

因素对温度场的影响,其正确性已得到试验验证。该计算机模拟方法与传统的设计方法相比较,具有明显的优越性,提供

了一种良好的热处理炉虚拟生产技术,可作为智能热处理CAD的核心技术之一。

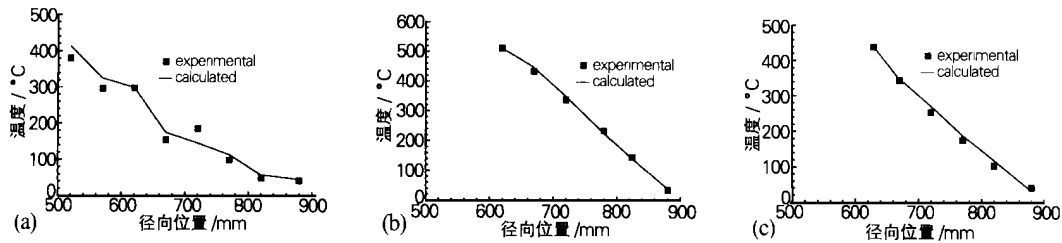


图4 模拟结果与实测数据的比较

(a) 轴向位置 A (b) 轴向位置 B (c) 轴向位置 C

Fig. 4 Comparison of simulated results and experimented results

(a) at position A (b) at position B (c) at position C

参考文献:

- [1] 顾剑锋,潘健生,胡明娟,等.冷轧辊淬冷过程数值模拟的研究[J].金属热处理学报,1999,(2):1-7.
- [2] 田东,胡明娟,潘健生,等.淬冷过程中三维传热的数值模拟[J].兵器材料科学与工程,1998,(7):28-32.
- [3] 袁文庆,陈晓.工件加热三维非稳态温度场的计算机模拟[J].金属热处理学报,1991,(2):35-41.
- [4] Holman J. P. Heat Transfer [M]. New York: McGraw-Hill Book Company, 1986: 85-104.
- [5] 孔祥谦.有限单元法在传热学中的应用[M].北京:科学出版社,1998:1-7.
- [6] 吴光英.现代热处理炉[M].北京:机械工业出版社,1990:5-14.
- [7] 臧东慧.热处理设备的计算机辅助设计[D].上海:上海交通大学,1994.

热障涂层界面微结构尺寸与残余应力关系的数值模拟

王洪,张坤,陈光南(中科院力学研究所 表面改性实验室,北京 100080)

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。以无尖点正弦波界面形貌为对象,研究了其微结构尺寸(包括微坑间距、宽度和深度)对平行和垂直于界面的残余应力最大值 S_{MX} 和 S_{MY} 的影响规律。结果表明,在本文所给定的尺度范围内,微结构尺寸对 S_{MX} 和 S_{MY} 均有影响,但对 S_{MY} 的影响要更为显著;在微坑深度、宽度和间距等3个微结构尺寸参数中,微坑深度对界面残余应力的影响最大。

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: TB115 **文献标识码:** A **文章编号:** 0254-6051(2001)11-0017-03

Numerical Simulations of Relationship Between Interface Topography Dimensions and Residual Stresses in Thermal Barrier Coatings

WANG Hong, ZHANG Kun, CHEN Guang-nan

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

Abstract: The relationship between interface topography dimension and residual stress in thermal barrier coating during cooling of heat cycles is numerically simulated by finite element method in this paper. For sinusoid topography without tips, the three parameters of the distance between two pits, pit width and depth are concerned. It is shown that, in the range of microstructure dimensions given in this paper, the dimensions have a pronounced effect on the maximum of interfacial residual stresses of S_{MY} (normal to the interface) and S_{MX} (parallel to the interface), but more pronounced on S_{MY} . It has been also found that the pit depth is the major factor among the three parameters.

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

作者简介:王洪(1975,3—),男,河北束鹿县人,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资助(59836220)

收稿日期:2001-05-11

热障涂层是金属工件能在高温条件下稳定工作的重要保障,界面粗糙化则是减缓工件使用过程中,涂层与基体间因热物性差异在涂层及其界面上导致的变形失配和热残余应力^[1~5],从而延长其使用寿命的有效措施。由于界面粗糙化会产生垂直于界面的拉应力^[5],界面造型不适度也有可能损

伤界面,反而降低涂层的使用寿命。用数值模拟方法研究了矩形、有尖点和无尖点的正弦波等不同界面形貌对界面热残余应力的影响,结果表明^[6]:在界面形貌微结构尺寸相同的情况下,无尖点正弦波形貌由于没有明显的应力集中和应力突变,是最为理想的界面形貌。在此基础上,本文研究了界面微结构尺寸变化对残余应力的影响,为优化热障涂层界面及其加工工艺的设计提供更为全面的理论指导。

1 物理模型

采用如图 1 所示的无尖点正弦波形貌作为界面形貌,其微结构尺寸包括微坑的坑深 h 、坑宽 $2r$ (微坑两端部之间的距离)以及间距 d (两相邻微坑之间的距离),其量级一般在微米尺度。

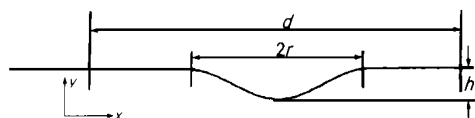


图 1 正弦形界面形貌微结构尺寸示意图

Fig. 1 Scheme of microstructure dimensions of sinusoid interface topography

以等离子喷涂热障涂层为研究对象,其陶瓷层(内含 8% wt Y_2O_3 的 ZrO_2)厚度为 $250\mu m$,结合层(Ni-22Cr-10Al-1Y)厚度为 $100\mu m$,金属基体为单晶镍基超合金 Ren 6N5。

假定热障涂层在稳态工况下工作,其陶瓷层外表面恒温 $1200^\circ C$,基体恒温 $1050^\circ C$;且结合层不隔热,即陶瓷层内表面与金属基体温度相同^[7]。此时,撤掉工作环境的热源,让涂层和基体准稳态降温至 $25^\circ C$,因各层间的变形失配而产生热残余应力;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,只考虑降温过程的初末两种状态。

2 数值模拟

由于工件金属基体的厚度远大于陶瓷层和过渡层的厚度,因此可只取陶瓷层和结合层为分析对象。由于垂直于横截面方向上的尺寸相对于界面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。假设各层的热学、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,并取文献[5]中给出的具体数值,见表 1。

表 1 涂层和基体的热学和力学参数^[5]

Table 1 Thermal/mechanical properties for the thermal barrier coating and substrate^[5]

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

以初末两态温度的变化作为涂层降温时的体力载荷,初始状态(即稳态工况)陶瓷层中的温度分布可由热传导求得。计算范围取 3 个微坑周期,每个周期的形貌如图 1 所示,其坑深、坑宽和间距分别为 $10\mu m$ 、 $100\mu m$ 和 $200\mu m$ 。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($-1.486\% = -14.5 \times 10^{-6} / \times 1025$)。

3 计算结果与讨论

根据上述条件,用有限元法计算的陶瓷层一侧的界面残余应力如图 2 所示。图中横坐标为结点号(不同的结点号代表界面形貌上不同的位置),纵坐标为界面残余应力。界面上相邻微坑的中点为 1 号结点,结点 2~42 在 x 轴上的投影将微坑宽度 40 等分。可见, x 方向界面残余应力 S_{xx} 均为压应力,最大值位于微坑两端部。 y 方向界面残余应力 S_{yy} 在微坑端部附近呈拉应力,最大拉应力位于微坑的两端部。拉应力由微坑端部向内部方向逐渐减小,再过渡为压应力,最大压应力值位于微坑中部。

一般认为在陶瓷层一侧,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^[5~8],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。因此界面残余应力值最大的点,即微坑端部是危险点。

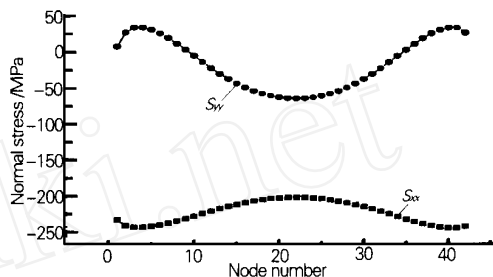


图 2 陶瓷层一侧界面残余应力

Fig. 2 Interfacial residual stresses in topcoat
 $h = 10\mu m, 2r = 100\mu m, d = 200\mu m$

下面分 3 种情况分别讨论每个参数对陶瓷层界面残余应力最大值,即微坑端部 x 方向最大压应力 S_{Mx} 和 y 方向最大拉应力 S_{My} 的影响。

(1) 保持微坑深度和宽度不变,考察微坑间距 d 对 S_{Mx} 和 S_{My} 的影响。由图 3 可见,微坑间距 d 对 S_{Mx} 的影响总体上讲不大, d 从 $100\mu m$ 增加到 $200\mu m$ 时, S_{Mx} 从 -252MPa 减小到 -241MPa ,变化率约为 4%; d 超过 $200\mu m$ 后, S_{Mx} 的变化更小。但微坑间距的变化对 S_{My} 有显著影响。当 d 从 $100\mu m$ 增加到 $200\mu m$ 时, S_{My} 由 61MPa 减小到 27MPa ,其变化率为 56%;大于 $200\mu m$ 后, d 的影响程度减弱。表明增大微坑间距能显著降低 y 方向残余拉应力最大值,但当微坑间距超过其坑径的 3 倍后,相邻微坑的应力场的叠加效果已经消失,相邻微坑间的相互作用可以忽略。

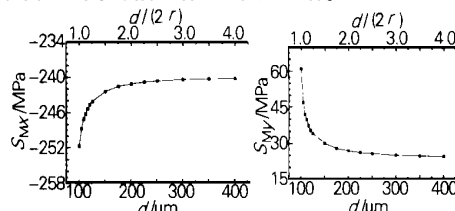


图 3 陶瓷层一侧界面残余应力最大值随 d 的变化趋势

Fig. 3 Relationship of the maximum of interfacial residual stresses in topcoat and d
 $h = 10\mu m, 2r = 100\mu m$

(2) 保持微坑的深度和间距不变,考察微坑宽度 $2r$ 变化对 S_{MX} 和 S_{MY} 的影响,见图 4。为便于说明,图 4 上还给出了微坑的宽/深比坐标。由图 4 可见,随 $2r$ 增加, S_{MX} 、 S_{MY} 均呈先增后减的非单调变化趋势。 $2r$ 与 h 相等即微坑宽度与深度相等时, S_{MX} 达到最大值 -260MPa, S_{MY} 达到最大值 66MPa。当 $2r = 100\mu\text{m}$ 即 $2r/h = 10$ 时, S_{MX} 减小为 -235MPa, S_{MY} 则减小为 17MPa,变化率分别为 9% 和 74%。 $2r > 100\mu\text{m}$ 即 $2r/h > 10$ 以后, S_{MX} 的变化很小, S_{MY} 也基本不变。表明在微坑深度和间距不变的条件下,微坑宽度和微坑宽/深比对界面上 y 方向的残余拉应力最大值也有显著影响,其影响程度甚至高于因微坑间距不同而带来的变化。

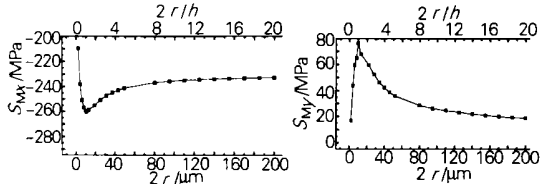


图 4 陶瓷层一侧界面残余应力最大值随 $2r$ 变化趋势
Fig. 4 Relationship of the maximum of interfacial residual stresses in topcoat and $2r$

$h = 10\mu\text{m}, d = 200\mu\text{m}$

(3) 保持微坑宽度和间距不变,考察其深度 h 变化对 S_{MX} 和 S_{MY} 的影响。由图 5 不难看出, S_{MX} 和 S_{MY} 均随 h 增大而单调变化。随 h 增大, S_{MX} 逐渐下降,但下降幅度逐渐减缓。在 S_{MX} 从 -272MPa 下降到 -230MPa,即 h 增加到 $50\mu\text{m}$ 后,其下降趋于平稳。从图 5 还可看出,微坑深度 h 对 S_{MY} 的影响明显高于对 S_{MX} 的影响。尽管 S_{MY} 随 h 的增加速度有所下降,但在本文的计算范围内, S_{MY} 的上升势头并未平缓。 h 从 0 增加到 $50\mu\text{m}$, S_{MY} 则从 0MPa 上升到 95MPa,其变化率远高于间距和宽度变化的影响。 h 进一步增加到 $70\mu\text{m}$, S_{MY} 则继续攀升到 104MPa,并无平缓趋势。表明在微坑宽度和间距不变的条件下,微坑深度对界面上 x 、 y 两个方向的残余应力最大值均有显著影响,但仍然是拉应力变化明显

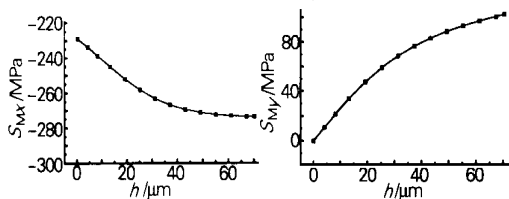


图 5 陶瓷层一侧界面残余应力最大值随 h 变化趋势
Fig. 5 Relationship of the maximum of interfacial residual stresses in topcoat and h

$(2r = 100\mu\text{m}, d = 200\mu\text{m})$

(上接第 14 页)

作为热作模具钢性能数据库的基础,以 5 大类热作模具的失效分析结果为依据,与钢材的性能测试结果进行综合比较分析而得出各类模具的抗力指标为专家意见的主要内容,所建立的热作模具钢选材用材专家系统,信息数据庞大、可靠,专家判据理论及实际依据充分,科学,经几个企业的试用,证明了本专家系统具有使用灵活方便、界面操作简单实用、选材结

果合理有效等特点。

4 结论

对本文所示的无尖点正弦波界面形貌而言,在给定的微结构尺度范围内,界面残余拉应力和压应力的最大值均位于微坑的两端部,微结构尺寸变化对界面残余应力最大值的影响规律为:

(1) 在微坑深度 h 和宽度 $2r$ 不变的条件下,增大微坑间距 d 能显著降低 y 方向残余拉应力最大值,微坑间距 d 超过其坑径的 3 倍以后,相邻微坑间的相互作用可以忽略。

(2) 在微坑深度 h 和间距 d 不变的条件下,微坑宽度 $2r$ 和微坑宽/深比对界面上 y 方向的残余拉应力最大值也有显著影响,当微坑宽度等于其深度时,微坑两端部的拉应力值达到最大。

(3) 在微坑宽度 $2r$ 和间距 d 不变的条件下,微坑深度 h 对界面上 x 、 y 两个方向的残余应力最大值均有显著影响,但仍然是拉应力变化明显高于压应力,间距和宽度的影响更为明显。

总的来说,界面微结构尺寸变化对 y 方向残余应力的影响程度明显高于对 x 方向的影响,而微坑深度 d 的影响又明显高于其它两个参数,因此,微坑的深度必须适度。

参考文献:

- [1] Singh R K, Gilbert D R, Fitz-Gerald J, Lee D G. Surface Composites: Novel Method to Fabricate Adherent Interfaces[J]. Surface Engineering, 1997, 13(5): 389-392.
- [2] Rabiei A, Mumm D R, Hutchinson J W, Schweinfest R, Rühle M, Evans A G. Microstructure, Deformation and Cracking Characteristics of Thermal Spray Ferrous Coatings[J]. Materials Science and Engineering, 1999, 269: 152-165.
- [3] Hsueh C H and Evans A G. Residual Stresses in Metal/Ceramic Bonded Strips[J]. J. Am. Ceram. Soc., 1985, 68(5): 241-248.
- [4] Yang Y S and Na S J. Residual Stresses in Laser Surface Hardening of Large Areas[J]. Surface and Coatings Technology, 1990, 42: 165-174.
- [5] 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.
- [6] 王洪, 张坤, 陈光南. 界面形貌对热障涂层界面残余应力的数值模拟[J]. 金属热处理, 2001, 26(9): 44-46.
- [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.

果合理有效等特点。

参考文献:

- [1] 板野嘉彦. “プラスチック金型材料选择”エキスパートシステム[J]. 型技术, 1989, 4(12): 82-88.
- [2] 板野嘉彦. プラスチック金型材料选择エキスパートシステムにおける金型材料の利用技術[J]. 型技术, 1992, 7(8): 42-43.
- [3] 陈蕴博. 热作模具钢的选择与应用[M]. 北京: 国防工业出版社, 1993.