Кырг.
2022-48

Кыргыз Республикасынын Улуттук илимдер академиясынын
академик Ж.Жеенбаев атындагы Физика Институту
Б.Н. Ельцин атындагы Кыргыз-Орус Славян университети

Д 01.21.633 диссертациялык кеңеши

Кол жазма укугунда

УДК 538.9

Сатаев Лесбек Оригалиевич

Кремнийдин нитридин реакциялык бышырууну моделдик изилдөө

Адистиги 01.04.07 – конденсирленген абалдын физикасы

Физика-математика илимдеринин кандидаты илимий даражасын изденип алуу
үчүн жазылган диссертациянын

автореферат

Бишкек – 2022

Диссертациялык иш Кыргыз Республикасынын Улуттук илимдер академиясынын академик Ж.Жеенбаев атындагы физика институтунда аткарылды.

Илимий жетекчиси:	**Касмамытов Нурбек Кыдырмышевич,** физика-математика илимдеринин доктору, профессор, КР УИАнын физика Институтунун мүдүрүнүн илимий иштер боюнча орун басары, «Кумайлык материалдар» лабораториясынын башчысы.
Расмий оппоненттер:	**Кидибаев Мустафа Мусаевич,** физика-математика илимдеринин доктору, Кыргыз Республикасынын УИАнын академиги, КР УИАнын физика Институтунун «Кристаллофизика жана радиометриялоо» лабораториясынын башчысы.
	Утемисов Касымкул, физика-математика илимдеринин кандидаты, доцент, Ж.Баласагын атындагы Кыргыз улуттук университетинин физика жана электроника факультетинин физика кафедрасынын доценти.
Алып баруучу мекеме:	Ош мамлекеттик университетинин физика кафедрасы. Дареги: Кыргыз Республикасы,723500, Ош шаары, Ленин көчөсү 331, e-mail: edu@oshsu.kg

Диссертацияны коргоо Кыргыз Республикасынын Улуттук Илимдер академиясынын академик Ж.Жеенбаев атындагы физика Институтунун жана Б.Ельцин атындагы Кыргыз-Орус Славян университетинин алдындагы физика-математикалык илимдердин доктору (кандидаты) илимий даражасын изденип алуу үчүн диссертацияларды коргоо боюнча Д 01.21.633 диссертациялык кеңешинин отурумунда 2022-жылдын «__*23*__» _____*июня*________ саат ___*11-00*______да өтөт. Дареги: 720071, Бишкек шаары, Чүй проспектиси 265а. Улуттук илимдер академиясынын физика институтунун конференция залында 2 – кабат, тел.:(0312) 39-18-67.

Диссертацияны коргоону онлайн берүүнүн коду https://vc.vak.kg/b/d_0-6st-bc5-w1v

Диссертация менен диссертациялык кеңеш түзүлгөн уюмдардын китепканаларынан жана info@iobjournal.org сайтынан таанышууга болот.

Автореферат «__*23*___» _мая__2022-ж. таратылды

диссертациялык кеңештинин
илимпоз катчысы, ф-м.и.к. Саякбаева Б.Б.

ИШТИН ЖАЛПЫ МҮНӨЗДӨМӨСҮ

Диссертациянын темасынын актуалдуулугу. Кремнийдин нитридинин негизинде, кремнийди азот менен биргеликте реакциялык бышыруу ыкмасын колдонуу менен жаңы керамокомпозициялык материалдарды алуунун технологиясы КРнын УИАсынын академик Ж.Жеенбаев атындагы физика Институтунун «кумайлык материалдар» лабораториясынын кызматкерлери тарабынан мурдараак иштелип чыккан [1.2]. Бирок, оптималдык түзүлүшкө жана талап кылынган функционалдык касиетке ээ, конкреттүү нитрий кремнийлик жасалгаларды алуу үчүн кымбатка турган бир катар тажрыйбаларды жүргүзүү зарыл.

Кремнийдин кумайларын азоттун чөйрөсүндө бышыруудагы процесстерди изилдөө жана реакциялык бышыруунун оптималдык шарттарын аныктоо үчүн: кремнийдин атомдорунун кремнийдин нитридине айлануу ылдамдыгынын мыйзамченемдүүлүктөрүн; кремнийдин тешиктүү жасалгаларын реакциялык бышыруу процессинде азоттун салыштырмалуу концентрациясынын өзгөрүшүнүн эволюциясынын кинетикасын; ошондой эле бышыруунун жөндөлүп туруучу тышкы параметрлерин билүү талап кылынат. Бул маселени чечүү кымбат баадагы тажрыйбалардын катарын азайтууга же толугу менен алмаштырууга мүмкүндүк берүүчү, ысытуу жана нитрокремнийлик жасалгаларды реакциялык синтездөө процесстерин теориялык талдоосуз жана сандык моделдөөсүз мүмкүн эмес. Ушуга байланыштуу, иште майда дисперстик мунайлык кремнийди азоттун атмосферасында реакциялык бышыруунун физика-математикалык модели иштелип чыгарылды жана сандык эсептөөлөрү жүргүзүлдү. Кремнийди реакциялык азоттону моделдөдө жылуулукту жана заттын массасын ташуудагы физикалык процесстер, газ динамикасы, ошондой эле кремнийдин данчаларынын кристаллдык торчосунун атомдорунун жана азоттун иондорунун ортолорундагы гетерогендик кристаллхимиялык реакциялар эске алынды. Кремнийдин нитридин синтездөө кандай жүрөрүн, аны илимий түшүнүү жана моделдөөнүн жардамы менен изилдөө илимий жана колдонмолук жактан актуалдуу болуп саналат.

Диссертациянын темасынын негизги илимий-изилдөө иштери менен байланышы. Диссертациялык иш КР УИАсынын физика Институтунун кумайлык материалдар лабораториясынын, УИАнын Президиуму бекиткен, Кыргыз Республикасынын мамбюджети тарабынан каржыланган физика Институтунун ИИИ нин долбору боюнча пландалган ИИИнин темасы менен тыкыс байланышта тикеден-тике аткарылды.

Изилдөө объектиси: Ар кандай конфигурациядагы кумайлык кремнийлик жасалгаларын таза азоттун атмосферасында реакциялык бышыруу процессиндеги реакциялык синтез жана диффузиялык жылуулук – масса ташуу процесстеринин мыйзамченемдүүлүктөрү.

Изилдөөнүн предмети – тышкы параметрлердин жана жасалганын конфигурациясынын (өлчөмдөрү жана формалары) кремнийдин нитридин синтездөөнүн кинетикасына көргөзгөн таасири.

Иштин максаты: Кремнийдин ар-кандай конфигурациядагы кумайлык жасалгаларын азоттун атмосферасында реакциялык бышыруунун туруктуу эмес моделин иштеп чыгуу. Кремнийдин нитридин кристаллхимиялык синтездөөнүн кинетикалык мыйзамченемдүүлүктөрүн аныктоо боюнча теориялык изилдөөлөрдү

сандык эсептөөлөр аркылуу жүргүзүү. Коюлган максатка жетүү үчүн диссертацияда төмөндөгүдөй **маселелер** чечилди:

1) кремнийдин нитридин реакциялык синтездөөнүн эволюциялык процессин жазуучу физика – математикалык моделди (ФММ) математикалык физиканын дифференциалдык теңдемелери түрүндө түзүү;
2) ар кандай конфигурациядагы жасалгалар үчүн кремнийдин нитридин реакциялык синтездөөнүн сандык эсептөөлөрүн, кремнийди азоттун атмосферасында бышырууда алынган өздүк тажрыйбалык маалыматтарды пайдалануу менен, комплекстүү COMSOL 4 multiphysics-5.3 программасын колдонуп жүргүзүү;
3) тышкы параметрлердин: реакциялык бышыруунун температурасын, электрмешиндеги газдын басымын, ошондой эле жасалгалардын өлчөмдөрүнүн реакциялык бышыруунун эволюциялык процессине көргөзгөн таасирлерин аныктоо жана кремнийдин нитридин синтездөөнүн бир калыпта өтүшүнүн узактыгынын, ылдамдыгынын, интенсивдүүлүгүнүн оптималдуу маанилерин аныктоо.

Алынган жыйынтыктардын илимий жаңылыктары:

1) Жогорку температурада кремнийди азоттун атмосферасында бышыруу учурунда, кремнийди диффузиялык азоттону баяндоо үчүн кремнийдин нитридин реакциялык синтездөөнүн физика-математикалык модели биринчи жолу иштеп чыгарылды.
2) Кремнийдин ар-кандай конфигурациядагы көзөнөктүү жасалгаларын азоттун атмосферасында реакциялык азоттоо процессинин кинетикасын Кнудсендик диффузияны эске алуу менен сандык эсептөөлөр биринчи жолу жүргүзүлдү.
3) Кремнийдин кумайлык жасалгаларын азоттук атмосферада бышыруу процессиндеги газ-катуу заттык реакциясы компьютерде *ортомчулук моделди* колдонуу менен ишке ашырылды.
4) Кремнийдин нитридин реакциялык синтездөө процессинин кинетикалык мыйзам ченемдүүлүктөрү калың жана жука капталдуу жасалгалар үчүн жүргүзүлдү. Кремнийдин нитридинин экзотермалык реакциясынын процессинин убактысынын моменттери жана бөлүнүп чыккан жылуулук энергиясынын эң чоң мааниси аныкталды.
5) Кремнийдин нитридин реакциялык синтездөөнүн жүрүшүнүн берилген температура жана реакциялык бышыруунун кармоо убактысына, азоттун электр мешиндеги басымынын өзгөрүүсүнө, жасалгалардын конфигурациясына жана өлчөмүнө карата узактыгынын, ылдамдыгынын жана интенсивдүүлүгүнүн маанилери аныкталды.

Алынган жыйынтыктардын ишенимдүүлүгү:

Сандык эсептөөлөрдүн негизги жыйынтыктары теориялык жана математикалык физиканын ыкмаларын, дифференциалдык теңдемелердин теориясын, туура коюлган маселелерди жана дифференциалдык теңдемелерди апроксимациялоону, аларды чыгаруунун итерациялык ыкмаларын пайдалануу менен, колдонуу аркылуу алынды. Алынган жыйынтыктардын ишенимдүүлүгү эсептелген маанилердин кремнийдин нитридин синтездөдө алынган өздүк тажрыйбалардын маалыматтары менен канагаттандыраарлык келишүүчүлүгү жана корреляциялуу болушу, макулдашылгандыгы жана дал келиши менен да тастыкталды. Ишенимдүүлүктүн жыйынтыктарынын сандык мүнөздөмөлөрү катары, физикалык катаачылыктын

эсептөөнүн катаачылыгы шарттаган интервалдын чегинен чыкпастыгынын ыктымалдуулугу пайдаланылды.

Алынган жыйынтыктардын практикалык маанилүүлүгү.

Алынган жыйынтыктар конденсирленген абал жана материал таануу тармагында практикалык мааниге ээ. Моделдик изилдөөлөрдү профилдик ЖОЖлордо магистранттарды жана аспиранттарды даярдоодогу билим берүү процессинде кумайлык материалдар жана катуу заттар физикасы дисциплиналарын окутууда колдонууга болот. Сунушталган иш кумайлык кремнийди азоттун атмосферасында реакциялык бышыруунун оптималдык температура – убакыттык режимин аныктоого мүмкүндүк берүүчү теориялык изилдөө болуп эсептелет. Сандык эсептөөлөр, кремнийдин нитридин реакциялык синтездөөдө керамиканын берилген физика – механикалык касиеттери калыптана турган оптималдуу режимди аныктоого багытталган. Сандык эсептөөлөрдүн жыйынтыктары, кремнийдин нитридин толук синтездөө үчүн талап кылынган технологиялык регламентти аныктоо боюнча жүргүзүлгөн кымбат баадагы тажрыйбаларды олуттуу кыскартууга мүмкүндүк берет.

Диссертациядагы коргоого алып чыгарылган негизги жоболор:

1) *Кумайлык кремнийлик жасалгаларды азоттун атмосферасында* реакциялык бышыруу процессин жазуучу физика – математикалык модель.
2) Физика – математикалык моделди (ФММ) компьютердик ишке ашыруунун жыйынтыктары жана цилиндр формасындагы жана башка конфигурациялардагы (формалардагы жана өлчөмдөрдөгү) кумайлык
3) жасалгалар үчүн жүргүзүлгөн сандык эсептөөлөрдү талдоо. Көзөнөктүүлүгү 30% түзгөн, ар кандай конфигурациядагы кумайлык кремнийлик жасалгаларды реакциялык азоттоонун эволюциялык процессинин өзгөчөлүгү.
4) Жука жана калың капталдуу кумайлык кремнийлик жасалгалардын жанында кремнийдин нитридин реакциялык синтездөөнүн кинетикалык мыйзамченемдүүлүктөрү.
5) Реакциялык бышыруу процессин башкарууга мүмкүндүк бере турган реакциялык бышыруунун температурасынын, электр мешиндеги газдын басымынын, ошондой эле жасалгалардын өлчөмдөрүнүн таасиринин мыйзамченемдүүлүктөрү жана кремнийдин нитридин синтездөө процессинин өтүшүнүн узактыгынын, ылдамдыгынын, интенсивдүүлүгүнүн жана бир калыпталуулугунун оптималдуу маанисин аныктоо.

Изденүүчүнүн жеке салымы. Изденүүчү диссертациялык иштин темасын аныктоо жана аны пландоодон баштап, ошондой эле изилдөөлөрдүн маселелерин аныктоону, аны компьютердик ишке ашырууну жана алынган жыйынтыктарды талкулоолорду камтыган, биргелешип жүргүзүлгөн илимий изилдөөлөрдүн баардык этаптарында тикеден тике катышты. Жыйынтыктарды чечмелөө жана илимий макалаларды жазуу илимий жетекчиси ф.м.и.д., профессор Н.К.Касмамытов жана УИАнын академик Ж.Жеенбаев атындагы физика Институтунун кумайлык материалдар лабораториясынын ага илимий кызматкери ф.м.-и.к. Н.Ж. Кайрыевтер менен бирге жүргүзүлдү.

Изилдөөлөрдүн жыйынтыктарын апробациялоо.

Диссертациялык иштин негизги жыйынтыктарын изденүүчү соавтор катары Орусия федерациясынын ЖАК тарабынан рецензияланган журналдарда, РИНЦтин импакт-фактору 0,2 ден жогору болгон журналдарында, КРнын УИАсынын акад. Ж.Жеенбаев атындагы физика Институтунун журналдарында

жана РИНЦке кирген, импакт-фактору нөл болбогон республикалык илимий журналдарда жарыяланган.

Диссертациялык иштин негизги жоболору жана жыйынтыктары төмөндөгүдөй эл аралык конференцияларда баяндалып жана талкууланды:

1) На XIII- Международной научно-практической конференции «Современные тенденции развития науки и технологий» г. Белгород, Россия, 30-апреля 2016 г.
2) На II-Международной научно-практической конференции, посвященной памяти С.Ф.Ковалевской (Международные научные чтения) под патронажем Европейского фонда инновационного развития (Science LAB Group) г.Москва, Россия, 19 сентября 2016 г.
3) На Международной научной конференции «Информационные технологии и математическое моделирование в науке, технике и образовании», посвященной академику НАН КР А.Ж.Жайнакову, - г.Бишкек, Кыргызстан, - 6-8 октября 2016 г.
4) На Международной открытой школе-конференции стран СНГ «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы» г. Уфа, Республика Башкортостан, Россия, 8 октября 2017 г.
5) На XIII – Международной научной конференции «Физика твёрдого тела», посвящённой 20-летию Евразийского национального университета им. Л.Н.Гумилева, г.Астана, Республика Казахстан, 26-28 апреля 2017 г.

Жыйынтыктардын баяндамаларда чагылдырышынын толуктугу

Диссертациялык иштин материалдары РИНЦтин илимий рецензияланган журналдарында жана жыйынтыктарында жарыяланган 15 макалаларда жана КРнын УИАнын акад. Ж.Жеенбаев атындагы физика Институтунун «Кумайлык материалдар» лабораториясынын 2016-2020жж.жылдын отчетторунда жарыяланды.

Диссертациянын түзүмү жана көлөмү. Диссертациялык иш киришүүнү, изилдөө маселесинин коюлушун, 3 бапты, тыянактарды, адабияттын тизмесин жана тиркемелерди камтыйт. Иштин жалпы көлөмү 152 беттен, 39 сүрөттөн, 5 таблицадан жана колдонулган адабияттын 79 аталыштан турган тизмесинен турат.

ДИССЕРТАЦИЯЛЫК ИШТИН НЕГИЗГИ МАЗМУНУ

Киришүүдө диссертациянын темасынын актуалдуулугу негизделип, изилдөөнүн объектиси жана предмети баяндалып, иштин илимий жаңылыгы берилип, илимий жана практикалык маанилүүлүгү талкууланып, коргоого чыгарылган негизги жоболор формулировкаланган.

Биринчи бапта «Кремний нитридин реакциялык бышыруунун заманбап абалы». Диссертациялык иштин темасы менен байланыштагы теориялар жана тажрыйбалар боюнча адабияттык маалыматтарды талдоолор жүргүзүлгөн. Кремнийдин нитридинин кремнийди таза азоттун атмосферасында бышыруудагы калыптануу процессинин негизги технологиялык режимдери жана өзгөчөлүктөрү аныкталган. Кумайлык кремнийди азоттун атмосферасында реакциялык бышыруу процессинде орун алган негизги аспектер жана физикалык кубулуштар ажыратылып жана талкуланды. Кремнийдин нитридинин

микротүзүлүшүнүн реакциялык синтездөөн кийинки калыптанышынын негизги мыйзамченемдүүлүктөрү баяндалды.

Кремнийдин азот менен биргеликте кристаллхимиялык синтезделиши катуу кристаллдык Si заты жана кремнийдин кристаллдык торчосуна диффундирленген азоттун атомдорунун ортосунда жүрүүчү гетерогендик реакциялык процесс катары жүрүп, натыйжада реакциянын өндүрүмүндө Si_3N_4 түрүндөгү жаңы кристаллдык бирикме Si_3N_4 түрүндө пайда болот:

$$3Si+2N_2=Si_3N_4+Q,$$

мында Q-реакциянын жүрүшүндө бөлүнүп чыккан жылуулук.

Газ катуу заттык реакцияларда жүрүүчү процесстерди жазуучу, мүмкүн болгон физика-математикалык моделдер кыскача талкууланды жана баяндалды. Газ катуу-заттык реакциялар боюнча моделдердин үч негизги түрлөрү: бир тектүү эмес, бир тектүү жана ортолук моделдери каралды.

Адабияттык материалдарды талдоонун негизинде изилдөөнүн – кремнийдин нитридин реакциялык синтездөөнүн физика математикалык моделин иштеп чыгуу жана өздүк тажрыйбалардын маалыматтарын пайдалануу менен өндүрүштө колдонулуучу жасалгалардын ар-кандай формалары үчүн сандык эсептөөлөрдү жүргүзүү маселелери формулировкаланды.

Экинчи бапта «Физика-математикалык модель жана сандык эсептөөлөрдүн методикасы». Кристаллдык кремнийди азоттун атмосферасында бышыруу процессин, дифференциалдык теңдемелердин системдерин сандык эсептөө ыкмасын колдонуп, ишенимдүү жазууга жана кремнийдин нитридин жогорку температурада синтездөөнүн кинетикалык мыйзамченемдүүлүктөрүн ачып көрсөтүүгө мүмкүндүк берүүчү, биз иштеп чыккан үч өлчөмдүү физика математикалык модели (ФММ) каралат.

Сунуш кылынган ФММ бир катар жакындатууларды жана жөнөкөйлөтүүлөрдү колдонуу менен сандык ыкмалардын жардамы аркылуу чыгарылган, дифференциалдык үч (1), (2) жана (3) теңдемелеринен турат. ФММ негизинде, диффузиялык жылуулук ташуунун жана кристаллдык кремнийдин азот менен бирге реакциялык синтезделишинин туруктуу эмес физика – математикалык модели болуп эсептелет жана өзүнө өз-ара байланышкан үч дифференциалдык теңдемелерди курамына камтыйт:

$$\left(\rho C_p\right)_{eff}\frac{\partial T}{\partial t}=\nabla\left(\lambda_{eff}\nabla T\right)+Q\cdot\dot{R}_g, \qquad (1)$$

$$\varepsilon_p\frac{\partial n}{\partial t}=\nabla\left(D_{eff}\nabla n\right)-2\dot{R}_g. \qquad (2)$$

$$n_{Si0}\frac{df}{dt}=3\dot{R}_g \qquad (3)$$

Тиешелүү түрдө (1), (2) жана (3) дифференциалдык теңдемелери: *биринчиси* – жасалганын берилген көлөмүнүн аймагындагы температуранын бөлүштүрүлүшүн жана анын убакыт боюнча өзгөрүшүн жазган жылуулук өткөргүчтүктүн теңдемеси болуп саналат; *экинчиси* – бул кремний жасалгасындагы газдын (азоттун) агымынын үзгүлтүксүздүгүнүн теңдемеси; *үчүнчүсү*–азоттун атомдорунун концентрациясынын, кремний жасалгасындагы

кремнийдин нитридин пайда кылуу менен жүргөн азоттоо процессинин натыйжасында өзгөрүүсүн жазуучу теңдеме.

Кремнийдин нитридин жогорку температуралык кристалл-химиялык синтездөө, өзүн иш жүзүндө изотермалык түрдө өтүүчү газ – катуузаттык реакция катары көргөзөт. Изотермалык реакцияларда, эгерде чогултуучу кошулуучу деп, аталган маанилердин кичинелиги эске алынбаса, анда эсептөөнүн талдоочу жана сандык ыкмаларында квазитурактуу жакындатуу өзүн актайт.

Мындай квазитурактуу жакындатуу, сунушталган ФММ деги (1-3) дифференциалдык теңдемелерин сандык жана талдоочулук чыгарууну олуттуу жөнөкөйлөтүүгө мүмкүндүк берди. Башка жагынан алганда, (1-3) теңдемелерин чыгарууну андан-ары жөнөкөйлөтүү үчүн изотермалык жакындатуу жүргүзүлдү. Ушуну менен бирге, көпчүлүк газдарда жана кристаллдык катуу заттарда температуралардын жогорулашы менен алардын физика химиялык касиеттери байкаларлык өзгөрөт. Демек, изотермалык жакындатуу эсептөөлөрдүн жыйынтыктарын белгилүү түрдө байкаларлык өзгөртүп жана байкаларлык катааларга эки учурда гана алып келиши мүмкүн: биринчиден, азот газынын агымындагы температуранын өзгөрүшүнүн олуттуу градиенти бар болсо; жана экинчиден, кремнийдин кумайчаларынын жасалганы түзгөн бышып уюган бөлүкчөлөрүнүн өлчөмдөрү жетишерлик чоң мааниге ээ болсо. Сандык эсептөөлөрдө мындай катааларды жана дал келбестиктерди чыгарып салуу үчүн, газдын (азоттун) мүнөздөмөсүнө жана катуу заттык фазага (кремний) да жакындатуулар жүргүзүлгөн, атап айтканда, жылуулук өткөрүмдүүлүккө, илешкектикке, жылуулук сыйымдуулука, диффузия коэффициентине, реакциянын ылдамдыгынын туруктуусуна, реакциянын жылуулугуна жана башкаларга.

Мурдагы белгилүү моделдерден айырмаланып, биз иштеп чыккан ФММде Кнудсендик диффузия деп аталган кошумча эске алынды. Кнудсендик диффузия катуу заттардагы ачык көзөнөктөр (бири-бири менен катышып туруучу ачык капиллярдык көзөнөктөр) аркылуу газдардын массасын ташуу. Цилиндердик кремнийдин нитридинин үлгүлөрүндө көзөнөктүк 31-32% түзөт, ал эми кремнийдин нитридинин реакциялык бышырылган үлгүлөрүндө көзөнөктүк бир аз азайып 30% түзөт.

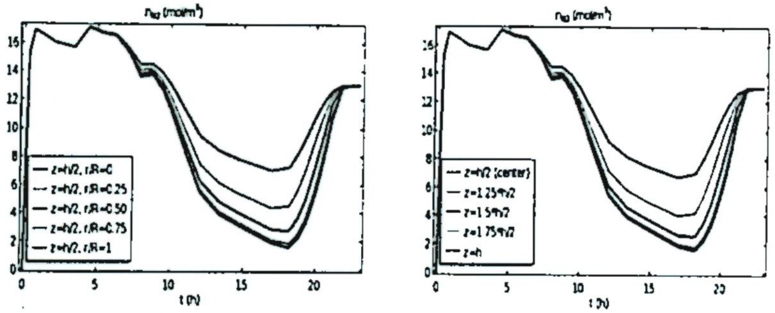
Эгерде үлгүлөрдөгү көзөнөктүк өтө аз болуп, алар аз санда болсо, анда бул газдын (азоттун) кристалл түрүндөгү кремний үлгүлөрүнүн көлөмүнө терең диффузияланышын олуттуу чектөөгө алып келмек. Кумайлык материал таануудан, кумайлык материалдарда туюк бири-бири менен катышпаган көзөнөктөө көзөнөктүк 12% аз болгон учурда пайда болору белгилүү.

Диссертациялык иштеги сандык эсептөөлөр газ-катуу заттык процесстерде колдонулган орточолук деп аталган моделди колдонуу менен жүргүзүлдү. Негизинде, орточолук модель кумайлык көзөнөктүү нерсени төмөндөгүдөй жөнөкөйлөтүлгөн микротүзүлүш катары карайт. Тажрыйбада колдонулуучу кумайлык жасалга кремнийдин шар түрүндөгү микро кумайларынын жыйындысынан турат. Кремнийдин ар-бир шар түрүндөгү микрокумайчасы өз ичинде андан да кичине субданчалык кристаллдардан турат. Сандык эсептөөлөрдү жүргүзгөндө биз субданча да шар түрүндөгү формага ээ деген кошумча жакындатууну колдондук.

ФММди компьютердик ишке ашыруу температуранын эволюциясынын жана башка параметрлердин мейкиндиктик-убакыттык көз карандылыгын,

ошондой эле азоттун концентрациясынын цилиндр формасындагы кремний жасалгасынын ичинде, жасалганын баардык көлөмүндө кремнийдин нитридин реакциялык пайда кылуу менен өзгөрүүсүн ишенимдүү эсептеп чыгууга мүмкүндүк берди.

Үчүнчү бапта «Ар кандай формадагы жана өлчөмдөгү продукция үчүн кремний нитридинин реакциялык синтезин компьютерде ишке ашыруу». Өндүрүштүн ар кандай сфераларында колдонулуучу ар кандай формадагы жана өлчөмдөгү жасалгалар үчүн нитридди реакциялык синтездөөнү сандык эсептөөнүн жыйынтыктары жана талкуулосу баяндалды. 3.1а,б. сүр. туташ цилиндр формасындагы кремний жасалгасы үчүн кремнийдин нитридин реакциялык синтездөөнү сандык эсептөөлөрдүн жыйынтыгы көрсөтүлдү жана талкууланды. Сандык эсептөөлөр үчүн реакциялык азоттонун температурасынын өзгөрүшүнүн убакыттык мыйзамы жана азоттун электрмештин камерасына берилген басымы өзүбүздүн тажрыйбадан алынды. Реакциялык бышыруунун жумушчу температурасынын T=1350°C маанисинде, кармоо убактысынын баштапкы моментинде электр мешинин вакуумдук камерасына азот киргизилип, реакциялык бышыруу процессинде басым турактуу P=1,5 атм да кармалып турду. T-1350°C кезинде 4 саатка барабар кармоо убактысы ичинде диффузия процесси активдүү өтөт, б.а. азоттун атомдору кремний кристаллынын баардык багыттары боюнча интенсивдүү диффузияланышат жана сыноочу үлгүдөгү азоттун концентрациясы кремний жасалгасынын баардык көлөмү боюнча өсөт (3.2а, б сүр. кара).



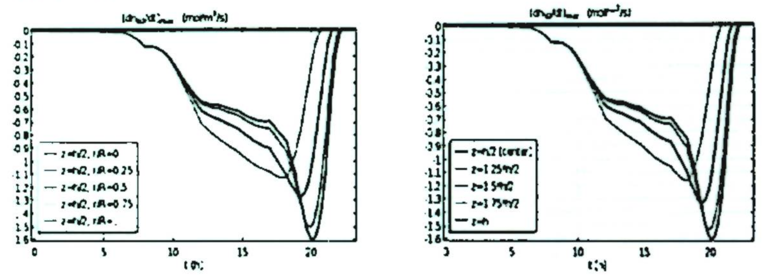
а) б)

3.1 а,б – сүрөтү. Цилиндр формасындагы жасалганы (R=0,215см, h=4,5см) изотермалык убакыттык кармап туруудан көз карандылыкта, азоттун молекуласынын молярдык концентрациясынын кумайлык цилиндрдин радиалдык (а) жана акциалдык (б) окторунун ар-кайсыл чекиттериндеги өзгөрүүсү.

Ийриликтерди талдоо кармоо убактысынын 7ден 24 саатка чейинки интервалында кремнийдин нитридинин реакциялык пайда болушунун темпи жасалганын ар кайсыл чекитинде ар башка болорун көргөзүп турат. Мисалы, цилиндрдин каптал бетинен анын башкы огуна чейинки радикалдык багыттагы ар-башка чекиттеринде азоттонун «тармакталышы» байкалат.

Бул азоттоо үлгүнүн бетинде цилиндрдин борбордук бөлүгүндө, анын огунун жанындагыга караганда мурдарак башталышы жана бир аз тезирек өтүшү

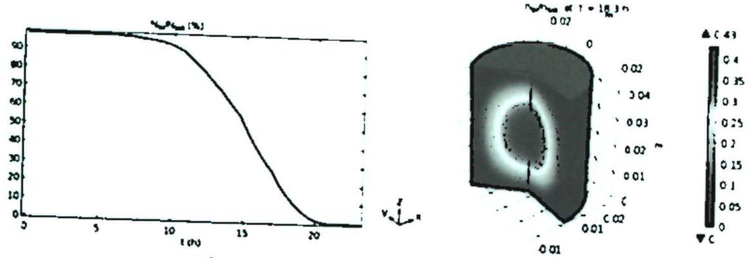
менен түшүндүрүлөт. Акырында, кремний цилиндиринин толук реакциялык азоттолуу процесси, кармоо убактысы 24 саатты түзгөндө бүткүл көлөм боюнча аяктайт. Бул моментте октун борбору менен цилиндрдин бетинин ортосундагы азоттун молярдык концентрациясы бирдей болуп калат. 3.2 а,б-сүр. азоттун атомдорунун молярдык концентрациясынын цилиндрдин радиалдык жана аксиалдык багыттары боюнча өзгөрүүсүн эсептөөнүн кинетикалык ийриликтери көрсөтүлгөн. Реакциялык азотто цилиндирдин бетинде өтө жогорку темпте өтөрү жана эң эле төмөнкү ылдамдыкта кремний цилиндиринин борбордук бөлүгүндө өтөрү көрүнүп турат. Сандык эсептөөлөр кремнийди реакциялык азоттоо ~1100°С тан жогорку температурада эле байкаларын, бирок төмөнкү интенсивдүүлүктө, абдан акырындык менен өтөрүн көргөзүп турат. Реакциялык бышыруунун температурасынын өсүшү менен азоттоонун темпи бөлүктөлүп өсөт жана эң чоң маанисине убакыттын 20 саатка барабар моментинде,1350°С температурасында жетет. 3.3 а,б – сүр. цилиндрдеги кремнийдин баштапкы санынын пайыздык кармалышынын, реакциялык синтезге кирген кремнийдин атомдоруна карата салыштырмалуу азайышынын монотондук кинетикалык ийрилиги көрсөтүлгөн. Ийриликтен, 24 саат кармаганда, кремний азот менен бүткүл көлөмдө кристаллхимиялык реакцияга кирип, кремнийдин нитридин пайда кылары көрүнүп турат.



а) б)

3.2а,б – сүрөтү. Азоттоонун реакциясынын ылдамдыгынын цилиндрдин ар кандай чекиттериндеги (R=0,215см, h=4,5см) эволюциясы: а) каптал бетинен цилиндрдин огуна карата радиалдык багытта, б) цилиндрдин башкы огунун багытына карата.

3.3 б – сүр. цилиндрдин борбордук бөлүгүндө, убакыттын 18,8 саатка барабар моментинде кремний дагы эле толугу менен реакцияланбаганы ачык көрүнүп турат. Кремнийдин нитридин синтездөөнү цилиндрлик жасалганын баардык көлөмү боюнча толугу менен бүткөрүү үчүн реакциялык бышырууну, бышыруунун 1350°С температурасында, азоттун 1,5 атм туруктуу басымында 7 саатка чейин узартуу талап кылынат.



а) б)

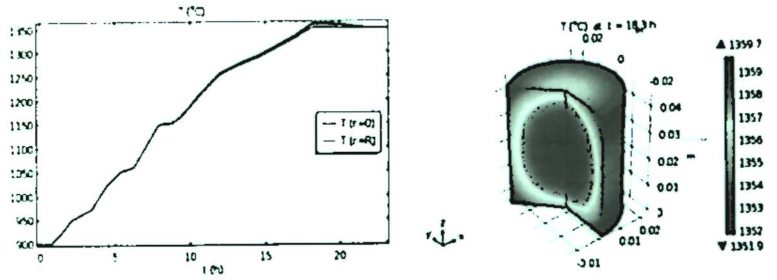
3.3 а,б – сүрөтү. Кремний үлгүсүндөгү, кремнийдин азот менен реакцияга кирбеген атомдорунун кармалышынын жалпы санынын салыштырмалуу өзгөрүшү, пайыз менен: а) реакциялык азоттоонун кармоо убактысынан болгон көз карандылыгынын кинетикалык ийрилиги; б) кремнийдин атомдорунун молярдык концентрациясынын убакыттын 18,3 саатка барабар моментине туура келген мейкиндиктик кайта бөлүштүрүлүшү.

Сандык эсептөөлөрдүн ийриликтерин талдоодон, азоттун кремнийдин субданчасынын кристаллдык торчосуна диффузиялык түрдө кирe баштайт да, алгач бул процесс цилиндирлик жасалганын бетине жакын аймактарда жүрүп, андан соң ички борбордук бөлүгүнө катышуучу капилярлык көзөнөктөр боюнча акырындап ташылат деп, бир маанилүү тастыктого болот. Кремнийдин нитиридин реакциялык синтездөнү сандык эсептөөлөр, кремнийдин нитридинин интенсивдүү реакциялык калыптанышынын фронтунун жасалганын бетине жакын катмарчаларынан ички борбордун аймагына карата которулушун байкоого мүмкүндүк берет.

3.4 а,б – сүр. кремнийди кумайлык цилиндирдин баардык көлөмү боюнча реакциялык азоттоо процессинин убакыттын t=18,3 саатка барабар моментиндеги температуранын бөлүштүрүлүшү көрсөтүлгөн. Сандык эсептөөлөр, бышыруунун температурасынын 1150°С тан 1350°С на чейин интервалында цилиндрдин бети менен анын борбордук бөлүгүнүн ортосундагы температуранын айырмачылыгы акырындап байкала баштарын көргөзүп турат (3.4 а – сүр., көк жана жашыл ийриликтер).

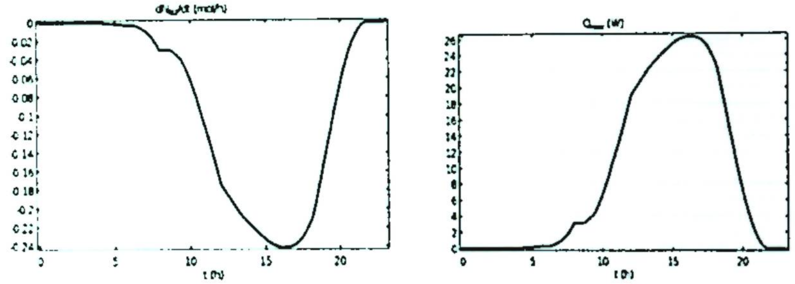
1350°С температурасында кармоо убактысынын 16,5 сааттан баштап 21,5 саатка чейинки интервалында, температуранын бул айырмасы эң чоң маанисине ~8÷9°С на жетет. Бул кремнийдин нитридин синтездөөнүн экзотермалык реакциясы учурунда жылуулуктун кошумча бөлүнүп чыгышы менен байланыштырылат.

3,5а,б – сүр. тиешелүү түрдө, үлгүдөгү реакциялык азоттоонун ылдамдыгынын жана жылуулукту бөлүп чыгаруунун кубаттуулугунун эсептелген ийрилиги көрсөтүлгөн. Реакциялык азоттоонун ылдамдыгы цилиндрдин бетинен анын ички борбордук бөлүгүн көздөй өзгөрүп, цилиндрдин борбордук бөлүгүндө эң чоң маанисине жетет, бул экзотермалык реакциянын фронтунда жылуулуктун кошумча бөлүнүп чыгышы менен шартталат.



3.4 а,б – сүрөтү. Температуранын цилиндрлик жасалганын бетинде жана башкы огун бойлото кармоо убактысынан көз карандылыкта бөлүштүрүлүшү: а) көк жана жашыл ийриликтер тиешелүү түрдө температуранын цилиндрдин борборунда жана бетинде өзгөрүшүнө туура келет; б) температуралык синтездөө процессинин убактысынын t =18,3 саатка барабар моментиндеги мейкиндиктик бөлүштүрүлүшү.

Азоттун кремний жасалгасынын ичиндеги берилген каалагандай чекитиндеги концентрациясы эки процесс менен, атап айтканда: реакциялык азотто жана азоттун атомдорун кремний кристаллынын беттик аймактарынан цилиндрлик жасалганын ички аймагына диффузиялык ташуу менен аныкталат.

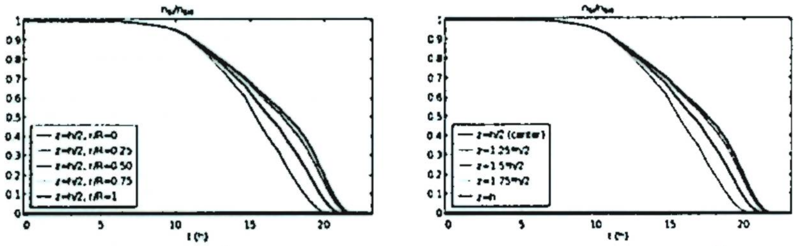


а) б)

3.5 а,б – сүрөтү. Кремнийди азоттун чөйрөсүндө реакциялык бышыруу процессинде, кремнийди азоттоо реакциясынын ылдамдыгынын (а) жана жылуулук бөлүп чыгаруунун кубаттуулугунун (б) убакыттан болгон көз карандылыгы.

Бул эки процесстин ылдамдыктары барабар болгон моментте азоттун концентрациясы өзүнүн эң кичине маанисине жетет (3.2 а,б – сүр. кара). Убакыттын, меште азоттун температурасы туруктуу болуп кармалып турган аралыгында (3.1-сүр. убакыттын t=[2÷3] саат, [5÷6] саат, [8÷9] саат интервалындагы кармоо), реакциялык азоттоонун ылдамдыгы өтө төмөн. Бул кремнийдин кристаллдык торчосунун азоттун атомдору менен диффузиялык каныгуусунун мештин камерасындагы азоттун, биз аз убакыттан кийин кайтадан 1.5 атмге чейин көтөрүлүүчү басымынын 1,25 атмге чейин циклдик түрдө

төмөндөшү менен шартталган жетиштүү эместиги менен байланыштырылат. Буга карабастан, азоттун концентрациясы жасалганын бүткүл кесилиши боюнча монотондуу түрдө өсөт. Бул өсүү кристаллдык кремнийге азотту диффузиялык масса ташуу процессинин реакциялык азоттоого караганда үстөмдүк кылышы менен байланышта болот (3.2а,б – сүр. кара). Кремнийдин нитридинин жогорку жылуулук өткөрүмдүүлүгүнө жараша температуранын үлгүнүн баардык кесилиши боюнча бөлүштүрүлүшү иш жүзүндө бирдей болот жана реакциялык азоттоо процесси азоттун атомдорунун кремний кристаллына диффузиялык өтөрүлүшү менен гана чектелет. Эгерде цилиндрлик жасалганын баштапкы өлчөмүн болжол менен 4,44 эсеге узартсак, б.а. радиустун R=2,15 см баштапкы маанисинде эле цилиндрдин бийиктигин h=20 см ге чейин чоңойтсок, анда анын салыштырма бети 25 % кичирейет. Бул учур үчүн, кремний кристаллына диффузияланган азоттун атомдорунун агылышынын интенсивдүүлүгүн эсептөөнүн мааниси, электр мешинин камерасындагы азоттун басымынын ошол эле маанисине тиешелүү пропорцияда азаят. Жасалганын көлөмүнүн чоңойушунун натыйжасында, беттин жанындагы азоттоонун диффузиялык процесси жана тиешелүү түрдө азоттун атомдорунун жасалганын көлөмүнүн тереңине кириши азоттонун убактысын цилиндрдин баштапкы h=4,5 см ге барабар өлчөмүндөгүгө салыштырмалуу 2 саатка чоңоюшуна алып келет.



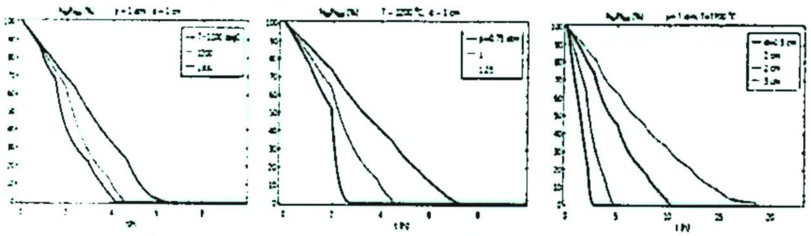
а) б)

3.6а,б – сүрөтү. Цилиндрдин (R=0,215 см, h=4,5 см) радиалдык жана акциалдык окторунун ар-кандай чекиттериндеги кремнийдин реакция кылбаган атомдорунун салыштырмалуу концентрациясынын эволюциясы.

Мында, жасалгадагы температуранын реакция процессинде экзотермалык жылуулуктун бөлүнүп чыгышынан эсебинен пайда болгон эң чоң төмөндөшү ошол боюнча эле калат да ~9°C түзөт.

3.6а,б – сүр. азот менен реакция кылбаган кремнийдин атомдорунун, цилиндрлик үлгүнүн радиалдык (а) жана (б) багыттарындагы берилген чекиттердеги салыштырмалуу кармалышынын азайышынын мыйзамченемдүүлүгү көрсөтүлгөн. Мындан, кармоо убактысынын 15 тен 22 саатка чейинки интервалында, бышыруунун жогорку температурасы 1280-1350°C ка жеткенде, кремнийдин реакция кылбаган атомдорунун саны цилиндрдин көлөмүнүн баардык берилген чекиттеринде монотондуу түрдө азаят. Цилиндрдин борбордук бөлүгүндө реакция кылбаган кремнийдин салыштырма санынын азаюусунун темпи цилиндрдин бетине жакын аймактарындагыга караганда байкаларлык аз.

Ошондой эле тышкы параметрлердин: бышыруу температурасынын, газдын басымынын жана жасалганын өлчөмдөрүнүн кремнийдин нитридин реакциялык синтездөөгө көргөзгөн таасирин изилдөө да кызыгууну пайда кылат. 3.7а,г – сүр. кармоо убактысынын t=18,5 саат моментиндеги жана T=1320°C температурасындагы реакциялык бышырууну сандык эсептөөнүн жыйынтыгы өлчөмдөрү: h=6см, жазылыгы a=4см, калыңдыгы b=2см болгон туташ параллелепипеддин мисалында келтирилген. Мындан, реакциялык бышыруунун температурасы 1100°C тан 1300°C ка чейин өскөндө реакциялык азоттоонун темпи өсөрү көрүнүп турат. Мисалы, калыңдыгы 1см болгон параллелепипед үчүн, мештин камерасындагы газдын басымы туруктуу p=1атм жана реакциялык бышыруунун температурасы 1300°C болгондо, кремнийдин азоттун чөйрөсүндө кремнийдин нитридине толугу менен айланышы, бышыруунун температурасы 1200°C болгондогуга салыштырмалуу 2 саат мурда бүтөт. Реакциялык синтездөөнүн температурасы туруктуу 1200°C ка барабар учурунда, электрмешининин камерасындагы азоттун басымынын p=0,75 атм 1,25атм чейин жогорулашы, кремнийдин кремний нитридине айлануусунда убакыттык темпин да, байкаларлык жогорулатууга алып келди.



а) б) в)

3.7а,в – сүрөтү. Жасалганы азоттоо процессинин эволюциясынын температурадан (а) азоттун мештеги басымынан (б) жана жасалганын каптал бетинен калыңдыгынан көз карандылыгы.

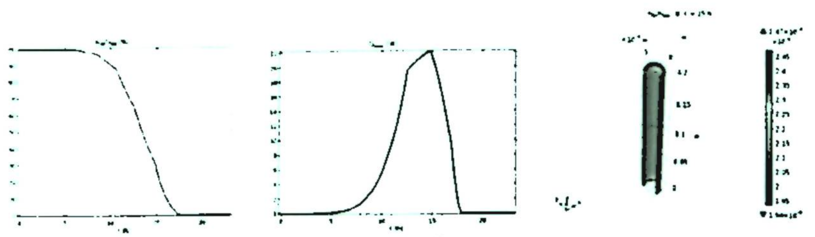
3.7б – сүр., азоттун камерадагы басымын, бышырууну 1200°C барабар туруктуу температурасында жана параллелепипеддин 1 см ге барабар калыңдыгында 0.5 атм ге жогорулатуу, реакциялык бышыруунун кремнийдин нитридинин параллелепипеддин бүткүл көлөмү боюнча толугу менен калыптануусуна чейинки узактыгын 4 саатка кыскарта турганы келип чыгат.

Эгерде реакциялык азоттоо процессин, бышыруунун 1200°C ка барабар температурасында жана мештин камерасындагы азоттун басымы p=1 атм туруктуу бойдон калган учуру үчүн пареллелепипеддин калыңдыгынын 0,5 тен 3 см ге чейин өзгөрүшүнөн көз карандылыкта карасак, анда кремнийдин кремний нитридине калыңдыгы 3 см болгон параллелепипеддин бүткүл көлөмү боюнча толугу менен айланышы үчүн, калыңдыгы 0,5 см болгон параллелепипеддикине караганда 17 саат убакыт көбүрөк талап кылынат. Сандык эсептөөлөр, реакциялык бышыруунун кремнийдин нитридинин параллелепипеддин баардык көлөмү боюнча аягына чейин синтезделишине кеткен убакыттын узактыгына жасалганын өлчөмдөрү (капталынын калыңдыгы) өтө сезилерлик таасир кыларын көргөзөт. Кремнийдин нитридинин массивдүү параллелепипеддин борбордук ички аймактарында реакциялык синтезделишинин темпи жасалганын беттерине жакын

аймактарындагыга караганда ~2÷3 саатка артка калат. Кремнийдин нитридинин пареллелепипеддин бүткүл көлому (берилген өлчөмдөр үчүн) боюнча синтезделүү процессинин температурасы бирдей эмес; параллелепипеддин борбордук бөлүгүндөгү температура параллелепипеддин четки (чокулары жана кырлары) бөлүктөрүнө салыштырмалуу 5-6°C ка жогору.

Кремнийдин калдыктарынын кремнийдин нитридине толугу менен айланышы үчүн азоттун атомдорунун массивдүү жасалганын борбордук бөлүгүнө кошумча диффузиялык агып кириши талап кылынат. Кристаллдык кремнийди реакциялык азоттоо процессинде массивдүү жасалгалардын борбордук бөлүгүндөгү температура, жасалганын четтериндегиге караганда (жасалганын конфигурациясы жана өлчөмдөрүнөн көз карандылыкта) ΔT=5° ÷ 10°C ка жогору болгондуктан, кристаллдык торчонун борбордук бөлүктөрүндөгү термелүүлүктүк динамика да жогору болот. Ушуга байланыштуу, жасалганын борбордук бөлүктөрүндө кристаллдык торчонун параметрлери «борпоңураак» болуп калат да, бул болсо азоттун атомдор үчүн потенциалдык тосмонун кичирейишине алып келет жана азоттун атомдорунун диффузиялык агымынын кремнийдин кристаллдык торчосунун жасалганын четтериндегиге караганда температурасы жогору болгон борбордун багытын көздөй жеңил өтүшүн өбөлгөлөйт. Башкача айтканда, диффузия температуранын градиенти жогорулаган аймака багытталган болуп калат. Жасалганын борбордук бөлүгүндөгү температуранын жогорулашын кремнийдин нитридинин пайда болушунун экзотермалык мүнөзгө ээ болушу, б.а. кремнийдин кремний нитридине реакциялык айланышынын фронттук зонасында жылуулуктун кошуча бөлүнүп чыгышы менен байланыштырылат, ал эми үлгүнүн массивдүү болушу жылуулуктун электр мешинин мейкиндигине тез агып кетишин акырындатат.

Ошентип, иште өндүрүштүн ар кайсыл тармактарында колдонула турган бир катар жасалгалар, атап айтканда ар кандай конфигурациядагы жука жана калың капталдуу, жасалгалар: мисалы, термопара үчүн чехол катары колдонулуучу түтүктөр; кымбат баалуу металлдарды афинаждоодо колдонулган кесилген конус түрүндөгү стакандар; Кыргыз Республикасынын «Астра» КХМЗ нда Чохральский ыкмасын колдонуп жарым өткөргүч кристаллдык кремнийди өстүрүүдө колдонулуучу массивдүү тигелдер; жогорку температуралык электр мештеринде экрандарды бекитүүчү катары колдонулуучу массивдүү чоң бурамалар ж.б.у.с. үчүн үч өлчөмдүү сандык эсептөөлөр жүргүзүлдү жана баяндалды. Авторефераттын көлөмүнүн чектелүү болгондугуна байланыштуу, металлургияда пайдаланылуучу термопаралардын чехолдору катары колдонулуучу жука капталдуу түтүктөр үчүн жүргүзүлгөн кээ бир сандык эсептөөлөрдү кыскача келтирип кетебиз. 3.8а,г – сүр. реакциялык бышыруунун термопаралардын чехолдору катары колдонулуучу калыңдыгы 3мм болгон жука капталдуу цилиндр формасындагы түтүк үчүн жүргүзүлгөн сандык үч өлчөмдүү эсептөөлөрдүн жыйынтыгы көрсөтүлгөн.



а) б) в)

3.8а,б – сүрөтү. Ички жана тышкы радиустары тиешелүү түрдө R_1=1см, R_2=1.3 см жана узундугу h=20 см болгон цилиндрлик жука капталдуу түтүк үчүн, реакциялык бышыруунун температурасы 1280°С жана кармоонун моменти t=15,4 саат болгон учур үчүн жүргүзүлгөн сандык эсептөөлөрдүн жыйынтыктары: а-кармонун берилген моментиндеги азоттун атомдору менен реакцияга кирбеген кремнийдин атомдорунун жалпы саны; б-кремнийдин нитридинин реакциялык синтезделүү процессинде бөлүнүп чыккан жылуулуктун $Q=4,4112x10^5$ Ж саны; в-температуранын түтүктүн көлөмү боюнча мейкиндиктик кайрадан бөлүштүрүлүшү жана кремнийдин реакцияга кирбеген атомдорунун салыштырмалу концентрациясы.

Сандык эсептөөлөр боюнча, реакциялык бышыруунун убакыттын t=15,4 саат моментинде (3.8а – сүр. кара) кремнийдин азот менен реакцияга кирбеген саны кремний жасалгасынын көлөмү боюнча 28% га жакынды түзөт. Кремнийдин азот менен кристалл химиялык реакцияга кириши жылуулуктун кошумча санын Q бөлүп чыгаруу менен коштолот. Убакыттын t=14,7 саат моментинде (3.8б – сүр. кара) кремнийдин нитридин синтездөөнүн экзотермалык реакциясына жараша жылуулуктун $Q=4,4112x10^5$ Ж барабар эң чоң бөлүнүшү байкалат. Бул факт кремнийдин нитридинин синтезделиши ушул температурада жана убакыттын ушул моментинде көчкү түрүндө жүрөрүн бир маанилүү тастыктайт. Бул учурда температура, синтездөө процессинде жука капталдуу цилиндр түтүктүн,температурасы жасалганын көлөмүнө салыштырмалуу 1°С ка жогору болгон туура жактык бөлүгүнөн башка бүткүл көлөмү боюнча иш жүзүндө бир калыпта бөлүштүрүлөт.

Калыбы, бул эки фактор менен, биринчиден кремнийдин нитридинин өтө жогорку жылуулук берүү жөндөмдүүлүгү жана экинчиден, реакциянын фронтунда бөлүнүп чыккан жылуулуктун бир бөлүгү, кремний азот менен реакцияга кире элек жаңы тилкелерде кремнийдин нитридинин жаңы кристаллдарын кезектеги реакциялык пайда кылуучу азоттун андан аркы диффузиялык кириши сыяктуу жүрөт. Бышыруунун жумушчу температурасы 1280°С учурунда, кармоонун 5 сааттан жана 17,5 саатка чейинки интервалында реакцияга кирбеген кремнийдин саны көчкү түрүндө, тез темпте азаят, ал эми кармоонун убактысынын 17,5÷ 24 саатка чейинки интервалында, калган кремний акырындык менен түтүктүн бүткүл көлөмү боюнча кремнийдин нитридине айланат. Ошентип, кремнийди диффузиялык – реакциялык азоттону, крмнийдин нитридине кристалл-химиялык айлануусу менен бирге, калыңдыгы 0,3 төн 0,6 см ге чейин өзгөргөн жука капталдуу ар-кандай жасалгалар үчүн берилген убакыт учурунда жүргүзүлгөн сандык эсептөөлөр ыкмасы, биринчи жакындатууда, азот

менен реакцияга кирбеген жасалгада калдыктуу кремнийдин салыштырма кармалышы анча чоң эмес айырмаланышын айтпаганда, жыйынтыктардын окшоштугун, орун аларын көргөзөт.

ТЫЯНАКТАР:

1. Ар кандай конфигурациядагы (формалары жана өлчөмдөрү боюнча) кумайлык кремнийлик жасалгалардын кремний-нитридин диффузиялык–реакциялык синтездөөсүн ишенимдүү жазуучу дифференциалдык үч теңдеме түрүндөгү физика-математикалык модели иштелип чыкты.
2. Туруктуу эмес дифференциалдык ФММ теңдемелерин комплекстик COMSOL multiphysics – 5.3 программасынын жардамы менен жакындатылган талдоо жана сандык эсептөөлөр жүргүзүлдү.
3. Кремнийдин нитридинин синтезделиши, алгач жасалганын бетине жакын аймактарында жасалганын борборун көздөй фронттук монотондуу өтүшү менен жүрө турганы аныкталды. Жука жана калың капталдуу кумайлык кремнийлик жасалгалардын жанында кремнийдин нитридинин реакциялык синтезделишинин кинетикалык мыйзамченемдүүлүктөрү изилденди. Жасалгалардын массасынын жана көлөмүнүн чоңоюшу менен кремнийдин нитридинин реакциялык пайда болушунун кинетикасы, реакциялык бышыруунун температуралык режиминин жана газдын басымынын бирдей баштапкы шарттарында, кремнийдин нитридинин акырына чейин калыптанышына чейинки реакциялык бышыруунун убактысынын жогорулашына алып келет.
4. Сандык эсептөөлөр аркылуу, тажрыйба менен жакшы дал келген, диффузиялык азоттоонун эволюциялык процесстери жана кремнийдин нитридинин реакциялык калыптанышы аныкталды. Реакциялык бышыруунун температурасынын, электр мешиндеги газдын басымынын, ошондой эле жасалганын өлчөмдөрүнүн, реакциялык бышыруу процессин башкарууга, б.а. кремнийдин нитридин синтездөөнүн өтүшүнүн узактыгынын, интенсивдүүлүгүнүн жана бир калыптуулугунун оптималдуу маанисин кыныксыз аныктоого мүмкүндүк берүүчү мыйзамченемдүүлүктөр аныкталды.
5. Сандык эсептөөлөр, кремнийдин нитридинин жасалганын бүткүл көлөмү боюнча акыына чейин синтезделишине чейинки реакциялык бышыруунун узактыгына жасалганын габарити жана капталдарынын калыңдыгы байкаларлык таасир кыларын көргөздү. Кремнийдин нитридинин реакциялык синтезделишинин темптери массивдүү параллелепипеддин борбордук ички аймактарында жасалганын бетине жакын аймактарына караганда ~2÷3 саатка кечигет.

ЖАРЫК КөРГөН ИШТЕРДИН ТИЗМЕСИ

1. **Сатаев, Л.О.** Влияние температуры, давления газа и внешних параметров изделия, на реакционный синтез нитрида кремния [текст] /Н.К. Касмамытов, Н.Ж.Кайрыев, Л.О. Сатаев //Бишкек: научно-информационный журнал ИФ им. академика Ж.Жеенбаева НАН КР «Материаловедение», 2021. -№1. – С.6-12.
2. **Сатаев, Л.О.** Модельные расчеты реакционного синтеза нитрида кремния для толстостенных изделий [текст] /СатаевЛ.О., Н.К.Касмамытов, Н.Ж. Кайрыев

// Бишкек: научно-информационный журнал ИФ им. академика Ж.Жеенбаева НАН КР «Материаловедение», 2021. -№1. – С.13-20.

3. **Сатаев, Л.О.** Модельные расчеты реакционного синтеза нитрида кремния для тонкостенных изделий[текст] / Л.О. Сатаев //Бишкек: научный журнал ИФ им. академика Ж.Жеенбаева НАН КР «Физика», 2021. -№1. – С.5-11.
4. **Сатаев, Л.О.** Модельные расчеты реакционного спекания кремниевых изделий в атмосфере азота[текст] /Л.О. Сатаев, Н.К. Касмамытов, Н.Ж.Кайрыев // Бишкек: научный журнал ИФ им. академика Ж.Жеенбаева НАН КР «Физика», 2021. -№1. – С.12-10.
5. **Сатаев, Л.О.** Особенности физико-математической модели реакционного спекания пористого порошкового кремниевого тела в среде азота [текст] / Л.О.Сатаев, Н.К.Касмамытов, Н.Ж. Кайрыев // Калининград: Вестник науки и образования Севера –Запада России, 2019. –Т.5. -№1. – С.89-97.
6. **Сатаев, Л.О.** Численные расчёты кинетики реакционного спекания сферической частицы [текст] /Л.О.Сатаев, Н.К.Касмамытов, Н.Ж. Кайрыев // Калининград: Вестник науки и образования Севера –Запада России, 2018. – Т.4. -№4. – С.91-98.
7. **Сатаев, Л.О.** Модельные исследования кинетики реакционного спекания полнотелых сферических частиц кремния в азоте [текст] / Сатаев Л.О., Н.К.Касмамытов, Н.Ж. Кайрыев // Калининград: Вестник науки и образования Севера –Запада России, 2018. –Т.4. -№3. – С.101-108.
8. **Касмамытов Н.К.** Моделирование реакционного спекания частицы кремния сферической формы в атмосфере азота [текст] / Н.К.Касмамытов, Н.Ж. Кайрыев, Л.О.Сатаев // Бишкек: научный журнал ИФТПиМ НАН КР «Физика», 2017. -№1. - С.87-90.
9. **Касмамытов Н.К.** Физико-математическое моделирование реакционного спекания кристаллического кремния в атмосфере азота [текст]/ Н.К.Касмамытов, Н.Ж. Кайрыев, Л.О.Сатаев // Бишкек: научн. техн. журнал «Известия КГТУ им. И.Раззакова», 2016. - №3(39), ч. 1. – С.135-139.
10. **Сатаев Л.О.** Расчётные данные по формированию нитрида кремния в процессе реакционного спекания кремния в атмосфере азота [текст] / Л.О.Сатаев, Н.К.Касмамытов, Н.Ж.Кайрыев //Россия, Белгород: периодический научный сборник «Современные тенденции развития науки и технологий», 2016. - №4-1.– С.46-53.
11. **Касмамытов Н.К.** Двухмерная нестационарная модель реакционного спекания кремния в атмосфере азота [текст] / Н.К.Касмамытов, Л.О.Сатаев, Н.Ж.Кайрыев.// Москва: Европейский фонд инновационного развития.- Сб. труд. II- Международные научные чтения памяти Софьи Ковалевской. – 19 сент.- 2016. – С. 5-8.
12. **Касмамытов Н.К.** Численные расчёты процесса реакционного спекания кремния в атмосфере азота на основе двухмерной модели [текст] / Н.К.Касмамытов, Л.О.Сатаев, Н.Ж.Кайрыев. // Москва:
13. Европейский фонд инновационного развития.- Сб. труд. II- Международные научные чтения памяти Софьи Ковалевской, 19 сент., 2016. –С. 8-15.
14. **Касмамытов Н.К.** Нано- и ультраструктурированные нитридокремниевые материалы, полученные методом реакционного спекания [текст] / Н.К. Касмамытов, Л.О. Сатаев// Астана: тезисы, сб. трудов XIII – Международной

научной конференции «Физика твёрдого тела», посвящённой 20-летию Евразийского национального университета им. Л.Н.Гумилева, 26-28 апреля, 2016. – С.98.

15. **Касмамытов Н.К.** Двухмерная модель реакционного спекания керамики на основе нитрида кремния [текст] / Н.К. Касмамытов, Л.О. Сатаев, Н.Ж.Кайрыев // Астана: тезисы, сб. трудов XIII – Международной научной конференции «Физика твёрдого тела», посвящённой 20-летию Евразийского национального университета им. Л.Н.Гумилева, 26-28 апреля 2016. – С.99.
16. **Касмамытов Н.К.** Численное моделирование реакционного спекания отформованных ультрадисперсных порошков кремния в атмосфере азота [текст] / Н.К.Касмамытов, Л.О.Сатаев, Н.Ж.Кайрыев // Россия, Институт сверхпластичных материалов РАН., Уфа: Школа конференция стран СНГ, Тезисы, сб. трудов «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы» 03 август, 2016. — С. 56.

Сатаев Лесбек Оргалиевичтин 01.04.07 – Конденсирленген абалдын физикасы адистиги боюнча «Кремний нитридин реакциялык бышырууну моделдик изилдөө» темасында физика жана математика илимдеринин кандидаты илимпоздук даражасын изденип алуу үчүн жазылган диссертациялык ишинин

РЕЗЮМЕСИ

Урунттуу сөздөр: реакциялык бышыруу, кремний, азот, кумайлык жасалгалар, азоттоо процесси, кремнийдин нитридин синтездөө, моделдөө, дифференциалдык теңдемелер, жакындатылган чыгарылыш, эсептөөнүн сандык ыкмасы, кинетика, синтездөөнүн өзгөчөлүктөрү.

Изилдөө объектиси: Кремнийдин ар-кандай конфигурациядагы кумайлык жасалгаларын таза азоттун атмосферасында реакциялык бышыруу процессиндеги реакциялык синтез менен диффузиялык жылуулук – масса ташуу процессинин мыйзам ченемдүүлүктөрү. **Изилдөөнүн предмети:** Кремнийдин нитридин синтездөөнүн кинетикасына тышкы параметрлердин жана жасалгалардын өлчөмдөрүнүн жана формаларынын таасирин изилдөө. **Изилдөө ыкмалары:** теориялык жана математикалык физиканын, дифференциалдык теңдемелер теориясынын ыкмаларын, теңдемелерди аппроксимациялоо жана аларды итерациялык чыгаруу ыкмаларын пайдалануу менен колдонуп, сандык эсептөөлөрдү жүргүзүү.

Иштин максаты: Кремнийдин ар-кандай конфигурациядагы кумайлык жасалгаларын азоттун атмосферасында реакциялык бышыруунун туруктуу эмес моделин иштеп чыгуу. Кремнийдин нитридин кристаллхимиялык синтездөөнүн кинетикалык мыйзам ченемдүүлүктөрүн аныктоо боюнча теориялык изилдөөлөрдү сандык эсептөөр аркылуу жүргүзүү. **Натыйжалар, илимий жыйынтыктар:** Жогорку температурада кремнийди азоттун атмосферасында бышыруу учурунда, кремнийди диффузиялык азоттону баяндоо үчүн кремнийдин нитридин реакциялык синтездөөнүн физика-математикалык модели биринчи жолу иштеп чыгарылды. Кремнийдин ар-кандай конфигурациядагы көзөнөктүү жасалгаларын азоттун атмосферасында реакциялык азоттоо процессинин кинетикасын, Кнудсендик диффузияны эске алуу менен сандык эсептөөлөр биринчи жолу жүргүзүлдү. Кремнийдин кумайлык жасалгаларын азоттук атмосферада бышыруу процессиндеги газ-катуу заттык реакциясы компьютерде *ортомчулук модели* колдонуу менен ишке ашырылды. Кремнийдин нитридин реакциялык синтездөө процессинин кинетикалык мыйзам ченемдүүлүктөрү калың жана жука капталдуу жасалгалар үчүн жүргүзүлдү. Кремнийдин нитридин реакциялык синтездөөнүн жүрүшүнүн берилген температура жана реакциялык бышыруунун узактыгы үчүн, азоттун электр мешиндеги басымынан өзгөрүүсүнө, жасалгалардын конфигурациясына жана өлчөмүнө карата узактыгынын, ылдамдыгынын жана интенсивдүүлүгүнүн маанилери аныкталды.

Колдонулушу: Иштин натыйжалары нитриддик керамиканы алуу учурунда реакциялык бышыруунун оптималдык режимин иштеп чыгуу үчүн керамикалык материал таануу аймагында колдонулат.

РЕЗЮМЕ

диссертации Сатаева Лесбека Оргалиевича на тему: «Модельные исследования реакционного спекания нитрида кремния» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 физика конденсированного состояния

Ключевые слова: реакционное спекание, кремний, азот, порошковые изделия, процесс азотирования, синтез нитрида кремния, моделирование, дифференциальные уравнения, приближенное решение, численный метод расчета, кинетика, особенности синтеза.

Объект исследования – закономерности диффузионного тепло-массопереноса с реакционным синтезом в процессе спекания кремниевых порошковых изделий различной конфигурации в атмосфере чистого азота. **Предмет исследования** – влияние внешних параметров и конфигурации изделий (размеры и форма) на кинетику синтеза нитрида кремния. **Методы исследования** - численные расчеты с применением методов теоретической и математической физики, теории дифференциальных уравнений с использованием методов аппроксимации уравнений и их итерационного решения. **Цель работы** - разработка нестационарной модели реакционного спекания порошковых изделий кремния различной конфигурации в атмосфере азота. Проведение теоретических исследований по выявлению кинетических закономерностей кристаллохимического синтеза нитрида кремния методом численных расчетов. **Результаты, научная новизна** - впервые разработана физико-математическая модель реакционного синтеза нитрида кремния для описания диффузионно-реакционного азотирования кремния при высоких температурах спекания кремния в атмосфере азота. Проведены численные расчеты кинетики процесса реакционного азотирования пористых кремниевых изделий различной конфигурации в атмосфере азота с учетом кнудсеновской диффузии. Проведена компьютерная реализация газо-твердотельной реакции в процессе спекания порошкового кремниевого изделия в атмосфере азота с применением так называемой промежуточной модели. Определены кинетические закономерности процесса реакционного синтеза нитрида кремния для толстостенных и тонкостенных изделий. Выявлены значения длительности, скорости, интенсивности протекания реакционного синтеза нитрида кремния для заданных температур и времен выдержек реакционного спекания, от изменений давления азота в электропечи, от конфигурации и размеров изделий. **Применение-** результаты работы будут применятся в области керамического материаловедения при разработке оптимальных режимов реакционного спекания при получении нитридной керамики.

RESUME

The dissertation of candidate Satayev Lesbek Orngalievich on "Model studies of the reactionary sintering of silicon nitrid" for the degree in mathematics and physics 01.04.07 and physics of condensed state as specialization.

Key words: reactionary sintering, silicon, nitrogen, powder products, nitrogen process, silicon nitride synthesis, modeling, differential equations, approximate solution, numerical method of calculation, kinetics, synthesis features.

The object of the study is the regularity of diffusion heat-mass transfer with reactionary synthesis in the process of sintering silicon powder products of different configurations in the atmosphere of pure nitrogen. **The subject of the study** is the influence of external parameters and configuration of products (size and shape) on the kinetics of silicon nitrid synthesis. **The purpose of the work** is the development of a non-stationary reactionary sintering model of silicon powder products of different configurations in the nitrogen atmosphere. Theoretical studies to identify kinetic patterns of crystalochemical synthesis of silicon nitrids by numerical calculations. **Results, scientific novelty** - for the first time, a physical and mathematical model of the reactionary synthesis of silicon nitrid is developed to describe the diffusion-reactionary nitrogenization of silicon at high temperatures of silicon sintering in the nitrogen atmosphere. Numerical calculations of kinetics of the process of reactionary nitrogenization of porous silicon products of different configurations in the nitrogen atmosphere, taking into account knudsen diffusion were conducted. Computer implementation of the gas-solid reaction in the process of sintering powdered silicon product in the nitrogen atmosphere using the so-called intermediate model was carried out. Kinetic patterns of the process of reactionary synthesis of silicon nitride for thick-walled and thin-walled products have been defined. The values of duration, speed, intensity of reactionary synthesis of silicon nitride for specified temperatures and times of reaction sintering exposure, from changes in nitrogen pressure in the electric furnace, from the configuration and size of the products have been revealed.

Application-results of the work will be used in the field of ceramic material science to develop optimal modes of reactionary sintering when obtaining nitride ceramics.

Сатаев Лесбек Оригалиевич

Кремнийдин нитридин реакциялык бышырууну моделдик изилдөө

Физика-математика илимдеринин кандидаты илимий даражасын изденип алуу үчүн жазылган диссертациянын

авторефераты

Формат 60х84/16. Офсетная бумага.
Объем 1,5 п.л. Тираж 100 экз.

Отпечатано в типографии «Мега Формат»