

**Fuming Deng*, Cen Hao, Zhenhai Guo, Shuang Wang,
Xiang Bo, Qing Lei**

Institute of Super-hard Cutting Tool Materials,
China University of Mining and Technology, Beijing, P.R. China
*dfm@cumt.edu.cn

Моделювання дослідження однорідності поля повітряного потоку системи осадження HFCVD з урахуванням розстановки ниток розжарення

Метод CVD з ниткою розжарення має багато переваг, таких як застосування простого обладнання, простота в експлуатації і низькі витрати, що дозволяє широко використовувати його у промисловому виробництві інструментів з алмазним покриттям. Результати дослідження показали, що при відстані між нитками розжарення $T_w = 10$ мм однорідність поля повітряного потоку була найкращою, а розташування ниток розжарення з відстанями $T_{w1} = 14$ мм, $T_{w2} = 10$ мм, $T_{w3} = 10$ мм, $T_{w4} = 8$ мм, $T_{w5} = 8$ мм сприяє збільшенню продуктивності нанесення покриття. Експериментальні результати узгоджуються з результатами моделювання і доведено, що вони можуть використовуватися для керування реальним виробничим процесом.

***Ключові слова:** відстань між нитками розжарення, однорідність, моделювання, поле повітряного потоку.*

ВСТУП

За допомогою технології гібридного фізико-хімічного осадження з парової фази (Hybrid Physical-Chemical Vapor Deposition, HFCVD) було проведено багато досліджень з підготовки алмазних покриттів, включаючи процеси попередньої обробки [1–3], процеси осадження [4–6] і розробку обладнання. Дотепер найважча і актуальна проблема полягає в тому, як поліпшити однорідність алмазного покриття після посилення адгезії між покриттям і підкладкою, що дозволило б застосувати цю технологію у масовому виробництві. Однорідність поля повітряного потоку при осадженні була основним напрямком досліджень.

ОСНОВНА МОДЕЛЬ CVD І ПРИНЦИП АЛГОРИТМУ

У механіці рідини [7, 8] рівняння нерозривності і імпульсне рівняння разом називають рівняннями Нав'є-Стокса (N-S). Після розв'язання рівняння N-S, можна вирішити задачу для потоку і отримати інформацію про поле потоку.

Рівняння нерозривності потоку також є рівнянням збереження маси, яке можна представити диференціальним виразом

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho u_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho u_z)}{\partial z} = 0. \quad (1)$$

Рівняння збереження імпульсу описується як швидкість зміни моменту імпульсу, що дорівнює сумі зовнішніх сил, що діють на нього, а диференціальне вираз рівняння збереження імпульсу має вигляд

$$\begin{cases} \frac{\partial(\rho u_x)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u_x \vec{u}) = -\rho \frac{\partial(p)}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + \rho f_x; \\ \frac{\partial(\rho u_y)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u_y \vec{u}) = -\rho \frac{\partial(p)}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + \rho f_y; \\ \frac{\partial(\rho u_z)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u_z \vec{u}) = -\rho \frac{\partial(p)}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} + \rho f_z. \end{cases} \quad (2)$$

У наведеній вище формулі: u_i – координатна складова швидкості; t – час, с; ρ – густина; p – тиск, що діє на мікроелемент рідини; τ_{ij} – компонент в'язкого напруження; f_i – масові сили, м/с^2 , где $i/j = x, y, z$.

У програмному забезпеченні FLLUENT, що використовували в цій роботі, застосовано метод скінченних елементів (МСЕ) [9–11]. Для цього методу характерний ясний фізичний зміст і швидке розв'язання дискретних рівнянь. В системі осадження алмазів HFCVD основними компонентами газу є ацетон і водень (газоподібний водень становить від 96 до 98 %). Отже, ацетон ігнорується при аналізі, враховується тільки наявність водню. Відповідно до швидкості потоку водню, що дорівнювала 1000 мл/хв, і радіуса впускного отвору $R = 2,5$ мм, була розрахована швидкість потоку газу на впуску – 0,88 м/с. Розмір реакційної камери становив $\varnothing 460 \times 380$ мм, а коефіцієнт в'язкості руху водню – $2,41 \times 10^{-4} \text{ м}^2/\text{с}$. Стан потоку газу в реакційній камері з осадженою методом HFCVD алмазною плівкою характеризується як нестисливий ламінарний потік [12, 13].

ГЕОМЕТРИЧНІ МОДЕЛІ І РОЗБИВКА НА СІТКУ СКІНЧЕННИХ ЕЛЕМЕНТІВ

Створення геометричних моделей

Автори використовували програмне забезпечення SolidWorks для створення чверті геометричної моделі реактора HFCVD з двома площинами симетрії, що зменшило обсяг обчислень і дозволило заощадити їх час. Модель показана на рис. 1.

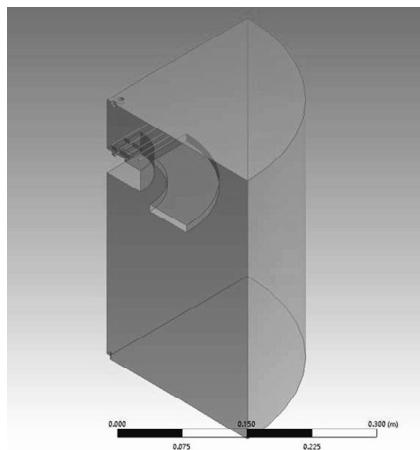


Рис. 1. 1/4 моделі системи HFCVD.

Матеріалом нитки розжарення служив вольфрам (W), розглядали всього 10 ниток. Осьовим напрямком була вісь Z, напрямком їх розташування – вісь X. Підкладка представляла собою пластину розмірами 16×16×4,5 мм з вольфрамового твердого сплаву із вмістом Co 6 %. Її поміщали на підкладковий стіл з молібдену (Mo) розміром $\varnothing 55 \times 30$ мм. Після розгляду результатів моделювання і попередніх експериментів автори визначили параметри процесу осадження (концентрація джерела вуглецю становила 2 %, тиск осадження – 3 кПа, відстань між нитками і підкладкою – 5 мм). Змінні фактори переважно враховували вплив відстані між нитками T_w на поле повітряного потоку на поверхні підкладки.

Розбивка на сітку скінченних елементів

Розбивка на сітку скінченних елементів ділить підкладку, верхню поверхню столу підкладки і нитку розжарення за допомогою локального згущення для поліпшення якості сітки і точності розрахунку. Сіткова модель площі поверхні підкладки і часткового виду області згущення поверхні столу були такими, як показано на рис. 2. Кількість елементів після розбивки становило 2783522, а кількість вузлів – 497300.

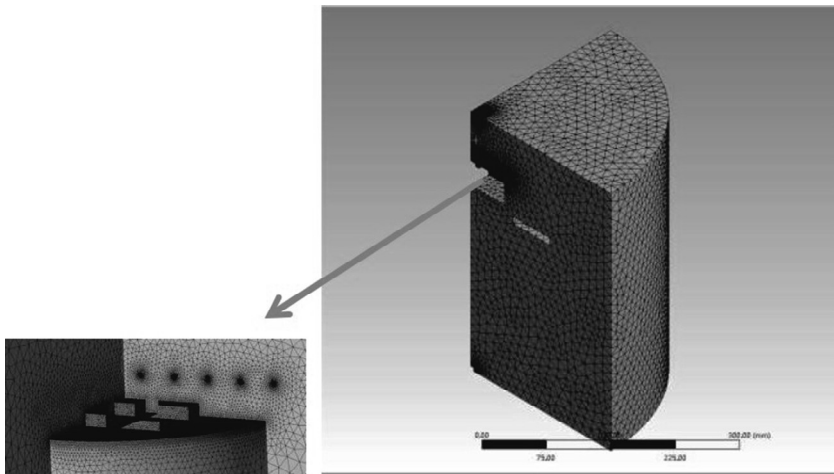


Рис. 2. Схематичне зображення імітаційної моделі після створення сітки.

Параметри, що задаються

У табл. 1 наведено значення властивостей матеріалів, прийняті при моделюванні.

Таблиця 1. Фізичні властивості різних матеріалів для моделювання

Елемент	Матеріал	Теплопровідність λ , Вт/(м·К)	Питома теплоємність c , Дж/(кг·°C)	Густина ρ , кг/м ³	Коефіцієнт в'язкості ν , м ² /с
Реакційний газ	H ₂	0,1289	7243	0,0899	2,41·10 ⁻⁴
Нитка	W	174	132	19300	–
Підкладка	YG6	92,11	188,4	14600	–
Підкладковий стіл	Mo	138	251	10240	–

Після того, як було задано всі параметри, виконували ініціалізацію, а потім починали розрахунок. Кількість ітераційних кроків було зведено до 150–170. Криві збіжності показано на рис. 3.

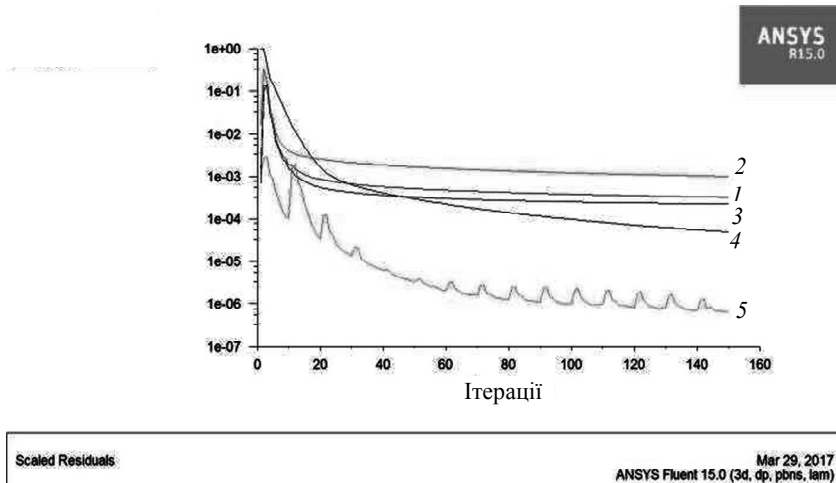


Рис. 3. Графік масштабованих нев'язок: швидкість потоку в напрямку осей Y (1), Z (2), X (3), нерозривність (4), енергія (5).

РЕЗУЛЬТАТИ ТА АНАЛІЗ МОДЕЛЮВАННЯ

Вплив різної відстані між нитками розжарення на поле повітряного потоку

Відстань між нитками розжарення впливає тільки на розподіл поля повітряного потоку на поверхні підкладки, при цьому інші параметри осадження не змінюються. Досліджували тільки вплив кроку ниток розжарення на поле повітряного потоку на поверхні підкладки при зміні відстані між нитками. Параметрами ниток розжарення були: крок нитки $T_w = (8, 10, 12, 14)$ мм, кількість ниток $N = 10$ і відстань між нитками розжарення і підкладкою $H_y = 5$ мм.

На рис. 4 показано розподіл поля потоку при різних відстанях між нитками T_w . Ліворуч представлено розподіл швидкості поля повітряного потоку у всій порожнині паралельно напрямку ниток і перпендикулярно напрямку ниток, а праворуч у збільшеному масштабі – розподіл швидкості потоку в області розташування ниток, підкладок і столу для підкладок. Напрямок Z був паралельним напрямку ниток розжарення, напрямком X – вертикальним до напрямку ниток розжарення, а швидкість потоку в вузлах в напрямку X і напрямку Z відображена на центральній лінії поверхні підкладки. Криві розподілу швидкостей потоку в позитивному напрямку осі координат X і негативному напрямку осі Z зображено на рис. 5 і 6 відповідно. Тут точкові графіки характеризують зміну швидкостей потоку на поверхні підкладки вздовж осей X (при $x = 0-0,008$ м і $x = 0,013-0,029$ м) і Z (при $z = -0,008-0,0$ м і $z = -0,029-(-0,013)$ м).

З полів швидкостей потоків видно, що, коли відстань між нитками T_w мала, розподіл швидкості на поверхні підкладки не є рівномірним: в середині швидкість потоку мала, а на кромці висока. Коли T_w становить 8 мм, це явище є найбільш очевидним. Це пов'язано з тим, що газ протікає через нитку, створюючи явище теплового потоку, і чим менший крок нитки, тим сильніше

явище гарячого потоку між нитками, а явище сильного теплового потоку зменшує швидкість потоку газу між нитками і збільшує його нерівномірність. При малій відстані T_w висока температура підкладки також несприятлива для потоку газу, і підкладка також блокує газ, так що газ протікає через поверхню підкладки, а потім обтікає, збільшуючи швидкість потоку на крайовій частині. Отже, швидкість потоку над підкладкою значно нижче, а швидкість потоку до краю підкладки вища. У міру того, як відстань T_w збільшується, тепловий потік навколо нитки значно зменшує швидкість потоку текучого середовища між нитками, і поле повітряного потоку над підкладкою має тенденцію бути однорідним. На рис. 5 і 6 видно, що коли відстань між гарячими нитками становить 8 мм, швидкість потоку над поверхнею підкладки в напрямку X коливається, причому флуктуація швидкості потоку є найменшою, коли T_w становить 10 мм. При відстані між нитками 14 мм швидкість потоку на краю підкладки значно більша, ніж в середній частині. Коли відстань між нитками становила 8 мм, швидкість потоку газу, незалежно від того, в напрямку X або Z , поступово збільшувалася від центру до краю підкладки. Решта три випадки були відносно однорідними, а швидкість потоку і однорідність не сильно відрізняються.

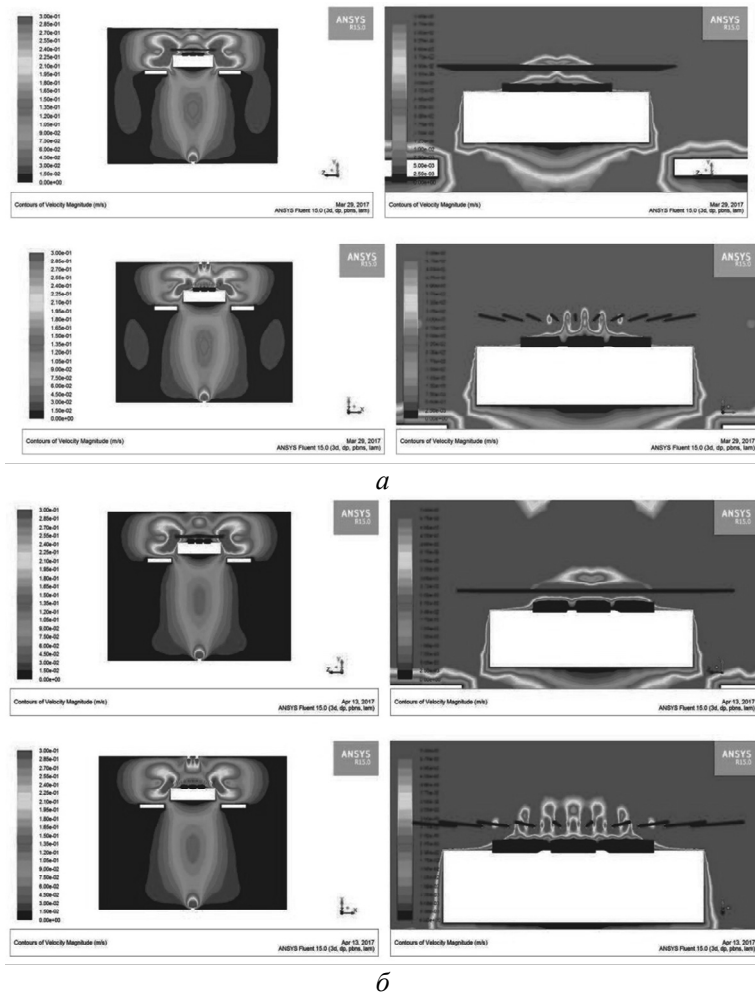


Рис. 4. Вплив T_w на поле повітряного потоку на поверхні підкладки: 8 (а), 10 (б), 12 (в), 14 (г) мм.

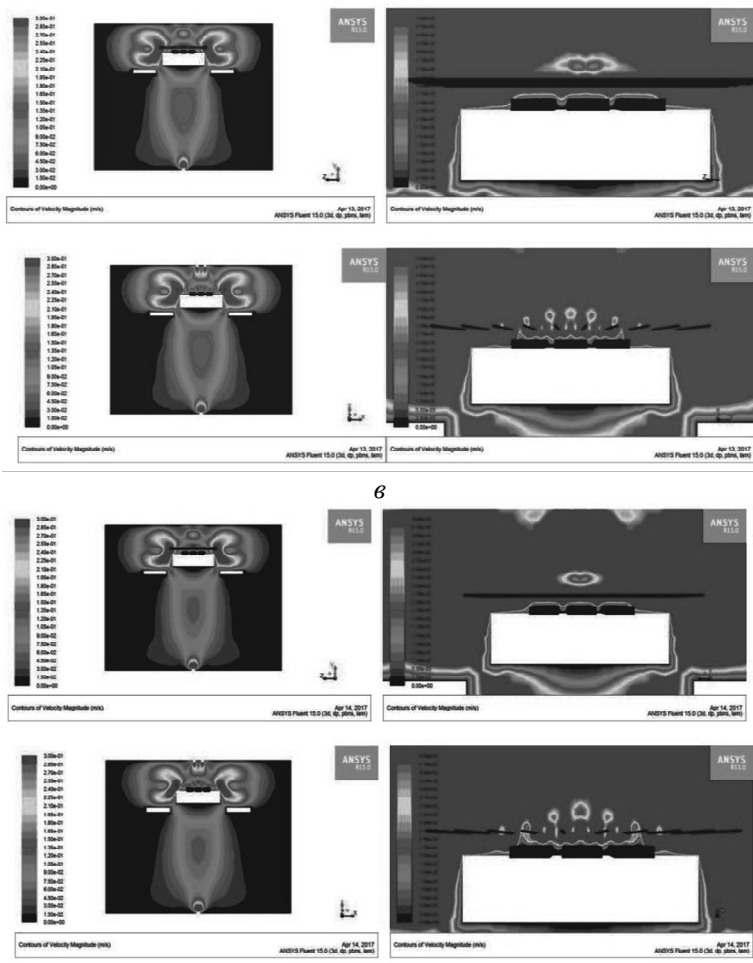


Рис. 4. (Продовження.)

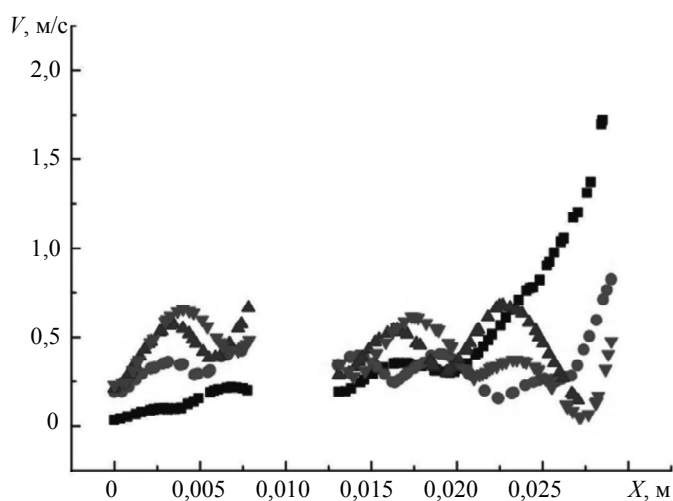


Рис. 5. Вплив T_w на поле поверхневого потоку на підкладці довж напрямку X : $T_w = 0,008$ (■), 0,01 (●), 0,012 (▲), 0,014 (▼) м.

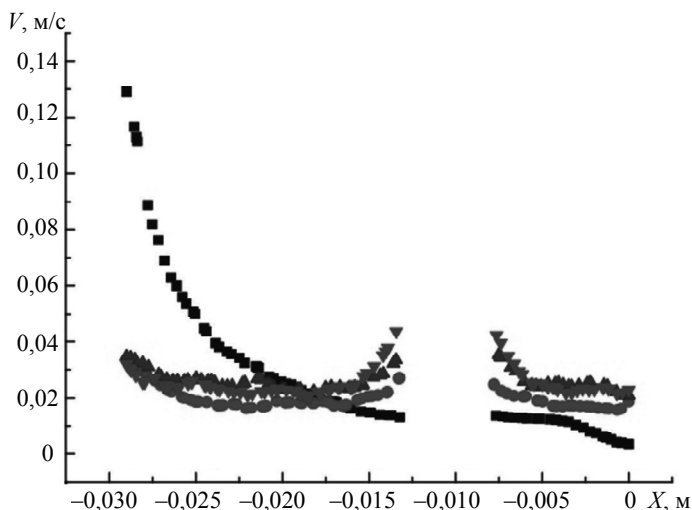


Рис. 6. Вплив T_w на поле поверхневого потоку на підкладці вдвож напрямку Z : $T_w = 0,008$ (■), $0,01$ (●), $0,012$ (▲), $0,014$ (▼) м.

Щоб порівняти рівномірність швидкості потоку газу над підкладкою, вибирали значення швидкості потоку в позитивному напрямку осі X і негативному напрямку осі Z і розраховували стандартні відхилення (табл. 2).

Таблиця 2. Стандартне відхилення швидкості в напрямках X та Z при різній відстані між нитками

T_w , мм	Стандартне відхилення швидкості потоку в напрямку X , м/с	Стандартне відхилення швидкості потоку в напрямку Z , м/с
8	0,036712115	0,023968725
10	0,012054936	0,003885982
12	0,014790619	0,003548856
14	0,015451113	0,004928088

З таблиці видно, що однорідність поля повітряного потоку була найгіршою, коли відстань між нитками T_w була 8 мм. Коли відстань між нитками перевищує 8 мм, поле повітряного потоку над підкладкою, очевидно, є однорідним, і рівномірність швидкості потоку газу не сильно відрізняється. Загальна однорідність була найкращою, коли крок T_w нитки розжарення дорівнював 10 мм.

Вплив різної відстані між нитками на поле повітряного потоку

Щоб дослідити умови покращення однорідності поля потоку на поверхні підкладки, автори вибрали нитки розжарення, розташовані з різними інтервалами, і вивчили вплив на поле повітряного потоку навколо підкладки. Відповідно до діаметра підкладкового столу і впливу розташування нитки розжарення в полі повітряного потоку навколо підкладки було обрано п'ять комбінацій відстаней між нитками розжарення. Відстань між симетричною стороною нитки розжарення від середини до зовнішньої сторони було позначено T_{w1} , T_{w2} , T_{w3} , T_{w4} , T_{w5} . Номер першої групи позначили 1#, а відстань між нитками дорівнювала: $T_{w1} = 14$ мм, $T_{w2} = 12$ мм, $T_{w3} = 10$ мм, $T_{w4} = 10$ мм, $T_{w5} =$

8 мм; номер другої групи – 2#, а відстань між нитками: $T_{w1} = 14$ мм, $T_{w2} = 12$ мм, $T_{w3} = 12$ мм, $T_{w4} = 10$ мм, $T_{w5} = 8$ мм; номер третьої групи – 3#, відстань між нитками: $T_{w1} = 14$ мм, $T_{w2} = 10$ мм, $T_{w3} = 10$ мм, $T_{w4} = 8$ мм, $T_{w5} = 8$ мм; номер четвертої групи – 4#, відстань між нитками: $T_{w1} = 12$ мм, $T_{w2} = 10$ мм, $T_{w3} = 10$ мм, $T_{w4} = 8$ мм, $T_{w5} = 8$ мм; номер п'ятої групи – 5#, відстань між нитками: $T_{w1} = 10$ мм, $T_{w2} = 10$ мм, $T_{w3} = 8$ мм, $T_{w4} = 8$ мм и $T_{w5} = 8$ мм.

Аналогічно рис. 4, на рис. 7 показано розподіл поля повітряного потоку в реакційній камері для п'яти комбінацій розташувань ниток розжарення.

Графіки швидкості потоку на поверхні підкладки вздовж напрямків X і Z в залежності від розташування ниток розжарення представлено на рис. 8 і 9.

Як видно з рис. 7–9, вплив розташування ниток розжарення на швидкість потоку газу на поверхні підкладки відносно невеликий. В основному це впливає на швидкість потоку на поверхні підкладки в напрямку X , де швидкість потоку газу змінюється. Навпаки, швидкість потоку газу на поверхні

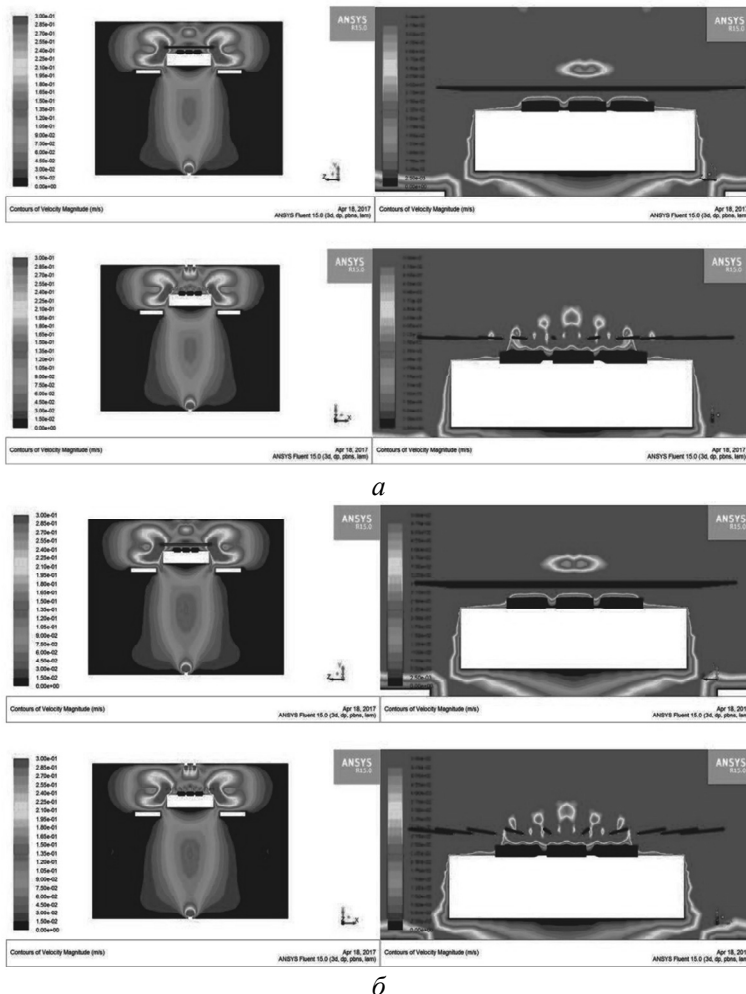


Рис. 7. Поле повітряного потоку на поверхні підкладки з нерівномірно розташованими нитками розжарення: а – 1# ($T_{w1} = 14$ мм, $T_{w2} = 12$ мм, $T_{w3} = 10$ мм, $T_{w4} = 10$ мм, $T_{w5} = 8$ мм); б – 2# ($T_{w1} = 14$ мм, $T_{w2} = 12$ мм, $T_{w3} = 12$ мм, $T_{w4} = 10$ мм, $T_{w5} = 8$ мм); в – 3# ($T_{w1} = 14$ мм, $T_{w2} = 10$ мм, $T_{w3} = 10$ мм, $T_{w4} = 8$ мм, $T_{w5} = 8$ мм); г – 4# ($T_{w1} = 12$ мм, $T_{w2} = 10$ мм, $T_{w3} = 10$ мм, $T_{w4} = 8$ мм, $T_{w5} = 8$ мм); д – 5# ($T_{w1} = 10$ мм, $T_{w2} = 10$ мм, $T_{w3} = 8$ мм, $T_{w4} = 8$ мм, $T_{w5} = 8$ мм).

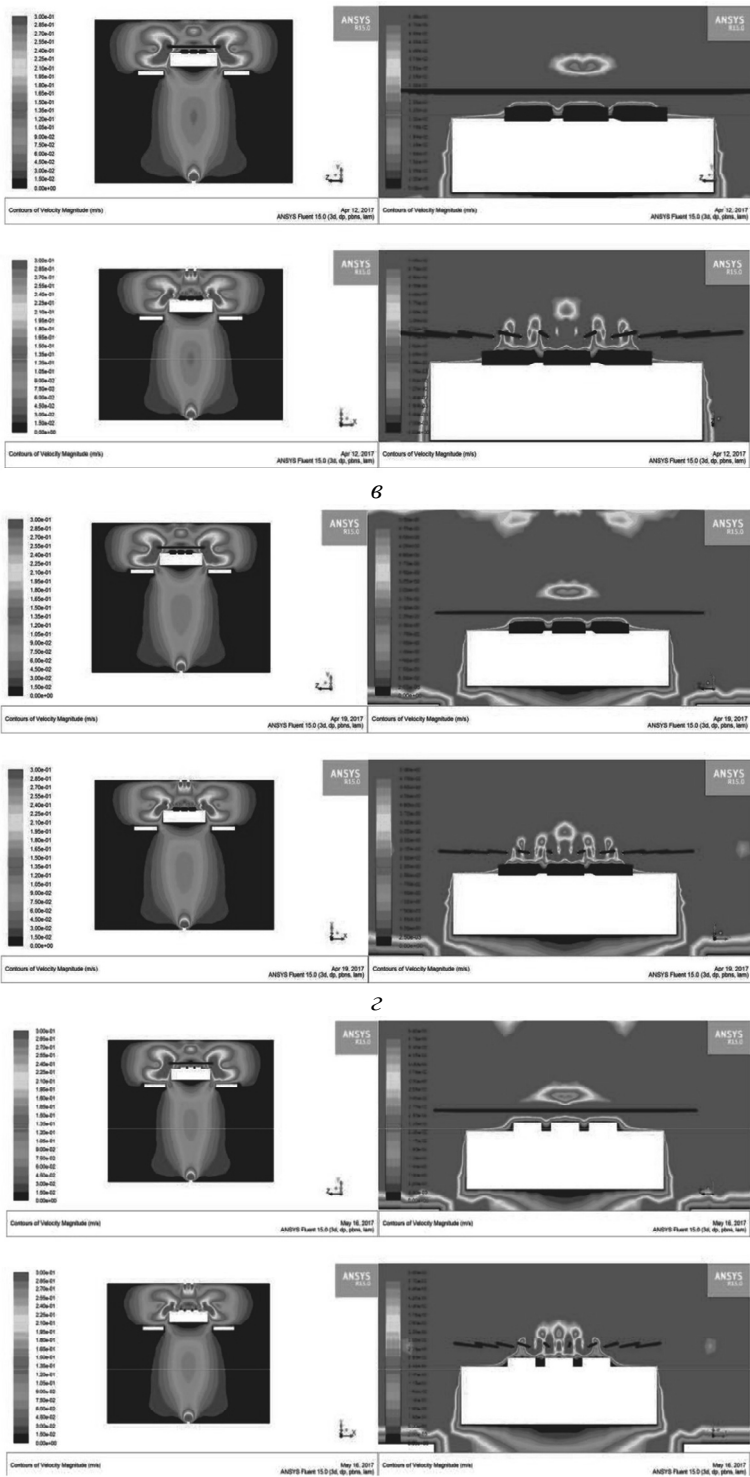


Рис. 7. (Продовження).

підкладки коливалася менше в разі розташування 4#. У разі розташуванні 3# швидкість потоку газу з двох сторін підкладки коливалася менше, але швид-

кість потоку газу в середині підкладки коливалася сильно. Однак флуктуація швидкості потоку на поверхні підкладки в напрямку Z була невеликою, на неї мало впливали зміни в розташуванні ниток розжарення.

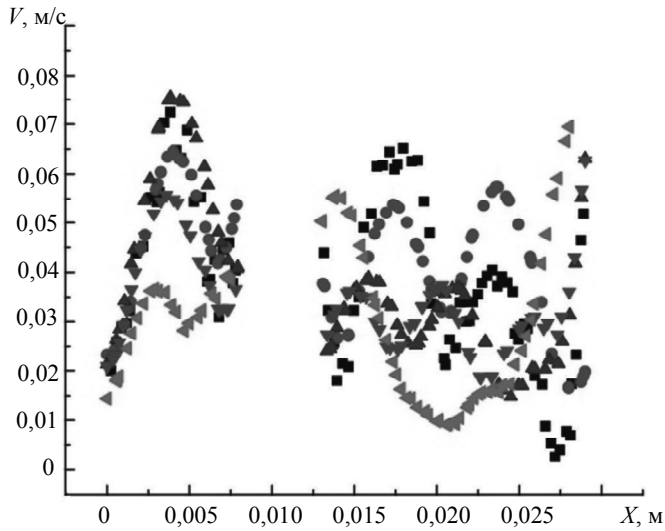


Рис. 8. Вплив нерівномірного розташування ниток розжарення на швидкість потоку на поверхні підкладки вздовж напрямку X : 1# (■), 2# (●), 3# (▲), 4# (▼), 5# (◄).

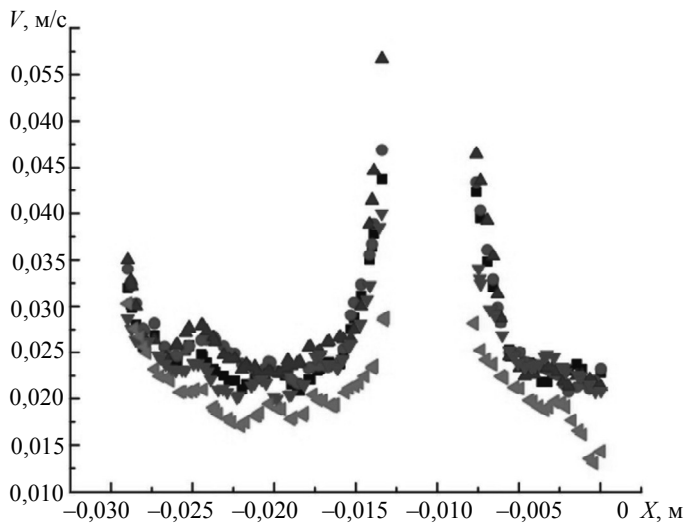


Рис. 9. Вплив нерівномірного розташування ниток розжарення на швидкість потоку на поверхні підкладки вздовж напрямку Z : 1# (■), 2# (●), 3# (▲), 4# (▼), 5# (◄).

У табл. 3 показано стандартне відхилення значень швидкості потоку в позитивному напрямку осі X і негативному напрямку осі Z в різних випадках нерівномірного розташування ниток напруження. Однорідність швидкості потоку може бути безпосередньо оцінена за стандартним відхиленням.

З табл. 3 видно, що швидкість потоку газу над підкладкою була невеликою при різному розташуванні п'яти ниток, і однорідність розподілу потоку не сильно відрізнялася. В цілому, швидкість потоку в напрямку осі Z є більш рівномірною. Навпаки, рівномірність швидкості потоку в обох напрямках була краще в 4#. Але загальна ситуація не сильно відрізнялася.

Таблиця 3. Стандартне відхилення швидкості потоку в напрямках X та Z при нерівномірному інтервалі між нитками розжарення

Зразок	Стандартне відхилення швидкості потоку в напрямку X, м/с	Стандартне відхилення швидкості потоку в напрямку Z, м/с
1#	0,017079606	0,004928088
2#	0,012758028	0,005265566
3#	0,016306462	0,006451551
4#	0,010048487	0,00408392
5#	0,018401782	0,00342685

Обговоривши результати моделювання, автори виявили, що все ще є можливості для поліпшення однорідності розподілу потоку, коли відстань між нитками вибрано в двох розташуваннях – 3# і 5#, а кількість підкладок в разі розташування 3# збільшило простір, який дозволяє збільшити масове виробництво. Випадок 5# більше підходить для одночасного осадження на дев'ять підкладках. Отже, проблема, яка повинна бути вирішена на більш пізньому етапі, полягає в тому, щоб зробити поле повітряного потоку в напрямку осі X більш рівномірним.

Особливості експерименту

У відповідності з фактичними лабораторними умовами експериментальні параметри вибирали таким чином: кількість ниток дорівнювала $N = 10$, а відстань T_w від середини до двох сторін становила 14, 10, 10, 8 і 8, а відстань між підкладками $T_y = 8$ мм. Відстань нитки розжарення від підкладки становила $H_y = 5$ мм, а швидкість потоку газу на вході була обрана рівної 0,85 м/с. Потім на основі принципу симетрії було обрано чотири підкладки для експериментів з нанесення алмазного покриття. Положення розміщення підкладок показано на рис. 10.

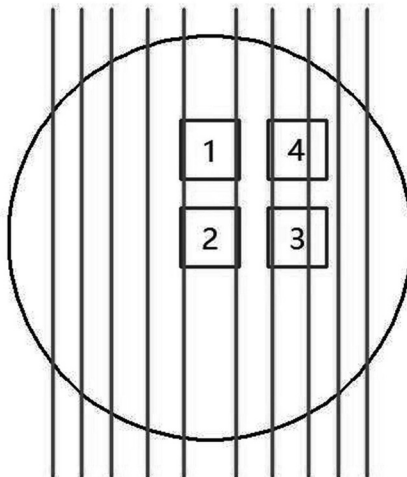


Рис. 10. Розміщення підкладок.

Перед осадженням підкладку попередньо обробляють кислотно-основним травленням. Попередньо оброблену підкладку потім поміщали в апарат для

осадження HFCVD відповідно до конструктивних параметрів і наносили алмазне покриття, використовуючи параметри процесу осадження (табл. 4).

Таблиця 4. Параметри підготовки алмазного покриття

Параметри	Процес карбонізації нитки розжарення	Процес нанесення покриття
Витрата газу, мл/хв	1000	1000
Вміст водню, %	4	2
Температура нитки, °C	2100±100	2300±100
Температура підкладки, °C	–	700–850
Відстань між нитками, T_w	3#	3#
Відстань між ниткою розжарення і підкладкою, мм	–	5
Відстань між підкладками, мм	8	8
Фоновий вакуум, Па	≤ 4	≤ 4
Потужність нитки розжарення, кВт	8	10
Реакційний тиск, кПа	6	3
Час процесу, хв	120	240

Адгезію алмазного покриття CVD перевіряли методом індентування з використанням цифрового твердоміра ТН903. Поверхню алмазного покриття спостерігали на скануючому електронному мікроскопі S-3400. Алмазне покриття було перевірено за допомогою рентгено-дифракційного аналізу. Рівномірність росту алмазу і адгезію покриття до підкладки порівнювали на різних підкладках і в різних місцях однієї і тієї ж підкладки.

Експериментальні результати і аналіз

СЕМ-спостереження за морфологією алмазного покриття. На рис. 11 представлено СЕМ-зображення морфології алмазного покриття на поверхні підкладки в середній частині для чотирьох видів розташування ниток розжарення. Видно, що розмір зерен і їхнє розташування (див. рис. 11, *a*) були більш однорідними, а розміри зерен і морфологія інших зразків (див. рис. 11, *b–z*) значно відрізнялися. Однак морфологія чотирьох зразків мала багато спільного. Наприклад, існує багато кристалічних площин (111) та (220), кристали алмазу були прозорими, краї кристалів і орієнтація були чіткими. Розмір зерен був великим, зерна були щільно упаковані, не було отворів і ізольованих зерен, якість покриття була хорошим, а шорсткість поверхні була великою.

На рис. 12 представлено СЕМ-зображення морфології алмазного покриття на поверхні підкладки в чотирьох різних місцях, видно, що морфологія алмазу переважно однакова, зерна алмазу були прозорими, краї кристала були чіткими і мали чітку орієнтацію, і загалом були присутні грані кристалів (111) і (220). Зерна були згруповані і поєднані один з одним з утворенням полікристалів. Розмір зерен був крупним, кристалічні зерна були щільно упаковані, пор і ізольованих зерен не було, якість покриття була хорошою, а шорсткість поверхні – великою.

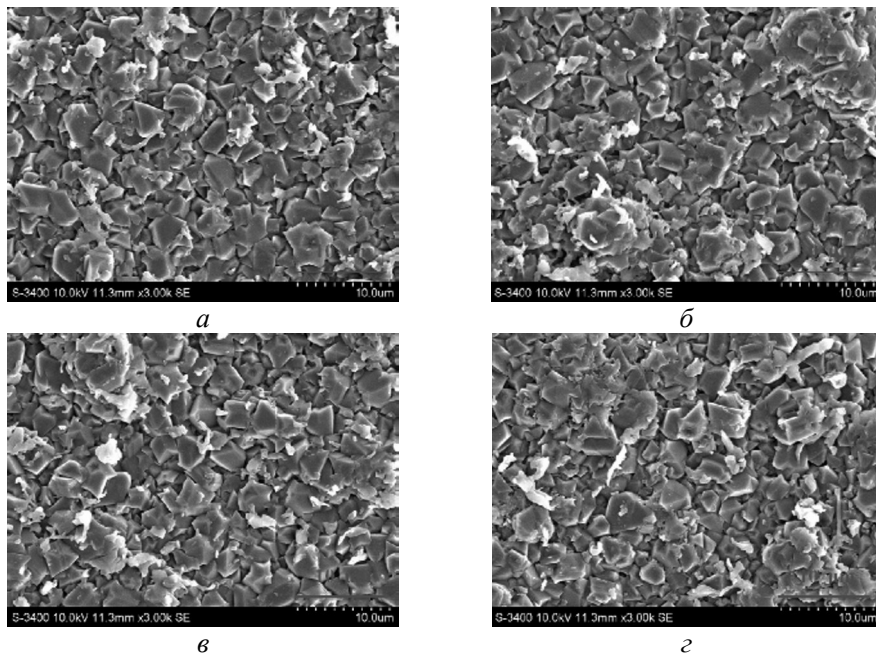


Рис. 11. СЕМ-зображення нанесених покриттів при різних розташуваннях ниток розжарення.

В цілому, розмір алмазного зерна в зразках 1# (рис. 12, а) і 2# (рис. 12, в) був трохи більшим, ніж у 3# (рис. 12, г) і 4# (рис. 12, б). І щільність алмазних зерен у зразках 1# і 2# була нижчою, ніж у 3# і 4#. Це вказувало на те, що швидкість потоку газу була дещо нижчою. Однак морфологія алмазу на поверхні підкладки, паралельній напрямку ниток, виявилася подібною.

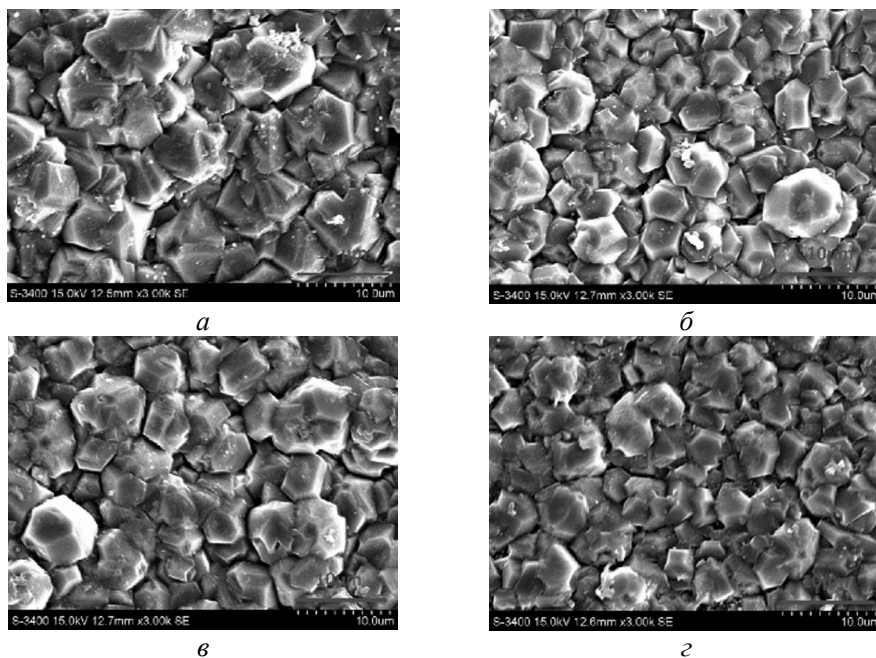


Рис. 12. СЕМ-морфологія алмазних покриттів, нанесених при різних положеннях ниток розжарення: 1# (а); 2# (в); 3# (г); 4# (б).

Випробування на інденування та аналіз алмазного покриття на матриці осадження в різних зонах. Метод інденування був використаний для перевірки ефективності зчеплення покриття з підкладкою. Використовували вимірювач оптичної твердості HBVU-1875 з навантаженням 588 Н і часом навантаження 10 с. На рис. 13 показано СЕМ-фотографію відбитка алмазного покриття, підкладки якого знаходилися в різних положеннях.

Як видно з рис. 12, відбитки інденування алмазних CVD покриттів в чотирьох різних місцях були в основному схожі. Краї заглиблень були чіткими, а форма правильною. Серед них краї відбитків зразків 1# (а) і 2# (б) характеризувалися слабким руйнування алмазного шару, краї відбитків 3# (в) і 4# (г) були чіткими, без тріщин і відшаровування покриття, що вказувало на те, що алмазне покриття було міцно поєднано з підкладкою.

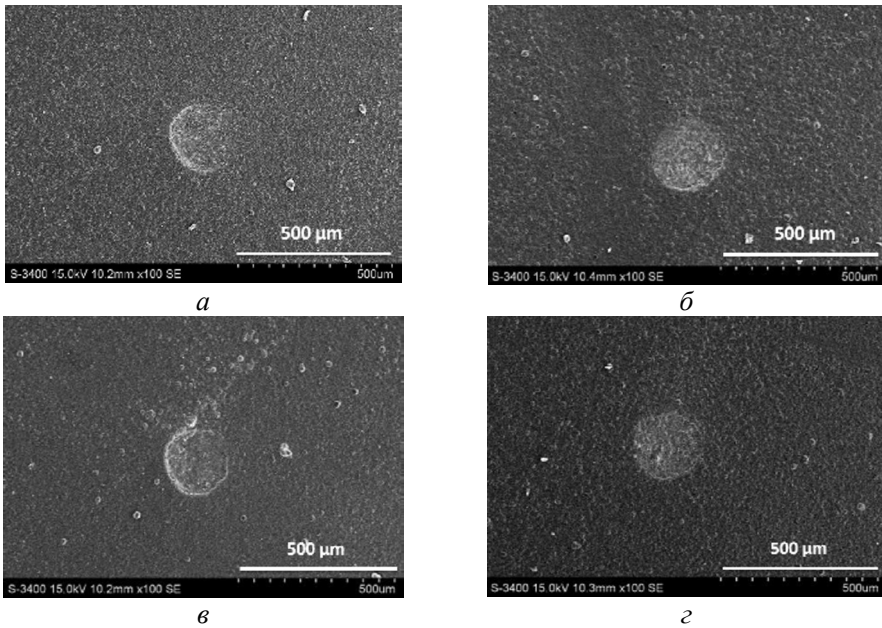


Рис. 13. Відбитки інденування алмазних CVD покриттів, нанесених в різних положеннях.

Рентгеноструктурний аналіз алмазних покриттів, нанесених в різних зонах. На рис. 14 показано рентгенограми алмазних покриттів, нанесених в різних місцях. В ході дослідження виявлено площини кристалів (111), (220) і (311) при кутах 2θ , рівних $43,9^\circ$, $75,3^\circ$ і $91,5^\circ$ відповідно. Таким чином, максимальний кут розгортки становив 100° , а швидкість розгортки складала $4^\circ/\text{хв}$. На рис. 14 видно, що графітові піки в алмазних покриттях чотирьох зразків відсутні, характерні піки алмазу чіткі і гострі, чистота алмаза висока, і обидва мають хорошу орієнтацію зерна. З'явилися три характерні піки алмазу, і кристалічні площини (111) і (220) мають високу інтенсивність дифракції, в той час як кристалічна площина (311) має низьку інтенсивність дифракції, що вказує на те, що алмазні зерна мають в основному (111) і (220) кристалічні площини. Серед чотирьох зразків алмазного покриття найбільша інтенсивність дифракції граней кристалів (111) і (220) у зразку 2# (б), за яким слідує 1# (а) і 3# (г) та, нарешті, зразок 4# (в), але різниця незначна, через те, що зразки 1# і 2# трохи грубіші, а орієнтація зерен дуже хороша, але загальна різниця незначна. Кристалічна форма чотирьох зразків дуже гарна, тому дифракційні піки відносно сильні.

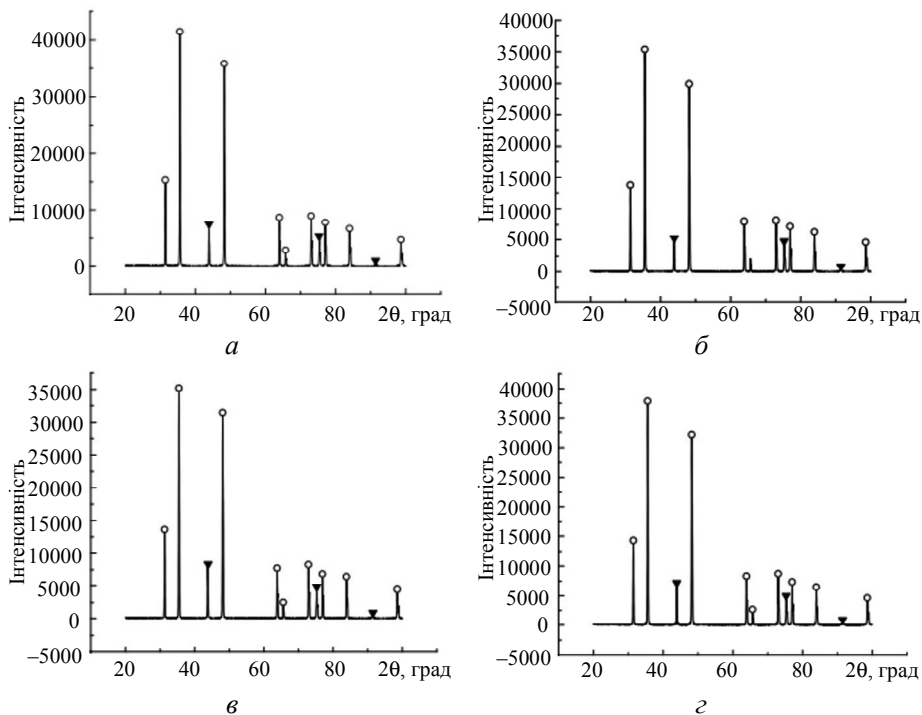


Рис. 14. Рентгенограми алмазних покриттів, нанесених в різних положеннях. ○ – WC, ▼ – алмаз.

У поєднанні з визначенням мікроскопічних морфологічних та індентуючих властивостей алмазного покриття, нанесеного в реальному експерименті, можна зробити непряму оцінку однорідності якості алмазного покриття, нанесеного в різних місцях. З дифракційних картин SEM і XRD алмазного покриття можна бачити, що алмазне покриття, отримане за допомогою комп'ютерної оптимізації умов осадження, було переважно однорідним, що узгоджується з результатами моделювання. Таким чином, це вказує на те, що фактично комп'ютерним моделюванням можна поліпшити однорідність алмазного покриття.

Морфологія поверхні алмазу в різних точках однієї і тієї ж підкладки. Досліджували морфологію поверхні алмазу в різних точках зразка 2#. Було вибрано п'ять точок на зразку 2#, які представляють собою положення чотирьох носиків інструменту і положення центру інструменту (A, B, C, D і E).

На рис. 15 представлено SEM-зображення у п'яти точках алмазного покриття.

З рис. 15 видно, що форма алмазів в чотирьох положеннях A, B, C і D інструменту загалом однакова, і частинки алмазу еквівалентні за розміром, але розмір частинок алмазу в частині E в позиційному покритті трохи менший, ніж в інших місцях, а щільність упаковки частинок трохи більша, ніж в інших чотирьох позиціях. У поєднанні з попереднім розподілом поля повітряного потоку, завдяки "ефекту гарячого дроту" і положенням, швидкість потоку в центрі поверхні підкладки також була трохи меншою, а положення далеко від центру було вищим. Взаємодія поля повітряного потоку робить щільність зародкоутворення алмазу в центральній області більшою, швидкість росту відносно низькою, кластери і розміри зерен невеликими, щільність упаковки зерен достатньо великою. Загалом поверхня алмазів є однорідною, а їх щільність високою. У практичних застосуваннях ріжуча кромка інструменту з

алмазним покриттям розташована в чотирьох кутах інструменту. Отже, рівномірність росту алмазу на ріжучій кромці і міцність з'єднання між покриттям і підкладкою істотно впливають на продуктивність і стабільність інструменту. Після осадження продуктивність інструменту з покриттям краща.

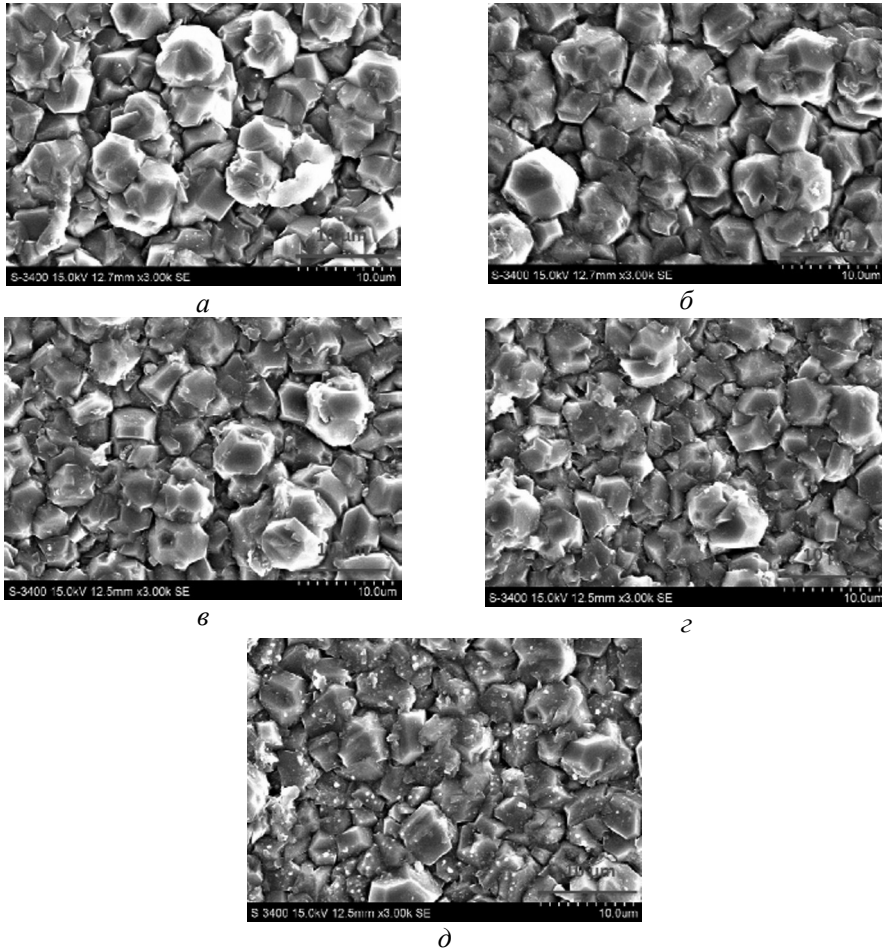


Рис. 15. СЕМ-зображення морфології алмазу: А (а); В (б); С (в); D (г); E (д).

ВИСНОВКИ

З результатів моделювання видно, що коли нитки розжарення розташовується на однаковій відстані, що дорівнює 10 мм, поле повітряного потоку на поверхні підкладки є відносно однорідним.

Явище “теплового опору” або “тепла навколо потоку”, що виникає поблизу нитки розжарення, може сильно вплинути на однорідність поля повітряного потоку на поверхні підкладки. Швидкість потоку над підкладкою збільшується з відстанню між нитками розжарення. Коли крок ниток становить 10 мм або більше, однорідність швидкості потоку газу поліпшується, і різниця стає невеликою.

Коли відстань між нитками становить $T_{w1} = 14$ мм, $T_{w2} = 10$ мм, $T_{w3} = 10$ мм, $T_{w4} = 8$ мм, $T_{w5} = 8$ мм, кількість підкладок можна збільшувати, що дозволяє застосувати більш масове виробництво. Кроки ниток $T_{w1} = 10$ мм, $T_{w2} = 10$ мм, $T_{w3} = 8$ мм, $T_{w4} = 8$ мм, $T_{w5} = 8$ мм більш придатні для одночасного осадження дев'яти підкладок.

Однорідність алмазу на чотирьох підкладках і в п'яти положеннях центральної підкладки були хорошими, чистота алмаза була високою, а міцність зчеплення алмазного покриття та підкладки мала тенденцію до однорідності. Експериментальні результати узгоджуються з результатами моделювання, що вказує на те, що моделювання має важливе значення для управління експериментом і його результати можуть бути використані для реального виробництва.

ФІНАНСУВАННЯ

Національний фонд природничих наук Китаю (№ 5172278), Пекінський фонд природничих наук спільного проекту (№ 15L00025), Пекінська комісія з освіти і досягнення в області науки і техніки (№ 2010-583).

Fuming Deng, Cen Hao, Zhenhai Guo, Shuang Wang, Xiang Bo,
Qing Lei
Institute of Super-hard Cutting Tool Materials,
China University of Mining and Technology, Beijing, P.R. China
Simulation study on airflow field uniformity of HFCVD
deposition system by filament spacing

Hot filament CVD method had many advantages such as simple equipment, easy operation and low expenses, which made it the most widely used method in industrial producing diamond coated tools. The results showed that when T_w was 10mm, the uniformity of airflow field was the best; when the filament spacing was $T_{w1} = 14$ mm, $T_{w2} = 10$ mm, $T_{w3} = 10$ mm, $T_{w4} = 8$ mm, $T_{w5} = 8$ mm, it could be produced in larger quantities. The experimental results were consistent with the simulation results, and it was proved that the simulation results could be used to guide the actual experiment.

Keywords: filament spacing, uniformity, simulation, airflow field.

1. Wei Q., Yu Z.M., Ashfold M.N.R., Ye J., Ma L. Synthesis of micro-or nano-crystalline diamond films on WC-Co substrates with various pretreatments by hot filament chemical vapor deposition. *Appl. Surf. Sci.* 2010. Vol. 256, no. 13. P. 4357–4364.
2. Geng C.L., Tang W.Z., Hei L.F., Liu S.T., Lu F.X. Fracture strength of two-step pretreated and diamond coated cemented carbide microdrills. *Int. J. Refract. Met. Hard Mater.* 2007. Vol. 25, no. 2. P. 159–165.
3. Ma Y. P., Chen M., Sun F.H. Study on the optimization of deposition processing technology of diamond coated tools. *Adv. Mater. Res.* Vols. 69–70. P. 16–19.
4. Lu H., Xu F., Zuo D., et al. Study on deposition process of cemented carbide matrix diamond coating. *J. Mach. Manuf. Autom.* 2013. Vol. 42, no. 5. P. 44–47.
5. Zhao Y. Effect of deposition conditions of diamond coating on cemented carbide substrate on its bonding performance: Diss. Nanjing: Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, 2011.
6. Sun F.H., Chen M. Effect of carbon source concentration on the performance of diamond film coated tools. *Diam. Abrasives Eng.* 2000. no. 5. P. 3–6.
7. Tang J. FLUENT14.0 Super Learning Manual. People's Posts and Telecommunications Press, 2013.
8. Yao P. Numerical simulation of temperature field of hot air heating flow field in tall factory building: Diss. Northeastern University, 2011.
9. Gu R. Fundamental of Finite Difference Method in Fluid Mechanics. Shanghai Jiaotong University Press, 1988.
10. Li R.X. Foundation of finite element method. National Defense Industry Press, 2002.
11. Li R.X. Foundation of finite volume method. National Defense Industry Press, 2005.
12. Heat Transfer / ed. J.P. Holman. Beijing: Mechanical Industry Press, 2005.
13. Zhao Z. Heat Transfer Theory. Beijing: Higher Education Press, 2002.

Надійшла до редакції 10.01.19

Після доопрацювання 21.04.19

Прийнята до опублікування 12.05.20