

Научная статья

Трехмерное численное моделирование процесса переноса паров кремния в условиях среднего вакуума в задаче с цилиндрической симметрией

*В.А. Демин¹, Т.В. Демина^{1,2}, В.В. Коновалов², Т.П. Любимова^{1,2}*¹ Пермский государственный национальный исследовательский университет, Пермь, Российская Федерация² Институт механики сплошных сред УрО РАН, Пермь, Российская Федерация

Проведено трехмерное численное моделирование переноса паров кремния через разреженную атмосферу инертного газа от зеркала расплава к изделию цилиндрической формы при парофазном силицировании. Процесс осуществляется в условиях среднего вакуума и предназначается для насыщения пористых тонкостенных углеродных изделий кремнием. В ходе расчетов используется модифицированное уравнение нелинейной диффузии, учитывающее в качестве дополнительного фактора конвективный массоперенос в системе. Инструментом решения задачи является авторский вычислительный пакет на основе метода конечных разностей. Расчеты выполняются для параметров, определенных по формулам молекулярно-кинетической теории и теории фильтрации, то есть в рассматриваемой физико-математической модели отсутствуют подгоночные феноменологические параметры. Разработанный подход дает на порядок меньшее расчетное время силицирования, чем классическое уравнение диффузии, и хорошо согласуется с экспериментом. Это доказывает более высокую прогностическую значимость предлагаемой модели по сравнению с предшествующими аналогами. Изучаются динамика и стационарные распределения полей концентрации паров кремния для нескольких конфигураций системы, отличающихся расположением тиглей в реторте. Полученные расчетные данные сопоставляются с предельным случаем классической диффузии. Поскольку нелинейное слагаемое в используемом модифицированном уравнении не является малым, результаты моделирования существенно отличаются от данных, полученных в рамках классической теории. В работе объясняется, почему применяемое уравнение нелинейной диффузии дает поток кремния на входе в изделие, качественно согласующийся с экспериментом. В частности, подтвержден эффект более слабой пропитки образца на большей высоте по сравнению с уровнем, на котором находятся тигли. Показано, что общий массопоток паров кремния в образец достаточен, чтобы за разумное время силицировать изделие.

Ключевые слова: парофазный метод, пары кремния, силицирование, диффузия, конвективный массоперенос*Получение:* 22.07.2026 / *Принятие:* 26.09.2026 / *Публикация онлайн:* 31.10.2026

УДК 533.72; 533.27

1. Введение

В последние десятилетия использование композиционных материалов становится все более технологичным и разнообразным. В результате их совершенствование и производство бурно развиваются во всем мире [1–5]. Можно предполагать, что композиционные материалы будут находить все новые области применения. Одним из активно используемых в технике композитов является насыщенное кремнием углеродное волокно, обладающее высокими антиокислительными, прочностными и герметизирующими свойствами [6–11]. Такой композит получается путем жидкофазного силицирования [12, 13]. Однако при реализации данной технологии присутствующие в системе капиллярные силы не позволяют проводить глубокую и равномерную пропитку всего объема материала, необходимую для достижения требуемых параметров проницаемости.

Альтернативой жидкофазному насыщению служит так называемый парофазный способ силицирования углеродных матриц [9]. Он реализуется в сложных по своей конструкции печах в условиях экстремально высоких температур и среднего вакуума, при которых происходит интенсивное парообразование кремния и его свободный перенос от источника к изделию. Атомы газообразного кремния проникают глубоко в изделие и закупоривают самые мелкие поры. Главные минусы технологии — высокая энергоемкость и сложная реализация, но тем не менее в некоторых ситуациях до сих пор не существует какой-то ее приемлемой альтернативы. Особенно острым вопрос применимости парофазного силицирования становится при производстве крупногабаритных изделий, когда чрезвычайно сложно достичь равномерности насыщения парами кремния всех участков. В результате отдельные области пересыщаются конденсированным кремнием без образования необходимого количества SiC, а на некоторых участках кремний излишне «выгорает», эти области остаются «сухими», то есть избыточно пористыми.

Для оценки успешности процесса парофазного силицирования крупногабаритного изделия сложной формы имеет смысл прибегать к методам предварительного численного моделирования [14]. Однако, ввиду трудоемкости и сложности описания протекающих на практике физико-химических процессов, формулировка даже базовых математических моделей вызывает затруднения. В частности, при сильной разреженности среды массоперенос кремния представляется классическим уравнением диффузии [15–18]. Условия среднего вакуума и высокая температура приводят к тому, что коэффициент диффузии атомов газообразного кремния на несколько порядков превышает значения, характерные для нормального атмосферного давления. Вследствие этого в рассматриваемых условиях главным механизмом транспорта становится диффузия.

Предложенная в [17, 18] модель приводит к парадоксальным выводам, которые не подтверждаются в лабораторных опытах. Согласно этим работам, во-первых, требуется помещать тигли в реторте как можно ближе к изделию, а во-вторых, модель предсказывает очень малые значения потока кремния в изделие для типичных расстояний между тиглями и образцом. На практике парофазное силицирование происходит за разумное для

технологического процесса время порядка нескольких часов и не требует приближения тиглей к изделию на максимально близкое расстояние. Ранее авторами настоящей работы предложено как объяснение перечисленным выводам [19], так и более сложная физико-математическая модель процесса переноса паров кремния в разреженной среде инертного газа (как правило, аргона), в которую добавлен еще один механизм переноса паров кремния. Этот дополнительный механизм транспорта имеет конвективную природу, и его учет позволил прийти к новому уравнению нелинейной диффузии, которое сначала было отработано на системах с более простой геометрией. С использованием этого уравнения были получены точные стационарные решения одномерных распределений паров кремния в задачах с декартовой и цилиндрической симметрией [20], решены двумерные задачи с модельными вариантами расположения зеркала расплава и изделия [21]. Была решена задача в трехмерной постановке для тигля конечных размеров и реторты, имеющей форму прямоугольного параллелепипеда [22]. В работе [23] проанализирован случай неоднородного распределения температуры в реторте. Показано, что это привносит дополнительный вклад в транспортные свойства паров кремния в зависимости от величины и направления градиента температуры в системе. Полученные результаты позволили сформировать общую непротиворечивую картину динамики концентрационного фронта паров кремния и стационарных распределений полей их концентрации в реторте в ходе силицирования для простейших конфигураций системы.

Однако наиболее реалистичной является задача переноса паров кремния от зеркала расплава к полуму цилиндрическому изделию в реторте, которая также имеет цилиндрическую геометрию. Как демонстрируется далее, такая конфигурация позволяет организовать сходящиеся к изделию концентрационные потоки, способствующие сокращению времени силицирования. Кроме того, количественное сравнение показывает, что этот эффект нельзя отождествлять с действием конвективного механизма переноса. В то же время из-за трехмерности расчеты в такой постановке являются более сложными и требуют применения более совершенных вычислительных технологий. Для расчета обсуждаемой конфигурации авторы применяют собственный высокоуровневый вычислительный пакет, имеющий в основе метод конечных разностей.

2. Постановка задачи

Ранее в работах [19–22] перенос паров кремния в разреженной среде аргона с учетом конвективного механизма транспорта описывается модифицированным уравнением:

$$\frac{\partial C}{\partial t} - D_c(\nabla C)^2 = D\Delta C. \quad (1)$$

Это квазилинейное дифференциальное уравнение в частных производных второго порядка параболического типа [24], в котором C — массовая доля (или массовая концентрация) газообразного кремния [25], D — коэффициент диффузии [$\text{м}^2/\text{с}$], D_c — параметр конвективного переноса, имеющий аналогичную размерность. Слагаемое, квадратичное по градиенту концентрации, не вводится в уравнение искусственно, а естественно возникает из выражения $(\mathbf{u}\nabla)C$, отвечающего за конвективный перенос в системе. Следовательно, параметры D и D_c математически не связаны, и каждый из них определяется собственными физическими факторами [19–22]. В эксперименте давление стороннего газа аргона в реторте соответствует условиям среднего вакуума и составляет примерно $p_a = 100$ Па. Давление паров кремния не может превышать значения насыщения, что в рассматриваемых условиях при температуре порядка 1800–1900 К составляет примерно $p_{si} = 10$ Па [26–28]. Таким образом, в отношении парциальных давлений компонентов смеси имеет место достаточно сильное условие: $p_a \gg p_{si}$.

Параметр конвективного переноса в уравнении (1), появляющийся при выводе уравнения, определяется как (см. [20–22]):

$$D_c = \frac{\kappa R T \rho_{si}}{\eta \mu_{si}}, \quad (2)$$

где κ — проницаемость аргона, R — универсальная газовая постоянная, T — абсолютная температура, [K], η — динамическая вязкость паров кремния, ρ_{si} и μ_{si} — плотность газообразного кремния и его молярная масса.

Для нахождения коэффициента диффузии и параметра конвективного переноса воспользуемся результатами молекулярно-кинетической теории [29]. Тогда коэффициент диффузии газообразного кремния в разреженной несущей среде (аргоне) и динамическая вязкость паров кремния с хорошей степенью точности вычисляются по известным формулам:

$$D = \frac{3}{8} \frac{kT}{\sigma_{12} p} \sqrt{\frac{\pi kT}{2m_{12}}} = \frac{3}{8} \frac{(kT)^{3/2}}{d^2 p \sqrt{\pi m_0}} = 0.7 \text{ м}^2/\text{с}, \quad \eta = \frac{1}{3} \left(\frac{2}{\pi} \right)^{3/2} \frac{\sqrt{m_0 kT}}{d^2} = 1.1 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2/\text{с}.$$

Здесь σ_{12} — эффективное сечение рассеяния для двух частиц; m_{12} — приведенная масса атомов кремния и аргона; k — постоянная Больцмана; p — давление аргона. Для двух примерно одинаковых по массе и размерам частиц имеем: $\sigma_{12} = \pi d^2$, где $m_{12} = m_0/2$, m_0 — масса одного атома кремния ($\sim 4.7 \cdot 10^{-26}$ кг), d — диаметр атома аргона ($d = 2.3 \cdot 10^{-10}$ м). Величины получены для давления аргона $p_a = 100$ Па и температуры $T = 1800$ К, однако вариация этих параметров в рабочих интервалах не изменяет на порядки коэффициенты диффузии и динамической вязкости.

Согласно уравнению Менделеева–Клапейрона, плотность насыщенного пара, находящегося над зеркалом расплава, является малой величиной:

$$\rho_{si} = \frac{p_{si} \mu_{si}}{RT} = 1.87 \cdot 10^{-5} \text{ кг/м}^3.$$

Оценка плотности кремния выполнена также при $T = 1800$ К и давлении насыщения $p_{si} = 10$ Па.

Определим еще один важный параметр — пористость аргона ϕ . Заметим, что она вычисляется достаточно точно, без каких-то излишних и необоснованных предположений, и равна доле пустого пространства в объеме, занимаемом несущей средой. Пусть v_0 — объем одного атома аргона, $n_a = p_a/kT$ — число частиц аргона в единице объема расчетной области (парциальное давление аргона $p_a = 100$ Па из эксперимента). Тогда имеем значение пористости, стремящееся к единице: $\phi = 1 - v_0 n_a = 0.999999997$. Вследствие этого в условиях среднего вакуума атомы аргона выступают в роли рассеивающих центров и занимают чрезвычайно малый объем. Проницаемость пористой среды для газовой смеси аргона и паров кремния вычислим по формуле Козени–Кармана, что обоснованно, так как она выводится из общих гидродинамических соображений и применима для сред с произвольной пористостью [23]:

$$\kappa = \frac{\kappa_0 \phi^3}{(1 - \phi)^2},$$

где константа Козени–Кармана κ_0 в формуле пропорциональна квадрату характерного размера обтекаемых препятствий, роль которых играют атомы аргона: $\kappa_0 = a^2$; $a = 1.4 \cdot 10^{-10}$ м — характерный размер атома. Таким образом, проницаемость оказывается равной: $\kappa = 2 \cdot 10^{-3}$ м².

Подстановка всех полученных значений в формулу (2) для параметра конвективного переноса дает оценку: $D_c = 54$ м²/с.

3. Стационарное решение в цилиндрической системе координат

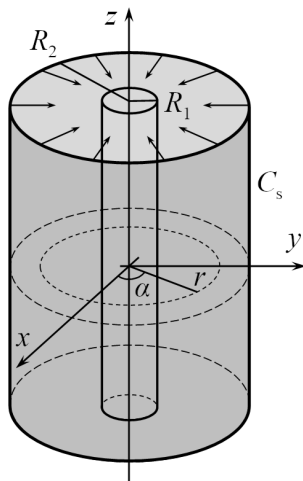


Рис. 1. Геометрия модельной задачи и система координат

Для понимания сути проблемы сначала рассмотрим модельную одномерную задачу парофазного силицирования изделия в цилиндрической постановке. Пусть внешняя оболочка радиусом R_2 является зеркалом расплава в реторте и генерирует пары кремния, как представлено на рисунке 1. Легко показать, что действие силы тяжести не оказывает существенного влияния на перенос паров кремния в реторте. Как сказано выше, плотность разреженного газа мала и вычисляется через уравнение состояния идеального газа. Для парциального давления 10 Па (давления насыщения парами кремния при температуре 1800 К) плотность составляет около $\rho_{si} = 1.87 \cdot 10^{-5}$ кг/м³. Объемные плотности сил давления в печи размерами L порядка метра и силы тяжести с вектором ускорения $\mathbf{g}$ ($|\mathbf{g}| = 9.81$ м/с²), соответственно, равны:

$$|\nabla p_{si}| \sim \left| \frac{p_{si}}{L} \right| \approx 10 \text{ Па/м}, \quad |\rho_{si} \mathbf{g}| \approx 1.83 \cdot 10^{-4} \text{ Па/м}.$$

Таким образом, имеем: $|\nabla p_{si}| \gg |\rho_{si} \mathbf{g}|$. В рассматриваемом диапазоне температуры влиянием ее неоднородности в реторте также можно пренебречь [23].

Цилиндр радиуса R_1 (Рис. 1) представляет собой изделие, изготовленное из пористого материала, полностью поглощающее пары кремния. Пусть на поверхности расплава поддерживается значение концентрации C_s , соответствующее состоянию насыщения [30]. При давлении насыщенного пара кремния в рассматриваемых термодинамических условиях и соотношении 1:10 парциальных давлений кремния и аргона значение концентрации насыщения примем равным $C_s = 0.08$. Сначала решим задачу в предположении однородности по аксиальной координате z и отсутствия зависимости от угла α .

Итак, требуется найти решение одномерного стационарного уравнения (1), которое в цилиндрических координатах с учетом симметрии ($\partial/\partial z = 0$ и $\partial/\partial \alpha = 0$) принимает вид:

$$-\left(\frac{dC}{dr}\right)^2 = \frac{\psi}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dC}{dr} \right), \quad (3)$$

при следующих граничных условиях

$$r = R_1: C = 0; \quad r = R_2: C = C_s. \quad (4)$$

В уравнение (3) введено обозначение $\psi = D/D_c$ — безразмерный параметр задачи, показывающий отношение диффузионного и конвективного вкладов в массоперенос.

Интегрирование краевой задачи (3) и (4) дает специфическое суперлогарифмическое решение вида [21]:

$$C(r) = \psi \ln \left\{ \frac{\exp(C_s/\psi) \ln(r/R_1) - \ln(r/R_2)}{\ln(R_2/R_1)} \right\}. \quad (5)$$

В предельном случае $D_c = 0$ уравнение (1) с теми же граничными условиями приводит к более простому логарифмическому решению:

$$C(r) = C_s \frac{\ln(r/R_1)}{\ln(R_2/R_1)}. \quad (6)$$

Табуляция решений (5) и (6) представлена на рисунке 2 (кривые 4 и 3 соответственно) в зависимости от относительной радиальной координаты $(r - R_1)/(R_2 - R_1)$. При построении графиков приняты следующие значения параметров: $\psi = 0.016$, $C_s = 0.08$, $R_1 = 0.2$ м и $R_2 = 0.9$ м (для решений 1 и 2 в прямоугольной системе координат считалось, что горизонтальная координата $x = r$). Видно, что решение (5), как и в случае плоской геометрии [19], представляет собой сильно выпуклую функцию, которая описывает распределение концентрации паров с резким градиентом при $r = R_1$, то есть на входе в изделие. Оценки показывают, что столь выраженная динамика изменения концентрации обеспечивает высокую скорость массопереноса кремния, достаточную для насыщения пор углеродной матрицы за разумное время, хорошо согласующееся с экспериментальными данными. Эта зависимость значительно отличается по своей структуре от аналогичного решения, полученного ранее на основе чисто диффузионной модели [17, 18]. Упрощенная модель [17, 18] в прямоугольной системе координат приводит к линейной зависимости концентрации от координаты (линия 1, Рис. 2), дает на порядок меньшие значения массопотока и несостоятельна в плане предсказания времени силицирования углеродных преформ.

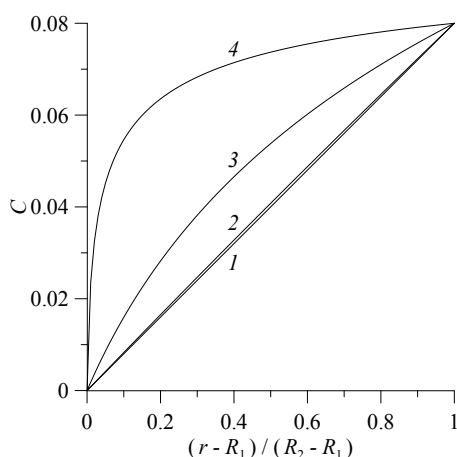


Рис. 2. Кривая 1 – линейное решение (классическая диффузия в прямоугольной системе координат); 2 – решение при условии $D_c = D$ (эффект нелинейной диффузии присутствует, но он мал и по величине такой же, как в типичном квазилинейном уравнении, то есть отличие вкладов линейного и квадратичного слагаемых в уравнении (1) не учитывается; также не принимается во внимание топологический эффект схождения потока к оси симметрии); 3 – решение (6) при $D_c = 0$ (эффект нелинейной диффузии отсутствует, учитывается только топологический эффект схождения потока к оси симметрии); 4 – решение уравнения (1) при $D_c \gg D$ (принимается во внимание как реалистичный вклад нелинейной диффузии, так и топологический эффект схождения потока к оси при наличии цилиндрической симметрии)

Как показывает рисунок 2, для системы с цилиндрической симметрией отличие между модифицированным и классическим уравнением диффузии (кривые 4 и 3 соответственно) становится менее очевидным, и их сравнение, особенно при трехмерной постановке, возможно лишь количественно. Однако видно, что конвективный механизм привносит существенный вклад в массоперенос кремния и обеспечивает на входе в изделие производную, практически на порядок превышающую значение для чисто диффузионного транспорта.

Для предельного случая $D_c = D$ уравнение (1) известно достаточно давно; иногда его называют уравнением Л.С. Лейбензона [31]. Впервые необходимость его использования возникла при описании процессов фильтрации в пористых средах, и оно фактически вытекает из закона сохранения массы. Применительно к задаче о распространении тепла при теплопроводности, зависящей от температуры, подобное квазилинейное уравнение рассмотрено в [32]. В общем контексте (с учетом более высокой степени нелинейности) без привязки к конкретным граничным условиям его математические свойства анализировались в [33–35]. Однако сейчас нелинейное слагаемое в уравнении (1) не является малым. Оно имеет не вторичную по отношению к диффузии, а самостоятельную физическую природу. Как уже отмечено, данное слагаемое моделирует дополнительный конвективный массоперенос в системе, связано со слагаемым $(\mathbf{u} \nabla) C$ и превалирует над диффузионным массопереносом. Параметры D и D_c не зависят друг от друга, при этом, с точки зрения неравновесной термодинамики, градиент концентрации кремния можно интерпретировать как дополнительную термодинамическую силу, вызывающую поток его паров. В случае сложной трехмерной задачи с большим числом источников, которые описываются кусочными граничными условиями, найти точное решение уравнения (1) не представляется возможным, поэтому требуется численное моделирование.

Для математического представления процесса переноса кремния при парофазном силицировании, конечно, можно сформулировать более полную постановку задачи [36], которая будет учитывать эффект оттеснения аргона парами кремния. Работа [36] содержит полную газодинамическую задачу перераспределения паров кремния, когда замыкание производится с помощью уравнения Навье–Стокса. Показывается, что оттеснение аргона имеет место, однако отличие концентраций аргона вблизи зеркала расплава и на пористом образце составляет всего 5%. Этот факт подтверждает применимость предлагаемого далее подхода.

4. Трехмерная задача

Рассмотрим далее более реалистичную постановку задачи, в которой изделие и реторта имеют цилиндрическую форму, а на дне реторты находится один или несколько тиглей конечных размеров (Рис. 3а, б). Конфигурация с

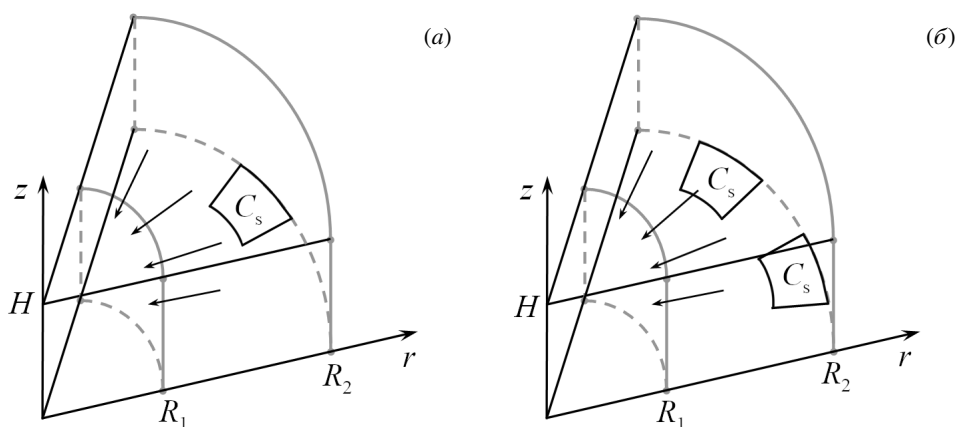


Рис. 3. Схематическое изображение системы с одним (а) и двумя тиглями (б) в трехмерной постановке; стрелками обозначен сходящийся поток паров кремния

несколькими тиглями необходима для того, чтобы оценить, насколько устойчивыми и физически адекватными являются численные решения при кусочно-заданных граничных условиях, моделирующих синхронное испарение с разных участков поверхности расплава.

По-прежнему на зеркале расплава Γ устанавливается концентрация насыщения C_s . На поверхности изделия выполняется условие полного поглощения. На вертикальной наружной стенке реторты, верхней границе и дне ставится условие непроницаемости — отсутствие потока через эти границы. В силу симметричного расположения тиглей вокруг изделия в опыте достаточно провести моделирование в сегменте с учетом периодичности решения (в том числе с попарной установкой тиглей) по азимутальной координате.

Таким образом, при расчетах поля концентрации на вертикальных боковых границах сегмента ставится условие периодичности решения. Имеем следующий набор граничных условий:

$$\begin{aligned} r = R_1 : C = 0; \quad r = R_2 : \frac{\partial C}{\partial r} = 0; \\ z = 0 (\notin \Gamma) : \frac{\partial C}{\partial z} = 0; \quad z = 0 (\in \Gamma) : C = C_s; \quad z = H : \frac{\partial C}{\partial z} = 0; \\ C(r, \alpha, z) = C(r, \alpha + \Delta\alpha, z). \end{aligned} \quad (7)$$

5. Методика численного решения

Прямое 3D-моделирование уравнения (1) с граничными условиями (7) для поля $C(r, \alpha, z, t)$ и поиск стационарных решений $C(r, \alpha, z)$ выполнялись в авторском пакете CrystarPack [37, 38] с использованием метода конечных разностей. Пакет, написанный на языке программирования Фортран-90 и реализованный как DLL-библиотека, предназначен для решения задач механики сплошных сред и значительно сокращает время разработки расчетных программ.

Пакет CrystarPack поддерживает 2D/3D структурированные сетки с регулярным либо адаптивным шагом, разнесенные узлы сетки и метод деформированных координат для сложной геометрии. Доступны схемы конечных объемов (1–3-го порядка точности), а также конечных разностей с разностными производными произвольного порядка и точности, явные/неявные схемы и адаптивный шаг по времени. Физическая модель (уравнения и граничные условия) задается компактно через процедуры пользовательского пакета, что обеспечивает ее гибкость по сравнению с «закрытыми» коммерческими аналогами.

Вычислительным ядром является модифицированный метод Ньютона–Рафсона с механизмами глобальной сходимости и декомпозиции по полям/областям. Матрица Якоби рассчитывается численно, с экономией времени и рабочей памяти. Для решения СЛАУ доступны итерационные (GMRES+ILU по умолчанию, SPARSKIT2, LIS) и прямые решатели (MUMPS, HSL/M41). Пакет CrystarPack заполняет нишу между коммерческими программными комплексами и разработкой кода с нуля. Аппроксимация с помощью неявной схемы позволяет значительно сократить число шагов по времени (до 50–100) при реализации нестационарного расчета (например, до выхода решения на стационарный режим) по сравнению с явной схемой, требовавшей до 10 тысяч шагов. Кроме того, реализованный авторами итерационный метод Ньютона–Рафсона дает возможность напрямую решать задачу поиска стационарного режима. Таким образом, в обсуждаемой работе предлагается устойчивая и вычислительно эффективная методика расчета. Применение многопроцессорных вычислительных технологий сократит время расчета еще существеннее.

Расчеты осуществлялись на компьютере с процессором Intel® Core™ i5-4690 × 4 с 8.0 Гбайт оперативной памяти. Для аппроксимации применялась трехслойная неявная схема второго порядка точности как по времени, так и по пространству. Граничные условия дискретизировались также согласно формулам второго порядка

точности. Число узлов по радиальной, азимутальной и аксиальной координатам варьировалось от $51 \times 61 \times 21$ до $101 \times 181 \times 41$. Вычислительные эксперименты на различных сетках показали хорошую точность и сходимость результатов.

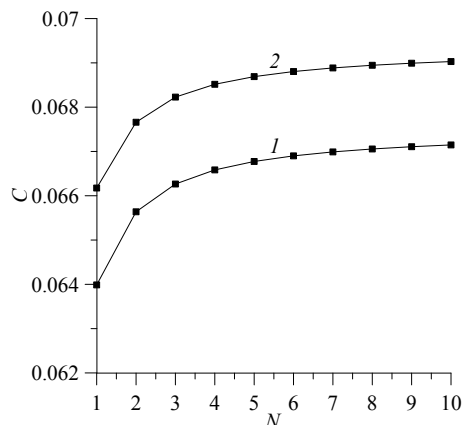


Рис. 4. Характер концентрации насыщения на стадии установления в центре вычислительного домена в зависимости от фактора размера сетки; сегмент с одним тиглем (кривая 1), сегмент с двумя тиглями (2)

включении уравнения с нелинейностью в модель процесса насыщения, а также исследовать, насколько устойчивыми будут расчеты при наличии нескольких тиглей, что обуславливает присутствие в постановке задачи кусочно-заданных граничных условий.

Для ответов на эти вопросы проделаны расчеты с двумя тиглями, находящимися на расстоянии друг от друга, более близком по сравнению с удалением до стенок сегмента (чтобы выполнялась попарная периодичность). В ходе численного моделирования, помимо поля концентрации, вычислялись значения производной по нормали на поверхности изделия. Поскольку производная концентрации определяет поток кремния в материал, то ввиду большой значимости этой величины для ее нахождения использовались односторонние формулы численного дифференцирования четвертого порядка точности.

6. Результаты и обсуждение

Параметры расчетной области соответствовали их характерным значениям в печах для проведения процесса парофазного силицирования. Радиусы изделия и реторты составляли $R_1 = 0.2$ м и $R_2 = 0.9$ м, а их высота для простоты принята одинаковой: $H = 40$ см. Численное моделирование проводилось для одного или двух тиглей с углами раствора сегментов $\Delta\alpha_1 = 60^\circ$ и $\Delta\alpha_2 = 90^\circ$. Очевидно, что первый вариант соответствовал шести тиглям вокруг изделия, второй — восьми. Форма тиглей имела вид трапециевидного сегмента, что обеспечивало совпадение границ с узлами сетки в цилиндрической системе координат. Уравнение нелинейной диффузии (1) решалось при значениях параметра конвективного переноса $D_c = 52.8 \text{ м}^2/\text{с}$ и при $D_c = 0$ (в предельном случае классической диффузии). Значение параметра выбиралось таким же, как в работе [22], чтобы иметь возможность выполнить хотя бы качественное сравнение с результатами решения для плоской геометрии.

Поле концентрации в горизонтальном сечении вблизи дна (на высоте $h = 1$ см) представлено на рисунке 5 в момент времени $t = 0.01$ с. Расчетная сетка содержала $101 \times 121 \times 41$ узлов по радиальной, азимутальной и вертикальной координатам для конфигурации с одним тиглем и $101 \times 181 \times 41$ узлов для конфигурации с двумя тиглями. Видно, что за это небольшое время над тиглями уже сформировался концентрационный фронт паров кремния, однако он еще не успел дойти до изделия.

То, что концентрация достигает максимума над самим зеркалом расплава, ожидаемо, так как именно там происходит парообразование. Наблюдается ярко выраженная граница концентрационного фронта, что характерно для обобщенного уравнения нелинейной диффузии $u_t = \Delta(u^m)$ при $m > 1$ [34].

Любопытно, что цилиндрическая симметрия поля концентрации слабо нарушается из-за локальности источников. Диффузия даже за такой малый промежуток времени размывает неоднородности, связанные с дискретным расположением источников кремния. В результате на этом этапе в реторте уже имеет место сходящийся к оси симметрии регулярный концентрационный фронт, граница которого с хорошей степенью точности обладает цилиндрической симметрией. Ввиду сильной разреженности среды и высокой температуры (см. зависимость кинетических коэффициентов от этих параметров) концентрационный фронт быстро достигает изделия, и уже ко времени $t \sim 1.0$ с поле концентрации перестает меняться и приходит в состояние установления. На рисунке 6 приведены поля концентрации паров кремния при одном и двух тиглях вблизи дна. Несмотря на разное число тиглей на единицу длины дуги сегмента, профили качественно похожи. Тем не менее значения производных на входе в изделие различаются: 3.828 м^{-1} для одного тигля и 4.068 м^{-1} для двух. Во втором случае тиглям отвечает большая общая площадь зеркала расплава, поэтому поток кремния при двух тиглях выше, чем при одном. Вполне естественно, что над тиглями наблюдается достаточно большое количество пара, и это

На рисунке 4 представлены графики изменения концентрации насыщения в центре реторты при одном и двух тиглях в зависимости от фактора размера сетки N , который входит как множитель в следующие формулы вычисления числа узлов: $(10N+1) \times (12N+1) \times (4N+1)$ для конфигурации с одним тиглем; $(10N+1) \times (18N+1) \times (4N+1)$ для конфигурации с двумя тиглями.

В задаче с одним тиглем в рабочей области его размеры принимались равными 15.7×14 см, где первое число отражает длину тигля вдоль азимутальной координаты по внешней дуге, а второе — по радиальной координате. Зеркало расплава располагалось на дне реторты у внешней вертикальной границы (Рис. 3а). Под тигель с расплавом кремния выделялась расчетная сетка размером 21×21 узел. В конфигурации с двумя находящимися рядом тиглями (Рис. 3б) размер каждого из них был таким же (15.7×14 см), и аппроксимация осуществлялась с тем же числом узлов на каждый тигель.

По результатам расчетов требовалось выяснить, как взаимодействуют потоки кремния от разных тиглей при

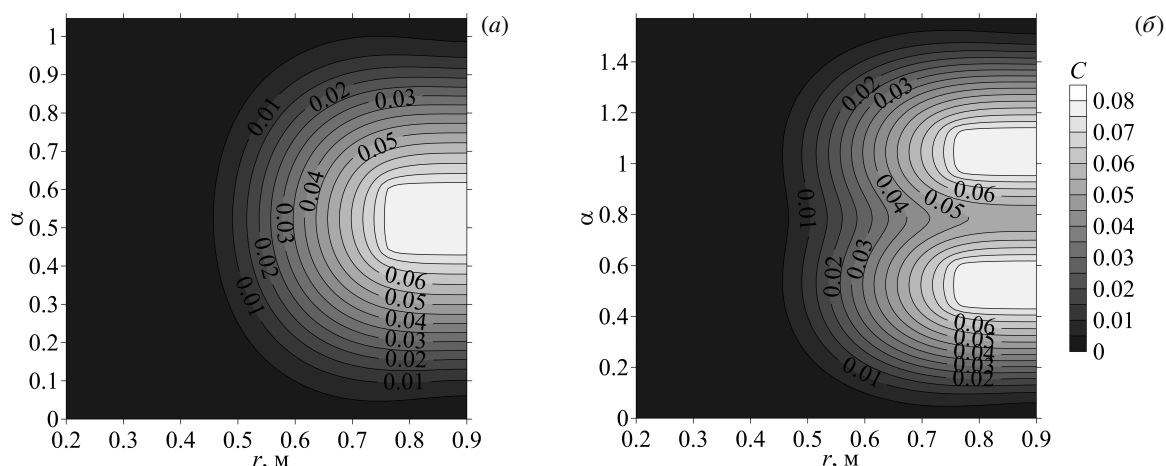


Рис. 5. Поле концентрации в переходный момент времени $t = 0.01$ с в горизонтальном сечении на высоте $h = 1$ см; сегмент с одним тиглем (а), сегмент с двумя тиглями (б)

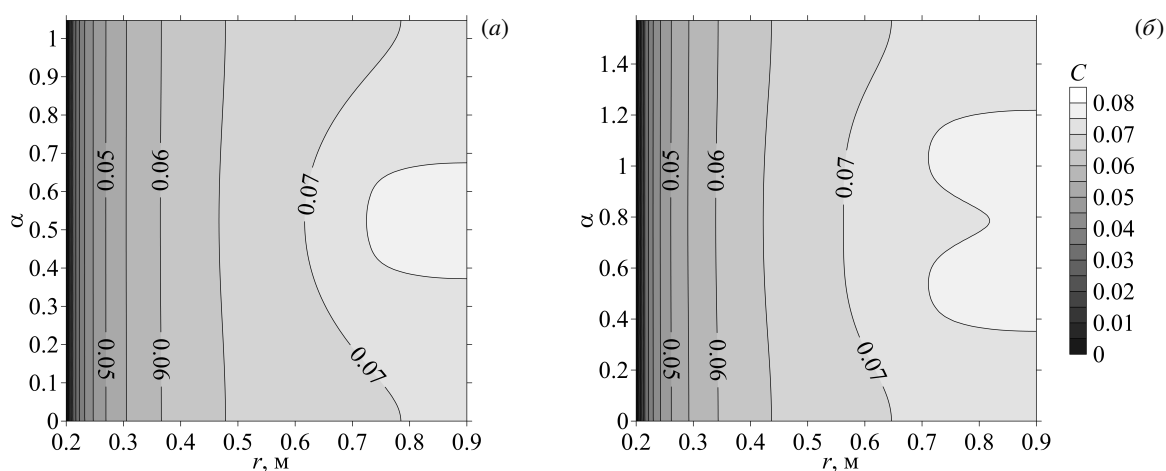


Рис. 6. Поле концентрации в стадии установления в горизонтальном сечении на высоте $h = 1$ см; сегмент с одним тиглем (а), сегмент с двумя тиглями (б)

отражается на поле концентрации в виде плато, повторяющих форму тиглей. При приближении к изделию фронт становится круче, что хорошо согласуется с результатами трехмерных расчетов в полости прямоугольной формы [21]. Поле концентрации в горизонтальном сечении, проходящем через середину высоты реторты, представлено на рисунке 7. Здесь уже не чувствуется влияние на него тиглей. Однако характерный логарифмический профиль вблизи поверхности изделия сохраняется, что дает большие значения производных на входе в изделие даже на значительном удалении от тиглей.

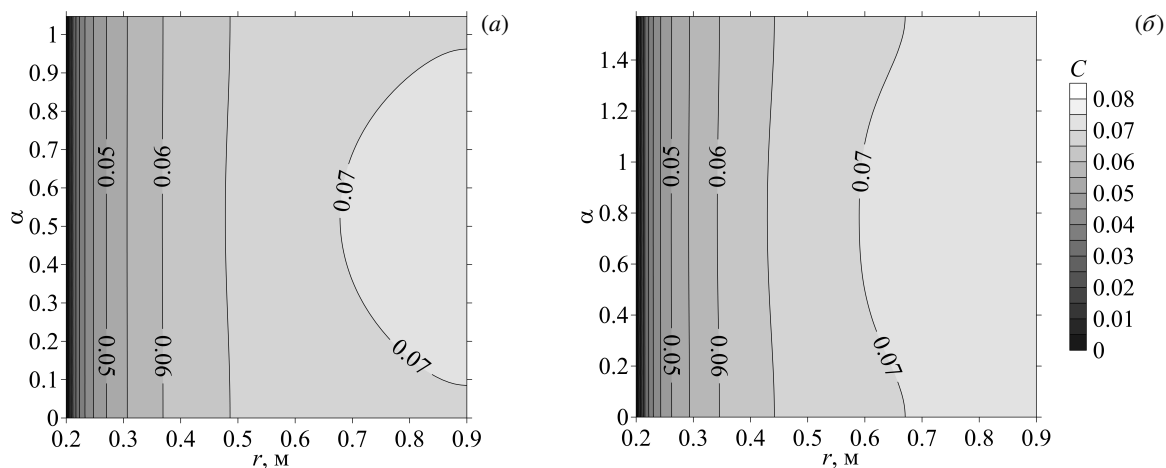


Рис. 7. Поле концентрации в стадии установления в горизонтальном сечении на высоте $h = 20$ см; сегмент с одним тиглем (а), сегмент с двумя тиглями (б)

Движение паров кремния фактически представляет собой локализованные над его расплавом восходящие струи. Сначала движение вверх характеризуется сильно неоднородным распределением концентрации кремния, но с течением времени профиль концентрации сглаживается и приходит к стационарному виду. Поле концентрации над тиглями в вертикальном сечении при $r = 0.83$ м в различные моменты времени представлено на рисунке 8.

Подобное распределение паров кремния в реторте говорит о том, что кремний в реторте есть везде, а не только над тиглями (см. Рис. 9а и Рис. 9б). Этот кремний активно проникает в поры по всей поверхности изделия. В свою очередь это говорит о том, что не имеет смысла приближать тигли к изделию на максимально близкое расстояние. Если силицирование на каких-то участках изделия не происходит, то это уже не связано с отсутствием кремния вблизи его поверхности, а имеет совсем другое объяснение. В этой ситуации ключевую роль начинает играть

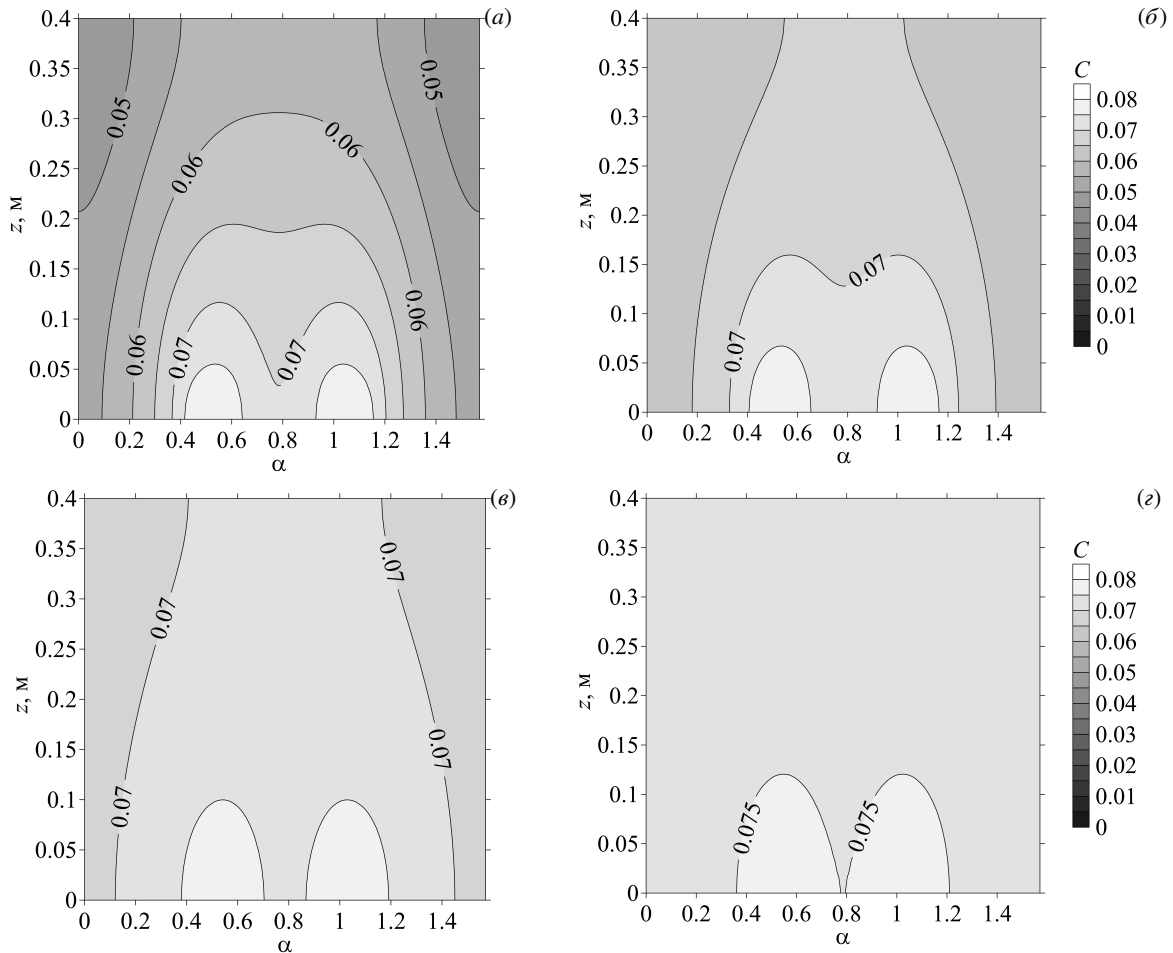


Рис. 8. Поля концентрации кремния над тиглями в вертикальном сечении изделия при $r = 0.83$ м в разные моменты времени t , с: 0.1 (а), 0.2 (б), 0.5 (в), 1.0 (г)

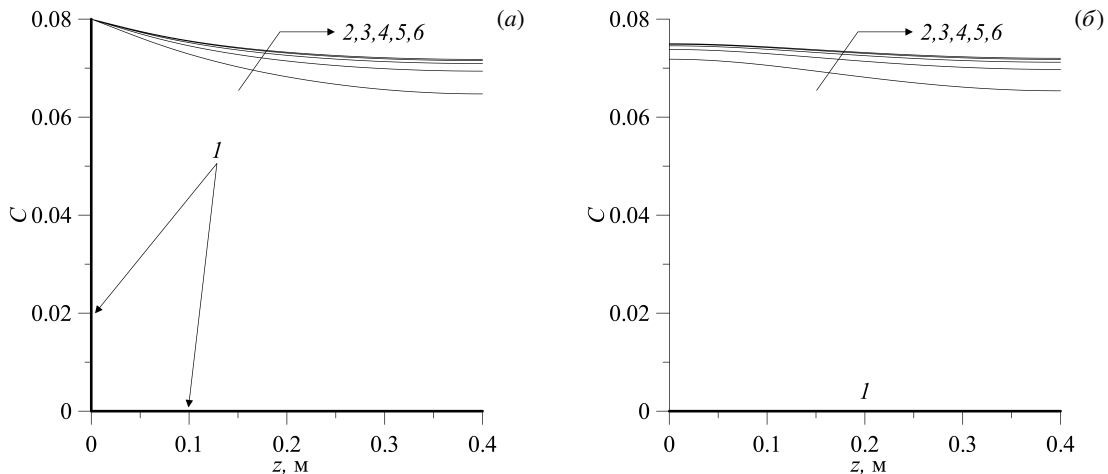


Рис. 9. Вертикальное распределение концентрации кремния над тиглем (а) и в пространстве между тиглями (б) в разные моменты на отрезке времени $0 \leq t \leq 1.0$ с при шаге $\Delta t = 0.2$ с (кривые 1–6)

температурный фактор. Во-первых, температура в печи непрерывно меняется с течением времени в соответствии с разными режимами прогрева. Во-вторых, всегда имеет место сложное пространственное распределение температуры в реторте, обусловленное расположением нагревателей и вакуумных насосов, неконтролируемым образом сказывающееся на конденсации кремния в порах и химическом процессе карбидизации углерода.

Особый интерес в расчетах представляют значения градиента концентрации паров кремния на поверхности изделия на разной высоте, так как именно градиент концентрации определяет привес (масса с учетом кремния) образца. Цифровые значения производной концентрации на поверхности изделия на разной высоте реторты приведены в таблице. Из таблицы видно, что производная как для одного, так и для двух тиглей немного уменьшается с высотой. Таким образом, косвенно подтверждается экспериментальный факт, согласно которому процесс силицирования вблизи дна идет более интенсивно, чем в верхней части реторты.

Таблица. Значения производных на поверхности изделия вдоль вертикали в единицах 1/м

Число тиглей (вид диффузии) \ Высота, см	1	10	15	20	25	30
Один ($D_c \neq 0$)	3.8283	3.8220	3.8149	3.8066	3.7985	3.7916
Два ($D_c \neq 0$)	4.0683	4.0614	4.0537	4.0446	4.0356	4.0281
Один ($D_c = 0$)	0.1516	0.1511	0.1505	0.1499	0.1492	0.1487
Два ($D_c = 0$)	0.1733	0.1727	0.1720	0.1712	0.1704	0.1697

Из сравнения рисунков 6 ($D_c = 52.8 \text{ м}^2/\text{с}$) и 10 ($D_c = 0$) следует, что картина трехмерного движения концентрационного фронта качественно ничем не отличается от двух решений одномерной задачи, представленных на рисунке 2. На входе в изделие, как в случае нелинейной, так и классической диффузии, имеем узнаваемый логарифмический профиль зависимости концентрации кремния от радиальной координаты. Однако выпуклость распределения при классической диффузии мала (Рис. 10) и является исключительно следствием схождения линий тока к оси симметрии ввиду топологической особенности задачи. В то же время при рассмотрении нелинейной диффузии, помимо этого механизма, происходит дополнительный конвективный массоперенос паров, вследствие этого профиль распределения на входе в изделие при учете нелинейности процесса оказывается практически в 25 раз круче характерного для классической диффузии.

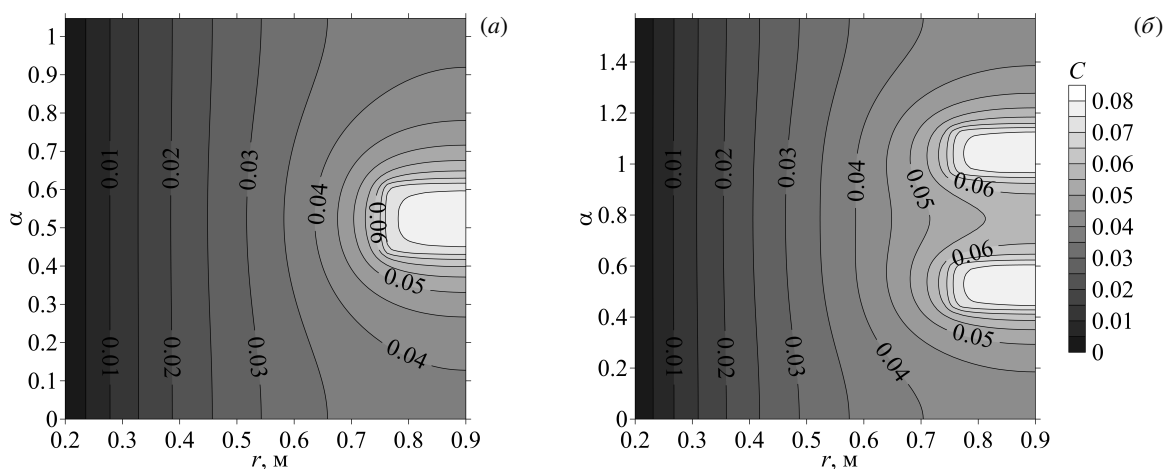


Рис. 10. Поле концентрации в стадии установления в горизонтальном сечении на высоте $h = 20$ см в случае классической диффузии; сегмент с одним тиглем (а), сегмент с двумя тиглями (б)

7. Выводы

Подводя итог полным трехмерным расчетам, выполненным для системы с цилиндрической симметрией в условиях среднего вакуума, можно сделать вывод: даже при использовании упрощенной физико-математической модели на основе самодостаточного уравнения нелинейной диффузии время численного эксперимента для каждой новой конфигурации остается значительным. Это говорит о том, что при современном уровне развития вычислительных средств и в ближайшей перспективе весьма затруднительно реализовать полную систему уравнений газодинамики для расчета физических процессов при производстве углеродных композиционных материалов методом парового силицирования.

Представленные результаты также позволяют понять, почему данная задача вызывала ранее так много дискуссий о механизмах транспорта газообразного кремния от расплава до изделия. В случае плоской конфигурации системы отличия очевидны: уравнение нелинейной диффузии дает выпуклый логарифмический профиль, а уравнение классической диффузии приводит к линейной зависимости. В то же время в системе с цилиндрической симметрией

распределение концентрации кремния в обоих случаях имеет выпуклый логарифмический вид. Это обусловлено геометрическим фактором: потоки от расположенных на периферии тиглей сходятся к изделию, имеющему общую ось с ретортой. Тем не менее, несмотря на качественное сходство решений, количественная разница в производных полях концентрации паров кремния на поверхности изделия несомненна, что указывает на необходимость отказа от использования уравнения классической диффузии при описании процесса парофазного силицирования.

Работа выполнена в рамках крупного научного проекта при финансовой поддержке Минобрнауки России (соглашение № 075-15-2024-535 от 23.04.2024, задача № 2.10.2).

Литература

1. *Баженов С.Л.* Механика и технология композиционных материалов. Долгопрудный: Изд. дом "Интеллект", 2014. 328 с.
2. *Мэттьюз Ф., Ролингс Р.* Композитные материалы. Механика и технология. М.: Техносфера, 2004. 408 с.
3. *Chawla K.K.* Composite Materials. Science and Engineering. 3rd ed. Springer, 2012. 542 p. DOI: 10.1007/978-0-387-74365-3
4. *Padture N.P.* Advanced structural ceramics in aerospace propulsion // *Nature Materials*. 2016. Vol. 15, no. 8. P. 804–809. DOI: 10.1038/nmat4687
5. *Ceramic Matrix Composites: Materials, Modeling and Technology* / ed. by N.P. Bansal, J. Lamon. John Wiley & Sons, 2015. P. 720. DOI: 10.1002/9781118832998
6. *Щурик А.Г.* Искусственные углеродные материалы. Пермь: Изд-во УНИИКМ, 2009. 340 с.
7. *Бушуев В.М., Синани И.Л.* Разработка технологического процесса изготовления несущей основы герметичных конструкций на основе углерод-углеродных композиционных материалов // *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Машиностроение, материаловедение*. 2016. Т. 18, № 1. С. 43–53. DOI: 10.15593/2224-9877/2016.1.03
8. *Синани И.Л., Бушуев В.М.* Разработка технологических процессов изготовления герметичных углерод-углеродных композиционных материалов типа Углекон // *Коррозия: материалы, защита*. 2013. № 7. С. 18–23.
9. *Бушуев В.М., Лунегов С.Г., Бушуев М.В.* Разработка комбинированного метода силицирования крупногабаритных изделий из УУКМ, базирующегося на альтернативном жидкофазном методе и применении процесса капиллярной конденсации паров кремния // *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Аэрокосмическая техника*. 2015. № 40. С. 44–63. DOI: 10.15593/2224-9982/2015.40.03
10. Способ изготовления герметичных изделий из углерод-карбидокремниевых материалов: RU2543242C2 / В.М. Бушуев, В.Ю. Чунаев, М.В. Бушуев, Д.С. Оболенский. Заявл. 2015. Оpubл. 27.02.15, Бюл. № 6.
11. Способ изготовления тонкостенных изделий из силицированного углеродного композиционного материала: RU2194682C2 / В.М. Бушуев, П.Г. Удинцев, В.Ю. Чунаев, А.В. Дувалов. Заявл. 2002. Оpubл. 20.12.2002.
12. *Шикунов С.Л., Курлов В.Н.* Получение композиционных материалов на основе карбида кремния силицированием углеродных матриц // *Журнал технической физики*. 2017. Т. 87, № 12. С. 1871–1878. DOI: 10.21883/JTF.2017.12.45212.2291
13. *Shikunov S., Kaledin A., Shikunova I., Straumal B., Kurlov V.* Novel Method for Deposition of Gas-Tight SiC Coatings // *Coatings*. 2023. Vol. 13, no. 2. 354. DOI: 10.3390/coatings13020354
14. *Kulik V.I., Kulik A.V., Ramm M.S., Makarov Y.* Modelling of SiC-Matrix Composite Formation by Thermal Gradient Chemical Vapour Infiltration // *Materials Science Forum*. Vol. 457–460. Switzerland: Trans Tech Publ, 2004. P. 253–256. DOI: 10.4028/www.scientific.net/msf.457-460.253
15. *Kulik V.I., Kulik A.V., Ramm M.S., Makarov Y.N.* Modelling of SiC-matrix composite formation by isothermal chemical vapor infiltration // *Journal of Crystal Growth*. 2004. Vol. 266, no. 1–3. P. 333–339. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2004.02.063
16. *Гаршин А.П., Кулик В.И., Матвеев С.А., Нилов А.С.* Современные технологии получения волокнисто-армированных композиционных материалов с керамической огнеупорной матрицей // *Новые огнеупоры*. 2017. № 4. С. 20–35. DOI: 10.17073/1683-4518-2017-4-20-35
17. *Кулик В.И., Кулик А.В., Рамм М.С., Демин С.Е.* Разработка модели и численное исследование процессов получения композитов с SiC матрицей методом парофазного силицирования // IV Международная конференция с элементами научной школы для молодежи "Функциональные наноматериалы и высокочистые вещества". М.: ИМЕТ РАН, 2012. С. 240–242.
18. *Кулик В.И., Кулик А.В., Рамм М.С., Демин С.Е.* Численное исследование градиентных газофазных процессов получения керамоматричных композитов с SiC матрицей // V Международная конференция "Функциональные наноматериалы и высокочистые вещества". М.: ИМЕТ РАН, 2014. С. 128–129.
19. *Демин В.А., Демина Т.В., Марышев Б.С.* Физико-математическая модель переноса газообразного кремния в ходе высокотемпературного силицирования углеродных композитных материалов // *Вестник Пермского университета. Физика*. 2022. № 3. С. 48–55. DOI: 10.17072/1994-3598-2022-3-48-55
20. *Агеева М.В., Демин В.А., Демина Т.В.* Физико-математическая модель доставки паров кремния в ходе высокотемпературного силицирования пористых углеродных материалов // *Известия вузов. Порошковая металлургия и функциональные покрытия*. 2024. Т. 18, № 3. С. 49–61. DOI: 10.17073/1997-308X-2024-3-49-61

21. Демин В.А., Демина Т.В. Трехмерное численное моделирование процесса переноса паров кремния в ходе насыщения пористой углеродной матрицы // Теплофизика высоких температур. 2024. Т. 62, № 6. С. 888–897. DOI: 10.31857/S0040364424060102
22. Demin V.A., Demina T.V., Zinurova V.E. Penetration of a Silicon Vapor through Residual Gaseous Medium during Siliconizing of a Carbon Composite Material // Multiphase Systems. 2024. Vol. 19, no. 3. P. 103–111. DOI: 10.21662/mfs2024.3.015
23. Демин В.А., Зинурова В.Э. Влияние неоднородности температурного поля на перенос паров кремния от зеркала расплава к изделию в ходе высокотемпературного силицирования // Вестник Пермского университета. Физика. 2023. № 2. С. 51–58. DOI: 10.17072/1994-3598-2023-2-51-58
24. Полянин А.Д., Зайцев В.Ф. Справочник по нелинейным уравнениям математической физики: Точные решения. М.: Физматлит, 2002. 432 с.
25. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Курс теоретической физики. Т. 6. Гидродинамика. М.: Физматлит, 2001. 736 с.
26. Стэлл Д.Р. Таблицы давления паров индивидуальных веществ. М.: Изд-во иностр. лит., 1949. 72 с.
27. Tomooka T., Shoji Y., Matsui T. High Temperature Vapor Pressure of Si // Journal of the Mass Spectrometry Society of Japan. 1999. Vol. 47, no. 1. P. 49–53. DOI: 10.5702/massspec.47.49
28. Sevast'yanov V.G., Nosatenko P.Y., Gorskii V.V., Ezhov Y.S., Sevast'yanov D.V., Simonenko E.P., Kuznetsov N.T. Experimental and theoretical determination of the saturation vapour pressure of silicon in a wide range of temperatures // Russian Journal of Inorganic Chemistry. 2010. Vol. 55, no. 13. P. 2073–2088. DOI: 10.1134/S0036023610130036
29. Гиришфельдер Д., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1961. 929 с.
30. Кнаке О., Странский И.Н. Механизм испарения // Успехи физических наук. 1959. Т. 68, № 2. С. 261–305. DOI: 10.3367/UFNr.0068.195906с.0261
31. Лейбензон Л.С. Движение природных жидкостей и газов в пористой среде. М.: Гостехиздат, 1947. 244 с.
32. Зельдович Я.Б., Компанеев А.С. К теории распространения тепла при теплопроводности, зависящей от температуры // Сборник, посвященный 70-летию А. Ф. Иоффе. М.: Изд-во АН СССР, 1950. С. 61–72.
33. Vázquez J.L. The Porous Medium Equation: Mathematical Theory. Oxford: Clarendon Press, 2007. 624 p. DOI: 10.1093/acprof:oso/9780198569039.001.0001
34. Пухначев В.В. Многомерные точные решения уравнения нелинейной диффузии // Прикладная механика и техническая физика. 1995. Т. 36, № 2. С. 23–31.
35. Калаишиков А.С. Некоторые вопросы качественной теории нелинейных вырождающихся параболических уравнений второго порядка // Успехи математических наук. 1987. Т. 42, № 2. С. 135–176.
36. Демин В.А., Игошев С.А. К вопросу о газодинамической модели высокотемпературного силицирования пористых углеродных материалов // Известия РАН. Механика жидкости и газа. 2025. № 2. С. 135–146. DOI: 10.7868/s3034534025020121
37. Коновалов В.В., Любимова Т.П. Разработка библиотеки встраиваемого программного кода для решения задач направленной кристаллизации // Вычислительная механика сплошных сред. 2008. Т. 1, № 4. С. 43–54. DOI: 10.7242/1999-6691/2008.1.4.37
38. Konovalov V.V. Development of CrystarPack numerical package for solving computational fluid dynamics problems // Journal of Physics: Conference Series. 2022. Vol. 2317, no. 1. 012003. DOI: 10.1088/1742-6596/2317/1/012003

Сведения об авторах:

Демин Виталий Анатольевич (корр.), дфмн, проф., Пермский государственный национальный исследовательский университет (ПГНИУ), 614680, г. Пермь, ул. Букирева, д. 15; e-mail: demin@psu.ru; ORCID: 0000-0002-9765-7695

Демина Татьяна Витальевна, асп., ПГНИУ; e-mail: demina-tatyana99@yandex.ru; ORCID: 0009-0006-5600-1354

Коновалов Владимир Владиславович, кфмн, нс, Институт механики сплошных сред УрО РАН (ИМСС УрО РАН), 614018, г. Пермь, ул. Академика Королёва, д. 1; e-mail: konovalov@icmm.ru; ORCID: 0000-0001-6733-234X

Любимова Татьяна Петровна, дфмн, проф., ИМСС УрО РАН; e-mail: lubimova@psu.ru; ORCID: 0000-0002-8212-2890

Research article

Three-dimensional numerical simulation of the silicon vapor transport process under medium vacuum conditions in the problem with cylindrical symmetry

V.A. Demin^{1,2}, T.V. Demina^{1,2}, V.V. Konovalov², T.P. Lyubimova^{1,2}

¹ Perm State National Research University, Perm, Russian Federation

² Institute of Continuous Media Mechanics UB RAS, Perm, Russian Federation

This paper presents the results of three-dimensional numerical simulation of silicon vapor transport through a rarefied inert gas atmosphere from a melt surface to a cylindrical product during vapor-phase silicification. The process is carried out under medium vacuum conditions and is designed for saturating porous thin-walled carbon products with silicon. The computation is carried out using a modified nonlinear diffusion equation that takes into account convective mass transfer in the system as an additional factor. The problem is solved by making use of the finite difference software package developed by the authors. The calculations are performed for parameters, whose values are determined by the formulas of molecular kinetic theory and filtration theory, that is, the proposed physical-mathematical model does not include adjustable phenomenological parameters. The developed approach predicts the silicification time, which is an order of magnitude shorter than the values obtained from the classical diffusion equation, and is consistent with experimental data. This demonstrates the superior predictive value of the proposed model compared to earlier approaches. The dynamics and steady-state distributions of silicon vapor concentration fields are studied for several system configurations that differ in the location of crucibles in the retort. The results of calculation are compared with the limiting case of classical diffusion. Since the nonlinear term in the modified equation is not small, there is a fundamental quantitative difference between the results of simulation done and the data of classical theory. The analysis of the obtained results explains why the modified nonlinear diffusion equation used in the calculations yields a silicon flux at the inlet of the sample that qualitatively agrees with experimental observations. In particular, the effect of weaker sample saturation at a height greater than the level of the crucible location is confirmed. It is shown that the total mass flow of silicon vapor into the sample is sufficient to silicify the sample in a reasonable time.

Keywords: vapor-phase method, silicon vapor, silicification, diffusion, convective mass transfer

Received: 22.07.2026 / **Accepted:** 26.09.2026 / **Published online:** 31.10.2026

Acknowledgements

This work was carried out as part of a major scientific project with financial support from the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (Agreement No. 075-15-2024-535 dated 23.04.2024, Task No. 2.10.2).

References

1. *Bazhenov S.L.* Mekhanika i tekhnologiya kompozitsionnykh materialov. Dolgoprudnyy: Izd. dom "Intellekt", 2014. 328 p.
2. *Matthews F.L., Rawlings R.D.* Composite materials: Engineering and Science. CRC Press, 1999. 470 p.
3. *Chawla K.K.* Composite Materials. Science and Engineering. 3rd ed. Springer, 2012. 542 p. DOI: 10.1007/978-0-387-74365-3
4. *Padture N.P.* Advanced structural ceramics in aerospace propulsion. Nature Materials. 2016. Vol. 15, no. 8. P. 804–809. DOI: 10.1038/nmat4687
5. Ceramic Matrix Composites: Materials, Modeling and Technology / ed. by N.P. Bansal, J. Lamon. John Wiley & Sons, 2015. P. 720. DOI: 10.1002/9781118832998
6. *Shchurik A.G.* Iskusstvennyye uglirodnyye materialy. Perm': Izd-vo UNIIKM, 2009. 340 p.
7. *Bushuev V.M., Sinani I.L.* Technological process development of base support production of the sealed constructions based on carbon-carbon composite materials. Bulletin of PNRPU. Series: "Mechanical Engineering, Materials Science". 2016. Vol. 18, no. 1. P. 43–53. DOI: 10.15593/2224-9877/2016.1.03
8. *Sinani I.L., Bushuev V.M.* Razrabotka tekhnologicheskikh protsessov izgotovleniya germetichnykh uglirod-uglirodnykh kompozitsionnykh materialov tipa Uglekon. Korroziya: materialy, zashchita. 2013. No. 7. P. 18–23.
9. *Bushuev V.M., Lunegov S.G., Bushuev M.V.* Development of a combined method of siliconising of large-sized CCCM product based on alternative liquid-phase method and process of capillary condensation of silicon vapours. PNRPU Aerospace Engineering Bulletin. 2015. No. 40. P. 44–63. DOI: 10.15593/2224-9982/2015.40.03
10. Method of manufacturing hermetic products from carbon-carbidesilicon materials: RU2543242C2 / V.M. Bushuev, V.J. Chunaev, M.V. Bushuev, D.S. Obolenskij. 2015
11. Method of manufacturing thin-wall products from silicified carbon composite: RU2194682C2 / V.M. Bushuev, P.G. Udintsev, V.J. Chunaev, A.V. Duvalov. 2002
12. *Shikunov S.L., Kurlov V.N.* SiC-Based Composite Materials Obtained by Siliconizing Carbon Matrices. Technical Physics. 2017. Vol. 62, no. 12. P. 1869–1876. DOI: 10.1134/S1063784217120222
13. *Shikunov S., Kaledin A., Shikunova I., Straumal B., Kurlov V.* Novel Method for Deposition of Gas-Tight SiC Coatings. Coatings. 2023. Vol. 13, no. 2. 354. DOI: 10.3390/coatings13020354
14. *Kulik V.I., Kulik A.V., Ramm M.S., Makarov Y.* Modelling of SiC-Matrix Composite Formation by Thermal Gradient Chemical Vapour Infiltration. Materials Science Forum. Vol. 457–460. Trans Tech Publ, 2004. P. 253–256. DOI: 10.4028/www.scientific.net/msf.457-460.253
15. *Kulik V.I., Kulik A.V., Ramm M.S., Makarov Y.N.* Modelling of SiC-matrix composite formation by isothermal chemical vapor infiltration. Journal of Crystal Growth. 2004. Vol. 266, no. 1–3. P. 333–339. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2004.02.063

16. Garshin A.P., Kulik V.I., Matveev S.A., Nilov A.S. The state-of-art technologies for the fiberreinforced composition materials with the ceramic refractory matrix. *Novye ognepupory (New Refractories)*. 2017. No. 4. P. 20–35. DOI: 10.17073/1683-4518-2017-4-20-35
17. Kulik V.I., Kulik A.V., Ramm M.S., Demin S.Y. Razrabotka modeli i chislennoye issledovaniye protsessov polucheniya kompozitov s SiC matritsey metodom parofaznogo silitsirovaniya. IV Mezhdunarodnaya konferentsiya s elementami nauchnoy shkoly dlya molodezhi “Funktsional’nyye nanomaterialy i vysokochistyye veshchestva”. M.: IMET RAN, 2012. P. 240–242.
18. Kulik V.I., Kulik A.V., Ramm M.S., Demin S.Y. Chislennoye issledovaniye gradiyentnykh gazofaznykh protsessov polucheniya keramomatrichnykh kompozitov s SiC matritsey. V Mezhdunarodnaya konferentsiya “Funktsional’nyye nanomaterialy i vysokochistyye veshchestva”. M.: IMET RAN, 2014. P. 128–129.
19. Demin V.A., Demina T.V., Maryshev B.S. Physical and mathematical model of gaseous silicon transfer during high-temperature siliconization of carbon composite materials. *Bulletin of Perm University. Physics*. 2022. No. 3. P. 48–55. DOI: 10.17072/1994-3598-2022-3-48-55
20. Ageeva M.V., Demin V.A., Demina T.V. Physical and mathematical model of the silicon vapor transport during high-temperature silicification of a porous carbon media. *Powder Metallurgy and Functional Coatings*. 2024. Vol. 18, no. 3. P. 49–61. DOI: 10.17073/1997-308X-2024-3-49-61
21. Demin V.A., Demina T.V. Three-Dimensional Numerical Simulation of Silicon Vapor Transport during the Infiltration of a Porous Carbon Matrix. *High Temperature*. 2024. Vol. 62, no. 6. P. 779–787. DOI: 10.1134/S0018151X25700385
22. Demin V.A., Demina T.V., Zinurova V.E. Penetration of a Silicon Vapor through Residual Gaseous Medium during Siliconizing of a Carbon Composite Material. *Multiphase Systems*. 2024. Vol. 19, no. 3. P. 103–111. DOI: 10.21662/mfs2024.3.015
23. Demin V.A., Zinurova V.E. Influence of the temperature field inhomogeneity on the transfer of silicon vapor from the melt mirror to the product during high-temperature siliconization. *Bulletin of Perm University. Physics*. 2023. No. 2. P. 51–58. DOI: 10.17072/1994-3598-2023-2-51-58
24. Polyanin A.D., Zaitsev V.F. *Handbook of nonlinear partial differential equations*. New York: Chapman & Hall/CRC Press, 2003. 840 p. DOI: 10.1201/9780203489659
25. Landau L.D., Lifshitz E.M. *Fluid Mechanics. Course of Theoretical Physics*. Vol. 6. Oxford: Pergamon Press, 1987. 539 p.
26. Stull D.R. Vapor pressure of pure substances: Organic and inorganic compounds. *Industrial & Engineering Chemistry*. 1947. Vol. 39, no. 4. P. 517–540. DOI: 10.1021/ie50448a022
27. Tomooka T., Shoji Y., Matsui T. High Temperature Vapor Pressure of Si. *Journal of the Mass Spectrometry Society of Japan*. 1999. Vol. 47, no. 1. P. 49–53. DOI: 10.5702/masspec.47.49
28. Sevast’yanov V.G., Nosatenko P.Y., Gorskii V.V., Ezhov Y.S., Sevast’yanov D.V., Simonenko E.P., Kuznetsov N.T. Experimental and theoretical determination of the saturation vapour pressure of silicon in a wide range of temperatures. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*. 2010. Vol. 55, no. 13. P. 2073–2088. DOI: 10.1134/S0036023610130036
29. Hirschfelder J.O., Curtiss C.F., Bird R.B. *Molecular theory of gases and liquids*. Wiley & Sons, 1954. 1219 p.
30. Knacke O., Stranski I.N. The mechanism of evaporation. *Progress in Metal Physics*. 1956. Vol. 6. P. 181–235. DOI: 10.1016/0502-8205(56)90007-7
31. Leybenzon L.S. *Dvizheniye prirodnnykh zhidkostey i gazov v poristoy srede*. M.: Gostekhizdat, 1947. 244 p.
32. Zel’dovich Y.B., Kompaneyets A.S. K teorii rasprostraneniya tepla pri teploprovodnosti, zavislyashchey ot temperatury. *Sbornik, posvyashchennyy 70-letiyu A. F. Ioffe*. M.: Izd-vo AN SSSR, 1950. P. 61–72.
33. Vázquez J.L. *The Porous Medium Equation: Mathematical Theory*. Clarendon Press, 2007. 624 p. DOI: 10.1093/acprof:oso/9780198569039.001.0001
34. Pukhnachev V.V. Exact multidimensional solutions of the nonlinear diffusion equation. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*. 1995. Vol. 36, no. 2. P. 169–176. DOI: 10.1007/bf02369646
35. Kalashnikov A.S. Some problems of the qualitative theory of non-linear degenerate second-order parabolic equations. *Russian Mathematical Surveys*. 1987. Vol. 42, no. 2. P. 169–222. DOI: 10.1070/rm1987v042n02abeh001309
36. Demin V.A., Igoshev S.A. Gasdynamic Modeling of High-Temperature Siliconizing of Porous Silicon-Based Materials. *Fluid Dynamics*. 2025. Vol. 60, no. 2. 32. DOI: 10.1134/S001546282460528X
37. Kononov V.V., Lyubimova T.P. Working out of built-in program code library for solving directional solidification crystal growth tasks. *Computational Continuum Mechanics*. 2008. Vol. 1, no. 4. P. 43–54. DOI: 10.7242/1999-6691/2008.1.4.37
38. Kononov V.V. Development of CrystarPack numerical package for solving computational fluid dynamics problems. *Journal of Physics: Conference Series*. 2022. Vol. 2317, no. 1. 012003. DOI: 10.1088/1742-6596/2317/1/012003