Научная статья

УДК 544.431
DOI: 10.18577/2307-6046-2026-0-11-154-164

ХИМИЧЕСКИЕ РЕАКЦИИ ПИРОЛИТИЧЕСКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ МЕТИЛДИХЛОРСИЛАНА

Д.В. Сидоров[1], А.Д. Сидоров[2]

[1]Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов» Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Москва, Россия; admin@viam.ru
[2]Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «МИРЭА – Российский технологический университет», Институт информационных технологий, Москва, Россия; mirea@mirea.ru

Аннотация. *Представлено теоретическое исследование химических реакций, протекающих в ходе термического разложения изолированной молекулы метилдихлорсилана. Определены наиболее вероятные химические реакции разложения метилдихлорсилана и механизмы их протекания. При помощи метода квантовой химии рассчитаны термодинамические характеристики продуктов и структур переходного состояния при разных температурах. Вычислены константы скоростей протекания реакций при разных температурах.*

Ключевые слова: *метилдихлорсилан, пиролитическое разложение, переходное состояние, термодинамические характеристики, квантовая химия, константа скорости*

Для цитирования: Сидоров Д.В., Сидоров А.Д. Химические реакции пиролитического разложения метилдихлорсилана // Труды ВИАМ. 2026. № 11 (165). С. 154–164. URL: http://www.viam-works.ru. DOI: 10.18577/2307-6046-2026-0-11-154-164.

Scientific article

CHEMICAL REACTIONS OF PYROLYTIC DECOMPOSITION OF METHYLDICHLOROSILANE

D.V. Sidorov[1], A.D. Sidorov[2]

[1]Federal State Unitary Enterprise «All-Russian Scientific-Research Institute of Aviation Materials» of National Research Center «Kurchatov Institute», Moscow, Russia; admin@viam.ru
[2]MIREA – Russian Technological University, Institute of Information Technologies, Moscow, Russia; mirea@mirea.ru

Abstract. *The article is devoted to a theoretical study of chemical reactions occurring during thermal decomposition of an isolated methyldichlorosilane molecule. The most probable chemical reactions of methyldichlorosilane decomposition and the mechanisms of their occurrence were determined. Using the quantum chemistry method thermodynamic were calculated characteristics of products and transition structures at different temperatures. The reaction rate constants at different temperatures have been also calculated.*

Keywords: *methyldichlorosilane, pyrolytic decomposition, transition state, thermodynamic characteristics, quantum chemistry, reaction rate*

For citation: Sidorov D.V., Sidorov A.D. Chemical reactions of pyrolytic decomposition of methyldichlorosilane. *Trudy VIAM*, 2026, no. 11 (165), pp. 154–164. Available at: http://www.viam-works.ru. DOI: 10.18577/2307-6046-2026-0-11-154-164.

Введение

Процесс пиролитического разложения кремнийорганических и металлорганических соединений широко используется в различных отраслях промышленности для осаждения пленок и покрытий [1]. Кремнийорганические соединения, которые могут существовать при обычных условиях как в газообразном, так и в жидком, и твердом агрегатных состояниях, являются достаточно удобным и предпочтительным исходным сырьем для синтеза функциональных покрытий из карбида кремния, оксида кремния, карбонитрида кремния и т. п.

Метилтрихлорсилан – наиболее распространенный кремнийорганический исходный мономер для получения карбида кремния [2, 3]. Способ получения метилтрихлорсилана промышленно освоен и основан на непосредственном взаимодействии кремния и хлорметила при высоких температурах (метод Рохова) [4]. В качестве исходных кремнийорганических мономеров для получения карбида кремния также могут применяться диметилдихлорсилан, триметилхлорсилан и метилдихлорсилан, которые образуются при взаимодействии кремния и хлорметила и могут быть выделены как побочные продукты синтеза метилтрихлорсилана [5].

Пиролитическое разложение метилтрихлорсилана рассмотрено в работах [6–8]. Установлено, что при воздействии высоких температур с наибольшей вероятностью происходит образование свободных радикалов в виде метила и трихлорида кремния за счет разрыва связи Si–C в структуре метилтрихлорсилана. Возможно также образование непредельных кремнийорганических соединений за счет конкурирующих реакций элиминирования.

Пиролитическое разложение диметилдихлорсилана изучено в меньшей степени. При исследовании в работах [9, 10] установлено, что основными продуктами разложения диметилдихлорсилана при использовании в качестве газа-носителя аргона или водорода являются метан, тетрахлорид кремния, трихлорсилан, дихлорсилан, метилтрихлорсилан. Наиболее вероятной считают [11] химическую реакцию, связанную с образованием дихлорсилана и метана.

В работе [12] по теоретическому и экспериментальному изучению механизма пиролиза триметилхлорсилана показано, что при температурах ~1200 К с кинетической точки зрения наиболее выгодно протекание химической реакции элиминирования HCl с образованием непредельного диметилсилаэтилена. При температурах >1300 К наблюдается увеличение скорости образования метильного и диметилхлорсилильного радикалов в ходе протекания конкурирующей реакции за счет разрыва связи Si–C.

Термохимическое разложение тетраэтилсилана исследовали в работе [13] при температурах до 1330 К методом вакуумной ультрафиолетовой фотоионизационной масс-спектрометрии с импульсным пиролизом и теоретическим методом квантовой химии с использованием теории функционала плотности и теории переходного состояния. Установлено, что пиролиз тетраэтилсилана инициируется разрывом связи Si–C с образованием триэтилсилильного и этильных радикалов. При рассмотрении побочных реакций триэтилсилильного радикала при пониженных температурах показано предпочтительное протекание реакции по механизму 1,2-элиминирования водорода по сравнению с гомолитическим разрывом связи Si–C.

При исследовании пиролитического разложения аллилтрихлорсилана и аллилтриметилсилана при температурах до 1340 К с помощью вакуумной ультрафиолетовой однофотонной ионизации с применением масс-спектрометрии (VUV-SPI-TOFMS) показано [14], что начальной стадией разложения аллилтрихлорсилана является гомолитическое расщепление связи Si–C с образованием радикалов в виде аллила и трихлорида кремния. При пиролизе аллилтриметилсилана, наряду с разрывом связи Si–C,

также протекает реакция по механизму элиминирования молекулярного пропилена с образованием диметилсилаэтилена.

Описание химических реакций и процесса протекания пиролитического разложения метилдихлорсилана (МДХС) практически не освещено в научно-технической литературе. В работе [15] представлены лишь некоторые данные по разложению МДХС, изученные методом VUV-SPI-TOFMS. Авторы считают, что при температуре ~1260 К с наибольшей вероятностью происходит элиминирование метана с образованием дихлорида кремния и элиминирование молекулы хлорида водорода с образованием хлорсилаэтилена.

В связи с этим в данной работе будет предпринята попытка изучить химические реакции пиролитического разложения МДХС с использованием теоретического метода квантовой химии. Следует отметить, что получение новых научных знаний неразрывно связано с развитием и освоением новых технологий в различных отраслях [16].

Материалы и методы

Расположение атомов в пространстве, межатомные расстояния и углы для изолированной молекулы метилдихлорсилана, находящейся в газообразном состоянии, определены неэмпирическим методом квантовой химии. В основе выбранного для расчета метода лежит математический аппарат теории возмущений Меллера–Плессета второго порядка с базисным набором функций (6-311G) и добавлением диффузионных и поляризационных составляющих. На рис. 1 представлена рассчитанная и оптимизированная структурная формула метилдихлорсилана.

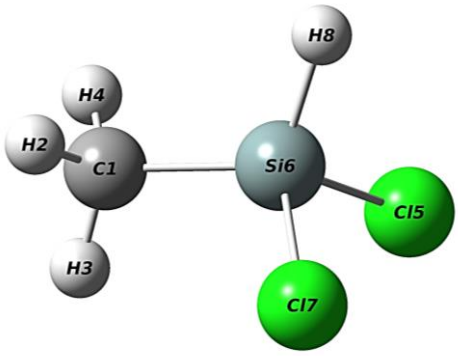


Рис. 1. Структурная формула метилдихлорсилана

В результате проведенного расчета установлено, что длина связи между атомом углерода и кремния (C1–Si6) составляет 1,85 Å; между атомами кремния и хлора [(Si6–Cl5), (Si6–Cl7)] – имеет одинаковое значение и составляет 2,05 Å. Длина связей между углеродом (C1) и атомами водорода (H2, H3, H4) также имеет одинаковое значение и составляет 1,09 Å. Значение углов для (C1–Si6–Cl5) и (C1–Si6–Cl7) равно друг другу и составляет 109,6 градусов. Между атомом кремния (Si6) и атомом водорода (H8) длина связи составляет 1,47 Å. Схожие геометрические параметры по длинам связей получены ранее для изолированной молекулы метилхлорсилана [17].

Результаты и обсуждение

Опираясь на полученные результаты вычислений расположения атомов в пространстве и длин межатомных связей, можно предположить разрыв связей и химические реакции пиролитического разложения изолированной молекулы метилдихлорсилана в газовой фазе:

$$CH_3SiHCl_2 \rightarrow CH_3 + SiHCl_2 \quad (1)$$
$$CH_3SiHCl_2 \rightarrow CH_3SiCl_2 + H \quad (2)$$
$$CH_3SiHCl_2 \rightarrow CH_2SiHCl_2 + H \quad (3)$$
$$CH_3SiHCl_2 \rightarrow CH_3SiHCl + Cl \quad (4)$$
$$CH_3SiHCl_2 \rightarrow CH_4 + SiCl_2 \quad (5)$$
$$CH_3SiHCl_2 \rightarrow CH_2SiCl_2 + H_2 \quad (6)$$
$$CH_3SiHCl_2 \rightarrow CH_2SiHCl + HCl \quad (7)$$
$$CH_3SiHCl_2 \rightarrow SiHCl + CH_3Cl. \quad (8)$$

Наиболее простыми случаями разрыва межатомных связей являются химические реакции, проходящие по гомолитическому механизму с образованием свободных радикалов. При разрыве связи «кремний–углерод» в молекуле МДХС возможно образование метила и дихлорсилила по реакции (1). При отрыве атома водорода от кремния будет образован метилдихлорсилил по реакции (2). При отрыве атома водорода от углерода образуется метилендихлорсилан по реакции (3). В случае отрыва атома хлора от кремния реакция будет протекать по реакции (4) с образованием метилхлорсилила.

Далее, исходя из механизма элиминирования молекул метана, водорода, хлорметила и хлорида водорода, можно предположить протекание оставшихся реакций. В частности, при элиминировании метана по реакции (5) будет образован дихлорид кремния в виде бирадикала. В случае отщепления молекулярного водорода по реакции (6) формируется непредельный дихлорсилаэтилен. По реакции (7) образуется хлорсилаэтилен с двойной связью «кремний–углерод» и хлорид водорода. При элиминировании хлорметила по реакции (8) образуется хлорсилан.

Для оценки протекания наиболее вероятных химических реакций, происходящих при пиролитическом разложении МДХС с термодинамической точки зрения, проведен расчет термодинамических характеристик исходного метилдихлорсилана и продуктов его разложения вышеуказанным методом квантовой химии. Результаты расчета изменений полной электронной энергии (ΔE), стандартной энтальпии (ΔH^o), стандартной энергии Гиббса (ΔG^o) и стандартной энтропии (ΔS^o) при разных температурах и давлении 100 кПа представлены в табл. 1.

Исходя из полученных данных по изменению стандартной энтальпии при протекании химических реакций (1)–(8), видно, что все они являются эндотермическими.

Учитывая, что при протекании химических реакций элиминирования (5)–(8) возможно образование структур переходного состояния, оказывающих влияние на энергетический барьер, проведен поиск, оптимизация и расчет термодинамических характеристик таких структур ранее указанным методом квантовой химии. Поиск структур в переходном состоянии выполнен путем сканирования по координатам реакции с последующей геометрической оптимизацией найденной структуры. В результате проведенного поиска для реакции (5) обнаружена переходная структура ПС1, в которой, в отличие от исходной структуры МДХС, длина связи C1–Si6 укорочена и составляет 1,8411 Å, длины связей C1–H8 и Si6–H8 также укорочены до 1,3839 и 1,4246 Å соответственно, угол между C1–Si6–Cl7 составляет 116,0 градуса. Для реакции (6) найдена переходная структура ПС2, в которой длина связи C1–Si6 составляет 1,6734 Å за счет формирования двойной связи, длины связей C1–H4 и Si6–H8 увеличены до 2,4201 и 2,2205 Å соответственно, угол между C1–Si6–Cl7 составляет 125,4 градуса. В переходной структуре ПС3 для реакции (7) длина связи C1–Si6 составляет 1,7263 Å также за счет формирования двойной связи, длины связей C1–H3 и Si6–Cl5 составляют 1,7263 и 2,8348 Å соответственно, угол между C1–Si6–Cl7 составляет 122,4 градуса. Для

реакции (8) обнаружена переходная структура ПС4, в которой длина связи C1–Si6 составляет 1,9874 Å, длины связей C1–Cl7 и Si6–Cl7 составляют 2,0513 и 2,1456 Å соответственно, угол между C1–Si6-Cl5 составляет 120,2 градуса. На рис. 2 представлены обнаруженные структурные формулы переходных состояний для реакций элиминирования (5)–(8) при пиролитическом разложении МДХС.

Таблица 1

Термодинамические характеристики химических реакций пиролитического разложения метилдихлорсилана при различных температурах

Продукты реакции	ΔE	ΔH^o	ΔG^o	ΔS^o, Дж/(моль·К)
	кДж/моль			
При температуре 298 К				
$CH_3 + SiHCl_2$	384,56	387,04	334,01	177,86
$CH_3SiCl_2 + H$	363,08	365,56	329,83	119,84
$CH_2SiHCl_2 + H$	409,40	411,88	373,43	128,97
$CH_3SiHCl + Cl$	442,39	444,88	405,31	117,83
$CH_4 + SiCl_2$	162,07	164,55	116,85	159,97
$CH_2SiCl_2 + H_2$	256,11	258,59	221,37	124,84
$CH_2SiHCl + HCl$	309,44	311,92	268,56	145,44
$SiHCl + CH_3Cl$	361,09	363,57	314,03	241,09
При температуре 1000 К				
$CH_3 + SiHCl_2$	375,13	383,45	209,31	174,14
$CH_3SiCl_2 + H$	362,88	371,19	240,02	131,17
$CH_2SiHCl_2 + H$	413,16	421,48	274,13	147,35
$CH_3SiHCl + Cl$	435,91	444,22	311,95	132,28
$CH_4 + SiCl_2$	145,75	154,06	4,54	149,52
$CH_2SiCl_2 + H_2$	255,50	263,81	126,93	136,88
$CH_2SiHCl + HCl$	302,93	311,25	164,94	146,30
$SiHCl + CH_3Cl$	344,87	353,18	204,07	205,19
При температуре 2500 К				
$CH_3 + SiHCl_2$	339,99	360,77	–40,58	160,54
$CH_3SiCl_2 + H$	349,16	369,94	43,02	130,77
$CH_2SiHCl_2 + H$	402,87	423,66	50,51	149,26
$CH_3SiHCl + Cl$	418,14	418,14	116,14	129,11
$CH_4 + SiCl_2$	105,68	126,46	–204,96	132,57
$CH_2SiCl_2 + H_2$	228,95	249,73	–72,43	128,87
$CH_2SiHCl + HCl$	275,03	295,82	–47,10	137,17
$SiHCl + CH_3Cl$	307,52	328,31	–6,54	145,43

В табл. 2 представлены результаты расчетов изменений полной электронной энергии, стандартной энтальпии, стандартной энергии Гиббса и стандартной энтропии для структур переходных состояний в реакциях элиминирования при пиролизе МДХС при разных температурах и давлении 100 кПа.

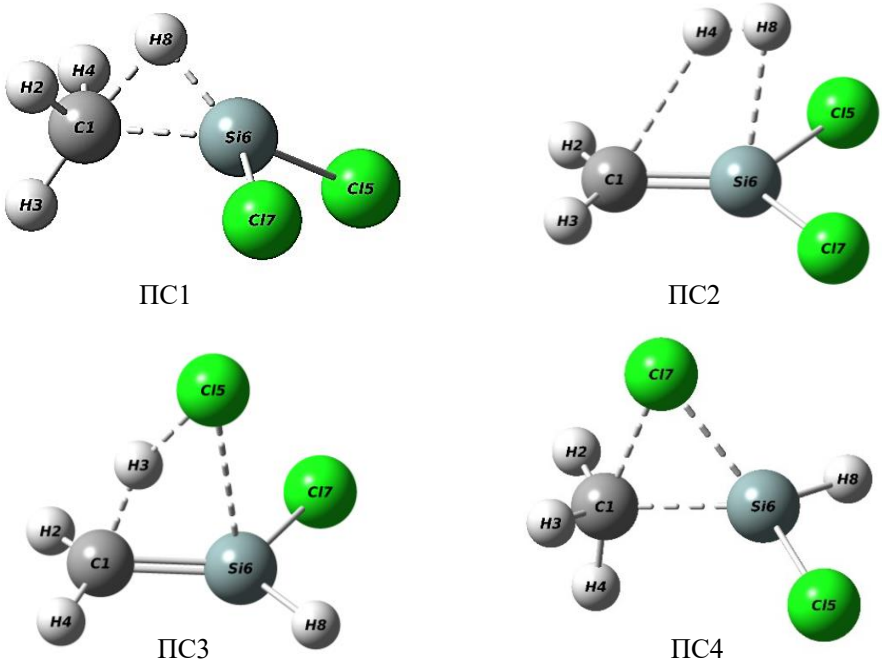


Рис. 2. Структурные формулы переходных состояний для реакций элиминирования метилдихлорсилана

Таблица 2

Термодинамические характеристики для структур переходных состояний при пиролизе метилдихлорсилана

Продукты реакции	ΔE	ΔH^o	ΔG^o	ΔS^o, Дж/(моль·К)
	кДж/моль			
При температуре 298 К				
ПС1	368,08	381,98	384,30	–7,77
ПС2	318,90	318,90	312,20	22,45
ПС3	334,81	334,81	332,92	6,35
ПС4	447,43	447,43	452,20	–16,01
При температуре 1000 К				
ПС1	371,56	371,57	396,69	–25,13
ПС2	322,98	322,99	291,76	31,23
ПС3	336,42	336,42	326,85	9,56
ПС4	441,60	441,60	467,69	–26,09
При температуре 2500 К				
ПС1	347,05	347,05	447,25	–40,08
ПС2	314,02	314,02	248,53	26,20
ПС3	330,36	330,36	314,68	6,28
ПС4	429,36	429,36	513,25	–33,56

Исходя их обобщенных полученных ранее термодинамических данных, на рис. 3 представлено изменение полной электронной энергии химических реакций пиролиза относительно молекулы МДХС при температуре 1000 К с учетом обнаруженных структур переходных состояний.

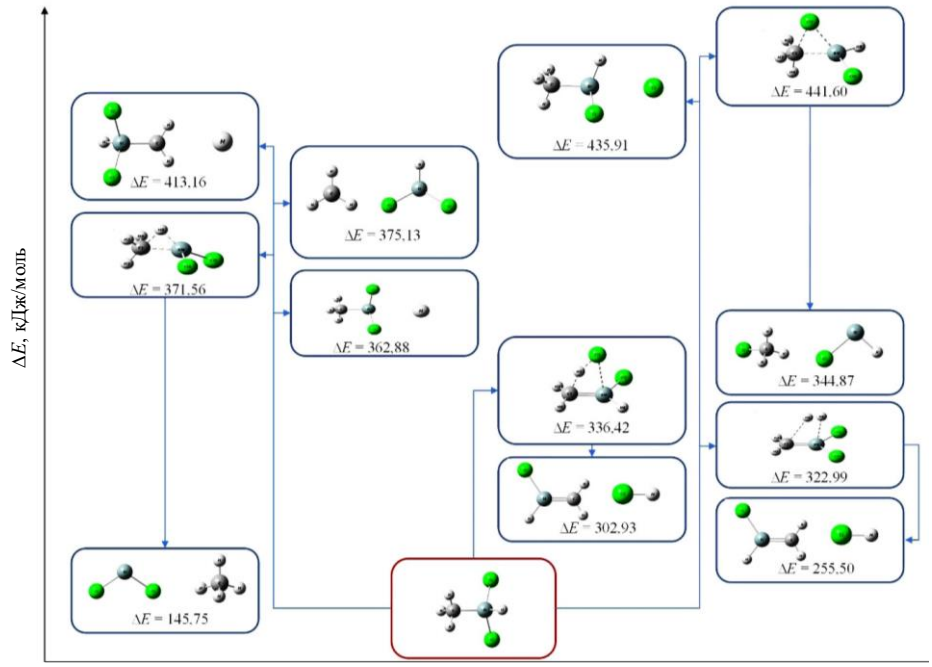


Рис. 3. Изменение полной электронной энергии химических реакций пиролиза метилдихлорсилана при температуре 1000 К

При рассмотрении вероятности протекания химических реакций при температуре 1000 К видно, что минимальное изменение полной энергии в количестве 322,99 кДж/моль соответствует протеканию химической реакции (7) с образованием хлорсилаэтилена и хлорида водорода с учетом структуры переходного состояния ПС2.

Вероятность протекания химических реакций можно оценить с помощью изменения стандартной энергии Гиббса. С учетом ранее полученных результатов линейной зависимости изменения стандартной энергии Гиббса от температуры [18] на рис. 4 представлен график изменения стандартной энергии Гиббса рассмотренных ранее химических реакций.

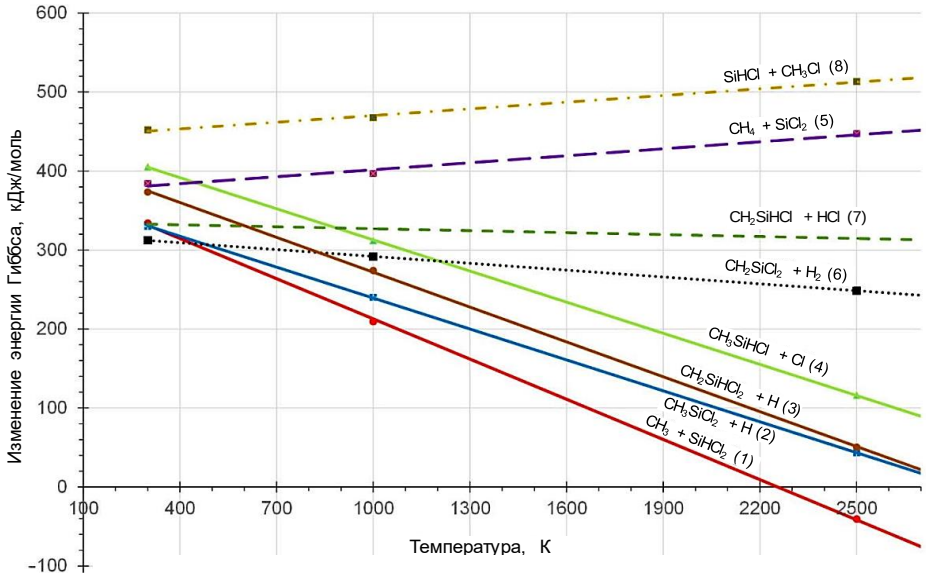


Рис. 4. Изменение стандартной энергии Гиббса для химических реакций (1)–(8) пиролитического разложения метилдихлорсилана от температуры

Анализ полученных данных показал, что при температурах до 440 К с наиболее высокой скоростью будет проходить реакция элиминирования молекулярного водорода с образованием дихлорсилаэтилена. Более высокие температуры способствуют гомолитическому разрыву связи C–Si по реакции (1) с последующим образованием радикалов метила и дихлорсилила. Интересным фактом является то, что реакции элиминирования молекул метана и хлорметила замедляются по мере увеличения температуры. Таким образом, как и в предыдущих случаях, при пиролизе изолированной молекулы МДХС наиболее быстрая химическая реакция связана с гомолитическим разрывом связи Si–C.

Для расчета изменения концентрации продуктов реакций во времени на языке Python написана программа, в которой используется ранее полученная линейная зависимость и математическая формула (9). Следует отметить, что расчет констант скоростей химических реакций базируется на принципах теории активированного комплекса (переходного состояния) [19–21]:

$$k = \frac{k_b T c}{h} \mathrm{e}^{\frac{-\Delta G}{RT}}, \qquad (9)$$

где k_b – постоянная Больцмана; h – постоянная Планка; c – концентрация; ΔG – изменение стандартной энергии активации Гиббса при давлении 100 кПа; R – газовая постоянная; T – температура.

Следует учесть допущение, что при расчете по указанной формуле эффект туннелирования, который связан с возможностью образования продуктов реакций без преодоления энергетического барьера, не учитывается. Изменение стандартной энергии активации Гиббса для реакций (5)–(8), протекающих с энергетическим барьером, определено исходя из выявленных структур переходного состояния. Для химических реакций (1)–(4) без четко определяемого энергетического барьера изменение стандартной энергии активации Гиббса рассчитано как разница между продуктами и реагентами.

На рис. 5 показано изменение количества молекул МДХС при разных температурах во времени. За начальное значение для количества молекул принято число Авогадро ($6{,}02 \cdot 10^{23}$) для 1 моля вещества.

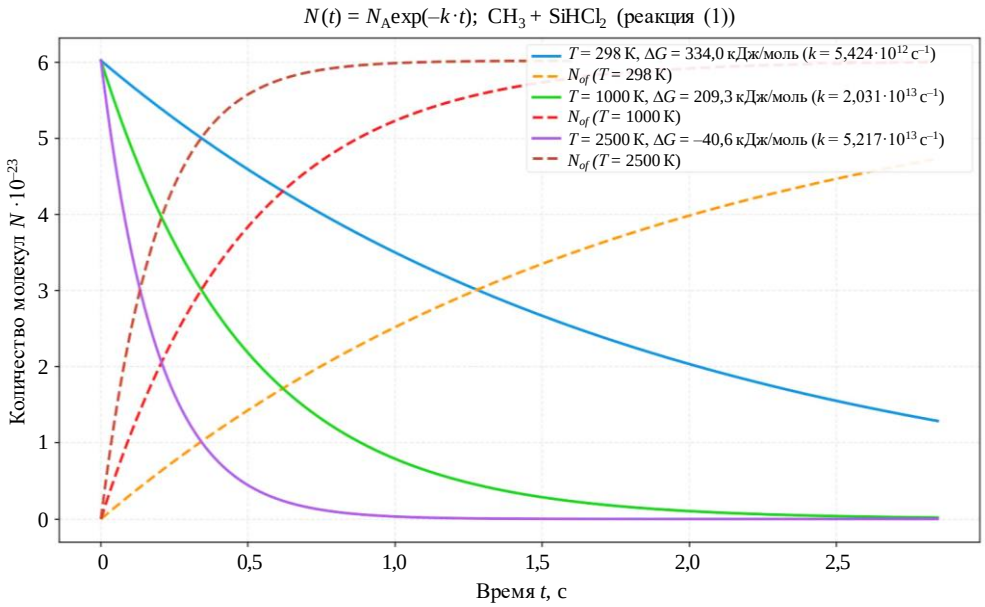


Рис. 5. Изменение количества молекул метилдихлорсилана при разных температурах во времени (N_A – число Авогадро; k – концентрация продуктов; ΔG – изменение стандартной энергии активации Гиббса; T – температура; N_{of} – число молекул исходного мономера)

Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП «Климатические испытания» НИЦ «Курчатовский институт» – ВИАМ.

Заключения

В результате проведенного теоретического исследования термического разложения изолированной молекулы МДХС методом квантовой химии определены геометрические параметры молекулы, рассмотрены различные химические реакции и описаны механизмы их протекания.

При разных температурах рассчитаны термодинамические характеристики продуктов реакций, образующихся при термическом разложении МДХС. Для химических реакций термического разложения МДХС, протекающих по механизму элиминирования, выявлены структуры переходных состояний и рассчитаны энергетические затраты.

На основании полученных результатов установлено, что при температурах >440 К преобладающей химической реакцией является образование радикалов метила и дихлорсилила за счет гомолитического разрыва связи C–Si.

Список источников

1. Акчурин Р.Х., Мармалюк А.А. МОС-гидридная эпитаксия в технологии материалов фотоники и электроники. М.: Техносфера, 2018. 488 с.
2. Latha H., Udayakumar A., Prasad V. Microstructure and electrical properties of nitrogen doped 3C–SiC thin films deposited using methyltrichlorosilane // Materials science in semiconductor processing. 2015. Vol. 29. P.117–123.
3. Reznik B., Gerthsen D., Zhang W., Huttinger G. Microstructure of SiC deposited from methyltrichlorosilane // Journal of the European ceramic society. 2003. Vol. 23. P. 1499–1508.
4. Pakula D., Marciniec B., Przekop R. Direct synthesis of silicon compounds – from the beginning to green chemistry revolution // AppliedChem. 2023. Vol. 3. P. 89–109.
5. Сидоров Д.В., Шавнев А.А., Мелентьев А.А. Формирование карбидокремниевых покрытий методом химического газофазного осаждения (обзор). Часть 2 // Труды ВИАМ. 2022. № 2 (108). С. 88–98. URL: http://www.viam-works.ru (дата обращения: 16.03.2026). DOI: 10.18577/2307-6046-2022-0-2-88-98.
6. Zhang W., Huttinger G. CVD of SiC from methyltrichlorosilane. Part II: composition of the gas phase and the deposit // Chemical vapor deposition. 2001. Vol. 7. P. 173–181.
7. Osterheld T., Allendorf M., Melius C. Unimolecular decomposition of methyltrichlorosilane: RRKM calculatios // Journal of physical chemistry. 1994. Vol. 98. P. 6995.
8. Ge Y., Gordon M., Battaglia F. et al. Theoretical study of the pyrolysis of methyltrichlorosilane in the gas phase. 3. Reaction rate constant calculations // The Journal of Physical Chemistry A. 2010. Vol. 114. P. 2384–2392.
9. Cagliostro D., Riccitiello S., Carswell M. Analysis of the pyrolysis products of dimethyldichlorosilane in the chemical vapor deposition of silicon carbide in argon // Journal of the American ceramic society. 1990. Vol. 73. P. 607–614.
10. Cagliostro D., Riccitiello S., Ren J. et al. Comparison of the pyrolysis products of dichlorodimethylsilane in the chemical vapor deposition of silicon carbide on silica in hydrogen or argon // Journal of the American ceramic society. 1994. Vol. 77. P. 2721–2726.
11. Cagliostro D., Riccitiello S. Model for the formation of silicon carbide from the pyrolysis of dichlorodimethylsilane in hydrogen: I, silicon formation from chlorosilanes // Journal of the American ceramic society. 1993. Vol. 76. P. 39–48.
12. Shao K., Brunson J., Tian Y., Zhang J. Analysis of the pyrolysis products of dimethyldichlorosilane in the chemical vapor deposition of silicon carbide in argon // Journal of the American ceramic society. 1990. Vol. 73. P. 607–614.
13. Shao K., Zhang J., Liu X. Thermal Decomposition Mechanism of Tetraethylsilane by Flash Pyrolysis Vacuum Ultraviolet Photoionization Mass Spectrometry and DFT Calculations: The Competition between β-Hydride Elimination and Bond Homolysis // The Journal of Physical Chemistry A. 2023. Vol. 127. P. 18. DOI: 10.1021/acs.jpca.2c09081.

14. Shao K., Tian Y., Zhang J. Thermal decomposition mechanism of allyltrichlorosilane and allyltrimethylsilane // International Journal of Mass Spectrometry. 2021. Vol. 460. P. 116476. DOI: 10.1016/j.ijms.2020.116476.
15. Lemieux J., Zhang J. Thermal decomposition of methyltrichlorosilane, dimethyldichlorosilane and methyldichlorosilane by flash pyrolysis vacuum ultraviolet photoionization time-of-flight mass spectrometry // European journal of mass spectrometry. 2014. Vol. 20. P. 409–417.
16. Щеголева Н.Е., Евдокимов С.А., Вершинин Д.И. и др. Керамика на основе нитрида кремния как перспективный материал для гибридных подшипников // Авиационные материалы и технологии. 2026. № 2 (83). С. 145–159. URL: http://www.journal.viam.ru (дата обращения: 01.06.2026). DOI: 10.18577/2071-9140-2026-0-2-145-159.
17. Сидоров Д.В., Грунин А.А., Кирилин А.Д., Шавнев А.А. Первый шаг пиролитического разложения метилхлорсилана // Химическая технология. 2025. Т. 26. № 1. С. 26–33.
18. Сидоров Д.В., Грунин А.А., Шавнев А.А. Скорость химической реакции образования 1,2-диметилдисилена из метилсилилена // Труды ВИАМ. 2025. № 5 (147). С. 76–87. URL: http://www.viam-works.ru (дата обращения: 14.04.2026). DOI: 10.18577/2307-6046-2025-0-5-76-87.
19. Ochterski J.W. Thermochemistry in Gaussian. Gaussian Inc., 2000. 19 p.
20. Чоркендорф И., Наймантсведрайт Х. Современный катализ и химическая кинетика. Долгопрудный: Интеллект, 2010. 504 с.
21. Беспалов А.С. Носители катализаторов на основе оксида алюминия // Труды ВИАМ. 2026. № 6 (160). С. 108–117. URL: http://www.viam-works.ru (дата обращения: 30.06.2026). DOI: 10.18577/2307-6046-2026-0-6-108-117.

References

1. Akchurin R.Kh., Marmalyuk A.A. *MOS hydride epitaxy in photonics and electronics materials technology*. Moscow: Tekhnosfera, 2018, 488 p.
2. Latha H., Udayakumar A., Prasad V. Microstructure and electrical properties of nitrogen doped 3C–SiC thin films deposited using methyltrichlorosilane. *Materials science in semiconductor processing*, 2015, vol. 29, pp. 117–123.
3. Reznik B., Gerthsen D., Zhang W., Huttinger G. Microstructure of SiC deposited from methyltrichlorosilane. *Journal of the European ceramic society*, 2003, vol. 23, pp. 1499–1508.
4. Pakula D., Marciniec B., Przekop R. Direct synthesis of silicon compounds – from the beginning to green chemistry revolution. *AppliedChem*, 2023, vol. 3, pp. 89–109.
5. Sidorov D.V., Schavnev A.A., Melentev A.A. Formation of silicon carbide coatings by chemical vapor deposition (review). Part 2. *Trudy VIAM*, 2022, no. 2 (108), pp. 88–98. Available at: http://www.viam-works.ru (accessed: March 16, 2026). DOI: 10.18577/2307-6046-2022-0-2-88-98.
6. Zhang W., Huttinger G. CVD of SiC from methyltrichlorosilane. Part II: composition of the gas phase and the deposit. *Chemical vapor deposition*, 2001, vol. 7, pp. 173–181.
7. Osterheld T., Allendorf M., Melius C. Unimolecular decomposition of methyltrichlorosilane: RRKM calculatios. *Journal of physical chemistry*, 1994, vol. 98, p. 6995.
8. Ge Y., Gordon M., Battaglia F. et al. Theoretical study of the pyrolysis of methyltrichlorosilane in the gas phase. 3. Reaction rate constant calculations. *The Journal of Physical Chemistry A*, 2010, vol. 114, pp. 2384–2392.
9. Cagliostro D., Riccitiello S., Carswell M. Analysis of the pyrolysis products of dimethyldichlorosilane in the chemical vapor deposition of silicon carbide in argon. *Journal of the American ceramic society*, 1990, vol. 73, pp. 607–614.
10. Cagliostro D., Riccitiello S., Ren J. et al. Comparison of the pyrolysis products of dichlorodimethylsilane in the chemical vapor deposition of silicon carbide on silica in hydrogen or argon. *Journal of the American ceramic society*, 1994, vol. 77, pp. 2721–2726.
11. Cagliostro D., Riccitiello S. Model for the formation of silicon carbide from the pyrolysis of dichlorodimethylsilane in hydrogen: I, silicon formation from chlorosilanes. *Journal of the American ceramic society*, 1993, vol. 76, pp. 39–48.

12. Shao K., Brunson J., Tian Y., Zhang J. Analysis of the pyrolysis products of dimethyldichlorosilane in the chemical vapor deposition of silicon carbide in argon. *Journal of the American ceramic society*, 1990, vol. 73, pp. 607–614.
13. Shao K., Zhang J., Liu X. Thermal Decomposition Mechanism of Tetraethylsilane by Flash Pyrolysis Vacuum Ultraviolet Photoionization Mass Spectrometry and DFT Calculations: The Competition between β-Hydride Elimination and Bond Homolysis. *The Journal of Physical Chemistry A*, 2023, vol. 127, p. 18. DOI: 10.1021/acs.jpca.2c09081.
14. Shao K., Tian Y., Zhang J. Thermal decomposition mechanism of allyltrichlorosilane and allyltrimethylsilane. *International Journal of Mass Spectrometry*, 2021, vol. 460, p. 116476. DOI: 10.1016/j.ijms.2020.116476.
15. Lemieux J., Zhang J. Thermal decomposition of methyltrichlorosilane, dimethyldichlorosilane and methyldichlorosilane by flash pyrolysis vacuum ultraviolet photoionization time-of-flight mass spectrometry. *European journal of mass spectrometry*, 2014, vol. 20, pp. 409–417.
16. Shchegoleva N.E., Evdokimov S.A., Vershinin D.I., Kholodova V.V., Vaganova M.L., Chaynikova A.S. Silicon nitride based ceramics as a promising material for hybrid bearings. *Aviation materials and technologies*, 2026, no. 2 (83), pp. 145–159. Available at: http://www.journal.viam.ru (accessed: June 01, 2026). DOI: 10.18577/2071-9140-2026-0-2-145-159.
17. Sidorov D.V., Grunin A.A., Kirilin A.D., Shavnev A.A. The first step of the pyrolytic decomposition of methylchlorosilane. *Khimicheskaya tekhnologiya*, 2025, vol. 26, no. 1, pp. 26–33.
18. Sidorov D.V., Grunin A.A., Schavnev A.A. Rate of chemical reaction of formation of 1,2-dimethyldisilene from methylsilylene. *Trudy VIAM*, 2025, no. 5 (147), pp. 76–87. Available at: http://www.viam-works.ru (accessed: April 14, 2026). DOI: 10.18577/2307-6046-2025-0-5-76-87.
19. Ochterski J.W. *Thermochemistry in Gaussian*. Gaussian Inc., 2000, 19 p.
20. Chorkendorff I., Niemantsverdriet H. *Modern Catalysis and Chemical Kinetics*. Dolgoprudny: Intellekt, 2010, 504 p.
21. Bespalov A.S. Aluminum oxide-based catalyst carriers. *Trudy VIAM*, 2026, no. 6 (160), pp. 108–117. Available at: http://www.viam-works.ru (accessed: June 30, 2026). DOI: 10.18577/2307-6046-2026-0-6-108-117.

Информация об авторах

Сидоров Денис Викторович, ведущий научный сотрудник, к.т.н., НИЦ «Курчатовский институт» – ВИАМ, admin@viam.ru
Сидоров Артем Денисович, студент, РТУ МИРЭА, ИИТ, mirea@mirea.ru

Information about the authors

Denis V. Sidorov, Leading Researcher, Candidate of Science (Tech.), NRC «Kurchatov Institute» – VIAM, admin@viam.ru
Artem D. Sidorov, Student, MIREA – Russian Technological University, IIT, mirea@mirea.ru

Статья поступила в редакцию 23.06.2026; одобрена и принята к публикации после рецензирования 15.07.2026.
The article was submitted 23.06.2026; approved and accepted for publication after reviewing 15.07.2026.