

УДК 666.233

А. А. Будяк , канд. физ.-мат. наук ; С. А. Ивахненко, док. техн. наук

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

О ВЛИЯНИИ КОНФИГУРАЦИИ ДЕФОРМИРУЕМОГО УПЛОТНЕНИЯ НА ТЕПЛОВОЕ ПОЛЕ В РЕАКЦИОННОЙ ЯЧЕЙКЕ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ МОНОКРИСТАЛЛОВ АЛМАЗА МЕТОДОМ Т-ГРАДИЕНТА

In a reaction vessel there was made the calculation of a thermal field to grow single crystals of diamond by a method of the T-gradient for two variants of working space: the first – “the anvil with recess”, the second – HPA of “toroid” type is applied. It is shown, that in the second case the average temperature in metal- solvent rises up to 80 °C, and the average temperature gradient decreases two times as much.

Введение

Для синтеза сверхтвердых материалов, например, алмаза и кубического нитрида бора, при высоких давлениях и температуре применяются аппараты высокого давления (АВД), содержащие две одинаковые смыкающиеся матрицы А, имеющие на своих торцах центральные углубления, куда помещен контейнер В из литографского камня с реакционной ячейкой (АВД типа наковальня с лункой) (рис. 1, а). Под давлением плит пресса наружная часть контейнера, деформируясь, заполняет пространство между матрицами вблизи центрального углубления и задерживает истечение материала контейнера из него, тем самым, обеспечивая герметичность рабочего пространства.

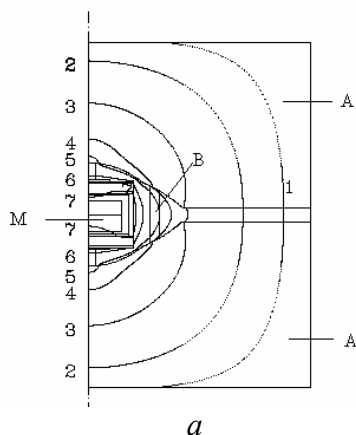
Для обеспечения герметичности реакционной ячейки при повышенных давлении и температуре используют АВД типа тороид, в матрицах которых соосно центральным углублениям выполнены кольцевые канавки К (рис. 2, а). Целью настоящей работы является определение влияния материала деформируемого уплотнения в кольцевых канавках на тепловое поле в металле–растворителе.

Методика исследования

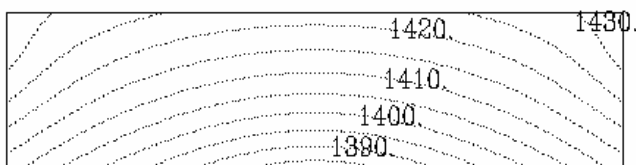
Решение поставленной задачи экспериментальным путем весьма затруднительно из-за невозможности обеспечить одинаковые условия как при повторении экспериментов, так и при использовании двух типов АВД, а также невозможности определения температуры с помощью термопар во множестве точек металла–растворителя одновременно. Аналитическое определение температуры путем решения уравнения теплопроводности тоже проблематично из-за многочисленности элементов снаряжения реакционной ячейки АВД и разнообразия граничных условий. Поэтому расчеты теплового поля проводились численным методом, изложенным в [1]. Его суть заключается в последовательном приближенном решении стационарных линейных уравнений электро- и теплопроводности при соответствующих граничных условиях методом конечных разностей (методом сеток). Получаемая при этом система линейных алгебраических уравнений 5–6 порядка решалась итерационным методом Гаусса–Зейделя. Ввиду осесимметричности АВД рассматривалась половина осевого сечения матриц и помещенного в их углубления контейнера с реакционными компонентами и задача решалась на неравномерной сетке, которая сгущалась в зоне, занятой металлом–растворителем (см рис. 1, а, б).

Обсуждение результатов

На рис. 1, *a* приведены изотермы теплового поля в матрице с контейнером, в котором помещена ячейка для выращивания монокристаллов алмаза на затравке, а на рис. 1, *б* – изотермы в металле–растворителе для одного из вариантов сборки реакционной ячейки для АД типа наковальня с лункой.



1 – 230 °С ; 2 – 250 °С ; 3 – 300 °С ; 4 – 400 °С ; 5 – 600 °С ; 6 – 1100 °С ;
7 – 1400 °С.

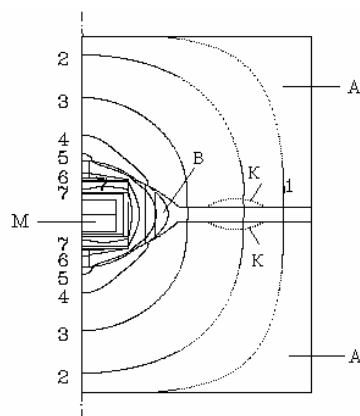


б

Рис. 1. Изотермы теплового поля в половине осевого сечения матриц без кольцевых углублений (*a*) и в металле–растворителе (*б*).

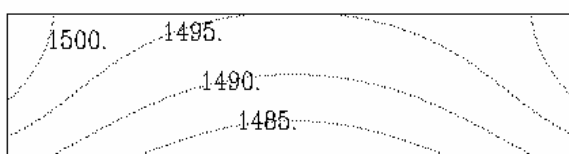
Если герметичность рабочего пространства недостаточна, что может иметь место, например, при увеличении давления и температуры, тогда целесообразно использовать АД типа тороид.

На рис. 2, *a* приведены изотермы теплового поля в матрице с кольцевыми углублениями. Как и следовало ожидать, в матрице с контейнером при наличии кольцевых углублений картина изотерм практически не изменилась. Но, как следует из расчетов и видно на рис. 1, *a* и рис. 2, *a*, при этом обнаруживается следующий тепловой эффект: при одном и том же снаряжении реакционной ячейки и одинаковых граничных условиях усредненная температура в металле–растворителе при использовании матриц без кольцевых углублений $\cong 1412$ °С, – с кольцевыми углублениями $\cong 1492$ °С, а усредненный градиент температуры в металле–растворителе имеет следующие расчетные величины : в матрице без кольцевых углублений $\text{grad } T \cong 9,6$ °С/мм, в матрице с кольцевыми углублениями $\text{grad } T \cong 4,2$ °С /мм.



а

1 – 230 °С ; 2 – 250 °С ; 3 – 300 °С ; 4 – 400 °С ; 5 – 600 °С ; 6 – 1100 °С ;
7 – 1400 °С.



б

Рис. 2. Изотермы теплового поля в половине осевого сечения матриц с кольцевыми углублениями (а) и в металле–растворителе (б).

Выводы

При выращивании монокристаллов алмаза методом Т–градиента в АД типа тороид температура в металле–растворителе повышается на 50 –85 °С, а градиент температуры уменьшается в два раза по сравнению с теми же характеристиками теплового поля при использовании АД с матрицами без кольцевых углублений. Полученные результаты позволяют корректировать нагрев реакционного объема в зависимости от типа используемых АД без ввода термопар.

Работа выполнена при содействии Государственного фонда фундаментальных исследований при Министерстве образования и науки Украины, проект № 10.01/037.

Литература

1. Будяк А. А. Расчет теплового поля в реакционной ячейке АД методом поэтапного моделирования // Сверхтв. материалы.– 1994.– № 3.– С.13 – 18.
2. Патент Франции № 2122772; кл. В I J 3/00, 1972.

Поступила 02.07.2006 г.