

NiCoCrAlY/YSZ 梯度涂层热力学性能 的有限元模拟

王士峰¹, 夏明岗², 刘明³, 王玉¹, 王斌², 白宇^{1*}, 王海斗³

(1. 西安交通大学金属材料强度国家重点实验室, 西安 710049; 2. 西安交通大学物理学院物质非平衡合成与调控教育部重点实验室, 西安 710049; 3. 陆军装甲兵学院装备再制造技术国防科技重点实验室, 北京 100072)

摘要: 采用代表体积单元法建立 NiCoCrAlY/YSZ 梯度热障涂层的有限元二维微观模型, 计算不同相成分配比下梯度层的热物理性能参数, 将参数结果推广到三维多层涂层实体模型, 研究热循环过程中双层结构涂层和梯度结构涂层的热力学性能。结果表明: 梯度层的弹性模量、泊松比、热膨胀系数、导热系数与各相成分比例近似呈线性关系, 导热系数受各相分布形态的影响; 当梯度层中 NiCoCrAlY 相成分比例在 0.7 以下时, 导热系数较低, 常温状态最高为 $2.91 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ 。相比于双层结构涂层, 梯度结构涂层的 YSZ 成分比例降低 20%, 隔热温度降低 14%, 陶瓷面层在高温时产生的热失配径向拉应力降低 47%, 轴向拉应力降低 32%, 切应力降低 37%, 冷却后的残余应力降低 50%, 这归因于涂层结构的梯度化有效降低涂层与基体热膨胀系数不同而产生的热失配应力。根据涂层应力分布结果, 涂层易在 TC/BC 界面的中心区域形成垂直裂纹, 靠近外侧边缘区形成水平裂纹。

关键词: 热障涂层; 梯度结构; 有限元; 微观模型; 热应力

doi: 10.11868/j.issn.1005-5053.2022.000059

中图分类号: TG148

文献标识码: A

文章编号: 1005-5053(2023)01-0070-10

Finite element simulation of thermodynamic properties of NiCoCrAlY/YSZ gradient coating

WANG Shifeng¹, XIA Minggang², LIU Ming³, WANG Yu¹, WANG Bin², BAI Yu^{1*}, WANG Haidou³

(1. State Key Laboratory for Mechanical Behavior of Materials, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China; 2. School of Physics, MOE Key Laboratory for Non-equilibrium Synthesis and Modulation of Condensed Matter, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China; 3. National Key Laboratory for Remanufacturing, Army Academy of Armored Forces, Beijing 100072, China)

Abstract: The two-dimensional finite element microscopic model of NiCoCrAlY/YSZ gradient thermal barrier coating was established by using the representative volume element method to calculate the thermophysical properties of the gradient layer under different composition ratios. The parameter results were extended to the three-dimensional multi-layer solid model to study the thermodynamic properties of the double-layer coating and gradient structured coating under thermal cycling condition. The results show that the elastic modulus, Poisson's ratio, coefficient of thermal expansion and thermal conductivity of the gradient layer are approximately linear with the component proportion of each phase, and the thermal conductivity is also affected by the distribution pattern of each phase. The thermal conductivity is low and the highest value is $2.91 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ when the proportion of NiCoCrAlY phase in the gradient layer is below 0.7 at room temperature. Compared with the double-layer coating, the proportion of YSZ in gradient coatings is reduced by 20%, the insulation temperature is reduced by 14%, the radial tensile stress, axial tensile stress, and shear stress of the ceramic surface layer at high temperature are reduced respectively by 47%, 32% and 37%, and the residual stress after cooling is reduced by 50%. The results are attributed that the gradient of the coating structure can effectively reduce the thermal mismatch stress caused by the difference in the thermal expansion coefficient between coating and substrate. According to the results of coating stress distribution, the coating is inclined to form vertical cracks in the centre region and horizontal cracks near the outer edge of the TC/BC interface.

Key words: thermal barrier coating; gradient structure; finite element; microscopic model; thermal stress

热障涂层是航空发动机与燃气轮机等国家重大装备的有效热防护手段^[1-2]。目前广泛使用的热障涂层一般采用双层结构,该结构由合金底层(bond coat, BC)与陶瓷面层(top coat, TC)组成,其目的是利用陶瓷面层优异的阻热性能来降低金属基体(substrate, SUB)服役时的表面温度,从而实现其在高温环境下的可靠应用。但在双层结构热障涂层中,陶瓷面层与合金底层之间的热失配应力始终是影响其可靠服役的不利因素^[3]。

为缓解热失配应力,许多研究者对热障涂层进行了结构方面的梯度化设计^[4-5],在陶瓷面层与合金底层之间制备梯度层(gradient coat, GC),使得涂层在化学成分与力学性能上沿涂层厚度方向呈现梯度分布^[6-7]。程西云等^[8]分析了梯度层的结构形式、厚度及中间层数等参数对涂层热应力分布的影响,发现合理的梯度结构能改善涂层内部轴向热应力及剪应力分布,改变热应力分布特征。庞铭等^[9]建立数值仿真模型,研究基体、黏结层及陶瓷层的厚度参数对涂层残余应力的影响,发现基体厚度对喷涂涂层的残余应力的方向和大小有显著影响。Baig 等^[10]制备了双层涂层和梯度涂层并进行了有限元分析,发现梯度涂层的显微组织、显微硬度和热膨胀系数均发生变化,五层梯度涂层产生的径向、轴向和剪切应力最小。Bhattacharyya 等^[11]利用板的弯曲理论,比较了不同基底材料的梯度涂层沉积后各层的残余应力分布,发现随着梯度层中YSZ浓度的增加,涂层的应力状态逐渐由靠近黏结层-涂层界面处的完全受拉变为局部受拉。目前学者们针对多层梯度涂层开展的研究多为梯度层的厚度、成分比例等宏观结构参数对涂层制备或服役过程中产生的热应力的影响,然而,研究使用的梯度层的热物理参数多采用解析表达式直接计算,未考虑梯度层中各相分布形态、相互作用与组分比例

是否满足解析表达式的使用条件,对于梯度涂层材料形态分布的分析不够深入,缺少用于分析梯度结构涂层的高效建模方法。

本工作基于涂层扫描电子显微镜(SEM)图像,采用代表体积单元法提取梯度涂层结构特征,建立相成分比例可精确调控的梯度结构涂层分析模型,然后采用有限元方法计算不同材料成分比例下梯度层的弹性模量、泊松比、导热系数与热膨胀系数,研究涂层梯度结构与成分比例及其性能间的构效关系,进一步分析在实体结构模型中涂层的梯度结构对涂层热力学性能的影响规律。

1 梯度涂层的设计建模

1.1 梯度涂层热物理性能参数微观模型的建立

图1为等离子喷涂梯度结构热障涂层的截面SEM图与微观结构模型。图1(a)中颜色较浅的部分为YSZ陶瓷相,深色部分为NiCoCrAlY金属相,梯度层中的金属相具有起伏状的长条分布结构特征。将梯度层中金属相的不规则长条起伏结构简化为上下两条正弦结构曲线,左右两条圆弧曲线的规则长条结构,结合涂层中陶瓷相材料与金属相材料的分布规律,设计建立梯度涂层的微观结构模型,并假设^[12-13]:忽略模型中的界面、孔隙、裂纹等微观缺陷,金属相的起伏特征为梯度涂层微观非均质的周期函数,涂层边界无成分波动,涂层内部各相材料材质均匀,忽略涂层初始状态残余应力。

梯度涂层微观模型的设计分三步:建立单个金属相正弦模型,计算其面积;根据梯度层中金属相与陶瓷相的成分比例,计算梯度层模型中金属相正弦模型的数量;在梯度层范围内随机生成对应数量的金属相正弦模型,得到单个相成分比例的梯度层模型;将多个相成分比例不同的梯度层模型与陶瓷

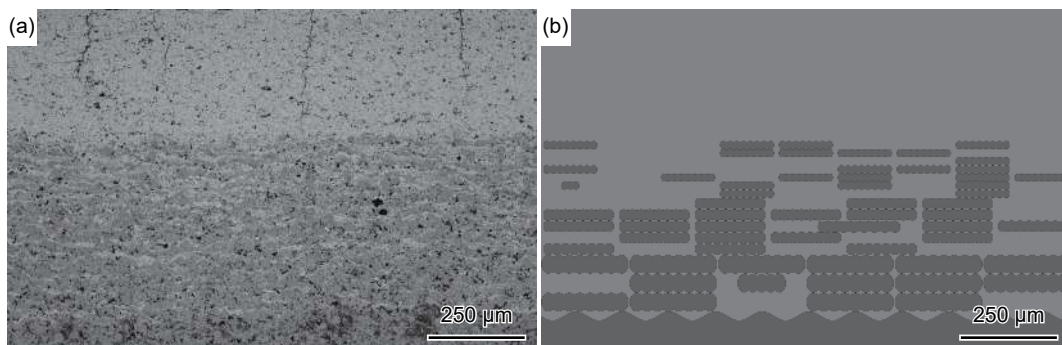


图1 梯度结构热障涂层 (a)显微结构形貌;(b)微观结构模型

Fig. 1 Gradient structured thermal barrier coating (a) microstructure morphology; (b) microstructural model

面层和合金底层组合,得到如图1(b)所示的梯度涂层微观结构模型。

采用代表体积单元法^[14]提取相成分比例不同的多个梯度层中金属相的长度,将金属相厚度方向上的起伏结构简化为正弦结构,设计高度为 h ,宽度为 w 的矩形框架,其上下边均为 θ ($\theta=0.5, 1.5, 2.5\dots$)个周期且相位差为0.5个周期的两条正弦曲线,垂直偏距差等于矩形的高度 h ,左右边均为1/4个圆弧,建立梯度层中单个金属相的正弦模型。

金属相正弦模型的矩形高度 h 为相成分比例 x 的函数,满足:

$$h = \frac{t}{(1+2(f+f^*)) / (1-10x)} \quad (1)$$

式中: t 为单层梯度层的厚度; f 为正弦曲线的幅值因数; f^* 为正弦模型间的间隙距离因数。

拟合各相成分比例梯度层中提取的金属相长条结构长度,得到金属相宽度 w 与相成分比例 x 的关系式,满足:

$$w = (314.5x + 109) - (\sqrt{2}-1)h \quad (2)$$

金属相正弦模型的面积 S_0 由3部分组成,分别为矩形框架面积 S_1 、上下边的正弦曲线面积 S_2 和左右两侧的圆弧曲线面积 S_3 。

$$S_0 = S_1 + S_2 + S_3 \quad (3)$$

$$S_1 = hw \quad (4)$$

$$S_2 = 2 \left(\cos(0) - \cos\left(\frac{w}{4\theta}\right) \right) \cdot (hf) \quad (5)$$

$$S_3 = h^2 \left(\frac{\pi}{4} - \frac{1}{2} \right) \quad (6)$$

根据梯度层的相成分比例 x 与单层梯度层的厚度 t 、涂层宽度 L 计算梯度层内金属相面积 S ,令 n (n 为满足 $nS_0 \leq S$ 的最大整数)个面积为 S_0 的金属相正弦模型与单个面积为 S_0^* 的金属相正弦模型之

和等于 S ,即得到梯度层中金属相正弦模型的数量:

$$S = n \cdot S_0 + S_0^* \quad (7)$$

根据正弦模型高度 h 和宽度 w 将梯度层划分为 N_h 行 N_w 列的均匀网格,随机在其中的 $n+1$ 个网格中心生成金属相正弦模型,通过布尔运算实现金属相与陶瓷相的混合,得到单个成分比例的梯度层模型, N_h 、 N_w 满足:

$$\begin{aligned} N_h \cdot N_w &\geq n+1 \\ N_h &= 1-10x \\ N_w &= \frac{L}{w + (\sqrt{2}-1)h} \end{aligned} \quad (8)$$

调整梯度层金属相的面积 S 与金属相正弦模型高度 h 、宽度 w ,重复上述设计过程,将得到的多个梯度层与陶瓷面层和合金底层结合,完成梯度涂层微观结构模型的建立。

通过有限元软件 ABAQUS 建立 NiCoCrAlY 相比比例分别为 0.2~0.8 的 7 个梯度层的二维微观结构模型,分别添加边界条件以计算梯度层的热物理性能参数。对模型分别设置 20~1100 °C 间的 7 个温度,并添加如图 2 所示的三种边界条件并计算:图 2(a)表示涂层模型左侧和下侧所添加的位移边界条件,分别限制 X 方向和 Y 方向的位移,右侧设置 Y 方向的位移载荷,采用式(9)、式(10)计算弹性模量、泊松比;图 2(b)表示涂层模型的上侧和下侧所添加的接触边界条件,设置环境温度和换热系数,采用式(12)计算导热系数;图 2(c)表示涂层模型左侧和下侧所添加的位移边界条件,分别限制 X 方向和 Y 方向的位移,升高涂层模型整体温度,采用式(13)计算热膨胀系数。采用解析表达式(14)、式(15)计算梯度层的密度和比热。

热障涂层的热导率受涂层微观结构的影响显著,难以直接通过解析表达式准确计算,为了验证

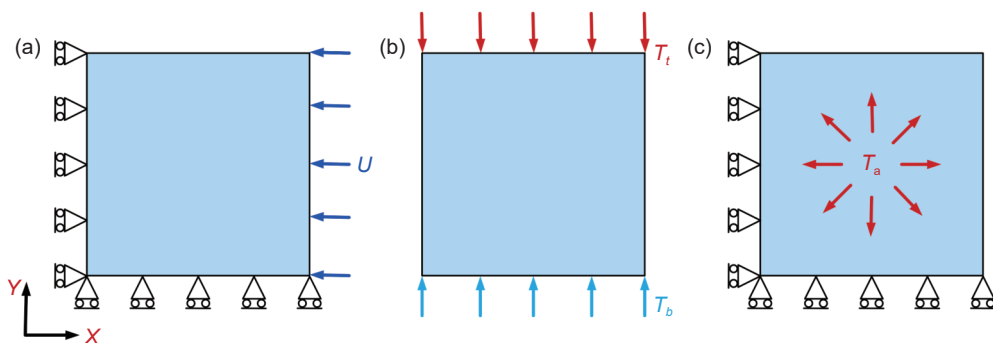


图2 梯度层的热物理性能参数分析模型的边界条件 (a)弹性模量及泊松比;(b)导热系数;(c)热膨胀系数

Fig. 2 Boundary conditions of thermophysical properties analysis model of gradient layer (a)elasticity modulus and Poisson's ratio; (b)thermal conductivity; (c)coefficient of thermal expansion

微观模型建立方法的准确性,建立厚度为 1.5 mm 的双层结构涂层与梯度结构涂层的有限元微观模型,并添加如图 2(b)所示的温度接触边界条件,计算其在不同温度下的导热系数,采用激光导热仪(LFA 427)对 1.5 mm 的双层结构涂层和梯度结构涂层喷涂样品进行热导率测试,将涂层热导率的有限元分析结果与实验测试结果对比。

划分梯度层模型的有限元网格时,由于梯度层的结构复杂,且 YSZ 相与 NiCoCrAlY 相随机分布

无规则,为了得到单元大小均匀的网格,网格划分方式为自由网格,单元形状为四边形,过渡区可为三角形,传热单元与平面应力单元分别选择四节点线性四边形传热单元 DC2D4 与四节点线性缩减积分单元 CPS4R。

表 1^[15-16]为已有的 YSZ、NiCoCrAlY 及铸铝合金的材料热物理性能参数,YSZ 的材料参数大部分是通过喷涂样品进行性能测试得到,各相材料均采用线弹性模型。

表 1 材料热物理性能参数^[15-16]
Table 1 Thermophysical properties of materials^[15-16]

Material	Temperature/°C	E/GPa	ν	$\alpha/(10^{-6}\cdot\text{K}^{-1})$	$\kappa/(\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$	$C/(\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$	$\rho/(\text{kg}\cdot\text{m}^{-3})$
YSZ	20	105.4	0.25	7.9	1.032	500	4580
	200	—	0.25	8.77	1.032	—	4580
	400	—	0.25	9.46	0.911	576	4580
	600	—	0.25	10.34	0.788	—	4580
	800	—	0.25	10.71	0.661	637	4580
	1000	—	0.25	11.70	0.622	—	4580
	1100	—	0.25	12.20	0.622	—	4580
NiCoCrAlY	20	200	0.30	13.6	5.8	400	8100
	200	190	0.30	14.2	7.5	400	8100
	400	175	0.31	14.6	9.5	400	8100
	600	160	0.31	15.2	12.0	400	8100
	800	145	0.32	16.1	14.5	400	8100
	1000	120	0.33	17.2	16.2	400	8100
	1100	110	0.33	17.6	17.0	400	8100
Casting aluminum alloy	20	84	0.32	21.0	130	400	2680
	400	70	0.32	21.8	148	400	2680

弹性模量 E 定义为材料变形时材料在位移载荷施加方向上应力 σ_y 与应变 $\Delta L_y/L_y$ 之比^[17]:

$$E = \frac{\sigma_y}{\Delta L_y/L_y} \quad (9)$$

泊松比 ν 定义为材料变形时材料在位移载荷施加方向上的应变 $\Delta L_x/L_x$ 与位移载荷施加方向上的应变 $\Delta L_y/L_y$ 之比:

$$\nu = \frac{\Delta L_x/L_x}{\Delta L_y/L_y} \quad (10)$$

在稳态传热条件下,根据傅里叶第一定律^[18],在长度为 L ,面积为 A ,上下边温度差为 ΔT 的材料截面,内部通过热量为 Q 时,其热导率 κ 可以采用式 (11) 计算:

$$\kappa = \frac{QL}{A\Delta T} \quad (11)$$

热膨胀系数 α 定义为材料发生温度变化 ΔT 所导致的长度 L 变化:

$$\alpha = \Delta L \cdot \frac{1}{L} \cdot \frac{1}{\Delta T} \quad (12)$$

由体积分数为 V_A ,密度为 ρ_A 的材料 A 和体积分数为 V_B ,密度为 ρ_B 的材料 B 组成的复合材料的密度 ρ 采用式 (13) 计算:

$$\rho = \rho_A V_A + \rho_B V_B \quad (13)$$

假设 A、B 两相材料之间的界面不会吸收热能, c_A 为材料 A 的比热容, c_B 为材料 B 的比热容,复合材料的比热容 c 采用式 (14) 计算:

$$c = \frac{c_A \rho_A V_A + c_B \rho_B V_B}{\rho_A V_A + \rho_B V_B} \tag{14}$$

1.2 梯度涂层热循环多层实体结构模型的建立

使用有限元软件 ABAQUS 建立热障涂层系统的三维多层实体结构模型,分析不同涂层系统在热循环过程中的温度场与应力场,总结研究涂层的梯度结构与双层结构之间的热力学性能差异。铸铝合金基体厚度为 20 mm,宽度为 20 mm,长度为 200 mm,顶面热障涂层厚度为 1.5 mm,建模时独立

建立各层的三维模型,通过绑定约束获得涂层系统的实体模型^[19]。热障涂层具有两种结构:双层结构和梯度结构,双层结构涂层中陶瓷面层与合金底层的厚度分别为涂层总厚度的 90%、10%,梯度结构涂层包括三层梯度涂层与五层梯度涂层,其中陶瓷面层、梯度层与合金底层的厚度分别为涂层总厚度的 50%、40%、10%。双层结构涂层具有一种结构,梯度结构涂层的梯度层数和成分梯度不同,具有 6 种结构,根据其结构特点分别进行命名,如表 2 所示。

表 2 双层涂层和梯度涂层的层数和成分比例
Table 2 Number of layer and composition ratios of double-layer coating and gradient coating

Coating type	Model	Layer	Proportion of NiCoCrAlY in each layer				
Double-layer coating	G0	—	—				
Three-layer gradient coating	G3-1	3	0.2	0.5	0.8		
	G3-2	3	0.3	0.5	0.7		
	G3-3	3	0.4	0.5	0.6		
Five-layer gradient coating	G5-1	5	0.2	0.3	0.5	0.7	0.8
	G5-2	5	0.2	0.4	0.5	0.6	0.8
	G5-3	5	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7

研究对象为涂层系统在一个热循环过程中的涂层隔热性能与涂层应力状态,涂层系统的初始温度为 25 ℃,热障涂层顶面接触环境温度从 25 ℃ 升高至 1178 ℃ 再降低至 25 ℃,对流换热系数为 1504 W/(m²·K),忽略高温气体对涂层的冲击力作用,基体底面与 25 ℃ 的冷却空气接触,对流换热系数为 900 W/(m²·K)。

模型网格划分为四面体结构化网格,传热单元与平面应力单元分别选择八节点线性四面体传热单元 DC3D8 与八节点六面体线性减缩积分单元 C3D8R。由于涂层厚度相对于基体厚度较小,且涂层/基体界面处存在应力集中,故需在轴向上加密涂层/基体界面及涂层的网格,并进行网格无关性验证以确定网格无关解。对梯度结构涂层模型的各部件分别设置不同尺寸的网格,计算比较涂层界面处的最大 Mises 应力变化量,以进行网格无关验证。验证结果如表 3 所示,当基体轴向渐变网格尺寸细化为 100 ~ 1000 μm,合金底层及各梯度层网格轴向尺寸细化为 25 μm,陶瓷面层网格轴向尺寸细化为 50 μm 时界面应力变化量较小,模型满足网格无关性要求,此时模型整体网格数量为 92.4 万,最终建立的涂层结构模型与网格划分细节如图 3 所示。

表 3 网格无关性验证结果
Table 3 Grid independent validation results

Gradient structure	Model parameter		
	Element size/μm	Element number	Maximum mises/MPa
SUB	100-1000	204000	308.35
	50-1000	240000	308.38
BC and GC	25	80000	308.35
	16	128000	308.37
TC	50	240000	316.61
	37.5	320000	320.71

2 结果与讨论

2.1 梯度涂层热物理性能参数的计算结果

图 4 为不同 NiCoCrAlY 相成分比例梯度层的热物理性能参数计算结果。由图 4 可知梯度层的弹性模量、泊松比、热膨胀系数、比热容、密度和导热系数与其相成分比例近似呈线性关系,其中导热系数受各相分布形态的影响。梯度层中起隔热作用的主要是陶瓷相,因此随着梯度层中金属相比例的增加,其导热系数也随之增加,如图 4(c)所示。

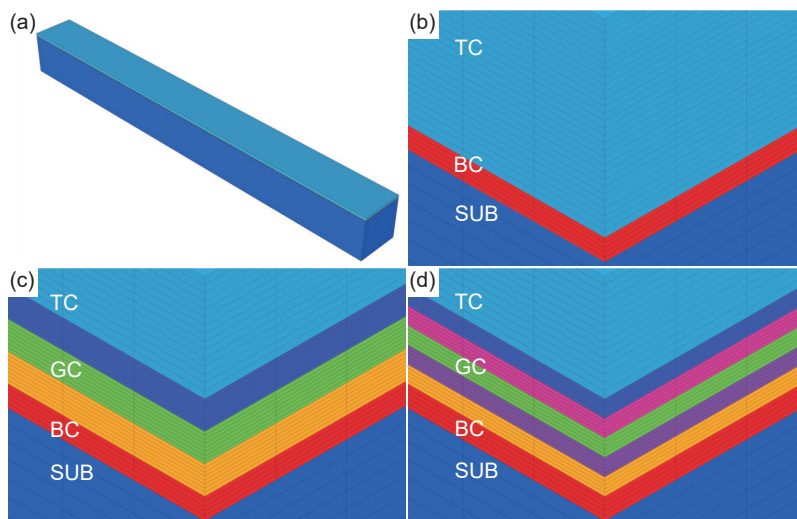


图 3 涂层系统的实体结构有限元模型 (a)实体模型; (b)双层结构涂层; (c)三层梯度涂层; (d)五层梯度涂层

Fig. 3 Solid structure finite element model of coating system (a)solid model; (b)double-layer coating; (c)three-layer gradient coating; (d)five-layer gradient coating

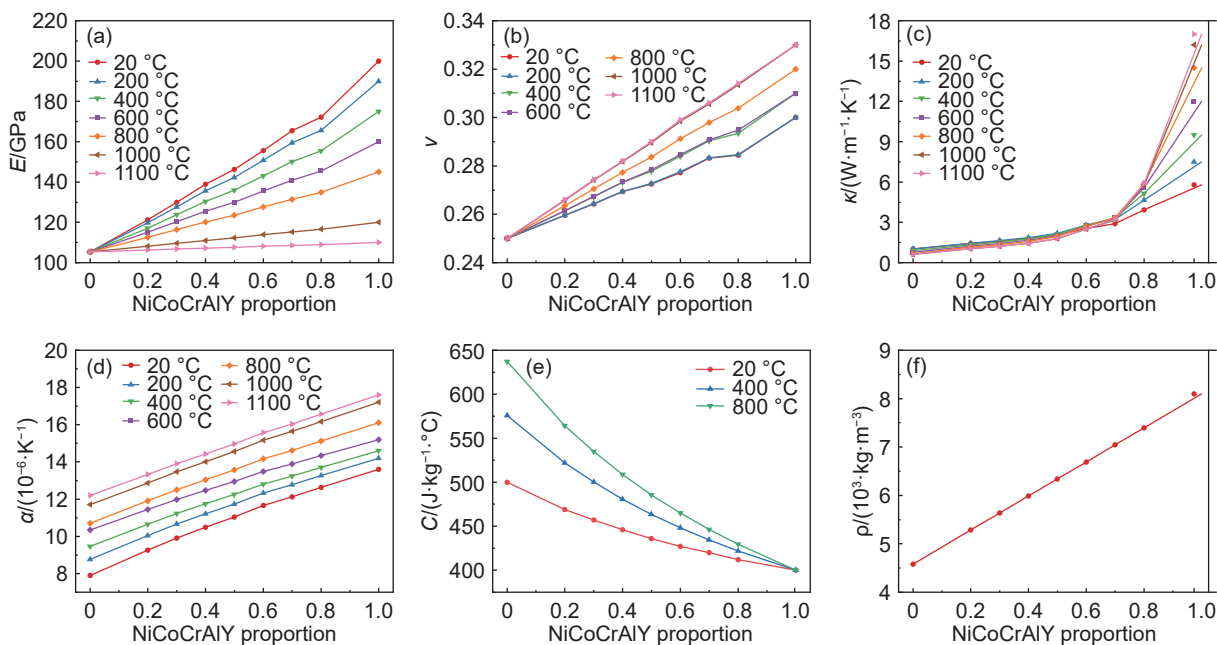


图 4 不同温度下梯度层的热物性性能参数随 NiCoCrAlY 相比比例变化曲线 (a)弹性模量; (b)泊松比; (c)导热系数; (d)热膨胀系数; (e)热容; (f)密度

Fig. 4 Variation curves of thermophysical properties of the gradient layer with different proportion of NiCoCrAlY phase at different temperatures (a) elasticity modulus; (b) Poisson's ratio; (c) thermal conductivity; (d) coefficient of thermal expansion; (e) thermal capacity; (f) density

当梯度层中 NiCoCrAlY 金属相比比例较低时, 导热系数增加缓慢, 当相比比例增长到 0.7 时, 其常温下的导热系数达到 $2.91 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$, 但是当金属相比比例继续增加时, 导热系数曲线的斜率迅速提高, 这是由陶瓷材料和金属材料在导热方式差异与形态特征上的差异所导致。在梯度涂层微观模型中, 各梯度层金属相平行于涂层径向分布, 当金属相比比例较低时, 其分布较为分散, 陶瓷相导热占优, 涂层表现出低导热系数; 金属相比比例较高时, 其分布较为

集中, 在厚度方向上金属相导热占优, 涂层表现出高导热系数。

1.5 mm 的双层结构涂层与梯度结构涂层的热导率有限元分析结果与实验测试结果如图 5 所示。涂层的热导率随着温度升高而降低, 常温时双层结构涂层热导率测得为 $1.19 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$, 梯度结构涂层热导率测得为 $1.81 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 。涂层中存在的微孔洞与微裂纹对涂层的热导率有显著影响, 导致有限元分析计算结果和实验测试结果间存在约

为5%的误差。

2.2 热障涂层高温环境下的温度场分析

图6为双层结构涂层与梯度结构涂层在高温环境下的轴向温度分布与综合隔热性能对比。梯度结构涂层中的陶瓷面层、合金底层与梯度层的厚度相等,且YSZ总体积分数均为70%,因此各个梯度涂层整体隔热能力无显著差异,只是各梯度层内部的温度场分布略有不同(图6(a))。此外,还发现涂层表层温度越高,底层温度越低,其隔热能

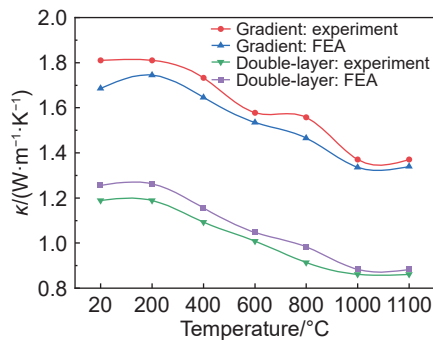


图5 涂层热导率的有限元计算结果与实验测试结果

Fig. 5 Finite element calculation results and experimental test results of the thermal conductivity of coating

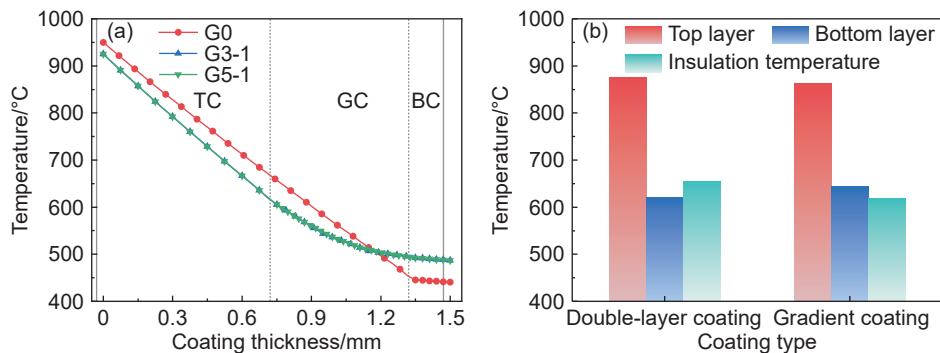


图6 不同结构涂层的隔热模拟结果 (a)涂层轴向温度分布;(b)涂层隔热性能对比

Fig. 6 Thermal insulation simulation results of coatings with different structures (a) axial temperature distribution of coatings; (b) comparison of insulation properties of coatings

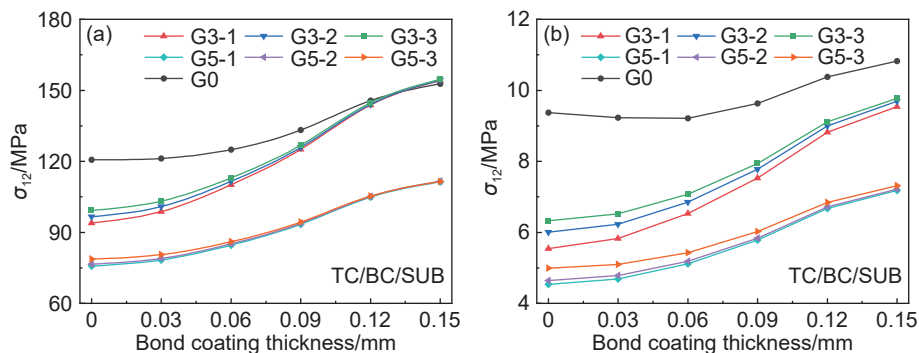


图7 不同结构涂层的合金底层产生的剪切应力 (a)高温状态;(b)室温状态

Fig. 7 Shear stresses generated in alloy base layers with different structural coatings (a) high temperature condition; (b) room temperature condition

力越强,双层结构涂层的上、下表面温度分别为949.7 °C和440.5 °C,梯度涂层的上、下表面温度分别为924.7 °C和487.3 °C(图6(b))。相较于双层结构涂层,梯度结构涂层隔热温度下降了14%。这与陶瓷相比降低20%有关。

2.3 热障涂层热循环过程中的热失配应力分析

热障涂层在热循环的过程中,由于基体和涂层的热膨胀系数不同,将发生热失配应变,使涂层在热失配应力作用下发生开裂或剥落失效,相较于双层结构涂层,梯度涂层中相成分梯度的存在使得涂层的热膨胀系数等热物理性能参数梯度变化,从而缓解涂层与基体的热失配应变,减小产生的热失配应力,有效增加涂层的高温服役寿命^[20-21]。涂层中各层受到的热失配应力 σ_c 可以表示为^[22]:

$$\sigma_c = \frac{(\alpha_m - \alpha_c) E_c \Delta T}{1 - \nu_c} \quad (15)$$

式中: α_m 、 α_c 分别为基体和涂层的热膨胀系数; E_c 为涂层的弹性模量; ΔT 为涂层的温度差; ν_c 为涂层的泊松比。

图7为涂层在热循环过程中合金底层产生的最大剪切应力沿涂层轴向的变化趋势。合金底层

通常起到增强涂层与基体结合力的作用,其产生的剪切应力大小能够反映系统热失配应力的大小。各个涂层中合金底层产生剪切应力最大的位置均在 BC/SUB 界面的最外侧边缘处,沿轴向到 TC/BC 界面逐渐减小。高温状态下相较于双层结构涂层,三层、五层梯度涂层中合金底层在 TC/BC 界面产生的剪切应力分别减小 22%、37%,残余剪切应力

分别减小 41%、52%,相同结构的梯度涂层,成分梯度越小,涂层产生的剪切应力越大。

图 8 为涂层在热循环过程中陶瓷面层产生的最大轴向拉应力。陶瓷面层产生最大轴向拉应力的位置在 TC/BC 界面靠近外侧边缘处,因此涂层易在该位置形成水平裂纹,这与 Wang 等^[23]的研究结果一致。高温状态下相较于双层结构涂层,三层、五层梯度涂层产生的轴向拉应力分别减小 30%、32%,残余轴向拉应力分别减小 52%、59%,相同结构的梯度涂层,成分梯度越小,涂层产生的轴向拉应力越小。

图 9 为涂层在热循环过程中陶瓷面层产生的最大径向应力以及径向应力沿涂层轴向的变化趋势。梯度涂层的应力分布比双层涂层更复杂,涂层受径向拉应力最大的位置出现于陶瓷面层在 TC/BC 界面的中心区域,因此该位置易形成垂直裂纹。陶瓷面层顶部受压应力,沿轴向到底部逐渐转变为拉应力,在陶瓷面层底部,高温状态下三层、五层梯度涂层的陶瓷面层底部产生的径向拉应力较双层结构涂层分别减小 31%、47%。

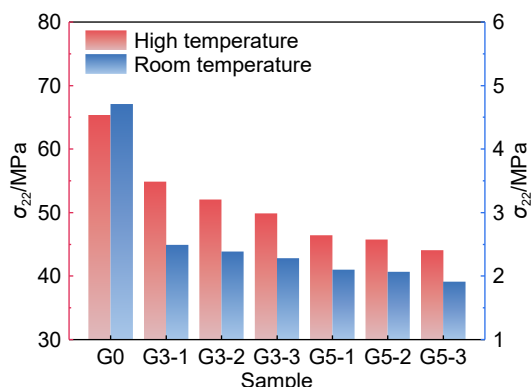


图 8 不同结构涂层的陶瓷面层产生的最大轴向拉应力

Fig. 8 Maximum axial tensile stresses generated in ceramic top layers with different structural coatings

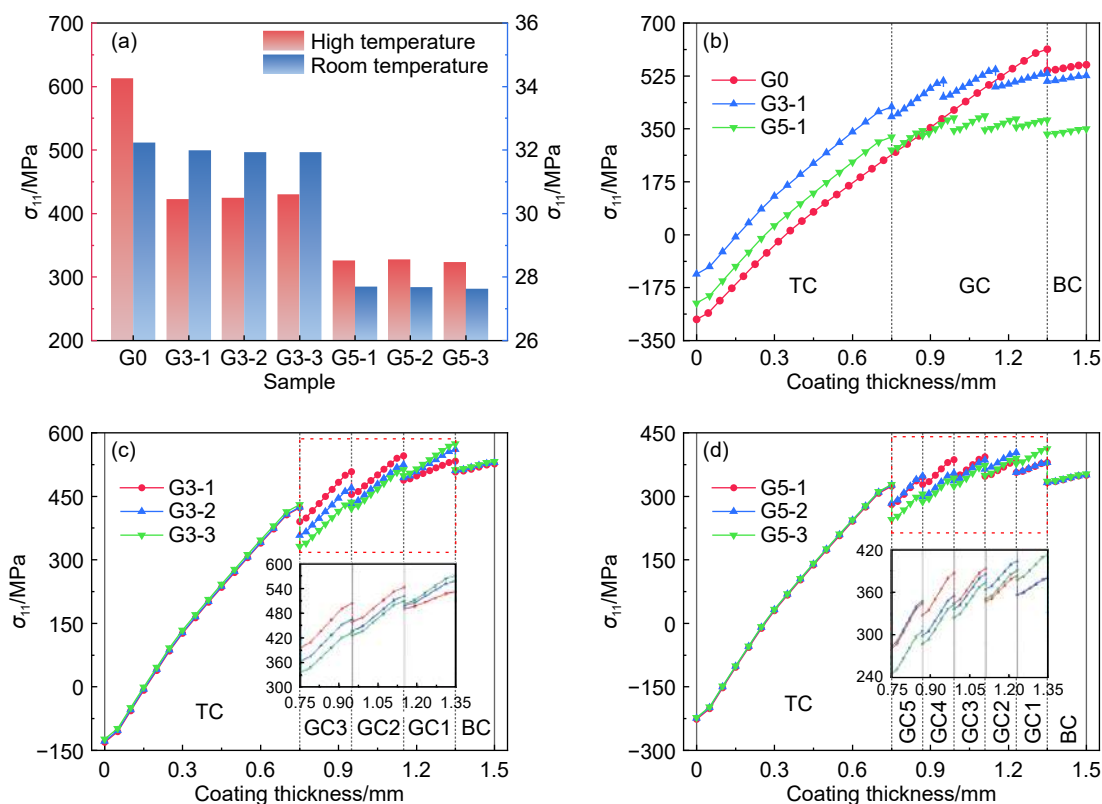


图 9 不同结构涂层的陶瓷面层产生的径向拉应力对比 (a)各涂层产生的最大径向拉应力;(b)双层、三层梯度、五层梯度涂层应力分布;(c)三层梯度涂层应力分布;(d)五层梯度涂层应力分布

Fig. 9 Comparison of the maximum radial tensile stresses generated in ceramic top layers with different structural coatings (a)maximum radial tensile stress generated in each coating; (b)stress distributions in double-layer, three-layer gradient and five-layer gradient coatings; (c)stress distribution in three-layer gradient coating; (d)stress distribution in five-layer gradient coating

综上,梯度层能够缓解涂层产生的热失配应力,使得涂层的径向拉应力在各层的界面处发生了突变,导致应力曲线呈上升阶梯状。当梯度结构涂层的梯度层数相同时,陶瓷面层和合金底层的成分和温度场分布相同,因此产生的径向应力大小基本相等,而梯度层产生的应力与其相成分比例有关,同一梯度层中,陶瓷相成分比例越大,产生的径向拉应力越大;各梯度层之间,材料相成分梯度越大,对应力增长趋势的缓解作用越明显,界面应力突变越大,三层、五层梯度涂层的梯度层界面应力变化值最大为11%、14%。

3 结论

(1)梯度层的弹性模量、泊松比、热膨胀系数及导热系数与其中相成分比例近似呈线性关系,其中导热系数受各相分布形态的影响。当NiCoCrAlY金属相成分比例在0.7以下时,导热系数较低,常温状态最高为 $2.91 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 。

(2)当梯度结构涂层中的总陶瓷相成分比例相等时,涂层的隔热性能相同。对比双层结构涂层,当梯度结构涂层陶瓷相成分比例含量降低20%时,涂层隔热温度下降14%。

(3)涂层结构的梯度化能够显著降低陶瓷面层在服役过程中内部产生的应力,实现涂层热力性能的渐变。对比双层涂层,梯度涂层高温时陶瓷面层中的热失配径向拉应力降低47%,轴向拉应力降低32%,切应力降低37%,冷却至室温后的残余应力降低50%。

(4)涂层在热循环过程中,陶瓷面层底部靠近外侧边缘处易产生较大的轴向拉应力,促使水平裂纹的形成,而陶瓷面层底部中心区域则易产生较大的径向拉应力,促使垂直裂纹的形成。

参考文献:

- [1] 薛召露,郭洪波,宫声凯,等. 新型热障涂层陶瓷隔热层材料[J]. *航空材料学报*, 2018, 38(2): 10-20.
XUE Z L, GUO H B, GONG S K, et al. Novel ceramic materials for thermal barrier coatings[J]. *Journal of Aeronautical Materials*, 2018, 38(2): 10-20.
- [2] 王斯佳,徐彤,刘梅军,等. 热障涂层失效行为及长寿命设计研究现状[J]. *材料研究与应用*, 2022, 16(1): 1-18.
WANG S J, XU T, LIU M J, et al. Failure behavior and long-life design of thermal barrier coating: a review[J]. *Materials Research and Application*, 2022, 16(1): 1-18.
- [3] 张博,李广荣,徐彤,等. 长寿命热障涂层的剥落机理及抗剥落结构设计[J]. *航空材料学报*, 2022, 42(1): 1-14.
ZHANG B, LI G R, XU T, et al. Failure mechanism and cracking-resistant design of thermal barrier coatings with long life span[J]. *Journal of Aeronautical Materials*, 2022, 42(1): 1-14.
- [4] 种南京,柳琪,李天庆,等. 厚质梯度 NiCoCrAlY/YSZ 热障涂层的制备及结合性能[J]. *铸造技术*, 2021, 42(7): 555-559.
CHONG N J, LIU Q, LI T Q, et al. Bonding property of high-thickness gradient NiCoCrAlY/YSZ thermal barrier coatings[J]. *Foundry Technology*, 2021, 42(7): 555-559.
- [5] 周雳,邢志国,王海斗,等. 等离子喷涂金属/陶瓷梯度热障涂层研究进展[J]. *表面技术*, 2020, 49(1): 122-131.
ZHOU L, XING Z G, WANG H D, et al. Research progress of metal/ceramic gradient thermal barrier coatings by plasma spraying[J]. *Surface Technology*, 2020, 49(1): 122-131.
- [6] 王涛,朱磊,唐杰,等. 双送粉激光熔覆 CoCrAlSiY/YSZ 梯度涂层微观组织及热振性能[J]. *中国机械工程*, 2021, 32(15): 1854-1860.
WANG T, ZHU L, TANG J, et al. Microstructure and thermal shock properties of CoCrAlSiY/YSZ gradient coatings by double-powder-feeding laser cladding[J]. *China Mechanical Engineering*, 2021, 32(15): 1854-1860.
- [7] 刘文光,丰霞瑶,姚婉,等. 功能梯度圆柱壳的热应力与热传导分析[J]. *航空材料学报*, 2019, 39(6): 81-89.
LIU W G, FENG X Y, YAO W, et al. Analysis on thermal stress and heat conduction of functionally graded cylindrical shell[J]. *Journal of Aeronautical Materials*, 2019, 39(6): 81-89.
- [8] 程西云,张政科. 梯度结构对氧化铝/镍梯度涂层抗热应力的影响[J]. *润滑与密封*, 2016, 41(10): 13-18.
CHENG X Y, ZHANG Z K. Influences of gradient structure on thermal shear stresses of $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Ni}$ gradient coatings[J]. *Lubrication Engineering*, 2016, 41(10): 13-18.
- [9] 庞铭,张啸寒. 结构参数对等离子喷涂 Mo/8YSZ 功能梯度热障涂层残余应力的影响[J]. *航空材料学报*, 2020, 40(6): 23-32.
PANG M, ZHANG X H. Effect of structural parameters on the residual stress of Mo/8YSZ functionally graded thermal barrier coating prepared by plasma spraying[J]. *Journal of Aeronautical Materials*, 2020, 40(6): 23-32.
- [10] BAIG M N, KHALID F A, KHAN F N, et al. Properties and residual stress distribution of plasma sprayed magnesia stabilized zirconia thermal barrier coatings[J]. *Ceram-*

- ics International, 2014, 40(3): 4853-4868.
- [11] BHATTACHARYYA A, MAURICE D. Residual stresses in functionally graded thermal barrier coatings [J]. *Mechanics of Materials*, 2019, 129: 50-56.
- [12] 郭蕙敏, 李博, 张立群, 等. 真实 TGO 界面形貌对热障涂层界面应力的影响 [J]. *金属热处理*, 2021, 46(11): 232-235.
- GUO H M, LI B, ZHANG L Q, et al. Effect of real TGO interface topography on interface stress of thermal barrier coatings [J]. *Heat Treatment of Metals*, 2021, 46(11): 232-235.
- [13] 李佐君, 梁伟, 钟舜聪, 等. TGO 及初始裂纹对热障涂层裂纹形核与扩展影响的有限元分析 [J]. *失效分析与预防*, 2021, 16(5): 300-308.
- LI Z J, LIANG W, ZHONG S C, et al. Influence of TGO and initial crack on crack nucleation and propagation in thermal barrier coatings based on finite element analysis [J]. *Failure Analysis and Prevention*, 2021, 16(5): 300-308.
- [14] WEI Z Y, CAI H N, MENG G H, et al. An innovative model coupling TGO growth and crack propagation for the failure assessment of lamellar structured thermal barrier coatings [J]. *Ceramics International*, 2020, 46(2): 1532-1544.
- [15] WANG L, ZHONG X H, ZHAO Y X, et al. Design and optimization of coating structure for the thermal barrier coatings fabricated by atmospheric plasma spraying via finite element method [J]. *Journal of Asian Ceramic Societies*, 2014, 2(2): 102-116.
- [16] ZHOU Y C, HASHIDA T. Coupled effects of temperature gradient and oxidation on thermal stress in thermal barrier coating system [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2001, 38(24-25): 4235-4264.
- [17] 何周理, 徐德昇. 二维编织复合材料弹性模量分析 [J]. *装备制造技术*, 2016(3): 51-53.
- HE Z L, XU D S. The transmitter design parameters theoretical analysis of a new generation of weather radar [J]. *Equipment Manufacturing Technology*, 2016(3): 51-53.
- [18] 凌锡祥, 王玉璋, 王星, 等. 层状热障涂层孔隙微结构对其隔热性能影响的数值研究 [J]. *中国有色金属学报*, 2015, 25(2): 408-414.
- LING X X, WANG Y Z, WANG X, et al. Numerical study of effect of pore microstructure of layered thermal barrier coatings on thermal insulation performance [J]. *Journal of the Chinese Society of Rare Earths*, 2015, 25(2): 408-414.
- [19] RAJABI M, ABOUTALEBI M R, SEYEDEIN S H, et al. Simulation of residual stress in thick thermal barrier coating (TTBC) during thermal shock: a response surface-finite element modeling [J]. *Ceramics International*, 2022, 48(4): 5299-5311.
- [20] 庞铭, 刘全秀, 张啸寒. 梯度层不同对比对等离子喷涂 Mo/8YSZ 功能梯度热障涂层残余应力的影响规律研究 [J]. *中国稀土学报*, 2020, 38(5): 677-687.
- PANG M, LIU Q X, ZHANG X H. Influence rule of different ratios of gradient layer on residual stress of plasma sprayed Mo/8YSZ functionally graded thermal barrier coating [J]. *Journal of the Chinese Society of Rare Earths*, 2020, 38(5): 677-687.
- [21] 于海鹏, 桑玮玮, 李振军, 等. $\text{Sm}_2\text{Ce}_2\text{O}_7$ -YSZ 功能梯度热障涂层热冲击性能计算机模拟 [J]. *中国陶瓷*, 2018, 54(1): 28-33.
- YU H P, SANG W W, LI Z J, et al. Computer simulation of thermal shock resistance of $\text{Sm}_2\text{Ce}_2\text{O}_7$ -YSZ function gradient thermal barrier coatings [J]. *China Ceramics*, 2018, 54(1): 28-33.
- [22] 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(3/4): 249-271.
- [23] WANG L, WANG Y, SUN X G, et al. Thermal shock behavior of 8YSZ and double-ceramic-layer $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ /8YSZ thermal barrier coatings fabricated by atmospheric plasma spraying [J]. *Ceramics International*, 2012, 38(5): 3595-3606.

收稿日期: 2022-04-18; 修订日期: 2022-05-18

基金项目: 国家自然科学基金重点项目 (52130509); 国家自然科学基金面上项目 (52075542); 国家自然科学基金青年项目 (52005388)

通讯作者: 白宇 (1983—), 男, 博士, 教授, 主要从事新型陶瓷涂层、金属陶瓷复合涂层的研究, 联系地址: 陕西省西安市碑林区咸宁西路 28 号西安交通大学 (710049), E-mail: byxjtu@mail.xjtu.edu.cn

(责任编辑: 徐永祥)