

© И.В. Деревянко, О.И. Поляков, А.В. Жаданос, 2012 г.  
Национальная металлургическая академия Украины,  
г. Днепропетровск  
Республика Украина  
*Alexjad@mail.ru, Ihorsic@meta.ua*

## ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПРИМЕСНЫХ ОКСИДОВ В ПРОЦЕССЕ ПОЛУЧЕНИЯ КАРБИДА КРЕМНИЯ

Особенностью процесса и технологии получения карбида кремния по способу Ачесона состоит в образовании по толщине слоя шихты продуктов, отличающихся между собой как содержанием карбида кремния, так и концентрацией примесей. При загрузке в электропечь сопротивления мощностью 4000 кВт шихты в количестве 65–75 т, образуется только 8,5–9,5 т абразивного карбида кремния, остальные продукты синтеза представлены аморфом 2,5–3,5 т, сростками 0,55–0,65 т, силоксиконном 5,5–6,5 т и непрореагировавшей шихтой 15–20 т. Практика производства карбида кремния показывает, что при многократном использовании возвратной шихты, она обогащается вредными примесями преимущественно  $Al_2O_3$ ,  $CaO$ ,  $Fe_2O_3$ . Поэтому шихту, обогащенную примесными оксидами до концентрации  $Al_2O_3 + CaO + Fe_2O_3$  более 2 %, выводят из технологической схемы производства и направляют в отвал. В печи, загруженной шихтой (до компании), примеси распределены равномерно. В условиях высоких температур примесные оксиды восстанавливаются и перемещаются от реакционной зоны в более холодные горизонты шихты, вследствие чего примеси перераспределяются по толщине шихтовой загрузки.

В настоящей работе объяснен механизм перераспределения примесных оксидов между кристаллическим  $SiC$  и попутными продуктами с привлечением механизма химических транспортных реакций.

$$i A_{(тв, ж)} + k B_{(газ)} + \dots = j C_{(газ)}.$$

Шихта для получения карбида кремния представляет собой систему  $Si-Al-Ca-Fe-C-O$ . В зоне реакций образования  $SiC$   $Fe_2O_3$  восстанавливается с образованием термодинамически прочных силицидов и практически не перераспределяется в шихте.

Термодинамические исследования выполненные с использованием программного обеспечения HSC Chemistry 5.0 (ESM Software, Outokumpu, Финляндия) показали, что в составе газовой фазы находятся компоненты  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $SiO$ ,  $Al_{г}$ ,  $Al_{2г}$ ,  $AlO_{г}$ ,  $Al_2O_{г}$ ,  $Al_2O_{2г}$ ,  $AlC_{г}$ ,  $AlC_{2г}$ ,  $Al_2C_{2г}$ ,  $Ca_{г}$ . Для дальнейших расчетов в составе газовой фазы учитываем  $CO$ ,  $SiO$ ,  $Al_{г}$ ,  $AlO_{г}$ ,  $Al_2O_{г}$ ,  $Al_2C_{2г}$ ,  $Ca_{г}$  т. е.

$$\sum P = P_{CO} + P_{SiO} + P_{Al} + P_{AlO} + P_{Al_2O} + P_{Al_2C_2} + P_{Ca}.$$

Как показывают проведенные нами расчеты в интервале температур 2073–2373K при концентрации  $\text{SiO}_2$  – 55 %  $P_{\text{SiO}} = 0,25$ ;  $\text{Al}_2\text{O}_3$  – 0,45 %  $P_{\text{Al}_2\text{O}_g} = 6,98 \cdot 10^{-4}$ ,  $P_{\text{AlO}_g} = 1,14 \cdot 10^{-7}$ ,  $P_{\text{Al}_2\text{C}_{2g}} = 1,71 \cdot 10^{-7}$ ,  $P_{\text{Al}_g} = 9,13 \cdot 10^{-4}$ ;  $\text{CaO}$  – 0,2 %  $P_{\text{Ca}_g} = 4 \cdot 10^{-3}$ ;  $P_{\text{CO}} = 0,975$ . С учетом полученных данных рассчитана степень перехода примесных компонентов в продукты плавки в результате электротермического процесса в промышленной печи сопротивления (табл. 1).

Таблица 1

Степень перехода примесных компонентов при производстве карбида кремния в печи мощностью 4000 кВА

Примесь	Продукт плавки					
	кern	карбид кремния	аморф	сростки	силоксикон	непрореагировавшая шихта
$\text{Al}_2\text{O}_3$	0,05	2,1	8,3	13,6	0,95	75
$\text{CaO}$	0,05	1,3	7,3	9,5	0,85	81

Расчетно-аналитическими исследованиями с использованием концепции химических транспортных реакций термодинамически обосновано процессы перемещения примесей  $\text{Al}_2\text{O}_3$  и  $\text{CaO}$  в виде летучих химических соединений  $\text{Al}_2\text{O}_g$ ,  $\text{AlO}_g$  и паров металла  $\text{Ca}_g$ , с их дальнейшей конденсацией в холодных зонах печи. Расчитаны коэффициенты распределения примесей и степень их концентрации в продуктах плавки позволили установить периодичность вывода возвратной шихты с технологического цикла производства абразивного карбида кремния.