

2. Бобров А. В. Минеральные равновесия алмазообразующих карбонатно-силикатных систем: Автореф. Дис. докт. геол.-минералог. наук: 25.00.04 / МГУ им. М. В. Ломоносова. – М., 2009. – 44 с.
3. Литвин Ю. А., Спивак А. В. Алмазиты: быстрый рост в контакте графита и карбонатных расплавов (опыты при 7,5–8,5 ГПа) // Доклады Академии наук. – 2003. – Т. 391, № 5. – С. 673–677.
4. Рост алмаза из раствора в расплаве CaCO<sub>3</sub> / А. Ф.Хохряков, Ю. М. Борздов, Ю. Н. Пальянов, А. Г. Сокол // Записки всероссийского минералогического общества: Экспериментальная минералогия. – 2003. – Ч. СXXXII, № 2. – С. 87–94.
5. Thermally stable polycrystalline diamond sintered with calcium carbonate / J. E. Westraadt, N. Dubrovinskaia, J. H. Neethling, I. Sigalas // Diamond Relat. Mater. – 2007. – N 16. – P. 1929–1935.
6. High-E / Low-E CBN/Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> Composite for Heavy Interrupted Cutting / I. A. Petruska, A. S. Osipov, T. I. Smirnova et al. // SPS11: Proc. 4<sup>th</sup> Int. Swed. Prod. Symp., Lund, Sweden, May 3–5, 2011. – Lund, Swedish Production Academy, 2011. – P. 161–168.
7. Инфильтрационные явления в условиях высокого давления при спекании кубического нитрида бора / И. А. Петруша, М. В. Никишина, И. А. Боримский и др. // Породоразрушающий и металлообрабатывающий инструмент – техника и технология его изготовления и применения: сб. науч. тр. – Киев: ИСМ НАН Украины, 2009. – Вып. 12 – С. 265–270.
8. Моделирование термомеханического состояния реакционной ячейки АД при спонтанной кристаллизации алмазов / А. А. Лещук, Н. В. Новиков, В. И. Левитас // Сверхтвердые материалы. Получение и применение: Моногр.: В 6 т. / Под общ. ред. Н. В. Новикова. – К.: «Алкон», 2003. – Т. 1. Синтез алмаза и подобных материалов. – Гл. 3. – С. 96–118.
9. Phase relations of CaCO<sub>3</sub> at high pressure and high temperature / K. Suito, J. Namba, T. Horikawa et al. // American Mineralogist. – 2001. – V. 86. – P. 997–1002.
10. О результатах технологических испытаний образцов литографского камня Алгетского месторождения (Грузинская ССР) / А. Прихна, Э. Винник, Л. Фокина // Отчет по договору № 193. – ИСМ им. В. Н. Бакуля. – 1965. – 34 с.
11. Давыдов В. А., Ревин О. Г., Слесарев В. Н. Диффузия компонентов литографского камня в графит при высоких давлениях и температурах // Сверхтвердые материалы. – 1982. – № 3. – С. 3–7.
12. Kennedy S. C., Kennedy G. C. The equilibrium boundary between graphite and diamond // J. Geophys. Res. – 1976. – V. 81. – P. 2467–2470.
13. Will G, Nover G., von der Gönna J. New experimental results on the phase diagram of boron nitride // J. Sol. State Chem. – 2000. – V. 154. – P. 280–285.
14. Кинетические особенности кристаллизации алмаза в карбонат-углеродной системе (эксперимент при 8,5 ГПа) / Н. А. Солопова, А. В. Спивак, Ю. А. Литвин, В. С. Урусов // Электронный научно-информационный журнал «Вестник Отделения наук о Земле РАН», ISSN 1819-6586, URL: [http://www.scgis.ru/russian/cp1251/h\\_dgggms/1-2008/informbul-1\\_2008/term-11.pdf](http://www.scgis.ru/russian/cp1251/h_dgggms/1-2008/informbul-1_2008/term-11.pdf) . – 2008. – № 1(26). – С. 1–5.

Поступила 20.07.11

УДК 004.942:62-978

**Т. В. Коваленко; А. Н. Катруша**, канд. техн. наук; **С. А. Ивахненко**, д-р техн. наук; **Т. А. Цысарь**

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

## **РАСЧЕТ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ПОЛЕЙ В ЯЧЕЙКЕ АППАРАТА ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ ДЛЯ ВЫРАЩИВАНИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ АЛМАЗА ПРИ ТЕМПЕРАТУРАХ ДО 2000 °С**

*Рассчитано распределение температурных полей в ростовой ячейке с целью определения температуры на деталях сборки и возможности достижения температуры для создания условий, обеспечивающих зародышеобразование алмаза в системах на основе магния.*

**Ключевые слова:** монокристаллы алмаза, ячейка высокого давления, системы на основе магния, распределение температур.

Высокие термобарические параметры, агрессивность компонентов реакции, значения градиента температуры и точность поддержания параметров обуславливают значительные экспериментальные трудности при выращивании монокристаллов алмаза в системах на основе магния. Разработка ячеек для выращивания монокристаллов алмаза методом температурного градиента для указанных систем ограничена возможностями проведения экспериментальных исследований в области высоких температур и малыми размерами деталей, применяемых для сборки ростовых ячеек заданной конфигурации. Экспериментальное изучение распределения температуры в реакционной ячейке для выращивания алмаза трудоемко и возможно лишь для ограниченного круга задач.

В последние годы широко используются расчеты с применением методов конечных элементов для решения задач электро- и теплопроводности. Путем варьирования свойств материалов элементов ростового объема и контейнера аппарата высокого давления (АВД) данные методы позволяют оптимизировать условия выращивания путем задания необходимых резистивных составляющих системы электрического нагрева для задания требуемого распределения температуры в ростовом объеме.

В настоящей работе были проведены расчеты распределения температурных полей в ростовой ячейке с целью определения температуры на деталях сборки, возможности достижения температуры для создания условий, обеспечивающих стабильный рост монокристаллов алмаза. Представляло интерес изучить влияние конфигурации нагревательной системы на распределение температуры в ростовом объеме, особенно на границе растворитель – система нагрева.

С помощью методов компьютерного моделирования с применением схем расчета на основе метода конечных элементов [1; 2] исследовано изменение распределения температур для ростовой ячейки АВД типа «тороид» ТС-20. Расчеты проводились для ростовой ячейки, показанной на рис. 1, в которой использован сплав растворитель Mg – С цилиндрической формы.

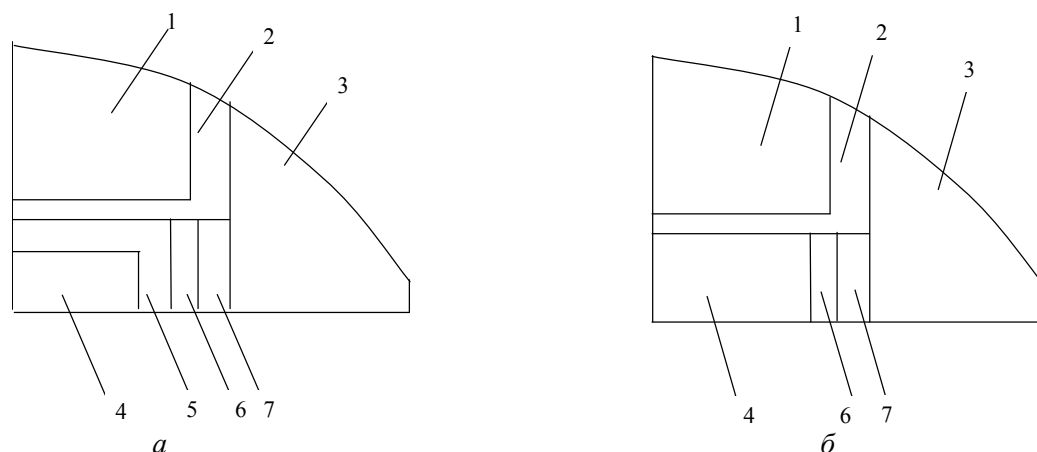
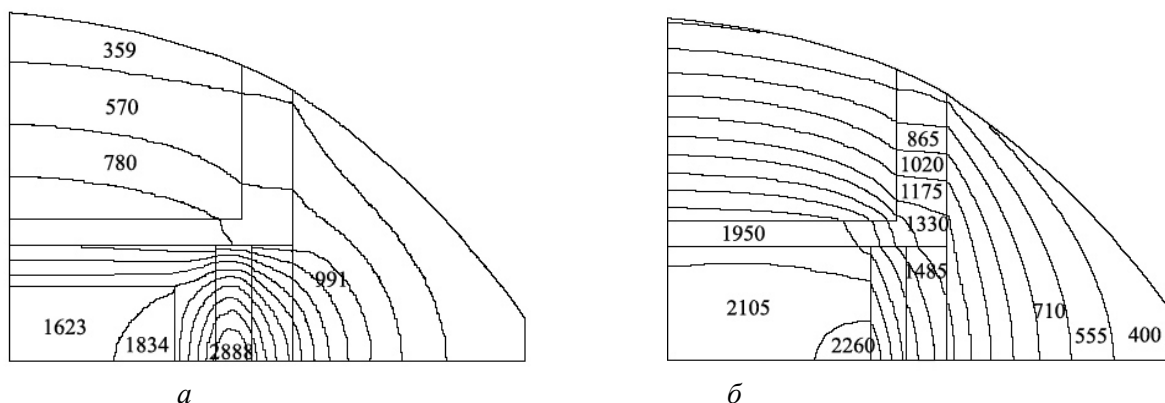


Рис. 1. Схем ячейки АВД для выращивания монокристаллов алмаза: а – с изоляцией ростового объема от системы нагрева; б – без применения изоляции; 1 – изоляционный диск (CsCl); 2 – графитовый нагревательный элемент; 3 – контейнер (литографский камень); 4 – ростовой объем; 5 – элементы изоляции ростового объема; 6 – трубчатый нагреватель (графит); 7 – изоляционная втулка (CsCl)

Ввиду осевой симметрии ячейки АВД и граничных условий на ее поверхности в расчетах учитывали  $\frac{1}{4}$  часть осевого сечения ячейки. Расчетная схема дискретизировалась на треугольные элементы, соединенные между собой в узлах. В области с максимальными значениями электропотенциала и температуры проведено сгущение конечноэлементной сетки. На данную область приходится около 90 % элементов и узлов.

Расчеты проводились для сборки ячейки с применением изоляции ростового объема (рис. 1, б) и без изоляции (рис. 2, а). Рассмотрены варианты применения различных материалов для изготовления нагревательных элементов: графита ГСМ и смеси из стабилизированного диоксида циркония  $ZrO_2$  и графита.

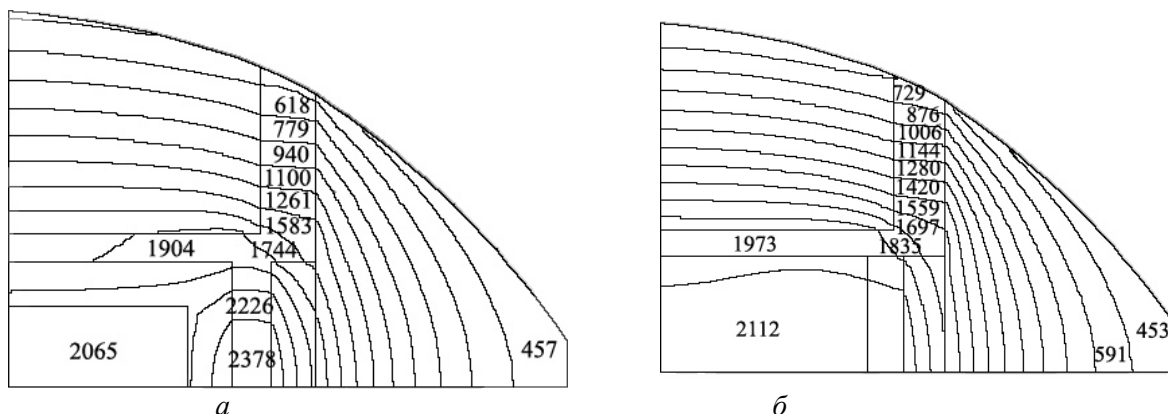


а

б

Рис. 2. Схемы распределения температуры в ячейке АД с использованием нагревательных элементов, выполненных из дисперсно-композиционного материала на основе диоксида циркония. Цифрами указаны значения температуры, °С

В результате решения стационарной задачи электро- и теплопроводности [1] получено распределение температуры в различных частях ростовой ячейки АД. На основании расчетов разработаны модели, показанные на рис. 2, 3. Характер расположения линий изотерм в объеме ростовой ячейки позволяет оценить температуру на различных деталях ячейки АД.



а

б

Рис. 3. Схемы распределения температуры в ячейке АД с использованием графитовых нагревательных элементов. Цифрами указаны значения температуры, °С

Результаты расчетов распределения температур в ростовом объеме с использованием трубчатого нагревателя, выполненного из дисперсно-композиционного материала на основе диоксида циркония, показаны на рис. 2. Анализ результатов показывает, что при использовании данных материалов при достижении температуры в центре ростового объема 2000 °С температура на отдельных элементах ячейки достигает 2888 °С (рис. 2, а) и 2260 °С (рис. 2, б). Такая высокая температура приводит к алмазообразованию на нагревателе и последующему изменению его резистивных свойств и конфигурации температурного поля.

Результаты расчетов для конструкций ячеек высокого давления, в которых применялся графитовый трубчатый нагреватель, показаны на рис. 3.

Как видим, при использовании хлорида цезия в качестве изоляции ростового объема от системы нагрева температура на элементах изоляции достигает 2387 °С, что приводит к плавлению CsCl и, следовательно, изменению термобарических параметров выращивания монокристаллов алмаза. При этом для достижения температуры, необходимой для выращивания монокристаллов алмаза в системах на основе магния, требуются более высокие значения мощности. Схема, показанная на рис. 3, б, позволяет снизить температуру на элементах конструкции для проведения процесса выращивания в области термодинамической стабильности до 1700–2110 °С.

Результаты расчетов показывают, что применение дисперсно-композиционного материала на основе диоксида циркония в качестве материала нагревательных элементов (см. рис. 2, а) обеспечивает минимальную температуру нагрева матриц АД в зоне контакта с электровводом в ячейку, что

позволяет избежать их перегрева. Для схемы нагрева с использованием графитовых нагревателей (см. рис. 3) при применении электроизоляции реакционного объема (см. рис. 3, а), наблюдается перегрев на нагревателе на  $\sim 350$  °С по сравнению с конструкцией без использования изоляции (см. рис. 3, б). По-видимому, для равномерного распределения температуры в ростовом объеме необходимо применять комбинированные нагревательные элементы, выполненные из графита и смеси на основе стабилизированного диоксида циркония с графитом, размещенные в резистивной цепи нагрева последовательно.

Проведенные исследования позволяют выбирать материалы, пригодные для изготовления деталей ячейки, а также оптимизировать конструкцию ячейки АД для выращивания монокристаллов алмаза в ростовых системах на основе магния в области термодинамической стабильности.

*Розраховано розподіл температурних полів у ростовій комірці з метою визначення температури на деталях конструкції та можливості досягнення температури для створення умов, що забезпечують зародкоутворення алмазу в системах на основі магнію.*

*Ключові слова: монокристали алмаза, комірка високого тиску, системи на основі магнію, розподіл температур.*

*The calculations of the distribution of temperature fields in the growth cell in order to determine the temperature on the details of the assembly and possibility of achieving temperatures to create conditions for the nucleation of diamond in magnesium-based systems are realized.*

*Key words: diamond single crystals, high pressure cell, magnesium-based systems, temperature distribution.*

#### Литература

1. Лещук А.А., Новиков Н.В., Левитас В.И. Компьютерное моделирование физико-механических процессов в реакционной ячейке аппаратов высокого давления при синтезе алмазов // Пробл. прочности. – 2001. – № 3. – С. 108–128.
2. Лещук А.А. Компьютерное моделирование областей кристаллизации алмаза в аппаратах высокого давления // Прикладная механика. – 2001. – 37, № 7. – С. 121–127.

*Поступила 25.06.11*

УДК 539.89:669.018.45

**С. Н. Шевчук**, канд. техн. наук, **О. А. Заневский**, канд. хим. наук, **А. Н. Катруша**, канд. техн. наук,  
**С. А. Ивахненко**, д-р техн. наук

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

### ДВУХСТАДИЙНОЕ ВЫРАЩИВАНИЕ МОНОКРИСТАЛЛОВ АЛМАЗА С ПРИМЕНЕНИЕМ ТЕРМОЦИКЛИРОВАНИЯ

*Установлено, что при выращивании монокристаллов алмаза на затравке использование термоциклирования, заключающееся в снижении ростовой температуры до уровня, обеспечивающего затвердевание металлического растворителя углерода на основе Fe-Co-Ti-Al, с выдержкой при этом в течение 0,5 – 3,0 часов и последующего повышения температуры до значений, соответствующих первоначальному уровню, приводит к возрастанию массовой скорости роста кристаллов в 1,5 – 2,0 раза.*

*Ключевые слова: алмаз, выращивание, температурный градиент, затравка, скорость роста, термоциклирование.*

Уникальные физические свойства алмаза обеспечивают его применение в различных областях научных исследований и высокотехнологичных производствах. Потребность в монокристаллах алмаза, выращенных в области термодинамической стабильности при высоких давлениях и