

放电镀膜时等离子体通道内粒子状态的计算机模拟

肖波, 揭晓华, 肖厚群

(广东工业大学 材料与能源学院, 广州 510006)

摘要: **目的** 分析液相脉冲放电微观机理, 解释放电过程中放电通道对电极的影响。 **方法** 以 45 钢表面液相脉冲放电沉积 TiC 陶瓷涂层放电沉积瞬间极板间形成的单脉冲等离子体为研究对象, 用粒子模拟的方法描述了放电通道中电子、钛离子的运动及分布状态。 **结果** 放电通道中电子的运动较为活跃, 在放电形成的开始阶段, 电子由工件电极负极激发, 迅速向工具电极移动, 期间通过与液相介质中的中性粒子碰撞, 迅速往工具电极积累, 运动过程中遵循等离子体的集体运动特性, 过程贯穿于整个等离子体的形成过程; 在相同的时间步长内, 放电通道中 Ti 离子的运动比电子要缓慢得多, 在脉冲放电期间需要较多的时间才能迁移到极板。 **结论** 放电镀膜时, 所用极间距应大于电火花成形加工时的极间距。

关键词: 液相脉冲放电; 粒子模拟; 放电通道; 等离子体

中图分类号: TG174.453; TP391.9

文献标识码: A

文章编号: 1001-3660(2013)06-0006-04

Computer Simulation of Charge Particle State in Plasma Discharge Channel with Electrical Discharge Coating

XIAO Bo, JIE Xiao-hua, XIAO Hou-qun

(Faculty of Material and Energy, Guangdong University of Technology, Guangzhou 510006, China)

ABSTRACT: **Objective** To explore the mechanism of EDC, and the influence between discharge channel and electrode during discharge process. **Methods** The research object of this paper is single pulse plasma discharge channel, which formed in liquid when manufacture TiC ceramic coating on 45 steel by electrical discharge coating technology. The particle-in-cell simulation method is utilized to describe the movement and distribution of titanium ions and electrons. **Results** Electronic movement was active in discharge channel, the electrons were aroused in negative electrode and rapidly move to the tool electrode, and the complicated interaction with other particles led to electrons quickly accumulate in tool electrode. Above-mentioned movement followed the collective motion features of plasma during the whole plasma formation process. At the same time step, the motion of titanium ion was much slower than electronic in plasma channel, and it took more time to move to the plate during the pulse discharge period. **Conclusion** It requires wider electrode distance when the electrical discharge coating is adopted compared with sinker EDM.

KEY WORDS: EDC in liquid; particle-in-cell; discharge channel; plasma

收稿日期: 2013-06-19; 修订日期: 2013-06-27

Received: 2013-06-19; Revised: 2013-06-27

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51075075); 高等学校博士学科点专项科研基金资助项目(20104420110006)

Fund: Supported by the National Natural Science Foundation of China (51075075) and the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education Project(20104420110006)

作者简介: 肖波(1987—), 男, 湖南怀化人, 硕士生, 主要研究方向为金属表面改性及其数值模拟。

Biography: XIAO Bo (1987—), Male, from Huaihua, Hunan, Master, Research interests on metallic surface modification and its numerical simulation.

液相脉冲放电制备金属陶瓷涂层,是近年来表面改性领域研究的热点。其机理是:依靠电子击穿介质形成等离子体的高能量,使工件材料、工具表面、工作介质产生一系列反应,从而在工件表面形成高性能陶瓷涂层^[1]。

研究放电通道中粒子的运动状态,对于了解液相脉冲放电沉积涂层的加工机理十分重要,但到目前为止,直接观测放电过程中等离子体的运动还存在巨大的困难。粒子模拟(PIC)方法是通过一定时间内追踪大量带电粒子在外加电磁场和自洽电磁场作用下的运动,从而得到宏观特性量和运动规律的一种基本模拟方法。借助 PIC 法研究特定工艺参数下的物理模型,国内外已有一些报道。例如:哈尔滨工业大学的崔景芝等^[2]利用 PIC 法对电火花成形加工中的放电通道进行了微观研究,发现放电通道的负极为喇叭口形,中部为腰鼓形;中国石油大学的于丽丽等^[3]和大连理工大学的桑超峰等^[4]均结合各自的科研工艺,运用 PIC 法进行了理论研究。但是将 PIC 法应用到液相脉冲放电沉积金属陶瓷涂层微观机理的研究上,还鲜有报道。文中将 PIC 法应用于液相脉冲放电沉积陶瓷涂层的工艺上,通过对模型进行简化,避免了求解复杂的麦克斯韦方程组及蒙特卡洛碰撞,从而在降低模拟难度的同时,保证了模拟精度。

1 模型选择

在 45 钢表面进行液相脉冲放电沉积涂层的宏观物理模型如图 1 所示,沉积过程中采用负极性接法,正极为纯钛电极,负极为 45 钢工件材料^[5-6]。放电通道中微观等离子体的粒子运动及两极板间距为本文的研究对象。

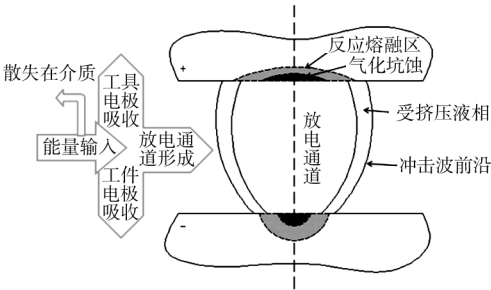


图 1 单脉冲热源模型
Fig. 1 Heat source model of single pulse

粒子模拟的模型选择需根据不同的工艺特点,在尽量减少计算机计算量,保证模拟精度的前提下,考虑模型的维数、电磁场的影响、碰撞等问题。

在粒子模拟中,通常约定:某一方向既有粒子坐标

的变化,又有速度的变化,称为一维,用 1D 表示;如果只有速度的变化,没有坐标的变化,则称为 1/2 维,用 1/2D 表示;两个方向上既有粒子坐标的变化,又有速度的变化,则为二维(2D)模型。文中根据液相脉冲放电粒子运动模拟在径向上的运动(包括自洽场)完全一致的情况,可不必对此方向不同带电粒子的运动进行重复计算,因此选用二维粒子运动模型,大大减少了模拟计算时间。

粒子模拟模型按照求解不同形式的电磁方程,可以分为静电模型、电磁模型和静磁模型。由于在液相脉冲放电中,静电力起着决定性的作用,因此为了简化运算,忽略磁场的作用,选择静电模型进行模拟。这避免了求解复杂的麦克斯韦方程组,只求解较为简单的泊松方程即可满足模拟的需求,在一定程度上减少了模拟的困难程度。

2 模拟思路

2.1 基本思路

在模拟过程中,电子、正离子均看作带电粒子。等离子体粒子模拟的基本思路是:先设置大量带电粒子的初始空间状态,包括初始位置和初始速度,对这些带电粒子进行统计,求出空间的电荷密度和电流密度,求解泊松方程(代替麦克斯韦方程),以求得空间网格的电场;然后通过求解粒子运动方程(洛伦兹力公式),求出在电场力作用下带电粒子的运动状态及空间产生的新的粒子位置、速度分布情况,完成一个周期时间内带电粒子位置的变化;如此循环,即可跟踪大量粒子在一定时间范围内的运动状态及运动规律。整个液相脉冲放电通道内的等离子体模拟过程如图 2 所示。

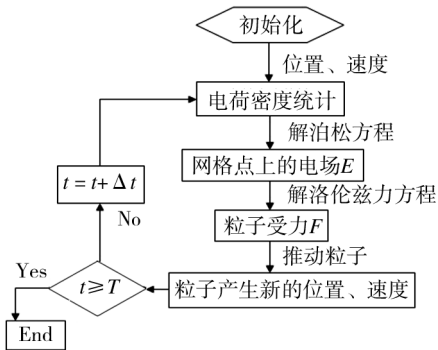


图 2 粒子模拟流程
Fig. 2 PIC flow chart

2.2 初始化

模拟的初始化目的是要设置模拟前大量粒子的数量及其所在的位置与初始速度,假设初始阶段带电粒子在极板上均匀分布,速度的分布服从麦克斯韦速度

分布特点。

假设工件电极极板长度为 L , 模拟中所采用的粒子数目为 N , $r_i(x, y)$ 表示第 i ($i = 1, 2, 3, \dots, N$) 个粒子的位置, 根据蒙特卡洛方法, 产生一个随机数 R , 其值的范围为 $0 \sim 1$, 因此得式(1)。

$$r_i(x, y) = (L \times R, 0) \quad (1)$$

在位置初始化之后, 需要对其速度也进行初始化设置。本文采用麦克斯韦速度分布, 其函数式为:

$$\zeta(v_x, v_y) = \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left[-m(v_x^2 + v_y^2) / (2kT) \right] dv_x dv_y \quad (2)$$

对上式积分可得:

$$\xi(v) = 1 - \exp(-v^2/v_t^2) \quad (3)$$

其中, $v^2 = v_x^2 + v_y^2$, $v_t^2 = 2kT/m$ (k 为波尔兹曼常数, m 为所模拟带电粒子的质量)。同样利用蒙特卡洛方法取 R 为 $0 \sim 1$ 的随机数, 使得 $\xi(v) = R$, 得到以下方程组:

$$\begin{cases} |v| = v_t \sqrt{-\ln R} \\ \theta = 2\pi R, \phi = \pi R \\ v_x = v \sin \phi \cos \theta \\ v_y = v \sin \phi \sin \theta \end{cases} \quad (4)$$

于是, PIC 模拟的初始粒子环境已经设立, 将其作为初始模块, 调用于每一次的模拟初始阶段。

2.3 求解电荷密度和电流密度

模型经简化后, 不必求解复杂的麦克斯韦方程组, 只需求得空间体系的电荷密度, 便能为下阶段的场方程求解提供依据。根据初始的位置及速度分布, 可利用粒子云法 (CIC, Cloud in cell) 将带电粒子分布到相应的网格中去。将二维空间 $X \times X$ 均匀地划分为 M 个网格, 每个网格大小为 $d \times d$, 于是第 i ($i = 1, 2, 3, \dots, M$) 个网格的坐标为:

$$(x_i, y_i) = ((i-1)d, (i-1)d) \quad (5)$$

在 x 方向上, 假设 x_i 为第 i 个网格点的位置, 如果 $|x - x_i| \leq d$, 则带电粒子对网格 i 分配的电荷大小为:

$$q_i = q_c (1 - |x - x_i|/d) \quad (6)$$

其中, q_c 为带电粒子所带电量。如果 $|x - x_i| > d$, 则不分配电荷, 即 $q_i = 0$ 。对于 y 方向上的网格, 也同样以上述方法将带电粒子的电量分配到各个网格节点上去。

2.4 求解电势、电场和力

将每个网格点的电荷代入泊松方程, 得到电势分布:

$$\nabla^2 \phi = -4\pi \rho(r) = -4\pi \sum_i [q_i S(r - r_i)] \quad (7)$$

对于二维等离子体模型, 可由电势 ϕ 得到电场分布:

$$E(r) = -\nabla \phi = 2q(r - r_j) / |r - r_j|^2 \quad (8)$$

将已经解得的电场代入洛伦兹力公式, 可以求得每个粒子的受力:

$$F(r) = q_c E(r) \quad (9)$$

2.5 粒子运动

粒子受力, 会离开原来的位置, 在周围粒子及自洽电场力的作用下, 产生新的位移和速度, 于是在一个 Δt 内发生一次位置与速度的更迭。本文采用蛙跳式 (Leap-Frog) 递进的方法, 利用运动方程依次求解下一个位置的速度与位移, 原理如图 3 所示^[7]。

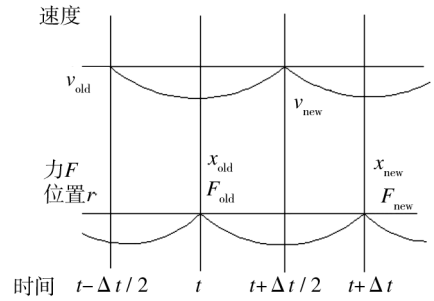


图 3 v, r, F 随时间参数的蛙跳图

Fig. 3 Leap-Frog diagram among v, r, F with time

对运动方程式 (10) 及 (11) 作有限差分, 可得式 (12) 和 (13):

$$F = m \frac{dv}{dt} \quad (10)$$

$$\frac{dr}{dt} = v \quad (11)$$

$$F_{old} = m(v_{new} - v_{old}) / \Delta t \quad (12)$$

$$v_{new} = m(r_{new} - r_{old}) / \Delta t \quad (13)$$

于是对于求得的 F_{old} 及初始设置的 v_{old} , 可以求得一个时间步长后的 v_{new} , 然后依据公式 (13) 求得新的位置 r_{new} , 随着时间步长的进行, 在一个周期内依次求得带电粒子新的位置信息。至此, 已完成一个时间步长内某一个带电粒子的循环, 依次进行循环求解, 便能够获取一系列带电粒子的运动信息, 达到所研究的目的。

3 模拟结果分析

文中采用 MATLAB7.0 的自主编程对带电粒子运动进行粒子模拟, 极间距离取 $30 \mu\text{m}$, 追踪粒子数量 N 为 1×10^4 , 图 4 为放电通道中电子运动的状态图。图中选取了 t 为 100, 150, 200, 300, 400, 500 ns 下, 电子在空间的分布状态。

由图 4 可见, 在放电开始阶段, 工件电极不断激发出活跃的电子, 在较短的时间内, 电子以雪崩式的速度

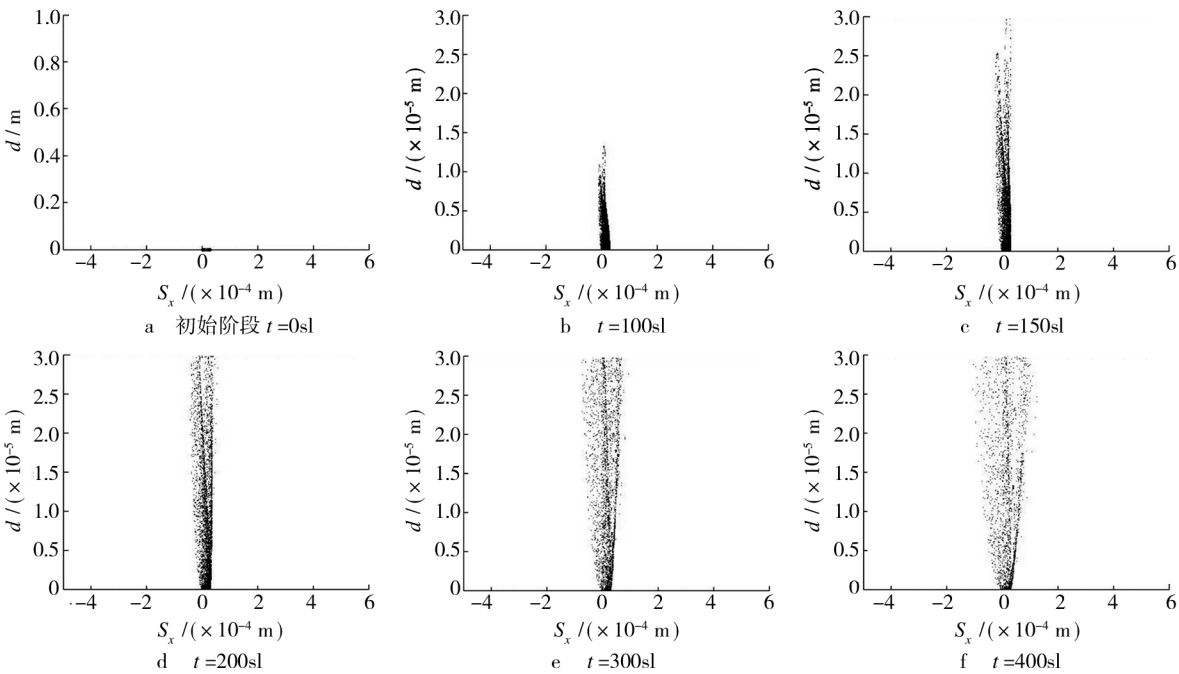


图 4 不同时间步长放电通道内电子运动相图
Fig. 4 Plasma electron movement phase diagram in different step length

呈扇形喷射出电极表面,在每个时间段形成了小区域的自洽电场,并且在电场力的作用下不断往工具电极运动,表明电子在放电通道的形成过程中发挥了较为积极的击穿作用,也为能量的传递增加了推动力,使得工具电极表面迅速接收电子,达到较高的能量并电离出正离子。当程序进行到 200sl 后,电子不断地被极板吸收,同时许多电子散失在介质当中,因此无论是哪种带电粒子,在脉冲放电形成等离子体的瞬间,被极板吸收的数量要小于从另一极板上释放出来的数量。

图 5 为钛离子的运动状态。被激发后,在相同的时间内,钛粒子在通道中的运动要比电子缓慢得多,其原因与正离子本身的质量、带电量及尺寸有关。钛粒子的相对原子质量为 47.867,换算成单个离子质量约为 8×10^{-26} kg,这相比电子 (9.1×10^{-31} kg) 显然要大得多,并且带电量也较电子成倍增加,它们较难像自由电子一样穿梭于中性粒子和各同性粒子之间,因而其带给工具电极的能量要小于电子带给工具电极的能量,这一点也说明了能量分配系数不同的原因。

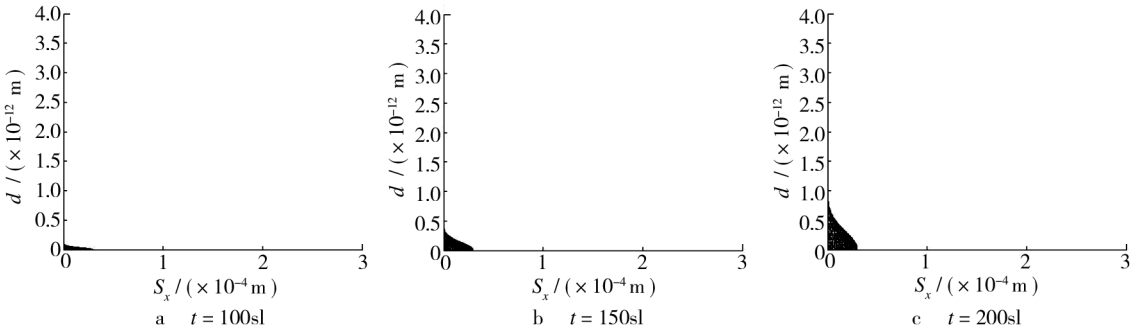


图 5 不同时间步长放电通道内钛离子运动相图
Fig. 5 Plasma Ti^+ movement phase diagram in different step length

4 结论

1) 放电通道中,电子的运动较为活跃。在放电形成的开始阶段,电子由工件电极负极激发,迅速向工具电极移动并积累,运动过程中遵循等离子体的集体运动特性,过程贯穿于整个等离子体的形成过程。

2) 在相同的时间步长内,放电通道中 Ti^+ 的运动比电子要缓慢得多,电子轰击工具电极的瞬间,将正离子从工具电极激发出来。由于正离子的质量、半径、带电量均比电子要大很多,导致其在往负极移动的过程中速率较慢,在脉冲放电期间需要较多的时间才能迁移到极板。这提示放电镀膜时,所用极间距应大于电
(下转第 22 页)

3 结论

1) 电化学蚀刻会使镀层表面光泽度降低,颜色变暗。

2) 电化学蚀刻时,镀层表面胞状物交界处优先被蚀刻,随着蚀刻时间延长,胞状物面上再发生蚀刻,表面的微孔数量增多且孔径增大,比表面积增大。生成的蚀刻层微孔分布比较均匀,深度可通过调整工艺参数控制为 10 ~ 20 μm 之间,胞状物交界处生成的微孔密度大且孔径大。极化曲线分析表明,电化学蚀刻微孔没有穿透至基底的现象。

3) 电化学蚀刻会使蚀刻层硬度下降,对结合力没有大的影响。此外,电化学蚀刻不会改变镍磷合金镀层的物相结构,但会降低镀层磷含量。

参考文献

- [1] 唐娟,程凯,张韧,等. 化学镀镍-磷的研究与应用[J]. 电镀与涂饰,2011,30(8):24—27.
TANG Juan, CHENG Kai, ZHANG Ren, et al. Review on the Study and Application of Electroless Nickel-phosphorus Pla-

- ting[J]. Electroplating & Finishing, 2011, 30(8): 24—27.
- [2] 董允,张廷森,林晓嫣. 现代表面工程技术[M]. 北京:机械工业出版社,2003.
DONG Yun, ZHANG Ting-sen, LIN Xiao-yan. Modern Surface Engineering Technology [M]. Beijing: China Machine Press, 2013.
- [3] 李宁. 化学镀实用技术[M]. 北京:化学工业出版社,2012.
LI Ning. Operative Technology of Electroless Plating [M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2012.
- [4] 杨丁. 金属蚀刻技术[M]. 北京:国防工业出版社,2007.
YANG Ding. Metal Etching Technology [M]. Beijing: National Defense Industry Press, 2007.
- [5] 胡文彬,刘磊,仵亚婷. 难镀基材的化学镀镍技术[M]. 北京:化学工业出版社,2003.
HU Wen-bing, LIU Lei, WU Ya-ting. Electroless Nickel Plating on Difficult-to-plate Substrates [M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2003.
- [6] 方信贤. 中温酸性化学镀镍磷合金组织和性能研究[J]. 表面技术,2007,38(4):25—27.
FANG Xin-xian. Study on Microstructure and Properties of Acidic Electroless Plating Ni-P Layer at Middle Temperature [J]. Surface Technology, 2007, 38(4): 25—27.

(上接第9页)

火花成形加工时的极间距。

3) 整个放电过程形成的等离子体具有准电中性的特性。

参考文献

- [1] 赵万生. 先进电火花加工技术[M]. 北京:国防工业出版社,2004.
ZHAO Wan-sheng. Advanced Electric Spark Machining Technology [M]. Beijing: National Defence Industry Press, 2004.
- [2] 崔景芝,王振龙. 放电通道的微观模拟及其物理性能研究[J]. 电加工与模具,2007(1):13—16.
CUI Jing-zhi, WANG Zhen-long. Microcosmic Simulation of Discharge Channel in EDM [J]. Electromachining & Mould, 2007(1): 13—16.
- [3] 于丽丽,刘永红,纪仁杰,等. 非导电工程陶瓷电火花加工放电通道模拟[J]. 系统仿真学报,2009,21(1):286—288.
YU Li-li, LIU Yong-hong, JI Ren-jie, et al. Simulation of Dis-

- charge Channel for Non-conductive Ceramics During Electrical Discharge Machining [J]. Journal of System Simulation, 2009, 21(1): 286—288.
- [4] SANG Chao-feng, SUN Ji-zhong, WANG De-zhen. Plasma Density Enhancement in Atmospheric-pressure Dielectric-barrier Discharges by High-voltage Nanosecond Pulse: a PIC Simulation [J]. Journal of Physics D: Applied Physics, 2010, 43: 045202.
- [5] 何玲,揭晓华,陈磊. 液中脉冲放电制备陶瓷涂层的研究进展[J]. 材料研究与应用,2010,4(2):85—88.
HE Ling, JIE Xiao-hua, CHEN Lei. Research Progress of Electrical Discharge Coating in Liquid [J]. Materials Research and Application, 2010, 4(2): 85—88.
- [6] YEO S H, KURNIA W, TAN P C. Critical Assessment and Numerical Comparison of Electro-thermal Models in EDM [J]. Journal of Materials Processing Technology, 2008, 203: 241—251.
- [7] 邵福球. 等离子体粒子模拟[M]. 北京:科学出版社,2002.
SHAO Fu-qiu. Plasma Particle Simulation [M]. Beijing: Science Press, 2002.