

高温氧化对 EB-PVD 热障涂层内部应力场分布影响的数值模拟

郝 勇^{1,2}, 齐红宇^{1,3}, 马立强¹

- (1. 北京航空航天大学 能源与动力工程学院, 北京 100191;
2. 中国航空工业集团公司 沈阳发动机设计研究所, 沈阳 110015;
3. 先进航空发动机协同创新中心, 北京 100191)

摘 要: 针对电子束物理气相沉积(EB-PVD)热障涂层(TBCs)复杂结构的特点, 选用 Walker 黏塑性本构模型实现对其高温力学行为的准确描述. 选择具有叶片曲率特征的圆管试样, 并借鉴实际发动机载荷特征进行数值分析. 重点考虑 EB-PVD 热障涂层界面的形状以及热生长氧化层(TGO)厚度变化对应力场的影响. 计算结果表明, 直线型界面对 EB-PVD 热障涂层结构的应力场改变不大, 而余弦界面对 EB-PVD 热障涂层的应力场改变的幅度可达 2 倍之多; 热生长氧化层的出现导致陶瓷层界面处的应力绝对值增加; 无论是循环至最高温度 1050℃ 还是冷却到 100℃ 时, 界面波谷始终受径向压应力, 此处不易形成损伤, 而波峰处的应力比较大, 且其应力状态是损伤容易形成的部位, 可以认为是陶瓷层失效与破坏的危险点.

关 键 词: 热障涂层; 热生长氧化层; 界面; 应力场; 电子束物理气相沉积

中图分类号: V231.91

文献标志码: A

Numerical simulation of effect of high temperature oxidation on stress field distribution of EB-PVD thermal barrier coating

HAO Yong^{1,2}, QI Hong-yu^{1,3}, MA Li-qiang¹

- (1. School of Energy and Power Engineering,
Beijing University of Aeronautics and Astronautics, Beijing 100191, China;
2. Shenyang Engine Design and Research Institute,
Aviation Industry Corporation of China, Shenyang 110015, China;
3. Co-Innovation Center for Advanced Aero-Engine, Beijing 100191, China)

Abstract: Targeting the characteristics of thermal barrier coatings (TBCs) prepared by electron beam-physical vapor deposition (EB-PVD) of complex structure, the Walker viscoplastic constitutive model was used to realize the accurate description of the high temperature mechanical behavior of TBCs structure. Tube specimens with blade curvature feature were selected for numerical analysis with reference to the actual engine load characteristics. The effect of the interface shape and the thickness of thermal growth oxide (TGO) on stress field of EB-PVD coating were focused on. The calculating results show that the stress field of TBCs structure changes little at the linear interface, while the amplitude of stress field can be changed up to 2 times at the cosine interface. The absolute value of stress at top coat increases due to the presence of the TGO. The valley at the interface is always subject to radial compressive stress no matter of circulation to the highest temperature 1050℃ or cooling to 100℃, therefore the valley is not easy to be damaged; while the stress at the peak is rela-

收稿日期: 2014-04-04

作者简介: 郝勇(1964—), 男, 辽宁沈阳人, 研究员, 博士生, 主要从事航空发动机结构及强度研究.

通讯作者: 齐红宇(1969—), 男, 黑龙江齐齐哈尔人, 副教授、硕士生导师, 博士, 主要从事航空发动机结构及强度研究.

tively large, furthermore, the stress state is easy to form part of the damage. As a result, the peak is a point for easy failure and destruction of the ceramic layer.

Key words: thermal barrier coatings (TBCs); thermal growth oxide (TGO); interface; stress field; electron beam-physical vapor deposition (EB-PVD)

热障涂层的使用最早是 1960 年,能够降低金属基体的使用温度,增加效率,提高部件的使用寿命. NASA 的实验表明,0.4 mm 热障涂层可使涡轮叶片的表面温度降低 $100\text{ }^{\circ}\text{C} \sim 300\text{ }^{\circ}\text{C}$ ^[1-5]. 一般热障涂层是双层结构:陶瓷层和金属黏结层. 黏结层的制备工艺主要有等离子喷涂法和电子束物理气相沉积(EB-PVD)法.

热障涂层通常由于陶瓷层的剥离发生失效^[6-8]. 失效路径位于热生长氧化层(TGO)内部或靠近 TGO. 但是,这些关于热障涂层破坏机理的研究大都源于实验观察,缺少基于实验结果的理论支持. 在热障涂层理论分析方面,目前采用的方法包括解析法和有限元法. 解析法包括轴对称弹性分析模型、轴对称弹塑性分析模型等;有限元法包括耦合 TGO 增长的弹塑性模型、耦合黏结层蠕变和 TGO 增长的弹性模型以及基于有限元分析的断裂力学方法等. 在这些研究当中,都没能考虑涂层材料的复杂变形特征,显然由此得到的有限元分析结果将是不够准确的.

本文选用陶瓷层材料 Walker 黏塑性本构模型,采用有限元法对带 EB-PVD 热障涂层(以下简称涂层)圆管试样的应力场进行分析. 重点考虑涂层界面的形状以及 TGO 厚度变化对应力应变的影响,详细分析陶瓷层内部界面附近以及不同厚度 TGO 内部的应力场.

1 应力应变分析

圆管试样的几何尺寸为内径为 11 mm,外径为 15 mm,长度为 85 mm,黏结层为 $80\text{ }\mu\text{m}$ 和陶瓷层为 $120\text{ }\mu\text{m}$. 根据已有的氧化实验^[14],氧化动力学呈现出抛物线规律,并且 TGO 最大厚度约为 $8\text{ }\mu\text{m}$. 因此,建立 TGO 的厚度分别是 0, 2.0, 3.0, 4.5, $8.0\text{ }\mu\text{m}$ 的圆管平面直线轴对称模型和曲线轴对称模型. 在正弦界面定义了 A, B, C 共 3 个特殊位置,有限元网格图见图 1.

热循环载荷最高温度为 $1050\text{ }^{\circ}\text{C}$,最低温度为 $100\text{ }^{\circ}\text{C}$,升温时间为 120 s,降温时间为 300 s. 进行瞬态温度载荷下的应力计算,温度在 $1050\text{ }^{\circ}\text{C}$ 与 $100\text{ }^{\circ}\text{C}$ 之间线性变化,计算 3 个循环. 认为整个模型内部不存在温度梯度. 模型的初始温度均为

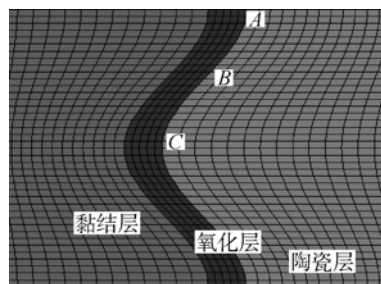


图1 有限元网格图

Fig. 1 Drawing of finite element grid

$400\text{ }^{\circ}\text{C}$,表示该温度下整个涂层系统处于无应力状态.

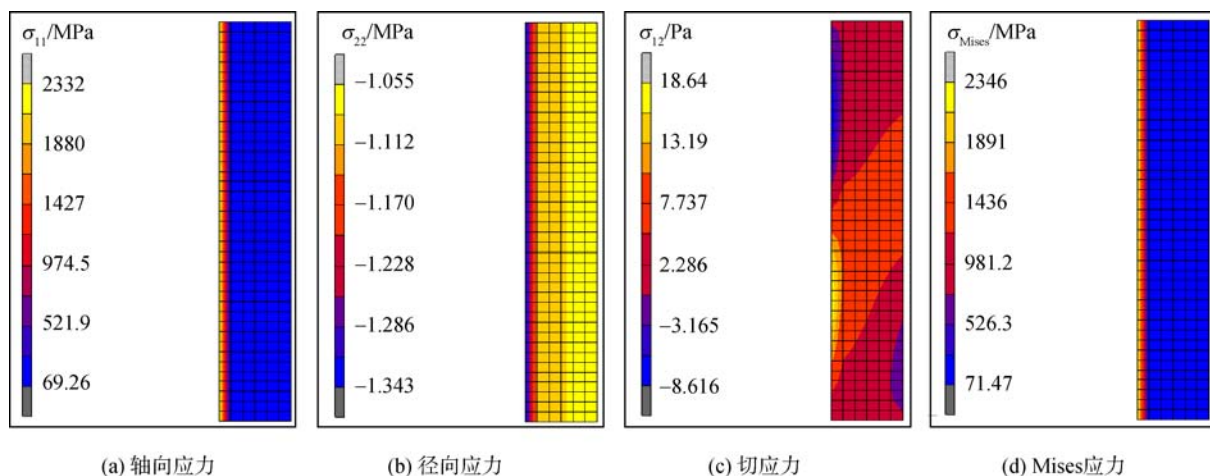
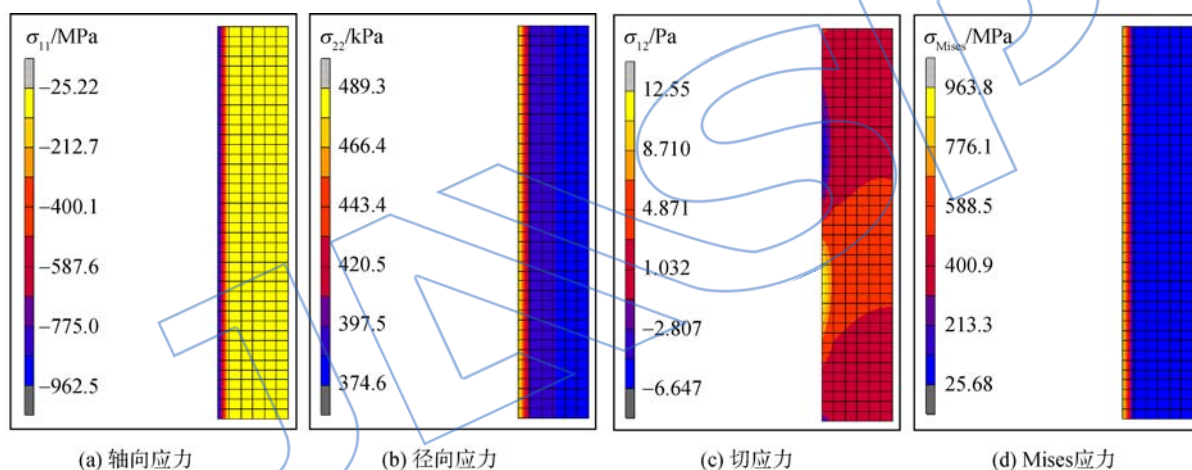
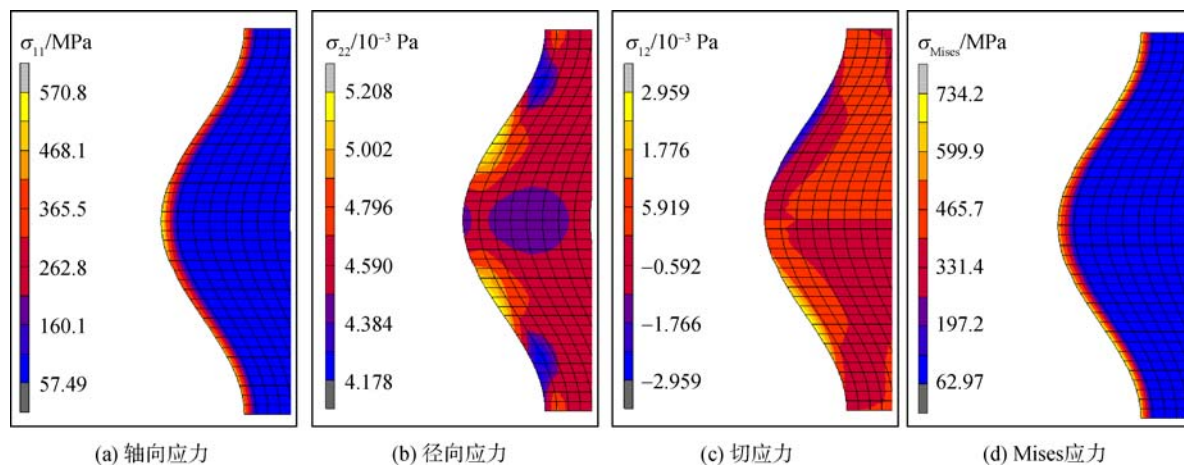
陶瓷层材料采用 Walker 黏塑性本构模型. 作为黏塑性理论的代表之一, Walker 黏塑性本构模型使用背应力 Ω 和阻应力 K 来描述材料的本构特征,该理论认为材料不存在特定的屈服点或屈服面,其非弹性变形将在加载的所有阶段出现^[9-10].

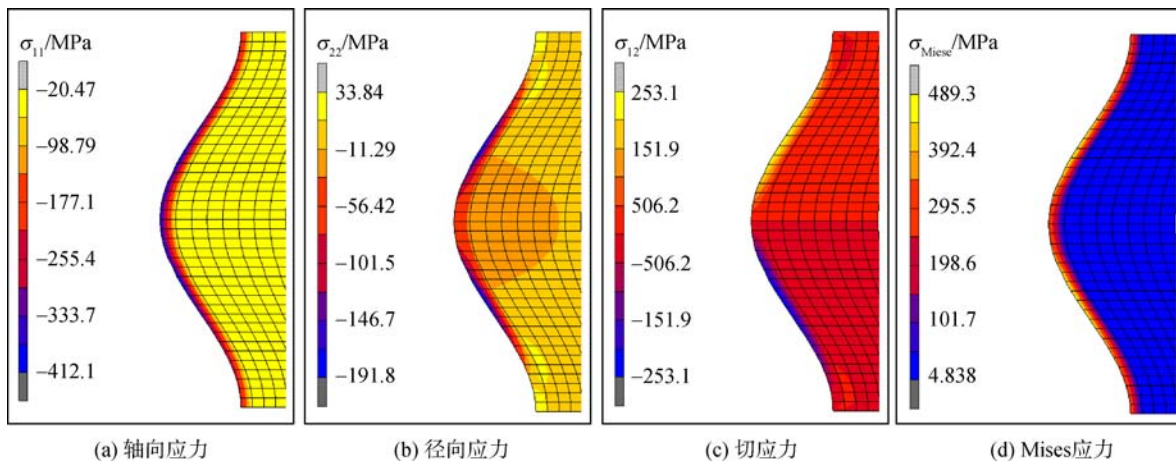
由于 TGO 厚度通常较小(约为 0.01 mm),认为其不发生屈曲现象,计算时采用理想线弹性模型. 黏结层采用理想弹塑性模型. 基体材料为 DZ125 定向合金,采用理想弹塑性模型. 以上具体参数以及涂层体系的热膨胀系数可参阅文献^[11-14]. 不同材料间热膨胀系数的差别较大,是 EB-PVD 制备的涂层内部形成热不匹配应力的主要原因^[15-18].

2 计算结果分析与及讨论

对于新制备的涂层,其内部通常不存在 TGO,引起涂层发生剥落的微裂纹首先在界面附近的陶瓷层中萌生. 以 TGO 厚度为 $2.0\text{ }\mu\text{m}$ 时的涂层作为对象,分析陶瓷层内部应力分布情况,由此确定涂层内部危险点位置.

图 2 和图 3 分别是涂层界面为直线型界面的情况下,循环至最高温度 $1050\text{ }^{\circ}\text{C}$ 和冷却到最低温度 $100\text{ }^{\circ}\text{C}$ 带 $2.0\text{ }\mu\text{m}$ TGO 时陶瓷层内部靠近界面附近轴向应力(σ_{11})、径向应力(σ_{22})、切应力(σ_{12})和 Mises 应力(σ_{Mises})分布图. 图 4 和图 5 分别是涂层界面为余弦界面的情况下时,循环至最高温度 $1050\text{ }^{\circ}\text{C}$ 和冷却到最低温度 $100\text{ }^{\circ}\text{C}$ 带 $2.0\text{ }\mu\text{m}$ TGO 时陶瓷层内部靠近界面附近轴向应力、径向

图 2 陶瓷层的应力分布(直线型界面,TGO厚度为 $2\mu\text{m}$, 1050°C)Fig. 2 Stress distribution at top coat for linear interface model with $2\mu\text{m}$ TGO at 1050°C 图 3 陶瓷层的应力分布(直线型界面,TGO厚度为 $2\mu\text{m}$, 100°C)Fig. 3 Stress distribution at top coat for linear interface model with $2\mu\text{m}$ TGO at 100°C 图 4 陶瓷层的应力分布(余弦界面,TGO厚度为 $2\mu\text{m}$, 1050°C)Fig. 4 Stress distribution at top coat for cosine interface model with $2\mu\text{m}$ TGO at 1050°C

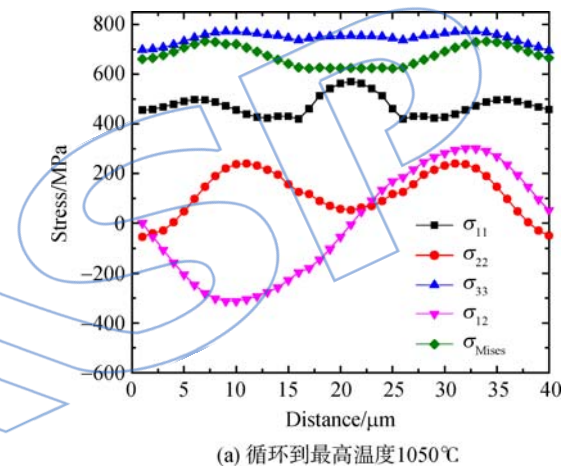
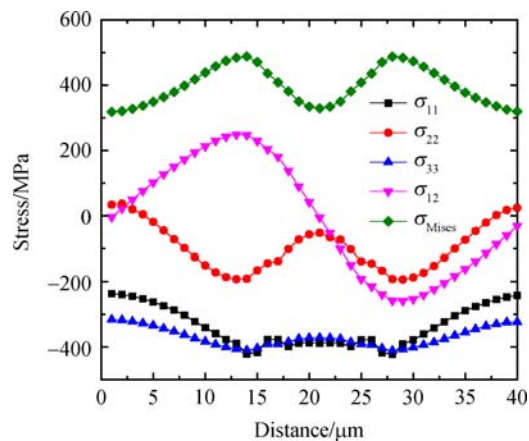
图5 陶瓷层的应力分布(余弦界面,TGO厚度为 $2\mu\text{m}$, $100\text{ }^{\circ}\text{C}$)Fig. 5 Stress distribution at top coat for cosine interface model with $2\mu\text{m}$ TGO at $100\text{ }^{\circ}\text{C}$

应力、切应力和 Mises 应力分布图. 从图 2~图 5 可知, 由于模型、载荷以及边界条件的对称性, 轴向应力、径向应力和 Mises 应力分布关于中心位置对称, 切应力分布关于中心位置反对称. 对于余弦界面和直线型界面有所不同的是, 在从最高温度 $1050\text{ }^{\circ}\text{C}$ 循环到最低温度 $100\text{ }^{\circ}\text{C}$ 时, 余弦界面的最大切应力和最小切应力的位置关于中心位置(图 2 中的 C 点)互换, 而直线型界面的最大切应力和最小切应力仍然在同一位置. 不过, 总体来说直线型界面上的轴向应力、径向应力、周向应力、切应力和 Mises 应力几乎都是相等的.

从图 4 可以看出当温度达到 $1050\text{ }^{\circ}\text{C}$ 时, B 点附近的径向应力、切应力和 Mises 应力绝对值最大; 当冷却到 $100\text{ }^{\circ}\text{C}$ 时, 由图 6 可见, 轴向应力、径向应力、切应力和 Mises 应力最大值的绝对值在界面上的 B 点和 C 点之间.

为了确定界面附近危险点的具体位置, 选取陶瓷层内部靠近界面的结点作为研究对象. 图 6 为陶瓷层内部靠近界面处, 轴向应力、径向应力、周向应力(σ_{33})、切应力以及 Mises 应力随节点位置的变化曲线. 从图 6(a)可以看出, $1050\text{ }^{\circ}\text{C}$ 时陶瓷层内界面附近的轴向和周向应力均很大, 这也是出现最大 Mises 应力的原因; B 点承受最大轴向和周向拉应力作用, 整个界面附近切应力和径向应力相对很小. 从图 6(b)可以看出, 当冷却到 $100\text{ }^{\circ}\text{C}$ 时, 轴向应力、周向应力以及 Mises 应力的绝对值都较 $1050\text{ }^{\circ}\text{C}$ 时小; Mises 应力的最大值仍然出现在 B 点; 切应力关于波谷反对称, 且在 B 点绝对值最大; 径向应力在 B 点最小; 周向应力随结点位置变化值很小.

随着高温工作时间的增加, TGO 厚度会逐渐

(a) 循环到最高温度 $1050\text{ }^{\circ}\text{C}$ (b) 冷却到最低温度 $100\text{ }^{\circ}\text{C}$ 图6 余弦界面涂层应力分量随陶瓷层内结点位置的变化曲线(TGO厚度为 $2\mu\text{m}$)Fig. 6 Varying of stress component for cosine interface coating with node position at top coat with $2\mu\text{m}$ TGO

增大, 同时涂层中裂纹也将经历从萌生到扩展这个过程. 而后, 在保持载荷、边界条件不变的前提下

下和在不同界面的情况下,计算无 TGO 和 TGO 厚度(δ_{TGO})分别为 2.0、3.0、4.5、8.0 μm 时,涂层圆管试件内部的应力场,来分析 TGO 厚度的不同对界面附近陶瓷层应力状态的影响以及对陶瓷层内部裂纹形成的影响。

图 7 和图 8 分别为余弦界面涂层 TGO 的厚

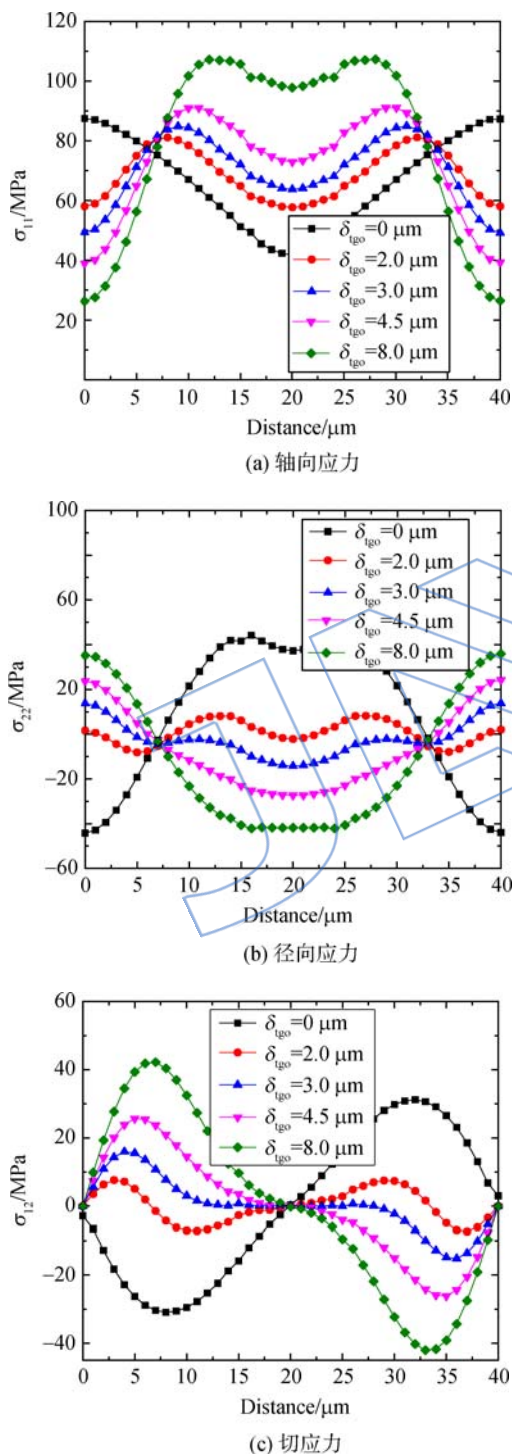


图 7 余弦界面涂层陶瓷层内结点应力分布(1050 °C)

Fig. 7 Stress distribution of nodes at top coat for cosine interface coating at 1050 °C

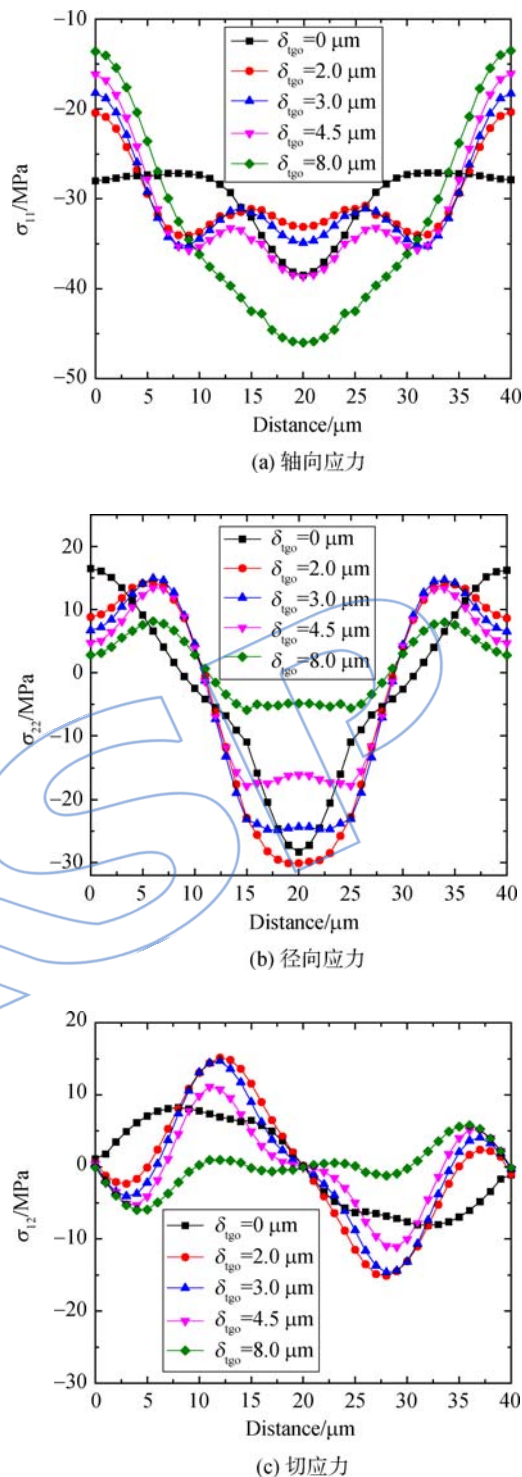


图 8 余弦界面涂层陶瓷层内结点应力分布(100 °C)

Fig. 8 Stress distribution of nodes at top coat for cosine interface coating at 100 °C

度为 0、2.0、3.0、4.5、8.0 μm 时,加载到 1050 °C 和冷却到 100 °C 时,陶瓷层单元内部靠近界面处,各应力分量随结点位置的变化曲线。

从图 7 可以看出,当循环达到最高温度 1050 °C 时,无 TGO 和 TGO 厚度为 2.0 μm 之间,各个应力发生很大的突变;而当 TGO 厚度大于

2.0 μm 后,轴向应力和切应力的最大值均出现在 B 点;随着 TGO 厚度的增加,轴向应力、径向应力和切应力的最大值和最小值之差也逐渐变大。

而当冷却到 100 $^{\circ}\text{C}$ 时,从图 8 可知:无 TGO 和 TGO 厚度为 2 μm 之间,各个应力发生很大的突变;而当 TGO 厚度大于 2 μm 后,径向应力和切应力的最大值均出现在 B 点;而且随着 TGO 厚度的增加,C 点处的轴向应力绝对值逐渐增大。

总之,直线型界面对涂层结构的内部应力场改变不大,而余弦界面对涂层的应力场改变的幅度可达 2 倍之多。因此,从另一个角度验证了 TGO 的出现导致陶瓷层界面处的应力绝对值增加;当循环达到最高温度 1050 $^{\circ}\text{C}$ 时,随着 TGO 厚度的增加,陶瓷层界面处的应力都显著增大;而当冷却到 100 $^{\circ}\text{C}$ 时,轴向应力随 TGO 厚度增大而增大,而径向应力和切应力则减少。

无论是循环至最高温度 1050 $^{\circ}\text{C}$ 还是冷却到 100 $^{\circ}\text{C}$ 时,C 点始终受径向压应力,此处不易形成损伤。而 B 点的应力比较大,且其应力状态是损伤容易形成的部位,可以认为是陶瓷层失效与破坏的危险点。

3 结 论

选用 Walker 黏塑性本构模型实现对涂层结构高温力学行为的准确描述,选择具有叶片曲率特征的圆管试样,并借鉴实际发动机载荷特征进行数值分析。

陶瓷层与黏结层的直线型界面对涂层结构的内部应力场改变不大,而余弦界面对涂层的应力场改变的幅度可达 2 倍之多。因此,从有限元的计算结果看出,TGO 的出现导致陶瓷层界面处的应力绝对值增加;且无论是循环至最高温度 1050 $^{\circ}\text{C}$ 还是冷却到 100 $^{\circ}\text{C}$ 时,界面波谷(C 点)始终受径向压应力,此处不易形成损伤。

界面上波峰(B 点)的应力比较大,且其应力状态是损伤容易形成的部位,可以认为是陶瓷层失效与破坏的危险点。

参考文献:

- [1] 霍武军,孙护国. 先进的航空发动机涡轮叶片涂层技术[J]. 航空科学技术,2001(3):34-36.
- [2] Clarke D R, Levi C G. Materials design for the next generation thermal barrier coatings[J]. Annual Review of Materials Research,2003,33(1):383-417.
- [3] Hernandez M T, Cojocar D, Bartsch M, et al. On the opening of a class of fatigue cracks due to thermo-mechanical fatigue testing of thermal barrier coatings[J]. Computational Materials Science,2011,50(9):2561-2572.
- [4] Gabe D R, Green W A. The mathematical modelling of CMA multilayered coatings [J]. Surface and Coatings Technology,1998,105(3):195-201.
- [5] 李美姮,胡望宇,孙晓峰,等. 热障涂层的研究进展与发展趋势[J]. 材料导报,2005,19(4):41-45.
- [6] LI Meiyuan, HU Wangyu, SUN Xiaofeng, et al. Recent research progress in thermal barrier coatings[J]. Materials Review,2005,19(4):41-45. (in Chinese)
- [7] Spitsberg I T, Mumm D R, Evans A G. On the failure mechanisms of thermal barrier coatings with diffusion aluminate bond coatings[J]. Materials Science and Engineering: A,2005,394(1):176-191.
- [8] Bhatnagar H, Ghosh S, Walter M E. Parametric studies of failure mechanisms in elastic EB-PVD thermal barrier coatings using FEM[J]. International Journal of Solids and Structures,2006,43(14):4384-4406.
- [9] Chen W R, Wu X, Marple B R, et al. Oxidation and crack nucleation/growth in an air-plasma-sprayed thermal barrier coating with NiCrAlY bond coat[J]. Surface and Coatings Technology,2005,197(1):109-115.
- [10] Janosik L A, Duffy S F. A viscoplastic constitutive theory for monolithic ceramics: I [J]. Journal of Engineering for Gas Turbines and Power,1998,120(1):155-161.
- [11] Xie W, Walker K P, Jordan E H, et al. Implementation of a viscoplastic model for a plasma sprayed ceramic thermal barrier coating[J]. Journal of Engineering Materials and Technology,2003,125(2):200-207.
- [12] 耿瑞. 热障涂层强度分析及寿命预测研究[D]. 北京:北京航空航天大学,2001.
- [13] GENG Rui. Strength analysis and lifetime prediction of thermal barrier coating[D]. Beijing: Beijing University of Aeronautics and Astronautics,2001. (in Chinese)
- [14] Cheng J, Jordan E H, Barber B, et al. Thermal/residual stress in an electron beam physical vapor deposited thermal barrier coating system[J]. Acta Materialia,1998,46(16):5839-5850.
- [15] 于慧臣,吴学仁. 航空发动机设计用材料数据手册:第四册[M]. 北京:航空工业出版社,2010.
- [16] 魏洪亮. 涡轮叶片/热障涂层结构分析方法及界面破坏的研究[D]. 北京:北京航空航天大学,2007.
- [17] WEI Hongliang. Analysis method of turbine vane/thermal barrier coatings structures and study on interfaces failure [D]. Beijing: Beijing University of Aeronautics and Astronautics,2007. (in Chinese)
- [18] Tzimas E, Müllejans H, Petevs S D, et al. Failure of thermal barrier coating systems under cyclic thermomechanical loading[J]. Acta Materialia,2000,48(18):4699-4707.
- [19] Greving D J, Shadley J R, Rybicki E F. Effects of coating

- thickness and residual stresses on the bond strength of ASTM C633-79 thermal spray coating test specimens[J]. Journal of Thermal Spray Technology, 1994, 3(4): 371-378.
- [17] Padture N P, Gell M, Jordan E H. Thermal barrier coatings for gas-turbine engine applications[J]. Science, 2002, 296(5566): 280-284.
- [18] Yang L, Liu Q X, Zhou Y C, et al. Finite element simulation on thermal fatigue of a turbine blade with thermal barrier coatings[J]. Journal of Materials Science and Technology, 2014, 30(4): 371-380.

JALSP