

梯度功能材料的组成设计分析^①

李益民 郑子樵 梁叔全 胡文彬

(中南工业大学材料系, 长沙 410083)

摘 要 系统地分析了梯度功能材料组成设计的思想、方法和计算过程。提出了一种考虑导热系数温度依存性情况下温度场模拟解析的新方法, 对梯度层表观材料性能进行了预测, 分析了热应力计算过程和给出了组成分布最优设计的途径。

关键词 梯度功能材料 组成设计 表观材料性能 分布函数

梯度功能材料(FGM)是基于一种全新的材料设计概念合成的新型复合材料^[1]。它以金属、陶瓷和纤维等为原材料通过控制材料组成和显微结构的梯度分布来消除传统的金属—陶瓷复合材料的宏观界面, 使材料性能也呈梯度变化。这种材料由于能够缓和热应力, 是未来航天器用的理想耐热、隔热材料。

梯度功能材料研究的内容主要有三个方面: (1) 材料设计; (2) 材料合成; (3) 材料性能评价。其中材料的优化设计应该是材料合成技术的基础。但是目前对梯度功能材料合成技术已开展了较深入的研究, 而梯度设计这一方面的工作开展得较少, 且设计时大多假定物性值不随温度变化。本文系统阐述了梯度设计的思想、方法和计算过程, 提出了一种考虑导热系数温度依存性情况下温度场模拟解析的新方法, 可以使温度场模拟更切合实际情况, 而且在用理论分析法预测梯度层表观弹性性能时引入了复合材料微观力学中的弹性力学极值法。

1 梯度功能材料的设计思想

传统的材料科学研究多采用分析法, 即先试探性地用各种方法制得材料, 再对材料进行分析评价。材料的性能只有制作出来后通过分析测试才能知道可用于哪一方面。而材料科学

的发展趋势是使用者提出所需要的材料性能, 材料设计部门根据要求进行设计, 选择最佳的材料组元组合和最合理的组合方式, 交由材料合成部门选择适当的方法进行合成, 这就是所谓逆设计法^[2]。梯度功能材料的设计正是顺应了这一发展趋势。

梯度功能材料的逆设计过程为, 先给出所需的材料性能和已知的边界条件, 然后从设计数据库中选择基本材料组合, 确定组成分布函数。接下来根据设计知识库预测梯度层的表观材料性能。最后是热应力计算和优化过程。

由上述设计思想可知, FGM 设计内容广泛, 计算过程复杂, 必须在大量积累材料物性数据, 确定各种复合准则的基础上建立计算机辅助设计专家系统以满足设计要求。

2 设计过程

2.1 分析模型及温度场

如图1所示, 将厚度为 h 的FGM板看作由 N 层梯度层叠合而成的非对称层合板, 每一层内金属相和陶瓷相随机均匀混合, 各相同性。同时假设FGM板上表面和下表面温度保持恒定, 分别为 T_u 和 T_l 。

考虑导热系数温度依存性情况下的定常热传导的微分方程为:

^① 国家自然科学基金资助 收稿日期: 1993-11-08; 修回日期: 1993-12-10

$$\frac{d}{dZ}(\lambda \frac{dT}{dZ}) = 0 \quad (1)$$

式中 λ 为导热系数, Z 为无量纲厚度。对于 FGM 板, 由于各梯度层成分和温度分布不同, λ 不是常数。根据分析模型的假设, 可以认为每一梯度层内成分保持均匀, λ 只因为温度变化而导致不同。由于每一梯度层内温度变化较小, 可以将导热系数随温度的变化用线性形式表示:

$$\lambda = \lambda^0(1 + \beta T) \quad (2)$$

式中 i 表示 FGM 板内第 i 层梯度层, λ_i 表示第 i 层内导热系数, λ^0 表示 0°C 时该层导热系数。 β 是温度系数, 可为大于零或小于零的常数。自变量 T 仅仅限于第 i 层内的温度。将式(2)两边对 Z 求导变换得:

$$\frac{dT}{dZ} = \frac{1}{\lambda^0 \beta} \frac{d\lambda}{dZ} \quad (3)$$

将式(3)代入式(1)得:

$$\frac{d^2 \lambda^2}{dZ^2} = 0 \quad (4)$$

对第 i 层梯度层, 式(4)的边界条件为:

$$\begin{cases} Z = Z_i, T = T_i, \lambda = \lambda_i(T_i) \\ Z = Z_{i+1}, T = T_{i+1}, \lambda = \lambda_i(T_{i+1}) \end{cases} \quad (5)$$

上式中 $Z_i, Z_{i+1}, T_i, T_{i+1}$ 分别表示第 i 层梯度层边界上的厚度值和温度值。代(5)式入(4)式得:

$$\frac{\lambda_i^2 - \lambda_i^2(T_i)}{\lambda_i^2(T_{i+1}) - \lambda_i^2(T_i)} = \frac{Z - Z_i}{h_i} \quad (6)$$

式中 h_i 为第 i 层的厚度, Z 为第 i 层内的无量

纲厚度自变量。将(2)式代入(6)式得:

$$T = \frac{1}{\beta \lambda_i^0} \{ \lambda_i^2(T_i) + \frac{Z - Z_i}{h_i} [\lambda_i^2(T_{i+1}) - \lambda_i^2(T_i)] \}^{1/2} - \frac{1}{\beta} \quad (7)$$

$$\text{即 } T = \frac{1}{\beta} \{ (1 + \beta T_i)^2 - \frac{Z - Z_i}{h_i} [(1 + \beta T_i)^2 - (1 + \beta T_{i+1})^2] \}^{1/2} - \frac{1}{\beta} \quad (8)$$

上式就是第 i 层梯度层内考虑导热系数温度依存性时的温度分布, 此时各梯度层内温度分布是非线性的。只要确定 β 常数和各梯度层边界温度 T_i 和 T_{i+1} , 则各梯度层内温度场可以很容易地求出。

假设 FGM 板内热传导没有损失, 即每一梯度层所通过的热流密度相同, 则根据傅立叶定律有:

$$\bar{\lambda}_i \frac{T_i - T_{i-1}}{h_i} = \bar{\lambda}_{i+1} \frac{T_{i+1} - T_i}{h_{i+1}} \quad (9)$$

式中 $\bar{\lambda}_i$ 和 $\bar{\lambda}_{i+1}$ 分别采用 i 和 $i+1$ 层内导热系数的积分平均值, 即

$$\begin{cases} \bar{\lambda}_i = \frac{1}{T_i - T_{i-1}} \int_{T_{i-1}}^{T_i} \lambda_i(T) dT \\ \bar{\lambda}_{i+1} = \frac{1}{T_{i+1} - T_i} \int_{T_i}^{T_{i+1}} \lambda_{i+1}(T) dT \end{cases} \quad (10)$$

将式(10)代入式(9)有:

$$\frac{1}{h_i} \int_{T_{i-1}}^{T_i} \lambda_i(T) dT = \frac{1}{h_{i+1}} \int_{T_i}^{T_{i+1}} \lambda_{i+1}(T) dT \quad (11)$$

由 FGM 板边界条件, 已知 T_u 和 T_L 。则可令 $T_0 = T_L$, 假设一个 T_1 值, 就可算得 T_2 值, 由 T_1 和 T_2 则可算出 T_3 值。如此循环下去, 最后看 T_N 值是否等于 T_u 。若相等, 则可得出各梯度层边界温度; 若不等, 则选择另一个假设 T_1 值代入计算, 直至得出各梯度层边界温度为止。这种算法在计算机上很容易实现。得出各梯度层边界温度后, 再将其代入式(8)中就可求得整个 FGM 板内温度场。

2.2 组成分布函数

设梯度功能材料由金属相和陶瓷相组成(为了以后处理的方便, 忽略了孔隙的存在),

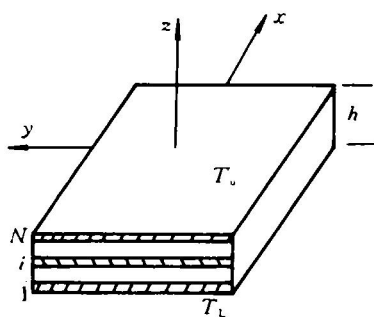


图1 FGM板分析模型

其体积分数分别为 V_m 和 V_c ,

$$V_m + V_c = 1 \quad (12)$$

定义 V_c 随无量纲厚度 Z 变化的曲线为组成分布函数曲线。由于 FGM 一侧为金属, 一侧为陶瓷, 因此可以大致推测组成分布函数曲线如图 2 所示。

这种形状的曲线可以简单地认为是指数函数, 这就使得问题的处理大大简化。所以分布函数 $V_c(Z)$ 可以表示如下:

$$V_c(Z) = Z^n \quad 0 \leq Z \leq 1 \quad (13)$$

2.3 FGM 梯度层表观性能预测

为了计算温度场和热应力分布, 必须知道 FGM 梯度层的表观材料性能, 如导热系数 λ , 热膨胀系数 α 、杨氏模量 E 和泊松比 ν 等。预测方法可分为理论分析法和经验公式法。

2.3.1 理论分析法

为了预测梯度层的表观材料性能, 根据前述分析模型, 决定采用复合材料微观力学的方法。复合材料中微观力学方法又分为材料力学方法和弹性力学方法。根据 FGM 为颗粒复合材料的实际情况, 这里只介绍弹性力学的极值法。Paul 首次明确地用线弹性力学的极值方法讨论了颗粒增强复合材料弹性模量的上、下限^[3]。在这里我们假设金属和陶瓷的弹性模量分别为 E_m 和 E_c , 并且以 FGM 靠近金属侧的梯度层来加以讨论。这样, 金属为基体, 而陶瓷为弥散材料。

在确定复合材料线弹性模量 E 的单向拉伸试验中, 假定应力和应变状态是宏观上均匀。

$$E = \sigma / \epsilon \quad (14)$$

式中 σ 是作用的单向应力, ϵ 是产生的轴向

应变。得到的应变能可以写成两种形式:

$$U = \frac{1}{2} \frac{\sigma^2}{E} V \quad (15)$$

$$U = \frac{1}{2} E \epsilon^2 V \quad (16)$$

先考虑表观弹性模量的下限。确定表观弹性模量下限的基础是最小余能原理。它可叙述为: 物体的表面上作用着力和力矩, 令 $\sigma_x^0, \sigma_y^0, \sigma_z^0, \tau_{xy}^0, \tau_{yz}^0, \tau_{zx}^0$ 满足应力平衡方程和指定边界条件的应力状态, 即容许应力场。令 U^0 是该应力状态下的应变能。而且由规定载荷引起的物体中的实际应变能 U 不超过 U^0 , 即 $U \leq U^0$ 。

为求得表观弹性模量 E 的下限, 在基本的单向载荷试件的两端承受着正应力。满足该载荷和应力平衡方程式的内应力场是:

$$\begin{aligned} \sigma_x^0 &= \sigma \\ \sigma_y^0 &= \sigma_z^0 = \tau_{xy}^0 = \tau_{yz}^0 = \tau_{zx}^0 = 0 \end{aligned} \quad (17)$$

对(17)式应力的应变能为:

$$\begin{aligned} U^0 &= \frac{1}{2} \int_V \frac{(\sigma_x^0)^2}{E} dV \\ &= \frac{\sigma^2}{2} \int_V \frac{dV}{E} \end{aligned} \quad (18)$$

但是 E 在整个体积内不是常数, 因为在体积 $V_m V$ 中基体模量为 E_m , 在体积 $V_c V$ 中弥散材料模量为 E_c , V 为总体积。这样,

$$\int_V \frac{dV}{E} = \frac{V_m V}{E_m} + \frac{V_c V}{E_c} \quad (19)$$

因此,

$$U^0 = \frac{\sigma^2}{2} \left(\frac{V_m}{E_m} + \frac{V_c}{E_c} \right) V \quad (20)$$

但是由不等式 $U \leq U^0$ 和式(15)中 U 的定义:

$$\frac{1}{2} \frac{\sigma^2}{E} V \leq \frac{1}{2} \sigma^2 \left(\frac{V_m}{E_m} + \frac{V_c}{E_c} \right) V \quad (21)$$

所以有:

$$E \geq \frac{E_m E_c}{V_m E_c + V_c E_m} \quad (22)$$

这就是用组分材料的模量和体积分数表示的 FGM 梯度层表观弹性模量的下限。

确定表观弹性模量上限的基础是最小势能原理。它可叙述为: 物体除作用力为零外的表面有给定的位移, 令 $\epsilon_x^*, \epsilon_y^*, \epsilon_z^*, \gamma_{xy}^*, \gamma_{yz}^*, \gamma_{zx}^*$ 是任一满足指定位移边界条件的相容应变场, 即容许应变场。 U^* 是该应变场下的应变能。

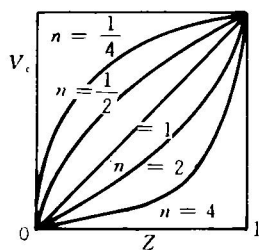


图2 组成分布函数

由规定的位移得到的物体中的实际应变能 U 不超过 U^* , 即 $U \leq U^*$ 。

为求得表观弹性模量的上限, 使基本的单轴向试件承受一个伸长 ϵL 。 ϵ 是平均应变, L 是试件长度。相应于试件边界上平均应变的内应变场是:

$$\begin{aligned}\epsilon_x^* &= \epsilon & \epsilon_y^* &= \epsilon_z^* = -\nu\epsilon \\ \gamma_{xy}^* &= \gamma_{yz}^* = \gamma_{zx}^* = 0\end{aligned}\quad (23)$$

ν 是梯度层的表观泊松比。为简化处理, ν 采用线性加和定律, 即 $\nu = \nu_m V_m + \nu_c V_c$ 。利用应力—应变关系式, 在给定应变场下, 基体的应力为:

$$\begin{aligned}\sigma_{x_m}^* &= \frac{1 - \nu_m - 2\nu_m\nu}{1 - \nu_m - 2\nu_m^2} E_m \epsilon \\ \sigma_{y_m}^* &= \sigma_{z_m}^* = \frac{\nu_m - \nu}{1 - \nu_m - 2\nu_m^2} E_m \epsilon \\ \tau_{xy_m}^* &= \tau_{yz_m}^* = \tau_{zx_m}^* = 0\end{aligned}\quad (24)$$

弥散材料的应力为:

$$\begin{aligned}\sigma_{x_c}^* &= \frac{1 - \nu_c - 2\nu_c\nu}{1 - \nu_c - 2\nu_c^2} E_c \epsilon \\ \sigma_{y_c}^* &= \sigma_{z_c}^* = \frac{\nu_c - \nu}{1 - \nu_c - 2\nu_c^2} E_c \epsilon \\ \tau_{xy_c}^* &= \tau_{yz_c}^* = \tau_{zx_c}^* = 0\end{aligned}\quad (25)$$

将应变式(23)、应力式(24)和(25)代入应变能方程, 可得出 FGM 梯度层应变能表达式:

$$\begin{aligned}U^* &= \frac{\epsilon^2}{2} \left(\frac{1 - \nu_c - 4\nu_c\nu + 2\nu^2}{1 - \nu_c - 2\nu_c^2} E_c V_c \right. \\ &\quad \left. + \frac{1 - \nu_m - 4\nu_m\nu + 2\nu^2}{1 - \nu_m - 2\nu_m^2} E_m V_m \right) V\end{aligned}\quad (26)$$

但按不等式 $U \leq U^*$ 和方程(16) U 的定义可得:

$$\begin{aligned}\frac{1}{2} E \epsilon^2 V &\leq \frac{\epsilon^2}{2} \left(\frac{1 - \nu_c - 4\nu_c\nu + 2\nu^2}{1 - \nu_c - 2\nu_c^2} E_c V_c \right. \\ &\quad \left. + \frac{1 - \nu_m - 4\nu_m\nu + 2\nu^2}{1 - \nu_m - 2\nu_m^2} E_m V_m \right) V\end{aligned}\quad (27)$$

简化得:

$$\begin{aligned}E &\leq \frac{1 - \nu_c - 4\nu_c\nu + 2\nu^2}{1 - \nu_c - 2\nu_c^2} E_c V_c \\ &\quad + \frac{1 - \nu_m - 4\nu_m\nu + 2\nu^2}{1 - \nu_m - 2\nu_m^2} E_m V_m\end{aligned}\quad (28)$$

这就是表观弹性模量的上限。

用理论分析法预测 FGM 梯度层其它表观性能在这里就不一一介绍了。文献[4]中介绍了运用复合材料层合板理论预测 FGM 梯度层表观热膨胀系数的方法。

2.3.2 经验公式法

由于用理论分析法预测材料表观性能相当复杂, 并且仍需要作一些假设和简化处理, 所以一般实际设计时多采用经验公式法。

经验公式法有很多种, 针对 FGM 板, 我们采用 Reuss 的预测公式^[4]:

$$\begin{aligned}E &= C_g \{ E_m V_m + E_c (1 - V_m) \} \\ &\quad + (1 - C_g) / \{ V_m / E_m \\ &\quad + (1 - V_m) / (E_c) \} \\ K &= C_g \{ K_m V_m + K_c (1 - V_m) \} \\ &\quad + (1 - C_g) / \{ V_m / K_m \\ &\quad + (1 - V_m) / (K_c) \} \\ \alpha &= \frac{\alpha_m K_m V_m + \alpha_c K_c (1 - V_m)}{K_m V_m + K_c (1 - V_m)}\end{aligned}\quad (29)$$

式中下标 m 和 c 分别代表金属和陶瓷, 且 $V_m + V_c = 1$; C_g 为经验常数, 可以取 $C_g = 0.2$; K 是体积模量, $K = E/2(1 - \nu)$ 。

2.4 热应力计算

令 T^0 为无应力状态时温度, 那么热应力为:

$$\sigma = E \alpha (T(z) - T^0) \quad (30)$$

式中 E 、 α 和 $T(z)$ 均可以用组成分布函数 Z^n 和已知的陶瓷和金属性能来表示。根据热应力最小原则可以求出 n 值, 得到 FGM 最优组成分布函数。具体计算过程比较复杂, 需要计算机辅助来加以实现。

3 结语

本文系统地分析了梯度功能材料组成设计的思想、方法和过程。提出了一种考虑导热系数温度依存性情况下温度场模拟解析的新方法, 并且在用理论分析法预测梯度层表观弹性性能时引入了复合材料微观力学中的弹性力学极值法。梯度功能材料的组成设计牵涉到传热

(下转 67 页)

3 000K La<Ce<Tb<Dy

稀土 TiAl 合金制备均由电弧熔炼, 熔炼温度 2 000 K 左右, 而稀土元素蒸汽压较高, 在熔炼中挥发严重, 合金熔炼后经水冷铜坩埚冷却, 冷速快导致稀土蒸气不能及时排出, 保留在合金中形成气孔, 尤其在后凝固的地方如晶界处更为严重。这样蒸汽压愈高的元素, 愈易形成气孔。根据蒸汽压的大小, 稀土 TiAl 中气孔按 La、Ce、Tb、Dy 顺序加强, 这一推测结果与试验结果相符。同时, 断口观察还表明 Ce、Tb、Dy 更易在 TiAl 中形成粗大第二相粒子, 表明 Ce、Tb、Dy 较 La 在 TiAl 中的固溶度更小, 若采用快速冷凝技术扩大这些元素的固溶度, 并借助粉末冶金方法成型以消除气孔, 可期望 Ce、Tb、Dy 与 La 有相同效果。

4 结论

(1) 稀土 La、Ce、Tb、Dy 对 TiAl 铸态组

织有明显的细化作用, 并随含量增加, 细化效果加强。

(2) 添加 La 可以得到组织致密、无粗大析出相, 性能良好的 TiAl 铸锭; 添加 Ce、Tb、Dy 则引起铸锭孔洞增加, 析出相粗大, 性能恶化。

(3) TiAl+La 合金的最佳 La 含量为 0.2 at.-%, 最佳性能: TRS=730 MPa, $D_p=0.25$ mm。

参考文献

- 1 Vasudevan V *et al.* Scripta Metall, 1989; 23(6): 907.
- 2 《稀土》编写组编. 稀土(下). 北京: 冶金工业出版社, 1976, 353.
- 3 陈仕奇, 曲选辉, 雷长明, 黄伯云. 金属学报, 1994, 30(1): 20.
- 4 中山大学编. 稀土物理化学常数手册. 北京: 冶金工业出版社, 1976.

(上接 58 页)

学、复合材料力学和复合材料物性估计技术, 设计过程复杂, 但其对梯度功能材料的合成有着重大的理论和实际意义。

参考文献

- 1 郑子樵, 梁叔全等. 宇航材料与工艺, 1992, 23(6): 17.

- 2 Tohru Hirano, Junichi Teraki *et al.* In: Proceedings of the First International Symposium on FGM, Sendai, Japan, 1990, 5.
- 3 Robert M J(著). Mechanics of Composite Materials, Washington: Scripta Book Company, 1975, 99.
- 4 Takashi Ishikawa. In: Proceedings of the First International Symposium on FGM, Sendai, Japan, 1990: 11.