

摘要:利用有限元方法,对热障涂层热循环降温过程中产生的残余应力进行了数值模拟,研究了有尖点和无尖点正弦波形微坑以及矩形微坑对界面残余应力的影响。结果表明,微坑形状不同,界面上残余应力的大小、性质与分布也不同;微坑的形状变化和尖点的出现,将会使该处的应力发生突变,不利于增强界面结合强度。因此,从对热障涂层界面残余应力的影响角度看,无尖点的正弦波形微坑既优于有尖点微坑也优于矩形微坑。

关键词:界面形貌;热障涂层;有限元方法;数值模拟

中图分类号: TG174 **文献标识码:** A **文章编号:** 0254-6051(2001)09-0044-03

Numerical Simulation of Interfacial Residual Stresses in Thermal Barrier Coatings Induced by Interface Topography

WANG Hong, ZHANG Kun, CHEN Guang-nan

(Laboratory of Surface Modification, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Science, Beijing 100080, China)

Abstract: The residual stresses in thermal barrier coatings during cooling of heat cycles were numerically simulated by finite element method in this paper, with an attempt to understand the influences of interface topography, rectangle micro-pit, sinusoid with tip and without tip, on interfacial residual stresses distribution. It shows that, interfacial residual stress distribution is varied with the shape of micro-pit and the variation of micro-pit and appearance of tip will cause the sudden change of stresses which is bad to interface bonding. On the opinion of the influences on the interfacial residual stressed in thermal barrier coatings, the sinusoid micro-pit without tip is better than both micro-tip sinusoid with tip and rectangle.

Key words: interface topography; thermal barrier coatings; finite element method; numerical simulation

1 引言

为使金属工件能在高温条件下稳定工作,其表面往往需要涂覆陶瓷保护层,即所谓热障涂层。典型的热障涂层一般由 Y 稳定 ZrO₂ 陶瓷层和 MCrAlY 结合层复合构成,它可以用等离子喷涂方法、电子束物理气相沉积 (EBPVD) 和激光等方法制备。在涂层的使用过程中,由于热物性差异和变形失配,会在涂层内部和界面上产生热残余应力^[1,2],并最终导致陶瓷涂层沿界面剥离。因此,如何增强界面结合强度成为延长热障涂层使用寿命的一个关键问题。

实践表明,界面粗糙化是提高界面结合强度的有效措施。喷丸处理是目前最常用的界面粗糙化方法(见图 1a)。这种

方法因难以精确控制所制造的界面形貌和粗糙度,其强化效果有限。为此,最近 Wolfe^[3] 等人提出采用其深度高达 100μm 的激光刻蚀网状矩形沟槽来增强 EBPVD 热障涂层的界面结合强度(见图 1b)。值得注意的是,界面粗糙化在增强界面的同时也会产生垂直于界面的拉应力^[2],过度的界面造形有可能损伤界面,反而降低涂层的使用寿命。为减小界面造形对涂层界面结合强度带来的损伤,我们采用激光毛化方法^[4,5]增强管内表面涂层与基体间的结合强度,取得了很好的效果。激光毛化是一种新的表面粗糙化加工技术,它可以在材料表面均匀离散地加工其截面近似于单个正弦波形的微坑(见图 1c、d),并能精确控制其形状、尺寸和分布。

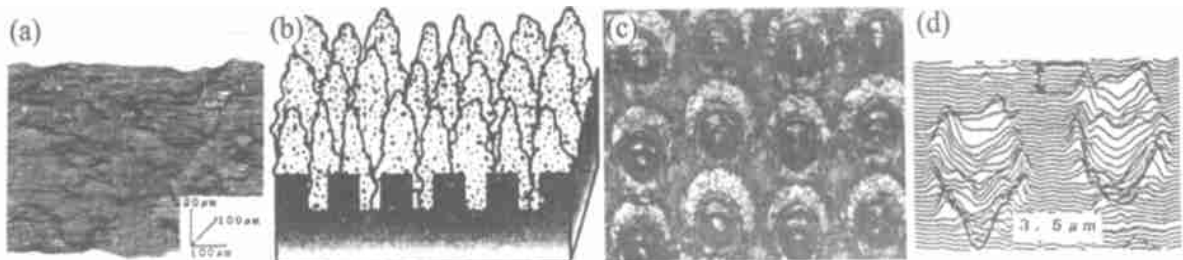


图 1 用不同方法处理的界面形貌

(a) 喷丸^[6] (b) 激光刻蚀沟槽^[3] (c) 激光毛化(俯视图) (d) 激光毛化(侧视图)^[6]

Fig. 1 Interface topographies with varied method treatment

(a) shot-blast texturing^[6] (b) laser-grooving^[3] (c) laser texturing (planform) (d) laser texturing (side elevation)^[6]

为将激光毛化技术引入热障涂层界面粗糙化加工并为优化其工艺设计提供理论指导,本文拟采用有限元数值模拟方

法分析热障涂层冷却过程中,不同界面形貌对界面残余应力的影响规律。

2 物理模型

作为研究对象的等离子喷涂热障涂层(见图 2)由厚 250μm 的 ZrO₂(含 8wt% Y₂O₃)陶瓷层和厚度为 100μm 的 Ni-22Cr-10Al-1Y 结合层构成。基体为单晶镍基超合金 Ren 6N5。

作者简介:王洪(1975.3-),男,湖北束鹿人,硕士研究生,主要从事材料热处理过程热力学问题的数值模拟。联系电话:010-62547527

基金项目:国家自然科学基金重点项目(59836220)

收稿日期:2001-03-15

关于热障涂层的工况,设定:在稳态工况下工作,其陶瓷层外表面恒温 1200 ,基体恒温 1050 ;由于基体和结合层基本不隔热,所以可以认为陶瓷层内表面与基体同温^[7];此时,撤掉工作环境的热源,让涂层和基体准稳态降温至 25 ,热残余应力因各层间的变形失配而产生;忽略涂层制备过程产生的残余应力的影响以及此过程中的塑性变形和蠕变,故残余应力的分布与过程无关,可只考虑降温过程的初末两态。

关于涂层界面微坑形貌,根据上节的介绍,可典型化为如下 3 种类型(见图 3):其中(a)为矩形波微坑;(b)为削去正弦波中线以上部分形成的微坑^[21], (c)为将(b)中尖点进行光滑处理形成的微坑。

3 数值模拟

由于基体的厚度远远大于上两层的厚度,计算中可不作考虑,因此可取陶瓷层和结合层为分析对象。由于在垂直于横截面的方向上的尺寸相对于形貌周期的尺寸要大得多,因此这是一个平面应变问题。假设陶瓷层和结合层在界面上不产生相对滑动。

假设各层的热、力学参数(杨氏模量 E 、泊松比 ν 和热膨胀系数 CTE)在各自温度变化过程中为定值。在平面应变问题下的系统热、力学参数值^[2]见表 1。

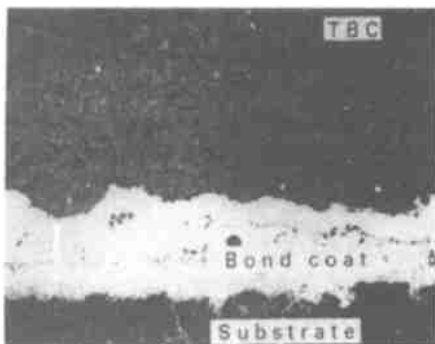


图 2 典型等离子喷涂热障涂层(陶瓷层和结合层)^[13]

Fig. 2 Typical plasma-sprayed thermal barrier coatings (ceramic coating and bond coating)^[13]

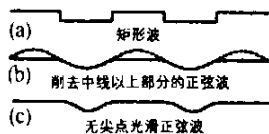


图 3 不同形状的形貌

- (a) 矩形波 (b) 削去的中线以上部分正弦波
(c) 无尖点光滑正弦波

Fig. 3 Topographies with varied shapes

- (a) rectangle (b) sinusoid without convex
(c) smooth sinusoid with out tip

表 1 涂层系统热、力学参数^[2]

Table 1 Thermal/mechanical properties for thermal barrier coatings system^[2]

	陶瓷层	结合层	基体
E / GPa	50	200	213
	0.10	0.30	0.25
CTE/ $10^{-6} \cdot ^{-1}$	10	15.2	14.5

本文以等离子喷涂热障涂层为计算对象,陶瓷层、结合层的厚度分别为 250 μm 和 100 μm 。为便于比较,假定上节所述 3 种类型微坑的深度、宽度和间距相同,分别为:10 μm 、100 μm 和 100 μm 。计算范围取 3 个微坑周期。用初末两态温度的变化作为模型的体力载荷,初始状态(即稳态工况)的温度分布由热传导求得。由于基体的厚度相对于陶瓷层和结合层的厚度要大得多,以及结构的周期性,因此图 2 中的左右边界上应添加位移边界条件,大小为基体的热膨胀量 ($-1.486\% = -14.5 \times 10^{-6} \times 1025$)。

4 计算结果和分析

取平行于界面的方向为 x 轴,垂直于界面的方向为 y 轴。图 4~6 分别对应矩形波、削去中线以上部分的正弦波、无尖点光滑正弦波 3 种形貌陶瓷层中 x 、 y 方向正应力分布。由图可见,对于 3 种不同的界面形貌,冷却后,陶瓷层 x 方向的残余应力均为压应力; y 方向的残余应力在微坑的内部存在压应力,外部为拉应力。 x 方向残余压应力由外表面到界面逐渐增大。这是因为基体的热膨胀系数要比陶瓷层的热膨胀系数大,降温后基体的收缩量大于陶瓷层的收缩量;降温前,陶瓷层由外表面到界面,温度逐渐降低;降温后的收缩量随之递减,因而陶瓷层和基体的热不匹配量随之递增。3 种界面陶瓷层外表面的压应力值均为 -156MPa,这是因为陶瓷层外表面远离微坑,应力的分布已不受形貌变化的影响。

由图 7 可见(a)、(b)和(c)型界面上 x 方向的最大残余应力分别为 -265MPa、-254MPa 和 -243MPa,并均位于微坑两端部。(a)型界面形貌与其它两种界面形貌的最大差别是,在(a)型微坑的两端部存在剧烈的应力梯度和应力突变;(b)型界面的尖点处也存在应力突变,但突变幅度较(a)小得多。因此,从界面上 x 方向的残余应力值的大小分布和变化幅度看,(c)型界面形貌最为优越。关于 y 方向的残余应力,(a)型界面的最大压应力值为 -214MPa,存在于微坑两端部(即尖点)内侧;最大拉应力存在于微坑两端部的尖点处,其值为 67MPa,值得注意的是尖点两侧的应力差高达 281MPa。(b)型界面的最大压应力值为 -46MPa,存在于微坑中部;最大拉应力也为 67MPa,也存在于微坑两端部的尖点处。(c)型界面

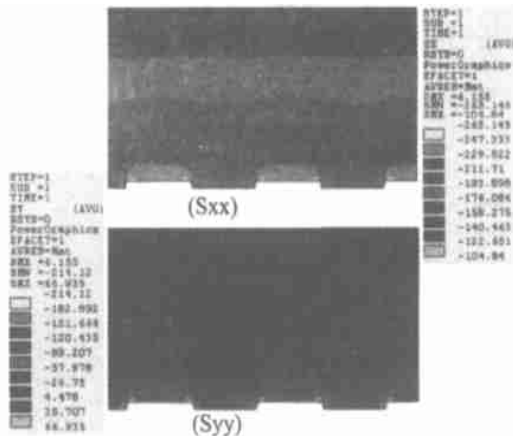


图 4 矩形波形貌:陶瓷层残余应力分布

Fig. 4 Rectangle: residual stresses distribution in ceramic coating

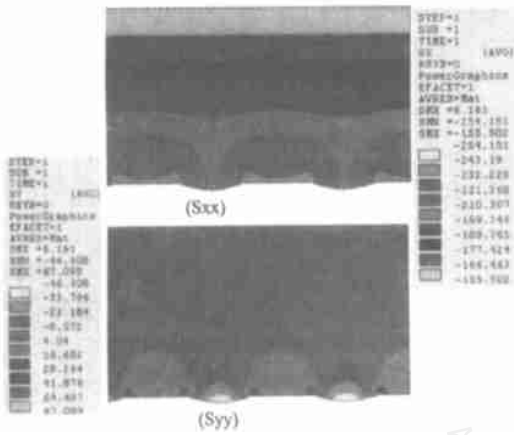


图5 消去中线以上部分的正弦波形貌：
陶瓷层残余应力分布

Fig. 5 Sinusoid without convex tip: residual stresses distribution in ceramic coating

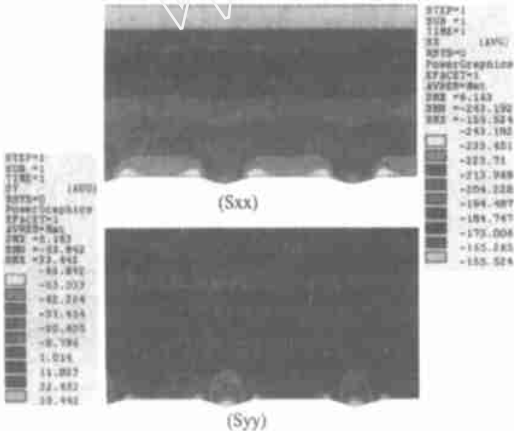


图6 无尖点光滑正弦波形貌：
陶瓷层残余应力分布

Fig. 6 Smooth sinusoid without tip: residual distribution in ceramic coating

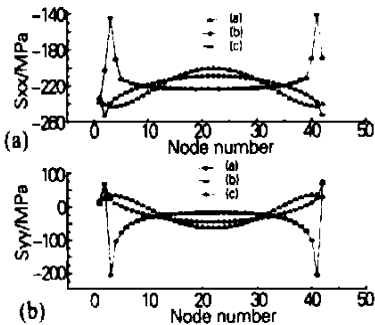


图7 不同形貌下界面残余应力分布

Fig. 7 Interfacial residual stresses distribution in varied topography

的最大压应力值为 - 63MPa,位于微坑中部;最大拉应力为 33MPa,也位于微坑两端部,但明显小于(a)型和(b)型界面。所以从 y 方向的应力大小和分布以及应力梯度看,也是(c)形貌最为优越。

一般认为界面上陶瓷层一侧,垂直于界面的残余拉应力 S_{yy} 和平行于界面的压应力 S_{xx} 是导致涂层破坏的主要原

因^[2,7,8],其中平行于界面的残余压应力易导致陶瓷层的崩离;而垂直于界面的残余拉应力会使陶瓷层剥落。不同界面形貌下,界面上陶瓷层一侧残余应力分布见图7,横坐标为结点号(不是界面上结点的位置坐标),纵坐标为界面残余应力。界面上相邻微坑的中点为0号结点,结点1~42在 x 轴上的投影将微坑宽度40等分。形貌(c)相对于形貌(b)和(a)大幅度降低了 S_{yy} ,对 S_{xx} 也有一定程度的降低,这是由于(a)和(b)在微坑的边缘出现了尖点,产生了应力集中。而文献[1,2]表明,应力突变对涂层的使用也是很不利。对比两种形貌的 S_{yy} , (a)的幅值为 281MPa, (b)的幅值为 113MPa, (c)的幅值为 96MPa,形貌(a)在边界上产生了相对更大的应力突变。这是由于矩形波形貌不如正弦波形貌平缓光滑造成的,而尖点对应力突变的影响相对较小。

5 结论

(1) 在微坑深度、宽度和间距相同的情况下,界面形貌对热障涂层界面残余应力的性质、大小和分布有显著影响。

(2) 界面上的几何突变将会导致界面残余应力的突变,且几何突变愈剧烈,界面应力突变也愈剧烈,因而影响涂层界面的结合强度。

(3) 正弦形微坑界面明显优于矩形微坑界面,而光滑正弦形微坑界面更优于有尖点正弦形界面。因此,脉冲激光毛化技术可以作为一种更为理想的界面形貌制备手段。

由计算结果不难看出,界面形貌的尺度(包括深度、宽度和分布)的变化,也会对界面残余应力产生显著影响。有关这方面的研究结果将另文发表。

参考文献:

- [1] Singh R K, Gilbert D R, Fitz J- Gerald and Lee D G. Surface composites: Novel Method to Fabricate Adherent Interfaces[J]. Surface Engineering, 1997, 13(5): 389-392.
- [2] Hsueh C H, Becher P F, Fuller E R Jr., Langer S A and Carter W C. Surface Roughness Induced Residual Stresses in Thermal Barrier Coating: Computer Simulations[J]. Materials Science Forum, 1999: 308-311, 442-449.
- [3] Wolfe D, Singh J. Functionally Gradient Ceramic/ Metallic Coatings for Gas Turbine Components by High-Energy Beams for High-Temperature Applications[J]. Journal of Materials Science, 1998, 33: 3677-3692.
- [4] Shen H, Chen G N, Li G C. The Plastic Instability Behavior of Laser Textured Steel Sheet[J]. Materials Science and Engineering A, 1996(A219/ 1-2): 156-161.
- [5] 陈光南. 毛化轧辊的新方法及其应用[J]. 钢铁, 1997, 32(6): 65-66
- [6] Shin Ujihara, Tomohiko Hisasune, Yuji Hishida, Makoto Imanaka, Hideo Abe. Application of Laser-Textured Steel Sheets or Autobody Panels[J]. Iron and Steel Engineer, 1991, (8): 52-56.
- [7] 杨晓光, 耿瑞, 熊昌炳. 一种简便的隔热涂层残余应力分析方法及结果讨论[J]. 航空动力学报, 1997, 12(3): 239-242.
- [8] Haynes J A, Ribney E D, Ferber M K and Porter W D. Oxidation and Degradation of a Plasma-sprayed Thermal Barrier Coating System[J]. Surface and Coatings Technology, 1996, (86-87): 102-108.