



面向“十三五”高等教育规划教材

等离子喷涂工艺 及热障涂层数值模拟理论及应用

Numerical Simulation Theory and Application of
Plasma-Spraying Technology and Thermal Barrier Coatings

范群波 著

 北京理工大学出版社
BEIJING INSTITUTE OF TECHNOLOGY PRESS

面向“十三五”高等教育规划教材

等离子喷涂工艺及热障涂层 数值模拟理论及应用

范群波 著

内 容 简 介

本书是面向“材料成型及控制工程”专业本科生及“材料加工工程”专业硕士生编写的专业教材,同时也适用于其他相关专业及广大工程技术人员。等离子喷涂工艺制备热障涂层技术,是延长发动机使用寿命的关键技术之一,在航空、航天、车辆、船舶及军事领域有着广泛的应用。随着各领域对新型发动机性能需求的不断提高,完全基于经验或试验进行工艺优化的传统方法已不再适用,掌握等离子喷涂工艺及热障涂层数值模拟技术则有望大幅缩短研发周期、节约研制成本。本书系统介绍了等离子喷涂工艺制备热障涂层过程的数值模拟理论与方法,以及涂层典型热物理性能、力学性能及使用寿命数值模拟理论与方法。全书凝聚了作者多年来的研究成果,参考了大量国内外文献资料,并针对一些具体工程应用实例进行了深入阐述和剖析。

版权专有 侵权必究

图书在版编目(CIP)数据

等离子喷涂工艺及热障涂层数值模拟理论及应用 / 范群波著. —北京: 北京理工大学出版社, 2017. 3

ISBN 978 - 7 - 5682 - 3644 - 7

I. ①等… II. ①范… III. ①等离子喷涂 - 数值模拟②热障 - 涂层 - 数值模拟
IV. ①TG174

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2017) 第 021120 号

出版发行 / 北京理工大学出版社有限责任公司

社 址 / 北京市海淀区中关村南大街 5 号

邮 编 / 100081

电 话 / (010) 68914775 (总编室)

(010) 82562903 (教材售后服务热线)

(010) 68948351 (其他图书服务热线)

网 址 / <http://www.bitpress.com.cn>

经 销 / 全国各地新华书店

印 刷 / 三河市华骏印务包装有限公司

开 本 / 787 毫米 × 1092 毫米 1/16

印 张 / 12

彩 插 / 4

字 数 / 288 千字

版 次 / 2017 年 3 月第 1 版 2017 年 3 月第 1 次印刷

定 价 / 36.00 元

责任编辑 / 李秀梅

文案编辑 / 杜春英

责任校对 / 周瑞红

责任印制 / 王美丽

图书出现印装质量问题, 请拨打售后服务热线, 本社负责调换

前 言

利用等离子喷涂工艺制备热障涂层，并将其应用于发动机热端部件，可显著提高发动机耐高温、抗热冲击、长寿命等服役性能要求，已成为发展新型高性能发动机的一项关键技术，在航空、航天、车辆、船舶等领域有着广泛的应用。

但等离子喷涂工艺参数众多，涉及喷枪内部复杂的物理化学反应、带化学反应的湍流射流场、射流场与颗粒群的流固耦合作用、颗粒群在基体表面的沉积及涂层生长过程、熔融颗粒高速碰撞于基体表面的变形机理等，使长期以来工程技术人员多以经验为主进行相关工艺参数优化。不仅如此，涂层内部的微观结构也十分复杂，包含各种微孔洞、微裂纹等缺陷，且存在大量的片层粒子间界面，将显著影响涂层热导率、结合强度以及服役寿命等重要性能。

随着计算机软硬件技术的发展，利用数值模拟进行等离子喷涂工艺过程及热障涂层性能的有效预测已成为可能，从而有望让研发人员摆脱“经验加试验”的传统思路。通过计算机即可实现涂层虚拟制备和材料设计，跟踪从原始粉体材料到射流场、涂层的全过程演变历程，人们能够对涂层的形成机理、材料的失效本质及其主控因素等有更为深入的认识。而且，相关工作可以极大地缩短研制周期，节约研制成本。尽管如此，目前国内外仍然缺乏针对此领域的专业教材，一定程度上影响了本学科的发展。本书的撰写，正是在这一背景需求下开展的。

作者从国家“十五”计划开始就开展等离子喷涂工艺及热障涂层数值模拟研究，相关内容是作者近20年来的工作积累。全书共分11章，分别介绍了等离子喷涂及热障涂层数值模拟发展现状、等离子喷枪出口关键参数预测方法、等离子体二维射流场数值模拟、等离子体二维射流场中飞行颗粒数值模拟、等离子喷涂三维场数值模拟、等离子喷涂涂层的数值模拟、颗粒与基体相互作用过程数值模拟、基于涂层显微组织的有限元模型生成方法、缺陷及片层粒子间界面对涂层基本属性的影响、涂层拉伸结合强度预测方法、涂层热循环寿命预测方法，并讲述了相应的工程应用实例。全书力求突出新颖性、实用性和先进性，可作为

“材料加工工程”专业研究生以及“材料成型及控制工程”专业本科生的专业教材，也可以供“表面工程”专业的有关教学和科研人员参考。

本书在撰写过程中得到了恩师王富耻教授、王鲁教授的鼓励与支持，李树奎教授、沈伟博士以及王琳琳硕士也给予了作者极大的帮助，在此一并表示感谢。

作 者

2016年1月于北京

目 录

第 1 章 等离子喷涂及热障涂层数值模拟发展现状	1
1.1 等离子喷涂数值模拟概述	2
1.1.1 等离子体射流模型	2
1.1.2 等离子体与颗粒的相互作用模型	3
1.1.3 涂层的沉积模型	5
1.1.4 颗粒与基体的相互作用模型	5
1.2 热障涂层性能预测研究现状	7
1.2.1 涂层有限元模型构建	7
1.2.2 涂层基本属性计算	9
1.2.3 涂层结合强度预测	11
1.2.4 涂层热循环失效机理分析	11
1.2.5 涂层热循环寿命预测	14
参考文献	15
第 2 章 等离子喷枪出口关键参数预测方法及实例分析	19
2.1 数学模型	19
2.1.1 能量守恒方程与输入功率	20
2.1.2 冷却水带走的热功率	22
2.1.3 气体的受热功率	22
2.1.4 气体电离功率	23
2.1.5 喷枪出口处基本参量的确定	24
2.2 工程应用实例分析	25
2.2.1 基本试验参数	25
2.2.2 电流强度的影响	25
2.2.3 工质气体的影响	26
2.2.4 电流强度与气体流率的综合影响	30

2 ■ 等离子喷涂工艺及热障涂层数值模拟理论及应用

2.2.5 喷枪出口处温度与速度的分布	31
参考文献	32
第3章 等离子体二维射流场数值模拟及实例分析	33
3.1 数学模型	33
3.1.1 连续性方程	33
3.1.2 动量守恒方程	34
3.1.3 能量守恒方程	34
3.1.4 $k-\varepsilon$ 双方程	35
3.1.5 化学反应方程	35
3.2 基本物性参数与输运系数	36
3.3 工程应用实例分析	38
3.3.1 几何模型与边界条件	38
3.3.2 典型工况下射流温度场与速度场	39
3.3.3 典型工况下射流场内的组分分布	41
3.3.4 电流强度对射流场的影响	43
3.3.5 Ar 流率的影响	46
3.3.6 He 流率的影响	48
参考文献	50
第4章 等离子体二维射流场中飞行颗粒数值模拟及实例分析	53
4.1 数学模型	54
4.1.1 颗粒的受力平衡方程	54
4.1.2 热量交换方程	54
4.2 飞行颗粒关键参量试验验证方法	55
4.3 工程应用实例分析	56
4.3.1 几何模型与边界条件	56
4.3.2 颗粒的飞行轨迹	57
4.3.3 固定轴向位置颗粒直径、速度与温度的分布状况	58
4.3.4 颗粒的速度变化历程	62
4.3.5 颗粒的表面温度变化历程	64
4.3.6 电流强度对颗粒的影响	66
4.3.7 Ar 流率对颗粒的影响	68
4.3.8 He 流率对颗粒的影响	70
4.3.9 颗粒在飞行过程中的熔化状态	72
参考文献	77
第5章 等离子喷涂三维场数值模拟及实例分析	79
5.1 数学模型	79

5.1.1	连续性方程	80
5.1.2	动量守恒方程	80
5.1.3	能量守恒方程	80
5.1.4	$k-\varepsilon$ 双方程	81
5.1.5	化学反应方程	81
5.1.6	射流与基体相互作用方程	82
5.1.7	颗粒轨道模型	82
5.1.8	等离子体-颗粒热量交换方程	83
5.2	工程应用实例	84
5.2.1	几何模型与边界条件	84
5.2.2	无基体三维空间射流场	85
5.2.3	有基体三维空间射流场	87
5.2.4	三维空间颗粒群	89
	参考文献	90
第 6 章	等离子喷涂涂层的数值模拟	93
6.1	计算模型及计算过程	94
6.1.1	蒙特卡洛随机模型介绍	94
6.1.2	随机操作过程	94
6.1.3	网格的划分	95
6.2	模拟涂层三维形貌及其生长过程	96
6.2.1	涂层三维形貌计算过程及表征参量	96
6.2.2	涂层密度的计算	98
6.2.3	涂层生长时间的确定	98
6.3	模拟涂层的二维组分分布	98
6.4	随机模型的影响因素	99
6.4.1	材料组分的影响	100
6.4.2	随机操作数的影响	101
6.4.3	初始输入颗粒数的影响	102
6.5	工程应用实例	103
6.5.1	涂层的三维形貌	103
6.5.2	涂层的二维组分分布	110
	参考文献	111
第 7 章	颗粒与基体相互作用过程数值模拟及实例分析	113
7.1	数学模型	114
7.2	颗粒倾斜入射的数值模拟参数定义	114
7.3	计算方法	115

4 ■ 等离子喷涂工艺及热障涂层数值模拟理论及应用

7.4 工程应用实例	115
7.4.1 熔融颗粒垂直碰撞瞬间变形历程分析	115
7.4.2 熔融颗粒倾斜入射过程的数值模拟	118
参考文献	121
第8章 基于涂层显微组织的有限元模型生成方法	123
8.1 涂层显微组织图像的数字图像处理	123
8.1.1 图像数字化	124
8.1.2 阈值分割处理	125
8.1.3 有限元网格模型的生成	126
8.2 基于 Micro-CT 的涂层三维模型的构建	128
8.2.1 Micro-CT 测试系统	128
8.2.2 三维微观组织有限元模型的生成	129
参考文献	131
第9章 缺陷及片层粒子间界面对涂层基本属性的影响	133
9.1 缺陷及片层粒子间界面对涂层基本属性影响的数学模型	133
9.1.1 缺陷及片层粒子间界面对涂层弹性模量影响的数学模型构建	133
9.1.2 缺陷及片层粒子间界面对涂层热导率影响的数学模型构建	136
9.2 缺陷对涂层基本属性影响系数的确定	137
9.2.1 缺陷对涂层弹性模量影响系数的确定	139
9.2.2 缺陷对涂层热导率影响系数的确定	140
9.2.3 缺陷对涂层弹性模量及热导率的影响比较	141
9.3 片层粒子间界面对涂层基本属性影响系数的确定	141
9.3.1 涂层基本属性的试验测定	142
9.3.2 片层粒子间界面对涂层基本属性影响系数的计算	142
9.4 缺陷及片层粒子间界面对涂层基本属性的影响分析	143
参考文献	144
第10章 涂层拉伸结合强度预测方法及实例分析	145
10.1 涂层拉伸结合强度的试验测试	145
10.1.1 涂层拉伸试验	145
10.1.2 结合强度试验值 Weibull 统计分析	145
10.1.3 涂层拉伸失效位置	146
10.2 涂层结合强度预测的有限元方法	146
10.3 解析法预测涂层拉伸结合强度	147
10.3.1 解析模型	147
10.3.2 结合强度解析解 Weibull 统计分析	149

10.3.3 涂层结合强度预测的解析方法	150
10.4 涂层拉伸结合强度预测有限元法与解析法的比较	151
10.5 工程应用实例 1	151
10.5.1 有限元模型、材料性能参数与载荷施加	152
10.5.2 拉伸失效裂纹扩展模拟	153
10.5.3 涂层典型区域拉伸结合强度计算	155
10.5.4 结合强度有限元计算值 Weibull 统计分析	156
10.6 工程应用实例 2	158
10.6.1 基本参数及三维有限元模型的构建	158
10.6.2 施加载荷及边界条件	158
10.6.3 模拟结果与试验结果的对比	160
10.6.4 涂层失效过程及机理分析	161
参考文献	164
第 11 章 涂层热循环寿命预测方法及实例分析	165
11.1 涂层热循环试验	165
11.1.1 试验条件	165
11.1.2 TGO 生长动力学曲线	165
11.1.3 涂层热循环试验寿命	167
11.2 涂层热循环应力计算有限元方法	168
11.3 多因素耦合计算方法	171
11.4 工程应用实例分析	172
11.4.1 几何模型及边界条件	172
11.4.2 陶瓷层高温阶段的应力	174
11.4.3 陶瓷层室温阶段的应力	176
11.4.4 陶瓷层热循环应力影响因素分析	177
参考文献	180

第 1 章

等离子喷涂及热障涂层数值模拟发展现状

热障涂层的研究始于 20 世纪 40 年代，在航空、航天、车辆、船舶等领域有着广泛的应用。所谓热障涂层，是指由金属黏结层（如 NiCrCoAlY）和高熔点陶瓷（如 Y_2O_3 部分稳定的 ZrO_2 ）表面层组成的涂层系统，作用于发动机热端部件可起到良好的隔热作用。以航空发动机为例，随着其向高流量比、高推重比等更高性能方向发展，在发动机热端部件表面制备热障涂层已成为保证发动机使用安全性和可靠性的关键因素。

热障涂层的制备方法很多，主要有等离子喷涂法、气相沉积法（CVD、PVD 或 PCVD 法）、高温自蔓延合成法、粒子排列法、粉末冶金法和离心铸造法等。而在制备热障涂层方面，等离子喷涂法具有明显的优势。如图 1-1 所示，等离子喷涂法利用喷枪产生的直流电弧加热工作气体（氩气（Ar）、氦气（He）等或其混合气体），通过离化和复合反应获得超高温（通常在 10 000 °C 以上）和高速等离子射流，熔化由载气送入的陶瓷、金属粉体材料，并最终使之与基体碰撞形成涂层。此外，等离子喷涂法还具有零件无变形、涂层种类多、工艺稳定、零件尺寸不受限制及涂层质量高等诸多优点，是目前制备热障涂层最实用的一种途径。

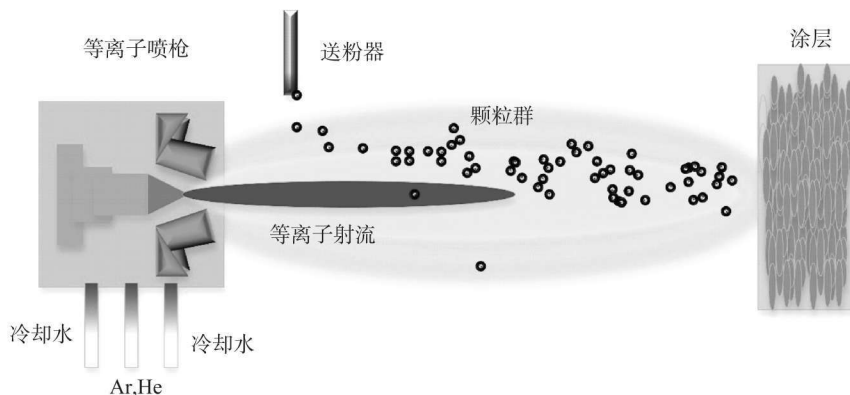


图 1-1 等离子喷涂法示意图

采用等离子喷涂法制备热障涂层，所涉及的物理和化学过程十分复杂，其中包括等离子射流的生成，射流与喷涂颗粒之间的传热、传质及动量传递，颗粒与基体的相互作用，以及热障涂层的形成等，使得理论研究工作长时间滞后于技术的发展，许多喷涂现象的实质

仍有待深入探索。所以长期以来，工程师们一直都是凭经验和直觉甚至反复试验去加工，以获得所期望的热障涂层，这样往往费工费钱。随着计算机软、硬件技术的发展，利用数值模拟的方法进行虚拟加工，以寻求最优的工艺方案，不仅可以提高产品加工质量，而且可以缩短研制周期，降低成本。

不仅如此，热障涂层的服役环境极度恶劣，通常要承受热冲击、高温氧化、热腐蚀等多种侵害，加之涂层本身为多层结构，不同层之间的材料性能不同，使热障涂层在实际服役过程中承受着复杂的应力场作用，最终导致热障涂层易过早剥落失效。通过数值模拟方法对涂层的关键热物理性能、力学性能及服役寿命等进行有效预测，揭示其失效机理，确定其主控因素，进而改进涂层制备工艺，具有十分重要的工程指导价值。

1.1 等离子喷涂数值模拟概述

有关等离子喷涂领域的数值模拟工作已取得了很大进展，主要包括：

- (1) 等离子体射流模型；
- (2) 等离子体与颗粒的相互作用模型；
- (3) 涂层的沉积模型；
- (4) 颗粒与基体的相互作用模型。

1.1.1 等离子体射流模型

常见的等离子体包括电弧等离子体、高频等离子体和燃烧等离子体。电弧等离子体以其功率大、操作方便等优点而获得了广泛的应用。电弧等离子体喷涂的原理是：借助流经亚声速或超声速喷嘴的非氧化性控制气氛来稳定并压缩电弧产生高温；当气体流经电弧时，温度可达 10 000 ℃ 以上；在此温度下，气体离化成等离子体射流从喷嘴中喷出。

模拟等离子体射流遇到的主要困难是高温变物性和射流的流动状况。射流在上万度的温度下，必然伴随着气体热物理性质的大幅度变化。例如，1 000 K 时 Ar 的密度、热导率和黏性系数分别为 0.487 kg/m³、0.04 W/(m·K) 和 5.35 × 10⁻⁵ kg/(m·s)；而在 10 000 K 的等离子体温度下，相应的 Ar 的密度、热导率与黏性系数分别为 0.047 8 kg/m³、0.625 W/(m·K) 和 2.90 × 10⁻⁴ kg/(m·s)。因此，在计算过程中，必须考虑气体大幅度的物性变化。

等离子体射流模型认为气体是连续的多组分的反应介质，其热动力学与传输特性均与温度有关。应用于等离子喷涂的热等离子体通常由多种成分及其分解和电离的成分组成，它们包括双原子分子、单原子分子、分子离子、原子离子和自由电子。等离子体流动可能受到诸如偏离电离和分解平衡等化学动力学效应和多种组分的混合特性等的显著影响。此外，射流边界上的卷吸作用使得大量的环境气体进入射流，所以还涉及如何计算等离子体多组分混合物物性的问题。

对于大尺寸、大流量、大功率的工业等离子体装置，其流动状况通常为湍流流动。而喷涂时等离子体射流在出口附近的中心区流动通常是层流的，然后再转为湍流，环境气体向湍流等离子体射流的卷吸具有复杂的特征。到目前为止，对于高温电离气体的湍流流动研究，

至今仍没有合适的湍流模型。常用的处理方法是，沿用非电离气体流动与传热研究中所用的模拟方法，采用湍流动能与耗散函数的双方程模型（标准 $k-\varepsilon$ 双方程模型，或略加修改的低雷诺数 $k-\varepsilon$ 双方程模型）来进行等离子体流动的数值模拟。

等离子体射流模型的重点在于研究射流场内的温度分布与速度分布状况，进而通过计算颗粒与射流的相互作用达到预测射流场中颗粒温度和速度的目的。目前，人们已提出了大量的等离子体射流场模型，通常这些模型是建立在已知喷嘴出口处的温度与速度分布基础上；射流中各组分气体组成的混合气体满足质量守恒、动量守恒与能量守恒；部分模型还考虑了组分气体的电离复合与化合反应；各模型采用的几何维度涉及二维与三维。二维模型计算时间较短，但无法描述射流在三维空间中的温度、速度分布；三维模型较二维模型信息完整，且可进一步计算喷涂颗粒在三维空间中的分布以及在涂层表面的沉积状况，但其计算时间要长得多。

对于等离子喷涂法制备热障涂层工艺而言，喷涂过程可以在不同的气氛和压力下进行，但是等离子喷涂法是一项复杂的技术，有数百个影响因素。其中，输入功率、电弧电压、电弧电流、喷距以及喷涂角度对涂层的性质和寿命起着关键作用。

1.1.2 等离子体与颗粒的相互作用模型

等离子喷涂中，喷涂粒子的行为可分为碰撞前和碰撞后两个阶段。喷涂粉末经由送粉嘴进入等离子焰流后，将首先受到焰流的加热和加速，与等离子体射流发生相互作用，如图 1-2 所示。之后，具有一定速度的熔滴和基体发生碰撞，熔滴迅速变形并急速冷却凝固，从而形成扁平的粒子。

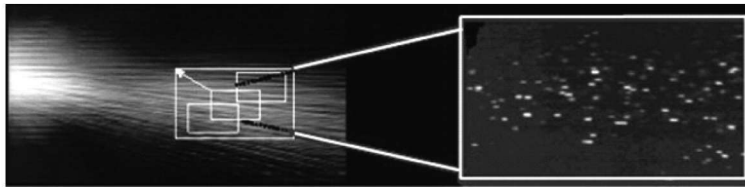


图 1-2 等离子体射流与颗粒的相互作用

在许多情况下，供给等离子喷枪的能量只有较少一部分传给颗粒，但在喷涂过程中，颗粒还必须从等离子体中得到适量的动量，以便喷涂颗粒更牢固地和喷涂表面结合。事实上，涂层的质量很大程度上取决于颗粒在碰撞前的速度和它是否完全熔化。因此，必须了解颗粒在等离子体中的受力状况、运动轨迹、温度和物理状态的变化过程，从而控制各种实验条件，使颗粒和等离子体有足够的接触，以获取必要的热量和动量，达到最佳的喷涂效果。在此研究领域，数值模拟需要解决的主要问题包括：颗粒在等离子体中的受力及颗粒群轨道模型、颗粒与等离子体的传热以及颗粒内部的导热状况。

1. 颗粒在等离子体中的受力

作用在颗粒上的力可分为三类：

- (1) 与流体 - 颗粒的相对运动无关的力，如惯性力、重力和压差力等。
- (2) 依赖于流体 - 颗粒间的相对运动，其方向沿着相对运动方向的力，如黏性阻力、附加质量和 Basset 力等。
- (3) 依赖于流体 - 颗粒间的相对运动，其方向垂直于相对运动方向的力，如升力、

Magnus 力和 Saffman 力等。

结合等离子体本身的高温特性, 可对经典模型进行修正, 主要包括:

(1) 等离子体射流密度与喷涂颗粒密度相比要小得多, 这使附加质量力、升力等力可以忽略不计。

(2) 重力等力与黏性阻力相比要小得多, 故重力可以忽略不计。

(3) 压力的影响可以忽略不计, 故压差力可以忽略不计。

(4) 热泳引起的力, 该力使颗粒的运动方向随机分布, 运动方式趋于复杂化。

在此基础上, 可将颗粒在等离子体中的受力模型简化为

$$F = F_D + F_B + F_{th} \quad (1-1)$$

式中, F 为惯性力, F_D 为黏性阻力, F_B 为 Basset 力, F_{th} 为热泳所产生的力。

目前, 拉格朗日 (Lagrange) 轨道模型是分析颗粒及颗粒群轨道较为完善的一种方法。它把颗粒看成是与气体有滑移的, 沿轨道运动的分散群, 并完整地考虑了两者之间的相互作用。

2. 颗粒与等离子体的传热

颗粒在等离子体中的受热是研究的重点, 因为它关系到颗粒在碰撞固化前是否能够完全熔化, 以获得高质量的涂层; 同时, 又要避免颗粒的过分蒸发, 以减少材料和能量的损失。尽管通常喷涂颗粒的直径仅为几十微米, 但其在等离子体射流或等离子体反应器中的停留时间往往较短 (10^{-3} s 左右), 并且等离子体系统中往往存在巨大的温度梯度与速度梯度, 要使所有颗粒都能得到适当而有效的加热, 并不是一件容易的事情。只有那些能够送到等离子体射流的高温区并获得足够长的加热时间的颗粒, 才能获得有效的加热。

颗粒的加热历程与许多因素有关, 如颗粒的运动轨迹、颗粒材料的种类 (包括材料密度、熔点、熔化潜热、沸点、蒸发潜热和比热等)、颗粒的形状、颗粒尺寸、颗粒喷射位置、颗粒喷射方向、颗粒喷射速度、等离子体射流的温度场与速度场, 等等。

3. 颗粒内部的导热

颗粒内部的导热是一个复杂而重要的问题, 尤其对于非金属喷涂材料, 因为它直接决定了等离子体传给颗粒的热量在颗粒内部的分配及颗粒内部的温度分布, 从而直接决定了颗粒是否完全熔化。实际的处理方法也视各种条件的不同而分为两种: 一种是忽略颗粒内部的温度梯度, 即认为其热传导系数足够大, 而把它当成一个均温的球体来处理; 另一种是用差分方法来数值求解颗粒的热传导方程, 从而得出其温度分布 $T(r, t)$ 。

第一种方法比较简单, 但需要满足一定的条件。事实上, 当毕欧数 $Bi < 0.1$ 时, 即可将颗粒视为均温球体。对于一般的金属喷涂材料, 如钨、铝, Bi 可以认为小于 0.1, 但对于一般的非金属材料, 如 Al_2O_3 、 Cr_2O_3 、 ZrO_2 , 通常都不能满足。

颗粒在等离子体中的升温过程如下:

(1) 颗粒进入等离子体, 从常温被加热到熔点, 该过程中没有质量损失。

(2) 颗粒表面温度达到熔点后, 表面开始熔化, 熔化逐步从表面向颗粒内部移动。从颗粒中心到熔化表面是固态, 从熔化表面到颗粒外表面是液态, 两部分的温度都在逐步升高。

(3) 颗粒表面温度达到沸点, 表面开始蒸发, 如果这时颗粒还没有完全熔化, 则熔化表面继续向中心移动, 固液两部分温度仍逐步上升。

(4) 颗粒开始冷却, 温度下降, 直至重新固化。

1.1.3 涂层的沉积模型

1. 传统的涂层沉积模型

等离子喷涂涂层的沉积与固化至今是等离子喷涂过程中人们认识最空白的地方。认识上的困难是因为两个动态边界的运动很难计算，即涂层表层的运动和随后涂层内部的固-液界面的运动。除此之外，关于涂层的热传导知识对预测涂层的显微结构、缺陷机理以及热应力是必需的。

尽管存在以上困难，但是研究发现，粒子彼此间相互热影响的可能性是很小的。或者说，熔融粒子落到过去喷上而尚未结晶完的粒子上的概率是很小的，在计算中可不予考虑。各粒子与基体相互作用的独立性，使分析涂层形成原因的工作容易多了，可把它归结为研究单个粒子接触相互作用的集成。因此，涂层从整体来看可以认为是由薄片组成的材料，这些薄片在接触表面上被粒子凝固时一定面积的焊合点相互联结在一起，焊合点并不充满粒子间整个的接触面积。

为模拟涂层的形成，人们发展了各种不同的模型。

Cirolini 等人^[1]将涂层视为一种简单的材料，且按一定的速率生长，并受到等离子体以及喷涂颗粒的加热。该模型对于孔隙的形成、未熔（或部分熔化）颗粒与基体（或沉积层）的相互作用以及因残余应力作用而引起的翘起现象提出了一系列规则：

- (1) 上层熔滴严格按下层粒子的形状铺展开。
- (2) 如果在最上层扁平粒子下方出现孔隙，则在其上方飞入的新的粒子将推动原上层粒子下沉，并破坏该孔隙。
- (3) 顶层熔滴凝固时将发生翘起现象，其翘起程度取决于与最初碰撞点之间的距离。
- (4) 未熔颗粒彼此间，以及与基体（或沉积层）之间不会发生黏着现象，如果彼此接触，将发生反弹。
- (5) 部分熔化颗粒应分开处理，熔化的部分遵从规则（1）~（3），未熔的部分遵从规则（4）。

Kanouff 等人^[2]提出了用 String 法来模拟涂层的形成，即用一串等距节点定义涂层表面形状，并跟踪沉积涂层形状的变化。该模型可计算任意涂层形状复杂的表面，并模拟大量热喷涂液滴的随机沉积。

2. 涂层沉积模型在制备热障涂层过程中的应用

对于等离子喷涂制备热障涂层，由于其结构特殊，制备工艺复杂，故形成涂层中界面的尺寸、形状、成分、结构都比较复杂，因此针对涂层界面的研究十分困难。热障涂层在形成与固化过程中主要的界面有：黏结层（即纯金属层）与金属基体间的界面，各过渡层之间的界面，纯陶瓷层与过渡层间的界面，同一过渡层中喷枪两次行程间得到的层间界面（由时间间隔造成的界面），层内粒子间的界面（粒子搭接和焊合的接触面）。涂层由大量的变形粒子堆积而成，这不可避免地导致了疏松孔隙、微裂纹等的出现。涂层的性能因变形粒子的散流形状、彼此间的相互作用、不同类型的微观结构以及熔化状态而不同。

1.1.4 颗粒与基体的相互作用模型

颗粒与基体的相互作用模型，主要是研究单个或多个处于熔融状态的飞行颗粒以液滴形

式与基体发生碰撞后,其形变的过程与机理。具体来说,主要是建立诸如液滴大小、速率以及材料特性这类参数与最后液滴散流大小、散流时间之间的关系。这类模型对于深入分析涂层的微观形成机理,从而进一步实现对涂层宏观性能的预测具有十分重要的意义。

由于涉及瞬间发生的变形机制,喷涂时熔融粒子碰撞冷基体将发生凝固,且这两个过程同时进行,所以这是一类非常复杂的问题。根据研究的重点和方向不同,国内外已提出了各种不同的模型。比较典型的有颗粒与基体的垂直相互作用和颗粒与基体的倾斜相互作用,其重点是从流体力学、热学及形态学的角度来研究熔融粒子在基体表面的变形机制及传热规律等。此外,研究颗粒与基体相互作用时瞬态压力的形成与发展规律,对于分析涂层的形成也具有极为重要的意义。

1. 颗粒与基体的垂直相互作用

颗粒与基体的垂直相互作用模型是其他模型的基础,根据变形与变温处理方法的不同,可将其分为等温过程和变温过程。对于等温过程,在计算过程中只考虑了粒子变形流动的流体力学过程,主要文献均没有考虑粒子变形过程中的传热和粒子的冷却凝固过程,即利用了“先变形,后冷却凝固”的假设前提。对于变温过程,则将粒子的流变和冷却凝固过程结合起来,即同时考虑了颗粒与基体之间的热相互作用,这无疑是对喷涂粒子的沉积过程更为接近的模拟。

Harlow 等人^[3]最初于 1967 年采用标记单元法 (Marker - and - Cell, MAC) 研究了碰撞最初瞬间的熔滴变形过程,试图通过数值模拟结果解释高速摄影所拍摄到的实验现象。计算中忽略了表面张力和黏性的影响,因而没有得到最终的变形粒子的尺寸。

Trapaga 等人^[4]利用 Flow - 3D 分析了等温条件下液滴在固体表面及已沉积颗粒上的冲击变形随时间的变化规律,该软件使用了在 MAC 基础上发展起来的 SOLA - VOF 计算方法。

Feng 等人^[5]对熔滴扁平模拟的计算采用了拉格朗日坐标下的有限元方法。在计算中采用自适应网格 (Adaptive Grid),即自动重新划分网格的方法来处理自由表面。由于要不断地进行网格的重新划分,控制因素较多,计算过程比较复杂。

较为成熟的颗粒与基体的相互作用模型是由 Pasandideh^[6]等人提出来的。他们利用经过修改的 SOLA - VOF 法对 N - S 方程和能量方程进行了求解,研究了平面基体上锡液滴的撞击和凝固过程,成功模拟了液滴的变形、凝固以及与基体之间的热传导。

2. 颗粒与基体的倾斜相互作用

等离子喷涂过程中,许多参数,如喷枪的功率、几何设计、喷涂距离、喷涂角度等对沉积涂层的性能都将产生直接的影响。但在数值模拟过程中,常常被忽略的一项就是喷涂角度。事实上,随着等离子喷涂应用领域的日益广泛以及基体几何形状的日益复杂化,对于喷涂角度在等离子喷涂工艺中的评价就显得尤为重要。

Fasching 等人^[7]的研究表明,喷涂时的射流与颗粒的非对称性分布可以通过倾斜喷枪的方法进行矫正,从而得到厚度均匀的涂层,并改善涂层的结构与性能。Ilavsky 等人^[8]研究了喷涂角度对等离子喷涂沉积层中孔洞及微裂纹的影响。研究结果表明,孔洞形成于经过散流并凝固后的液滴之间,或未完全熔化的颗粒周围。孔隙率随喷涂角度的减小而增大。液滴在散流变形和冷却凝固过程中,可能在其内部形成裂纹,裂纹的形成具有一定的择优取向,与喷涂角度有关。Leigh 等人^[9]就喷涂角度对沉积层表面粗糙度以及微观硬度、拉伸强度和

断裂韧性等性能的影响进行了研究和分析,结果表明,表面粗糙度与喷涂角度及喷涂材料有关,而微观硬度、拉伸强度和断裂韧性等性能随喷涂角度的减小而减小。

3. 颗粒与基体相互作用的瞬态压力

等离子喷涂时,熔融粒子的速度可以达到 $100 \sim 200 \text{ m/s}$,这将在粒子碰撞区产生高压。在接触处,压力和高温均是物理化学相互作用的推动力,这些作用促成粒子的牢固结合并形成涂层。关于颗粒与基体相互作用时瞬态压力的研究,过去一直是人们忽略的一个问题,近年来,虽已注意到这一问题的重要性,但仍有待深入研究。

Montavon 等人^[10]通过求解 N-S 方程计算了基本喷涂参数,如颗粒直径、密度、黏度、速度以及喷涂等对瞬态压力的影响;李京龙等人^[11]在研究熔滴碰撞基体表面的基础上对碰撞瞬态压力进行了计算。研究表明,碰撞压力集中于熔滴直径 2.5 倍以内的区域,存在一个集中、扩展和释放的过程。发现熔滴碰撞瞬间产生的碰撞压力最大,且集中在熔滴和基体表面的接触点上,随着熔滴的扁平变形,沿基体表面的最大压力和压力梯度先是集中在熔滴与基体接触区域的周边,造成熔滴沿基体表面产生高速的横向铺展流动,随后随着扁平过程的进行,压力向熔滴内部和边缘迅速扩展并释放。

1.2 热障涂层性能预测研究现状

热障涂层性能预测主要包括:

- (1) 涂层有限元模型构建;
- (2) 涂层基本属性计算;
- (3) 涂层结合强度预测;
- (4) 涂层热循环失效机理分析;
- (5) 涂层热循环寿命预测等。

1.2.1 涂层有限元模型构建

由于热障涂层微观结构的复杂性,给实际涂层模型的建立带来了很大的困难。涂层几何模型的准确构建对涂层性能的研究至关重要,一些学者通过建立简化的解析几何模型(如同心圆模型),利用解析法求得涂层性能的解析解。由于涂层结构多样,且在服役过程中涉及的物理、化学和力学现象十分复杂,场方程相互耦合,因此很难根据简化的解析几何模型求得准确的解析解。而在对问题进行过多的简化后,得到的近似解可能误差很大,甚至是错误的。随着计算机硬件、软件技术的飞速发展和对材料物理规律研究的深入,有限元技术取得了很大的进展。可以通过有限元计算来描述涂层服役过程中温度场、应变场、应力场等,据此研究涂层组织性能的变化,并通过虚拟的涂层服役过程模拟来预测涂层的最终性能。而利用有限元方法研究涂层性能的重要基础是涂层有限元模型的准确建立。

热障涂层的有限元模型有很多,下面列出比较典型的几种。

1. 无缺陷有限元模型

较早期的一些学者在建立涂层有限元模型时,忽略涂层中各种缺陷,建立了均质的、各向同性的理想模型。该模型不包含陶瓷层的孔洞、裂纹等缺陷,且基本未考虑界面处的形貌。