

В. А. Федорович, д-р техн. наук, Е. В. Островерх, канд. техн. наук,
Н. В. Козакова, канд. техн. наук, Харьков, Украина,
Е. А. Бабенко, канд. техн. наук, Stuttgart, Germany

ВЛИЯНИЕ СВОЙСТВ МЕТАЛЛА-КАТАЛИЗАТОРА В АЛМАЗНЫХ ЗЕРНАХ НА НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОЕ СОСТОЯНИЕ АЛМАЗОНОСНОГО СЛОЯ НА ЭТАПЕ ИЗГОТОВЛЕНИЯ ИНСТРУМЕНТА

Аннотация. *Приведены результаты 3D моделирования методом конечных элементов процесса спекания комплексной системы «связка–алмазное зерно–металлофаза». Впервые при исследовании процесса спекания расчетным методом установлено влияние физико-механических свойств металлофазы, а также ее процентного содержания в алмазном зерне на напряженно-деформированное состояние данной системы. Установлены наиболее термостойкие виды сплавов-растворителей: Co–Cr, Ni–Fe–Cr, Fe–Co–Cr, которые обеспечивают целостность зерен на этапе изготовления (спекания) алмазных кругов на керамических связках за счет уменьшения значения приведенных напряжений в системе в 1,7...2,1 раза. Изучение влияния физико-механических свойств металла-катализатора (сплава-растворителя) на напряженно-деформированное состояние исследуемой системы позволяет определить их рациональные значения для различных марок алмаза, что может иметь практическую ценность при синтезе алмаза.*

Ключевые слова: *алмазное зерно, металлофаза, напряженно-деформированное состояние, керамическая связка, термостойкие сплавы-растворители.*

Для изготовления алмазно-абразивного инструмента используется широкий диапазон марок синтетического алмаза. Марка алмазного зерна определяет его прочность, связанную, прежде всего, с содержанием примесей, совершенством формы, внутренней и поверхностной дефектностью. Каждой марке алмаза соответствуют определенные термобарические и кинетические условия синтеза, состав растворителя углерода, марка графита, расположение реакционных компонентов, технология обогащения, режимы дробления и сортировки, которые и обеспечивают необходимый уровень ее прочностных свойств [1].

Одним из наиболее значимых факторов, влияющих на термостойкость алмаза, являются металлические включения в массе алмаза, которые неизбежно присутствуют после его синтеза (рис. 1). Известны механизмы образования включений в кристаллах алмаза. Один из них заключается в захвате включений вершинами кристалла (при малых пересыщениях) и ребрами (в условиях больших пересыщений), другой – в зарастивании исходного раствора в центральных пирамидах нарастания в местах встречи слоев [2].



Рисунок 1 – Снимок монокристалла алмаза с локальным включением металла-катализатора

Согласно данным [3] наличие сплава-растворителя в синтетическом алмазе приводит к увеличению внутренних давлений в зерне, появлению сетки микротрещин в процессе нагрева и миграции металлофазы на поверхность кристалла. Уровень давления в плоскости можно оценить соотношением:

$$q = \bar{K}_2(\alpha_2 - \alpha_1)(T_1 - T_0), \quad (1)$$

где \bar{K}_2 – приведенный модуль объемного сжатия металлофазы;

α_2 – коэффициент линейного температурного расширения (КЛТР) металлофазы;

T_1 – температура, при которой происходит выход металлофазы на поверхность алмаза, сопровождаемый образованием трещин (соответствует 973 К);

α_1 – коэффициент линейного температурного расширения алмаза в диапазоне до 750 К ($\alpha_1 = 3,7 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$).

Однако данная расчетная схема не учитывает влияние силового фактора на уровень напряжений в алмазных зернах и решается в условиях двухмерного моделирования. С учетом высокой температурной нагрузки алмазоносного слоя на этапе обжига, возникает необходимость более глубокого изучения воздействия физических свойств сплава-растворителя (металлофазы) на изменение напряженно-деформированного состояния (НДС) системы «связка–алмазное зерно–металлофаза». Анализ НДС моделируемой системы позволит спрогнозировать поведение системы и сохранить целостность алмазных зерен при изготовлении кругов. Изучение влияния физико-механических свойств металла-катализатора на НДС

исследуемой системы позволило определить их рациональные значения для различных марок алмаза, что может иметь практическую ценность при синтезе поликристаллов алмаза.

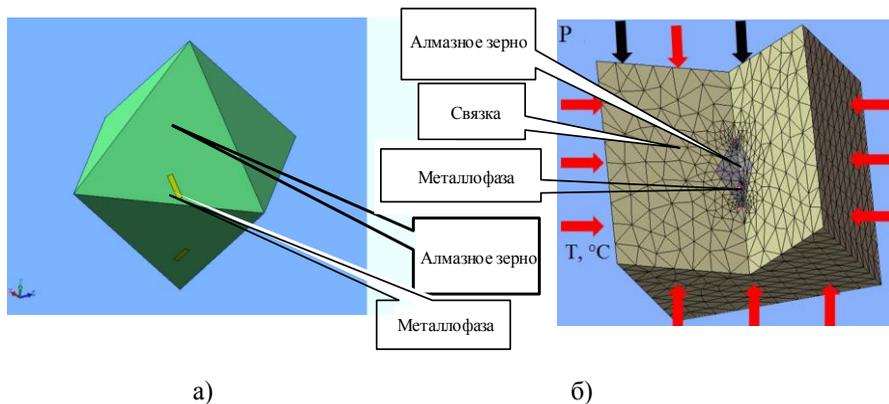


Рисунок 2 – 3D модели и расчетная схема исследуемой системы:

- а) 3D модель системы «алмазное зерно–металлофаза»;
- б) 3D конечно-элементная модель и расчетная схема системы «связка–алмазное зерно–металлофаза» для исследования процесса спекания алмазоносного слоя

Для исследования изменения в НДС системы «связка–алмазное зерно–металлофаза» смоделирован процесс обжига керамического алмазоносного слоя К1-01 с содержанием алмаза различных марок. Для детального анализа были выбраны марки зерен, соответствующие согласно классификации [3] хрупкой, прочной группе, а также группе повышенной прочности. Моделировалась температурная нагрузка (Т) и давление (Р) на алмазоносный слой с зернами марок АС4, АС6, АС15 и АС32. Количество металлофазы, содержащееся в алмазе, моделировалось включениями от 7,5 до 0,6 % мас. Монокристалл алмаза был представлен в геометрии октаэдра. Проведен ряд расчетов с приложением температурной нагрузки на поверхность элемента «связка» (рис. 2), соответствующей значению температуры от 200 °С до 800 °С с шагом итерации 200 °С и длительностью нагрузки 10 секунд.

Физические свойства алмаза динамически изменялись при изменении температуры в исследуемой системе. В качестве металлофазы применялись пять ростовых систем, наиболее широко используемых в производстве (табл. 1). На данном этапе исследований моделировались следующие виды металлофазы: $Ni_{39,6}Mn_{59,4}(Cr_3C_2)_{1,0}$; $Fe_{95}Si_5$; $Co_{88}(Cr_3C_2)_{12}$; $Ni_{48}Fe_{48}(Cr_3C_2)_4$; $Fe_{44}Co_{44}(Cr_3C_2)_{12}$ [4].

Таблица 1 – Некоторые физико-механические свойства сплавов-растворителей, используемые при трехмерном моделировании [4]

| Состав сплава-растворителя, мас. % | Обозначение | Модуль упругости E , ГПа | КЛТР $\alpha \cdot 10^{-6}$ К ⁻¹ | Модуль объемного сжатия K , ГПа |
|--|-------------|----------------------------|---|-----------------------------------|
| Ni _{39,6} Mn _{59,4} (Cr ₃ C ₂) _{1,0} | Ni–Mn–Cr | 217 | 20,3 | 96,19 |
| Fe ₉₅ Si ₅ | Fe–Si | 238 | 12,9 | 113,33 |
| Co ₈₈ (Cr ₃ C ₂) ₁₂ | Co–Cr | 250 | 10,3 | 162,19 |
| Ni ₄₈ Fe ₄₈ (Cr ₃ C ₂) ₄ | Ni–Fe–Cr | 188 | 10,2 | 110,56 |
| Fe ₄₄ Co ₄₄ (Cr ₃ C ₂) ₁₂ | Fe–Co–Cr | 246 | 9,2 | 201,56 |

Учитывая отличие (более чем в 2 раза) показателей отдельных термических свойств сплава-растворителя, выдвинуто предположение о том, что путем выбора их значений представляется возможность влиять на изменение напряженно-деформированное состояние системы «алмазное зерно–металлофаза» на этапе спекания алмазоносного слоя керамических кругов.

Для его подтверждения проведен ряд расчетов для алмазоносного слоя на керамической связке K1-01 с алмазным порошком AC15 100/80. В качестве предельно допустимой нагрузки в зерне рассматривалось $\sigma_p = 0,57$ ГПа [5]. С использованием трехмерного моделирования методом конечных элементов были рассчитаны предельные значения эквивалентных напряжений. Анализ полученных результатов показал, что наибольшие напряжения среди варьируемых видов металлофазы наблюдались у зерен, содержащих сплав *Ni–Mn* (рис. 3).

В системе с преобладающим содержанием *Fe–Si* наблюдались напряжения, значения которых в среднем были в 1,5 раз меньшими: так, при температуре обжига $T = 600$ °С в зерне с содержанием сплава *Ni–Mn* значения напряжения составляло $\sigma_{эkv} = 2,1$ ГПа, а в зерне с металлофазой *Fe–Si* это значение равнялось $\sigma_{эkv} = 1,6$ ГПа. Применение сплавов *Co–Cr*, *Ni–Fe–Cr*, *Fe–Co–Cr* вызывало сопоставимые напряжения в системе. Для $T = 600$ °С значение $\sigma_{эkv}$ было зафиксировано в диапазоне от 1,04 до 1,13 ГПа. Во всем интервале значений можно выделить сплав *Ni–Fe–Cr*, при использовании которого удалось достичь наименьших значений $\sigma_{эkv}$. Моделирование алмаза, не содержащего включений металлофазы, показало насколько менее термически напряженным может быть его состояние: при одинаковых температурных режимах спекания алмазное зерно с металлофазой характеризовалось напряжением в 1,9 раз большим, чем зерно без нее (рис. 4).

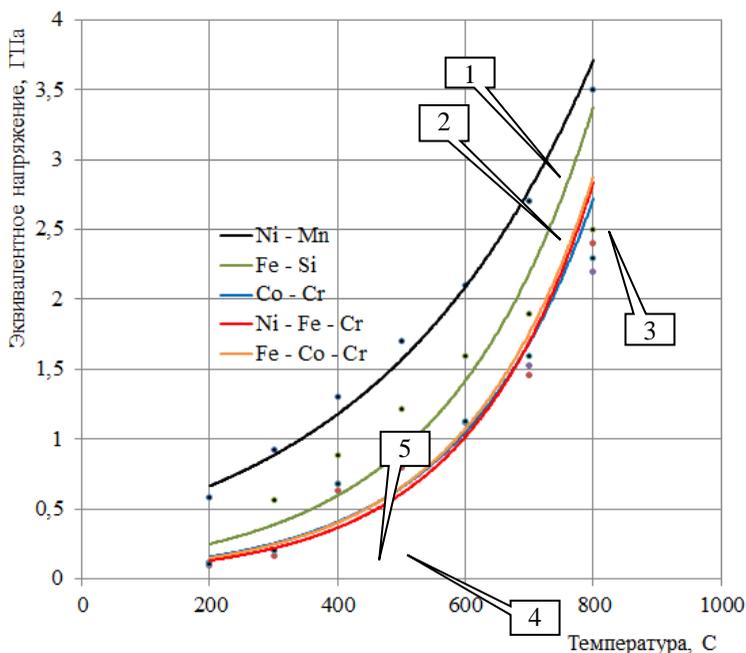


Рисунок 3 – Зависимость предельного значения $\sigma_{экв}$ в системе «алмазное зерно–металлофаза» от температуры обжига керамической связки K1-01 для зерен с различной металлофазой:
 1) *Ni-Mn*; 2) *Fe-Si*; 3) *Co-Cr*; 4) *Ni-Fe-Cr*; 5) *Fe-Co-Cr*

Анализ влияния физических свойств сплавов-растворителей на результаты моделирования процесса обжига позволил сделать вывод о том, что минимальные напряжения в системе возникают при модуле упругости металлофазы не более 200 ГПа и коэффициенте термического линейного расширения не более $10,2 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$, что в данном случае соответствует сплаву *Ni-Fe-Cr*. В среднем увеличение значения КЛТР в 2 раза с $10,2 \cdot 10^{-6}$ до $20,3 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ приводит к увеличению эквивалентных напряжений $\sigma_{экв}$ в 2,7 раз.

Процентное содержание сплава-растворителя также являются значимыми факторами, влияющими на предельные значения эквивалентных напряжений в системе «алмазное зерно–металлофаза» при наличии температурной нагрузки. На следующем этапе исследований моделировалась система с алмазным зерном фракции 63/50 и процентным содержанием металлофазы, соответствующим маркам AC4, AC6, AC15, AC32. В качестве металлофазы в модель закладывались

свойства ростовой системы *Ni-Fe-Cr*. Расчет показал, что при выборе более прочных алмазных марок увеличивается их термостойкость (рис. 5), связанная с меньшими значениями эквивалентных напряжений, возникающих не только в области металлофазы, но и на вершинах кристалла.

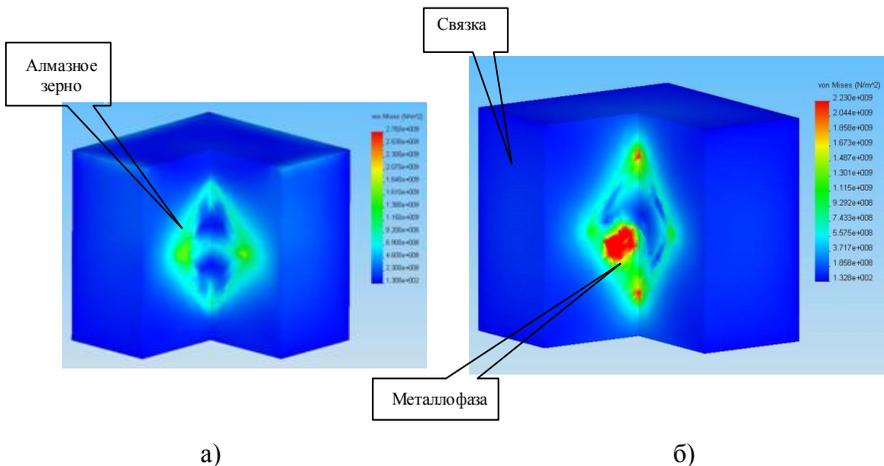


Рисунок 4 – Распределение напряжений в алмазном зерне:
 а) без металлофазы ($\sigma_{экр} = 0,58$ ГПа); б) зерно с включением металлофазы
Ni-Fe-Cr, составляющим 7,5 % мас. ($\sigma_{экр} = 1,13$ ГПа):
 температура обжига 600 °С, время обжига 10 с, марка связки К1-01

Увеличение процентного содержания металлофазы в алмазном зерне приводит к пропорциональному росту критических напряжений в области включений сплава-растворителя, который связан с расширением включений под действием температурной нагрузки (рис. 5).

Так для зерна АС4 при температуре обжига $T = 400$ °С предельное расчетное значение $\sigma_{экр} = 0,56$ ГПа в 1,5 раза превышает предельно допустимое значение $\sigma_p = 0,37$ ГПа. При аналогичной температурной нагрузке в зерне марки АС32 напряжение достигает значения $\sigma_{экр} = 2,2$ ГПа, что более чем в 2 раза меньше допустимого значения $\sigma_p = 5,37$ ГПа. При моделировании алмаза марки АС15 и АС32 превышение допустимого значения эквивалентного напряжения происходит лишь при температурах $T = 400$ °С и $T = 600$ °С соответственно. Для менее прочных марок алмаза с

большим содержанием включений критические напряжения могут возникнуть уже при $T = 300 \text{ }^\circ\text{C}$.

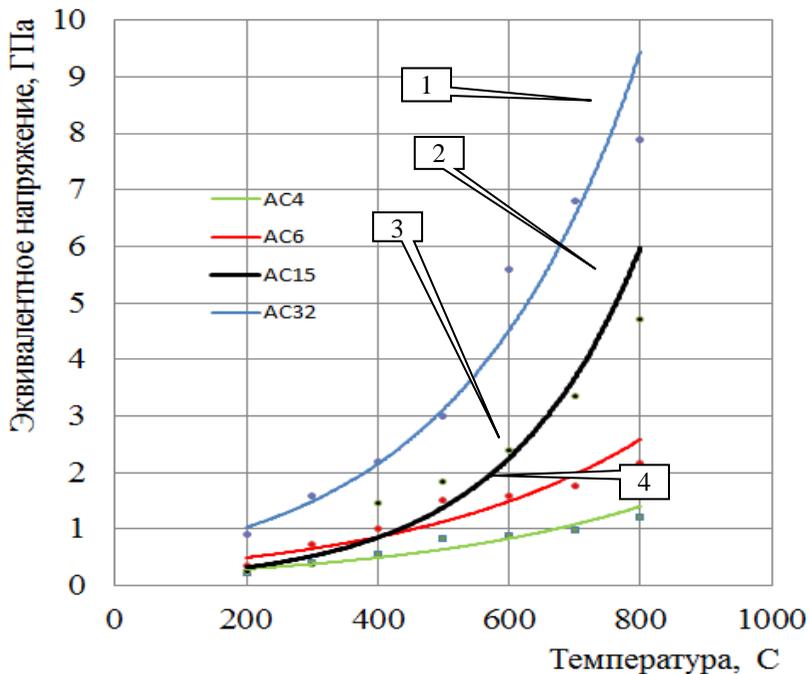


Рисунок 5 – Зависимость эквивалентного напряжения в системе «алмазное зерно–металлофаза» от температуры обжига связки K1-01 для алмазных зерен с различным процентным содержанием металлофазы: 1) AC32; 2) AC15; 3) AC6; 4) AC4

Таким образом, результаты расчетов подтвердили возможность прогнозирования напряжено-деформированного состояния системы «связка–алмазное зерно–металлофаза» и предельных значений эквивалентных напряжений $\sigma_{эkv}$ путем варьирования физических свойств алмазного шлифпорошка. Путем моделирования определены наиболее термостойкие виды сплавов-растворителей, которые могут обеспечивать целостность алмазных зерен при изготовлении (обжиге) алмазосного слоя кругов на керамических связках. К группе термостойких видов металлофазы можно отнести сплавы $Co-Cr$, $Ni-Fe-Cr$, $Fe-Co-Cr$. В этой группе критическое значение $\sigma_{эkv}$ зафиксировано лишь при $T = 400 \text{ }^\circ\text{C}$, в то

время как для сплавов $Ni-Mn$ и $Fe-Si$ эта температура составила $T = 200\text{ }^{\circ}C$ и $T = 300\text{ }^{\circ}C$ соответственно. Так моделирование спекания при $T = 400\text{ }^{\circ}C$ с металлофазой $Co-Cr$, $Ni-Fe-Cr$, $Fe-Co-Cr$ показало, что применение этих сплавов-растворителей обеспечивает уменьшение значений приведенных напряжений в 1,7...2,1 раза.

Исследование воздействия процентного содержания металлофазы на НДС системы «связка–алмазное зерно–металлофаза» подтвердило предположение о необходимости минимизации количества металлических включений в алмазном зерне. Граница термостойкости для зерен AC4 и AC6 зафиксирована при $T = 300\text{ }^{\circ}C$, а для более прочных зерен AC15 и AC32 при $T = 400\text{ }^{\circ}C$ и $T = 600\text{ }^{\circ}C$ соответственно.

Результаты моделирования говорят о необходимости использования зерен хрупкой группы в алмазных кругах на полимерных связках, температура горячего прессования которых не достигает $200\text{ }^{\circ}C$. Кроме того, необходим поиск путей решения проблемы низкой термостойкости алмазов путем совершенствования технологий синтеза алмазных шлифпорошков.

Таким образом, 3D моделирование методом конечных элементов процесса спекания комплексной системы «связка–алмазное зерно–металлофаза» позволило установить, что в процессе изготовления алмазоносного слоя на керамических связках одной из причин преждевременного разрушения алмазных зерен является наличие внутренних напряжений в зерне, которые превышают предельно допустимые значения и вызваны наличием металлических включений сплава-растворителя.

Расчетным методом установлено, что при одинаковых термических нагрузках значение эквивалентного напряжения в системе «алмазное зерно–металлофаза» может варьироваться в зависимости от процентного содержания сплава-растворителя. Моделирование НДС системы «связка–алмазное зерно–металлофаза» при спекании алмазных зерен различных марок показало, что для зерна AC4 63/50 с содержанием сплава-растворителя 7,5 % мас. напряжения достигают критического значения уже при $T = 300\text{ }^{\circ}C$, а для наиболее прочного в исследовании зерна AC32 100/80 с содержанием сплава-растворителя 0,6 % мас. – при $T = 600\text{ }^{\circ}C$.

Впервые при исследовании процесса спекания расчетным методом установлено влияние физико-механических свойств металлофазы, а также ее процентного содержания в алмазном зерне на напряженно-деформированное состояние системы «связка–алмазное зерно–металлофаза». Установлены наиболее термостойкие виды сплавов-растворителей, которые могут обеспечивать целостность зерен на этапе изготовления (обжига) алмазоносного слоя кругов на керамических связках. К группе термостойких можно отнести сплавы $Co-Cr$, $Ni-Fe-Cr$, $Fe-Co-Cr$. Для этой группы сплавов критические значения $\sigma_{э\text{кв}}$ зафиксированы лишь при T

= 400 °С, в то время как для сплавов *Ni–Mn* и *Fe–Si* эти температуры составляют $T = 200$ °С и $T = 300$ °С соответственно. Выбор термостойкого сплава-растворителя позволяет уменьшить значения приведенных напряжений в системе «алмазное зерно–металлофаза» в 1,7...2,1 раза. С уменьшением процентного содержания металлофазы в зерне растет его термостойкость.

Список использованных источников: 1. *Новиков Н. В.* Синтез алмазов / Н. В. Новиков, Д. В. Федосеев, А. А. Шульженко и др. – Киев: Наук. думка, 1987. – 160 с. 2. Инструменты из сверхтвердых материалов / Под. ред. Н. В. Новикова. – М.: Машиностроение, 2005. – 555 с. 3. *Новиков Н. В.* Методика определения прочности и трещиностойкости поликристаллических сверхтвердых материалов / Н. В. Новиков, И. М. Андросов, А. Л. Майстренко // Сверхтвердые материалы. – 1988. – № 2. – С. 33–37. 4. *Майстренко А. Л.* К вопросу о механизме разупрочнения кристаллов синтетического алмаза при высокотемпературном нагревании / А. Л. Майстренко, А. И. Боримский, Л. Н. Девин и др. // Породоразрушающий и металлообрабатывающий инструмент – техника и технология его изготовления и применения: Сб. науч. тр. – К.: ИМ ім. В. М. Бакуля НАН України, 2010. – Вип. 13. – С. 272–279. 5. *Козакова Н. В.* Определение рациональных характеристик алмазных кругов путем 3D моделирования процессов их изготовления и шлифования сверхтвердых материалов: Дис. ... канд. техн. наук: 05.03.01. – Харьков, 2005. – 210 с.

Володимир Федорович, Євген Островерх,
Наталія Козакова, Харків, Україна
Євген Бабенко, Штутгарт, Німеччина

ВПЛИВ ВЛАСТИВОСТЕЙ МЕТАЛА-КАТАЛІЗАТОРА В АЛМАЗНИХ ЗЕРНАХ НА НАПРУЖЕНО-ДЕФОРМОВАНИЙ СТАН АЛМАЗОВІСНОГО ШАРУ НА ЕТАПІ ВИГОТОВЛЕННЯ ІНСТРУМЕНТУ

Анотація. Одним з найбільш значущих факторів, що впливають на термостійкість синтетичного алмазу, є наявність у ньому металевих включень, які неминуче лишаються після його синтезу і призводять до зростання внутрішніх тисків у кристалі, появи сітки мікротріщин і міграції металлофазы на його поверхню у процесі нагрівання. З урахування високого температурного навантаження, яке випробовує алмазоносною шар при спіканні шліфувальних кругів, з'являється необхідність вивчення впливу фізичних властивостей сплава-розчинника (металлофазы) на зміну напружено-деформованного стану системи «зв'язування–алмазне зерно–металлофаза». Результати 3D моделювання методом кінцевих елементів процесу спікання комплексної системи «зв'язування–алмазне зерно–металлофаза» дозволяють прогнозувати її поведінку, за якої забезпечується збереження цілісності алмазних зерен при виготовленні абразивного інструмента. Вперше дослідженням процесу спікання розрахунковим методом встановлено вплив фізико-механічних властивостей металлофазы, а також її відсотковою вмісту в алмазному зерні на напружено-деформований стан системи «зв'язування–алмазне зерно–металлофаза». Встановлено найбільш термостійкі види сплавів-розчинників: *Co–Cr*, *Ni–Fe–Cr*, *Fe–Co–Cr*, що забезпечують цілісність зерен на етапі виготовлення (спікання) алмазних кругів на керамічних зв'язуваннях за рахунок зменшення значень приведених напружень в системі в 1,7...2,1 рази. Вивчення впливу фізико-механічних властивостей метала-катализатора

(сплава-розчинника) на напружено-деформований стан досліджуваної системи дозволяє визначити їхні раціональні значення для різних марок алмаза, що може мати практичну цінність при синтезі алмаза.

Ключові слова: алмазне зерно, металофаза, напружено-деформований стан, керамічне зв'язування, термостійкі сплави-розчинники.

Vladimir Fedorovych, Evgeniy Ostroverkh,
Nataliya Kozakova, Kharkov, Ukraine
Evgeniy Babenko, Stuttgart, Germany

INFLUENCE OF PROPERTIES OF METAL-CATALYST IN DIAMOND GRAINS ON STRESSED-DEFORMED STATE OF THE DIAMOND-LAYER ON THE STAGE OF MANUFACTURING THE TOOL

Abstract. *One of the most significant factors affecting the heat resistance of a synthetic diamond is the presence of metallic inclusions in it, which are inevitably present after its synthesis and lead to an increase in internal pressures in the crystal, the appearance of a network of microcracks and metallophase migration on its surface during heating. Taking into account the high temperature load experienced by the diamond layer during sintering of grinding wheels, it becomes necessary to study the effect of the physical properties of the solvent-alloy (metal phase) on the change in the stress-strain state of the binder – diamond grain – metal phase system. The results of 3D modeling by the finite element method of sintering the complex system “bond – diamond grain – metal phase” allow predicting its behavior ensuring the integrity of the diamond grains during the manufacture of an abrasive tool. The influence of the physicochemical properties of the metal phase, as well as its percentage in the diamond grain, on the stress-strain state of the “binder – diamond grain – metal phase” system has been established for the first time while studying the sintering process. The most heat-resistant types of alloys-solvents were established: Co – Cr, Ni – Fe – Cr, Fe – Co – Cr, which ensure the integrity of the grains at the stage of manufacturing (sintering) diamond circles on ceramic bonds by reducing the value of reduced stresses in the system in 1, 7 ... 2.1 times. Studying the effect of the physicochemical properties of the metal-catalyst (alloy-solvent) on the stress-strain state of the system under study allows determining their rational values for various grades of diamond, which may be of practical value in the synthesis of diamond.*

Keywords: *diamond grain, metal phase, stress-strain state, ceramic bundle, heat-resistant solvent alloys.*