

Научная статья

УДК 533.15; 666.3.017

doi: 10.17223/19988621/97/6

Моделирование процессов газообмена в пористом пространстве между поверхностью металлокерамических плат и огнеупорной оснасткой в условиях высокотемпературного спекания

Илья Александрович Жуков¹, Алексей Юрьевич Крайнов²,
Ксения Михайловна Моисеева³, Евгений Валерьевич Ермолаев⁴,
Валерий Алексеевич Егошин⁵, Шамиль Наилевич Шугаев⁶,
Равил Шамилевич Ахметгалиев⁷

^{1, 2, 3, 5, 6, 7} Томский государственный университет, Томск, Россия

^{4, 5, 6} Марийский государственный университет, Йошкар-Ола, Россия

^{4, 5, 6, 7} АО «Завод полупроводниковых приборов», Йошкар-Ола, Россия

¹ zhukoviatstu@yandex.ru

² akrainov@ftf.tsu.ru

³ moiseeva_km@t-sk.ru

⁴ ermolaev_ev@zpp12.ru

⁵ vaegoshin@zpp12.ru

⁶ shnshugaev@zpp12.ru

⁷ rshahmetgaliiev@zpp12.ru

Аннотация. Проведено моделирование процессов конвекции и диффузии примесей в формир-газе в процессах высокотемпературного спекания керамических изделий. Для описания изотермического фильтрационного движения газа в пористом пространстве использована модель Лейбензона. Определены стационарные поля давления, концентраций паров металлов и модуля скорости движения смеси газов в пористом пространстве между шероховатой пластиной и поверхностью корпуса микросхемы.

Ключевые слова: математическое моделирование, газообмен, фильтрация газа, диффузия примесей, пористость

Благодарности: Работа выполнена в рамках государственного задания № FSWM-2025-0010 «Физико-химические закономерности формирования структурно-фазового состояния и физико-механических свойств композиционных керамических материалов, стойких к интенсивным термомеханическим воздействиям и износу».

Для цитирования: Жуков И.А., Крайнов А.Ю., Моисеева К.М., Ермолаев Е.В., Егошин В.А., Шугаев Ш.Н., Ахметгалиев Р.Ш. Моделирование процессов газообмена в пористом пространстве между поверхностью металлокерамических плат и огнеупорной оснасткой в условиях высокотемпературного спекания // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2025. № 97. С. 83–99. doi: 10.17223/19988621/97/6

Original article

Modeling of gas exchange processes in the porous space between the surface of metal-ceramic boards and the refractory tooling under high-temperature sintering conditions

Il'ya A. Zhukov¹, Aleksey Yu. Krainov², Kseniya M. Moiseeva³,
Evgeniy V. Ermolaev⁴, Valeriy A. Egoshin⁵, Shamil' N. Shugaepov⁶,
Ravil' Sh. Akhmetgaliev⁷

^{1, 2, 3, 5, 6, 7} Tomsk State University, Tomsk, Tomsk, Russian Federation

^{4, 5, 6} Mari State University, Yoshkar-Ola, Russian Federation

^{4, 5, 6, 7} JSC Semiconductor Devices Plant, Yoshkar-Ola, Russian Federation

¹ zhukoviatsu@yandex.ru

² akrainov@fft.tsu.ru

³ moiseeva_km@t-sk.ru

⁴ ermolaev_ev@zpp12.ru

⁵ vaegoshin@zpp12.ru

⁶ shnshugaepov@zpp12.ru

⁷ rshahmetgaliev@zpp12.ru

Abstract. The convection and diffusion of impurities in the forming gas during the high-temperature sintering of ceramic products are simulated. The Leibenson model is used to describe the isothermal filtration gas flow in the porous space. The stationary fields of pressure, impurity vapor concentration, and velocity modulus of the gas mixture in the porous region between the rough plate and the microcircuit housing surface are determined. The characteristic time of convection and diffusion in the porous space between the metal plate and the ceramic-metal board surface is estimated. The conditions for the accumulation and release of impurities from the porous space of the metal plate under the bottom of the board are determined. The proposed mathematical models can be used to calculate the rate of impurity release from the porous space under the board bottom depending on the roughness of the metal plate surface.

Keywords: self-propagating high-temperature synthesis, sintering, titanium diboride, structure, mechanical properties, composite material, Ti–B–Fe system, hardness, strength characteristics

Acknowledgments: This work was carried out within the framework of the state assignment No. FSWM-2025-0010 "Physico-chemical regularities of formation of structural-phase state and physical-mechanical properties of composite ceramic materials resistant to intensive thermomechanical effects and wear".

For citation: Zhukov, I.A., Krainov, A.Yu., Moiseeva, K.M., Ermolaev, E.V., Egoshin, V.A., Shugaepov, S.N., Akhmetgaliev, R.Sh. (2025) Modeling of gas exchange processes in the porous space between the surface of metal-ceramic boards and the refractory tooling under high-temperature sintering conditions. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mehanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics.* 97. pp. 83–99. doi: 10.17223/19988621/97/6

Введение

Известно, что высокотемпературная обработка не спеченных металлокерамических плат в условиях массового производства корпусов микросхем осуществляется в многоэтажных огнеупорных пакетах, представляющих собой сборную конструкцию из чередующихся прямоугольных огнеупорных пластин в несколько уровней [1]. В качестве основного материала пластин используют муллитокорундовую керамику или же тугоплавкий металл (Nb, Mo, Ta, W, Re). Как показала практика, металлический материал является наиболее предпочтительным. Одно из существенных преимуществ тугоплавкого металла перед муллитокорундовой керамикой – способность выдерживать циклические изменения температуры до 1 000 проходов через печь обжига с максимальной температурой 1 600°C без изменения механических свойств.

Так как подготовка плат к обжигу предполагает их укладку на огнеупорные пластины, то к поверхности пластин предъявляются особые требования в период эксплуатации. К наиболее существенным требованиям можно отнести поддержание точности уровня плоскостности пластин, обеспечивающих устойчивое положение огнеупорных пакетов при их движении через канал печи обжига, уровня шероховатости профиля поверхности, необходимого для минимизации физического контакта огнеупорных пластин и металлокерамических плат. Для этого применяются специальные технологические приемы обработки поверхности металлических пластин, предотвращающие залипание металлокерамических плат к их поверхности и обеспечивающие стабильные условия диффузии и циркуляции формир-газа в пространстве между дном платы и поверхностью металлических пластин. Последнее условие является крайне важным и определяет степень спекания металлизационных частей плат, примыкающих к поверхности металлических пластин.

Известно, что спекание металлокерамических плат проводят в туннельной печи обжига при температурах 1 500–1 600°C в среде формир-газа (азот + водород), увлажненного парами воды до температуры точки росы 15–35°C. На поверхности металлизационных частей плат под воздействием водорода и паров воды протекают гетерогенные окислительно-восстановительные реакции. При этом известно, что лимитирующими стадиями процесса восстановления окисленных частиц металла водородом являются подвод восстановителя и отвод продуктов восстановления, а лимитирующей стадией процесса окисления – скорость реакции. Вследствие этого при недостаточно развитой поверхности металлических пластин к поверхности металлизационных частей плат, расположенных на ее дне, может быть затруднен подвод водорода и отвод продуктов восстановления [2]. Тогда окислительно-восстановительное равновесие будет смещаться в сторону окисления, в отличие от поверхности металлизационных частей плат с хорошим доступом формир-газа (окислительно-восстановительное равновесие смещается в сторону восстановления). То есть при плохой фильтрации формир-газа поверхность металлизационных частей плат, примыкающих к поверхности металлических пластин, может быть сильна окислена. Помимо этого, в пористом пространстве между дном металлокерамической платы и шероховатой поверхностью металлической пластины за счет конвекции и фильтрации формир-газа должны удаляться продукты деструкции органики.

Органические вещества в объеме керамической массы и металлизационных паст разлагаются при температурах от 300 до 1 000°C. При повышении темпе-

ратуры до значений от 1 000 до 1 500°С в летучих компонентах появляются пары металла из-за его сублимации при высоких температурах. Смесь формир-газа и летучих компонентов, содержащих пары металла, поступает в пористое пространство между дном металлокерамической платы и поверхностью металлической пластины. При недостаточной фильтрации в пористом пространстве шероховатой металлической пластины под поверхностью платы возможна десублимация паров металлов в углублениях шероховатости металлической пластины. Это явление является крайне нежелательным, так как после нескольких циклов обжига металлические пластины теряют свои свойства шероховатости и становятся непригодными для использования.

В работе [3] проведены измерения коэффициента диффузии кислорода, коэффициента поверхностного обмена, диссоциативной адсорбции и скорости инкорпорации. Показано, что коэффициент диффузии кислорода увеличивается при повышении температуры и уменьшается с увеличением давления кислорода.

Решение задач вычислительной газодинамики применительно к проектированию геометрии поверхности газопроницаемой керамики рассматривается в работе [4]. Авторы приводят вычислительные данные концептуального дизайна инновационного компактного теплообменника из газовой керамики, подходящего для высокотемпературных применений.

Создание композиционных мембран возможно при моделировании пористой основы методами гидродинамики [5]. В данной работе представлены данные по проницаемости композитных мембран с верхними слоями различной толщины, нанесенными на подложку, подготовленную по общей технологии процесса инверсии фаз.

Влияние инертных частиц, расположенных на поверхности смешанной ионно / электроннопроводящей оксидной керамики, на кислородные было изучено путем численного моделирования основных транспортных процессов [6]. Показано, что реакция поверхностного обмена блокируется инертными поверхностными частицами, что приводит к выраженному эффекту сужения потока.

Внимание форме частиц уделяется при изучении кинетики кислородного обмена керамических частиц [7]. Результаты моделирования были интерпретированы с точки зрения длины трехфазной границы каталитических частиц.

По результатам обзора открытых источников целью исследований является моделирование процесса конвекции и диффузии примесей в формир-газе в пористом пространстве между дном платы и шероховатой поверхностью металлической пластины. При этом требуется определить зависимость концентрации примеси в данном пространстве от характеристик шероховатости металлической пластины.

Вывод уравнений фильтрации и переноса примесей в пространстве между пластиной и поверхностью корпуса микросхемы

Изменение температуры металлокерамической платы происходит медленно, поэтому примем, что процессы диффузии и конвекции газов происходят в изотермических условиях. На границе платы принимаются исходная концентрация формир-газа и нулевая концентрация продуктов газификации органических веществ и паров металла, так как в печи происходит вытяжка газов из объема печи.

Пространство под дном платы представляет собой пространство с определенной величиной пористости. Примем эту пористость постоянной по площади под

дном платы; высоту пористого пространства также принимаем постоянной величиной (рис. 1).

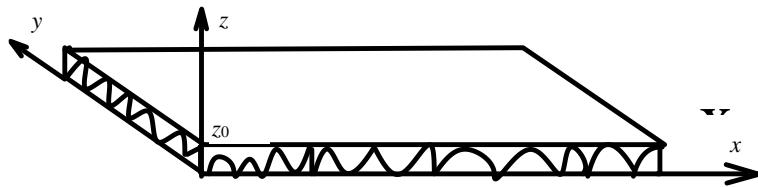


Рис. 1. Пористое пространство под металлокерамической платой, образованное шероховатой поверхностью подложки

Fig. 1. Porous space under the metal-ceramic board formed by the rough surface of the substrate

Для описания изотермического фильтрационного движения газа в пористом пространстве будем использовать модель Лейбензона [8]. Выведем уравнения фильтрации для рассматриваемого случая. Уравнение сохранения массы формир-газа в пористом пространстве с пористостью m записывается в виде:

$$m \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\operatorname{div}(\rho u), \quad (1)$$

где t – время, ρ – плотность, u – скорость, m – пористость.

В (1) скорость фильтрации определяется законом Дарси

$$u = -\frac{k}{\mu} \operatorname{grad}(p), \quad (2)$$

где p – давление, k – коэффициент фильтрации, μ – коэффициент динамической вязкости.

Скорость u – это скорость, определяемая как объемный расход газа в единицу времени через площадку, перпендикулярную направлению вектора скорости:

$$u = \frac{Q}{S_n},$$

где Q – объемный расход газа, S_n – площадь сечения пористого пространства, перпендикулярная направлению вектора скорости.

Скорость u связана с истинной скоростью движения газа U в порах пористого пространства с пористостью m соотношением

$$U = \frac{u}{m}.$$

Плотность газа ρ_0 при температуре T_0 определяется из уравнения состояния идеального газа

$$\rho_0 = \frac{P}{RT_0}. \quad (3)$$

Подставим (2), (3) в (1) и получим

$$\frac{m}{RT_0} \frac{\partial P}{\partial t} = -\operatorname{div}\left(-\frac{k}{\mu} \operatorname{grad}(p) \frac{P}{RT_0}\right). \quad (4)$$

Постоянная величина RT_0 сокращается. Учтем, что $\operatorname{grad}(p)p = \frac{1}{2}\operatorname{grad}(p^2)$ и перепишем (4) в виде:

$$m \frac{\partial p}{\partial t} = -\operatorname{div} \left(-\frac{k}{2\mu} \operatorname{grad}(p^2) \right). \quad (5)$$

В общем случае k является функцией пространственных координат $k = (x, y, z)$. Запишем уравнение (5) в декартовой системе координат в виде, в котором последнее слагаемое (производная по z) остается без преобразований вида (2)–(4):

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{k(x, y, z)}{\mu} \frac{\partial p^2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{k(x, y, z)}{\mu} \frac{\partial p^2}{\partial y} \right) \right) - \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial z} (\rho w) RT_0. \quad (6)$$

На высоте $z = z_0$ происходит выделение продуктов газификации органических веществ и паров металла со скоростью W_Δ (имеет отрицательную величину в силу направления оси z). При $z = 0$ поток массы равен нулю (см. рис. 1).

С учетом того, что ширина пористого слоя составляет десятки микрометров, а размеры изделия – десятки миллиметров, очевидно, что толщина пористого слоя много меньше его ширины и длины, поэтому проведем усреднение по толщине пористого слоя, принимая, что по толщине пористого слоя имеется однородное распределение давления. Проинтегрируем (6) по координате z от $z = 0$ до $z = z_0$:

$$\begin{aligned} \int_0^{z_0} \frac{\partial p}{\partial t} dz &= \frac{1}{2m} \int_0^{z_0} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{k(x, y, z)}{\mu} \frac{\partial p^2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{k(x, y, z)}{\mu} \frac{\partial p^2}{\partial y} \right) \right) dz - \frac{1}{m} \int_0^{z_0} \frac{\partial}{\partial z} (\rho w) RT_0 dz, \\ \int_0^{z_0} \frac{\partial p}{\partial t} dz &= \frac{\partial p}{\partial t} z_0 = \frac{\partial p}{\partial t} \Delta(x, y). \end{aligned}$$

Здесь принято обозначение $z_0 = \Delta(x, y)$. С учетом того, что толщина пористого слоя в общем случае может быть переменной по площади под металлокерамической платой, интегрирование дает следующие результаты:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2m} \int_0^{z_0} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{k(x, y, z)}{\mu} \frac{\partial p^2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{k(x, y, z)}{\mu} \frac{\partial p^2}{\partial y} \right) \right) dz = \\ &= \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{k(x, y) \Delta(x, y)}{\mu} \frac{\partial p^2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{k(x, y) \Delta(x, y)}{\mu} \frac{\partial p^2}{\partial y} \right) \right), \\ &\frac{1}{m} \int_0^{z_0} \frac{\partial}{\partial z} (\rho w) RT_0 dz = \frac{1}{m} RT_0 \rho_0 W_\Delta = \frac{1}{m} p W_\Delta. \end{aligned}$$

С учетом проведенных преобразований уравнение (6) перепишется в виде:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{2m \Delta(x, y)} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{k(x, y) \Delta(x, y)}{\mu} \frac{\partial p^2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{k(x, y) \Delta(x, y)}{\mu} \frac{\partial p^2}{\partial y} \right) \right) - \frac{W_\Delta p}{m \Delta(x, y)}. \quad (7)$$

Введем обозначение $p^2 = P$, $p = \sqrt{P}$. Преобразуем

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{2p}{2p} \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{2p} \frac{\partial p^2}{\partial t} = \frac{1}{2p} \frac{\partial P}{\partial t} = \frac{1}{2\sqrt{P}} \frac{\partial P}{\partial t}.$$

Тогда (7) перепишется в виде:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\sqrt{P}}{m\Delta(x, y)} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{k(x, y)\Delta(x, y)}{\mu} \frac{\partial P}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{k(x, y)\Delta(x, y)}{\mu} \frac{\partial P}{\partial y} \right) \right) - \frac{2W_\Delta P}{m\Delta(x, y)}. \quad (8)$$

В изотермических условиях вязкость принимаем постоянной.

Для металлической пластины принимаем $k(x, y)$ и $\Delta(x, y)$ постоянными, тогда (8) перепишется в виде:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{k\sqrt{P}}{m\mu} \left(\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} \right) - \frac{2W_\Delta P}{m\Delta(x, y)}. \quad (9)$$

Для решения уравнения (9) необходимо поставить начальные и граничные условия.

Запишем уравнение конвекции и диффузии продуктов сублимации металлов в пористом пространстве под металлокерамической платой. Примем, что формир-газ, содержащий пары металла, является двухкомпонентным (формир-газ и пары металла как примесь в газе).

Введем величину массовой концентрации примесей в формир-газе

$$Y(x, y, z, t) = \frac{\rho_a(x, y, z, t)}{\rho_0},$$

где ρ_a – парциальная плотность примесей в газе.

На высоте $z = z_0$ происходит выделение продуктов газификации органических веществ и паров металла со скоростью W_Δ и концентрацией $Y(x, y, z_0, t) = Y_0$. Максимальное значение относительной концентрации примесей имеется в потоке газов от поверхности металлокерамической платы $Y_0(x, y, z_0, t) = \frac{\rho_a(x, y, z_0, t)}{\rho_0}$.

Величина Y_0 принимается постоянной по всей нижней поверхности металлокерамической платы, лежащей на металлической пластине. W_Δ имеет отрицательную величину в силу направления оси z . При $z = 0$ поток массы равен нулю.

Уравнение сохранения массы примесей в пористом пространстве с учетом конвективного и диффузионного переноса имеет вид:

$$\frac{\partial \rho_a}{\partial t} + \frac{\partial \rho_a U}{\partial x} + \frac{\partial \rho_a V}{\partial y} + \frac{\partial \rho_a W}{\partial z} = D\rho_0 \left(\frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 Y}{\partial z^2} \right). \quad (10)$$

Перепишем (10) в виде:

$$\frac{\partial Y\rho_0}{\partial t} + \frac{\partial Y\rho_0 U}{\partial x} + \frac{\partial Y\rho_0 V}{\partial y} + \frac{\partial Y\rho_0 W}{\partial z} = D\rho_0 \left(\frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 Y}{\partial z^2} \right). \quad (11)$$

Уравнение сохранения массы формир-газа в пористом пространстве запишется в виде:

$$\frac{\partial \rho_0}{\partial t} + \frac{\partial \rho_0 U}{\partial x} + \frac{\partial \rho_0 V}{\partial y} + \frac{\partial \rho_0 W}{\partial z} = 0. \quad (12)$$

С учетом (12) уравнение (11) перепишется в виде:

$$\rho_0 \frac{\partial Y}{\partial t} + \rho_0 U \frac{\partial Y}{\partial x} + \rho_0 V \frac{\partial Y}{\partial y} + \rho_0 W \frac{\partial Y}{\partial z} = D\rho_0 \left(\frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 Y}{\partial z^2} \right).$$

После сокращения на ρ_0 получим:

$$\frac{\partial Y}{\partial t} + U \frac{\partial Y}{\partial x} + V \frac{\partial Y}{\partial y} + W \frac{\partial Y}{\partial z} = D \left(\frac{\partial^2 Y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 Y}{\partial z^2} \right). \quad (13)$$

Разделим (13) на постоянную величину Y_0 и введем обозначение $c(x, y, z, t) = \frac{Y(x, y, z, t)}{Y_0}$, тогда уравнение (13) запишется в виде:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + U \frac{\partial c}{\partial x} + V \frac{\partial c}{\partial y} + W \frac{\partial c}{\partial z} = D \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right). \quad (14)$$

Проведем осреднение по толщине пористого слоя. Проинтегрируем (14) по координате z от $z = 0$ до $z = z'_0$, $z'_0 = z_0 m$:

$$\begin{aligned} & \int_0^{z'_0} \frac{\partial c}{\partial t} dz + \int_0^{z'_0} \left(U \frac{\partial c}{\partial x} + V \frac{\partial c}{\partial y} + W \frac{\partial c}{\partial z} \right) dz = \int_0^{z'_0} \left(D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) dz. \quad (15) \\ & \int_0^{z'_0} \frac{\partial c}{\partial t} dz = z'_0 \frac{\partial c}{\partial t} = z_0 m \frac{\partial c}{\partial t} = \Delta(x, y) m \frac{\partial c}{\partial t}. \\ & \int_0^{z'_0} \left(U \frac{\partial c}{\partial x} + V \frac{\partial c}{\partial y} + W \frac{\partial c}{\partial z} \right) dz = \Delta(x, y) m U \frac{\partial c}{\partial x} + \Delta(x, y) m V \frac{\partial c}{\partial y} + W_\Delta c_0. \\ & \int_0^{z'_0} \left(D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) dz = \Delta(x, y) m D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \Delta(x, y) m D \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \left(D \frac{\partial c}{\partial z} \Big|_{z_0} - 0 \right). \end{aligned}$$

После интегрирования уравнение (14) перепишется в виде:

$$\begin{aligned} & \Delta(x, y) m \frac{\partial c}{\partial t} + \Delta(x, y) m U \frac{\partial c}{\partial x} + \Delta(x, y) m V \frac{\partial c}{\partial y} = \\ & = \Delta(x, y) m D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \Delta(x, y) m D \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \left(D \frac{\partial c}{\partial z} \Big|_{z_0} - 0 \right) - W_\Delta c_0. \end{aligned}$$

Принимаем, что $D \frac{\partial c}{\partial z} \Big|_{z_0} = 0$, так как по оси z проведено осреднение, получим

$$\begin{aligned} & \Delta(x, y) m \frac{\partial c}{\partial t} + \Delta(x, y) m U \frac{\partial c}{\partial x} + \Delta(x, y) m V \frac{\partial c}{\partial y} = \\ & = \Delta(x, y) m D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \Delta(x, y) m D \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} - W_\Delta c_0, \end{aligned}$$

или

$$\frac{\partial c}{\partial t} + U \frac{\partial c}{\partial x} + V \frac{\partial c}{\partial y} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} - \frac{W_\Delta c_0}{m \Delta(x, y)}. \quad (16)$$

Таким образом, система уравнений (9) и (16) описывает процессы фильтрации газовой смеси с учетом диффузии компонентов газовой смеси в пористом пространстве шероховатой металлической пластины с установленной сверху заготовкой корпуса микросхемы при его термической обработке в печи.

Математическая постановка задачи о переносе примесей в пространстве между пластиной и поверхностью металлокерамической платы

Система уравнений (9) и (16) описывает процессы фильтрации газовой смеси с учетом диффузии компонентов газовой смеси в пористом пространстве между поверхностями шероховатой металлической пластины и поверхностью металлокерамической платы. Для получения однозначного решения этой системы уравнений необходимо поставить начальные и граничные условия. Тогда математическая постановка задачи принимает вид:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{k\sqrt{P}}{m\mu} \left(\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} \right) - \frac{2W_\Delta P}{m\Delta(x, y)}, \quad (17)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + U \frac{\partial c}{\partial x} + V \frac{\partial c}{\partial y} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} - \frac{W_\Delta c_0}{m\Delta(x, y)}, \quad (18)$$

$$U = \frac{u}{m}, \quad u = -\frac{k}{\mu} \frac{\partial p}{\partial x}, \quad (19)$$

$$V = \frac{v}{m}, \quad v = -\frac{k}{\mu} \frac{\partial p}{\partial y}. \quad (20)$$

Начальные условия:

$$P(x, y, 0) = p_0^2, \quad c(x, y, 0) = 0, \quad (21)$$

границные условия:

$$P(x_{rp}, y_{rp}, t) = p_0^2, \quad c(x_{rp}, y_{rp}, t) = 0. \quad (22)$$

$$c_0 = 1.$$

В системе уравнений (17) – (20) уравнение (17) – уравнение фильтрации газа, (18) – уравнение конвекции и диффузии примеси в газе, (19) и (20) – уравнения для определения скорости фильтрации газа в направлениях декартовой системы координат.

Начальные условия соответствуют атмосферному давлению в пористом пространстве и отсутствию примесей в формир-газе.

Граничные условия соответствуют атмосферному давлению на границе зазора между дном металлокерамической платы и шероховатой металлической пластины по периметру платы и отсутствию примесей в газе, так как проводится вентилирование объема печи.

Задача (17)–(22) решается численно методом продольно-поперечной прогонки [8–13]. Расчет проводится до установления стационарных значений распределения давления и концентраций.

Тестирование программы ЭВМ расчета переноса примесей в пространстве между пластиной и поверхностью платы проводилось на выполнимость закона сохранения массы примесей в пространстве под металлокерамической платой. С поверхности корпуса микросхемы приходит относительная масса примесей

$$Q_{in} = c_0 \cdot W_\Delta \cdot L_x \cdot L_y.$$

Со всех границ в окружающее пространство выходит относительная масса примесей

$$Q_{out} = \int_0^{L_y} \left(-c(0, y) \cdot U(0, y) + D \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=0} + c(L_x, y) \cdot U(L_x, y) - D \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x=L_x} \right) dy + \\ + \int_0^{L_x} \left(-c(x, 0) \cdot V(x, 0) + D \frac{\partial c}{\partial y} \Big|_{y=0} + c(x, L_y) \cdot U(x, L_y) - D \frac{\partial c}{\partial y} \Big|_{x=L_y} \right) dx.$$

В стационарном состоянии выполняется равенство

$$Q_{in} = Q_{out}. \quad (23)$$

В численном решении равенство (23) выполняется с точностью 95–97% в зависимости от толщины пористого пространства.

Расчеты были проведены для модельного образца металлокерамической платы с размерами: длина и ширина корпуса микросхемы $L_x = 0.02$ м, $L_y = 0.02$ м. В качестве исходных данных для расчета задавалась вязкость формир-газа при температуре 1 000°C $\mu = 53.5 \cdot 10^{-5}$ Па·с, пористость пространства под металлокерамической платой $m = 0.85$, давление газа $p = 101\,230$ Па, коэффициент диффузии $D = 1.36 \cdot 10^{-4}$ м²/с, скорость газа $W_\Delta = 0.1 \cdot 10^{-3}$ м/с.

Коэффициент проницаемости зависит от геометрических характеристик пористой среды. Для определения величины коэффициента проницаемости будем использовать формулу Козени–Кармана

$$k = \frac{d^2 m^3}{(1-m)^2}, \quad (24)$$

где d – характерный размер пор, вычисляется как отношение объема пористого тела к площади поверхности пор.

Коэффициент проницаемости, рассчитанный по формуле (24), $k = 1.69 \cdot 10^{-8}$ м².

Расчеты проведены для трех значений толщины пористого пространства: $\Delta = 60 \cdot 10^{-6}$ м, $\Delta = 30 \cdot 10^{-6}$ м, $\Delta = 120 \cdot 10^{-6}$ м.

Результаты расчетов переноса примесей в пространстве между пластиной и поверхностью металлокерамической платы

На рис. 2–4 представлены стационарные поля давления, концентрации паров металлов и модуля скорости движения смеси газов в пористом пространстве между шероховатой пластиной и поверхностью корпуса микросхемы. Рисунки построены для ряда значений толщины пористого пространства по мере ее уменьшения. Когда толщина пористого пространства большая, избыточное давление в пористом пространстве небольшое, скорости движения газовой смеси невысокие, относительная концентрация паров металла невысокая (см. рис. 2). При уменьшении толщины пористого пространства (см. рис. 3, 4) наблюдаются увеличение избыточного давления в пористом пространстве, увеличение скорости движения газа и увеличение относительной концентрации паров металла. В таблице представлены максимальные величины относительной концентрации паров металла при заданных значениях толщины пористого пространства. Видно, что при $\Delta = 120 \cdot 10^{-6}$ м она невелика: 0.22, при $\Delta = 60 \cdot 10^{-6}$ м имеет величину 0.48, а при $\Delta = 30 \cdot 10^{-6}$ м становится близкой к 1. Это указывает на то, что при дальнейшем уменьшении толщины пористого слоя в центральной части пористого пространства может начаться десублимация паров металла на шероховатую поверхность металлической пластины,

а также прекращение сублимации металла с поверхности металлокерамической платы. В этом случае, если металл находится во внутренних слоях платы, при сублимации он диффундирует к ее поверхности и будет оставаться там.

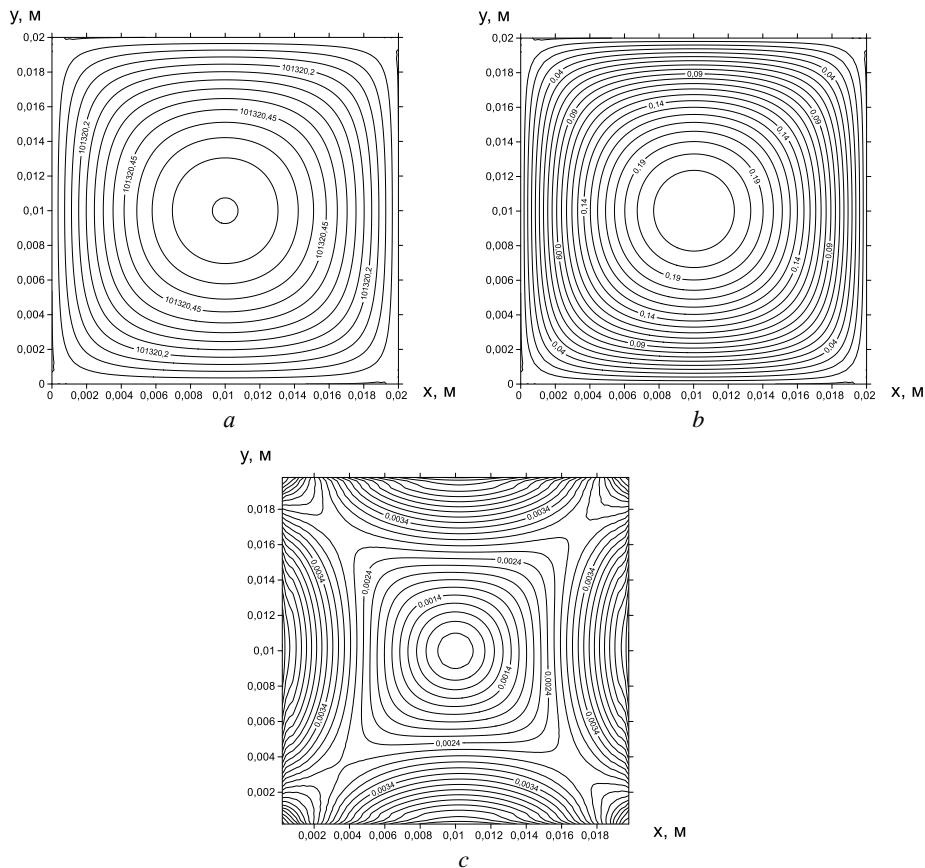


Рис. 2. Стационарное поле давления (*a*), относительной концентрации паров примесей (*b*), скорости течения газа (*c*) в пористом пространстве между металлической пластиной и поверхностью металлокерамической платы ($\Delta = 120 \cdot 10^{-6}$ м)

Fig. 2. Field of the (*a*) stationary pressure, (*b*) relative concentration of the impurity vapors, and (*c*) gas flow velocity in the porous space between the metal plate and the surface of the metal-ceramic board ($\Delta = 120 \cdot 10^{-6}$ m)

Максимальные значения относительной концентрации паров металлов в пористом пространстве между шероховатой пластиной и поверхностью металлокерамической платы

Δ , мкм	C_{\max}
120	0.22
60	0.48
30	0.97

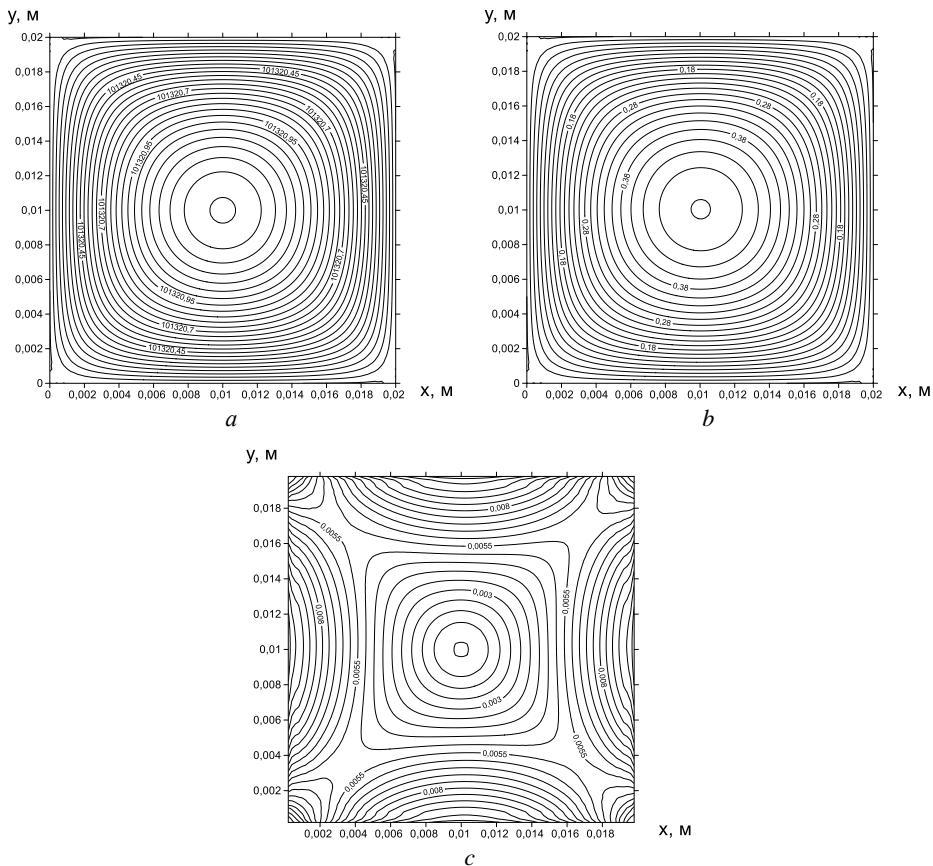


Рис. 3. Стационарное поле давления (*a*), относительной концентрации паров примесей (*b*), скорости течения газа (*c*) в пористом пространстве между металлической пластины и поверхностью металлокерамической платы ($\Delta = 60 \cdot 10^{-6}$ м)

Fig. 3. Field of the (*a*) stationary pressure, (*b*) relative concentration of the impurity vapors, and (*c*) gas flow velocity in the porous space between the metal plate and the surface of the metal-ceramic board ($\Delta = 60 \cdot 10^{-6}$ m)

В математической модели (17)–(22) не учитывается процесс десублимации паров металла, поэтому в расчетах при дальнейшем уменьшении толщины пористого слоя могут получиться значения относительной концентрации паров металла больше 1, что указывает на то, что создается перенасыщение формир-газа парами металла, и в этом случае, из физики процесса, должна начаться десублимация паров металла.

Проведем некоторые оценки процесса конвекции и диффузии в пористом пространстве между металлической пластины и поверхностью металлокерамической платы.

Процесс выхода примесей и паров металла из пористого пространства определяется скоростью движения газа в этом пространстве, которая, в свою очередь, определяется скоростным напором выделяющихся из объема металлокерамической

платы летучих компонентов – паров металла при его сублимации. При фиксированной температуре скорость сублимации одинакова (одинакова величина W_Δ). С увеличением толщины пористого слоя (при одинаковой пористости) увеличивается площадь проходного сечения для протекания газа, поэтому скорость течения газа уменьшается. Разбавление летучих компонентов в пористом пространстве происходит диффузией формир-газа с границы от периметра платы. Диффузия происходит навстречу конвективного движения газа. Поэтому при высокой скорости течения газа из пористого пространства формир-газ за счет диффузии с границ пористого пространства не успевает «разбавить» летучие компоненты (пары металла) в пористом пространстве. При увеличении толщины пористого слоя скорость течения газа уменьшается, и за счет встречной диффузии происходит разбавление выделяющихся из объема платы летучих компонентов.

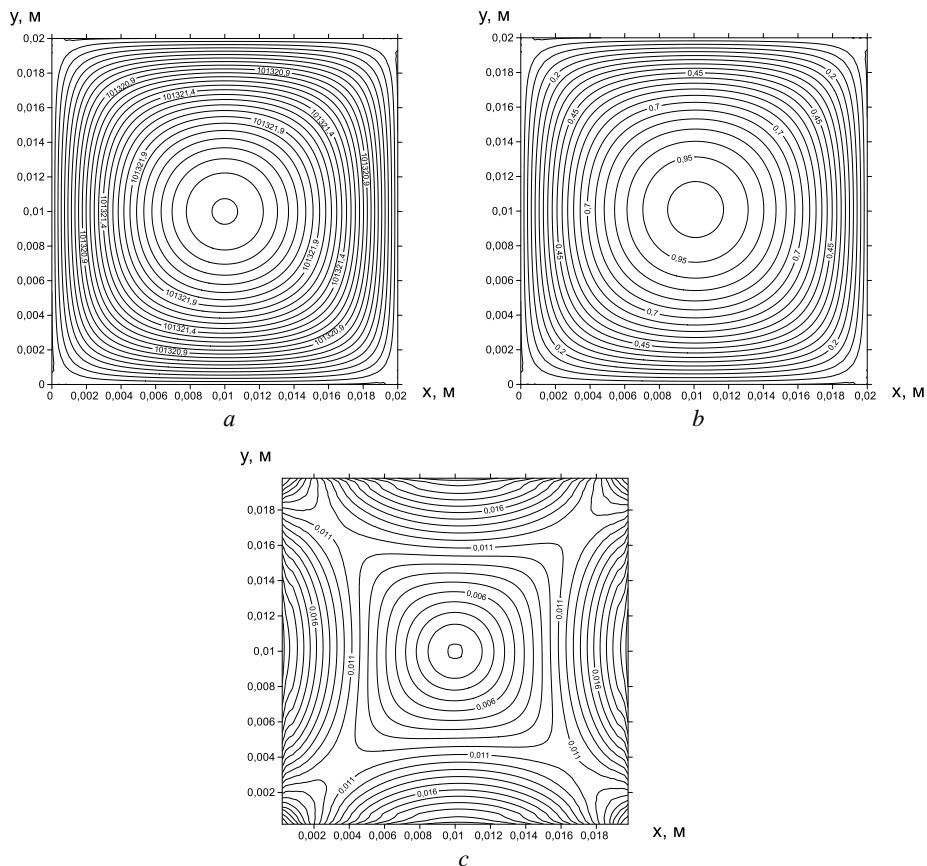


Рис. 4. Стационарное поле давления (*a*), относительной концентрации паров примесей (*b*), скорости течения газа (*c*) в пористом пространстве между металлической пластиной и поверхностью металлокерамической платы ($\Delta = 30 \cdot 10^{-6} \text{ м}$)

Fig. 4. Field of the (a) stationary pressure, (b) relative concentration of the impurity vapors, and (c) gas flow velocity in the porous space between the metal plate and the surface of the metal-ceramic board ($\Delta = 30 \cdot 10^{-6}$ m)

С площади поверхности дна заготовки корпуса микросхемы выделяется газ со скоростью $W_\Delta = 0.1 \cdot 10^{-3}$ м/с. В стационарном процессе через зазор толщиной Δ этот газ вытекает в окружающее пространство. Соблюдается равенство объемных потоков газа $Q_{in} = Q_{out}$, где $Q_{in} = L_x \cdot L_y \cdot |W_\Delta|$, $Q_{out} = (2L_x + 2L_y) \cdot \Delta \cdot |V|$. Подставляя числовые значения? определяем величину скорости $|V|$ на выходе из зазора: при $\Delta = 30 \cdot 10^{-6}$ м $|V| = 0.016$ м/с, при $\Delta = 60 \cdot 10^{-6}$ м $|V| = 0.008$ м/с, при $\Delta = 120 \cdot 10^{-6}$ м $|V| = 0.004$ м/с. Пренебрегая переменностью скорости газа по траектории от центра дна платы до границы, оценим время движения элементарного объема газа на расстояние $L_x/2$ (характерное время фильтрации, $t_g^* = \frac{L_x/2}{|V|}$). При $\Delta = 30 \cdot 10^{-6}$ м это время составляет 0.625 с, при $\Delta = 60 \cdot 10^{-6}$ м 1.25 с, при $\Delta = 120 \cdot 10^{-6}$ м 2.5 с. Навстречу этому потоку имеется диффузионный поток формир-газа. Характерное время распространения диффузии на расстояние $L_x/2$ определяется соотношением $t_D^* = \frac{(L_x/2)^2}{D}$. Подставляя числовые значения определяем $t_D^* = 0.735$ с. Очевидно, что если характерное время диффузии t_D^* больше характерного времени фильтрации t_g^* ($t_D^* > t_g^*$), то летучие компоненты (пары металла при его сублимации) будут накапливаться в пористом пространстве металлической пластины под дном платы. Если $t_D^* \leq t_g^*$, то за счет взаимной диффузии формир-газ успевает проникнуть к центру пористого пространства, летучие компоненты успевают выводиться в окружающее пространство.

Как видно из результатов расчетов, представленных на рисунках 2-4, при $\Delta = 60 \cdot 10^{-6}$ м летучие компоненты не накапливаются в пористом пространстве металлической пластины под дном металлокерамической платы. Как показывают оценки характерных времен, в этом случае выполняется соотношение $t_D^* \leq t_g^*$.

Заключение

Необходимо отметить, что приведенные математические модели позволяют определить характер взаимодействия формир-газа с нижней частью платы в зависимости от шероховатости поверхности металлических пластин. Но в реальных условиях обжига лицевая сторона металлокерамических плат также остается закрытой специальными керамическими грузами, которые размещаются поверх плат во избежание попадания и дальнейшего припекания на поверхности плат каких-либо загрязнений, а также позволяют подавить неоднородность усадочных деформаций платы во время спекания. При этом между лицевой поверхностью платы и керамическим грузом также создается пористое пространство, которое должно обеспечивать равномерный прогрев заготовок, равномерный газообмен в виде удаления продуктов деструкции органики и подачу восстановительной азотно-водородной среды к поверхности металлизационных частей плат, размещенных на их лицевой стороне.

В связи с этим в плане дальнейших исследований представляет большой интерес проведение численного моделирования процесса выхода образующихся при обжиге заготовок корпусов микросхем летучих компонентов, когда заготовка

лежит на шероховатой поверхности металлической пластины и прикрыта сверху керамической пластинкой-грузиком также с заданной шероховатостью.

Список источников

1. Ермолов Е.В. Структурно-фазовое состояние вольфрамовых межслойных переходов и его влияние на механические характеристики металлокерамических плат: дис. канд. техн. наук. Томск, 2024. 152 с.
2. Афонов О.Н. Влияние конструктивных и технологических факторов на коррозию металлокерамических корпусов интегральных схем: дис. канд. техн. наукв. Йошкар-Ола, 2005. 152 с.
3. Porotnikova N., Zakharov D., Khodimchuk A., Kurumchin E., Osinkin D. Determination of kinetic parameters and identification of the rate-determining steps in the oxygen exchange process for LaNi_{0.6}Fe_{0.4}O_{3-d} // Int. J. Mol. Sci. 2023. V. 24. Art. 13013. doi: 10.3390/ijms241613013
4. Zavattini S.A., Cornolti L., Puragliesi R., Arrivabeni E., Ortona A., Barbato M.C. Conceptual design of an innovative gas–gas ceramic compact heat exchanger suitable for high temperature applications // Heat and Mass Transfer. 2024. V. 60. P. 1979–1990. doi:10.1007/s00231-022-03284-1
5. Hao P., Wijmans J.G., He Z., White L.S. Effect of pore location and pore size of the support membrane on the permeance of composite membranes // Journal of Membrane Science. 2020. V. 594. Art. 117465. doi: 10.1016/j.memsci.2019.117465
6. Preis W. Modeling of oxygen exchange of oxide ceramics: effect of inert particles at the surface // Journal of Solid State Electrochemistry. 2019. V. 23. P. 1089–1097 doi: 10.1007/s10008-019-04200-0
7. Preis W. Modeling the effect of spill-over on oxygen exchange kinetics of oxide ceramics covered by catalytically active surface particles // Journal of Solid State Electrochemistry. V. 29. P. 2849–2857. doi: 10.1007/s10008-024-06186-w
8. Леонтьев Н.Е. Основы теории фильтрации: учебное пособие. 2-е изд. М.: МАКС Пресс, 2017. 88 с.
9. Пасконов В.М., Полежаев В.И., Чудов Л.А. Численное моделирование процессов тепломассообмена. М.: Наука, 1984. 288 с.
10. Самарский А.А. Теория разностных схем. М.: Наука, 1977. 388с.
11. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. М.: Наука, 1971. 552 с.
12. Крайнов А.Ю., Миньков Л.Л. Численные методы решения задач тепло- и массопереноса: учеб. пособие. Томск: СТТ, 2016. 92 с.
13. Rimar M., Yeromin O., Larionov G., Kulikov A., Fedak M., Krenicky T., Gupalo O., Myanovskaya Y. Method of sequential approximation in modelling the processes of heat transfer and gas dynamics in combustion equipment. Appl. Sci. 2022. V. 12. Art. 11948. doi: 10.3390/app122311948.

References

1. Ermolaev E.V. (2024) *Strukturno-fazovoe sostoyanie volframovykh mezhsloynykh perekhodov i ego vliyanie na mekhanicheskie kharakteristiki metallokeramicheskikh plat* [Structure-phase state of tungsten interlayer transitions and its influence on the mechanical characteristics of ceramic-metal boards]. Dissertation. Tomsk.
2. Afonov O.N. (2005) *Vliyanie konstruktivnykh i tekhnologicheskikh faktorov na korroziyu metallokeramicheskikh korpusov integral'nykh skhem* [Influence of the design and technological factors on the corrosion of the metal-ceramic cases of the integrated circuits]. Dissertation. Yoshkar-Ola.
3. Porotnikova N., Zakharov D., Khodimchuk A., Kurumchin E., Osinkin D. (2023) Determination of kinetic parameters and identification of rate-determining stages in the oxygen exchange

- process for LaNi0.6Fe0.4O3-d. *International Journal of Molecular Sciences*. 24. Article 13013. doi: 10.3390/ijms241613013
- 4. Zavatttoni S.A., Cornolti L., Puragliesi R., Arrivabeni E., Ortona A., Barbato M.C. (2024) Conceptual design of an innovative gas-gas ceramic compact heat exchanger suitable for high temperature applications. *Heat and Mass Transfer*. 60. pp. 1979–1990. doi: 10.1007/s00231-022-03284-1
 - 5. Hao P., Wijmans J.G., He Z., White L.S. (2020) Influence of pore location and pore size of the support membrane on the permeability of composite membranes. *Journal of Membrane Science*. 594. Article 117465. doi: 10.1016/j.memsci.2019.117465
 - 6. Preiss W. (2019) Modeling of oxygen exchange of oxide ceramics: influence of inert particles on the surface. *Journal of Solid State Electrochemistry*. 23. pp. 1089–1097. doi: 10.1007/s10008-019-04200-0
 - 7. Preiss W. (2025) Modeling the influence of spillover on the oxygen exchange kinetics of oxide ceramics coated with catalytically active surface particles. *Journal of Solid State Electrochemistry*. 29. pp. 2849–2857. doi: 10.1007/s10008-024-06186-w
 - 8. Leontiev N.E. (2017) *Osnovy teorii fil'tratsii: uchebnoe posobie* [Fundamentals of filtration theory: textbook]. Moscow: MAKS Press.
 - 9. Paskonov V.M., Polezhaev V.I., Chudov L.A. (1984) *Chislennoe modelirovaniye protsessov teplo-massoobmena* [Numerical modeling of heat and mass transfer processes]. Moscow: Nauka.
 - 10. Samarskiy A.A. (1977) *Teoriya raznostnykh skhem* [Theory of difference schemes]. Moscow: Nauka.
 - 11. Samarskiy A.A. (1971) *Vvedenie v teoriyu raznostnykh skhem* [Introduction to the theory of difference schemes]. Moscow: Nauka.
 - 12. Kraynov A.Yu., Min'kov L.L. (2016) *Chislennye metody resheniya zadach teplo- i massoobmena: uchebnoe posobie* [Numerical methods for solving problems of heat and mass transfer: textbook]. Tomsk: STT.
 - 13. Rimar M., Eromin O., Larionov G., Larionov G., Kulikov A., Fedak M., Krenitsky T., Gupalo O., Myanovskaya Yu. (2022) Method of sequential approximation in modeling of heat transfer and gas dynamics processes in furnace equipment. *Applied Sciences*. 12. Article 11948. doi: 10.3390/app122311948

Сведения об авторах:

Жуков Илья Александрович – доктор технических наук, доцент, заведующий лабораторией нанотехнологий металлургии Томского государственного университета (Томск, Россия). E-mail: zhukoviatsu@yandex.ru

Крайнов Алексей Юрьевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой математической физики Томского государственного университета (Томск, Россия). E-mail: akrainov@ftf.tsu.ru

Моисеева Ксения Михайловна – доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры математической физики Томского государственного университета (Томск, Россия). E-mail: moiseeva_km@t-sk.ru

Ермоляев Евгений Валерьевич – кандидат технических наук, заместитель главного конструктора по новым разработкам АО «Завод полупроводниковых приборов» (Йошкар-Ола, Россия); старший преподаватель Мариинского государственного университета (Йошкар-Ола, Россия). E-mail: ermolaev_ev@zpp12.ru

Егошин Валерий Алексеевич – заместитель главного конструктора по материалам АО «Завод полупроводниковых приборов» (Йошкар-Ола, Россия); старший преподаватель Мариинского государственного университета (Йошкар-Ола, Россия); аспирант Томского государственного университета (Томск, Россия). E-mail: vaegoshin@zpp12.ru

Шугаев Шамиль Наилевич – директор по развитию АО «Завод полупроводниковых приборов» (Йошкар-Ола, Россия); старший преподаватель Мариинского государственного

университета (Йошкар-Ола, Россия), аспирант Томского государственного университета (Томск, Россия). E-mail: shnshugaepov@zpp12.ru

Ахметгалиев Равил Шамилевич – главный технолог АО «Завод полупроводниковых приборов» (Йошкар-Ола, Россия), аспирант Томского государственного университета (Томск, Россия), e-mail: rshahmetgaliev@zpp12.ru.

Information about the authors:

Zhukov Il'ya A. (Doctor of Technical Sciences, Associate Professor, Head of Laboratories of Nanotechnology in Metallurgy, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: zhukoviatsu@yandex.ru

Krainov Aleksey Yu. (Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: akrainov@ftf.tsu.ru

Moiseeva Kseniya M. (Doctor of Physics and Mathematics, Associate Professor, Professor, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: moiseeva_km@t-sk.ru

Ermolaev Evgeniy V. (Deputy Chief Designer for New Developments, JSC Semiconductor Devices Plant, Yoshkar-Ola, Russian Federation; Senior Lecturer, Mari State University, Yoshkar-Ola, Russian Federation). E-mail: ermolaev_ev@zpp12.ru

Egoshin Valeriy A. (Deputy Chief Designer for Materials, JSC Semiconductor Devices Plant, Yoshkar-Ola, Russian Federation; Senior Lecturer, Mari State University, Yoshkar-Ola; Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: vaegoshin@zpp12.ru

Shugaev Shamil' N. (Development Director, JSC Semiconductor Devices Plant, Yoshkar-Ola, Russian Federation; Senior Lecturer, Mari State University, Yoshkar-Ola; Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: shnshugaepov@zpp12.ru

Akhmetgaliev Ravil' Sh. (Chief Technologist, JSC Semiconductor Devices Plant, Yoshkar-Ola, Russian Federation; Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: rshahmetgaliev@zpp12.ru.

Статья поступила в редакцию 27.02.2025; принята к публикации 06.09.2025

The article was submitted 27.02.2025; accepted for publication 06.09.2025