



УДК 681.587.73, 62-523.8

Д. И. Юшин, О. А. Сапрыкин, О. В. Толстель

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЙ СИНТЕЗА ПОРОШКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ КОСМИЧЕСКОЙ РОБОТОТЕХНИКИ

36

*Проанализирован технологический процесс и дана краткая характеристика основных теоретических моделей искрового плазменного спекания (ИПС). Рассмотрен опыт применения численного моделирования методом конечных элементов (МКЭ) с использованием специализированного программного обеспечения для исследования ИПС. Сформулированы цели и задачи численного моделирования данного технологического процесса. Обозначены основные недостатки и ограничения известных методик моделирования.*

*The production process is analyzed and a brief description of the main theoretical models of spark plasma sintering (SPS) is given. The experience of the use of numerical modeling by the finite element method (FEM) using specialized software for the study of SPS is examined. Goals and objectives of numerical simulation of the process are formulated. The main shortcomings and limitations of known methods of modeling are outlined.*

**Ключевые слова:** робототехника, космические технологии, искровое плазменное спекание, порошковые материалы, численное моделирование, метод конечных элементов, теория спекания.

**Key words:** robotics, space technology, spark plasma sintering, powder materials, numerical simulation, finite element method, theory of sintering.

### Введение

Робототехника — законченное инженерное творение человека, на сегодня демонстрирует лишь принципиальную возможность освоения в угоду человеческому любопытству и стремлению к познанию труднодоступных мест, включая столь притягательный космос. Одно из начальных условий для создания робототехники — материаловедение и технологии синтеза материалов. Среди основных задач материаловедения — установление закономерностей зависимости свойств материалов от их микроструктуры и элементного состава. В свою очередь, с ней неразрывно связана важнейшая задача технологии материалов — получение требуемых свойств при синтезе, что достигается образованием необходимой микроструктуры и обеспечением нужного элементного состава. Одной из таких технологий является искровое плазменное спекание (ИПС) (англ. *Spark Plasma Sintering (SPS)* или *Field Assisted Sintering Technology (FAST)*). В процессе ИПС порошковая засыпка нагревается посредством пропускания через систему импульсного постоянного тока большой силы и подвергается одноосному механическому давлению. ИПС существенно сокращает время синтеза образцов по сравнению, скажем, со свободным спеканием или спеканием под давлением и



улучшает качество спеченного материала, так как позволяет свести к минимуму рост зерен и сохранить нано- и субмикроструктуры в нанодисперсных порошковых материалах [1–3].

### Теоретическое описание ИПС

В настоящее время существует несколько вариантов теоретического описания процесса ИПС. Наибольшее распространение получили теория Олевского и так называемый закон Абюфа (англ. *Abouaf law*).

**Теория спекания Олевского.** Основными факторами спекания, обеспечивающими массоперенос, являются: деформация по степенному закону ползучести и зернограничная диффузия [4]. Деформация порошковой засыпки выражена в определяющем уравнении, которое связывает внешнее давление  $\sigma_{ij}$  с компонентами тензора скоростей деформаций  $\varepsilon'_{ij}$  нелинейно-вязкими определяющими соотношением [5]:

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma(W)}{W} \left[ \varphi \varepsilon'_{ij} + \left( \psi - \frac{1}{3} \varphi \right) e'_{Cr} \delta_{ij} \right] + P_L \delta_{ij}, \quad (1)$$

где  $W$  – эквивалентная скорость деформации;  $\sigma(W)$  – эквивалентное напряжение;  $\varphi$  и  $\psi$  – нормированные сдвиговая и объемная вязкости;  $\delta_{ij}$  – символ Кронекера;  $\varepsilon'_{ij}$  – тензор скорости деформации;  $e'_{Cr}$  – первый инвариант тензора скорости деформации по степенному закону ползучести;  $P_L$  – эффективное давление спекания.

Эквивалентная скорость деформации  $W$  зависит от пористости и инвариантов тензора скорости деформации:

$$W = \frac{1}{\sqrt{1-\theta}} \sqrt{\varphi \gamma'^2 + \psi e'^2_{Cr}}, \quad (2)$$

где  $\theta$  – пористость,  $\gamma'$  – второй инвариант девиатора скорости деформации. Эквивалентное напряжение выражается так:  $\sigma(W) = AW^m$ , где  $A$  и  $m$  – параметры закона ползучести.  $A$  определяется как

$$A = \tilde{A} T^m \exp\left(\frac{m \Delta H_{SD}}{RT}\right), \quad (3)$$

где  $\tilde{A}$  – предэкспоненциальный множитель;  $T$  – температура;  $m$  – показатель степени в законе ползучести;  $\Delta H_{SD}$  – энергия активации самодиффузии;  $R$  – универсальная газовая постоянная.

В определяющем уравнении (1) два параметра  $\varphi$  и  $\psi$  – функции пористости, выражаются в соответствии с реологической моделью Скорехода следующим образом:  $\varphi = (1-\theta)^2$ ,  $\psi = \frac{2(1-\theta)^3}{3\theta}$ .

Эффективное давление спекания  $P_L$  функционально зависит от пористости и от размеров частиц спекаемого порошка:

$$P_L = \frac{3\alpha}{G} (1-\theta)^2, \quad (4)$$

где  $\theta$  – пористость;  $\alpha$  – поверхностное натяжение;  $G$  – средний радиус частицы порошка (на ранних стадиях спекания) и средний размер



зерна (на поздних стадиях спекания). Для вычисления скорости изменения пористости используется уравнение закона сохранения массы порошковой засыпки  $e' = \frac{\theta'}{1-\theta'}$ , где  $e'$  – общая скорость деформации

(усадки) порошковой засыпки;  $\theta'$  – скорость изменения пористости.

Общая скорость деформации  $e'$  – сумма двух скоростей деформации, обусловленных ползучестью ( $e'_{Cr}$ ) и зернограничной диффузией ( $e'_{gb}$ ) [6]:  $e' = e'_{Cr} + e'_{gb}$ . В свою очередь,  $e'_{gb}$  является суммой трех компонентов, которые представляют вклад установившейся электромиграции в общую скорость деформации, вклад от сил поверхностного натяжения и вклад от внешнего механического давления.

Для вычисления среднего размера частицы порошка (на ранних стадиях спекания) и среднего размер зерна (на поздних стадиях спекания) Олевским было предложено следующее уравнение:

$$G' = \frac{k_0}{3G^2} \left( \frac{\theta_c}{\theta_c + \theta} \right)^{3/2} \exp\left( \frac{-Q_G}{RT} \right), \quad (5)$$

где  $G'$  – скорость роста частицы порошка или;  $k_0$  – константа, характеризующая свойства материала;  $Q_G$  – энергия активации роста зерна;  $\theta_c$  – критическое значение пористости для перехода от открытых пор к закрытым. Все параметры, входящие в уравнения (1)–(5), определяются экспериментально или берутся из литературных источников.

**Закон Абюфа.** Основное определяющее уравнение связывает тензор механических напряжений, вызванных внешним механическим давлением, с тензором скорости деформаций порошковой засыпки (деформация соответствует степенному закону ползучести) [8]:

$$\sigma = 3K(T) \left( \sqrt{3\bar{\epsilon}'} \right)^{m-1} \left( \frac{2}{3c} \epsilon' + \left( \frac{1}{9f} - \frac{2}{9c} \right) e' \right), \quad (6)$$

где  $\sigma$  – механическое напряжение, вызванное внешним давлением;  $K(T)$  – консистенция материала в плотном состоянии;  $T$  – температура;  $\bar{\epsilon}'$  – эквивалентная скорость деформации по степенному закону ползучести;  $\epsilon'$  – тензор скорости деформаций;  $m$  – параметр степенного закона ползучести (характеристика материала);  $e'$  – первый инвариант тензора скорости деформации; функции, зависящая от пористости:  $c$  – связана с напряжениями сдвига и изменением формы порошковой засыпки в процессе спекания;  $f$  – связана с гидростатическим давлением и изменением объема порошковой засыпки. На основе экспериментальных данных по спеканию образцов из данного материала  $c$  и  $f$  рассчитываются методом горячего изостатического прессования:

$$f = \frac{1}{9} \left( \frac{\rho'_r}{\rho_r} \right)^{\frac{2m}{m+1}} \left( \frac{k}{P} \right)^{\frac{2}{m+1}}, \quad c = \frac{3f \left| \frac{\epsilon'_{zz}}{3} - \epsilon'_{zz} \right| (\sigma_{zz} - 2P)}{\epsilon'_{zz} |P + \sigma_{zz}|},$$

где  $\rho_r$  – относительная плотность (измеряется экспериментально);  $\rho'_r$  – скорость изменения относительной плотности (измеряется экспе-



риментально);  $k$  — коэффициент, функционально зависящий от температуры;  $P$  — изостатическое давление прессования;  $\epsilon'_v$  — первый инвариант тензора скорости деформаций; вертикальные компоненты тензоров:  $\epsilon'_{zz}$  — тензора скорости деформаций;  $\sigma_{zz}$  — тензора напряжений (рассчитывается исходя из условий эксперимента).

### Численное моделирование процесса ИПС

Так как процесс ИПС происходит при высокой температуре, вызванной протеканием импульсного электрического тока, то в обеих теориях расчет температуры порошковой засыпки производится по классическим уравнениям, описывающим Джоулев нагрев, теплопроводность и тепловое излучение. Рассмотренные теории дают две системы уравнений, решая которые можно рассчитать плотность спекаемого образца, скорость уплотнения, напряжения и деформации в образце, температуру и плотность тока. Дополнительно, пользуясь уравнением (6), можно рассчитывать размер зерна и скорость его роста.

Аналитические решения этих уравнений позволяют определять только средние значения пористости, размера зерна и температуры. Более важной информацией является распределение значений данных параметров по объему спекаемого образца. Поэтому при моделировании процессов ИПС используются методы численного решения рассмотренных систем уравнений для геометрических объемов образца, или системы оснастка-образец. В качестве метода решения в подавляющем большинстве случаев — метод конечных элементов (МКЭ).

**Цели и задачи численного моделирования новейших технологий синтеза материалов и изделий на примере ИПС.** Целями численного моделирования ИПС являются:

- 1) проведение виртуальных экспериментов для сокращения количества технологических экспериментов при разработке техпроцессов спекания материалов и изделий сложной формы;
- 2) предсказание свойств спеченных материалов и выявление зависимости свойств от технологических режимов и начальных условий.

Для достижения данных целей необходимо решить основную задачу — разработать методику численного моделирования, которая будет учитывать взаимосвязи всех основных параметров процесса ИПС и адекватно моделировать изменение микроструктуры спекаемого образца в течении процесса спекания, что позволит производить не только качественную оценку спекания, но и количественно рассчитывать параметры процесса и предсказывать свойства спеченных материалов.

**Применение численного моделирования на примере ИПС.** На данный момент опубликовано немало работ, выполненных различными исследовательскими группами, которые использовали рассмотренные теории для моделирования МКЭ процесса ИПС. В большинстве из них была применена теория Олевского. Основными результатами стали модели ИПС образцов из меди и оксида алюминия, в которых были получены распределения пористости по объему спекаемого образца и изменение пористости (относительной плотности) в процессе спекания [9]. В работах, где анализ МКЭ производился на основе уравнений Олевского, были получены данные о распределении размеров зерна по



объему образца и изменение размеров зерна во времени [9]. Наиболее полное описание применения закона Абюфа для моделирования ИПС дано в работе [8], где была разработана и протестирована сложная модель процесса ИПС, которая учитывает контактное сопротивление и трение, но не учитывает вклад импульсного тока в кинетику уплотнения порошковой засыпки. В результате были получены данные о распределении и изменении относительной пористости в сечении спекаемого образца и проведено сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными [8].

Моделирование процесса ИПС, описанное в работах [6–11], имеет ряд допущений и ограничений. Большинство параметров, характеризующих свойства материала порошка было принято константами, хотя они функционально зависят от температуры и пористости. Порошковая засыпка с самого начала спекания рассматривается как твердое пористое тело, но в начальный момент времени она является дисперсной системой. Допущение об образце как твердом пористом теле не позволяет учитывать в модели начальные условия спекания: изначальный размер частиц порошка и степень предварительного прессования засыпки. Данное допущение обуславливает тот факт, что нагрев реальной порошковой засыпки сильно отличается по всем своим параметрам от нагрева образца в модели. Следующим важным ограничением данных моделей стало отсутствие учета характеристик импульсного тока, то есть длительность импульсов и пауз, и их последовательность.

Отдельно необходимо отметить, что в рассмотренных работах не изложена методика моделирования процесса ИПС с помощью МКЭ, а это значительно затрудняет применение теоретических описаний ИПС в исследовательской практике.

### Выводы

Проанализированы перспективные технологии синтеза материалов и изделий для космической робототехники из порошков. В качестве перспективной технологии синтеза порошковых материалов рассмотрен метод искрового плазменного спекания. На основе анализа основных теоретических разработок и их применения при численном моделировании были сформулированы цели и задачи моделирования ИПС. Рассмотрены основные недостатки и ограничения существующих подходов к моделированию МКЭ данной технологии спекания.

*Данная работа выполнена за счет средств субсидии федерального бюджета по теме «Разработка основных функциональных и мехатронных систем роботов для космического и напланетного использования», уникальный идентификатор ПНИЭР RFMEFI57815X0141.*

### Список литературы

1. Suárez M., Fernández A., Menéndez J.L. et al. Challenges and Opportunities for Spark Plasma Sintering: A Key Technology for a New Generation of Materials / Sintering Applications. Publisher: InTech, Chapters published February 06, 2013.



2. Orru R., Licheri R., Mario Locci A. et al. Consolidation/synthesis of materials by electric current activated/assisted sintering // *Materials Science and Engineering*. 2009. Vol. R63. P. 127–287.
3. Guillon O., Gonzalez-Julian J., Dargatz B. et al. Field-Assisted Sintering Technology // *Advanced Engineering Materials*. 2014. Vol. 16, № 7. P. 830–849.
4. Olevsky E. Theory of sintering: from discrete to continuum // *Materials Science and Engineering*. 1998. Vol. R23. P. 41–100.
5. Григорьев Е. Г., Калинин Б. А. Электроимпульсная технология формирования материалов из порошков. М., 2008.
6. Olevsky E., Froyen L. Constitutive modeling of spark-plasma sintering of conductive materials // *Scripta Materialia* 2006. Vol. 55. P. 1175–1178.
7. Olevsky E., Tikare V., Garino T. Multi-scale modeling of sintering—A Review // *J. Amer. Ceram. Soc.* 2006. Vol. 89. № 6. P. 1914–1922.
8. Mondalek P. Numerical modeling of the spark plasma sintering process / Doctoral thesis. MINES ParisTech, 2012.
9. Wei Li. Constitutive Modeling and Simulation of Spark Plasma Sintering with Applications to Fabrication of Functionally Structured Mono-Carbides / Ph. D. thesis. University of California, San Diego, 2013.
10. Olevsky E. A., Garcia-Cardona C., Bradbury W. L. et al. Fundamental Aspects of Spark Plasma Sintering: II. Finite Element Analysis of Scalability // *J. Am. Ceram. Soc.* 2012. Vol. 95, № 8. P. 2414–2422.
11. Maniere C., Durand L., Weibel A. et al. Spark plasma sintering and finite element method: from the identification of the sintering parameters of a submicronic  $\alpha$ -alumina powder to the development of complex shapes // *Acta Materialia*. 2016. Vol. 102. P. 169–175.

#### Об авторах

Денис Игоревич Юшин — науч. сотр., ФГУП ЦНИИМАШ, Королёв.  
E-mail: yushindenis@gmail.com

Олег Алексеевич Сапрыкин — нач. отд. 9004, ФГУП ЦНИИМАШ, Королёв.  
E-mail: oleg.sapr@gmail.com

Олег Владимирович Толстель — канд. техн. наук, доц., Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Калининград.  
E-mail: oleg77764@mail.ru

#### About the authors

Denis Yushin — researcher, TSNIIMASH, Korolev.  
E-mail: yushindenis@gmail.com

Oleg Saprykin — head of department 9004, TSNIIMASH, Korolev.  
E-mail: oleg.sapr@gmail.com

Dr Oleg Tolstel' — Ass. Prof., I. Kant Federal University, Kaliningrad.  
E-mail: oleg77764@mail.ru