

热障涂层界面形貌尺寸与残余应力的关系

姚国凤¹, 马红梅¹, 王晓英¹, 罗志久¹, 高雪飞¹, 陈光南²

(1. 吉林大学 机械科学与工程学院, 吉林 长春 130025; 2. 中国科学院 力学研究所, 北京 100080)

摘要: 利用 ANSYS 有限元分析软件对热障涂层中的残余应力进行了模拟分析, 得出了界面形貌尺寸与残余应力之间的关系。模拟结果表明, 热障涂层中的残余应力是界面形貌尺寸的函数。这些结论为提高涂层界面结合强度的热障涂层界面造形提供了理论支持, 也为热障涂层界面的优化提供了指导意见。

关键词: 热障涂层; 残余应力; 界面形貌

中图分类号: TG174 **文献标识码:** A **文章编号:** 0254-6051(2005)10-0043-04

Relation Between Interface Topography Dimension and Residual Stress in Thermal Barrier Coatings

YAO Guo-feng¹, MA Hong-mei¹, WANG Xiao-ying¹, LUO Zhi-jiu¹, GAO Xue-fei¹, CHEN Guang-nan²

(1. College of Mechanical Science and Engineering, Jilin University, Changchun Jilin 130025 China;

2. Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

Abstract: The residual stress in thermal barrier coatings (TBCs) was analyzed in simulation with finite element analysis software ANSYS. The relation between the residual stress and the interface topography dimension was worked out. The result shows that the residual stress in thermal barrier coatings is a function of interface topography parameters. This con-

表 1 图 5 中标示部位球形析出物的成分定量分析结果

Table 1 Compositions of the sphere precipitates at the marked site in Fig. 5

element	图 5a 中标示部位球形				图 5c 中标示部位球形					
	C	Mo	Fe	total	O	Si	Cr	Mn	Fe	total
wt%	18.29	50.45	31.26	100	10.58	0.88	0.86	1.36	86.31	100
at%	58.37	20.17	21.46	100	29.01	1.37	0.73	1.09	67.80	100

性撕裂与脆性断裂混合形式发生。断口分析与上述冲击性能试验结果相吻合。

(2) 热处理制度及毛坯尺寸对于 40CrNiMoA 钢的冲击性能具有显著影响, 在一定条件下, 冲击功随着毛坯尺寸的减小而升高, 表明在热处理过程中提高冷却速度有利于改善钢的冲击性能; 在调质处理过程中, 适当提高回火温度有利于改善钢的冲击性能。

(3) 本文所得 40CrNiMoA 钢的冲击性能低于文献[1]报道值, 其可能的原因有二: 其一是试验钢坯中含有大量球形金属氧化物和碳化物, 这些析出物的存在使钢的冲击性能恶化; 其二是试样在热处理过程中的回火温度略低于文献报道值。

致谢: 南阳二机石油装备(集团)有限公司刘俭同志参加了本文的部分试验工作; 冲击试验得到国家钢铁材料检测中心及清华大学工程力学系付朝华高工、北京工商大学机械自动化学院张力教授的大力协助。

参考文献:

- [1] 孙珍宝, 朱谱藩, 林慧国, 等. 合金钢手册(下册)(第一分册)[M]. 北京: 冶金工业出版社, 1992: 289-293.
- [2] 项程云. 合金结构钢[M]. 北京: 冶金工业出版社, 1999:

201-206.

- [3] Hertzberg R. Deformation and Fracture Mechanics of Engineering Materials(2nd ed.) [M]. New York: Wiley, 1983.
- [4] Menzemer C C, Srivatsan T S, Al-Hajri M, Ortiz R. The impact toughness and tensile properties of 8320 steel[J]. Mater. Sci. Eng., 2000, A289: 198-207.
- [5] Zhang Xinping, Shi Yaowu. How to obtain a complete dependence curve of impact toughness or fracture toughness vs temperature on nuclear pressure vessel steels by using only one Charpy-size specimen[J]. International Journal of Pressure Vessel and Piping, 1996, 65: 187-192.
- [6] Schäfer L. Tensile and impact behavior of the reduced-activation steels OPTIFER and F82H mod[J]. Journal of Nuclear Materials, 2000, 283-287: 707-710.
- [7] Shanmugam P, Pathak S D. Some studies on the impact behavior of banded microalloyed steel[J]. Engineering Fracture Mechanics, 1996, 53(6): 991-1005.
- [8] Kim J T, Kwon H K, Chang H S, Park Y W. Improvement of impact toughness of the SA 508 class 3 steel for nuclear pressure vessel through steel-making and heat-treatment practices[J]. Nuclear Engineering and Design, 1997, 174: 51-58.

clusion provides theoretical supports for the interface sculpting to enhance the interfacial bonding strength, and advices for optimization of interface topography of TBCs.

Key words: thermal barrier coatings; residual stress; interface topography

基于提高发动机的经济性和可靠性的要求,近年来陶瓷材料在发动机燃烧室中的应用和研究得到了广泛重视,热障涂层技术已成为未来发动机热端部件高温防护涂层技术的发展方向。典型的等离子喷涂热障涂层系统是由一个抗氧化的金属结合层和覆盖在其上面的一个多孔的绝热的陶瓷层组成,由于涂层系统热膨胀系数在界面上跃变较大,所以无论在制备过程中还是在热载荷下,将在涂层内部积聚较大的应力,最终导致陶瓷涂层沿界面剥离。因此,如何增强界面的结合强度成为延长热障涂层使用寿命的关键问题。实践表明界面粗糙化是提高界面结合强度的有效措施,也是提高发动机中承受热循环的等离子喷涂热障涂层寿命的有效措施。然而,系统中的残余应力受陶瓷层和结合层界面形貌的影响,当界面是绝对平坦,垂直界面的残余应力 σ_y 是零,而当界面有形貌时,垂直界面的残余拉应力 σ_y 就不再是零了,拉应力可能会导致涂层破裂和剥离。这意味着界面粗糙化在增强界面结合的同时也引进了对界面寿命不利的因素。由于界面形貌可以具有不同的尺寸结构,因此提出了一个关于界面形貌尺寸与残余应力关系的问题。

1 模型描述

首先,通过改变正弦波(图1a)的波长(幅值不变)和幅值(波长不变)来说明曲率的影响;第二,通过对比中线(即界面在无形貌时涂层系统的层间界面)以下正弦波(图1b)模拟的界面形貌、经过光滑处理的中线以下的正弦波形貌以及用无尖点正弦波^[2](图1c)模拟的微坑形貌所对应的陶瓷层中垂直于界面的拉应力 σ_y ,来测试尖点的影响;第三,通过模拟具有不同高度的上半圆(图1d),来测试形貌高度的影响;第四,通过模拟具有相同高度不同间距的上半圆和无尖点正弦波,来测试形貌间距的影响。

作为研究对象的等离子喷涂热障涂层由厚250 μm 的 ZrO_2 陶瓷层和厚100 μm 的Ni-22Cr-10Al-1Y(质量分数,%)结合层构成。基体为单晶镍基超合金

作者简介:姚国凤(1962.09—),男,吉林长岭人,教授,工学博士,主要从事计算结构动力学、激光熔凝加工温度场及残余应力的数值模拟,发表论文30余篇。联系电话:0431-5095804

基金项目:973 国家重大基础研究前期研究专项(2002CCA01200);“985工程”汽车工程科技创新平台

收稿日期:2005-06-13

René N5,其厚度远大于陶瓷层和结合层的厚度,因此计算中可取陶瓷层和结合层作为分析对象,将基体的热畸变作为边界条件^[1]。假设陶瓷层、结合层和基体各层的热力学参数在本数值模拟中为定值,其值^[5]见表1。

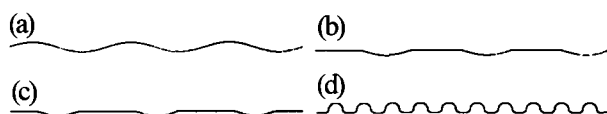


图1 不同形状的界面形貌微观结构模型

(a) 正弦波界面形貌 (b) 中线以下正弦波界面形貌

(c) 无尖点正弦波界面 (d) 确定高度确定间距的上半圆界面形貌

Fig.1 Interface topography microstructure model with various shapes

(a) the sinusoid interface (b) the sinusoid removed peak portion

interface (c) the smooth sinusoid with no sharp corner interface

(d) semicircular top interface with a certain height and a certain interval

表1 陶瓷层、结合层和基体各层的热力学参数

Table 1 The thermodynamics parameters of ceramic coating, bond coating and substrate

参数	陶瓷层	结合层	基体
	ZrO_2	Ni-22Cr-10Al-1Y	(René N5)
弹性模量 E/GPa	50	200	213
泊松比 ν	0.1	0.3	0.25
热膨胀系数 $\text{CTE} \times 10^{-6}/^\circ\text{C}$	10	15.2	14.5

由于垂直于横截面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。在本文计算中以喷涂时基体加热后的控制温度(1150 $^\circ\text{C}$)为热障涂层系统的自由应力状态(即初始状态)^[3],计算模型在室温(25 $^\circ\text{C}$)时的残余应力。计算热残余应力所用的温度改变量(模型承受的热载荷)为(25 $^\circ\text{C}$ - 1150 $^\circ\text{C}$) = -1125 $^\circ\text{C}$ 。

2 数值计算与讨论

本文分析对象是采用等离子喷涂方法制备的热障涂层,计算涂层在制备中产生的残余应力与涂层形貌尺寸之间的关系。用大型有限元分析软件 ANSYS 进行计算,模型实体由两部分构成,上层为陶瓷层实体,下层是结合层实体,中间界面分别用图1中所提及的各种形貌来模拟。以中线以下正弦波为例,其有限元模型如图2所示。

界面形貌尺寸对陶瓷层中垂直界面的拉应力 σ_y 的影响有以下几个方面。

(1) 曲率的影响 首先模拟波长相同幅值不同的正弦波,得出在波长相同的情况下,陶瓷层中垂直于界面的Y方向的拉应力的最大值随着幅值的增大而

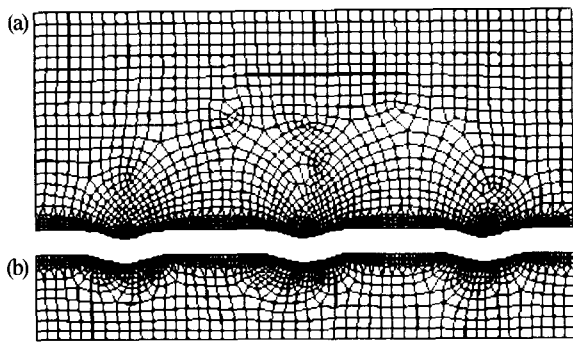


图2 热障涂层有限元模型

(a) 陶瓷层 (b) 结合层

Fig.2 Finite element model of thermal barrier coatings

(a) ceramic coating (b) bond coating

增大,如图3a所示。其次模拟幅值相同波长不同的正弦波,得出在幅值相同的情况下,陶瓷层中垂直于界面的Y方向的拉应力的最大值随着波长的增大而减小,见图3b。无论是波长的缩短(幅值不变)还是幅值的增大(波长不变)都使形貌的曲率增加,因此得出陶瓷层中垂直于界面的Y方向的拉应力的最大值随着曲率的增加而增加。

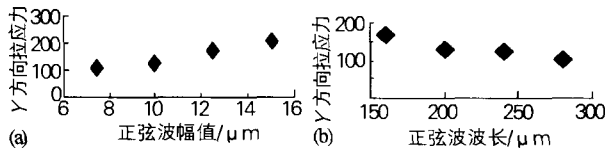


图3 界面形貌曲率对拉应力的影响

(a) 幅值 (b) 波长

Fig.3 Effect of curvature of the interface topography on the tensile stress

(a) amplitude (b) wave length

(2) 形貌尖点的影响 考虑到尖点的影响,比较中线以下正弦波、微坑两端经过光滑处理的中线以下的正弦波以及用无尖点正弦波模拟的微坑形貌分别对应的陶瓷层中垂直界面的拉应力 σ_y ,来测试尖点的影响。在以上3种形貌中陶瓷层中的垂直于界面的拉应力都出现在形貌微坑的两端部,最大值分别为144.878MPa、106.131MPa和84.29MPa,数据之间产生差距的原因是因为中线以下正弦波形貌在微坑的两端部出现了尖点,产生了应力集中(奇异),对于微坑两端经过光滑处理的中线以下正弦波,陶瓷层中垂直于界面的拉应力明显减小,用无尖点正弦波模拟的形貌进一步减小了垂直于界面的拉应力的值。因此,模型证明尖点对应力幅值的影响是显著的。

(3) 形貌高度的影响 通过模拟具有不同高度的上半圆,来测试在曲率相同时形貌高度的影响;形貌的顶部是一个半圆,形貌的高度通过在半圆底部加矩形块来控制,由于矩形块的使用将引入会导致应力集

中(奇异)的尖角,将矩形块底部两侧的尖角进行了光滑处理。通过模拟可知道在曲率相同的情况下,陶瓷层中出现在半圆形貌顶点的垂直于界面的拉应力(即陶瓷层中垂直于界面的拉应力的最大值)随形貌高度的增加而增加,见图4,但形貌的高度对陶瓷层中垂直于界面的拉应力的影响并不显著。

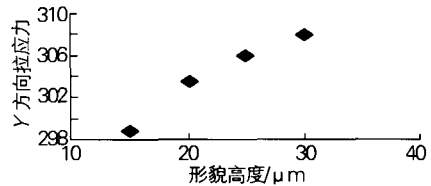


图4 界面高度对拉应力的影响

Fig.4 Effect of the height of topography on the tensile stress

(4) 形貌间距(形貌间相互作用)的影响 通过模拟具有相同高度不同间距的上半圆(代表上凸形貌)和无尖点正弦波(代表下凹形貌),两组模型微观结构来测试形貌间距的影响。在第一组模型中用高度相同间距不同的上半圆和一个单独的上半圆测试上凸形貌间距对陶瓷层中Y方向拉应力的影响。我们得出在上凸半圆模拟的形貌中,Y方向拉应力的最大值随着形貌间距的增大而增大,见图5a,所以,在第一组模型中Y方向拉应力的最大值出现在单独一个孤立的半圆形貌中;在第二组模型中采用深度相同距离不同的无尖点正弦波和一个单独的无尖点正弦波微坑模型测试下凹形貌中间距对陶瓷层中垂直于界面的Y方向拉应力的影响。由此得出在用无尖点正弦波模拟的下凹形貌中,Y方向的拉应力的最大值随着形貌距离的增大而减小,见图5b,所以,Y方向拉应力的最大值出现在间距最小的无尖点正弦波形貌模型中。因此,在上凸形貌中,形貌间的相互作用减小了陶瓷层中垂直界面的Y方向拉应力的值,也就是Y方向拉应力随着形貌间距的增大(形貌间相互作用减小)而增大;在下凹形貌中,形貌间的相互作用增大了陶瓷层中垂直界面的Y方向拉应力的值,也

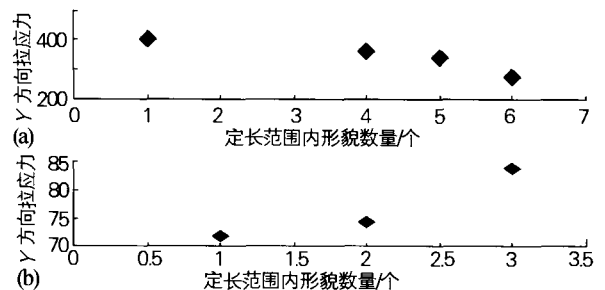


图5 形貌间距对拉应力的影响

(a) 上凸 (b) 下凹

Fig.5 Effect of the interval of topography shapes on the tensile stress

(a) convex (b) concave

NiTi 形状记忆合金加热相变过程的 DSC 研究

谢致薇¹, 白晓军¹, 王国庆¹, 李海江¹, 杨元政¹, 冉 炜²

(1. 广东工业大学 材料与能源学院, 广东 广州 510643; 2. 中山大学 附属第一医院, 广东 广州 510080)

摘要:采用差示扫描量热法研究了时效处理对 NiTi 形状记忆合金加热相变过程的影响规律。结果表明:当时效温度低于 T_0 (特征转折温度) 时, 相变温度 (A_s 和 A_f) 随时效温度的升高而升高; 当时效温度高于 T_0 时, 相变温度随时效温度的升高而下降。对于 A_s , 当时效 15min 时, $T_0 = 500^\circ\text{C}$, 当时效 30min 时, $T_0 = 400^\circ\text{C}$; 对于 A_f , T_0 均为 400°C 。在 300°C 、 400°C 和 500°C 时效 15min, 加热相变过程为 $M \rightarrow R$ 和 $R \rightarrow P$ 两阶段, 在 600°C 和 700°C 时效 15min 时, 加热相变过程为 $M \rightarrow P$ 一阶段; 当时效时间延长至 30min 时, 加热相变过程由 $M \rightarrow R$ 和 $R \rightarrow P$ 两阶段相变过程变为 $M \rightarrow P$ 一阶段。时效温度为 500°C 和 700°C 时, 体积转变率与温度关系曲线的斜率较大。

关键词: NiTi 形状记忆合金; 相变; 差示扫描量热法 (DSC)

中图分类号: TG139. 6; TG111. 5 **文献标识码:** A **文章编号:** 0254-6051(2005)10-0046-04

DSC Analysis of Heating Transformation in NiTi Shape Memory Alloys

XIE Zhi-wei¹, BAI Xiao-jun¹, WANG Guo-qing¹, LI Hai-jiang¹, YANG Yuan-zheng¹, Ran Wei²

(1. Faculty of Materials and Energy Sources, Guangdong University of Technology, Guangzhou Guangdong 510643, China; 2. The First Affiliated Hospital, Sun Yat-Sen University, Guangzhou Guangdong 510080, China)

Abstract: Effects of ageing on heating transformation of NiTi shape memory alloys were investigated by DSC analysis method. The results show that the transformation temperature A_s and A_f increase as the ageing temperature increasing when the ageing temperature is lower than T_0 , while the transformation temperature A_s and A_f decrease as the ageing temperature increasing when the ageing temperature is higher than T_0 . T_0 is related with ageing time: for A_s , T_0 is 500°C when ageing time is 15min, and 400°C with 30min. For A_f , T_0 is always 400°C . Heating transformation of $M \rightarrow R$ and $R \rightarrow P$ occur when the ageing is conducted at 300°C , 400°C and 500°C for 15min, while the transformation of $M \rightarrow P$ occurs as the ageing goes at 600°C and 700°C for 15min. The transformation of $M \rightarrow R$ and $R \rightarrow P$ are replaced by $M \rightarrow P$ as the ageing time increasing to 30min. There is maximum value of $df(P)/dT$ when ageing at 500°C and 700°C .

Key word: NiTi shape memory alloys; transformation; DSC (Differential scanning calorimetry)

作者简介: 谢致薇 (1960. 10—), 女, 博士, 副教授, 主要从事功能材料和薄膜材料的研究工作, 发表论文 10 余篇。联系电话: 020-38458569

基金项目: 南宁市科技开发计划

收稿日期: 2005-04-08

就是 Y 方向拉应力随着形貌间距的增大 (形貌间相互作用减小) 而减小。

3 结论

在数值计算部分采用几组特定的形貌定性地模拟了形貌尺寸对陶瓷层中垂直界面的残余拉应力 σ_y 的影响, 得出了以下结论。

(1) 陶瓷层中垂直于界面的拉应力随着形貌曲率的增大而增大。

(2) 陶瓷层中垂直于界面的拉应力受形貌中的尖角的影响很大, 形貌中应尽量避免引起应力集中 (奇异) 的尖角。

(3) 陶瓷层中垂直于界面的拉应力随着形貌高度的增加而增加, 但受高度的影响并不显著。

1 引言

用于修复口腔畸形的记忆合金矫形器的矫形过程实际上是 NiTi 合金在人体温度作用下的加热相变过程, 其矫形效果与合金的记忆性能, 即加热相变过程有关, 因此, 有必要弄清合金经各种特定热处理后的加热

(4) 形貌间距对陶瓷层中垂直于界面的残余拉应力有影响, 在上凸形貌中, 拉应力随形貌间距的增大而增大; 在下凹形貌中, 拉应力随形貌间距的增大而减小。

参考文献:

- [1] Hsueh C H, Becher P F, Fuller E R, et al. Surface-Roughness Induced Residual Stress in Thermal Barrier Coating: Computer Simulations [J]. Materials Science Forum, 1999, 308-311: 442-449.
- [2] 王 洪, 张 坤, 陈光南. 界面形貌对热障涂层界面残余应力影响的数值模拟 [J]. 金属热处理, 2001, 26(9): 44-46.
- [3] 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, 1977, 12(3): 239-242.