

УДК 539.4.01/539.51/519.876.5

Компьютерное проектирование газотермических покрытий из порошков металлов^{*}

О.П. Солоненко¹, В.А. Бледнов¹, В.И. Иордан²

¹*Институт теоретической и прикладной механики
им. С.А. Христиановича СО РАН, Новосибирск*

²*Алтайский государственный университет, Барнаул*

E-mail: solo@itam.nsc.ru

Предложен подход к моделированию процесса формирования слоистой структуры газотермических, в том числе плазменных, покрытий при напылении порошков металлов. Представлены результаты, связанные с разработкой вычислительного алгоритма и комплекса программ для моделирования процесса укладки сплэтов в покрытие с учетом динамически изменяемой при напылении топологии его поверхности, а также формирования слоистой структуры и пористости покрытия. Для прогнозирования сценариев формирования сплэтов и оперативной оценки их толщин и диаметров используются экспериментально апробированные теоретические решения. Приводятся результаты вычислительных экспериментов, иллюстрирующие работоспособность разработанной вычислительной технологии.

Ключевые слова: плазменное напыление, моделирование, капля расплава, сплэт, слоистая структура, кластер покрытия, топология поверхности, пористость.

ВВЕДЕНИЕ

В современных технологиях плазменного напыления в большинстве случаев отсутствует возможность оперативного контроля качества покрытий, что затрудняет их проектирование и оптимизацию. Насколько известно авторам, до настоящего времени отсутствует какая-либо физически обоснованная и практически апробированная концепция, позволяющая с единых позиций подойти к проектированию и оптимизации конкретных технологий газотермического напыления (плазменного, газопламенного, детонационного, электродуговой металлизации и т. д.). Обычно отработка процесса напыления осуществляется путем постановки ограниченного набора технологических экспериментов на конкретном оборудовании с использованием порошкового материала того или иного фракционного состава с последующим исследованием характеристик напыленных покрытий.

^{*} Работа выполнена при финансовой поддержке СО РАН в рамках Междисциплинарного интеграционного проекта СО РАН № 1 на 2009–2011 гг.

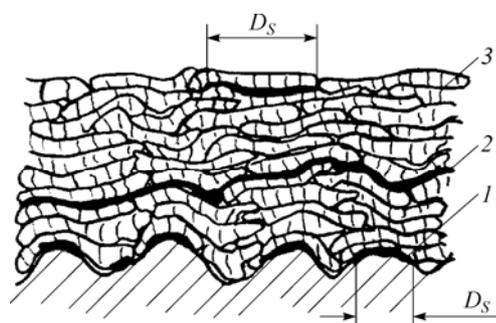
Принимая во внимание достаточно большое количество факторов, определяющих результат процесса напыления, метод “проб и ошибок” дополняется в ряде случаев планированием эксперимента, диагностикой или моделированием состояния частиц в полете и перед соударением их с поверхностью основы. Попытки постановки сквозного комплексного эксперимента в газотермическом напылении (ГТН) [1] с целью изучения физических процессов, протекающих в цепочке “генерация высокотемпературного потока–инжекция порошкового материала–формирование технологического запыленного потока–взаимодействие капель расплава с поверхностью и формирование покрытия”, весьма немногочисленны и в основном представляют методический интерес из-за его ресурсоемкости при отработке реальной технологии.

Для прогнозирования структуры и свойств напыляемого покрытия в технологической цепочке “плазмотрон–струя–покрытие” в дальнейшем основное внимание будет сконцентрировано на моделировании его слоистой структуры, формируемой из полностью расплавленных частиц (рис. 1).

Как известно, при плазменном напылении (см. работу [2]), даже при максимально возможном расходе порошкового материала, частицы которого подвергаются полному плавлению, покрытие формируется путем послойной укладки отдельных сплэтов — растекшихся и затвердевших на основе (подложке или предварительно напыленном слое) капель расплава. Следовательно, достоверность результатов моделирования структуры напыляемого покрытия во многом определяется точностью расчета укладки отдельных сплэтов при заданных значениях ключевых физических параметров (КФП) соударения капли расплава с основой: скорости, температуры и размера частицы, температуры основы и топологии ее поверхности.

Для оценки необходимых вычислительных затрат предположим, что необходимо провести моделирование процесса формирования фрагмента покрытия с поперечными размерами L_x и L_y , толщиной h , причем напыляемый порошок считается монодисперсным с размером частиц D_p . Таким образом, если в первом приближении пренебречь объемом пор в покрытии, то оценка необходимого количества сплэтов для полного заполнения объема покрытия $V = L_x L_y h$, представится

как $N_p = 6V / (\pi D_p^3) = 6L_x L_y h / (\pi D_p^3)$. То есть, если фрагмент покрытия имеет площадь основания $S = 1 \text{ см}^2$ ($L_x = L_y = 1 \text{ см}$) и толщину $h = 100 \text{ мкм}$, то при размере напыляемых частиц $D_p = 10, 25, 50$ и 100 мкм необходимо выполнить моделирование процесса формирования сплэтов в количестве $N_p \approx 1,9 \cdot 10^7, 1,2 \cdot 10^6, 1,5 \cdot 10^5$ и $2 \cdot 10^4$, соответственно. Детальное моделирование процесса формирования одного сплэта в общем случае требует расчета трехмерной нестационарной краевой задачи со свободной границей для уравнений Навье–Стокса совместно с уравнениями сопряженного конвектив-



со свободной границей для уравнений Навье–Стокса совместно с уравнениями сопряженного конвектив-

Рис. 1. Схематическое представление слоистой структуры плазменного покрытия, сформированного из полностью расплавленных частиц.

1 — граница между покрытием и основой,
2 — граница между напыленными слоями,
3 — граница между сплэтами.

но-кондуктивного теплообмена, а также фазовых превращений в растекающейся частице, а в ряде случаев и в подложке. Если допустить, что для такого расчета требуется 1 секунда процессорного времени, что является существенно заниженной, как минимум на один–два порядка, величиной (даже при моделировании процесса формирования сплэта на гладкой подложке), тогда время вычислений составит, соответственно, $t_{\text{calc}} \approx 220, 14, 2$ дня и 5,5 часов. Следовательно, в настоящее время такой подход носит скорее теоретический, нежели практический интерес, поскольку моделирование соударения десятков и сотен тысяч капель с подложкой и напыляемым покрытием требует колоссальных вычислительных затрат.

Альтернативой ему является использование экспериментально апробированных теоретических решений или полуэмпирических зависимостей [3–6], позволяющих с достаточной для практики точностью прогнозировать толщину и диаметр сплэтов в широком диапазоне КФП, что существенно (на несколько порядков) ускоряет вычислительную процедуру моделирования слоистой структуры покрытий.

Чтобы конструктивно подойти к решению данной проблемы, необходимо сформулировать ответ на вопрос: какой смысл мы вкладываем в понятие установления обратной связи в ГТН?

Естественно исходить из требований обеспечения заданных функциональных характеристик покрытия. К последним необходимо отнести: адгезию и когезию; микро- и макропористость; микро-, мезо-, макроструктуру и фазовый состав; внутренние границы раздела (межфазные и структурные); остаточные напряжения в покрытии, основе и на их границе раздела; свойства поверхности напыленного покрытия. При этом требование одновременного удовлетворения покрытием несколькими из перечисленных характеристик может существенно ограничить использование того или иного оборудования.

Большинство других функциональных характеристик покрытия являются производными от перечисленных выше, а также в той или иной степени наследуют свойства исходных материалов (порошка и подложки). К ним можно отнести: теплопроводность, газопроницаемость, электропроводность, твердость и микротвердость, оптические свойства, термостабильность, механическую и химическую стойкость и др.

Очевидно, что указанные выше основные характеристики покрытия определяются большим количеством факторов, обусловленных конкретной реализацией технологической цепочки “генератор высокотемпературного потока–исходный порошок–его инжекция в поток–формирование технологического запыленного потока–его взаимодействие с подложкой и формируемым покрытием в процессе напыления”.

Кроме того, большую роль играют свойства подложки и ее поверхности перед напылением, а также характеристики газовой среды, в которой ведется напыление. В ряде случаев напыленное покрытие представляет собой лишь полуфабрикат и подвергается затем механической и термической обработке. При этом требования к напыленному материалу могут быть ослаблены, поскольку конечные свойства покрытия могут быть достигнуты в результате его последующей обработки.

1. КОНЦЕПЦИЯ

В первом приближении основные характеристики покрытия определяются пространственно-временными распределениями расхода $G(D_p, r, t)$ частиц заданного размера и его среднеквадратическим отклонением $\sigma_G(D_p, r, t)$, распределениями

осредненных значений КФП: скорости u_{p0} , размера D_p , агрегатного состояния A_{p0} и температуры T_{p0} частиц перед соударением, температуры T_{b0} основы, характеристик шероховатости ее поверхности R_a , R_z , R_{\max} , а также среднеквадратическими отклонениями перечисленных выше параметров по сечению пятна напыления $r \leq R_{\text{slot}}$ (считаем, что пятно осесимметрично, а агрегатное состояние частиц может быть однозначно восстановлено по температуре их поверхности):

$$\{D_p(r, t), w_{p0}(r, t), T_{p0}(r, t), T_{b0}(r, t), \sigma_{Dp}(r, t), \sigma_{w_{p0}}(r, t), \sigma_{T_{p0}}(r, t), \sigma_{T_{b0}}(r, t)/r \leq R_{\text{slot}} \quad t > 0\}.$$

Если предположить, что перечисленные выше статистические характеристики не зависят от времени, т. е. поток частиц в пятне напыления квазистационарен, то будем иметь:

$$\{G(D_p, r), D_p(r), w_{p0}(r), T_{p0}(r), T_{b0}(r), \sigma_G(D_p, r), \sigma_{Dp}(r), \sigma_{w_{p0}}(r), \sigma_{T_{p0}}(r), \sigma_{T_{b0}}(r)/r \leq R_{\text{slot}} \quad t > 0\}.$$

Поскольку в условиях ГТН, как отмечалось выше, даже при предельных нагрузках порошком несущего высокотемпературного потока покрытие формируется из отдельных капель, соударяющихся, растекающихся и затвердевающих на основе [2], представляется естественным, в первом приближении, проектирование и оптимизацию покрытия, а также установление обратной связи “покрытие–струя–генератор высокотемпературного потока” перевести в плоскость проектирования и оптимизации сплэта, а также установления обратной связи “сплэт–струя–генератор высокотемпературного потока” [7].

Следовательно, необходимо разработать конструктивный подход, позволяющий в каждом конкретном случае устанавливать функциональную связь между характеристиками сплэта $X_s = \{x_j\}$ и соответствующим подпространством $\Phi(X_s) \subseteq \Phi_0$ допустимых значений КФП в сечении пятна напыления. Здесь Φ_0 — исходное пространство потенциально возможных значений КФП. Очевидно, что каждому требованию, предъявляемому к функциональной характеристике покрытия x_j , отвечает соответствующее множество допустимых КФП, а совокупность требуемых характеристик сплэта $X_s = \{x_j\}$ может быть обеспечена в целом в пространстве Φ_0 , если пересечение всех подмножеств допустимых КФП не является пустым, т. е.

$$\Phi(X_s) = \bigcap_j \Phi(x_j) \neq \emptyset.$$

Только в этом случае возможно дальнейшее проектирование покрытия и соответствующей технологии, обеспечивающих одновременно необходимые характеристики сплэтов, из которых будет формироваться покрытие. Если при этом в нашем распоряжении имеется некоторая совокупность альтернативного оборудования $\Psi = \{\psi_i\}$ для газотермического напыления, каждое из которых потенциально обеспечивает множество КФП $\mathfrak{R}(\psi_i)$, то требуемые характеристики сплэта могут быть обеспечены в целом с помощью оборудования ψ_i в том и только том случае, если $\mathfrak{R}(\psi_i) \cap \Phi(X_s) \neq \emptyset$. Иначе данное оборудование неприемлемо для обеспечения необходимых значений КФП. В случае же, если оборудование ψ_i потенциально пригодно, мы можем проектировать и оптимизировать технологию, обеспечивающую требуемые характеристики сплэта в контексте послойного формирования покрытия заданной толщины. Таким образом будет определено допустимое подмножество $\mathfrak{Z}(\psi_i) \subseteq \mathfrak{R}(\psi_i) \cap \Phi(X_s)$ КФП, отвечающее оптимальному процессу напыления покрытия с помощью технологического оборудования ψ_i .

Рассмотрение данной проблемы показывает, как постепенно сужается пространство допустимых значений КФП по мере добавления новых требований к характеристикам сплэта при взаимодействии “капля расплава–поверхность”. Если в результате последовательного удовлетворения требованиям мы получим непустое множество КФП, то только после этого можно перейти к последнему этапу установления обратной связи в технологии газотермического напыления — формулированию требований к технологическому потоку и его оптимизации. При этом полученное множество допустимых КФП в каждом конкретном случае однозначно даст ответ, какой метод напыления и какое оборудование могут быть использованы при проектировании и дальнейшей оптимизации технологии напыления с точки зрения обеспечения требуемых пространственно-временных и функциональных характеристик сплэтов, из которых формируется покрытие.

В число возможных требований, предъявляемых к сплэту как основному мезообъему покрытия, включаются следующие [7]: реализация одного из четырех базовых сценариев, условие стабильного формирования, ограничение на размерные или безразмерные значения толщины и диаметра, условие получения равнотолщинных сплэтов по сечению пятна напыления, ограничение на безразмерное или размерное время формирования сплэтов, условие на контактную температуру (данное требование представляется важным, если на стадии растекания и затвердевания капли температура межфазной границы “сплэт–основа” должна находиться в определенном диапазоне значений, что может быть связано с получением требуемых фазового состава, степени кристалличности или эвтектики), условия на скорость охлаждения расплава и плотность мощности теплового потока в основу, ограничения на междендритные расстояния для осей 1-го и 2-го порядка, обеспечение заданного уровня кристалличности, условие на скорость охлаждения сплэта после его формирования, условие на обеспечение прочности сцепления сплэта с основой, уровень остаточных термических напряжений в сплэте, обеспечение условий протекания требуемых полиморфных превращений при формировании сплэта (это относится прежде всего к напылению оксидов металлов). Этот список может быть пополнен.

Однако, как следует из анализа возможных требований, предъявляемых к сплэту, они могут быть классифицированы по следующим признакам:

- требования к геометрическим характеристикам сплэта;
- требования к температурно-временному режиму его формирования;
- требования материаловедческого характера (микроструктура, прочность соединения с основой, условие аморфности, достижение заданного фазового состояния и т. д.).

Поскольку даже для высокостабильного напылительного оборудования параметры частиц (скорость, температура, размер) в каждой точке пятна напыления претерпевают отклонения относительно их средних значений по ансамблю напыляемых частиц, необходимы зависимости, позволяющие проводить как прямой анализ чувствительности характеристик сплэта к изменению КФП в заданном диапазоне, так и обратный, когда следует, задавшись некоторым допустимым уровнем отклонения характеристик сплэта от фиксированного значения, определять допустимый уровень флуктуаций КФП [3, 8].

Отметим, что существующее серийное оборудование, используемое в технологиях ГТН, вообще говоря, не обеспечивает осевую симметрию характеристик частиц в сечении пятна напыления. Исключением являются лишь некоторые технологии, такие, как электродуговая металлизация, распыление проволоки плазменной струей, распыление порошка с помощью сверхзвуковой струи продуктов сгорания, где поток напыляемых частиц, в первом приближении, можно считать

осесимметричным. В связи с этим уместно отметить, что использование осесимметричных высокотемпературных технологических потоков “газ–частицы” позволяет существенно ускорить проектирование и оптимизацию конкретных процессов напыления путем постановки комплексного эксперимента [1].

Изложенная выше концепция в настоящее время реализована для случая нанесения покрытий из порошков материалов, характеризующихся высокой теплопроводностью и низкой вязкостью расплава: число Прандтля $Pr = \nu_{pm}^{(l)} / a_{pm}^{(l)} = \mu_{pm}^{(l)} c_{pm}^{(l)} \lambda_{pm}^{(l)} \ll 1$, которое рассчитывается при температуре плавления материала частицы, здесь $a_{pm}^{(l)}, \mu_{pm}^{(l)}, c_{pm}^{(l)}, \lambda_{pm}^{(l)}$ — температуропроводность, динамическая вязкость, удельная теплоемкость и теплопроводность расплава при температуре плавления, верхние индексы l и s отвечают жидкому и твердому состояниям материала соответственно.

Прежде всего это относится к газотермическому нанесению покрытий из металлических порошковых материалов. Несмотря на определенные успехи, достигнутые в области моделирования процессов при соударении капель расплавов с основой, предпочтение в данной работе отдано развитию теоретических подходов, позволяющих с достаточной для инженерной практики точностью прогнозировать перечисленные выше характеристики сплэтов в зависимости от заданных значений КФП при соударении капли расплава с основой.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ

Согласно работе [3], взаимодействие “капля расплава–основа” реализуется по одному из четырех базовых сценариев (рис. 2): 1 — растекание и одновременное затвердевание капли на поверхности твердой подложки и последующее охлаждение сплэта; 2 — растекание, одновременное затвердевание капли и подплавление подложки в пятне контакта ее с частицей с последующим затвердеванием подплавленного слоя и охлаждением системы “сплэт–основа”; 3 — полное растекание капли на твердой основе и последующее охлаждение и затвердевание слоя расплава с одновременным возможным его сворачиванием под действием сил поверхностного натяжения; 4 — полное растекание капли с одновременным

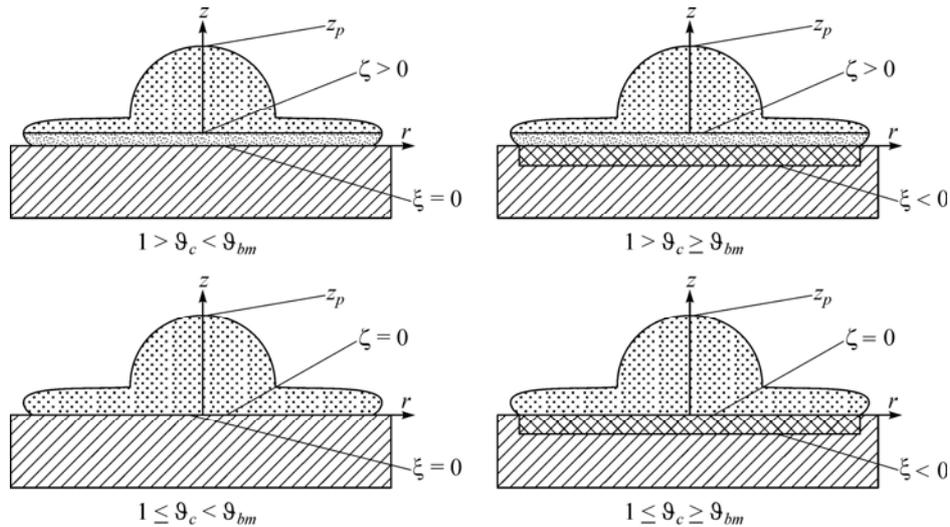


Рис. 2. Базовые сценарии формирования сплэтов при ГТН.

подплавлением основы, последующее охлаждение и затвердевание растекшейся капли и образовавшегося приповерхностного слоя расплава, завершающееся остыванием системы “сплэт–подложка”.

На рис. 2 и далее приняты обозначения: ζ, ξ, z_p — текущие координаты фронта затвердевания в растекающейся капле, фронта плавления основы и вершины деформирующейся частицы, $\vartheta_c, \vartheta_{bm}$ — безразмерные температуры в контакте “частица–основа” и плавления материала основы, $\vartheta = T/T_{pm}$, T_{pm} — температура плавления материала частицы.

В случае относительно малой вязкости и высокой теплопроводности расплава ($Pr \ll 1$) толщина динамического пограничного слоя составляет лишь малую часть теплового слоя (для капель всех металлических расплавов $Pr \sim 10^{-2}$). Таким образом, вязкое течение расплава реализуется в слое с температурой, близкой к температуре стенки T_{pm} , поскольку перепад температуры по сечению вязкого подслоя пренебрежимо мал. Из сказанного следует, что гидродинамические особенности течения в нем не оказывают какого-либо заметного влияния на теплообмен расплава, имеющего температуру $T_{p0} > T_{pm}$, с твердой стенкой (фронтом затвердевания). В данном случае для достаточно больших чисел Рейнольдса $Re = D_p u_{p0} / \nu_{pm}^{(l)}$ и Вебера $We = \rho_{pm}^{(l)} D_p u_{p0}^2 / \sigma_{pm}^{(l)}$ ($\rho_{pm}^{(l)}$, $\sigma_{pm}^{(l)}$ — плотность и поверхностное натяжение расплава при температуре плавления) над вязким слоем имеет место течение, близкое к идеальному растеканию жидкости, в сечении которого и реализуется основной перепад температуры, определяющий тепловой поток в стенку.

В работах [4–7] развита и экспериментально апробирована теория равновесного затвердевания капли металлического расплава при ее деформации на подложке, позволившая без единой эмпирической константы выполнить критериальное обобщение для толщин и диаметров сплэтов, закрепившихся на полированных подложках. Это, в свою очередь, позволило конструктивно подойти к формулировке математических аналогов перечисленных выше требований к сплэтам, формирование которых реализуется по 1-му сценарию, наиболее распространенному в технологиях ГТН.

Полученные решения, характеризующие безразмерную толщину \bar{h}_s и диаметр \bar{D}_s сплэта, а также толщину подплавленного приповерхностного слоя основы \bar{h}_b , в общем виде представляются как

$$\bar{h}_s = c_\zeta \sqrt{Fo^*} \equiv 1 - Pe \cdot Fo^*, \quad \bar{D}_s = \sqrt{2/(3\bar{h}_s)}, \quad \bar{h}_b = c_\xi \sqrt{Fo^*},$$

где $Fo^* = [c_\zeta (\sqrt{1 + 4Pe/c_\zeta^2} - 1) / 2Pe]^2$ — безразмерное время встречи фронта затвердевания расплава с вершиной растекающейся капли, $Pe = D_p u_{p0} / a_{pm}^{(l)}$ — число Пекле. Значения коэффициентов c_ζ и c_ξ , определяющих динамику затвердевания расплава и возможного подплавления подложки в пятне контакта ее с частицей, а также безразмерная температура в контакте ϑ_c , отвечающие 1-му и 2-му сценариям формирования металлических сплэтов, представляющие наибольший практический интерес, приведены в таблице.

Таблица

Решения, отвечающие различным сценариям формирования сплэтов

№ п/п	Зависимости, характеризующие соответствующий сценарий	Примечание
1	$c_\zeta = P[\sqrt{1+4Q/P^2} - 1]/2, \quad c_\xi = 0,$ $P = \frac{\pi\lambda_{p,p}^{(s,l)}\text{Ku}_p^{(l)} + 2(1+\alpha_c)\text{K}_\varepsilon^{(b,p)}(\vartheta_{p0} - 1)}{\sqrt{\pi}\text{K}_\varepsilon^{(b,p)}\text{Ku}_p^{(l)}},$ $Q = \frac{2\lambda_{p,p}^{(s,l)}(1-\vartheta_{b0})}{\text{Ku}_p^{(l)}} \left[1 - \frac{(1+\alpha_c)(\vartheta_{p0} - 1)}{(1-\vartheta_{b0})\text{K}_\varepsilon^{(b,p)}} \right],$ $\vartheta_c = \left(\sqrt{\pi} + \lambda_{p,p}^{(l,s)}\text{K}_\varepsilon^{(b,p)}\vartheta_{b0}c_\zeta \right) / \left(\sqrt{\pi} + \lambda_{p,p}^{(l,s)}\text{K}_\varepsilon^{(b,p)}c_\zeta \right).$	1-й сценарий: деформация и одновременное затвердевание капли на твердой подложке.
2	$c_\zeta = P[\sqrt{1+4Q/P^2} - 1]/2, \quad c_\xi = S_{p,b} \left[c_\zeta + 2(d_2 - d_1)/\text{Ku}_p^{(l)} \right],$ $P = \frac{2[d_2(2S_{p,b} + \lambda_{b,p}^{(l,s)}) - d_1S_{p,b}]}{\text{Ku}_p^{(l)}(S_{p,b} + \lambda_{b,p}^{(l,s)})},$ $Q = \frac{2[2d_2(d_2 - d_1)S_{p,b} - \lambda_{b,p}^{(l,s)}\text{Ku}_p^{(l)}(1 - \vartheta_{bm})]}{(\text{Ku}_p^{(l)})^2 (S_{p,b} + \lambda_{b,p}^{(l,s)})},$ $d_1 = \text{K}_\varepsilon^{(b,p)}(\vartheta_{bm} - \vartheta_{b0})/\sqrt{\pi}, \quad d_2 = (1 + \alpha_c)(\vartheta_{p0}^{(l)} - 1)/\sqrt{\pi},$ $\vartheta_c = 1 - \frac{\lambda_{b,p}^{(l,s)}(1 - \vartheta_{bm})c_\zeta}{S_{p,b}} \left[\frac{2(d_2 - d_1)}{\text{Ku}_p^{(l)}} + \left(1 + \frac{\lambda_{b,p}^{(l,s)}}{S_{p,b}} \right) c_\zeta \right]^{-1}.$	2-й сценарий: деформация и одновременное затвердевание капли расплава с подплавлением подложки в пятне контакта ее с частицей.

$Fo = a_{pm}^{(l)}t/D_p^2$ — критерий Фурье, $\text{Ku}_p^{(l)} = L_{pm}/[c_{pm}^{(l)}T_{pm}]$ — критерий Стефана–Кутателадзе,

$\text{K}_\varepsilon^{(b,p)} = (\lambda_{bm}^{(s)}/\lambda_{pm}^{(l)})\sqrt{a_{pm}^{(l)}/a_{bm}^{(s)}}$ — критерий тепловой активности материала основы к расплаву

частицы, $\lambda_{p,p}^{(s,l)} = \lambda_{pm}^{(s)}/\lambda_{pm}^{(l)}$, L_{pm} — теплота плавления материала частицы. Верхние индексы s, l переменных отвечают твердому и жидкому состояниям материала, в то время как нижние индексы p, b — частице и основе. Дополнительный нижний индекс m характеризует соответствующее свойство материала при его температуре плавления, коэффициент $c_\zeta = P[\sqrt{1+4Q/P^2} - 1]/2$, $0,26$ определяет относительный вклад конвекции расплава в окрестности точки его торможения в сравнении с кондуктивным теплообменом между растекающейся частицей и основой.

Принципиальным отличием развитого нами теоретического подхода от существовавших ранее является то, что с его помощью прогнозируется толщина сплэта в окрестности точки торможения ($2r < D_p$), где допущение об одномерности процессов нестационарного сопряженного теплообмена в системе “частица–подложка”, включая фазовые превращения, достаточно обоснованно. При такой постановке толщина сплэта h_s более жестко связана с ключевыми физическими параметрами взаимодействия $D_p, u_{p0}, T_{p0}, T_{b0}$ и теплофизическими свойствами рассматриваемой пары материалов, соответственно для чисел Рейнольдса $Re > 1000$ и Вебера $We > 200$, характерных для газотермического напыления, и практически не зависит от процессов, протекающих на периферии растекающейся частицы ($2r > D_p$). Следовательно, экспериментальная проверка достоверности разработанной

теории может быть выполнена более корректно и информативно. В то же время, теоретические обобщения, для которых первичным является диаметр сплэта, не учитывают деталей течения в тонкой периферийной пленке расплава, включая ее передний фронт, характеризующийся многообразием конечных форм, для которых зачастую трудно однозначно измерить диаметр, а следовательно, сопоставить его с теоретически предсказанным. Результаты тестирования решения, отвечающего 1-му сценарию формирования сплэтов, приведены в работе [9]. Показано, что рассчитанные значения толщин и диаметров сплэтов удовлетворительно согласуются с экспериментом, в то время как расчеты по известным из литературы зависимостям существенно (до нескольких раз) расходятся с экспериментом.

Развитая и экспериментально апробированная теория формирования металлических сплэтов, учитывающая ключевые физические параметры перед соударением капли с основой, а также теплофизические свойства пары материалов, позволяет с достаточной для практики точностью подойти к решению проблемы проектирования сплэта, удовлетворяющего заданным требованиям. В работе [3] на примере 1-го сценария, наиболее распространенного в технологии ГТН, представлены математические аналоги некоторых условий, накладываемых на геометрические характеристики сплэта.

Как видно из анализа полученных решений (см. табл.), толщина и диаметр металлических сплэтов полностью определяется числом Пекле Pe , начальной температурой частицы T_{p0} и подложки T_{b0} , а также теплофизическими свойствами их материалов. Следовательно, если задать диапазоны потенциального изменения КФП, то для фиксированной пары материалов “частица–основа” исходным пространством КФП будет являться прямоугольный параллелепипед (рис. 3, *a*)

$$\Phi_0 = \left\{ (Pe, T_{p0}, T_{b0}) \mid [Pe_{\min}; Pe_{\max}] \times [T_{p,\min}; T_{p,\max}] \times [T_{b,\min}; T_{b,\max}] \right\}.$$

Для иллюстрации приняты следующие условия: материал частицы — никель, материал подложки — нержавеющая сталь, $D_{p,\min} = 20$ мкм, $D_{p,\max} = 100$ мкм, $u_{p,\min} = 75$ м/с, $u_{p,\max} = 250$ м/с, $T_{p,\min} = 1730$ К, $T_{p,\max} = 3000$ К, $T_{b,\min} = 300$ К, $T_{b,\max} = 500$ К. Подпространства исходного пространства Φ_0 , отвечающие различным сценариям формирования сплэтов, представлены на рис. 3 (сценарий 1 — *b*, 2 — *c*, 4 — *d*, 3 — *e* (пустое множество)).

3. ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ

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 КФП. Вторая подсистема — «ПОКРЫТИЕ», исходя из набора значений КФП, 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.

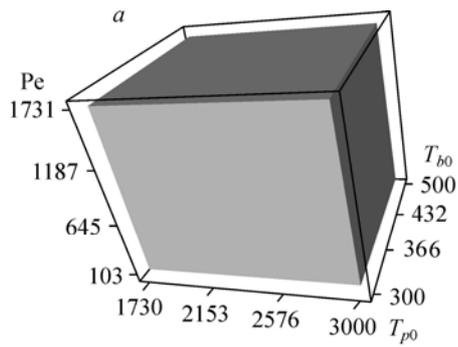
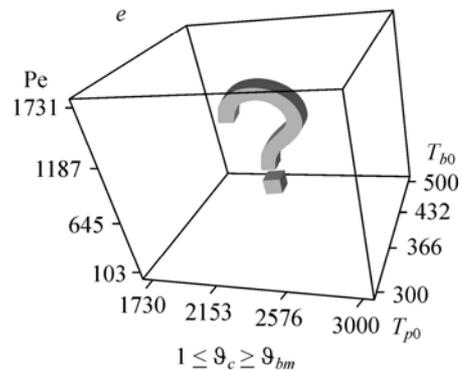
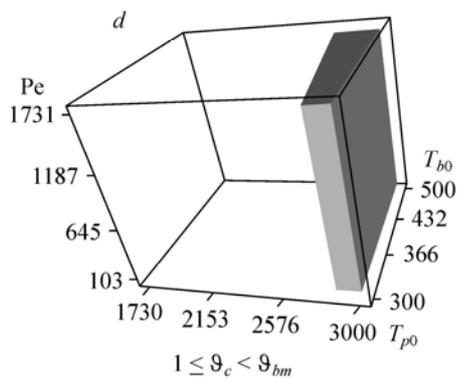
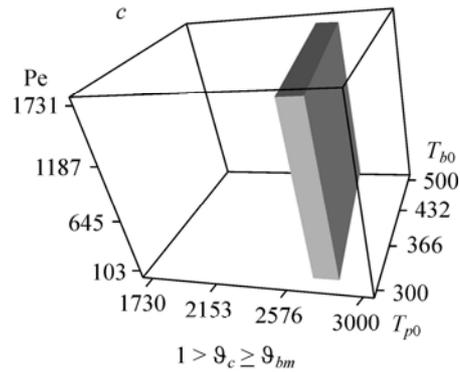
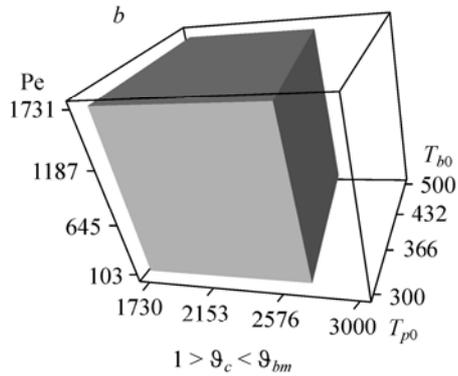


Рис. 3. Базовые сценарии при соударении капли расплава никеля с основой из нержавеющей стали.

a — исходное фазовое пространство ключевых физических параметров взаимодействия “капля расплава (никель) — основа (нержавеющая сталь)”: $Pe \in [Pe_{\min}; Pe_{\max}]$, $T_{p0} \in [T_{p,\min}; T_{p,\max}]$, $T_{b0} \in [T_{b,\min}; T_{b,\max}]$.



Подсистема «СПЛЭТ». Основным принцип работы подсистемы «СПЛЭТ», как отмечалось выше, заключается в последовательном усечении исходного операционного пространства КФП в зависимости от требований, формулируемых к сплэту. В качестве исходного пространства используется трехмерное пространство, оси которого определяются пользователем из списка КФП: T_{p0} , T_{b0} , u_{p0} , D_p , либо число Pe вместо двух последних параметров. Для каждой из осей задается минимальное и максимальное значение параметра, которые ограничивают область исследуемого пространства по данному параметру. Ограничение представляется некоторой функцией (либо неравенством), разделяющей операционное пространство параметров на две области: область с выполнением условий-ограничений и область, в которой условие не может быть выполнено. В результате этого происходит сужение пространства КФП. В качестве ограничений могут выступать требования, предъявляемые к размерам сплэта, к диапазонам изменения скорости и температуры частиц, температуры подложки в процессе растекания капли расплава. Список наиболее важных требований, предъявляемых к сплэту, приведен выше.

В частности, 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, последовательно формулируя ограничения на условия формирования сплэта, мы получаем подпространство исходного пространства КФП, в котором одновременно выполняются все сформулированные требования. Если же некоторые требования противоречат друг другу, конечное множество КФП окажется пустым.

Отдельными блоками подсистемы «СПЛЭТ» являются модули анализа прямой и обратной чувствительности “толщина сплэта ↔ КФП”, а также построение корреляционных зависимостей для характеристик сплэтов при изменении одного из КФП, что представляется полезным для анализа качественных и количественных закономерностей процесса напыления.

Приведенные выше приближенные теоретические решения для толщины и диаметра сплэтов, отвечающие первым двум сценариям, получены при условии идеальности контакта между растекающейся и затвердевающей частицей и основой. Данное допущение для растекания расплава в окрестности точки торможения ($2r < k_1 D_p$, где $1 < k_1 < 1,2$), вследствие высокого напорного давления, выполняется с достаточной точностью даже для шероховатой подложки при высоте элементов шероховатости меньше конечной толщины сплэта.

На рис. 4 представлены поперечные разрезы сплэтов никеля на кремниевой подложке с модельной шероховатостью поверхности в виде прямоугольных параллелепипедов высотой 1 мкм, сечением которых являются квадраты со стороной

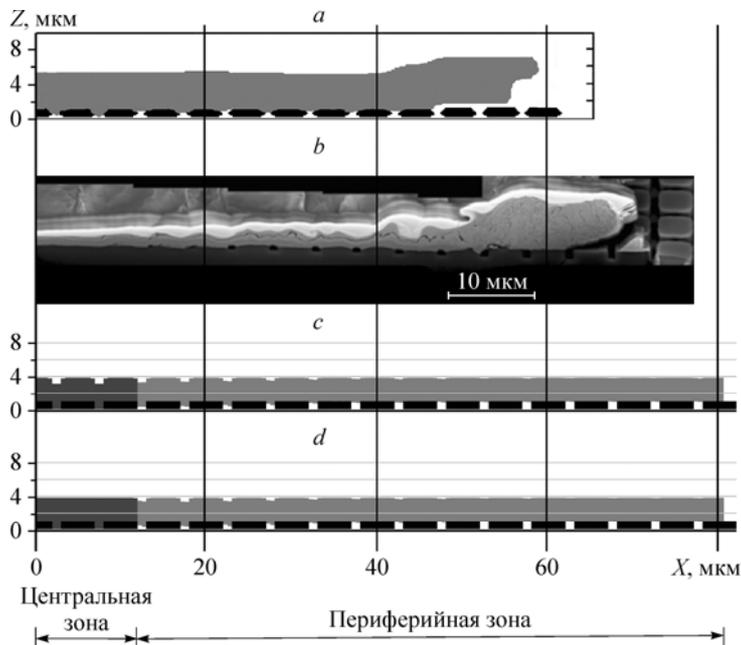


Рис. 4. Поперечный разрез сплэтов, полученных при растекании капли никеля на кремниевой подложке, имеющей модельную шероховатость: *a* — результат расчета [10], *b* — экспериментальный сплэт из работы [10], *c*, *d* — расчет по формулам таблицы, отвечающим 2-му сценарию формирования сплэта.

4 мкм, и расстоянием между соседними параллелепипедами равным 1 мкм. Поперечные разрезы сплэтов сделаны на удалении 20 мкм от их центров. Согласно работе [10], значения КФП были приняты следующими: $D_p = 50$ мкм, $u_{p0} = 70$ м/с, $T_{p0} = 2663$ К, $T_{b0} = 623$ К. Данные параметры взаимодействия “капля–подложка” отвечают 2-му сценарию формирования сплэта, причем согласно теоретическому решению (см. табл.), гладкая подложка в окрестности лобовой точки должна подплавиться на глубину 2,3 мкм, что должно привести к расщеплению элементов шероховатости в ядре сплэта, вследствие напорного давления, которое практически исчезает к периферии сплэта. На рис. 4, *a* представлен результат расчета [10], выполненного с использованием модели, основанной на уравнениях Навье–Стокса, дополненной уравнением переноса энтальпии расплава. Поскольку модель не учитывает сопряженный теплообмен между растекающейся каплей и подложкой и фазовые превращения в последней, она не позволяет проводить корректный расчет для 2-го сценария формирования сплэта. Рис. 4, *b* иллюстрирует поперечный разрез экспериментального сплэта, для которого видно выглаживание элементов шероховатости в окрестности точки торможения. И, наконец, на рис. 4, *c*, *d* представлены поперечные разрезы цилиндрических сплэтов, полученные с использованием приближенного аналитического решения для 2-го сценария (см. табл.) с учетом полного затекания расплава в окрестности точки торможения. Верхняя поверхность сплэта на рис. 4, *c* полностью повторяет топологию поверхности подложки, в то время как рис. 4, *d* отвечает более реалистичному случаю, когда к моменту полного формирования сплэта, толщина которого превосходит высоту элементов шероховатости, происходит выглаживание его поверхности. Это следует из элементарных оценок для отношения характерных времен восстановления вогнутой (выпуклой) полусферической поверхности расплава $t_r \sim \mu_{pm}^{(l)} \Delta / \sigma_{pm}^{(l)}$ и растекания капли $t_d \sim D_p / u_{p0}$, которое для никеля имеет порядок $t_r / t_d \sim 10^{-2}$. Следовательно, в процессе растекания капли микронеоднородности ее поверхности с характерным размером порядка 1 мкм исчезают практически мгновенно.

Подсистема «ПОКРЫТИЕ» обеспечивает моделирование процесса формирования покрытия, т.е. реализует послынную укладку сплэтов на основу — подложку или напыляемое покрытие при последовательном нормальном соударении отдельных микрокапель металлического расплава в зависимости от заданных КФП.

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 (КП) — фрагментом всего покрытия в виде прямоугольного параллелепипеда, нижнее основание которого является гранью в виде прямоугольника или квадрата (частью предварительно обработанной поверхности подложки), а верхнее имеет определенный рельеф, который изменяется в процессе напыления. Размеры КП должны быть такими, чтобы его структура при моделировании была адекватна структуре аналогичного КП 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, а также их эффективная толщина и диаметр. Вид материалов напыляемых частиц и подложки, значения КФП, отвечающие выбранному режиму напыления, а также параметры КП 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 КП 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 теоретическим решениям, представленным в таблице, а сам алгоритм укладки подробно изложен в [11].

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 [11]. 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 , формируется аппроксимирующая 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 и 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 ($u_r = \beta r z$) и нормальной составляющих ($u_z = -\beta z^2$) скорости растекания капли согласно [11], отвечающих привязанной к центру сплэта локальной цилиндрической системе координат.

В процессе моделирования КП используется дискретизация в виде прямоугольной сетки узловых точек в плоскости XY (d_x и d_y — соответственно, шаги дискретизации по осям X и Y). Площадь одного элементарного прямоугольника $dS = d_x d_y$. 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).

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. То есть, эффективная контактная площадь S_{eff} сплэта с поверхностью окажется меньше расчетной площади πR_S^2 основания сплэта на суммарную площадь тех элементарных площадок ($dS = d_x d_y$), на которые жидкость капли не может натекает.

Как уже говорилось выше, в любом случае Z -координаты точек нижнего основания сплэта из зоны ядра должны остаться неизменными и после сплайн-аппроксимации, но тогда возможно возникновение больших перепадов (разрывов) на расчетной поверхности нижнего основания сплэта в точках круговой границы между ядром и периферийной частью сплэта. Поэтому, чтобы исключить возможность таких перепадов (разрывов), перед сплайн-аппроксимацией используется одно из свойств B -сплайновых поверхностей [12]. А именно, если продублировать одну из точек хотя бы 2 раза (сделать ее повторной с кратностью 3), тогда в результате сплайн-аппроксимации расчетная B -сплайновая поверхность практически проходит через эту опорную повторную вершину. Следуя этому свойству, в алгоритме обеспечивается кратность повторности вершин круговой границы ядра сплэта не ниже 3 (обе размерности опорного массива вершин возрастают на 4).

Таким образом, по сформированному опорному массиву вершин для нижнего основания сплэта рассчитывается гладкая поверхность $Z = F_1(X, Y)$ с использованием составных рациональных B -сплайновых поверхностей в параметрической форме [11]:

$$R_{i,j}(u, v) = \begin{pmatrix} X_{i,j}(u, v) \\ Y_{i,j}(u, v) \\ Z_{i,j}(u, v) \end{pmatrix} = \frac{\sum_{k=0}^3 \sum_{l=0}^3 w_{kl} \cdot n_k(u) \cdot n_l(v) \cdot P_{k-1+i, l-1+j}}{\sum_{k=0}^3 \sum_{l=0}^3 w_{kl} \cdot n_k(u) \cdot n_l(v)}, \quad 0 \leq u, v \leq 1, \quad (1)$$

$$i = 0, 1, 2, \dots, m, \quad j = 0, 1, 2, \dots, n, \quad m = n = D_s,$$

$$\sum_{k=0}^3 \sum_{l=0}^3 n_k(u) n_l(v) = 1. \quad (2)$$

Функциональные коэффициенты $n_k(u)$ определяются по формулам $n_0(u) = (1-u)^3/6$, $n_1(u) = (3u^3 - 6u^2 + 4)/6$, $n_2(u) = (-3u^3 + 3u^2 + 3u + 1)/6$, $n_3(u) = u^3/6$ и подчиняются условию «нормировки» (2). При этом кубические многочлены $n_k(u)$ рассчитываются по аналогичным формулам с учетом замены параметра u на v (в расчетах параметры u и v фиксированы). Как видно из (1), для расчета координат каждой точки $R_{i,j}(u, v)$ используются 16 опорных вершин $P_{k-1+i, l-1+j}$, где $k = 0, 1, 2, 3$. Среди этих 16-ти Z -координат опорных вершин $P_{k-1+i, l-1+j}$ определяются Z_{\min} и Z_{\max} , с помощью которых для этих 16-ти опорных вершин определяются весовые коэффициенты w_{kl} следующим образом:

$$w_{k,l} = 1 + k_w \cdot \frac{Z_{k-1+i, l-1+j} - Z_{\min}}{Z_{\max} - Z_{\min}}. \quad (3)$$

Формула (3) для более высоких Z -координат определяет более высокий вес, тем самым обеспечивая свойство аппроксимации: чем выше вес, тем ближе расчетная точка B -сплайновой поверхности $R_{i,j}(u,v)$ будет располагаться к соответствующей опорной вершине. Степень близости можно регулировать параметром k_w (вычислительный эксперимент показал, что его значение находится в диапазоне примерно от 2 до 5). Как видно из (1) и (3), несмотря на то, что при изменении в двойном (i, j) -цикле каждый раз на одной индексной переменной (например, переменной j) из 16-ти вершин 12 вершин повторяются, однако значения соответствующих им весов, в общем случае, изменяются. Каждый раз, учитывая локальное окружение для текущей опорной вершины, весовые коэффициенты позволяют регулировать форму нижнего основания сплэта и, тем самым, регулировать форму и эффективные размеры пор, образующихся под сплэтами.

В результате сплайн-аппроксимации некоторые расчетные Z -координаты точек B -сплайновой поверхности могут оказаться ниже соответствующих Z -координат точек напыляемой поверхности, на которую укладывается сплэт. В этом случае, исходя из физического смысла, в алгоритме такие заниженные расчетные Z -координаты точек B -сплайновой поверхности заменяются на Z -координаты соответствующих им точек напыляемой поверхности, на которую укладывается сплэт. Затем из массива пересчитанных в результате сплайн-аппроксимации вершин $\{\tilde{P}_{i,j}\}$, проекция которых на плоскость XU образует квадратный участок напыляемой поверхности с центром в лобовой точке (x_p, y_p) , из квадратного участка отбрасываются вершины поверхности, не входящие в зону сплэта. К тому же, восстанавливаются координаты опорных вершин из зоны ядра сплэта и тех точек периферийной кольцевой зоны сплэта, на которые натекания жидкости не происходит. В результате таких коррекций в соответствующей структуре данных сохраняется множество координат точек поверхности $Z = F_1(X, Y)$ нижнего основания сплэта, однако гладкость такой поверхности не гарантирована. Напротив, в расчетах поверхности $Z = F_2(X, Y)$ верхнего основания сплэта с учетом свойств растекания и затвердевания жидкой фазы частиц должно быть обеспечено условие гладкости поверхности верхнего основания сплэта, в результате чего поверхности нижнего и верхнего оснований сплэта не будут параллельными (это адекватно реальной ситуации). При расчете $Z = F_2(X, Y)$ необходимо учитывать различные случаи топологии поверхности, на которую укладывается сплэт.

Например, если толщина сплэта h_s меньше глубины шероховатости участка поверхности, на который укладывается ядро сплэта, тогда в качестве поверхности верхнего основания сплэта можно принять

$$Z = F_2(X, Y) = \tilde{F}_1(X, Y) + \tilde{h}_s, \quad (4)$$

где $Z = \tilde{F}_1(X, Y)$ — результат сплайн-сглаживания поверхности $Z = F_1(X, Y)$ нижнего основания сплэта (с учетом всех выше оговоренных коррекций), а

$$\tilde{h}_s = \bar{h}_s - \Delta\bar{h}_s. \quad (5)$$

Величина \bar{h}_s учитывает выше оговоренную коррекцию площади контакта S_{eff} вместо πR_S^2 в виде

$$\bar{h}_s = V_p / S_{\text{eff}} = h_s \cdot (\pi R_S^2 / S_{\text{eff}}). \quad (6)$$

Поправка $\Delta\bar{h}_S$ учитывает замену поверхности $Z = F_1(X, Y)$ нижнего основания сплэта на результат ее сплайн-сглаживания $Z = \tilde{F}_1(X, Y)$ при определении $Z = F_2(X, Y)$ в выражении (4) и обеспечивает равенство объема исходной капли объему сплэта. Для определения поправки $\Delta\bar{h}_S$ обозначим через $\rho_S = \{(i, j)_S\}$ — множество пар индексов, которыми пронумерованы элементарные площадки проекции сплэта на плоскость XY в количестве N_S . Тогда баланс объемов, заключенных между поверхностями $Z = \tilde{F}_1(X, Y)$ и $Z = F_1(X, Y)$ с учетом знака, определяется выражением $\Delta V = dS \cdot \sum_{(i,j) \in \rho_S} (\tilde{Z}_{i,j}^{(1)} - Z_{i,j}^{(1)}) = N_S \cdot dS \cdot \Delta\bar{h}_S$, из которого следует выражение для поправки

$$\Delta\bar{h}_S = \sum_{(i,j) \in \rho_S} (\tilde{Z}_{i,j}^{(1)} - Z_{i,j}^{(1)}) / N_S. \quad (7)$$

Рассмотрим другой случай, когда толщина сплэта h_S больше глубины шероховатости участка поверхности, на который укладывается ядро сплэта, и в зоне ядра сплэта имеются углубления типа кратеров, которые должны заполняться по крайней мере до минимальной Z -координаты одной из точек края кратера. Тогда при определении с помощью сплайн-аппроксимации поверхности $Z = F_1(X, Y)$ нижнего основания сплэта Z -координаты опорных внутренних вершин кратеров в зоне ядра сплэта можно заменить на минимальные Z -координаты точек краев этих кратеров. Оставшийся объем капли $\bar{V}_p = V_p - \sum_i V_{cr,i}$, где $\sum_i V_{cr,i}$ — суммарный объем заполненных кратеров, определит эффективную толщину сплэта по формуле, аналогичной соотношению (6): $\bar{h}_S = \bar{V}_p / S_{\text{eff}}$. Поверхность верхнего основания сплэта далее определяется аналогично описанной выше процедуре с дополнительной поправкой $\Delta\bar{h}_S$ согласно (7).

Алгоритм укладки на поверхность очередного сплэта циклически повторяется до тех пор, пока не будет исчерпано заданное значение расхода частиц N_p .

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Как уже говорилось выше, в процессе моделирования КП используется дискретизация в плоскости XY в виде прямоугольной сетки узловых точек (d_x и d_y — соответственно шаги дискретизации по осям X и Y) с учетом того, что вычисления производятся в вещественном формате, а результаты вычислений координат по осям X и Y округляются до целых (Z -координаты остаются в вещественном формате). Размеры основания КП 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 КП определяется суммарным объемом элементов разбиения (ЭР), каждый из которых имеет площадь основания $dS = d_x d_y$, а их количество в КП равно $N = N_x N_y$. В силу пористости в каждом ЭР чередуются незаполненные (полые) и заполненные части объема ЭР.

Введем обозначения: $h_{i,j}^{(k)}$ — высота k -ой заполненной части (вдоль оси Z), где $k = 1, 2, \dots, K_{i,j}$ и $K_{i,j}$ — число заполненных частей в (i, j) -ом ЭР, i и j — координаты ЭР в плоскости XY (в плоскости подложки), $H_{i,j}$ — высота (i, j) -го ЭР,

$d_x d_y \sum_{k=1}^{K_{i,j}} h_{i,j}^{(k)}$ — суммарный объем заполненных частей ЭР; $d_x d_y H_{i,j}$ — полный объем ЭР, $P_{i,j}^{(\text{ЭР})} = 1 - \sum_{k=1}^{K_{i,j}} h_{i,j}^{(k)} / H_{i,j}$ — оценка эффективной пористости (i, j) -го ЭР.

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 $i = 1, 2, \dots, N_y$) и для всего КП в целом:

$$P_i = 1 - \frac{\sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{K_{i,j}} h_{i,j}^{(k)}}{\sum_{j=1}^{N_y} H_{i,j}}, \quad P_j = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{N_x} \sum_{k=1}^{K_{i,j}} h_{i,j}^{(k)}}{\sum_{i=1}^{N_x} H_{i,j}}, \quad P_{\text{КП}} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{K_{i,j}} h_{i,j}^{(k)}}{\sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} H_{i,j}}. \quad (8)$$

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

$$P_i^{(l)} = 1 - \left(\sum_{j=1}^{N_y} \gamma_{i,j}^{(l)} \right) / N_y, \quad P_j^{(l)} = 1 - \left(\sum_{i=1}^{N_x} \gamma_{i,j}^{(l)} \right) / N_x, \quad (9)$$

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

Определив минимальную и максимальную высоты среди ЭР 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:

$$\Delta H_i = M_i - m_i, \quad \Delta H_j = M_j - m_j. \quad (10)$$

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

$$\Delta H_{\text{КП}} = H_{\max} - H_{\min}, \quad (11)$$

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

Отображение результатов моделирования производится в виде трехмерной сцены (рис. 5, а) с возможностью отображения пористой структуры шлифов (тонких пластинок, вырезанных из КП, с толщиной в один шаг дискретизации), с гистограммами распределения пористости по слоям покрытия (рис. 5, б) и первого монослоя КП на подложке (рис. 5, в). Для этого случая размер тестовой медной подложки 2×2 мм. Размеры напыляемых частиц (никель) $D_p = 20\text{--}40$ 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 эффективной пористости по 4 слоям (шлифам) — 8...9 % (рис. 5, б), общая эффективная пористость КП — $P_{\text{КП}} = 8,5$ %, шероховатость поверхности КП — $\Delta H_{\text{ПК}} = 60$ мкм ($\bar{H}_{\text{КП}} = 363$ мкм).

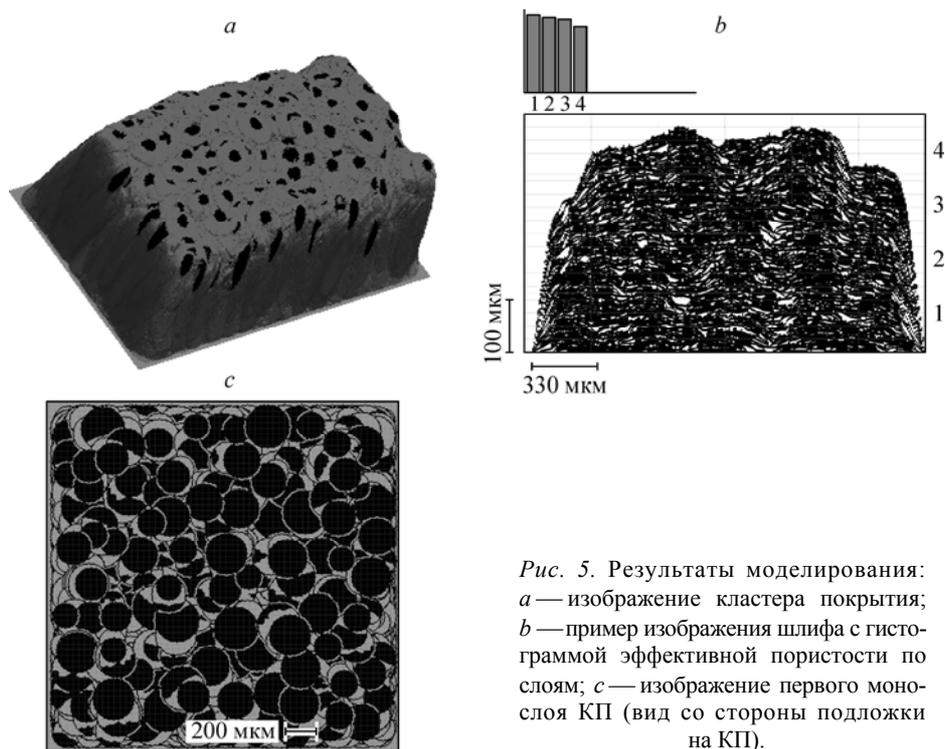


Рис. 5. Результаты моделирования: *a* — изображение кластера покрытия; *b* — пример изображения шлифа с гистограммой эффективной пористости по слоям; *c* — изображение первого монослоя КП (вид со стороны подложки на КП).

Кроме того, численные эксперименты позволили определить зависимость общей эффективной пористости от шага дискретизации d (рис. 6), позволяющую вводить относительную поправку на значение пористости в зависимости от шага дискретизации (при $d < 1$ мкм пористость, при прочих равных условиях, практически не меняется). Зависимости пористости кластера покрытия от изменения скорости напыляемых частиц никеля при напылении на медную и стальную подложки представлены на рис. 7. Как видно, на более теплопроводной медной подложке пористость покрытия выше, что обусловлено более интенсивным затвердеванием растекающихся капель при формировании первых монослоев покрытия.

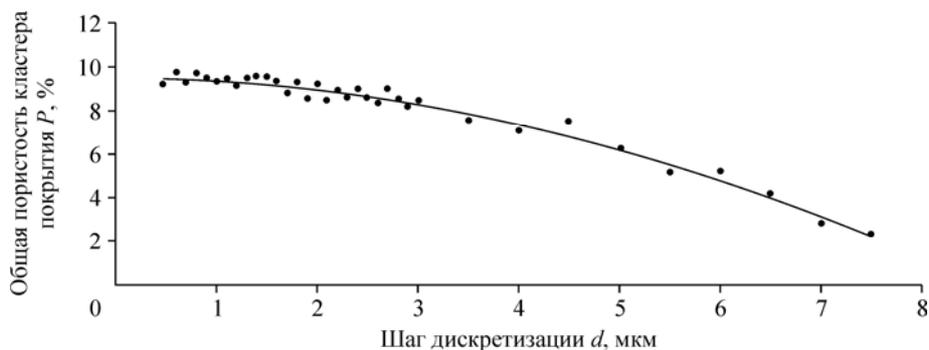


Рис. 6. График зависимости общей пористости кластера покрытия от шага d дискретизации в плоскости подложки ($d = d_x = d_y = d_z$).

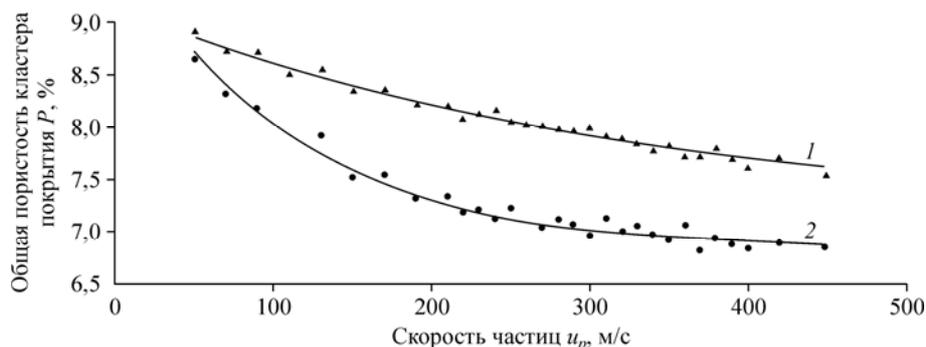


Рис. 7. График зависимости эффективной пористости кластера покрытия от скорости частиц никеля, напыляемых на медную (1) и стальную (2) подложки.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотренные в настоящей статье подходы к моделированию процесса формирования слоистой структуры газотермических, в том числе плазменных покрытий при напылении порошков металлов и оценка их структурно-функциональных характеристик позволяют целенаправленно проектировать и оптимизировать покрытия с необходимыми для практики свойствами. При этом появляется возможность формулировать требования к оборудованию и исследовать его потенциальные технологические возможности с точки зрения обеспечения заданных характеристик покрытия.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Жуков М.Ф., Солоненко О.П. Высокотемпературные запыленные струи в процессах обработки порошковых материалов. Новосибирск: Изд. ИТ СО РАН, 1990. 516 с.
2. Кудинов В.В. Плазменные покрытия. М.: Наука, 1977. 184 с.
3. **Высокоэнергетические** процессы обработки материалов / О.П. Солоненко, А.П. Алхимов, В.В. Марусин и др. Новосибирск: Наука. Сиб. изд. фирма РАН, 2000. 425 с.
4. Солоненко О.П., Смирнов А.В. Соударение капли расплава с поверхностью. Теория и модельный эксперимент // Докл. РАН. 1998. Т. 363, № 1. С. 46–49.
5. Solonenko O.P. Equilibrium solidification of melted microdroplets under their collision with substrate: Theory and its application in thermal spray technology // Thermal Plasma Torches and Technologies. Vol. 2. Thermal Plasma and Allied Technologies: Research and Developments / Ed. by O.P. Solonenko. Cambridge, England, Cambridge Inter. Sci. Publ., 2001. P. 78–98.
6. Solonenko O.P., Smirnov A.V. Equilibrium solidification of melted microdroplets under their collision with substrate: Model experiment and criterial generalization of splat morphology. Ibid. P. 99–113.
7. Solonenko O.P., Shurina E.P., Gobysh A.V. New approach to computer-aided design and optimization the plasma spray process: concept and software/ In coll.: "Progress in Plasma Processing of Materials 2003"/ Ed. by P.Fauchais, New York, Begell House, Inc., USA. P. 431–438.
8. Solonenko O.P. Sensitivity analysis and inverse link 'outlet coating characteristics – torch operating conditions' in thermal spray technology // Proc. of 14th Intern. Symp. on Plasma Chem., 2-6 August, Praha, 1999. Vol. 4. P. 1995–2000.
9. Смирнов А.В. Экспериментальное исследование взаимодействия капель металлических расплавов с основой // Автореф. дисс. канд. физ.-мат. наук, ИТПМ СО РАН, 2000. 20 с.
10. Parizi H.B., Rosenzweig L., Mostaghimi J. et al. Numerical Simulation of Droplet Impact on Patterned Surfaces // Thermal Spray 2007: Global Coating Solutions (Ed.) B.R. Marple, M.M. Hyland, Y.-C. Lau, C.-J. Li, R.S. Lima, G. Montavon Published by ASM Intern., Materials Park, Ohio, USA, 2007. P. 213–218.
11. 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 политехнического университета. 2010. Т. 317, № 5. С. 82–87.
12. Шикин Е.В., Плис А.И. Кривые и поверхности на экране компьютера. Руководство по слайдам для пользователя. М.: Диалог-Мифи, 1996. 240 с.

Статья поступила в редакцию 21 декабря 2010 г.