

УДК 004.94:539.893:539.4

**О. О. Лещук**, д-р техн. наук, **О. В. Бовсунівський**, асп., **С. Б. Полотняк**,  
**В. В. Лисаківський**, кандидати технічних наук, **С. А. Івахненко**, член-кор. НАН України

*Інститут надтвердих матеріалів ім. В. М. Бакуля НАН України, м. Київ,  
вул. Автозаводська 2, 04074, e-mail: olesbov@gmail.com*

## **МОДЕЛЮВАННЯ НАПРУЖЕНО-ДЕФОРМОВАНОГО СТАНУ КОНТЕЙНЕРА ПРИ СТИСКАННІ ПУАНСОНАМИ КУБІЧНОГО ПРЕСУ**

*Розроблено чисельну методику моделювання процесу стиснення пірофілітового куба між пуансонами кубічного пресу, досліджено його напружено-деформований стан та визначені особливості процесу деформування контейнерів.*

*Показано, що методика достатньо точно відображає процес стиснення пірофілітового куба під дією високого тиску, але в той же час потребує корегування для врахування особливостей деформування в області контакту на стику трьох пуансонів*

**Ключові слова:** *пірофілітовий контейнер, метод скінченних елементів, процес деформування*

Для створення умов, які потрібні для вирощування структурно досконалих монокристалів алмазу, в даний час широко використовують шестипуансонні кубічні апарати високого тиску (АВТ) [1]. Ці АВТ здатні створювати в достатньо великих ростових об'ємах високий квазігідростатичний тиск 6–8 ГПа, температуру до 1800 °С та спроможні підтримувати їх упродовж тривалого часу.

За останні роки зроблено ряд змін у конструкції пуансонів АВТ даного типу для підвищення ефективності генерування високого тиску [2, 3]. Було розроблено пуанسونи з подвійно скошеною робочою поверхнею у вигляді двоступеневих пірамідальних площадок, що дало можливість створювати в контейнері апарату з ребром куба до 90–100 мм квазігідростатичний тиск понад 6 ГПа [4].

В таких АВТ у якості матеріалу контейнера, що виконує роль середовища для передачі тиску, забезпечує герметизацію камери високого тиску та здійснює бічну підтримку робочої поверхні пуансонів, зазвичай використовують пірофіліт. Контейнер у формі куба формується з використанням зв'язуючих складових для забезпечення однорідності матеріалу.

Експериментальне дослідження [5] розподілу тиску в пірофілітовому контейнері кубічного АВТ показало, що при тиску всередині контейнера 5,5 ГПа градієнт тиску вздовж осі симетрії куба складає в середньому 50 МПа/мм. Тобто розподіл тиску не є однорідним, в процесі деформування в контейнері виникає складний напружено-деформований стан. Тому ключовим моментом для суттєвого покращення ефективності вирощування монокристалів алмазу є розуміння механізмів формування тиску в контейнері АВТ. Проведений аналіз

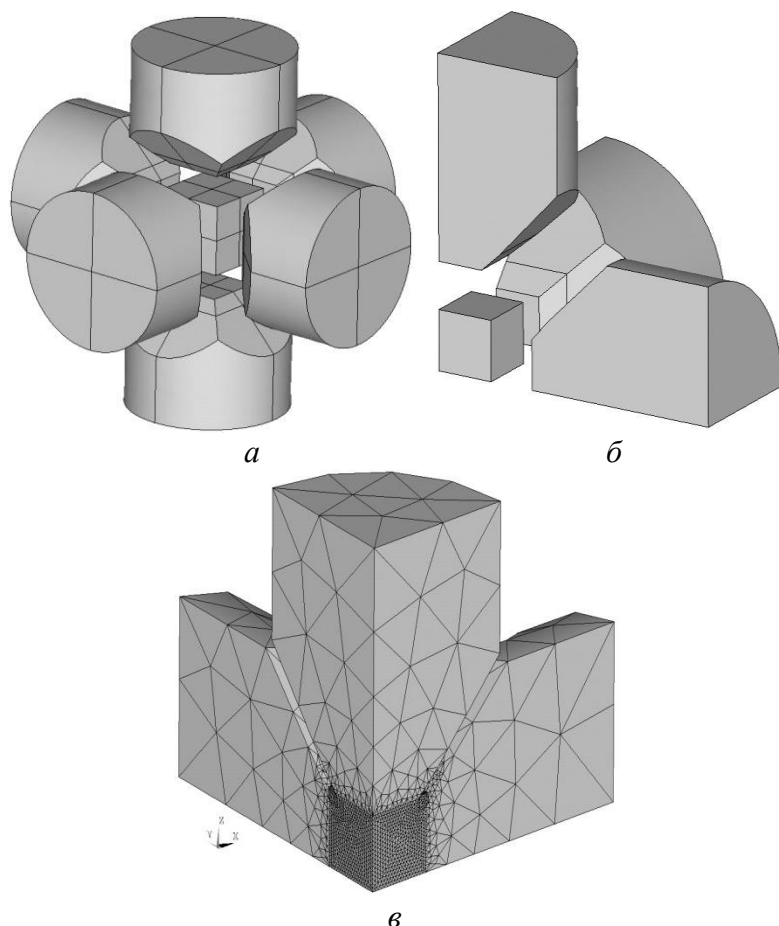


Рис. 1. Шестипуансонний АВТ: а – загальний вигляд вузла високого тиску, що складається з контейнеру та шести стискаючих пуансонів; б – розрахункова схема; в – її скінчено-елементна дискретизація

скінченних елементів процесу стиснення пірофілітового куба між пуансонами шестипуансонного апарату, дослідженні його напружено-деформованого стану та визначенні особливостей процесу деформування контейнерів.

Як об'єкт дослідження розглянуто конфігурацію комірки високого тиску шестипуансонного апарату з діаметром плунжера 560 мм, яка успішно використовується для забезпечення процесу вирощування монокристалів алмазу на затравці [8, 9] (рис. 1). Обрана геометрія робочої поверхні пуансонів має два скоси, пірамідальні натискувальні площадки:

наявних в літературі даних показав, що в зв'язку зі значною складністю та вартістю кількість таких досліджень обмежена, існує лише декілька робіт по скінчено-елементному моделюванню процесів формування поля тиску в пірофілітовому контейнері кубічного АВТ [6, 7].

Так як дані по розподілу тиску в середовищі, котре передає його, є дуже важливими, а вартість експериментальних досліджень дуже висока, то для визначення впливу геометричних параметрів пуансонів на розподіл тиску в контейнері найбільш доцільним є використання чисельних методів механіки твердого тіла.

Тому мета даної роботи полягає в розробці чисельної методики для моделювання з використанням методу

перший з кутом  $\alpha_1 = 41,5^\circ$  та довжиною  $l_1=13,5$  мм та наступним під кутом  $\alpha_2 = 46^\circ$ ; горизонтальна площадка пуансона має розміри  $44 \times 44$  мм<sup>2</sup>.

В зв'язку з симетрією геометрії та умов навантаження як розрахункову схему обрано 1/8 вузла високого тиску. Очевидно, що таке спрощення не впливає на кінцевий результат.

При проведенні розрахунків застосовували розроблені в Інституті надтвердих матеріалів ім. В. М. Бакуля НАН України алгоритми та програмне забезпечення для чисельного, з використанням методу скінченних елементів, розв'язку контактних термопружнопластичних задач при скінченних деформаціях [10–14]. Були прийняті вихідні положення: матеріал пуансонів деформується пружно, а пластичне деформування пірофілітового куба визначається моделлю лінійно-зміцненого тіла.

В роботі було використано наступні фізико-механічні властивості твердосплавних пуансонів (ВК-8): коефіцієнт Пуассона  $\nu = 0,21$ ; модуль Юнга  $E = 605$  ГПа [4]. Властивості матеріалу пірофілітового куба розмірами  $56 \text{ мм} \times 56 \times 56$  мм для початкових розрахунків були обрані із статті [7].

Як і в роботах [6, 7] процес навантаження пірофілітового куба при стисненні між пуансонами шестипуансонного АВТ був поділений на два етапи.

На першому етапі рухаються лише перші три пуансони (рис.2, а), три інших залишаються в зафіксованому стані. При початковому зміщенні, котре складало майже 28% від кінцевого, матеріал куба витікає в зазори між пуансонами і формуються прокладки стиснення довжиною близько 1,5 мм (рис. 2, б), величина тиску в пірофілітовому кубі дорівнює близько 0,2–0,3 ГПа, з рівномірним розподілом тиску по всьому його об'єму.

На другому етапі рухаються всіх шість пуансонів, довжина прокладок стиснення досягає кінцевих значень у 11–12 мм, камера високого тиску герметизується і йде утворення високого тиску у всьому об'ємі пірофілітового куба.

При моделюванні перший етап нами був заданий як початкова умова (рис. 2, в), тобто кінцева стадія його була прийнята як початкова точка для моделювання другого етапу процесу. Така процедура дозволяє уникнути розбіжності розв'язку задачі через високу спотвореність геометрії скінченних елементів і складний механізм пластичної течії матеріалу куба в кутах кубічних пуансонів.

Задавали наступні граничні умови: по зовнішній поверхні пуансонів (протилежній робочій поверхні) осьове переміщення складає 2,6 мм; по поверхнях симетрії пуансонів, куба та прокладок стиснення виконуються умови симетрії; на плоскій поверхні контакту пуансон–пірофілітовий куб – умови контактної взаємодії з коефіцієнтом тертя 0,95 (практично умови абсолютного зчеплення), а на поверхнях контакту деформована прокладка стиснення–пуансон – умови контактної взаємодії з коефіцієнтом тертя 0,08.

При розрахунках враховували вплив тиску на пластичні і пружні властивості пірофіліту.

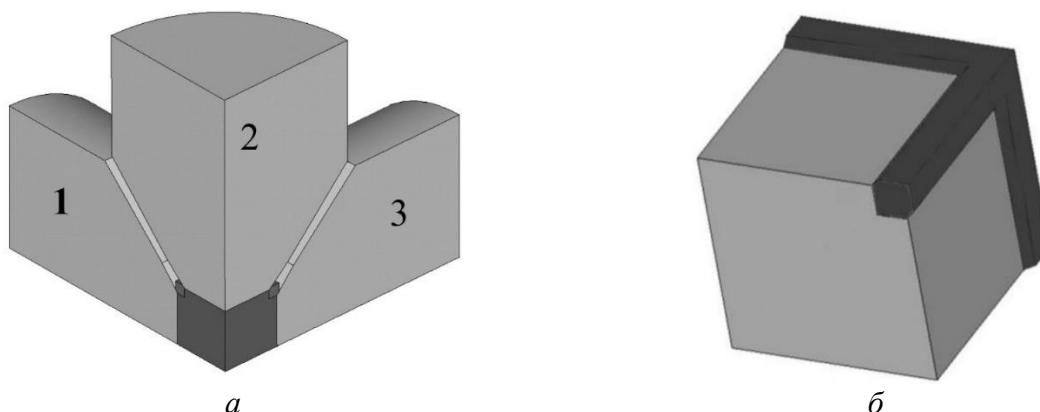


Рис.2. Процес навантаження пірофілітового куба при стисненні між пуансонами шестипуансонного АВТ: а – рух пуансонів на першій стадії моделювання.; б – утворення прокладки стиснення на першій стадії моделювання

Як зазначено вище, попередні розрахунки напружено-деформованого стану пірофілітового куба в процесі стискання в шестипуансонному АВТ, були проведені з використанням механічних властивостей пірофіліту з роботи [6]. І при стисненні на 75% (1,9 мм) від запланованого рівня тиск в кубі досягав всього 0,3 ГПа (рис. 3).

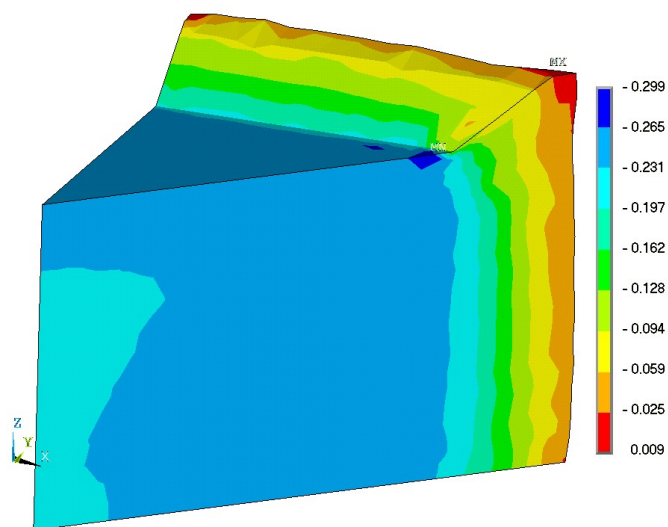


Рис. 3. Розподіл тиску (ГПа) в пірофілітовому кубі при стисненні на 1,9 мм з механічними властивостями пірофіліту з [6]

Тому було проведено корегування властивостей пірофілітового куба і в подальшому процесі моделювання ми використовували наступні параметри [15, 16]:  
прокладка стиснення:  $E = 2,82$  ГПа,  $\nu = 0,12$ , межа плинності 110 МПа;  
куб:  $E = 30$  ГПа,  $\nu = 0,12$ , межа плинності 560 МПа.

Одержаний напружено-деформований стан для куба при вище вказаних параметрах показано на рисунку 4, а. Як бачимо, при даних властивостях тиск в пірофілітовому кубі при стисненні на 68 % від запланованого (1,7 мм) досягає 2,03 ГПа, а довжина прокладки стиснення при даному тиску склала 2,7 мм. Порівнявши дані, отримані в нашій роботі, з результатами інших робіт [6, 7], можна зробити висновок, що вони збігаються.

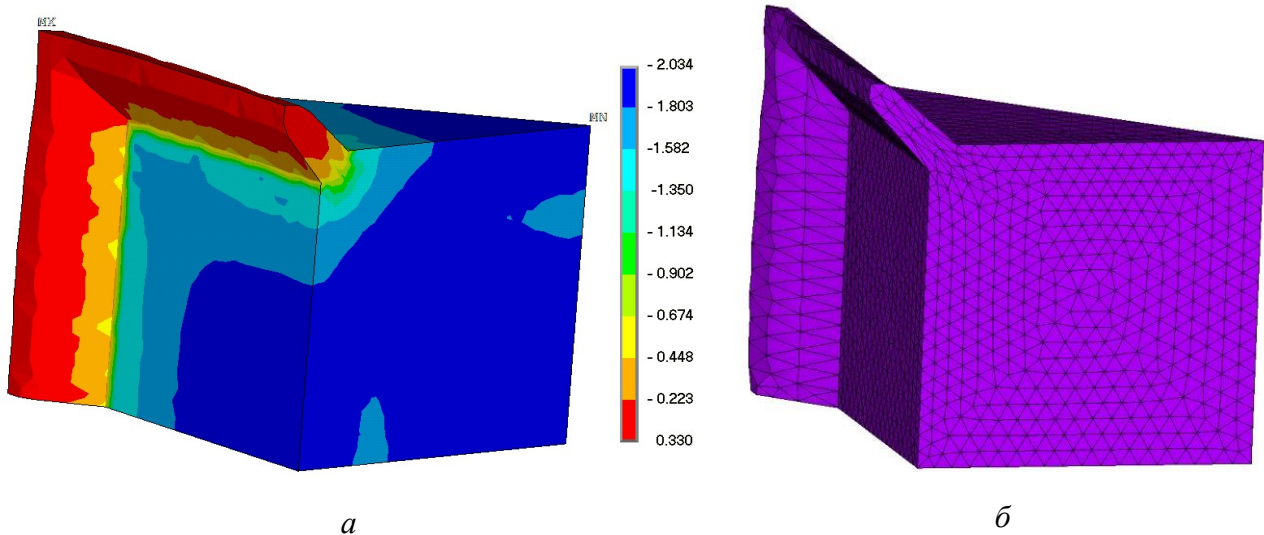


Рис. 4. Напружено-деформований стан для куба: розподіл тиску (ГПа) в пірофілітовому кубі при стисненні на 1,7 мм (а); сітка скінчених елементів після стиснення пірофілітового куба на 1,7 мм (б)

Розглянувши детально всі ділянки пірофілітового куба бачимо, що найбільш нестабільна зона в пірофілітовому кубі знаходиться в місці утворення прокладки стиснення на стику трьох пуансонів, так як дана зона є найбільш деформованою зоною у всьому кубі.

Частина моделі, котра характеризує прокладку стиснення, під час моделювання напружено-деформованого стану пірофілітового куба має найбільш деформовану сітку скінчених елементів та з кожним наступним кроком навантаження викривлення стає ще більшим (рис. 4, б), що призводить до суттєвого зменшення кроку навантаження, збільшення часу розрахунку та зменшує стабільність моделі.

Як видно з рис. 4, а, найбільший тиск створюється в центрі самого куба та на краях, де іде утворення прокладки стиснення. Це можна пояснити тим, що місце утворення прокладки стиснення є концентратором напружень. При подальшому збільшенні переміщення пуансонів тиск розподіляється таким чином, що в місці утворення прокладки стиснення тиск стає більшим ніж в центрі куба. Це підтверджується експериментальними даними.

Величина накопиченої пластичної деформації в матеріалі куба в середньому дорівнює 60–70%, в той же час в місці сходження трьох пуансонів спостерігається рівень пластичної деформації матеріалу понад 710 %. (рис. 5). Наявність сильно деформованої частини зразку вказує на необхідність корегування розрахункової моделі для урахування можливості руйнування окремих скінчених елементів в процесі деформування

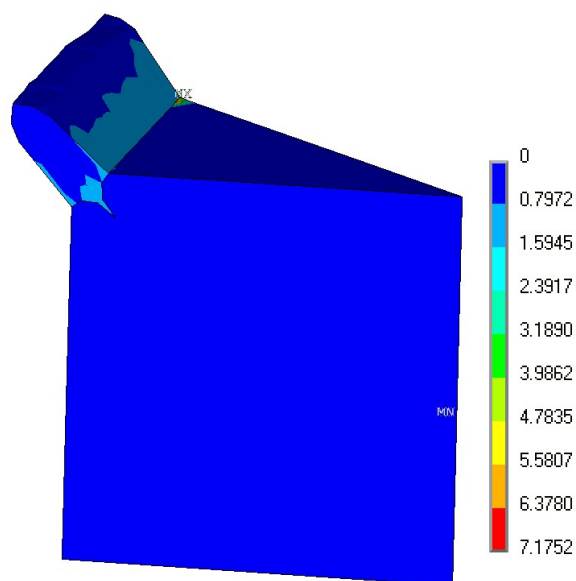


Рис.5. Розподіл накопиченої пластичної деформації в пірофілітовому кубі при тискові 2,03 ГПа

Результати моделювання показали, що використана методика достатньо точно відображає процес стиснення як пірофілітового куба, так і комірок, призначених для дослідження різних матеріалів під дією високих квазігідростатичних тисків в шестикуансонних АВТ. Наявність сильно деформованої частини зразку в області контакту з трьома пуансонами вказує на необхідність корегування розрахункової моделі для урахування можливості руйнування окремих скінчених елементів в процесі деформування.

#### Висновок

В даній роботі розроблено чисельну методику моделювання процесу стиснення пірофілітового куба між пуансонами шестикуансонного АВТ методом скінчених елементів, досліджено його напружено-деформований стан та визначено особливості процесу деформування з утворенням прокладок стиснення.

*Разработана численная методика моделирования процесса сжатия пирофиллитового куба между пуансонами кубического пресса, исследовано его напряженно-деформированное состояние и определены особенности процесса деформирования контейнера.*

*Показано что методика достаточно точно описывает процесс сжатия пирофиллитового куба под действием высокого давления, но в то же время требует корректировки для учета особенностей деформирования в области контакта на стыке трех пуансонов*

**Ключевые слова:** *пирофиллитовый контейнер, метод конечных элементов, процесс деформирования*

#### **O. O. Lyeshchuk, O. V. Bovsunivskiy, S. B. Polotnyak, V. V. Lysakovskii, S. A. Ivakhnenko** **SIMULATION OF THE STRESS-STRAIN STATE OF THE CONTAINER** **AT COMPRESSION ON ANVILS OF A CUBIC PRESS**

*A numerical technique for simulation of the compression of a pyrophyllite cube on anvils of a cubic press has been developed, stress-strain state of a cube has been studied and the peculiarities of the process have been defined.*

*It is shown that the technique correctly describes the compression of the pyrophyllite cube under high pressure, but at the same time requires an adjustment to take into account the deformation singularities in the contact region at the junction of the three anvils*

**Key words:** *pyrophyllite container, finite element method, deformation process*

#### **Литература**

1. Chien-Min J. Sung. Optimised cell design for high-pressure synthesis of diamond // High Temperatures - High Pressures. – 2001. – 33. – P. 489–501.

2. Design and performance of tapered cubic anvil used for achieving higher pressure and larger sample cell. / Q. G. Han, W. K. Yang, P. W. Zhu, et al. // *Rev Sci Instrum.* – 2013. – 84. – P. 073902-1 - 073902-5.
3. Wang H. K., He D. W. A hybrid pressure cell of pyrophyllite and magnesium oxide to extend the pressure range for large volume cubic presses // *High Press Res.* – 2012. – 32. – P. 186–194.
4. FEM study on a double-beveled anvil and its application to synthetic diamonds / Q. G. X. Han, P. Jia, J. M. Qin, et al. // *High Press Res.* – 2009. – 29. – С. 449–456.
5. Quantitative measurements of pressure gradients for the pyrophyllite and magnesium oxide pressure-transmitting mediums to 8 GPa in a large-volume cubic cell / H. K. Wang, D. W. He, X. Z. Yan, et al. // *High Press Res.* – 2011. – 31. – С. 581–591.
6. Finite-element analysis on pressure transfer mechanism in large-volume cubic press / R. Li, B. Xu, Q. Zhang, et al. // *High Press Res.* – 2016. – 36. – P. 575–584.
7. Simulation of pressure distribution in a pyrophyllite high-pressure cell by finite-element analysis / R. Lia, H. A. Maa, Q. G. Hana, et al. // *High Press Res.* – 2007. – 27. – С. 249–257.
8. Лысаковский В. В. Особенности выращивания монокристаллов алмаза в системе Fe–Co–Zr–C // *Сверхтвердые материалы.* – 2014. – № 5. – С. 11–16.
9. Дефектно-примесный состав монокристаллов алмаза, выращенных в системе Fe–Mg–Al–C / Т. В. Коваленко, С. А. Ивахненко, В. В. Лысаковский, и др. // *Сверхтвердые материалы.* – 2017. – № 2. – С. 14–19.
10. Полотняк С. Б. Методика чисельного моделювання процесів мартенситних фазових перетворень у малих обсягах матеріалів при деформуванні на алмазних ковадлах // *Сверхтвердые материалы.* – 2008. – № 2. – С. 13–28.
11. Lavrykov S. A. FEM Tools software system for finite element simulation of 3D mechanical and technology processes on PC. // *Proc. 4-th Conf. Numeric. Methods in Mech. of Continua.* – 1992. – 38. – P. 91–102.
12. Idesman A. V., Levitas V. I. Finite element procedure for solving contact thermoplastic problems at large strain, normal and high pressures. // *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.* – 1995. – 126. – P. 39–66.
13. Polotnyak S. B., Idesman A. V. Numerical modelling of the mechanical state of deformable gaskets in diamond anvil cell. // *J. Mater. Process. Technol.* – 1996. – 60. – P. 685–690.
14. Левитас В. И., Полотняк С. Б., Идесман А. В. Большие упруго-пластические деформации и напряженное состояние деформируемой прокладки аппарата высокого давления с алмазными наковальнями // *Пробл. прочности.* – 1996. – № 3. – С. 78–88.
15. Sherman W. F., Stadtmuller A. A. Experimental techniques in high pressure research. – London: John Wiley & Sons Ltd, 1987. – 471 с.
16. Edmont J. M., Paterson M. S. Strength of solid pressure media and implications for high pressure apparatus // *Contributions to Mineralogy and Petrology.* – 1971. – 30. – N 2. – P. 141–160.

Надійшла 26.07.18

## References

1. Chien-Min J. Sung. (2001). Optimised cell design for high-pressure synthesis of diamond. *High Temperatures - High Pressures*, 33, 489–501.
2. Han Q. G., Yang W. K., Zhu P. W., et al. (2013). Design and performance of tapered cubic anvil used for achieving higher pressure and larger sample cell. *Rev. Sci. Instrum*, 84, 073902-1–073902-5.
3. Wang H. K., & He DW. (2012). A hybrid pressure cell of pyrophyllite and magnesium oxide to extend the pressure range for large volume cubic presses. *High Press Res*, 32, 186–194.
4. Han Q. G., Jia X. P., Qin J. M., et al. (2009). FEM study on a double-beveled anvil and its application to synthetic diamonds. *High Press Res*, 29, 449–456.
5. Wang H. K., He D. W., Yan X. Z., et al. (2011). Quantitative measurements of pressure gradients for the pyrophyllite and magnesium oxide pressure-transmitting mediums to 8 GPa in a large-volume cubic cell. *High Press Res*, 31, 581–591.
6. Li R., Xu B., Zhang Q., et al. (2016) Finite-element analysis on pressure transfer mechanism in large-volume cubic press. *High Press Res*, 36, 575–584.
7. Lia R., Maa H. A., Hana Q. G., et al. (2007). Simulation of pressure distribution in a pyrophyllite high-pressure cell by finite-element analysis. *High Press Res*, 27, 249–257.
8. Lysakovskii V. V. (2014). Osobennosti vyrashchivaniya monokristallov almaza v sisteme Fe–Co–Zr–C [ Special features of growing diamond single crystals in the Fe–Co–Zr–C system ]. *Sverkhtverdye Materialy - Journal of Superhard Materials*, 5, 11–16 [in Russian].
9. Kovalenko T. V., Ivakhnenko S. A., Lysakovskiy V. V., et al. (2017). Defektno-primesnyi sostav monokristallov almaza, vyrashchennykh v sisteme Fe–Mg–Al–C [Defect-and-impurity state of diamond single crystals grown in the Fe–Mg–Al–C system]. *Sverkhtverdye Materialy – Journal of Superhard Materials*, 2, 14–19 [in Russian].
10. Polotnyak S. B. (2008). Procedure of Numerical Simulation of Martensitic Phase Transformation Processes in Small Volumes of Materials when Deformed in Diamond Anvils. *Journal of Superhard Materials*, Vol. 30, 2, 82–93.
11. Lavrykov S. A. (1992). FEM Tools software system for finite element simulation of 3D mechanical and technology processes on PC. *Proc. 4-th Conf. Numeric. Methods in Mech. of Continua*, 38, 91–102.
12. Idesman A. V., Levitas V. I (1995). Finite element procedure for solving contact thermoplastic problems at large strain, normal and high pressures. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 126, 39–66.
13. Polotnyak S. B., Idesman A. V. (1996). Numerical modelling of the mechanical state of deformable gaskets in diamond anvil cell. *J. Mater. Process. Technol.*, 60, 685–690.
14. Levitas V. I., Polotnyak S. B., Idesman A. V. (1996). Large elastoplastic strains and the stressed state of a deformable gasket in high pressure equipment with diamond anvils. *Strength of materials*, Vol. 28, 3, 221–227.
15. Sherman W. F., Stadtmuller A. A. (1987). *Experimental techniques in high pressure research*. London: John Wiley & Sons Ltd.
16. Edmont J. M., Paterson M. S. (1971). Strength of solid pressure media and implications for high pressure apparatus. *Contributions to Mineralogy and Petrology*, Vol. 30, 2, 141–160.