

文章编号：1000-4750(2002)04-118-05

梯度涂层材料中裂纹问题的非均匀元分析

赵希淑，张双寅，吴永礼

(中科院力学所，北京 100080)

摘 要：本文采用非均匀等参有限元的方法研究了薄膜梯度涂层/均匀基材中的界面裂纹问题,并与双材料界面裂纹情况进行了对比计算。研究表明：在均匀基材上采用梯度涂层，与双材料相比可以有效地降低裂尖场应力强度因子；同时还分析了涂层厚度与梯度参数对界面应力强度因子的影响。结果表明：当薄膜厚度大于或等于裂纹长度时，应力强度因子(K_I , K_{II})对其尺度的变化显得不敏感；对梯度参数的影响而言，当材料性能曲线的幂指数 m 大于 1 时，裂尖场的应力强度因子 K_{II} 相对 K_I 很小且基本不随 m 变化，因此裂尖场与均匀材料情况类似；当 m 小于 1 时，应力强度因子 K_{II} 随 m 减小而急剧增大，裂尖场由 K_I 及 K_{II} 控制，断裂趋于混合型。

关键词：非均匀等参元；功能梯度材料；界面裂纹；应力强度因子

中图分类号：O346.1 **文献标识码：**A

1 引言

近年来，随着材料科学与技术的进步以及复合材料设计与制作的迅猛发展，作为复合材料的新世代，功能梯度材料的潜在应用前景已越来越受到人们的普遍关注^[1]。不同于均匀材料和典型的复合材料，功能梯度材料一般由两种物理性质完全不同的材料(例如陶瓷和金属)复合而成，其中组分的含量或颗粒大小沿空间一个或几个方向呈梯度变化，从而使材料具有宏观连续和微观非均匀的特点。实验研究表明^[2]：这种材料只有在低于毫米量级观察时，才能看到材料呈现层状结构，而且层厚不超过 0.2mm，在高于毫米尺度观察时，材料结构基本上为连续分布情况。另外，Delale 和 Erdogan^[3]等也提出了性能连续的材料模型。采用指数形式的材料模型文献^[4]等解析地研究了梯度材料的裂纹问题。关于梯度材料的有限元数值分析方面，有 Williamson 等^[5]以及 Bao 和 Wang^[6]等。目前的有限元分析方法中采用的基本上都是均匀元，这种分析方法需要划分很密的网格才能达到精度要求。

本文在采用非整数幂函数形式的材料模型情况下，用非均匀等参有限元的方法^[7]，数值研究了梯度涂层/均匀基材界面裂纹的应力强度因子 (K_I , K_{II})随涂层厚度及梯度参数的变化情况，并与均匀材料和双材料结果进行了对比。对于梯度材料，非均匀元法有它特殊的优越性，它可以反映材料性能连续变化的特点，比常规元素可以节省单元数。

2 材料性能模型

本文研究的问题为位于梯度涂层/均匀基材间的界面裂纹，如图 1 所示。其中以 Ti-Al 合金为均匀基材，弹性模量 $E_0=260\text{GPa}$ ，并以其中混入陶瓷颗粒作为梯度涂层材料，其性能模型采用垂直于裂纹方向的一维幂函数形式，即

$$E = E_0 + g \left| \frac{y}{H} \right|^m \quad (m > 0) \quad (1)$$

基于以前的研究，泊松比 ν 的变化对应力强度因子的影响不是很重要，因此在介质中均取为 0.3。另外，根据细观力学的简单混合律方法，可得梯度材

收稿日期：2000-12-10；修改日期：2001-02-13

基金项目：国家自然科学基金项目(19772064)

作者简介：赵希淑(1967)，女，山东，博士研究生，从事复合材料研究

张双寅(1938)，男，河北人，研究员，从事固体力学研究

吴永礼(1940)，男，上海人，研究员，从事固体计算力学研究

料性能与其组分性能的关系为：

$$\begin{aligned} E &= E_g V_g(y) + E_m(1 - V_g(y)) \\ &= E_m + (E_g - E_m) V_g(y) \end{aligned} \quad (2)$$

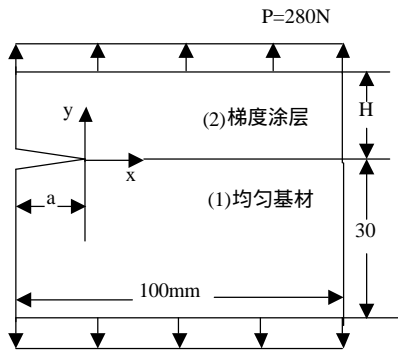


图1 涂层/基材界面裂纹示意图

Fig.1 Schematic diagram of coatings/substrate

其中下标 ‘g’ 和 ‘m’ 分别代表组分颗粒(grain)和 Ti-Al 金属基(matrix)。比较(1)、(2)式可知：幂律变化式中的梯度参数 g 以及 m 分别与混入成分和基材的性能差($E_g - E_m$)、以及组分的体含量分布 $V_g(y)$ 有关，即在基材给定的情况下，可以根据混入颗粒及其体含量分布得到梯度材料的性能；换句话说，细观颗粒成分的性能及体含量分布可以通过宏观梯度参数 g 及 m 表现出来。

下面首先介绍非均匀等参有限元法，详细内容请参考文献[7]。

3 非均匀等参元法

在通常的有限元分析中，应变 e 与单元的节点位移 $d^{(e)}$ 可通过应变矩阵 $B^{(e)}$ 表示为

$$e = B^{(e)} d^{(e)} \quad (3)$$

应力应变关系为

$$s = D^{(e)} e \quad (4)$$

上式中 $D^{(e)}$ 表示材料的弹性矩阵。根据虚功原理，可得

$$\int_W [de]^T s dW - \int_W [dU]^T b dW - \int_{G_i} [dU]^T t ds = 0 \quad (5)$$

其中 b 为体力矢量，这里为零； t 为已知的边界外力矢量。将式 (3)、(4) 代入式(5)，可得(5)式中第一项，即单元的刚度矩阵 $K^{(e)}$

$$K^{(e)} = \int_W [B^{(e)}]^T D^{(e)} B^{(e)} dW \quad (6)$$

对于非均匀元，在每一个单元中，由于不同位置处材料的性能不同，因此考虑到梯度材料的非均匀性，上式中的 $D^{(e)}$ 为与坐标有关的非常数矩阵。

因此应用等参元的高斯积分，(6)式可变为

$$K^{(e)} = \sum_1^n \sum_1^n B^T(p, q) D_c(p, q) B(p, q) \cdot \det J(p, q) w(p) w(q) \quad (7)$$

其中 w 表示高斯点的权函数， $D_c(p, q)$ 为随各个高斯点变化的非常数材料矩阵。本文采用材料模型(1)式将材料的非均匀性分配到每个单元中的各个高斯点(这里数目为 9 个)上来确定 $D_c(p, q)$ 。在边界条件即(5)式中 t 给定后，就可进行非均匀元的数值计算。

4 梯度涂层/均匀基材界面裂纹的数值分析

为了分析薄膜材料中涂层厚度及梯度参数对裂尖场 I、II 型应力强度因子的影响，本文在非均匀元法的基础上分析了如图 1 示的平面中心裂纹问题(利用对称条件只计算了一半)。其中裂尖处的单元取为 1/4 节点奇异元，半裂纹长度 $a=5\text{mm}$ 。计算中采用的单元类型为四边形八节点等参元，单元总数为 868 个，节点总数为 2693 个；加载方式为 I 型模式，大小为 280N。

为了便于与涂层材料进行比较，下面首先在相同的网格划分及加载模式下对均匀材料及双材料裂尖场进行有限元分析。

4.1 均匀材料及双材料的有限元计算

在均匀材料的分析中，材料性能取为涂层中的基材，即 $E_0=260\text{GPa}$ 。关于应力强度因子的计算，本文采用的是外推法。根据文献[8]，可推得

$$\frac{E_0}{(1+n)(c+1)} \sqrt{\frac{p}{2}} \frac{U_q(r, p) - U_q(r, -p)}{\sqrt{r}} \quad (8a)$$

$$= K_I - \sqrt{2p} A_3^{(1)} r$$

$$\frac{E_0}{(1+n)(c+1)} \sqrt{\frac{p}{2}} \frac{U_r(r, p) - U_r(r, -p)}{\sqrt{r}} \quad (8b)$$

$$= K_{II} - \sqrt{2p} A_3^{(2)} r$$

其中 $A_3^{(1)}$ 、 $A_3^{(2)}$ 可参阅弹性力学平面问题裂纹位位移的全场表达式。由于考虑的问题是在裂尖附近，即当 $r \rightarrow 0$ 时，在(8)式中右边包含 $A_3^{(1)}$ 、 $A_3^{(2)}$ 的第二项均趋于零。因此，利用已知的左边项作为函数值、对应的径向坐标 r 值为自变量形成直线的截距即为应力强度因子 K_I 、 K_{II} 。由于在计算中裂纹面上下材料厚度不同，因此 $K_{II} \neq 0$ 。

另外，我们还对双材料裂尖场随材料的变化进行了有限元分析。其中材料 1 的弹性模量 E_1 取为 E_0 ，材料 2 的模量由混入颗粒的性能决定，即：

$E_2 = E_0 + g_i$ (g_i 的值分别取为 $0.5E_0, E_0, 1.5E_0,$ 和 $2E_0$)。根据双材料裂纹尖端位移场分布^[9], 平均裂纹上、

下表面($q = \pm p$)的位移 U_q, U_r , 可得应力强度因子 K_I 及 K_{II} 的近似计算公式如下:

$$K_I = \frac{\sqrt{2p} ch(pe) m_1 U_q|_{q=p} - m_2 U_q|_{q=-p} - 2e(m_1 U_r|_{q=p} - m_2 U_r|_{q=-p})}{c+1 \sqrt{r}} \tag{9a}$$

$$K_{II} = \frac{m_1 \sqrt{2p} ch(pe) m_1 U_r|_{q=p} - m_2 U_r|_{q=-p} + 2e(m_1 U_q|_{q=p} - m_2 U_q|_{q=-p})}{c+1 \sqrt{r}} \tag{9b}$$

其中, e 是与 Dundurs 参数有关的振荡因子, 等于 $\frac{1}{2p} \ln \frac{m_2 c + m_1}{m_1 c + m_2}$; m_i 指材料 i 的剪切模量; c 是与泊松比有关的弹性常数, 在平面应力问题中为 $\frac{3-n}{1+n}$, 平面应变问题中为 $3-4n$ 。上述计算结果与对应的涂层/基材裂纹情况进行了比较(见后)。

4.2 梯度涂层界面裂纹的应力强度因子计算

a) 涂层厚度的变化:

首先在梯度给定即 $m=0.5, g=E_0/2$ 的条件下, 本文对四种涂层厚度 H 与半裂纹长度 a 的比为 0.5, 1., 2., 3.4 的情况, 分别进行了非均匀元分析。其中应力强度因子(K_I, K_{II})通过上述外推法计算得到, 结果分别如图 2 中(a)、(b)所示, 另外为了便于比较, 图中还绘出了均匀材料及双材料的对应结果。由图中可看出: 当涂层厚度达到或大于裂纹长度即 $H \geq 2a$ 时, 不论是均匀材料、双材料, 还是梯度涂层材料, 应力强度因子 K_I, K_{II} 对厚度的尺寸变化均趋于平缓, 即当 $H \geq 2a$ 时应力强度因子对薄膜厚度的变化不敏感。另外对涂层材料来说 K_{II} 相对 K_I 很小(这里 $m=0.5, g=E_0/2$), 类似于均匀材料的结果。

b) 梯度参数的影响:

在涂层厚度给定即 $H=2a$ 的情况下, 本文数值分析了 I、II 型应力强度因子分别随梯度参数 g 及 m 的变化情况。

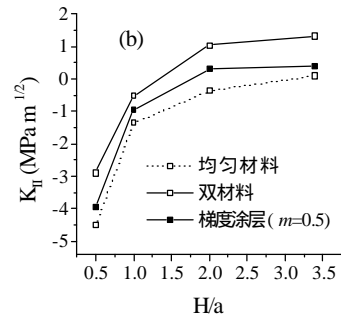
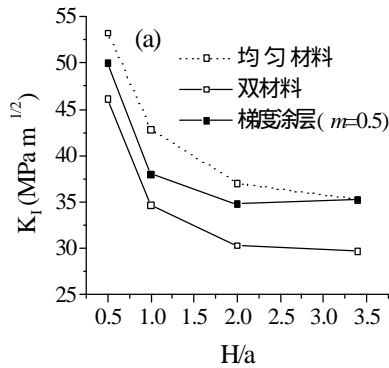


图 2 应力强度因子 K_I 和 K_{II} 随涂层厚度与半裂纹长度比 H/a 的变化曲线

Fig.2 The variations of K_I and K_{II} with the ratio of coatings' thickness and half length of crack (H/a)

首先在 $m=1/2$ 的条件下, 分别取 g 为 $0.5E_0, E_0, 1.5E_0,$ 及 $2E_0$ 四种情况进行了非均匀元分析。计算结果 K_I, K_{II} 分别如图 3 中(a)、(b)所示; 为了比较, 图中还绘出了上述 1) 节中双材料界面裂纹的对应结果。

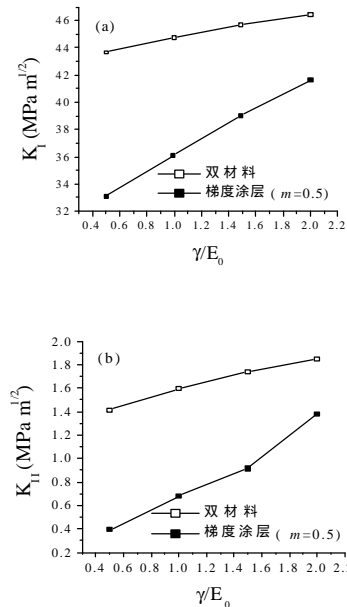


图 3 应力强度因子 K_I 及 K_{II} 随梯度参数 g/E_0 的变化曲线

Fig.3 The variations of K_I and K_{II} with the gradient parameter g/E_0

由图3中结果可看出:涂层/基材的应力强度因子 K_I 、 K_{II} 比双材料对应情况明显降低,即采用梯度涂层的确可以缓解明显界面断裂造成的失效。同时还可看出:随 g 的增长,涂层/基材的 K_I 、 K_{II} 比双材料增长得快。因此可推断出:当 g 很大时,涂层/基材的应力强度因子 K_I 、 K_{II} 会趋于双材料的结果,即裂尖场分布类似于双材料。

另外,在梯度参数 g 给定即取值分别为 E_0 和 $0.5E_0$ 两种条件下,本文分别选取 $m=0.25, 0.5, 1.0, 2.0$ 的情况对应应力强度因子进行了非均匀元计算。结果分别如图4中(a)、(b)所示。从图中可看出:在 m 小于1时,应力强度因子 K_I 随 m 增加而增加, K_{II} 则随 m 增加而很快减小,二者都随 g 的增加而增大;当 m 大于或等于1后,应力强度因子 K_I 对 g 的变化就不敏感了, K_{II} 则随 m 的变化而趋于平缓,且对小的 g 值近似为零。由此可推断出:当 $m>1$ 时,裂尖场应力强度因子主要由 K_I 控制, K_{II} 相对很小,因此基本上类似于均匀材料的结果。而当 $m<1$,即梯度涂层材料的性能曲线呈上凸形式时,裂尖场的应力强度因子呈混合型,并且对涂层中组分性能的变化很敏感。

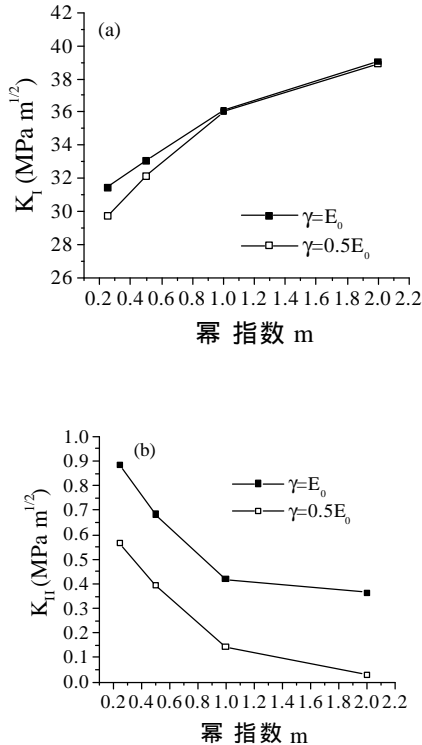


图4 应力强度因子 K_I 及 K_{II} 随梯度参数 m 的变化曲线

Fig.4 The variations of K_I and K_{II} with the power m of material property

5 讨论

在采用非整数幂函数变化的性能模型情形下,根据非均匀等参有限元方法,本文考察了梯度涂层/均匀基材界面裂纹的应力强度因子(K_I 及 K_{II})受薄膜厚度及梯度参数影响的情况,并对比计算了均匀材料及双材料情况。结果得出:采用梯度涂层(消除明显界面)时,与双材料相比可以明显地降低应力强度因子(K_I 及 K_{II});另外,当涂层厚度大于或等于裂纹长度时,应力强度因子(K_I 及 K_{II})对薄膜厚度的变化就不敏感了。对梯度参数而言:当幂指数 $m>1$ 且参数 g 不大(约为 $0.5E_0$)时,即组分的体含量分布呈上凸趋势时,由于 K_{II} 相对 K_I 来说很小,因此裂尖场基本上只由 K_I 决定,此时结果与均匀材料相似,这与采用指数函数模型的解析结论一致^[4];当幂指数 $m<1$ 时, K_{II} 相对 K_I 来说不可忽略,即裂尖场分布由 K_I 、 K_{II} 控制,成为混合型;另外,当梯度参数 g 很大时,裂尖场也会趋于双材料的结果。

目前由于功能梯度材料的可设计性,故其制作技术仍在不断的探索之中。希望本文的工作能在这种材料的优化设计方面提供一些参考。

参考文献:

- [1] 赵军,艾兴,张建华.功能梯度材料的发展与展望[J].材料导报,1997;11(4):57-60.
Zhao Jun, Ai Xing, Zhang Jianhua. The development and perspective of FGMs [J]. Materials Review, 1997, 11(4):57-60.
- [2] Jung Y-G, et al. Residual-stress and thermal-properties of Ir/Metal FGMs fabricated by hot pressing[J]. J. Mater. Sci., 1997, 32: 3841-3850.
- [3] Delale F, Erdogan F On the mechanical modeling of the interfacial region in bonded half-planes[J]. J. Appl. Mech., 1988, 55: 317-324.
- [4] Jin Z-H & Noda N Crack-tip singular fields in nonhomogeneous materials[J]. J Appl. Mech., 1994, 61: 738-740.
- [5] Williamson T L, et al. Finite element analysis of thermal residual stresses at graded ceramic-metal interfaces[J]. Part I. Model description and geometrical effects. J. Appl. Phys., 1993, 74: 1310-1320.
- [6] Bao G & Wang L Multiple cracking in functionally graded ceramic/metal coatings[J]. Int. J. Solids Structures, 1995; 32(19): 2853-2871.

- [7] Zhang S Y & Leech C M Use of inhomogeneous finite element for the prediction of stress in rope terminations[J]. Engineering Computations, 1985, 2(1): 55-62.
- [8] Xu Ji-lin & Wu Yong-li. The singular isoparametric elements for the calculation of elastic stress intensity factors[J]. Acta Mechanica Solida Sinica, 1983, 2:258-263.
- [9] Williams M L The stresses around a fault or crack in dissimilar media[J]. Bulletin of the Seismological Society of America, 1959, 49: 199-204.

AN ANALYSIS OF A CRACK IN FUNCTIONALLY GRADIENT COATINGS BY INHOMOGENEOUS FINITE ELEMENT

ZHAO Xi-shu , ZHANG Shuang-yin , WU Yong-li

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

Abstract: In the paper, an inhomogeneous isoparametric finite element method is employed to investigate an interfacial crack between the gradient coatings and homogeneous substrate, as well as that of bimetals for comparison. It turns out that the stress intensity factors (SIFs) can be effectively reduced in the gradient coatings than in bimetals. In addition, the influences of coatings' thickness and gradient parameter on the SIFs are also studied in detail. The results indicate that when the thickness of coatings is greater or equal to the length of crack, the SIFs are insensitive to the variation of coatings' thickness. Concerning the influence of the gradient parameter, for the power index $m > 1$, the SIF K_{II} , which is very small as compared to K_I , keeps virtually unchanged with variation of m , and the field near the crack-tip is similar to that of homogeneous materials. Whereas for $m < 1$, the SIF K_{II} is sharply increased with the decrease of m , and the crack-tip field is obviously governed by K_I and K_{II} , suggesting that the fracture is mixed mode.

Key words: inhomogeneous isoparametric element; functionally gradient materials; interfacial crack; the stress intensity factors