

# Numeryczne modelowanie naprężeń rezydualnych w spiekanych materiałach kompozytowych

## Numerical modeling of residual stresses of sintered composite materials

SZYMON NOSEWICZ  
JERZY ROJEK

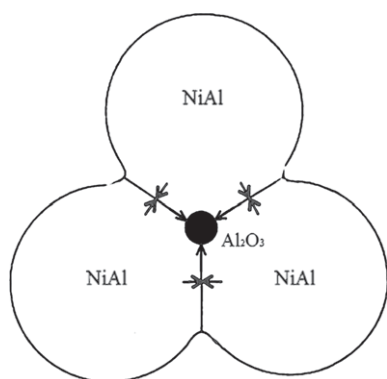
**Streszczenie:** Proces spiekania jest jedną z głównych metod wytwarzania materiałów kompozytowych na osnowie intermetallicznej zbrojonych cząstkami ceramicznymi. W końcowej fazie spiekania, podczas chłodzenia materiału, może dochodzić do pęknięcia cząstek na skutek występujących na granicach faz znacznych wartości naprężeń rezydualnych, co w konsekwencji prowadzi do postępowej degradacji materiału. Prezentowana praca przedstawia wyniki modelowania numerycznego naprężeń mikro- oraz makroskopowych występujących w trakcie oraz po procesie spiekania materiałów kompozytowych. Do analizy procesów spiekania został użyty oryginalny termolepkosprężysty 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.

Słowa kluczowe: spiekanie, kompozyty, naprężenia rezydualne, metoda elementów dyskretnych

**Abstract:** Sintering process is one of the major method of manufacture technology of composite materials with intermetallic matrix reinforced by ceramic particles. In the final stage of sintering, during cooling of material, the microcracks may occur due to appearance of significant residual stress at the grain boundaries, which leads to progressive degradation of the material. This paper presents numerical modeling of micro- and macroscopic stress during and after sintering process composite materials. The original thermo-viscoelastic model of discrete elements have been performed. Numerical simulations have been carried out on the example of the  $\text{NiAl-Al}_2\text{O}_3$  composite. The obtained results confirm correct and efficient performance of the proposed numerical model.

Keywords: sintering, composite, residual stresses, discrete element method

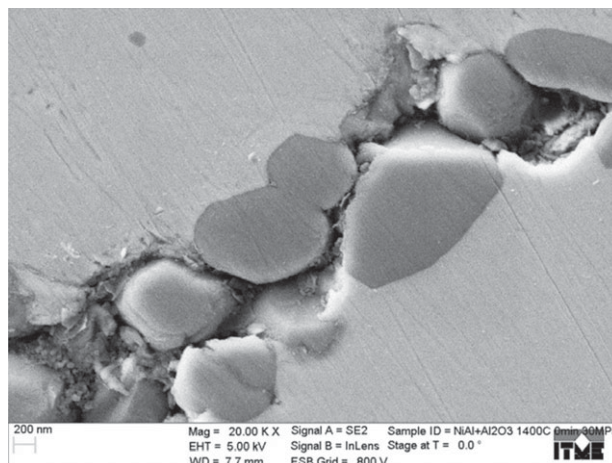
Spiekanie jest jedną z najczęściej wykorzystywanych technik otrzymywania nowoczesnych materiałów kompozytowych. W trakcie spiekania luźny proszek pod wpływem ciśnienia oraz temperatury zbliżonej do temperatury topnienia przekształca się w lity materiał. W przypadku spieków kompozyto-



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

Mgr inż. Szymon Nosewicz – Instytut Podstawowych Problemów Techniki PAN, ul. Pawińskiego 5B, 02-106 Warszawa, e-mail: snosew@ippt.gov.pl; prof. dr hab. inż. Jerzy Rojek – Instytut Podstawowych Problemów Techniki PAN, ul. Pawińskiego 5B, 02-106 Warszawa, e-mail: jrojek@ippt.gov.pl.

wych 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 makronaprężeń rozciągających oraz ściskających prowadzi do powstawania mikropęknięć, a w dalszej perspektywie do postępującej degradacji materiału (rys. 2).



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 pozwoliłaby na zminimalizowanie negatywnego wpływu naprężeń resztkowych oraz umożliwiła 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 często stosowanym narzędziem do analizy numerycznej procesów metalurgii proszków [1 – 5]. Jednakże większość stosowanych dyskretnych modeli spiekania zakłada jedynie lepkie oddziaływanie pomiędzy elementami dyskretnymi, zaniedbując oddziaływanie sprężyste. Przy dużych odkształceniach występujących podczas spiekania pod wysokim obciążeniem zewnętrznym lepkie modele mogą błędnie wyznaczać wartości sił oraz naprężeń pomiędzy oddziałującymi cząstkami, szczególnie dla materiałów dwufazowych. Cytowane prace dotyczące modelowania dyskretnego (oprócz [3]) przedstawiają wyniki symulacji numerycznych spiekania jedynie jednofazowych proszków i 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 termolepkosprężysty model elementów dyskretnych. W ramach prezentowanych badań zostały wyznaczone naprężenia mikroskopowe powstające 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-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

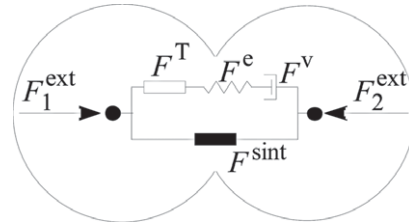
### Podstawy modelu numerycznego

Do badań numerycznych nad naprężeniami w materiale kompozytowym użyto oryginalnego termolepkosprężystego modelu spiekania dwóch cząstek, który został szczegółowo przedstawiony w pracach [6, 7]. Model reologiczny składa się z elementu reprezentującego siłę napędową spiekania  $F^{sint}$ , połączonego równolegle z elementem *Maxwella* (szeregowo połączony element sprężysty z elementem lepkiem) wzbogaconym o element termiczny (rys. 3). Siła napędowa spiekania dana jest równaniem:

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

gdzie:

- $\gamma_s$  – energia powierzchniowa cząstki, J/m<sup>2</sup>,
- $\Psi$  – kąt dwuścienny, rad,
- $R$  – promień cząstki, m,
- $a$  – promień szyjki, m.



Rys. 3. Schemat reologiczny modelu termolepkosprężystego

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:

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

gdzie:

$$F^e = k_n (u_n^T + u_n^e)^2 \quad (4)$$

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

$F^T, F^e$  – siły wynikające kolejno z oddziaływania termicznego oraz sprężystego,

$k_n$  – sztywność cząstki w kierunku normalnym,

$u_n^T, u_n^e$  – przemieszczenia wynikające kolejno z oddziaływania termicznego oraz sprężystego w kierunku normalnym,

$F^v$  – siła wynikająca z oddziaływania lepkiego,

$V_n^v$  – prędkość względna cząstki w kierunku normalnym wynikająca z oddziaływania lepkiego,

$D_b$  – efektywny współczynnik dyfuzji po granicach ziaren.

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

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

naprężenia  $\sigma^{sint}$  wywołanego siłą napędową spiekania  $F^{sint}$

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

oraz naprężenia  $\sigma^{ev}$  w lepkosprężystym elemencie *Maxwella*

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

gdzie *A* jest powierzchnią przekroju połączenia sztywnego.

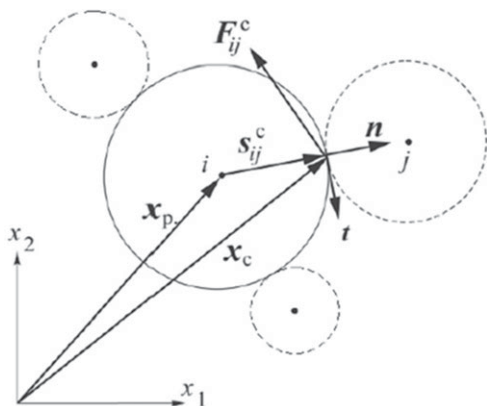
Po zakończonym procesie spiekania ( $\sigma^{sint} = 0$ ) naprężenia resztkowe są wynikiem działania sił pozostałych w elemencie sprężystym po zdjęciu obciążenia.

W trakcie 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  $\sigma_i$  w ziarnie *i* (rys. 4) otoczonym *N* ziarnami *j* można wyznaczyć z następującego równania [8]:

$$\sigma_i = \frac{1}{V_i} \sum_{j=1}^N (\mathbf{s}_{ij}^c)^T \mathbf{F}_{ij}^c = \frac{1}{V_i} \sum_{j=1}^N \begin{pmatrix} (s_{ij}^c)_1 (F_{ij}^c)_1 & (s_{ij}^c)_1 (F_{ij}^c)_2 & (s_{ij}^c)_1 (F_{ij}^c)_3 \\ (s_{ij}^c)_2 (F_{ij}^c)_1 & (s_{ij}^c)_2 (F_{ij}^c)_2 & (s_{ij}^c)_2 (F_{ij}^c)_3 \\ (s_{ij}^c)_3 (F_{ij}^c)_1 & (s_{ij}^c)_3 (F_{ij}^c)_2 & (s_{ij}^c)_3 (F_{ij}^c)_3 \end{pmatrix} \quad (10)$$

gdzie:  $\mathbf{F}_j^c = ((F_j^c)_1, (F_j^c)_2, (F_j^c)_3)^T$  – wektor oddziaływania ziarna *j* na ziarno *i*,

$\mathbf{s}_j^c = ((s_j^c)_1, (s_j^c)_2, (s_j^c)_3)^T$  – wektor łączący środek ziarna *i* z punktem kontaktu między ziarnami *i* oraz *j*,  
 $V_i$  – objętość ziarna *i*.



Rys. 4. Schemat oddziaływania elementów dyskretnych

Do dalszej analizy została użyta jedynie część hydrostatyczna wyznaczonego średniego naprężenia  $\sigma_r$ .

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 mikrodo makroskopowego zostało oparte na koncepcji reprezentatywnego elementu objętościowego (RVE).

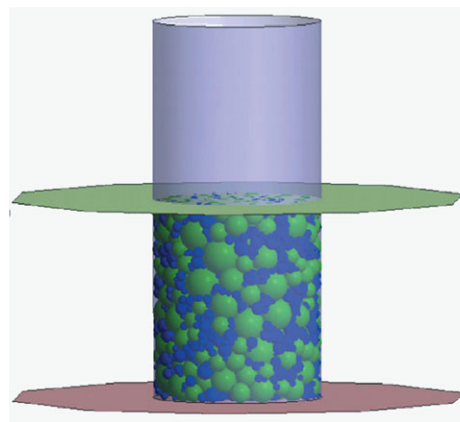
Naprężenie makroskopowe dla RVE  $\bar{\sigma}$  wyliczane jest za pomocą następującej zależności [9]:

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{V_{RVE}} \sum_{c=1}^{N_c} (\mathbf{L}^c)^T \mathbf{F}^c = \frac{1}{V_{RVE}} \sum_{c=1}^{N_c} \begin{pmatrix} L_1^c F_1^c & L_1^c F_2^c & L_1^c F_3^c \\ L_2^c F_1^c & L_2^c F_2^c & L_2^c F_3^c \\ L_3^c F_1^c & L_3^c F_2^c & L_3^c F_3^c \end{pmatrix} \quad (11)$$

gdzie  $N_c$  jest liczbą kontaktów pomiędzy elementami dyskretnymi dla całego RVE,  $\mathbf{F}^c = (F_1^c F_2^c F_3^c)^T$  jest wektorem całkowitej siły oddziaływania dla danego kontaktu,  $\mathbf{L}^c = (L_1^c L_2^c L_3^c)^T$  jest wektorem łączącym środki elementów dyskretnych w kontakcie (ang. *branchvector*), a  $V_{RVE}$  jest objętością reprezentatywnego elementu objętościowego.

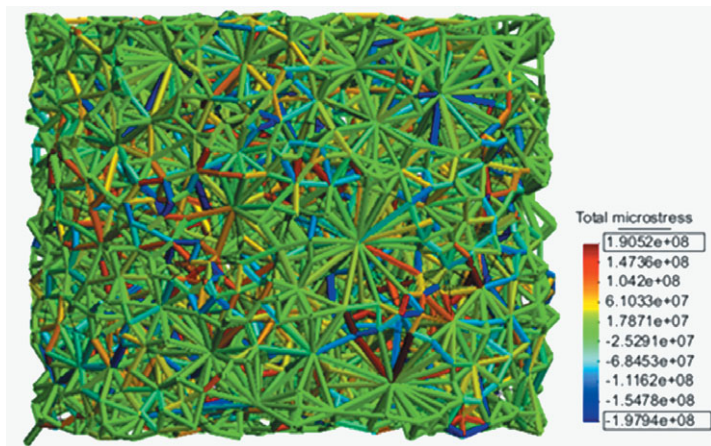
## Wyniki numeryczne

Analiza naprężeń w skali mikro- oraz makroskopowej została przeprowadzona na przykładzie cylindrycznej próbki kompozytowej NiAl/20%Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> składającej się z 2000 cząstek proszku intermetalicznego oraz ceramicznego (przy tworzeniu modelu geometrycznego próbki uwzględniono rzeczywisty rozkład wielkości ziaren obu faz). Za pomocą modelu termolepkosprężystego przeprowadzono symulację numeryczną spiekania w temperaturze 1400°C oraz pod ciśnieniem 30 MPa. Na rys. 5 pokazano próbkę w trakcie procesu spiekania, natomiast rys. 6 przed-



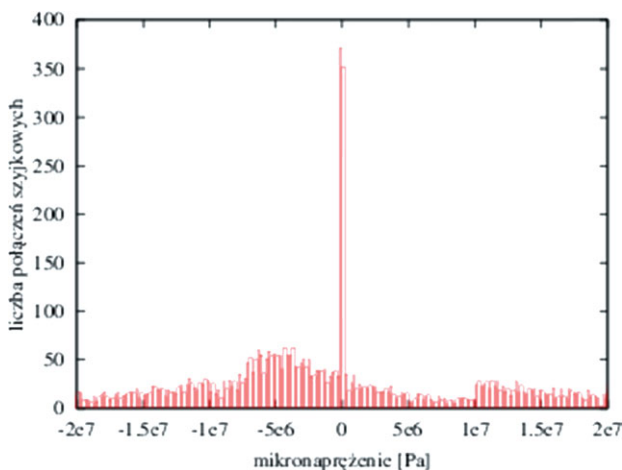
Rys. 5. Symulacja modelu spiekania materiału kompozytowego NiAl/20%Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

stawia próbkę po spiekaniu z uwzględnionymi połączeniami między elementami dyskretnymi w postaci belek wraz z rozkładem mikronaprężeń wyznaczonych za pomocą równania (7).



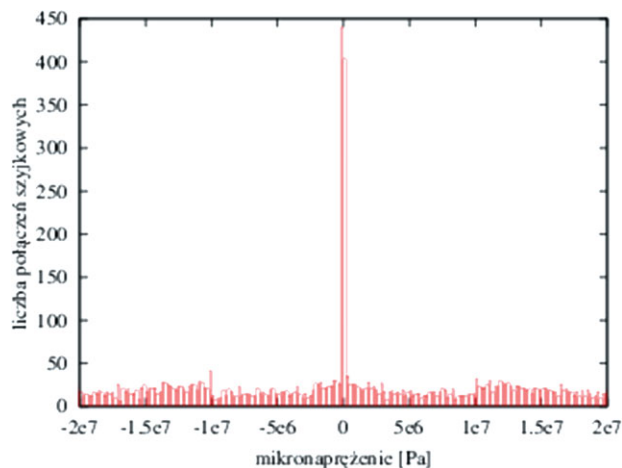
Rys. 6. Rozkład mikronaprzeżeń rezydualnych w szyjkach dla całej próbki kompozytowej

Na rys. 7 oraz 8 porównano rozkłady mikronaprzeżeń w trakcie spiekania oraz po odciążeniu (naprzeżenia resztkowe). W pierwszym przypadku wartości mikronaprzeżeń 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, mikronaprzeżenia ściskające oraz rozciągające wykazują wartości zbliżone, co świadczy o stanie równowagi w odciążonym materiale.

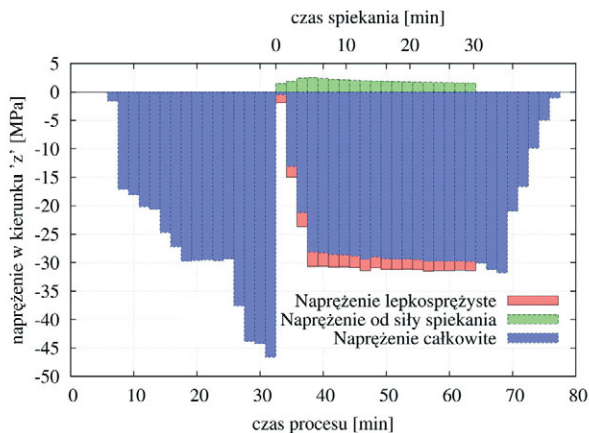


Rys. 7. Histogram mikronaprzeżeń w szyjce w końcowym etapie spiekania

Wykorzystując wartości mikronaprzeżeń powstających w szyjkach oraz stosując równanie (11), wyznaczono ewolucję naprzeżenia makroskopowego dla elementu RVE (w tym przypadku dla całej próbki spiekanej) dla całego przebiegu procesu metalurgii proszków (prasowanie, spiekanie, chłodzenie). Na rys. 9 przedstawiono makronaprzeżenia lepkosprężyste od siły spiekania oraz całkowite oddziałujące w kierunku z, który jest kierunkiem przyłożenia obciążenia zewnętrznego w spiekanej próbce kompozytowej ( $p = 30$  MPa). Wartość makronaprzeżenia



Rys. 8. Histogram mikronaprzeżeń rezydualnych w szyjce

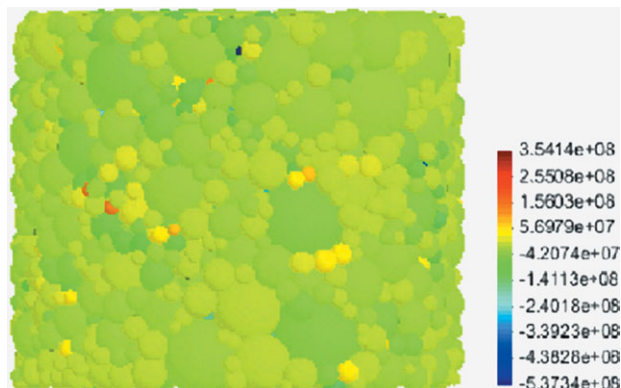


Rys. 9. Ewolucja makronaprzeżeń w kierunku z w funkcji czasu procesu oraz spiekania

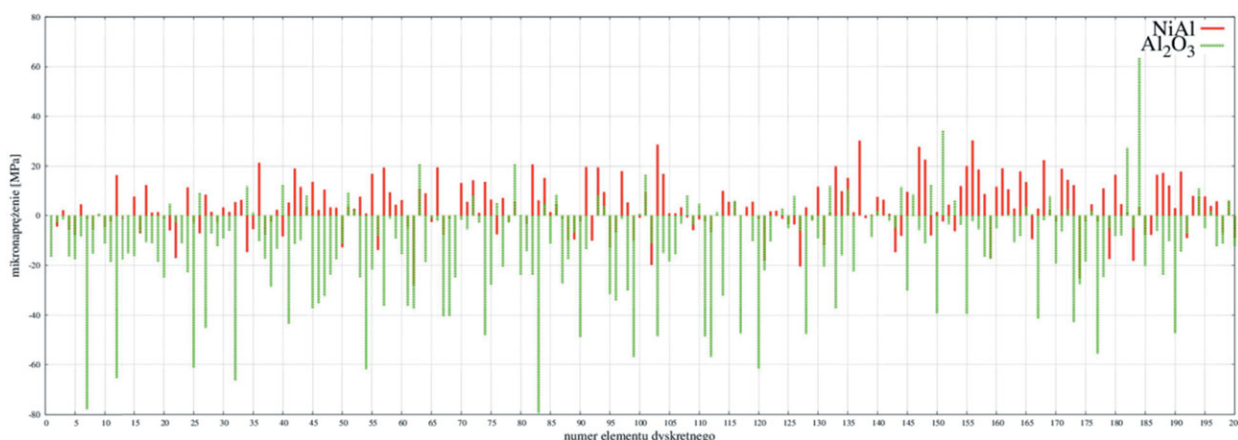
całkowitego w końcowym etapie spiekania wynosi 30,65 MPa (reakcja na przyłożone obciążenie zewnętrzne), natomiast dla stanu po odciążeniu – 0,0008 MPa (stan równowagi).

W prezentowanej pracy, korzystając z zależności (10), wyznaczono uśrednione naprzeżenie mikro-

powe w ziarnie dla wszystkich elementów dyskretnych. Na rys. 10 przedstawiono rozkład mikronaprzeżeń w ziarnie w całej objętości spiekanej próbki kompozytowej NiAl/20%Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> w czasie spiekania.



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



Rys. 11. Porównanie mikronaprzeżeń rezydualnych w ziarnie dla 200 cząstek NiAl oraz Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

W celu zbadania charakteru wzajemnego oddziaływania poszczególnych faz kompozytu po odciążeniu, wyznaczono oraz porównano mikronaprzeżenia rezydualne w ziarnie dla 200 elementów dyskretnych osnowy NiAl oraz zbrojenia Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (rys. 11). Na podstawie przedstawionego wykresu można stwierdzić, że cząstki osnowy są rozciągane, natomiast cząstki zbrojenia ściskane. Jest to zgodne z przewidywaniami teoretycznymi, które dotyczą mechanizmów chłodzenia materiału kompozytowego. Różnice w wartościach współczynnika rozszerzalności cieplnej wpływają na zjawisko ściskania cząstek ceramicznych podczas chłodzenia. Na to zjawisko wpływa również niekorzystne umiejscowienie małych cząstek zbrojenia pomiędzy większymi cząstkami intermetallicznymi.

### Podsumowanie

Oryginalny termolepkosprężysty model elementów dyskretnych jest odpowiednim narzędziem do

modelowania procesów wytwarzania nowoczesnych materiałów kompozytowych. Otrzymane wyniki naprężeń mikroskopowych (zarówno w połączeniu szybkowym, jak i w ziarnie) oraz makroskopowych w trakcie oraz po procesie metalurgii proszków próbki kompozytowej NiAl/20%Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> wskazują na poprawną oraz efektywną symulację procesu spiekania oraz chłodzenia.

### LITERATURA

1. Henrich B., Wonisch A., Kraft T., Moseler M., Riedel H.: Simulations of the influence of rearrangement during sintering. *Acta Materialia*, Vol. 55, 2007, pp. 753 – 762.
2. Martin C.L., Schneider L.C.R., Olmos L., Bouvard D.: Discrete element modeling of metallic powder sintering. *Scripta Materialia*, Vol. 55, 2006, pp. 425 – 428.
3. Olmos L., Martin C.L., Bouvard D.: Sintering of mixtures of powders: Experiments and modelling. *Powder Technology*, Vol. 190, 2009, pp. 134 – 140.

4. Parhami F., McMeeking R.M.: A network model for initial stage sintering. *Mechanics of Materials*, Vol. 27, 1998, pp. 111 – 124.
5. Wonisch A., Kraft T., Moseler M., Riedel H.: Effect of different particle size distributions on solid-state sintering: A microscopic simulation approach. *Journal of the American Ceramic Society*, Vol. 92, 2009, pp. 1428 – 1434.
6. Nosewicz S., Rojek J., Pietrzak K., Chmielewski M., Kaliński D.: Modelowanie procesu spiekania materiałów dwufazowych metodą elementów dyskretnych. *Rudy i Metale Nieżelazne*, nr 9, 2012, ss. 599 – 603.
7. Nosewicz S., Rojek J., Pietrzak K., Chmielewski M.: Viscoelastic discrete element model of powder sintering. *Powder Technology*, Vol. 246, 2013, pp. 157 – 168.
8. Luding S.: Micro-macro transition for anisotropic, frictional granular packings. *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 41, 2004, pp. 5821 – 5836.
9. Chang C., Chao S., Chang Y.: Estimates of elastic moduli for granular material with anisotropic random packing structure. *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 32, 1995, pp. 1989 – 2008.