

## ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ПРОЦЕССА ГАЗОФАЗНОГО СИНТЕЗА КРЕМНИЯ

Кудякова В.С.<sup>1, 2</sup>, Шишкин Р.А.<sup>1, 2</sup>

<sup>1)</sup> Уральский федеральный университет имени первого Президента России  
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

<sup>2)</sup> Институт химии твердого тела УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия  
E-mail: v.s.kudiakova@urfu.ru

## THERMODYNAMIC ANALYSIS OF THE SILICON GAS-PHASE SYNTHESIS PROCESS

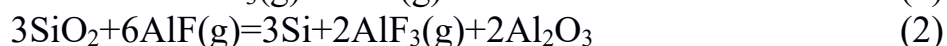
Kudyakova V.S.<sup>1, 2</sup>, Shishkin R.A.<sup>1, 2</sup>

<sup>1)</sup> Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

<sup>2)</sup> Institute of Solid State Chemistry UB RAS, Yekaterinburg, Russia

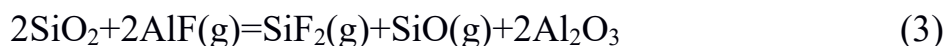
The thermodynamic analysis of silicon synthesis in transport reaction with aluminum fluorides was performed by HSC Chemistry program. A mechanism for the process of silicon formation, which consists of 4 stages, is proposed.

Несмотря на широкое применение кремния в современной промышленности, исследование новых технологий, которые повысят экономическую эффективность процесса синтеза и позволят получить кремний с заданной морфологией, остается актуальным вопросом. Недавно был предложен новый газофазный метод синтеза кремния из оксида за счет восстановления субфторидом алюминия в ходе транспортной химической реакции [1]. Этот метод основан на следующих превращениях:



Стоит отметить, что реакция (2) носит только формальный характер и не характеризует процессы, происходящие в реакционном пространстве, поскольку согласно законам химической кинетики, не существует реакций с молекулярностью выше трёх. С другой стороны, понимание кинетики протекания процесса синтеза важно для подбора оптимальных технологических параметров, которые позволят получать кремний с максимальным выходом при минимальных ресурсозатратах.

В настоящей работе проведено термодинамическое моделирование процессов в системе Al-AlF<sub>3</sub>-SiO<sub>2</sub> с помощью программы HSC Chemistry 9.3.0, имеющей наиболее полную базу современных термодинамических взаимосогласованных данных. Предложен механизм протекания процесса образования кремния, состоящий из 4 стадий:



Стадия 1 соответствует реакции с участием 4 молекул, что противоречит законам химической кинетики. Мы предполагаем, что она протекает с участием промежуточных метастабильных соединений, не представленных среди известных термодинамических данных.

На рисунке 1 приведён пример изменения равновесного состава продуктов реакций 1-2 в зависимости от температуры. На диаграмме не отмечены  $\text{AlF}_2(\text{g})$ ,  $\text{Al}_2\text{F}_6(\text{g})$ ,  $\text{SiO}(\text{g})$ ,  $\text{Si}_2\text{OF}_6(\text{g})$ ,  $\text{Al}_2\text{SiO}_5$ , которые присутствуют в системе в следовых количествах.

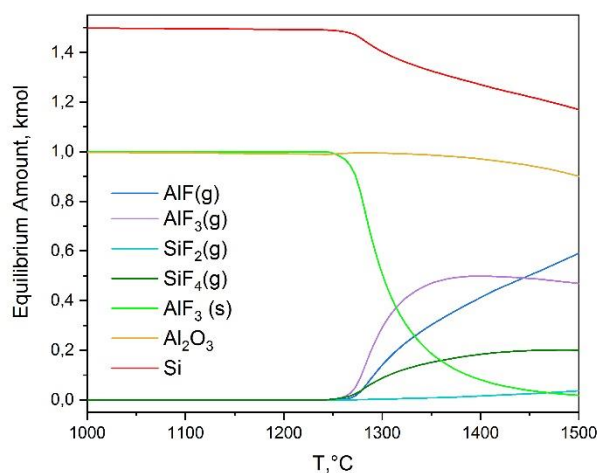


Рис. 1. Значения равновесных содержаний продуктов взаимодействия в закрытой системе «Al-AlF<sub>3</sub>-SiO<sub>2</sub>».

*Работа выполнена при поддержке совета по грантам Президента Российской Федерации (проект № МК-182.2022.1.3).*

1. Shishkin R.A., Kudyakova V.S. et al., AIP Conf. Proc., 2174, 020063 (2019).