

等离子喷涂热障涂层逐道沉积累积应力的模拟

田甜, 郑振环, 李强

(福州大学 材料科学与工程学院, 福州 350108)

[摘要] 运用 ANSYS12.0 软件,对等离子喷涂热障涂层逐道沉积过程中的累积应力进行了有限元模拟。结果表明,涂层制备过程中,已喷涂层的温度随喷枪移动呈周期性大幅波动,这种快速热冲击使得涂层中产生了相应的应力波动。涂层喷涂结束并冷却至室温后,边缘存在应力集中,陶瓷层与粘结层的界面边缘处最大切向拉应力为 122 MPa。涂层各界面中部应力值呈波浪状周期性浮动, X 方向应力是主要的应力形式。

[关键词] 等离子喷涂;热障涂层;有限元模拟;温度波动;应力分析

[中图分类号] TG174.442; TP391.9 **[文献标识码]** A **[文章编号]** 1001-3660(2012)06-0018-04

Simulation on Stress Accumulation during the Path-by-path Deposition Process of Thermal Barrier Coating by Plasma Spraying

TIAN Tian, ZHENG Zhen-huan, LI Qiang

(College of Material Science and Engineering, Fuzhou University, Fuzhou 350108, China)

[Abstract] Finite element simulation on stress accumulation during the path-by-path deposition process of thermal barrier coating by plasma spraying was performed by FEM software ANSYS12.0. During the spraying process, the temperature of the deposited coating fluctuates with the movement of the spraying gun periodically within a wide range. This rapid thermal shock will cause a corresponding stress fluctuation. After the coating being cooled to the room temperature, concentrated stress appeared at the edge of the coating, the maximum shear tensile stress existed at the edge of the interface between the ceramic layer and the bonding layer is 122 MPa. Stress at the middle of the interfaces of the coating fluctuates periodically like a wave and stress in the X direction is the major stress.

[Key words] plasma spraying; thermal barrier coatings; finite element simulation; temperature fluctuation; stress analysis

等离子喷涂热障涂层广泛应用于航天发动机和工业涡轮机等高温部件^[1]。由于制备过程涉及高温、大温变以及喷涂体系材料的热物理性能存在差异,热障涂层中必然存在残余应力^[2]。残余应力的大小和分布影响着涂层的结合强度、抗热冲击性能和热循环疲劳寿命等^[3],因此,预测和控制热障涂层残余应力已成为人们广泛关注的问题。研究残余应力的方法主要有实验测试^[4]、数学分析^[5]和数值模拟^[6]等。实验测试技术在时间和空间连续性上有待提高;数学分析模型大多为弹性模型,且只适用于简单的几何结构。随着计算机和模拟工具的发展,运用数值模拟准确预测热障涂层残余应力成为可能^[7]。H. W. Ng, Sujanto Widjaja, Zhu 等^[8-10]运用有限元分析软件,将涂层分成若干薄

层,通过逐层计算,实现热障涂层沉积过程的模拟。但这类增层模型只涉及厚度方向的累积过程,无法模拟大面积涂层制备过程中的应力累积。侯平均等人^[11]在增层模型的基础上,将每个薄层内的单元按喷涂顺序逐一激活,模拟了 $ZrO_2/NiCoCrAlY$ 热障涂层体系的温度和应力的演化过程。该模型考虑了喷枪移动对涂层应力的影响,但是逐个激活单元时没有考虑实际喷涂每道的尺寸和时间。

文中在逐层沉积模型的基础上,运用有限元分析软件 ANSYS12.0,采用“生死”单元技术,依据喷枪移动速度逐个激活代表“道”的单元块来模拟热障涂层沉积过程温度和应力的累积过程,分析涂层边缘及界面处的残余应力分布。

[收稿日期] 2012-07-23; **[修回日期]** 2012-08-17

[作者简介] 田甜(1987—),女,湖北襄阳人,硕士生,主攻金属表面工程。

[通信作者] 李强(1962—),男,甘肃会宁人,博士,教授,主要研究方向为金属材料工程。

1 模型建立

1.1 几何模型简化

模拟在沿长度为 80 mm 的绕轴线快速旋转的圆筒外壁制备 8% Y_2O_3 - ZrO_2 /NiCoCrAlY (8% 为质量分数,后同)热障涂层的过程,如图 1 所示。由于圆筒的几何形状、筒壁所受的温度载荷及边界条件均满足轴对称条件,因此取圆筒纵截面的一半进行二维模拟。在等离子喷涂的实际过程中,喷涂材料先在基体上沉积成一道,按道与道之间一定的搭接率逐道累积成一薄层,再由薄层逐层沉积形成涂层。实验测试表明^[12],涂层的每道近似高斯分布,宽度为 16~17 mm,高度为 20~25 μm 。文中在计算时,陶瓷层与粘结层的每道宽度均取 16 mm,高度取 21 μm ,粘结层和陶瓷涂层分别经 6 层和 12 层累积,厚度分别为 126 μm 和 252 μm ,圆筒的壁厚 3 mm,将道搭接率设为 50%,故几何模型中每道宽度为 8 mm。喷枪以 0.4 m/s 的速度沿圆筒轴线来回扫描,为简化计算,将喷枪的一个扫描历程所获得的“层”离散化为 10 道,喷枪每次移动距离为 8 mm,并将道呈高斯分布的几何形状进行了阶梯状简化,如图 2 所示。

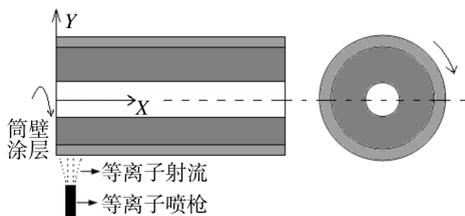


图 1 圆筒试样示意

Fig. 1 Schematic representation of the spraying process

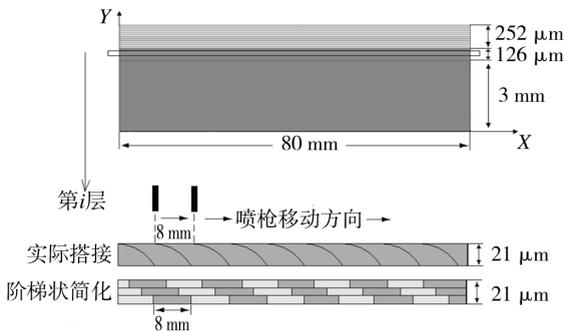


图 2 涂层沉积过程的几何模型简化

Fig. 2 Models of deposition process of TBCs

1.2 有限元求解

在分析中作如下假设:1)由于喷涂速度远小于涂层粉末颗粒凝固速度,认为后喷的涂层到来时,前一涂层已凝固;2)液态熔滴的凝固发生在熔滴变形后;3)根据喷涂时残余应力的形成机理,假定整个涂层系统

最初所处的高温状态是应力自由的;4)假设各层的热、力学参数(杨氏模量 E 、泊松比和热膨胀系数 CTE)在本数值模拟范围内为定值;5)所计算的传热过程时间非常短,不考虑辐射传热的影响;6)整个涂层系统无缺陷;7)等离子射流使试样表面的温度分布较集中,离中心较小的范围以外温度骤降,故只考虑其对当前激活的单元块热流密度的影响,忽略其对周围涂层单元的影响;8)由于 8% Y_2O_3 阻止 ZrO_2 中相变的发生,故忽略涂层中的组织应力^[6]。

基体的初始预热温度设为 220 $^{\circ}C$,粘结层和陶瓷层粉末粒子分别以 1400,2205 $^{\circ}C$ 的温度撞击在基体上并急速冷凝。边界条件设置如图 3 所示,基体与空气的对流系数 h 为 8 $W/(m^2 \cdot K)$ ^[8],等离子射流中心热流密度为 $6 \times 10^5 W/m^2$ ^[13]。

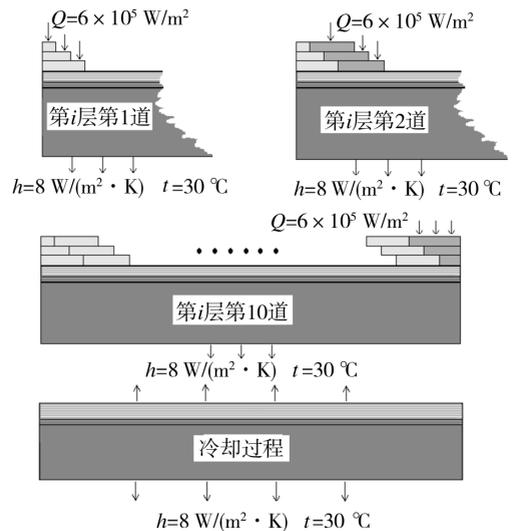


图 3 逐道沉积过程的边界条件

Fig. 3 Boundary conditions with continuous path-by-path updating of the geometry

模型的网格划分如图 4 所示。整个涂层系统沿 X 方向划分 400 个单元,基体沿圆筒 Y 方向划分为 5 个单元,粘结层和陶瓷层沿 Y 方向分别划分为 18,36 个单元,因此每一单层厚度方向划分了 3 个单元。运用 ANSYS,采用四节点热-力耦合单元 PLANE13 进行模拟,应用 APDL 命令流“杀死”所有涂层单元,每 0.02 s (轴长/喷枪扫描速度)激活一个代表“道”的单元块,按沉积顺序依次激活,直至涂层喷涂完毕。已喷涂层体系的升温,是等离子体的热对流和热传导以及新增涂层熔滴颗粒的热传导共同作用的结果。每激活一个单元块,对当前激活的单元块赋予材料初始温度,即熔点温度,并施加热流密度 Q ,然后对当前所有“活”单元进行求解。将这一瞬态求解获得的节点温度作为激活下一子步求解过程的初始条件。在喷涂过程结束以后,涂层和基体由瞬态分析,获得的温度自然冷却至室

温(需 600 s), 再进行一次稳态分析, 获得冷却过程中产生的热应力。

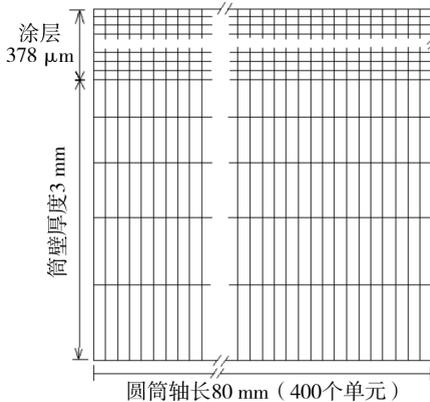


图4 网格划分

Fig. 4 Mesh of the structure for finite element analysis

1.3 材料性能参数

基体、粘结层和陶瓷层材料的物理性能参数^[6,8]见表1。

表1 涂层与基体的材料性能参数

Tab. 1 Material properties parameters of the substrate and coatings

项目	基底 GH4169	粘结层 NiCoCrAlY	陶瓷层 ZrO ₂ -8%Y ₂ O ₃
弹性模量/GPa	205	225	53
密度/(kg·m ⁻³)	7800	7320	6037
泊松比	0.3	0.3	0.25
热膨胀系数/(×10 ⁻⁶ °C ⁻¹)	18.7	14.0	7.2
比热容/(J·kg ⁻¹ ·°C ⁻¹)	437	501	500
屈服强度/MPa	627	300	
切变模量/MPa	79 000	688	
导热系数/(W·m ⁻¹ ·°C ⁻¹)	21	4.3	1.5

2 数值模拟结果与分析

2.1 涂层沉积过程中的应力分析

热障涂层不同材料界面上的应力状况是导致热障涂层失效的主要原因, 此外, 由于Y方向和层间的温度梯度很小, 在涂层承受的几种应力(X方向、Y方向、切向)中, X方向应力是界面处的主要应力形式^[14], 因此, 选取基体与粘结层界面中点处的节点以及粘结层与陶瓷层界面中点处的节点分析沉积过程中的温度和应力, 如图5所示。由图5可见, 涂层界面处节点的温度随时间呈波动式变化, 后沉积涂层经过节点上方就经历一次快速升温 and 降温过程, 温度出现一次大幅波动。与温度波动相对应, 各节点的每一次快速变温热冲击过程都会产生剧烈的应力波动。图5a中, 喷枪在0.1 s时刻移至该节点上方, 节点所在单元被激活, 达

到最高温度 1400 °C, 喷枪移开后, 节点开始第一个降温过程, 节点所在单元由于快速冷却承受拉应力, 拉应力值逐渐累积增大, 降温结束时达到 260 MPa; 随后喷枪返回, 节点开始第一个升温过程, 由于基体热膨胀系数较粘结层的热膨胀系数大, 节点膨胀受约束, 拉应力逐渐减小并反向成压应力, 在升温结束时, 压应力累积达到 500 MPa; 然后随着第二个降温过程的开始, 冷却收缩产生拉应力, 累积结果使得压应力逐渐减小并且反向成为拉应力。如此循环, 直至喷涂结束。随着涂层增厚, 喷枪的等离子射流对该节点温度波动的影响逐渐减弱, 但在 1.9 s 时, 温度波动突然增大, 达到 1100 °C, 这是由于该时刻开始喷涂陶瓷层, 而陶瓷熔点温度较高的缘故。图5b中的节点位于第6层粘结层的上表面, 后续12层陶瓷层沉积在此位置上方时, 该点温度出现12个峰值, 节点的应力变化规律类似, 涂层颗粒在喷涂过程中经历多次剧烈的温度波动, 这种快速升温 and 降温的热冲击使得涂层中产生较大的应力。

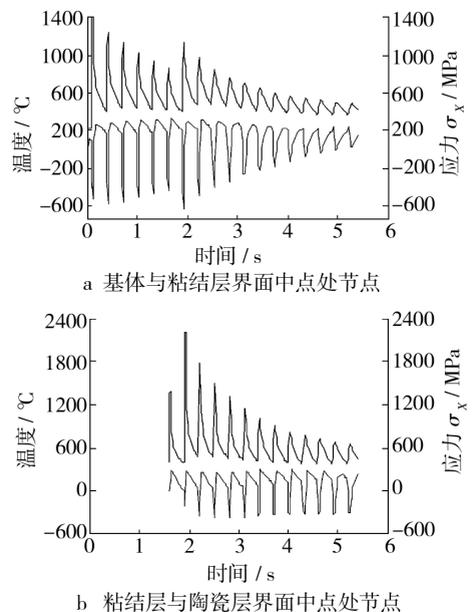


图5 节点的温度和应力随时间的变化情况

Fig. 5 Temperature and stress in the X direction curves of nodes

2.2 试样喷涂完毕冷却至室温后的应力分布

图6为喷涂结束后, 试样冷却至室温时涂层系统的应力分布。从图6中可以看出, 涂层受压, 基体受拉。这是由于涂层系统由高温冷却时, 都有收缩的趋势, 而涂层的热膨胀系数小于基体的热膨胀系数, 其收缩小于基体。涂层各界面处的应力突变较严重, 边缘有较大的应力集中现象。最大X方向拉应力为 483 MPa, 出现在基体与粘结层的界面, 这种拉应力会使界面处产生裂纹; 最大X方向压应力为 765 MPa, 出现在陶瓷层表面。最大Y方向压应力为 211 MPa, 存在于

基体边缘,靠近粘结层。最大切向拉应力为 122 MPa,存在于陶瓷层与粘结层的界面边缘,在涂层边缘拉应

力的作用下,涂层界面处的裂纹会迅速扩展至涂层中间区域,最终导致涂层大片剥离。

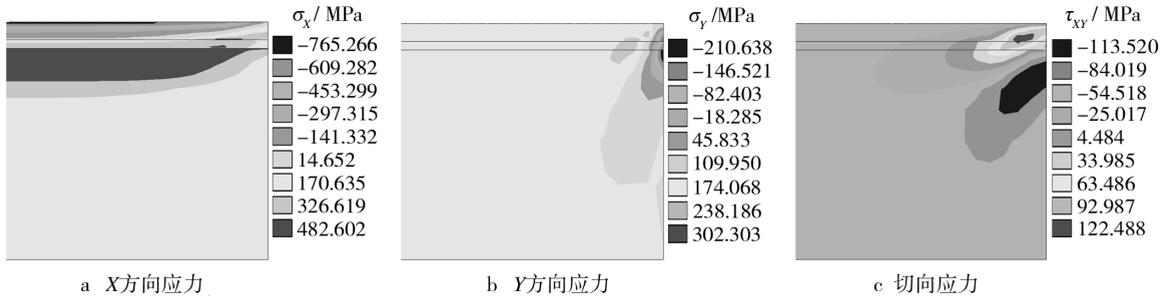


图 6 试样冷却至室温后的涂层应力

Fig. 6 Residual stress contours at room temperature

图 7 为试样喷涂完毕并冷却至室温时,试样中部水平方向 $8\text{ mm} \leq X \leq 64\text{ mm}$ 区间内,涂层系统的基体与粘结层界面、粘结层与陶瓷层界面和陶瓷层表面的总体应力分布。粘结层与基体界面的 X 方向应力 σ_x 主要为拉应力,应力值在 90 MPa 附近波动,这种拉应力会使垂直于涂层表面方向的裂纹扩展, Y 方向应力 σ_y 和切向应力 τ_{xy} 较小。粘结层与陶瓷层界面的 X 方向应力 σ_x 为压应力,压应力值在 250 ~ 350 MPa 之间波动, Y 方向应力 σ_y 和切向应力 τ_{xy} 与 X 方向应力相

比,几乎可以忽略不计。陶瓷层表面的 X 方向应力 σ_x 为压应力,应力值在 500 MPa 附近波动, Y 方向应力 σ_y 和切向应力 τ_{xy} 几乎为零。可见, X 方向应力 σ_x 是各界面上的主要应力形式。界面处的应力大小和状态与 Zhang 等^[15]用数学分析模型计算出的双层热障涂层界面处应力状态比较接近。道与道之间的相互搭接会使搭接区域的涂层经历两次热载荷,导致界面应力波动,由于水平方向 $8\text{ mm} \leq X \leq 64\text{ mm}$ 区间内含 7 道沉积层,故涂层各界面处出现 7 次应力波动。

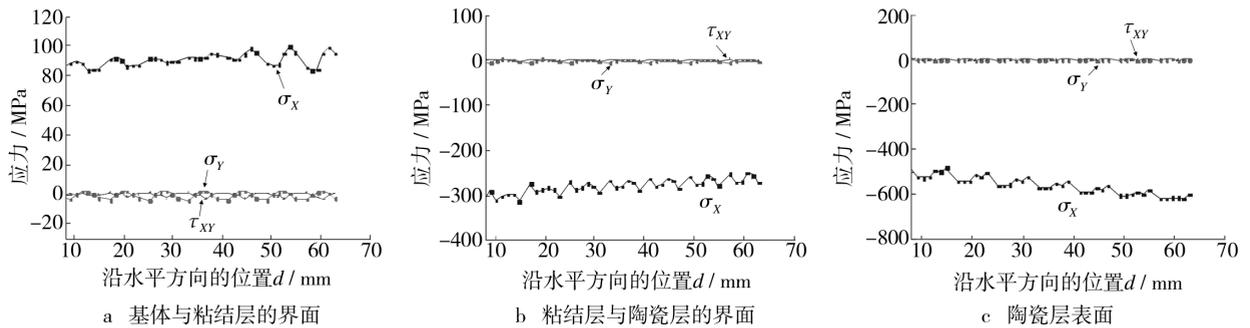


图 7 界面应力的变化

Fig. 7 Residual stress curves along interfaces

3 结语

文中对热障涂层沉积过程的模拟,不仅考虑了涂层沿垂直于基体表面方向上的生长,同时模拟了涂层在平行于基体表面的方向上的沉积过程,更逼近实际喷涂过程,对热障涂层残余应力的预测和控制有一定的指导意义。但几何模型并未考虑涂层中的孔隙和裂纹等缺陷,使得模拟分析结果与实际测试结果存在差异,在该领域建立更好的模型值得进一步研究。

[参 考 文 献]

[1] PADTURE N P, GELL M, JORDAN E H. Thermal Barrier Coatings for Gas-turbine Engine Applications[J]. Science,

2002, 296(5566): 280—284.

[2] 马维,潘文霞,张文宏,等.热喷涂涂层中残余应力分析和检测研究进展[J].力学进展,2002,32(1):41—56.
[3] HE M Y, HUTCHINSON J W, EVANS A G. Simulation of Stresses and Delamination in a Plasma-sprayed Thermal Barrier System upon Thermal Cycling[J]. Materials Science and Engineering A, 2003, 345(1/2): 172—178.
[4] JIANG Y, XU B, WANG H, et al. Determination of Residual Stresses within Plasma Spray Coating Using Moire Interferometry Method[J]. Applied Surface Science, 2011, 257(6): 2332—2336.
[5] JOHNSTON R E. The Sensitivity of Abradable Coating Residual Stresses to Varying Material Properties[J]. ASM International, 2009, 18(5/6): 1004—1013.

$(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)$ 和 $(0 \frac{1}{2} \frac{1}{2})$ 。对于 Ni_3Al 面心结构,当晶面指数 h, k, l 为全奇或全偶时,就会产生基本的衍射峰;当晶面指数 h, k, l 奇偶兼有时,超结构衍射峰就会出现^[5]。因此,在相同晶面间距下,有序状态的晶面间距为无序状态的两倍,对于有序结构,在布拉格衍射图谱上就会出现超结构衍射线^[6]。

$NiAl$ 的有序化结构为 B2 型,当晶面指数满足 $h+k+l=2n$ 时,B2 型结构就会出现基本结构衍射线;当晶面指数满足 $h+k+l=2n+1$ 时,会出现超结构衍射线^[7]。由图 5 可见, $NiAl$ 在热处理前就出现了超点阵峰,说明 $NiAl$ 的有序化能非常低,有序化过程非常容易实现,即使是在激光熔覆的快速凝固情况下,也能实现有序化过程。由图 6 可见,热处理后, $NiAl$ 结构仍为有序化,说明 $NiAl$ 相结构非常稳定。

从有序化过程来看,虽然 Ni_3Al 和 $NiAl$ 有序化的温度都为熔点温度,但 $NiAl$ 的有序化更容易实现。笔者认为可能是以下原因:1) $NiAl$ 有序化的温度高于 Ni_3Al ,当 $Ni-Al$ 系合金从液态凝固时, $NiAl$ 先发生凝固,所以 $NiAl$ 有序化的时间比 Ni_3Al 长;2) $NiAl$ 为先析出相,所以 $NiAl$ 会比 Ni_3Al 相更纯;3) 有序化的过程相当于扩散过程,所以 $NiAl$ 会比 Ni_3Al 更容易实现有序化。

4 结语

激光熔覆可以使材料表面获得高质量和高性能,

金属间化合物具有许多优异的特性,利用激光熔覆工艺获得金属间化合物熔覆层可以使材料的表面性能得到很大改进,若能实现熔覆层中韧性相的合理分布,将有利于改善熔覆层的韧性,而有序化的实现也最终对熔覆层的表面性能起到改善作用。但是激光设备投资大,操作环境要求严格,熔覆效率低,成本高。近年来又出现了等离子熔覆技术,与激光熔覆相比,等离子熔覆具有优质、高效、低成本的优点,负压等离子束熔覆复合新材料强化技术代表着这一领域的领先水平,已成功应用于煤矿采掘运输设备中^[8-9]。

[参 考 文 献]

(上接第 21 页)

[6] WANG L, WANG Y, SUN X G, et al. Finite Element Simulation of Residual Stress of Double-ceramic-layer $La_2Zr_2O_7/8YSZ$ Thermal Barrier Coatings Using Birth and Death Element Technique[J]. Computational Materials, 2012, 53(1): 117—127.

[7] BENGTSOON P, PERSSON C. Modeled and Measured Residual Stresses in Plasma Sprayed Thermal Barrier Coatings [J]. Surface and Coating Technology, 1997, 191(92): 78—86.

[8] NG H W, GAN Z. A Finite Element Analysis Technique for Predicting as-sprayed Residual Stresses Generated by the Plasma Spray Coating Process[J]. Finite Elements in Analysis and Design, 2005, 41(13): 1235—1254.

[9] ZHU J, XIE H, HU Z, et al. Residual Stress in Thermal Spray Coatings Measured by Curvature Based on 3D Digital Image Correlation Technique[J]. Surface and Coating Technology, 2011, 206(6): 1396—1402.

[10] SUJANTO W, ANDI M L, TICK H Y. Modeling of Residual Stresses in a Plasma-sprayed Zirconia/Alumina Functionally

[1] 尹衍升,施忠良,刘俊友. 铁铝金属间化合物[M]. 上海:上海交通大学出版社,1996.

[2] 斯松华,袁晓敏,何宜柱. 激光熔覆钴基合金涂层的组织结构[J]. 激光杂志,2002(4): 58—59.

[3] 张文钺. 焊接冶金学[M]. 北京:机械工业出版社,1995.

[4] 陈国良. 有序金属间化合物结构材料的物理金属学基础[M]. 北京:冶金工业出版社,2000.

[5] 李超. 金属学原理[M]. 哈尔滨:哈尔滨工业大学出版社,1989.

[6] 余永宁. 金属学原理[M]. 北京:冶金工业出版社,2000.

[7] 梁敬魁. 粉末衍射法测定晶体结构(下册)[M]. 北京:科学出版社,2002.

[8] 师昌绪,徐滨士,张平,等. 21 世纪表面工程的发展趋势[J]. 中国表面工程,2001, 14(1): 2—7.

[9] 李敏,李惠东,李惠琪,等. 等离子体表面改性技术的发展[J]. 金属热处理,2004, 29(7): 5—9.

Graded-Thermal Barrier Coating[J]. Thin Solid Films, 2003, 434(1/2): 216—227.

[11] 侯平均,王汉功,汪刘应,等. 等离子喷涂双层热障涂层沉积过程的数值模拟[J]. 焊接学报, 2009, 30(11): 97—104.

[12] GHAFOURI-AZAR R, MOSTAGHIMI J, CHANDRA S. Modeling Development of Residual Stresses in Thermal Spray Coatings[J]. Computational Materials Science, 2006, 35(1): 13—26.

[13] 王桂兰,胡帮友,严波,等. 三维等离子喷涂的涂层生长过程温度场数值模拟[J]. 固体力学学报, 2005, 26(2): 151—156.

[14] 张显程,巩建鸣,涂善东. 等离子喷涂沉积过程与残余应力分析[J]. 设计计算, 2003, 20(1): 33—36.

[15] ZHANG X C, XU B S, WANG H D, et al. Prediction of Three-dimensional Residual Stresses in the Multilayer Coating-based Systems with Cylindrical Geometry[J]. Composites Science and Technology, 2006, 66(13): 2249—2256.