

Колдонулган адабияттар

1. Абраимов И.И. Классификация приборных структур одноэлектроники/ И.И. Абраимов, Е.Г. Новик //Физика и техника полупроводников, 1999. Т. 33.- №11.-С.1388-1394.
2. Кузминь Л.С.Прямое наблюдение дискретного коррелированного одноэлектронного туннелирования /Л.С. Кузминь , К.К Лихарев // Письма в ЖЭТФ. 1987. Т. 45.- С.385.
3. Лихарев К.К. Одноэлектроника / К.К. Лихарев, Т. В. Класов //В мире науки, 1992.-Т.8.
4. Солдатов Е.С. Одноэлектронный транзистор на основе одиночной класстерно молекулы при комнатной температуре/ Е.С. Солдатов, В.В. Ханин и др. // Письма в ЖЭТФ. 1996. -Т. 64
5. Молекулярный одноэлектронный транзистор, работающий при комнатной температуре/ Е.С. Солдатов, В.В. Ханин, А.С. Трифионов и др. //УФН. 1998. Т. 168. -№ 2.- С. 217-219.

УДК 621.762

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКЦИОННОГО СПЕКАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ В АТМОСФЕРЕ АЗОТА

Касмаматов Нурбек Кыдырмышевич, д.ф.-м.н., профессор кафедры физики и микроэлектроники КРСУ, Кыргызстан, 720000, Киевская 44, e-mail:nurkas@mail.ru.

Кайрыев Нурлан Жутанович, к.ф.-м.н, доцент кафедры физики и микроэлектроники КРСУ, Кыргызстан, 720000, Киевская 44, e-mail: n.kajryev@mail.ru

Сатаев Лесбек Орынгалиевич, аспирант кафедры физики Кыргызского Государственного Университета им. И.Арабаева, Кыргызстан,720026, Раззакова 51, e-mail: Leke_1974@mail.ru

В статье разработана двухмерная нестационарная физико-математическая модель, позволяющая рассчитать пространственно-временные зависимости эволюции нагрева в процессе реакционного спекания кристаллических порошков кремния в газовой среде азота.

Ключевые слова: двумерная модель, реакционное спекание, нитрид кремния, дифференциальные уравнения, краевые и начальные условия, эффективные коэффициенты.

TWO DIMENSIONAL TRANSIENT MODEL OF REACTING SILICON SINTERING IN THE NITROGEN ATMOSPHERE

Kasmamytov Nurbek Kydyrmyshevich, D.Sc., professor of Physics and Microelectronics department KRSU, Kyrgyzstan, 720000, Kievskaya, 44, e-mail: nurkas@mail.ru

Kajryyev Nurlan Zhutanovich, Cand., assistant professor of Physics and Microelectronics department KRSU, Kyrgyzstan, 720000, Kievskaya, 44, e-mail: n.kajryev@mail.ru

Sataev Lesbek Oryngalievich, grad student of Physics department in Kyrgyz State University, Kyrgyzstan, 720026, Razzakova, 51, e-mail: leke1974@mail.ru

Two dimensional transient physical and mathematical model that allows us to calculate the spatial-temporal evolution dependence in the process of heating the reacting crystalline silicon powder sintering in nitrogen gases was developed in the article.

Keywords: two dimensional model, reacting sintering, silicon heating, differential equations, boundary and initial conditions, effective coefficients.

Организация производства дешевых керамических изделий, различных составов и композиций на основе нитрида кремния, получаемые методом реакционного спекания является актуальной проблемой керамической технологии, которая использует технические приёмы порошковой металлургии [3].

В работах [4,5] подробно описана технология получения керамокомпозиционных материалов на основе нитрида кремния, а также изучено формирование их структуры и свойств. Для получения керамокомпозиционных изделий на основе нитрида кремния стало необходимым теоретическое изучение ряда процессов, протекающих при реакционном спекании порошков кремния в среде азота. В частности, требовалось выявить оптимальные условия реакционного спекания, при котором формируется заданная структура нитридокремниевой керамики, знание об изменении концентрации азота в кристаллическом кремниевом изделии в процессе спекания, темпы превращения кристаллического кремния в нитрид кремния в зависимости от внешних регулируемых параметров реакционного спекания и конфигурации изделия. Отметим, что ранее в работах [2,7] нами было проведено теоретическое исследование реакционного спекания кремниевых порошковых изделий в атмосфере азота методом численного моделирования на базе одномерной нестационарной модели. Результаты численного моделирования на базе одномерной нестационарной модели показали, что они хорошо согласуются с экспериментальными данными. Фактически модельные исследования позволили заменить длительный и дорогостоящий эксперимент.

Целью настоящей работы заключалось в разработке двухмерной нестационарной модели реакционного спекания кремниевых кристаллических порошковых изделий в газовой среде азота. И на основе этой двухмерной модели провести численное моделирование процесса реакционного спекания в объёме кремниевого изделия в атмосфере азота.

Для реализации поставленной цели в настоящей работе решалась следующая задача. В центре цилиндрической печи находится пористое изделие из кремния в форме цилиндра (трубки, стакана) радиуса R и высотой h . В момент времени t , когда печь с изделием равномерно разогреты до температуры 900°C , начинают осуществлять медленный напуск в камеру реактора печи особо чистый азот. Отметим, при данной температуре спекания в кристаллическом кремнии начинают активно протекать процессы диффузии. Молекулы азота за счет диффузионных механизмов (через газовую фазу, поверхностную, объёмную и зернограничную) проникают внутрь кремниевого изделия. В процессе дальнейшего нагрева при определённых температурах реакционного спекания кристаллический кремний постепенно начинает вступать в кристаллохимическую реакцию с атомами азота с формированием нитридокремниевое соединения Si_3N_4 . Реакция образования нитрида кремния в изделии происходит до тех пор, пока весь кристаллический кремний не провзаимодействует с азотом. Температура на поверхности изделия полагается равной температуре азота в печи. Температура спекания и давление азота в печи считаются внешними регулируемыми параметрами и задаются как функции времени, которые для расчётов были взяты из собственных экспериментов [5,2].

Таким образом, требовалось рассчитать пространственно-временные зависимости эволюции температуры и изменения концентрации азота внутри объёма кремниевого цилиндрического изделия, вплоть до образования нитридокремниевое керамического изделия с использованием двухмерной нестационарной модели. Знание этих зависимостей необходимо, для прогнозирования процесса реакционного спекания нитрида кремния.

По сути, физико-математическая модель тепломассопереноса реакционного спекания кристаллического кремния с азотом включает в себя три взаимосвязанных дифференциальных уравнения. Дифференциальное уравнение (1) представляет собой нестационарное уравнение теплопроводности в частных производных второго порядка, которое описывает распределение температуры в заданной области объёма пористого цилиндрического кремниевого изделия и ее изменение во времени. Дифференциальное уравнение (2) в частных производных второго порядка является уравнением непрерывности газа (азота) в кремниевом изделии. Третье уравнение представляет собой дифференциальное

уравнение (3), которое описывает уменьшение концентрации атомов азота в кремниевом изделии в процессе спекания за счет вступления атомов азота в кристаллохимическую реакцию с кремнием, образуя нитрид кремния. Дифференциальные уравнения (1) и (2) записаны в цилиндрической системе координат с учетом осевой симметрии.

$$(\rho c)_{\text{eff}} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda_{\text{eff}} \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_{\text{eff}} \frac{\partial T}{\partial z} \right) + Q \cdot \dot{n} \quad (1)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r D_{\text{eff}} \frac{\partial n}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{\text{eff}} \frac{\partial n}{\partial z} \right) + \dot{n} \quad (2)$$

$$\frac{dn_{\text{Si}}}{dt} = -k_r n_{\text{Si}} \quad (3)$$

Для решения системы трёх дифференциальных уравнений (1)-(3) задаются следующие начальные и граничные условия:

$$t = 0 : \quad T(r) = T_0 = 900 \text{ } ^\circ\text{C}, \quad n_0(r) = \frac{p_0}{kT_0} \sim 10^{14} \text{ м}^{-3}, \quad p_0 \sim 10^{-5} \text{ Па}, \quad n_{\text{Si}} = \frac{(1-\bar{I}) \rho_{\text{Si}}}{\mu_{\text{Si}}} N_A ;$$

$$r = 0 : \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial n}{\partial r} = 0 ; \quad r = R : \quad T(R) = T_R(t), \quad n(R) = n_R(t) ,$$

где t – время, r – радиальная координата, T – температура, $n_{\text{N,si}}$ – концентрации молекул азота и кремния, ρ_{eff} – эффективная плотность, c – удельная теплоемкость, λ – теплопроводность, D – коэффициент диффузии пористого кремния в азоте, dn/dt – скорость уменьшения концентрации молекул азота за счет реакции, Q и k_r – соответственно теплота и константа скорости реакции, \bar{I} – пористость кремниевого изделия, ρ_{Si} – плотность и μ_{Si} – молярная масса кремния, k – постоянная Больцмана, N_A – постоянная Авогадро.

Для осуществления численных расчётов реакционного спекания кремния с азотом требовалось определить ряд констант и коэффициентов. Например: константа скорости реакции определялась по формуле согласно [6,1] в виде:

$$k_r = C \cdot p e^{-E_A/kT} \quad (4)$$

где $p = nkT$ – парциальное давление азота, E_A – энергия активации, C – постоянная величина, зависящая от параметров порошка, которая определяется из эксперимента [3-5].

Значение константы C для модельных расчётов было взято равным $C = 10^{-3} \text{ с}^{-1} \cdot \text{Па}^{-1}$. Так как кристаллохимическая реакция кремния с азотом протекает по схеме $3\text{Si} + 2\text{N}_2 = \text{Si}_3\text{N}_4$, то можно определить скорость изменения концентрации молекул азота в процессе реакции в виде формулы:

$$\dot{n} = -\frac{2}{3} k_r n_{\text{Si}} = -\left(\frac{2}{3} C k T n_{\text{Si}} e^{-E_A/kT} \right) n \quad (5)$$

Теплофизические и переносные коэффициенты теплопроводности (6) и плотности (7), вычислялись с помощью соотношений:

$$\lambda_s = x_{\text{Si}} \lambda_{\text{Si}} + x_{\text{Si}_3\text{N}_4} \lambda_{\text{Si}_3\text{N}_4} \quad (6)$$

$$\rho_s = (x_{\text{Si}} / \rho_{\text{Si}} + x_{\text{Si}_3\text{N}_4} / \rho_{\text{Si}_3\text{N}_4})^{-1} \quad (7)$$

где массовые доли не прореагировавшего кремния и сформировавшегося кристаллического нитрида кремния в процессе реакционного синтеза определялись по ниже приведенным формулам (8) и (9):

$$x_{Si} = \frac{n_{Si} M_{Si}}{n_{Si} M_{Si} + n_{Si_3N_4} M_{Si_3N_4}} \quad (8)$$

$$x_{Si_3N_4} = \frac{n_{Si_3N_4} M_{Si_3N_4}}{n_{Si} M_{Si} + n_{Si_3N_4} M_{Si_3N_4}} \quad (9)$$

Эффективные коэффициенты теплопроводности, плотности и удельной теплоемкости пористого кремниевого изделия вычислялись соответственно по формулам:

$$\lambda_{eff} = \lambda_g \Pi^{1/3} + \lambda_s (1 - \Pi^{2/3}) \quad (10)$$

$$\rho_{eff} = \rho_g \Pi + \rho_s (1 - \Pi) \quad (11)$$

$$c_{eff} = \bar{x}_{Si} c_{Si} + \bar{x}_{Si_3N_4} c_{Si_3N_4} + \bar{x}_g c_{p,g} \quad (12)$$

Массовые доли кремния, нитрида кремния и газа (азота) в пористом спекаемом изделии оценивались по трём ниже приведённым формулам:

$$\bar{x}_{Si} = \frac{n_{Si} M_{Si}}{n_{Si} M_{Si} + n_{Si_3N_4} M_{Si_3N_4} + n_g M_g}, \quad \bar{x}_{Si_3N_4} = \frac{n_{Si_3N_4} M_{Si_3N_4}}{n_{Si} M_{Si} + n_{Si_3N_4} M_{Si_3N_4} + n_g M_g},$$

$$\bar{x}_g = \frac{n_g M_g}{n_{Si} M_{Si} + n_{Si_3N_4} M_{Si_3N_4} + n_g M_g} \quad (13)$$

Величина эффективного коэффициента диффузии атомов азота в кремний для расчётов была принята равным $D_{eff} = 10^{-5}$ м²/с, а энергия активации кристаллохимического реакционного синтеза нитрида кремния была взята равной $E_A = 141,3$ кДж/моль.

Результаты численного расчёта и их обсуждение с помощью данной двухмерной модели реакционного спекания кристаллического кремния в атмосфере азота будут представлены в следующей статье.

В заключении отметим, что разработанная двухмерная нестационарная модель позволила провести численный расчёт пространственно-временных зависимостей эволюции температуры и изменения концентрации азота внутри объёма кремниевого цилиндрического изделия, вплоть до образования нитридокремниевого керамического изделия.

Список литературы

1. Быков Ю.В. и др. Моделирование реакций азотирования и окисления кремния при микроволновом нагреве// Международный семинар «Проблемы моделирования и развития технологии получения керамики». Бишкек: Изд-во КРСУ, 2005. - С. 50–52.
2. Кайрыев Н.Ж. Одномерная физико-математическая модель реакционного спекания отформованных ультрадисперсных порошков кремния в атмосфере азота / Н.Ж. Кайрыев, Л.О. Сатаев, Н.К. Касмамытов// Агентство перспективных научных исследований. Периодический научный сборник. Белгород. – 2016. - №4-1. – С.40-45.
3. Касмамытов Н.К. Структурообразование керамокомпозиционных материалов на основе нитрида кремния /Н.К.Касмамытов.- Бишкек: КРСУ, 2011. - 100 с.
4. Касмамытов Н.К. Кыргызская керамика на базе местного сырья /Н.К. Касмамытов, В.П. Макаров. - Бишкек, КРСУ - 2014. – 122 с.
5. Касмамытов Н.К. Утилизация отходов кремниевого производства/ Н.К. Касмамытов. - Бишкек: Белек.- 2010.- 236 с.
6. Моделирование и технология получения керамики на основе кремния. Под ред. Лелевкина В.М., Каныгиной О.Н. –Бишкек: КРСУ, 2008. –282 с.
7. Сатаев Л.О. Расчётные данные по формированию нитрида кремния в процессе реакционного спекания кремния в атмосфере азота /Л.О. Сатаев, Н.Ж. Кайрыев, Н.К. Касмамытов // Агентство перспективных научных исследований. Периодический научный сборник. Белгород. – 2016. - №4-1. – С.46 - 53.