

# Analyse par simulation de l'interaction entre un jet plasma et des gouttes de suspension colloïdale : application à la projection plasma de nanomatériaux

F. GIRARD<sup>a,b</sup>, S. VINCENT<sup>a</sup>, E. MEILLOT<sup>b</sup>, JP. CALTAGIRONE<sup>a</sup>, L. BIANCHI<sup>b</sup>

*a. Laboratoire I2M Département Trefle, site ENSCBP, 16 avenue Pey-Berland, 33607 PESSAC*

*b. Laboratoire de Projection Thermique, CEA Le Ripault, BP 16, 37260 MONTS*

## Introduction

Parmi les procédés de projection thermique, la projection plasma de nanoparticules offre des perspectives intéressantes en termes de microstructure et de qualité des dépôts. Le changement d'échelle de la microstructure (micrométrique à nanométrique) permet d'améliorer les propriétés fonctionnelles des pièces revêtues.

Cependant, la faible inertie des nanoparticules oblige à les introduire par le biais de suspensions colloïdales (solvant aqueux ou éthanol) injectées par voie mécanique (dans notre cas), pour qu'elles aient une énergie cinétique suffisante pour arriver au cœur de l'écoulement plasma.

Du fait des conditions extrêmes du procédé (hautes températures, faible taille des particules, phénomènes ultrarapide), l'approche expérimentale reste difficile à mettre en œuvre pour observer les différentes étapes du processus, les analyser et en tirer des améliorations sur le contrôle du procédé.

Des travaux précédemment menés par Céline Caruyer [1] ont permis d'étudier la fragmentation du jet de suspension colloïdale (fragmentation primaire), ainsi que la fragmentation des gouttes formées (fragmentation secondaire) et l'écoulement libre de la flamme plasma.

Des recherches [2] ont déjà été effectuées sur l'évolution thermocinétique de nanoparticules en projection plasma, injectées cette fois par voie pneumatique. D'autres travaux [3] ont porté sur la projection plasma de nanoparticule en suspension à base d'acétone (d'où combustion). Cependant dans ce cas, l'écoulement du plasma a été considéré incompressible, ce qui ne correspond pas à notre étude où le nombre de Mach est supérieur à 0.3.

L'objectif de ce travail est d'étudier par simulation numérique à petite échelle les écoulements tri-phasiques (liquide, vapeur, solide), les phénomènes situés en aval de la fragmentation secondaire des gouttes de suspension et en amont de la phase d'impact des nanoparticules sur le substrat cible. On étudiera donc l'évaporation du solvant des suspensions et le vol des nanoparticules solides ou fondues une fois le solvant évaporé, dans le cas de particules de zircone  $ZrO_2$  de 100nm de diamètre en suspension aqueuse.

## I Modélisation et simulation du problème

Le plasma est considéré comme compressible, optiquement mince. Son écoulement obéit aux lois de la mécanique des milieux continus (équations de Navier-Stokes, de l'énergie, équations d'advection et de diffusion) en formulation à 1-fluide adaptée à des écoulements multiphasiques [4].

Les particules sont des sphères solides indéformables jusqu'à leur fusion, supposées uniformément réparties au sein des gouttes de suspension colloïdale. Ces gouttes sont également considérées sphériques, avec une rhéologie newtonienne de la phase porteuse fluide. Le substrat placé à 40mm de la torche est indéformable, mais non adiabatique. Il est refroidi par l'arrière.

On simulera le problème via le code Thétis développé au sein de l'I2M avec un maillage 3D (à cause de l'instabilité du plasma) structuré. Les gouttes et particules solides seront résolues, i.e. de taille plus grande que celle de la maille de calcul, et une méthode de pénalisation sera mise en œuvre pour modéliser le caractère solide des particules. Les différentes interfaces en présence (liquide/solide/plasma) seront suivies sur le maillage eulérien fixe par une approche Volume Of Fluid [4]. Deux aspects du procédé seront étudiés :

- Une vision globale du problème, qui tienne compte de la géométrie de l'écoulement (substrat à 40 mm de la torche), des espèces présentes dans cet écoulement (plasma Ar/H<sub>2</sub>, vapeur d'eau, engouffrement d'air) et de l'enthalpie nécessaire pour vaporiser l'eau. Nous introduirons des nanoparticules en représentation lagrangienne dans le champ ainsi obtenu afin d'observer leur évolution thermocinétique dans l'écoulement.

- Une vision locale, autour d'une goutte de suspension de 5  $\mu\text{m}$ , avec résolution des phénomènes associés à son évaporation. Les particules seront résolues dans ce cas (rayon plus grand que la maille).

## II Problèmes traités

### II. 1) L'écoulement plasma global et la balistique des particules post-évaporation

Dans un premier temps, nous étudions l'influence sur l'écoulement de la présence d'une source de vapeur dans le plasma, de la consommation énergétique nécessaire pour créer cette vapeur à partir du solvant liquide et l'influence d'un substrat placé près de la torche. Parallèlement, après une estimation du temps nécessaire à l'évaporation du liquide, nous introduisons des particules libres de différentes tailles dans cet écoulement plasma. Les différentes tailles prennent en compte une éventuelle agglomération des nanoparticules au sein des gouttes de suspension.

L'objectif est de déterminer l'état thermocinétique (vitesse, taille, taux de fusion, position) des particules de céramique. Ainsi nous serons en mesure de quantifier les différents objets qui atteindront le substrat.

### II 2) L'évaporation des gouttes de suspension colloïdale

L'évaporation de la goutte de solution colloïdale dépend de plusieurs phénomènes:

- les propriétés radiatives du plasma et des solutions colloïdales en termes d'émission, absorption, transmission, réflexion et diffraction doivent être connues

- Les transferts conducto-convectif avec prise en compte de l'effet Knudsen qui atténue la conduction entre le plasma et la goutte. Il faut tenir également compte de la vitesse d'éjection de la vapeur, qui peut s'opposer aux transferts conductifs.

- L'évaporation du solvant entraîne la réduction du volume de la goutte, donc le rapprochement entre les nanoparticules, luttant ainsi contre l'effet du dispersant stérique contenu dans le solvant. Des agglomérats de particules peuvent éventuellement se former. De plus, au fur et à mesure que la goutte s'évaporera, du liquide peut se retrouver coincé entre les particules. Avec l'augmentation de la température, il change d'état et exerce une pression sur les particules non complètement coalescées. Cette pression peut-être suffisante pour briser les agglomérats formés. Ces phénomènes génèrent ainsi une distribution granulométrique de particules fondues différentes de la distribution initiale.

L'objectif est de caractériser la migration et la fusion des particules nanométriques au sein d'une goutte de suspension colloïdale.

## III Résultats attendus

Nous souhaitons pouvoir prédire, en fonction de la granulométrie des nanoparticules injectées dans le plasma, quel sera leur état thermocinétique avant l'impact. Nous aurons aussi accès à l'effet de la vaporisation du solvant sur la température et la dynamique du plasma. Ce travail s'inscrit dans un projet plus global d'étude de la projection plasma de nanoparticules en suspension, qui doit permettre d'en maîtriser de nombreux aspects et améliorer ainsi le développement de nouvelles applications industrielles de ce procédé (piles à combustible).

## Bibliographie

[1] C. CARUYER *et al*, Analysis by modeling of plasma flow interactions with liquid injection, *Surface & Coatings Technology* 220 (2013) 149–156, 2012.

[2] H-B. XIONG & J-Z. LIN, Nanoparticles Modeling in Axially Injection Suspension Plasma Spray of Zirconia and Alumina Ceramics, *Journal of Thermal Spray Technology*, January 2009

[3] X. L. SUN *et al*, Combustion-aided suspension plasma spraying of Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanoparticles: Synthesis and modeling, *Journal of applied physics*, 2008

[4] S. VINCENT *et al*, Eulerian–Lagrangian multiscale methods for solving scalar equations – Application to incompressible two-phase flows, *Journal of Computational Physics* 229 (2010) 73–106, 2010