

УДК 533.72; 533.59,  
PACS 51.20.+d, 81.90.+c

## Физико-математическая модель переноса газообразного кремния в ходе высокотемпературного силицирования углеродных композитных материалов

В. А. Демин<sup>1,2\*</sup>, Т. В. Демина<sup>1,3</sup>, Б. С. Марышев<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> Пермский государственный национальный исследовательский университет, Пермь

<sup>2</sup> Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь

<sup>3</sup> Институт механики сплошных сред УрО РАН, Пермь

\* demin@psu.ru

Предлагается новая физико-математическая модель высокотемпературного переноса паров кремния в условиях среднего вакуума от зеркала расплава до поверхности поглощающей пористой среды в атмосфере остаточного газа. Разработанная модель максимально упрощена и предназначена для дальнейшей численной реализации в ходе моделирования нестационарного трехмерного процесса высокотемпературного силицирования пористых углеродных изделий произвольной формы и при условии сложного распределения источников кремния. Физико-математическая модель переноса описывается всего одним нелинейным дифференциальным уравнением в частных производных для концентрации паров кремния в атмосфере аргона или любого другого остаточного газа. В предельном случае простейшей геометрии и одномерной постановки задачи получено стационарное аналитическое решение, объясняющее аномально большой поток паров кремния вглубь пористого материала в натуральных экспериментах. Полученное аналитическое решение для изучаемых газовых смесей выражается через известные верифицированные значения материальных параметров. Оно показывает, что несмотря на низкое значение плотности насыщенных паров кремния парожидкофазный процесс высокотемпературного силицирования углеродных материалов физически возможен за разумное время.

**Ключевые слова:** высокотемпературные процессы; разреженная среда; перенос паров кремния; диффузионный и конвективный транспорт

*Поступила в редакцию 23.06.2022; после рецензии 18.08.2022; принята к опубликованию 23.08.2022*

## Physical and mathematical model of gaseous silicon transfer during high-temperature siliconization of carbon composite materials

V. A. Demin<sup>1,2\*</sup>, T. V. Demina<sup>1,3</sup>, B. S. Maryshev<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> Perm State University, Perm, Russia

<sup>2</sup> Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russia

<sup>3</sup> Institute of Continuous Media Mechanics UB RAS, Perm, Russia

\* demin@psu.ru

We propose a new physical and mathematical model for description of silicon vapor high-temperature transfer under medium vacuum conditions from the melt mirror to the surface of an absorbing porous medium in an atmosphere of residual gas. The developed model is simplified to the greatest extent possible and is intended for further numerical implementation in the course of modeling a non-stationary three-dimensional process of high-temperature siliconization of arbitrary-shaped porous carbon products under the condition of a complex distribution of silicon sources. The physical and mathematical model of transport consists of only one non-linear partial differential equation for the silicon vapor concentration in an atmosphere of argon or any other residual gas. In the limiting case of the simplest geometry and one-dimensional formulation of the problem, we obtained a stationary analytical solution that explains the anomalously large silicon vapor flux into the porous material in full-scale experiments. The obtained analytical solution for the studied gas mixtures is expressed in terms of the known verified values of the material parameters. It shows that despite the low saturation density of silicon vapor, the vapor-liquid-phase process of high-temperature siliconization of carbon materials is physically possible in a reasonable time.

**Keywords:** high temperature processes; rare medium; transfer of silicon vapor; diffusive and convective transport

*Received 23 June 2022; revised 18 August 2022; accepted 23 August 2022*

doi: 10.17072/1994-3598-2022-3-48-55

## 1. Введение

Все известные на сегодняшний день технологии производства высокотемпературных композиционных материалов непрерывно совершенствуются и вследствие усложнения требуют на разных этапах реализации более современных подходов, включая самый первый, – построение новых физико-математических моделей для происходящих процессов [1]. Одной из актуальных проблем в этой области является численное моделирование доставки газообразного кремния от зеркала расплава до поверхности изделия в ходе высокотемпературного силицирования углеродного пористого материала.

Для реальных условий производства этот процесс описывается сложной системой дифференциальных уравнений в частных производных, и для его адекватного описания требуется учет множества осложняющих факторов. В то же время технология является существенно трехмерной и требует сильной детализации расчетной сетки по причине наличия в реторте множества тиглей с расплавом и их сложного расположения в рабочем пространстве печи. В настоящий момент осуществить полноценное 3D-численное моделирование этого процесса не представляется возможным.

В результате существующие модели для описания переноса газообразного кремния в рабочем пространстве промышленной установки в ходе высокотемпературного силицирования ограничиваются простейшими подходами [2]. А именно, вследствие того, что данный процесс осуществляется в условиях среднего вакуума и при чрезвычайно высоких температурах выше точки плавления кремния, считается, что диффузия играет

решающую роль в обеспечении транспорта газообразного кремния от зеркала расплава к изделию.

Иными словами, для описания указанного процесса используется простейшее уравнение диффузии без учета конвективного переноса. Однако использование реальных значений коэффициента диффузии в этом уравнении не позволяет обеспечить наблюдаемое в эксперименте расходование того количества кремния, которое необходимо для полноценного силицирования изделия. В результате складывается парадоксальная ситуация, т.е. факты показывают: в экспериментах изделие при определенных условиях все же может быть насыщено требуемым количеством кремния. Это означает, что все физические условия, необходимые для успешной реализации этого процесса, до сих пор не определены.

## 2. Диффузионный транспорт в газах

Воспользуемся уравнением классической диффузии, которое имеет вид

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right),$$

где  $D$  – коэффициент диффузии,  $C$  – массовая концентрация. Это стандартное дифференциальное уравнение в частных производных второго порядка параболического типа [3]. В стационарном случае ( $\partial/\partial t = 0$ ) задача упрощается и сводится к уравнению Лапласа

$$\Delta C = 0.$$

Не вдаваясь в тонкости промышленной технологии, рассмотрим процесс в виде простейшей модельной постановки, когда поверхности изделия и расплава представляют собой две параллельные плоскости, находящиеся на расстоянии  $L$  друг от друга (рис. 1). Действием силы тяжести в дальнейшем будем пренебрегать.

Пусть на зеркале расплава задается концентрация насыщенных паров кремния  $C(L) = C_s$ , а на левой границе в виду полного поглощения газообразного кремния пористой средой поддерживается условие  $C(0) = 0$ . В одномерной постановке уравнение Лапласа с этими граничными условиями даст единственное нетривиальное решение в виде линейной зависимости, схематично представленное на рис. 1:

$$C(x) = \frac{C_s}{L} x.$$

Пусть характерное расстояние  $L$  между зеркалом расплава и изделием составляет порядка 0.5 м. Давление насыщенного пара для кремния при температурах, не сильно превышающих точку плавления кремния, весьма мало и равно по порядку величины  $p_s = 10$  Па [4,5].

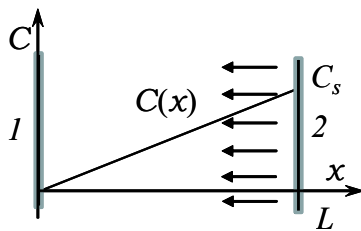


Рис. 1. Геометрия задачи: 1 – изделие, 2 – поверхность расплава;  $C_s$  – концентрация насыщения

Объемная концентрация для кремния в состоянии насыщения вычисляется через давление насыщенных паров с помощью уравнения состояния идеального газа

$$n_s = \frac{p_s}{kT} = \frac{10}{1.38 \cdot 10^{-23} \cdot 1800} = 4.02 \cdot 10^{20} \text{ 1/м}^3.$$

Здесь  $k$  – постоянная Больцмана, а характерная рабочая температура лежит в окрестности  $T = 1800$  К. Сравним предсказываемую теоретически плотность потока кремния со значением, наблюдаемым в эксперименте. В самом деле, по определению плотность потока вещества – это масса, переносимая за единицу времени через единицу площади

$$\vec{j} = \frac{dm}{dSdt} \vec{n} = \frac{dm}{dSdt} \frac{dl}{dl} \vec{n} = \rho \vec{v},$$

где  $\vec{n}$  – единичный вектор, направленный в сторону движения газа. Если перенос кремния определяется только диффузией, то в этом случае плот-

ность потока кремния определяется только законом Фика

$$\vec{j}_k = -\rho D \nabla C = -D \nabla \rho_k.$$

Данная формула предсказывает весьма малое значение плотности потока кремния  $j_k = 2.62 \cdot 10^{-5} \text{ кг/м}^2\text{с}$  (плотность кремния на зеркале расплава составляет  $\rho_k = p_k \mu_k / RT = 1.87 \cdot 10^{-5} \text{ кг/м}^3$ ). По оценкам технологов, занимающихся силицированием углеродных изделий, этого явно недостаточно, чтобы при имеющейся пористости материала за разумное время произвести полную закупорку пор. Более того, на сегодняшний день имеет место ситуация, когда иногда при переходе к новой по форме заготовке или новым условиям нагрева процесс невозможно предсказать, будет ли он успешным. Иными словами, у технологов нет строгой теории, предсказывающей однозначно, насколько удачным будет результат. Но в действительности при выполнении некоторых условий различные по форме изделия все же успешно насыщаются кремнием, и можно считать надежно установленным положение, согласно которому все неудачи в ходе технологического процесса определяются не расстоянием от зеркала расплава до изделия, а совсем другими факторами.

Более общее уравнение переноса примеси с учетом дополнительного конвективного транспорта газа как сплошной среды [6] записывается в виде

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\vec{v} \nabla) C = D \Delta C. \quad (1)$$

Здесь  $\vec{v}$  – макроскопическая скорость физически малого элемента газа. Главной проблемой при использовании уравнения (1) является вопрос о его замыкании. В рамках механики сплошных сред динамика флюида в общем случае определяется уравнением Навье – Стокса [6]. В трехмерном случае это три нелинейных дифференциальных уравнения в частных производных для трех компонент скорости  $v_x$ ,  $v_y$  и  $v_z$ . В эти уравнения входят еще две переменные – давление и плотность, которые тоже подлежат определению. В результате к системе уравнений добавляются еще два: закон сохранения массы в дифференциальной форме и уравнение состояния. Таким образом, итоговая система уравнений становится чрезвычайно громоздкой и трудноразрешимой.

В настоящее время прямое численное моделирование рассматриваемых процессов в полной трехмерной постановке весьма затруднительно даже с помощью высокопроизводительных суперкомпьютеров. Проблема заключается в построении упрощенной формулировки задачи, такой, чтобы, с одной стороны, учесть все физические факторы, важные для адекватного описания рассматриваемых процессов, а с другой стороны – избежать ис-

пользования излишне сложных моделей, чтобы задача считалась за разумное время и не требовала бы излишних вычислительных мощностей.

Следуя подходу, реализованному в [7], рассмотрим в полной постановке уравнение Навье – Стокса и оценим вклад каждого слагаемого. В гидродинамике пористых сред необходимо отличать поровую скорость  $\vec{v}$  и скорость фильтрации  $\vec{v}$ . Скорость фильтрации определяется через общий расход флюида и связана с поровой скоростью соотношением  $\vec{v} = \phi \vec{v}$ . Здесь  $\phi$  – пористость материала. Для поровой скорости в среде имеем исходное уравнение движения [7]

$$\rho_f \left( \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \nabla) \vec{v} \right) = -\nabla p - \frac{\eta}{\kappa} \vec{v},$$

где  $\rho_f$  – плотность прокачиваемого флюида,  $\eta$  – динамическая вязкость,  $\kappa$  – проницаемость. Переходя полностью к скорости фильтрации, получаем

$$\rho_f \left( \phi^{-1} \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \phi^{-2} (\vec{v} \nabla) \vec{v} \right) = -\nabla p - \frac{\eta}{\kappa} \vec{v}. \quad (2)$$

Теперь можно оценить слагаемые в левой и правой частях этого уравнения, содержащие скорость. Наименее тривиальным параметром в данном уравнении является проницаемость  $\kappa$ . В отношении подвижных атомов несущей среды (аргона) можно говорить лишь о модельном характере этого газа как пористого материала с некоторой эффективной проницаемостью. А именно, имеется в виду модель, согласно которой газообразный кремний как некий флюид фильтруется через несущую среду за счет того, что пары кремния рассеиваются на точечных, более тяжелых, но тем не менее подвижных атомах аргона. В виду крайней разреженности несущей среды ожидается, что проницаемость  $\kappa$  будет иметь аномально большое значение.

Пусть среда представляет собой систему из небольших твердых сферических центров, которые омываются гидродинамическим потоком. В двумерной постановке применительно к рассеивающим центрам с цилиндрической симметрией и достаточно плотной упаковкой проницаемость такой среды вычисляется в работе [8]. Это естественно дает для наших параметров существенно заниженную оценку  $\kappa \sim 10^{-6} \text{ м}^2$ , так как в нашем случае рассеивающие центры фактически точечные. Гидродинамическое сопротивление точечных рассеивающих центров зависит от длины свободного пробега

$$l = \frac{kT}{\sqrt{2}\pi d^2 p} = \frac{1.38 \cdot 10^{-23} \cdot 1800}{\sqrt{2}\pi (1.4 \cdot 10^{-10})^2 \cdot 100} = 5.6 \cdot 10^{-3} \text{ м}.$$

Здесь диаметр атома аргона взят  $d = 1.4 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ , парциальное давление аргона равно 100 Па. В итоге

получаем для проницаемости  $\kappa \sim l^2 = 3.1 \cdot 10^{-5} \text{ м}^2$ . Однако эта оценка тоже дает заниженное значение, так как она справедлива в случае плотной упаковки препятствий. Таким образом, для оценки проницаемости воспользуемся известной формулой Козени–Кармана [7, 11]. Эта формула имеет в теории пористых сред широкое применение и выводится из самых общих геометрических соображений. В результате получаем

$$\kappa = \frac{\phi^3 d^2}{(1-\phi)^2} = 2 \cdot 10^{-3} \text{ м}^2,$$

где  $\phi$  – пористость среды (аргона),  $d$  – характерный размер обтекаемого препятствия (в нашем случае это атомы аргона).

Еще один важный параметр – это макроскопическая скорость элемента газа (скорость фильтрации). Будем считать, что при испарении атомы кремния отрываются от поверхности расплава со среднеквадратичной скоростью

$$u = \sqrt{3kT/m_0} \approx 1250 \text{ м/с}.$$

Осредняя по всевозможным направлениям, получаем среднюю проекцию плотности потока на нормаль  $j_k = \rho_k u/2$ . Часть этого импульса необратимо теряется на рассеивающих центрах, поэтому для скорости фильтрации имеем  $\rho_k u/2 = (\rho_k + \rho_a)v$ . Откуда вытекает, что среднемассовая скорость  $v = \rho_k u/2(\rho_k + \rho_a) = 41 \text{ м/с}$  (для парциального давления аргона  $p_a = 100 \text{ Па}$  имеем  $\rho_a = p_a \mu_a / RT = 2.67 \cdot 10^{-4} \text{ кг/м}^3$ ).

Оценим теперь величину каждого слагаемого в уравнении (2), принимая во внимание, что пористость  $\phi$  такой среды близка к единице:

$$\left| \rho_f \phi^{-2} (\vec{v} \nabla) \vec{v} \right| \sim \rho_f \frac{v^2}{L} = 2.86 \cdot 10^{-4} \frac{41^2}{0.5} = 0.96,$$

$$\left| \rho_f \phi^{-1} \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} \right| \rightarrow 0,$$

$$\left| \frac{\eta \vec{v}}{\kappa} \right| = \frac{3.5 \cdot 10^{-4} \cdot 41}{3.1 \cdot 10^{-5}} = 463.$$

Из этих оценок видно, что вязкое слагаемое является доминирующим в этом уравнении. А именно, как инерционное слагаемое, так и слагаемое, отвечающее за нестационарность процессов, пренебрежимо малы по сравнению с вязким членом

$$\left| \frac{\eta \vec{v}}{\kappa} \right| \gg \left| \rho_f \phi^{-2} (\vec{v} \nabla) \vec{v} \right|.$$

В результате из (2) имеем выражение для скорости в виде известного закона Дарси [7]

$$\vec{v} = -\frac{\kappa}{\eta} \nabla p_k. \quad (3)$$

За счет испарения на зеркале расплава и поглощения на изделии имеем некий средний градиент плотности паров кремния. Так как давление идеального газа пропорционально плотности, это порождает градиент давления кремния, который может выступать в роли дополнительной движущей силы помимо диффузии. Парциальное давление кремния согласно уравнению состояния идеального газа равно

$$p_k = n_k kT, \quad (4)$$

где  $n_k = N_k/V$  – число атомов кремния в единице объема. Выразим  $n_k$  через массовую концентрацию  $C$ . По определению под массовой концентрацией будем понимать

$$C = \frac{m_k}{m_a + m_k} = \frac{\rho_k}{\rho_a + \rho_k}.$$

Плотность кремния выражается через относительную массовую концентрацию следующим образом:

$$\rho_k = \frac{C}{1-C} \rho_a. \quad (5)$$

Перепишем уравнение (4) через плотность кремния и подставим туда соотношение (5)

$$p_k = \frac{RT}{\mu_k} \frac{C}{1-C} \rho_a.$$

Далее подставим этот результат в закон Дарси (3), пренебрегая пространственными неоднородностями плотности аргона и температуры. Также учтем, что концентрация кремния в действительности никогда не достигает единицы. Аргон или остаточный воздух присутствуют в реторте всегда, и их концентрация примерно на порядок превышает концентрацию паров кремния. В результате разложим множитель  $C/(1-C)$  в ряд по малым  $C$  и ограничимся в итоговом выражении первым исчезающим членом. Закон Дарси (3) приобретает вид

$$\vec{v} = -\frac{\kappa}{\eta} \nabla p_k = -\frac{\kappa}{\eta} \frac{RT \rho_a}{\mu_k} \nabla C. \quad (6)$$

Тем не менее в уравнение (1) необходимо подставлять среднемассовую скорость

$$\vec{v} = \frac{\rho_a \vec{v}_a + \rho_k \vec{v}_k}{\rho_a + \rho_k} = \frac{\rho_k \vec{v}_k}{\rho_a + \rho_k} \approx \frac{\rho_k \vec{v}_k}{\rho_a}.$$

Подставляя это выражение в обобщенное уравнение переноса примеси (1) с учетом того, что в этом уравнении фигурирует среднемассовая скорость, получаем окончательно уравнение

$$\frac{\partial C}{\partial t} - \frac{\kappa RT \rho_k}{\eta \mu_k} (\nabla C)^2 = D \Delta C. \quad (7)$$

Теперь это более сложное дифференциальное уравнение в частных производных с нелинейностью типа квадрата градиента концентрации. Отметим, что подобные уравнения диффузии с нелинейностями, которые квадратичны градиенту концентрации, довольно часто встречаются в различных областях физики. Так, в работах [9,10] показано, что нелинейное слагаемое данного вида довольно сильно меняет транспортные диффузионные свойства материала, в роли которого выступает кристалл ниобата лития, и позволяет объяснить некоторые наблюдаемые эффекты, связанные с насыщением водородом рассматриваемой среды.

Для стационарных условий уравнение (7) приводится к виду

$$-(\nabla C)^2 = \psi \Delta C, \quad (8)$$

где  $\psi$  – знакоположительный безразмерный параметр, отвечающий за вклад конвективного слагаемого в общий транспорт паров кремния

$$\psi = \frac{\eta \mu_k D}{\kappa RT \rho_k}. \quad (9)$$

Оценим значение нового введенного параметра. Возьмем величину динамической вязкости и коэффициента диффузии из работы [11]. В этой работе данные параметры оценивались применительно к рассматриваемому процессу силицирования исходя из известных формул молекулярно-кинетической теории [12]:

$$D = \frac{3}{8} \frac{kT}{\sigma_{12} p} \sqrt{\frac{\pi kT}{2 \mu_{12}}} = \frac{3}{8} \frac{(kT)^{3/2}}{d_{Si}^2 p \sqrt{\pi m_0}},$$

$$\eta = \frac{1}{3} \left( \frac{2}{\pi} \right)^{3/2} \frac{(m_0 kT)^{1/2}}{d_{Ar}^2}.$$

Здесь  $\sigma_{12}$  – эффективное сечение рассеяния для двух частиц,  $\mu_{12}$  – приведенная масса. Для двух примерно одинаковых по массе и размерам частиц имеем  $\sigma_{12} = \pi d^2$ ,  $\mu_{12} = m_0$ . Масса одного атома кремния равна  $m_0 = \mu_k / N_A = 0.028$  кг/Моль /  $6.02 \cdot 10^{23}$  1/Моль =  $4.7 \cdot 10^{-26}$  кг. Из табличных данных возьмем диаметр атома кремния  $d_{Si} = 0.23 \cdot 10^{-9}$  м. В результате получаем  $D = 0.7$  м<sup>2</sup>/с,  $\eta = 3.5 \cdot 10^{-4}$  м<sup>2</sup>/с. Таким образом, оценка параметра  $\psi$  дает

$$\psi = \frac{3.5 \cdot 10^{-4} \cdot 28 \cdot 10^{-3} \cdot 0.7}{2 \cdot 10^{-3} \cdot 8.31 \cdot 1800 \cdot 1.87 \cdot 10^{-5}} = 0.012.$$

Заметим, что этот комплекс представляет собой изначально безразмерный параметр в задаче и характеризует соотношение между диффузионным и конвективным переносом.

### 3. Аналитическое решение

В одномерной постановке уравнение (8) имеет точное решение. А именно, сформулируем крае-

вую задачу в виде обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка и двух граничных условий:

$$-\left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)^2 = \psi \frac{\partial^2 C}{\partial x^2};$$

$$C(0) = 0, C(L) = C_s.$$

Сделаем в этом уравнении замену переменных

$$u = \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right) = C', \quad (10)$$

тогда порядок уравнения понижается, и оно приводится к виду

$$-(u)^2 = \psi u'.$$

Теперь переменные разделяются и как слева, так и справа получаем табличные интегралы:

$$-\int dx = \psi \int \frac{du}{u^2}.$$

Результатом элементарного интегрирования [13] является функциональная зависимость

$$u = \frac{\psi}{x - A\psi}.$$

Здесь  $A$  – неизвестная константа интегрирования. Возвращаясь к старой переменной (10), а именно, подлежащей определению функции  $C(x)$ , получаем после интегрирования логарифмическое решение вида

$$C = \psi \ln\left(\frac{x - A\psi}{B}\right).$$

Из упоминавшихся ранее граничных условий находим константы интегрирования  $A$  и  $B$

$$A = -\frac{B}{\psi}, \quad B = \frac{L}{\exp(C_s/\psi) - 1}.$$

В результате получаем зависимость

$$C(x) = \psi \ln\left(\frac{x}{L} (\exp(C_s/\psi) - 1) + 1\right), \quad (11)$$

где  $C_s$  – концентрация насыщенного пара. Вычислим производную от этого решения на левой границе

$$\left.\frac{\partial C}{\partial x}\right|_{x=0} = \frac{\psi (\exp(C_s/\psi) - 1)}{L}.$$

Это значение производной дает на поверхности изделия плотность потока паров кремния на порядок выше, чем в случае чисто диффузионного переноса  $j_k \sim 10^{-4}$  кг/м<sup>2</sup>с.

#### 4. Обсуждение результатов

Как видно из формулы (11), сейчас решение представляет собой выпуклую функцию. Графиче-

ски эта функциональная зависимость представлена на рис. 2.

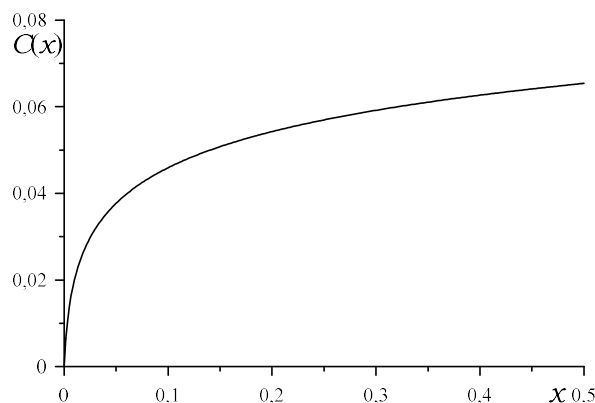


Рис. 2. Табуляция формулы (11) на основе решения нелинейного уравнения диффузии

Наибольшая производная имеет место как раз на левой границе расчетной области, т.е. на поверхности изделия. Отметим, что плотность потока пропорциональна величине производной в этой точке. Таким образом, учет независимого конвективного переноса паров кремния в дополнение к диффузионному транспорту позволяет объяснить наблюдаемую в экспериментах достаточно большую скорость высокотемпературного насыщения углеродного материала в условиях среднего вакуума.

#### 5. Заключение

Полученное в ходе данного исследования аналитическое решение обобщенного уравнения диффузии паров кремния при силицировании пористого углеродного материала показывает, что газообразный кремний занимает практически весь объем рабочего пространства печи. Иными словами, нет необходимости максимально близко приближать тигли с расплавом кремния к поверхности изделия, как это предполагалось долгое время по результатам предшествующих теоретических работ. Полученные результаты показывают, что сопротивление сторонних газов диффузионному потоку кремния, конечно, должно присутствовать в реальном технологическом процессе, но классическая диффузия является не единственным механизмом переноса. Обобщение модели с учетом дополнительного конвективного переноса позволило разрешить парадокс, согласно которому в эксперименте наблюдается аномально интенсивное насыщение пористого углеродного материала парами кремния в противовес более ранним теоретическим предсказаниям.

#### 6. Благодарности

Авторы благодарят В. М. Бушуева (г. Пермь) за постановку проблемы и полезные дискуссии по ак-

туальным вопросам совершенствования технологии производства современных углеродных композиционных материалов, а также К. А. Финикова (г. Красноярск) – за критические замечания в адрес работы, которые позволили выявить и устранить ее некоторые недочеты.

### Список литературы

1. Демин В. А., Марышев Б. С., Меньшиков А. И. Численное моделирование процесса высокотемпературного силицирования углерод-углеродного пористого материала // Вестник Пермского университета. Физика. 2021. № 3. С. 56–62. DOI: 10.17072/1994-3598-2021-3-56-62
2. Кулик В. И., Кулик А. В., Рамм М. С., Демин С. Е. Численное исследование градиентных газофазных процессов получения керамоматричных композитов с SiC матрицей // Функциональные наноматериалы и высококачественные вещества: сб. матер. V межд. конф., М.: ИМЕТ РАН, 2014. С. 128–129.
3. Демин В. А., Марышев Б. С. Методы математической физики: учеб.-метод. пособие. Пермь: изд-во ПГНИУ, 2021. 110 с.
4. Стэлл Д. Р. Таблицы давления паров индивидуальных веществ. М.: Изд-во Иностран. лит-ры, 1949. 71 с.
5. Tomooka T., Shoji Y., Matsui T. High temperature vapor pressure of Si // J. Mass Spectrom. Soc. Jpn. 1999. Vol. 47 (1), N. 49. P. 49–53.
6. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Курс теоретической физики. Т. 6. Гидродинамика. М.: Физматлит, 2001. 736 с.
7. Nield D. A., Bejan A. Convection in porous media. New York: Springer. 2006. 654 p.
8. Maryshev B. S., Zaks M. A. Modelling of transportation process in plane flows with stagnation points // Transport in Porous Media. 2020. Vol. 135. P. 1–24. DOI: 10.1007/s11242-020-01465-2.
9. Демин В. А., Петухов М. И., Пономарев Р. С., Топова А. В. О роли анизотропии и нелинейных диффузионных эффектов при формировании волноводов в кристалле ниобата лития // Вестник Пермского университета. Физика. 2021. № 1. С. 49–58. doi: 10.17072/1994-3598-2021-1-49-58.
10. Vohra S. T., Mickelson A. R., Asher S. E. Diffusion characteristics and waveguiding properties of proton exchanged and annealed LiNbO<sub>3</sub> channel waveguides // J. Appl. Phys. 1989. Vol. 66. N. 11. P. 5161–5174. DOI: 10.1063/1.343751.
11. Меньшиков А. И. Теоретические модели конденсационных и адсорбционных процессов при пропитке пористых материалов: дис. на соиск. учен. степ. канд. физ.-мат. наук. Пермь: Изд-во ПГНИУ, 2022. 135 с.

12. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: Изд-во Иностран. лит-ры, 1961. 929 с.
13. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. М.: Наука, 1984. 831 с.

### References

1. Demin V. A., Maryshev B. S., Menshikov A. I. Numerical modelling of a high temperature silicification process in the carbon-carbon porous medium. *Bulletin of Perm University. Physics*, 2021, no. 3, pp. 56–62. DOI: 10.17072/1994-3598-2021-3-56-62 (In Russian).
2. Kulik A. V., Kulik V. I., Ramm M. S., Demin S. E. Numerical study of gradient CVI processes for production of SiC-matrix composites. *Proc. of the V<sup>th</sup> Int. Conf. "Functional nanomaterials and high-purity substances"*. Moscow: Inst. of Metallurgy and Materials Science, 2014, pp. 128–129 (In Russian).
3. Demin V. A., Maryshev B. S. *Metody matematicheskoy fiziki* [Methods of Mathematical Physics]: tutorial. Perm: Perm University Press, 2021. 110 p. (In Russian).
4. Stull D.R. Vapor pressure of pure substances. *Ind. & Eng. Chem*, 1947, vol. 39, no. 4, pp. 517–550.
5. Tomooka T., Shoji Y., Matsui T. High temperature vapor pressure of Si. *J. Mass Spectrom. Soc. Jpn.*, 1999, vol. 47 (1), no. 49, pp. 49–53.
6. Landau L. D., Lifshitz E. M. *Course of Theoretical Physics, vol. 6. Fluid Mechanics*. Oxford: Butterworth-Heinemann, 1987. 554 p.
7. Nield D. A., Bejan A. *Convection in Porous Media*. New York: Springer. 2006. 654 p.
8. Maryshev B. S., Zaks M. A. Modelling of transportation process in plane flows with stagnation points. *Transport in Porous Media*, 2020, vol. 135, pp. 1–24. DOI: 10.1007/s11242-020-01465-2.
9. Demin V. A., Petukhov M. I., Ponomarev R. S., Topova A. V. Nonlinear sorptive effects during the pumping of nanofluid through porous medium. *Bulletin of Perm University. Physics*, 2021, no. 1, pp. 49–58. DOI: 10.17072/1994-3598-2021-1-49-58 (In Russian).
10. Vohra S. T., Mickelson A. R., Asher S. E. Diffusion characteristics and waveguiding properties of proton exchanged and annealed LiNbO<sub>3</sub> channel waveguides. *J. Applied Physics*, 1989, vol. 66, no. 11, pp. 5161–5174. DOI: 10.1063/1.343751.
11. Menshikov A. I. *Teoreticheskie modeli kondensatsionnykh i adsorbtsionnykh protsessov pri propitke poristykh materialov* [Theoretical modeling of the processes of condensation and adsorption during the saturation of porous materials]. Cand. phys. and math. sci. thesis. Perm: Perm University Press, 2022. 135 p. (In Russian).

12. Hirschfelder J. O., Curtiss Ch. F., Bird R. B. *Molecular theory of gases and liquids*. NY: Wiley, 1954. 1219 p.
13. Korn G. A., Korn T. M. *Mathematical handbook for scientists and engineers*. NY: McGraw-Hill, 1968. 1130 p.

**Просьба ссылаться на эту статью в русскоязычных источниках следующим образом:**

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. doi: 10.17072/1994-3598-2022-3-48-55

**Please cite this article in English as:**

Demin V. A., Demina T. V., Maryshev B. S. Physical and mathematical model of gaseous silicon transfer during high-temperature siliconization of carbon composite materials. *Bulletin of Perm University. Physics*, 2022, no. 3, pp. 48–55. doi: 10.17072/1994-3598-2022-3-48-55

**Сведения об авторах**

1. *Виталий Анатольевич Демин*, д-р. физ.-мат. наук, доцент, заведующий кафедрой теоретической физики, Пермский государственный национальный исследовательский университет, ул. Букирева, 15, Пермь, 614990; профессор, Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Комсомольский пр-т., 29, Пермь, 614990.
2. *Татьяна Витальевна Демина*, магистрант, Пермский государственный национальный исследовательский университет, ул. Букирева, 15, Пермь, 614990; инженер-исследователь, Институт механики сплошных сред УрО РАН, ул. Академика Королева, 1, Пермь, 614013.
3. *Борис Сергеевич Марышев*, канд. физ.-мат. наук, н.с., Институт механики сплошных сред УрО РАН, ул. Академика Королева, 1, Пермь, 614013; доцент кафедры теоретической физики, Пермский государственный национальный исследовательский университет, ул. Букирева, 15, Пермь, 614990.

**Author information**

1. *Vitaly A. Demin*, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Head of the Department of Theoretical Physics, Perm State University; 15, Bukireva st., Perm, 614990, Russia; Professor, Perm National Research Polytechnic University; 29, Komsomolsky prospekt, Perm, 614990, Russia.
2. *Tatyana V. Demina*, Master's Student, Perm State University; 15, Bukireva st., Perm, 614990, Russia; Research Engineer, Institute of Continuous Media Mechanics UB RAS; 1, Akademika Koroleva st., Perm, 614013, Russia
3. *Boris S. Maryshev*, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Researcher, Institute of Continuous Media Mechanics UB RAS; 1, Akademika Koroleva st., Perm, 614013, Russia; Associate Professor, Department of Theoretical Physics, Perm State University; 15, Bukireva st., Perm, 614990, Russia