

DOI: 10.7511/jslx20240722005

冷喷涂中氧化物影响的物质点法模拟

陈聪, 苏浩, 刘岩*

(清华大学 航天航空学院, 北京 100084)

摘要:冷喷涂利用冲击载荷下材料的塑性变形实现金属间的固态结合,在表面修复、特殊材料制备和增材制造等工程应用方面具有重要意义。原材料表面的氧化物是影响冷喷涂中材料结合效率和粘接强度的重要因素之一。本文采用物质点法研究了颗粒及基底表面氧化物对粘接过程的影响。通过分析界面处氧化物的残留情况,借助定义的颗粒内极端塑性变形区的体积比,给出了不同冲击速度下颗粒和基底氧化物对接触面积和塑性变形程度的影响规律。当氧化物存在时,提高颗粒的冲击速度能够同时增加新鲜的金属表面和塑性变形。

关键词:冷喷涂;氧化物;物质点法;增材制造

中图分类号:O347.5;TG495

文献标志码:A

文章编号:1007-4708(2024)05-0857-07

1 引言

随着现代工业对结构大型化、形状复杂化和功能多样化的需求日益增加,在材料间形成可靠的连接成为关键的技术问题^[1,2]。冷喷涂(Cold Spray)是一种利用冲击过程中材料的塑性变形实现材料间固态结合的新型增材制造技术^[3,4]。在冷喷涂中,直径 $1\ \mu\text{m}\sim 50\ \mu\text{m}$ 的颗粒在拉瓦尔喷管中由气体加速至 $300\ \text{m/s}\sim 1200\ \text{m/s}$,微颗粒冲出管口后沉积到基底上^[5,6]。在加速过程中,气流会对颗粒进行一定的预热,但是颗粒的工作温度仍然远低于熔点^[7,8]。因此,该技术非常适用于超高熔点、温度敏感、氧化敏感、相变敏感等特殊材料间的结合^[9,10],在航空航天、能源和医疗等领域具有广阔的应用前景^[11,12]。

冷喷涂粘接过程受到多种因素的影响,原材料表面的氧化物是影响材料临界粘接速度和粘接效果的重要因素之一。以铜材料为例,Gilmore等^[13]采用了氧化物含量为 $0.336\ \text{wt}\%$ 的颗粒,得到的临界粘接速度约为 $640\ \text{m/s}$;Gärtner等^[14]采用了氧化物含量为 $0.2\ \text{wt}\%$ 的颗粒,得到的临界粘接速度约为 $550\ \text{m/s}$;Li等^[15]采用了 $0.01\ \text{wt}\%$ 的颗粒,得到的临界粘接速度约为 $327\ \text{m/s}$ 。氧化物的存在使

得材料间的结合变得困难,导致材料临界粘接速度提高。除了粘接效率,氧化物对沉积层性质也起着重要作用。Yu等^[16]发现氧化物会降低颗粒的塑性变形能力和应变硬化效果,进而导致沉积层的硬度下降。Li等^[17]发现沉积层的抗拉强度会随着氧化物含量的增加而急剧降低,且断裂主要发生在颗粒间的粘接界面上。Kang等^[18]在界面处观察到了由残留氧化物引起的孔隙,氧化物抑制了金属间的有效结合。

为了定量分析氧化物对粘接过程的影响,Yin等^[19]采用欧拉有限元法分别模拟了单个6061-T6铝颗粒和两个6061-T6铝颗粒沉积过程中颗粒上氧化物的失效行为,认为金属射流能够对断裂氧化物起到清除作用。Khamsepour等^[20]采用拉格朗日有限元法模拟了Ti-6Al-4V颗粒和Ti-6Al-4V基底表面均含氧化物的情况。结果表明提高颗粒速度和基底温度可以促进基底氧化物的失效,但是提高颗粒温度对基底氧化物没有显著影响。Kim等^[21]通过拉格朗日有限元法并结合侵蚀算法模拟铝颗粒在钢基底上沉积的过程,比较了颗粒上氧化物对等效塑性应变及温度分布的影响,结果显示氧化物会使得颗粒边缘处的等效塑性应变和温度降低,进而影响颗粒的沉积。

收稿日期:2024-07-22;修改稿收到日期:2024-08-14.

基金项目:国家自然科学基金(12072172;11772171)资助项目.

作者简介:刘岩*(1978-),男,博士,副教授(E-mail:yan-liu@tsinghua.edu.cn).

引用本文:陈聪,苏浩,刘岩.冷喷涂中氧化物影响的物质点法模拟[J].计算力学学报,2024,41(5):857-863.

CHEN Cong, SU Hao, LIU Yan. Effect of surface oxide in cold spray with the material point simulations[J]. Chinese Journal of Computational Mechanics, 2024, 41(5): 857-863.

冷喷涂过程本质上是高应变率动态加载、多种材料相互作用的复杂问题^[22,23]。传统拉格朗日有限元法在模拟大变形问题时往往会出现严重的网格畸变,导致模拟精度下降,而欧拉法则存在材料界面追踪困难、不易描述物体接触等问题。物质点法(Material Point Method)作为一种无网格粒子类方法,综合了拉格朗日法和欧拉法的优点,在模拟高速冲击、爆炸等材料大变形问题中具有明显的优势^[24]。Liu 等^[25]通过物质点法模拟冷喷涂过程,发现有限元结果中等效塑性应变曲线上的突跳是由网格畸变造成的。肖芳昱^[26]基于物质点法探讨了冷喷涂中不同工况参数对颗粒及基底变形行为和粘接效果的影响。

本文针对典型的极易氧化的纯铝材料,采用物质点法研究颗粒及基底氧化物对冷喷涂的影响。

2 基本方法与计算模型

2.1 物质点法简介

物质点法对计算域进行双重离散,如图 1 所示,连续体离散成一组带有质量的拉格朗日质点,在物质的运动区域建立一套背景网格^[24]。质点携带了连续体的各种物理量,如密度、速度和应力等,质点的运动代表了物体的变形。背景网格用于物理量的插值和运动方程的求解。

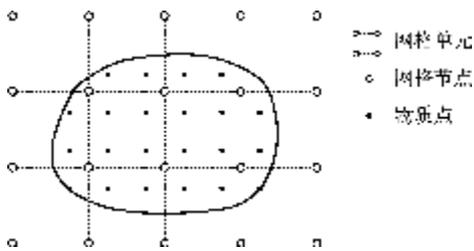


图 1 物质点离散
Fig. 1 Discretization of material point method

在每一个时间步内,将质点的物理量映射到背景网格节点上建立方程,并施加本质边界条件;其次,求解节点运动方程,更新节点物理量;接着插值更新质点的物理量;再者将更新后的质点动量重新映射回节点上,计算应变率,并进而由本构模型计算应力;最后,在下一个时间步开始前,抛弃变形的网格,重新使用规则网格。通过上述步骤,物质点法能完全避免网格畸变问题,保证大变形问题的良好计算精度。计算公式参考文献^[24]。

在冷喷涂的冲击速度范围内,接触算法十分重要。物质点可以通过背景网格实现高效准确的接触判断和接触力施加^[24]。如果两物体对同一节点

的动量存在贡献,则认为两个物体发生了接触,还可以通过设置最小接触距离来进一步准确判断接触。在判断接触后施加接触力,使两物体不穿透。

2.2 计算模型设置

针对冷喷涂中典型的单颗粒冲击过程,建立如图 2 所示的物质点模型,颗粒的冲击方向垂直于基底表面。考虑到问题的对称性,建立了 1/4 模型来减少计算量。颗粒的外径为 $10.8 \mu\text{m}$,基底的尺寸为 $40 \mu\text{m} \times 40 \mu\text{m} \times 50 \mu\text{m}$ 。颗粒和基底均为铝材料,采用 Johnson-Cook 强度模型和 Mie-Grüneisen 状态方程,材料参数列入表 1^[27]。

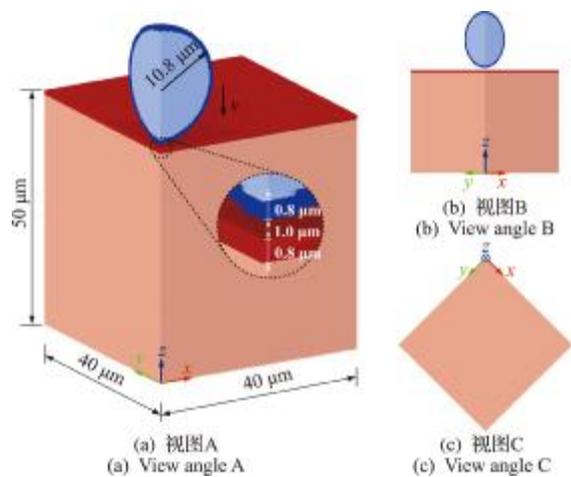


图 2 以颗粒和基底均含氧化物的情况为例,1/4 的冷喷涂物质点模型

Fig. 2 A quarter of cold spray MPM model (the case in which particle and substrate both contain the oxide layer as an example)

表 1 铝的材料参数^[27]

Tab. 1 Material parameters of aluminum^[27]

参数	数值
密度 $\rho/\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	2710
杨氏模量 E/GPa	68.9
泊松比 ν	0.33
比热容 $c_p/\text{J} \cdot (\text{kg} \cdot \text{K})^{-1}$	904
Johnson-Cook 强度模型	
A/GPa	0.148
B/GPa	0.345
N	0.183
C	0.001
M	0.895
T_m/K	916
T_r/K	290
Mie-Grüneisen 状态方程	
γ	2.14
$c_0/\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	5350
s	1.37

根据文献^[28],直径为 $20 \mu\text{m}$ 的铝颗粒,其临

界粘接速度为 620 m/s~660 m/s。在模拟中,颗粒的冲击速度为 500 m/s,700 m/s 和 900 m/s,分别代表了明显低于、稍微高于和明显高于临界粘接速度的三种典型工况。颗粒底面距离基底上表面 1 μm。基底的上表面采用自由边界条件,对称面上采用对称边界条件,其他表面采用透射边界条件。背景网格尺寸为 0.5 μm,相邻物质点间距为 0.25 μm。

为了研究氧化物对冲击过程的影响,在颗粒和基底上分别设置厚度为 0.8 μm 的氧化层^[29],分别模拟了仅颗粒含氧化物、颗粒和基底均含氧化物的情况。氧化铝采用 Johnson-Holmquist 陶瓷模型,参数列入表 2^[30]。

表 2 氧化铝的材料参数^[30]
Tab. 2 Material parameters of alumina^[30]

参数	数值
密度 $\rho/\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	3890
杨氏模量 E/GPa	373.97
泊松比 ν	0.23
Johnson-Holmquist 模型	
A/GPa	0.96
B/GPa	0.54
C	0.007
M	0.78
N	0.89
T/GPa	0.312
$\sigma_{\text{HEL}}/\text{GPa}$	4.5875
$P_{\text{HEL}}/\text{GPa}$	3.5117
D_1	0.001
D_2	0.60
K_1	231
K_2	-160
K_3	2774

2.3 塑性变形区体积测量

为了定量比较颗粒内金属部分的塑性变形程度,需要对塑性变形区体积进行测量。测量方法基于表面网格生成算法实现,该算法可用于构建任意由点状粒子形成的实体区域的几何曲面^[31]。以二维模型为例,首先以每个物质点为顶点构建一组 Delaunay 三角形网格(三维模型则构建四面体网格),如图 3(a)所示。采用 Delaunay 三角剖分时,每一个三角形的外接圆不能包含点集中的其他点。并且在散点集形成的所有三角剖分中, Delaunay 三角剖分形成的三角形最小内角最大^[32]。获得物体的 Delaunay 三角形网格后,采用 α 形状算法^[33],如图 3(b)所示,将探测球半径以内的

Delaunay 网格识别成实体填充区,以外的则为空区域。然后,提取出实体填充区的表面,并计算封闭表面围成区域的面积或体积。数据的显示及后处理使用了软件 Ovito^[34]。

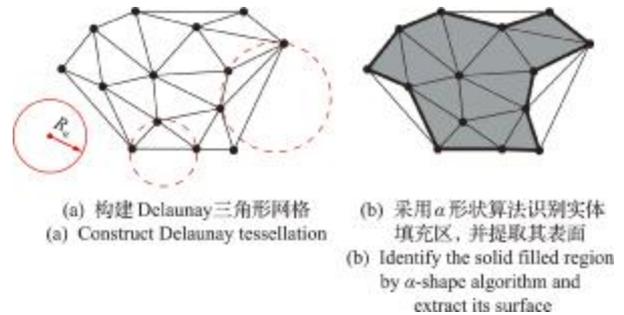


图 3 构建 Delaunay 三角形网格以及采用 α 形状算法识别实体填充区,并提取其表面
Fig. 3 Construct Delaunay tessellation, identify the solid filled region by α -shape algorithm and extract its surface

3 氧化物的影响

3.1 对材料接触面积的影响

在冲击过程中,金属间需要紧密接触才能发生粘接,而氧化物的存在阻碍了金属间的直接接触。图 4 给出了仅颗粒表面存在氧化物时,不同冲击速度下颗粒底面上氧化物的残留情况。

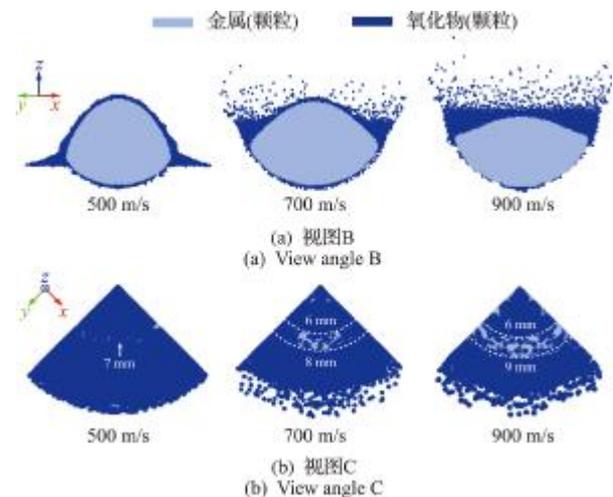


图 4 仅颗粒含氧化物时,不同冲击速度下颗粒底面上氧化物的残留(只显示颗粒金属及颗粒氧化物)
Fig. 4 Oxide residues on the bottom surface of the particle under different impact velocities when only the particle contains the oxide layer (only the metal and oxide of the particle are shown)

当冲击速度为 500 m/s 时,极少数位置的氧化物能够完全脱落,露出内部金属表面,氧化物的平均厚度为 0.71 μm(初始厚度 0.8 μm)。从颗粒上剥落的氧化物则沿着基底的表面附着其上,进一步阻碍了金属接触。速度为 700 m/s 时,在颗粒的边

缘处出现了射流,此时颗粒底面出现了连续的区域,可使颗粒与基底的金属发生接触。当速度增加至 900 m/s 时,颗粒边缘处的射流更加剧烈,暴露的新鲜金属表面面积进一步增加,形成一个环状区域。在三种冲击速度下,颗粒底面的中心区域仍会残留较厚的氧化物阻碍粘接,离中心半径为 6 mm~9 mm 处的氧化物被清除掉,该区域也是颗粒与基底最有可能发生粘接的位置。

当基底表面也存在氧化物时,氧化物的残留情况如图 5 所示。冲击速度为 500 m/s 时,颗粒边缘处也能产生射流。残留氧化物的平均厚度为 0.84 μm (初始厚度 1.6 μm)。随着冲击速度的增加,基底局部氧化物先被清除,露出新鲜金属表面。但颗粒上的氧化物很难清除,导致颗粒和基底金属仍无法直接接触。因此,进一步增加颗粒冲击速度或预先尽可能减小基底上氧化层的厚度,有可能提升粘接概率。

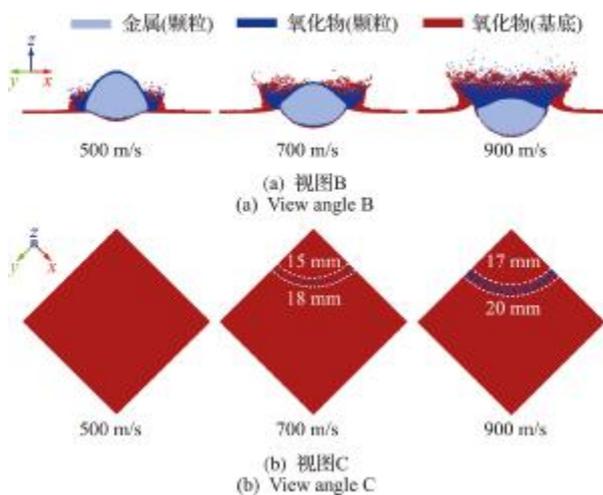


图 5 当颗粒和基底均含氧化物时,不同冲击速度下颗粒与基底间氧化物的残留(只显示颗粒金属、颗粒氧化物和基底氧化物)
Fig. 5 Oxide residues between the particle and the substrate under different impact velocities when the particle and substrate both contain oxide layers (Only the metal and oxide of the particle, and the oxide of the substrate are shown)

在冷喷涂中,颗粒与基底间的粘接强度与新鲜金属的接触面积密切相关。图 4 和图 5 的结果表明,随着冲击速度的提高,边缘处形成的射流有助于清除氧化物,导致材料可能发生粘接的位置不断向颗粒的边缘处移动,新鲜金属的接触面积不断扩大。

早期研究者们曾将射流的出现作为粘接发生的重要标志,进而提出了以下假设^[35,36],在冲击过程中,内部金属形成的射流冲破氧化层促使颗粒与基底间发生粘接。本文对比了纯金属颗粒和仅颗粒含氧化物、颗粒和基底均含氧化物时的冲击形貌及等效塑性应变分布,冲击速度 700 m/s 的结果如图 6 所示。纯金属颗粒冲击时会在颗粒及冲击坑

边缘处发生严重的塑性变形,并出现射流现象(图 6(a))。当颗粒或基底表面存在氧化物时,颗粒边缘处的射流由氧化物产生。由于氧化物是脆性材料,相比内部的韧性金属更容易发生断裂,所以形成的射流比纯金属颗粒更加剧烈(图 6(b, c))。产生射流的过程属于氧化物的自清洁过程。此外,颗粒射流和基底射流之间不存在相互嵌入的趋势。但颗粒射流会受到基底射流的影响,使得氧化物在边缘处出现严重的堆积现象,阻碍金属在此处的粘接。

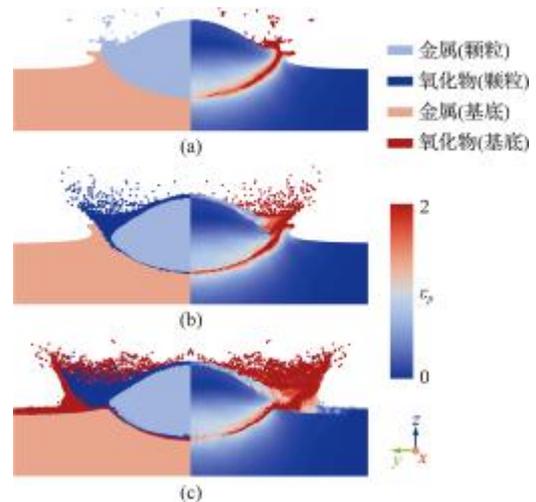


图 6 当冲击速度 $v=700$ m/s 时,冲击坑附近的形貌(左)及等效塑性应变分布(右)的主视图
Fig. 6 Front view of the morphology (left) and equivalent plastic strain distribution (right) near the impact crater under the impact $v=700$ m/s

3.2 对塑性变形的影响

在冷喷涂中,材料发生充分的塑性变形是粘接的重要因素^[9,18]。针对颗粒内金属部分,定义了塑性变形区体积比

$$f_{\epsilon_p > \epsilon_c} = V_{\epsilon_p > \epsilon_c} / V_0$$

式中 $V_{\epsilon_p > \epsilon_c}$ 为通过 2.3 节方法测量得到的金属中等效塑性应变大于 ϵ_c 的区域的体积, V_0 为颗粒初始的金属部分体积。本文将等效塑性应变超过 1 的区域定义为极端塑性变形区。

图 7 给出了不同冲击工况下颗粒中金属部分的极端塑性区体积比的演化过程。其中,10 ns~30 ns 为颗粒塑性变形的快速增长阶段,在 35 ns 时变形基本达到了稳定值。当颗粒表面不含氧化物时,冲击速度从 500 m/s 增加至 700 m/s,最终的极端塑性变形区体积比从 11.9% 增加至 27.4%。当冲击速度进一步提高到 900 m/s,颗粒内 42.8% 的区域都发生了极端塑性变形。

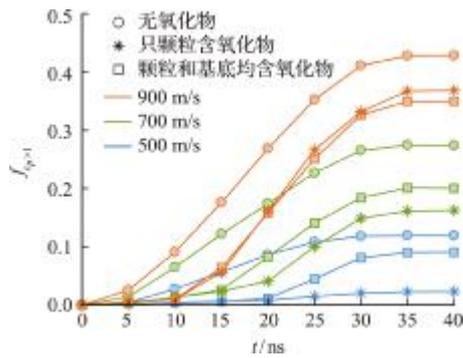


图7 不同冲击工况下颗粒中金属部分的极端塑性区体积比变化过程

Fig. 7 Evolution of volume ratio in the extreme plastic deformation zone of the metal within particles under different impact conditions

当材料表面存在氧化物时,部分冲击能量会通过氧化物断裂的形式耗散。颗粒表面氧化物会抑制颗粒内部金属的塑性变形,使得颗粒的撞击部分塑性变形分布得更加均匀(图 8(b)),颗粒内极端塑性变形区体积比降低。若颗粒含氧化物,当冲击速度为 500 m/s 时,颗粒中的极端塑性变形区体积比为 2.3%。当冲击速度增加至 900 m/s,极端塑性变形区体积比增加至 36.8%,相比不含氧化物的颗粒,其差距仅为 6%。基底表面的氧化物同样会限制基底内部金属的塑性变形,但可能有助于增加颗粒内部金属的塑性变形(图 8(c))。综上所述,无论是颗粒还是基底表面存在氧化物时,均会阻碍整体塑性变形,而不充分的塑性变形可能会进一步阻碍材料间的粘接。因此,需要提高颗粒的冲击速度来降低氧化物对塑性变形的抑制作用。

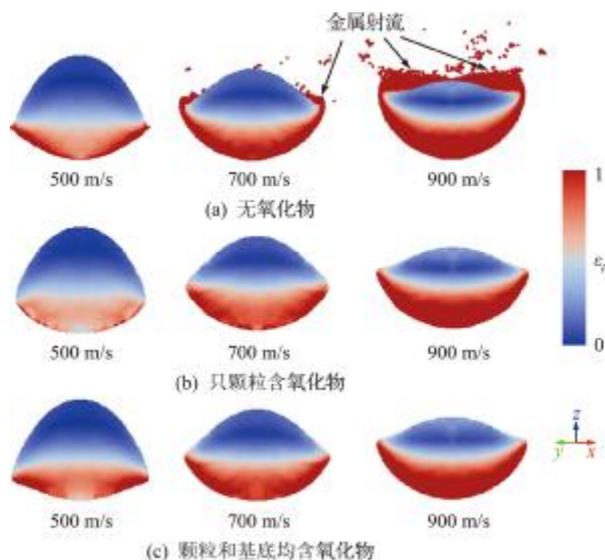


图8 不同冲击工况下,颗粒中金属部分的等效塑性应变分布(视图B)。

Fig. 8 Equivalent plastic strain distribution of the metal in particles under different impact conditions, which are results from view angle B

4 结 论

针对冷喷涂中常用的金属铝材料,本文采用物质点法研究了不同冲击速度下颗粒和基底表面氧化物的影响。在冷喷涂中,氧化物对粘接的阻碍作用主要体现在两个方面,(1)冲击过程很难将接触面上的氧化物彻底清除,氧化物会残留在颗粒底部的中心区域,还会在颗粒边缘处发生堆积,显著减少金属间的接触面积。(2)氧化物的存在会降低颗粒内极端塑性变形区的体积比,限制颗粒和基底金属在边缘处的射流。关于射流现象,模拟结果表明,当颗粒表面存在氧化物时,射流并不是由内部金属产生,而是由氧化物自身产生。随着冲击速度的提高,氧化物以射流的形式离开金属表面,提升了其自清洁的效果。

参考文献(References):

- [1] MacDonald E, Wicker R. Multiprocess 3D printing for increasing component functionality[J]. *Science*, 2016, **353**(6307): aaf2093.
- [2] DebRoy T, Wei H L, Zuback J S, et al. Additive manufacturing of metallic components—process, structure and properties [J]. *Progress in Materials Science*, 2018, **92**: 112-224.
- [3] 邓楠,董浩,车洪艳,等.冷喷涂制备金属涂层及其在增材制造应用中的研究进展[J].表面技术, 2020, **49**(3): 57-66. (DENG Nan, DONG Hao, CHE Hong-yan, et al. The research progress on preparation of metal coatings by cold spraying and its application in additive manufacturing [J]. *Surface Technology*, 2020, **49**(3): 57-66. (in Chinese))
- [4] Li W Y, Yang K, Yin S, et al. Solid-state additive manufacturing and repairing by cold spraying: A review[J]. *Journal of Materials Science & Technology*, 2018, **34**(3): 440-457.
- [5] Dykhuizen R C, Smith M F, Gilmore D L, et al. Impact of high velocity cold spray particles [J]. *Journal of Thermal Spray Technology*, 1999, **8**(4): 559-564.
- [6] 彭云辉,崔新宇,熊天英,等.冷喷涂技术在材料制备领域的研究进展[J].中国材料进展, 2024, **43**(4): 290-300. (PENG Yun-hui, CUI Xin-yu, XIONG Tian-ying, et al. Research status of cold spray technology in the field of materials preparation [J]. *Materials China*, 2024, **43**(4): 290-300. (in Chinese))
- [7] Stoltenhoff T, Kreye H, Richter H J. An analysis of the cold spray process and its coatings [J]. *Journal of Thermal Spray Technology*, 2002, **11**(4): 542-550.
- [8] 宋凯强,丛大龙,何庆兵,等.先进冷喷涂技术的应用

- 及展望[J]. 装备环境工程, 2019, **16**(8): 65-69. (SONG Kai-qiang, CONG Da-long, HE Qing-bing, et al. Application and prospect of advanced cold spray technology[J]. *Equipment Environmental Engineering*, 2019, **16**(8): 65-69. (in Chinese))
- [9] Moridi A, Hassani-Gangaraj S M, Guagliano M, et al. Cold spray coating: Review of material systems and future perspectives [J]. *Surface Engineering*, 2014, **30**(6): 369-395.
- [10] 葛 益, 雒晓涛, 李长久. 冷喷涂固态颗粒沉积中颗粒间结合形成机制研究进展[J]. 表面技术, 2020, **49**(7): 60-67, 89. (GE Yi, LUO Xiao-tao, LI Chang-jiu. Research progress on the interface bonding formation mechanism of solid particle deposition in cold spray [J]. *Surface Technology*, 2020, **49**(7): 60-67, 89. (in Chinese))
- [11] Yin S, Cavaliere P, Aldwell B, et al. Cold spray additive manufacturing and repair: Fundamentals and applications [J]. *Additive Manufacturing*, 2018, **21**: 628-650.
- [12] 石仲川, 刘德鑫, 张晓云, 等. 冷喷涂技术的研究现状及在航空工业领域内的应用 [J]. 材料导报, 2012, **26**(17): 70-74. (SHI Zhong-chuan, LIU De-xin, ZHANG Xiao-yun, et al. Research of cold gas dynamic spray technology and its application in aviation industry [J]. *Materials Reports*, 2012, **26**(17): 70-74. (in Chinese))
- [13] Gilmore D L, Dykhuizen R C, Neiser R A, et al. Particle velocity and deposition efficiency in the cold spray process [J]. *Journal of Thermal Spray Technology*, 1999, **8**(4): 576-582.
- [14] Gärtner F, Stoltenhoff T, Schmidt T, et al. The cold spray process and its potential for industrial applications [J]. *Journal of Thermal Spray Technology*, 2006, **15**(2): 223-232.
- [15] Li C J, Li W Y, Liao H L. Examination of the critical velocity for deposition of particles in cold spraying [J]. *Journal of Thermal Spray Technology*, 2006, **15**(2): 212-222.
- [16] Yu M, Li W Y, Guo X P, et al. Impacting behavior of large oxidized copper particles in cold spraying [J]. *Journal of Thermal Spray Technology*, 2013, **22**(2): 433-440.
- [17] Li W Y, Li C J, Liao H L. Significant influence of particle surface oxidation on deposition efficiency, interface microstructure and adhesive strength of cold-sprayed copper coatings [J]. *Applied Surface Science*, 2010, **256**(16): 4953-4958.
- [18] Kang K, Yoon S, Ji Y, et al. Oxidation dependency of critical velocity for aluminum feedstock deposition in kinetic spraying process [J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2008, **486**(1-2): 300-307.
- [19] Yin S, Wang X F, Li W Y, et al. Deformation behavior of the oxide film on the surface of cold sprayed powder particle [J]. *Applied Surface Science*, 2012, **259**: 294-300.
- [20] Khamsepour P, Moreau C, Dolatabadi A. Effect of particle and substrate pre-heating on the oxide layer and material jet formation in solid-state spray deposition: A numerical study [J]. *Journal of Thermal Spray Technology*, 2023, **32**(4): 1153-1166.
- [21] Kim K, Li W Y, Guo X P. Detection of oxygen at the interface and its effect on strain, stress, and temperature at the interface between cold sprayed aluminum and steel substrate [J]. *Applied Surface Science*, 2015, **357**: 1720-1726.
- [22] Liu Z Y, Wang H Z, Hache M, et al. Formation of refined grains below 10 nm in size and nanoscale interlocking in the particle—particle interfacial regions of cold sprayed pure aluminum [J]. *Scripta Materialia*, 2020, **177**: 96-100.
- [23] Li W Y, Zhang D D, Huang C J, et al. Modelling of impact behaviour of cold spray particles: Review [J]. *Surface Engineering*, 2014, **30**(5): 299-308.
- [24] 张 雄, 廉艳平, 刘 岩, 等. 物质点法 [M]. 北京: 清华大学出版社, 2013. (ZHANG Xiong, LIAN Yan-ping, LIU Yan, et al. *Material Point Method* [M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2013. (in Chinese))
- [25] Liu Y, Xu C Y. Investigating the cold spraying process with the material point method [J]. *International Journal of Mechanics and Materials in Design*, 2019, **15**(2): 361-378.
- [26] 肖芳昱. 基于物质点法冷喷涂粒子沉积过程的数值模拟 [D]. 湘潭大学, 2022. (XIAO Fang-yu. Numerical Simulation of Cold Spraying Particle Deposition Process Based on Material Point Method [D]. Xiangtan University, 2022. (in Chinese))
- [27] Yin S, Wang X F, Li W Y, et al. Effect of substrate hardness on the deformation behavior of subsequently incident particles in cold spraying [J]. *Applied Surface Science*, 2011, **257**(17): 7560-7565.
- [28] Schmidt T, Assadi H, Gärtner F, et al. From particle acceleration to impact and bonding in cold spraying [J]. *Journal of Thermal Spray Technology*, 2009, **18**(5): 794-808.
- [29] Li W Y, Liao H L, Li C J, et al. Numerical simulation of deformation behavior of Al particles impacting on

- Al substrate and effect of surface oxide films on interfacial bonding in cold spraying[J]. *Applied Surface Science*,2007,**253**(11):5084-5091.
- [30] Li J, Huang F, Zhang L. Numerical simulations of tungsten alloy rods penetration into alumina ceramic/armor steel composite target[J]. *Journal of Beijing Institute of Technology*,2008,**17**(3):253.
- [31] Stukowski A. Computational analysis methods in atomistic modeling of crystals[J]. *JOM*,2014,**66**(3):399-407.
- [32] Naumann U, Schenk O. *Combinatorial Scientific Computing*[M]. Boca Raton: CRC Press,2012.
- [33] Edelsbrunner H, Mücke E. 3-Dimensional alpha-shapes[J]. *ACM Transactions on Graphics*,1994,**13**(1):43-72.
- [34] Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool[J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*,2010,**18**(1):015012.
- [35] 章华兵,单爱党,魏 仑,等.冷气动力喷涂涂层结合机理及其工艺研究进展[J].材料导报,2007,**21**(4):80-91. (ZHANG Hua-bing, SHAN Ai-dang, WEI Lun, et al. Developments of the bonding mechanism and process in cold gas dynamic spray[J]. *Materials Reports*,2007,**21**(4):80-91. (in Chinese))
- [36] Balani K, Agarwal A, Seal S, et al. Transmission electron microscopy of cold sprayed 1100 aluminum coating[J]. *Scripta Materialia*,2005,**53**(7):845-850.

Effect of surface oxide in cold spray with the material point simulations

CHEN Cong, SU Hao, LIU Yan*

(School of Aerospace Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract: Cold spray is a technique utilizing the plastic deformation of materials under impact to achieve solid-state bonding between metals. It has great importance for engineering applications such as surface repair, preparation of special materials, and additive manufacturing. The oxide on the raw materials is one of the major factors influencing the bonding efficiency and adhesive strength in cold spray. The effects of the oxide on the bonding between the particle and substrate are investigated with the simulation of material point method. The volume ratio of extreme plastic deformation zone in the particle is defined. Based on the residue of oxides at the interface and the aforementioned definition, the conclusions of the effect on the contact area and the plastic deformation under various impact velocities are drawn. Under the existence of oxides, increasing the impact velocity of the particle can simultaneously enlarge the fresh metallic surface and increase the plastic deformation.

Key words: cold spray; oxide; material point method; additive manufacturing