

doi: 10.11933/j.issn.1007-9289.2015.05.010

YSZ 活性扩散障结构应力的有限元分析*

胡 祯¹, 李争显^{1,2}, 刘林涛¹, 杨晨曦¹

(1. 西安建筑科技大学 冶金工程学院, 西安 710055; 2. 西北有色金属研究院 腐蚀与防护研究所, 西安 710016)

摘 要: 利用有限元分析法建立了镍基合金基体/ $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Zr}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{NiCrAlY}$ 粘结层模型, 模拟计算了温度快速变化时扩散障的应力集中区域及应力水平, 分析了扩散障的厚度及界面形貌对扩散障结构应力的影响。结果表明: 在温度急剧变化过程中, 扩散障内应力水平较高的区域主要出现在 Al_2O_3 层, 特别是在 Al_2O_3 层中段、非平整界面的尖点、拐点处以及曲面的凹凸不平处; 扩散障内应力值随 Al_2O_3 层和 Zr 层的增大而减小, 且 Al_2O_3 层厚度变化对应力的影响比 Zr 层厚度变化的影响大; 非平整界面最大等效应力比平整界面高约 1 000 MPa。

关键词: 活性扩散障; 有限元; 结构应力

中图分类号: TG174.44

文献标志码: A

文章编号: 1007-9289(2015)05-0064-07

Finite Element Analysis of Structural Stress in YSZ Active Diffusion Barrier Coating

HU Zhen¹, LI Zheng-xian^{1,2}, LIU Lin-tao¹, YANG Chen-xi¹

(1. School of Metallurgical Engineering, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an 710055; 2. Institute of Corrosion and Protection, Northwest Institute for Non-ferrous Metal Research, Xi'an 710016)

Abstract: To analyze the stress concentration areas and stress level in the active diffusion barrier coating, a finite element analysis (FEA) model of Ni-based substrate/ $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Zr}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{NiCrAlY}$ bond coating was established under a rapidly changing temperature condition. The effects of the thickness and interface morphology of the diffusion barrier coating were evaluated. The results show that high stress concentration areas were mainly in the alumina scale, especially in the middle part, the sharp points, inflections and interface irregularities, during the drastic change of temperature. The stress decreases with increasing thickness of Al_2O_3 scale and the zirconium layer. Meanwhile, the effect of stress on the thickness of Al_2O_3 scale is more sensitive than that of the zirconium layer. Additionally, the maximum equivalent stress on the non-flat interface is 1 000 MPa higher than that of the flat interface.

Keywords: active diffusion barrier coating; finite element; structural stress

0 引 言

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^[1-2],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^[3-4]。为了抑止有害元素的互扩散,在涂层与基体之间添加扩散障是一种有效的方法^[5-7]。按照材料的属性可将扩散障分为金属、陶瓷两大

类。陶瓷因其良好的高温稳定性和阻扩散能力成为常用的扩散障材料,而陶瓷扩散障与合金基体的界面结合强度低是阻碍其实际应用的主要原因^[8]。为提高其界面结合强度,王福会等^[9]提出了活性扩散障这一概念。活性扩散障是利用氧化物平衡分解压的不同,通过高温处理或服役环境的高温使 AO_x 与扩散元素发生氧化反应,原位生成“三明治”结构的扩散障,使扩散障的结合

收稿日期: 2015-06-03; 修回日期: 2015-08-30; 基金项目: * 国家重点基础研究发展计划(973 计划)(2012CB625102)

通讯作者: 李争显(1962-), 男(汉), 教授, 博士; 研究方向: 表面腐蚀与防护; Tel: (029) 8623 1077; E-mail: lizx@c-nin.com

网络出版日期: 2015-09-09 15:11; 网络出版地址: <http://www.cnki.net/kcms/detail/11.3905.TG.20150909.1511.004.html>

引用格式: 胡祯, 李争显, 刘林涛, 等. YSZ 活性扩散障结构应力的有限元分析 [J]. 中国表面工程, 2015, 28(5): 64-70. Hu Z, Li Z X, Liu L T, et al. Finite element analysis of structural stress in YSZ active diffusion barrier coating [J]. China Surface Engineering, 2015, 28(5): 64-70.

力提高。该课题组在 MCrAlY/DD6 之间制备出 YSZ 活性扩散障,经 1 000 °C/15 h 后,YSZ 转化成 $Al_2O_3/Zr+Y_2O_3/Al_2O_3$ 的“三明治”结构。研究发现:原位反应生成的 Al_2O_3 与 MCrAlY 涂层和基体的结合性能较好且这种结构可有效抑制元素的扩散。

虽然扩散障可以有效地抑制元素的互扩散,但却加入增加了界面数量造成界面的不稳定及不匹配,影响了活性扩散障的使用寿命,限制其实际应用^[10]。而活性扩散障还存在陶瓷/金属/陶瓷界面,材料性能的差异对涂层的寿命也有很大的影响^[11]。一方面,金属和陶瓷物理性能的不同,使得“三明治”结构厚度对涂层热应力有一定影响。另一方面,涂层的制备过程无法保证基体表面的绝对平整,在沉积 ZrO_2 先驱层前基体表面的凹凸不平、沉积过程中电流不稳定等因素可能会导致扩散障界面出现凹凸不平;在热处理过程中由于粘结层和基体中 Al 元素分布的不均匀性及扩散速率的不同,使生成的 Al_2O_3 界面不平整。扩散障结构厚度以及界面的不平整是影响扩散障结构应力的两个主要因素。目前在这方面还未见有相关的文献报道,而且涂层内部应力水平的测试方法也有一定的局限性。文中运用有限元方法,建立活性扩散障有限元模型,着重比较分析温度骤变条件下扩散障结构厚度及界面形貌对其应力的影响。

1 有限元分析模型

1.1 有限元模型的建立

模拟以 RenéN5 镍基合金/ ZrO_2 先驱层/Ni

CrAlY 粘结层为研究对象。且由于基体和粘结层之间的 ZrO_2 先驱层在制备及热处理工程中会与基体和粘结层中扩散的 Al 元素反应,生成 $Al_2O_3/Zr/Al_2O_3$ “三明治”结构的扩散障,故分析模型结构为 NiCrAlY/ $Al_2O_3/Zr/Al_2O_3$ /RenéN5 镍基合金。采用 ANSYS Workbench 软件,首先建立平板模型,然后计算模型的温度场分布,最后进行结构分析求得耦合应力结果。模型尺寸如图 1 所示。

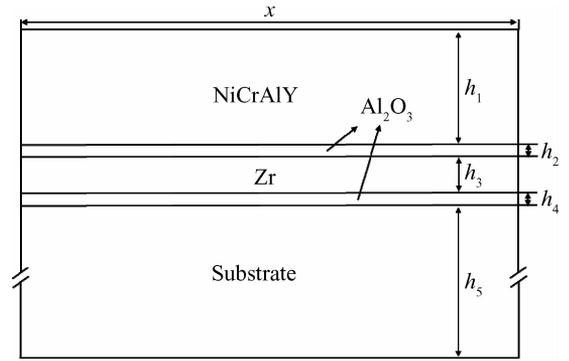


图 1 有限元模型尺寸示意图

Fig. 1 Size diagram of the finite element model

粘结层 $h_1 = 16.5 \mu m$; Al_2O_3 层 $h_2 = h_4 = 1 \mu m$; Zr 层 $h_3 = 3 \mu m$; 基体 $h_5 = 2 mm$; 模型宽度 $x = 312.5 \mu m$ 。

模拟模型作以下假设:① 假定在稳定的工作环境中,涂层与基体的温度相同;② 不考虑制备过程中和热处理反应过程中的残余应力,不考虑元素的扩散。

1.2 材料参数

基体及涂层材料的性能参数^[12-14]见表 1。

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/ ($kg \cdot m^{-3}$)	Thermal conductivity/ ($W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$)	Thermal expansion coefficient/($10^{-6} \cdot ^\circ C$)	Specific heat/ ($J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$)	Young's modulus/GPa	Passion's ratio
NiCrAlY	20-1 600	7 380	5.8-17.0	13.6-17.6	450	110-200	0.30-0.33
Al_2O_3	20-1 600	3 984	4-10	8.0-9.6	755	320-400	0.23-0.25
Zr	20	6 511	22.7	5.8	0.27	88	
René N5	20-1 100	8 780	8.00-28.95	14.8-18.0	440	120-220	0.31-0.35

1.3 边界条件及温度加载

边界条件:为保证模型在计算过程中不发生

移动和转动,对模型 A 处进行 X,Y 位移方向的约束($X=Y=0$);对 B 处进行 Y 位移方向的约束

($Y=0$),如图2所示。

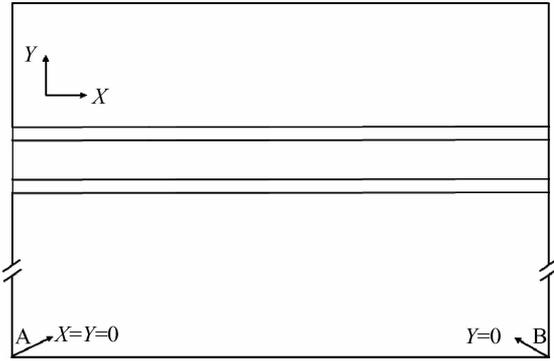


图2 模拟边界条件示意图

Fig. 2 Boundary conditions of the simulated model

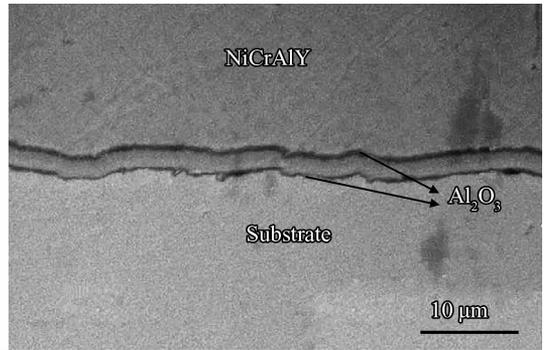
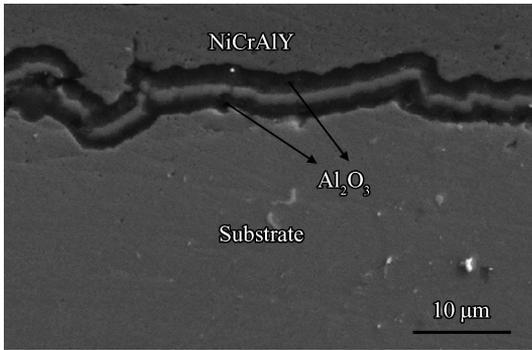


图3 950 °C热震后试样不同区域扩散障的显微形貌

Fig. 3 Cross section morphologies of different area on the active diffusion barrier coating after 950 °C heat shock

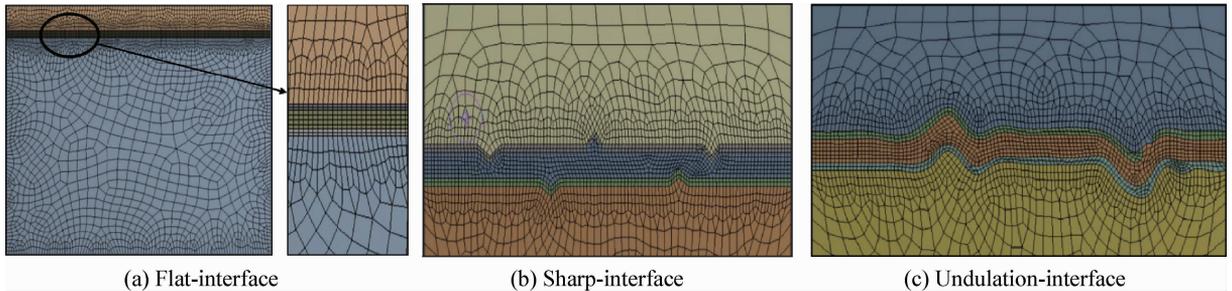


图4 模型网格划分图

Fig. 4 Finite element mesh of the models

2 结果与分析

图5为1 100 °C热震后的扩散障显微形貌。采用物理气相沉积法(EB-PVD)在RenéN5镍基单晶合金基体上先后沉积 ZrO_2 先驱层及粘结层,经氧化处理得到“三明治”结构的扩散障,然后对其进行1 100 °C的热震试验,最后观察试样横截面的显微形貌。图中可明显观察到 Al_2O_3 层出现了开裂。在温度变化的过程中,材料热膨

胀的不匹配使扩散障内(特别是陶瓷层)出现应力集中,而陶瓷的塑性差,造成裂纹在该处萌生及扩展最终出现开裂。

1.4 网格划分

图3为采用EB-PVD制备所得试样经950 °C热冲击后的扩散障显微形貌。基于实际形貌,建立了3种不同界面形貌的扩散障模型,即理想的平面界面扩散障(模型I)、简化的尖角界面扩散障(模型II)以及简化的曲面界面扩散障(模型III)。图4模型的网格划分图,3种模型对NiCrAlY粘结层/ Al_2O_3 界面、 $Al_2O_3/Zr/Al_2O_3$ 界面和 Al_2O_3 /基体界面处的网格均进行了精细划分。

胀的不匹配使扩散障内(特别是陶瓷层)出现应力集中,而陶瓷的塑性差,造成裂纹在该处萌生及扩展最终出现开裂。

图6为1 100 °C热冲击模拟后模型I的X轴方向应力分布图。图中应力最大的红色区域主要集中在 Al_2O_3 层。扩散障内应力在735.45~2 489.9 MPa之间,且 Al_2O_3 层的应力值比Zr层高出约1 000 MPa。原因在于金属塑性比陶瓷好,可以通过塑性变形释放部分应力。另外,由

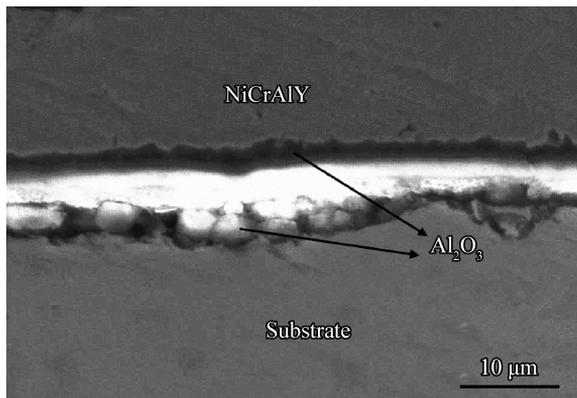


图 5 1100 °C 热震后试样的截面形貌

Fig. 5 Cross section morphology of the active diffusion barrier coating after 1100 °C heat shock

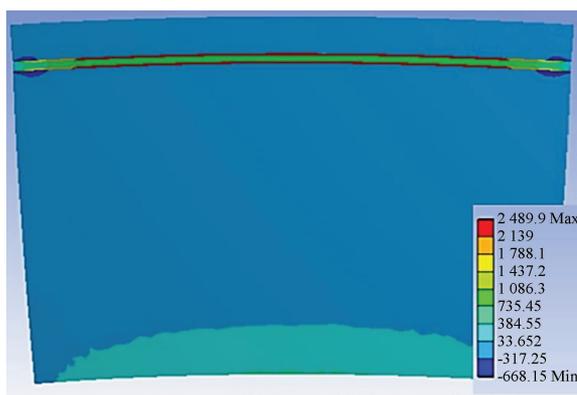


图 6 1100 °C 热冲击模拟后模型 I 的 X 轴方向应力分布
Fig. 6 Normal stress (X-axis) of the model I after 1100 °C heat shock simulation

于温度的快速变化导致涂层与基体存在温度差, 基体金属的热膨胀量小于涂层的膨胀量, 使涂层受到基体的约束而发生弯曲变形, 图中可以观察到涂层整体有轻微的弯曲, 涂层弯曲变形的作用力使得内部上凸的陶瓷层的应力比靠近边缘处的陶瓷层内的应力大。

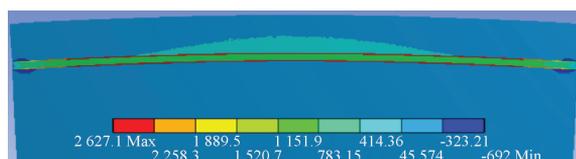
模拟结果和试验结果均说明 Al_2O_3 层是裂纹易萌生及扩展区域, 严重的会导致涂层整体性剥落。由于扩散障内存在陶瓷/金属界面且物理性能差别较大, 故下文进一步分析扩散障的厚度及界面形貌对其结构应力的影响。

2.1 扩散障厚度因素

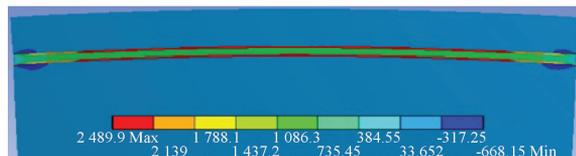
2.1.1 Al_2O_3 层厚度的影响

图 7 为不同 Al_2O_3 厚度模型经 1100 °C 热冲击模拟所得的 X 轴(平行于界面)方向的应力分布图。图 7(a)~(e) 中 Al_2O_3 层的厚度分别为

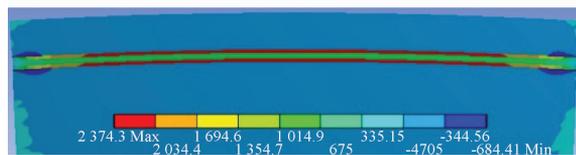
0.5、1.0、1.5、2.0 和 2.5 μm , Zr 层厚度均为 3 μm 。模拟结果发现应力集中区域均出现在扩散障的 Al_2O_3 层。这主要是由于材料的热传导, 杨氏模量和泊松比等物理参数的不匹配造成的。



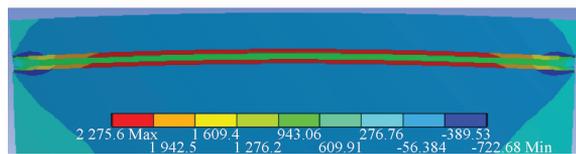
(a) Al_2O_3 : 0.5 μm , Zr: 3 μm



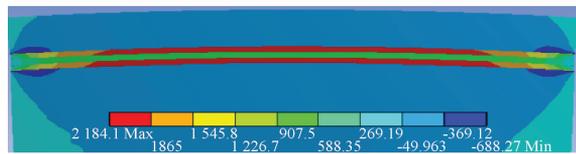
(b) Al_2O_3 : 1.0 μm , Zr: 3 μm



(c) Al_2O_3 : 1.5 μm , Zr: 3 μm



(d) Al_2O_3 : 2.0 μm , Zr: 3 μm



(e) Al_2O_3 : 2.5 μm , Zr: 3 μm

图 7 1100 °C 热冲击模拟后不同厚度 Al_2O_3 层的 X 轴方向应力分布图

Fig. 7 Normal stress (X-axis) of different Al_2O_3 thickness models after 1100 °C heat shock simulation

由图可见, 随着 Al_2O_3 层的增厚, 最大应力值从 2627.1 MPa 减小到了 2184.1 MPa。在热冲击过程中, 因金属的热膨胀系数大于陶瓷, 故金属层的热膨胀量大于陶瓷层, 金属层通过界面作用拉伸陶瓷层, 陶瓷层受到 X 方向的拉应力作用, 相应的陶瓷层对金属层产生压缩应力。但由于陶瓷层厚度仅有几个微米, 无法起到隔热作用, 陶瓷层的增厚对温度影响不大, 金属层对陶瓷层的拉伸作用变化亦不大, 使陶瓷层对金属层

的压缩应力随其厚度的增厚而增大,减小了金属层对陶瓷层的拉伸作用。

2.1.2 Zr 层厚度的影响

选取的 Zr 层厚度参数分别为 3、4、5、6、7、8、9 和 10 μm , Al_2O_3 层均为 2 μm 。1 100 $^\circ\text{C}$ 热冲击模拟结果如图 8 所示,随着 Zr 层的增厚,最大应力值减小约 250 MPa。应力降低的主要原因是金属的塑性比陶瓷好,延性层的增厚使得扩散障整体的塑性改善,且金属延性层可以通过形变消耗掉部分能量。而从图 7 的结果发现扩散障内应力随陶瓷层增厚度减小了约 443 MPa。这是因为陶瓷层的杨氏模量是金属层的 4~5 倍,故陶瓷层的影响比金属层大。

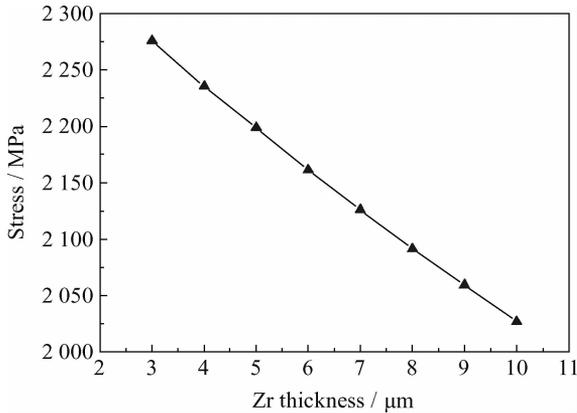


图 8 1 100 $^\circ\text{C}$ 热冲击模拟后模型 Zr 层厚度与应力的关系

Fig. 8 Relationships between Zr thickness and normal stress after 1 100 $^\circ\text{C}$ heat shock simulation

2.1.3 Al_2O_3 层与 Zr 层厚度比的影响

图 9 反映了 1 100 $^\circ\text{C}$ 热冲击条件下 Al_2O_3 层和 Zr 层厚度比对扩散障应力的影响。从图中可以看出, Al_2O_3 层和 Zr 层厚度相差较大时,扩散障内应力值约 2 600 MPa;随 Al_2O_3 层与 Zr 层厚度比的减小,扩散障内的应力值呈减小的趋势,当 Al_2O_3 层和 Zr 层厚度比为 1 : 1 时其应力值为 1 800 MPa 左右。应力值随 Al_2O_3 层和 Zr 层厚度差的减小而减小了 400 MPa。这主要是由于陶瓷层压应力和金属延性层的综合作用使扩散障内应力随二者的厚度差的减小而降低。

从上述分析结果可知:在扩散障结构设计时,确定合适的 ZrO_2 厚度,使其在保证阻扩散效果的同时尽可能生成的厚度相近的“三明治”结构,对于减小扩散障内热应力,延长扩散障的寿命至关重要。

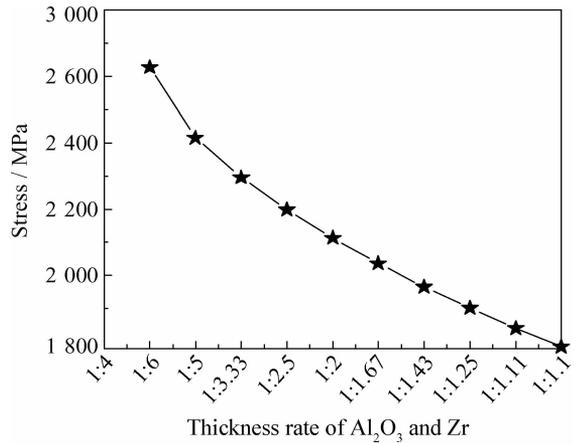


图 9 1 100 $^\circ\text{C}$ 热冲击模拟后模型 Al_2O_3 及 Zr 层厚度比与应力的关系

Fig. 9 Relationship between the thickness rate of the $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Zr}$ and normal stress after 1 100 $^\circ\text{C}$ heat shock simulation

2.2 扩散障界面形貌因素

从图 3 中看可以观察到 950 $^\circ\text{C}$ 热冲击后,在凹凸起伏的界面内出现了裂纹及断裂,而相对较平整的界面内未出现断裂。这一现象说明扩散障的界面形貌对其结构应力及寿命也有很大的影响,故下文选取 3 种不同的界面形貌,对其进行了 950 $^\circ\text{C}$ 热冲击的模拟,研究不同界面形貌对结构应力水平的影响。

2.2.1 平面界面的影响

图 10 为平面界面(模型 I)的等效应力分布图。可以看出, Al_2O_3 层中段处的应力最大,约为 1 682.9~1 892.7 MPa。Zr 层的应力值在 424.26~843.8 MPa。快速升温过程中,由于温度梯度差及金属与陶瓷材料热物性的不匹配,导致扩散障内存在很大的拉应力,而陶瓷没有金属的延性,热应力无法通过塑性变形弱化,故 Al_2O_3 层内的应力水平比 Zr 层高约 1 200 MPa。

2.2.2 尖点界面的影响

图 11 为尖点界面(模型 II)的等效应力分布图。可见等效应力的最大值出现在尖点和拐点处。其中最大应力值高达 2 671.6~3 005 MPa, Al_2O_3 层中段的应力值也有 2 005~2 338 MPa。模型 II 的等效应力比模型 I 高约 200~1 100 MPa,这除了温度梯度差及异种材料热物性不匹配两个因素外,尖点的存在也会造成严重的应力集中,导致陶瓷层局部应力水平的增大,容易成为裂纹萌生区域。

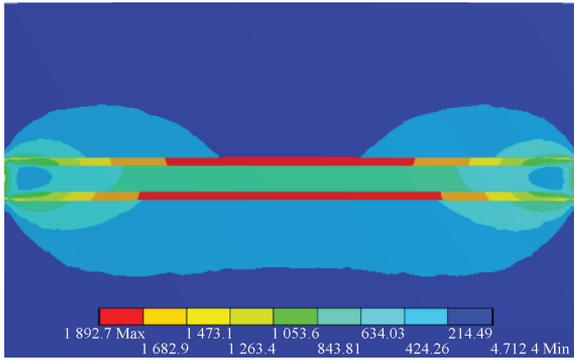


图 10 950 °C 热冲击模拟后平面界面扩散障的等效应力分布

Fig. 10 Equivalent stress of flat-interface active diffusion barrier coating after 950 °C heat shock simulation

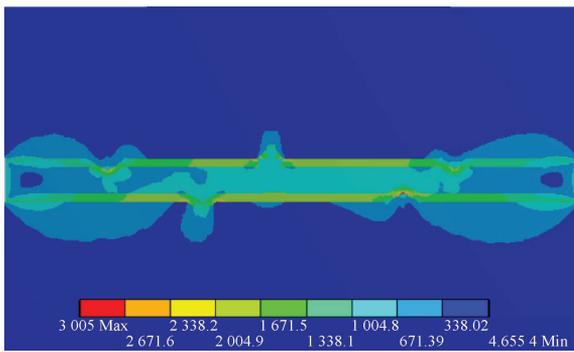


图 11 950 °C 热冲击模拟后尖点界面扩散障的等效应力分布

Fig. 11 Equivalent stress of sharp-interface active diffusion barrier coating after 950 °C heat shock simulation

2.2.3 曲面界面的影响

图 12 为曲面界面(模型 III)的等效应力分布图,可见危险区域主要分布于界面的上凸和下凹处,这些区域的等效应力值高达 2 812.6 ~ 3 163.6 MPa,且圆弧处的应力值沿着半径方向逐渐递减。模型 III 的等效应力值比模型 I 高出约 300~1 200 MPa。因为在升温过程中,陶瓷层受 X 方向的拉应力,当界面形貌为平面时,界面处垂直于界面的 Y 方向的应力为零。对于界面为曲面的情况,Y 方向的应力不再为零,既有拉应力也有压应力。金属和陶瓷热膨胀的不匹配使弯曲处陶瓷层受拉应力。双重拉应力的综合作用使得界面凹凸处的应力值很高。

图 13 为 3 种界面形貌模型的最大等效应力柱状图。该图显示:平整界面比非平整界面的最大等效应力小约 1 000 MPa,而两种非平整界面

的最大等效应力值相差不大。说明界面形貌对扩散障应力有很大影响,界面的不平整使陶瓷层受力变得更加复杂,故在涂层制备过程中应保证基体和涂层界面的平整性,降低其应力水平。

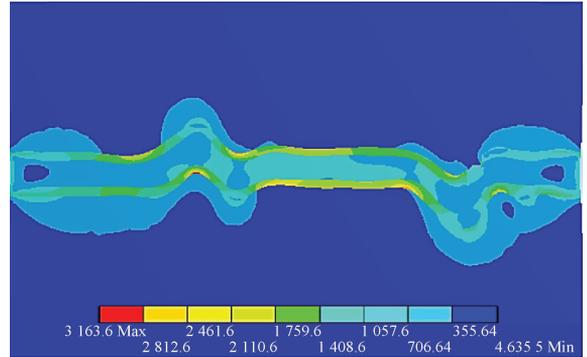


图 12 950 °C 热冲击模拟后曲面界面扩散障的等效应力分布

Fig. 12 Equivalent stress of undulation-interface active diffusion barrier coating after 950 °C heat shock simulation

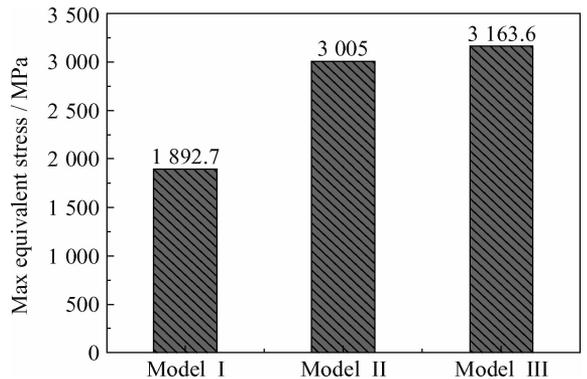


图 13 950 °C 热冲击模拟后不同界面形貌模型最大等效应力柱状图

Fig. 13 Maximum equivalent stress of different interface active diffusion barrier coating after 950 °C heat shock simulation

3 结 论

- (1) 在温度急剧变化过程中,扩散障内应力水平较高的区域主要出现在 Al_2O_3 层,特别是 Al_2O_3 层中段、非平整界面的尖点、拐点处以及曲面的凹凸不平处。
- (2) 扩散障内应力值随 Al_2O_3 层和 Zr 层的增大减小,且 Al_2O_3 层厚度变化对应力的影响比 Zr 层的影响大。
- (3) 非平整界面扩散障结构的最大等效应力

比平整界面扩散障结构的最大等效应力高约 1 000 MPa,因此说明非平整界面的扩散障结构在温度急剧变化过程中更易产生裂纹。

参考文献

- [1] 郑蕾, 郭洪波, 郭磊, 等. 新一代超高温热障涂层研究 [J]. 航空材料学报, 2012, 32(4): 14-24.
Zheng L, Guo H B, Guo L, et al. New generation thermal barrier coatings for ultrahigh temperature applications [J]. Journal of Aeronautical Materials, 2012, 32(4): 14-24. (in Chinese).
- [2] Rajendran R. Gas turbine coatings—an overview [J]. Engineering Failure Analysis, 2012, 26(12): 355-369.
- [3] Padture N P, Gell M, Jordan E H. Materials science—thermal barrier coatings for gas-turbine engine applications [J]. Science, 2002, 296: 280-284.
- [4] Peng H, Guo H B, Yao R, et al. Improved oxidation resistance and diffusion barrier behaviors of gradient oxide dispersed NiCoCrAlY coatings on superalloy [J]. Vacuum, 2010, 85(5): 627-633.
- [5] Gleeson B. Thermal barrier coatings for aeroengine application [J]. Journal of Propulsion and Power, 2012, 22(2): 375-383.
- [6] Zhou X, Xu Z H, Mu R, et al. Thermal barrier coatings with a double-layer bond coat on Ni₃Al based single-crystal superalloy [J]. Journal of Alloys and Compounds, 2014, 591(1): 41-51.
- [7] Li W Z, Li Y Q, Wang Q M, et al. Oxidation of a NiCrAlYSi overlayer with or without a diffusion barrier deposited by one-step arc ion plating [J]. Corrosion Science, 2010, 52(2): 1753-61.
- [8] 李伟洲, 王启民, 孙超. 高温防护涂层扩散阻挡层的研究进展 [J]. 材料导报, 2009, 23(9): 30-34.
Li W Z, Wang Q M, Xun C. Development of diffusion barrier in high temperature coating systems [J]. Materials Review; Review Articles, 2009, 23(9): 30-34 (in Chinese).
- [9] Guo C, Wang B W, Cheng Y X, et al. Ytria partially stabilized zirconia as diffusion barrier between NiCrAlY and Ni-base single crystal René N5 superalloy [J]. Corrosion Science, 2015, 94: 122-128.
- [10] 蔡妍, 易军, 陆峰, 等. 热障涂层金属元素扩散阻挡层研究进展 [J]. 材料工程, 2011, 23(9): 92-96.
Cai Y, Yi J, Lu F, et al. Development in research on metal diffusion barrier of TBCs [J]. Materials Engineering, 2011, 23(9): 92-96 (in Chinese).
- [11] Eriksson R, Sjöström S, Brodin H, et al. TBC bond coat-top coat interface roughness: influence on fatigue life and modelling aspects [J]. Surface & Coatings Technology, 2013, 236(24): 230-238.
- [12] 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 & Technology, 2014, 30(4): 371-380.
- [13] 中国航空材料手册编辑委员会. 中国航空材料手册: 第二卷. 变形高温合金—铸造高温合金 [M]. 第2版. 北京: 中国标准出版社, 2002.
China aviation materials manual editing committee. China aeronautical materials handbook Vol. 2: Wrought superalloy—cast superalloy [M]. 2nd ed. Beijing: China Standard Press, 2002 (in Chinese).
- [14] Chemical elements(sorted by number) [EB/OL]. (2014-06-04)[2015-06-03]. [http://en.wikipedia.org/wiki/Book:chemical_elements_\(sorted_by_number\)](http://en.wikipedia.org/wiki/Book:chemical_elements_(sorted_by_number)).

(责任编辑: 王文宇)