

محاسبه عددی نرخ انتشار گاز آلاینده CO در فرآیند سنتز SiC

سیمین تقی زاده^{۱*} ، بهادر ابول پور^۲ و حانیه عباسلو^۳

*۱- دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشکده محیط زیست ، دانشگاه صنعتی سیرجان

۲- استادیار، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی سیرجان

۳- استادیار، دانشکده عمران، دانشگاه صنعتی سیرجان

ایمیل نویسنده مسئول: Taghizadehsimin73@gmail.com

تاریخ دریافت: ۱۳۹۹/۱۱/۰۲ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۹/۱۲/۱۱

چکیده

SiC ماده‌ای مقاوم و مناسب است. امروزه با افزایش تقاضا تولید این ماده افزایش پیدا کرده است و در پی آن حجم عظیمی از گاز CO تولید می‌شود. روش مرسوم و متداول برای تولید باصرفه و اقتصادی SiC ، استفاده از روش آچسون است که سبب ورود مواد آلاینده به محیط زیست می‌شود. قبل از ارائه هرگونه راهکار جهت کاهش میزان آلودگی لازم است مقدار آلودگی و نرخ انتشار را اندازه‌گیری کرد. روش‌های فراوانی جهت ارزیابی نرخ انتشار گازها وجود دارد. در این پژوهش برای اولین بار از نرم‌افزار متلب جهت محاسبه نرخ انتشار گاز CO در طی فرآیند تولید SiC با روش راکتور آچسون پرداخته شده است. ابتدا به بررسی خواص بستر و تغییرات دما پرداخته و سپس روند فرآیند تولید SiC و CO به تصویر کشیده شده است. بررسی‌ها نشان می‌دهد که لازم است دمای بستر در اثر ایجاد مقاومت الکتریکی در هسته گرافیتی به مقدار مطلوب برای شروع واکنش برسد، با شروع واکنش تولید SiC، تخلخل بستر به علت مصرف کربن افزایش می‌یابد و همزمان گاز CO تولید می‌شود. با پیشرفت واکنش میزان این گاز، داخل راکتور افزایش می‌یابد و جریانی به سمت دریچه خروجی ایجاد شده و سبب کاهش گاز CO در داخل راکتور می‌شود.

کلمات کلیدی

"سیلیکون کاربید" ، "مدلسازی عددی" ، "گاز کربن مونواکسید" ، "راکتور آچسون" ، "نرخ پخش"

Numerical calculation of Pollutant gas CO diffusion rate in SiC synthesis process

Simin Taghizadeh^{1,*}, Bahador Abolpour², Haniyeh Abbaslou³

^{1*} Master Student of Environmental Engineering, Department of Environment, University of Technology, Sirjan, Iran

² Assistant Professor, Faculty of Chemical Engineering, University of Technology, Sirjan, Iran

³ Assistant Professor, Faculty of Civil Engineering, University of Technology, Sirjan, Iran

*Email Address: Taghizadehsimin73@gmail.com

Abstract

SiC is a durable and suitable material. Today, with the increase in demand, the production of this material has increased, and as a result, a huge volume of CO gas is produced. A common method for cost-effective and economical production of SiC is the Acheson method, which causes pollutants to enter the environment and thus increase air pollution. There are many methods for estimating gas diffusion rates. In this research, for the first time, MATLAB software has been used to calculate the CO gas diffusion rate during the SiC production process using the Acheson reactor method. First, the properties of the substrate and temperature changes are studied and then the process of SiC and CO production process is depicted. Studies show that the bed temperature needs to reach the desired value to start the reaction due to electrical resistance in the graphite core. With the start of the SiC production reaction, the bed porosity increases due to carbon consumption and CO gas is produced at the same time. As the reaction progresses, the amount of this gas inside the reactor increases and a current is generated towards the outlet valve, reducing the CO gas inside the reactor.

Keywords

"SiC", "Numerical calculation", "CO gas", "Acheson method", "Diffusion rate"

۱- مقدمه

کرد و به شبیه سازی سیستم پرداخت. یکی از روش هایی که در سال های اخیر برای حل معادلات مربوط به پدیده انتقال شهرت پیدا کرده، روش های عددی است. از جمله مزایای این روش نسبت به روش های تجربی می توان به کاهش زمان و هزینه طراحی، حصول اطلاعات و جزئیات دقیق، توانایی مطالعه و شبیه سازی مسائلی که انجام آزمایش بر روی آن ها دشوار و غیر ممکن است، اشاره کرد. تکنیک های مدل سازی و شبیه سازی را می توان در تمام جنبه های مشکل آلودگی هوا به کار برد. به عنوان مثال، (۱) برای ارزیابی نرخ انتشار، (۲) برای توصیف فرم های رخ داده در جو و (۳) برای تعیین کمیت اثرات جانبی آلاینده (محاسبه خسارت) در یک منطقه خاص. بازنمایی صحیح این پدیده ها و تعامل های چندرسانه ای آن ها (هوا-آب و زمین) به مجموعه معادلات مختلفی نیاز دارد [۲۲]. در این پژوهش به مطالعه ای انتقال جرم گاز، طی فرآیند آچسون، در مخزن استوانه ای ثابت در حین سنتز SiC، به روش هسته زایی از بستری متشکل از ۳ نوع ماده پرداخته شد. بدین منظور نرخ پخش و پراکنش گاز آلاینده CO در فرآیند تولید SiC، مدل سازی و اثر خصوصیتی از قبیل تخلخل، ظرفیت حرارتی، هدایت حرارتی، دما و دانسیته بر پخش و پراکنش گاز CO بررسی گردید. اطلاعات مورد نیاز جهت شبیه سازی از مرجع [۲۳] استخراج شد.

۲- روش انجام تحقیق

• مدلسازی ریاضی

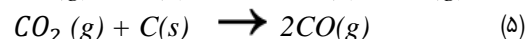
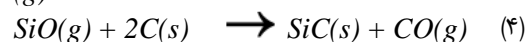
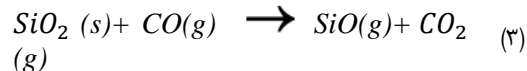
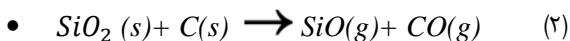
در این بخش به معرفی معادلات حاکم بر مسئله (معادلات ناپایای دو بعدی مربوط به انتقال جرم در سیستم مورد نظر) که توسط نرم افزار MATLAB، در دامنه هندسه رآکتور مورد نظر (تحت شرایط مرزی مناسب و مقتضی) جهت انتقال و انتشار گاز در حالت ناپایا استفاده می شود، می پردازیم.

• هندسه رآکتور

در فرآیند آچسون از یک کوره که شبیه تقاری با کف ثابت و فریم های آهنی جانبی که قابل جابجایی هستند استفاده می شود [۱۴، ۲۳]. در مرکز یک المنت گرافیتی به شعاع ۰/۰۸۴ متر و طول برابر با طول داخلی رآکتور قرار دارد و اطراف المنت از مواد بستر پر شده و بعد از آن لایه آجر نسوز (عایق) با ضخامت ۰/۱ متر اطراف بستر را پوشانده است و در آخر بدنه رآکتور که از جنس استیل است، قرار دارد. بستر رآکتور متشکل از SiO₂، C و SiC می باشد که به ترتیب ماسه، کک و سیلیکون کاربید نامیده می شوند. شعاع داخلی رآکتور ۱/۶ متر (تا قبل از آجر نسوز) و طول داخلی رآکتور ۹/۱۶ متر است، [۲۳].

در این فرآیند، کوره بر اساس مقاومت الکتریکی تولید حرارت می کند [۲۴]. طول و توان کوره در میزان و کیفیت تولید اهمیت فراوانی دارد [۱۴]. یک المنت گرافیتی (بصورت قلم یا پودر گرافیت) با مقاومت الکتریکی بالا، بصورت یک هسته استوانه ای در مرکز قرار می گیرد که با عبور دادن جریان الکتریکی سبب انجام واکنش و تولید SiC می شود. دمای این هسته در حدود ۲۰۰۰ درجه سانتی گراد تا ۲۷۰۰ درجه سانتی گراد (بسته به محتوای بستر و نوع عایق و غیره) در نظر گرفته می شود [۱۵]. توان ورودی تقریباً ۶-۱۲ کیلووات ساعت بر کیلوگرم سیلیکون کاربید است [۱۵]. قسمت جزئی از سطح جانبی رآکتور در بالا

سیلیکون کاربید^۱، با فرمول شیمیایی SiC، یکی از مواد دیرگداز است که از ویژگی های برجسته این ماده می توان به سختی بالا [۱] و ثابت فیزیکی در دماهای بالا [۲]، هدایت گرمای عالی و ضریب هدایت حرارت بالا، مقاومت بالا در برابر خوردگی و اکسیداسیون [۳]، نیمه هادی [۴]، خواص الکتریکی مطلوب، استحکام شکست بالا، نقطه ذوب بالا [۱]، مدول الاستیسیته خوب [۵، ۶] و مقاومت در برابر سایش [۷] اشاره کرد. سیلیکون کاربید به صورت خام در طبیعت یافت نمی شود [۸] بلکه به صورت مصنوعی ساخته و سنتز می گردد. این ماده ابتدا در سال ۱۸۹۳ توسط هنری مویسان در حین بررسی شهاب سنگ های یافت شده در آریزونا کشف شد. بعدها ادوارد گودریچ آچسون در سال ۱۸۹۲ این ماده را به طور مصنوعی برای استفاده به عنوان ساینده سنتز کرد که به روش آچسون معروف شد. این فرآیند به معنی احیاء سیلیکا توسط کربن در دمای بالا است [۴]. در نتیجه سنتز SiC توسط کوره آچسون گاز آلاینده مونواکسید کربن نیز تولید می شود. در سال های اخیر پژوهش های زیادی بر روی تولید این ترکیب با استفاده از روش های دیگر صورت گرفته است که از جمله ای آن ها می توان به سل-ژل^۲ [۹، ۱۰]، حرارت دهی مایکروویوی^۳ [۱۱]، پلاسما^۴ حرارتی [۱۲]، سنتز احتراقی^۵ [۱۳] و رآکتور آچسون^۶ [۱۴] اشاره کرد. تشکیل SiC فرآیندی بسیار پیچیده است که شامل بسیاری از پدیده های شیمیایی، فیزیکی و واکنش های غیر کاتالیستی احتمالی از جمله تبلور مجدد، تجزیه، تبخیر و میعان می شود [۱۵]. واکنش های شیمیایی مختلفی در هنگام تشکیل سیلیکون کاربید رخ می دهد [۱۶]. موارد زیر مهم ترین واکنش ها تحت نظریه تک مرحله ای و چند مرحله ای هستند [۱۷]:



نظریه تک مرحله ای که به صورت واکنش (۱) است، در آن دی اکسید سیلیکون در سطح کربن جامد، واکنش داده و تشکیل هسته SiC می دهد؛ اما در نظریه چند مرحله ای (واکنش های ۲ تا ۵) ابتدا دی اکسید سیلیکون جامد به گاز تبدیل می شود و سپس SiO تولید شده در سطح کربن جامد واکنش داده و تولید SiC می کند. در نتیجه این واکنش ها گاز مونواکسید کربن تولید می شود. مونواکسید کربن (CO) یا اکسید کربن، یک گاز بی رنگ، بی بو و بی مزه است که برای انسانها بسیار خطرناک است [۲۰-۱۸]. حضور CO در اتمسفر زمین، شیمی جو زمین و همچنین محیط را تحت تأثیر قرار می دهد [۲۱]، مشکلات جدی تنفسی ایجاد کرده و باعث گرم شدن سطح کره زمین می شود. مدل سازی ریاضی یکی از روش های متداول جهت بررسی و مطالعه تأثیر پارامترهای مختلف سیستم و اثر متقابل آن ها بر یکدیگر است. جهت مدل سازی ریاضی لازم است معادلات ریاضی حاکم بر سیستم را به دست آورده و از حل معادلات حاکم با استفاده از شرایط مرزی و اولیه می توان تأثیر متغیرها را مشاهده

4 Thermal plasma
5 Combustion synthesis
6 Acheson reactor

1 Silicon Carbide
2 Sol-gel
3 Microwave heating

$$\rho = \frac{m}{v} \quad (7)$$

که در آن m جرم و v حجم ماده است. اندازه ذرات در طول واکنش ثابت در نظر گرفته شده است و شکل آن‌ها کروی فرض می‌شود. ****مولکول SiC به تنهایی نامتخلخل هست اما زمانی که در کنار یکدیگر قرار می‌گیرند به علت رشد کریستالی که دارند متخلخل فرض می‌شوند.** ****به علت استفاده از روش سعی و خطا نیازمند یک دمای اولیه هستیم.**

• **قانون دوم فیک و شرایط اولیه و مرزی حاکم بر آن**

سرعت نفوذ جرمی یک گونه شیمیایی در ماده‌ای راکد و در یک جهت مشخص، با گرادیان غلظت محلی در همان جهت متناسب است. این رابطه خطی بین سرعت نفوذ و گرادیان غلظت با گذشت زمان تحت عنوان قانون دوم فیک معرفی می‌شود [۲۵].
قانون دوم فیک، انتقال جرم از طریق مکانیزم نفوذ داخل جامدات را به صورت زیر بیان می‌کند:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = \left\{ D_r \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C_A}{\partial r} \right) + D_\theta \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial C_A}{\partial \theta} \right) + D_z \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial C_A}{\partial z} \right) \right\} \quad (8)$$

که در آن $\frac{\partial C_A}{\partial t}$ بیانگر تغییرات غلظت نسبت به زمان، $\frac{\partial C_A}{\partial \theta}$ و $\frac{\partial C_A}{\partial z}$ به ترتیب تغییرات غلظت در جهت شعاع، زاویه و ارتفاع و D_r ، D_θ و D_z ضریب نفوذ مؤثر بستر در راستای شعاع، زاویه و ارتفاع هستند. همان‌گونه که مشخص است برای حل این معادله دیفرانسیل لازم است ابتدا بخش‌های مختلف معادله قانون دوم فیک گسسته شوند؛ و سپس نیازمند داشتن ۱ شرط اولیه و ۴ شرط مرزی هستیم. جهت شرط اولیه می‌توان فرض نمود در لحظه شروع فرآیند سنتز، غلظت گاز در مخلوط راکتور در تمام نقاط باهم برابر و مساوی صفر بوده است، یعنی:

$$C_{initial-co} = 0 \text{ at } t=0 \text{ for all } r \text{ and } \theta \quad (9)$$

شرایط مرزی نیز به ترتیب در ادامه آورده شده‌اند:

$$\text{if } r = 0 \quad (10)$$

$$C(r, \theta, t) = C(r + 1, \theta, t)$$

$$\text{if } r = r_{max}$$

$$\begin{cases} \text{if } \theta < 5 & C(r, \theta, t) = 0 \\ \text{if } \theta > 5 & C(r, \theta, t) = C(r - 1, \theta, t) \end{cases} \quad (11)$$

$\frac{\partial C_A}{\partial \theta}$ در حالت $\theta < 5$ به علت جابجایی سریع توسط هوا صفر شده است.

$$\text{if } \theta = 0 \quad (12)$$

$$C(r, \theta + 1, t) = C(r, \theta - 1, t)$$

جهت خروج گاز تولیدی درون راکتور باز می‌ماند. خاکاره درشت نیز جهت کاهش دادن خطر انفجار گاز مونواکسید کربن تولیدشده، در محل شیر خروجی به مخلوط اضافه می‌شود. با توجه به بالاتر بودن نقطه ذوب SiO_2 (۱۷۲۷ درجه سانتی‌گراد) از دمای معمول این فرآیند (حدود ۱۵۲۷ درجه سانتی‌گراد) احتمال رخ دادن واکنش مستقیم و یک‌طرفه میان آن با پودر جامد کربن وجود ندارد [۱۴]. خلاصه‌ای از شرح خصوصیات راکتور در جدول ۱ آمده است. این خصوصیات که در امر مدل‌سازی و شبیه‌سازی موردنیاز است، از مقاله [۲۳] استخراج شده است. جدول ۱: خصوصیات راکتور مورد استفاده در فرآیند آچسون، برگرفته از [۲۳]

واحد	مقدار	پارامتر
m	۱/۶۳	شعاع داخلی راکتور
m	۹/۱۶	طول راکتور
m	۰/۰۱	ضخامت استیل بدنه
m	۰/۱	ضخامت آجر نسوز عایق
m	۰/۰۰۶	شعاع ماسه
m	۰/۰۰۹	شعاع کک
m	۰/۰۰۵	شعاع سیلیکون کاربید اولیه
$\frac{\text{Kg}}{\text{Kmol}}$	۴۴/۰۸	جرم مولکولی ماسه
$\frac{\text{Kg}}{\text{Kmol}}$	۲۸/۰۱	جرم مولکولی کک
$\frac{\text{Kg}}{\text{Kmol}}$	۴۰/۰۷	جرم مولکولی سیلیکون کاربید
$\frac{\text{Kg}}{\text{m}^3}$	۲۰۹۸/۷	دانسیته ماسه
$\frac{\text{Kg}}{\text{m}^3}$	۱۶۰۰	دانسیته کک
$\frac{\text{Kg}}{\text{m}^3}$	۳۱۹۰	دانسیته سیلیکون کاربید
Kg	۵۸۱۶۰	جرم اولیه ماسه
Kg	۳۶۸۴۰	جرم اولیه کک
Kg		جرم اولیه سیلیکون کاربید*
	۲۱	درصد وزنی سیلیکون کاربید
	۰	تخلخل سیلیکون کاربید**
pa	۱۰۱۳۲	فشار کلی همه اجزا
K	۲۹۸	دمای اولیه بستر***
hr	۴۰	زمان کل انجام واکنش

* جرم اولیه سیلیسیوم کاربید از روابط زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} m_{sic} &= W_{sic}(m_{sic} + m_{SiO_2} + m_c) \\ W_{sic} &= \frac{m_{sic}}{m_{sic} + m_{SiO_2} + m_c} \\ m_{sic} &= \frac{m_{sic}(m_{SiO_2} + m_c)}{1 - W_{sic}} \quad (6) \end{aligned}$$

همچنین دانسیته ذرات نیز از رابطه زیر محاسبه شده است:

طوری تعیین شوند که شرط پایداری را برقرار کنند. انتخاب نامناسب این دو پارامتر، می تواند حل عددی را ناپایدار کند و در نهایت حل عددی واگرا شود. روش تفاضلات محدود برای مشتق نسبت به مکان به ۳ روش پیشرو، پسر و مرکزی انجام می شود و برای مشتق نسبت به زمان روش ضمنی^۲ یا روش صریح^۳ مورد استفاده قرار می گیرد. جهت محاسبه مشتق جزئی و گسسته سازی $\frac{\partial C_A}{\partial t}$ از روش صریح و برای گسسته سازی $\frac{\partial^2 C_A}{\partial r^2}$ و $\frac{\partial^2 C_A}{\partial \theta^2}$ از روش مرکزی استفاده شد. لازم به ذکر است، چون طول رآکتور بسیار بزرگتر از شعاع داخلی رآکتور باشد، می توان از توزیع دما در جهت طول رآکتور در مقایسه با توزیع آن در جهت شعاع رآکتور صرف نظر کرد.

• **روند حل عددی مساله**

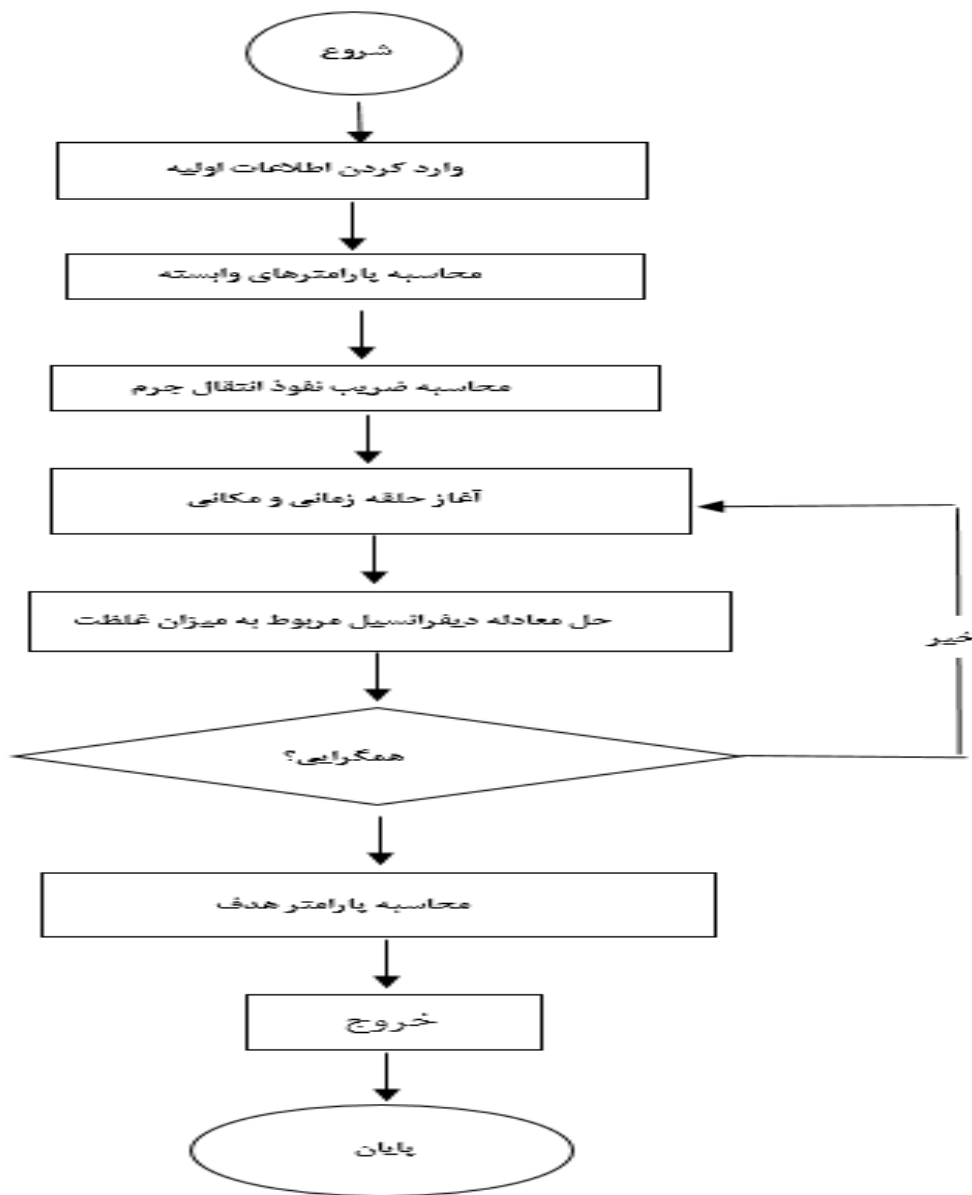
روند حل عددی در فلوچارت شکل نشان داده شده است.

$$if \theta = 180^\circ$$

$$C(r, \theta + 1, t) = C(r, \theta - 1, t)$$

(۱۳)

لازم بذکر است که شرایط مرزی ذکر شده به علت قرینه بودن هندسه رآکتور برای نیمی از آن در نظر گرفته شده است. بعد از نوشتن این روابط و قانون بقا، در نهایت مجموعه ای از معادلات دیفرانسیل با مشتقات جزئی ایجاد می شوند و این معادلات با استفاده از روش های عددی مختلفی مانند روش تفاضل محدود و روش حجم محدود قابل حل هستند. ابتدا بخش های مختلف معادله قانون دوم فیک گسسته می شوند. برای گسسته سازی از روش های تفاضل محدود (FDM) استفاده و کلیه خواص بستر که متغیر با دما هستند درون این حلقه در نظر گرفته می شوند و سپس از دستور Solve جهت گسسته سازی نهایی استفاده می شود. همچنین گام زمانی و اندازه شبکه مناسب موجود در حل، باید



شکل ۲- فلوچارت روند مورد نظر جهت حل عددی

$$\rho_{eff} = (1 - \varepsilon)[W_{C_i} - X_C W_{C_i}] \rho_C + (W_{SiO_2_i} - X W_{SiO_2_i}) \rho_{SiO_2} + (W_{SiC_i} - X W_{SiO_2_i} \frac{M_{SiC}}{M_{SiO_2}}) \rho_{SiC} \quad (24)$$

که در آن W_{C_i} کسر وزن اولیه کربن در بستر، $W_{SiO_2_i}$ کسر وزن اولیه SiO_2 در بستر، W_{SiC_i} کسر وزن اولیه SiC در بستر است.

$$C_{peff} = (1 - \varepsilon)[W_{C_i} - X_C W_{C_i}] C_{pC} + (W_{SiO_2_i} - X W_{SiO_2_i}) C_{pSiO_2} + (W_{SiC_i} - X W_{SiO_2_i} \frac{M_{SiC}}{M_{SiO_2}}) C_{pSiC} \quad (25)$$

که در آن پارامتر k ($\frac{1}{sec}$) ثابت سرعت واکنش است و پارامتر n به معنای درجه واکنش نسبت به غلظت SiO_2 و X میزان تبدیل است. بنابراین در طول زمان واکنش، با تغییرات دمای این بستر، ترکیب فاز جامد نیز تحت تغییر است و برخی از اجزای جامد به CO گازی تبدیل می‌شوند و بستر را ترک می‌کنند و تخلخل این بستر را تغییر می‌دهند.

• میزان تخلخل

جهت محاسبه تخلخل (ε_{bed}) و تغییرات آن باید به شکل زیر محاسبات را انجام داد:

• اطلاعات مورد نیاز جهت مدل سازی انتقال جرم

همان طور که قبلاً گفته شد، اطلاعات اولیه از مقاله [۲۳] استفاده شده است. در درجه بعدی لازم است که دیگر پارامترهای مؤثر در مسئله محاسبه گردند.

• میزان تبدیل

بر اساس مدل هسته‌زایی و رشد، SiO_2 موجود در بستر جامد به مرور زمان به SiC تبدیل می‌شود. مقدار تبدیل در طول زمان واکنش ($\frac{dX}{dt}$) به شرح زیر است [۱۷]:

$$\frac{dX}{dt} = \frac{K(1 - X)}{n[Ln(1 - X)]^{1-n}} \quad (21)$$

که در آن پارامتر k ($\frac{1}{sec}$) ثابت سرعت واکنش است و پارامتر n به معنای درجه واکنش نسبت به غلظت SiO_2 و X میزان تبدیل است. بنابراین در طول زمان واکنش، با تغییرات دمای این بستر، ترکیب فاز جامد نیز تحت تغییر است و برخی از اجزای جامد به CO گازی تبدیل می‌شوند و بستر را ترک می‌کنند و تخلخل این بستر را تغییر می‌دهند.

• میزان تخلخل

جهت محاسبه تخلخل (ε_{bed}) و تغییرات آن باید به شکل زیر محاسبات را انجام داد:

$$\varepsilon_{bed} = \varepsilon_{bed_i} + \frac{V_{remt}}{2\pi r_{bed} * \Delta r * l_{r_i}} \quad (22)$$

که در آن ε_{bed_i} تخلخل اولیه بستر، V_{remt} (m^3) حجم کل فضای خالی شده، r_{bed} (m) شعاع حلقه، Δr (m) گام شعاع و l_{r_i} (m) طول دیواره داخلی رآکتور است.

میزان حجم آزاد شده در رابطه بالا در اثر حذف کربن از بستر در حین تبدیل SiO_2 به SiC است که می‌توان از رابطه ۲۳ برای محاسبه V_{remt} استفاده کرد:

$$V_{remt,C} = \frac{X_C * 2\pi r_{bed} * \Delta r * l_{r_i} * \rho_{eff} * W_C}{\rho_C} \quad (23)$$

در این رابطه X_C میزان تبدیل کربن، ρ_{eff} ($\frac{Kmol}{m^3}$) دانسیته مؤثر بستر، W_C کسری از وزن کربن در بستر و ρ_C ($\frac{Kmol}{m^3}$) دانسیته کربن می‌باشد. مقدار ρ_{eff} بر اساس لحظه و شعاع اولیه قرار می‌گیرد.

پس از محاسبات عددی طبق روابط بالا مشخص شد که مقادیر محاسبه شده با مقادیر حاصل از آزمایش‌های تجربی (میزان تخلخل اولیه و نهایی بستر) در مرجع [۲۳] برابر است.

لازم به ذکر است که مقدار SiO_2 ذوب شده در طی این فرایند بسیار کم فرض شده است. در غیر این صورت SiO_2 ذوب شده می‌تواند در داخل بستر متخلخل جریان داشته و ایجاد اختلال کند.

• خواص بستر

جهت محاسبه خواص بستر، رنج‌هایی از دما به‌عنوان ورودی به نرم‌افزار HSC داده می‌شود و سپس منحنی‌های خروجی تبدیل به اعداد می‌شوند. در معادله مربوط به محاسبه هدایت حرارتی مؤثر و دانسیته ذرات جامد، دما را ثابت در نظر می‌گیریم ولی ظرفیت حرارتی و ضریب هدایت حرارتی آن‌ها تابعی از دما هستند.

$$k_{eff} = X K_{SiC} + (1 - X)(1 - \varepsilon)[W_{C_i} - X_C W_{C_i}] K_C + (W_{SiO_2_i} - X W_{SiO_2_i}) K_{SiO_2} + (W_{SiC_i} - X W_{SiO_2_i} \frac{M_{SiC}}{M_{SiO_2}}) K_{SiC} \quad (26)$$

در این رابطه K_{SiO_2} ($\frac{W}{m.K}$) هدایت حرارتی SiO_2 و K_C ($\frac{W}{m.K}$) هدایت حرارتی کربن است.

• توزیع دما درون بستر

قانون فوریه می‌تواند برای بیان و توصیف انتقال حرارت هدایتی ناپایا ($\frac{\partial T}{\partial t}$) در یک جسم جامد با خواص ترموفیزیکی ثابت و در یک هندسه استوانه‌ای محدود بکار برده شود.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial T}{\partial r} \right\} \quad (27)$$

که $\frac{\partial T}{\partial r}$ بیانگر تغییرات دما در جهت شعاع و α ($\frac{m^2}{s}$) ضریب نفوذ حرارتی می‌باشند.

معادله حالت ناپایدار انرژی در داخل بستر با استفاده از رابطه زیر قابل محاسبه است:

گازی و $\Omega_{i,j}$ تابع برخورد i و j می‌باشند. روابط زیر تعیین کننده این مقادیر هستند

$$M_{i,j} = \frac{M_i M_j}{M_i + M_j} \quad (31)$$

$$\Omega_{i,j} = 1 + \frac{\pi}{8} \quad (32)$$

$$D_{iK} = \frac{n}{\eta_d} * D_{i,d} \quad (33)$$

D_{iK} ضریب نفوذ نادن و $D_{i,d}$ ضریب نفوذ گاز i در گاز ساکن d است. با جایگذاری در رابطه اول داریم:

$$D_{iK} = D_{iK,j} = \frac{\frac{3}{8}}{8 * \eta_d * s_d (1 + \frac{\pi}{8})} * (\frac{8 * K_b * T}{\pi * M_i})^{\frac{1}{2}} \quad (34)$$

با فرض کروی بودن دانه‌های جامد و با انجام برخی بازآرایی‌های مناسب داریم:

$$D_{iK} = \frac{3}{32 * \eta_d * r_d^2 * (1 + \frac{\pi}{8})} * \left(\frac{8 * \bar{R} * T}{\pi * M_i} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (35)$$

\bar{R} ثابت جهانی گازها، η_d و r_d به ترتیب تعداد دانه‌های جامد در واحد حجم و شعاع متوسط ذرات کروی دانه‌های جامد هستند (برای ذرات غیر کروی می‌توان قطر معادل را جایگذاری کرد). با استفاده از این مدل نفوذ در دانه‌های $D(C)$ و $C(SiO_2)$ ، $B(SiC)$ بدست می‌آید. می‌توان از رابطه ویکی که برای نفوذ یک گاز در ۲ گاز دیگر است و با ایجاد بازآرایی در آن، رابطه زیر را جهت نفوذ متوسط نادن در بستر با ۳ ماده استفاده کرد:

$$D_{AK,C-D} = D_{AK,C} * D_{AK,D} \left(\frac{1 + m_C}{M_C} \right) \left(\frac{m_D * M_D}{m_D * M_D} \right) * \left(\frac{m_C}{M_C} \right) / (D_{AK,C} + D_{AK,D} * \frac{m_C}{m_D * M_D}) \quad (36)$$

پارامتر m مقدار جرم و M وزن مولکولی ذرات جامد بستر هستند. پس از محاسبه‌ی ضریب نفوذ متوسط نادن، فرمول گسسته قانون دوم فیک برای مدلسازی استفاده شد.

۳- نتایج

• تغییرات تخلخل بستر

میزان تخلخل اولیه بستر ۰/۳۹ بود که با گذشت زمان، C و SiO_2 مصرف و CO تولید می‌شود که از میان بستر عبور کرده و از دریچه راکتور خارج می‌گردد و باعث ایجاد فضای خالی در بستر و در نتیجه افزایش تخلخل می‌گردد. بررسی‌ها نشان داد که از ثانیه‌ی ۳۱۲۵ تخلخل بستر شروع به افزایش می‌کند. بعد از گذشت حدود ۱۴ ساعت از فرآیند، میزان تشکیل SiC به حداکثر مقدار خود می‌رسد، در این زمان میزان تخلخل بستر نیز به حداکثر مقدار خود یعنی ۰/۸۰۲ می‌رسد و تا پایان

$$\begin{aligned} & (-k_{eff} r \frac{\partial T}{\partial r})_{in} + (\sigma r T^4)_{in} \\ & - \left(-k_{eff} r \frac{\partial T}{\partial r} \right)_{out} - (\sigma r T^4)_{out} \\ & - (q_{reac} * r dr)_{c.v.} - (q_{melt} * r dr)_{c.v.} \\ & - \left(q_{loss,z} \frac{r dr}{l} \right)_{c.v.} \\ & = [r dr \frac{\partial}{\partial} (\rho_{eff} C_{peff} T)]_{c.v.} \end{aligned} \quad (28)$$

در این رابطه $k_{eff} (\frac{W}{m.K})$ هدایت حرارتی مؤثر بستر، σ ضریب بولتزمن، $q_{melt} (\frac{J}{m^3})$ گرما مصرف‌شده توسط ذوب SiO_2 ، $q_{loss,z} (\frac{J}{m^2})$ اتلاف حرارتی از سطح مقطع چپ و راست راکتور استوانه‌ای، $T(K)$ دما و $q_{reac} (\frac{J}{m^3})$ گرما مصرف‌شده توسط واکنش است. در این رابطه هدایت و تشعشع درون بستر جامد (با فرض خاصیت بدنه سیاه)، اتلاف حرارتی از سطوح جانبی، مصرف انرژی حرارتی متوسط واکنش شیمیایی و فرآیند ذوب و تجمع حرارت درون بستر در نظر گرفته شده است.

برای حل عددی معادلات بالا، ابتدا معادلات گسسته می‌شوند، به این منظور از روش اختلاف محدود صریح و پیشرو استفاده شد. همه خواص بستر که متغیر با دما هستند درون حلقه در نظر گرفته می‌شوند و مرتباً در حال به‌روزرسانی هستند. با محاسبه‌ی هم‌زمان متغیرهای اصلی این مدل‌سازی (X, T)، تغییرات خواص بستر (مانند k_{eff}, C_{peff} و ρ_{eff}) بررسی گردید. محاسبات تا زمانی که شرط همگرایی برقرار شود، ادامه داده شد.

• ضریب نفوذ

یکی از پارامترهای مهم در این مدل‌سازی ضریب نفوذ مؤثر است. برای مشخص کردن مقدار ضریب نفوذ مؤثر (D_{eff}) باید توجه داشت که علاوه بر نفوذ مولکول‌های گاز از داخل بستر، باید نفوذ گاز از داخل روزنه‌ها را نیز لحاظ کرد. به همین دلیل نفوذ نادن^۱ استفاده می‌شود [۲۶].

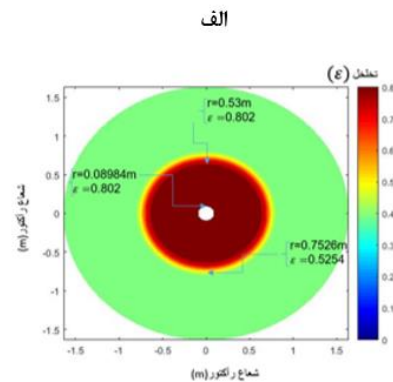
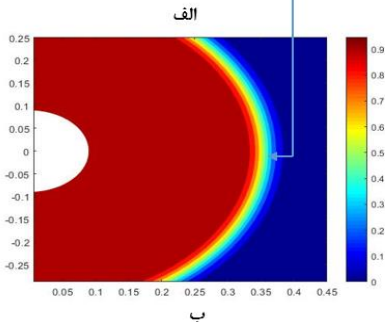
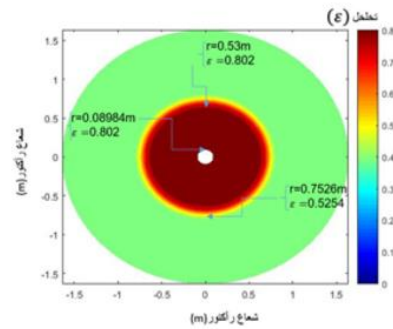
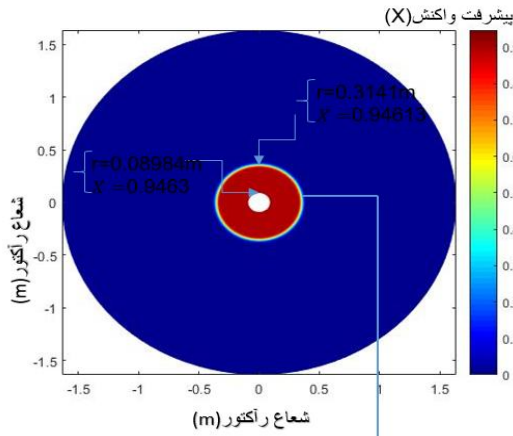
$$D_{eff} = \frac{\varepsilon}{D_k^{-1}} \quad (29)$$

D_K ضریب نفوذ نادن، ε_0 میزان تخلخل اولیه و T_0 ضریب پیچ‌وخم اولیه بستر (هرچه مقدار پیچ‌وخم روزنه‌ها بیشتر باشد، مقدار آن افزایش می‌یابد) است. در این مدل، روزنه‌ها که از یکسری ذرات جامد تشکیل شده، به صورت ذرات گاز با سایز بزرگ فرض شدند و با این فرض D_K را برای سه ماده C, B و D محاسبه گردید. هنگامی که متوسط پویس آزاد مولکولی گاز نفوذکننده بزرگ‌تر از قطر متوسط حفره باشد ضریب نفوذ نادن اهمیت پیدا می‌کند و مقدار آن از مدل غبارآلود ماسون^۲ محاسبه می‌شود.

$$D_{i,j} = \frac{\frac{3}{8}}{n * \pi * \delta_{i,j} * \Omega_{i,j}} * (\frac{\pi * K_b * T}{2 M_{i,j}})^3 \quad (30)$$

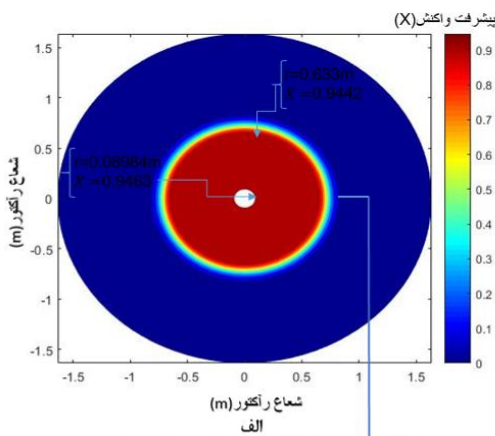
که $D_{i,j}$ ضریب نفوذ گاز i در j ، K_b ثابت بولتزمن، n دانسیته مولکولی مخلوط گازی، $\delta_{i,j}$ فاصله برخورد i و j ، $M_{i,j}$ جرم مولکولی متوسط

فرآیند ($t=40$ hr) مقدار تخلخل همین مقدار باقی می ماند و تنها محدوده شعاع بیشتری ($r=0.5$ m) از بستر راکتور تحت تغییر تخلخل قرار می گیرد (شکل ۳).



شکل ۴ میزان پیشرفت واکنش (X) در $t=14$ hr : الف : مقدار پیشرفت واکنش در محدوده شعاع $0.8-0.31$ برابر با 0.94 ، ب : ناحیه متمرکز شده جهت مشاهدهی بهتر پیشرفت واکنش (X)

کانتور شکل ۵ پیش‌بینی‌های مدل برای تبدیل نهایی (بعد از ۴۰ ساعت) SiO_2 به SiC در شعاع‌های مختلف راکتور را نشان می‌دهد. همان‌طور که در این شکل دیده می‌شود، شعاع‌های کمتر از 0.6 متر درون این راکتور، تبدیل نهایی بیش از 0.94 دارند.



شکل ۳- کانتورهای، الف) تخلخل بستر در لحظه $t=14$ hr ، ب) تخلخل بستر در لحظه $t=40$ hr

همان‌طور که در شکل (ب) نشان داده شده است تخلخل در ناحیه اطراف هسته ($r=0.5$ m) برابر با 0.8 است و در محدوده شعاع‌های $0.7-0.5$ متر در محدوده $0.8-0.5$ روند کاهشی پیدا می‌کند. این مقدار به میزان پیش‌بینی شده 0.62 در مرجع [۲۱] نزدیک است که نشان از صحت مدل‌سازی می‌باشد.

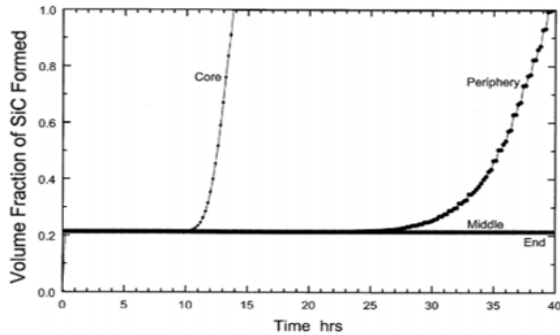
• میزان پیشرفت واکنش

همان‌طور که در بخش قبل گفته شد تخلخل، وابسته به میزان پیشرفت واکنش و یا در واقع میزان تبدیل SiO_2 به SiC است؛ در نتیجه کانتورهای خروجی در این قسمت رفتاری مشابه با نمونه‌های بخش قبل دارند.

بررسی نشان می‌دهد که در شروع واکنش میزان تبدیل، صفر بوده است و در $t=11$ hr واکنش تولید SiC شروع و در $t=14$ hr به حداکثر مقدار خود می‌رسد. این نتایج مطابق با نتایج حاصل از مقاله کومار و گوپتا (۲۰۰۲) است، همچنین در مقاله گوپتا و همکاران (۲۰۰۱) شروع فرآیند در $t=14$ hr ذکر شده و مقدار تجربی 97% برای میزان تبدیل نهایی برای سیلندر متشکل از SiC گزارش شده است. در شکل ۴ مشاهده می‌شود که پس از گذشت ۱۴ ساعت از شروع واکنش در محدوده شعاعی $0.89-0.31$ متر میزان پیشرفت واکنش 0.94 است.

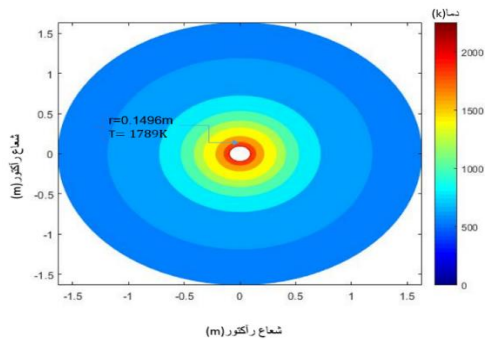
شکل ۵- میزان پیشرفت واکنش (X) در $t=40$ hr : الف: میزان پیشرفت واکنش (X) در محدوده شعاع $0.8-0.6$ برابر با 0.94 ، ب: ناحیه متمرکز شده

طی یک ساعت کامل می‌شود. در شکل واضح است که با گذشت زمان و افزایش دما در میانه راکتور مجدداً واکنش تولید سیلیکون کاربید انجام می‌شود ولی از آنجا که از منبع تغذیه و دریافت گرما دور است، واکنش به کندی انجام می‌گردد به طوری که در عرض حدود ۱۳ ساعت میزان SiC از ۰.۲ به ۱ می‌رسد.



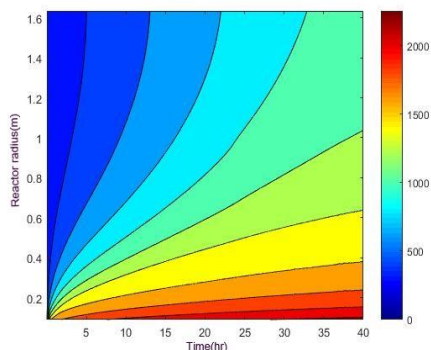
شکل ۸- میزان SiC با زمان در مکان‌های مختلف در کوره مقاومت [۱۵].

در کانتور خروجی از کد نوشته شده در این پژوهش (شکل ۹) که مربوط به ساعت یازدهم فرآیند است، حدود نقطه‌ای شروع واکنش تولید SiC قابل مشاهده است. این نقطه تقریباً در شعاع ۰/۱۴ m که دما برابر ۱۷۸۹K است دیده می‌شود.



شکل ۹- تشکیل SiC در $t=39600$ s و $r=0.1496$ m و $T=1788$ K

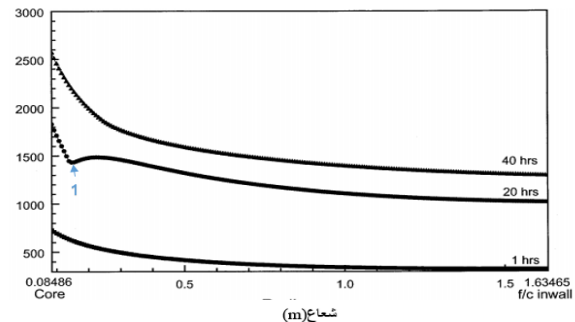
در شکل ۱۰ تغییرات دمای بستر، در طول ۴۰ ساعت فرآیند نشان داده شده است. دمای استوانه راکتور به صورت تابعی از شعاع ($T=T(r)$) در نظر گرفته شده است و حداکثر دما در نواحی نزدیک به هسته گرافیتی بوده است و حرارت به روش هدایت، در جهت شعاع، به سمت پوسته استیل راکتور حرکت می‌کند، با افزایش فاصله، مقدار حرارت و دما کاهش می‌یابد. مثلاً در زمان ۱۴ ساعت، پروفایل تغییرات دما در عرض راکتور در شکل ۱۱ نشان دهنده‌ی همین ادعاست.



شکل ۱۰- تغییرات دمای بستر در مدت زمان واکنش و شعاع‌های راکتور

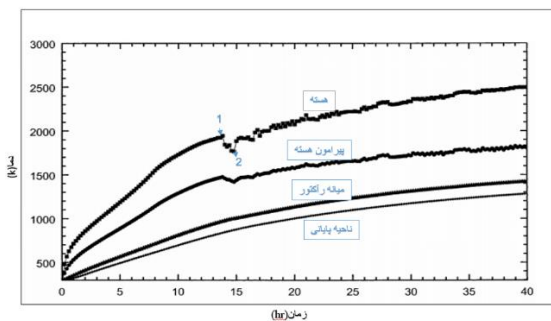
• انتقال حرارت و پروفایل توزیع دما

همانطور که قبلاً گفته شد، تأمین گرمای واکنش از طریق ایجاد مقاومت الکتریکی در المنت موجود در هسته گرافیتی در مرکز راکتور صورت می‌گیرد. در ابتدا با وارد شدن حداکثر توان، مدت زمانی صرف گرم شدن محیط سرد الکتروود می‌شود و تغییرات دما ناچیز است اما پس از گذشت زمان، گرافیت گرم شده و حرارت بصورت هدایت در بستر انتقال پیدا می‌کند. با رسیدن دمای بستر به ۱۷۸۸ درجه سانتی‌گراد، واکنش تولید SiC، که واکنشی گرماگیر است رخ می‌دهد و منجر به کاهش ناگهانی دما می‌گردد (شکل ۶). به علت وجود منبع تغذیه در هسته و ایجاد گرمای مداوم، مجدداً گرما افزایش یافته و واکنش نیز سریع انجام می‌شود.



شکل ۶- تغییرات دما برحسب شعاع در ۳ زمان مختلف [۱۵]

دما از طریق هدایت در بستر منتقل می‌شود. در هسته، به علت انجام واکنش، نوسانات دما ایجاد می‌شود و تا شعاع مشخصی از پیرامون هسته انتقال می‌یابد. ولی در میانه راکتور، که فاصله از هسته زیاد و تاثیرات نوسان دما ناچیز است، پروفایل دما ثابت و بدون نوسان است (شکل ۷).



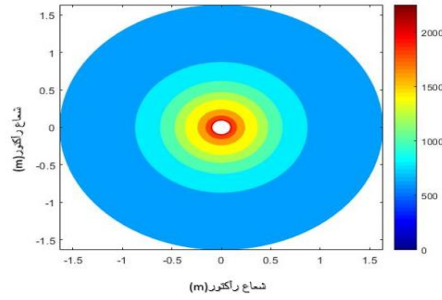
شکل ۷- تغییرات دما برحسب دما در ۴ ناحیه مختلف از بستر [۱۵].

با دقت در شکل ۸ که حاصل از مدل‌سازی ریاضی می‌باشد، می‌توان دید که سیلیکون کاربید در زمان کمتر از ۱۰ ساعت، به مقدار قابل توجهی تولید نمی‌شود، ولی با گذشت زمان و افزایش دما، واکنش تولید SiC به سرعت انجام شده و در عرض حدود ۳ ساعت میزان SiC از ۰.۲ به ۱ می‌رسد. این نتیجه مشابه با نتایج حاصل از مقاله گوپتا و همکاران (۲۰۰۱) است. همچنین کومار و گوپتا (۲۰۰۲) گزارش کردند که بعد از گذشت ۱۱ ساعت، در دمای ۱۷۹۰ درجه کلونین (که بسیار نزدیک به دمای تشکیل SiC (۱۷۸۸K) است) سیلیکون کاربید شروع به تشکیل می‌کند و هنگامی که تشکیل SiC رخ می‌دهد، کل واکنش در سطح هسته

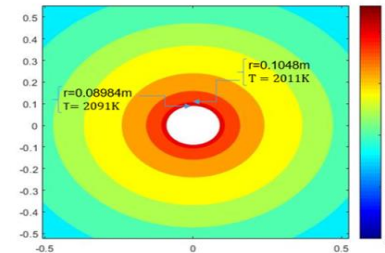
دمای بستر در $r=0/08\text{ m}$ و ب: ناحیه متمرکز شده

در انتقال حرارت مربوط به فرآیند، این امکان وجود دارد تا اتلاف حرارت هم از دریچه باز موجود در سطح فوقانی راکتور صورت پذیرد و هم به وسیله‌ی پوسته‌ی استیل رخ دهد. اما از آنجا که مقدار اختلاف در اتلاف گرما از دریچه و پوسته استیل، ناچیز است، برای سهولت شبیه‌سازی انتقال حرارت، راکتور بسته در نظر گرفته شد. در شکل ۱۴ شامل مجموعه‌ای از نتیجه‌گیری‌های ذکر شده در فوق است. پیش بینی‌های مدل برای دمای هسته و نقاط واقع شده در سطوح خارجی استوانه SiC تولید شده در پایان واکنش (در $r=0/658\text{ m}$)، به عنوان تابعی از زمان انجام واکنش را نشان می‌دهد. مقادیر تجربی این دما نیز برای اعتبار سنجی پیش بینی مدل برای این پارامترها در شکل ۴-۱۶ ارائه شده است تا به مقایسه‌ی بین داده‌های آزمایشگاهی و نظری در هسته پرداخته شود. بنا بر شواهد، دما تأثیر زیادی بر سینتیک واکنش‌ها دارد، در این نمودار مشاهده می‌شود برخلاف افزایش سریع دمای در هسته، افزایش یافته است، بنابراین تشکیل SiC ملایم پیش می‌رود. با پیشرفت واکنش به سمت پایان و با نزدیک شدن دما به 1800 K ، سرعت واکنش نیز افزایش می‌یابد. جالب است بدانید که تبدیل کامل تشکیل کاربید سیلیکون در محیط پیرامون هسته حدود ۷ برابر بیشتر از زمان تبدیل کامل کاربید سیلیکون در سطح هسته طول می‌کشد. پروفیل‌های واکنش در میانه راکتور و در ناحیه بین مواد اولیه و پوشش نسوز در کوره به‌سادگی نشان می‌دهد که درجه حرارت در این مکان‌ها برای تشکیل SiC به اندازه کافی بالا نمی‌رود. بنابراین، هیچ کسری از SiC در این مکان‌ها تشکیل نمی‌شود. با افزایش زمان، کلیه دما در مکان‌های مختلف کوره به تدریج افزایش می‌یابد تا زمان به ۱۳ ساعت برسد. در این زمان دمای هسته در حدود 2020 K درجه سانتیگراد است. پس از آن دمای هسته به سرعت کاهش می‌یابد و نوسانات در دمای هسته رخ می‌دهند. افت دما نشان می‌دهد که واکنش عمده‌ای بین سیلیس و کربن در حال انجام است. واکنش بین سیلیس و کربن بسیار گرماگیر است، بنابراین، هنگامی که این واکنش در شرایط مناسب دمایی اتفاق بیفتد، مقدار زیادی گرما را با توجه به واکنش جذب می‌کند (واکنش ۳-۱). این موضوع باعث کاهش دما در این مرحله می‌شود. به دلیل افت دما، سرعت واکنش کندتر می‌شود. به محض مطلوب شدن دما (به دلیل منبع تغذیه مداوم) پس از مدت زمان مشخص، سرعت واکنش دوباره سریعتر می‌شود. مقدار بسیار زیادی گرما دوباره جذب شده و دما کاهش می‌یابد. بنابراین، همیشه نوسان دما وجود دارد. این نوسانات به میزان تشکیل SiC در آن مرحله زمانی و در نتیجه به سرعت واکنش بستگی دارد. همچنین، هرچه کاربید سیلیکون بیشتر و بیشتر شکل می‌گیرد، رسانایی گرمایی ماده افزایش می‌یابد و به عنوان یک رسانای گرمایی خوب عمل می‌کند، بنابراین دما کاهش می‌یابد. با ادامه تأمین نیرو، پس از تشکیل کامل SiC در سطح هسته، به تدریج درجه حرارت در این مکان بدون نوسان زیاد ثابت می‌شود. از آنجا که هیچ واکنشی در این گره رخ نمی‌دهد، با شروع تشکیل کاربید سیلیکون در مکان‌های دیگر، هنوز تحت تأثیر مواد اولیه مجاور قرار می‌گیرد.

(K)



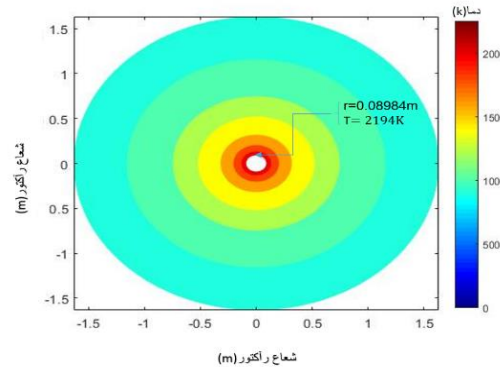
الف



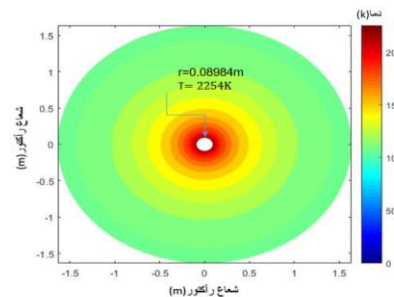
ب

شکل ۱۱- توزیع دما در $t=14\text{ hr}$ (الف): دما در محدوده شعاع $0/089\text{ m}$ - $0/1$ برابر با 2011 K و ب: ناحیه متمرکز شده در $r=0/05\text{ m}$

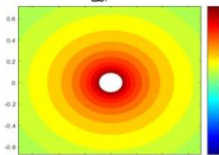
همان‌طور که در شکل ۱۲ و ۱۳ دیده می‌شود اختلاف دما در مرز هسته بین ۲۷-۴۰ ساعت برابر با 60 K درجه کلون است. در مطالعه تجربی انجام‌شده توسط کومار و گوپتا (۲۰۰۲) نشان داده شد که افزایش دما در مدت ۲۷ ساعت اتفاق می‌افتد و تا پایان فرآیند (۴۰ ساعت) شاهد افزایش دمای کم (70 K) خواهیم بود.



شکل ۱۲- توزیع دمای بستر راکتور در لحظه $t=27\text{ hr}$



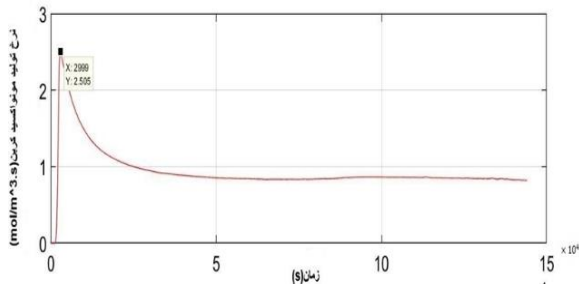
الف



ب

شکل ۱۳- توزیع دمای بستر راکتور در لحظه $t=40\text{ hr}$ (الف): توزیع

واکنش و تولید سیلیسیکون کاربید و در نتیجه نرخ تولید گاز مونواکسید کربن بیشتر مشاهده می‌شود. حداکثر نرخ تولید گاز در $t=2999s$ برابر با $\frac{2}{5.05} \frac{Kmol}{m^3.s}$ است. از طرفی با گذشت زمان، CO فرصت خروج از راکتور را یافته و میزان آن در راکتور کاهش می‌یابد.

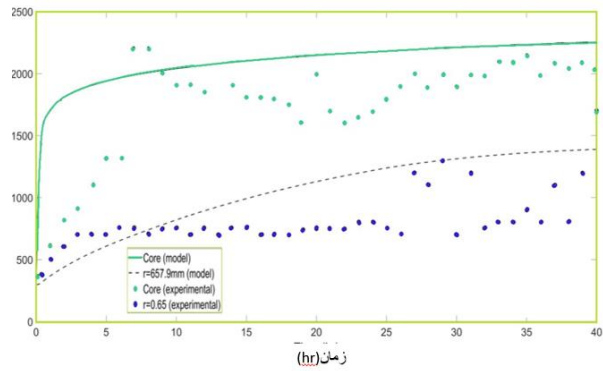


شکل ۱۶- نرخ تولید گاز مونواکسید کربن بر حسب زمان

۴- نتیجه گیری

در این پژوهش به محاسبه عددی نرخ پخش و پراکنش گاز آلاینده CO در فرآیند تولید SiC پرداخته شد. با انجام مدل‌سازی و محاسبه عددی وابسته به انتقال حرارت، جرم و خصوصیات بستر راکتور آپسون جهت سنتز SiC و توسعه نتایج تجربی و عددی حاصل از سایر پژوهش‌ها نتایج زیر حاصل شد.

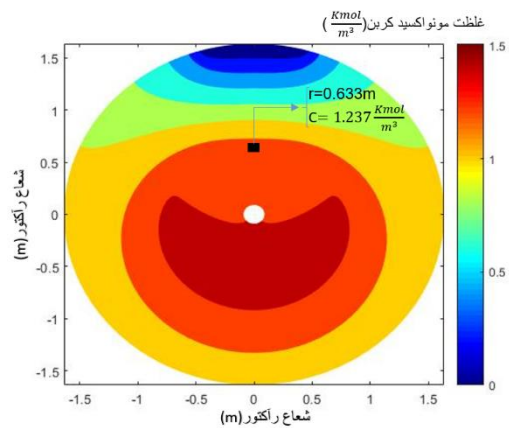
- تخلخل بستر در ابتدای فرآیند به دلیل عدم انجام واکنش تولید SiC، تغییر نمی‌کند. با گذشت زمان و شروع واکنش، کربن موجود در بستر مصرف شده و در بستر فضای خالی ایجاد می‌شود که باعث افزایش تخلخل می‌شود.
- واکنش مصرف SiO_2 و C در جهت تولید SiC تا میزان تبدیل ۰/۹۴ پیشرفت می‌کند.
- از آن‌جا که منبع تولید انرژی در مرکز راکتور وجود دارد، دما در هسته گرافیتی راکتور، بیش‌ترین میزان را داشت. از طریق انتقال حرارت به روش هدایت گرما در جهت شعاع و زاویه انتقال یافت و دما در لایه‌های مختلف راکتور افزایش یافت. البته هرچه به سمت پوسته استیل نزدیک شویم، میزان دما و افزایش آن، کمتر است.
- برای انجام واکنش تولید SiC باید دما به دمای مطلوب واکنش (۱۷۸۸ درجه کلوین) برسد. در حین انجام واکنش، به علت گرماگیر بودن واکنش، دما، ناگهانی کاهش می‌یابد. از آن‌جا که تولید گرما در هسته مداوم است، واکنش با دریافت گرما، سریع پیشرفت کرد.
- هم‌زمان با تولید SiC، گاز مونواکسید کربن نیز تولید می‌شود. این گاز به سمت دریچه خروجی حرکت کرده و جریانی از ناحیه غلیظ‌تر به ناحیه رقیق‌تر برقرار می‌کند. پروفایل تغییرات غلظت CO نشان می‌دهد که در ابتدا، میزان CO در راکتور زیاد است، ولی با جریان گاز به سمت خروجی، غلظت CO به مرور کاهش می‌یابد.
- حداکثر نرخ تولید گاز CO در کمتر از یک ساعت و در نزدیکی هسته به علت بالا بودن دما نسبت به نقاط دیگر؛ افزایش پیشرفت واکنش و تولید سیلیسیوم کاربید و در نتیجه نرخ تولید گاز مونواکسید کربن بیشتر مشاهده می‌شود. حداکثر نرخ تولید گاز در $t=2999s$ برابر با $\frac{2}{5.05} \frac{Kmol}{m^3.s}$ است.



شکل ۱۴- پیش‌بینی‌های مدل برای دمای هسته و سطح خارجی سیلندر SiC تولیدشده در پایان واکنش

• انتقال جرم گاز مونواکسید کربن

در راکتور مورد بررسی در این مطالعه، علاوه بر سیلیکون کاربید، مونواکسید کربن نیز تولید می‌شود. تولید CO با شروع واکنش تولید SiC انجام می‌شود. با گذشت زمان میزان CO افزایش یافته و جریانی از ناحیه غلیظ‌تر به ناحیه رقیق‌تر برقرار می‌شود. این گاز در بستر منتقل شده و به قسمت فوقانی راکتور که دریچه‌ای به منظور خروج گاز مونواکسید کربن و جلوگیری از خطر انفجار و خفه شدن واکنش تعبیه شده است، جریان می‌یابد. در $t=14hr$ غلظت گاز مونواکسید کربن $\frac{0.74}{m^3} \frac{Kmol}{m^3}$ است. روند تغییر غلظت CO در شعاع‌ها و زوایای مختلف مطابق با کانتور شکل ۱۵ است. همانطور که واضح است، پس از هر بار افزایش غلظت CO و انتقال آن به سمت خروجی، کاهش غلظت در نزدیکی دریچه به‌وضوح مشاهده می‌شود.



شکل ۱۵- کانتور نمایش‌دهنده غلظت مونواکسید کربن در راکتور در لحظه $t=14270.0s$

نتیجه حاصل از شبیه‌سازی نرخ تولید گاز CO که در راستای r و θ از راکتور آپسون، در حین تولید SiC خارج شده در نمودار زیر نمایش داده شده است. همان‌طور که در شکل ۱۶ مشاهده می‌شود در $t=2999s$ نرخ تولید گاز به‌شدت افزایش می‌یابد تا به مقدار $\frac{2}{5.05} \frac{Kmol}{m^3.s}$ می‌رسد و پس از آن تا $t=14hr$ مقدار نرخ تولید روند کاهشی و از $t=14-40hr$ روند ثابت پیدا می‌کند. در نزدیکی هسته به علت بالا بودن دما نسبت به نقاط دیگر؛ افزایش پیشرفت

- [1] Gerhardt, R. (Ed.). 2011. Properties and applications of silicon carbide. BoD–Books on Demand.
- [2] Chelnokov, V. E., and Syrkin, A. L. 1997. High temperature electronics using SiC: actual situation and unsolved problems. *Materials Science and Engineering: B*, 46(1), 248-253.
- [3] Chandler, R. C., and Amra, L. H. 1986. U.S. Patent No. 4,617,232. Washington, DC: U.S. Patent and Trademark Office.
- [4] Mukasyan, A. S. 2017. Silicon Carbide. *Concise Encyclopedia of Self-Propagating High-Temperature Synthesis*. I. P. Borovinskaya, A. A. Gromov, E. A. Levashov et al. Amsterdam, Elsevier: 336-338.
- [5] Abderrazak, H., and Hmida, E. 2011. Silicon carbide: synthesis and properties. *Properties and applications of Silicon Carbide*, 361-388.
- [6] Sadow, S. E., and Agarwal, A. K. Ye ar. *Advances in silicon carbide processing and applications*: Artech House.
- [7] Shcherban, N. D. 2017. Review on synthesis, structure, physical and chemical properties and functional characteristics of porous silicon carbide. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 50, 15-28.
- [8] Liu, Z., Deng, C., Yu, C., Wang, X., Ding, J., and Zhu, H. 2018. Preparation of in situ grown silicon carbide whiskers onto graphite for application in Al₂O₃-C refractories. *Ceramics International*, 44(12), 13944-13950.
- [9] Meng, G. W., Z, Z., Zhang, L. D., and Phillipp, F. 2000. Growth and Characterization of Nanostructured β -SiC Via Carbothermal Reduction of SiO₂ Xerogels Containing Carbon Nanoparticles. *Journal of Crystal Growth*, 209, 801-806.
- [10] Shteplyuk, I., Khranovskyy, V., and Yakimova, R. 2016. Combining graphene with silicon carbide: synthesis and properties—a review. *Semiconductor Science and Technology*, 31(11), 113004.
- [12] Tong, L., and Reddy, R. G. 2006. Thermal plasma synthesis of SiC nano-powders/nano-fibers. *Materials Research Bulletin*, 41(12), 2303-2310.
- [13] Feng, A., and Munir, Z. 1994. Field-assisted self-propagating synthesis of β -SiC. *Journal of applied physics*, 76(3), 1927-1928.
- [14] Guichelaar, P. J. 1997. Acheson Process. In *Carbide, Nitride and Boride Materials Synthesis and Processing* (pp. 115-129): Springer Netherlands.
- [15] Gupta, G. S., Vasanth Kumar, P., Rudolph, V. R., and Gupta, M. 2001. Heat-transfer model for the acheson process. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 32(6), 1301-1308
- [16] Kukushkin, S. A., and Osipov, A. V. 2008. New method for growing silicon carbide on silicon by solid-phase epitaxy: Model and experiment. *Physics of the Solid State*, 50(7), 1238.
- [17] Abolpour, B., and Shamsoddini, R. 2020. Mechanism of reaction of silica and carbon for producing silicon carbide. *Progress in Reaction Kinetics and Mechanism*, 45, 1468678319891416.
- [18] Dey, S., and Dhal, G. C. 2019. Materials progress in the control of CO and CO₂ emission at ambient conditions: An overview. *Materials Science for Energy Technologies*, 2(3), 607-623
- [19] Luo, Y., and Niu, S. 2020. Mature forest shows little increase in carbon uptake in a CO₂-enriched atmosphere: Nature Publishing Group.
- [20] Ragsdale, S. W. 2004. Life with carbon monoxide. *Critical reviews in biochemistry and molecular biology*, 39(3), 165-195.
- [21] Young, M. E., Fossati, L., Johnstone, C., Salz, M., Lichtenegger, H., France, K., Cubillos, P. E. 2020. Observability of ultraviolet Ni lines in the atmosphere of transiting Earth-like planets. *Astronomische Nachrichten*.
- [22] Zannetti, P. (Ed.). 2013. *Air pollution modeling: theories, computational methods and available software*. Springer Science & Business Media.
- [23] Kumar, P. V., and Gupta, G. S. 2002. Study of formation of silicon carbide in the Acheson process. *Steel research*, 73(2), 31-38.
- [24] Vanýsek, P. 2017. ECS Classics: Acheson, Silicon Carbide, and the Electric Arc. *Electrochemical Society Interface*, 26(1), 36.
- [25] Sakin-Yilmazer, M., Kaymak-Ertekin, F., and Ilicali, C. 2012. Modeling of simultaneous heat and mass transfer during convective oven ring cake baking. *Journal of Food Engineering*, 111(2), 289-298.
- [26] Abolpour, B., Mehdi Afsahi, M., and Vasant Kumar, R. 2012. A novel theoretical model for calculating the effective diffusivity of gases in a porous pellet composed of two different grains. *Research on Chemical Intermediates*, 38(7), 1455-1465.