

热失配应力下热障涂层表面裂纹扩展的数值模拟

于庆民, 石永志

(西北工业大学, 陕西 西安 710072)

摘要: 采用扩展有限元 (XFEM) 法研究了高温下热失配应力对热障涂层表面裂纹扩展的影响。结果表明, 在热失配应力的作用下, 表面裂纹的位置、倾斜角度和长度对裂纹扩展的长度、能量释放率和裂尖的应力水平有着显著的影响; 对于初始长度相同的裂纹, 界面波谷处裂纹扩展长度最长, 能量释放率最大; 倾斜角度越大, 裂纹扩展长度越短, 应变能越大; 裂纹初始长度越大, 裂纹的扩展长度越长且扩展速率越快, 能量释放率越大。存在多条表面裂纹的情况下, 其裂纹扩展相互影响。

关键词: 热障涂层; 热失配应力; 表面裂纹; 扩展有限元

中图分类号: TG34

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2018)10-3052-06

典型热障涂层系统是由基体 (SUB)、粘结层 (BC) 和陶瓷顶层 (TC) 以及热生长氧化物 (TGO) 构成的多层结构, 拥有良好的高温力学性能并且抗高温腐蚀、氧化等, 因而被广泛应用于发动机涡轮叶片等热端部件。

由于在高温下持续工作, 导致热障涂层失效的因素有很多, 如复杂的几何结构、材料参数不匹配、高温氧化、烧结效应及相变和冲蚀, 与外物撞击等^[1-3], 主要表现在界面裂纹失效和陶瓷层内部裂纹失效。已有很多学者对热障涂层界面裂纹与表面裂纹做了研究。Hutchinson 和 Suo^[4]的研究表明, 对只考虑弹性性质的涂层系统, 当应力达到 GPa 量级的时候, 已经足以引起涂层开裂。Bäker 和 Rösler^[5]发现界面裂纹扩展倾向于远离界面, 并且当摩擦存在时, 这种现象更为明显。Zhou 和 Kokini^[6]研究了涂层表面裂纹形态对界面断裂的影响, 发现裂纹长度越短、裂纹密度越大, 越有利于提高涂层界面的抗断裂能力。同时 Michlika 和 Berndt^[7]的研究表明, 涂层表面的微小裂纹可以削弱界面裂纹的形成。Erdogan 和 Ozturk^[8,9]研究了涂层表面内的弹性多裂纹问题, 发现周期性裂纹对涂层表面应力松弛有影响。Evans^[10,11]等研究了粗糙度等因素对涂层失效的影响, 发现涂层中的应力取决于界面的粗糙度, 越大的粗糙度可能越早地引起涂层的失效。Zhang^[12]等研究了界面粗糙度对涂层系统表面能量释放率、应力水平、裂纹扩展长度的影响, 发现由于界面的周期性, 能量释放率成周期性分布, 表面裂纹朝

着应力水平大的位置扩展。Fan^[13]等研究了在拉力作用下热障涂层界面断裂的问题, 发现涂层失效不仅有裂纹的扩展和聚合, 而且有涂层的屈曲和剥落。Zhu^[14]等模拟了在拉力作用下热障涂层表面裂纹和界面裂纹的相互作用, 结果表明, 表面裂纹密度和界面粘附能越大, 界面分离的可能性越小。

实际上, 热障涂层在高温环境下工作, 各层弹性模量、热膨胀系数的不同会导致热失配应力的产生, 在升温 and 降温过程中尤为明显^[15,16]。尽管针对涂层系统中的界面裂纹和表面裂纹问题已做了大量的研究, 但对温度作用下热障涂层表面裂纹扩展问题的研究不多。本研究采用扩展有限元法分析升温过程中产生的热失配应力对涂层表面裂纹扩展行为的影响, 考虑表面裂纹的位置、倾斜角度和长度等因素, 并研究多条裂纹的扩展情况。

1 有限元模型

1.1 几何模型

图 1 所示为热障涂层几何模型, 模型包括 4 层: 基体层 (SUB)、粘结层 (BC)、氧化层 (TGO) 和陶瓷层 (TC)。厚度分别为 1.6 mm、5 μm 、0.1 mm 和 0.25 mm, TC/TGO 和 TGO/BC 界面采用正弦曲线, 波长为 60 μm , 振幅为 10 μm , 采用 2 个周期的波长模型。不考虑 TGO 的动态生长过程。

1.2 材料参数

表 1~4 为 4 层材料的参数数据。TC 层材料为

收稿日期: 2017-10-09

基金项目: 中央高校基本科研业务费专项资金 (3102015ZY031)

作者简介: 于庆民, 男, 1975 年生, 博士, 副教授, 西北工业大学力学与土木建筑学院, 陕西 西安 710072, 电话: 029-88431000, E-mail: qingminyuan@163.com

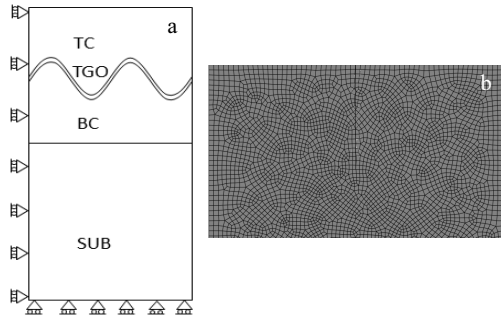


图 1 热障涂层模型示意图和裂纹局部网格图

Fig.1 Model of thermal barrier coatings (a) and local mesh maps of crack (b)

表 1 TC 层材料 (8YSZ) 参数

Table 1 Material parameters of TC layer (8YSZ)^[17,18]

$T/^\circ\text{C}$	$\alpha/\times 10^{-6}\cdot^\circ\text{C}^{-1}$	E/GPa	ν
25	9.68	17.5	0.2
100	-	-	0.2
200	9.7	-	0.2
400	-	-	0.2
600	-	-	0.2
700	9.88	-	0.2
800	-	-	0.2
900	-	12.4	0.2
1000	10.34	-	0.2
1165	-	-	0.2

表 2 TGO 层材料 (Al_2O_3) 参数

Table 2 Material parameters of TGO layer (Al_2O_3)^[17,18]

$T/^\circ\text{C}$	$\alpha/\times 10^{-6}\cdot^\circ\text{C}^{-1}$	E/GPa	ν
25	5.1	380	0.27
100	-	-	0.27
200	-	-	0.27
400	-	-	0.27
600	-	353	0.27
700	-	-	0.27
800	-	338	0.27
900	-	-	0.27
1000	9.8	312	0.27
1165	-	-	0.27

表 3 BC 层材料 (MCrAlY) 参数

Table 3 Material parameters of BC layer (MCrAlY)^[17,18]

$T/^\circ\text{C}$	$\alpha/\times 10^{-6}\cdot^\circ\text{C}^{-1}$	E/GPa	ν
25	-	183	0.3
100	10.34	-	0.3
200	11.3	-	0.3
400	12.5	152	0.3
600	-	-	0.3
700	-	-	0.3
800	14.3	109	0.3
900	16	-	0.3
1000	-	-	0.3
1165	-	-	0.3

表 4 SUB 层材料 (镍基高温合金) 参数

Table 4 Material parameters of SUB layer (nickel-based superalloys)^[17,18]

$T/^\circ\text{C}$	$\alpha/\times 10^{-6}\cdot^\circ\text{C}^{-1}$	E/GPa	ν
25	12.6	211	0.3
100	-	-	0.3
200	13.6	201	0.3
400	-	188	0.3
600	14	173	0.3
700	-	-	0.3
800	15.4	157	0.3
900	-	-	0.3
1000	16.3	139	0.3
1165	-	-	0.3

8YSZ, TGO 层材料为 Al_2O_3 , BC 层材料为 MCrAlY , SUB 层材料为镍基高温合金。各层均采用线弹性材料属性。

采用基于 traction-separation 描述的双线性本构模型, 给出了材料达到极限强度前的线弹性段和材料达到极限强度后的刚度线性降低软化阶段, 如图 2 所示。采用 XFEM 方法, 使用基于最大主应力的损伤起始 (damage initiation) 准则和基于能量的线性损伤演化 (damage evolution) 准则^[19]。

最大主应力准则为:

$$\left(\frac{\langle \sigma_n \rangle}{\sigma_n^0}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_s}{\sigma_s^0}\right) = 1 \quad (1)$$

式中, σ_n 代表法向应力, σ_s 代表剪切应力, σ_n^0 和 σ_s^0 代表名义应力的峰值, $\langle \rangle$ 代表斜坡函数的符号, 意味着压应力状态下不会出现损伤。

基于能量的线性软化准则为:

$$\left(\frac{G_n}{G_{nc}}\right)^2 + \left(\frac{G_s}{G_{sc}}\right) = 1 \quad (2)$$

其中, G_n 代表法向能量释放率, G_s 代表剪切方向能量释放率, G_{nc} 代表法向临界能量释放率, G_{sc} 代表剪切方向临界能量释放率。

模型中需要给定材料刚度 (即弹性模量)、极限强度以及临界断裂能量释放率。文中选取临界最大主应力是 125 MPa, 临界断裂能量释放率为 20 J/m^2 ^[14,20]。在 TC 层预制表面裂纹。

1.3 边界条件和单元

如图 1 所示, 热障涂层左侧和下侧均采用位移边界条件, 分别限制 X 方向和 Y 方向的位移, 右侧采用耦合约束边界条件, 使 X 方向的位移保持一致^[17]。采用温度场作为裂纹扩展的驱动力, 初始分析步设置温度为 25°C , 涂层系统在此温度下内部无应力。由于是线弹性材料模型, 将不考虑温度降低的过程, 否则裂纹在温度降低过程中会闭合, 升温过程如图 2 所示。

本模型均采用自由四边形结构网格, 网格类型为

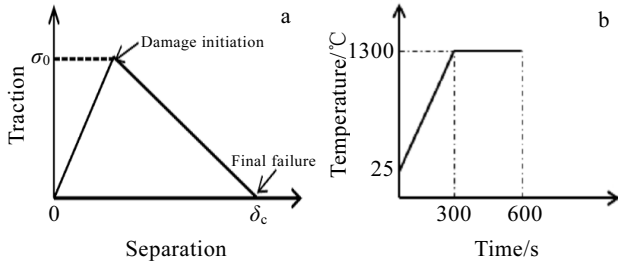


图 2 双线性本构模型和温度加载过程

Fig.2 Bilinear constitutive model (a) and temperature loading process (b)

四结点双线性平面应变四边形单元 CPE4R，带减缩积分和沙漏控制。TC 层需加密网格，因为裂纹预制在 TC 层内。

2 结果与分析

2.1 热失配应力对不同位置裂纹扩展的影响

在陶瓷层表面预制 1 条 5 μm 的竖直裂纹，图 3a~3c 分别对应于界面的波谷、波峰和中间位置。从图 3 可以看出，当涂层有竖直裂纹时，在热失配应力的作用下，裂纹沿着竖直方向继续扩展。不同位置的裂纹最终扩展的长度不同，处于界面波谷位置的裂纹最终扩展的长度最长，处于界面波峰位置的裂纹最终扩展长度最短，处于中间位置的裂纹扩展长度短于波谷位置的裂纹长度，但是长于波峰位置的裂纹长度，得到的结果与文献[12]中得到的结果相同。3 种位置的裂纹均在裂纹尖端出现应力变大的状态，如图 4 所示，且最终波谷处裂纹尖端的应力水平最大，达到 313.126

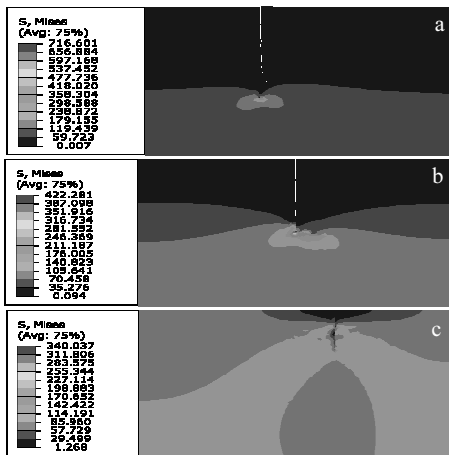


图 3 不同位置的裂纹在扩展过程中的 Mises 应力云图

Fig.3 Mises stress contours of cracks at different locations in the extension: (a) valley, (b) middle, and (c) peak

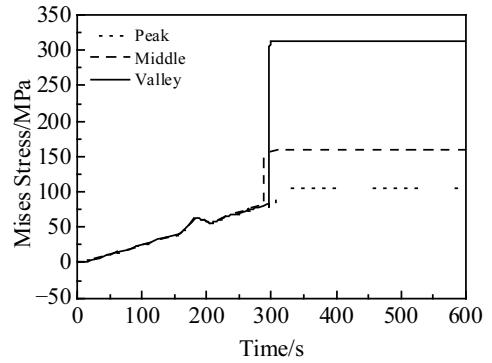


图 4 不同位置处裂纹尖端的应力曲线

Fig.4 Mises stress at crack tips for different locations

MPa，波峰处的应力水平最小，为 105.048 MPa，而中间位置的应力水平为 159.314 MPa，处于波峰和波谷两者之间，这也与文献[21]中的结果相同。

图 5 为 3 种位置处的裂纹尖端的能量释放率。从中可以看出，不同位置处的能量释放率不同，波谷处的裂纹能量释放率最大，波峰处的最小，中间位置的裂纹处于两者之间。能量释放率与裂纹扩展长度有着紧密的关系，裂纹扩展长度越长，能量释放率越大，波谷处的裂纹扩展长度相对于其它位置处是最长的，能量释放率相比于其它位置也是最大的。可以看出，垂直裂纹对涂层系统有着应力释放功能，且波谷处裂纹释放效果最明显。在涂层设计制备时，可以在不同位置预制微小裂纹来削弱涂层中的残余应力，从而提高涂层的应变容限和寿命。

2.2 热失配应力对不同角度裂纹扩展的影响

为了研究在热失配应力情况下初始裂纹不同倾斜角度对裂纹扩展的影响，在涂层中间位置预制 10 μm 的裂纹，分别与竖直方向成 15°、30°、45°、55°和 60° 的夹角，如图 6 所示。从图中看出，裂纹在 15°时扩展路径最长，60°时裂纹扩展路径最短。不论裂纹初始

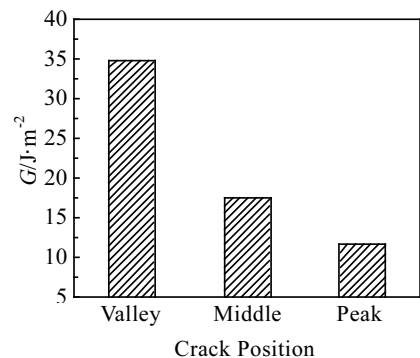


图 5 不同位置处的裂纹能量释放率

Fig.5 Crack energy release rates at different positions

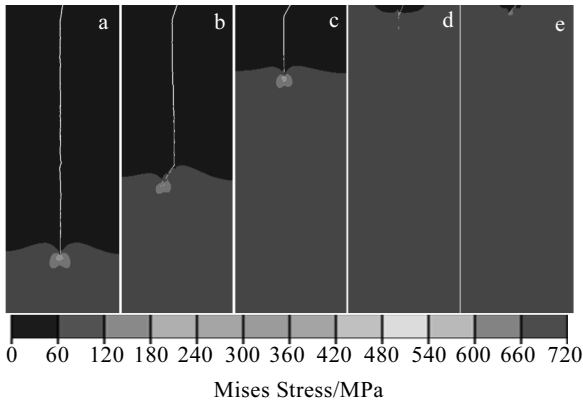


图 6 不同倾角的裂纹在扩展过程中的 Mises 应力云图

Fig.6 Mises stress contours for cracks with different angles in extension: (a) 15°, (b) 30°, (c) 45°, (d) 55°, and (e) 60°

倾斜角度是多少，它们最初扩展方向是以直线向下扩展。随着裂纹倾斜角度的增大，裂纹最终扩展的长度减小，直至最后只在预制裂纹处发生开裂。这是由于裂纹倾斜角度越大，裂纹尖端所受到的垂直于裂纹扩展方向的载荷分量越小导致的。

图 7 为裂纹扩展长度与裂纹初始倾斜角度的关系。在中间位置的裂纹，15°时最终扩展长度为 151 μm，30°时最终扩展长度为 123 μm，45°时最终扩展长度为 48 μm，55°时最终扩展长度为 15 μm，而 60°时最终长度仅为 10 μm，未发生扩展。随着裂纹初始倾斜角度的增大，裂纹扩展长度减小，当倾斜角度达到 60°时，裂纹不再发生扩展。裂纹初始倾斜角度越小，扩展长度越长，随着角度的增大，裂纹扩展长度减小直至不发生扩展。波谷位置处的裂纹扩展长度大于中间位置和波峰位置，这是由于波谷处的应力较大导致的。图 8 是中间位置不同角度裂纹的应变能。从图 8 中可以看出，倾斜角度越大，涂层最终的应变能也越大，这与裂纹扩展长度关系相反。说明倾斜角度对应

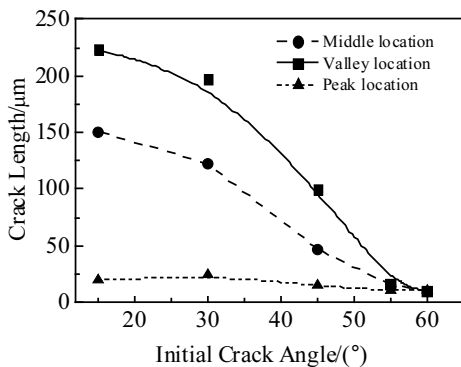


图 7 不同角度时裂纹的最终扩展长度

Fig.7 Ultimate crack lengths under different angles

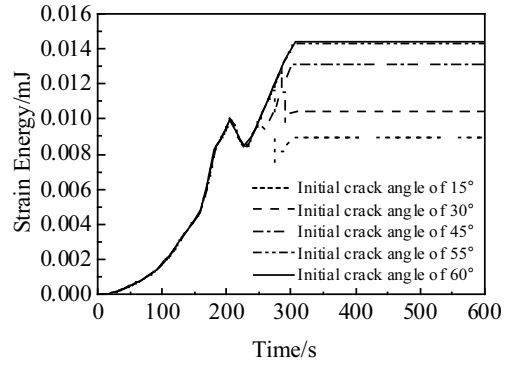


图 8 中间位置不同初始角度裂纹的应变能

Fig.8 Strain energies of cracks under different initial angles in the middle

变能有影响，最终影响裂纹的扩展。角度越大，裂纹扩展长度越短，涂层整体应力水平越低。在设计制备热障涂层时预制大角度的斜裂纹可以更好地削弱涂层中的残余应力水平，且裂纹不发生扩展，可以避免涂层因预制的微裂纹而产生断裂，从而提高热障涂层的寿命。

2.3 热失配应力对不同初始长度裂纹扩展的影响

为了研究在热失配应力情况下初始裂纹长度对裂纹扩展的影响，在陶瓷层中间位置分别预制长度为 10、20、30 和 40 μm 长度的裂纹，如图 9 所示。从图 9 可以看出，裂纹扩展长度随着预制裂纹长度的增加而增加，裂纹尖端会出现应力较大的现象，且裂纹扩展一般向着应力较大的地方进行扩展，在给定温度足够高的情况下，最终会扩展到 TGO 界面。图 10 为裂纹扩展长度、扩展速率与裂纹初始长度的关系。随着裂纹初始长度的增加，裂纹扩展长度及裂纹扩展速率均增大。10 μm 的裂纹 Y 方向扩展长度为 48 μm，扩

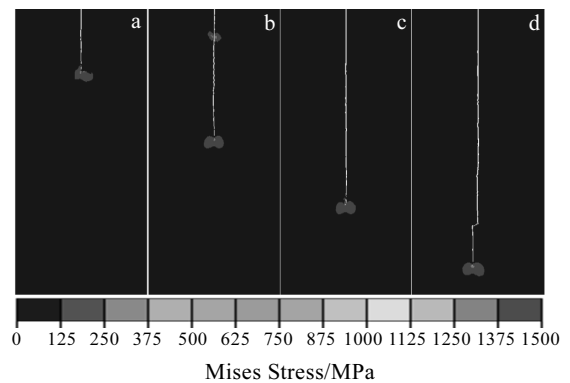


图 9 不同初始长度的裂纹在扩展过程中的 Mises 应力云图

Fig.9 Mises stress contours for cracks with different initial lengths in extension: (a) 10 μm, (b) 20 μm, (c) 30 μm, and (d) 40 μm

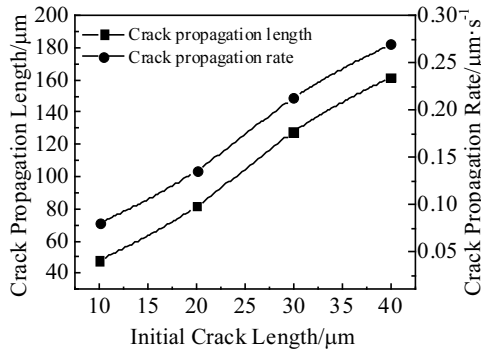


图 10 不同初始裂纹长度时裂纹的扩展长度和裂纹扩展速率
Fig.10 Crack propagation length and crack propagation rate under different initial crack lengths

展速率为 0.08 μm/s, 40 μm 的裂纹在相同时间内 Y 方向扩展长度为 161 μm, 扩展速率为 0.27 μm/s。图 11 为不同初始裂纹长度时的能量释放率。随着裂纹初始长度的增加, 裂纹尖端的能量释放率也随之增大。根据断裂力学的标准, 当裂纹扩展能量释放率达到临界能量释放率时, 裂纹开始扩展。

可以看出, 不同初始长度裂纹最终的扩展长度不同, 初始裂纹越长, 裂纹最终扩展长度越长, 扩展速率越快, 越容易发生断裂, 并最早失效, 且初始裂纹越长, 裂纹的能量释放率越大。因此, 在设计制备具有垂直涂层表面裂纹的热障涂层过程中, 预制的微裂纹长度不宜过长, 过长则容易使涂层在使用过程中微裂纹扩展速率加快, 长度增长, 更易发生断裂。

2.4 热失配应力对多裂纹扩展的影响

在陶瓷层表面分别预制 3 条和 7 条 5 μm 的裂纹, 研究其扩展情况。图 12a~12c 分别为间距 15 μm 的 3 条 5 μm 裂纹, 间距 45 μm 的 3 条裂纹和间距 15 μm 的 7 条裂纹。图 12a 中在波谷位置处的裂纹扩展最长,

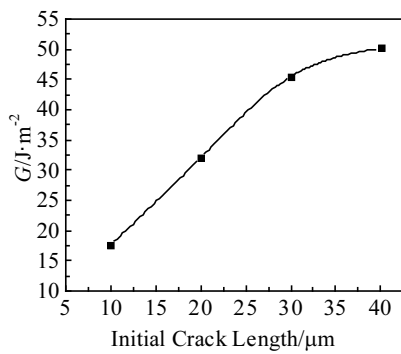


图 11 不同初始裂纹长度时的能量释放率
Fig.11 Energy release rates of cracks with different initial lengths

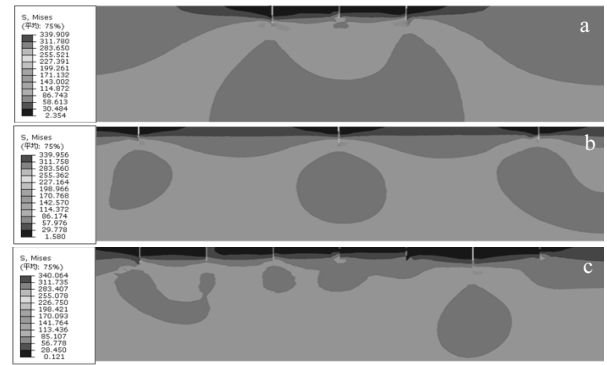


图 12 多裂纹情况下裂纹扩展的 Mises 应力云图
Fig.12 Mises stress contours of multi-crack in extension: (a) 3 cracks separated by 15 μm, (b) 3 cracks separated by 45 μm, and (c) 7 cracks separated by 15 μm

中间位置处的裂纹未发生扩展, 且波谷处的裂纹最先开始扩展。从图 12b 可以看出, 中间位置处的裂纹扩展最长且最先开始扩展, 与图 12a 裂纹的扩展顺序不同。图 12c 中从左向右第 6 条裂纹扩展长度最长, 且有的位置处的裂纹未发生扩展, 各个裂纹之间相互影响, 最终裂纹扩展形成的应力场较复杂。

图 13 为相同裂纹条数而间距不同的扩展长度图。从总体趋势可以看出, 在裂纹条数相同时, 间距越大, 裂纹扩展长度越长。这是由于致使裂纹扩展的能量相同, 在裂纹数量相同时, 裂纹间距越大, 各个裂纹之间的影响越小造成的。多裂纹存在的情况下, 裂纹长度不仅与所加载的温度有关系, 而且与裂纹条数和裂纹间距有关系(即也和表面裂纹密度相关), 且裂纹间距对裂纹扩展顺序也有影响。总的来说, 多条裂纹存在的情况下, 裂纹朝着应力最大的方向扩展^[5,6,22]。

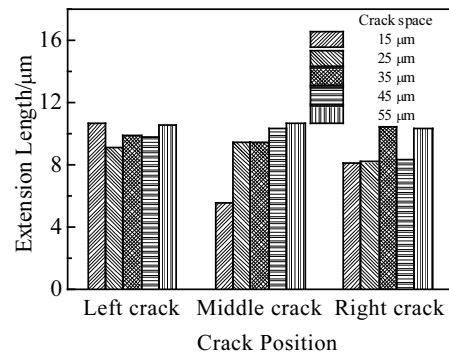


图 13 相同条数(3条)不同间距时裂纹的扩展长度
Fig.13 Extension length of cracks with the same number (3) and different spacings

3 结 论

1) 在热失配应力的作用下, 初始裂纹长度相等时, 位于界面波谷处裂纹扩展长度最长; 随着倾斜角度的增大, 裂纹最终扩展长度减小; 随着裂纹初始长度的增加, 裂纹最终扩展长度和裂纹扩展速率均增大。

2) 存在多条裂纹时, 裂纹的扩展长度与裂纹之间的距离和裂纹的条数有着密切的关系, 即也和裂纹密度密切相关, 裂纹朝着应力最大的方向扩展。

参考文献 References

- [1] Zhou Yichun(周益春), Liu Qixing(刘奇星), Yang Li(杨 丽) *et al. Chinese Journal of Solid Mechanics(固体力学学报)[J]*, 2010, 31(5): 504
- [2] Kumar V, Balasubramanian K. *Progress in Organic Coatings [J]*, 2016, 90: 54
- [3] Hua J J, Zhang L P, Liu Z W *et al. Journal of Inorganic Materials[J]*, 2012, 27(7): 680
- [4] Hutchinson J W, Suo Z. *Advances in Applied Mechanics[J]*, 1992, 29: 63
- [5] Bäker M, Rösler J. *Computational Materials Science[J]*, 2012, 52(1): 236
- [6] Zhou B, Kokini K. *Materials Science and Engineering A[J]*, 2003, 348(1-2): 271
- [7] Michlika P, Berndt C. *Surface and Coatings Technology[J]*, 2006, 201(6): 2369
- [8] Erdogan F, Ozturk M. *International Journal of Engineering Science[J]*, 1995, 33(15): 2179
- [9] Erdogan F. *Journal of Applied Mechanics[J]*, 1986, 52(4): 729
- [10] Evans A G, Mumm D R, Hutchinson J W *et al. Progress in Materials Science[J]*, 2001, 46(5): 505
- [11] Rabiei A, Evans A G. *Acta Materialia[J]*, 2000, 48(15): 3963
- [12] Zhang W X, Fan X L, Wang T J. *Applied Surface Science[J]*, 2011, 258(2): 811
- [13] Fan X L, Wei J, Li J G *et al. Surface and Coatings Technology[J]*, 2014, 244: 117
- [14] Zhu W, Yang L, Guo J W *et al. Applied Surface Science[J]*, 2014, 315: 292
- [15] Yu Q M, Zhou H L, Wang L B. *Ceramics International[J]*, 2016, 42(7): 8338
- [16] Yu Q M, Cen L. *Ceramics International[J]*, 2017, 43(3): 3089
- [17] Ranjbar-Far M, Absi J, Shahidi S *et al. Materials & Design [J]*, 2011, 32(2): 728
- [18] Ranjbar-Far M, Absi J, Mariaux G *et al. Materials & Design [J]*, 2010, 31(2): 772
- [19] Qi Shasha(齐莎莎). *Dimensional Analysis and Finite Element Simulations on the Erosion Process of Plasma Sprayed Thermal Barrier Coatings(等离子喷涂热障涂层冲蚀失效的量纲分析及有限元模拟)[D]*. Xiangtan: Xiangtan University, 2015
- [20] Chen Z X, Qian L H, Zhu S J. *Engineering Fracture Mechanics[J]*, 2010, 77(11): 2136
- [21] Wang L, Wang Y, Zhang W Q *et al. Applied Surface Science [J]*, 2012, 258(8): 3540
- [22] Schulze G W, Erdogan F. *International Journal of Solids and Structures[J]*, 1998, 35(28): 3615

Numerical Simulation of Surface Crack Propagation in Thermal Barrier Coatings Under Thermal Mismatch Stress

Yu Qingmin, Shi Yongzhi

(Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

Abstract: The effect of thermal mismatch stress on the surface crack propagation in thermal barrier coatings was investigated by extended finite element method (XFEM). The results show that the location, slope angle and length of the crack have a significant effect on the crack propagation length, energy release rate and stress level of crack tip under the thermal mismatch stress. Among the cracks with the same initial length, the one at the valley has the longest extension length and the highest energy release rate. The larger the slope angle, the shorter the length of crack expansion but the larger the strain energy. The larger the initial crack length, the longer the crack propagation length and the faster the expansion rate, and the greater the energy release rate. The crack propagation affects each other under the condition of multiple cracks.

Key words: thermal barrier coating; thermal mismatch stress; surface crack; extended finite element method

Corresponding author: Yu Qingmin, Ph. D., Associate Professor, School of Mechanics, Civil Engineering and Architecture, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, P. R. China, Tel: 0086-29-88431000, E-mail: qingminy@163.com