コールドスプレーにおける衝突粒子付着プロセスの数値解析

Numerical Simulation on Deposition Phenomena of Impact Particle in Cold Spraying

岡野 晴行 (東理大院)

山本 誠 (東理大)

Haruyuki Okano, Grad. School of Tokyo University of Science

Makoto Yamamoto, Tokyo University of Science

Key Words: Cold Spraying, MPS Method, Particle Impingement, Deposition

1. 緒言

コールドスプレー法とは、ノズルからヒーターで加熱した He 等の非活性ガスと共に原料粉末を超音速で噴射して基材に衝突させ、固相状態で基板に皮膜を形成する技術である。フレーム溶射などの溶射法と比較して、作動ガスの温度が比較的低い。そのため、基材の熱変質及び酸化が生じにくく、緻密な皮膜が得られるという利点があり、同手法に対する基礎研究や応用化に関する技術開発が数多く行われている。

コールドスプレー法の成膜プロセスはまだ十分に明らかにはなっていないが、粒子が付着・堆積するためには、ある臨界値以上の衝突速度が必要である。これを臨界速度といい、材質や温度により変化する。Schmidt ら⁽¹⁾は、コールドスプレー法における粒子の衝突速度と温度の関係を示した。また、衝突粒子が基板に付着し皮膜を形成するためには、4つの過程があることが Steenkiste ら⁽²⁾により報告されている。この過程の第一段階において、衝突速度が臨界速度以上の場合、衝突粒子が付着することで第一層が形成され、第二段階以降に第一層の粒子変形及び再配列などが行われる。したがって、第一層の付着粒子が土台となるため、第一段階がコールドスプレーの皮膜形成にとって重要となる。

コールドスプレー法による衝突粒子の付着プロセスは数十ナノ秒間に完結するため、詳細な観測は極めて困難である。さらに、作動ガスなどの使用には多大な費用を要する。そこで数値解析を用いれば、これらの問題が解決でき、さらに粒子付着プロセスの詳細を様々な条件で観測することができる。しかし、構造物の大変形や破壊を伴う計算において、従来用いていた格子法では、格子の破綻が生じたり、格子の変形のため予測精度が落ちる。そのため本研究では、越塚らによって開発された粒子法により皮膜形成の第一段階における衝突粒子及び基板の変形挙動の数値解析を行い、衝突粒子の付着プロセスを数値的に再現することを目的とする。計算結果により、付着プロセスの第一段階における垂直方向の粒子付着形状、臨界速度以上及び以下の速度における衝突粒子の挙動が再現される。

2. 数値解析手法

本研究では、越塚らの MPS (Moving Particle Semi-implicit) 法に、粒子間相互作用モデルを構造物計算に適用した二次元動的弾性解析手法⁽³⁾で計算を行う。

2.1 弾性モデル

弾性体に関する支配方程式は次のようになる。

$$\rho \frac{Dv_{\alpha}}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} [\lambda \varepsilon_{\gamma\gamma} \delta_{\alpha\beta} + 2\mu \varepsilon_{\alpha\beta}] \quad (1)$$

ここで、 v_{α} は速度、 t は時間、 ρ は密度、 x_{β} は座標、 $\delta_{\alpha\beta}$ は Kronecker シンボル、 $\varepsilon_{\gamma\gamma}$ は体積ひずみ、 $\varepsilon_{\alpha\beta}$ はひずみテンソルである。また、 λ と μ はラメの弾性定数である。

MPS 法では、粒子間相互作用モデルを用いて偏微分方程式

を離散化する。このモデルには、次式によって定義される重み関数 w_{ij} を用いる。

$$w_{ij} = \begin{cases} r_e/|\mathbf{r}_{ij}| - 1 & |\mathbf{r}_{ij}| < r_e \\ 0 & |\mathbf{r}_{ij}| \geq r_e \end{cases} \quad (2)$$

ここで、 $\mathbf{r}_{ij}$ は粒子 ij の粒子間相対位置ベクトル、 r_e は粒子 i の影響半径である。また、MPS 法では、支配方程式を離散化の際に勾配及び発散を次のようにモデル化する。

$$\nabla \phi = \frac{d}{n_0} \sum_j \frac{\phi_j - \phi_i}{|\mathbf{r}_{ij}|^2} \mathbf{r}_{ij} w_{ij} \quad (3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{2d}{n_0} \sum_j \frac{\mathbf{u}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ij}}{|\mathbf{r}_{ij}|^2} w_{ij} \quad (4)$$

ここで、 ϕ は物理量、 $\mathbf{u}_{ij}$ はベクトル変数値、 d は次元数、 n^0 は初期粒子数密度を表す。また、粒子数密度 n_i は次式で計算される。

$$n_i = \sum_j w_{ij} \quad (5)$$

2.2 弾塑性モデル

塑性計算の手法は基本的に弾性体の計算手法に依存する。本研究では、図 1 に示すように、実験により得られた応力-ひずみ線図を色分けされた区間で分割する。ある粒子 i と j の間のひずみ ε_{ij} が ε_n 以上及び ε_{n+1} 以下の場合、その区間におけるヤング率を算出し、ラメの弾性定数を求める。そして、その値を式(1)に代入することで弾塑性体の計算を行う。

3. 計算条件

3.1 計算領域及び境界条件

図 2 に示すように、本研究では衝突プロセスを簡略化し、衝突粒子と基板のみを計算対象とする。このとき、 D_0 は 20 mm、 L は 64 mm、 H は 24 mm とし、衝突粒子と基板は接触している。また、青色部分は衝突粒子の計算粒子、緑色部分は基板の計算粒子、赤色部分は固定端とし、応力を 0 とする。衝突方向は基板に対して垂直方向である。なお、計算に用いる粒子数は衝突粒子が 600 個、基板が 30×80 個の合計 3,000 個、粒子直径は 0.8 mm とする。

Fig. 1 Stress-Strain Curve

Fig. 2 Computational Domain

3.2 粒子及び基板条件

まず、計算結果により得られる粒子付着形状を検証するため、Schmidt らの実験条件にしたがい、衝突粒子に銅、基板に炭素鋼を用い、粒子衝突速度は 350 m/s とする。次に、衝突粒子及び基板にチタンを用いる。このとき、臨界速度は、衝突温度が 20℃ であると仮定すると、以下の Schmidt らの半実験式より算出でき、約 540 m/s であることがわかっている。

$$V_{crit} = \sqrt{\frac{F_1 \cdot 4\sigma_{TS} \left(1 - \frac{T_i - T_R}{T_m - T_R}\right)}{\rho} + F_2 C_p (T_m - T_i)} \quad (6)$$

ここで、右辺第 1 項は材料強度と動荷重間の相互作用、第 2 項は熱散逸と運動エネルギー間のエネルギーバランスを表し、 V_{crit} は臨界速度、 ρ は密度、 σ_{TS} は引張強さ、 T_i は衝突温度、 T_R は参照温度、 T_m は融点、 C_p は比熱である。また、 F_1 、 F_2 はそれぞれ 1.2、0.3 と定義されるモデルパラメータである。これにより、粒子衝突速度を臨界速度以上である 600 m/s、それ以下の 100 m/s として衝突粒子及び基板の変形挙動を観察する。

4. 結果及び考察

4.1 粒子付着形状の検証

図 3 に時間経過に対する衝突粒子の y 方向ひずみを示す。図 3 より、時間経過と共にひずみが線形に増加していることがわかる。また、ひずみが 30 μ s 付近で最大となり、35–40 μ s 間でほぼ一定となることがわかる。この傾向は、初期形状に復元するための弾性ひずみエネルギーが回復し、衝突粒子に塑性ひずみが残ることにより生じると考えられる。

Fig. 3 y -Direction Strain Change of Particle against Time

Fig. 4 Speed Distribution at 35 μ s

Fig. 5 Shapes of Particle Deposition

次に、図 4 に粒子が基板に衝突してから 35 μ s における y 方向に対する粒子の速度分布を示す。図 4 より、物体表面付近に速度が生じていることがわかる。しかし、図 3 よりひずみが一定になることから、この速度による付着形状への影響は小さい。一方、衝突粒子と基板の接触面側では、初期速度に比べ衝突粒子内部の速度が減少してゼロに近い値になり、粒子の挙動が収まったと判断できる。以上より、35 μ s 後の粒子形状で衝突粒子が基板に付着したと考えられる。

図 5 に計算結果及び実験結果の粒子付着形状を示す。図 5 の x 方向を比較すると、マテリアルジェットという突出物が共に生じているが、図 5 (b)に比べ(a)は短い。この原因としては、本計算で衝突粒子と基板間の接触力である摩擦力を考慮していないことが挙げられる。一方、 y 方向を比較すると、図 5 (a), (b)のめり込む深さがおおよそ一致した。このとき生じる誤差は、衝突を完全弾性衝突としたことが原因と考えられるため、反発係数の大きいチタンなどを用いる場合には無視できる。以上より、基板に対し垂直に衝突する場合、摩擦力の影響は小さいと考えられるため、本計算は、垂直方向の変形挙動による衝突粒子の付着を妥当に再現しているといえる。

4.2 衝突粒子及び基板の変形挙動

図 6、7 に y 方向ひずみが一定になるまでの各粒子衝突速度における衝突粒子及び基板の変形挙動を示す。まず、図 6 より、衝突粒子が基板に接触し、30 μ s 後に基板から離れていることが観察できる。この挙動から粒子衝突速度が臨界速度以下の場合、衝突粒子が基板に付着せず跳ね返ったとみなせる。次に、図 7 より、衝突粒子が基板にめり込むことが観察できる。30、35 μ s 後における衝突粒子の形状を比較する

Fig. 6 Deformation of Particle Impingement with $V=100$

Fig. 7 Deformation of Particle Impingement with $V=600$

と、 y 方向ひずみが小さくなる。これは図 3 の 30~35 μs 付近と同じ現象が起きていると考えられるため、衝突粒子が基板に付着したといえる。以上により、粒子衝突速度が臨界速度以上で基板に付着し、臨界速度以下で跳ね返ることを再現することができた。

5. 結言

衝突粒子及び基板の変形挙動の数値解析を行い、得られた知見は以下の通りである。

- ・ MPS 法を用いることで、付着プロセスの第一段階における垂直方向の粒子付着形状を再現できた。
- ・ 粒子衝突速度が臨界速度以上で付着し、臨界速度以下で跳ね返る挙動を再現できた。

今後の展望として、衝突粒子と基板間で生じる接触力の一つである摩擦力を考慮することにより、付着プロセスの第一段階における水平方向の粒子付着形状を再現することを目標とし、研究を進めていく。

参考文献

- (1) Schmidt, T., Gartner, F., Assadi, H. and Kreye, H., Development of a Generalized Parameter Window for Cold Spray Deposition, *Acta Materialia*, Vol.54, No.3 (2006) pp.729-742.
- (2) Van Steenkiste T H, Smith J R and R E, Aluminum Coatings via Kinetic with Relatively Large Powder Particles, *Surface and Coatings Technology*, Vol.154, No.3 (2002) pp.237-252.
- (3) 宋武燮, 越塚誠一, 岡芳明, MPS 法による弾性構造体の動的解析, *日本機械学会論文集*, 71 巻, (2005)