

## METALLIC SURFACES AND FILMS

PACS numbers: 45.50.-j, 47.10.A-, 47.27.nf, 47.40.Ki, 47.55.Kf, 47.85.mb

### Моделирование процесса напыления твёрдых частиц при помощи сопла Димет

А. И. Долматов, А. В. Бильчук\*

*Национальный аэрокосмический университет им. Н. Е. Жуковского  
«Харьковский авиационный институт»,  
ул. Чкалова, 17,  
61070 Харьков, Украина  
\*Государственная авиационная служба Украины,  
просп. Победы, 14,  
01135 Киев, Украина*

Проведено исследование процессов при сверхзвуковом напылении твёрдых покрытий. Используются методы вычислительной газовой динамики, газовой динамики дисперсных сред, теории напряжённо-деформированного состояния и механики твёрдых тел. Проведено математическое моделирование трёхмерного течения вязкой двухфазной сжимаемой турбулентной среды, состоящей из реального газа — воздуха и деформируемых разрушимых конъюгирующих твёрдых частиц порошка. Получены поля параметров и кинетические характеристики движения двухфазной среды в сопле Димет и свободной зоне течения между соплом и твёрдой подложкой.

**Ключевые слова:** напыление, двухфазный поток, математическое моделирование, сверхзвуковое течение, сопло Димет.

Проведено дослідження процесів при надзвуковому напорошенні твердих покриттів. Використано методи обчислювальної газової динаміки, газової

---

Corresponding author: Anatolii Ivanovych Dolmatov  
E-mail: a.dolmatov@khai.edu

*National Aerospace University 'Kharkiv Aviation Institute',  
17 Chkalov Str., 61070 Kharkiv, Ukraine  
\*State Aviation Administration of Ukraine,  
14 Peremohy Ave., 01135 Kyiv, Ukraine*

Citation: A. I. Dolmatov and O. V. Bilchuk, Simulation of Process of Solid Particles Sputtering with Dimet Nozzle, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **41**, No. 7: 927–940 (2019) (in Russian), DOI: [10.15407/mfint.41.07.927](https://doi.org/10.15407/mfint.41.07.927).

динаміки дисперсних середовищ, теорії напружено-деформованого стану та механіки твердих тіл. Проведено математичне моделювання тривимірної течії в'язкого двофазного стискуваного турбулентного середовища, що складається з реального газу — повітря і деформованих руйнованих кон'югованих твердих частинок порошку. Отримано поля параметрів і кінетичні характеристики руху двофазного середовища в соплі Димет і вільній зоні течії між соплом і твердою підкладкою.

**Ключові слова:** напорошення, двофазний потік, математичне моделювання, надзвукова течія, сопло Димет.

The investigation of processes having place during a supersonic deposition of solid coatings is carried out. The methods of computational gas dynamics, gas dynamics of disperse media, the theory of stress-strain state and the mechanics of solids are used. Mathematical modelling of a three-dimensional flow of a viscous two-phase compressible turbulent medium consisting of a real gas—air and deformable destructible conjugating solid particles of powder is carried out. Fields of parameters and kinetic characteristics of the motion of a two-phase medium in both the Dymet nozzle and a free flow zone between the nozzle and a solid substrate are obtained.

**Key words:** sputtering, two-phase flow, mathematical modelling, supersonic flow, Dymet nozzle.

*(Получено 11 октября 2018 г.; окончат. вариант — 6 февраля 2019 г.)*

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Задачей исследования процессов при сверхзвуковом напылении твердых покрытий в данной работе является получение полей параметров и кинетических характеристик движения двухфазной среды в сопле Димет и в свободной зоне течения между соплом и твердой подложкой при помощи математического моделирования трехмерного течения вязкой двухфазной сжимаемой турбулентной среды, состоящей из реального газа — воздуха и деформируемых разрушимых конъюгирующих твердых частиц порошка. Для решения поставленной задачи применяются методы вычислительной газовой динамики, газовой динамики дисперсных сред, теории напряженно-деформированного состояния и механики твердых тел [1–5]. В основе используемой математической модели лежат уравнения и системы уравнений классической газовой динамики, включающие в себя уравнения неразрывности, Навье–Стокса, энергии, уравнение состояния реальных газов в виде модифицированного уравнения Редлиха–Квонга, кинематические и динамические уравнения движения твердых частиц конечного размера в неоднородном турбулентном потоке, уравнения взаимодействия твердой частицы с твердой недеформируемой мишенью при неупругом и частично неупругом ударах, уравнения теплопроводности и др. [1–

10]. Для решения системы дифференциальных уравнений с частными производными при известных граничных условиях смешанного типа в работе используется апробированный метод вычислительной математики, а именно — метод контрольных объемов, адаптированный к расчету течения двухфазной среды. Аппроксимация дифференциальных уравнений алгебраическими выполняется путем дискретизации расчетного пространства рабочей области структурированными гексагональными сетками заданной топологии с дополнительными законами распределения ячеек вблизи твердых поверхностей для адекватного моделирования пограничного слоя. Для адаптации геометрической модели к конечно-разностным схемам, при расчетах течения и обработке результатов использовался специализированный многофункциональный CAE-пакет высокого уровня ANSYS CFX 16.2.

## 2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ГЕОМЕТРИЯ РАСЧЁТНОЙ ОБЛАСТИ

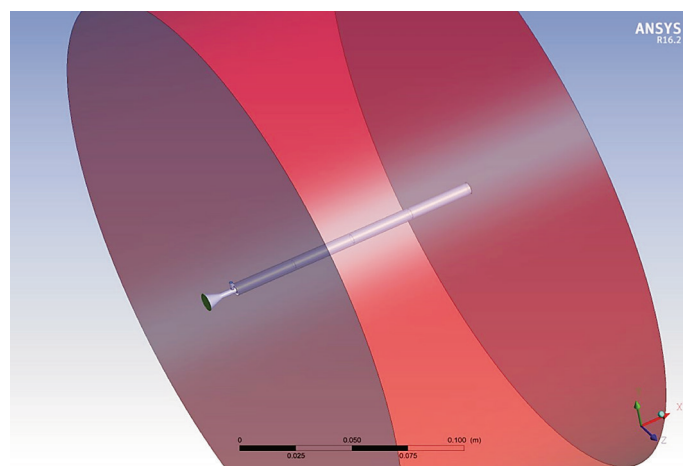
В расчетную область включены регионы внутреннего обтекания всех частей сопла Димет, представленного на рис. 1, зона течения между срезом сопла и твердой подложкой-мишенью, а также релаксационный карман, предназначенный, во-первых, для релаксации схемных возмущений при итерационном процессе расчета течения, во-вторых — для возможности физически осмысленного задания граничных условий невозмущенного потока на достаточном удалении от вихревой зоны (рис. 2).

Расстояние между срезом сопла и подложкой — 25 мм, основной поток воздуха поступает в сопло через торцевую поверхность (рис. 2, граница Inlet Air, обозначена зеленым цветом), предварительно разгоняется в конической дозвуковой части сопла, после чего через



**Рис. 1. Схема проточной части сопла Димет.**

**Fig. 1.** Scheme of the Dymet nozzle flowing part.



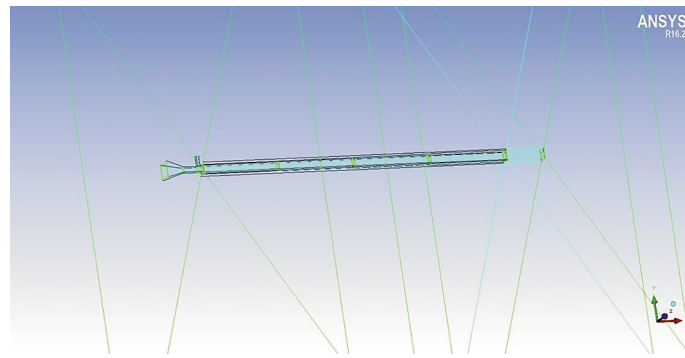
**Рис. 2.** Схема расчетной области течения.

**Fig. 2.** The scheme of the calculated flow region.

канал подвода порошка, ориентированный перпендикулярно к оси проточной части, происходит впрыск воздушно-порошковой смеси (рис. 2, граница Inlet Powder, обозначена голубым цветом). Затем воздушно-порошковая смесь разгоняется до сверхзвуковых скоростей в четырех последовательно расположенных цилиндрических секциях (рис. 1), после чего поступает в свободную зону течения между соплом и подложкой, осуществляя ударное напыление порошка и частичный разлет частиц вследствие частично неупругих ударов.

Выходная граница расчетной области, расположенная на расстоянии 400 мм от внешней стенки сопла в радиальном направлении (рис. 2, граница Outlet, обозначена красным цветом) и на расстоянии 300 мм от подложки в осевом направлении, представляет собой проницаемую границу с заданным значением статического давления, соответствующим давлению невозмущенной среды, т.е. 1 атм. На всех твердых поверхностях (рис. 2, границы Wall, обозначены серым цветом) заданы условия непротекания, непроскальзывания пограничного слоя, условие нестационарной теплопередачи от турбулентной газообразной среды к твердому телу, а на подложке — дополнительное условие фракционирования ударного взаимодействия на вполне неупругие и частично неупругие удары по критериям механики твердых тел, основанных на импульсе, диаметре, угле атаки твердой частицы, тензоре Гука для материалов подложки и атакующей частицы, вязких сдвиговых напряжениях и стохастических зависимостях для сверхзвукового дисперсного потока.

При создании расчетной конечно-разностной сетки использована

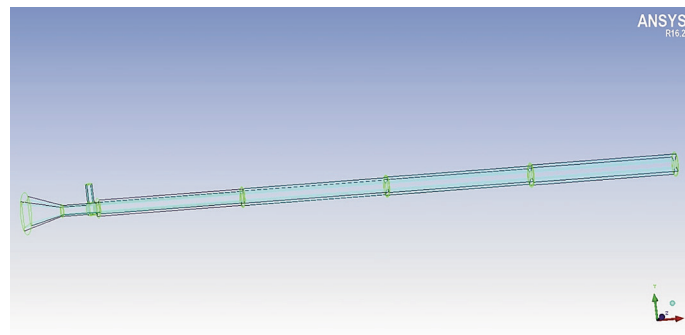


**Рис. 3.** Общая логическая структура мультиблоковой топологии пространства.

**Fig. 3.** General logical structure of the multi-block topology of space.

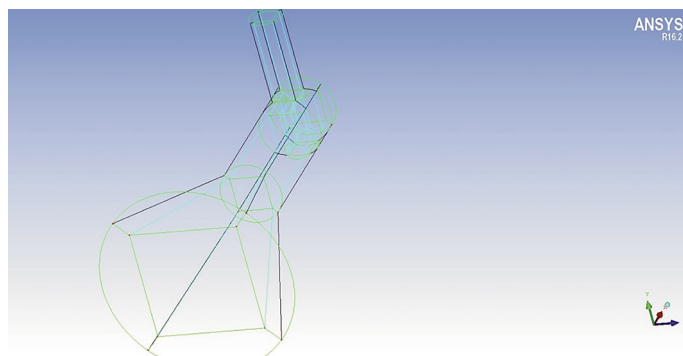
структурированная блоковая топология с индивидуальными подсистемами гексагональных блоков для отдельных участков течения (рис. 3–5). Всего для расчетной области создано семь независимых блоковых групп, трансляция параметров между которыми осуществляется методом General Connection без коррекции переменных (опция None) на контактных поверхностях Domain Interface.

Для всех цилиндрических каналов применена технология O-grid, обеспечивающая высокую детализацию и допустимое качество структурированной сетки. После задания законов распределения узлов вдоль всех ребер, количества ячеек, построения предварительной опорной сетки и конвертации таковой в структурированную мультиблочную сетку, получена конечно-разностная сетка (рис. 6, а, б), состоящая из 4413306 ячеек с минимальным парамет-



**Рис. 4.** Ассоциированная топология сопла Димет.

**Fig. 4.** Associated topology of the Dimet nozzle.



**Рис. 5.** Топология ассоциированных блоков вблизи точек ввода воздуха и порошка.

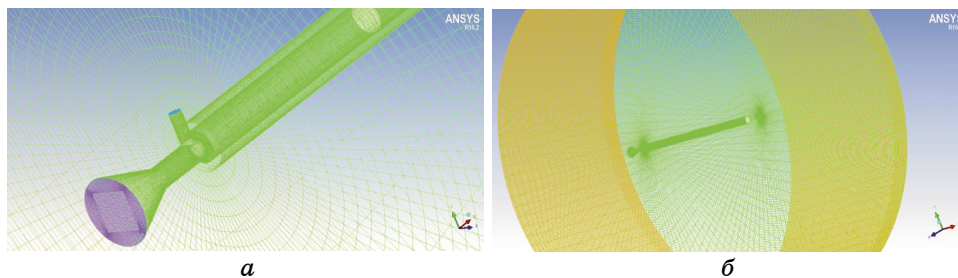
**Fig. 5.** Topology of associated blocks near the points of entry of air and powder.

ром интегрального качества 0,617, что соответствует требованиям к гексагональным элементам при газодинамических расчетах.

Полученная конечно-разностная сетка импортирована в программный пакет CFX-Pre16.2 с сохранением топологических структур (в первую очередь, характерных предварительно заданных границ для задания граничных условий) и масштабированием 1:10, поскольку вследствие малых линейных размеров некоторых элементов — в частности, переходов между участками сопла Димет — при построении сетки использовалась размерная линза 10:1.

### 3. ОПИСАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ТЕЧЕНИЯ

При расчетах использовалась стандартная математическая модель ANSYS CFX для трехмерного движения вязкой сжимаемой турбу-



**Рис. 6.** Конечно-разностная сетка: вид спереди (а), вид сзади (б).

**Fig. 6.** Finite difference grid: front view (a), rear view (b).

лентной газообразной среды с твердыми частицами при смешанном типе течения, включающем дозвуковые и сверхзвуковые участки. В качестве замыкающих уравнений для турбулентного течения использовалась система уравнений двухпараметрической модели турбулентности Shear Stress Transport (SST), обеспечивающей высокую точность расчетов для рассматриваемого типа течения. Замыкающие уравнения при этом выглядят как:

$$\begin{aligned}\frac{\partial(\rho K)}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{C} K) &= \nabla \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{k3}} \right) \nabla K \right] + P_k - \beta' \rho K \omega, \\ \frac{\partial(\rho \omega)}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{C} \omega) &= \nabla \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_{\omega 3}} \right) \nabla \omega \right] + (1 - F_1) 2\rho \frac{1}{\sigma_{\omega 2} \omega} \nabla K \nabla \omega + \\ &+ \alpha_3 \frac{\omega}{K} P_k - \beta_3 \rho \omega^2,\end{aligned}$$

где  $K$  — кинетическая энергия турбулентности,  $\omega$  — турбулентная частота,  $\mu_t$  — турбулентная динамическая вязкость, коэффициенты модели  $\sigma_{k3}$ ,  $\sigma_{\omega 3}$ ,  $\alpha_3$ ,  $\beta_3$  (обобщенно  $\Phi_3$ ) рассчитываются по общей формуле через известные коэффициенты модели:

$$\Phi_3 = F_1 \Phi_1 + (1 - F_1) \Phi_2$$

и функции гибридизации модели (функции стенки)  $F_1$  и  $F_2$ :

$$\begin{aligned}\mu_t &= \frac{a_1 K}{\max(a_1 \omega, S F_2)}, \\ F_1 &= \text{th}(\arg_1^4), \\ \arg_1 &= \min \left( \max \left( \frac{\sqrt{K}}{\beta' \omega y}, \frac{500 \nu}{y^2 \omega} \right), \frac{4 \rho K}{C D_{k\omega} \sigma_{\omega 2} y^2} \right), \\ C D_{k\omega} &= \max \left( 2\rho \frac{1}{\sigma_{\omega 2} \omega} \nabla K \nabla \omega, 10^{-10} \right), \\ F_2 &= \text{th}(\arg_2^2), \\ \arg_2 &= \max \left( \frac{2\sqrt{K}}{\beta' \omega y}, \frac{500 \nu}{y^2 \omega} \right),\end{aligned}$$

$\beta' = 0,09$ ,  $\alpha_1 = 5/9$ ,  $\beta_1 = 0,075$ ,  $\sigma_{k1} = 2$ ,  $\sigma_{\omega 1} = 2$ ,  $\alpha_2 = 0,44$ ,  $\beta_2 = 0,0828$ ,  $\sigma_{k2} = 1$ ,  $\sigma_{\omega 2} = 1/0,856$ ,  $y$  — расстояние до твердой стенки [9, 10].

Результаты расчетов представлены в обработке CFD-Post 16.2.

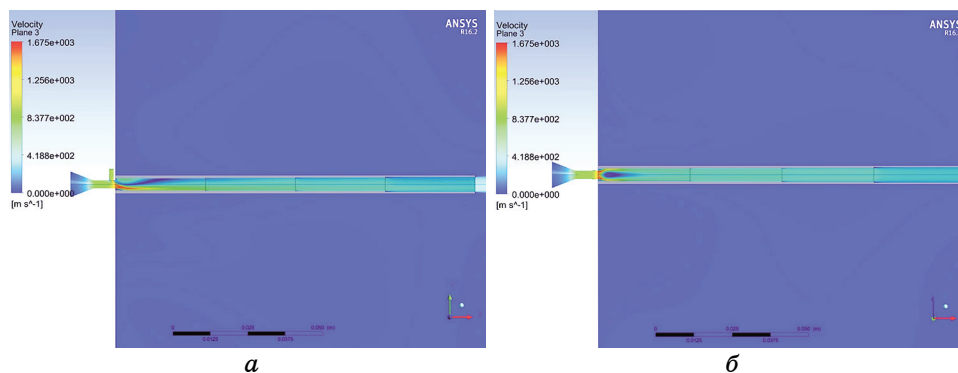
#### 4. РЕЗУЛЬТАТЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Распределение скорости вдоль проточного тракта сопла представлено на рис. 7.

Как нетрудно видеть из рисунка 7, *а*, впрыск воздушно-порошковой смеси под высоким давлением приводит к существенному отклонению потока и развитию сильной радиальной неравномерности течения. В верхней части сопла наблюдается зона с уменьшенной скоростью течения, в то время как в нижней части и боковых частях центрального сечения (рис. 7, *б*) присутствует сверхзвуковая зона с высоким уровнем гидравлических потерь. Данная неравномерность наблюдается на протяжении практически всего сопла Димет, что хорошо видно из профилей скорости на рис. 8.

Наиболее ярко выраженная неравномерность параметров наблюдается в первом цилиндрическом участке сверхзвукового сопла, где радиальный перепад скоростей достигает 960 м/с (рис. 8, *а*). Во втором и третьем цилиндрических участках сопла Димет (рис. 8, *б*, *в*) происходит постепенное выравнивание поля параметров с одновременным снижением скорости, что приводит к относительно равномерному полю скоростей в конце четвертого цилиндрического участка (рис. 8, *г*), на срезе сопла и, как следствие, на участке напыления на подложке в тени сопла.

Однако, как видно из рисунка 8, *г*, полной гомогенизации не наблюдается до самого момента истечения, что приводит к высокोगradientному распределению статического давления и температуры на подложке и неравномерности процесса напыления. Безразмерная степень неравномерности поля скоростей на срезе сопла (т.е.



**Рис. 7.** Распределение скорости вдоль проточного тракта: в плоскости впрыска порошка (*а*), горизонтальное сечение (*б*).

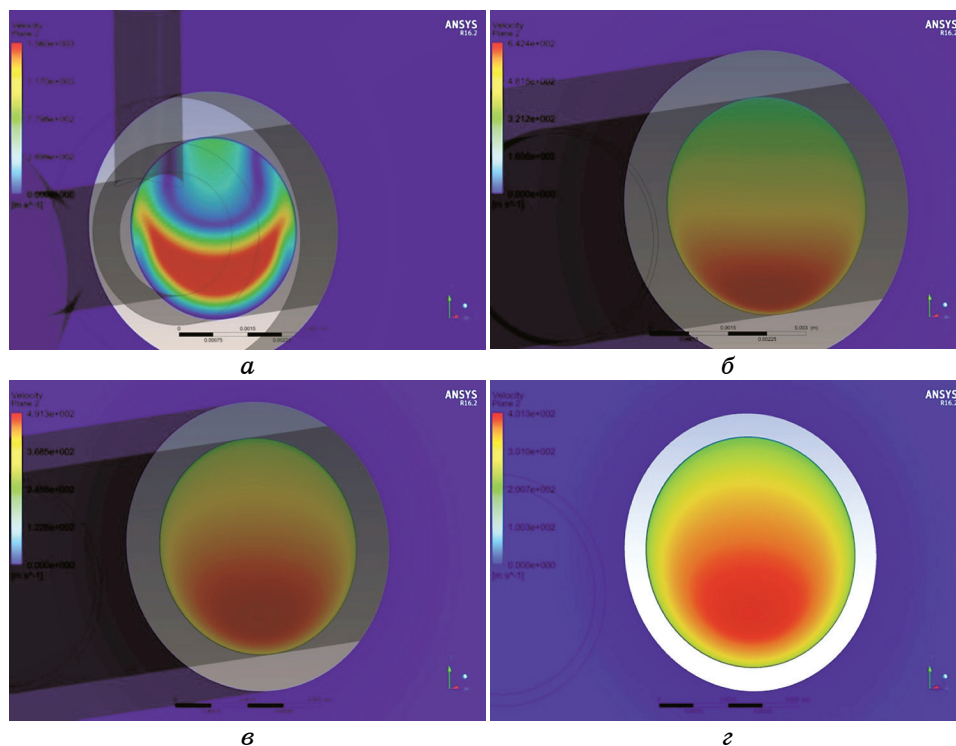
**Fig. 7.** Speed distribution along the flow path: in the plane of powder injection (*a*), horizontal section (*b*).



в конце последнего сверхзвукового цилиндрического участка без учета пристеночного пограничного слоя составляет 0,83, в то время как безразмерная степень неравномерности статического давления — практически равна 1, а разница в плотности потока твердых частиц не превышает 15%, что свидетельствует о достаточно хорошей гомогенизации течения и о возможности полного выравнивания поля скорости при добавке дополнительной цилиндрической секции.

Траектории частиц порошка, не прилипших к подложке, представляют собой пространственные полилинии, свидетельствующие о сложной структуре вихревых течений в окрестности подложки (рис. 9).

Как видно из рисунка 9, вблизи среза сопла существуют различные группы вихрей, вызывающие разнос частиц на достаточно большое расстояние, причем оси этих вихрей неколлинеарны.



**Рис. 8.** Нормальные эпюры скорости:  $d = 4$  мм (а),  $d = 4,2$  мм (б),  $d = 4,5$  мм (в),  $d = 4,9$  мм (г).

**Fig. 8.** Normal speed diagrams:  $d = 4$  mm (а),  $d = 4.2$  mm (б),  $d = 4.5$  mm (в),  $d = 4.9$  mm (г).

Вследствие данного факт вихри, очевидно, могут конъюгировать с развитием трудно прогнозируемых пространственных течений, чье влияние на процесс напыления невозможно оценить в рамках поставленных в работе задач.

Линии тока основного потока воздуха, поступающего через впускное сечение InletAir, представлены на рис. 10. Цветовая гам-

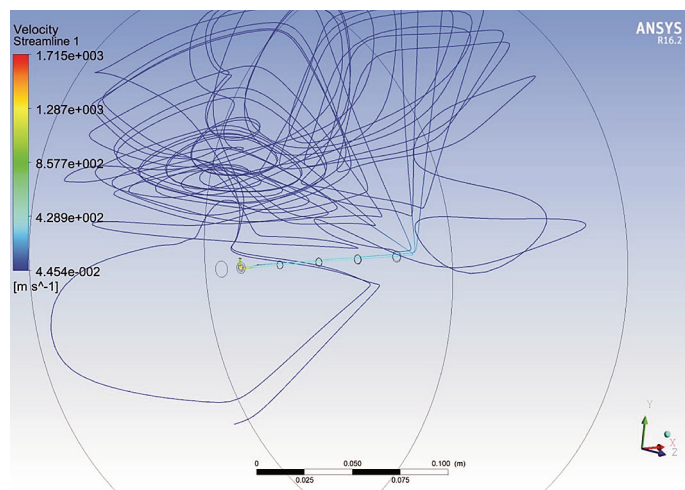


Рис. 9. Траектории частиц (при условии неприлипания).

Fig. 9. Trajectories of particles (under the condition of non-adherence).

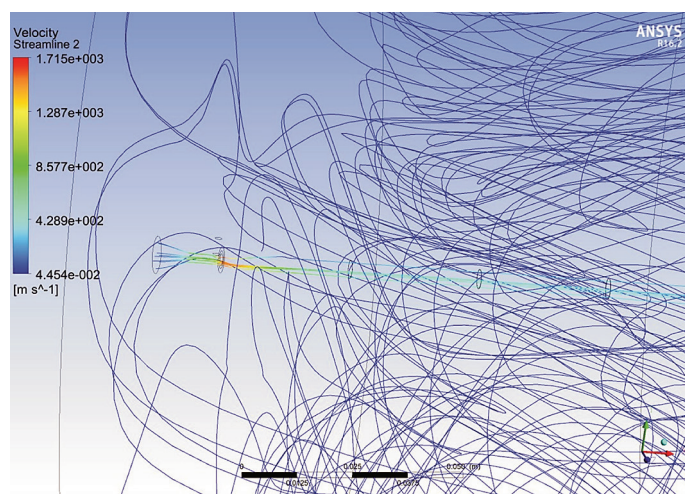


Рис. 10. Линии тока воздуха.

Fig. 10. Lines of air current.

ма отражает распределение абсолютной средневзвешенной по Фавру скорости вдоль линий тока.

Как видно из рисунка 10, большая часть основного потока воздуха испытывает существенное радиальное отклонение в направлении, совпадающем с вектором движения несущего потока порошка, причем на дозвуковом участке течения это отклонение сопряжено со значительным (почти на 130 м/с) увеличением скорости потока. Дальнейшее движение носит характер равномерного торможения высокоскоростных (1062–1715 м/с) и равномерного ускорения медленных (588–655 м/с) участков течения при параллельно протекающем процессе перераспределения частиц порошка, постепенно формирующем равномерное поле по всему сечению потока.

В дозвуковой части сопла и на первом участке сверхзвукового течения происходит весьма быстрое снижение статического давления (рис. 11), приводящее к перерасширению относительно атмосферного (выбранного в качестве базового, таким образом, нижний предел шкалы соответствует значению  $p = 0,5$  атм. В верхней части первого радиального сверхзвукового участка имеется зона существенного торможения потока с большими гидравлическими потерями и низким статическим давлением, возникающая из-за многочисленных вихревых течений газа непосредственно перед критическим сечением (рис. 12).

Распределение статического давления в радиальном направлении выравнивается достаточно быстро, однако из-за практически ортогонального направления движения основного потока и несущей порошок струи на участке перед критическим сечением, непо-

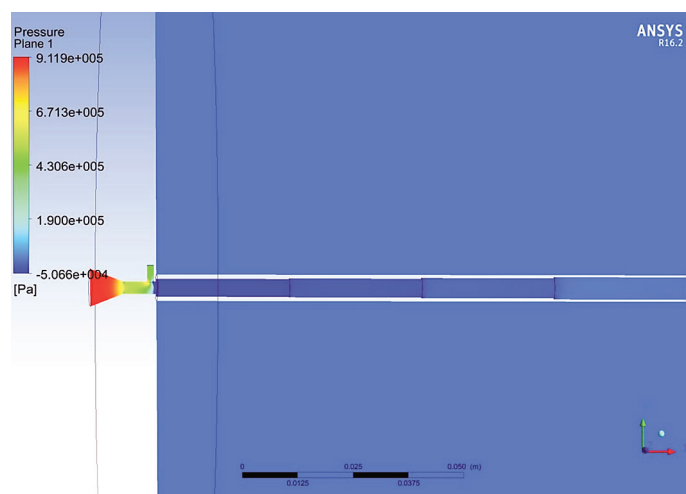


Рис. 11. Статическое давление воздуха.

Fig. 11. Static air pressure.

средственно в таковом и на некоторой протяженности первого цилиндрического сверхзвукового участка существует значительный градиент давления, приводящий к радиальным течениям, дополнительным гидравлическим потерям и уменьшению КПД процесса напыления.

Распределение статического давления от входа воздуха до подложки-мишени представлено на рис. 13 для трех характерных линий тока.

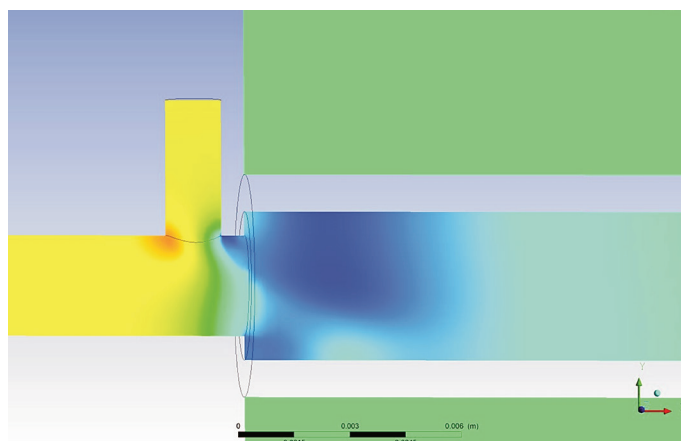


Рис. 12. Статическое давление вблизи критического сечения.

Fig. 12. Static pressure near the critical section.

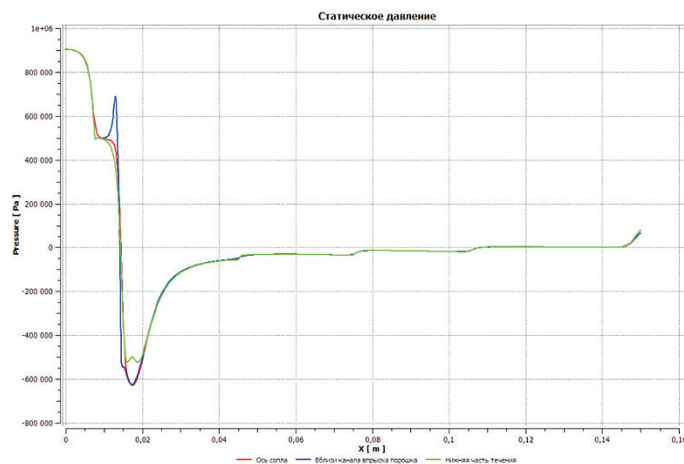


Рис. 13. Статическое давление (вход–подложка).

Fig. 13. Static pressure (input–substrate).

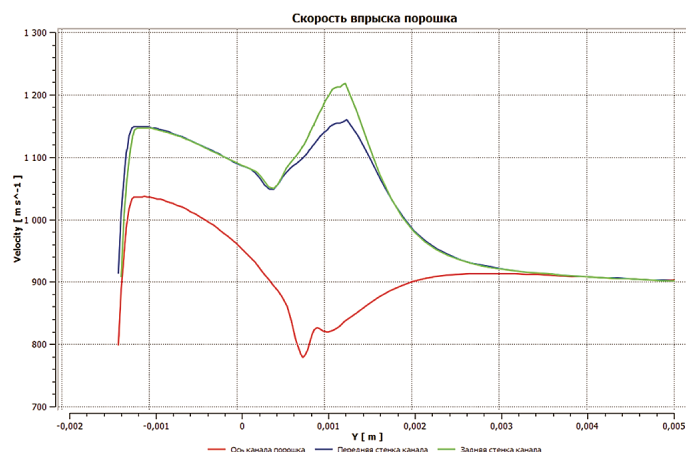


Рис. 14. Скорость воздушно-порошковой смеси.

Fig. 14. Speed of the air-powder mixture.

Как видно из рисунка 14, скорость потока с частицами порошка достаточно сильно различается в зависимости от положения линии тока или траектории частицы. В частности, близкие к оси канала траектории отличаются в целом меньшей скоростью, чем периферийные сечения, что приводит к неравномерному распределению вероятности прилипания в тени сопла на подложке. Несмотря на то, что статическое давление в зоне ударного торможения (рис. 13, правая часть, все три траекторные линии) почти одинаково, расхождение в скоростях частиц соответствующих участков течения приводит к увеличению вероятности отражения частицы поверхностью при частично неупругом ударе для углов атаки менее 81 градуса. При этом более высокоскоростные частицы более склонны к отражению при углах 78–82°, а низкоскоростные (рис. 14, красная линия) — при углах 72–79°.

## 5. ВЫВОДЫ

Неравномерность потока, возникающая из-за интенсивного смешения основного и несущего потока в дозвуковой зоне течения сопла Димет, оказывает влияние на равномерность распределения частиц и приводит к снижению максимальной скорости потока на срезе сопла. Зона на радиальной поверхности со стороны канала подачи порошка в первом цилиндрическом сверхзвуковом участке вследствие экранирования характеризуется высокими гидравлическими потерями, пониженной скоростью движения частиц и несущего потока. Коэффициент прилипания частиц к подложке в тени сопла является нелинейной функцией угла атаки и скорости частицы при

практически равномерном распределении статического давления по поверхности ударной зоны.

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА—REFERENCES

1. L. I. Sedov, *Mekhanika Sploshnoy Sredy* [Continuum Mechanics] (Moscow: Nauka: 1970) (in Russian).
2. G. N. Abramovich, *Prikladnaya Gazovaya Dinamika* [Applied Gas Dynamics] (Moscow: Nauka: 1968) (in Russian).
3. F. M. White, *Fluid Mechanics* (New York: McGraw Hill: 2011).
4. H. Versteeg and W. Malalasekera, *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method* (Harlow: Prentice Hall: 2007).
5. H. Lomax, T. H. Pulliam, and D. W. Zingg, *Fundamentals of Computational Fluid Dynamics* (NASA Ames Research Center: 1999).
6. G. Shlikhting, *Teoriya Pogranichnogo Sloya* [The Boundary Layer Theory] (Moscow: Nauka: 1974) (in Russian).
7. F. S. Sherman, *Viscous Flow* (McGraw-Hill College: 1990).
8. D. C. Wilcox, *Turbulence Modeling for CFD* (DCW Industries: 2006).
9. J. D. Anderson, *Modern Compressible Flow* (Tata McGrawhill India Pvt Ltd: 2012).
10. P. Davidson, *Turbulence: an Introduction for Scientists and Engineers* (Oxford University Press: 2015).