**Носко Ольга Анатоліївна. Особливості структури, фазові перетворення легованого кремнію і модифікованих заевтектичних силумінів та розробка способів підвищення їх властивостей : Дис... канд. наук: 05.16.01 - 2006.**

|  |  |
| --- | --- |
| |  | | --- | | **Носко О.А. Особливості структури, фазові перетворення легованного кремнію і модифікованих заевтектичних силумінів та розробка способів підвищення їх властивостей. – Рукопис.**  Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 05.16.01 – Металознавство та термічна обробка металів. – Національна металургійна академія України, Дніпропетровськ, 2006.  Дисертація спрямована на підвищення електрофізичних властивостей легованого кремнію і механічних властивостей модифікованих заевтектичних силумінів, що працюють при підвищених температурах.  З використанням методики фізико-хімічного моделювання проведений розрахунок значень енергії зв’язку та зарядової щільності кремнію при мікролегуванні B, Al, Cu, Sn, Ge, Hf, Zr та комплексами B-Sn і B-Mo. Елементи поділені на три групи: перша – Mo, Hf, Zr – елементи, що посилюють енергію взаємодії атомів кремнію; друга – Sn, Ge – елементи, що слабо впливають на енергію взаємодії атомів у гратці кремнію; третя – B, Al, Cu – елементи, що різко знижують енергію взаємодії атомів у гратці кремнію.  Вперше вивчено вплив легуючих елементів на температурні інтервали фазових перетворень в напівпровідниковому кремнії. Показано, що при легуванні Cz–Si композиціями B-Sn і B-Mo стабілізовані при кімнатній температурі поряд з SiГЦК алмазним метастабільні модифікації кремнію з ромбічною та ОЦК гратками. Вперше виявлено взаємозв’язок між мікротвердістю і часом життя нерівноважних носіїв заряду легованого Cz–Si відносно енергії взаємодії атомів кремнію в кристалічній гратці.  Вивчені структура, форми росту первинних кристалів, визначені кількісні параметри структури заевтектичних силумінів при введенні бору, олова, композицій бор-олово та бор-олово-скандій. Показано, що найкращі кількісні параметри структури серед усіх сплавів, що досліджені, забезпечуються в силуміні, який модифіковано комплексом B-Sn. У сплавах Al-Si-Sn, Al-Si-B-Sn, Al-Si-B-Sn-Sc в об’ємі первинних кристалів поряд з Si ГЦКАЛМАЗ присутні фази SiРОМБ і SiОЦКIII.  Розроблені й рекомендовані для дослідно-промислового опробування режими термічної обробки Cz-Si, легованого Sn, Ge, Zr, Hf й заевтектичних силумінів, легованих композицією B-Sn, які забезпечують підвищення електрофізичних та механічних властивостей відповідно. | |
| |  | | --- | | В дисертації викладені теоретичні узагальнення і запропоновані нові рішення наукових і практичних задач, що є базовими для вибору ефективних легуючих елементів для напівпровідникового кремнію та модифікуючих елементів для заевтектичних силумінів та розробки оптимальних режимів термічної обробки для підвищення їх електрофізичних та механічних властивостей відповідно.  1. Аналіз літератури свідчить про те, що вивчення впливу легуючих елементів на структуру, фазові перетворення та властивості легованого кремнію та модифиікованих сплавів системи Al-Si, є актуальною задачею.  2. З використанням методики фізико-хімічного моделювання проведений розрахунок значень енергії зв’язку та зарядової щільності кремнію при мікролегуванні (концентрація легуючих елементів від 210-4 до 8,710-2 % ат.) перехідними металами, а також елементами, в яких при нагрівані спостерігається зміна типу зв’язку від ковалентного до металевого (B, Sn, Ge). Розрахунок проведений виходячи з мінімальних значень міжатомних відстаней. Вивчені у даній роботі елементи поділені на три групи: перша – Mo, Hf, Zr – елементи, що посилюють енергію взаємодії атомів кремнію; друга – Sn, Ge – елементи, що слабо впливають на енергію взаємодії атомів у гратці кремнію; третя – B, Al, Cu – елементи, що різко знижують енергію взаємодії атомів у гратці кремнію.  3. За допомогою дилатометричного аналізу вивчений вплив легуючих елементів на температурні інтервали фазових перетворень у напівпровідниковому кремнії. Показано, що усі легуючі елементи, які вивчені в даній роботі, зміщують температуру I фазового перетворення (SiГЦКSiРОМБ) в область більш високих температур на 50-200С, що сприяє підвищенню термостабільності напівпровідникового кремнію. Температура II фазового перетворення (SiРОМБSiОЦК III) при легуванні коливається в області 700±50С, а III фазового перетворення (SiОЦКIIISiГПУ) в області 900±50С.  4. Вивчена дислокаційна мікроструктура Cz–Si, легованого дослідженими елементами. Показано, що легування Cz–Si бором (що максимально знижує енергію взаємодії атомів кремнію) призводить до утворення великої кількості двійників та меж двійникування. Введення алюмінію, міді, олова, германію, гафнію та цирконію призводить до утворення дислокацій та їх ланцюжків. Комплексне легування B-Sn призводить до утворення областей з виділеннями надлишкової фази, а легування B-Mo - до утворення двійників, меж двійникування та окремих дислокацій. Нагрівання до температури 1000С й наступне охолодження до кімнатної температури приводе до зменшення кількості двійників та розсипання дислокаційних ланцюжків у Cz–Si, легованому бором, гафнієм, цирконієм та комплексом B-Mo; до порушення монокристалічності Cz–Si, легованого алюмінієм та міддю; до збільшення кількості надлишкової фази та порушення монокристалічності Cz–Si, комплекснолегованого B-Sn;  5. Металографічно і рентгеноструктурно показано, що при легуванні Cz–Si композиціями B-Sn і B-Mo стабілізовані при кімнатній температурі поряд з SiГЦК алмазним метастабільні модифікації кремнію з ромбічною та ОЦК гратками. Методом локального рентгеноспектрального аналізу визначена розчинність олова в твердому розчині заміщення на основі кремнію ОЦК та твердому розчині заміщення олова й бору у гратці кремнію ромбічного. Аналогічно молібден розчиняється в метастабільній фазі кремнію ОЦК III та утворює твердий розчин заміщення.  6. Встановлено взаємозв’язок між мікротвердістю та часом життя неосновних носіїв заряду легованого Cz–Si відносно енергії взаємодії атомів кремнію в кристалічній гратці. Показано, що з підвищенням енергії взаємодії атомів кремнію при введенні досліджених у роботі легуючих елементів (B, Al, Cu, Zr, Hf) одночасно зростають і мікротвердість і час життя нерівноважних носіїв заряду, нейтральні елементи (Sn, Ge) практично не впливають на вказані властивості. Залежність між мікротвердістю та часом життя неосновних носіїв заряду рекомендується використовувати як експрес-метод для прогнозування зміни tННЗ при зміненні технологічних параметрів.  7. Вивчені структура, форми росту первинних кристалів, визначені кількісні параметри структури заевтектичних силумінів при введенні бору, олова, композицій бор-олово та бор-олово-скандій. Показано, що найкращі кількісні параметри структури серед усіх досліджених сплавів, забезпечуються в силуміні, який модифікований комплексом B-Sn;  8. Вивчено розподіл компонентів та легуючих елементів між фазами та структурними складовими сплавів, що досліджуються. Показано, що:  - в сплавах Al-Si-Sn, Al-Si-B-Sn, Al-Si-B-Sn-Sc в об’ємі первинних кремнієвих кристалів поряд з b-SiАЛМАЗ присутні ще два твердих розчини b1 і b2 на основі кремнію з концентрацією алюмінію та легуючих елементів у сумі до 1% та до 3,5% відповідно;  - вміст кремнію в евтектичній структурі в усіх досліджених сплавах у порівнянні з вихідним сплавом Al-Si зміщується в область заевтектичних концентрацій;  9. Методами мікротвердості та рентгеноструктурного аналізу вивчено фазовий склад сплавів, що досліджені. Показано, що:  - у сплавах Al-Si-Sn, Al-Si-B-Sn, Al-Si-B-Sn-Sc в об’ємі первинних кристалів поряд з Si ГЦКАЛМАЗ присутні фази SiРОМБ і SiОЦКIII;  - фази на основі бору, олова і скандію (бориди, сполуки олова й скандію з алюмінієм та кремнієм) в сплавах не зафіксовані.  10. Проведено калориметричний аналіз досліджених сплавів. Показано, що:  - на термограмах досліджених сплавів зафіксовані термічні ефекти, що відповідають ліквідусу, перитектичному перетворенню Р+d-SiОЦКIII«РЗАЛ+g-SiРОМБ, евтектичному перетворенню Р«a-Al+g-SiРОМБ і твердофазному перетворенню, тип якого остаточно не з’ясований;  - в присутності олова і композицій бор-олово і бор-олово-скандій інтервал евтектичної кристалізації розширюється та зміщується в область більш низьких температур. Бор практично не впливає на температуру евтектичного перетворення;  11. Розроблені й рекомендовані для дослідно-промислового випробування режими термічної обробки Cz-Si, легованого В, Sn, Ge, Zr, Hf і заевтектичних силумінів, легованих композицією B-Sn, що забезпечують підвищення електрофізичних властивостей напівпровідникового матеріалу (а саме tННЗ у 1,5-2 рази) і механічних властивостей силумінів (НВ у 1,6-1,7 рази), та зменшення розміру первинних кристалів b-Si твердого розчину у 4-14 разів. Це покращить експлуатаційні властивості готових виробів. | |