

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБЪЕМНОГО СПЕКАНИЯ ПОРОШКОВЫХ КАТОДОВ СИСТЕМЫ Ti-AL

Оноприенко О.О.

Томский политехнический университет
634050, Россия, г. Томск, пр-т Ленина, 30
E-mail: ifvt_abit@mail.ru

Введение

Перспективным применением спеченных порошковых сплавов Ti-Al является использование их в качестве мишеней (катодов) в технологиях нанесения ионно-плазменных покрытий. Однако порошковые катоды Ti-Al до настоящего времени не нашли широкого применения по причине отсутствия достаточно простой, доступной и высокопроизводительной технологии производства катодов с однородной структурой и приемлемой пористостью. Известны попытки уменьшить пористость порошковых катодов спеканием под давлением или в результате самораспространяющегося высокотемпературного синтеза с приложением давления [1]. Эти способы характеризуются низкой производительностью и высокой стоимостью готовых изделий. Применение спекания порошковых смесей Ti-TiAl₃ позволяет одновременно достичь приемлемых характеристик пористости спеченных образцов и себестоимости их изготовления в условиях опытно-промышленного производства.

Однако для целенаправленного выбора технологических режимов спекания (с получением минимальной пористости) необходимо теоретическое и экспериментальное исследование закономерностей формирования структуры, фазового состава и физико-механических свойств материала при спекании.

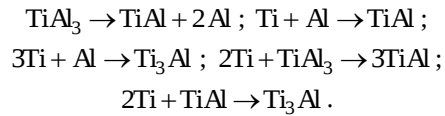
Математическая постановка

Если условия эксперимента таковы, что в процессе нагрева температура спекания превышает температуру плавления образца (то есть образец в процессе обработки плавится), то используем реологические соотношения [2]:

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial t} + \frac{\mu}{\kappa} \sigma_{ij} = 2\mu \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial t} + \delta_{ij} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\lambda \varepsilon_{kk} - \kappa w) + \frac{\mu}{\kappa} K (\varepsilon_{kk} - w) \right] \quad (1)$$

где κ – коэффициент сдвиговой вязкости. В предельном случае $\kappa \rightarrow \infty$ из (1) следует соотношение Дюамеля-Неймана, в случае $\kappa \rightarrow 0$ имеем соотношение между компонентами σ_{ij} и ε_{ij} для идеальной вязкой жидкости с шаровым тензором напряжений

Учитываем, что концентрация почти не изменяется в процессе спекания и ограничимся пятью кинетическими уравнениями [3]:



Математическая постановка задачи в этом случае включает уравнение теплопроводности:

$$V_0 c_p \frac{dT}{dt} = -\varepsilon_T \sigma_T (T^4 - T_e^4) S_n - 3KT\alpha_T V_0 \frac{d\varepsilon_{kk}}{dt} + V_0 W_1$$

и систему кинетических уравнений, записанных для пяти химических реакций,

$$\begin{aligned} \frac{dy_1}{dt} &= -y_1 \varphi_1 - y_2^2 y_1 \varphi_3, \\ \frac{dy_2}{dt} &= -y_2 y_3 \varphi_2 - 2y_1 y_2^2 \varphi_3 - 2y_2^2 y_4 \varphi_4 - 3y_3 y_2^3 \varphi_5, \\ \frac{dy_3}{dt} &= 2y_1 \varphi_1 - y_2 y_3 \varphi_2 - y_2^2 y_3 \varphi_5, \\ \frac{dy_4}{dt} &= y_1 \varphi_1 + y_2 y_3 \varphi_2 + 3y_1 y_2^2 \varphi_3 - y_2^2 y_4 \varphi_4, \\ \frac{dy_5}{dt} &= y_2^2 y_1 \varphi_4 + y_3 y_2^3 \varphi_5. \end{aligned}$$

Объемное изменение образца и его относительное уплотнение оцениваем по формулам:

$$\frac{V}{V_0} = \frac{1}{1 + \varepsilon_{kk}} \quad \text{и} \quad \frac{\delta p}{p_0} = \frac{\varepsilon_{kk}}{1 + \varepsilon_{kk}}.$$

На основе соотношений Максвелла (1) для объемных деформаций получаем

$$\frac{d\varepsilon_{kk}}{dt} = -\frac{dw}{dt} + \frac{\mu}{\kappa} (\varepsilon_{kk} - w).$$

$$\text{С учетом } w = 3 \left[\alpha_T (T - T_0) + \sum_{k=1}^n \alpha_k (y_k - y_{k,0}) \right],$$

находим

$$\frac{d\varepsilon_{kk}}{dt} = -3\alpha_T \frac{dT}{dt} - 3 \sum_{k=1}^n \alpha_k \frac{dy_k}{dt} + \frac{\mu}{\kappa} (\varepsilon_{kk} - w). \quad (2)$$

Подставляя полученное выражение в уравнение баланса тепла и приводя подобные слагаемые, получаем

$$\begin{aligned} c_{\text{eff}_v} \frac{dT}{dt} &= -\varepsilon_T \sigma_T (T^4 - T_e^4) S_n + W_{\text{eff}_v} - \\ &- D \frac{\mu}{\kappa} \left(\varepsilon_{kk} - 3 \left[\alpha_T (T - T_0) + \sum_{k=1}^n \alpha_k (y_k - y_{k,0}) \right] \right) \end{aligned}$$

где $c_{\text{eff}_v} = V c_p - 3D\alpha_T$; $D = 3KT\alpha_T V_0$. Суммарный источник тепла W_{eff_v} вследствие химических реакций (включающий изменение объема в ходе реакций) с учетом кинетических уравнений записывается следующим образом

$$W_{\text{eff}_v} = W_1 - 3DW_2 = \\ = V\rho \sum_{i=1}^5 \frac{h_i}{m_i} \frac{dy_i}{dt} - 3D \sum_{i=1}^5 \alpha_i \frac{\partial y_i}{\partial t} = \sum_{k=1}^5 \omega_k$$

где

$$\omega_1 = q_1 y_1 \varphi_1; \quad \omega_2 = q_2 y_2 y_3 \varphi_2; \quad \omega_3 = q_3 y_1 y_2^2 \varphi_3; \\ \omega_4 = q_4 y_4 y_2^2 \varphi_4; \quad \omega_5 = q_5 y_3 y_2^3 \varphi_5; \\ q_j = VQ_j + 3D\Delta Q_j, \quad i=1..5;$$

Подставляя уравнение баланса тепла в уравнение (2) и приводя подобные слагаемые, получаем

$$\left(1 - \frac{3\alpha_T D}{V_0 c_p}\right) \frac{d\varepsilon_{kk}}{dt} = \frac{\varepsilon_T \sigma_T (T^4 - T_e^4) S_n}{V_0 c_p} - \\ - W_{\text{eff}_1} + \frac{\mu}{\kappa} (\varepsilon_{kk} - w)$$

где

$$W_{\text{eff}_1} = \frac{3\alpha_T}{c_p} W_1 + 3 \sum_{i=1}^5 \alpha_i \frac{\partial y_i}{\partial t}.$$

Полученная система уравнений дополняется условиями в начальный момент времени:

$$t = 0: \quad T = T_0, \quad y_i = y_{i0}, \quad i=1..5.$$

Численное исследование

В расчетах используем среднеинтегральное значение коэффициента динамической вязкости системы, рассчитанное по табличным данным

$$\kappa = \frac{1}{T_2 - T_1} \int_{T_1}^{T_2} \kappa(T) dT.$$

Задача решалась численно с использованием алгоритма с автоматическим выбором шага. Для расчета тепловой части задачи использовали метода Рунге–Кутты–Мерсона. Для вычисления кинетических функций и объемных деформаций использовали неявный метод Эйлера. Достоверность результатов подтверждена сравнением с известными аналитическими решениями для частных предельных случаев. При стремлении коэффициента вязкости к нулю решение задачи стремится к решению задачи в термоупругой постановке [3]. Результатом численного исследования являются фазовый и элементный состав спеченного образца; зависимости концентраций элементов и фаз от времени при различных параметрах модели, отвечающих за технологические условия.

На рис. 1 приведено изменение температуры, объемных деформаций, относительного изменения объема и концентраций элементов при изменении начальной концентрации TiAl_3 . Видно, что результат получается качественно иным, чем в модели с термоупругими напряжениями и деформациями.

В случае вязкоупругих напряжений и деформаций расчеты показывают, что дополнительные затраты энергии на объемные деформации в образце приводят к появлению плато на температурной кривой, не связанного с фазовым переходом (кривые 1-3 рис.1, а), но больше чем в случае тер-

моупругих напряжений и деформаций (кривая 4). Видно, что небольшая добавка TiAl_3 приводит к интенсификации усадки порошков. Но увеличение содержания TiAl_3 в прессовке приводит к монотонной усадке порошков и увеличению относительного объема, что сильнее сказывается для вязкоупругих деформаций.

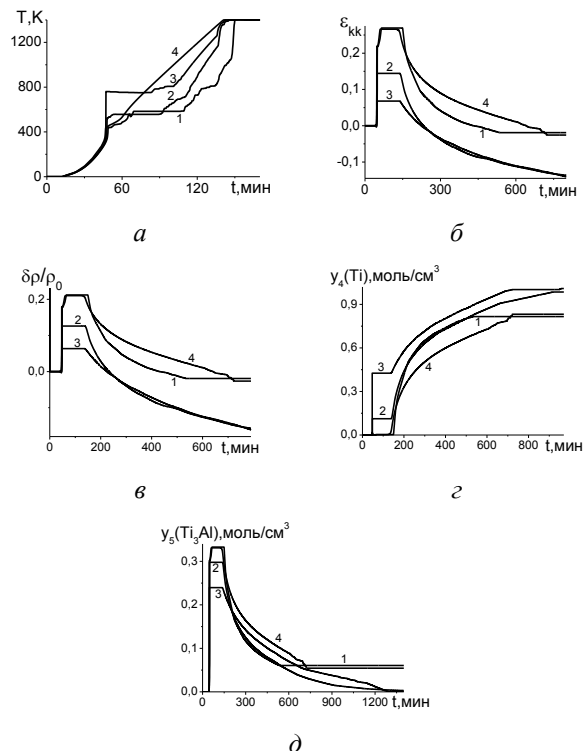


Рис. 1. Изменение температуры (а), объемных деформаций (б), относительного уплотнения образца (в) и мольных концентраций фаз Ti и Ti_3Al (г) – (д) во времени в процессе нагрева и спекания при различных начальных объемных концентрациях TiAl_3 :

1. – $y_1[\text{TiAl}_3] = 0.3\%$, 2. – $y_1[\text{TiAl}_3] = 0.4\%$, 3. – $y_1[\text{TiAl}_3] = 0.5\%$ в случае вязкоупругих деформаций и 4. – $y_1[\text{TiAl}_3] = 0.3\%$ в случае упругих деформаций

Литература

1. Сорокова С.Н., Князева А.Г. //Известия Томского политехнического университета. 2009. Т. 314. № 2. С. 96-101.
2. Князева А.Г., Сорокова С.Н. //Физика горения и взрыва. 2006. Т. 42. № 5. С. 63-73.
3. Сорокова С.Н., Князева А.Г. // Теоретические основы химической технологии. 2008. Т. 42. № 4. С. 457-465.
4. Сорокова С.Н., Князева А.Г. // Физическая мезомеханика. 2008. Т. 11. № 6. С. 95-101.
5. Сорокова С.Н., Князева А.Г. // Теоретические основы химической технологии. 2010. Т. 44. № 2. С. 184-197.