

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО CVD СИНТЕЗА КАРБИДОВ ВОЛЬФРАМА

В.Л. Гончаров

*ИФХЭ РАН, 119991, г. Москва, Ленинский проспект, д.31, корп. 4
e-mail: gontcharov@ipc.rssi.ru*

Проведено систематическое исследование системы WF_6-H_2 -углеродсодержащий прекурсор с целью определения равновесных конденсированных и газовых состояний, при различных внешних условиях: температуры, состава исходных реагентов и общего давления. Расчёт термодинамических параметров производился посредством модифицированной программа “Астра-4” [1], в основе которой использован принцип нахождения максимума энтропии изолированной термодинамической системы. Экспериментально была установлена зависимость скорости осаждения основных карбидных фаз (моно-, полу- и субкарбида вольфрама) от общего давления реакционной смеси в интервале 0.1-20 кПа. Выявлено, что соотношение пропана к водороду в реакционной смеси, в основном, контролирует синтез карбида той или иной стехиометрии. Кажущаяся энергия активации процесса осаждения карбидных фаз различна и составляет величину 27,9 кДж/моль для WC, 36,1 кДж/моль для W_2C и 55,1 кДж/моль для W_3C . При исследовании механизма кристаллизации основное внимание было уделено теоретическому исследованию гомо- и гетерогенных элементарных стадий в смеси WF_6 , H_2 и C_3H_8 . Расчет проводился с использованием термодинамического приближения к теории переходного состояния (ТПС), которое предполагает создание переходного комплекса в газовом и адсорбированном состоянии. Показано, что в цепи химических реакций основную роль играют реакции комплексообразования низших фторидов вольфрама на поверхности, а при синтезе карбидов – фторуглеводороды. Сильные латеральные взаимодействия в слое адсорбированных частиц значительно влияют на кинетику химических превращений и рост карбидных пленок.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 09-08-00182)

Литература

1. Б.Г. Трусов, Моделирование химического и фазового равновесий при высоких температурах (АСТРА-4/pc), (МГТУ им. Н.Е.Баумана) Москва, 1994