

基于临界失效能密度判据的热障涂层 热震损伤行为研究

李定玉¹, 王如转¹, 李卫国², 郑恒伟¹, 王小荣¹

(1.重庆科技学院, 重庆 401331; 2.重庆大学, 重庆 400030)

摘要: **目的** 探索热障涂层系统 (TBCs) 在热震过程中的损伤行为。**方法** 基于材料能量储存极限, 推导了适用于平面复杂应力情形的温度相关性临界失效能密度判据, 进而利用该临界失效能密度判据与 ABAQUS 有限元软件相结合, 研究了热生长氧化层 (TGO) 凸起的热障涂层系统在冷却热震过程中的损伤行为。**结果** 对于 TGO 层凸起的热障涂层系统, 计算了冷却热震过程中陶瓷层 (TC) 和 TGO 层的失效能密度分布云图, 并根据最大失效能分布情况分析 TBCs 在热震过程中各层材料的可能破坏位置, 所得结果与实验吻合较好。在对 TBCs 的冷却热震损伤行为模拟计算中发现, 当 TC 层的强度比较低时, 热震会使 TC 层上表面产生往内部扩展的垂直裂纹; 当 TC 层强度达到某一定值时, 首先发生热震破坏的位置由 TC 层上表面变成了 TGO 层与粘结层 (BC) 的界面处, 即 TBCs 的各层破坏顺序发生了变化。**结论** 使用临界失效能密度准则来判断热障涂层在冷却热震过程中的损伤行为, 比单纯使用某一方向应力更为准确, 并能准确判断损伤起始位置和演化情况, 从而更全面地反映热障涂层在热震过程中的损伤破坏行为。

关键词: 热障涂层; 失效能密度; 热震; 有限元; 损伤

中图分类号: TG174.44 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-3660(2019)01-0056-06

DOI: 10.16490/j.cnki.issn.1001-3660.2019.01.008

Thermal Shock Damage Behaviour of Thermal Barrier Coatings Based on the Failure Energy Density Criteria

LI Ding-yu¹, WANG Ru-zhuan¹, LI Wei-guo², ZHENG Heng-wei¹, WANG Xiao-rong¹

(1. Chongqing University of Science and Technology, Chongqing 401331, China;

2. Chongqing University, Chongqing 400030, China)

ABSTRACT: The work aims to investigate the damage behavior of thermal barrier coating system (TBCs) during the thermal shock. The temperature-dependent failure energy density criteria was deduced based on the energy storage limitation of material for plane complex stress condition. With the criteria and ABAQUS finite element software, thermal shock damage behavior of raised TBCs in the thermally grown oxide (TGO) was studied. The distribution of failure energy density in top-coat (TC) and TGO during cooling thermal shock was calculated for the raised TBCs in TGO and the damaged location of each layer in TBCs

收稿日期: 2018-09-20; 修订日期: 2018-11-22

Received: 2018-09-20; Revised: 2018-11-22

基金项目: 国家自然科学基金项目 (11602043, 11602044, 11602042); 重庆市基础科学与前沿技术研究项目 (cstc2017jcyjAX0240); 重庆市教育委员会科学技术研究项目 (KJ1713323)

Fund: Supported by the National Natural Science Foundation of China (11602043, 11602044, 11602042), the National Science Foundation Project of Chongqing CSTC (cstc2017jcyjAX0240) and Scientific and Technological Research Program of Chongqing Municipal Education Commission (KJ1713323)

作者简介: 李定玉 (1987—), 男, 博士, 讲师, 主要研究方向为高温固体力学。邮箱: ldy0322@cqust.edu.cn

Biography: LI Ding-yu (1987—), Male, Doctor, lecturer, Research focus: high temperature solid mechanics. E-mail: ldy0322@cqust.edu.cn

during the thermal shock was analyzed according to the maximum failure energy distribution. The obtained results agreed well with the experiment results. Furthermore, the simulation of thermal shock damage evolution behavior for TBCs showed that vertical cracks growth towards inside layer could be produced in TC under thermal shock when the strength of TC was relative lower. However, the firstly damaged location could change to the interface between TGO and BC (bond-coat) from the upper surface of TC when the strength of TC reached a certain value. The damage order of each layer in TBCs changed. Therefore, the failure energy density criteria is more accurate to characterize the thermal shock damage behavior of TBCs than the stress of one direction and can also determine the exact location of damage initiation and the evolution of damage, thus revealing the thermal shock failure for TBCs comprehensively.

KEY WORDS: thermal barrier coating; failure energy density; thermal shock; finite element method; damage

热障涂层系统 (TBCs) 因其表面陶瓷材料涂层良好的热/力学特性而具有耐高温、耐腐蚀、抗热震好等优异性能, 被广泛应用于燃气轮机、航空航天发动机、核反应堆等重要领域。目前典型的热障涂层系统一般由隔热陶瓷层 (TC)、热生长氧化层 (TGO)、粘结层 (BC) 以及超合金基体组成^[1-4]。作为燃气轮机等高温结构的热防系统, TBCs 在服役过程中主要遭受循环升降温热载荷作用, 而 TBCs 是典型的多层材料体系, 因此在热载荷作用时, 系统内会产生较大的热失配应力。特别是在冷却热震过程中, 由于表层材料的收缩受到里层材料 (陶瓷层和热生长层) 的约束, 使系统表层产生较大的拉应力, 从而导致陶瓷层产生裂纹, 甚至发生脱层破坏^[5]。因此, 研究热障涂层系统在热震载荷下的损伤机理, 对建立其寿命评价方法有着关键作用。

对于热障涂层系统热载荷损伤问题, 国内外学者开展了大量相关方面的研究。Erdogan^[6]研究了剪切载荷下的非均匀材料裂纹尖端的奇异性。Evans^[7]研究了 TGO 层厚度等因素对热障涂层破坏的影响, 并发现存在一个临界 TGO 层厚度, 使涂层系统在相同热载荷条件下发生破坏。Thouless^[8]研究了涂层表面裂纹规律以及涂层与基体之间的断裂韧性比对 TBCs 破坏模式的影响规律。Chen 等^[9]使用不同喷射加热方法得到了热障涂层系统的不同失效模式。Sun 等^[10]采用理论与数值模拟相结合的方法, 研究了热生长氧化层蠕变对界面裂纹形核的影响。Fan 等^[11]详细研究了不同表面裂纹密度、长度、材料参数等因素对表面裂纹尖端驱动力的影响, 结果表明, 表面裂纹密度增大在一定程度上对材料抗热震性能有提高作用。Peng 等^[12]利用实验与数值模拟相结合的手段, 得到了界面裂纹和表面垂直裂纹的竞争关系以及两种裂纹扩展的主要机理, 并验证了通过调整两层间的弹性模量比值和厚度比值可以控制裂纹扩展路径。以上卓有成效的研究工作, 大大加深人们对热障涂层系统的认识, 为热障涂层的应用提供了有力的理论和技术参考。

在研究热障涂层系统热载荷损伤问题时, 以有限元方法的应用最广泛。Bialas^[13]和 Jiang^[14]使用有限元方法研究了 TGO 层厚度对 TBCs 裂纹扩展行为的影

响。Hille 等^[15]采用内聚力单元法研究了粘结层与陶瓷层间的形貌 (粗糙度) 对 TGO 裂纹形成的影响, 计算结果表明, 粗糙的粘结界面更容易产生裂纹。张治彪^[16]基于真实的 TGO 形貌进行有限元建模, 分析了热障涂层的热应力分布, 并使用 VCCT 方法和 XFEM 计算分析了涂层系统的失效形式。随着近年来有限元方法的发展, 已有学者使用 ABAQUS 软件实现了化-热-力耦合的计算^[17], 且得到了实验验证^[18]。

然而以上热障涂层系统失效分析的有限元方法中, 裂纹扩展判据或者材料失效判据都是基于传统的断裂力学判据和经典强度理论, 但是在实际涂层系统中, 因为 TGO 形貌不规则造成应力分布的不均匀性和复杂性, 单纯使用经典断裂力学模型和某一方向应力难以准确判断裂纹起裂位置和扩展方向。因此, 本文基于材料能量储存极限的概念^[19], 建立了平面复杂应力情形的 TBCs 热震损伤温度相关性临界失效能密度判据, 并结合有限元方法, 研究了 TGO 层凸起情形时 TBCs 的冷却热震损伤失效行为, 为热障涂层系统的应用提供理论依据。

1 线弹性材料的临界失效能密度判据

李卫国和方岱宁等人^[19]认为: (1) 对于一种特定材料, 其存在一个储能极限, 即材料发生破坏时对应一个固定不变的能量最大值, 这个最大值可以用应变能表征, 也可以用热能进行表征; (2) 从对材料的破坏效果讲, 材料储存的能量与应变能之间存在一种定量的等效关系。因此, 不同温度下, 当材料内部的能量密度 (即应变能密度以及等效的热能密度之和) 达到了临界值时, 材料发生断裂。因此有:

$$W_{\text{total}} = KW_T(T) + W_\alpha(T) \quad (1)$$

式中: W_{total} 为单位体积材料的储能能量极限, 即临界失效能密度; T 为当前温度; $W_T(T)$ 为当前温度下的热能密度; $W_\alpha(T)$ 为当前温度下材料破坏时的应变能密度; K 为热能和应变能之间的能量转换系数。

以 T_0 为参考温度时, 对应的热能密度可以表示为:

$$W_T(T) = \rho \int_{T_0}^T C_p(T) dT \quad (2)$$

其中, $C_p(T)$ 为材料对应温度下的定压热容。

由前面的定义可知:

$$W_T(T_0)=0 \quad (3)$$

$$W_\sigma(T_m)=0 \quad (4)$$

式(4)中 T_m 为材料的熔点。根据式(1)有:

$$W_{\text{total}} = KW_T(T_m) = W_\sigma(T_0) \quad (5)$$

因此,可以得到:

$$K = \frac{W_\sigma(T_0)}{W_T(T_m)} = \frac{W_\sigma(T_0)}{\rho \int_{T_0}^{T_m} C_p(T) dT} \quad (6)$$

将式(6)重新代入式(1)可得:

$$W_{\text{total}} = KW_T(T) + W_\sigma(T) = \frac{\rho \int_{T_0}^T C_p(T) dT}{\rho \int_{T_0}^{T_m} C_p(T) dT} W_\sigma(T_0) + W_\sigma(T) \quad (7)$$

式(7)即为材料的温度相关性临界失效能密度。对于平面问题的线弹性材料,其应变能密度可以由式(8)计算:

$$W_\sigma(T) = \frac{1}{2E(T)} (\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2) - \frac{\nu}{E(T)} (\sigma_x \sigma_y + \sigma_x \sigma_z + \sigma_y \sigma_z) + \frac{1}{2G(T)} \tau_{xy}^2 \quad (8)$$

式中: $E(T)$ 、 $G(T)$ 分别为当下温度时材料的弹性模量和剪切模量; ν 为泊松比。对于平面, $\sigma_z=0$ 。

临界失效能密度可以由参考温度下单向拉伸破坏时的应变能密度决定,将参考温度 T_0 时的单向拉伸强度 σ_0 代入式(7)可以得到:

$$W_{\text{total}} = W_\sigma(T_0) = \frac{\sigma_0^2}{2E_0} \quad (9)$$

式中: E_0 为参考温度下的弹性模量。

综上所述,本模型考虑了材料处于复杂应力状态的破坏情形,不再以单纯的最大拉应力或最大主应力对材料是否失效进行判断,而是综合考虑了材料所处的应力状态以及温度的影响。在计算过程中,根据物理知识以及材料产生裂纹后不能自行闭合的事实,认为只有给材料造成拉伸效应的应变能才使材料破坏,因此计算应变能密度时只考虑大于 0 的应力分量。

2 有限元模型

实验研究表明, TBCs 在服役过程中,往往是在冷却过程中出现损伤及裂纹扩展^[3],因此本文利用有限元计算软件 ABAQUS 的子程序接口 UVARM 和 USDFLD,将上述所得到的失效能密度准则对 TBCs 进行热震损伤行为模拟,分析其冷却热震中的损伤形核过程及演化行为。由于本文的数值模拟计算主要模拟冷却热震,持续时间较短,在所计算的温度范围内,假设材料的力学性能均为线弹性,所以不考虑材料的

蠕变效应,并且当材料的失效能密度达到临界值时即发生破坏。因此,计算过程中材料只有两种状态,也就是破坏前和破坏后。通过 USDFLD 子程序,将计算过程中发生破坏的单元的积分点弹性模量设置为 $0.001E_0$ (E_0 为破坏前的弹性模量),以避免计算无法收敛。针对 TBCs 的典型 TGO 界面几何形态,本文建立了 TGO 层凸起的四层 TBCs 结构的有限元模型(如图 1 所示),其中 TC 层厚度为 $300 \mu\text{m}$, TGO 层厚度为 $10 \mu\text{m}$, BC 层厚度为 $100 \mu\text{m}$,中间 TGO 层凸起处圆弧半径 $r=50 \mu\text{m}$ 。模型的左边和底部使用 ABAQUS 中的对称约束,而右边为方程约束,计算所需的材料参数见表 1^[16],其中弹性模量、热导率、热膨胀系数等均为温度相关性。模型的温度初始值为 1000°C ,在 TC 层上表面进行降温,5 s 内表面温度降至 25°C 。

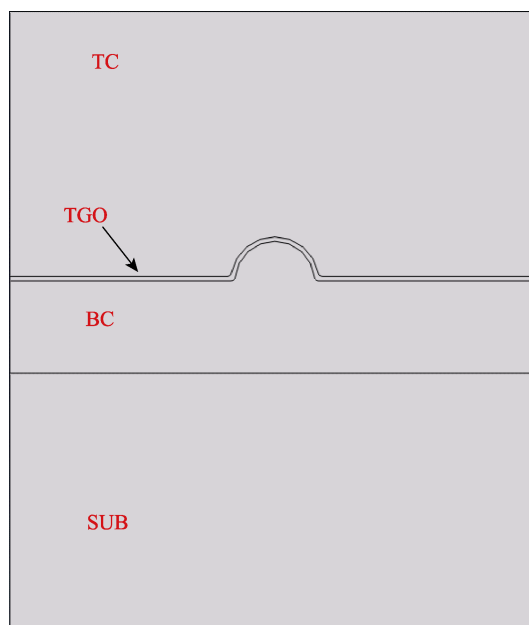


图 1 有限元几何模型
Fig.1 Geometric model for FEM

表 1 热障涂层各层材料参数^[16]
Tab.1 Materials parameter for each layer in TBCs^[16]

	SUB	BC	TGO	TC
T/K	300~1500	300~1500	300~1500	300~1500
E/GPa	220~120	200~110	400~320	48~22
ν	0.31~0.35	0.3~0.33	0.23~0.25	0.10~0.12
$\alpha/(\times 10^{-6} \text{K}^{-1})$	14.8~18.0	13.6~17.6	8.0~9.6	9.0~12.2
$k/(\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$	88~69	5.8~17.0	10~4	2.0~1.7
Density/ ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$)	8500	7380	3984	3610
$C_p/(\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$	440	450	755	505

3 结果分析与讨论

3.1 冷却热震过程中失效能密度在 TC 层和 TGO 层的分布

图 2 和图 3 分别为冷却热震过程中 1 s 和 5 s 时 TC 层失效能密度分布。可以看出,在热震初始阶段,TC 表面的失效能密度最大,而随着热震的进行,失效能密度最大值出现在凸起处的 TC 层与 TGO 层的界面处。也就是说,冷却热震过程中,TBCs 在热震初始阶段,容易在 TC 表面先发生损伤而产生表面裂纹,而在中后期,将会在凸起处的 TC 层与 TGO 层的界面处发生破坏。这与目前实验观测到的现象吻合,即 TBCs 在冷却过程中首先形成一个或多个表面裂纹,在后续加载过程中,表面裂纹将会贯穿涂层并扩展至 TGO 层与 BC 层,从而造成 TBCs 失效。并且在界面处使用失效能密度得到的发生破坏位置与实验接近,验证了使用失效能密度作为材料破坏准则的正确性。

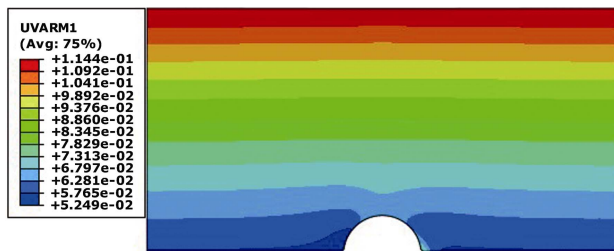


图 2 冷却热震 1 s 时 TC 层失效能密度分布云图
Fig.2 Distribution of failure energy density for TC layer during thermal shock for 1 s



图 3 冷却热震 5 s 时 TC 层失效能密度分布云图
Fig.3 Distribution of failure energy density for TC layer during thermal shock for 5 s

从图 4 和图 5 可以看出,冷却热震过程中,TGO 层的最大失效能密度始终出现在凸起处右上角内侧,即热震过程中 TGO 层最先发生损伤开裂的位置在与 BC 层的交界处,而非与 TC 层的交界处,这与实验观测到的热障涂层系统 I 型破坏模式(图 6)吻合^[20]。但用内聚力单元法和 XFEM 方法得到的结果是:TGO 层在与 TC 层的交界面处先开裂。因此,使用失效能密度准则能更准确地判断 TBCs 中 TGO 的破坏方式。

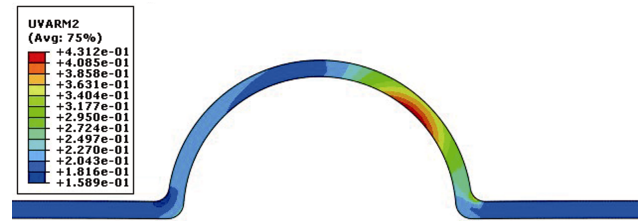


图 4 冷却热震 1 s 时 TGO 层失效能密度分布云图
Fig.4 Distribution of failure energy density for TGO layer during thermal shock for 1 s

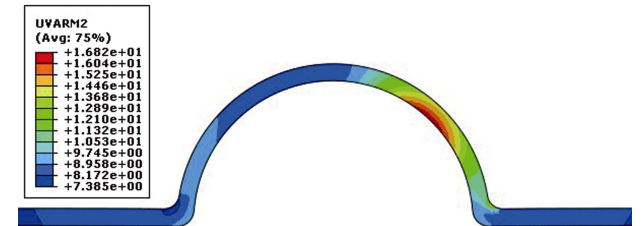


图 5 冷却热震 5 s 时 TGO 层失效能密度分布云图
Fig.5 Distribution of failure energy density for TGO layer during thermal shock for 5 s

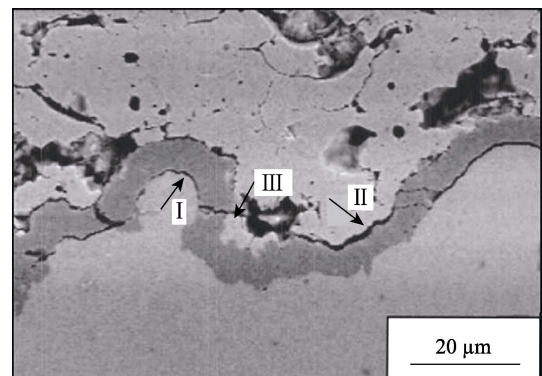


图 6 TBC 中的裂纹模式
(I 箭头所指为 TGO/BC 界面裂纹)^[20]
Fig.6 Crack patterns of the TBC (arrow I shows the crack at the interface of TGO/BC)^[20]

3.2 TBCs 热震损伤过程模拟

在 3.1 节讨论了使用失效能密度判据分析 TBCs 破坏行为的准确性后,针对同样的边界条件和热载荷,模拟了上述 TBCs 代表单元的冷却热震损伤行为。在计算模拟中,假设 TC 层的强度为 30 MPa, TGO 层的强度为 200 MPa, BC 层的强度为 250 MPa。从图 7 可以看到,冷却热震过程中,因 TC 层的临界失效能密度较小,其表面遭受热震时首先达到了临界值而发生破坏,产生了垂直向内部扩展的裂纹,而裂纹扩展过程中也释放了涂层内的应力。因此,在所计算的热震时间内(0.5 s),当裂纹扩展到一定程度时便不再往里扩展,TGO 层也没有损伤出现。

然而将 TC 层的强度提升到 60 MPa 后,再进行计算可以发现(图 8),热震过程中,在 TGO 层与 BC 层交界凸起处的右边首先出现损伤破坏,即当 TC

层强度达到一定值时, TBCs 中首先达到临界失效能密度的是 TGO 层, 热震损伤起始位置由 TC 层上表面变成了 TGO 层与 BC 层的交界处, 这与图 6 中 I 型破坏模式吻合较好。随着热震的进行, 由于 TC 层失效能密度过大, 也达到了临界值, 从而产生了向里扩展的垂直裂纹, 释放表面过大的拉应力, 而此时凸起处的 TGO 层已基本与 BC 层脱离, 且脱离区域向右侧水平 TGO 层延伸。因此, 从图 7—9 可以发现, TBCs 的冷却热震损伤破坏行为与 TC 层的强度有密切关系。

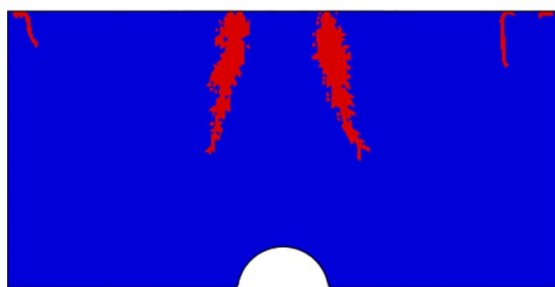


图 7 降温热震过程中 TC 层的损伤行为
(TC 层强度 30 MPa)

Fig.7 Damage behavior of TC layer during cooling thermal shock (strength of TC at 30 MPa)

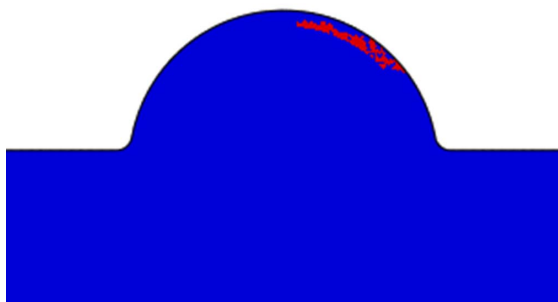


图 8 降温热震过程中 TGO 层的损伤行为
(TC 层强度 60 MPa)

Fig.8 Damage behavior of TGO layer during cooling thermal shock (strength of TC at 60 MPa)

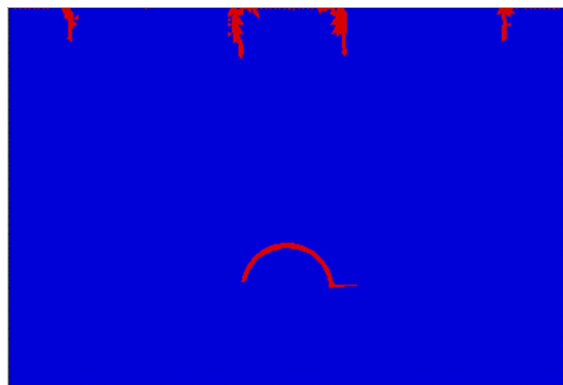


图 9 冷却热震过程中 TBCs 的损伤行为
(TC 层强度 60 MPa)

Fig.9 Damage behavior of TBCs during cooling thermal shock (strength of TC at 60 MPa)

4 结论

基于材料储能极限的概念, 推导了适用于二维复杂应力情形的材料温度相关性临界失效能密度准则, 该准则比单纯使用传统强度理论或断裂力学方法有更好的适用性。

使用所得到的温度相关性临界失效能密度准则与 ABAQUS 软件相结合, 计算了冷却热震过程中 TC 层和 TGO 层的失效能密度分布情况, 分析了此两层在热震过程中的可能破坏位置, 所得结果与实验吻合较好。

模拟了冷却热震过程中 TBCs 的损伤破坏行为, 计算结果发现, TBCs 的热震损伤行为与 TC 层强度密切相关。当 TC 层强度较低时, 热震过程中首先发生破坏的是 TC 层; 而当 TC 层强度达到一定值时, TBCs 首先破坏的位置发生在 TGO 层与 BC 层的凸起交界处。

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] CHEN L B. Yttria-stabilized zirconia thermal barrier coatings—A review[J]. Surface review and letters, 2006, 13(5): 535-544.
- [3] 王铁军, 范学领, 孙永乐, 等. 重型燃气轮机高温透平叶片热障涂层系统中的应力和裂纹问题研究进展[J]. 固体力学学报, 2016, 37(6): 477-517.
WANG Tie-jun, FAN Xue-ling, SUN Yong-le, et al. The stress and cracks in the thermal barrier coating system: A review[J]. Chinese journal of solid mechanics, 2016, 37(6): 477-517.
- [4] KUMAR V, BALASUBRAMANIAN K. Progress update on failure mechanisms of advanced thermal barrier coatings: A review[J]. Progress in organic coatings, 2016, 90: 54-82.
- [5] FREUND L B, SURESH S. Thin film materials: Stress, defect formation, and surface evolution[J]. AIAA journal, 2003, 43: 713-737.
- [6] ERDOGAN F. The crack problem for bonded non-homogeneous materials under antiplane shear loading[J]. Journal of applied mechanics, 1985, 52(4): 729.
- [7] EVANS A G, HE M Y, HUTCHINSON J W. Mechanics-based scaling laws for the durability of thermal barrier coatings[J]. Progress in materials science, 2001, 46(3): 249-271.
- [8] THOULESS M D, LI Z, DOUVILLE N J, et al. Periodic cracking of films supported on compliant substrates[J]. Journal of the mechanics & physics of solids, 2011, 59(9): 1927-1937.

- [9] CHEN Z B, WANG Z G, ZHU S J. Tensile fracture behavior of thermal barrier coatings on superalloy[J]. *Surface & coatings technology*, 2011, 205(15): 3931-3938.
- [10] SUN Y L, ZHANG W X, LI J G, et al. Local stress around cap-like portions of anisotropically and non-uniformly grown oxide layer in thermal barrier coating system[J]. *Journal of materials science*, 2013, 48 (17): 5962-5982.
- [11] FAN X L, ZHANG W X, WANG T J, et al. Investigation on periodic cracking of elastic film/substrate system by the extended finite element method[J]. *Applied surface science*, 2011, 257(15): 6718-6724.
- [12] JIANG P, FAN X L, SUN Y L, et al. Competition mechanism of interfacial cracks in thermal barrier coating system[J]. *Materials and design*, 2017, 132: 559-566.
- [13] BIALA S M. Finite element analysis of stress distribution in thermal barrier coatings[J]. *Surface and coatings technology*, 2008, 202(24): 6002-6010.
- [14] JIANG J, XU B, WANG W, et al. Finite element analysis of the effects of thermally grown oxide thickness and interface asperity on the cracking behavior between the thermally grown oxide and the bond coat[J]. *Journal of engineering for gas turbines and power*, 2017, 139: 022504.
- [15] HILLE T S, NIJDAM T J, SUIKER A S J, et al. Damage growth triggered by interface irregularities in thermal barrier coatings[J]. *Acta materialia*, 2009, 57(9): 2624-2630.
- [16] 张治彪. 基于真实 TGO 界面形貌的热障涂层热应力及界面失效有限元分析[D]. 长沙: 湘潭大学, 2016.
- ZHANG Zhi-biao. The analysis of thermal stress and the crack propagation within real TGO interface in thermal barrier coatings by finite element modeling[D]. Changsha: Xiangtan University, 2016.
- [17] LEOFFEL K, ANAND L. A chemo-thermo-mechanically coupled theory for elastic-visco plastic deformation, diffusion, and volumetric swelling due to a chemical reaction[J]. *International journal of plasticity*, 2011, 61(2): 1409-1431.
- [18] LEOFFEL K, ANAND L, GASEM Z M. On modeling the oxidation of high-temperature alloys[J]. *Acta materialia*, 2013, 61(2): 399-424.
- [19] LI W, YANG F. The temperature-dependent fracture strength model for ultra-high temperature ceramics[J]. *Chinese journal of theoretical and applied mechanics*, 2010, 26(2): 235-239.
- [20] RABIEI A, EVANS A G. Failure mechanisms associated with the thermally grown oxide in plasma-sprayed thermal barrier coatings[J]. *Acta materialia*, 2000, 48(15): 3963-3976.