

ТЕХНОЛОГИИ

УДК 621.793.74:681.3.06

**ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ГОМОГЕНИЗАЦИИ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ
ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ПРОЦЕССА
ПЛАЗМЕННОГО НАПЫЛЕНИЯ ПОКРЫТИЙ**Т.А. КАШКО¹, С.П. КУНДАС¹, С.В. БОРДУСОВ¹, Е. LUGSCHEIDER², R. NICKEL²

¹ Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
П. Бровка, 6, Минск, 220013, Беларусь;

² Materials Science Institute, Aachen Technical University, Aachen, Germany

Поступила в редакцию 23 сентября 2003

В статье предложен метод гомогенизации физических и механических свойств покрытий исходя из содержания в их структуре различного вида дефектов (пор, микротрещин и др.) с применением полученного аналога для дальнейшего моделирования системы покрытие–основание с помощью программного комплекса MSC-MARC. Метод основан на требовании аналогичности физического поведения гомогенизированной во всей области системы и не-гомогенного барьерного покрытия. В рамках методики возможно применение нелинейных моделей для описания поведения материала при термических и механических нагрузках.

Ключевые слова: плазменное напыление, компьютерное моделирование, гомогенизация.

Введение

Атмосферное плазменное напыление (APS) в настоящее время широко применяется для нанесения различных видов покрытий, в частности антикоррозионных и термобарьерных (ТВС). Эффективным методом исследования, разработки и оптимизации процессов плазменного напыления покрытий является компьютерное моделирование [1]. Следует отметить, что разработанные в настоящее время модели покрытий [1] не позволяют в полной мере учитывать влияние дефектов микроструктуры на свойства покрытий. Авторами предложено использовать для этих целей метод гомогенизации физических и механических свойств покрытий исходя из содержания в их структуре различного вида дефектов (пор, микротрещин и др.) с применением полученного аналога для дальнейшего моделирования напряженно-деформированного состояния системы покрытие–основание с помощью программного комплекса MSC-MARC. Применение метода конечных элементов (МКЭ) для моделирования свойств покрытий из стабилизированного оксида циркония (PYSZ), полученного методом атмосферного напыления, являлось объектом исследований, проведенных в настоящей работе.

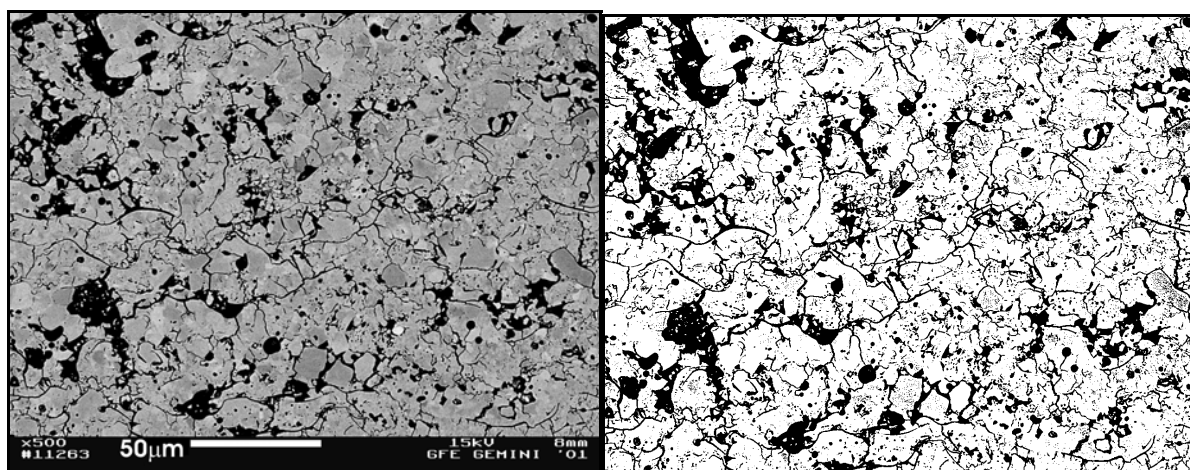
Характеристика микроструктуры ТВС-покрытий

Керамические APS-покрытия характеризуются ламельной структурой, высокой пористостью и наличием микротрещин. Пористость является важной характеристикой покрытий и определяет его качество, причем объемная доля пористости ТВС-покрытий для достижения их

продолжительного периода жизни должна находиться в пределах 10–15 %. Для микроструктуры этих покрытий характерно наличие мезо- и микропор, а также сети микротрещин.

Известно, что выбор параметров напыления может влиять на микроструктуру, пористость, среднюю длину трещин, форму и ориентацию пор, трещин и других дефектов. Эта зависимость должна быть учтена в разрабатываемой материальной модели и свойствах ТВС-покрытия, которые используются для анализа напряженно-деформированного состояния (НДС) в программном комплексе MSC-MARC. Информационным базисом метода гомогенизации явились снимки электронной просвечивающей микроскопии (SEM) специально приготовленных шлифов покрытия, полученных для разных параметров напыления, один из которых приведен на рис. 1,а. Это типичное сечение ТВС-покрытия, сформированного атмосферным плазменным напылением для установленного набора параметров процесса [2]. Более светлые области представляют собой керамический материал, темные и практически черные — поры и микротрещины.

Для использования SEM-изображений в разрабатываемой модели при предположении наличия лишь двух фаз (материала керамики, которому приписывается белый цвет, и материала пустот, представляющего собой поры, трещины и прочие дефекты и являющегося смесью воздуха, плазмообрустающего газа и других включений, ему приписан черный цвет) осуществляется дискретизация фазовой структуры покрытия. На рис. 1,б представлена черно-белая дигитализация микроструктуры покрытия (рис. 1,а), в которой серые области оригинального изображения переведены в один из двух цветов в зависимости от уровня серого цвета и устанавливаемого предела шкалы, разделяющего материалы керамики и пустот.



а

б

Рис. 1. SEM-изображение APS-покрытия (а) и его черно-белая дискретизация (б)

Оригинальное изображение и его дискретизация описывают двумерное сечение трехмерного покрытия, перпендикулярное его поверхности, и его микроструктуру. Гомогенизация применена к двумерной модели микроструктуры, что является вторым допущением в разработанном методе, так как экспериментально трехмерные изображения получить достаточно сложно, а расчет трехмерных моделей значительно увеличивает объем вычислений и время расчета.

Методика гомогенизации

Применение метода гомогенизации позволяет перенести микроскопические данные в макроскопическое описание поведения материала покрытия. Возможный алгоритм гомогенизации для периодических структур описан, например, в [3]. В этом подходе к построению алгоритма гомогенизации предполагается, что поры, микротрещины и прочие дефекты распределены в основе периодически, а размеры их очень малы сравнительно с размерами покрытия (а именно — его толщиной). При рассмотрении микроструктуры PYSZ (см. рис. 1) сложно вы-

явить ее периодичность, по крайней мере — невозможно напрямую убедиться в наличии какой-либо доминирующей периодичности. Поэтому авторами предложен альтернативный путь гомогенизации поведения материалов для применения в континуальной модели при МКЭ-анализе, основанный на требовании аналогичности физического поведения гомогенизированной во всей области системы и негомогенного ТВС. Физическая величина, рассчитанная для гомогенизированных свойств материала, интегрированная по гомогенизированной области, должна совпадать с величиной, интегрированной по негомогенной области тех же размеров. Разработанный алгоритм предполагает моделирование поведения негомогенной системы, проводимое при помощи МКЭ. Конечно-элементное разбиение модели проведено в MSC-MARC/MENTAT 2001 по оцифрованному черно-белому SEM-изображению покрытия. Каждый пиксель представлен двумерным конечным элементом, свойства материала которого определены цветом этого пикселя, черный задает элемент с материалом "пустот", а белый — с ТВС-покрытия [4].

В общем случае гомогенизации подлежат не только термодинамические и механические свойства материалов, но и основные физические свойства, такие, например, как плотность, гомогенизация которой основана на законе сохранения массы [4]. Физическим критерием для проведения гомогенизации теплопроводности материала является равнозначность полных тепловых потоков в не- и гомогенной системах для определенной статической краевой задачи теплопроводности. При этом используются физические предположения, аналогичные реализованным в программе ТВС-TOOL фирмы Onega [5]. Различие состоит в применяемом численном методе для нахождения решения граничной задачи [4] (в работе [5] используется метод конечных разностей). Гомогенизированная удельная теплоемкость рассчитывается в рамках предположения о равенстве энергий, необходимых для перевода обеих систем из одного установившегося состояния в другое [4].

Для гомогенизации механических свойств разработан алгоритм, в котором в качестве энергетического критерия используется общая энергия деформации [4]. В рамках построенной модели рассматривается одноосное растяжение образца. По кривым зависимости напряжение–деформация (они могут быть получены экспериментально из изучения одноосного напряженного состояния и широко используются для описания механического поведения материалов как базис и одновременно результат теоретических моделей) определяются механические свойства материалов, причем не только в одноосном случае. Переход к описанию многоосного напряженного состояния можно осуществить при помощи эквивалентного напряжения Фон Мизеса (EQMS) [4].

Таким образом, для получения зависимости напряжение–деформация для гомогенного материала предполагается, что для обоих материалов при одних и тех же граничных условиях равна полная энергия деформации, что для 2D модели гомогенизированного материала записывается как

$$\sigma_{xx}^h \varepsilon_{xx}^h A = \sigma_v^h \varepsilon_v^h A = \int_A^{ih} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} dA, \quad (1)$$

где $\sigma_{xx}^h \varepsilon_{xx}^h A = \sigma_v^h \varepsilon_v^h A$ — полная энергия деформации для гомогенной модели (при одноосном растяжении ненулевыми являются лишь компоненты тензоров напряжений и деформаций

$\sigma_{xx}^h, \varepsilon_{xx}^h$, равные эквивалентным их значениям $\sigma_v^h, \varepsilon_v^h$); $\int_A^{ih} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} dA$ — полная энергия деформации для негомогенной (*ih*) модели (интеграл по площади тела *A*).

На основе вышеприведенной методики, предполагая известными кривые зависимости напряжение–деформация (т.е. законы НДС) для обоих материалов, можно получить гомогенизированную кривую зависимости напряжение–деформация. При этом могут рассматриваться различные модели поведения материала, в частности, линейно-упругое и упругопластическое поведение.

В рамках модели линейной упругости для каждой фазы естественно предположить линейную упругость и для гомогенной среды, в этом случае гомогенизированный модуль Юнга

E_h получается после замены ε_{xx} в (1) по закону Гука в предположении о равенстве напряжений отклика внешней распределенной нагрузки [4].

При моделировании гомогенизации в рамках упругопластичности PYSZ-APS-покрытия выбраны упругопластическая материальная модель для материала керамики и упругая – для материала "пустот" (вкладом последней фазы материала можно пренебречь) [4].

В разработанной модели для обеспечения лучшей сходимости и вычислительной стабильности была выбрана идеальная упругопластическая модель [4]. Искомая кривая для заданной микроструктуры получается из уравнения (1). Для негомогенной системы по найденному решению механической задачи гомогенное эквивалентное напряжение фон Мизеса находится вычислением среднего значения по всему рассматриваемому образцу, тогда гомогенная эквивалентная деформация может быть рассчитана:

$$\varepsilon_v^h = \int_A \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} dA \Big/ \int_A \sigma_v dA .$$

Точки $(\varepsilon_v, \sigma_v)$ рассчитаны для различных распределенных нагрузок, причем приращение нагрузки происходит автоматически в течение МКЭ-анализа (для компонент напряжения и деформации в предположении малости полных и инкрементальных деформаций и перемещений используется формулировка Эйлера). В этом случае связь между эквивалентными напряжением и деформацией может быть установлена без рассмотрения разгрузки и зависимости от истории нагружения.

Полученные кривые могут быть привязаны к эмпирическим законам деформационной теории пластичности путем адаптации параметров последних и расширения до трехмерной задачи [6].

Результаты гомогенизации

В соответствии с разработанной методикой проведена серия экспериментов по напылению покрытий на основе PYSZ [2, 4]. Из полученных при различных режимах напыления образцов покрытия изготавливались шлифы поперечного сечения для исследования их микроструктуры на электронном сканирующем микроскопе. Методы гомогенизации свойств материалов применены к SEM-изображениям микроструктуры покрытия.

Гомогенизация микроструктуры проведена для двух режимов напыления: плазмообразующий газ — 41 slpm Ar и 10 slpm H₂, ток плазмотрона — 550 А, напряжение – 8,4 кВт, дистанция напыления — 120 мм, массовый расход порошка — 40 г/мин, диаметр частиц — 16–90 мкм (изображение 11263, см. рис. 1); плазмообразующим газом — 35 slpm Ar и 10 slpm H₂, ток плазмотрона — 550 А, мощность — 38,2 кВт, дистанция напыления — 120 мм, массовый расход порошка — 40 г/мин, диаметр частиц — 16–90 мкм (изображение 11243). Свойства материала PYSZ: $\rho=6037,0$ кг/м³, $\lambda=2,5$ Вт/мК, $c_p=400$ Дж/кгК, $E=2,2E11$ Па, $\nu=0,25$, для "пустот" $\rho=1,2$ кг/м³, $\lambda=25,6$ Вт/мК, $c_p=1050$ Дж/кгК, $E=2,2E11$ Па, $\nu=0,25$.

Необходимые вычисления для гомогенизации термических и механических свойств (для линейно-упругой модели) проведены для полного изображения (1280×946 пикселей, 290×215 мкм), а также для его частей (11263а, б, 11243а, б) размером 260×275 пикселей (59×62 мкм), причем меньшие изображения использовались в КЭ-расчетах для гомогенизированной теплопроводности и модуля Юнга вследствие большого числа элементов и необходимости получения результатов за допустимое время. Полученные результаты гомогенизации приведены в таблице.

Различие в значениях гомогенизированных величин является следствием различных долей "пустот" по отношению к керамике в выбранных участках изображения, с увеличением размера рассматриваемых изображений вариации уменьшаются. Вариации удельной теплоемкости не настолько велики вследствие малости отношения величины удельной теплоемкости "пустот" к керамике.

Результаты вычислений для гомогенизации термических и механических свойств

Образец	ρ^h , кг/м ³	λ^h , Вт/мК	c_p^h , Дж/кгК	E^h , Па
11263	4421,64	—	400,04	—
11263 a	3777,41	6,48	400,08	3,184E+9
11263 b	4169,02	5,40	400,06	6,035E+8
11243	5008,27	—	400,03	—
11243 a	4932,41	3,80	400,03	1,325E+10
11243 b	4825,19	3,98	400,03	4,728E+9

Для определения гомогенизированной кривой напряжение–деформация для упруго-пластической модели использовался ряд областей 318×227 пикселей (72×52 мкм) исходного изображения (pa,pe,pi). Свойства материалов принимались аналогичными линейно-упругой модели, предел текучести керамики принимался $\sigma_F=500,0$ МПа. Гомогенизированные кривые напряжение–деформация для образца 11263 приведены на рис. 2.

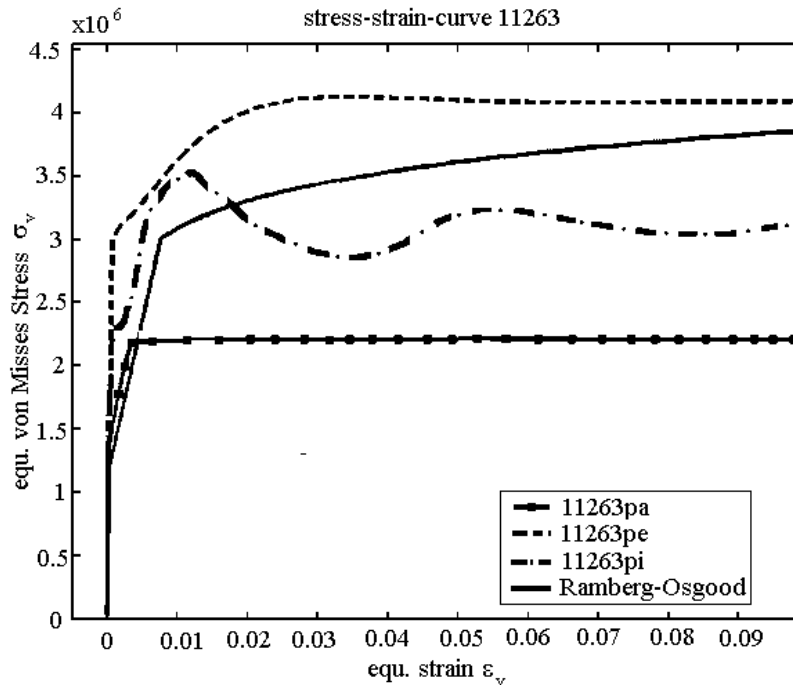


Рис. 2. Гомогенизированные кривые напряжение–деформация различных частей покрытия 11263

Как видно из рисунка, для различных областей образца форма кривых отличается, что связано с различным содержанием пор в этих областях, отличиях в форме пор ("пустот") и может быть уменьшено при увеличении размеров расчетных областей. Нелинейная модель может быть адаптирована для этих кривых. Так, показана возможность адаптации модели Рамберга-Осгуда (Ramberg-Osgood-model) [6] для данных кривых [4]. Определяемый в данном случае модуль Юнга в линейно-упругой области составляет 8,9 ГПа для образца 11263 и 56 ГПа для образца 11243, что находится в пределах допустимых значений для APS-PYSZ-покрытий.

Выводы

Для МКЭ-моделирования системы покрытие–основание при плазменном напылении ТВС-покрытий предложен метод гомогенизации физических и механических свойств материалов, содержащих дефекты сплошности (поры, микротрещины и др.).

Первые результаты, полученные с использованием нелинейных механических моделей вместо традиционных линейных, выявили некоторые тенденции в поведении гомогенизированных свойств покрытий. В частности, результаты гомогенизации зависят от выбранной области. Показано, что вариации результатов для различных избранных областей некоторого SEM-изображения могут быть уменьшены при увеличении изображения и рассмотрении как можно большего рисунка.

Дальнейшие исследования будут концентрироваться на применении альтернативных нелинейных материальных моделей, а также на применении альтернативных методов гомогенизации периодических структур, укрупнении КЭ-сетки и экспериментальном построении гомогенизированных моделей.

Благодарность. Авторы выражают благодарность научному обществу Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) за финансовую поддержку работ в рамках Collaborative Research Center (SFB) 370 "Integrated Modelling of Materials".

APPLICATION OF THE MATERIAL PROPERTIES HOMOGENISATION METHOD IN PLASMA SPRAYING SIMULATION

T.A. KASHKO, S.P. KUNDAS, S.V. BORDUSOV, E. LUGSCHEIDER, R. NICKEL

Abstract

Method to homogenize thermal and mechanical properties of plasma sprayed coatings, based on the voids (pores, lamellas, cracks) existence in their microstructure, is presented in the article to be used in further simulations of stresses and strains in coating-substrate system. Developed method is based on the equivalence of physical behaviour of homogeneous coating and real barrier coating. It is possible to use non-linear models within the developed methodology to describe the system behaviour under thermal and mechanical loads.

Литература

1. Плазменные процессы в производстве изделий электронной техники. В 3 т. Т. 1./А.П. Достанко, С.П. Кундас, С.В. Бордусов и др.; Под общ. ред. А.П. Достанко. — Мн., 2000.
2. *Fischer A.* Analyse des Atmosphärischen Plasmaspritzens mittels on-line Prozesskontrolle. PhD Thesis, RWTH Aachen, Shaker, Werkstoffwissenschaftliche Schriftenreihe, Bd. 53, 2002.
3. *Sanchez-Palencia E.* Non-Homogeneous Media and Vibration Theory. Berlin, Heidelberg, New York: Springer Verlag. 1993, 1980.
4. *Nickel R., Kashko T., Kundas S., Lugscheider E.* //Proceedings of ASTC-2003 Conference. P. 119–126.
5. *Dorvaux J.M.; Lavigne O.* Hits TBCTOOL: Thermal Conductivity Computation and Virtual Morphology Generation for TBCS, Version 1.05, Onera, Brite Euram BRPR CT 96-0338, BE96-3226 HITS, 2000.
6. *Betten, J.* Kontinuumsmechanik. Berlin, Heidelberg, New York: Springer Verlag. 1993, 2001.