

УДК 541.135.5

Е.Н. Козырев, В.И. Алехин

**ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ
ОДНОФАЗОВЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПЛЕНОК
ПРИ ПОМОЩИ СИНГУЛЯРНО ВОЗМУЩЕННОГО
ЭЛЕКТРОЛИЗА**

С помощью математического моделирования проведено изучение химической кинетики получения полупроводниковых пленок путем электролиза растворов солей проводников и методов ее управления.

Ключевые слова: математическое моделирование, полупроводниковые пленки, электролиз солей.

В настоящее время широко практикуется получение полупроводниковых пленок путем электролиза растворов солей проводников. В связи с этим весьма актуально изучение химической кинетики данных процессов и методов ее управления.

Процессы электролиза в данном случае происходят в больших диффузионных системах, поведение которых в достаточно общем случае описывается системой кинетических уравнений.

$$\frac{\partial V}{\partial t} + L(t, x, \nabla_x V, \nabla_{xx}^2 V, \dots, V, u) = 0, \quad (1)$$

где $V = (V_1, V_2, \dots, V_k)$ – кинетические переменные, $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ – фазовые переменные, $u = (u_1, u_2, \dots, u_n)$ – параметры управления, $x \in \Omega + \partial\Omega$, $u \in U + \partial U$, ∇_x – градиент по x .

Далее, покажем, как можно поставить задачу оптимального управления производственной системой электролиза солей, например мышьяка и галлия.

Пусть имеем раствор солей данных элементов. Математическую модель, соответствующую данным реакциям можно записать следующим образом.

Если $\varphi_0(x, y, z, t)$ – потенциал электрического поля в ванне при отсутствии внешнего напряжения между анодом и катодом, тогда уравнение, определяющее φ_0 будет иметь следующий вид:

$$\frac{\partial^2 \varphi_0}{\partial t^2} - a^2(x, y, z) \Delta \varphi_0 = - \frac{\varphi_0 \pi F C}{d} \left(e^{\frac{F \varphi_0}{kT}} - e^{-\frac{F \varphi_0}{kT}} \right), \quad (2)$$

где $\varphi_{0_{\text{ФФ}}} = \varphi_{0_{\text{ФВ}}} = \xi$ – значение потенциала, создаваемое ионами на границе электродов, $a = \frac{1}{\sqrt{L\bar{c}}}$.

L – коэффициент самоиндукции, \bar{c} – коэффициент емкости, C – концентрация раствора электролита, F – число Фарадея, k – газовая постоянная, T – абсолютная температура, d – диэлектрическая проницаемость.

Т.к. мы имеем химические реакции первого порядка, а также в наличии диффузию, то кинетические уравнения описывающие изменение концентрации данных процессов будут иметь следующий вид:

$$-\frac{\partial c}{\partial t} + a \operatorname{div} c = kc. \quad (3)$$

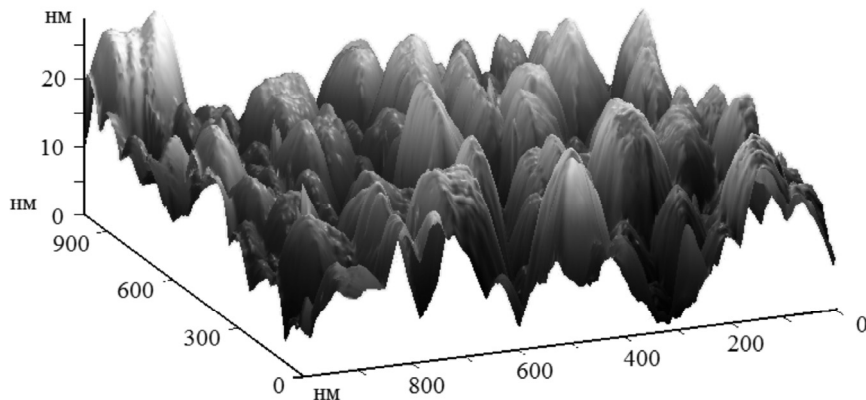


Рис. 1. Морфология поверхности двухслойной пленки Sn/Cu по данным АСМ

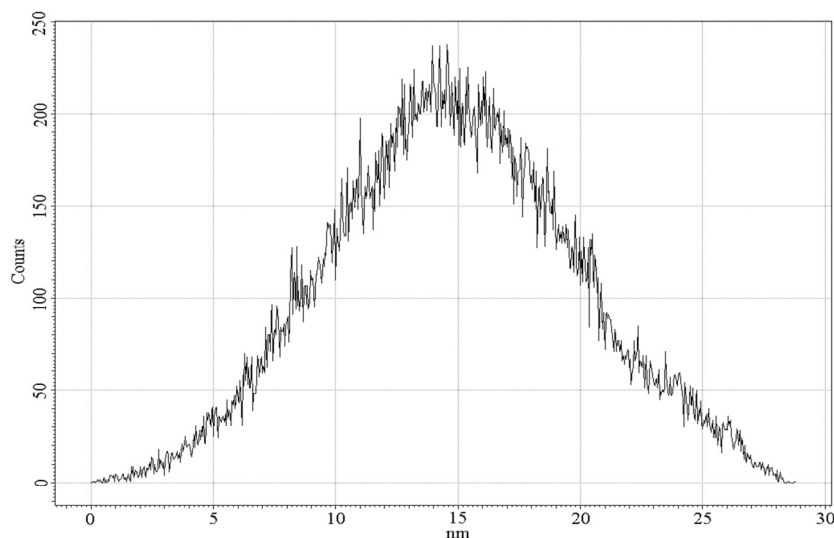


Рис. 2. Гистограмма распределения неровностей поверхности по размерам для двухслойной пленки Sn/Cu

Учитывая уравнения Аррениуса, $\frac{d \ln k}{dT} = \frac{E_a}{kT^2}$ (k – скорость химической реакции, ω – коэффициент диффузии, E_a – энергия активации химического процесса.

$E_a = \frac{pH}{7}$), pH – водородный показатель уравнения (2), (3) примут следующий вид:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 I}{\partial t^2} - a^2 \Delta I = \frac{8\pi E^2 C}{kT} ShI, \\ -\frac{\partial c}{\partial t} + \omega \operatorname{div} c = kc + \lambda, \\ \ln k = -\frac{pH}{7kT}. \end{cases}, \quad (4)$$

Граничные условия $I = \frac{rF}{kT}$,
 $i = \frac{\varphi_0}{r}$, r – сопротивление электролита,

$$I|_{r_a} = I|_{r_b} = \frac{F\xi}{kT}, \quad \frac{\partial I}{\partial n|_{r_b}} = 0, \quad \frac{\partial c}{\partial n|_{r_b}} = 0.$$

$\lambda = \lambda(x, y, z, t)$ – некоторая функция (x, y, z, t) , n – нормаль к поверхности ванны.

Начальные условия:

$$I|_{t=0} = \frac{Fr}{kT} i_0; \quad c|_{t=0} = c_0, \quad \frac{\partial I}{\partial t}|_{t=0} = \frac{Fr}{kT} \frac{\partial i_0}{\partial t}$$

Учитывая (4), получим сингулярно возмущенное уравнение электролиза

$$\begin{cases} \varepsilon^2 \frac{\partial^2 I}{\partial t^2} - \varepsilon^2 a^2 \Delta I = \frac{8\pi E^2 C}{kT} ShI, \\ -\varepsilon \frac{\partial c}{\partial t} + \varepsilon^2 \omega \operatorname{div} c = kc + \lambda, \\ \ln k = -\frac{pH}{7kT}. \end{cases} \quad (5)$$

плюс краевые и начальные условия.

Решая сингулярно возмущенную систему (5) при $\varepsilon \rightarrow 0$ получим пленку морфологией разрыхленности поверхности которой уже мы не можем пренебречь.

В отличие от данного случая морфологией разрыхленности пленки, получаемой при решении уравнений (4) можно пренебречь.

В этом случае уравнения (4) будем говорить, описывают регулярно возмущенный процесс.

В случае же (5) мы будем иметь сингулярно возмущенный процесс электролиза (рис. 1, рис. 2). **ГИАБ**

КОРОТКО ОБ АВТОРАХ

Козырев Евгений Николаевич – доктор технических наук, профессор, зав. каф.

Электронных приборов,

Алехин Вадим Иванович – кандидат технических наук, старший научный сотрудник, доктрант, кафедра теории и автоматизации металлургических процессов и печей,

Северо-Кавказский горно-металлургический институт (Государственный технологический университет).



ДИССЕРТАЦИИ ТЕКУЩАЯ ИНФОРМАЦИЯ О ЗАЩИТАХ ДИССЕРТАЦИЙ ПО ГОРНОМУ ДЕЛУ И СМЕЖНЫМ ВОПРОСАМ

Автор	Название работы	Специальность	Ученая степень
УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ГОРНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ и МАГНИТОГОРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ им. Г.И. НОСОВА			
ШАРИПОВ Ришат Хакимжанович	Изучение влияния скорости подъёма ковша на долговечность рукояти экскаваторов с зубчато-реечным напором (на примере ЭКГ-5А)	05.05.06	к.т.н.