

文章编号:2095-0411(2015)03-0029-06

激光诱导 Fe 基 TiN 强化复合层形成温度场模拟

王 辉,陈晓龙,童 涵

(常州大学 机械工程学院,江苏 常州 213164)

摘要:讨论激光诱导 Fe 基 TiN 强化复合层形成的可行性。不同于 PVD 和 CVD 及其他衍生方法, TiN 是在 Fe 基样品表层原位复合生成,而非 Fe 基表面,与激光熔覆和激光合金化不同, Fe 基体不经历熔化再凝固的过程。对移动激光光源条件下的温度场进行了模拟,通过分析激光温度场与各影响因素之间的关系来控制参数以获得 TiN 强化复合层。

关键词:激光;TiN;复合层;温度场;ANSYS

中图分类号:TH 16

文献标志码:A

doi:10.3969/j.issn.2095-0411.2015.03.006

Simulation of Laser-Induced Fe-Matrix TiN Reinforced Composite Layer Forming Temperature Field

WANG Hui, CHEN Xiaolong, TONG Han

(School of Mechanical Engineering, Changzhou University, Changzhou 213164, China)

Abstract: The feasibility of Fe-based TiN reinforced composite layer induced by laser was discussed. Unlike PVD and CVD as well as the methods based on deposition, TiN is in-situ composited in the surface layer of Fe-based sample induced by laser, but not deposited on the surface of Fe-based sample. Also, different from laser cladding and laser alloying, Fe substrate does not experience the cycle of melt and resolidification. The temperature field of laser under the condition of moving light source is simulated. The relationship between the laser temperature field and influence factors is analyzed in order to control parameters to achieve the TiN reinforced composite layer.

Key words: laser; TiN; composite layer; temperature field; ANSYS

激光诱导原位生成金属陶瓷复合层兼有金属基体和陶瓷增强相的双重优点,而且原位反应法促使复合层与基体润湿良好,结合力强,且清洁无污染,近年来成为金属基复合材料制备领域及材料表面改性领域的重要发展方向。

作为一种非计量化合物,由元素 Ti 和 N 组成的化合物 TiN_{1-x} 可以在很宽的组成范围内稳定存在,其范围为 $TiN_{0.6}$ — $TiN_{1.16}$,通称氮化钛(TiN)。氮化钛的结构由金属键和共价键混合而成,同时具

有金属晶体和共价晶体的特点,熔点高达 2 955℃,具有高硬度、耐磨损、耐高温、抗热震、摩擦系数低等优良的综合力学性能,是目前研究和应用最为广泛的耐磨材料之一。

TiN 当前最广泛的应用形式是作为涂层材料,用于刀具和机械零件的表面耐磨层,其制备技术主要是物理气相沉积(PVD)、化学气相沉积(CVD)^[1-5],以及在此基础上发展起来的基于沉积的其他方法。这些方法从原理上看,都是在基体表

收稿日期:2014-09-09。

作者简介:王辉(1972—),男,辽宁辽阳人,博士,副教授,主要从事特种加工和表面工程技术研究。

面沉积一层 TiN 薄膜作为涂层,涂层厚度一般为几个微米(BIAD 可以沉积厚的薄膜,但其沉积速率非常缓慢);在性能上,尽管 PVD 和 CVD 方法技术已经成熟,并且广泛应用于产品,但是由于原理的原因,基体与涂层之间存在材料和性能上的不连续,容易产生“蛋壳效应”,工艺不当或者在特殊应力作用下会导致涂层剥落。发展新的方法,使 TiN 与基体产生紧密结合,改性层质量及性能可控并易于控制,是国内外学者都在研究的有价值的课题。

本文模拟实验以 TiO₂ 为主要成分的混合物以一定比例敷在 Fe 基试样表面,通以一定流量氮气(N₂),在激光扫描辐照诱导作用下将 TiN 原位复合于 Fe 基试样表层,而并不是沉积于 Fe 基试样的表面,同时 Fe 基体也未经历熔化再凝固的循环。

原位复合 TiN 形成条件的问题是热力学的问题,使用经典吉布斯自由能计算公式 $\Delta G_T = \Delta H_T - T\Delta S$ 的积分计算、非常复杂,计算量大,本文使用物质吉布斯自由能函数法(Φ 函数法)进行热力学计算。使用 Φ 函数法进行热力学计算时,标准反应吉布斯自由能可表述为 $\Delta G_T = \Delta H_{298}^\ominus - T\Delta\Phi_T$,其中 $\Delta\Phi_T$ 为反应吉布斯自由能函数,可查取无机热力学性质数据表并计算而得。标准状态下的热力学判据并不适合快速非平衡过程,复合层形成过程自发进行的经验判据是 $\Delta G_T \leq -43 \text{ kJ}^{[6]}$,由此经过计算可获得激光诱导 Fe 基复合层 TiN 形成的热力学温度,从而通过调控激光温度场来控制 TiN 的形成。

参照实用无机物热力学数据手册进行计算, TiO₂ 参加反应的温度必须大于 2 143K(熔点温度),而 Fe 的熔点为 1 809K^[6]。通过研究激光辐照温度场的数值模拟来掌握辐照过程中温度场分布、演变,对于理论研究和实验均具有指导意义。近几年数值模拟基本上都利用通用型商业软件来处理初始条件、边界条件以及优化方面,节省了大量的实验时间^[7]。本文通过 ANSYS 软件进行温度场模拟分析获得实验进行的可行性参照。

1 激光辐照温度场模型的建立

ANSYS 热分析分为稳态热分析和瞬态热分析 2 种。激光辐照过程是一个局部快速加热到高温随后冷却的过程,随着热源的移动,整个零件的温度随时间和空间急剧变化。因此,温度场分析属于非线性瞬态分析过程,分析流程图如图 1 所示。

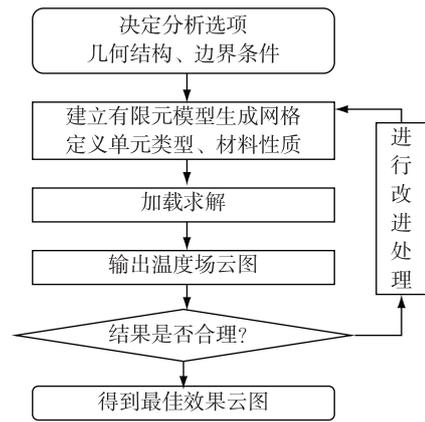


图 1 分析流程图

Fig.1 Analysis flow chart

1.1 激光热源的处理

圆形激光光斑功率分布不均匀,中心位置强而边缘位置较弱,激光束辐照到预置层表面的能量分布满足高斯分布^[8]:

$$P(x, y) = \frac{3\eta P_0}{\pi r^2} \cdot \exp\left\{-3\left[\frac{(x/r)^2 + ((y-vt)/r)^2}{r^2}\right]\right\}$$

式中: P_0 为激光束总能量; η 为材料对激光的吸收系数; v 为激光的扫描速度; r 为激光束的半径。激光束移动过程采用“生死单元法”,即将扫描层(粉层)均分为若干个单元,激光辐照前所有单元处于未激活状态(即“死”状态),当激光束开始移动时,将粉层上未激活的单元依次激活使其处于“生”状态。该过程实现某单元在被辐照前是不参与传热的,当激光束辐照到该单元时,将其激活参与传热,施加一定时间的热源,从而模拟激光热源的移动。

1.2 边界条件处理

其温度场控制方程根据质量守恒定律建立,数学表达式为:

$$\rho(T)C_p(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[K_x(T) \frac{\partial}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[K_y(T) \frac{\partial}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[K_z(T) \frac{\partial}{\partial z} \right] + H$$

式中: ρ 为材料密度, C_p 为比热, K_x 、 K_y 、 K_z 分别为 3 个方向上的导热系数, H 为相变潜热;对于 Fe 基试样, $K_x = K_y = K_z$,并忽略相变潜热,温度场控制方程可简化为:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = K \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) = K (\nabla^2 T)$$

激光辐照前试样处于室温,给定初始条件 T

$(x, y, z, 0) = 300\text{K}$ 及上表面、下表面、单元四周边界条件^[9-10]。

1.3 模型建立及网格划分

本文建立的三维模型:下层为 Fe 基体为 $15\text{mm} \times 10\text{mm} \times 5\text{mm}$ 的长方体,上层为 TiO_2 粉层为 $10\text{mm} \times 0.75\text{mm} \times 1\text{mm}$ 的长方体,网格划分均采用 SOLID70 六面体单元。激光自身特性决定了辐照过程中加热时间短、作用区域小、温度梯度大,考虑到计算时间和计算结果精确的相容性,网格划分方法为一般基体采用稀疏网格,粉层及基体表层临近区域采用细密网格;由于单元数比较庞大,计算时间较长,采用 ANSYS 高级分析中的自适应网格技术,修改宏命令使符合精度要求的细密网格随着激光热源一起移动且集中在热源附近^[11]。这样大大减少了计算求解时间,且对结果的精度影响不大。

1.4 热物理参数的确定

温度场模拟材料参数主要有导热系数、密度及比热容,这些参数都是随温度变化而变化的。选取较准确的几个温度节点的特征值用差值法和外推法对其他温度节点的特征值进行计算。粉层热物理性能参数根据复合材料混合法则求得^[12]

$$P(f_k) = \sum_1^N P_k f_k$$

式中: $P(f)$ 代表混合层材料的某性质, P_k 、 f_k 分别代表材料 k 组元的某性质和质量分数。

1.5 加载

模拟采用步进法移动热源来代替激光的移动,这样要求步长非常短,模拟采用的时间步长为 $1/3\text{ s}$ 。其步长远小于光斑直径,因此近似激光热源移动精度足够。被辐照材料与外界存在温度差值而与周围介质换热,激光辐照时热能损失主要是辐射换热,且温度越高辐射换热作用越强烈。为使计算方便本文采用总换热系数来代替对流和辐射换热系数。损失热能可表示为:

$$q_s = \beta(T - T_0)$$

式中: T 为零件表面温度; T_0 为周围介质温度; β 为表面换热系数。

2 结果后处理及分析

2.1 后处理

通过调节激光参数(激光功率、光斑半径、扫描速度)和粉层厚度的数值大小设计 9 组模拟试验数据,以单一变量为依据将试验模拟结果进行比对,分析该变量对于温度场的影响并进行结果优化。选取时刻为激光热源移动到右侧端点处,主要模拟试验参数见表 1。

表 1 模拟试验数据表
Table 1 Simulation test data table

	激光功率/ W	光斑半径/ mm	扫描速度/ (mm · s ⁻¹)	粉层厚度/ mm
1	700	1.5	3	1
2	600	1.5	3	1
3	800	1.5	3	1
4	700	1	3	1
5	700	2	3	1
6	700	1.5	2	1
7	700	1.5	4	1
8	700	1.5	3	0.5
9	700	1.5	3	1.5

试验 1 的模拟结果温度场云图输出如图 2,图中上层凸起长方体部分为模拟 TiO_2 粉层,其高度为 1mm , 底下部分为基体。从图 2(b)可以看出温度分布与施加的高斯热源有相同的分布特征,中心温度最高,向边缘方向逐渐降低,并且越靠近激光光斑中心处温度梯度越大。且激光束向前移动的过程中,激光直接照射处在短时间内上升到很高的温度,扫描过后温度急剧降低,体现激光加热急冷急热的特性。其分布形状为勺型,符合移动激光热源温度场的特性。图 3 为图 1(c)处理后的等值线图,从图中可以看出上层粉层部分温度分布基本在 TiO_2 熔点 (2143K) 之上(参照 H 线);而在基体部分温度高于 Fe 熔点 (1809K) 的深度小于 1mm , 可以认为基体未熔(等值线图中等值线数值由小到大标注字母顺序为 C、D、E、F、G、H、I, 其间夹杂的非顺序线为三维等值线投影应忽略)。

在结果优化过程中,通过选取不同参数为单一变量来获得各参数对温度场分布的影响,从而得到优化结果。本文以上例(激光功率 700W 、光斑半径 1.5mm 、扫描速度 3mm/s 、粉层厚度 1mm)为参考依次选取各参数为单一变量进行对比:

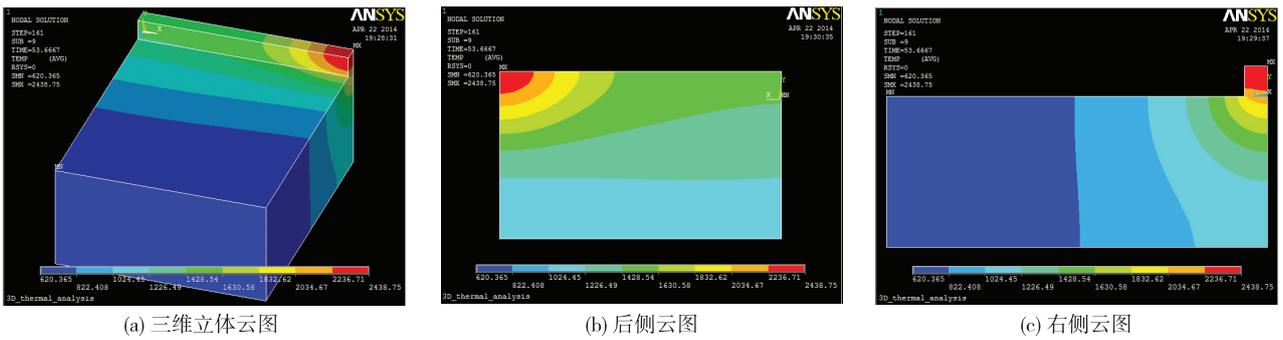


图 2 温度场云图

Fig.2 Temperature field cloud picture

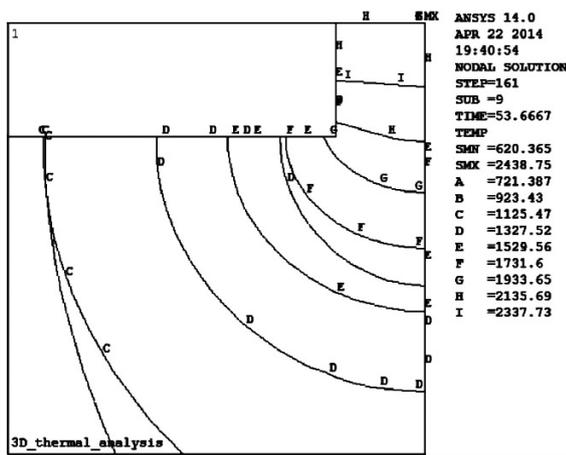


图 3 右侧等值线图

Fig.3 Right side contour map

2.2 激光功率对温度场的影响

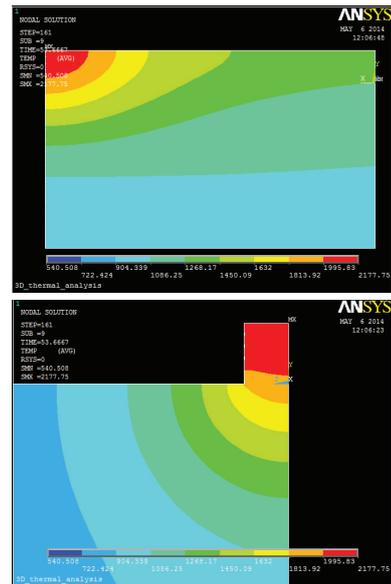
试验 2 和 3 的模拟结果输出如图 4,从图 3 和图 4 中可以看出整体温度数值随功率增大而增大,这是因为影响温度数值大小的主要因素为激光功率密度(两者为正比例关系),当光斑半径不变时,功率越大激光功率密度越大;温度梯度无明显差别,激光功率的变化对温度梯度影响不大。

2.3 光斑半径对温度场的影响

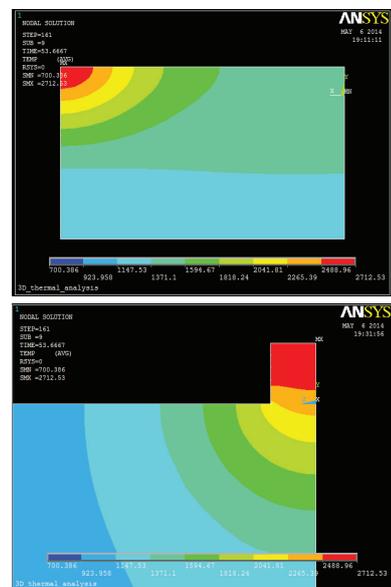
试验 4 和 5 的模拟结果输出如图 5,将其与图 3 作比较。从图 3 和图 5 中可以看出,光斑半径为 1mm 和 1.5mm 时温度数值大小相近,这是由于光斑面积大小差距较小。当半径为 2mm 时,温度数值明显变小,激光功率一定时,光斑半径越小,激光功率密度越大,温度数值越大。温度梯度无明显变化,光斑半径的变化对温度梯度影响不大。

2.4 扫描速度对温度场的影响

试验 6 和 7 的模拟结果输出如图 6 所示,从图



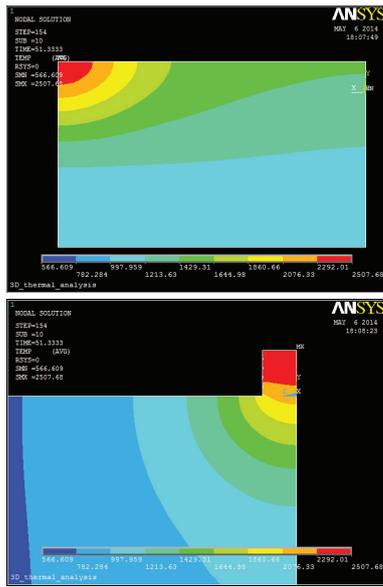
(a) 功率为 600W 的模拟结果



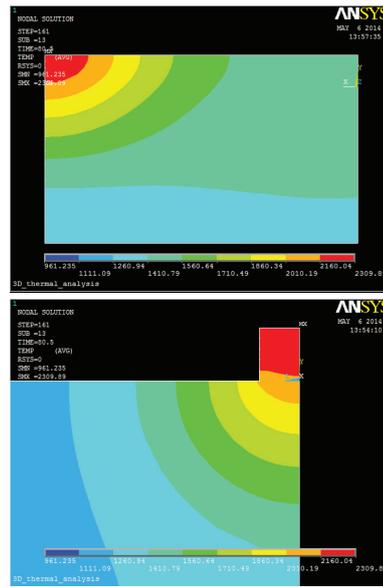
(b) 功率为 800W 的模拟结果

图 4 激光功率影响的温度场等值线图

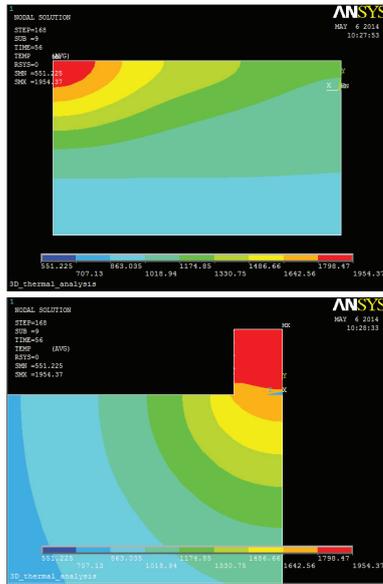
Fig.4 Contour map of laser power-affected temperature field



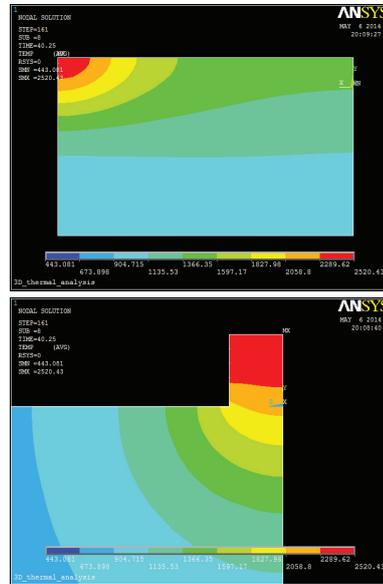
(a)半径为 1mm 时的模拟结果



(a)扫描速度为 2mm/s 时的模拟结果



(b)半径为 2mm 时的模拟结果



(b)扫描速度为 4mm/s 时的模拟结果

图 5 光斑半径影响的温度场等值线图

图 6 扫描速度影响的温度场等值线图

Fig.5 Contour map of spot radius-affected temperature field

Fig.6 Contour map of scanning speed-affected temperature field

3 与图 6 可以看出,最大温度随扫描速度增大而增大,但增长幅度不大;扫描速度越小时,温度分布越趋于平缓,温度梯度越小,即扫描速度越大,温度梯度越大,所以扫描速度对温度场温度梯度影响较大,而在合理的扫描速度范围内,扫描速度的变化对最大温度数值影响不大。

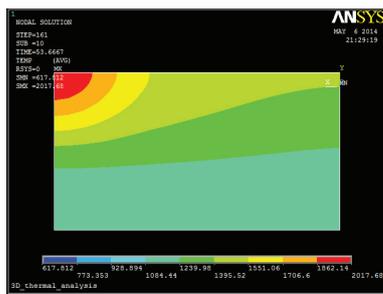
增加,即高斯公式中 y 值增大,其能量值随之变大。实际试验中,为使基体不熔、激光焦点在基体表面以上,在粉层厚度不大时,其值越大越接近激光焦点处,满足模拟情况。由于模拟重点在于基体表面附近区域温度分布情况,观察图 7(a)(I 线)、图 3(H 线)、图 7(b)(G 线)部分,随粉层厚度的增加,基体表层附近区域温度数值变大,温度梯度无明显变化。

2.5 粉层厚度对温度场的影响

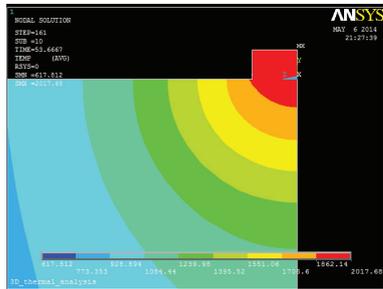
3 结论

试验 8 和 9 的模拟结果输出如图 7 所示,从图中可以看出,随粉层厚度的增加温度数值明显增大,这是因为所施加热源为高斯热源,当单位体积高度

应用 ANSYS 软件模拟激光诱导复合层生成实验实现温度场的模拟,为实验工艺参数选取、优化提



(a) 粉层厚度为 0.5mm 时的模拟结果



(b) 粉层厚度为 1.5mm 时的模拟结果

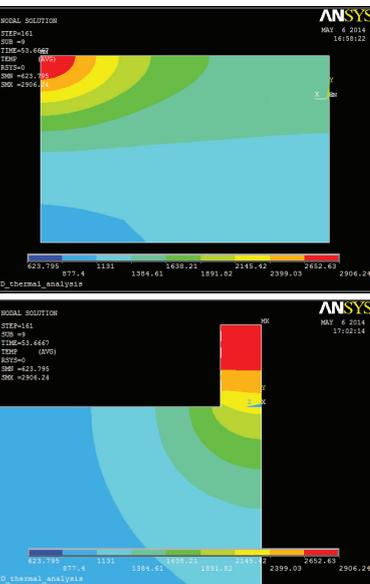


图 7 粉层厚度影响的温度场等值线图

Fig.7 Contour map of powder layer thickness-affected temperature field

供了可靠的理论依据。

通过温度场云图进行分析,激光束辐照粉层表面,激光能量转换为热能并向基体中传导,模型由表及里产生很大的温度分布梯度。根据温度的不同,整个模型可分为 3 个区域:TiO₂ 粉层熔化区(位于粉层 H 线至 I 线以上温度高于 TiO₂ 熔点)、中间区域(G 线周围区域温度在 TiO₂ 熔点与基体 Fe 熔点

之间其厚度小于 1mm)、基体不熔区(位于基体 F、G 线之间部分往下温度低于基体 Fe 熔点)。因此 TiN 复合层生成于 Fe 基体表层而基体不熔在理论上是可以实现,即 TiO₂ 粉层熔化区中分离出 Ti⁺ 透过中间区域,在基体表层与 N⁻ 结合生成 TiN 复合层。且在调试相关参数优化温度场云图的过程中,获得各参数对温度场分布的影响,其结果对于实验中激光参数的选取及粉层厚度的选择具有一定的指导价值。

参考文献:

[1]SOROKA E, LYASHENKO B, QIAO SHENGRU, et al. Tribological Behaviour and Cutting Performance of PVD-TiN Coating/Substrate System with Discontinuous Surface Architecture [J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2011, 40 (4): 580-584.

[2]WAGNER J, MITTERER C, PENOY M, et al. The effect of deposition temperature on microstructure and properties of thermal CVD TiN coatings[J]. International Journal of Refractory Metals and Hard Materials, 2008, 26 (2): 120-126.

[3]黄艳, 魏仕勇, 蒋庐珍. 物理气相沉积 TiN 涂层的研究现状与展望[J]. 江西科学, 2009, 27 (3): 466-470.

[4]高原, 徐晋勇, 刘燕萍, 等. 碳钢表面氮化钛陶瓷化研究[J]. 材料热处理学报, 2005, 26(3): 61-63.

[5]董洪亮, 李国军, 崔学军. 高性能陶瓷涂层的制备技术与发展[J]. 材料导报, 2008, 22(XI): 183-186.

[6]叶大伦. 实用无机物热力学手册[M]. 北京: 冶金工业出版社, 2002, 9.

[7]王毘成, 绍敏. 有限单元法基本原理与数值方法[M]. 北京: 清华大学出版社, 1988: 23-60.

[8]SEOP K H, IG H S, JAE K S. On the rule of mixtures for predicting the mechanical properties of composites with homogeneously distributed soft and hard particles[J]. Journal of Materials Processing Technology, 2001, 112(1): 109-113.

[9]关振中. 激光加工工艺手册[M]. 北京: 中国计量出版社, 1998: 28-74.

[10] Simchi, Pohl H r. Sintering processing parameters on the microstructure and densification of iron powder[J]. Materials and Engineering, 2003, 359: 119-128.

[11]王桂兰, 吴圣川, 张海鸥, 等. 复杂零件等离子熔积无模成形的温度场模拟[J]. 焊接学报, 2007, 28(5): 49-52.

[12] 王强, 李冬林. 基于 ANSYS 平台的堆焊热应力的动态模拟[J]. 武汉理工大学学报(交通科学与工程版), 2004, 128(6): 866-869.

(责任编辑:李艳)