

# 结构层热扩散系数对超薄涂层热力性能的影响<sup>1)</sup>

王小贞<sup>\*,2)</sup> 张士元<sup>†</sup> 郑百林<sup>\*\*</sup> 贺鹏飞<sup>\*\*</sup>

<sup>\*</sup>(福州大学物理与信息学院, 福州 350002) <sup>†</sup>(福建工程学院土木工程系, 福州 350007)

<sup>\*\*</sup>(同济大学航空航天与力学学院, 上海 200092)

**摘要** 将非傅立叶热传导模型(用于超薄热涂层)与傅立叶热传导模型(用于结构层)相结合求解温度场, 运用有限元法求解热涂层热应力和裂纹驱动力, 并分析结构层材料热扩散系数的变化对热涂层的热力学性能(温度场、应力场和断裂性能)的影响。研究表明, 结构层材料性能变化对温度场的影响主要表现在热冲击后期, 对热应力和裂纹尖端驱动力后期的变化也有一定的影响。

**关键词** 超薄热涂层, 非傅立叶热传导, 温度场, 热应力,  $J$  积分

## INFLUENCE OF THERMAL DIFFUSIVITY OF SUBSTRATE ON THERMODYNAMIC PROPERTIES OF THE VERY THIN THERMAL BARRIER COATINGS<sup>1)</sup>

WANG Xiaozhen<sup>\*,2)</sup> ZHANG Shiyuan<sup>†</sup> ZHENG Bailin<sup>\*\*</sup> HE Pengfei<sup>\*\*</sup>

<sup>\*</sup>(College of Physics and Telecommunication Engineering, Fuzhou University, Fuzhou 350002, China)

<sup>†</sup>(Department of Civil Engineering, Fujian University of Technology, Fuzhou 350007, China)

<sup>\*\*</sup>(School of Aerospace Engineering and Applied Mechanics, Tongji University, Shanghai 200092, China)

**Abstract** When thermal barrier coatings (TBCs) are made into laminate in micro/nano scale, the heat transfer theory in macro scale, Fourier heat equation, can not be used. But it can still be used in the substrate under TBCs. In this paper, the temperature field obtained from combining non-Fourier heat conduction model for TBCs and Fourier heat conduction model for substrate is used as the thermal load in the finite element analyses of thermal stress and  $J$ -integral of an edge crack in the TBCs. Influence of thermal diffusivity of substrate on the TBCs thermodynamic properties (temperature field, thermal stress and  $J$ -integral) is analyzed. The conclusion is that influence takes effect in the final thermal shock.

**Key words** very thin TBCs, non-Fourier heat conduction, temperature field, thermal stress,  $J$ -integral

抵抗热冲击的热涂层(TBCs)已广泛运用于航空航天等工程中, 人们对此已做了大量研究<sup>[1,2]</sup>. 在宏观尺度下, 由于物体的性质是连续变化的, 在忽略了某些微尺度(包括时间和空间)因素的影响下, 基于傅立叶热传导定律建立的宏观热传导, 成功地解决了许多自然界和工程领域所遇到的各类热传导问题. 但随着人们对微尺度领域的深入探索和研究,

特别是纳米技术(空间微尺度)和 高频短脉冲加热技术(时间微尺度)的出现, 经典傅立叶热传导定律所隐含的热量传播速度为无穷大的假设已不再成立, 傅立叶热传导定律已不再适用, 应该采用统计力学的观念和量子力学来解决微、纳尺度问题<sup>[3]</sup>.

早在 1845 年, Maxwell<sup>[4]</sup> 就认为热量的传播速度是有限的, 并通过引入松弛时间对傅立叶热传导

2007-03-15 收到第 1 稿, 2007-03-26 收到修改稿.

1) 福建省科技厅(JB06035), 国家自然科学基金(10472084)资助项目.

2) E-mail: zsywz2006@163.com

定理进行了修正；1944年，Peshkov<sup>[5]</sup>在实验中观察到在低温液氦 II (1.4K) 中热传播的波动现象，并定量测定了热波传播速度比声速小一个数量级。此后，许多学者对时间和空间微尺度条件下的传热问题进行了研究，建立起各种时间和空间微尺度条件下的导热模型：Qiu 等<sup>[6,7]</sup>对超短脉冲激光（不产生电流）加热金属薄膜的研究中提出了微观两步模型；Tzou<sup>[8~10]</sup>提出了单相延迟双曲线热传导模型和双相延迟模型；Guyer 等<sup>[11]</sup>在研究绝缘晶体内的热作用时提出了纯声子散射模型，Tzou<sup>[3]</sup>在强调绝缘体和半导体空间微尺度的迟滞行为时也得出同样的热传导方程；Majumdar<sup>[12~14]</sup>在研究半导体声学薄膜时提出了纯声子辐射模型。

本文针对超薄陶瓷热涂层结构（热涂层为纳米尺度的陶瓷绝缘层），将微观热传导模型（用于热涂层）和宏观经典傅立叶热传导定理（用于结构层）相结合，求解温度场；再利用有限元方法分析热涂层结构的应力场和单边裂纹问题，同时取 3 种不同热学性能的结构层进行研究，比较其对超薄热涂层结构的热力学性能（温度场、应力场以及断裂性能）的影响。

## 1 数学模型

对于超薄陶瓷热涂层（见图 1），由于热涂层是绝缘的并且其尺寸接近绝缘声子的平均自由程（10~500 nm），应采用纯声子散射模型或纯声子辐射模型；但纯声子辐射模型较为复杂（牵涉到太多纯物理的系数）在实际工程中不适用。而纯声子散射模型是波动方程，比经典傅立叶热传导方程复杂，但所用的物理量较少，在工程实际中较为容易运用，因此本文采用纯声子散射模型分析陶瓷热涂层的热分析，但热涂层下的结构层厚度达到宏观尺寸，所以采用经典傅立叶热传导定理计算结构层温度场。

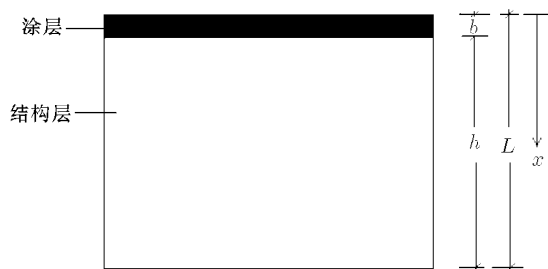


图 1 超薄陶瓷热涂层

对于陶瓷热涂层，双曲型纯声子散射方程如下

$$\nabla^2 T + \frac{9\tau_N}{5} \frac{\partial}{\partial t} (\nabla^2 T) = \frac{3}{\tau_R c^2} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{3}{c^2} \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} \quad (0 \leq x \leq b) \quad (1)$$

其中  $c$  是声子的平均速度， $\tau_N$  是声子系统中动量守恒的一般过程中的松弛时间， $\tau_R$  是声子系统中发生动量损失的碰撞过程中的松弛时间。

对于结构层，采用经典傅立叶热传导方程如下

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \alpha \frac{\partial T}{\partial t} \quad (b \leq x \leq b+h) \quad (2)$$

其中  $\alpha$  为热扩散系数。

热涂层厚度为  $b$ ，结构层厚度为  $h$ ；热冲击的初始条件为：当时间为零时，在热涂层和结构层内的温度为  $T_a$  并均匀分布，并且与外界无热对流和交换，即保持绝热；理想的热冲击边界条件 ( $T(t > 0, 0) = T_w$ )，认为表面热交换系数为无穷大，这虽然与实际情况有差异，但能完全反映方程 (1) 的迟滞作用<sup>[15]</sup>， $x = L$  处始终保持绝热；热涂层和结构层之间良好热接触，即保持温度和热流的相等。初始条件和边界条件的数学表达式为

$$\left. \begin{aligned} T(0, x) &= T_a \\ \frac{\partial T}{\partial t} &= 0, (t = 0) \\ T(t > 0, 0) &= T_w \\ \frac{\partial T}{\partial x} &= 0, (x = b+h) \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

## 2 求解

因要得到上述的方程组 (1)~(3) 的理论解较为困难，所以本文采用数值计算方法。对于双曲型纯声子散射模型方程可采用显式差分法或隐式差分法，但显式差分法必须要求空间和时间步长满足稳定条件  $0 < \alpha \Delta t / (\Delta x)^2$ ，才能得到稳定可靠的解，而隐式差分法的解是完全稳定的。由于方程中含有时间的二阶导数，容易得出数学上稳定而物理上错误的解，在此需要说明的是，数学上稳定的解只是说明振荡随时间的增加而衰减，不能保证在某一时刻不出现振荡，因此时间步长仍不能取得太大。对于本方程组采用完全隐式差分法，并将时间步长取小，这样就可以得到稳定的同时较接近真实物理意义的解。

按完全隐式中心差分法离散方程组 (1)~(3) 得出以下线性方程组 (4).

$$\left. \begin{aligned} & -\lambda_1(\Delta t + A)T_{j-1}^{n+1} + [2\lambda_1(\Delta t + A) + \\ & B\Delta t + C]T_j^{n+1} - \lambda_1(\Delta t + A)T_{j+1}^{n+1} = \\ & -\lambda_1AT_{j-1}^n + (2A\lambda_1 + B\Delta t + C)T_j^n - \\ & A\lambda_1T_{j+1}^n - CT_{j+1}^{n-1}, \quad (0 < x \leq b) \\ & -\alpha\lambda_2T_{j-1}^{n+1} + [1 + 2\alpha\lambda_2]T_j^{n+1} - \\ & \alpha\lambda_2T_j^{n+1} = T_j^n, \quad (b \leq x \leq b + h) \\ & T_j^0 = T_a, \quad T_j^{-1} = T_j^0 \\ & T_0^{n+1} = T_w, \quad T_{L+1}^n = T_{L-1}^n \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

方程组 (4) 中  $T$  的上角标表示时间, 下角标表

示空间,  $A = 9\tau_N/5, B = 3/(\tau_Rc^2), C = 3/c^2,$   
 $\lambda_i = \Delta t/\Delta x_i^2 (i = 1, 2), L$  为最后一个节点.

### 3 结果和讨论

#### 3.1 结构层材料热扩散系数对温度场的影响

分析中所采用的几何参数和物理参数见表 1, 参数中包括弹性模量  $E_1, E_2,$  密度  $\rho_1, \rho_2,$  热膨胀系数  $\lambda_1, \lambda_2$ (下角标 1 为热涂层, 下角标 2 为结构层). 热涂层 5 等分取  $n_1 = 5,$  结构层 10 等分取  $n_2 = 10,$   $T_a = 300^\circ\text{C}, T_w = 20^\circ\text{C};$  时间取为  $4 \times 10^{-7}\text{s},$  加载时间取 500 等分, 不同结构层材料  $M_1, M_2, M_3$  对应的不同热扩散系数  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$  分别取  $9.0 \times 10^{-5}, 6.99 \times 10^{-5}, 4.52 \times 10^{-5}(\text{m}^2/\text{s}^2).$

表 1 几何参数和物理参数

参数	取值	参数	取值	参数	取值
$\frac{9}{5}\tau_N$	$4 \times 10^{-12}$	$\rho_1 / (\text{kg}\cdot\text{m}^{-3})$	3 180	$\rho_2 / (\text{kg}\cdot\text{m}^{-3})$	2 710
$\tau_R/\text{s}$	$1 \times 10^{-12}$	$\lambda_1 / (10^{-6}/^\circ\text{C})$	4	$\lambda_2 / (10^{-6}/^\circ\text{C})$	24.9
$c/(\text{m}\cdot\text{s}^{-1})$	$6.3 \times 10^3$	$b/\text{m}$	$2.0 \times 10^{-7}$	$h/\text{m}$	$2.0 \times 10^{-6}$
$E_1/\text{GPa}$	410	$E_2/\text{GPa}$	70		

图 2 为结构层取不同材料  $M_1, M_2, M_3,$  在热冲击时间  $500 \times 10^{-10}\text{s}$  内, 结构层内 (距顶面  $140 \times 10^{-8} \sim 220 \times 10^{-8}\text{m}$ ) 温度分布的比较图.

从图中可知, 结构层的热扩散系数发生变化对热涂层中的温度分布影响主要表现在热冲击的后期; 当结构层的热扩散系数增加时, 在结构层中, 热冲击开始时, 温度相差不大, 随着时间的延续, 温度差增大较为明显, 但随着时间的继续推移, 温度相差渐渐缩小.

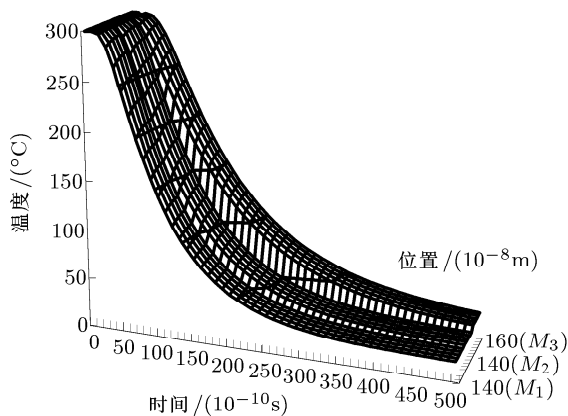


图 2 3 种材料结构层底部温度比较图

#### 3.2 结构层材料热扩散系数对应力场的影响

将以上温度场的结果作为载荷, 有限元模型在  $x$  方向的划分层数与前面的一样, 并截取对称面的右半部, 具体见图 3. 由于热冲击时, 热流沿着  $x$  方向, 因此将约束条件定为下边界两端节点  $x$  方向的位移为零, 对称面上  $y$  方向位移为零. 分别在模型上截取以下 4 个点的热应力  $\sigma_y,$  热涂层中  $A(0,0), B(4 \times 10^{-8}, 0),$  结构层中  $E(2.2 \times 10^{-6}, 0), F(2.0 \times 10^{-6}, 0).$  由于不考虑热交换系数的影响, 表面温度载荷比实际偏大, 取这种极限情况进行研究, 对于实际工程是有利的. 图 4~图 7 分别为热冲击时间在  $8 \times 10^{-8}\text{s}$  内, 当结构层的热扩散系数不同

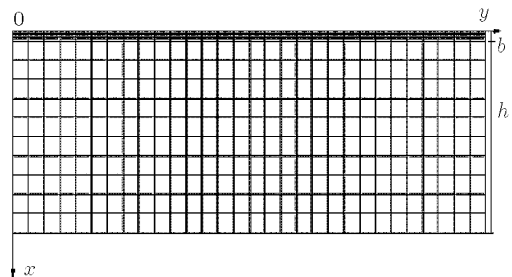


图 3 有限元网格图

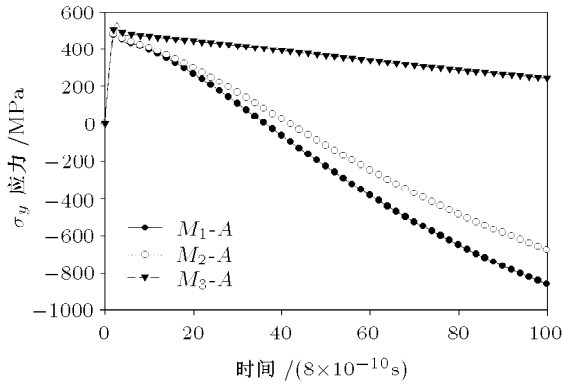


图 4 A 点不同热扩散系数时的  $\sigma_y$

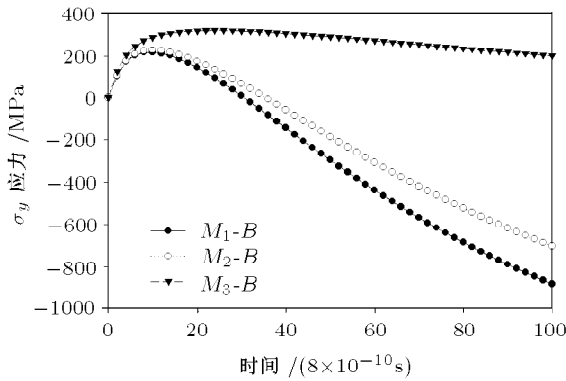


图 5 B 点不同热扩散系数时的  $\sigma_y$

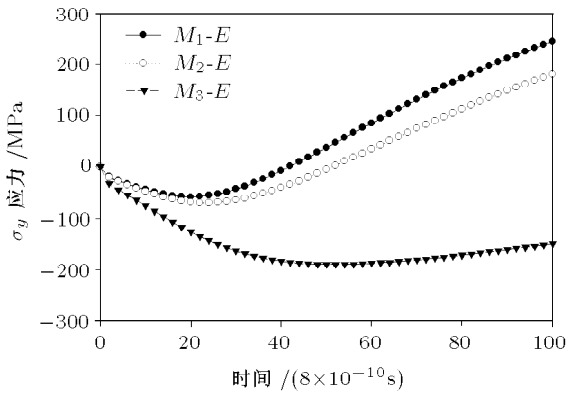


图 6 E 点不同热扩散系数时的  $\sigma_y$

时，热涂层和结构层中  $\sigma_y$  变化规律。

从图 4, 图 5 中可知，当结构层热扩散系数较小时，热涂层所受的应力随着扩散系数的降低而提高。由于假设热涂层表面的热交换系数为无限大，在热冲击开始时，就达到外界热冲击温度，因此应力变化为直接由受拉转向受压，而接近热涂层所受的应力递增和递减过程减缓。随着热扩散系数的不断提高，应力增长和衰减的速度显著加快，这是由于热扩散的速度加快，内部温差与表面温差的差距缩小，而内部材料的热膨胀系数比热涂层材料的高，内部结

构的收缩快。因此，热扩散系数越大，热扩散越快，热涂层  $\sigma_y$  由拉应力转向压应力也越快。从图 6, 图 7 中可知，当结构层热扩散系数变化时，结构层中所受的应力变化规律与热涂层相同，但应力方向相反。

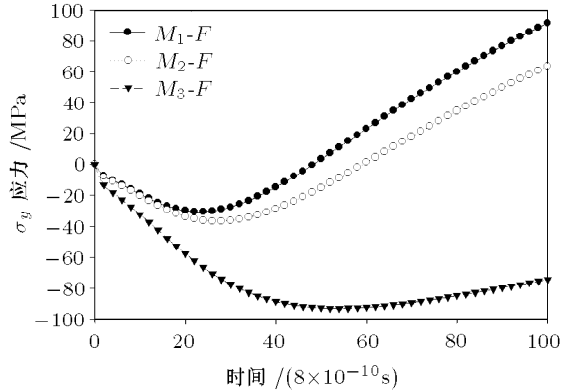


图 7 F 点不同热扩散系数时的  $\sigma_y$

### 3.3 结构层材料热扩散系数对裂纹驱动力的影响

超薄热涂层单边裂纹问题的有限元分析，取裂纹长度为  $4 \times 10^{-8}m$ ，裂纹尖端区域的单元采用 8 节点的二维等参单元，通过调整，使裂纹尖端单元成为退化的 1/4 节点奇异单元进行断裂力学分析 (见图 8)。图 9 为不同结构层热扩散系数时裂纹尖端的  $J$  积分变化规律。

从图 9 可知，在初始时，随着结构层热扩散系数的增加，裂纹尖端驱动力  $J$  积分降低，但是随着时间增加，热扩散系数较小， $J$  积分增长相对较缓；热扩散系数较大， $J$  积分增长较快。这是由于结构层热扩散系数较小时，温度变化减缓，整体温度差减小，裂纹尖端驱动力  $J$  积分也降低。因此，结构层热扩散系数降低，减缓了热冲击时整体温度变化，有利于降低裂纹尖端驱动力。

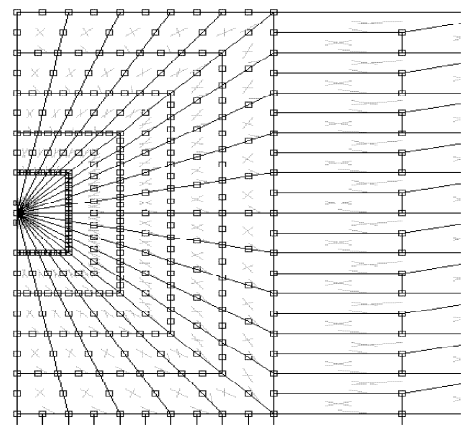


图 8 裂纹尖端区域有限元网格

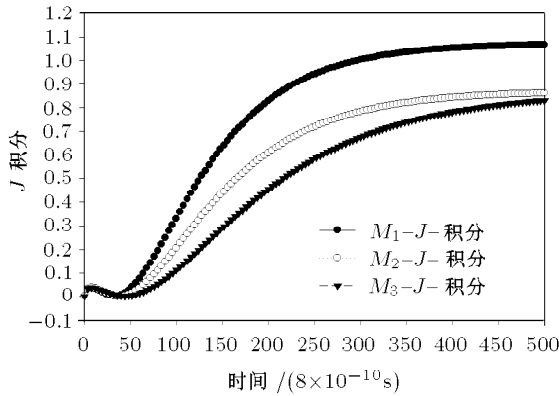


图 9 不同结构层热扩散系数下 J 积分

### 4 结 论

结构层材料的热扩散系数的变化, 对整体温度场的影响为: 对热涂层温度分布的影响主要表现在热冲击的后期, 对结构层温度分布的影响主要是在其下部; 热扩散系数的降低会减缓整体温度分布变化激烈程度; 使得整体温度分布趋于缓和. 对应力场的影响为: 当结构层热扩散系数较小时, 在热涂层内,  $\sigma_y$  增长、衰减速度较慢; 在结构层内,  $\sigma_y$  的方向相反, 变化规律相同. 对裂纹尖端驱动力的影响为: 随着时间增加, 较小结构层热扩散系数对应的 J 积分增长相对较缓, 而较大结构层热扩散系数对应的 J 积分增长较快, 结构层热扩散系数的降低, 有利于降低裂纹尖端驱动力.

### 参 考 文 献

- 1 Balke H, Hofinger I. Fracture mechanical damage modeling of thermal barrier coatings. *Archive of Applied Mechanics*, 2000, 70: 193~200
- 2 Jin ZH, Paulino GH. Transient thermal stress analysis of an

- edge crack in a functionally graded material. *International Journal of Fracture*, 2001, 107: 73~98
- 3 Tzou DY. Macro-to Microscale Heat Transfer. Taylor & Francis Publisher, America, 2000
- 4 Maxwell JC. On the Dynamic Theory of Gases. *Phil TransR Soc*, 1845, 157: 49~88
- 5 Peshkov V. Second Sound in Helium II. *Journal of Physics*, USSR, 1944, 8: 38
- 6 Qiu TQ, Tien CL. Femtosecond laser heating of multi-layer metall -Analysis. *Int J Heat and Mass Transfer*, 1994, 37(17): 2789~2797
- 7 Qiu TQ, Juhasz T, Tien CL, et al. Femtosecond laser heating of multi-layer metals II-Experiments. *Int J Heat and Mass Transfer*, 1994, 37(17): 2799~2808
- 8 Tzou DY. The generalized lagging response in small-scale and high-rate heating. *Int J Heat and Mass Transfer*, 1995, 38(17): 3231~3240
- 9 Tzou DY. A unified field approach for heat conduction from macro to micro-scales. *Transactions of ASME-Journal of Heat Transfer*, 1995, 117: 8~16
- 10 Tzou DY, Chiu KS. Temperature-dependent thermal lagging in ultrafast laser heating. *Int J Heat and Mass Transfer*, 2001, 44: 1725~1734
- 11 Guyer RA, Krumhansl JA. Solution of the linearized phonon Boltzmann equation. *Physical Review*, 1966, 148: 766~780
- 12 Majumdar A. Microscale Heat Conduction in Dielectric Thin Film. *ASME Journal of Heat Transfer*, 1993, 115: 7~16
- 13 Joshi AA, Majumdar A. Transient ballistic and diffusive phonon heat transport in thin film. *Journal of Applied Physics*, 1993, 74: 31~39
- 14 Shi Li, Majumdar A. Recent developments in micro and nanoscale thermometry. *Microscale Thermophysical Engineering*, 2001, 5: 251~265
- 15 Tzou DY. An analytical study on the fast transient process in small scales. *Int J Engng Sci*, 1995, 33: 1449~1463

(上接第 60 页)

### 3 结 论

试验研究了钢筋混凝土对边简支板在弹性区和塑性区的爆炸响应. 钢筋混凝土板的开裂在显著的弯曲变形出现之前, 随着爆炸脉冲的持续, 受拉面出现混凝土碎屑的喷射和脱落, 导致刚度急剧退化, 变形显著增加, 不断增加的曲率进一步加剧混凝土开裂和脱落.

尽管试样属于对边简支板, 受多种因素影响, 钢筋混凝土板在爆炸 II 呈现出明显的双向弯曲. 根据

数据记录和理论分析, 最大变形出现在爆炸结束和试样自振周期之间.

### 参 考 文 献

- 1 Mlakar PF, Corley WG, Sozen MA, et al. The Oklahoma City bombing: Analysis of blast damage to the Murrah Building. *J Perform Constr Facil*, 1998, 12(3): 113~119
- 2 John D. Murrah Building bombing revisited: A qualitative assessment of blast damage and collapse patterns. *J Perform Constr Facil*, 2006, 20(11): 330~335