

文章编号: 1000-5773(2014)06-0686-05

超高压碳化钨顶砧新结构的设计与研究^{*}

韩奇钢,班庆初,易 政,陈梦露,仲济伦,杨文珂,张 强

(吉林大学锻锻工艺研究所,吉林长春 130025)

摘要:基于高压顶砧设计原理——大质量支撑原理,借助有限元仿真技术,开展了一体式超高压碳化钨顶砧新结构的设计与研究。研究表明,采用圆角技术以及凹形支撑区技术,设计出的新结构顶砧能够降低传统碳化钨顶砧拐角处的应力集中效应,同时为碳化钨顶砧提供足够的侧向支撑作用,从而大幅提高顶砧的性能;一体式超高压碳化钨顶砧的传压效率较传统顶砧升高 58.5%、破裂几率较传统顶砧降低 33%、获得的极限腔体压力较传统顶砧升高 44.2%,达到 9.56 GPa。为大腔体、超高压环境下物质新结构与性质研究、新型功能材料的设计与合成研究提供了一种易于操作的可行性方案。

关键词:超高压;顶砧;六面顶压机;高温高压;有限元法

中图分类号: O521.3 **文献标志码:** A

doi: 10.11858/gywlxb.2014.06.007

1 引 言

压力作为一个基本物理条件,可以改变物质的晶体结构、电子结构和原子间的相互作用,获得许多常规条件下无法得到的新物质与新现象,拓展人类认识和改造自然的能力^[1-2]。因此,高压技术在国际上受到高度重视,广泛应用于物理学、地球科学、化学、材料学与生命科学等领域^[3-5]。高压技术能够获得的最高腔体压力值及其允许研究的样品体积一直以来都是高压研究发展过程中最为关心的两个因素。1986年,卡内基研究所地球物理实验室基于金刚石对顶砧技术(Diamond Anvil Cell, DAC),获得了 550 GPa 的静压强,超过地心最大压强 360 GPa^[6],这一静压强的达到,标志着近代高压技术又向前发展了一步。遗憾的是, DAC 技术的样品腔体受金刚石压砧尺寸的限制,一般只能达到几百立方微米,阻碍了很多大体积材料的高压研究,尤其是高压技术在大尺寸样品合成与表征等方面的应用。

为了实现大腔体超高压力的获得, Kawai 等人^[7]成功设计出了 Kawai 式高压装置; Walker 等人^[8]设计出目前使用较多的 Walker 式高压装置; 贺端威等人^[9-11]设计出基于铰链式六面顶压机的 6-8 型高压装置。通过提高二级压砧边长与切角边长的比例,可以提高 Kawai 式高压装置、Walker 式高压模具以及基于铰链式六面顶压机的 6-8 型增压系统等多级高压装置的压力效率,但均存在顶砧和高压腔体组装复杂、实验可靠性差等问题。

为了探寻解决上述问题的可行方案,本研究基于高压顶砧设计原理——大质量支撑原理,借助有限元仿真技术,开展了一体式超高压碳化钨顶砧新结构的设计与研究。期望在不改变铰链式六面顶压机液压系统的前提下,通过改变碳化钨顶砧的几何结构,大幅度地提高六面顶压机的高压腔体可获得的极限腔体压力值。

^{*} 收稿日期: 2014-04-02; 修回日期: 2014-06-05

基金项目: 国家自然科学基金(11204102); 高等学校博士学科点新教师基金(20120061120041); 吉林大学超硬材料国家重点实验室开放课题资助项目(201410)

作者简介: 韩奇钢(1983—),男,博士,副教授,主要从事高压科学与技术研究. E-mail: hanqg@jlu.edu.cn

2 设计原理与几何模型

如图 1 所示,依据顶砧设计原理——大质量支撑原理,当载荷作用在顶砧底面时,将按下式的比例关系,在顶砧砧面上产生超高压力

$$p_1 S_1 = p_2 S_2 + a \tag{1}$$

式中: p_1 为顶砧底面处施加的载荷, S_1 为顶砧底面的面积, p_2 为顶砧砧面所获得的压力, S_2 为顶砧小砧面的面积, a 为传压介质密封边引起的修正值。大质量支撑原理具体体现在高压环境下,整个顶砧对砧面所产生的高压的支撑作用,此作用十分有效地使碳化钨顶砧承受比碳化钨硬质合金材料的抗压强度高得多的压缩应力。

大质量支撑原理在高压技术中得到了广泛的应用,现今在科研和生产中使用的高压装置基本都应用了“大质量支撑原理”,例如 Bridgman 式高压装置、Belt 式高压装置、DAC 技术等。除此以外,这些装置的碳化钨顶砧的砧头多选为截头锥体,因为这是承受轴向载荷的最有利形状,它比同样截面积的圆柱能承受更大的应力。在被截取的平面上,原子具有向锥底方向扇形分布的机械链,在这种情形下,便出现了所谓的固体介质中的应力倍加现象。基于以上原理,本研究设计出了一种一体式超高压碳化钨顶砧新结构(简称新顶砧),它与传统顶砧模型的对比如图 2 所示。

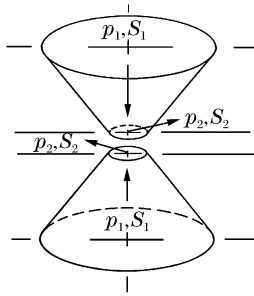


图 1 大质量支撑原理说明示意图

Fig. 1 Sketch of the principle of massive support

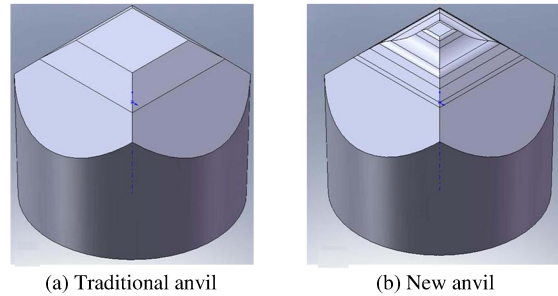


图 2 碳化钨顶砧模型图

Fig. 2 Models of traditional and new WC anvil

3 有限元模型

以生产中正常使用顶砧的实际工况为基础,分别对 SPD 6×12000 型六面顶压机配套使用的传统顶砧和新顶砧进行稳态应力分析。根据顶砧安全使用过程中的实际工况,设定了施加在砧体上的结构载荷,建立了有限元分析模型,顶砧单元分布如图 3 所示。为了便于计算结果的讨论,在砧头上取有限元单元为分析路径,节点位置对比如图 4 所示。

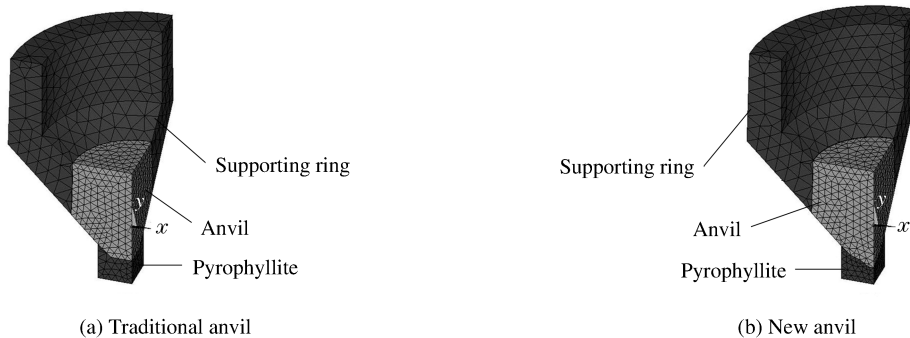


图 3 顶砧有限元力学模型

Fig. 3 The finite element model of anvil



图 4 顶砧有限元模型的节点编号

Fig. 4 Node numbers in the finite element model of anvil

4 计算结果与讨论

通常六面顶液压机的腔体压力由加载油压、传压介质以及高压腔体组装所用材料等因素决定,当传压介质和腔体组装确定后,腔体可获得的压力直接与加载油压相对应(腔体可获得的极限压力由顶砧性能决定)。为开展传统顶砧和新顶砧的传压效率分析,分别对传统顶砧和新顶砧施加相同油压载荷,顶砧上垂直应力的分布路径如图 5 所示。通过对图 5 仔细的比较分析发现,施加相同的油压载荷后,传统顶砧的砧面中心处垂直应力值为 5.52 GPa,而新顶砧的砧面中心处垂直应力值可以达到 8.75 GPa;垂直应力值的升高,表明高压腔体所获得的腔体压力相应升高。因此,新顶砧的传压效率较传统顶砧的传压效率升高了 58.5%。新顶砧传压效率的大幅提高主要归因于高压砧面面积的大幅减小。新顶砧砧面上的垂直应力分布与传统顶砧明显不同,这是因为新顶砧在传统顶砧的砧面上设计了二级顶砧以及凹形圆角支撑区,新顶砧密封边附近的应力值与传统顶砧相比变化不明显,这是因为其斜边几何尺寸和传统顶砧的斜边几何尺寸相同。

为探寻传统顶砧和新顶砧的破裂几率,通过调整油压载荷,使二者获得相同的 5.50 GPa 腔体压力。根据第四强度理论——von Mises 屈服准则,对二者进行比较分析。图 6 为 von Mises 应力路径曲线图。通过对图 6 仔细的比较分析发现,当腔体压力相同时,新顶砧上分布的 von Mises 应力值均低于传统顶砧,在碳化钨顶砧的破裂判据参考点(即碳化钨顶砧小斜边末尾处),von Mises 应力值由传统顶砧的 5.06 GPa 降低为 3.39 GPa,降幅达 33%。由第四强度理论可知,在相同腔体压力情况下,von Mises 应力值越低,表明其破裂几率越低。因此,在相同的使用条件下,通过采用圆角技术以及凹形支撑区技术,新顶砧能够大幅降低碳化钨顶砧拐角处的应力集中效应,为高压顶砧提供足够的侧向支撑作用,从而大幅提高顶砧的性能。

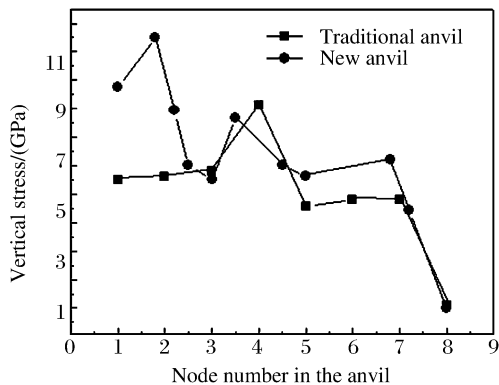


图 5 碳化钨顶砧上分布的垂直应力路径曲线图

Fig. 5 Graph showing the vertical stress in WC anvil

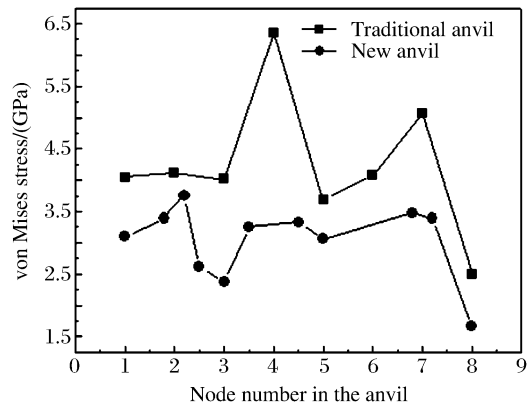


图 6 碳化钨顶砧上分布的 von Mises 应力路径曲线图

Fig. 6 Graph showing the von Mises stress in WC anvil

新顶砧的 von Mises 应力值较传统顶砧大幅度降低, 不仅表明新顶砧在相同腔体压力时的破裂几率较传统顶砧大幅度降低, 也表明新顶砧在采用与传统顶砧相同型号的碳化钨材料时, 可获得的极限腔体压力也将大幅度提升。通过升高模型施加的油压载荷, 使新顶砧与传统顶砧在破裂判据参考处的 von Mises 应力值达到 6.21 GPa, 略大于碳化钨破裂强度 (6.20 GPa), 如图 7 所示。由第四强度理论知, 当 von Mises 应力值略大于碳化钨屈服强度 (6.20 GPa) 时, 碳化钨顶砧将发生破裂, 即产生裂纹, 故此时对应的垂直应力值为安全使用条件下, 碳化钨顶砧可获得的极限腔体压力值。由图 7 知, 当新顶砧和传统顶砧在破裂判据参考处的 von Mises 应力值均为 6.21 GPa 时, 新顶砧的砧面中心垂直应力值较传统顶砧升高了 44.2%, 由传统顶砧的 6.63 GPa 升高至 9.56 GPa; 砧面中心垂直应力的大幅升高表明腔体压力大幅提升。因此, 新顶砧可获得的极限腔体压力可达 9.56 GPa, 其极限腔体压力较传统顶砧升高了 44.2%。

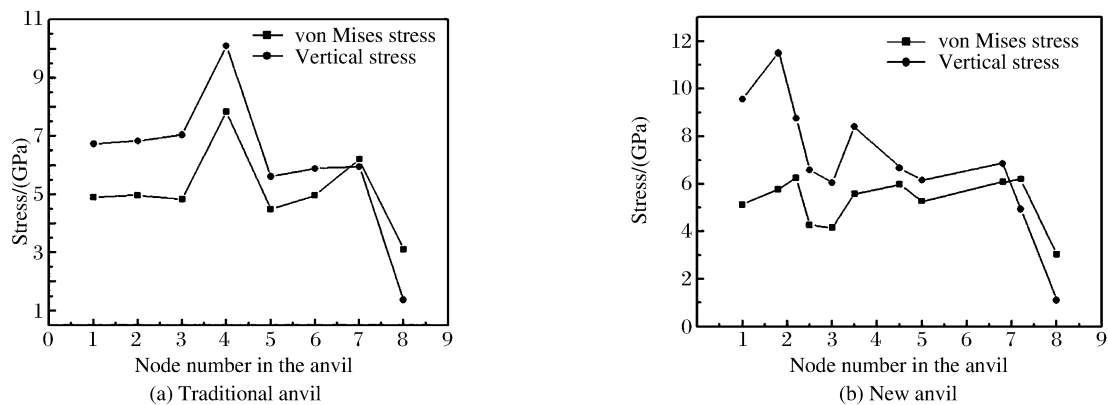


图 7 碳化钨顶砧上分布的应力路径曲线图

Fig. 7 Graph showing the stress in WC anvil

5 结 论

基于高压顶砧设计原理——大质量支撑原理, 借助有限元仿真技术, 开展了超高压碳化钨顶砧新结构的设计与研究。研究表明, 在不改变铰链式六面顶压机液压系统的前提下, 通过改变碳化钨顶砧的几何结构, 优化设计确定的一体式超高压碳化钨顶砧的传压效率较传统顶砧能够提升 58.5%, 破裂几率降低 33%, 可获得的极限腔体压力升高 44.2%, 能够达到 9.56 GPa。大腔体超高压碳化钨顶砧新结构的确立有利于促进高压物理学以及地球物理学等学科领域对大腔体、超高压极端条件的迫切需求。

References:

- [1] Ma Y, Eremets M, Oganov A R, et al. Transparent dense sodium [J]. Nature, 2009, 458: 182-185.
- [2] Loubeyre P, Occelli F, Le Toullec R. Optical studies of solid hydrogen to 320 GPa and evidence for black hydrogen [J]. Nature, 2002, 416: 613-617.
- [3] Oganov A R, Ma Y, Lyakhov A O, et al. Evolutionary crystal structure prediction as a method for the discovery of minerals and materials [J]. Rev Mineral Geochem, 2010, 71: 271-298.
- [4] Dong B, Tian F, Duan D, et al. Superconductive superhard phase of BC_7 : Predicted via *ab initio* calculations [J]. Diam Relat Mater, 2011, 20(3): 454-457.
- [5] Hilgren V J, Drake M J, Rubie D C. High-pressure and high-temperature experiments on core-mantle segregation in the accreting earth [J]. Science, 1994, 264: 1442-1445.
- [6] Xu J, Mao H, Bell P M. High-pressure ruby and diamond fluorescence: Observations at 0.21-0.55 terapascal [J]. Science, 1986, 232: 1404-1406.

- [7] Kawai N, Endo S. The generation of ultrahigh hydrostatic pressures by a split sphere apparatus [J]. *Rev Sci Instrum*, 1970, 41: 1178.
- [8] Sung C M. A century of progress in the development of very high pressure apparatus for scientific research and diamond synthesis [J]. *High Temp High Press*, 1997, 29(3): 253-293.
- [9] He D W, Wang F L, Kou Z L, et al. The new type of high pressure apparatus; China, 200710048839. 2 [P]. 2007-04-10. (in Chinese)
贺端威, 王福龙, 寇自力, 等. 用于产生超高压的新型装置: 中国, 200710048839. 2 [P]. 2007-04-10.
- [10] Wang F L, He D W, Fang L M, et al. Design and assembly of split-sphere high pressure apparatus based on the hinge-type cubic-anvil press [J]. *Acta Physica Sinica*, 2008, 57(9): 5429-5434. (in Chinese)
王福龙, 贺端威, 房雷鸣, 等. 基于铰链式六面顶压机的二级 6-8 型大腔体静高压装置 [J]. *物理学报*, 2008, 57(9): 5429-5434.
- [11] Lü S J, Luo J T, Su L, et al. A slide-type multianvil ultrahigh pressure apparatus and calibrations of its pressure and temperature [J]. *Acta Physica Sinica*, 2009, 58(10): 6852-6857. (in Chinese)
吕世杰, 罗建太, 苏 磊, 等. 滑块式六面八超高压实验装置及其压力温度标定 [J]. *物理学报*, 2009, 58(10): 6852-6857.
- [12] Han Q G, Ma H A, Li R, et al. The criterion for crack of tungsten carbide anvil based on finite element method [J]. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 2010, 24(1): 1-5. (in Chinese)
韩奇钢, 马红安, 李 瑞, 等. 基于有限元法确立碳化钨顶锤的破裂判据 [J]. *高压物理学报*, 2010, 24(1): 1-5.

Study on New Structure of Ultra-High Pressure WC Anvil

HAN Qi-Gang, BAN Qing-Chu, YI Zheng, CHEN Meng-Lu,
ZHONG Ji-Lun, YANG Wen-Ke, ZHANG Qiang

(*Roll-Forging Research Institute, Jilin University, Changchun 130025, China*)

Abstract: Based on the principle of massive support, the parameters of ultra-high pressure tungsten carbide (WC) anvil have been studied by finite element method. The results indicate that the technologies of radius beveling and concave region can enhance the performance of ultra-high pressure WC anvil, by decreasing the focus phenomenon of stress and increasing the lateral support, respectively. Furthermore, the pressure transmission efficiency of new anvil is higher compared with the traditional anvil, which can be enhanced about 58.5%. The rate of cracking in new anvil decreases about 33% than that of traditional anvil. The highest sample cell pressure generation by new anvil increases about 44.2% compared with the traditional anvil, which changes from 6.63 GPa to 9.56 GPa. This work represents a new structure of ultra-high pressure WC anvil for study on the novel structure and properties of matter, design and synthesis of functional materials.

Key words: ultra-high pressure; anvil; cubic high pressure apparatus; high pressure and high temperature (HPHT); finite element method (FEM)