

Al₂O₃-Ti 系梯度功能材料残余热应力有限元分析

Finite Element Analysis of Thermal Residual Stresses in Al₂O₃-Ti System Functionally Gradient Material

李臻熙 张同俊 李星国
(华中理工大学材料系)

Li Zhenxi Zhang Tongjun Li Xingguo
(Central China University of Science and Technology)

[摘要] 采用有限元方法 (Finite Element Method, FEM) 对 Al₂O₃-Ti 系梯度功能材料 (FGM) 在制备过程中产生的残余热应力进行了线弹性分析。详细讨论了梯度层数目、梯度层厚度和成分梯度指数对应力大小和分布的影响, 确定了各项最佳参数。非梯度功能材料 (NFGM) 与优化后的梯度功能材料的残余热应力对比结果显示: 梯度功能材料缓和热应力的效果十分显著。

关键词 梯度功能材料 残余热应力 有限元法

[Abstract] The elastic finite element method was introduced to study thermal residual stresses developed during fabrication in Al₂O₃-Ti system functionally gradient material (FGM). The effect of graded interlayer number, graded thickness and compositional gradient exponent on thermal residual stresses value and distribution was analyzed, then several parameters were optimized. Thermal residual stresses in non-gradient material (NFGM) and optimized FGM were comprised, the result showed that the effect of thermal stresses alleviated by FGM was remarkable.

Keywords functionally gradient material thermal residual stress finite element method

1 引言

金属-陶瓷系热应力缓和型梯度功能材料 (FGM) 在制备和服役过程中所产生的热应力的分布状况是制约材料性能的最关键因素, 同时也是进行梯度功能材料优化设计的主要理论依据和评价标准。因此分析 FGM 在制备中产生的残余热应力就具有十分重要的意义, 各国研究人员对该问题均给予了高度重视, 并且取得了一些研究成果^[1-3]。

本文采用有限元方法 (Finite Element Method) 对弹性条件下 Al₂O₃-Ti 系梯度功能材料在制备过程中产生的残余热应力进行了分析。详细讨论了梯度层数目、梯度层厚度和成分梯度指数对应力大小和分布的影响, 在综合分析了残余热应力大小、陶瓷侧应力状态等因素的基础上, 确定了 Al₂O₃-Ti 系梯度功能材料的各项最佳参数。最后, 将非梯度功能材料 (NFGM) 和优化后的梯度功能材料的各残余热应力分量进行了对比, 以验证梯度功能材料的热应力缓和效能。

2 分析模型

2.1 几何模型与 FEM 分析模型

图 1 所示为分析试样的几何模型。其中 t 为 FGM 层的厚度, 厚径比 $H/D = 0.27$, 坐标系如图所示。

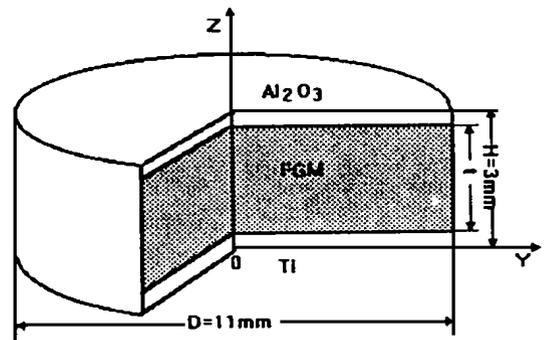
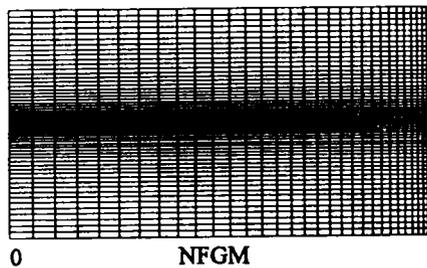


图 1 Al₂O₃-Ti 系 FGM 试样的几何模型

Fig. 1 Geometrical model of Al₂O₃-Ti system FGM specimen

FGM 层的成分分布采用幂函数表示:

$$f_1 = \begin{cases} 0 & (0 \leq z < 0.3) \\ \left(\frac{z-0.3}{t}\right)^p & (0.3 \leq z < 2.7) \\ 1 & (2.7 \leq z < 3) \end{cases} \quad (1)$$



式中 f_1 为 Al_2O_3 的体积分数, p 为成分梯度指数, t 为 FGM 层的厚度 (mm)。

本文采用矩形轴对称单元对试样的 1/4 截面进行有限元网格划分, 如图 2 所示。中心轴与底面交点为坐标原点, 径向和轴向的单元数分别为 30 和 60, 单元总

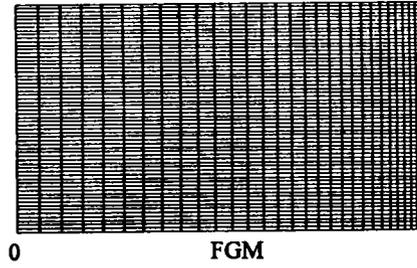


图 2 有限元分析模型

Fig. 2 Finite element analysis model of NFGM and FGM

数为 1800, 节点总数为 1891。

由于 NFGM 的 Al_2O_3 -Ti 界面处存在着较大的应力集中, 因此在进行单元划分时, 增大了界面附近的单元密度; 另外因残余热应力的轴向应力分量和切应力分量主要集中在径向边界附近^[1], 所以在 NFGM 和 FGM 的模型中也增大了该局部区域的单元密度。

2.2 材料物性参数模型

Al_2O_3 和 Ti 的基本物性参数如表 1 所示。

表 1 材料基本物性参数^[4]

Table 1 Physical properties of materials

材料	熔点 T_f ()	密度 ρ (g/cm^3)	杨氏模量 E (GPa)	热膨胀系数* α ($10^{-6}/$)	泊松比 ν
Al_2O_3	2045	3.9	380	8.71	0.27
Ti	1668	4.51	116	7.14	0.33

* 表中热膨胀系数 α 为室温至 1500 的平均值

不同成分的各梯度层的热膨胀系数 α 和泊松比 ν 采用线性混合率的推算值:

$$\alpha = \alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2 \quad (2)$$

$$\nu = \nu_1 f_1 + \nu_2 f_2 \quad (3)$$

其中下标 1、2 分别代表 Al_2O_3 -Ti 和 Ti, f_1 、 f_2 分别为 Al_2O_3 -Ti 和 Ti 的体积分数, $f_1 + f_2 = 1$ 。梯度层的杨氏模量 E 采用 Tamur^[5] 提出的复合材料杨氏模量计算式的计算值:

$$E = \left\{ f_2 \frac{q + E_1}{q + E_2} + f_1 \right\}^{-1} \times \left\{ f_2 E_2 \frac{q + E_1}{q + E_2} + f_1 E_1 \right\} \quad (4)$$

式中 q 为经验参数, 取 $q = 4500 MPa$ ^[2], 据文献 [2] 介绍,

q 取值大小对最终应力计算结果影响不大。

设试样在制备过程中, 由高温 (无温度梯度) 均匀冷却至室温的温度差 $\Delta T = 1500$; 高温时材料性能的变化 (如蠕变) 忽略不计; 各梯度层之间界面结合良好; 材料各项物性参数均与温度无关且各向同性。

本文采用 ALGOR 有限元分析软件进行 Al_2O_3 -Ti 系 FGM 残余热应力的线弹性分析。

3 结果与讨论

3.1 梯度层数目对残余热应力的影响

图 3 所示为 NFGM 和不同梯度层数的 FGM 的径向应力 σ_r 沿试样几何中心轴的轴向分布。图 4 为轴向应力 σ_z 沿径向边界的分布图。图中的横坐标均为试样的轴向

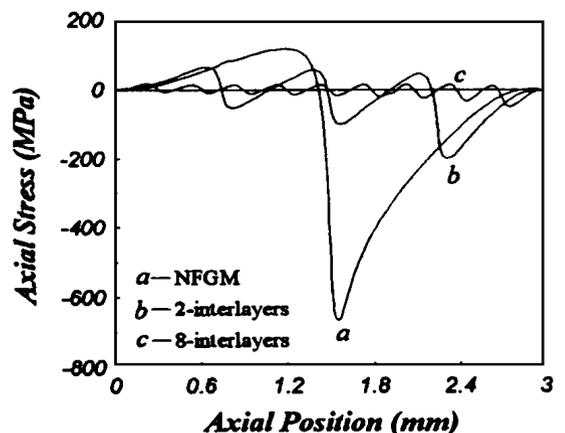


图 3 径向应力沿对称轴的分布

Fig. 3 Radial stress distribution along the axis of symmetry

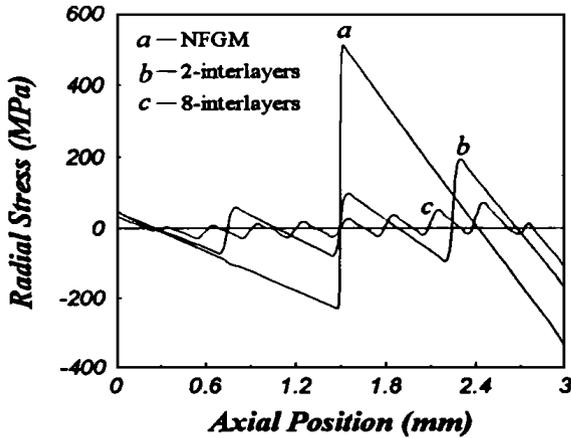


图 4 轴向应力沿径向边界的分布

Fig. 4 Axial stress distribution along the radial edge

位置。从图中可知,无论是 NFGM 还是 FGM,在各梯度层的界面附近均有应力峰出现, σ_r 、 σ_z 的轴向分布呈现锯齿状特征。但在 FGM 中,因各梯度层之间的热膨胀系数差 $\Delta\alpha$ 较小,应力峰比 NFGM 的明显降低,且随着梯度中间层数的增加,应力峰值逐渐下降。

梯度中间层数 n (不含纯 Al₂O₃-Ti 和纯 Ti 层) 对残余热应力大小的影响如图 5 所示。图中纵坐标为 FGM 中各应力分量最大值 (周向应力 σ_{θ} 的大小、分布及变化情况与径向应力 σ_r 相似) 与 NFGM 中对应各应力分量最大值之比 (切应力分量 τ_z 为最大绝对值之比)。显然,梯度中间层的引入能有效降低 NFGM 的残余热应力,且随着 n 值的增大,各残余热应力分量均呈下降趋势。但当 n 增大到一定值 ($n=8$) 后,应力下降趋势趋于平稳。因此,

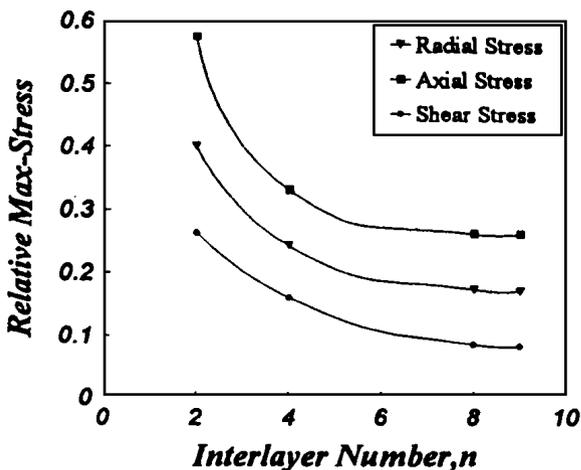


图 5 梯度中间层数对相对最大应力的影响

Fig. 5 Influence of the interlayer number on the relative maximum stresses

从材料制备的难度和残余热应力缓和效果两方面考虑,取梯度中间层数 $n=8$ (总层数=10) 是比较合适的。

3.2 梯度层厚度对残余热应力的影响

以线性成分梯度 ($p=1$, $n=8$) 的 FGM 为例,研究了梯度层厚度 t 对残余热应力的影响。如图 6 所示。

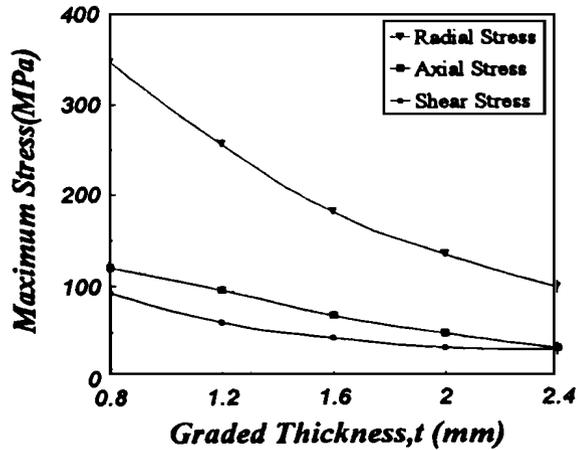
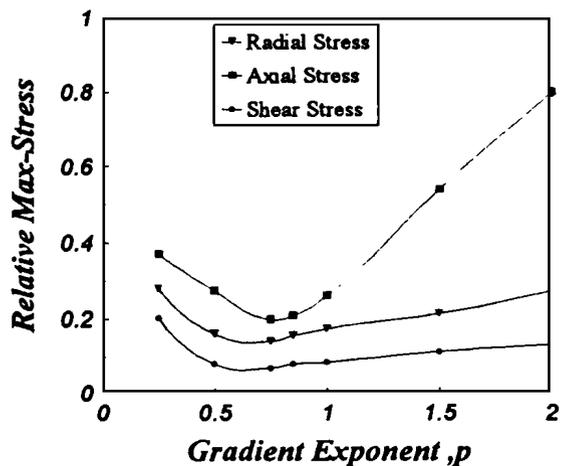
图 6 梯度层厚度 t 对残余热应力的影响

Fig. 6 Influence of the graded thickness on the maximum stresses

随着梯度层厚度 t 的增加, σ_r^{\max} 、 σ_z^{\max} 以近似于线性变化的趋势下降, τ_z^{\max} 也有所降低。显然 FGM 层厚度的增加有利于缓和梯度材料中的残余热应力。尤其是对 σ_{rr}^{\max} (以及 $\sigma_{\theta\theta}^{\max}$) 应力分量,应力缓和效果最明显。当 t 由 0.8mm 增加一倍时, σ_{rr}^{\max} 由 347MPa 降低至 180MPa,下降了 48%。

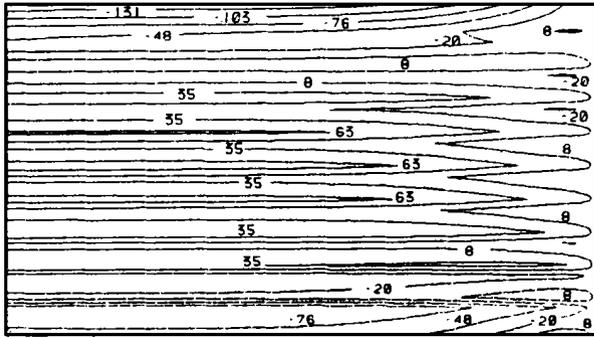
图 7 梯度指数 p 对相对最大应力的影响Fig. 7 Influence of the gradient exponent p on the relative maximum stresses

3.3 梯度指数 p 对残余热应力的影响

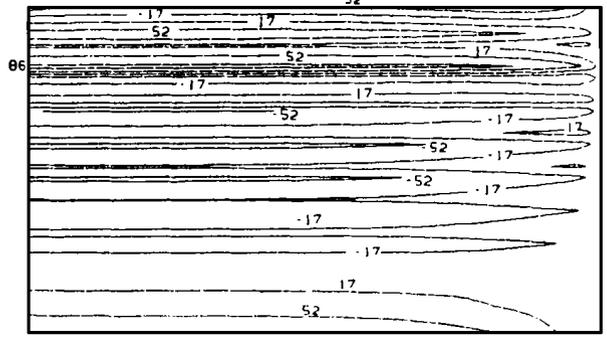
当梯度指数 $p > 1$, 成分曲线下凹; $p < 1$, 成分曲线上凸。经过对不同梯度指数 p 的 FGM 模型分析, 获得了各残余热应力分量随 p 值变化的曲线(图 7)。当 $p = 0.75$ 时, 各应力分量的最大值均降至最低点。 p 值的变化对轴

向应力 σ_z 的影响最大。

p 值的变化不仅对残余热应力大小有影响, 而且对应力分布状况也有较大影响。以 $p = 0.5$ 和 $p = 1.5$ 的 FGM 为例, 比较二者径向应力 σ_r 的分布, 如图 8、9 所示。



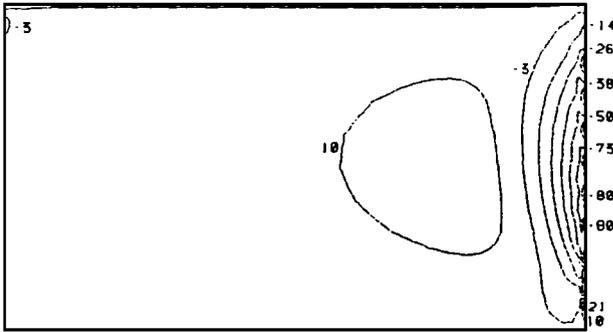
(a)



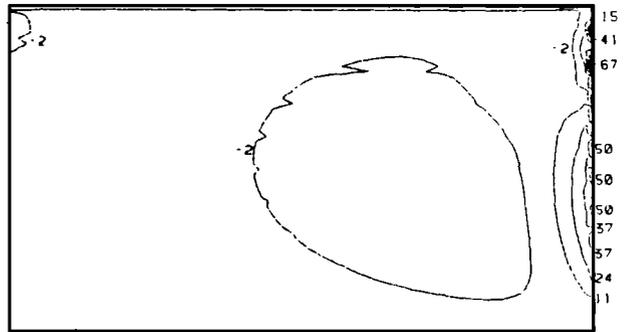
(b)

图 8 径向应力 σ_r 的等值线图 (a) $p = 0.5$, (b) $p = 1.5$ (单位: MPa)

Fig. 8 Contour plots of radial stress σ_r for (a) $p = 0.5$, (b) $p = 1.5$ (Unit: MPa)



(a)



(b)

图 9 轴向应力 σ_z 的等值线图 (a) $p = 0.5$, (b) $p = 1.5$ (单位: MPa)

Fig. 9 Contour plots of axial stress σ_z for (a) $p = 0.5$, (b) $p = 1.5$ (Unit: MPa)

当 $p = 0.5$ 时, 径向拉应力 σ_r 主要分布于梯度中间层中, 在纯 Al_2O_3 和纯 Ti 层中分布的均为径向压应力 σ_r (图 8a); 轴向拉应力 σ_z 则位于径向边界附近的材料内部, 径向边界处集中的主要是轴向压应力 σ_z (图 9a), 这种应力分布状况对材料是有利的。而当 $p = 1.5$ 时, σ_r 主要分布于 Al_2O_3 一侧, 最大径向拉应力则位于纯 Al_2O_3 层与梯度中间层的过渡区附近(图 8b), 陶瓷层中径向拉应力的存在容易引起陶瓷层的开裂; σ_z 集中在径向边界处, 而 σ_z 却分布在材料内部(图 9b), 这样就容易引起材料的层间开裂。分析表明, 当 $p < 1$ 时纯 Al_2O_3 层分布着径向压应力 σ_r , 而当 $p > 1$ 时却分布着径向拉应力 σ_r 。因此, 无论是从应力大小还是从应力分布来考虑, Al_2O_3 -Ti 系梯度功能材料的最佳成分梯度指数 $p = 0.75$ 。

3.4 FGM 残余热应力缓和效果评价

优化后的 Al_2O_3 -Ti 系梯度功能材料的各项参数分别为: 梯度中间层数 $n = 8$ (总层数 = 10); 梯度层厚度 $t = 2.4\text{mm}$; 成分梯度指数 $p = 0.75$ 。图 10 为优化后的 FGM 与 NFGM 各应力分量的等值线图。

从应力分布情况看, 各残余热应力分量在 NFGM 的 Al_2O_3 -Ti 界面附近存在着较大的应力集中。最大径向拉应力位于 Al_2O_3 -Ti 界面的陶瓷侧, 最大轴向拉应力和最大切应力均位于该界面与径向边界的交界处。而对于 FGM, 由于 Al_2O_3 -Ti 界面的消失, 残余热应力在整个试样截面上均匀分布, 可以有效避免 NFGM 的 Al_2O_3 -Ti 界面处的应力集中对材料造成的破坏。对于圆片状试样的轴向应力和切应力主要分布在径向边界附近。

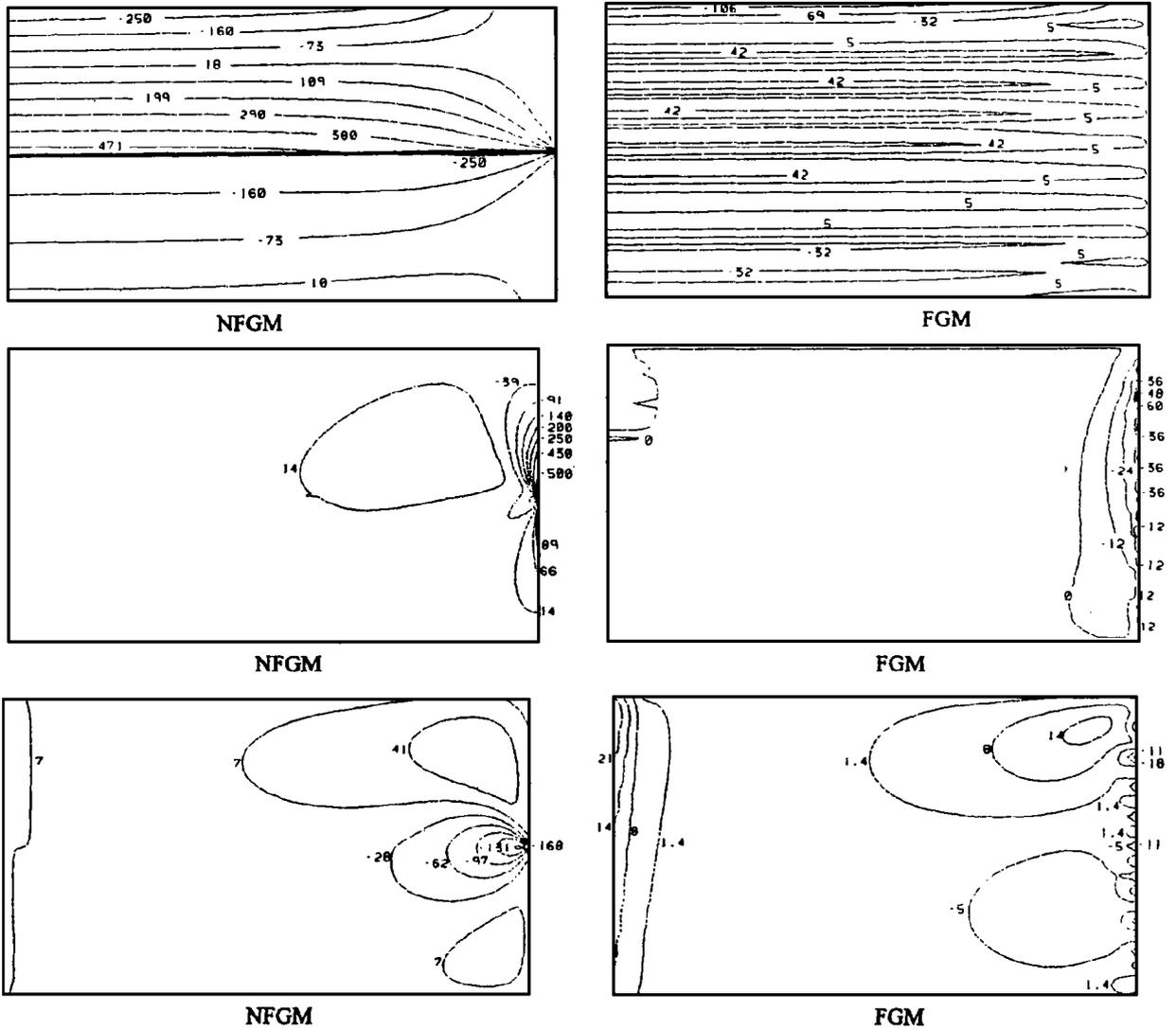


图 10 NFGM 与 FGM 的各应力分量等值线图 (单位: MPa)

(a) 径向应力; (b) 轴向应力; (c) 切应力

Fig. 10 Contour plots of stress in NFGM and FGM (Unit: MPa)

(a) radial stress; (b) axial stress; (c) shear stress

从应力大小来看, FGM 缓和热应力的效果十分明显, 如最大径向拉应力和最大轴向拉应力与 NFGM 的相比, 分别下降了 86% 和 80% (表 2)。FGM 各残余热应力分量的最大值均只有几十兆帕, 因此不会对材料造成破坏。

4 结论

(1) 梯度层数目的增加, 可有效降低残余热应力。但当梯度中间层数达一定值 ($n > 8$) 后, 残余热应力下降趋势趋于平稳, 应力缓和效果不明显。因此, 最佳梯度中间层数 $n = 8$ (总层数 = 10)。

表 2 NFGM 和 FGM 的各应力分量最大值比较 (单位: MPa)

Table 2 Comparison of maximum stresses between NFGM and FGM (Unit: MPa)

	径向应力 σ_r / σ_r	轴向应力 σ_z / σ_z	周向应力 $\sigma_{\theta\theta} / \sigma_{\theta\theta}$	切应力 τ_{rz} / τ_{rz}
NFGM	- 435/561.6	- 678/118	- 454.7/535.8	- 350.7/75.6
FGM	- 142.6/78.6	- 72/23.4	- 160.4/80	- 24.2/27

(2) 随着梯度层厚度的增加, 残余热应力逐渐降低。

(3) 当成分梯度指数 $p=0.75$ 时, 各残余热应力分量均降至最低点。成分曲线由上凸 ($p < 1$) 转变为下凹 ($p > 1$) 过程中, 纯 Al_2O_3 层中的径向应力由压应力转变为拉应力; 径向边界处的轴向应力也由压应力转变为拉应力。因此, 最佳成分梯度指数 $p=0.75$ 。

(4) FGM 在很大程度上缓和了 NFGM 的 Al_2O_3-Ti 界面附近的应力集中, 应力分布均匀; 各应力分量最大值均明显降低, 应力缓和效果显著。

参考文献

1 川崎亮, 渡边龙三. 倾斜组成制御した多层中间层をもつ金属/É Ö 接合体における热应力の有限要素解析. 日本金属学会志. 1987, 51 (6): 525~529
 2 R L Williamson, B H Rabin, J T Drake. Finite Element Anal-

ysis of Thermal Residual Stresses at Graded Ceramic-Metal Interfaces. Part I: Model Description and Geometrical Effects. J. Appl. Phys. 1993, 74: 1310~1320
 3 J T Drake, R L Williamson, B H Rabin. Finite Element Analysis of Thermal Residual Stresses at Graded Ceramic-Metal Interfaces. Part : Interface Optimization for Residual Stress Reduction. J. Appl. Phys. 1993, 74: 1321~1326
 4 Y S Touloukian et al. Thermophysical Properties of Mater, IFI/Plenum Press, New York-Washington, 1977
 5 I TAMURA et al. Proc. Third Int. Conf. Strength of Metals and Alloy. Institute of Metals, Cambridge, 1973

收稿日期: 1996年10月25日

李臻熙, 男, 1968年4月生, 讲师。联系地址: 武汉华中理工大学西七舍26#信箱, 430074

(上接第10页)

膜的最初就是以具有可能超过金刚石的硬度而引起人们的注意的。提高 C_3N_4 薄膜的硬度使其接近或超过金刚石的硬度是科研工作者奋斗的目标。目前的实验结果距这一目标还有一段距离。我们测量了所得薄膜的硬度, 得到较好的结果(表1)。测定设备为美国 DMH-2LS 超微载荷显微硬度计, 测试条件为加载 30s

表1 C_3N_4 薄膜的硬度

Table 1 The hardness of C_3N_4 film

样品批号	HV, GPa	荷载, g
12-9-3	47.3/50.0	5
12-25-1	29.2/32.0	5
2-7-2	39.4/30.4	10
3-7-1	45.6/41.6	10

4 结论

(1) 真空热处理有利于 $\beta-C_3N_4$ 薄膜的晶化, 在 900 条件下退火比 850 条件下更有利于 $\beta-C_3N_4$ 的晶化。

(2) $\langle 111 \rangle$ 晶向单晶硅片上生长的 $\beta-C_3N_4$ 薄膜的 XRD 谱, 只出现三个 $\beta-C_3N_4$ 的衍射峰。而在 $\langle 100 \rangle$ 晶向单晶硅片上生长的 $\beta-C_3N_4$ 薄膜的 XRD 谱, 只出现一个 $\beta-C_3N_4$ 的 $\langle 221 \rangle$ 晶向衍射峰。

(3) TED 图象出现了明显的劳厄斑点, 表明生成了大晶粒的 $\beta-C_3N_4$ 。

(4) 所制得的 C_3N_4 薄膜具有较高的硬度。

参考文献

1 A. Y. Liu, M. L. Cohen. Science, 1989, 245
 2 L. Maya, D. R. Cole, E. W. Hagman. J. Am. Ceram. Soc. 1991, 74: 1681
 3 M. R. Wixom. Ibid., 1990, 73: 1973
 4 C. Niu, et al. Science, 1993, 261: 334
 5 K. J. Boyd et al., J. Vac. Sci. Technol., 1995, A13: 2110
 6 K. M. Yu et al. Phys. Rev. B. 1994, 1349: 5034
 7 吴大维等. 氮化碳薄膜的耐腐蚀性和热稳定性研究. 材料科学与工程, 待出版
 8 吴大维等. C_3N_4 薄膜的结构与性能研究. 物理学报, 1997, 46 (3)

收稿日期: 1997. 7. 10

* 国家自然科学基金资助项目

何孟兵, 男, 生于 1971 年 9 月, 现主要从事超硬材料氮化碳薄膜的研制工作。联系地址: 武汉大学物理系 95 级研究生 (430072)。