

ФГБУН «Институт металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова
Российской академии наук», Москва, Россия

УДК 666.3-492.2.046.4

СТРУКТУРА ПОРОШКОВОГО КОМПАКТА. Часть 3. Теоретический анализ процесса спекания в порошковых компактах с неоднородной пористостью*

Представлен обзор публикаций, посвященных теоретическому анализу процесса спекания порошкового компакта с учетом неоднородности упаковки частиц в нем. Применяемые для решения проблемы методы условно разделены на аналитические и численные. Показано, что для получения согласующихся с экспериментальными наблюдениями результатов более широкие возможности можно реализовать, используя численные методы в совокупности с компьютерным моделированием упаковок частиц. Приведены примеры реализации метода применительно к спеканию оксидных керамических материалов.

Ключевые слова: порошковый компакт, структура, неоднородность, спекание, аналитические методы, численные методы.

В ранее опубликованных разделах настоящего обзора собраны и представлены сведения о неоднородности упаковки частиц в порошковом компакте, критериях ее оценки и причинах, которые порождают эту неоднородность. В части 1 приведены результаты наиболее ярких экспериментальных работ по влиянию этого фактора на процесс спекания [1]. В части 2 [2] основное внимание уделено обзору методов повышения однородности структуры порошкового компакта, которые условно подразделены на технологические и структурные. Часть 3 посвящена обзору теоретических методов, применяемых для оценки влияния неоднородности структуры порошкового компакта на его спекание и формирование структуры в спеченном материале.

Теоретическое описание процесса спекания занимает заметное место в современной науке о материалах или, точнее, в ее подразделе, именуемом порошковая металлургия. На сегодняшний день существуют два основных кардинально различающихся подхода к описанию процесса спекания: классическая физическая теория спекания [3] и феноменологическая [4, 5]. Первая оперирует физическими константами на уровне взаимодействия

индивидуальных частиц. Феноменологическая теория базируется на континуальных уравнениях механики сплошной среды (вязкая среда), требует для своей реализации наличия эмпирических коэффициентов и применяется для описания макроскопических задач порошковой технологии. Автор настоящего обзора попытался максимально полно представить результаты исследований по теоретической оценке влияния неоднородности структуры порошкового компакта на процесс спекания с использованием как физической, так феноменологической теорий. Кроме того, в работах по этой тематике просматривается еще одна тенденция, требующая условной классификации. Если в большинстве ранних исследований изучение трансформации пористого пространства при спекании проводилось при помощи аналитических (часто громоздких и сложных) зависимостей, то в дальнейшем для этой цели все чаще используются численные методы. Несмотря на то что и в том и другом случае для получения результатов активно используется компьютерная техника, разделение приведенных материалов на два подраздела — аналитические и численные методы — оправдано.

Аналитические методы

Количественным критерием неоднородности структуры порошкового компакта с мономодальным распределением пор по размерам является ширина этого распределения [1]. При анализе процесса спекания в таких компактах удобно использовать функциональную форму этого распределения. Подобный подход про-

* Часть 1 статьи опубликована в журнале «Новые огнеупоры» № 5 за 2014 г., часть 2 — в № 6 за 2014 г.



А. В. Галахов

E-mail: aleksander.galakhov@yandex.ru

демонстрирован в публикациях [6–8]. Ниже приведен пример получения аналитической зависимости, описывающей трансформацию формы мономодального распределения пор по размерам при спекании [6].

Пусть распределение объема пор в порошковом компакте описывается нормированной функцией распределения в пространстве радиусов пор r и времени t спекания:

$$F(r, t) = \int_0^r f(r, t) dr. \quad (1)$$

В физической теории спекания механизм усаживания поры трактуется как результат диффузионного массопереноса в ансамбле соприкасающихся частиц. Движущей силой этого процесса является градиент концентрации элементарных носителей массы, чаще всего вакансий, в локальных областях порошкового компакта. Процесс диффузионного залечивания поры подчиняется зависимости

$$\frac{dr}{dt} = -J_v \omega, \quad (2)$$

где J_v — плотность потока вакансий к поре радиуса r ; ω — объем вакансии.

Плотность потока вакансий зависит от взаимного расположения пор, наличия различных путей массопереноса к усаживаемой поре. В статье [6] рассмотрена ситуация, когда в окрестности поры радиуса r имеются два вида стоков для вакансий: граница зерна и ближайшая соседняя пора. Для таких условий уравнение (2), описывающее изменение радиуса поры во времени, может быть преобразовано к форме

$$\frac{dr}{dt} = -D_v \frac{2\gamma\theta}{kT} \frac{1}{rd} \left[1 + \left(1 - \frac{r}{r_s} \right) \frac{d\sqrt[3]{\theta}}{r_s} \right], \quad (3)$$

где θ — текущая интегральная пористость компакта; r_s — средний радиус поры в распреде-

лении; γ — поверхностная энергия материала частиц; D_v — коэффициент объемной диффузии вакансий; d — средний диаметр частиц; T — температура; k — постоянная Больцмана.

Временное изменение собственно формы распределения пор можно получить, используя условие непрерывности функции распределения (1) в пространстве размеров [7]:

$$\frac{df}{dt} = -f \frac{dv}{dr} - \frac{\partial f}{\partial r}, \quad (4)$$

где $v \equiv dr/dt$; $f \equiv f(r, t)$.

Подстановка уравнения (3) в выражение (4) дает пригодное для описания формоизменения распределения выражение. В нормализованных координатах (относительно среднего радиуса пор r_{s0} в исходном распределении) оно выглядит следующим образом [6]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{B_1}{rd} \left[\frac{f}{r} - \left(1 - \bar{r} \frac{B_2}{B_1} \right) \frac{\partial f}{\partial r} \right], \quad (5)$$

где $B_1 = 1 + d\sqrt[3]{\theta} / r_{s0}$; $B_2 = (d\sqrt[3]{\theta}) / r_{s0}$; $A = -2D_v\gamma\omega / (kT)$; $\bar{r} = r / r_{s0}$; $\bar{d} = d / r_{s0}$; $\bar{t} = tA / r_{s0}^3$.

В публикации [6] с помощью уравнения (5) проанализировали влияние ширины распределения пор по размерам на кинетику спекания. Ширину исходного распределения пор по размерам оценивали величиной коэффициента вариации: $v_0 = \sigma_0 / r_{s0}$ (σ_0 — стандартное отклонение для исходного распределения). Для расчетов в качестве исходных использовали нормальные распределения с коэффициентом вариации $v_0 = 0,1$, $v_0 = 0,3$ и $v_0 = 0,5$ и средним радиусом пор $r_{s0} = 1$. Значение исходной пористости компакта $\theta_0 = 0,5$, средний размер частиц порошка $d = 0,3$. Временная трансформация распределений различной ширины показана на рис. 1. Кинетику спекания характеризовали изменением во времени относительной плотности компакта ρ . Расчетные кинетические кривые уплотнения (рост плотности во времени), соответствующие этим распределениям, показаны на рис. 2, из которого видно, что компакт с узким распределением объема пор по размерам уплотняется быстрее. Однако на начальном этапе спекания скорость уплотнения материала с первоначально широким распределением выше. Это объясняется тем, что на начальном этапе спекания в материале с широким распределением больше мелких легко спекающихся пор. На заключительной стадии спекания скорость уплотнения материала с первоначально широким распределением резко падает. Из-за наличия в широком распределении пор, сильно различающихся по размерам, в таком

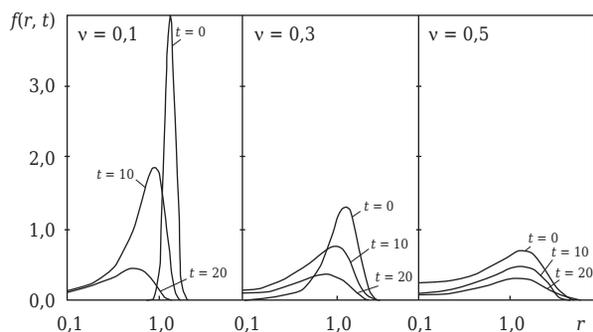


Рис. 1. Изменение во времени распределений объема пор по радиусам

компакте интенсивно протекает процесс диффузионной перекачки вакансий от мелких пор к крупным. В результате этого уже на раннем этапе спекания в нем формируется крупнопористая структура, спекание которой затруднено. Это видно из изменения максимального радиуса поры в распределениях r_{\max} (рис. 3). Если для материала с узким распределением с ростом плотности размер максимальной поры снижается, то в материале с широким распределением он растет. Рост пор в спекающемся компакте не противоречит экспериментальным наблюдениям [1].

Используя полученные результаты, можно сформулировать общие закономерности влияния ширины распределения пор на процесс спекания формовок из порошков с одинаковым размером частиц. Первое — при спекании компакта с узким распределением пор по размерам уплотнение компакта начинается позже, протекает более интенсивно и заканчивается раньше, чем при спекании компакта с первоначально широким распределением; другими словами, временной интервал спекания для материала, обладающего распределением с низким коэффициентом вариации, узок, а скорость уплотнения в этом интервале высока. Второе — в процессе спекания компакта с узким распределением размер пор монотонно уменьшается; для компакта с широким распределением возможен рост крупных пор. Эти результаты могут быть положены в основу некоторых практических рекомендаций по спеканию порошковых формовок. В частности, поскольку формовки с узким распределением объема пор по размерам обладают узким интервалом спекания, в котором уплотнение протекает быстро и с высокими скоростями, их нецелесообразно использовать при спекании крупных изделий. В этом случае неизбежны значительные градиенты температур по объему формовки, что может привести к разрушению изделия из-за разницы в скоростях усадки по объему. Для мелких изделий, когда температурные градиенты не столь велики, применение компактов с узким распределением пор по размерам позволяет существенно ускорить процесс спекания и повысить конечную плотность материала.

В рассмотренной выше работе [6] анализ выполнен с использованием функционального распределения пор по размерам, но без учета особенностей геометрии порового пространства. Для учета этого фактора часто применяются упрощенные модели порового пространства. Такая аналитическая модель предложена, например, в статье [9]. Геометрическое пространство порошкового компакта

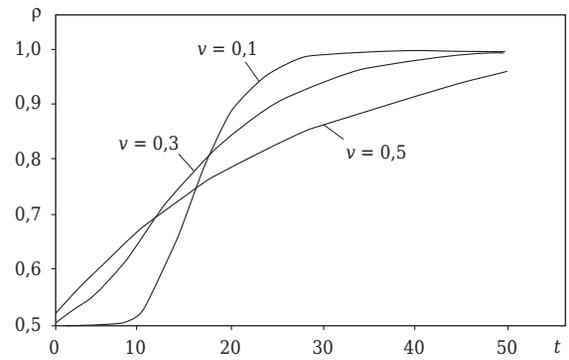


Рис. 2. Расчетные кинетические кривые уплотнения в распределениях с различной исходной шириной

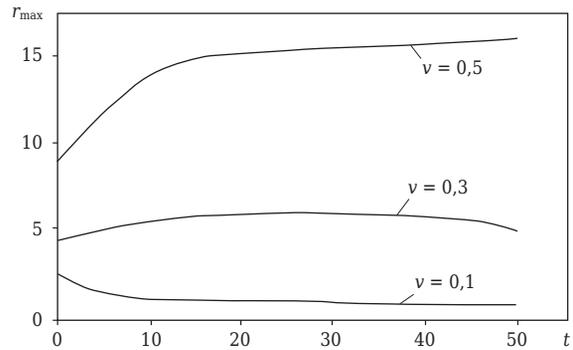


Рис. 3. Изменение во времени максимального радиуса поры r_{\max} в распределениях с различной исходной шириной

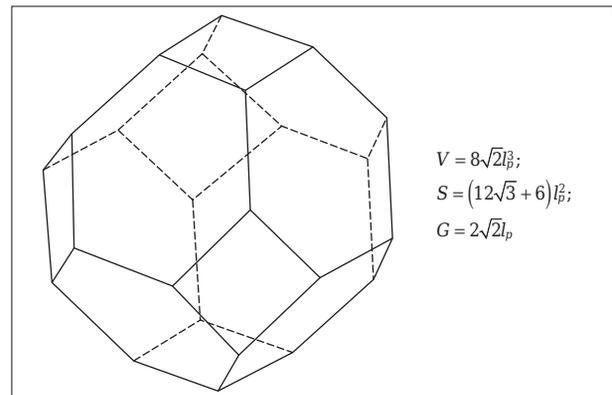


Рис. 4. Тетрадекаэдр Кельвина и соотношения для объема частицы V , удельной поверхности S , размера зерна для него G ; l_p — длина ребра

рассматривается как совокупность тетрадекаэдров Кельвина (рис. 4); удобство такой геометрической модели состоит в возможности определения интегральных характеристик структуры по простым аналитическим зависимостям (см. рис. 4). На рис. 5 показаны расчетные кинетические кривые, характеризующие влияние ширины распределения частиц в исходной упаковке на ее уплотнение и рост среднего размера зерен в процессе спекания

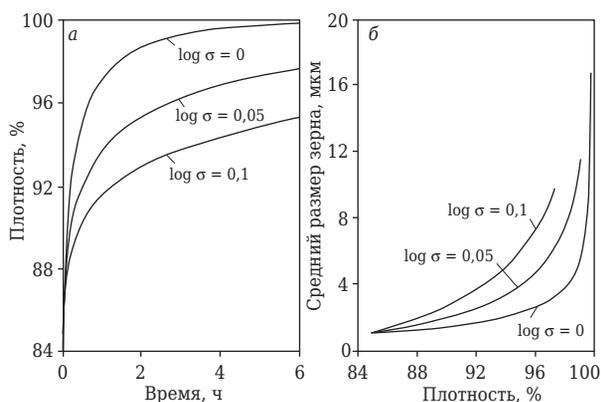


Рис. 5. Зависимости плотности от времени спекания (а) и среднего размера зерна от достигнутой плотности (б) для модельных компактов с различной шириной распределения пор по размерам [9]

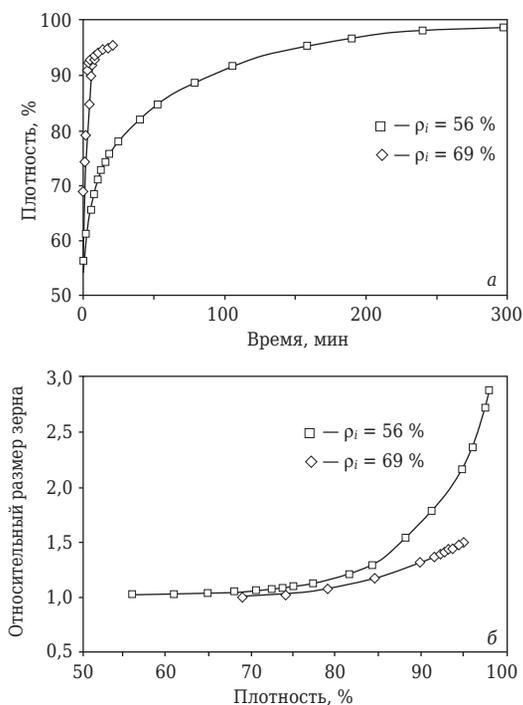


Рис. 6. Зависимости плотности от времени спекания (а) и среднего размера зерна от достигнутой плотности (б) для компактов из порошков TiO₂ с различной шириной распределения пор по размерам [10]

[9]. Компакты с узким распределением пор по размеру (как правило, это максимально плотные компакты из монодисперсных частиц), по прогнозам [9], будут уплотняться с максимальной скоростью (см. рис. 5, а). Прирост размера зерна во времени при спекании таких компактов самый невысокий (см. рис. 5, б). Результаты теоретического анализа процесса спекания, приведенные выше, получили многочисленные подтверждения в экспериментальных работах. Авторы публикации [10] исследовали спекание субмикронных сферических порошков TiO₂. В

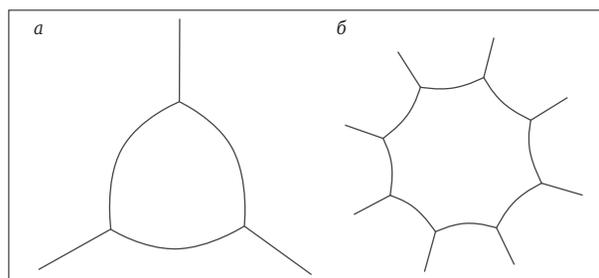


Рис. 7. Пора: а — внутриагломератная низкокоординированная; б — межагломератная высококоординированная

одном из компактов частицы были упакованы с высокой 69 %-ной плотностью, имели плотную упаковку частиц с узким распределением пор по размеру. Компакты с низкой 56 %-ной плотностью имели широкое распределение пор по размерам. Сопоставление кинетических кривых уплотнения этих компактов при спекании и зависимостей размера зерен от достигнутой плотности (рис. 6) демонстрируют хорошее согласие с расчетными данными [9].

В модели, предложенной в статье [9], не заложено различия между поведением в процессе спекания мелких внутриагломератных пор и крупных межагломератных. А между тем механизм усаживания этих пор имеет существенные различия. В плотноупакованных внутриагломератных областях мелкие поры, как правило, имеют низкое координационное число и при развитии процесса спекания их границы обращены к центру поры вогнутой стороной (рис. 7, а). В отличие от них крупные межагломератные поры имеют высокое координационное число. Форма их границ в процессе спекания обращена к центру поры выпуклой стороной (рис. 7, б). Исследования показали [11], что конфигурация пор сильно влияет на их поведение при спекании. В начале процесса спекания внутриагломератные низкокоординированные поры находятся в окружении мелких частиц, по множественным границам которых осуществляется мощный массоперенос в их внутренние полости и сохраняется до полного уплотнения компакта. Такое же окружение на начальном этапе спекания существует и у крупных межагломератных пор. Однако это окружение «не доживает» до полного уплотнения компакта. Собирательная рекристаллизация в мелкозернистых с развитой сеткой границ внутриагломератных областях, которыми окружена пора, приводит к полному исчерпанию эффективных путей массопереноса в них и понижению координации межагломератных пор еще до их закрытия. В этих условиях наблюдается ослабление потенциала к

спеканию, процесс усаживания пор замедляется и протекает на фоне роста зерна. Рост зерна на этом этапе начинает играть определяющую роль в формировании структуры.

В своей модели авторы [9] не учитывают отмеченного выше различия в поведении при спекании разного вида пор (см. рис. 7) и ограничиваются анализом спекания в предположении плотной упаковки частиц, что на практике реализуется редко. Поэтому аналитический аппарат, разработанный для количественного анализа процесса спекания [9], несмотря на хорошее соответствие, полученное при анализе многих экспериментальных результатов, все же не обеспечивает до конца достоверную трактовку известных фактов, наблюдаемых при спекании неоднородно упакованных порошковых компактов. В частности, факт роста высококоординированных межагломератных пор. Впервые это явление с позиций физической теории спекания было проанализировано в публикации [12]. В основе анализа лежит геометрическая модель высококоординированной поры (рис. 8). В этой модели пора представляет собой пространство внутри кольца, составленного из соприкасающихся моноразмерных частиц — зерен с радиусом r . Радиус вписанной окружности ρ ассоциирован с радиусом поры. Между контактирующими зернами внутреннего пространства расположены тройные стыки, образованные межзеренной и свободными границами, смыкающимися в стыке под контактным углом ψ . Для этой идеализированной конфигурации [12] установлено однозначное соответствие между контактным углом ψ и отношением радиуса поры к радиусу частицы — ρ/r . Контактный угол ψ , в исходной конфигурации равен нулю, с усаживанием поры растет, стремясь к величине равновесного диэдрального угла θ . Величина этого угла для каждого материала в конкретных условиях (температура, газовая атмосфера) имеет конкретное константное значение, определяемое из условия равновесия поверхностных сил в тройном стыке. Условием остановки усаживания поры является положение, когда контактный угол достигает значения равновесного диэдрального $\psi = \theta$. Это равенство однозначно определяет значение отношения радиусов поры и частицы ρ/r , при отклонении от которого равновесие поверхностных сил нарушается и пора приобретает потенциал к увеличению своего размера или, наоборот, к усаживанию. При этом значение критического отношения ρ/r зависит от количества частиц, окружающих пору, — ее координационного числа. С использованием такой схемы [12] построено графическое представ-

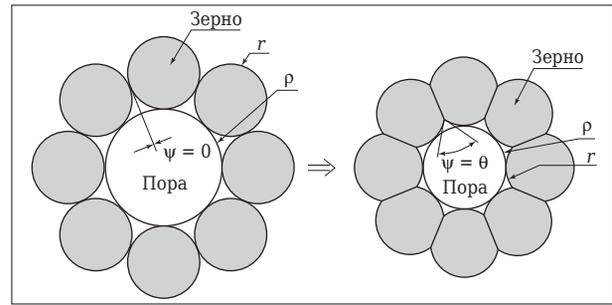


Рис. 8. Схема процесса усаживания высококоординированной поры при спекании: слева — исходная пора; справа — пора в положении $\psi = \theta$ [12]

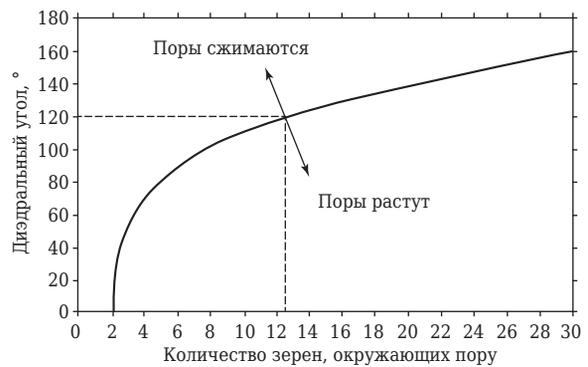


Рис. 9. Области нестабильности высококоординированных пор [12]

ление областей нестабильности для высококоординированных пор. Одна из таких диаграмм показана на рис. 9. Из нее, например, следует, что для материала с $\theta = 120^\circ$ увеличение координационного числа поры более 12 переводит ее в разряд растущих при спекании, а поры с координационным числом менее 12 при спекании усаживаются в размере. Разумеется, точные количественные прогнозы для реальных порошковых материалов делать на основании подобных диаграмм затруднительно. Тем не менее результаты, полученные во многих экспериментальных исследованиях, подтверждают предложенную [12] схему. Ниже приведены результаты, полученные в экспериментальном исследовании спекания порошковых компактов, содержащих высококоординированные поры [13].

Авторы [13] работали с порошками диоксида титана с узким распределением по размеру и субмикронным размером частиц 0,24 мкм. Образцы для исследования процесса спекания готовили литьем водных суспензий в гипсовые формы. Регулируя агрегативную устойчивость суспензии, изготовили две партии порошковых компактов. Компакты одной партии, полученные из флокулированной суспензии, имели низкую плотность и вследствие этого крайне

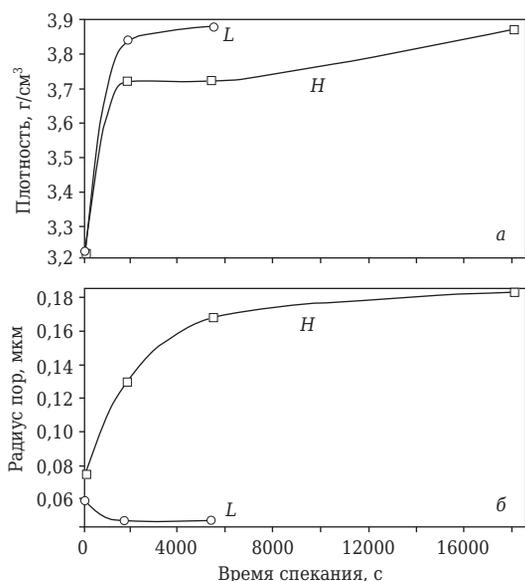


Рис. 10. Спекание компакта плотноупакованного (*L*) и содержащего межагломератные поры (*H*) из субмикронных порошков TiO_2 [13]

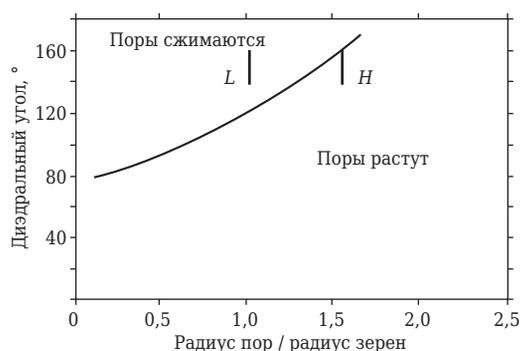


Рис. 11. Диаграмма областей стабильности компактов из субмикронных порошков TiO_2 с разной структурой порового пространства [13]

неоднородную «рыхлую» структуру, содержащую крупные межагломератные поры — *H* (high). Компакты, отлитые из суспензии с оптимально отрегулированной агрегативной устойчивостью, получились плотные и низкие — *L* (low). Для изучения трансформации пористой структуры в процессе спекания провели серию обжигов при $1200\text{ }^\circ\text{C}$ с разной продолжительностью (рис. 10). Из рис. 10, *a* видно, что характер кинетических кривых различается кардинально. Если компакты *L* с однородной плотной структурой достигали близкой к 100%-ной плотности в течение короткого промежутка времени (~1,5 ч), то для полного уплотнения компакта *H*, содержащего высококоординированные поры, время спекания до плотного состояния достигало 5 ч. Если в компактах *L* с ростом времени спекания наблюдается непрерывный рост плотности, то в компактах *H* — промежу-

точный временной интервал, в котором плотность остается неизменной. И только заметное увеличение времени спекания приводит к постепенному удалению этих пор. Кардинально различается и характер изменения пористой структуры в процессе спекания (см. рис. 10, *б*). В компактах *L* на протяжении всего процесса наблюдается стабильное уменьшение среднего размера пор, которые полностью исчезают уже через 30 мин. В компактах *H* поры непрерывно растут и тенденции к исчезновению не проявляют. Это происходит на фоне роста плотности материала. Полученные результаты [13] были обработаны авторами по методике [12] и представлены на диаграмме нестабильности пор, построенной для TiO_2 (рис. 11). Видно, что компакт *L* с плотной упаковкой частиц имеет поры, находящиеся в области усаживания, тогда как компакт *H* с крупными межагломератными порами находится в зоне роста пор.

Сформулированный [12] термодинамический подход открывает новые возможности для анализа процесса спекания. Например, с помощью этого подхода получена количественная оценка граничного значения координационного числа поры [14]. При увеличении координационного числа выше граничного значения процесс усаживания поры сменяется ее ростом. Эта оценка выполнена для двумерной поры, образуемой цилиндрическими частицами бесконечной длины. Поры, удовлетворяющие соотношению $\theta + 2\pi/n < \pi$ (θ — равновесный диэдральный угол, n — координационное число поры), имеют вогнутые к центру внутренние границы (см. рис. 7, *a*) и сохраняют потенциал к усаживанию. Для пор с $\theta + 2\pi/n > \pi$ уменьшение размера нарушает равновесное состояние, поэтому в процессе спекания эти поры растут.

Численные методы

Обильное количество физических и геометрических условий, меняющихся на каждой стадии спекания порошкового компакта, свидетельствует о сложности описания этого процесса единым аналитическим уравнением. Эти обстоятельства подтолкнули исследователей, работающих в этой области, к использованию численных методов. Тем более, что реализовать их ввиду повсеместного применения современной компьютерной техники и накопленного объема специализированного программного обеспечения становится все проще. Применение численных методов для анализа процесса спекания породило несколько методических подходов. Можно объединить их в три группы: 1 — численные методы в рамках континуальной модели

спекания, 2 — вероятностные численные методы (методы Монте-Карло), 3 — численные методы в рамках физической модели спекания.

Численные методы в рамках континуальной модели спекания

Реализация численного метода для анализа процесса спекания включает три этапа: I — выбор геометрической модели объекта, в котором протекает анализируемый процесс; II — выбор метода численной дискретизации формы объекта; III — выбор определяющего уравнения, на базе которого процесс анализируется. В качестве геометрической модели, используемой в рамках континуальной модели спекания, часто используется конфигурация из двух цилиндрических или сферических частиц, разделенных общей границей. Для дискретизации формы объекта (спекаемых частиц) обычно используют метод конечных элементов [15–19]. В качестве определяющего уравнения, описывающего формоизменение дискретного континуума, используют уравнение вязкого течения механики сплошной среды

$$\epsilon = \frac{1}{2\eta} \sigma, \tag{6}$$

где ϵ — девиатор скорости деформации; σ — девиатор напряжений; η — вязкость материала частиц.

Вязкость материала, разумеется, зависит от природы материала и температуры. Обычно используют эмпирические значения, полученные экспериментально. На рис. 12 показан пример разбиения модели спекаемой частицы на конечные элементы и полученные в результате эволюции в процессе спекания контуры формы шейки [15].

Применение методов механики сплошной среды не ограничивается рассмотрением двух-частичной конфигурации частиц. Такой подход использовали для анализа спекания много-частичной порошковой формовки [19]. Для описания формоизменения в порошковых частицах был применен метод конечных элементов. Весь анализируемый континуум разбивается на конечные элементы — подобласти, ситуация на границах которых подчиняется условиям непрерывности. Взамен обычно применяемого в теории вязкого течения соотношения (8) в качестве определяющего уравнения была предложена [19] своя оригинальная зависимость, содержащая пористость θ ,

$$P_{eff} = (3/2)\theta / (1 - \theta)P, \tag{7}$$

где P_{eff} — девиатор тензора напряжений в точке континуума (величина всестороннего дав-

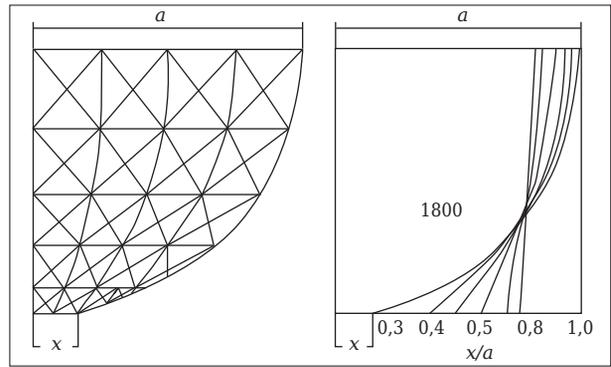


Рис. 12. Схема разбиения частицы конечными элементами и эволюция формы шейки в процессе спекания [15]

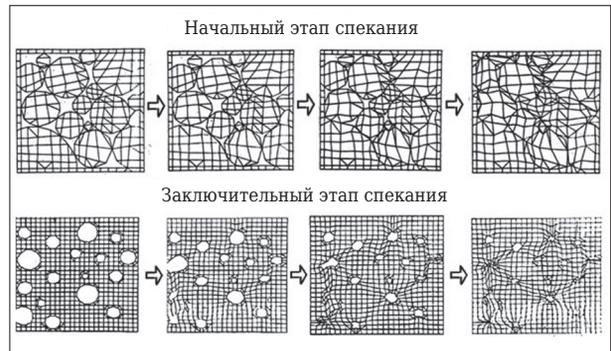


Рис. 13. Конечно-элементная дискретизация и формоизменение ансамбля частиц на начальном этапе спекания и ансамбля пор на заключительном [15]

ления); P — внешнее давление, приложенное к компакту.

Несмотря на кажущуюся общность подхода, авторы работы были вынуждены отдельно (на разных моделях) анализировать ситуацию, соответствующую начальному этапу процесса спекания и заключительному (рис. 13). Для анализа начального этапа спекания использовали геометрическую модель объекта, представляющую собой дискретный континуум из соприкасающихся частиц (см. рис. 13, верхний ряд). На заключительном этапе спекания анализируемый объект представляет собой сплошной континуум, который содержит изолированные поры (см. рис. 13, нижний ряд). К сожалению, в приведенном анализе никак не учтены взаимодействие границ с пустотами и рост пор на заключительном этапе спекания. Иначе говоря, при использовании континуальной модели [15] невозможно проследить структурные изменения в спекающемся порошковом компакте на всех этапах процесса уплотнения материала.

Вероятностные численные методы

В последнее время для анализа процесса спекания все большую популярность приобретают ве-

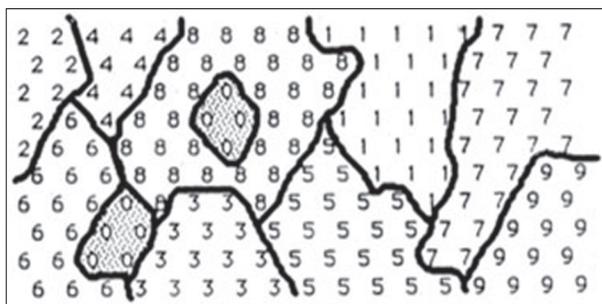


Рис. 14. Разбиение моделируемой области поликристалла. Области с ориентацией 0 представляют поры [23]

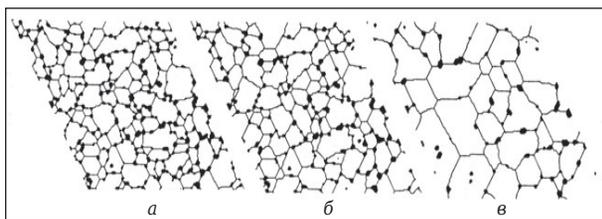


Рис. 15. Рост зерна и трансформация пор в поликристаллическом материале на заключительной стадии спекания. Моделирование методом Монте-Карло [23]

роятностные методы. По аналогии с применением таких методов в других областях эти методы часто именуют общепринятым термином — методы Монте-Карло. Первоначально такой метод был применен к анализу процесса рекристаллизации и роста зерна в поликристаллических материалах [20, 21]. Разработанная модель была модифицирована для описания заключительной стадии спекания в поликристалле, протекающей на фоне интенсивного роста зерна [22, 23]. Идея анализа заключается в разбиении модельной области поликристаллического материала регулярной сеткой микроподобластей, кристаллическая ориентация которых принимает определенное конкретное значение из дискретного ряда возможных. Схема разбиения показана на рис. 14 [23]. Каждой кристаллической ориентации приписывается свой индекс. Совокупность соседних микроподобластей с одинаковыми индексами образует непрерывную подобласть большего размера, которая трактуется как монокристаллическое зерно с единой ориентацией (на рис. 14 между этими подобластями проведены межзеренные границы). Одна из возможных кристаллических ориентаций, обозначенная индексом 0, закреплена за пустыми областями — порами.

Библиографический список

1. **Галахов, А. В.** Структура порошкового компакта. Часть 1. Неоднородность упаковки частиц / А. В. Галахов // Новые огнеупоры. — 2014. — № 5. — С. 22–32.

Для подсчета зернограничной энергии системы используется выражение

$$H = -J \sum_{nn} (\delta_{ij} - 1), \quad (8)$$

где J — энергия сегмента границы, разделяющего соседние контактирующие микроподобласти; δ_{ij} — символ Кронекера с индексами соседних подобластей.

Энергия сегмента не зависит от конкретного соотношения номеров контактирующих микроподобластей. Ее значение постоянно, т. е. взаимная ориентация контактирующих зерен при подсчете энергии границы учитывается по принципу «совпадает — не совпадает». Для соседних подобластей с одинаковой ориентацией ($i = j$) локальный вклад в зернограничную энергию системы нулевой и только на границе зерна, где i не равно j , он приобретает конкретное значение. Выражение (10) используется для подсчета зернограничной энергии системы при проходе по регулярной сетке. На рис. 15 показана картина трансформации структуры поликристаллического материала на заключительной стадии спекания, полученная с использованием метода Монте-Карло [23]. Видно, что на этой стадии рост зерен превалирует над процессом собственно уплотнения (удаление пористости).

В настоящее время метод Монте-Карло становится общепризнанным и часто используется для анализа заключительной стадии спекания и рекристаллизации в поликристаллических материалах. В последних редакциях этого программного продукта [24] учтены и поправлены многие сомнительные аспекты. В частности, с привлечением метода молекулярной динамики уточнены значения энергии сегмента границы J в базовом уравнении (10). Метод в трехмерной постановке может быть использован и в производственной практике для оптимизации режимов термообработки конкретных изделий [24]. Метод распространен на все этапы спекания, включая начальную, промежуточную и заключительную стадии [25]. Кроме того, показана возможность его применения для анализа спекания многочастичных конфигураций. В статье [26] описана оригинальная модификация этого метода, которая применяется для анализа процесса спекания в совокупности с методом конечных элементов.

(Продолжение следует)

2. **Галахов, А. В.** Структура порошкового компакта. Часть 2. Методы повышения однородности упаковки частиц / А. В. Галахов // Новые огнеупоры. — 2014. — № 6. — С. 34–45.

3. **Гегузин, Я. Е.** Физика спекания / Я. Е. Гегузин. — М. : Наука, 1984.
4. **Ивенсен, В. А.** Феноменология спекания и некоторые вопросы теории / В. А. Ивенсен. — М. : Металлургия, 1985.
5. **Скорород, В. В.** Реологические основы теории спекания / В. В. Скорород. — Киев : Наукова думка, 1972.
6. **Галахов, А. В.** Уплотнение материалов с неоднородной пористостью при спекании / А. В. Галахов, В. Я. Шевченко, Н. М. Жаворонков // Доклады АН СССР. — 1990. — Т. 311, № 5. — С. 1169–1173.
7. **Marcworth, A. J.** Computer simulation of effects of pressure-assisted final-stage densification / A. J. Marcworth, J. K. McCoy // J. Mater. Sci. — 1987. — Vol. 22. — P. 488–494.
8. **Shappel, J. S.** Particle size distribution effects on sintering rate / J. S. Shappel, T. A. Ring // J. Appl. Phys. — 1986. — Vol. 60, № 1. — P. 383–391.
9. **Junhong Zhao.** Effect of Pore Distribution on Microstructure Development: I, Matrix Pores / Junhong Zhao, M. P. Harmer // J. Amer. Ceram. Soc. — 1988. — Vol. 71, № 2. — P. 113–120.
10. **Barringer, E. A.** Formation, packing and sintering of monodispers TiO₂ powders / E. A. Barringer, H. K. Bowen // J. Amer. Ceram. Soc. — 1982. — Vol. 62, № 12. — P. 199–201.
11. **Slamovich, E. B.** Densification of large pores: I, Experiments / E. B. Slamovich, F. F. Lange // J. Amer. Ceram. Soc. — 1992. — Vol. 75, № 9. — P. 2498–2508.
12. **Kingery, W. D.** The sintering of crystalline oxides, I. Interactions between grains boundaries and pores / W. D. Kingery, B. Francois // In Sintering and related phenomena. — Gordon & Breach. — 1965. — P. 471–496.
13. **Boschi, A. O.** Pore stability during the sintering of TiO₂ / A. O. Boschi, E. Gilbert, W. E. Worrall, R. J. Brook // High Tech Ceramics. — Elsevier Science Publishers B. V., Amsterdam. — 1987. — P. 893–899.
14. **Kellett, B. J.** Thermodynamics of Densification: I Sintering of Simple Particle Arrays, Equilibrium Configurations, Pore Stability, and Shrinkage / B. J. Kellett, F. F. Lange // J. Amer. Ceram. Soc. — 1989. — Vol. 72, № 5. — P. 725–734.
15. **Lange, F. F.** Thermodynamics of densification: II, Grain growth in porous compacts and relation to densification / F. F. Lange, B. J. Kellett // J. Amer. Ceram. Soc. — 1989. — Vol. 72, № 5. — P. 735–741.
16. **Ross, J. W.** Dynamic computer simulation of viscous flow sintering kinetics / J. W. Ross, W. A. Miller, G. C. Weatherly // J. Appl. Phys. — 1981. — Vol. 52, № 6. — P. 3884–3888.
17. **Jagota, A.** Simulation of the viscous sintering of two particles / A. Jagota, P. R. Dawson // J. Amer. Ceram. Soc. — 1990. — Vol. 73, № 1. — P. 173–177.
18. **Martinez-Herrera, J. I.** Viscous sintering of spherical particles via finite element analysis / J. I. Martinez-Herrera, J. J. Derby // J. Amer. Ceram. Soc. — 1995. — Vol. 78, № 3. — P. 645–649.
19. **Fumihiko, Wakai.** Modeling and simulation of elementary processes in ideal sintering / Wakai Fumihiko // J. Amer. Ceram. Soc. — 2006. — Vol. 89, № 5. — P. 1471–1484.
20. **Ramakrishnan, N.** An analysis of pressure sintering by computer simulation / N. Ramakrishnan, T. Balakrishna Bhat, V. S. Arunachalam // Acta Metallurgica. — 1984. — Vol. 32, № 3. — P. 357–370.
21. **Anderson, M. P.** Computer simulation of grain growth—I. Kinetics / M. P. Anderson, D. J. Srolovitz, G. S. Grest, P. S. Sajhni // Acta Metallurgica. — 1984. — Vol. 32, № 5. — P. 783–791.
22. **Srolovitz, D. J.** Computer simulation of grain growth—II. Grain size distribution, topology, and local dynamics / D. J. Srolovitz, M. P. Anderson, P. S. Sajhni, G. S. Grest // Acta Metallurgica. — 1984. — Vol. 32, № 5. — P. 793–802.
23. **Hassold, G. N.** Computer simulation of final-stage sintering: I, Model, kinetics, and microstructure / G. N. Hassold, I-Wei Chen, D. J. Srolovitz // J. Amer. Ceram. Soc. — 1990. — Vol. 73, № 10. — P. 2857–2864.
24. **Chen, I-Wei.** Computer simulation of final-stage sintering: II, Influence of initial pore size / I-Wei Chen, G. N. Hassold, D. J. Srolovitz // J. Amer. Ceram. Soc. — 1990. — Vol. 73, № 10. — P. 2865–2872.
25. **Matsubara, Hideaki.** Computer simulation studies on sintering and grain growth / Hideaki Matsubara // Journal of the Ceramic Society of Japan. — 2005. — Vol. 113, № 4. — P. 263–268.
26. **Tikare, V.** Numerical simulation of Solid-state sintering: I, Sintering of three particles / V. Tikare, M. Braginsky // J. Amer. Ceram. Soc. — 2003. — Vol. 86, № 1. — P. 49–53. ■

Получено 17.07.14
© А. В. Галахов, 2014 г.

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКАЯ ИНФОРМАЦИЯ



Call for Papers!

39th INTERNATIONAL CONFERENCE AND EXPOSITION ON
ADVANCED CERAMICS AND COMPOSITES
January 25-30, 2015 | Hilton Daytona Beach Resort and Ocean Center | Daytona Beach Florida, USA

25 – 30 января 2015 г.
г. Дейтона-Бич, США

ICACC 15 — 39-я конференция и выставка высокотехнологичной керамики и композитов

www.ceramics.org