

Выводы

Карбидообразующие элементы W, Ta и Nb, характеризующиеся высокой (более 100 кДж/моль) энтальпией образования монокарбидов, при давлении ≥ 5 ГПа стабилизируют карбиды типа Me_3C в сплавах системы Co–Fe–C и переводят сплавы в метастабильное состояние.

Литература

1. Влияние концентрации хрома на синтез алмазов в системе Fe–Co–Cr–C / А. И. Боримский, В. Г. Делеви, П. А. Нагорный, Т. Ю. Чипенко // Синтез, спекание и свойства сверхтвердых материалов. Сер. Материаловедение: Сб. науч. тр. – К.: ИСМ им. В. Н. Бакуля НАН Украины, 2000. – С. 39–48.
2. Смитлз К. Дж. Металлы: Справоч. изд.: Пер. с англ. – М.: Металлургия, 1980. – 448 с.
3. Влияние легирования сплавов системы Co–Fe карбидами TaC, NbC и WC на их взаимодействие с графитом при нагреве под высоким давлением / А. И. Боримский, П. А. Нагорный, В. Г. Делеви и др. // Породоразрушающий и металлообрабатывающий инструмент – техника и технология его изготовления и применения: Сб. науч. тр. – К.: ИСМ им. В. Н. Бакуля НАН Украины, 2006. – Вып. 9. – С. 278–285.
4. Каменецкая Д. С., Корсунская И. А., Литвин Ю. А. Влияние графитизирующих элементов на равновесие с расплавом в системе железо–углерод при высоких давлениях // ФММ. – 1978. – Т. 45. – Вып. 3. – С. 569–579.
5. Экспериментальное исследование фазовых равновесий в системе Co–Fe–C при высоких давлениях / Ю. А. Кочержинский, О. Г. Кулик, В. З. Туркевич, В. И. Василенко // Сверхтв. материалы. – 1994. – № 3. – С. 6–11.
6. Сверхтвердые материалы. Получение и применение: Моногр.: В 6 т. / Под общ. ред. Н. В. Новикова. – К.: ИСМ им. В. Н. Бакуля, ИПЦ “АЛКОН” НАН Украины, 2003. – Т. 1: Синтез алмаза и подобных материалов / Отв. ред. А. А. Шульженко. – 320 с.

Поступила 24.06.09

УДК 539.89:66.083

А. П. Чепугов¹, В. В. Лысаковский¹, М. А. Серга¹, кандидаты технических наук,
С.А. Ивахненко¹, д-р. техн. наук, **В. В. Калаев², С. Е. Демина²**, кандидаты физико-математических наук

¹ *Институт сверхтвердых материалов им. В. Н. Бакуля НАН Украины, г. Киев*

² *ООО «Софт-Инпакт», С. Петербург, Россия*

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ НА МАССОПЕРЕНОС УГЛЕРОДА В МЕТАЛЛЕ-РАСТВОРИТЕЛЕ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ МОНОКРИСТАЛЛОВ АЛМАЗА МЕТОДОМ ТЕМПЕРАТУРНОГО ГРАДИЕНТА

In this paper we examined the influence of electromagnetic fields created by resistive elements of the assembly to the temperature fields distribution in the metal-solvent. The AC used to heat leads to a Lorentz force impacting to the motion of carbon particles in the reaction container cell volume. To evaluate influence of the electromagnetic field to the mass transfer of carbon we considered a few examples of a tension of electromagnetic field creating by using different ratios of electrical resistive elements. A computer simulation of the temperature fields distribution and the

carbon mass transfer in the single crystals diamond growth resulted in the identification of optimal ratio of electrical resistance elements.

Экспериментальное определение температуры в реакционной ячейке непосредственно в процессе выращивания монокристаллов алмаза в области термодинамической стабильности довольно трудоемко. В этой связи усовершенствование моделей для расчета тепло- и массопереноса при высоком давлении и высокой температуре особенно актуально. При расчете тепловых полей и массопереноса углерода от источника к растущему кристаллу влиянием электромагнитного поля, создаваемого резистивными элементами нагрева при пропускании через них переменного тока, как правило пренебрегают. Это связано с тем, что воздействие электромагнитного поля существенно мало. Однако, при условии проведения процесса выращивания в течение 100 ч. и более даже незначительные изменения в массопереносе могут существенно влиять на процесс роста монокристаллов.

В исследовании впервые использовали новый пакет программ «CGSim», разработанный компанией «Soft Inract»(С.-Петербург). Этот пакет позволяет осуществлять компьютерное моделирование процесса выращивания полупроводниковых и оптических кристаллов из расплава [1], а так же рассчитывать распределение градиентов температуры и массопереноса углерода в расплаве с учетом гидродинамических факторов.

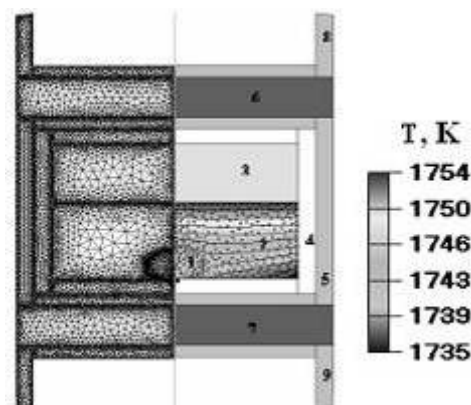


Рис. 1. Распределение температурных полей в контейнере АД типа «тороид» для выращивания монокристаллов алмаза типа IIa и IIb в ростовых системах Fe–Co–Zr–C и Fe–Co–Zr–B–C: 1 – затравочный кристалл; 2 – сплав-растворитель, 3 – источник углерода; 4 – теплоизоляция реакционного объема; 5 – трубчатый нагревательный элемент; 6, 7 – нагревательные элементы; 8, 9 – токоподводы

В исследовании также использовали осесимметричную модель ячейки аппарата высокого давления (АВД) типа «тороид» (рис. 1) и рассчитали распределение осевых и радиальных градиентов температуры в реакционном объеме контейнера. Для расчета диффузионного переноса углерода в металле-растворителе решили диффузионную задачу. Для расчета распределения температуры применяли ранее полученные экспериментально-расчетные данные [2,3] о свойствах материалов, из которых изготовлены детали контейнера АД. Используемое программное обеспечение позволяет рассчитывать распределение температуры в зависимости от количества теплоты, выделяемой на нагревательных элементах. Для учета влияния переменного тока использовали уравнение Максвелла, описанное для постоянной частоты 50 Гц (рис.1).

При изменении соотношения удельного сопротивления между верхним 6 и нижним 7 нагревательными элементами, (рис. 1) при длительных выдержках (100 ч и более), общее распределение температурных полей по всему объему контейнера АД практически не изменяется. Однако согласно расчету наибольшее изменение распределения температуры наблюдается в металле-растворителе в процессе роста монокристалла кристалла при увеличе-

нии его массы. Кристалл в процессе роста за счет высокой теплопроводности существенно влияет на перераспределение температуры в реакционном объеме. Распределение температуры в металле-растворителе в момент, когда масса растущего кристалла составляет один карат показано на рис. 2. Расчеты выполняли для кристалла кубоктаэдрического габитуса. Как видно из рис. 2, направление теплового потока в металле-растворителе соответствует направлению температурного градиента. Наибольшие отклонения теплового потока наблюдаются вблизи растущего кристалла.

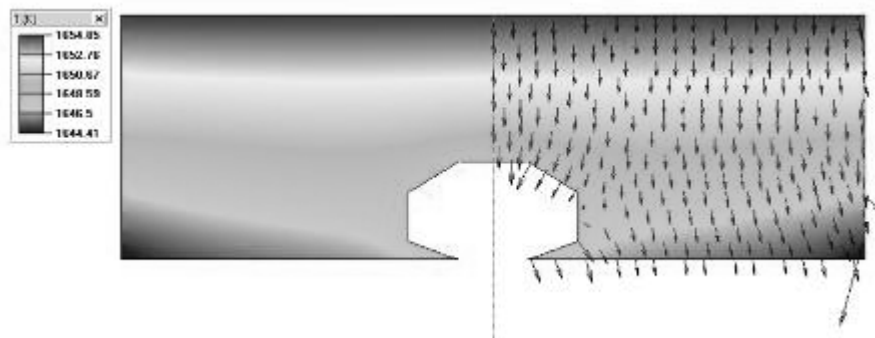


Рис. 2. Схема распределение температуры в металле-растворителе в ячейке АВД типа «тороид». Схема сборки ячейки по рис. 1

Полученные данные по распределению температурных полей в металле-растворителе позволили рассчитать распределение в нем углерода (рис. 3).

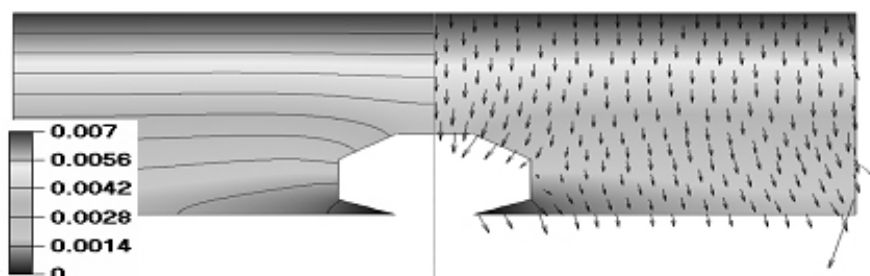


Рис. 3. Схема распределения углерода в металле-растворителе для заданного распределения температуры в ячейке АВД типа «тороид»

Как известно, основополагающим процессом, который влияет на качество растущего кристалла, является диффузия углерода в металле-растворителе. Используемое программное обеспечение позволяет рассчитывать массоперенос углерода от источника к растущему кристаллу не только по диффузионной модели, но и с учетом влияния эффектов конвекции и магнитного поля, создаваемого резистивной системой нагрева. Поскольку резистивное нагревание ячейки производится переменным током, на массоперенос углерода от источника к растущему кристаллу влияет сила Лоренца (частицы железа и кобальта движутся в электромагнитном поле). Это влияние изменяется в зависимости от напряженности магнитного поля, возникающего в результате прохождения переменного электрического тока по резистивной системе ячейки АВД.

Для оценки влияния эффекта Лоренца на массоперенос углерода рассмотрим три случая создания определенной напряженности магнитного поля при использовании различных соотношениях электропроводности резистивных элементов 6 и 7 АВД (см. рис. 1). Когда разница электропроводностей резистивных элементов ячейки АВД достигает $1,92 \cdot 10^6 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$ (рис. 4.а), в металле-растворителе образуются два противоположно направленных завихренных движения заряженных частиц. Это приводит к неравномерному распределению углерода в реакционном объеме вокруг поверхности кристалла и препятствует массопереносу углеро-

да от источника к растущему кристаллу. При увеличении разницы электропроводностей резистивных элементов в 2 раза, в металле-растворителе наблюдается сильное завихрение заряженных частиц, способствующее плавному равномерному перенесению углерода от источника к растущему кристаллу.

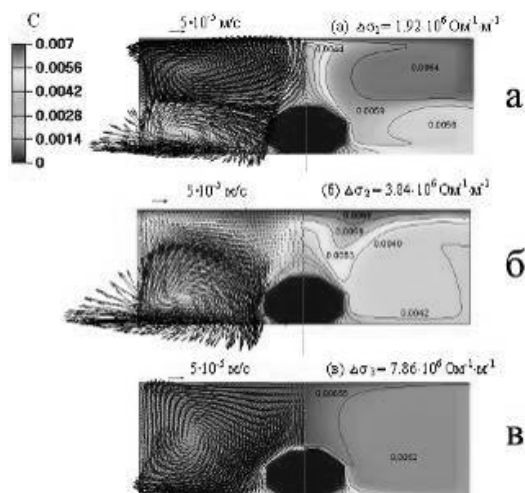


Рис. 4. Схема распределения концентрации углерода в металле-растворителе с изолиниями и векторами направленности движения заряженных частиц в электромагнитном поле разности электропроводности нагревательных элементов задающих градиенты температуры:

$$a - \Delta\sigma_1 = 1,92 \cdot 10^6 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}; \quad б - \Delta\sigma_2 = 3,84 \cdot 10^6 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}; \\ в - \Delta\sigma_3 = 7,86 \cdot 10^6 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$$

Когда разность электропроводностей нагревательных элементов ячейки АД достигнет $7,86 \cdot 10^6 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$, действующие силы Лоренца приводят к появлению сильного завихрения и перенесению углерода от источника к растущему кристаллу с высокой скоростью. Такой массоперенос наиболее негативно влияет на процесс выращивания кристаллов, поскольку при этом скорость роста кристалла превышает критическое значение.

Полученные результаты позволяют сделать следующие выводы:

1. Компьютерное моделирование процесса роста монокристаллов алмаза на затравке в системах Fe–Co–Zr–C и Fe–Co–Zr–B–C, выполненное с применением пакета программ «CGSim», позволяет определить распределение температуры, ее осевые и радиальные градиенты в зависимости от резистивных и тепловых свойств элементов ростовой ячейки, а так же учитывать влияние силы Лоренца на массоперенос углерода к растущему кристаллу.

2. Существуют критические значения соотношения электросопротивлений нагревательных элементов ростовой ячейки определяющих градиенты температур, превышение которых приводит к образованию в металле-растворителе завихрения потоков перенесения углерода, обусловленные силой Лоренца и приводящие к негативному процессу избыточного перенесения углерода к растущему кристаллу.

Литература

1. CGSim, Flow Module Ver. 3.9. Theory Manual, November 2007, Semiconductor Technology Research, Inc., 12901 Mill Shed Drive, Richmond, VA, 23112, USA.
2. Будяк А. А. Определение тепловой мощности электрического тока в аппаратах высокого давления методом электроаналогий // Сверхтвердые матер. – 1981. – № 4. – С. 5–8.
3. Будяк А. А. О приближенном расчете поля температуры в АД // Сверхтвердые матер. – 1982. – № 2. – С. 13–16.

Поступила 19.06.09