

DOI:10.16410/j.issn1000-8365.2020.09.007

# La<sub>2</sub>Zr<sub>2</sub>O<sub>7</sub> 厚度对 La<sub>2</sub>Zr<sub>2</sub>O<sub>7</sub>-8YSZ 双陶瓷热障涂层隔热性能与初始残余应力影响的数值模拟

潘恒沛<sup>1</sup>,袁晓冬<sup>1</sup>,夏申琳<sup>1</sup>,王明建<sup>1</sup>,李雪峰<sup>1,2</sup>

(1. 洛阳船舶材料研究所, 河南 洛阳 471023; 2. 河南省船舶及海工装备结构材料技术与应用重点实验室, 河南 洛阳 471023)

**摘要:**利用有限元法研究了 LZO-8YSZ 双陶瓷层热障涂层的初始残余应力分布状态,研究了 LZO 厚度对隔热性能和初始残余应力场的影响。结果表明,界面边缘处容易形成应力集中。在相同的陶瓷层厚度情况下,LZO-8YSZ 双陶瓷热障涂层的初始残余应力低于单一 YSZ 陶瓷层热障涂层和单一 LZO 陶瓷层热障涂层。随着 LZO 厚度的增加,涂层的隔热效果越好,但涂层内的残余应力以及界面残余应力都相应提高。当 LZO 厚度 100 μm、YSZ 厚度 300 μm 时,热障涂层的初始残余应力最低。

**关键词:**La<sub>2</sub>Zr<sub>2</sub>O<sub>7</sub>;热障涂层;残余应力;数值模拟

中图分类号: TG174.44

文献标识码:A

文章编号:1000-8365(2020)09-0831-04

## Numerical Simulation of Influence of La<sub>2</sub>Zr<sub>2</sub>O<sub>7</sub> Thickness on Thermal Insulation Performance and Initial Residual Stress of La<sub>2</sub>Zr<sub>2</sub>O<sub>7</sub>-8YSZ Double Ceramic Thermal Barrier Coating

PAN Hengpei<sup>1</sup>, YUAN Xiaodong<sup>1</sup>, XIA Shenlin<sup>1</sup>, WANG Mingjian<sup>1</sup>, LI Xuefeng<sup>1,2</sup>

(1. Luoyang Ship Metal Research Institute, Luoyang 471023, China; 2. Henan Key Laboratory of Technology and Application of Structural Materials for Ships and Marine Equipments, Luoyang 471023, China)

**Abstract:** The initial residual stress distribution of LZO-8YSZ double ceramic thermal barrier coating was studied by finite element method. The effect of LZO thickness on thermal insulation and initial residual stress field was studied. The results show that stress concentration is easy to form at the edge of the interface. The initial residual stress of LZO-8YSZ double ceramic thermal barrier coating is lower than that of single YSZ ceramic thermal barrier coating and single LZO ceramic thermal barrier coating at the same ceramic thickness. With the increase of LZO thickness, the insulation effect of the coating is better, but the residual stress inside the coating and the interface residual stress are increased correspondingly. When LZO and YSZ thickness is 100 μm and 300 μm, respectively, the initial residual stress of thermal barrier coating is the lowest.

**Key words:** La<sub>2</sub>Zr<sub>2</sub>O<sub>7</sub>; thermal barrier coatings; residual stress; numerical simulation

为了降低航空发动机的燃料消耗,提高推动比和使用寿命,可以利用热障涂层来对基体合金材料进行保护。而近年来,随着航空燃气轮机的高速发展,燃气室温度和应力不断升高,航空发动机涡轮叶片需要承受 1 600 °C 以上的涡轮进口温度<sup>[1]</sup>。热障涂层高温高压的工作环境要求其具有如下特点:高熔点、较低的热导率、较高的热膨胀系数及热稳定性<sup>[2]</sup>。目前普遍使用的热障涂层为 6%~8% 三氧化二钇(Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)、部分稳定的二氧化锆(ZrO<sub>2</sub>)涂层,

即钇稳定的二氧化锆(YSZ)涂层。但是这种材料在 1 170 °C 以上容易发生相变带来热膨胀不匹配应力,并伴有晶粒长大,导热系数增大等现象,使得涂层产生裂纹,并且在 1 200 °C 以上出现烧结,氧传导率增加,金属粘结层容易被氧化<sup>[3]</sup>。为了满足工作温度不断提高对热障涂层提出的要求,主要通过寻找更低热导率的涂层材料,或者对 YSZ 进行降低热导率的方法<sup>[4]</sup>。

目前取代 YSZ 的陶瓷面层材料研究集中在稀土锆酸盐,主要为锆酸镧(La<sub>2</sub>Zr<sub>2</sub>O<sub>7</sub>,即 LZO),这是因为 LZO 在室温至 1 400 °C 时,结构稳定性高,为单一的烧绿石结构,并且 LZO 还具有熔点高、导热率低、抗烧蚀性好等特点<sup>[5-7]</sup>。

由于 LZO 的热膨胀系数较小,直接与粘结层结

收稿日期:2020-03-07

作者简介:潘恒沛(1991-),河南济源人,硕士,工程师,主要从事材料检测及失效分析、金属热处理方面的工作。

电话:0379-67256734, E-mail:panhengpei@126.com

合会引起较大的热不匹配应力,而其与 YSZ 的热不匹配程度较低,所以根据梯度材料的概念,通过在粘结层上添加 YSZ,在 YSZ 上添加 LZO 的方式,构成 LZO/YSZ 双陶瓷结构热障涂层,利用 LZO 的低热导率与不透氧作用,同时使用 YSZ 作为 LZO 与 BC 的过渡层,降低因为 LZO 低的热膨胀系数而造成的不匹配应力过高现象。

目前针对 LZO/YSZ 双层结构中 LZO 厚度对热障涂层隔热性能和初始残余应力的影响研究较少。本文采用有限元分析的方法研究 LZO/YSZ 双陶瓷热障涂层中 LZO 厚度对热障涂层系统隔热性能及初始残余应力的影响。

## 1 涂层结构与有限元模型的建立

### 1.1 涂层几何结构

有限元计算的几何模型如图 1 所示,由于其为轴对称模型,为了减少计算时间,可以将其简化为二维轴对称模型:维持整个热障涂层厚度不变,为 400 μm,通过改变 LZO 层厚度,研究 LZO 层厚度对双陶瓷层热障涂层隔热及初始残余应力的影响。

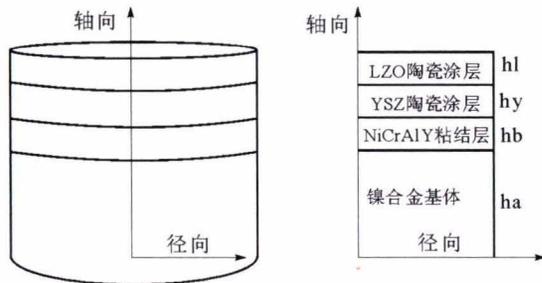


图 1 LZO/YSZ 热障涂层结构示意图

Fig.1 Structure diagram of LZO/YSZ thermal barrier coatings

### 1.2 材料属性

### 1.3 有限元模型

研究对象为 LZO/YSZ 双陶瓷层结构热障涂层。分析过程中粘结层为塑性模型,而基体与陶瓷层均视为完全弹性的,不涉及塑性变形,并且材料为各向同性的。同时假定各层界面处不发生相对滑动。分别进行双陶瓷层结构热障涂层隔热性能的模拟以及等离子喷涂初始残余应力的模拟。

双陶瓷层结构热障涂层隔热性能模拟有限元

表 1 模拟用材料属性参数

Tab.1 The attribute parameters of material for finite element modeling

材料	E/GPa	P/(kg/m <sup>3</sup> )	A/(10 <sup>-6</sup> /°C)	ν	k/(W/m·°C)	C/(J/kg·°C)	σ <sup>0</sup> /MPa
Ni-alloy	211	8 480	15.6	0.30	13.44	450	
NiCrAlY	183	7 320	13.6	0.30	4.3	501	416
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	400	3 500	8.7	0.23	7.794	1 000	
ZrO <sub>2</sub> +Y <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	48	5 650	10.2	0.26	1.53	450	
La2Zr2O7	63	6 300	9.1	0.25	0.87	460	

模型:由于热障涂层实际工作中,涂层外表面快速升温至 1 300 °C,而基体由于冷却气流作用,温度维持在 700 °C 左右,所以假定模型上表面温度为 1 300 °C,下表面温度为 700 °C,不考虑热对流及热辐射,研究 LZO/YSZ 双陶瓷层结构热障涂层的隔热效果<sup>[10]</sup>。

双陶瓷层结构热障涂层等离子喷涂下初始残余应力的有限元模型:由于等离子喷涂热障涂层工艺中,在喷涂结束后,工件温度基本维持在 427 °C,涂层的初始残余应力为涂层从制备完成温度冷却至室温所形成的残余应力。热应力耦合计算时,为避免有限元模型发生刚体移动,固定了对称轴上节点径向位移及底边节点轴向位移<sup>[11,12]</sup>。

## 2 数值模拟及分析

### 2.1 LZO 厚度对隔热性能的影响

图 2 给出了 LZO 涂层厚度对隔热性能的影响。由图 2 可以看出,LZO 厚度越厚,其隔热效果越好,纯 LZO 时,其降温速率最大,基体温度最低,约为 800 °C,而当纯 YSZ 时,其降温速率最小,基体温度最高,约为 860 °C。这是因为 LZO 的热导率低于 YSZ,当 LZO 越来越厚时,热障涂层的隔热性能越好。

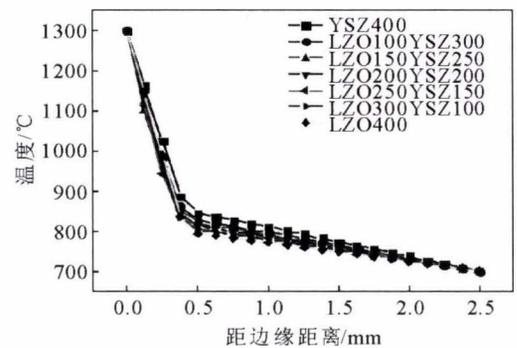


图 2 LZO 的厚度对隔热性能的影响

Fig.2 Effects of LZO thickness on thermal insulation performance

### 2.2 LZO 厚度对初始残余应力的影响

LZO 厚度为 100 μm、YSZ 厚度为 300 μm、粘结层厚度为 100 μm 热障涂层的初始残余应力分布状态如图 3 所示,涂层的主要区域内为径向压应力,当靠近边缘界面时,压应力迅速向拉应力转变,径向拉应力为 78 MPa。由于界面边缘区域较大的拉应力

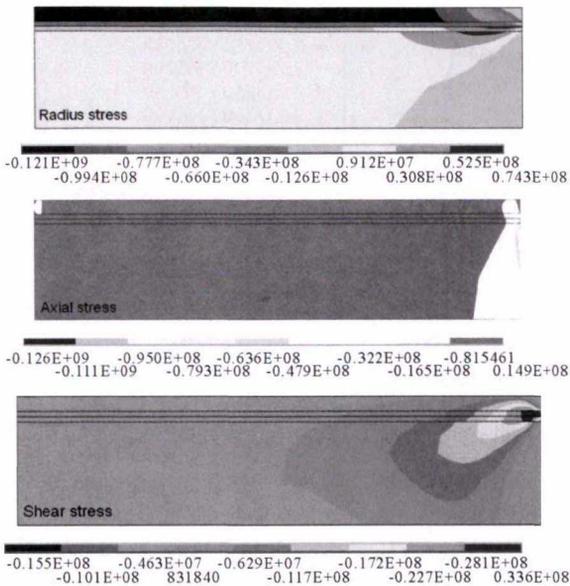


图3 LZO100/YSZ300 初始残余应力分布图  
Fig.3 Distribution of initial residual stress of LZO100/YSZ300

集中,裂纹的萌生扩展将发生。由于轴向拉应力较低,不超过 25 MPa,一般可以忽略不计。然而边缘处陶瓷层与粘结层界面轴向压应力很高,约为 126 MPa,过高的轴向压应力会导致涂层发生隆起失效。切应力主要集中在层间界面上,代表层与层之间错动的程度,约为 33 MPa,过高的切应力会导致涂层在界面处发生剪切破坏。因此需要尽力降低初始残余应力的大小,以获得性能较高的双陶瓷结构热障涂层。

TC/BC 界面应力分布状态如图 4 所示,图 4(a)

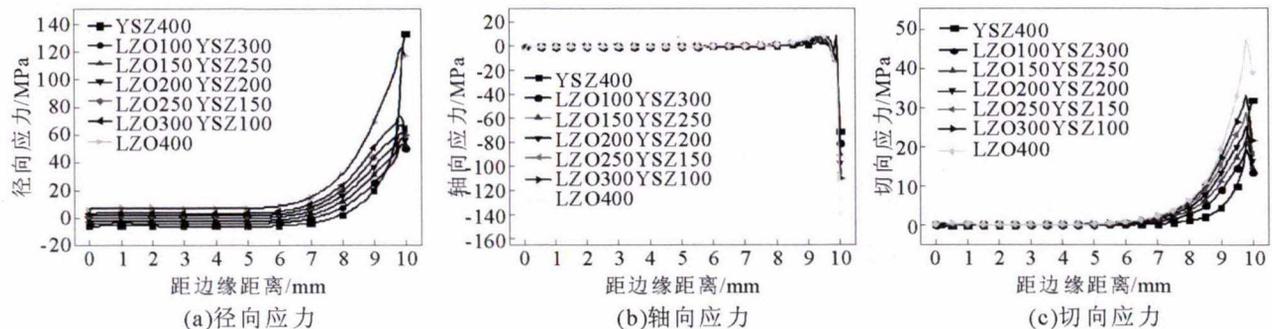


图4 TC/BC 界面残余应力的分布情况

Fig.4 Distribution of interface residual stress with different LZO thickness

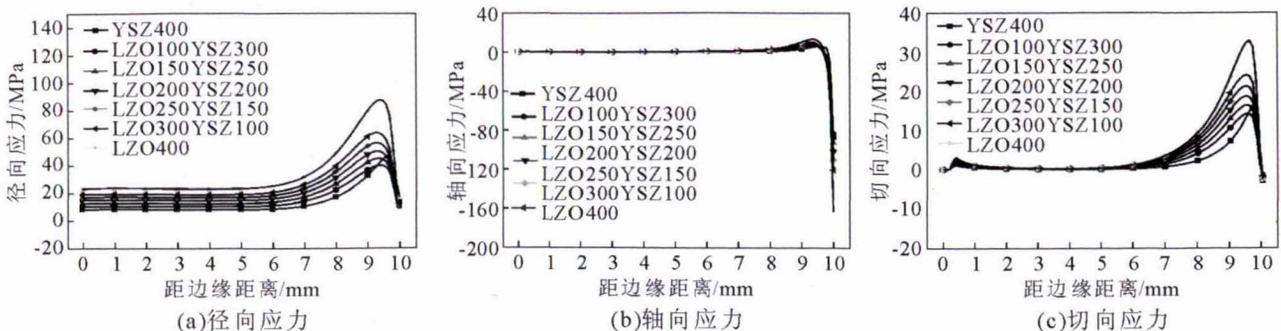


图5 BC/Sub 界面残余应力的分布情况

Fig.5 Distribution of interface residual stress with different LZO thickness

为界面径向应力,图 4(b)为界面轴向应力,图 4(c)为界面径向、轴向应力。由图明显可见,边缘位置存在很大的应力集中。降温时,热障涂层发生收缩,陶瓷层与粘结层的热膨胀系数不一致,从而导致陶瓷层与粘结层的界面形成拉扯,同时由于边界是自由边,变形不匹配程度高,从而在边缘处造成较大的应力聚集。当 LZO 的厚度不断增加时,TC/BC 界面的应力不断上升,而纯 YSZ 与纯 LZO 中的 TC/BC 界面应力明显高于双层陶瓷结构。这是因为:当陶瓷层为纯 YSZ 结构时,由于 YSZ 高温的氧扩散率高,TGO 的存在会导致粘结层表面的应力急剧上升。而当陶瓷层为纯 LZO 结构时,由于 LZO 的热膨胀系数较低,与粘结层的不匹配程度高,导致粘结层表面的拉应力较高。

BC/Sub 界面应力分布状态如图 5 所示,图 5(a)为界面径向应力,图 5(b)为界面轴向应力,图 5(c)为界面径向、轴向方向应力。由图明显可见,边缘位置存在很大的应力集中。降温时,热障涂层发生收缩,基体的热膨胀系数高于粘结层,基体的快速收缩收到粘结层的抑制,从而在其界面处造成较大的应力聚集。当 LZO 的厚度不断增加时,BC/Sub 界面的应力不断上升。这是因为:当 LZO 越厚时,LZO 对粘结层收缩的抑制作用增强,导致粘结层的收缩变形降低,由于粘结层的收缩变形降低,其对基体的快速收缩抑制作用得到加强,所以 BC/Sub 界面的应力逐渐增大。

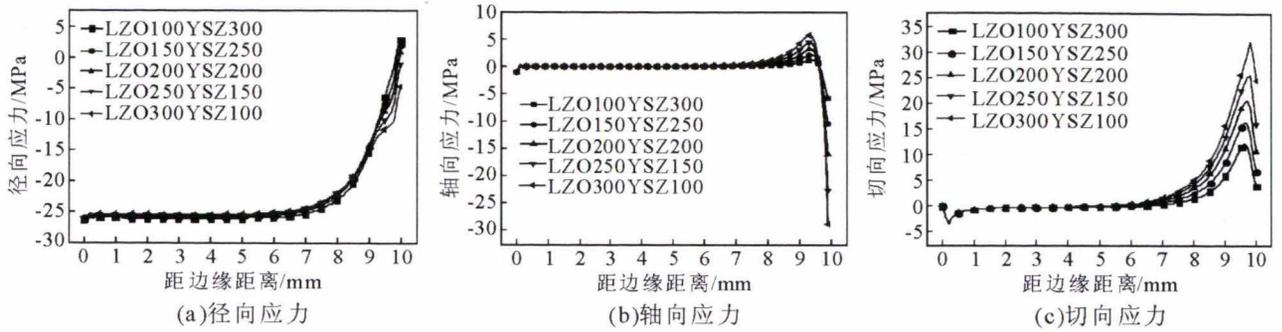


图 6 LZO/YSZ 界面残余应力的分布情况

Fig.6 Distribution of interface residual stress with different LZO thickness

由于 LZO/YSZ 双陶瓷结构会额外产生 LZO/YSZ 界面,其界面的应力分布情况如图 6 所示:图 6(a)为 LZO/YSZ 界面的径向应力,图 6(b)为 LZO/YSZ 界面的轴向应力,图 6(c)为 LZO/YSZ 界面的径向、轴向切应力,由图 6 可知,当 LZO 厚度逐渐增加时,LZO/YSZ 界面的应力逐渐增加。这是因为随着 LZO 厚度的不断增大,LZO 对 YSZ 的收缩变形抑制作用增强,从而界面应力不断升高。

由于残余应力主要集中在边缘界面位置,残余应力的大小决定了裂纹扩展的难易程度,因此对比 LZO/YSZ 双陶瓷层结构热障涂层与纯 YSZ、纯 LZO 热障涂层的最大残余应力,判定失效的难易程度,确定涂层的性能。图 7 为残余应力对比图。由图 7 可以明显看出,双陶瓷层的残余应力状态优于纯 YSZ 与纯 LZO,并且当 LZO 越厚,残余应力越高。当 LZO 为 100 μm、YSZ 为 300 μm 时构成的双陶瓷层热障涂层的残余应力最低。

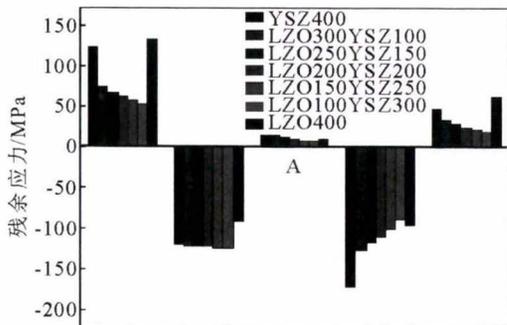


图 7 双陶瓷结构热障涂层残余应力对比图

Fig.7 Residual stress comparison of thermal barrier coating with double ceramic layer TBCs

### 3 结论

双陶瓷层热障涂层的初始残余应力均优于纯 YSZ 热障涂层结构,随着 LZO 的厚度增加,涂层的隔热效果越好,但涂层内的残余应力以及界面残余应力都相应提高,当全为 LZO 时,由于其较低的膨胀系数,热障涂层的初始残余应力最高。LZO 厚度 100 μm、YSZ 厚度 300 μm 时,热障涂层的初始残余

应力最低。

### 参考文献:

- [1] Schulz U, Leyens C, Fritscher K, et al. Some recent trends in research and technology of advanced thermal barrier coatings [J]. Aerospace Science and Technology, 2003, 7(1): 73-80.
- [2] Cao X Q, Vassen R, Stoever D. Ceramic materials for thermal barrier coatings [J]. Journal of the European Ceramic Society, 2004, 24(1): 1-10.
- [3] 刘纯波,林锋,蒋显亮.热障涂层的研究现状与发展趋势[J].中国有色金属学报,2007,17(1): 1-13.
- [4] Clarke D R. Materials selection guidelines for low thermal conductivity thermal barrier coatings [J]. Surface and Coatings Technology, 2003, 163: 67-74.
- [5] Li J Y, Dai H, Li Q, et al. Lanthanum zirconate nanofibers with high sintering-resistance [J]. Materials Science and Engineering: B, 2006, 133(1): 209-212.
- [6] Lehmann H, Pitzer D, Pracht G, et al. Thermal conductivity and thermal expansion coefficients of the lanthanum rare-earth-element zirconate system [J]. Journal of the American Ceramic Society, 2003, 86(8): 1338-1344.
- [7] Cao X Q, Vassen R, Jungen W, et al. Thermal stability of lanthanum zirconate plasma-sprayed coating [J]. Journal of the American Ceramic Society, 2001, 84(9): 2086-2090.
- [8] Sridharan S, Xie L, Jordan E H, et al. Stress variation with thermal cycling in the thermally grown oxide of an EB-PVD thermal barrier coating [J]. Surface and Coatings Technology, 2004, 179(2): 286-296.
- [9] Wang L, Wang Y, Sun X G, et al. Finite element simulation of residual stress of double-ceramic-layer La<sub>2</sub>Zr<sub>2</sub>O<sub>7</sub>/8YSZ thermal barrier coatings using birth and death element technique [J]. Computational materials science, 2012, 53: 117-127.
- [10] 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.
- [11] Zhang X C, Xu B S, Wang H D, et al. Modeling of the residual stresses in plasma-spraying functionally graded ZrO<sub>2</sub>/NiCoCrAlY coatings using finite element method [J]. Materials & design, 2006, 27(4): 308-315.
- [12] Jiang Y, Xu B S, Wang H D, et al. Finite element modeling of residual stress around holes in the thermal barrier coatings [J]. Computational Materials Science, 2010, 49(3): 603-608.