

Теоретическое исследование переноса паров кремния при производстве углеродных композиционных материалов

^{1,2}Демин В.А., ^{1,3}Демина Т.В.

¹Пермский государственный национальный исследовательский университет, Пермь

²Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь

³Институт механики сплошных сред УрО РАН, Пермь

Теоретическое описание процессов переноса в газах в условиях высокого и низкого вакуума требует разных подходов. В первом случае для этого требуется применение методов статистической физики, во втором – применимы уравнения механики сплошных сред. Однако, в промежуточной области, соответствующей условиям среднего вакуума, когда число Кнудсена имеет значение порядка 0.1 – 0.01, возникает сложная ситуация, когда ни тот ни другой подходы не дают хороших результатов при их строгом применении. Одно из таких парадоксальных явлений имеет место в ходе реализации технологического процесса высокотемпературного парофазного силицирования пористых углеродных матриц. Ранее в [1] для теоретического описания процесса переноса паров кремния в рабочем пространстве реторты использовалась так называемая диффузионная модель. Оценки показывают, что в рассматриваемых условиях коэффициент диффузии имеет огромную величину: $D = 0.7 \text{ м}^2/\text{с}$. В результате долгое время считалось, что классическая диффузия является главным механизмом переноса паров кремния в среде инертного несущего газа. В качестве одного из главных выводов диффузионная модель предсказывала чрезвычайно низкий поток кремния в пористую матрицу, что явно не соответствовало опыту.

В работе [2] на основе сплошносредного подхода получено новое нелинейное уравнение переноса, отличающееся от классического уравнения диффузии дополнительным нелинейным слагаемым типа квадрата градиента концентрации. Это уравнение выводится из полной системы уравнений гидродинамики и имеет вид:

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

где C – массовая концентрация кремния, а D_c – размерный параметр задачи, характеризующий наличие дополнительного конвективного переноса в среде. Этот параметр имеет такую же размерность как и коэффициент диффузии ($\text{м}^2/\text{с}$). Он выражается через материальные параметры среды следующим образом:

$$D_c = \frac{\kappa R T \rho_{\text{к}}}{\eta \mu_{\text{к}}}. \quad (2)$$

Здесь T – абсолютная температура, R – универсальная газовая постоянная, κ – проницаемость аргона, η – динамическая вязкость газообразного кремния, $\mu_{\text{к}}$ – молярная масса кремния, $\rho_{\text{к}}$ – плотность паров кремния.

В одномерной стационарной постановке уравнение (1) имеет точные аналитические решения, описывающие системы с плоской и с цилиндрической симметрией. Эти модельные системы отражают практические важные конфигурации, востребованные на производстве. Оба решения имеют характер логарифмических зависимостей и демонстрируют значительно более интенсивный массоперенос паров кремния в среде аргона в условиях среднего вакуума нежели диффузионная модель. Также, уравнение (1) хорошо программируется как в двумерном, так и трехмерном случаях. Граничные условия к этому уравнению ставятся вполне обоснованно и представляют собой классические условия типа Дирихле на зеркале расплава и на поверхности образца, а также условие Неймана на твердых непроницаемых стенках реторты. Пример задачи в трехмерной постановке приведен на рис. 1. Описание динамики перераспределения паров кремния в реторте от зеркала расплава к изделию производилось на основе уравнения (1) численно методом конечных разностей [3].

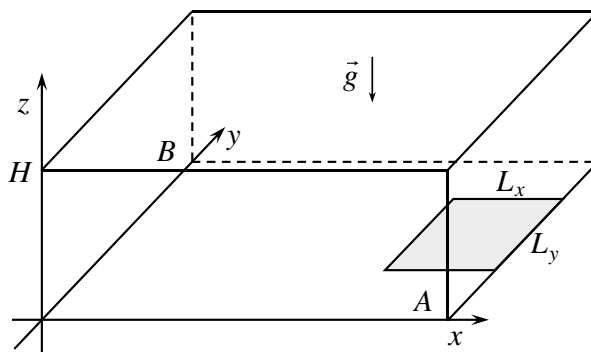


Рис. 1. Реторта в форме прямоугольного параллелепипеда. Серая область – зеркало расплава. Вертикальная граница слева – поверхность образца

В ходе расчетов использовался авторский программный продукт, реализованный на языке программирования Фортран-90. Рабочие размеры области составляли: $A = B = 0.6$ м, $H = 0.4$ м. Расчеты производились на равномерной прямоугольной сетке с числом узлов по осям $N_x = N_y = 101$, $N_z = 51$. Под зеркало расплава выделялось число узлов $n_x = n_y = 21$. Оценка параметра конвективного переноса (2) на основе известных табличных данных дает $D_c = 52$ м²/с. Пусть в условиях среднего вакуума парциальные давления паров кремния и несущего газа (аргона) равны соответственно $p_k = 10$ Па и $p_a = 100$ Па. Это соответствует массовой концентрации кремния на зеркале расплава $C_s = 0.08$. На поверхности образца предполагается полное поглощение пара, поэтому принимается, что на левой вертикальной границе при $x = 0$ концентрация равна нулю $C = 0$. Также, расчеты были выполнены для предельного случая $D_c = 0$, который соответствует классическому уравнению диффузии. Расчетные поля концентрации паров кремния, соответствующие стационарным режимам массопереноса, представлены на рис. 2.

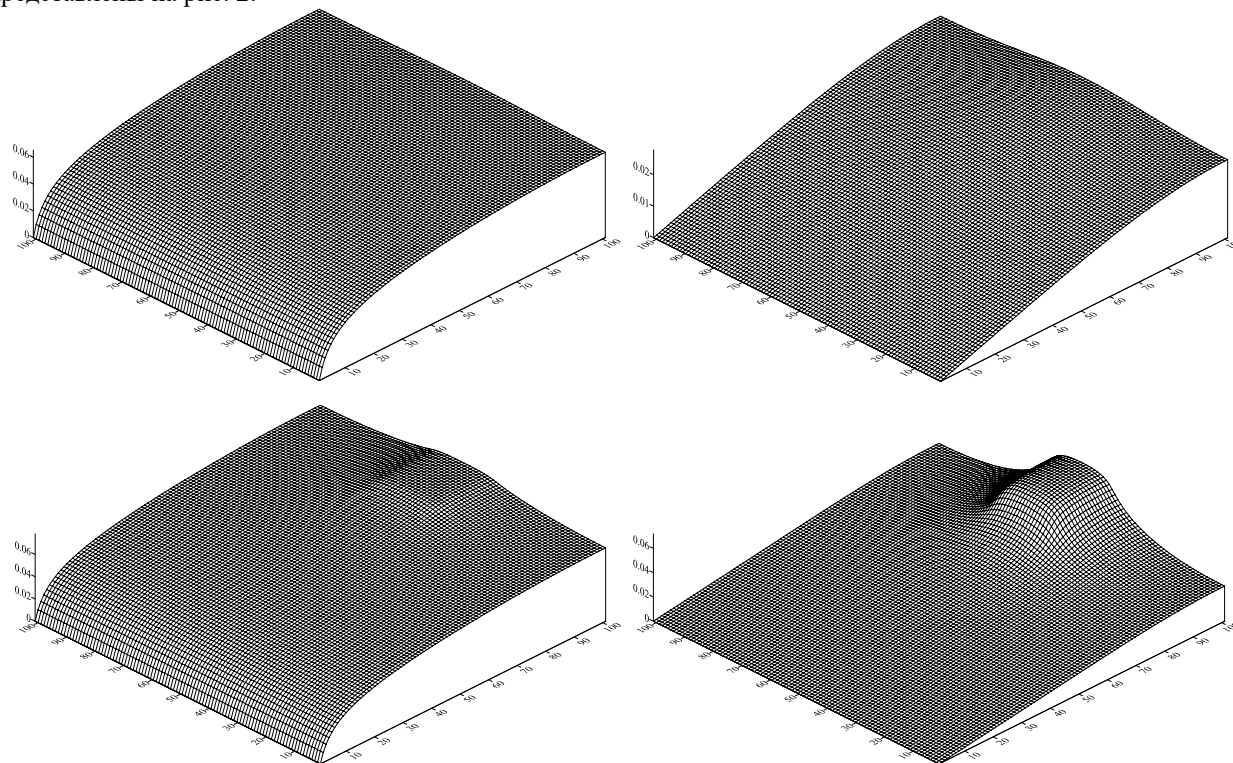


Рис. 2. Слева – результат расчета согласно уравнению (1); справа – согласно классическому уравнению диффузии

Верху представлены сечения полей концентрации на высоте $h = 23.3$ см, внизу изображены поля вблизи дна на высоте $h = 0.8$ см. Численное моделирование показывает, что учет конвективного механизма переноса значительно видоизменяет структуру полей концентрации на любой высоте внутри реторты. Из рис. 2 видно, что в противоположность диффузионной модели, модифицированное уравнение переноса паров кремния (1) вследствие условия полного поглощения на изделии предсказывает практически полное заполнение реторты парами кремния за исключением тонкой области вблизи образца. Выпуклость поля концентрации создает более высокий градиент на поверхности изделия, что приводит к значительному увеличению потока массы через границу раздела внутрь пористого материала. Таким образом, предлагаемая новая физико-математическая модель позволяет объяснить интенсивный массоперенос кремния в образец, что подтверждается экспериментально.

Список литературы

- [1] 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 Межд. конф. “Функциональные наноматериалы и высокочистые вещества”. Сб. матер. конф., М.: ИМЕТ РАН, Суздаль, 2012, с. 240-242.
- [2] 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.
- [3] Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1989. – 616 с.