

УДК 62-987:536.2:004.94

О.О. Лещук, к.т.н., с.н.с.
О.І. Боримський, к.т.н., с.н.с.
О.П. Антонюк, інж.

Інститут надтвердих матеріалів ім. В.М. Бакуля НАН України

МОДЕЛЮВАННЯ ТЕПЛООВОГО СТАНУ АПАРАТА ВИСОКОГО ТИСКУ ПРИ СПІКАННІ ДВОШАРОВИХ ПЛАСТИН НА ОСНОВІ КУБІЧНОГО НІТРИДУ БОРУ ТА ТВЕРДОГО СПЛАВУ

З використанням методу комп'ютерного моделювання розраховане поле температури в апараті високого тиску типу "ковадла із заглибленнями" при спіканні двошарових пластин на основі кубічного нітриду бору та твердого сплаву при високих p , T -параметрах. Наведений розподіл температури для пластин та реакційних комірок різних конструкцій, виготовлених із матеріалів з різними фізичними властивостями.

Постановка проблеми. Пластини на основі кубічного нітриду бору (КНБ) широко використовуються в різних галузях промисловості. Найбільш широко вони застосовуються як інструментальні матеріали для механічної обробки загартованих сталей, спеціальних чавунів, наплавлених покриттів, хромонікелевих сплавів та ін. [1]. Розробка пластин із КНБ відноситься до фундаментальної проблеми створення матеріалів з наперед заданими властивостями, що досліджується за планами науково-дослідних робіт НАН України.

В залежності від призначення виготовляються одношарові пластини, що складаються з порошку КНБ зі зв'язкою, або двошарові, що складаються з полікристала на основі КНБ, закріпленого на підкладці з твердого сплаву. Пластини виготовляються спіканням при високих тисках (5–8 ГПа) і температурах (1200–2000 °С), що відповідають області термодинамічної стабільності КНБ [2]. Для створення таких високих p , T -параметрів використовують спеціальні апарати високого тиску (АВТ) різних конструкцій. Серед різноманітності конструкцій АВТ для спікання пластин (як і для синтезу надтвердих матеріалів – алмаза і КНБ) застосовуються переважно апарати трьох типів, а саме: "ковадла із заглибленнями", циліндричні апарати, відомі за рубежом як апарати «белт», і багатопуансонні конструкції [2]. В даний час АВТ для синтезу надтвердих матеріалів і спікання полікристалів на їх основі є єдиним промисловим освоєним пристроєм, що працює у виробництві при зазначених вище робочих параметрах.

У реакційній комірці АВТ, підданій всебічному стиску і нагріванню, відбуваються фазові перетворення, кристалізація речовин, синтез нових з'єднань, спікання матеріалів. Робочий цикл продовжується від декількох секунд до десятків годин.

Одним з основних факторів спікання якісних одно- та двошарових пластин є створення таких умов нагріву реакційної комірки, які б забезпечили достатньо рівномірний розподіл температури в об'ємі зразка пластини. Регулювати розподіл теплових параметрів при спіканні пластини можливо шляхом відповідного вибору матеріалів та оптимізації конструкції комірки.

Очевидно, достовірні дані по розподілу температури в зразку можливо встановити експериментально, використовуючи термометри. Однак у цьому випадку для визначення оптимальних геометричних параметрів і фізичних характеристик матеріалів реакційної комірки необхідно провести велику кількість складних експериментів, що потребує багато часу та матеріальних витрат. Недоліком експериментального підходу є також практична неможливість побудови полів температури для багатослементних комірок складної конструкції та наявність похибок, пов'язаних з використанням термометрів. Тому для скорочення часу і зменшення матеріальних витрат для оптимізації доцільно залучати методи комп'ютерного моделювання.

Метою даної роботи було комп'ютерне моделювання теплового стану апарата високого тиску типу "ковадла із заглибленнями" при спіканні двошарових пластин на основі кубічного нітриду бору та твердого сплаву і встановлення закономірностей розподілу температури для пластин та реакційних комірок різних конструкцій, виготовлених із матеріалів з різними фізичними властивостями.

Результати комп'ютерного моделювання. Схема АВТ, що розраховувався, наведена на рис. 1. Нагрів зразка пластини відбувається за рахунок протікання електричного струму через АВТ і, як наслідок, виділення Джоулевого тепла в електропровідних елементах реакційної

комірки (рис. 2). Більша частина тепла виділяється в нагрівачі, матеріали якого мають достатньо високий електричний опір.

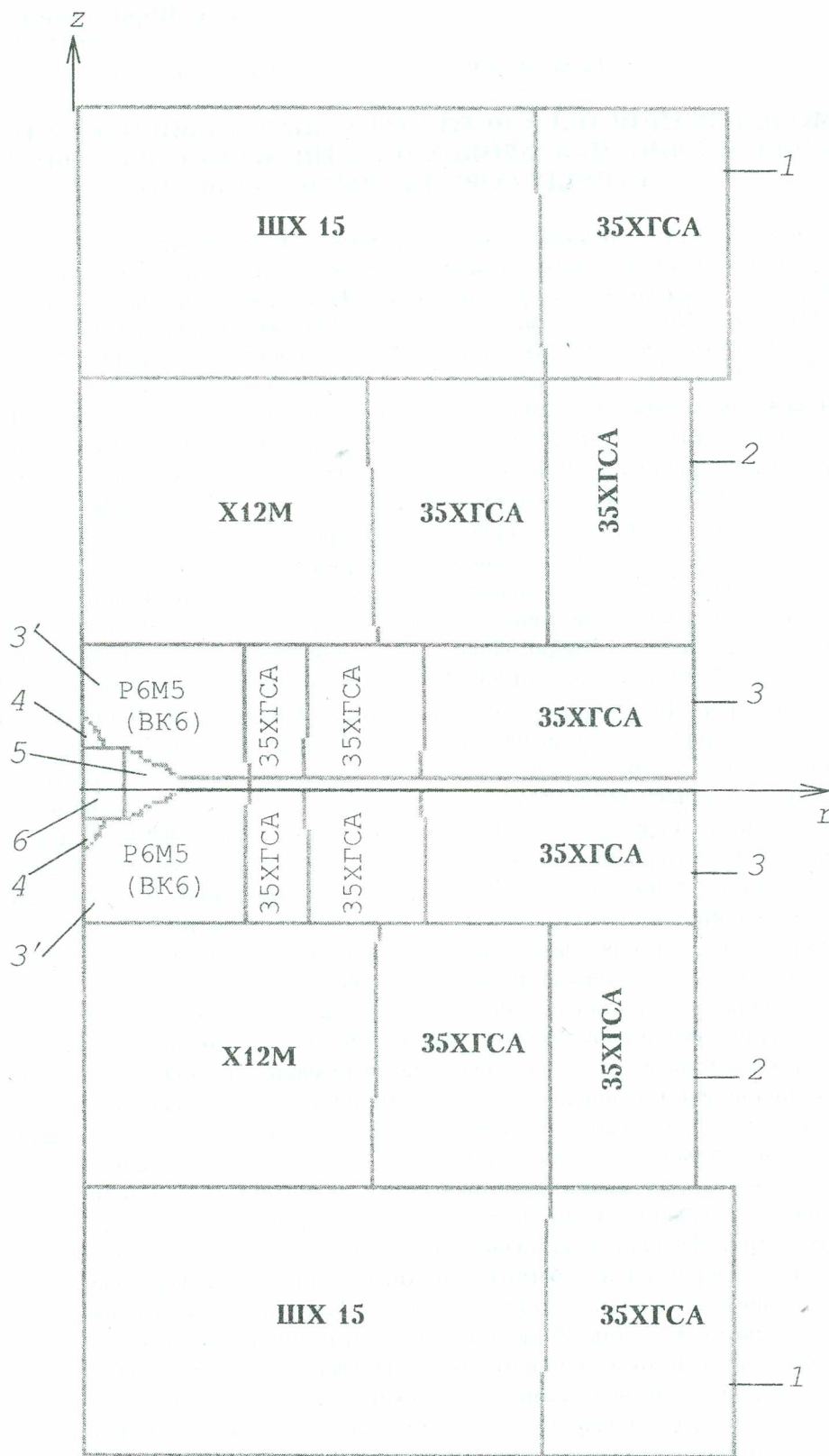


Рис. 1. Схема АВТ для спікання пластин: 1 – підкладна плита (сталь); 2 – опорна плита (сталь); 3 – блок кілець (сталь); 3' – матриця (сталь або твердий сплав); 4 – вставка (сплав ХН77ТІОР); 5 – контейнер (ванняк); 6 – реакційна комірка (див. рис. 2)

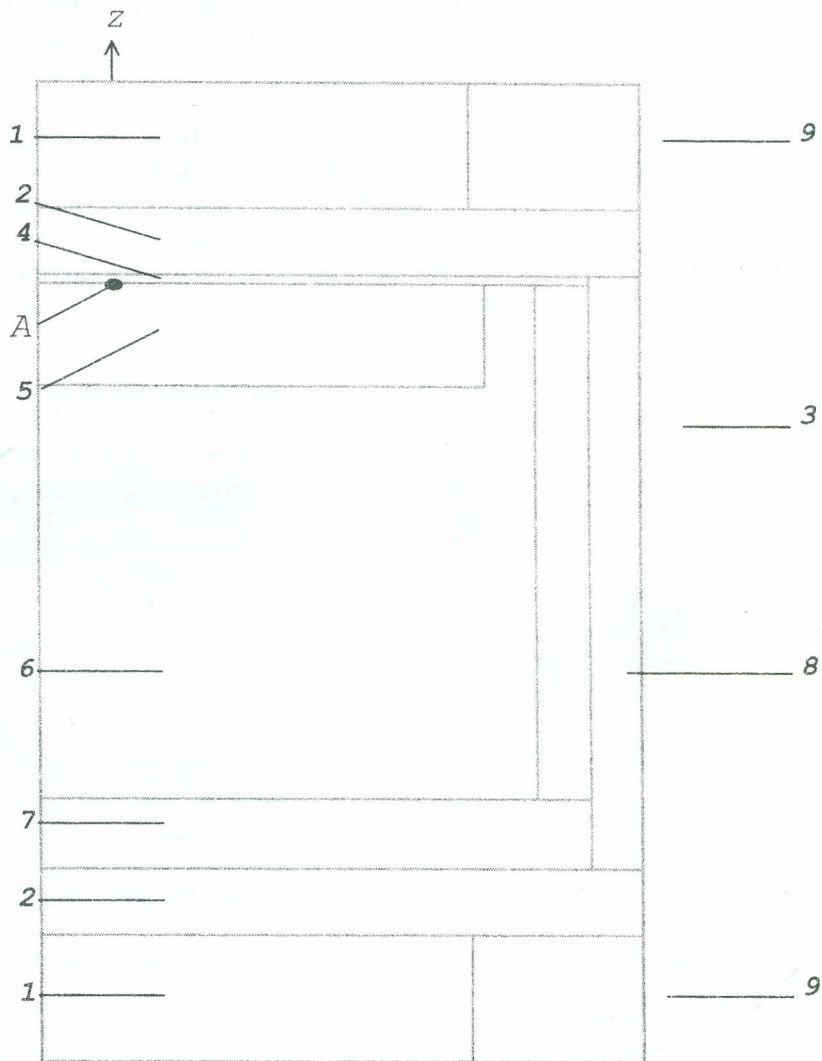


Рис. 2. Схема реакційної комірки АВТ: 1-3 - елементи нагрівача (1 - графіт; 2 - суміш порошків графіту та вапняку; 3 - графіт або суміш порошків графіту та нітриду бору); 4 - пластина (тантал); 5 - заготовка полікристала (суміш порошку КНБ з добавками); 6 - підкладка (твердий сплав); 7, 8 - елементи ізолятора (гексагональний нітрид бору); 9 - кільце (вапняк); А - контрольна точка

Для розрахунку температурних полів у досліджуваному АВТ була застосована комп'ютерна методика розв'язання зв'язаних задач електро- і теплопровідності, заснована на використанні методу скінченних елементів [2]. Методика пройшла широку апробацію при розв'язанні тестових і прикладних задач, зв'язаних із моделюванням процесів нагрівання АВТ для спонтанної кристалізації алмазів, тощо [2-4].

У даній роботі проведено розрахунок полів температури для АВТ типу "ковадла із заглибленнями" (див. рис. 1, 2) з реакційною коміркою діаметром 35 мм і висотою 28,5 мм (після стиску). Завдяки осьовій симетрії АВТ, а також симетрії граничних умов на його поверхні, до розгляду приймалася 1/2 частина осьового перерізу апарата. Схема АВТ була дискретизована 19535 трикутними елементами, сполученими між собою в 9920 вузлах (рис. 3, а). В області реакційної комірки, де градієнти електропотенціалу і температури приймають максимальні значення, виконувалося згущення скінченно-елементної сітки (рис. 3, б).

Граничні умови задавалися, виходячи з реальних умов експлуатації АВТ, наступним чином (див. рис. 1):

для задачі електропровідності на торцевих поверхнях підкладних плит приймалася значення електропотенціалу з таким розрахунком, щоб розрахункова температура у

контрольній точці А реакційної комірки (див. рис. 2) складала ~ 1400 °С. На іншій частині граничної поверхні задавалася умова електроізоляції (нульове значення густини електричного струму);

для задачі теплопровідності на торцевих поверхнях підкладних плит, достатньо віддалених від реакційної комірки, задавалася температура 40 °С. На бічних поверхнях підкладних і опорних плит приймалися умови конвективного теплообміну з повітрям (коефіцієнт тепловіддачі приймався рівним 50 Вт/(м²·°С), температура навколишнього середовища – 20 °С), а на бічних поверхнях блоків кілець – умови конвективного теплообміну з водою (відповідні значення становили 7600 Вт/(м²·°С) і 10 °С). На частині граничної поверхні, розміщеної між блоками кілець, задавалася умова теплоізоляції (нульове значення густини теплового потоку).

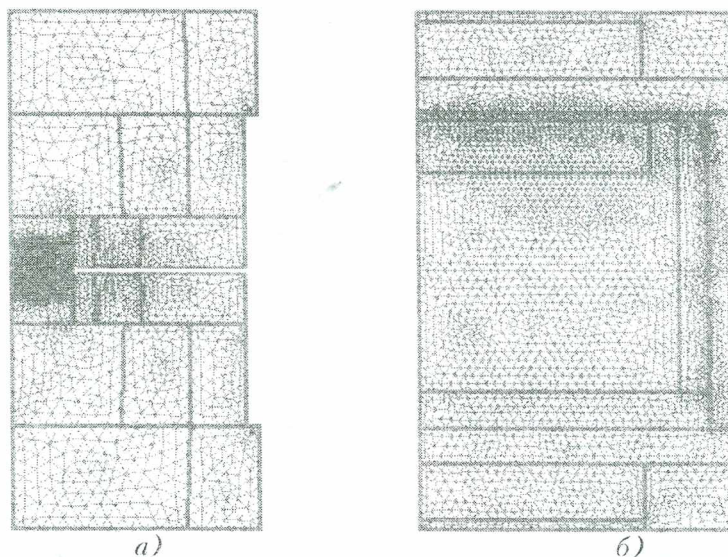


Рис. 3. Розрахункова дискретна схема АВТ (а) та реакційної комірки (б)

Матеріали конструктивних елементів АВТ позначені на рис. 1 та 2, а графіки залежностей їхніх електро- і теплофізичних властивостей від температури наведені в [5–8]. Для гексагонального і кубічного нітриду бору, які є електроізоляторами, приймалися значення теплопровідності відповідно 25 і 700 Вт/(м·°С). Фізичні властивості елементів нагрівача, що представляють собою порошкову двокомпонентну суміш, визначалися по моделі узагальненого сингулярного наближення теорії випадкових функцій [9], яка найповніше відбиває всі типи взаємодій між елементами неоднорідностей.

При ітераційному розв'язанні зв'язаної задачі електро- і теплопровідності в якості початкового наближення приймалася температура $T = 20$ °С у всьому об'ємі апарата. Умова збіжності ітераційної процедури задавалася у вигляді $T_i(\mathbf{r}_n) - T_{i-1}(\mathbf{r}_n) < 2$ °С, $n = 1, 2, \dots, N$, де \mathbf{r} – радіус-вектор вузлових точок скінченоелементної сітки, i – номер ітерації, n – номер вузла, N – кількість вузлів.

Розглядалися п'ять варіантів конструкції АВТ, які відрізнялися матеріалами підкладки, матриці і трубчастого елемента нагрівача (табл. 1).

Таблиця 1

Варіанти завдання матеріалів для конструкційних елементів АВТ

Варіант	Підкладка	Матриця	Нагрівач
1	ВК6	Р6М5	ГМ3
2	ВК15	Р6М5	ГМ3
3	ВК15	ВК6	ГМ3
4	ВК15	Р6М5	75 % ГМ3 + 25 % ВН (по масі)
5	ВК15	Р6М5	50 % ГМ3 + 50 % ВН (по масі)

В результаті комп'ютерного моделювання процесу резистивного електронагріву АВТ визначено розподіл температури в реакційній комірці та досліджуваному зразку пластини для прийнятих варіантів завдання матеріалів конструкційних елементів АВТ (рис. 4).

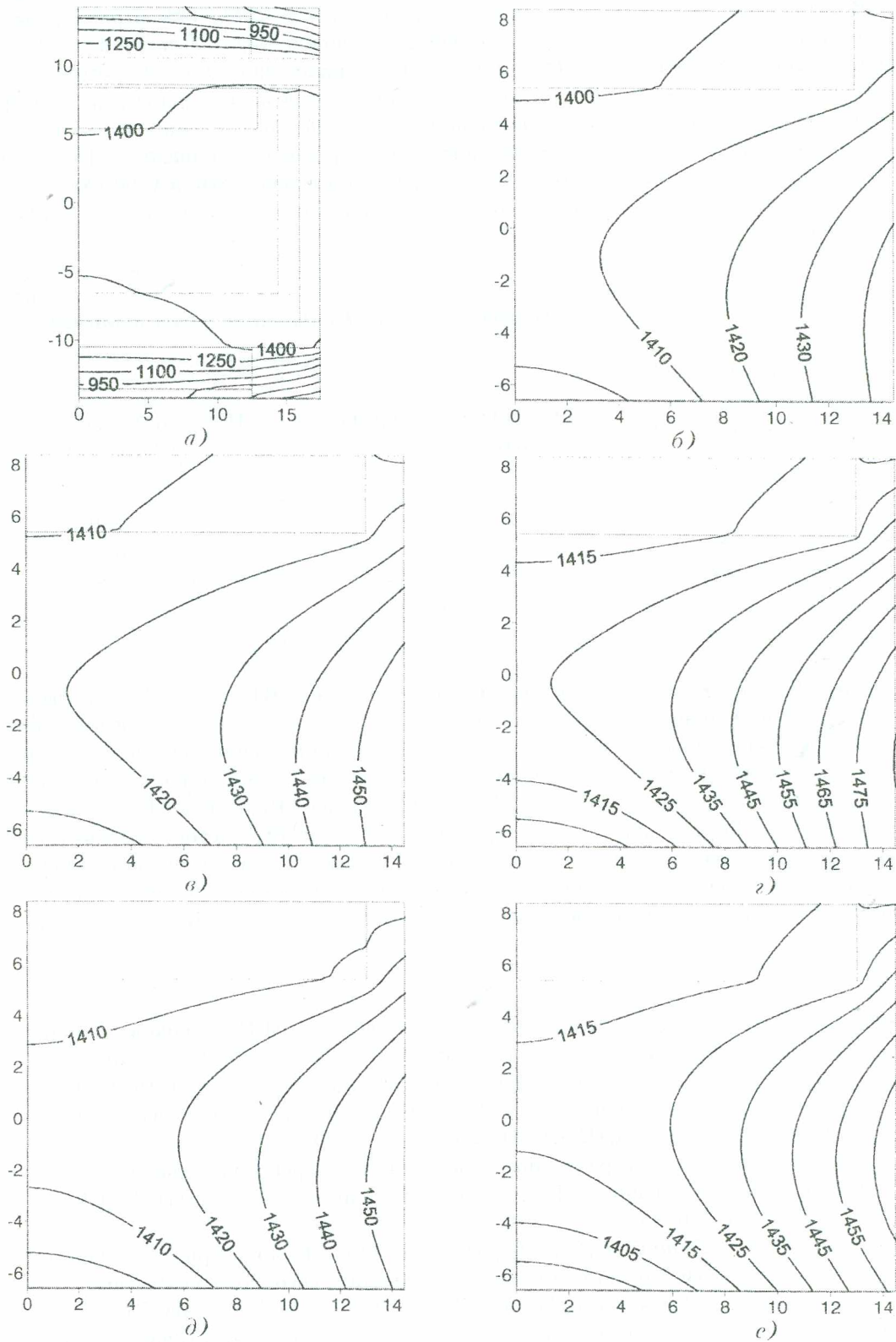


Рис. 4. Розподіл температури (°C) в реакційній комірці (а – варіант 1) та зразках двошарової пластини (б-е – варіанти 1-5 відповідно)

Аналіз картин розподілу ізотерм в реакційній комірці (рис. 4, а) вказує на присутність максимальних градієнтів температури в зоні нагрівача та теплоізоляційного кільця. Разом з тим в центральній частині комірки спостерігається порівняно однорідний розподіл температури.

Результати моделювання полів температури у досліджуваному зразку пластини зведені в табл. 2. Видно, що найбільш прийнятними є варіанти 1 і 2, для яких отримані найменші перепади температури як у зразку, так і безпосередньо в полікристалі. Для варіанта 3, в якому матеріалом матриці замість сталі був прийнятий твердий сплав, спостерігається значне підвищення потужності електричного струму, необхідної для розігріву апарата до температури спікання. Це можна пояснити порівняльним аналізом значень теплопровідності сталі і твердого сплаву, враховуючи, що їхня електропровідність приблизно однакова [5]: оскільки теплопровідність твердого сплаву в інтервалі температур розігріву матриці (200–900 °С) значно вища, то і відтік тепла через матрицю також більший, ніж у разі використання матриці, виготовленої із сталі.

Таблиця 2

Результати розрахунків теплового стану АВТ для прийнятих варіантів

Варіант	Максимальний перепад температури в полікристалі, °С	Максимальний перепад температури у зразку, °С	Потужність електричного струму, кВт
1	9	51	5,4
2	8	55	5,4
3	14	90	7,8
4	11	68	5,3
5	15	86	5,2

Висновки. В результаті моделювання теплового стану АВТ при спіканні двошарових пластин на основі кубічного нітриду бору та твердого сплаву і варіювання фізичних властивостей окремих елементів АВТ встановлено, що мінімальний перепад температури в об'ємі досліджуваного зразка пластини можливо отримати у разі використання наступних матеріалів для виготовлення елементів АВТ: твердого сплаву ВК6 (ВК15) – для підкладки, швидкоріжучої сталі Р6М5 – для матриці; графіту ГМ3 – для трубчастого елемента нагрівача. При цьому розрахункові значення максимальних перепадів температури у полікристалі та зразку становлять 9 і 55 °С відповідно. Для нагріву зразка пластини до температури спікання розрахункове значення потужності електричного струму становить 5,4 кВт.

ЛІТЕРАТУРА:

1. Киборит: получение, структура, свойства, применение / Н.В. Новиков, А.А. Шульженко, Н.П. Беженарь и др. // Сверхтв. материалы. – 2001. – № 2. – С. 40–51.
2. Сверхтвердые материалы. Получение и применение: Моногр. в 6-ти т. Т. 1. Синтез алмаза и подобных материалов / Под общ. ред. Н.В. Новикова. – Киев: ИСМ им. В.Н. Бакуля, ИПЦ «АЛКОП» НАНУ, 2003. – 320 с.
3. Тестирование пакетов программ, предназначенных для решения задач термомеханики / Н.В. Новиков, В.И. Левитас, Р.А. Золотарев и др. // Докл. АН УССР. Сер. А. – 1985. – № 4. – С. 30–35.
4. Новіков М.В., Лещук О.О., Боримський О.І. Комп'ютерне моделювання зон кристалізації алмазів різного габітусу в апаратах високого тиску типу ковадла із заглибленнями // Паук. вісті НТУУ «КНУ». – 2002. – № 2. – С. 68–75.
5. Компьютерное моделирование и сравнительный анализ эффективности слоистого и объемнораспределенного размещения фазовых составляющих в ячейках различных типов АВД при синтезе алмазов: Отчет о НИР / Ин-т сверхтв. материалов им. В.Н. Бакуля НАН Украины. – № ГР 0195U027176. – Киев, 1996. – 161 с.

6. Марочник сталей и сплавов / Под ред. В.Г. Сорокина. – М.: Машиностроение, 1989. – 640 с.
7. Физические свойства сталей и сплавов, применяемых в энергетике: Справ. Под ред. Б.Е. Неймарк. – М., Л.: Энергия, 1967. – 240 с.
8. Материалы для электротермических установок: Справ. пособие / Под ред. М.Б. Гутмана. – М.: Энергоатомиздат, 1987. – 296 с.
9. Шермергор Т.Д. Теория упругости микронеоднородных сред. – М.: Наука, 1977. – 400 с.

ЛЕЩУК Олександр Олександрович – кандидат технічних наук, старший науковий співробітник Інституту надтвердих матеріалів ім. В.М. Бакуля НАН України.

Наукові інтереси:

- термомеханіка матеріалів;
- комп'ютерне матеріалознавство;
- розробка фізико-механічних моделей та комп'ютерне моделювання технологічних процесів отримання функціональних матеріалів і виробів в екстремальних умовах високих тисків та температур.

Тел.: +380 44 4688631.

E-mail: leshchuk@ism.kiev.ua

БОРИМСЬКИЙ Олександр Іванович – кандидат технічних наук, старший науковий співробітник Інституту надтвердих матеріалів ім. В.М. Бакуля НАН України.

Наукові інтереси:

- розробка апаратури високого тиску;
- розробка технологій синтезу надтвердих матеріалів.

Тел.: +380 44 4688987.

E-mail: lab7@ism.kiev.ua

АНТОНЮК Олександр Петрович – інженер Інституту надтвердих матеріалів ім. В.М. Бакуля НАН України.

Наукові інтереси:

- моделювання фізико-механічних процесів синтезу надтвердих матеріалів.

Тел.: +380 44 4688631.

E-mail: antonyuk@ism.kiev.ua

Подано 23.04.2004