

**Институт физики имени академика Ж.Жеенбаева Национальной
Академии наук Кыргызской Республики и Кыргызско-Российский
Славянский университет имени первого президента России Б.Н.Ельцина**

Диссертационный совет Д.01.21.633

На правах рукописи
УДК: 621.762

Ласанху Керим Арсаевич

**Физико-химические свойства керамокомпозиционных материалов на
основе шламовых отходов кремния**

01.04.07 - физика конденсированного состояния

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Бишкек - 2021

Работа выполнена в лаборатории «Порошковых материалов» Института физики им. академика Ж.Жеенбаева Национальной академии наук Кыргызской Республики.

Научный руководитель (консультант): Касмамытов Нурбек Кыдырмышевич доктор физико-математических наук, профессор, Институт физики им. академика Ж.Жеенбаева Национальной академии наук Кыргызской Республики, заместитель директора по научной работе;

Официальные оппоненты: Ташполотов Ысламедин доктор физико-математических наук, профессор ОшГУ, г. Ош, ул. Ленина, 331;
Утемисов Касымкул кандидат физико-математических наук, доцент Кыргызского Национального университета им. Ж.Баласагына кафедра физики, факультет физики и электроники.

Ведущая (оппонирующая) организация: Восточно-Казахстанский Государственный Университет имени Сарсена Аманжолова, Республика Казахстан, г. Усть-Каменогорск, ул. 30-й Гвардейской дивизии, 34, почтовый индекс 070020, e-mail: kense@vkgu.kz

Защита диссертации состоится «21» октября 2021 года в 14:00 часов на заседании диссертационного совета Д.01.21.633 по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук при Институте физики им. академика Ж.Жеенбаева Национальной академии наук Кыргызской Республики и Кыргызско-Российского Славянского университета им.Б.Ельцина по адресу: г. Бишкек, 720071, пр. Чуй 265-а. Институт физики НАН КР, тел.:(0312) 39-18-67 Идентификационный код онлайн трансляции защиты диссертации в zoom-webinar: http://vc.vac.kg/b/d_0-pj7-m6b-mev.

С диссертацией можно ознакомиться в Центральной научной библиотеке Национальной академии наук Кыргызской Республики г. Бишкек, 720071, Чуйский проспект 265-а, гл. корпус и в библиотеке Кыргызского-Российского Славянского университета ул. Киевская 44

Автореферат разослан «_____» _____ 2021 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
д. ф.-м.н., профессор

Н.К. Касмамытов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы диссертации. В настоящее время нитридокремниевые материалы находят широкое применение в различных отраслях промышленности. В связи с этим изучение физико-химических свойств керамических материалов на основе нитрида и карбонитрида кремния является актуальным. В настоящее время создаются новые производства керамических материалов, требующие изучения целого комплекса свойств, таких как физико-механические, физико-химические и термические свойства. Данные нитридокремниевые материалы являются самыми перспективными керамокомпозиционными материалами (ККМ). В работах д.ф.-м.н., профессора Касмамытова Н.К., д.ф.-м.н., профессора Макарова В.П. подробно описана технология, структура, термомеханические свойства ККМ на основе шламового отхода кремниевого производства, но недостаточно глубоко изучено физико-химические свойства и кинетика реакционного синтеза нитридокремниевых материалов.

В литературных источниках отсутствуют какие-либо данные об исследовании посвященных химической устойчивости ККМ синтезированных на основе мелкодисперсных отходов полупроводникового производства кремния. Нет так же в научных трудах предшественников теоретических и модельно-математических исследований реакционного синтеза нитридокремниевых материалов в среде азота. **Актуальность** работы напрямую связана с возможностью применения полученных научных результатов на практике, а также способствующий развитию физического материаловедения в направлении создания новых керамокомпозиционных материалов на основе карбонитридных, оксинитридных и нитридных керамик.

Связь темы диссертации с крупными научными проектами и научно-исследовательскими работами. Научная диссертационная работа выполнялась по линии госбюджета в рамках научно-исследовательских работ, утвержденных Президиумом НАН КР, согласно планам НИР Института физики им. академика Ж.Жеенбаева НАН КР в лаборатории «Порошковых материалов».

Объект исследования – керамокомпозиционные нитридокремниевые материалы, полученные методом реакционного синтеза из отходов полупроводниковой кремниевой промышленности, в частности Кыргызского химико-металлургического завода «Астра» п.г.т. Орловка.

Предмет исследования – физико-химические свойства и процессы, протекающие при воздействии агрессивной среды на керамокомпозиционные нитридокремниевые материалы и изучение кинетики реакционного синтеза кремния в среде азота путем разработки одномерной математической модели.

Цель и задачи исследования. Целью диссертационной работы является изучение физико-химических свойств реакционно-синтезированных ККМ на основе нитрида кремния в различных агрессивных средах и определение оптимальных условий реакционного синтеза через построение одномерной математической модели.

Поставленная **цель** достигалась решением следующих **задач**:

1. Получить методом реакционного синтеза различные опытные образцы ККМ на основе ультрадисперсных отходов полупроводникового производства кремния в среде азота и метана при различных температурных режимах спекания.
2. Исследовать физико-химическую устойчивость в различных концентрированных кислотах и щелочах опытных синтезированных ККМ.
3. Рассчитать методом равностороннего концентрационного треугольника Гиббса-Розебома фазовый состав полученных опытных образцов ККМ.
4. Изучить кинетику реакционного синтеза нитридокремниевых образцов и определить оптимальное условие их получения при реакционном синтезе с помощью одномерной математической модели.
5. Определить область применения синтезированных керамокомпозиционных материалов в различных областях промышленности Кыргызской Республики.

Научная новизна полученных результатов:

1. Впервые получен из полидисперсного отхода кремния композиционный керамический материал с фазой Si-SiC-C в среде метана.
2. Определены параметры физико-химической стойкости, полученных ККМ путем реакционного синтеза отходов полупроводниковой промышленности в среде азота.
3. Рассчитан с помощью метода Гиббса-Розебома фазовый и химический состав полученных керамокомпозиционных нитридокремниевых материалов реакционно-синтезированных в среде азота.
4. Разработана одномерная математическая модель реакционного спекания ультрадисперсного порошка кремния в среде азота.

Достоверность результатов обеспечено использованием современных проверенных метода исследований в частности рентгеноструктурного и рентгенофазового анализа, электронная микроскопия с микрорентгеноспектральным анализом, аппроксимации дифференциальных уравнений и итерационного метода их решения, а также подтверждающейся удовлетворительной корреляцией с ранее известными и полученными данными эксперимента и с результатами расчетов других авторов. При измерениях физических величин были учтены различные возникающие источники погрешности – инструментальные, статистические, случайные, косвенные, а

также методические и субъективные при определении химической устойчивости в агрессивных средах и химического состава методом концентрационного треугольника Гиббса-Розебома, определения кинетики и расчета реакционного синтеза ККМ с помощью одномерной математической модели.

Практическая значимость полученных результатов.

1. Впервые проведен синтез в среде метана керамокомпозиционных материалов с добавлением графитовых волокон на основе производственных отходов полупроводниковой промышленности КХМЗ «Астра», Кыргызстан.
2. Промышленные полупроводниковые отходы перспективны в получении керамических материалов путём синтеза различных ККМ на основе нитридокремния, оксинитрида кремния и карбонитрида кремния.
3. Реакционно-синтезированные ККМ обладают повышенной физико-химической стойкостью к агрессивным средам.

На основе результатов исследования получено авторское свидетельство на изобретение керамокомпозиционного материала, зарегистрированного Кыргызпатентом «Способ получения керамического композиционного материала из отходов кремниевого производства» (19) **KG** (11) **1766** (13) **C1** (46) **28.08.2015**

Основные положения диссертации, выносимые на защиту:

1. Метод получения композиционных материалов в среде метана с добавлением графитовых волокон на основе полупроводниковых ультрадисперсных отходов кремния.
2. Результаты исследований физико-химической стойкости реакционно-синтезированных ККМ под воздействием агрессивных сред: концентрированных кислот и щелочей.
3. Результаты химического состава реакционно-синтезированных ККМ на основе карбонитрида, оксинитрида и нитрида кремния, получены расчетным методом Гиббса-Розебома.
4. Математическая одномерная модель реакционного синтеза микродисперсных шламовых порошков кремния (отходов кремниевого производства) в среде азота.

Личный вклад соискателя. В диссертационной работе результаты являются итогом общих и самостоятельных исследований автора. Личный вклад автора заключается в следующем: обработка анализа, интерпретация, получение и обобщение полученных экспериментальных данных. Диссертационная работа является результатом законченной работы автора. На различных этапах технологической разработки отдельные виды работ исследования, автор выполнял совместно с коллегами лаборатории, но при этом

личный вклад автора является основным в проведении экспериментальных исследований и выводов в целом.

Автор приносит глубочайшую благодарность за помощь в определении цели работы и обсуждения полученных результатов научного руководителя д.ф-м.н., профессора Нурбека Кыдырмышевича Касмамытова и научного консультанта д.ф-м.н., д.т.н. профессора Владимира Петровича Макарова и других научных сотрудников лаборатории.

Апробация результатов исследований. Основные положения и результаты диссертационной работы обсуждались и докладывались на международных научно-практических конференциях:

1. VIII International conference «Advanced technologies, equipment and analytical systems for material sciences and nonmaterial's», Almaty, Republic of Kazakhstan, June 9 and 10, 2011 г.;
2. Международной научной конференции «Рахматулинские-Ормонбековские чтения» г. Бишкек, 27-29 июня, 2013 г.;
3. Международной научно-практической конференции «Новая наука: теоретический и практический взгляд», г. Нижний Новгород, 14 апреля 2016г.;
4. XI Иссык-Кульской международной школе-конференции по радиационной физике твердого тела SCORPh-2015, г.Бишкек-Барскоон, 2015 г.;
5. Расширенный научный семинар Кыргызско - Российского Славянского университета им. Б.Н.Ельцина, Естественно-технического факультета, кафедры физики и микроэлектроники, 2018 г.;
6. Стажировка молодых ученых государств участников СНГ г.Дубна, Объединенный институт ядерных исследований, Россия, Московская область, г. Дубна, 18 Март-17 апрель 2012г.;
7. Стажировка молодых ученых государств участников СНГ г.Дубна, Объединенный институт ядерных исследований, Россия, Московская область, г. Дубна, 15 март- 14 апрель 2019г.;
8. Стажировка молодых ученых государств участников СНГ г.Дубна, Объединенный институт ядерных исследований, Россия, Московская область, г. Дубна, Октябрь 2019г.;
9. 71-я международная научная конференция «Eurasian scientific association», Россия, г. Москва, 28-29 января 2021 г.

Полнота отражения результатов диссертации в публикациях. Материалы настоящей диссертации нашли свое отражение в 30 публикациях: научных журналах и сборниках, на международных и республиканских конференциях, научных школах, отчётах НИР за 2009-2021гг. Института Физики НАН Кыргызской республики и в 1 авторском патенте.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, пяти глав, 141 страниц текста, 28 рисунков, 15 таблиц и 161 использованных источников.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении раскрывается проблема и актуальность темы, выбор объекта и предмета исследования, формулируются цели и задачи исследования, научная и практическая значимость полученных результатов, основные положения диссертационной работы, выносимые на защиту. Коротко описаны основные результаты исследования, полученные автором, его личный вклад в научно-исследовательскую диссертационную работу.

В первой главе приводится краткий литературный обзор по теме диссертации. Даны основные понятия и использование классических керамических нитридокремниевых материалов в различных отраслях промышленности и науки, виды классических керамических материалов, технологические стадии обработки монокремния для гелиоэнергетики, где и образуются различные отходы, которые и используются в виде исходного сырья для изготовления различных нитридокремниевых керамокомпозиционных материалов (ККМ). Проведен анализ ранее полученных экспериментальных данных по реакционному синтезу и формированию структуры и свойств ККМ. Приведены результаты расчета о влиянии ультрадисперсных порошков кремния и полученных керамокомпозиционных материалов на их основе на организм человека и природу. Дана информация о процентной допустимой концентрации (ПДК) в зоне реакционного синтеза и порошковых отходов кремния. В конце первой главы сделаны заключение.

Во второй главе описаны *объект и предмет* исследования. Так же детально описаны технология получения, структура и коррозионные свойства ККМ и методы исследования в частности, рентгеноструктурный и рентгенофазовый анализ, локальный микрорентгеноспектральный анализ с использованием растровой электронной микроскопии, определения теплоёмкости на установке универсальной низкотемпературной, а также другие методы исследований и сделаны соответствующее заключение по второй главе.

В третьей главе описаны микроструктурные особенности формирования структур опытных реакционно-спеченных ККМ на основе карбонитрида, оксинитрида и нитрида кремния, а также ККМ армированных графитовым волокном.

Проанализированы результаты микрорентгеноспектральных исследований, которые были проведены в лаборатории электронной микроскопии Института проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук, где имеется

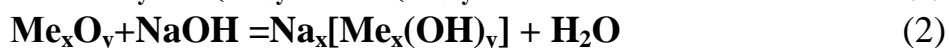
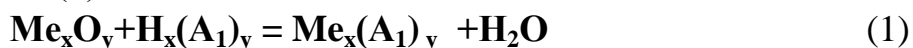
растровый электронный микроскоп с приставкой микрорентгеноспектрального анализатора с высокой разрешающей способностью японской фирмы «Joel».

Особое внимание уделено изучению микроструктуры реакционно-спеченных образцов ККМ-№4 с нитридокремниевой матрицей, которые дополнительно были армированы графитовым волокном (ГВ). Следует отметить, что ККМ армированные ГВ не изучены и в литературных источниках отсутствуют какие-либо данные о технологии их получения, составе, структуре и свойствах этих керамокомпозиционных материалов. Из работ д.ф.-м.н. Н.К.Касмамытова и д.ф.-м.н. В.П.Макарова известно, что реакционно-спеченные ККМ обладают широким спектром повышенных функциональных свойств, но имеют один недостаток это высокую хрупкость, относительно низкую прочность на трех точечный изгиб. Для того чтобы улучшить эти свойства ККМ, т.е. понизить хрупкость и увеличить прочность на изгиб, не ухудшая основных функциональных свойств нитридокремния, в работе была предпринята попытка изменить состав ККМ-№4 путем дополнительного введения в нитридокремниевую матрицу графитового волокна. Важно отметить, что ГВ так же, как и нитрид кремния характеризуется низким удельным весом, но высокой термостойкостью, коррозионной стойкостью, низким температурным коэффициентом расширения, и химической инертностью к кислотам и щелочам. На основе комплексных исследований ККМ армированных ГВ были сделано заключение.

В четвертой главе приведены результаты исследования различных ККМ опытных образцов по влиянию различных агрессивных сред на химическую стойкость к концентрированным кислотам и щелочам, а так же представлены расчеты фазового химического состава реакционно-спеченных ККМ с использованием метода концентрационного треугольника Гиббса-Розебома.

Рентгенофазовый анализ показал, что основная кристаллическая матрица ККМ-1, состоит из нано- и ультраструктурированных нитевидных кристаллов нитрида и карбонитрида кремния. Исследованиями установлено, что при длительных воздействиях на опытные ККМ с ГВ (рисунок 1. при выдержке в течение 1800 часов) агрессивными реагентами в виде различных сильнодействующих концентрированных кислот и щелочей, опытные образцы ККМ №4 не растворяются в них.

Следует заметить, что химические реагенты воздействуют определенным образом на примесные оксидные фазы, имеющиеся в структуре ККМ. В целом, проведенные исследования позволяют обобщить физико-химические исследования в виде общей схемы, протекающих химических реакций с кислотами (1) и щелочами (2).



где, Me_x - примесный металл в композиционном материале;
 $(A_1)_y$ - анион кислоты; H_x - катион кислоты.

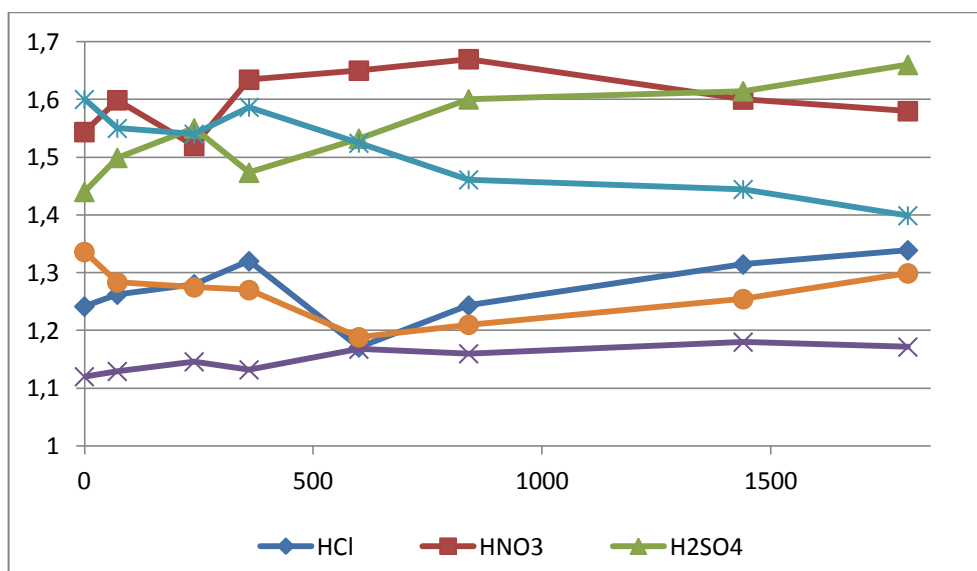


Рисунок 1 - Химическая устойчивость ККМ ГВ в концентрированных кислотах и щелочах

Обобщенные физико-химические формулы (1) и (2) позволяют охарактеризовать изменение массы ККМ при взаимодействии с агрессивными средами. Введение графитового волокна положительно влияет на формирование микроструктуры ККМ. В процессе синтеза ККМ формируются нано- и ультранитевидные кристаллы нитрида и карбонитрида кремния различной конфигурации, что в целом приводит к улучшению физико-химических свойств ККМ №4 и других ККМ.

Метод Гиббса-Розебома позволил в априори проанализировать формирование вероятных фаз в процессе реакционного синтеза. Расчеты синтеза ККМ были проведены для керамической смеси состоящая из твердых кристаллических

микрочастиц кремния и карбида кремния, находящиеся в газообразной среде азота в процессе реакционного синтеза при $T=1220-1320^{\circ}\text{C}$.

На рисунке 2 представлена расчетная диаграмма фазового равновесия (ДФР), позволившая рассчитать формирование фазовых составов ККМ. Для осуществления расчета фазового состава реакционно-спеченных ККМ за компоненты А, В и С согласно рисунку 2. соответственно

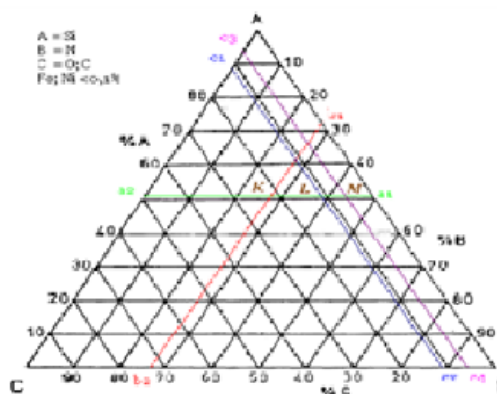


Рисунок 2 - Расчетная фазовая диаграмма Гиббса-Розебома для средних значений концентраций опытного ККМ, спеченный при $T=1220^{\circ}\text{C}$.

были приняты атомы Si, N, C и O, где за компонент C использовались как атомы углерода-C, так и кислорода - O. Анализ концентрационного треугольника Гиббса-Розебома показал, что в процессе реакционного синтеза ККМ в структуре последних могут формироваться как двухкомпонентные (например, SiO₂, SiC, Si₃N₄) так и трехкомпонентные соединения в виде Si₂(C_xN_y)₄, Si₂N₂O. Ниже приведены расчёты для исследуемой точки К по определению концентраций неизвестных формирующихся соединений в процессе реакционного синтеза ККМ. С помощью математических формул (1-4) определен концентрационный количественный состав формирующегося трехкомпонентного соединения в процессе синтеза ККМ.

Рассчитанные по формулам (1-4) значения последовательно подставляли в формулу (5):

$$\text{---} \qquad \text{---} \qquad (1)$$

$$\text{---} \qquad \text{---} \qquad (2)$$

$$\text{---} \qquad \text{---} \qquad (3)$$

$$\text{---} \qquad \text{---} \qquad (4)$$

Далее определяли количественное (масс. %) содержание для каждого атома Si, N, C и O входящее в неизвестное соединение.

$$\omega\%(X) = \frac{Ar(X) * n}{Mr} * 100\% \qquad (5)$$

Составляя пропорциональную зависимость количественного содержания массовой доли для соответствующих атомов Si, N, C и O, входящих в неизвестное трехкомпонентное соединение по соотношению (6) были определены возможные трехкомпонентные фазы, формирующиеся в процессе синтеза ККМ.

$$a : b : c = N(A) : N(B) : N(C) \qquad (6)$$

Расчеты показали, что в процессе реакционного синтеза ККМ при T=1220°C формируется многокомпонентный состав, состоящий из следующих фаз: матрица ККМ в основном состоит из оксинитридного соединения типа Si₂N₂O и ряда двухкомпонентных фаз Si₃N₄ и SiO₂; и SiC, причем последнее наблюдаются в малых количествах 0,1%, наряду с этим имеется оксид алюминия как примесь. Важно отметить, что расчетные данные по методу Гиббса-Розебома однозначно подтвердились прямыми экспериментальными методами рентгеноструктурного и рентгенофазового анализа ККМ, где также было установлено, что реакционно-спеченные ККМ состоят из: Si₂N₂O; смесь фаз Si₃N₄ и SiO₂; и SiC (0,1%).

Также аналогичные результаты по формирующимся фазам были получены для ККМ и ККМ с армированием ГВ реакционно-спеченных при температурах 1220 - 1320°C, с небольшими отличиями по количественному

содержанию трёхкомпонентной оксинитридной и двухкомпонентной нитридокремниевой фаз и незначительным по количественному содержанию появлением трехкомпонентной нестехиометрической карбонитридной фазы $\text{Si}_3(\text{C}_x\text{N}_y)_4$. Важно отметить, что микрорентгеноспектральные и рентгенофазовые исследования опытных образцов ККМ армированных графитовым волокном выявил незначительное образование трёхкомпонентного карбонитрида кремния $\text{Si}_3(\text{C}_x\text{N}_y)_4$ в виде увеличения фаз нитрида кремния Si_3N_4 и монокарбида кремния SiC . Практически заметное участие графитового волокна в образовании структуры ККМ начинается при температуре 1300 °С.

Таким образом, методом Гиббса-Розебома проведены расчеты по заданным параметрам исходных веществ, их дисперсности, условий и режимов реакционного синтеза, позволившие априори определить искомые фазовые составы ККМ с требуемыми физико-химическими свойствами. Расчетные данные хорошо согласуются с прямыми микроструктурными исследованиями. Кристаллическая матрица опытных образцов ККМ полученных путем реакционного синтеза шламового порошка кремния в среде азота в основном состоит из нитрида и оксинитрида кремния, а также небольшого количества в виде карбонитрида кремния. Наряду с этим в микроструктуре ККМ имеются следы примесей в виде сложных оксидных включений, оксидов алюминия и монокарбида кремния. Основной матричной фазой ККМ формирующейся при высокотемпературной физико-химической реакции в процессе спекания кремния в среде азота является нитрид кремния.

В пятой главе описаны теоретические исследования процесса реакционного синтеза нитрида кремния путем модельных исследований. Разработанная одномерная нестационарная физико-математическая модель в виде системы дифференциальных уравнений, которая описывает кинетику физико-химической реакции (7), протекающая в процессе высокотемпературного спекания кремниевого образца цилиндрической формы в атмосфере чистого азота. Приведены начальные и граничные условия реакционного спекания порошкового кремния спрессованного в виде цилиндра заданных размеров в атмосфере азота. В расчетах использовались экспериментальные данные нагрев, температура, давление, форма и размеры образца, и другие экспериментальные параметры.



Физико-математическая одномерная модель включает в себя совокупность трех формул: дифференциальное уравнение теплопроводности (8); дифференциальное уравнение непрерывности газа в пористом цилиндрическом образце кремния (9); и дифференциального уравнения (10), показывающее радиальное изменение концентрации азота в цилиндрическом

образце кремния в результате кристаллохимической реакции азотирования кремния:

$$\rho c_{eff} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda_{eff} \frac{\partial T}{\partial r} \right) + Q \cdot \dot{n}, \quad (8)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r D_{eff} \frac{\partial n}{\partial r} \right) + \dot{n}, \quad (9)$$

$$\frac{dn_{Si}}{dt} = -k_r n_{Si} \quad (10)$$

Для проведения численных расчетов кинетики реакционного синтеза ультрадисперсного кристаллического кремния с диффундирующим в нее азотом были заданы следующие, начальные и граничные условия:

$$t = 0: \quad T(r) = T_0 = 900^\circ C, \quad n_0(r) = \frac{p_0}{kT_0} \sim 10^{14} \text{ м}^{-3}, \quad p_0 \sim 10^{-5} \text{ Па}, \quad n_{Si0} = \frac{1 - \Pi}{\mu_{Si}} \rho_{Si} N_A;$$

$$r = 0: \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial n}{\partial r} = 0; \quad r = R: \quad T(R) = T_R(t), \quad n(R) = n_R(t).$$

Здесь t – время, r – радиальная координата, T – температура, n , n_{Si} – соответственно концентрации молекул азота и кремния, ρ_{eff} , c_{eff} , λ_{eff} , D_{eff} – соответственно эффективная плотность, удельная теплоемкость, теплопроводность, коэффициент диффузии азота в пористый кремний, \dot{n} – скорость уменьшения концентрации молекул азота за счет кристаллохимической реакции, Q и k_r – теплота и константа скорости реакции, Π – пористость изделия, ρ_{Si} , μ_{Si} – плотность и молярная масса кремния, k – постоянная Больцмана, N_A – постоянная Авогадро.

Коэффициент константы скорости реакции определяли по формуле (11):

$$k_r = C \cdot p e^{-E_A/kT}, \quad (11)$$

где $p = nkT$ – парциальное давление азота, E_A – энергия активации, C – постоянная, зависящая от параметров порошка, которая определяется на основе эксперимента.

Теплопроводность и плотность твердой фазы вычислялись по формулам (12) и (13):

$$\lambda_s = x_{Si} \lambda_{Si} + x_{Si_3N_4} \lambda_{Si_3N_4}, \quad (12)$$

$$\rho_s = x_{Si} / \rho_{Si} + x_{Si_3N_4} / \rho_{Si_3N_4}^{-1}, \quad (13)$$

где массовые доли кремния и нитрида кремния в твердой фазе вычислялись по формуле (14), (15) (преобразованного из формулы (5)):

$$x_{Si} = \frac{n_{Si} M_{Si}}{n_{Si} M_{Si} + n_{Si_3N_4} M_{Si_3N_4}}, \quad (14)$$

$$x_{Si_3N_4} = \frac{n_{Si_3N_4} M_{Si_3N_4}}{n_{Si} M_{Si} + n_{Si_3N_4} M_{Si_3N_4}}. \quad (15)$$

Эффективные значения теплопроводности, плотности и удельной теплоемкости пористого кремниевого изделия рассчитывали соответственно по формулам (16)-(18):

$$\lambda_{eff} = \lambda_g P^{1/3} + \lambda_s (1 - P^{2/3}), \quad (16)$$

$$\rho_{eff} = \rho_g P + \rho_s (1 - P), \quad (17)$$

$$c_{eff} = \bar{x}_{Si} c_{Si} + \bar{x}_{Si3N4} c_{Si3N4} + \bar{x}_g c_{p,g}. \quad (18)$$

Пористость шликерных изделий кремния составляла из расчета $P = 30 \pm 1$ %. Массовые доли кремния, нитрида кремния и азота в изделии вычисли по следующим соотношениям (19)-(21):

$$\bar{x}_{Si} = \frac{n_{Si} M_{Si}}{n_{Si} M_{Si} + n_{Si3N4} M_{Si3N4} + n_g M_g}; \quad (19)$$

$$\bar{x}_{Si3N4} = \frac{n_{Si3N4} M_{Si3N4}}{n_{Si} M_{Si} + n_{Si3N4} M_{Si3N4} + n_g M_g}; \quad (20)$$

$$\bar{x}_g = \frac{n_g M_g}{n_{Si} M_{Si} + n_{Si3N4} M_{Si3N4} + n_g M_g}. \quad (21)$$

Эффективный коэффициент диффузии и энергии активации кристаллохимической реакции прямого азотирования порошка кремния принимали в расчётах соответственно следующие значения:

$$D_{eff} = 10^{-5} \text{ м}^2/\text{с}; \quad E_A = 141,3 \text{ кДж/моль}.$$

Численное решение уравнений (8,9) осуществлялось методом контрольного объема совместно, путем преобразования их в обобщенном виде

— — —

, ϕ -непрерывная функция. Первые производные, входящие в граничные условия, аппроксимируются разностью второго порядка точности. Полученная система трехточечных алгебраических уравнений решается итеративно методом прогонки. Для ускорения сходимости итерационного процесса используется нижняя релаксация. Данные для параметров реакционного спекания нитрида кремния в азоте берутся из технического регламента собственных экспериментов. Радиус изделия $R = 2$ см. Для оценки значения постоянной концентрации C в формуле (10) были проведены численные эксперименты возрастания относительного количества атомов кремния вступающих в реакцию с атомами азота в изделии при трёх различных значениях C . На рисунке 3. представлена кривая численного расчета при одном значении коэффициента $C = 10^{-3} \text{ с}^{-1} \cdot \text{Па}^{-1}$, которая наиболее хорошо согласуется с экспериментом поэтому это значение концентрации C использовали во всех дальнейших математических расчетах.

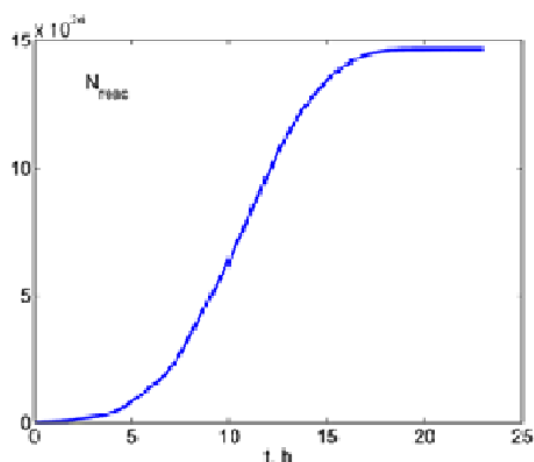


Рисунок 3.- Эволюция количества молекул азота, вступающих в реакцию с атомами кремния при $C=10^{-3}$ с-Па-1

Реакционное спекание при постоянном температуре и давлении. с помощью физико-математической одномерной модели был проведен расчет реакционного спекания изделия при постоянном (по времени) температуре и давлении азота в печи. На рисунке 4. показаны зависимости времени азотирования изделия от температуры и давления. Видно, что с увеличением температуры спекания время азотирования стремится к своему асимптотическому

значению, т.е. перестанет зависеть от температуры (например, для давлений $P=1,2$ и $1,4$ атм. этим значениям соответствует следующие временные значения 10 ч. и 8 ч.).

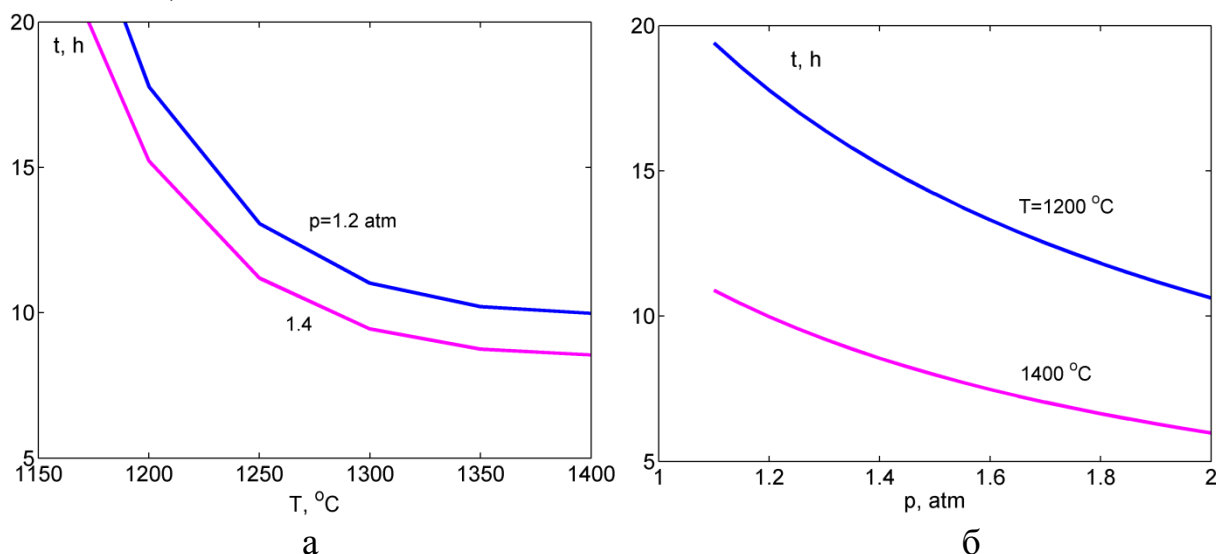


Рисунок 4 - Зависимость времени азотирования кремниевого изделия от температуры (а) и давление азота (б) в печи, проведенного при постоянных значениях

Это объясняется следующим образом. в данных расчетах коэффициент диффузии считается постоянным, не зависящим от температуры. Поэтому скорость азотирования ограничивается скоростью диффузионного переноса молекул азота внутрь изделия, а последняя не изменяется с увеличением температуры (т.к. давление постоянное). Зависимость $t(p)$ при высоких давлениях такую тенденцию теряет и преобладает только скорость диффузионного переноса атомов азота вглубь к атомам кремния шликерного изделия. Это обусловлено поверхностным образованием нитридокремневой фазы, при котором происходит первоначальное азотирование атомов кремния,

и инициировать дальнейший процесс протекание газообразного азота к реакционному синтезу в глубину образца при давлении равным 1,25-1,4 атм. становится затруднительных.

Закономерность протекание газообразного азота внутрь опытного образца т.е. в зону кристаллохимической реакции и образование нитридокремниевой фазы нужно учитывать так же и следующие факторы, влияющие на протекание процесса азотирования, опытного образца это плотность опытного образца шихты, давление газообразного азота в камере реакционного синтеза, диаметр образца, а так же дисперсность исходного порошка при шликерном формовании нитридокремниевого опытного изделия.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные результаты диссертационной работы можно сформулировать следующим образом.

1. Разработана технология получения керамокомпозиционных нитридокремниевых материалов с нано- и ультраструктурными кристаллами нитрида и карбонитрида кремния с высокотемпературными фазами, при не высоких температурах. При получении нитридокремниевых материалов требуется учитывать несколько факторов – химический состав исходного сырья полупроводникового ультрадисперсного отхода кремния (порошка) и сопутствующих добавок в процессе всей технологической операции **сырье - технологические операции – готовое изделие (материал)**. Разработанный метод получения керамических материалов выгоден, как со стороны экономики, так и со стороны ресурса, а полученные материалы конкурентоспособны, как со стороны стоимости – дешевле почти в 3 раза, так и со стороны физико-химических, физико-механических и эксплуатационных свойств не уступая известным классических материалам.

2. Методом локального микрорентгеноспектрального анализа установлено, что перераспределение основной фазы и примесных элементов в структурной матрице керамокомпозиционных материалов, коррелируются с экспериментальными данными рентгеноструктурного анализа. Микрорентгеноструктурный анализ показал, что для формирования нано-и ультраструктуры требуется температура выше 1250 С, в процессе реакционного синтеза при заданных температурах происходит неравномерное перераспределения примесных элементов на всех структурных уровнях нитридокремниевого изделия. Также при добавлении графитового волокна в опытные образцы в процентном соотношении (3-5-10%) положительно влияет на основную структурную матрицу, которая в свою очередь положительно влияет на физико-химические, физико-механические, эксплуатационные свойства керамокомпозиционного материала в целом.

3. При экспериментальном исследовании нитридокремниевых образцов на химическую устойчивость в концентрированных кислотах и щелочах было обнаружено, что полученные опытные изделия обладают высоким показателем химической устойчивости равный 1800 часов беспрерывного контакта с агрессивной средой. При реакционном синтезе можно получать нитридокремниевые материалы с различным химическим составом, состоящим из нитрида кремния, карбонитрида, карбида и оксинитрида кремния в зависимости от исходного сырья, и технологического режима.

4. Определено химический состав реакционно-спеченных керамокомпозиционных материалов методом Гиббса-Розебома и выявлены следующие закономерности: во-первых, состав $X_A = a_1 a_2$ независимо от того как бы не изменялось соотношение входящих фаз по всему объему изделия, концентрация атомов кремния во всех фазах в сумме будет одинакова, во-вторых, образование фазового состава и структуры исследуемых ККМ зависит от внешних параметров и условий реакционного синтеза и технологического процесса в целом.

5. Компьютерная реализация математической одномерной нестационарной модели реакционного спекания порошков кремния в среде азота позволило выявить следующее: максимальная эффективность азотирования происходит через свой временной минимум (12 часов), это соответствует диффузии и скорости протекания процессов азотирования по всему объему изделия, что соответствует полному реакционному взаимодействию атомов азота с кремнием, распределение температуры по всему сечению кремниевого образца однородное и его азотирование ограничивается диффузионным массопереносом азота в кристаллический кремний; Первоначально азотирование кремниевых образцов осуществляется на периферии (у поверхности) образца и азотирование максимально, а в центре образца азотирование минимально, для того, чтобы это избежать регулируется подача газообразного азота в зону реакционного синтеза в печи. Также определен эффективный реакционный синтез нано- и ультраструктурирование нитрида кремния высокотемпературными фазами карбонитрида кремния, происходит при температурном режиме выше $\sim 1250^\circ\text{C}$.

СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ

1. Ласанху К.А. Исследование низкотемпературной теплоёмкости керамокомпозиционного материала на основе шламовых отходов кремния / Н.К. Касмамытов, К.А. Ласанху, Т.Ш. Джунушалиева // Известия КГТУ. – 2009. - №17. - С.75-79.
2. Ласанху, К.А., Теплоемкость реакционно-спеченных нано- и ультраструктурированных нитридокремниевых материалов [Текст]/

- Н.К.Касамытов, К.А.Ласанху - Научный журнал ФИЗИКА №1– Бишкек 2010 г. С. 100-104. ИФТПиМ НАН КР
3. **Ласанху, К.А.,** Структура и физико-химические свойства нано- и ультраструктурированных керамокомпозиционных материалов [Текст] /К.А.Ласанху, Н.К.Касамытов - VIII Международная конференция «Перспективы технологии, оборудование и аналитические системы для материаловедения и наноматериалов», Казахстан. г. Алмата, пр. Аль-Фараби 71, КазНУ им Аль-Фараби, 9-10 июня. 2011 г. С. 249-254.
 4. **Ласанху, К.А.,** Химическая устойчивость нано- и ультраструктурированных керамокомпозиционных материалов в концентрированных кислотах и щелочах [Текст] /К.А.Ласанху, Н.К.Касамытов - Известие НАН КР, Серия физико-технических, математических, горно-геологических наук, «Илим» №2, Бишкек, 2011 г., с. 132-135.
 5. **Ласанху, К.К.,** Воздействие концентрированных кислот, щелочей на керамокомпозиционные материалы [Текст]/К.А. Ласанху, Н.К.Касамытов – Научный журнал Физика №3, г.Бишкек, 2011г. С.3-6.
 6. **Ласанху, К. А.,** О синтезе, структуре и физико-химических свойствах карбонитридных материалов полученных из шламовых отходов кремния [Текст]/ К.А. Ласанху, Н.К. Касамытов – Международный научный журнал «Вестник Кыргызско-Российского Славянского университет», Том12, №10, 2012г.,г.Бишкек, С 93-95.
 7. **Ласанху, К.А.,** Влияние фазового состава на физико-химическую устойчивость нано- и ультраструктурированных керамокомпозиционных материалов [Тезис]/К.А. Ласанху, Н.К. Касамытов – Открытая школа – конференция стран СНГ «Ультрамелкозернистые и наноструктурированные материалы», г.Уфа, Республика Башкортостан, Росси, тезис докладов УМЗНМ 8-12октября 2012г. С 1.
 8. **Ласанху, К.А.,** Физико-химические свойства и нано- и ультраструктурированных карбонитридных материалов. [Текст]/К.А.Ласанху - III Всероссийская молодежная конференция с элементами научной школы. «Функциональные наноматериалы и высокочистые вещества» ИМЕН РАН, РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва. 29 мая-1июня, 2012г., С. 369-370.
 9. **Lasankhu, K.A.,** Physical and chemical stability of ceramocompositions materials on the basis of waste of semiconductor production [Текст]/ К.А. Lasankhu, N.K. Kasamamytov - Научный журнал Физика №3,г.Бишкек, 2013г., С.28-35.
 10. **Ласанху, К. А.** Нитридокремниевые материалы. Рентгеноструктурный анализ [Текст]/К.А.Ласанху - Научный журнал ФИЗИКА №1 ИФТПиП НАН КР, г.Бишкек 2013 г. С. 82-85.
 11. **Ласанху, К. А.,** Нано и ультраструктурированный керамокомпозиционный материал [Текст]/К.А.Ласанху, Н.К. Касамытов, Н.Ж. Кайрыев – Научный и информационный журнал «Материаловедение», труды международной

- научной конференции «Рахматулинские-Ормонбековские чтения», №2 (3) г.Бишкек, 27-29 июнь, 2013г., С. 207-211.
12. **Ласанху, К. А.,** Физико-химическая устойчивость керамокомпозиционных материалов на основе отходов полупроводникового производства [Текст]/К.А.Ласанху, Н.К.Касамытов - Научный журнал ФИЗИКА №3–ИФТПиМ НАН КР, Бишкек 2013 г. С. 28-35.
 13. **Ласанху, К.А.,**Технология получения, структура и свойства большеобъемных наноструктурированных нитридокремниевых материалов [Текст] /К.А.Ласанху, Н.К.Касамытов - Научный журнал ФИЗИКА №1–Бишкек 2013 г. С. 45-49.
 14. **Ласанху, К.А.,** Воздействие концентрированных кислот и щелочей на пористые керамокомпозиционные материалы [Текст]/К.А.Ласанху, Н.К.Касамытов – Тематический сборник статей «Кыргызская керамика на основе местного сырья», КРСУ им.Б.Ельцина, г.Бишкек, 2014г. С. 84-90.
 15. **Ласанху, К.А.,** Теплоемкость реакционно-спеченных нано- и ультраструктурированных нитридокремниевых материалов [Текст]/К.А.Ласанху, Н.К.Касамытов - Тематический сборник научных статей «Кыргызская керамика на основе местного сырья», КРСУ им.Б.Ельцина, г.Бишкек, 2014, С. 78-84.
 16. Технология получения, структура и физико-химические свойства кермокомпозиционных материалов [Текст]/К.А.Ласанху, Н.К.Касамытов, Н.В.Гудимов, В.П.Макаров – Тематический сборник статей «Кыргызская керамика на основе местного сырья», КРСУ им.Б.Ельцина, г.Бишкек, 2014г. С. 90-99.
 17. Локальный микрорентгеноспектральный анализ микроструктуры спеченных керамокомпозиционных материалов на основе нитрида кремния[Текст]/Н.К.Касамытов, М.Ф.Имаев, К.А.Ласанху, Н.Ю.Пархимович – Научный и информационный журнал «Материаловедение» №1(15),г.Бишкек, 2015г., С. 24-36.
 18. Микроструктура и состав формирующихся фаз при реакционном спекании композиционной керамики армированной графитовым волокном [Текст]/ Н.К.Касамытов, К.А.Ласанху, М.Имаев, Н.Ю.Пархимович – Журнал Вестник Кыргызско-Российского Славянского университета им.Б.Ельцина, Том 15, №9, 2015 г., С. 67-72
 19. Микроструктура и химическая устойчивость в агрессивных средах композиционной нитридокремниевой керамики армированной графитовым волокном [Текст]/[К.А.Ласанху, Н.К.Касамытов, М.Ф.Имаев и др.] – Сборник трудов XI Иссык-Кульская международная школа конференция по радиационной физике твердого тела SCORPh-2015, г.Бишкек, 2015г., С. 159-170.
 20. Моделирование процесса реакционноо спекание порошка кремния в среде азота [Текст]/К.А.Ласанху, Н.Ж.Кайрыев, Л.О.Сатаев, .К.Касамытов – Научный журнал Физика НАН КР выпуск №2, г.Бишкек, 2015 г., С. 31-36.

21. **Ласанху, К.А.,** Модельные исследования азотирования порошков кремния методом реакционного спекания [Текст]/ Н.Ж.Кайрыев, Н.К.Касамытов, К.А.Ласанху – Сборник трудов XI Исык-Кульская международная школа конференция по радиационной физике твердого тела SCORPh-2015, г.Бишкек, 2015г., С. 135-140.
22. **Ласанху, К.А.,** Расчетные характеристики нагрева и процесса реакционного спекания кремния в среде азота методом численного анализа [Текст]/Н.Ж.Кайрыев, Н.К.Касамытов, К.А.Ласанху – Сборник трудов XI Исык-Кульская международная школа конференция по радиационной физике твердого тела SCORPh-2015, г.Бишкек, 2015г., С. 140-150.
23. Пат. 1766 Кыргызская Республика, (51)B22F 3/23(2015.01), B22F 8/00 (2015.01). Способ получения керамического композиционного материала из отходов кремниевого производства [Текст]/ В.П.Макаров, Н.К.Касамытов, К.А.Ласанху – Кыргызпатент; г.Бишкек - № 201440066.1; заявл. 18.06.2014; опубл. 28.08.2015, Бюл. №8.-7 с.
24. **Ласанху, К.А.,** Устойчивость бескислородных керамических материалов в кислотах [Текст]/К.А.Ласанху, Н.К.Касамытов – Новая наука: Теоретический и практический взгляд., Международное научное периодическое издание по итогам Международной научно-практической конференции, г.Уфа, Российская Федерация РИЦ АМИ, 14 апрель 2016г., С. 60-64.
25. **Ласанху, К.А.,** Устойчивость бескислородных керамических материалов в щелочах [Текст]/К.А.Ласанху, Н.К.Касамытов – Научно-издательский центр Аэтерна, инновационные технологии научного развития. Сборник статей Международной научно-практической конференции, часть 3, г. Уфа, НИЦ АЭТЕРНА, 15 июня 2016г., С. 9-13.
26. **Ласанху, К.А.,** Влияние графитового волокна на фазовый состав. Рентгеноструктурный анализ [Текст]/К.А.Ласанху, Н.К.Касамытов – НИЦ «Империя», «Интеграция наук» Международный научно-практический журнал, выпуск №7(11), Москва 2017г., С. 59-63.
27. **Ласанху, К.А.,** Физико-химические свойства композиционных материалов легированных графитовым волокном [Текст]/К.А.Ласанху, Н.К.Касамытов – Журнал «Современные научные исследования и разработки», Учредители: Научный центр «Олимп», Астрахань, выпуск №5(13), 2017г., С. 197-202.
28. **Ласанху, К.А.,** Нитридокремниевые фазы в керамических материалах [Текст]/ К.А. Ласанху – Научный журнал Физика №1, г.Бишкек 2018г., С. 110-115.
29. **Ласанху, К.А.,** Высокотемпературная фаза β - Si_3N_4 и графитовые наполнители [Текст] /К.А.Ласанху, -Журнал «Евразийское Научное Объединение», Сборник «Наука и современность» 71-я Международная научная конференция ЕНО, Россия, г.Москва, 28-29 январь, 2021г., с. 43-45.
30. **Ласанху, К.А.,** Формирование фаз трехкомпонентной системы Si-N-C реакционно-спеченного при 1320°C [Текст] /К.А.Ласанху, - Журнал «Евразийское научное Объединение», Сборник «Наука и современность»

71-я Международная научная конференция ЕНО, Россия, г. Москва, 28-29 января, 2021г., с. 45-47.

Ласанху Керим Арсаевичтин «Кремнийдин эң майда калдыктарынын негизиндеги керамикалык-композициялык материалдардын физикалык-химиялык касиеттери» деген темадагы 01.04.07 – конденсацияланган абалдын физикасы адистиги боюнча физика-математика илимдеринин кандидаты окумуштуулук даражасын изденип алуу үчүн жазылган диссертациясынын РЕЗЮМЕСИ

Түйүндүү сөздөр: композициялык керамика, фазалык курам, физикалык-химиялык касиеттер, кычкылдар менен жегичтердин таасири, Гиббс-Розебомдун усулу, математикалык моделдөө, бир өлчөмдүү стационардык эмес модель.

Изилдөөнүн объектиси: азоттун чөйрөсүндө жарым өткөргүчтүк кремний өнөр жайынын калдыктарынан реакциялык синтез усулу менен алынган керамикалык-композициялык нитрид-кремний материалдар.

Изилдөөнүн предмети – агрессивдүү чөйрөнүн керамикалык-композициялык нитрид-кремний материалдарга таасири астында болуп өтүүчү физикалык-химиялык касиеттер менен процесстер жана бир өлчөмдүү математикалык моделди иштеп чыгуу жолу менен азоттун чөйрөсүндө кремнийдин реакциялык синтезинин кинетикасын изилдөө.

Иштин максаты: реакциялык-катыган керамикалык-композициялык нитрид-кремний материалдардын ар кыл агрессивдүү чөйрөлөрдөгү фазалык курамын, физикалык-химиялык касиеттерин изилдөө. Физикалык-математикалык моделди иштеп чыгуу жана ККМдын реакциялык синтезинин кинетикасын изилдөө.

Изилдөөнүн усулдары жана аппаратурасы: СГВ 2.4.2/15 вакуумдук электр меши, микрорентгендик-спектралдык анализ, рентгендик-түзүмдүк анализ, физикалык-химиялык анализ, растрдык электрондук микроскоп, математикалык моделдөө, Гиббс-Розебомдун усулу.

Алынган натыйжалар жана алардын жаңычылдыгы: Биринчи жолу метандын чөйрөсүндө кремнийдин полидисперстүү калдыгынан Si-SiC-C фазасы бар композициялык керамикалык материал алынды. Нитрид-кремний материалдардын химиялык туруктуулук параметрлери аныкталды жана Гиббс-Розебомдун усулу менен фазалык жана химиялык курамы эсептелди. Азоттун чөйрөсүндө кремнийдин ультрадисперстүү күкүмүнүн реакциялык катуусунун бир өлчөмдүү математикалык модели иштелип чыкты.

Колдонуу чөйрөсү: Контакттар, диэлектриктер үчүн ысыкка чыдамдуу жана электрдик тетиктер катары элдик айыл чарбасынын кеңири спектринде, радиотехникада жана ар кыл химия өнөр жайында. Физика, химия жана

математика предметтеринде, стационардык эмес тутумдардын моделдерин моделдөө, эсептөөчү эксперимент үчүн математикалык моделди куруу, көп компоненттүү фазалык тутумдарды куруу, ар кыл конструкциялык материалдардын химиялык туруктуулугу жана анын коррозиялык туруктуулугу ж.б.у.с. багыттар боюнча атайын окуу дисциплиналарын окутууда.

РЕЗЮМЕ

диссертации Ласанху Керим Арсаевича на тему: «Физико-химические свойства керамокомпозиционных материалов на основе шламовых отходов кремния» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Ключевые слова: композиционная керамика, фазовый состав, физико-химические свойства, воздействие кислот и щелочей, метод Гиббса-Розебома, математическое моделирование, одномерная нестационарная модель.

Объект исследования: керамокомпозиционные нитридокремниевые материалы, полученные методом реакционного синтеза из отходов полупроводниковой кремниевой промышленности в среде азота.

Предмет исследования – физико-химические свойства и процессы, протекающие при воздействии агрессивной среды на керамокомпозиционные нитридокремниевые материалы и изучение кинетики реакционного синтеза кремния в среде азота путем разработки одномерной математической модели.

Цель работы: изучение фазового состава, физико-химических свойств реакционно-спеченных керамокомпозиционных нитридокремниевых материалов в различных агрессивных средах. Разработка физико-математической модели и изучение кинетики реакционного синтеза ККМ.

Методы исследования и аппаратура: Вакуумная электропечь СГВ 2.4.2/15, микрорентгеноспектральный анализ, рентгеноструктурный анализ, физико-химический анализ, растровый электронный микроскоп, математическое моделирование, метод Гиббса-Розебома.

Полученные результаты и их новизна: Впервые получен из полидисперсного отхода кремния композиционный керамический материал с фазой Si-SiC-C в среде метана. Определены параметры химической стойкости и рассчитан с помощью метода Гиббса-Розебома фазовый и химический состав нитридокремниевых материалов. Разработана одномерная математическая модель реакционного спекания ультрадисперсного порошка кремния в среде азота.

Область применения: В широком спектре народного сельского хозяйства, в качестве жаропрочных и электрических деталей для контактов, диэлектриков, в радиотехнике и в различной химической промышленности. В

предметах физики, химии и математики в процессе преподавании специальных учебных дисциплин, по направлению моделирование моделей нестационарных систем, построению математической модели для вычислительного эксперимента, построение многокомпонентных фазовых систем, химическая устойчивость различных конструкционных материалов и ее коррозионная стойкость и т.п.

ABSTRACT

of the dissertation written by Lasanhu Kerim Arsaevich on the topic: "Physico-Chemical Properties of Silicon Sludge Waste-Based Ceramic Composite Materials " for the degree of Candidate of Physical and Mathematical Sciences in specialty 01.04.07 - Condensed Matter Physics

Key words: composite ceramics, phase composition, physic-chemical properties, acid and alkaline attack, Gibbs- Roseboom method, mathematical simulation, one-dimensional non-stationary model.

Object of the Research: ceramic composite silicon nitride materials generated by the reaction synthesis method from wastes of semiconductor silicon industry in the nitrogen atmosphere.

Subject of the Research – physico-chemical properties and processes occurring under the aggressive environment influence on ceramic-composite silicon nitride materials and the study of silicon reaction synthesis kinetics in the nitrogen environment by developing a one-dimensional mathematical model.

Goal of the research work: study of phase composition, physic-chemical properties of reaction-sintered ceramic-composite silicon nitride materials in various aggressive media. Development of the physical and mathematical model and study of the critical micelle concentration reaction synthesis kinetics.

Research methods and apparatus: Vacuum electric furnace SGV 2.4.2 / 15, X-ray microanalysis, X-ray structural analysis, physic-chemical analysis, scanning electron microscope, mathematical simulation, Gibbs-Roseboom method.

Obtained results and heir novelty: For the first time, the composite ceramic material with a Si-SiC-C phase in the methane environment has been obtained from polydisperse silicon waste. The chemical resistance parameters have been determined and the phase and chemical composition of silicon nitride materials has been calculated using the Gibbs-Roseboom method. The one-dimensional mathematical model of reaction sintering of ultrafine silicon powder in nitrogen atmosphere has been developed.

Scope of application: In a wide range of national agriculture, as heat-resistant and electrical parts for contacts, dielectrics, in radio engineering and in various chemical industries. In physics, chemistry and mathematics in the course of teaching special academic disciplines, in the direction of non-stationary system model simulation, mathematical model building for computational experiment, multicomponent phase system building, chemical stability of various structural materials and its corrosion resistance, etc.

ПЕРЕЧЕНЬ СОКРАЩЕНИЙ И ОБОЗНАЧЕНИЙ

1. **ГВ** - Графитовое волокно.
2. **ККМ** - Керамокомпозиционный материал, синтезированный в среде азота
3. **КМ** - Композиционный материал, синтезированный в среде метана
4. **КХМЗ** - Кыргызский химико-металлургический завод «Астра»
5. **МА** - Микрорентгеноспектральный анализ
6. **МСК** - Монокристаллический слиток кремния
7. **НАН КР** - Национальная академия наук Кыргызской Республики.
8. **ПАВ** - Поверхностно активные вещества.
9. **Пластификатор** - Термопластичные вещества (парафин, воск, жиры, смолы типа фенолформальдегидные).
10. **ПУОК** - Полупроводниковые ультрадисперсные отходы кремния
11. **Р** - Давление , вакуум (мм.рт.ст., Па),
12. **РСНК** - Реакционно-связанный нитрид кремния.
13. **РЭМ** - Растровый электронный микроскоп
14. **Ср** - Теплоемкость Дж/г*К.
15. **Т** - Температура К.
16. **ТКЛР** - Температурный коэффициент линейного расширения.
17. **УУНТ** - Установка универсальная низкотемпературная.
18. **ΔG** - Энергия Гиббса.
19. **ΔH** - Энтальпия.
20. **ΔS** - Энтропия.
21. **BSE** - Детектор отраженных электронов (backscattered electrons)
22. **Q** - Теплота (Дж.).
23. **SE** - Детектор вторичных электронов (secondary electrons)
24. **λ** - Теплопроводность.
25. **ρ_k** - Плотность.
26. **σ** – Электропроводность.