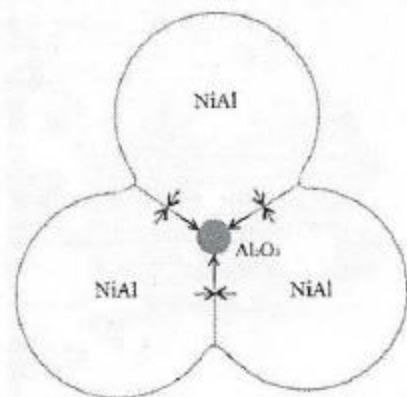


Numeryczne modelowanie naprężeń występujących w trakcie oraz po procesie metalurgii proszków materiałów kompozytowych

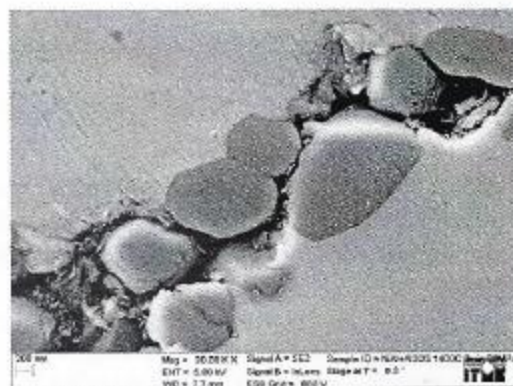
W technologii metalurgii proszków spiekanie, wraz z chłodzeniem, jest jednym z kluczowych etapów wytwarzania materiałów kompozytowych na podstawie metalicznej, podczas którego może dochodzić do pęknięcia materiału na skutek występujących na granicach faz naprężeń rezydualnych. Prezentowana praca przedstawia wyniki modelowania numerycznego naprężeń mikro- oraz makroskopowych występujących w trakcie oraz po procesie metalurgii proszków materiałów kompozytowych. Do analizy procesów metalurgii proszków został użyty oryginalny termo-lepkosprężysty model elementów dyskretnych. Symulacje numeryczne zostały przeprowadzone na przykładzie kompozytu $\text{NiAl-Al}_2\text{O}_3$. Uzyskane wyniki potwierdzają poprawne oraz efektywne działanie zaproponowanego modelu numerycznego.

1. Wstęp

Metalurgia proszków jest jedną z głównych metod otrzymywania nowoczesnych materiałów kompozytowych. W trakcie procesu spiekania, który jest najistotniejszym etapem metalurgii proszków, luźny proszek pod wpływem ciśnienia oraz temperatury zbliżonej do temperatury topnienia przekształca się w lity materiał. W przypadku spieków kompozytowych z minimalną porowatością w miejscach kohezyjnych połączeń (tzw. szyjka) oraz na granicach faz dochodzi do koncentracji mikronaprężeń resztkowych, powstających głównie podczas chłodzenia na skutek różnicy w wartościach współczynnika rozszerzalności cieplnej osnowy oraz zbrojenia (rys. 1). Złożony stan mikronaprężeń rozciągających oraz ściskających prowadzi do powstawania mikropęknięć oraz w dalszej perspektywie do postępowej degradacji materiału (rys.2).



Rys. 1. Układ oddziałujących ze sobą cząstek w trakcie chłodzenia kompozytu $\text{NiAl-Al}_2\text{O}_3$.



Rys. 2. Mikropęknięcia w materiale kompozytowym $\text{NiAl}/20\%\text{Al}_2\text{O}_3$

Obecny stan wiedzy na temat wytwarzania kompozytów technikami metalurgii proszków wskazuje na konieczność koncentracji prac nad lepszym poznaniem procesów technologii oraz optymalizacji. Możliwość badania materiału podczas procesu na poziomie cząstek proszku kompozytu pozwoliłoby na minimalizowanie negatywnego wpływu naprężeń resztkowych oraz umożliwiło otrzymanie wyrobu o oczekiwanych właściwościach użytkowych. Efektywnym oraz wydajnym narzędziem do realizacji podobnych badań jest modelowanie numeryczne.

Modelowanie procesów spiekania jest obecnie jednym z największych wyzwań w dziedzinie modelowania materiałów. Rosnące możliwości technik obliczeniowych sprawiły, że metoda elementów dyskretnych, zaliczana do mikromechanicznych modeli dyskretnych, stała się popularnym narzędziem do analizy numerycznej procesów metalurgii proszków [1-5]. Jednakże większość stosowanych dyskretnych modeli spiekania zakłada jedynie lekkie oddziaływanie pomiędzy elementami dyskretnymi zaniedbując oddziaływanie sprężyste. Przy dużych odkształceniach występujących podczas spiekania pod wysokim obciążeniem zewnętrznym lekkie modele mogą błędnie wyznaczać wartości sił oraz naprężeń pomiędzy oddziaływującymi cząstkami, szczególnie dla materiałów dwufazowych. Cytowane prace dotyczące modelowania dyskretnego (oprócz [3]) przedstawiają wyniki symulacji numerycznych spiekania jedynie jednofazowych proszków oraz nie uwzględniają wyznaczania naprężeń mikroskopowych w trakcie oraz po procesie spiekania.

W niniejszej pracy została przedstawiona numeryczna analiza naprężeń mikro- oraz makroskopowych występujących w trakcie oraz po procesie metalurgii proszków materiałów kompozytowych. Do analizy numerycznej procesu spiekania oraz chłodzenia został użyty oryginalny termo-lepkosprężysty model elementów dyskretnych. W ramach prezentowanych badań zostały wyznaczone naprężenia mikroskopowe generowane zarówno w miejscach kohezyjnych połączeń między cząstkami proszku, jak i w samych cząstkach. Za pomocą metody uśredniania zostały wyznaczone naprężenia makroskopowe w całej próbce kompozytowej. Do symulacji numerycznych został wykorzystany jeden z najbardziej obiecujących materiałów kompozytowych - NiAl-Al₂O₃.

2. Sformułowanie teoretyczne

Do badań numerycznych nad naprężeniami w materiale kompozytowym w niniejszej pracy użyto oryginalnego termo-lepkosprężystego modelu spiekania dwóch cząstek, który został szczegółowo przedstawiony w pracy [6]. Model reologiczny składa się z elementu reprezentującego siłę napędową spiekania F^{sint} połączonego równolegle z elementem Maxwella (szeregowo połączony element sprężysty z elementem lepkim) wzbogaconym o element termiczny (rys. 3). Siła napędowa spiekania dana jest równaniem:

$$F^{\text{sint}} = -\pi\gamma_s \left[4R \left(1 - \cos \frac{\Psi}{2} \right) + a \sin \frac{\Psi}{2} \right] \quad (1)$$

gdzie: γ_s jest energią powierzchniową cząstki [J/m²], Ψ jest kątem dwuściennym [rad], R jest promieniem cząstki [m], a jest promieniem szyjki [m]. Dla połączonych szeregowo elementów reologicznych całkowita prędkość cząstek w kierunku normalnym V_n jest sumą prędkości poszczególnych elementów:

$$V_n = V_n^T + V_n^e + V_n^v \quad (2)$$

oraz zachodzi równowaga sił poszczególnych elementów:

$$F^T = F^e = F^v \quad (3)$$

$$F^c = k_n (u_n^T + u_n^c) \quad (4)$$

$$F^v = \frac{\pi a^4}{8D_b} V_n^v \quad (5)$$

F^T , F^e są siłami wynikającymi kolejno z oddziaływania termicznego oraz sprężystego, k_n jest sztywnością cząstki w kierunku norm., u_n^T, u_n^e są przemieszczeniami wynikającymi kolejno z oddziaływania termicznego oraz sprężystego w kierunku normalnym, F^v jest siłą wynikającą z oddziaływania lepkiego, V_n^v jest prędkością względną cząstki w kierunku normalnym wynikającą z oddziaływania lepkiego, oraz D_b jest efektywnym współczynnikiem dyfuzji po granicach ziaren.

Siła oddziaływania między ziarnami przenoszona jest przez połączenie szyjkowe, którego przekrój jest kołem o promieniu a . Całkowite średnie naprężenie σ w tym przekroju w trakcie spiekania jest sumą

$$\sigma = \sigma^{\text{sint}} + \sigma^{\text{ev}} \quad (7)$$

naprężenia σ^{sint} wywołanego siłą napędową spiekania F^{sint}

$$\sigma^{\text{sint}} = \frac{F^{\text{sint}}}{A} \quad (8)$$

oraz naprężenia σ^{ev} w lepkosprężystym elemencie Maxwella

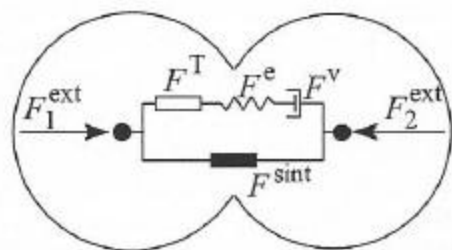
$$\sigma^{\text{ev}} = \frac{F^s}{A} = \frac{F^v}{A} \quad (9)$$

gdzie A jest powierzchnią przekroju połączenia szyjkowego. Po zakończonym procesie spiekania ($\sigma^{\text{sint}} = 0$) naprężenia reszkowe wynikają z sił pozostałych w elemencie sprężystym po zdjęciu obciążenia.

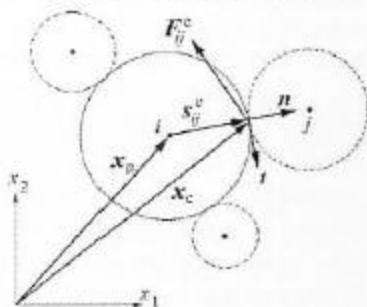
W trakcie procesu chłodzenia, na skutek różnicy w wartości współczynnika rozszerzalności cieplnej obu faz kompozytu, tworzy się złożony stan naprężenia, który może prowadzić do pęknięcia cząstek. Średnie naprężenia σ_i w ziarnie i (rys. 4) otoczone N ziarnami j można wyznaczyć z następującego równania [7]:

$$\sigma_i = \frac{1}{V_i} \sum_{j=1}^N s_{ij}^c \otimes F_{ij}^c \quad (11)$$

gdzie F_{ij}^c jest wektorem oddziaływania ziarna j na ziarno i , a s_{ij}^c jest wektorem łączącym środek ziarna i z punktem kontaktu między ziarnami i oraz j , a V_i jest objętością ziarna i . Do dalszej analizy została użyta jedynie część hydrostatyczna wyznaczonego średniego naprężenia σ_i .



Rys. 3. Schemat reologiczny modelu termolepkosprężystego



Rys. 4. Schemat oddziaływania elementów dyskretnych.

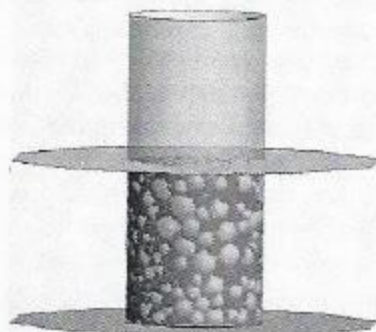
Na podstawie wyznaczonych wartości mikronaprężeń dla całej objętości spiekanej próbki kompozytowej możliwe jest modelowanie naprężeń makroskopowych w czasie całego procesu metalurgii proszków. W niniejszej pracy przejście z opisu mikro- do makroskopowego zostało oparte na koncepcji reprezentatywnego elementu objętościowego (RVE). Naprężenie makroskopowe dla RVE wyliczane jest za pomocą następującej zależności [8]:

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{V_{RVE}} \sum_{c=1}^{N_c} L^c \otimes F^c \quad (12)$$

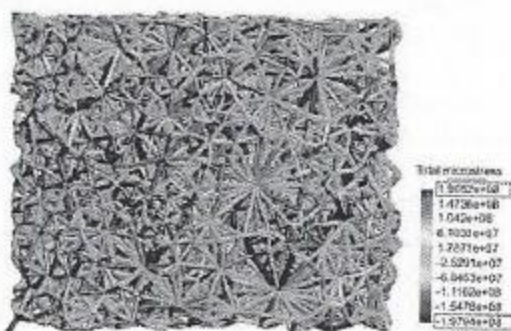
gdzie N_c jest liczbą kontaktów pomiędzy elementami dyskretnymi dla całego RVE, F^c jest całkowitą siłą oddziaływania dla danego kontaktu, L^c jest wektorem łączącym środki elementów dyskretnych w kontakcie (ang. *branch vector*), a V_{RVE} jest objętością reprezentatywnego elementu objętościowego.

3. Wyniki numeryczne

Analiza naprężeń w skali mikro- oraz makroskopowej została przeprowadzona na przykładzie cylindrycznej próbki kompozytowej NiAl/20%Al₂O₃ składającej się z 2000 cząstek proszku intermetalicznego oraz ceramicznego (przy generacji modelu geometrycznego próbki uwzględniono rzeczywisty rozkład wielkości ziaren obu faz). Za pomocą modelu termo-lepkosprężystego przeprowadzono symulację numeryczną spiekania w temperaturze 1400°C oraz pod ciśnieniem 30 MPa. Rys. 5 przedstawia próbkę w trakcie procesu spiekania, natomiast rys. 6 przedstawia próbkę po spiekaniu z uwzględnionymi połączeniami między elementami dyskretnymi w postaci belek wraz z rozkładem mikronaprężeń wyznaczonych za pomocą równania 7.



Rys. 5. Symulacja modelu spiekania materiału kompozytowego NiAl/20%Al₂O₃

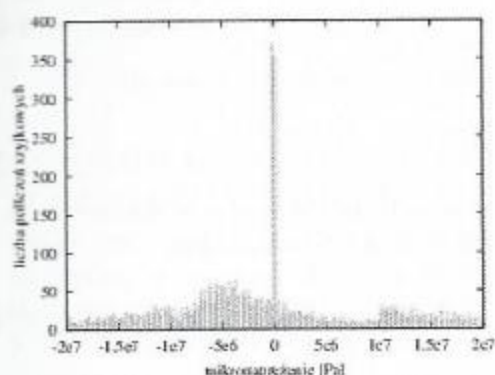


Rys. 6. Rozkład mikronaprężeń rezydualnych w sztykach dla całej próbki kompozytowej

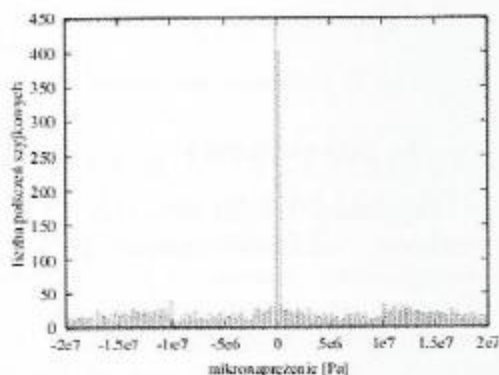
Na rysunku 7 oraz 8 porównano rozkłady mikronaprężeń w trakcie spiekania oraz po odciążeniu (naprężenia resztkowe). W pierwszym przypadku w spiekanej próbce kompozytowej przeważają wartości mikronaprężeń o charakterze ściskającym, czego skutkiem jest zbliżanie się do siebie elementów dyskretnych w skali mikroskopowej, oraz skurcz materiału i spadek porowatości w skali makroskopowej. W przypadku próbki kompozytowej po spiekaniu, mikronaprężenia ściskające oraz rozciągające wykazują wartości zbliżone, co świadczy o stanie równowagi w odciążonym materiale.

Wykorzystując wartości mikronaprężeń generowanych w sztykach oraz stosując równanie 12, wyznaczono ewolucję naprężenia makroskopowego dla elementu RVE (w tym

przypadku dla całej próbki spiekanej) dla całego przebiegu procesu metalurgii proszków (prasowanie, spiekanie, chłodzenie). Rys. 9 przedstawia makronapężenia lepkosprężyste, od siły spiekania oraz całkowite oddziaływujące w kierunku 'z', który jest kierunkiem przyłożenia obciążenia zewnętrznego w spiekanej próbce kompozytowej ($p = 30\text{MPa}$). Wartość makronapężenia całkowitego w końcowym etapie spiekania wynosi 30.65MPa (reakcja na przyłożone obciążenie zewnętrzne), natomiast dla stanu po odciążeniu - 0.0008MPa (stan równowagi).

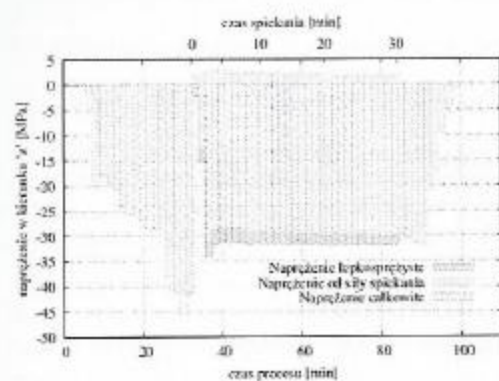


Rys. 7. Histogram mikronapężeń w szycie w końcowym etapie spiekania.

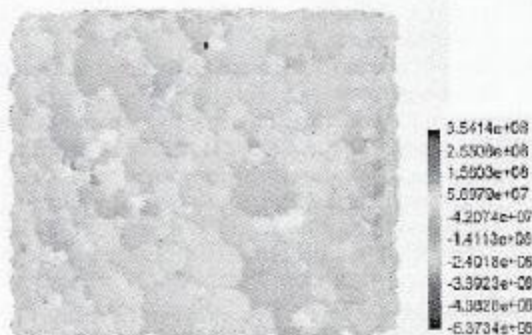


Rys. 8. Histogram mikronapężeń rezydualnych w szycie.

W prezentowanej pracy, korzystając z zależności 11, wyznaczono uśrednione napężenie mikroskopowe w ziarnie dla wszystkich elementów dyskretnych. Na rys. 10 przedstawiono rozkład mikronapężeń w ziarnie w całej objętości spiekanej próbki kompozytowej $\text{NiAl}/20\%\text{Al}_2\text{O}_3$ w czasie spiekania.

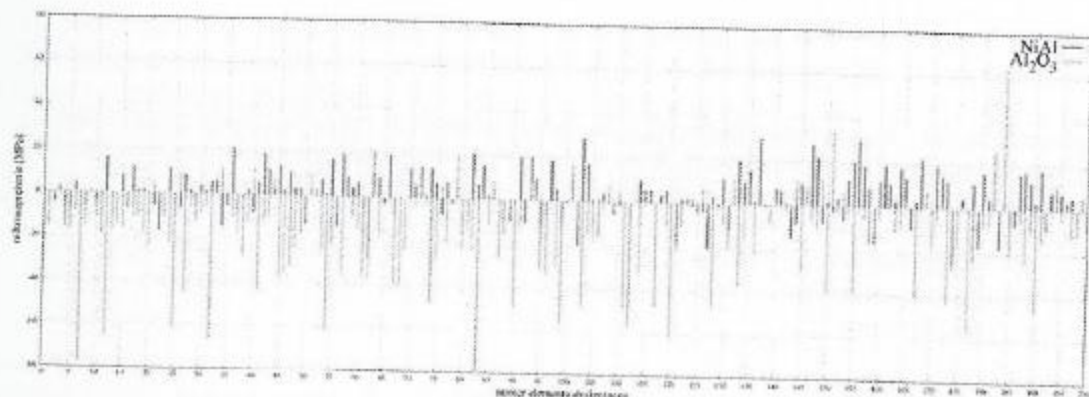


Rys. 9. Ewolucja makronapężeń w kierunku 'z' w funkcji czasu procesu oraz spiekania.



Rys. 10. Rozkład mikronapężeń w ziarnie w czasie spiekania próbki kompozytowej.

W celu badania charakteru wzajemnego oddziaływania poszczególnych faz kompozytu po odciążeniu, wyznaczono oraz porównano mikronapężenia rezydualne w ziarnie dla 200 elementów dyskretnych osnowy NiAl oraz zbrojenia Al_2O_3 (rys. 11). Na podstawie przedstawionego wykresu można stwierdzić, że cząstki osnowy są rozciągane, natomiast cząstki zbrojenia ściskane. Powyższy wynik jest zgodny z przewidywaniami teoretycznymi, które dotyczą mechanizmów chłodzenia materiału kompozytowego. Różnice w wartościach współczynnika rozszerzalności cieplnej wpływają na zjawisko ściskania cząstek ceramicznych podczas chłodzenia. Na powyższy fakt wpływa również niekorzystne umiejscowienie małych cząstek zbrojenia pomiędzy większymi cząstkami intermetalicznymi.



Rys. 11. Porównanie mikronaprzeżeń rezydualnych w ziarnie dla 200 cząstek NiAl oraz Al_2O_3 .

4. Wnioski końcowe

Oryginalny termo-lepkosprężysty model elementów dyskretnych jest odpowiednim narzędziem do modelowania procesów wytwarzania nowoczesnych materiałów kompozytowych. Otrzymane wyniki naprzeżeń mikroskopowych (zarówno w połączeniu szybkowym, jak i w ziarnie) oraz makroskopowych w trakcie oraz po procesie metalurgii proszków próbki kompozytowej NiAl/20% Al_2O_3 wskazują na poprawną oraz efektywną symulację procesu spiekania oraz chłodzenia.

Podziękowanie

Praca naukowa finansowana ze środków Programu Operacyjnego: Innowacyjna Gospodarka 2007-2013 w ramach projektu badawczego KomCerMet: „Kompozyty i nanokompozyty ceramiczno-metalowe dla przemysłu lotniczego i samochodowego”.

Literatura

- [1] Henrich B, Wonisch A, Kraft T, Moseler M, Riedel H. Simulations of the influence of rearrangement during sintering. *Acta Materialia*, 2007
- [2] Martin CL, Schneider LCR, Olmos L, Bouvard D. Discrete element modeling of metallic powder sintering. *Scripta Materialia*, 2006
- [3] Olmos L, Martin CL, Bouvard D. Sintering of mixtures of powders: Experiments and modelling. *Powder Technology*, 2009
- [4] Parhami F, McMeeking RM. A network model for initial stage sintering. *Mechanics of Materials*, 1998
- [5] Wonisch A, Kraft T, Moseler M, Riedel H. Effect of different particle size distributions on solid-state sintering: A microscopic simulation approach. *J. Am. Ceram. Soc.*, 2009
- [6] Nosewicz S, Rojek J, Pietrzak K, Chmielewski M, Kaliński D. Modelowanie procesu spiekania materiałów dwufazowych metodą elementów dyskretnych. *Rudy i Metale Nieżelazne*, 2012
- [7] Luding S. Micro-macro transition for anisotropic, frictional granular packings. *Int. J. Solids and Structures*, 2004
- [8] Chang C, Chao S, Chang Y. Estimates of elastic moduli for granular material with anisotropic random packing structure. *Int. J. Solids and Structures*, 1995

Numerical modeling of stress during and after powder metallurgy process of composite materials

Sintering and cooling processes are the major stages of powder metallurgy technology of composite materials with metallic matrix. During cooling the microcracks may occur due to appearance of the residual stress at the grain boundaries. This paper presents numerical modeling of micro- and macroscopic stress during and after the process of powder metallurgy composite materials. The original thermo-viscoelastic model of discrete elements have been performed. Numerical simulations have been carried out on the example of the NiAl- Al_2O_3 composite. The obtained results confirm correct and efficient performance of the proposed numerical model.