

热震作用下 YSZ 活性扩散障的非线性有限元分析

胡 祯¹, 李争显^{1,2,3}, 刘林涛¹, 李江涛³

(1. 西安建筑科技大学, 陕西 西安 710055)

(2. 西北有色金属研究院, 陕西 西安 710016)

(3. 东北大学, 辽宁 沈阳 110819)

摘要: 采用有限元法研究, 经历多次热震后, NiCrAlY 涂层/YSZ 扩散障/Ren é N5 基体内应力分布及演变和波峰值对应力的影响。研究发现, 75 次热震后模型外边缘附近及氧化铝层中存在较高的剪切应力和拉应力, 裂纹会在该处萌生及扩展。各处的应力值随热震次数的增加均有所增大; 随波峰峰值的增加, 氧化铝层内的应力值变化最大, 其中当波峰峰值(A)为 3 μm 时, 扩散障结构较优。

关键字: YSZ 活性扩散障; 热震; 有限元分析

中图分类号: TG174.444

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2016)11-2851-06

热障涂层系统(TBCs)在先进航空发动机高温防护方面已取得良好的效果, 并成为关键技术之一。但在长时间的高温服役过程中, 涂层与基体间的元素会发生互扩散现象, 导致涂层性能的退化及基体机械性能的降低^[1-4]。为了抑制有害元素的互扩散, 在涂层与基体之间添加扩散障是一种有效的方法^[5-8]。

根据王福会课题组^[9]所提的活性扩散障概念, 西北有色金属研究院刘林涛等^[10]对 N5/ZrO₂/NiCrAl 活性扩散障涂层体系进行了研究。结果表明, 900 °C/4 h 真空热处理后, 由于氧化物分解压的不同, Al 元素会与 ZrO₂ 反应形成 N5/Al₂O₃/富 Zr 层/Al₂O₃/NiCrAl 的结构体系并且原位生成的 Al₂O₃ 层具有良好的阻扩散性及界面结合性。900 °C 长时间恒温氧化测试结果发现, 100 h 后扩散障涂层体系仍保持稳定。

另有研究表明, 虽然扩散障可以有效地抑制元素的互扩散, 但却增加了界面数量, 造成界面的不稳定及不匹配, 限制其实际应用^[11]。此外, 活性扩散障还存在陶瓷/金属/陶瓷界面, 在温度快速变化过程中, 由于异种材料间热膨胀系数等物理性能的差别而产生的热应力^[12]对涂层的寿命也有很大的影响^[13]。

本研究采用有限元法主要研究经历多次热震后, NiCrAlY 涂层/YSZ 扩散障/Ren é N5 基体内的应力分布及演变和波峰值对应力的影响。

1 分析模型

1.1 有限元模型

采用 ABAQUS 软件, 建立 Ren é N5/Al₂O₃/富 Zr 层/Al₂O₃/NiCrAlY 模型。假设整个扩散障涂层体系内部均匀、无缺陷。假定初始模型为无初始残余应力状态。不考虑元素的扩散及材料的高温蠕变现象。

模型尺寸如图 1 所示, 其中粘结层 h_1 为 16.5 μm ; Al₂O₃ 层 h_2 , h_4 均为 1 μm ; 富 Zr 层 h_3 为 5 μm ; 基体 h_5 为 145 μm ; 模型宽度 x 为 250 μm 。

YSZ 活性扩散障为该研究的重点, 故对 Al₂O₃/富 Zr 层/Al₂O₃ 各层进行了精细划分, 同时为了减少计算

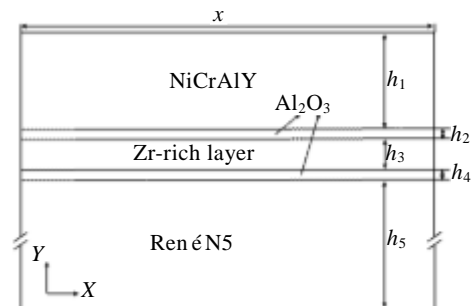


图 1 有限元分析模型尺寸

Fig.1 Size diagram of finite element models

收稿日期: 2015-11-15

基金项目: 国家重点基础研究发展计划 (“973” 计划) (2012CB625102, 2012CB625105); 博士研究生创新基金和科技部国际合作项目 (2014DFR50540)

作者简介: 胡 祯, 女, 1991 年生, 硕士生, 西安建筑科技大学冶金工程学院, 陕西 西安 710055, 电话: 029-86231077, E-mail: 124615862@qq.com

时间, 对 N5 基体和 NiCrAlY 涂层进行了较为粗糙的网格划分。温度场计算和耦合应力场计算分别采用 DC2D4 和 CPS4R 单元类型, 并且限制模型右边界 X 方向(径向)及模型底边 Y 方向(厚度方向, 轴向)的位移。计算结果中的 S11 应力为平行于 X 轴方向的应力, 其正值为径向拉应力, 负值为径向压应力。S22 为平行于 Y 轴方向的应力, 其正值为轴向拉应力, 负值为轴向压应力。

1.2 基体及涂层材料的性能参数

选用文献[14-17]中提供的材料参数, 见表 1。表 1 列出了 NiCrAlY, Al₂O₃, Ren éN5 在 20 及 1200 °C 时的热力学性能参数, 在分析时对其在 20 ~ 1200 °C 之间的热力学性能参数进行了线性内插。另外, 由于未得到 Zr 材料在高温环境下的热力学性能参数, 故假定 Zr 材料在室温及高温环境下的热力学性能参数值恒定。

1.3 温度加载

热震温度加载方式设置为: 120 s 从 25 °C 升高至 900 °C, 然后保温 300 s, 最后 30 s 从 900 °C 下降到 25 °C, 此为 1 个循环周期。如图 2 所示。

2 结果与讨论

2.1 应力随热震次数的变化

图 3 为经历 75 次热震后, 室温下模型外边缘及内部的局部应力分布云图, 图中颜色较深处为应力较大

区域。图 3a 为外边缘处 S11 分布云图。从图中可明显观察到应力较大处位于 NiCrAlY 涂层/Al₂O₃ 处, 以涂层内的单元 27 及 Al₂O₃ 内的单元 2587 为研究对象, 绘制其在热震过程中的应力演变曲线图, 如图 4 所示。由图 4 可知, 由于材料的热胀冷缩, 涂层及氧化铝内的剪切应力随温度的升降呈负正交替变化。在首次升降温过程中, 单元 27 内的 S11 从 -250 MPa 减小到 -180 MPa 后又升至 250 MPa; 单元 2587 内的 S11 从 0 MPa 升至 620 MPa 后又变化至 -210 MPa。随热震次数的增加, 单元 27 处高温时刻的 S11 应力从 -180 MPa 减小到 -170 MPa, 而室温时刻该处的 S11 应力从 250 MPa 增到 320 MPa; 单元 2587 处高温时刻的 S11 应力从 620 MPa 减小到 500 MPa, 而室温时刻该处的 S11 应力从 -220 MPa 增大到 -430 MPa。

温度改变时, 各层材料由于热工性能和力学性能的不同以及彼此之间的相互约束, 使其不能自由膨胀而产生应力。热应力随热震次数的增加而变化的主要原因是部分金属材料进入了屈服阶段, 产生了塑性变形。陶瓷与金属相比其塑韧性较差, Al₂O₃ 在高温下的抗拉强度为 220 MPa^[18]。对比模拟结果可知, 在热震初期的高温时刻 Al₂O₃ 内的径向拉应力就已经远远高出其抗拉强度, 说明在热震高温时刻陶瓷内就有微裂纹形成, 在后续的升降过程中裂纹将不断扩展。其次, 在 NiCrAlY 涂层/Al₂O₃ 的界面处还存在着剪切应力, Z. H. Xu^[19]等

表 1 基体及涂层材料性能参数

Table 1 Properties of the substrate and coating materials

Material	Temperature/ °C	Density/ kg m ⁻³	Thermal conductivity/ W (m K) ⁻¹	Thermal expansion coefficient/ × 10 ⁻⁶ °C ⁻¹	Specific heat/ J (kg K) ⁻¹	Young's modulus/GPa	Passion's ratio	Yield strength/ MPa
NiCrAlY ^[14,15]	20~1200	7380	5.8~17	13.6~17.6	450	110~200	0.3~0.33	114~426
Al ₂ O ₃ ^[14,15]	20~1200	3984	4~10	8~9.6	755	320~400	0.23~0.25	1000~10000
Zr ^[16]	20	6511	22.7	5.8	270	88	0.3	-
Ren éN5 ^[17]	20~1200	8780	69~88	14.8~18	440	120~220	0.31~0.35	800

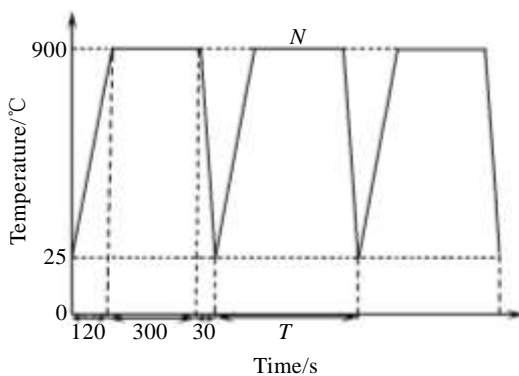


图 2 热震温度变化示意图

Fig.2 Temperature changes of thermal shock

人的研究结果测得 EB-PVD 涂层界面抗剪切强度为 30 MPa 左右。由此可知, 界面处也会有裂纹形成。

图 3b 为外边缘处 S22 分布云图。从图中可观察到左侧外边缘的界面处存在拉应力集中区, 特别是在 NiCrAlY 涂层/Al₂O₃ 和 Al₂O₃/N5 基体的界面处, 远离外边缘处其 S22 值有明显下降。以 NiCrAlY 涂层/Al₂O₃ 界面应力最大处的单元 253.节点 1 和 Al₂O₃/N5 基体界面应力最大处的单元 2728.节点 6 (五角星标记处) 为研究对象, 绘制其在热震过程中的应力演变曲线图, 如图 5 所示。从图中观察到这 2 处的应力随温度的升降亦呈负正交替变化。在首次升降温过程中, 节点 1 内的 S22 从 -200 MPa 减小到 -175 MPa 后又升至

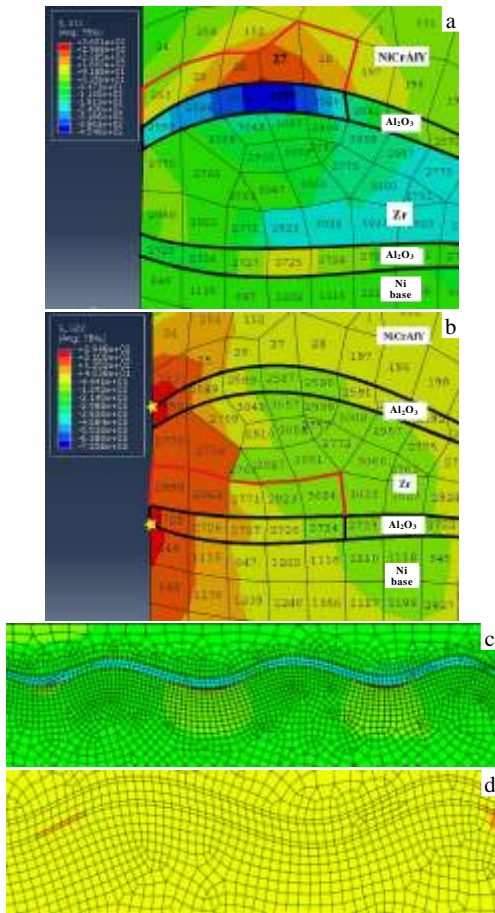


图 3 热震 75 次局部应力分布云图

Fig.3 Stress distribution of model after 75-times thermal shock: (a) S11, (b) S22, and (c, d) the simulation

260 MPa; 节点 6 内的 S22 从-150 MPa 升至-110 MPa 后又变化至 240 MPa。随热震次数的增加, 节点 1 处高温时刻的 S22 应力从-175 MPa 减小到-165 MPa, 而室温时刻该处的 S22 应力从 260 MPa 增到 295 MPa; 节点 6 处高温时刻的 S22 应力基本保持在-100 MPa, 而室温时刻该处的 S22 应力从 240 MPa 增到 250 MPa 后又降回 240 MPa。耿瑞等人^[20]研究结果显示 $ZrO_2/Al_2O_3/NiCrAlY$ 界面的抗拉强度为 (28 ± 5) MPa。S. Asghari 和 M. Salimi^[21]的研究结果显示 BC-TGO 界面裂纹形成及扩展的驱动力为残余拉应力。说明在轴向拉应力的作用下裂纹会优先在界面处形成及扩展。

除边缘处存在应力集中区外, 模型内部 Al_2O_3 层的波峰(波谷)处也存在一定程度的应力集中, 如图 3c 和图 3d 模拟结果所示。其中 $Zr/Al_2O_3/N5$ 基体处的 Al_2O_3 波峰处存在较高的应力值, 故选取 Zr/Al_2O_3 处的界面作为研究路径 1, 分析 75 次热震后室温下在该路径 1 处的应力分布, 结果如图 6 所示。图 6 中 (I), (II) 的横坐标为路径 1 上各节点距左边缘的距离,

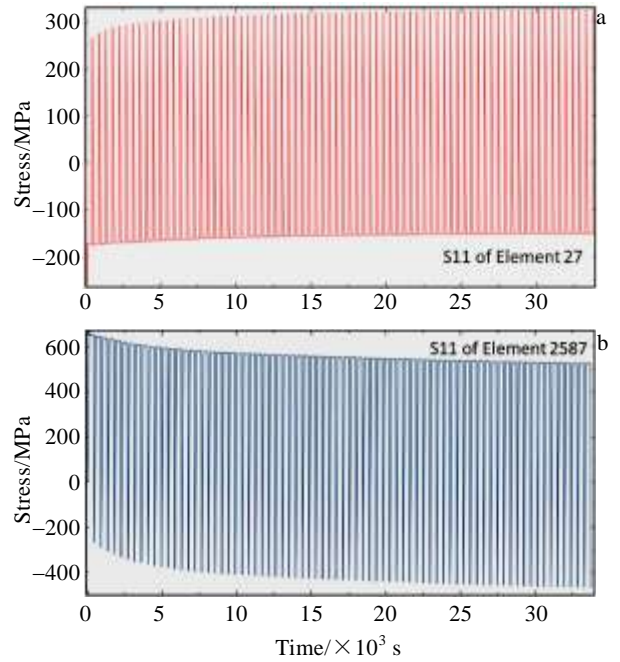


图 4 75 次热震后单元 27 及单元 2587 的 S11 应力变化图
Fig.4 S11 stresses of element 27 (a) and element 2587 (b) after 75-times thermal shock

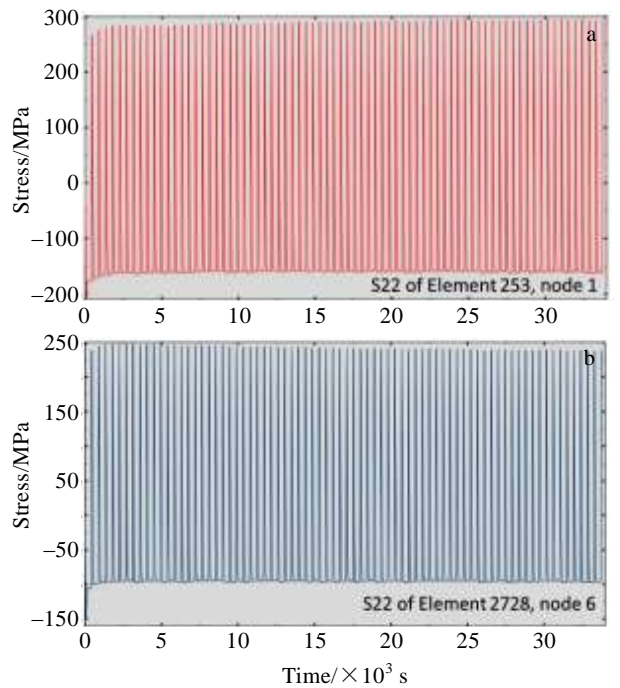


图 5 75 次热震后单元 253 节点 1 及单元 2728 节点 6 的 S22 应力变化图
Fig.5 S22 stresses of element 253 node 1 (a) and element 2728 node 6 (b) after 75-times thermal shock

纵坐标为应力值。模拟云图显示 Zr 层内的 S11 应力为负值, 而 Al_2O_3 层内的 S11 有正有负, 相应的从图 6

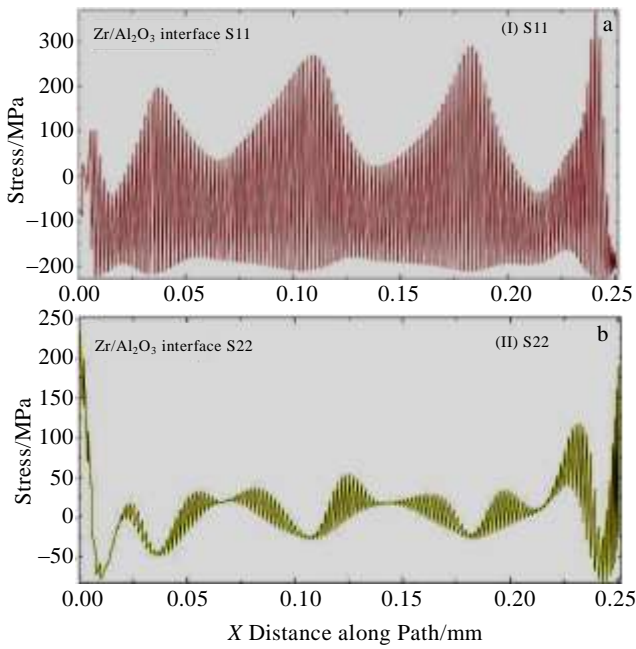


图 6 Zr/Al₂O₃ 曲面界面的应力分布图

Fig.6 Stress distribution at Zr/Al₂O₃ interface: (a) (I) S11 and (b) (II) S22

中 (I) 可知 Al₂O₃ 层从波峰到波谷, 其应力值在 350~ -40 MPa 之间变化且峰值大小对其应力值也有一定的影响。而 Zr 层内的应力随峰值的变化较小, 基本在 -200 MPa 上下波动。图 6 中 (II) 为路径 1 上的 S22 应力分布图。从图中可以看出波峰处的 S22 在 -25 MPa 左右, 波谷层的 S22 基本为 0 MPa, 而脊处的 S22 基本在 ±25 ~ ±50 MPa 之间波动。上述结果说明, 在涂层内部亦存在剪切应力和拉应力, 残余剪切力易导致涂层的崩离而残余拉应力会使涂层剥落。同时, 氧化铝层的形貌奇异使涂层内出现较大的应力波动, 这更易造成裂纹在波峰及脊处形成。

2.2 波峰峰值对应力的影响

建立了不同波峰峰值的模型, 同样以路径 1 为研究对象, 图 7 为经 75 次热震后室温下 Zr 层和 Al₂O₃ 层波峰 (波谷) 处最大剪切应力值随峰值增加的变化图。横坐标为峰值大小, 从 0 增加到 11 μm, 纵坐标为 S11 应力值, 图中的 4 条曲线从上到下依次为 Al₂O₃ 层波峰处、Al₂O₃ 层波谷处、Zr 层波谷处、Zr 层波峰处的最大 S11 值随波峰变化的曲线。从图中可看出, 随峰值从 0~11 μm, Al₂O₃ 层波峰处的应力值从 150 MPa 增至 400 MPa, 波谷处的应力值从 150 MPa 变至 -50 MPa; 而 Zr 层波谷处的应力值从 -200 MPa 减小到 -175 MPa, 波峰处的应力值从 -200 MPa 增加到 -225 MPa。峰值变化对 Al₂O₃ 层内的应力有很大的影响, 随峰值的增大 Al₂O₃ 层内的应力波动值增大。较大的

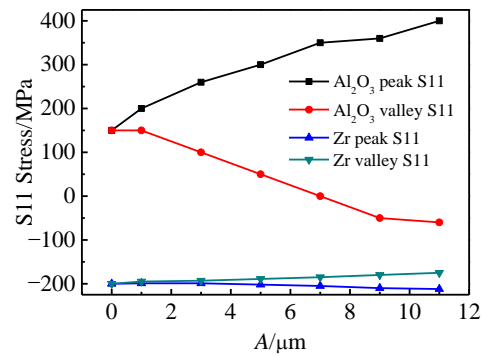


图 7 曲面 S11 应力-峰值 A 曲线图

Fig.7 Diagram of peak value versus S11 stress

应力波动会增大 Al₂O₃ 层内的不稳定性, 因此应选取较小的波峰值。

峰值为 0 μm, 即绝对平面在实际中很难实现。由图 7 结果可知, 峰值 A 的增大导致氧化铝层波峰波谷间的应力差增大。当 A 为 1~3 μm 时, 氧化铝波峰到波谷的应力变化相对较小, 为 50 ~ 150 MPa。以 A=1 μm 和 A=3 μm 为研究对象, 进一步研究两者在路径 1 上的 S22 应力分布, 结果如图 8 所示。A=1 μm 时, 距离外边缘 50~250 μm 区域的 S22 基本为 0 MPa; A=3 μm 时, 距离外边缘 50~250 μm 的范围内, 特别是在波峰与波谷间的脊处出现明显的应力波动, 其值为 0~-25 MPa。从涂层/基体间结合力的角度而言, 表面

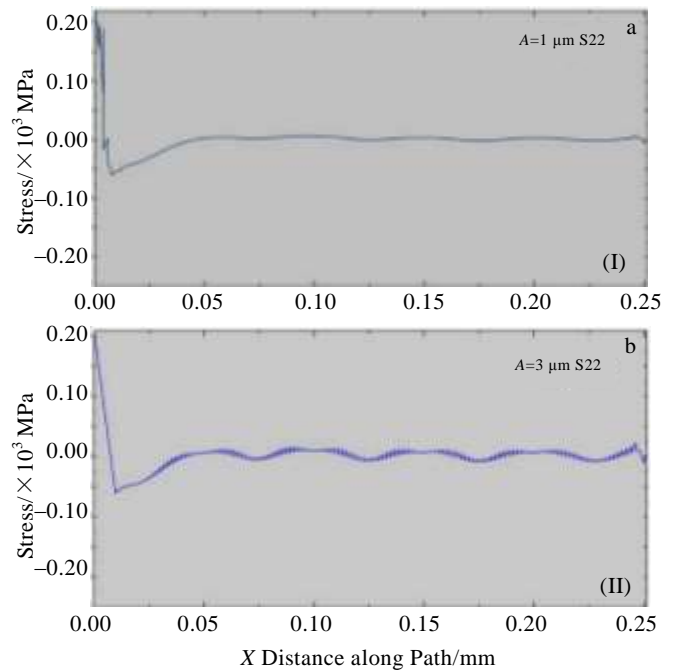


图 8 不同峰值下 Zr/Al₂O₃ 界面的 S22 应力分布图

Fig.8 S22 at Zr/Al₂O₃ interface with different peak values:

(a) A=1 μm, S22 and (b) A=3 μm, S22

过于平滑的基体不利于涂层/基体界面结合力的提高;但从抗热震性的角度而言,界面起伏过大会导致氧化铝层局部较高的应力集中。从图 8 的结果来看,波峰峰值 $A=3\ \mu\text{m}$ 为较优的界面形貌,一方面具有一定的界面起伏,一定程度上减小界面处横向裂纹的扩展速率;另一方面,脊处存在的压应力可减缓氧化铝层内裂纹的扩展。王洪^[22]等人研究发现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,其中正弦形微坑界面明显优于矩形微坑界面,且光滑正弦形微坑界面更优于有尖点正弦形界面。Si Kyaw^[23]等人研究发现尖锐的基体表面比平坦区域更易造成裂纹扩展并加速涂层的剥落。K. Chan^[24]等人通过解析模型预测得具有小曲率半径的基体表面会降低涂层的寿命。

3 结 论

1) 75 次热震后,模型外边缘附近及氧化铝层中存在较高的剪切应力和拉应力,裂纹会在该处萌生及扩展。

2) 随热震次数的增加,各处的应力值均有不同程度的增大;随波峰峰值的增加,氧化铝层内的应力值变化最大。

3) 当波峰值为 $3\ \mu\text{m}$ 时,扩散障结构较优。因为其具有一定的界面起伏,一定程度上减小界面处横向裂纹的扩展速率。另一方面,此时脊处存在的压应力可减缓氧化铝层内裂纹的扩展。

参考文献 References

- [1] Padture N P, Gell M, Jordan E H. *Science*[J], 2002, 296: 280
- [2] Rajendran R. *Engineering Failure Analysis*[J], 2012, 26(12): 355
- [3] Peng Hui, Guo Hongbo, Yao Rui *et al.* *Vacuum*[J], 2010(5), 85: 627
- [4] Zheng Lei(郑 蕾), Guo Hongbo(郭洪波), Guo Lei(郭 磊) *et al.* *Journal of Aeronautical Materials*(航空材料学报)[J], 2012, 32(6): 14
- [5] Brian Gleeson. *Journal of Propulsion and Power*[J], 2012, 22(2): 375
- [6] Zhou Xin, Xu Zhenhua, Mu Rende *et al.* *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2014, 591(1): 41
- [7] Li W Z, Li Y Q, Wang Q M *et al.* *Corrosion Science*[J], 2010, 52(2): 1753
- [8] Xu Zhenhua, Mu Rende, He Limin *et al.* *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2008, 466(1-2): 471
- [9] Guo Cean, Wang Wen, Cheng Yuxian *et al.* *Corrosion Science* [J], 2015, 94: 122
- [10] Liu Lintao(刘林涛), Li Zhengxian(李争显), Hua Yunfeng(华云峰) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2014, 43(11): 2708
- [11] Cai Yan(蔡 妍), Yi Jun(易 军), Lu Feng(陆 峰) *et al.* *Materials Engineering*(材料工程)[J], 2011(9): 92
- [12] Evans A G, Mumm D R, Hutchinson J W *et al.* *Prog Mater Sci*[J], 2001, 46(5): 505
- [13] Eriksson Robert, Sjöström Sören, Brodin Håkan *et al.* *Surface and Coatings Technology*[J], 2013, 236(24): 230
- [14] Zhou Y C, Hashida T. *International Journal of Fatigue*[J], 2002, 24(2-4): 407
- [15] Mao W G, Zhou Y C, Yu X H. *Mechanics of Materials*[J], 2006, 38(11): 1118
- [16] Hu Zhen(胡 祯), Li Zhengxian(李争显), Liu Lintao(刘林涛) *et al.* *China Surface Engineering*(中国表面工程)[J], 2015, 28(5): 69
- [17] Yang L, Lin Q X, Zhou Y C *et al.* *J Mater Sci Technol*[J], 2014, 30(4): 371
- [18] McLean A, Hartsock D. *Engineered Materials Handbook, Ceramics and Glasses Chardon*[M]. Ohio: ASM International, 1991: 676
- [19] Xu Z H, Yang Y C, Huang P *et al.* *Acta Materialia*[J], 2010, 58(18): 5972
- [20] Di Rui(耿 瑞), Zhou Baizhuo(周柏卓), Qi Hongyu(齐红宇) *et al.* *Journal of Aerospace Power*(航空动力学报)[J], 2003, 18(6): 50
- [21] Asghari S, Salimi M. *Surface and Coatings Technology*[J], 2010, 205(7): 2042
- [22] Wang Hong(王 洪), Zhang Kun(张 坤), Chen Guangnan(陈光南). *Heat Treatment of Metals*(金属热处理)[J], 2001, 26(9): 43
- [23] Kyaw Si, Jones Arthur, Hyde Tom. *Engineering Failure Analysis*[J], 2013, 27(1): 150
- [24] Chan K, Cheruvu S, Viswanathan R. *Proceedings of ASME Turbo Expo*[C]. Atlanta: ASME, 2003

Nonlinear Finite Element Simulation of Stress Distribution in YSZ Active Diffusion Barrier Coating System under Thermal Shock

Hu Zhen¹, Li Zhengxian^{1,2,3}, Liu Lintao¹, Li Jiangtao³

(1. Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an 710055, China)

(2. Northwest Institute for Nonferrous Metal Research, Xi'an 710016, China)

(3. Northeastern University, Shenyang 110819, China)

Abstract: The stress distribution and evolution of NiCrAlY coatings/YSZ diffusion barrier/ René N5 substrate after repeated thermal shock were studied using a finite element method. The effect of peak value on stress was also investigated. The results show that after 75 times-thermal shock, higher shear and tensile stresses exist in the outer edge and the alumina layer, where cracks are easier to initiate and propagate. With the increasing number of thermal shock, the stress in YSZ active diffusion barrier coating system increases. Moreover, the peak stress increases in the alumina layer, and the optimum peak value (A) is 3 μm .

Key words: YSZ active diffusion barrier coating system; thermal shock; finite element analysis

Corresponding author: Li Zhengxian, Ph. D., Professor, Center of Corrosion and Protection, Northwest Institute for Nonferrous Metal Research, Xi'an 710016, P. R. China, Tel: 0086-29-86231077, E-mail: lizx@c-nin.com