

# Multiscale Modelling of Plasma Spraying

Ilkin Alkhasli

---

Oktober 2021

**Schriftenreihe Oberflächentechnik, Band 70**

Hrsg.: Prof. Dr.-Ing. K. Bobzin

Partner im  
LABORATORIUM  
FÜGETECHNIK  
OBERFLÄCHENTECHNIK



# **Multiscale Modelling of Plasma Spraying**

## **Multiskalenmodellierung des Plasmaspritzens**

Von der Fakultät für Maschinenwesen der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen zur Erlangung des akademischen Grades eines Doktors der Ingenieurwissenschaften genehmigte Dissertation

vorgelegt von

Ilkin Alkhasli

Berichter: Univ.-Prof. Dr.-Ing. Kirsten Bobzin  
Univ.-Prof. Dr.-Ing. Stefanie Elgeti

Tag der mündlichen Prüfung: 03.09.2021



Schriftenreihe Oberflächentechnik

Band 70

**Ilkin Alkhasli**

**Multiscale Modelling of Plasma Spraying**

Shaker Verlag  
Düren 2021

**Bibliographic information published by the Deutsche Nationalbibliothek**

The Deutsche Nationalbibliothek lists this publication in the Deutsche Nationalbibliografie; detailed bibliographic data are available in the Internet at <http://dnb.d-nb.de>.

Zugl.: D 82 (Diss. RWTH Aachen University, 2021)

Copyright Shaker Verlag 2021

All rights reserved. No part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system, or transmitted, in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, recording or otherwise, without the prior permission of the publishers.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8440-8263-0

ISSN 1864-0796

Shaker Verlag GmbH • Am Langen Graben 15a • 52353 Düren

Phone: 0049/2421/99011-0 • Telefax: 0049/2421/99011-9

Internet: [www.shaker.de](http://www.shaker.de) • e-mail: [info@shaker.de](mailto:info@shaker.de)

### **Acknowledgement**

I would like to express my gratitude to Univ.-Prof. Dr.-Ing. Kirsten Bobzin for enabling my work at the Surface Engineering Institute (IOT), for the interesting research topic and her patience. I am also grateful to the thesis committee Univ.-Prof. Dr.-Ing Stefanie Elgeti for evaluating my work and Univ.-Prof. Dr.-Ing Uwe Reisgen for chairing the doctoral examination.

My work was funded by the German Research Foundation (DFG) – SFB1120 A10 – project number 236616214. I am grateful for their financial support.

To Dr.-Ing Mehmet Öte I am grateful for his trust and guidance, to Dr.-Ing. Martin Knoch for his invaluable support as a supervisor and a colleague. I would like to thank Seyed Ruhollah Dokhanchi, Fabian Wolf and Tolga Guzay for fruitful collaboration and their valuable contributions. My sincere thanks to Dr.-Ing. Mehmet Öte, Hendrik Heinemann, Dr.-Ing. Leonid Gerdt, Dr.-Ing. Mostafa Arghavani, Alexander Schmidt and especially to Dr.-Ing. Martin Knoch for their proofreading and their moral support towards the completion of this work.

I am thankful to Hendrik Heinemann for insightful discussions and his helpfulness, to Dr.-Ing. Lidong Zhao for his immense knowledge of material science, to Metin Yüceer for his assistance during experiments, to Uwe Werner and Felix Dudzic for always having my back on IT related issues, to Elisa Burbaum for the cross-section image she kindly provided.

I will forever be grateful to my parents for supporting my education. To my beloved spouse I am grateful for her patience, support, trust and acceptance over the many years this thesis was coming to fruition.

**Abstract**

Atmospheric plasma spraying is a versatile technology that can produce coatings with a wide range of characteristics. Adapting the coating characteristics to the increasing demands of modern industrial applications is an ongoing research topic. Modelling and simulation increase the understanding of the process dynamics and have the potential to predict the coating properties. Correlating the coating properties with the process parameters is an essential step for a modelling approach to fulfil this potential. Due to its complexity, it is practically impossible to describe the whole process in a single model. However, based on the nature and the scale of the governing physical phenomena, the plasma spraying process can be divided into constituting sub-processes, which can then be described by separate models. Available models of isolated sub-processes in the literature are not able to derive the coating properties from the process parameters. This thesis is therefore devoted to creating a predictive simulation chain by combining the models of atmospheric plasma spraying sub-processes with each other and thus connecting the coating properties with the process parameters.

The simulation chain includes the established models of the sub-processes, models developed in this work to describe previously neglected phenomena and the coupling strategies designed to link separate models together. The existing validated model of the plasma generator was utilized, while the discrete particle jet model was developed further to include the temperature gradients within individual particles. This model assumes perfectly homogenous and spherical particles. To account for realistic particle morphologies, a separate model that can resolve particles with complex shape was developed. By incorporating this model into the gradient particle jet model, the multiscale particle jet model were developed. Since the temperature gradients within the particles cannot be captured experimentally, the model was validated indirectly by correlating particle temperatures with experimentally obtained coating thickness distributions. A particle impact model was generated to simulate the coating formation by multiple particle impacts. This model can track the cooling rates of the individual particles as well. A multi-scale coupling strategy enabled linking the multiscale particle jet with the coating formation model. Finally, a model for the determination of the effective thermal conductivity of the simulated coatings was implemented as the final link in the simulation chain. In addition to increasing the understanding of distinct aspects of the process, the simulation chain has laid the foundation of a predictive tool that can be deployed for designing new coating systems.

**Zusammenfassung**

Atmosphärisches Plasmaspritzen ist eine vielseitige Technologie, mit der Beschichtungen aus einem breiten Spektrum von Werkstoffen hergestellt werden können. Die Modellierung und Simulation des Prozesses erhöhen das Verständnis der Prozessdynamik und haben das Potenzial, die Schichteigenschaften vorherzusagen und zu optimieren. Eine simulative Korrelation der Schichteigenschaften mit den Prozessparametern ist zur Erfüllung dieses Ziels unerlässlich. Aufgrund seiner Komplexität ist es praktisch unmöglich, den gesamten Prozess in einem einzigen Modell abzubilden. Basierend auf der Art und der Skala der physikalischen Phänomene kann das atmosphärische Plasmaspritzen jedoch in Teilprozesse unterteilt werden, die durch einzelne Modelle abgebildet werden können. Bereits vorhandene Modelle von vereinzelt Teilprozessen in der Literatur sind nicht in der Lage, die Schichteigenschaften aus den Prozessparametern abzuleiten. Diese Arbeit widmet sich daher dem Aufbau einer prädiktiven Simulationskette, indem die Modelle der Teilprozesse des atmosphärischen Plasmaspritzens miteinander verknüpft werden und somit die Schichteigenschaften direkt mit den Prozessparametern verbunden werden.

Die Simulationskette besteht aus den etablierten und neu entwickelten Modellen der Teilprozesse sowie den Kopplungsstrategien, mit denen die Modelle verknüpft werden. Das bestehende Modell des Plasmagenerators wurde übernommen, wobei das Partikelstrahlmodell wurde weiterentwickelt, um die Temperaturgradienten innerhalb der Partikeln zu berücksichtigen. Ein separates Modell um die realistische Partikelgeometrie aufzulösen, und eine Strategie, die es mit dem gradierten Partikelstrahlmodell koppelt, wurden entwickelt. Das dadurch entstandene multi-skalen Partikelstrahlmodell wurde anhand experimentellen Schichtdickenverteilungen validiert. Die Partikelaufrall- und Erstarrungsmodelle, die dem Stand der Technik entsprechen, wurden aufgebaut. Sie wurden weiterentwickelt um die Schichtbildung durch mehrfache Partikelaufrall sowie die Abkühlraten der einzelnen Partikel zu betrachten. Eine Monte-Carlo-Kopplungsstrategie wurde entwickelt, um die gradierten Partikelstrahl- und Schichtaufbaumodelle skalenübergreifend zu koppeln. Ein Modell zur Bestimmung der effektiven Wärmeleitfähigkeit der simulierten Beschichtungen unter Berücksichtigung der interlamellaren Schnittstellen bildete das letzte Glied in der Simulationskette. Neben der Erhöhung des Prozessverständnisses, ist eine prädiktive Simulationskette zustande gekommen, die für den Entwurf neuer Schichtsysteme eingesetzt werden kann.



**Table of Contents**

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>1</b>
1.1	State of the Art in Modelling of Plasma Spraying	3
1.1.1	Plasma Generator	4
1.1.2	Particle Jet	7
1.1.3	Coating Deposition	12
1.1.4	Effective Coating Properties	15
1.1.5	Material Properties	17
1.2	Aims and Solution Approach	18
<b>2</b>	<b>Plasma Generator, Plasma Jet and Discrete Particle Jet Models</b>	<b>22</b>
2.1	Plasma Generator Model	22
2.2	Plasma Jet Model	25
2.3	Discrete Particle Jet Model	26
2.4	Conclusion	34
<b>3</b>	<b>Particle Heating Model in 1-D</b>	<b>37</b>
3.1	Shell Model of the Particles	39
3.2	Finite Difference Method	40
3.3	Heat Conduction	43
3.4	Heat Convection	45
3.5	Melting and Evaporation	46
3.6	Melting Degree of Particles	47
3.7	Adaptive Time Stepping and Two-Way Coupling	48
3.8	Validation with the Analytical Solution	50
3.9	Conclusion	52
<b>4</b>	<b>Multiscale Particle Jet</b>	<b>54</b>
4.1	3-D Particle Model	54
4.2	Effective Coefficients and Properties	58
4.2.1	Effective Drag Coefficient	59
4.2.2	Finite Thermal Conductivity	66

---

4.2.3	Effective Heat Transfer Coefficient	67
4.2.4	Effective Thermal Conductivity	77
4.2.5	Effective Density	79
4.3	Experimental Validation	80
4.4	Conclusion	86
<b>5</b>	<b>Particle Impact Model</b>	<b>89</b>
5.1	Single Particle Impact Modelling	89
5.1.1	Variable Viscosity Method for Solidification Modelling	93
5.1.2	Momentum Source Method for Solidification Modelling	95
5.2	Automatized Multiple Particle Impact	103
5.3	Coupling of Particle Impact and Free Jet Models	107
5.4	Modelling of Inter-lamellar interfaces	110
5.5	Temperature Evolution of Individual Particles	114
5.6	Effective Thermal Conductivity	117
5.7	Conclusion	119
<b>6</b>	<b>General Summary and Conclusion</b>	<b>122</b>
<b>7</b>	<b>References</b>	<b>125</b>
<b>8</b>	<b>Appendix</b>	<b>138</b>
<b>9</b>	<b>Index</b>	<b>144</b>
9.1	List of Figures	144
9.2	List of Equations	152
9.3	List of Tables	154
9.4	List of Abbreviations	155
9.5	List of Symbols	156