

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛИЧЕСТВЕННЫХ ОТНОШЕНИЙ ФАЗ, СОСУЩЕСТВУЮЩИХ В ПРОЦЕССЕ КАРБОТЕРМИЧЕСКОГО СИНТЕЗА β -SiC

А.С. Лебедев^{1,2}, В.Е. Еремяшев^{1,3}, Е.А. Трофимов², Ю.Д. Савина²

¹ Институт минералогии УрО РАН, г. Миасс, Россия

² Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Россия

³ Южно-Уральский государственный университет, филиал в г. Златоусте, г. Златоуст, Россия

Уникальные свойства карбида кремния в виде ультрадисперсных порошков обуславливают его широкое применение в качестве различных наполнителей и модификаторов сплавов, керамических и металлокерамических материалов, защитных покрытий различного назначения. В настоящее время практически весь ультрадисперсный порошок карбида кремния получают из модификации α -SiC, синтезированного по многостадийной технологии методом Ачесона. Текущая тенденция развития технологий синтеза SiC направлена на получение порошков карбида кремния 3C-SiC(β) модификации, обладающей более привлекательными характеристиками. Данный аспект определяет актуальность исследований, направленных на разработку и апробирование эффективных технологий получения ультрадисперсных порошков карбида кремния 3C-SiC(β) модификации.

В работе приведены результаты термодинамического моделирования фазовых равновесий, реализующихся в системе Si–O–C для сечения C–SiO₂ в диапазоне температур 1400–1900 °C при различных отношениях количества углерода и оксида кремния. В процессе проведенных расчетов учитывалась возможность появления в системе газовой фазы и жидких кремния, углерода и оксида кремния. Теоретически определены доли основных компонентов, объем и состав газов, образующихся в ходе синтеза. В соответствии с результатом расчета фазовых диаграмм образование газообразных продуктов взаимодействия наблюдается только при температуре выше 1514 °C. Основным компонентом газовой смеси, образующейся в процессе синтеза в зоне реакции, является угарный газ. Среди других компонентов газовой смеси можно выделить монооксид кремния и углекислый газ. Содержание других компонентов, среди которых преобладают кремнийсодержащие, является несущественным. При соотношении $C/(SiO_2+C) \geq 0,37$ в газовой фазе имеет место скачкообразное снижение содержания всех газов-примесей.

Полученные данные создают теоретическую основу для выбора оптимальных условий для создания устойчивой автономной защитной атмосферы при проведении карботермического синтеза карбида кремния 3C-SiC(β) модификации, что обеспечивает надежную теоретическую основу энергоэффективного карботермического метода синтеза микроразмерного SiC из чистого природного кварца и графита без использования внешней защитной атмосферы.

Ключевые слова: карбид кремния, карботермический синтез, термодинамическое моделирование, состав фаз.

Введение

Уникальные свойства карбида кремния в виде ультрадисперсных порошков обуславливают его широкое применение в качестве различных наполнителей и модификаторов сплавов, керамических и металлокерамических материалов, защитных покрытий. Обзор методов синтеза карбида кремния указывает на то, что метод Ачесона с учетом всех его модификаций является наиболее распространенным промышленным методом получения карбида кремния [1–7]. Этот высокотемпературный способ синтеза карборунда достаточно прост, является низкзатратным, но не способен обеспечить возможность высокого выхода чистого и однородного SiC. Одним из альтернативных вариантов карботермического синтеза является спеканием кварца с углеродом с использованием в качестве источника углерода органических материалов [8–11] или углеродсодержащих отходов [12]. Термоплазменный синтез карбида кремния является процес-

сом, характеризующимся температурой до $> 10\ 000\ \text{K}$ [13]. В качестве источника кремния используют газ SiCl_4 , а в качестве источника углерода применяется метан [14]. За счет быстрого охлаждения полученных продуктов получают наноразмерные порошки карбида кремния 3С-SiC модификации.

При синтезе карбида кремния золь-гель методом источником Si и C являются водорастворимые органические соединения [15, 16]. Порошок, получаемый после просушивания геля и последующего карботермического восстановления при повышенной температуре, имеет большую площадь поверхности [17]. Материалы, полученные золь-гель методом, имеют довольно низкую плотность по сравнению с другими методами получения SiC [13]. В случае промышленного применения по сравнению с классическим методом Ачесона этот процесс достаточно дорогой, так как требует дорогостоящих прекурсоров. Метод роста SiC высокотемпературным осаждением из газовой фазы (HTCVD) [18–22] обеспечивает стабильность стехиометрии и низкая дефектность растущего кристалла. Недостатком метода является низкая скорость роста [23]. В основе сублимационного метода лежит процесс нагрева материала-источника до температуры сублимации с последующим осаждением его на затравке. Данный метод является более производительным по сравнению с HTCVD, но карбид кремния, полученный этим методом, является менее чистым и стехиометрически неоднородным.

В настоящее время практически весь ультрадисперсный порошок карбида кремния получают в виде α -SiC модификации по многостадийной технологии методом Ачесона. Текущая тенденция развития технологий синтеза SiC направлена на получение порошков карбида кремния 3С-SiC(β) модификации, обладающей более привлекательными характеристиками. Сдерживающим фактором получения и применения 3С-SiC модификации карбида кремния является отсутствие недорогих и эффективных технологий синтеза данного материала заданной чистоты и гранулометрического состава. Наиболее простыми и распространенными способами получения порошков 3С-SiC модификации карбида кремния промышленной чистоты являются методы, включающие спекание смеси кварца (SiO_2) и углерода в электропечах при температурах $2000\text{--}2600\ \text{°C}$ [9, 11, 24–25]. Карботермический синтез в условиях инертной атмосферы позволяет снизить температуру процесса до $1400\text{--}1700\ \text{°C}$ и получать β -SiC модификацию карбида, однако это требует более сложного оборудования. Данный аспект определяет актуальность исследований, направленных на разработку и апробирование эффективных технологий получения ультрадисперсных порошков карбида кремния 3С-SiC(β) модификации.

Ранее нами показана принципиальная возможность энергоэффективного карботермического синтеза нано- и микроразмерного β -SiC из чистого природного кварца и графита без использования внешней защитной атмосферы [26–28]. Подбор оптимальных параметров проведения карботермического синтеза SiC требует экспериментальных и теоретических работ, направленных на изучение массовых соотношений всех твердых, жидких и газовых фаз, возникающих в процессе синтеза в зависимости от его условий и, в первую очередь, в зависимости от соотношения масс исходных компонентов и температуры синтеза. В рамках теоретической части такого рода работ нами было выполнено термодинамическое моделирование фазовых равновесий, реализующихся в системе Si–O–C для сечения C–SiO₂ в диапазоне температур $1400\text{--}1900\ \text{°C}$ при различных отношениях масс углерода и оксида кремния в исходной смеси.

Экспериментальная часть

Моделирование выполнено с помощью блока Equilibrium программного пакета FactSage (версия 7.0) производства Thermfact (Канада) и GTT Technologies (Германия) [29–31] и данных баз SGPS и FToxid. Были использованы данные для графита, алмаза, расплавленного углерода, твердого и жидкого кремния, α -SiC и β -SiC, двадцати шести возможных компонентов газовой фазы и восьми кристаллических модификаций оксида кремния и оксидного (шлакового) расплава, а также параметр уравнения Редлиха – Кистера из работы [32], характеризующий расплав кремния и углерода. В процессе проведенных расчетов учитывалась возможность появления в системе газовой фазы и жидких кремния, углерода и оксида кремния. Общее давление в системе принималось равным 1 бар.

Обсуждение результатов

Результаты моделирования представлены на рисунках и отражают состав и количественные соотношения масс всех образующихся в исследуемой системе Si–O–C фаз в зависимости от соотношения масс исходных компонентов и температуры процесса (рис. 1, 2), а также данные о составе газовой фазы (рис. 3).

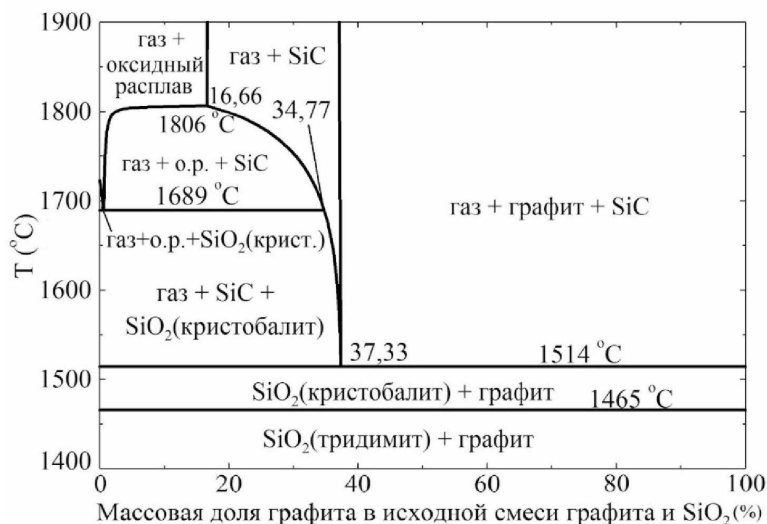


Рис. 1. Результаты расчёта фазовой диаграммы системы Si–O–C для сечения C–SiO₂

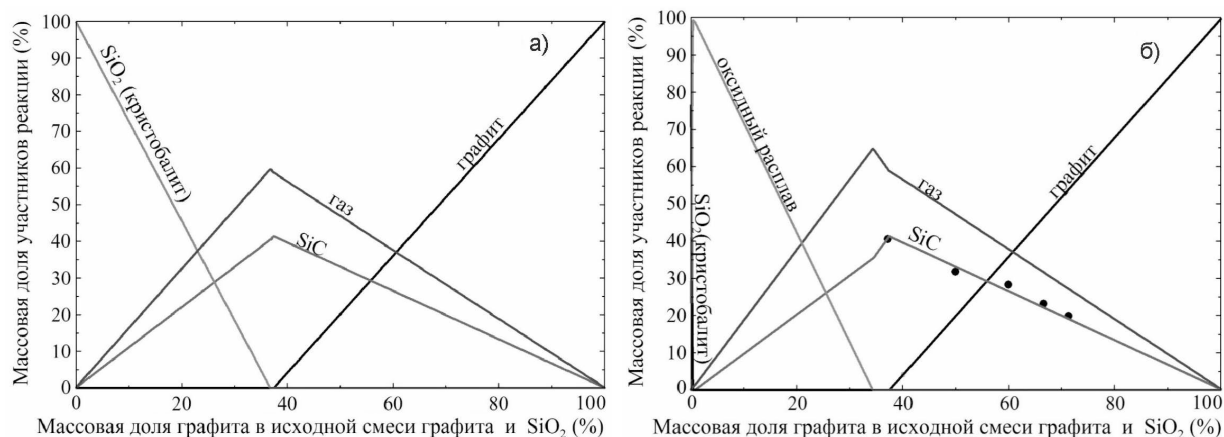


Рис. 2. Результаты моделирования зависимости количества массы газовой фазы от массовой доли углерода в исходной смеси C и SiO₂ при температуре 1600 (а) и 1700 °C (б). Для температуры 1700 °C представлены собственные экспериментальные данные, полученные при этой температуре

В соответствии с полученными данными в зависимости от соотношения исходных компонентов и температуры при температурах выше 1514 °C равновесными продуктами процесса взаимодействия будут являться различные сочетания карбида кремния, газовой фазы и избытка оксида кремния или графита. При этом образование модификации β-SiC является более вероятным, чем образование α-SiC.

При любой заданной температуре синтеза выше 1514 °C с увеличением содержания углерода в исходной смеси рост массовой доли образующего карбида кремния наблюдается только до значения $C/(SiO_2+C) = 0,3733$ (см. рис. 1). Дальнейшее увеличение доли углерода ведет к уменьшению доли образующегося SiC. Как показало сравнение результатов расчета с экспериментальными данными, ранее полученными для температуры 1700 °C (см. рис. 2), этот теоретически предсказанный эффект имеет место при экспериментальном синтезе SiC.

В соответствии с результатом расчета фазовых диаграмм образование газообразных продуктов взаимодействия наблюдается только при температуре выше 1514 °С (см. рис. 1). При температуре 1600 °С (см. рис. 2а) максимум массы газовой фазы наблюдается при $C/(C+SiO_2)=0,368$, тогда как при температуре 1700 °С (см. рис. 2б) максимум массы газа приходится на значение $C/(C+SiO_2)=0,343$.

Результаты расчёта показывают, что при этом значении отношения $C/(C+SiO_2)$ максимальная масса газа, приходящаяся на 1000 г суммарной массы всех веществ, участвующих в системе составляет 595 г при температуре 1600 °С и 647 г при температуре 1700 °С. При $C/(C+SiO_2)>0,37$ масса образующегося газа не зависит от температуры и определяется только соотношением $C/(C+SiO_2)$.

В соответствии с результатами моделирования соотношения газовых фаз основным компонентом газовой смеси, образующейся в зоне реакции, является угарный газ. Масса CO составляет около 1 мас. % от общей массы всех компонентов. Среди остальных компонентов газовой смеси можно выделить монооксид кремния и углекислый газ (см. рис. 3). Содержание других компонентов, среди которых преобладают кремнийсодержащие (Si_2O_2 , Si, SiO_2 , Si_2C , SiC_2), является незначительным (менее 0,01 мас. %).

Согласно результатам выполненного моделирования при $C/(SiO_2+C) \geq 0,37$ в газовой фазе наблюдается скачкообразное снижение содержания всех газов-примесей (кроме малозначимого SiC_2) (см. рис. 3).

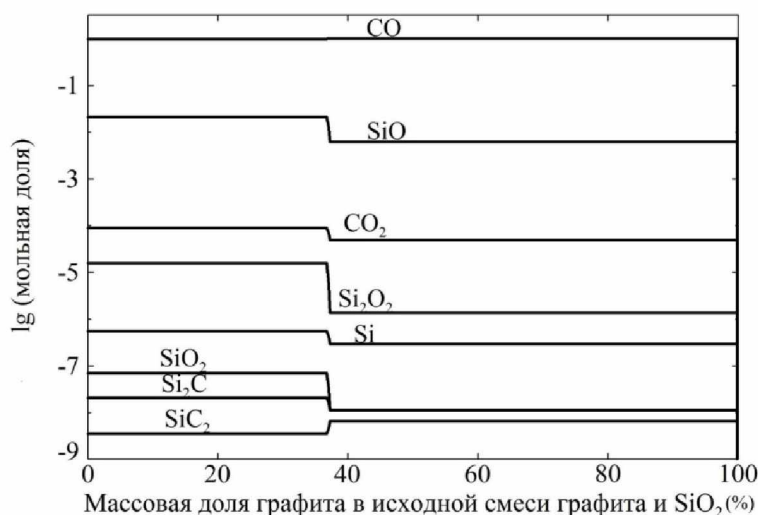


Рис. 3. Результаты моделирования зависимости состава газовой фазы от массовой доли углерода в исходной смеси SiO_2 и углерода для температуры 1600 °С

Заключение

Таким образом, выполненное моделирование обеспечивает надежную теоретическую основу для выбора оптимальных условий для реализации энергоэффективного метода карботермического синтеза нано- и микроразмерного SiC из чистого природного кварца и графита без использования внешней защитной атмосферы. Результаты, полученные в ходе выполненного термодинамического расчета, подтверждают возможность карботермического синтеза карбида кремния в системе Si–O–C только при температурах выше 1514 °С и указывают на стабильно высокое содержание CO в зоне синтеза, обеспечивающее образование автономной защитной атмосферы. Теоретически определены содержания основных компонентов, объем и состав газов, образующихся в ходе синтеза и позволяющих создавать устойчивую автономную защитную атмосферу для проведения карботермического синтеза.

Работа выполнена в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки России (проект № 11.9643.2017/8.9) и при поддержке комплексной программы фундаментальных научных исследований УрО РАН № 18-10-5-16 «Создание керамических и металлокерамических композитов на основе ультрадисперсного карбида кремния».

Литература

1. Roewer, G. Silicon carbide a survey of synthetic approaches, properties and applications / G. Roewer, U. Herzog, K. Trommer et al. // *Structure and Bonding*. – 2002. – V. 101. – P. 59–135.
2. Ефременкова, В.М. Информационное сопровождение научных исследований по карбиду кремния / В.М. Ефременкова, В.Г. Севастьянов // *НТИ. Сер. 1. Орг. и методика информ. работы*. – 2004. – № 9. – С. 16.
3. Stephen, E. *Advances in silicon carbide processing and applications* / E. Stephen // Sadow Anant Agarwal Editors. Boston • London – Artech House, Inc. – 2004.
4. Растегаев, В.П. Получение монокристаллов полупроводникового карбида кремния в вакууме / В.П. Растегаев // *Перспективные материалы*. – 2008. – № 2. – С. 43–48.
5. Раткин, Л.С. Новые разработки российской академии наук в сфере нанотехнологий / Л.С. Раткин // *Нано- и микросистемная техника*. – 2010. – № 4. – С. 2–4.
6. Карбид кремния: технология, свойства, применение / О.А. Агеев, А.Е. Беляев, Н.С. Болтовец и др.; под общ. ред. А.Е. Беляева и Р.В. Конаковой. – Харьков: ИСМА, 2010. – 532 с.
7. Silicon carbide. *Materials, processing and applications in electronic devices* / M. Mukherjee. – InTech., 2011. – 558 p.
8. Kevorkijan, V.M. Low-temperature synthesis of sinterable SiC powders by carbothermic reduction of colloidal SiO₂ / V.M. Kevorkijan, M. Komak, D. Kolar // *Journal of Materials Science*. – 1992. – V. 27. – P. 2705–2712.
9. Martin, H.P. Synthesis of Nanocrystalline Silicon Carbide Powder by Carbothermal Reduction / H.P. Martin, R. Ecke, E. Muller // *Journal of the European Ceramic Society*. – 1998. – V. 18. – P. 1737.
10. Wesch, W. Silicon carbide: synthesis and processing / W. Wesch // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. – 1996. – Vol. 116. – P. 305.
11. Thermodynamic analysis of the production of silicon carbide via silicon dioxide and carbon / V.G. Sevastyanov, E.P. Simonenko, Yu.S. Ezhov, N.T. Kuznetsov // *Material Science Forum*. – 2004. – V. 59. – P. 457–460.
12. The synthesis of nanostructured SiC from waste plastics and silicon powder / Z. Ju, L. Xu, Q. Pang et al. // *Nanotechnology*. – 2009. – № 2. – P. 20–55.
13. Oh, S.M. Preparation of nano-sized silicon carbide powder using thermal plasma / S.M. Oh, M. Cappelli, D.W. Park // *Korean J. Chem. Eng.* – 2002. – V. 19. – P. 903–907.
14. Krstic, V.D. Production of Fine, High-Purity Beta Silicon Carbide Powders / V.D. Krstic // *Journal of the American Ceramic Society*. – 1992. – V. 75. – P. 170–174.
15. Севастьянов, В.Г. Влияние природы прекурсоров высокодисперсного углерода на морфологию наночастиц карбида кремния / В.Г. Севастьянов, Р.Г. Павелко, Н.Т. Кузнецов // *Химическая технология*. – 2007. – Т. 1. – С. 12–17.
16. Курбаков, С.Д. Осаждение высокоплотных карбидокремниевых покрытий при пиролизе хлорпроизводных силана в псевдооживленном слое / С.Д. Курбаков, Т.А. Миреев // *Химия твердого топлива*. – 2009. – № 2. – С. 60–72.
17. New manufacturing process for nanometric SiC / B. Babić, D. Bučevac, A. Radosavljević-Mihajlović et al. // *Journal of the European Ceramic Society*. – 2012. – V. 32, Issue 9.
18. Transition between amorphous and crystalline phases of SiC deposited on Si substrate using H₃SiCH₃ / L. Wang, S. Dimitrijević, J. Han et al. // *Journal of Crystal Growth*. – 2009. – V. 311, Issue 19. – P. 4442–4446.
19. Orthnerz, M.P. Design and Performance of an LPCVD Reactor for the Growth of 3C-Silicon Carbide / M.P. Orthnerz, L.W. Rieth, F. Solzbacher // *ECS – The Electrochemical Society*. – 2009. – V. 92, № 6. – P. 1296–1302.
20. ElGazzar, H. Preparation and characterizations of amorphous nanostructured SiC thin films by low energy pulsed laser deposition / H. ElGazzar, H.G. Abdel-Rahman Salem, F. Nassar // *Applied Surface Science*. – 2010. – V. 256. – P. 2056–2060.
21. Особенности и механизмы роста пленок кубического карбида кремния на кремнии / Л.К. Орлов, Э.А. Штейнман, Т.Н. Смылова и др. // *Физика твердого тела*. – 2012. – Т. 54, № 4. – С. 666–672.

22. Синтез тонких пленок SiC на подложках Si методом ионно-лучевого распыления поверхность / И.К. Бейсембетов, К.Х. Нусупов, Н.Б. Бейсенханов и др. // Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2015. – № 4. – С. 81.
23. Control of stoichiometry, microstructure, and mechanical properties in SiC coatings produced by fluidized bed chemical vapor deposition / E. López-Honorato, P.J. Meadows, J. Tan, P. Xiao // Materials Research Society. – 2008. – V. 23. – P. 1785–1796.
24. Carbothermal synthesis of β -SiC powders from silicon and SiO₂-coated carbon powders / Y. Hwang, D.-H. Riu, H.-J. Kang et al. // International Journal of Materials Research. – 2014. – Vol. 105(4). – P. 392–396.
25. High-temperature interaction between silicon and carbon / V.I. Gorovenko, V.A. Knyazik, A.S. Shteinberg // Ceramics International. – 1993. – Vol. 19(2). – P. 129–132.
26. Carbothermal synthesis of nanoparticulate silicon carbide in a self-contained protective atmosphere / V.N. Anfilogov, A.S. Lebedev, V.M. Ryzhkov, I.A. Blinov // Inorganic Materials. – 2016. – Vol. 52(7). – P. 655–660.
27. Carbothermal synthesis of nanosized silicon carbide under an autonomous protective atmosphere / V.N. Anfilogov, A.S. Lebedev, V.M. Ryzhkov // Doklady Chemistry. – 2015. – Vol. 460(1). – P. 10–12.
28. Пат. 2537616 Российская Федерация. МПК C01B 31/36. Способ карботермического синтеза дисперсных порошков карбида кремния / В.Н. Анфилогов, А.С. Лебедев. – 2013128735/05, заявл. 24.06.2013; опублик. 10.01.2015, Бюл. № 1.
29. FactSage Thermochemical Software and Databases / C.W. Bale, P. Chartrand, S.A. Degterov et al. // Calphad. – 2002. – Vol. 26(2). – P. 189–228.
30. FactSage thermochemical software and databases – recent developments / C.W. Bale, E. Bélisle, P. Chartrand et al. // Calphad. – 2009. – Vol. 33(2). – P. 295–311.
31. FactSage thermochemical software and databases, 2010–2016 / C.W. Bale, E. Bélisle, P. Chartrand et al. // Calphad. – 2016. – Vol. 54. – P. 35–53.
32. Kawanishi, S. Equilibrium Phase Relationship between SiC and a Liquid Phase in the Fe-Si-C System at 1523–1723 K / S. Kawanishi, T. Yoshikawa, T. Tanaka // Materials Transactions. – 2009. – Vol. 50(4). – P. 806–813.

Лебедев Алексей Сергеевич – младший научный сотрудник, Южно-Уральский государственный университет, Управление научной и инновационной деятельности, 454080, г. Челябинск, проспект Ленина, 76; Институт минералогии УРО РАН, 456317, Челябинская область, г. Миасс, территория Ильменский заповедник. E-mail: Lebedev.a.s@bk.ru

Еремяшев Вячеслав Евгеньевич – доктор химических наук, профессор кафедры техники и технологии производства материалов, Южно-Уральский государственный университет, филиал в г. Златоусте, 456217, Челябинская обл., г. Златоуст; ул. Тургенева, 16; Институт минералогии УРО РАН, 456317, Челябинская область, г. Миасс, территория Ильменский заповедник. E-mail: eremiashevve@susu.ru

Трофимов Евгений Алексеевич – доктор химических наук, профессор кафедры материаловедения и физико-химии материалов, Южно-Уральский государственный университет, 454080, г. Челябинск, проспект Ленина, 76. E-mail: trofimovea@susu.ru.

Савина Юлия Дмитриевна – магистрант кафедры материаловедения и физико-химии материалов, Южно-Уральский государственный университет, 454080, г. Челябинск, проспект Ленина, 76. E-mail: yulechka.savina.95@mail.ru

Поступила в редакцию 29 июля 2019 г.

THE THERMODYNAMIC MODELING OF THE PHASES QUANTITATIVE RELATIONS IN THE PROCESS OF THE CARBOTHERMIC β -SiC SYNTHESIS

A.S. Lebedev^{1,2}, Lebedev.a.s@bk.ru
V.E. Eremyashev^{1,3}, eremiashevve@susu.ru
E.A. Trofimov², trofimovea@susu.ru
Yu.D. Savina², yulechka.savina.95@mail.ru

¹ Institute of Mineralogy UB RAS, Miass, Russian Federation

² South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

³ South Ural State University, Zlatoust, Russian Federation

The unique properties of silicon carbide in the form of ultrafine powders make it widely used as various fillers and alloys modifiers, ceramic and metal-ceramic materials, protective coatings for various purposes. Currently, almost all ultrafine silicon carbide powder is obtained from α -SiC modification, synthesized by Acheson multistage technology. The current trend in the development of SiC synthesis technologies is aimed to obtain the silicon carbide powders from 3C-SiC(β) modification, which has more attractive characteristics. This aspect determines the research relevance, focused on the development and testing of effective production technologies of ultrafine powders from 3C-SiC(β) silicon carbide modification. In this work, the thermodynamic modeling of phase equilibria are presented for Si–O–C system with C–SiO₂ section in the temperature range 1400–1900 °C at different ratios of carbon and silicon oxide. For this calculations, the possible formation of gas phase and liquid silicon, carbon and silicon oxide in the system was taken into account. The ratios of main components, as well as the gases volume and composition formed during the synthesis are theoretically determined. In accordance to phase diagrams, the formation of gaseous interaction products is observed only at temperatures above 1514 °C. Carbon monoxide is determined as the main component of the gas mixture formed during the synthesis in the reaction zone. Other components of the gas mixture include silicon monoxide and carbon dioxide. The content of other components, among which silicon-containing ones prevail, is insignificant. With the ratio $C/(SiO_2+C) \geq 0.37$ in the gas phase, there is an abrupt decrease in the content of all impurity gases. The obtained data provide a theoretical basis for the selection of optimal conditions in order to form of a stable autonomous protective atmosphere during the carbothermal synthesis of 3C-SiC(β) silicon carbide modification. It provides a reliable theoretical basis of an energy-efficient carbothermal method for the synthesis of micro-dimensional SiC from pure natural quartz and graphite without the use of an external protective atmosphere.

Keywords: silicon carbide, carbothermal synthesis, properties, modeling, phase composition.

References

1. Roewer G., Herzog K., Trommer et al. [Silicon Carbide a Survey of Synthetic Approaches, Properties and Applications]. *Structure and Bonding*, 2002, vol. 101, pp. 59–135.
2. Efremenkova V.M., Sevastianov V.G. Informatsionnoe soprovozhdenie nauchnykh issledovaniy po karbidu kremniia [Information Support of Research on Silicon Carbide]. *NTI Ser 1 Org i Metodika Inform Raboty* [Scientific and Technical Information. Series 1. Organization and Methodology of Information work], 2004, issue 9, p. 16.
3. Stephen E. Advances in Silicon Carbide Processing and Applications. *Saddow Anant Agarwal Editors. Boston • London – Artech House, Inc.* 2004.
4. Rastegaev V.P. [Obtaining Single Crystals of Semiconductor Silicon Carbide in Vacuum]. *Perspektivnye materialy* [Perspective Material], 2008, issue 2, pp. 43–48. (in Russ.)
5. Ratkin L.S. [New Developments of the Russian Academy of Sciences in the Field of Nanotechnology]. *Nano- i mikrosistemnaia tekhnika* [Nano- and Microsystem Technology], 2010, issue 4, pp. 2–4. (in Russ.)

6. Ageev O.A., Beliaev A.E., Boltovets N.S., Kiselev V.S., Konakova R.V. et al. *Karbid kremniia tekhnologiia svoistva primenenie* [Silicon Carbide: Technology, Properties, Application]. Kharkov, ISMA Publ., 2010, 532 p.
7. Mukherjee M. (ed.) Silicon Carbide. Materials, Processing and Applications in Electronic Devices. InTech. 2011. 558 p.
8. Kevorkijan V.M., Komak M., Kolar D. Low-Temperature Synthesis of Sinterable SiC Powders by Carbothermic Reduction of Colloidal SiO₂. *Journal of Materials Science*, 1992, vol. 27, pp. 2705–2712.
9. Martin H.P., Ecke R., Muller E. Synthesis of Nanocrystalline Silicon Carbide Powder by Carbothermal Reduction. *Journal of the European Ceramic Society*, 1998, vol. 18, p. 1737.
10. Wesch W. Silicon Carbide: Synthesis and Processing. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 1996, vol. 116, p. 305.
11. Sevastyanov V.G., Simonenko E.P., Ezhov Yu.S., Kuznetsov N.T. Thermodynamic Analysis of the Production of Silicon Carbide Via Silicon Dioxide and Carbon. *Material Science Forum*, 2004, vol. 59, P. 457–460. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.457-460.59.
12. Ju Z., Xu L., Pang Q., Xing Z., Ma X., Qian Y. The Synthesis of Nanostructured SiC from Waste Plastics and Silicon Powder. *Nanotechnology*, 2009, issue 2, pp. 20–55.
13. Oh S.M., Cappelli M., Park D.W. Preparation of Nano-Sized Silicon Carbide Powder Using Thermal Plasma. *Korean J. Chem. Eng.*, 2002, vol. 19, pp. 903–907.
14. Krstic V.D. Production of Fine, High-Purity Beta Silicon Carbide Powders. *Journal of the American Ceramic Society*, 1992, vol. 75, pp. 170–174.
15. Sevastyanov V.G., Pavelko R.G., Kuznetsov N.T. [Effect of the Nature of Highly Dispersed Carbon Precursors on the Morphology of Silicon Carbide Nanoparticles]. *Khimicheskaiia tekhnologiia* [Chemical technology], 2007, vol. 1, pp. 12–17. (in Russ.)
16. Kurbakov S.D., Mireev T.A. [Deposition of High-Density Silicon Carbide Coatings by Fluidized-Bed Pyrolysis of Chlorinated Silane Derivatives]. *Khimiia tverdogo topliva* [Solid fuel chemistry], 2009, vol. 43, issue 2, pp. 60–72. (in Russ.)
17. Babic B., Bucevac A.R.M., Dosen A. et al. New Manufacturing Process for Nanometric SiC. *Journal of the European Ceramic Society*, 2012, vol. 32, issue 9.
18. Wang L., Dimitrijević S., Han J., Iacopi F., Zou J. Transition between Amorphous and Crystalline Phases of SiC Deposited on Si Substrate using H₃SiCH₃. *Journal of Crystal Growth*, 2009, vol. 311, issue 19, pp. 4442–4446.
19. Orthnerz M.P., Rieth L.W., Solzbacher F. Design and Performance of an LPCVD Reactor for the Growth of 3C-Silicon Carbide. *ECS – The Electrochemical Society*, 2009, vol. 92, issue 6, pp. 1296–1302.
20. ElGazzar H., Abdel-Rahman Salem H.G., Nassar F. Preparation and Characterizations of Amorphous Nanostructured SiC Thin Films by Low Energy Pulsed Laser Deposition. *Applied Surface Science*, 2010, vol. 256, pp. 2056–2060.
21. Orlov L.K., Smyslova T.N., Ivina N.L., Steinman E.A., Tereshchenko A.N. [Features and Mechanisms of Growth of Cubic Silicon Carbide Films on Silicon]. *Fizika tverdogo tela* [Physics of the Solid State], 2012, vol. 54, issue 4, pp. 666–672. (in Russ.)
22. Beisembetov I.K., Nussupov K.Kh., Beisenkhanov N.B., Zharikov S.K., Kenzhaliev B.K., Akhmetov T.K., Seitov B.Zh. [Synthesis of SiC Thin Films on the Si Substrate by Ion-Beam Sputtering]. *Poverhnost'. Rentgenovskie, sinhrotronnye i nejtronnye issledovaniya* [Journal of Surface Investigation: X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques], 2015, issue 4, p. 81. (in Russ.)
23. Lopez-Honorato E., Meadows P.J., Tan J., Xiao P. Control of Stoichiometry, Microstructure, and Mechanical Properties in SiC Coatings Produced by Fluidized Bed Chemical Vapor Deposition. *Materials Research Society*, 2008, vol. 23, pp. 1785–1796.
24. Hwang Y., Riu D.-H., Kang H.-J., An J.-H., Jung W.S., Chun D., Kim Y. Carbothermal Synthesis of β-SiC Powders from Silicon and SiO₂-coated Carbon Powders. *International Journal of Materials Research*, 2014, vol. 105(4), pp. 392–396.
25. Gorovenko V.I., Knyazik V.A., Shteinberg A.S. High-Temperature Interaction between Silicon and Carbon. *Ceramics International*, 1993, vol. 19(2), pp. 129–132.

26. Anfilogov V.N., Lebedev A.S., Ryzhkov V.M., Blinov I.A. Carbothermal Synthesis of Nanoparticulate Silicon Carbide in a Self-contained Protective Atmosphere. *Inorganic Materials*, 2016, vol. 52(7), pp. 655–660.
27. Anfilogov V.N., Lebedev A.S., Ryzhkov V.M. Carbothermal Synthesis of Nanosized Silicon Carbide under an Autonomous Protective Atmosphere. *Doklady Chemistry*, 2015, vol. 460(1), pp. 10–12.
28. Anfilogov V.N., Lebedev A.S. Sposob karbotermicheskogo sinteza dispersnyh poroshkov karbida kremniya [Method for Carbothermic Synthesis of Dispersed Powders of Silicon Carbide]. Patent RF no. 2537616, 2015.
29. Bale C.W., Chartrand P., Decterov S.A., Eriksson G., Hack K., Mahfoud R. Ben, Melançon J., Pelton A.D., Petersen S. FactSage Thermochemical Software and Databases. *Calphad*, 2002, vol. 26(2), pp. 189–228.
30. Bale C.W., Belisle E., Chartrand P., Decterov S.A., Eriksson G., Hack K., Jung I.-H., Kang Y.B., Melançon J., Pelton A.D., Robelin C., Petersen S. FactSage Thermochemical Software and Databases – Recent Developments. *Calphad*, 2009, vol. 33(2), pp. 295–311.
31. Bale C.W., Bélisle E., Chartrand P., Decterov S.A., Eriksson G., Gheribi A.E., Hack K., Jung I.-H., Kang Y.-B., Melançon J., Pelton A.D., Petersen S., Robelin C., Sangster J., Spencer P., Van Ende M.-A. FactSage Thermochemical Software and Databases, 2010–2016. *Calphad*, 2016, vol. 54, pp. 35–53.
32. Kawanishi S., Yoshikawa T., Tanaka T. Equilibrium Phase Relationship between SiC and a Liquid Phase in the Fe-Si-C System at 1523–1723 K. *Materials Transactions*, 2009, vol. 50(4), pp. 806–813.

Received 29 July 2019

ОБРАЗЕЦ ЦИТИРОВАНИЯ

Термодинамическое моделирование количественных отношений фаз, сосуществующих в процессе карботермического синтеза β -SiC / А.С. Лебедев, В.Е. Еремяшев, Е.А. Трофимов, Ю.Д. Савина // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». – 2019. – Т. 11, № 4. – С. 76–84. DOI: 10.14529/chem190409

FOR CITATION

Lebedev A.S., Eremyashev V.E., Trofimov E.A., Savina Yu.D. The Thermodynamic Modeling of the Phases Quantitative Relations in the Process of the Carbothermic β -SiC Synthesis. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Chemistry*. 2019, vol. 11, no. 4, pp. 76–84. (in Russ.). DOI: 10.14529/chem190409
