

功能梯度热障涂层隔热与应力缓和的组合设计

范群波, 马 壮, 王富耻, 王 鲁

(北京理工大学材料学院, 北京 100081)

摘 要: 提出了功能梯度热障涂层隔热与应力缓和的组合设计思想, 给出了材料基本物性参数物理模型, 并在此基础上首先由隔热能力确定不同层数对应的成分分布指数, 继而进一步计算出与之匹配的轴向及径向应力分布情况, 最后结合涂层材料的制备成本, 确定了满足组合设计准则的涂层结构。

关键词: 功能梯度热障涂层; 隔热; 应力缓和

中图分类号: TG 174.442

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2007)S2-0544-04

1 前 言

目前有关功能梯度涂层材料结构的设计往往基于热应力缓和准则这一指标, 采用有限元法进行模拟。例如, Williamson^[1,2]等人研究了 Ni-ZrO₂ 系圆柱状功能梯度材料试样的梯度层厚度及成分分布变化对涂层应力、应变大小和分布的影响。研究表明随梯度层厚度的增加, 应力、应变的峰值呈线性下降趋势, 最终根据服役条件可以确定出涂层的厚度及成分分布指数。Giannakopoulos^[3]等人则研究了弹塑性 Ni-Al₂O₃ 系梯度功能材料在周期性变温环境中的应力、应变情况, 为材料在动态服役环境中的结构设计奠定了基础。

然而采用单一设计准则很难保证涂层材料在实际服役过程中真正发挥作用。事实上, 功能梯度热障涂层的隔热能力也是评价涂层好坏的一项关键指标, 在涂层结构设计过程中需与应力缓和原则同时考虑。基于此, 本研究提出了涂层隔热能力与应力缓和的组合设计方法, 根据服役环境的综合需要可以定量地给出涂层层数及成分分布指数, 为材料的制备提供实际指导。

2 成分分布指数的定义

设某种功能梯度材料由组元 1 和组元 2 构成, 其成分沿 y 方向呈一维连续变化, 则组元 1 的体积分数是 y 的一元函数。Wakashima 等^[4]采用幂函数来描述材料的成分分布:

$$V_f(y) = \left(\frac{y}{H}\right)^p \quad (1)$$

式中, H 为涂层的总厚度, p 为成分分布指数。通过改变 p 值的大小, 可以改变 $V_f(y)$ 的曲线形状。

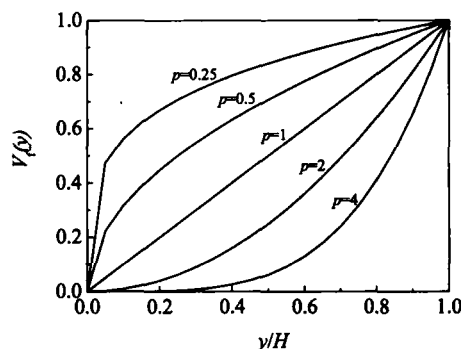


图 1 不同 p 值确定的成分分布曲线

Fig.1 Composition gradient exponents for different p values

3 涂层材料物性参数的数学模型

在金属-陶瓷型热应力缓和型功能梯度材料的结构设计和性能评价中, 必须首先掌握构成各层复合材料的物理性能参数, 这些数据包括弹性模量 E 、泊松比 ν 、热膨胀系数 α 、密度 ρ 以及热导率 λ 等。这些物性参数随成分分布指数发生变化, 与金属组元及陶瓷组元体积分数配比有关。涂层各层的物性参数可借助纯金属材料与纯陶瓷材料的物性参数经过不同的数学模型计算得到。

涂层的密度 ρ 和泊松比 ν 可由经典混合定律^[4]获得:

$$P = P_c V_c + P_m V_m \quad (2)$$

式中, P_c 与 P_m 分别表示纯陶瓷与纯金属的物性

收稿日期: 2007-02-28

基金项目: 北京理工大学优秀青年教师资助计划 (1040012040101) 资助

作者简介: 范群波, 男, 1974 年生, 博士, 讲师, 北京理工大学材料学院, 北京 100081, 电话: 010-68912712-666

参数, V_c 与 V_m 为对应的陶瓷与金属的体积分数, 且满足 $V_c + V_m = 1$ 。

弹性模量 E 通常用 Tamura 模型^[5,6]计算得到:

$$E = \frac{V_m E_m \left(\frac{q + E_c}{q + E_m} \right) + V_c E_c}{V_m \left(\frac{q + E_c}{q + E_m} \right) + V_c} \quad (3)$$

式中 $q = 4.5$ GPa, 为一经验值。式中 V 为体积, 下标 m 、 c 分别表示金属与陶瓷。

热膨胀系数 α 的计算通常借用 Gulati 等人提出的双层平板模型^[7]如下:

$$\alpha = \frac{\alpha_m k_m V_m + \alpha_c k_c V_c}{k_m V_m + k_c V_c} \quad (4)$$

$$\text{式中, } k = \frac{E}{2(1-\nu)}$$

对于金属基涂层, 热导率的计算通常采用 Markworth 等人提及的数学模型, 如式 (5)^[8]所示:

$$\lambda = V_m \lambda_m + V_c \lambda_c + V_m V_c \frac{\lambda_m - \lambda_c}{\left(\frac{\lambda_c}{\lambda_m} \right) - 1 + V_m} \quad (5)$$

利用有限元法对金属-陶瓷系功能梯度材料进行计算时, 通常假定材料的性能为各向同性, 且不随温度发生变化。

4 根据隔热能力要求确定成分分布指数

当涂层内部存在温度差时, 热量将以热传导形式从涂层的高温一侧传递到低温一侧。设涂层上下两个表面均维持均匀温度, 分别为 T_1 和 T_2 , 且存在一定温差, 热量从上侧平面向下侧平面传递, 且已达到稳态。在沿涂层厚度方向, 取厚度微元 dy , 则其对应的温差为 dt 。

根据傅立叶定律, 存在关系:

$$\phi = -\lambda \cdot A \cdot \frac{dt}{dy} \quad (6)$$

式中, ϕ 为单位时间内沿 y 方向通过面积 A 的热量; λ 为热导率; “-”表示表示热流温度方向与温度升高方向相反。

(6) 式也可以表示为:

$$q = \frac{\phi}{A} = -\lambda \cdot \frac{dt}{dy} \quad (7)$$

式中, q 表示单位时间内沿 y 方向通过单位面积的热量。

根据式 (1), 涂层热导率是其位置坐标 y 与成分分布指数 p 的函数, 故热导率 λ 可表示为:

$$\lambda = \lambda(y, p) \quad (8)$$

将式 (8) 代入式 (7), 经分离变量并积分, 可得:

$$q = \frac{\Delta T}{\int_0^H \frac{dy}{\lambda(y, p)}} \quad (9)$$

$$\text{或者 } r = \int_0^H \frac{dy}{\lambda(y, p)} = \frac{\Delta T}{q} \quad (10)$$

式中 r 即涂层热阻。

由式 (10) 可知, 当 q 值以及涂层的隔热温度 ΔT 一定时, 涂层的热阻也是一定的; 且当涂层厚度 H 一定时, 热阻 r 为成分分布指数 p 的函数。

在实际的工程应用中, 热阻值 r 通常是可以根据工件的使用环境测得的, 结合涂层的厚度要求, 即可由式 (6)~式 (10) 推导出成分分布指数 p 。 p 的推导过程可通过逐次迭代逼近算法实现, 其计算流程如图 2 所示。通过输入涂层厚度 H 、隔热温度 ΔT 、加热功率 Φ 、受热面积 A 以及为试探性计算而预设的层数 n 及成分分布指数 p_0 , 最终可获得满足隔热能力要求条件下不同层数对应的成分分布指数。

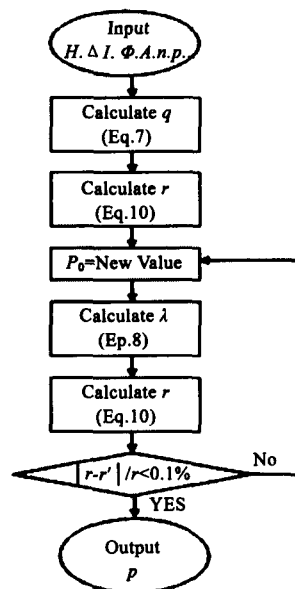


图 2 成分分布指数计算流程图

Fig.2 Calculation flow chart of composition gradient exponents

例如, 采用等离子喷涂法制备 Al/Ni-ZrO₂ 金属/陶瓷功能梯度涂层, 相关物性参数如表 1 所示。已知服役环境对涂层的有效加热功率为 2.30 kW, 且要求涂层的环境使用温度为 1200 ℃。可通过前述方法确定不同涂层层数时对应的成分分布指数。

结合涂层材料物性参数的数学模型, 将表 1 所示基本参数代入, 根据图 2 所示成分分布指数计算流程, 可获得总涂层厚度为 9mm 条件下不同层数 n 对应的成分分布指数 p , 如图 3 所示。图 3 中, 当 $n=3$ 时, $p=4.1$;

当 $n=5$ 时, $p=0.568$ 。由图可知, 在满足隔热性能要求的前提下, 随着涂层层数的增加成分分布指数将迅速下降。

表 1 材料基本物性参数

Table 1 Basic physical properties of materials	Al/Ni	ZrO ₂
$C_p/J \cdot g^{-1} \cdot K^{-1}$	0.649	0.502
$\lambda/W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$	17.2	1.02
E/GPa	91.9	40.84
ν	0.23	0.28
$\alpha/10^{-6} \cdot ^\circ C^{-1}$	14.8	8.20

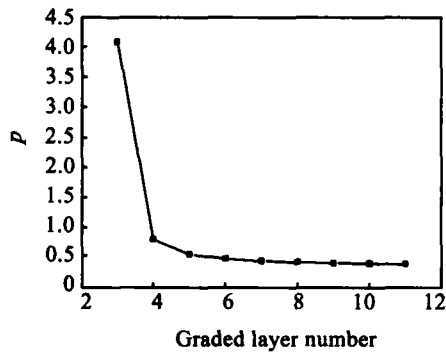


图 3 不同层数对应的成分分布指数

Fig.3 Composition gradient exponents for different layers

5 根据应力缓和要求确定涂层层数

当不同层数条件下涂层的成分分布指数确定后, 需由涂层的应力缓和要求进一步确定具体的涂层层数。这里所讨论的应力主要是针对服役环境中由于涂层各层温度不同使得各处热膨胀不匹配而引起热应力。热应力的大小和分布情况是评定涂层性能好坏的关键因素。本研究将利用 ANSYS 有限元法软件计算功能梯度热障涂层不同层数的热应力分布, 通过对比计算结果, 最终实现对涂层层数的优化设计。

应力计算所需数学模型如式 (11) 所示:

$$\{\sigma\} = [D](\{\epsilon\} - \{\epsilon'\}) \quad (11)$$

其中, $\{\sigma\}$ 为应力张量, $[D]$ 为弹性矩阵, $\{\epsilon\}$ 为弹性应变矩阵, $\{\epsilon'\}$ 为热应变矩阵。

热应变 $\{\epsilon'\}$ 的计算则根据式 (12) 计算如下

$$\{\epsilon'\} = \alpha(T - T_{ref}) \quad (12)$$

其中, α 为热膨胀系数, T 为当前温度, T_{ref} 为参考温度, 即无应力状态时的温度。

如图 4 所示, 可选用直径为 50 mm, 厚 9 mm 的圆盘形试样进行计算。考虑模型具有轴对称性, 仅取其中一矩形截面, 构建有限元计算几何模型如图 5 所示。

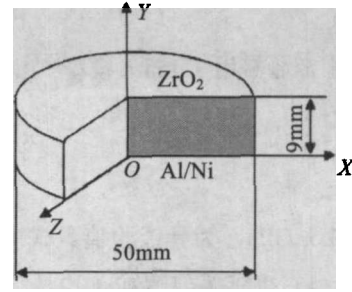


图 4 功能梯度涂层试样示意图

Fig. 4 A sample of FGM coatings

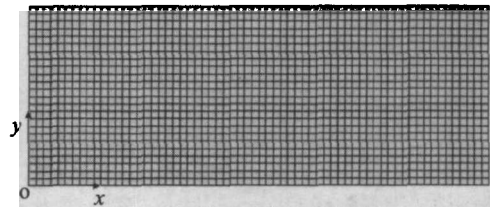


图 5 有限元计算几何模型

Fig.5 FGM geometry model

根据已知不同层数的成分分布指数, 输入相应物性参数, 可计算获得不同层数对应的径向热应力变化曲线 (X 方向) 和轴向热应力 (Y 方向) 变化曲线, 如图 6、图 7 所示, 图中横坐标为过原点 O 沿 y 方向的轴向位置。图 6、图 7 给出了 3、5、7、9、11、20 以及 50 层时热应力的计算结果。其中, 20 层~50 层的材料虽然在实际生产中由于加工成本及效益等因素不可能采纳, 但是可以相关理论计算结果对功能梯度材料热应力缓和的优化设计具有重要指导意义。

图 6 为不同层数的功能梯度材料径向热应力沿轴向位置的变化曲线。由图可知, 材料径向热应力轮廓呈锯齿状且应力峰值在梯度层界面附近。3 层材料的最大径向拉应力值为 167 MPa, 远远大于 5 层材料 44 MPa, 当材料层数大于 5 层时, 随着层数的增加, 径向热应力变化渐渐趋于平滑, 界面处应力集中情况得到缓和。

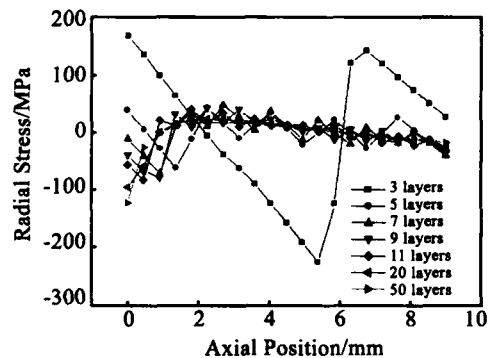


图 6 径向热应力沿轴向变化曲线

Fig.6 Radial thermal stress along axial positions

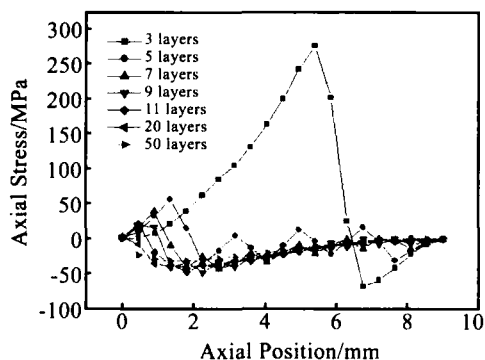


图 7 轴向热应力沿轴向变化曲线

Fig.7 Axial thermal stress along axial positions

图 7 为轴向热应力沿轴向位置的变化曲线, 变化趋势与径向应力类似。材料轴向热应力轮廓呈锯齿状且应力峰值出现在梯度层界面附近。随着材料层数的增加, 轴向应力显著降低, 5 层材料的最大拉应力 (56 MPa) 仅为 3 层材料 (275 MPa) 的 20%。

由于功能梯度材料层数的增多会加大工艺难度, 增加成本。因此, 在满足隔热能力及应力缓和条件下, 最终可选取 5 层作为涂层层数的优化设计结果。根据前面的计算结果, 成分分布指数 $p=0.568$ 。相关计算结果可直接指导功能梯度涂层材料的制备。

6 结 论

针对功能梯度热障涂层在传统结构设计方法中多

采用单一设计准则这一问题, 提出了隔热与应力缓和组合设计思想。对计算过程中所需的密度、泊松比、弹性模量、热膨胀系数、热导率等物性参量模型进行了比较和优化选择, 通过隔热性能分析, 利用逐次迭代逼近算法可获得不同层数条件下对应的成分分布指数, 并根据应力缓和需求最终确定出涂层层数及相应的成分分布指数。本研究所提出的涂层性能组合设计思想对于功能梯度材料的制备与应用具有重要的指导意义。

参考文献 References

- [1] Williamson R L, Rabin B H, Drake J T. *Journal of Applied Physics*[J], 1993, 74: 1310
- [2] Drake J T, Williamson R L, Rabin B H. *Journal of Applied Physics*[J], 1993, 74: 1321
- [3] Giannakopoulos A E, Suresh S, Finot M *et al. Acta Metallurgica et Materialia*[J], 1995, 43: 1335
- [4] Wakashima K, Hirano T, Nino M. *Space Application of Advance Structure Materials*[R], ESP SP-303, 1990: 97
- [5] Hull D, Clyne T W. *An Introduction to Composite Materials*[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1996: 352
- [6] Kingery W D, Bowen H K, Uhlmann D R. *Introduction to Ceramics*[M]. New York: Wiley-Interscience, 1976: 604
- [7] Gulati S J, Plummer W A. *AIP Conf. Proc*[C]. 1974, 17: 196
- [8] Markworth A J, Ramesh K S, Parks J W P. *Journal of Material Science*[J], 1995: 2183

Integration Design of Heat Insulation and Stress Relaxation for FGM Thermal Barrier Coatings

Fan Qunbo, Ma Zhuang, Wang Fuchi, Wang Lu

(Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

Abstract: The idea of the integration design of heat insulation and stress relaxation for FGM thermal barrier coating was suggested, and a physical model of basic parameters of material properties was given in the present paper. First, the composition gradient exponents for different layer numbers were designed according to the heat insulation requirement; then the axial and radial stress distributions matching with the above mentioned exponents were calculated, and finally, the coating structures which meet the criterious of the integration design were worked out in combination with the fabrication cost of coating materials.

Key words: FGM thermal barrier coatings; heat insulation; stress relaxation

Biography: Fan Qunbo, Lecturer, School of Materials Science and Engineering, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, P. R. China, Tel: 0086-10-68912712-666, E-mail: fanqunbo@bit.edu.cn