

УДК 539.4.01+539.51+519.876.5

*В.А. Бледнов, В.И. Иордан, О.П. Солоненко***Компьютерное моделирование формирования плазменных покрытий и их характеристик****V.A. Blednov, V.I. Jordan, O.P. Solonenko***Computer Simulation of Plasma Coatings Formation and their Characteristics**

Рассмотрен подход к моделированию процесса формирования слоистой структуры покрытий при плазменном напылении. Получены зависимости для вычисления функциональных характеристик покрытия (пористость, адгезионная прочность, шероховатость). Приведены результаты вычислительных экспериментов, характеризующие пористость и адгезионную прочность покрытий в зависимости от скорости частиц, позволяющие при прочих равных условиях оптимизировать режим напыления.

Ключевые слова: плазменное напыление, моделирование, сплэт, кластер покрытия, пористость, адгезия, когезия, шероховатость.

Введение. В современной технологии плазменного напыления в большинстве случаев отсутствует возможность установления оперативного контроля качества покрытий, что затрудняет их проектирование и оптимизацию. Созданный к настоящему времени программный комплекс «СПЛЭТ-ПОКРЫТИЕ» позволяет моделировать слоистую структуру плазменных покрытий из металлических порошков с оценкой их структурно-функциональных характеристик (структура пористости, шероховатость, прочность связи с подложкой и т.п.), предоставляя возможность решать задачу проектирования конкретного покрытия как «обратную» задачу. А именно, формулируя перечень исходных требований к покрытию, прогнозировать оценки «физически реализуемых» параметров «сплэтов» – растекшихся и затвердевших металлических капель при их соударении с поверхностью основы в процессе напыления покрытия заданной толщины. Полученные «прогнозные» оценки параметров сплэтов используются затем для определения подпространства ключевых физических параметров: скорости, температуры, размера частицы, температуры основы, топологии ее поверхности, обеспечивающих получение сплэтов с требуемыми характеристиками.

The approach to modeling the process of forming the coating's lamellar structure under plasma spraying is considered. Dependencies for calculation of functional characteristics of coating (porosity, adhesion strength, roughness) are introduced. The results of the computing experiments which characterize porosity and adhesion strength of coatings depending on particles' velocity are presented. They allow, with other things being equal, to optimize the spray conditions.

Key words: plasma spraying, modeling, splat, coating cluster, porosity, adhesion, cohesion, roughness.

1. Описание подхода к моделированию формирования слоистой структуры плазменных порошковых покрытий. Разработанный программный комплекс «СПЛЭТ-ПОКРЫТИЕ» включает две подсистемы. Первая подсистема – «СПЛЭТ», исходя из ограничений, налагаемых на параметры сплэтов, рассчитывает и осуществляет 3D-визуализацию физически реализуемого подпространства в фазовом пространстве ключевых физических параметров. Вторая подсистема – «ПОКРЫТИЕ», исходя из набора значений ключевых физических параметров, рассчитанных на основе заданных гистограмм распределений, с использованием справочной базы данных по физическим свойствам материалов, обеспечивает моделирование и визуализацию слоистой структуры плазменных покрытий и их функциональных характеристик.

При разработке подсистемы «СПЛЭТ» использовались экспериментально апробированные теоретические решения [1], характеризующие равновесное затвердевание капель металлических расплавов при их деформации на подложках. Согласно [1], взаимодействие «капля расплава–основа» реализуется по одному из четырех основных сценариев в зависимости от соотношения между температурой T_c , устанавливающейся в контакте, и температурами

* Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Президиума СО РАН (Междисциплинарный интегрированный проект №1 на 2009–2011 гг.)

T_{pm} и T_{bm} плавления материалов частицы и основы. Учет нестационарного сопряженного кондуктивно-конвективного теплообмена в процессе деформации и одновременного затвердевания капли расплава на подложке ($T_c < T_{pm}$) позволил получить экспериментально апробированные теоретические модельные решения, характеризующие толщину h_s и диаметр D_s сплэта в виде диска (цилиндра), а также толщину подплавленного приповерхностного слоя в основе h_b , при $T_c < T_{bm}$, зависящих от температур частицы T_p и подложки T_b , скорости u_p капель и их диаметра D_p (точнее говоря, от числа Пекле $Pe = u_p D_p / \nu_{pm}$, где ν_{pm} – кинематическая вязкость расплава материала частицы при температуре плавления).

Основной принцип работы подсистемы «СПЛЭТ» заключается в наложении ограничений на фазовое пространство ключевых физических параметров в зависимости от требований, формулируемых к сплэту. В качестве фазового пространства используется трехмерное пространство, оси которого определяются пользователем из списка ключевых физических параметров: T_p , T_b , u_p , D_p , либо число Pe вместо двух последних параметров. Для каждой из осей задаются минимальное и максимальное значения параметра, которые ограничивают область исследуемого пространства. Ограничение представляется некоторой функцией (либо неравенством), разделяющей фазовое пространство на две области: область с выполнением условий-ограничений и область, в которой условие не может быть выполнено. В результате этого происходит сужение пространства ключевых физических параметров. В качестве ограничений могут выступать требования, предъявляемые к размерам сплэта, к диапазонам изменения скорости и температуры частиц, температуры подложки в процессе растекания капли расплава. Подсистема «СПЛЭТ» позволяет формулировать условие стабильного формирования сплэта, а также накладывать ограничения на реализацию одного из базовых сценариев формирования сплэта, время его формирования, температуру в контакте «частица–подложка» с учетом заданного сценария формирования сплэта. Другая группа ограничений касается требований технологического и материаловедческого характера, предъявляемых к сплэту: прочность сцепления с основой или напыляемым покрытием (адгезия и когезия), скорость охлаждения капли при затвердевании и т.д. Таким образом, последовательное наложение ограничений на условия формирования сплэта приводит к подпространству исходного фазового пространства ключевых физических параметров, в котором одновременно выполняются все сформулированные требования. Если же некоторые требования противоречат друг другу, конечное множество ключевых физических параметров окажется пустым.

Отдельными блоками подсистемы «СПЛЭТ» являются модули анализа «прямой» и «обратной» чувствительности «толщина сплэта ↔ ключевые

физические параметры», а также вычисление корреляционных зависимостей между параметрами сплэта и ключевых физических параметров. Данные модули позволяют строить зависимости характеристик сплэтов от изменения одного из ключевых физических параметров, что представляется полезным для анализа качественных и количественных закономерностей процесса напыления.

Подсистема «ПОКРЫТИЕ» разработанного программного комплекса обеспечивает моделирование собственно процесса формирования кластера покрытия – некоторого элементарного фрагмента покрытия, заданной площади и толщины, выбираемого в пределах пятна напыления. Таким образом, реализуется послойная укладка сплэтов на основу – подложку или напыляемое покрытие, при последовательном нормальном соударении отдельных микрокапель металлического расплава в зависимости от заданных ключевых физических параметров.

Следует отметить, что моделирование и анализ функциональных характеристик напыляемых в практике покрытий, площадь которых может быть значительной, требует больших временных вычислительных затрат. Однако при моделировании можно ограничиться кластером покрытия – фрагментом всего покрытия в виде прямоугольного параллелепипеда, нижнее основание которого является плоской гранью в виде прямоугольника или квадрата, а верхнее имеет определенный рельеф, который изменяется в процессе напыления. Размеры кластера покрытий должны быть такими, чтобы его структура при моделировании была адекватна структуре аналогичного кластера покрытия при моделировании покрытия в целом.

Для укладки первых слоев сплэтов необходимо знать параметры подложки (материал и температуру), на которую производится напыление, так как от этого, при прочих равных условиях, зависит сценарий формирования сплэтов и их размеры. Вид материалов напыляемых частиц и подложки, значения ключевых физических параметров, отвечающие выбранному режиму напыления, а также параметры кластера покрытия задаются в меню программного комплекса, в то время как теплофизические свойства материалов считываются из справочной базы данных.

Процесс напыления характеризуется определенной степенью «стохастичности», поэтому параметры напыляемых частиц в пределах кластера покрытия задаются в соответствии с гистограммами их распределений, характеризующих пятно напыления. Это реализуется, в соответствии с заданными законами распределений, датчиками «псевдослучайных чисел», которые генерируют: x_p , y_p – координаты на напыляемой поверхности соударяющейся капли; u_p – ее скорость в направлении нормали к подложке, температуру T_p и размер D_p . Кроме того, перед началом расчета задается количество напыляемых частиц N_p , определяемое расходом напыляемого порошка.

Частицы первого слоя покрытия взаимодействуют с подложкой, поэтому учитываются основные параметры подложки: характеристики ее материала и температура T_b . С учетом сказанного выше в программном комплексе вычисление параметров сплэтов (толщины h_s и диаметра D_s), значения которых должны быть определены на каждом шаге алгоритма последовательной укладки сплэтов на напыляемую поверхность покрытия, осуществляется согласно [1], а сам алгоритм укладки подробно изложен в [2, с. 82–87].

С учетом топологии напыляемой поверхности, которую качественно должен повторять укладываемый на нее сплэт, в процедуре моделирования формы нижнего (и параллельного ему верхнего) основания сплэта применен аппарат аппроксимации, использующий составные «рациональные В-сплайновые поверхности» [2]. На основе опорных вершин $\{P_{i,j}\}$, проекция которых на плоскость XY образует квадратный участок напыляемой поверхности с центром в лобовой точке (x_p, y_p) соударяющейся капли и стороной D_s , аппроксимируется гладкая поверхность, которая принимается в качестве поверхности нижнего основания кругового сплэта. Для того чтобы координаты «опорного» массива вершин корректно учитывали физические особенности процесса затвердевания растекающейся капли, в формируемом сплэте выделяются две зоны: а) центральная – ядро сплэта – внутренний диск (окрестность лобовой точки) с диаметром $D_0 = k_1 D_p$ и толщиной h_s , где $1 < k_1 < 1,2$; б) периферийная кольцевая зона, ограниченная двумя окружностями с диаметрами D_0 и D_s . Z -координаты опорных вершин нижнего основания сплэта для зоны ядра принимаются равными Z -координатам соответствующего этой зоне участка напыляемой поверхности, так как напорное давление при растекании капли обеспечивает полный контакт сплэта с поверхностью в зоне ядра. В периферийной кольцевой зоне за счет доминирования радиальной компоненты скорости над направленной по нормали к подложке компоненты скорости расплав растекается по инерции над углублениями в поверхности основы, образуя поры. Расчетная траектория вязкого растекания капли над углублениями (Z -координаты опорных вершин над углублениями напыляемой поверхности) определяется с помощью радиальной ($u_r = \beta \cdot r \cdot z$) и нормальной составляющих ($u_z = -\beta \cdot z^2$) скорости растекания капли согласно [2].

Z -координаты опорных вершин кольцевой зоны приравниваются соответствующим Z -координатам тех вершин расчетной траектории, для которых Z -координаты напыляемой поверхности оказываются ниже соответствующих Z -координат расчетной траектории, иначе они приравниваются соответствующим Z -координатам напыляемой поверхности. А те Z -координаты кольцевой зоны напыляемой поверхности, которые выше Z -координат расчетной траектории на толщину h_s , определяют участки

кольцевой зоны, на которые жидкость капли не натекает, что вынуждает скорректировать форму оснований сплэта уменьшением их эффективной площади S_{eff} и соответствующим увеличением толщины сплэта согласно формуле $\bar{h}_s = h_s \cdot (\pi R_s^2 / S_{eff})$, поскольку должно быть соблюдено условие равенства объема исходной капли расплава объему сплэта в процессе его укладки.

Таким образом, по сформированному опорному массиву вершин рассчитывается гладкая поверхность $Z = (X, Y)$ с использованием «составных рациональных В-сплайновых поверхностей» в параметрической форме [2], в которых варьирование «весовыми» коэффициентами позволяет «регулировать» форму нижнего основания сплэта и тем самым «регулировать» форму и «эффективные» размеры пор, образующихся под сплэтами.

Затем из массива пересчитанных в результате сплайн-аппроксимации вершин $\{\bar{P}_{i,j}\}$, проекция которых на плоскость XY образует квадратный участок напыляемой поверхности с центром в лобовой точке (x_p, y_p) , отбрасываются вершины поверхности, не входящие в кольцевую периферийную зону сплэта. Затем в соответствующей структуре данных фиксируются координаты точек верхнего основания, параллельного нижнему основанию укладываемого сплэта с высотой \bar{h}_s , за исключением выступающих поверх сплэта вершин. Алгоритм укладки на поверхность очередного сплэта циклически повторяется до тех пор, пока не будет «исчерпано» заданное значение расхода частиц N_p .

2. Результаты вычислительных экспериментов. В процессе моделирования кластера покрытия используется дискретизация в виде прямоугольной сетки «узловых» точек в плоскости XY (d_x и d_y – соответственно, шаги дискретизации по осям X и Y). Вычисления в алгоритме укладки сплэтов производятся в вещественном формате, но результаты вычислений координат по осям X и Y округляются до целых (Z -координаты остаются в вещественном формате). Размеры основания кластера покрытия на подложке задаются в относительных единицах целыми числами N_x, N_y (реальные размеры равны, соответственно, $N_x d_x$ и $N_y d_y$). Объем кластера покрытия определяется суммарным объемом элементов разбиения, каждый из которых имеет площадь основания $dS = d_x d_y$, а их количество в кластере покрытия равно $N = N_x N_y$. В силу пористости в каждом элементе разбиения чередуются незаполненные (полые) и заполненные части объема элементов разбиения.

Введем обозначения: $h_{i,j}^{(k)}$ – высота k -й заполненной части (вдоль оси Z), где $k = 1, 2, \dots, K_{ij}$ и K_{ij} – число заполненных частей в (i, j) -м элементов разбиения; i и j – координаты элементов разбиения в плоскости XY (в плоскости подложки); H_{ij} – высо-

та (i, j) -го элементов разбиения; $d_x d_y \cdot \sum_{k=1}^{K_{i,j}} h_{i,j}^{(k)}$ – суммарный объем заполненных частей элементов разбиения; $d_x d_y H_{i,j}$ – «полный» объем элементов разбиения; $P_{i,j}^{(\text{ЭП})} = 1 - \sum_{k=1}^{K_{i,j}} h_{i,j}^{(k)} / H_{i,j}$ – оценка «пористости» (i, j) -го элементов разбиения. Аналогично рассуждая, получим оценки «пористости» P_i, P_j и $P_{\text{КП}}$, соответственно, для i -го шлифа (параллельного плоскости YZ с толщиной d_x , где $i = 1, 2, \dots, N_x$), для j -го шлифа (параллельного плоскости XZ с толщиной d_y , где $j = 1, 2, \dots, N_y$) и для всего кластера покрытия в целом:

$$P_i = 1 - \frac{\sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{K_{i,j}} h_{i,j}^{(k)}}{\sum_{j=1}^{N_y} H_{i,j}}, \quad P_j = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{N_x} \sum_{k=1}^{K_{i,j}} h_{i,j}^{(k)}}{\sum_{i=1}^{N_x} H_{i,j}},$$

$$P_{\text{КП}} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{K_{i,j}} h_{i,j}^{(k)}}{\sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} H_{i,j}}. \quad (1)$$

В каждом i -м и j -м шлифах распределения пористости по горизонтальным слоям с постоянной толщиной d_z определяются наборами

$$P_i^{(l)} = 1 - \left(\sum_{j=1}^{N_y} \gamma_{i,j}^{(l)} \right) / N_y, \quad P_j^{(l)} = 1 - \left(\sum_{i=1}^{N_x} \gamma_{i,j}^{(l)} \right) / N_x, \quad (2)$$

где $\gamma_{i,j}^{(l)}$ – доля «заполненности» ячейки объемом $d_x d_y d_z$ из l -го слоя и принадлежащей (i, j) -му элементу разбиения; $l = 1, 2, \dots, L$.

Определив минимальную и максимальную высоты среди элементов разбиения i -го шлифа как $m_i = \min_{j=1..N_y} (H_{i,j})$ и $M_i = \max_{j=1..N_y} (H_{i,j})$, за оценку шероховатости поверхности вдоль i -го шлифа (и для j -го шлифа) принимаем:

$$\Delta H_i = M_i - m_i, \quad \Delta H_j = M_j - m_j. \quad (3)$$

Оценка шероховатости кластера покрытия вычисляется через его максимальную $H_{\text{max}} = \max_i (M_i)$ и минимальную $H_{\text{min}} = \min_i (m_i)$ высоты как

$$\Delta H_{\text{КП}} = H_{\text{max}} - H_{\text{min}}, \quad (4)$$

а «среднее» значение высоты кластера покрытия равно $\bar{H}_{\text{КП}} = (H_{\text{max}} + H_{\text{min}}) / 2$.

Адгезионная прочность связи кластера покрытия с подложкой пропорциональна отношению суммарной площади оснований, контактирующих с подложкой сплэтов к площади основания самого кластера покрытия. Когезионная прочность связи между внутренними слоями в произвольном горизонтальном контактном сечении кластера покрытия пропорциональна отношению площади, суммирующей общую площадь каждой контактирующей

пары сплэтов из смежных слоев, к площади основания кластером покрытия.

Отображение результатов моделирования производится в виде трехмерной сцены (рис. 1а) с возможностью отображения пористой структуры «шлифов» (тонких пластинок, вырезанных из кластера покрытия, с толщиной в один шаг дискретизации) с гистограммами распределения пористости по слоям покрытия (рис. 1б) и первого монослоя кластера покрытия на подложке (рис. 1в). Для этого случая размер тестовой медной подложки 2×2 мм. Размеры напыляемых частиц $D_p = 20\text{--}40$ мкм, скорость $u_p = 120$ м/с, шаги дискретизации $d_x = d_y = d_z = d = 2$ мкм. Количество частиц – 10000. Полученные значения: диапазон распределения пористости по четырем слоям шлифа – 8...9% (рис. 1б), общая пористость кластера покрытия – $P_{\text{КП}} = 8,5\%$, шероховатость – $\Delta H_{\text{ПК}} = 60$ мкм ($\bar{H}_{\text{КП}} = 363$ мкм), адгезионная прочность – 86,6%, когезионная прочность в различных сечениях – 75...90%.

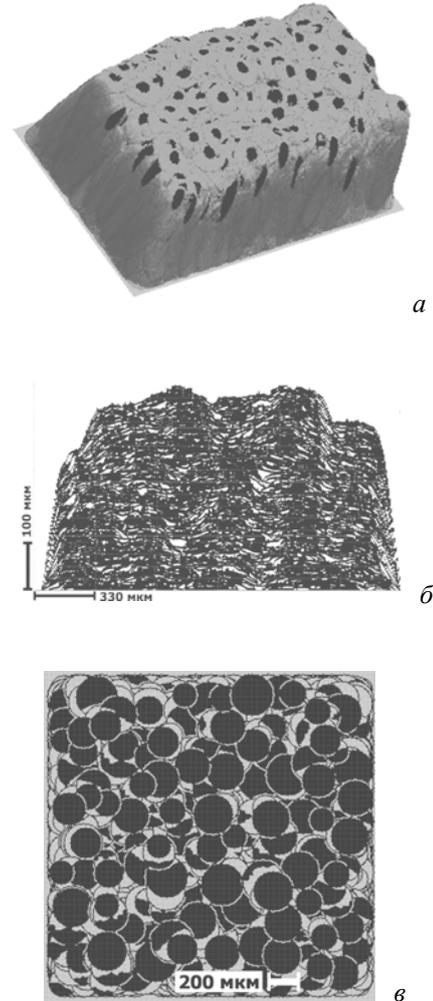


Рис. 1. Результаты моделирования: а – изображение кластера покрытия; б – пример изображения шлифа с гистограммой пористости по слоям; в – изображение первого монослоя кластера покрытия (вид со стороны подложки на кластер покрытия)

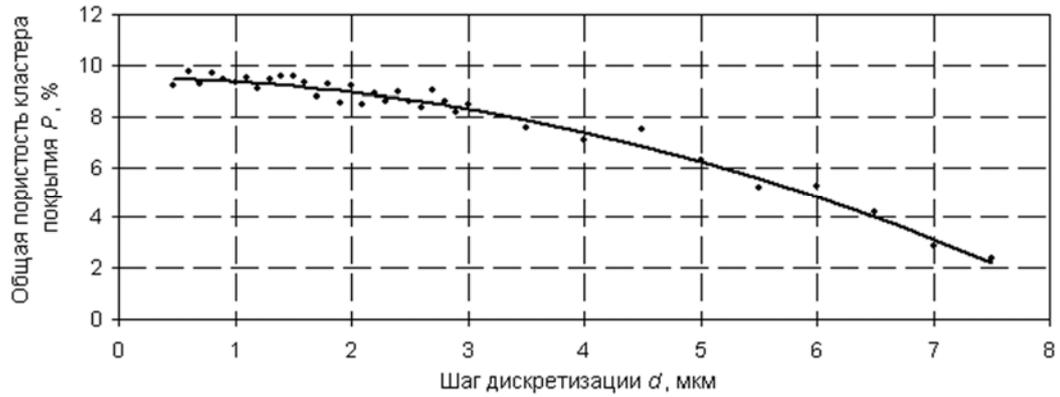


Рис. 2. График зависимости общей пористости кластера покрытия от шага d дискретизации в плоскости подложки ($d = d_x = d_y = d_z$)

Кроме того, численные эксперименты позволили определить зависимость общей пористости от шага дискретизации d (рис. 2), позволяющую вводить «относительную поправку» на значение пористости в зависимости от шага дискретизации – при $d < 1$ мкм пористость практически не меняется. За-

висимости «нормированной» адгезионной прочности и пористости кластера покрытия от изменения скорости напыляемых частиц никеля на подложку (рис. 3, 4) при больших значениях скорости частиц ($u_p > 300$ м/с) «коррелируют» между собой, так как значения этих характеристик «стабилизируются».

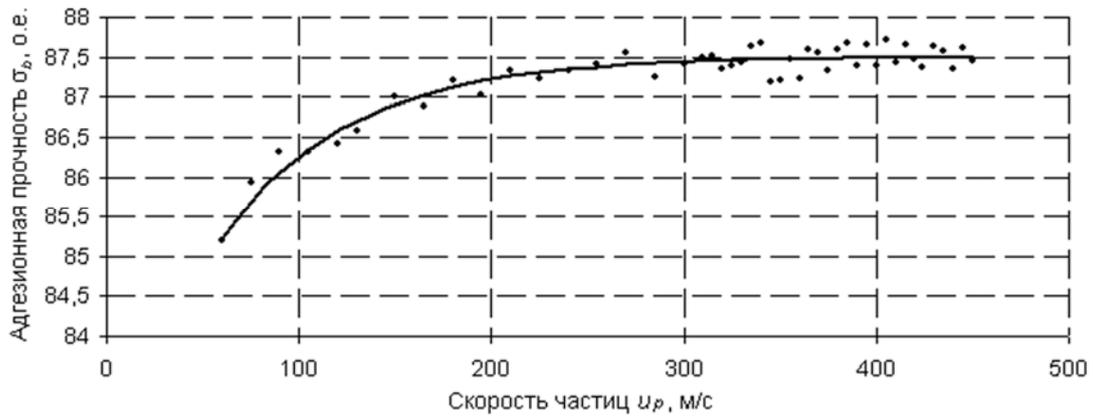


Рис. 3. График зависимости адгезионной прочности соединения кластера покрытия с подложкой от скорости частиц никеля, напыляемых на подложку из меди

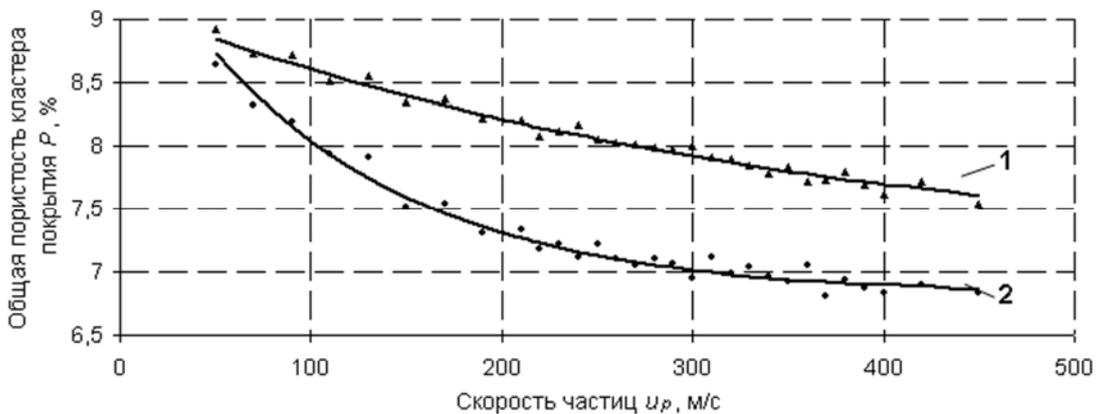


Рис. 4. График зависимости пористости кластера покрытия от скорости частиц никеля, напыляемых на медную (1) и стальную (2) подложки

Заключение. Рассмотренные в настоящей статье подход к моделированию процесса формирования плазменных покрытий и оценка их структурно-функциональных характеристик позволяют целена-

правленно проектировать покрытия с требуемыми для практики свойствами, при этом появляется возможность исследовать и оптимизировать режимы технологических процессов напыления.

Библиографический список

1. Солоненко О.П., Алхимов А.П., Марусин В.В., Оришич А.М., Рахмянов Х.М., Салимов Р.А., Щукин В.Г., Косарев В.Ф. Высокоэнергетические процессы обработки материалов. – Новосибирск, 2000.

2. Бледнов В.А., Иордан В.И., Солоненко О.П. Моделирование формирования слоистой структуры и пористости плазменных порошковых покрытий с учетом изменяемой топологии поверхности при напылении // Известия Томского политехн. ун-та. – 2010. – Т. 317, №5.