

文章编号: 1000-8055(2010)05-1085-07

等离子热障涂层失效机理的 数值分析研究

胡浩炬¹, 张建宇¹, 杨晓光², 李志永¹, 费斌军¹

(1. 北京航空航天大学 航空科学与工程学院, 北京 100191;

2. 北京航空航天大学 能源与动力工程学院, 北京 100191)

摘 要: 针对带等离子喷涂热障陶瓷涂层的圆筒金属基体结构在典型热循环载荷作用条件下的力学响应进行了数值计算, 基于陶瓷层中的应力结果对陶瓷层剥落失效机理展开了分析. 计算时对陶瓷层材料分别按理想线弹性本构和黏塑性本构模型开展了模拟. 分析发现, 陶瓷层的界面(横向)开裂存在两种模式: 在降温过程中, 陶瓷层容易出现界面波峰处的 I 型开裂与腰部位置处的 II 型开裂; 在升温过程中, 陶瓷层容易发生垂直开裂使结构中出现陶瓷层/基体的界面端, 界面端部严重的应力集中效应使陶瓷层容易在该处横向开裂形成界面处的边裂纹.

关 键 词: 热障涂层; 黏塑性; 应力分析; 界面; 有限元法

中图分类号: V231.95

文献标识码: A

Numerical study of failure mechanisms on plasma sprayed thermal barrier coatings

HU Hao-ju¹, ZHANG Jian-yu¹, YANG Xiao-guang²,
LI Zhi-yong¹, FEI Bin-jun¹

(1. School of Aeronautic Science and Engineering,
Beijing University of Aeronautics and Astronautics, Beijing 100191, China;

2. School of Jet Propulsion,
Beijing University of Aeronautics and Astronautics, Beijing 100191, China)

Abstract: A numerical simulation of a cylindrical system with plasma sprayed thermal barrier coatings under typical thermal loading was conducted, and the failure mechanisms were analyzed based on the stresses in ceramic coat. It is found that, there are two types of interfacial (transverse) cracking patterns of the ceramic coat: in the cooling process, mode I is vulnerable to crack at the peak position of the cosine curve, and mode II at the middle position; in the heating process, interface edges are introduced into the ceramic coat/substrate system as a result of the vertical cracks emergence, and the ceramic coat will transversely crack at these positions because of the stress concentration effect.

Key words: thermal barrier coatings; viscoplasticity; stress analysis; interfaces; finite element method

热障涂层(thermal barrier coatings, 简称 TBCs)涂覆于航空发动机热端部件能够提供有效

的高温防护, 已成为发展高推质比航空发动机的一项关键技术^[1]. 由于热障涂层在工作过程中通

收稿日期: 2009-09-27; 修订日期: 2009-12-21

作者简介: 胡浩炬(1981-), 男, 湖南安乡人, 博士生, 从事结构疲劳寿命、可靠性研究. E-mail: haoju_hu@126.com

常容易剥落失效,所以对其失效机理进行充分研究从而实现对其服役寿命的评估预测就显得格外重要。

国外热障涂层技术发展较早,关于热障涂层失效机理的研究展开的比较多,其中 Nusier 等与 Evans 等的结论最具代表性。Nusier, Ali 等^[2-3]认为在热循环的冷却过程中形成的涂层面内压应力导致黏接层表面起皱,使黏接层/氧化层或者氧化层/陶瓷层界面出现局部的界面微裂纹,界面微裂纹随着热循环的进行增长到一定长度后,当涂层再次受压时将发生屈曲失稳而剥落;Wang, Evans 等^[4-5]则认为,在热障涂层的制备过程中黏接层表面的粗糙不平或在其后的热循环过程中氧化层的局部优先生长,使界面微裂纹在氧化层凸起部位出现,在冷却过程中界面微裂纹扩展,当这些裂纹合并长大并贯穿整个界面时,热障涂层剥落失效。与国外相比,国内的热障涂层技术起步较晚,目前等离子喷涂热障涂层(plasma sprayed thermal barrier coatings,简称 PS TBCs)相对物理气相沉积热障涂层工艺上更为成熟,在工程上应用比较广泛,国内的研究者们同样针对其剥落失效机理展开了大量的理论与数值计算研究^[6-8],得到的结论与国外文献基本相同。然而,某型国产等离子热障涂层在接近于室温环境下喷涂,服役过程中可能出现垂直裂纹,热障涂层的剥落失效并不能基于上述几种模式进行判断。本文利用有限元计算工具 MSC. Marc 对带等离子喷涂热障涂层的圆筒结构在典型热循环载荷作用下的应力分布状况开展了数值计算,对陶瓷涂层材料分别按线弹性与黏塑性两种情况进行了考虑,对比两种计算结果,从应力的角度对热障涂层的失效过程及机理进行了探讨,给出了陶瓷层中垂直裂纹对界面裂纹产生机理的影响。

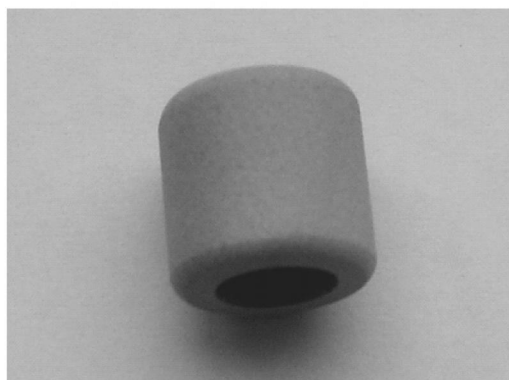
1 分析模型

1.1 热障涂层剥落失效现象

采用等离子喷涂工艺制备的热障涂层试样如图 1(a)所示,使用箱式硅碳棒高温电炉对试样循环加热,开展确定氧化层临界厚度的试验,图 1(b)给出陶瓷层最终剥落失效的试样形貌。

在试验过程中观测到热障涂层的剥落出现在将试件从高温电炉中移出的瞬时。根据试验条件对结构的瞬时温度场以及应力场进行了简单模拟,结果表明,在试件移出高温电炉的瞬间,陶瓷层面内出现较大的拉应力,据此初步判断,该类热

障涂层的失效模式与前述几种模式并不一致。以下将结合有限元计算对该类失效模式进行具体讨论。



(a) 沉积态



(b) 剥落失效后

图 1 表面形貌

Fig.1 Surface morphology

1.2 有限元模型建立

计算针对具体的试验所用试样展开。圆筒结构内径为 3 mm,基体厚度为 2 mm,等离子喷涂的黏接层与陶瓷层厚度分别为 100 μm 与 200 μm ,通常情况下,在热障涂层喷涂的过程中黏接层将发生氧化,本文计算时取黏接层与陶瓷层之间的氧化层厚度为 1 μm 。认为试样受循环温度载荷作用,内部不存在温度梯度,整个试样的温度在 100 s 内从 20 $^{\circ}\text{C}$ 升温至 1050 $^{\circ}\text{C}$,保持 360 s 后再经过 120 s 降为 20 $^{\circ}\text{C}$ 完成一个循环。等离子热障涂层在室温环境下喷涂,喷涂时金属基体温度在 200~400 $^{\circ}\text{C}$ 范围内,参考文献[6,9],本文取系统的初始无应力温度为 400 $^{\circ}\text{C}$ 另外,从后面对计算结果的分析中将会看到,试样在经历一次热循环后陶瓷层中即出现垂直裂纹,出现裂纹后试样中精确的应力状况需要借助断裂力学的手段进行分析,所以本文选取一个热循环展开计算。

根据圆筒试样的结构特点以及受载状况,计算按轴对称问题进行,图 2(a) 显示的为几何模型示意图,1 方向表示对称轴,2 方向为径向,3 方向代表周向.热障涂层中黏接层表面的粗糙不平是引起各层界面产生剥离应力从而使热障涂层发生界面开裂的重要因素,本文对此进行考虑,用余弦曲线近似表示黏接层在纵剖面内的形貌,余弦曲线波长取 $50\mu\text{m}$,而其幅值为 $7\mu\text{m}$.沿对称轴方向截取一个波长的长度进行有限元建模,采用一阶轴对称结构单元,对氧化层以及氧化层附近区域适当细化,该区域放大的有限元网格,如图 2(b) 所示,模型上端面节点 1 方向的位移固定,对下端面节点施加 1 方向的耦合位移约束保证轴向位移相同.

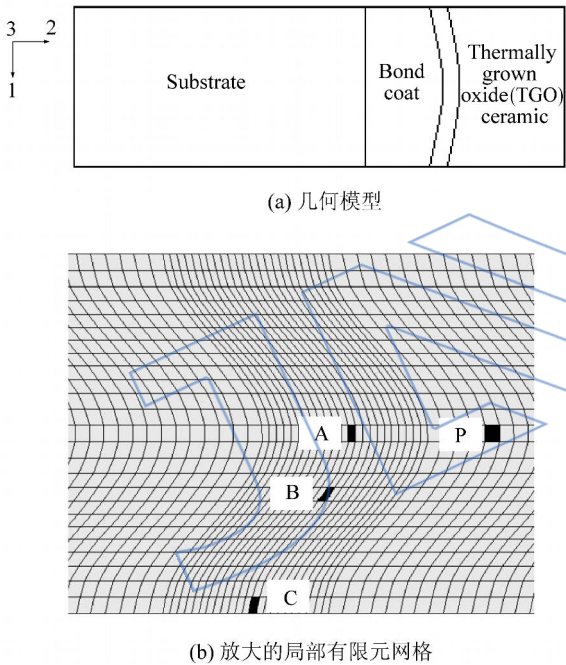


图 2 有限元模型
Fig. 2 Finite element model

1.3 各层材料模型、参数

基体、黏接层以及氧化层材料通常采用线弹性模型模拟,具体的材料热、力学性能参数参见表 1^[10].

对于陶瓷层材料,国内外的研究者在展开热障涂层失效机理的研究时,通常不加说明的采用理想线弹性模型进行模拟,但是 Charalambides 和 Demasi 等^[11-12]的研究表明,等离子喷涂的陶瓷层材料在高温条件下具有明显的应变率相关与拉压不对称特性,本文据此引入能够准确描述陶

瓷层材料复杂力学行为的 Walker 统一黏塑性本构模型,同时对陶瓷层材料进行线弹性与黏塑性两种情况的模拟.

表 1 不同温度下的材料参数
Table 1 Material parameters at different temperatures

	<i>T</i> / K	<i>E</i> / 10 ⁹ Pa	μ	α 10 ⁻⁶ K ⁻¹
Substrate	293	211	0.33	14.8
	473	197	0.33	15.2
	673	188	0.33	15.6
	873	176	0.33	16.2
	1073	157	0.34	16.9
	1273	120	0.35	17.5
Bond coat	293	200	0.33	14.8
	473	190	0.33	15.2
	673	175	0.33	15.6
	873	160	0.33	16.2
	1073	145	0.34	16.9
	1273	120	0.35	17.5
TGO	293	400	0.23	8
	473	390	0.23	8.2
	673	380	0.24	8.4
	873	370	0.24	8.7
	1073	355	0.25	9
	1273	325	0.25	9.3
Ceramic	293	48	0.1	9
	473	47	0.1	9.2
	673	44	0.1	9.6
	873	40	0.11	10.1
	1073	34	0.11	10.8
	1273	26	0.12	11.7

以常微分方程形式给出的 Walker 黏塑性本构模型详见文献[13],本文采用恰当的数值解法先将方程增量化,然后编制 FORTRAN 程序并通过有限元软件 MSC. Marc 的用户子程序接口 Hypela 嵌入 Marc 而实现.利用 Walker 模型对 Hastelloy-X 合金进行模拟,得到在温度为 871 °C (1600 °F),以不同的应变率进行位移加载条件下

的迟滞回环图形,通过与文献[14]所列试验数据比较,模拟结果良好。

本文中陶瓷层材料的 Walker 模型参数来自文献[15]。

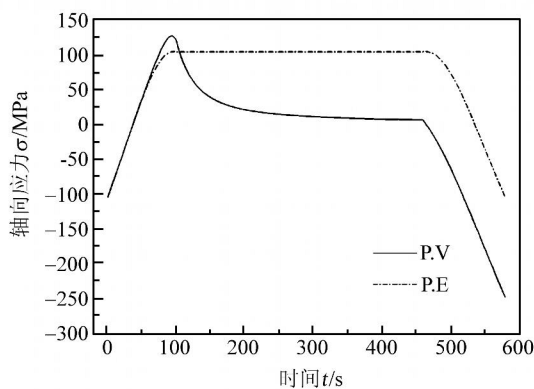
2 计算结果与失效分析

根据相关试验^[7-8]观测结果,等离子喷涂工艺制备的热障涂层失效一般表现为陶瓷层在靠近氧化层/陶瓷层界面的部位发生横向断裂而剥落,因此,陶瓷层内部的应力计算结果是研究的重点。通常认为,陶瓷层断裂与否主要取决于陶瓷层中最大拉伸主应力是否超过其抗拉强度^[16],由于本文计算时考虑了纵剖面内的余弦界面形貌,导致陶瓷层中将出现 1-2 面内的剪切应力,应力状态较复杂,但是从所得结果来看,该剪切应力相对于陶瓷层面内的正应力是微小的,而且沿径向远离界面时快速减小,本文基于近似以及方便讨论的考虑,不对主应力大小及方向进行确定,而分别对陶瓷层中的各个应力分量进行研究,认为陶瓷层是否出现表面垂直开裂与其面内的轴向以及周向拉应力相关,而在界面附近的横向开裂则是由该部位的径向拉应力与剪切应力所致^[6]。如图 2(b)中所标,选取陶瓷层中远离界面的任意单元 P,考察其轴向与周向应力,用于判断陶瓷层是否出现垂直开裂;选取界面附近陶瓷层中位于余弦曲线波峰、腰部以及波谷位置的单元 A、B、C,对该三处的径向拉应力与剪切应力进行分析。

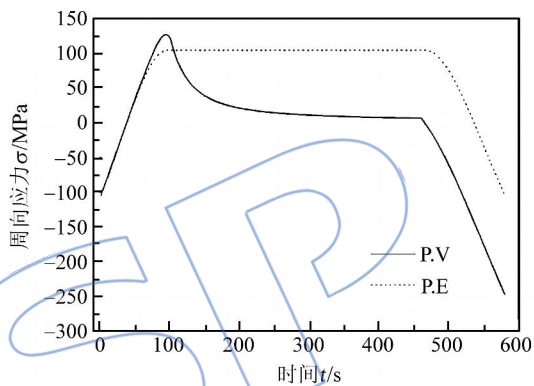
2.1 陶瓷层面内正应力与表面垂直开裂

图 3 给出 P 单元内某积分点处的轴向与周向的正应力随加载时间的变化曲线,图中所示 P.V 表示采用黏塑性本构模型计算所得的结果,P.E 表示按理想线弹性计算的结果。由图可见,按黏塑性本构模型进行模拟时,陶瓷层中轴向与周向应力随着加热的进行大致呈线性形式增大,在高温保持阶段出现明显的松弛现象,从较大的拉应力快速下降到接近零的水平,在随后的降温过程中呈线性减小趋势,而按理想线弹性模型进行计算时,陶瓷层中的应力在整个热加载循环中随温度呈线性形式变化;从图中还可以看出,系统温度较低时,两种模拟的应力-时间曲线基本重合,而温度较高时,如图中所注,当温度升至约 650 °C 时两条曲线开始分离,这证明陶瓷层材料只有在温度较高时才对加载速率敏感。

等离子喷涂的热障陶瓷涂层抗拉强度较低,



(a) 轴向应力



(b) 周向应力

图 3 陶瓷层应力随时间变化曲线

Fig. 3 Curves of stresses of different local places vs. time

一般在 27~35 MPa 的范围内^[16],两种计算所得应力一致显示,当系统温度升至约 500 °C 时陶瓷层面内的轴向与周向拉应力即超过抗拉强度,这表明,沉积态的热障涂层在典型热载荷作用一个循环周期后即出现陶瓷层表面垂直开裂的现象。对比文献[17]对于等离子喷涂热障涂层的热震试验的研究结果可以判断,本文研究的等离子热障涂层表面垂直裂纹将同样以一定宽度的网格形貌出现。需要指出,垂直裂纹出现使陶瓷层中出现自由端面,陶瓷层中的应力将被放松,只有当系统温度下降至无应力温度 400 °C 以后垂直裂纹完全闭合,陶瓷层中的应力才呈现出完整结构的力学响应特征,基于此作进一步分析可知,对陶瓷层按黏塑性本构模型模拟时,陶瓷层在高温保持阶段呈现出的拉应力松弛现象是不真实的,该应力松弛过程导致热循环周期结束时陶瓷层的内面压应力被严重放大,考虑到陶瓷层材料在低温条件下率效应并不明显的特点,可知对陶瓷层按理想线弹

性计算时能够准确得到系统温度从 400 °C降至室温过程中的应力结果。

2.2 陶瓷层近界面部位的径向应力、剪切应力及其横向断裂

图 4 显示的是热循环周期内界面附近关键部位 A、B、C 处的径向应力与剪切应力历程,图中所示 A、V、B、V、C、V 分别表示 A、B、C 处采用黏塑性本构模型计算所得的结果,A、E、B、E、C、E 分别表示 A、B、C 处按理想线弹性计算的结果,图中的应力变化形式与图 3 中所示陶瓷层面内正应力的变化形式一致,相比之下,图 4 所示的应力在绝对数值上远小于面内正应力。如图 4(a),两种计算结果都显示系统升温阶段温度越过喷涂温度时波谷位置的径向应力由压应力转变为拉应力,在温度为 500 °C时,该拉应力值约为 5 MPa,由于垂直裂纹出现,陶瓷层面内约束的放松将抑制该径向拉应力的增长,另外,图 4(b)中所示该部位剪切应力几乎可以忽略,可以看出,尽管在升温过程中陶瓷层的波谷位置将出现径向拉应力,但横向

微裂纹不易于此处首先萌生。同样基于 2.1 节中的原因,可以根据线弹性计算所得降温过程中的应力结果对陶瓷层的横向断裂展开分析,如图 4(a)所示,系统温度降到最低时,波峰位置的径向拉应力较大,约为 20 MPa,而剪切应力则相对较小,约为 5 MPa,腰部位置的径向拉应力约为 15 MPa,而剪切应力相对较大,约为 22 MPa,根据该结果可以推断,热循环载荷作用下,陶瓷层的横向微裂纹易于在氧化层/陶瓷层界面的波峰与腰部位置处萌生,波峰处容易产生法向应力主导的 I 型开裂,而腰部位置容易产生剪切应力主导的 II 型开裂,该结论与文献[6]中关于陶瓷层内部裂纹萌生机理的阐述一致。

文献[6]选取陶瓷层近界面部位在热循环最低温度时刻的应力结果对陶瓷层的横向开裂进行了的较详尽的分析,但是没有考虑陶瓷层出现垂直裂纹后系统升温过程中陶瓷层横向开裂的情况,实际上,陶瓷层中出现垂直裂纹以后,近界面附近的横向开裂还存在另外一种模式,本文用图 5 中所示的简单二维模型对此进行探讨。

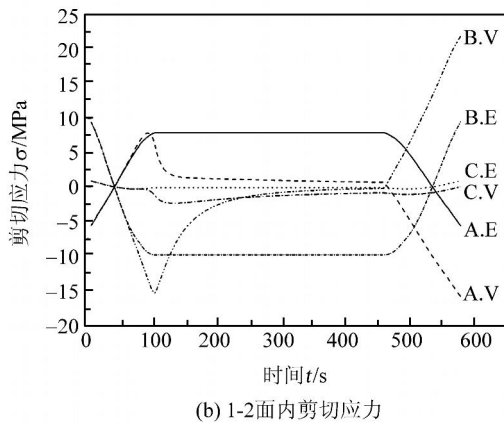
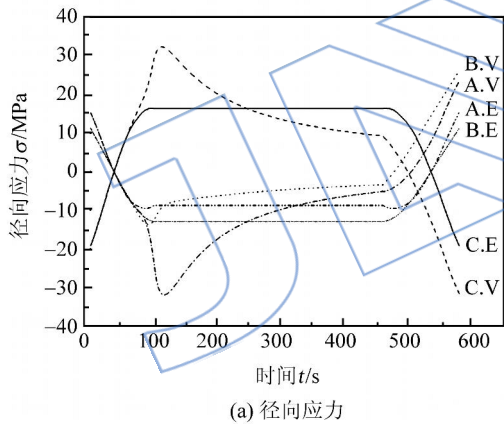


图 4 界面处的应力随时间变化曲线
Fig. 4 Curves of stresses of different local places vs. time

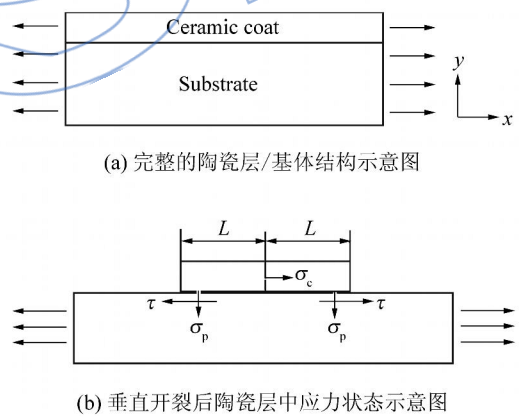


图 5 热障涂层结构
Fig. 5 Thermal barrier coating system

图 5(a)所示为陶瓷涂层涂覆于金属基体上的完整双层结构,在结构被加热而膨胀的过程中,陶瓷层中容易产生 x 方向的不匹配拉应力而沿垂直方向(y 方向)断裂,断裂位置随机,陶瓷层被垂直裂纹分割成段状。图 5(b)为某段陶瓷层附着于金属基体上的示意图,陶瓷层两端为自由端面,图中还示意性给出了陶瓷层在垂直裂纹尖端附近的应力状态^[18]以及该段陶瓷层中部位置的 x 方向拉应力。不难发现, σ_x 随着加热过程的继续将逐渐增大,当其达到陶瓷层材料的抗拉强度以后,

陶瓷层再次发生垂直断裂,在一定的热载荷作用下,这一断裂过程最终将趋于稳定,图中所示的长度值 L 存在一个最小值^[19];此后,陶瓷层中将出现垂直裂纹尖端处剪切应力 τ 与剥离应力 σ_p 引起的横向开裂,文献[18,20]对此类异质材料界面端的开裂问题进行了系统的讨论。

不同的陶瓷层横向裂纹生成模式将导致陶瓷层最终的失效模式不同。根据2.1节的分析,当系统温度降到最低时陶瓷层面内压应力水平较低,从而使陶瓷层在降温过程中因屈曲失稳而造成的大面积剥落受到抑制;而在热循环载荷的温度上升阶段,陶瓷层自由端面处萌生的横向边裂纹将向中部扩展,经过长时间循环作用以后,裂纹贯通,陶瓷层将发生垂直裂纹间距宽度大小的片状剥落。

3 结 论

1) 两种数值模拟的结果一致表明,无应力温度为 400 °C 左右的等离子热障陶瓷涂层在典型热循环载荷的升温阶段将产生垂直断裂现象。

2) 两种模拟结果在热循环周期的高温阶段存在明显差异,综合分析后可推断出,基于理想线弹性模型的模拟结果能够对热障涂层的失效模式作出准确判断。

3) 降温过程中陶瓷层容易在靠近余弦界面波峰以及腰部的位置发生横向微开裂;垂直裂纹出现后使陶瓷层中形成界面端,升温过程中,界面端部处严重的应力奇异性将使横向开裂在该处产生。

4) 陶瓷层中垂直裂纹的产生将抑制其在降温过程中因屈曲失稳而造成的大面积剥落;在结构温度上升的过程中,陶瓷层界面端部处萌生的横向裂纹扩展,经过多次热循环作用,该裂纹将贯穿整个片状陶瓷层的界面使陶瓷层发生剥落。

参考文献:

- [1] 马维,潘文霞,吴成康. 热障涂层材料性能和失效机理研究进展[J]. 力学进展,2003,23(4):548-559.
MA Wei, PAN Wenxia, WU Chengkang. Progress in research on the material properties and failure mechanisms of thermal barrier coatings[J]. Advances in Mechanics, 2003,23(4):548-599. (in Chinese)
- [2] Nusier S Q, Newaz G M, Chaudhury Z A. Experimental and analytical evaluation of damage processes in thermal barrier coatings[J]. International Journal of Solids and Structures, 2000,37(18):2495-2506.
- [3] Ali M Y, Nusier S Q, Newaz G M. Mechanics of damage initiation and growth in a TBC/ superalloy system[J]. International Journal of Solids and Structures, 2001,38(19):3329-3340.
- [4] Wang J S, Evans A G. Effects of strain cycling on buckling, cracking and spalling of a thermally grown alumina on a nickel-based bond coat[J]. Acta Materialia, 1999,47(2):699-710.
- [5] Evans A G, He M Y, Hutchinson J W. The ratcheting of compressed thermally grown thin films on ductile substrates[J]. Acta Materialia, 2000,48(10):2593-2601.
- [6] 魏红亮, 杨晓光, 齐红宇, 等. 等离子涂层热疲劳失效模式及失效机理研究[J]. 航空动力学报, 2008,23(2):270-275.
WEI Hongliang, YANG Xiaoguang, QI Hongyu, et al. Study of failure mode and failure mechanisms on thermal fatigue of plasma sprayed thermal barrier coatings[J]. Journal of Aerospace Power, 2008,23(2):270-275. (in Chinese)
- [7] 李其连. 等离子喷涂 ZrO_2 热障涂层热冲击破坏研究[J]. 中国表面工程, 2004(3):17-25.
LI Qilian. Research on thermoshock failure of zirconia TBCs deposited by plasma spraying[J]. China Surface Engineering, 2004(3):17-25. (in Chinese)
- [8] 徐惠彬, 宫声凯, 陈立强, 等. 热、力耦合作用下热障涂层的失效机制[J]. 北京航空航天大学学报, 2004,30(10):919-924.
XU Huibin, GONG Shengkai, CHEN Liqiang, et al. Failure process of thermal barrier coatings under thermal and mechanical loading[J]. Journal of Beijing University of Aeronautics and Astronautics, 2004,30(10):919-924. (in Chinese)
- [9] 杨晓光, 耿瑞. 带热障涂层导向器叶片二维温度场及热应力分析[J]. 航空动力学报, 2002,17(4):432-436.
YANG Xiaoguang, GENG Rui. The analysis of 2D temperature and thermal stress of TBC-coated turbine vane[J]. Journal of Aerospace Power, 2002,17(4):432-436. (in Chinese)
- [10] ZHOU Chungen, WANG Na, XU Huibin. Comparison of thermal cycling behavior of plasma sprayed nanostructured and traditional thermal barrier coatings[J]. Materials Science and Engineering, 2007,452-453:569-574.
- [11] Charalambides P G, Mcmeeking R M. Near-tip mechanics of stress-induced microcracking in brittle materials[J]. Journal of the American Ceramic Society, 1988,71(6):465-472.
- [12] Demasi J T, Sheffler K D, Ortiz M. Thermal barrier coating life prediction model development phase I [R]. NASA/CR-182230, 1989.
- [13] Chulya A, Walker K P. A new uniformly valid asymptotic integration algorithm for elasto-plastic-creep and unified viscoplastic theories including continuum damage [R]. NASA TM-102344, ICOMP-89-22, 1989.
- [14] 冯明晖, 吕和祥, 郭宇峰. 粘弹塑性统一本构模型理论[J].

- 计算力学学报,2001,18(4):424-434.
- FENG Minghui, L Ü Hexiang, GUO Yufeng. A theory of the visco-elastic-plastic unified constitutive model and comparison with others[J]. Chinese Journal of Computational Mechanics, 2001,18(4):424-434. (in Chinese)
- [15] Nissley D M, Meyer T G, Walker K P. Life prediction and constitutive models for engine hot section anisotropic materials[R]. NASA/CR-189233,1992.
- [16] XIE Wangang, Jordan E, Gell M. Stress and cracking behavior of plasma sprayed thermal barrier coatings using an advanced constitutive model[J]. Materials Science and Engineering :A, 2006,419(1-2):50-58.
- [17] 沈金文,吕广庶,马壮,等. 在热震试验中热障涂层的裂纹形成和扩展[J]. 新技术新工艺, 2002(4):39-41.
- SHEN Jinwen, L Ü Guangshu, MA Zhuang, et al. The crack forming and developing of thermal brrier coatings in thermal shock [J]. New Technology and New Process, 2002(4):39-41. (in Chinese)
- [18] Yu H H, He M Y, Hutchinson J W. Edge effects in thin film delamination [J]. Acta Materialia, 2001, 49(1):93-107.
- [19] Agrawal D C, Raj R. Measurement of the ultimate shear strength of a metal-ceramic interface[J]. Acta Metallurgica, 1989,37(4):1265-1270.
- [20] 许金泉. 界面力学[M]. 北京:科学出版社,2006.