дефектов, выступающих в роли центров захвата в Si_3N_4 , остается невыясненной.

Одним из наиболее эффективных и информативных методов исследования природы собственных и примесных дефектов в широкозонных полупроводниках и диэлектриках является люминесценция, в особенности времяразрешенная. Выполненные за последние годы исследования методами фото-(ФЛ), катодо-(КЛ) и электролюминесценции (ЭЛ) позволили обнаружить ряд характеристических полос свечения Si_3N_4 . Оптическое возбуждение приводило к появлению полос в области 2.5 и 3.2 эВ (по данным [2]) и 1.75, 2.3 и 3.3–3.6 эВ (по данным [3]). Возбуждение электронным пучком инициировало полосы 2.3, 2.8, 3.3–3.6 и 4.3–4.6 эВ [4]; разброс данных был обусловлен вариациями технологии изготовления Si_3N_4 [3,4]. Наконец, полосы ЭЛ структур Si-Si₃N₄ наблюдали при энергиях 1.9, 2.1, 2.4, 2.7, 3.0, 3.3, 3.7 и 4.5 эВ [5].

Низкая интенсивность люминесценции заставила в одних работах использовать специально изготовленные волноводные структуры в сочтении с методом “волновой накачки” [2], в других — высокие энергии электронов и плотности электронных пучков [4] или сквозных токов [5] через Si_3N_4 . В двух последних случаях измерение спектров могло сопровождаться изменениями электрофизических или физико-химических свойств диэлектрика вследствие хорошо известных процессов деградации [1,7]. Кроме того, в указанных работах не проводились измерения кинетики послесвечения полос при малых характеристических временах их затухания $\tau < 10^{-6}$ с.