

# 热障涂层界面氧化大变形热-化-力耦合模型\*

高俊翔, 常全玺, 武天亮, 郭晓峰, 汪建新  
(内蒙古科技大学 机械工程学院, 内蒙古 包头 014010)

**摘要:** 基于热-化-力耦合机制构建了 TGO 非线性氧化动力学模型, 结合有限元仿真手段揭示了热障涂层界面 TGO 非线性生长过程中的热-化-力耦合机制。研究表明: 相较于传统的 WAGNER 氧化模型, 该模型可以描述 TGO 非均匀生长现象。耦合效应会对氧扩散起抑制作用, 致使涂层 TGO 界面波峰处厚度减少 14.60%, 波谷处减少 13.10%, 进而导致层间应力水平下降。该模型揭示了多场耦合效应下的 TGO 非线性生长和应力演化规律。

**关键词:** 热障涂层; 热生长氧化物; 界面应力; 热-化-力耦合

中图分类号: TG174.4 文献标识码: A

文章编号: 2095-2295(2026)01-0044-09

DOI: 10.16559/j.cnki.2095-2295.2026.01.006

## A coupled thermo-chemical-mechanical model for interfacial oxidation in thermal barrier coatings with large deformation

GAO Junxiang, CHANG Quanxi, WU Tianliang, GUO Xiaofeng, WANG Jianxin

(School of Mechanical Engineering, Inner Mongolia University of Science & Technology, Baotou 014010, China)

**Abstract:** A nonlinear oxidation kinetics model for TGO was developed based on thermo chemo-mechanical coupling mechanisms. Through finite element simulations, the coupled thermo-chemo-mechanical interactions during TGO nonlinear growth at TBC interfaces were systematically investigated. Results demonstrate that compared to the conventional Wagner oxidation model, the proposed model more accurately describes the hetero-geneous growth characteristics of TGO. The coupling effects significantly inhibit oxygen diffusion, reducing TGO thickness by 14.60% at crest regions of the TGO interface and 13.10% at valley regions of the TGO interface, consequently lowering interfacial stress levels. The model reveals the nonlinear growth behavior of TGO and the stress evolution mechanisms under multi-field coupling effects.

**Key words:** thermal barrier coating; thermally grown oxide; interfacial stresses; thermo-chemo-mechanical coupling

航空发动机是衡量一个国家国防实力和科技水平的重要标志, 其性能提升对热端部件的高温热防护技术提出了更高要求。热障涂层技术凭借其优异的隔热性能, 被广泛应用于航空发动机燃烧室和涡轮叶片等热端部件<sup>[1-3]</sup>。通常热障涂层系统共由 4

层构成, 由表及里依次为陶瓷层(TC)、氧化层(TGO)、粘结层(BC)、基底(SUB)。高温环境中 TGO 在扩散作用下会持续生长。涂层制备过程中, TC/BC 之间会存在一定的粗糙度, 这会导致氧化膜厚度的非均匀增加。在 TGO 非均匀生长过程中, 其

\* 基金项目: 国家自然科学基金(52265021); 内蒙古自治区自然科学基金(2025QN05049); 内蒙古自治区直属高校基本科研业务费资助项目(2023QNJS070)。

作者简介: 高俊翔, 男, 硕士研究生。

通信作者: 郭晓峰, 男, 博士, E-mail: guoxiaofeng@imust.edu.cn

收稿日期: 2025-05-16

体积的变化会受到周围材料的约束或受自身不协调生长变形作用而产生较大的局部应力,这是导致涂层内裂纹产生和剥落失效的主要原因。该过程涉及多场耦合作用,即氧化反应会影响涂层体系的温度场与应力场;温度场影响化学反应速率;应力场对元素扩散产生较大的影响<sup>[4-5]</sup>。因此,热障涂层界面氧化过程是一个典型的热-化-力耦合过程。

传统的 WAGNER 氧化模型难以描述由于界面粗糙度导致的 TGO 非均匀生长现象<sup>[6]</sup>。近年来,热-化-力耦合理论的不断发展和完善为开展虑及多场耦合效应的 TGO 生长研究提供了基础和方法。针对热障涂层界面氧化的热-化-力多场耦合问题,LOEFFEL 等<sup>[7]</sup>基于大变形理论,开拓性地建立了热障涂层界面氧化的热-化-力多场耦合粘塑性本构模型。ZHOU 等<sup>[8]</sup>已经初步开展了 TBCs 界面氧化的大变形热-化-力耦合理论研究。

需要指出的是,已有研究表明热-化-力耦合效应会影响 TGO 生长和应力演化进程,然而对于影响程度大小和作用机理尚不明确;鉴于此,本文基于连续介质力学和热力学理论,构建 TBCs 界面氧化的大变形热-化-力耦合本构模型,重点分析耦合效应对动态界面氧化及应力演化的作用机理,为热障涂层界面优化及其制备工艺设计提供了理论参考。

## 1 热-化-力耦合模型

### 1.1 TGO 生长的控制方程

基于 HILLE 等<sup>[9]</sup>的研究成果,为了方便描述 TGO 生长时粘结层变成氧化铝的过程,引入变量  $n$  来描述界面附近局部区域 TGO 的组分比, $n = 1$  表示全部为 TGO, $n = 0$  表示全部为粘结层即完全没有被氧化, $0 < n < 1$  表示粘结层部分被氧化成 TGO。由质量守恒定律可得,此区域剩下的铝的浓度即铝所占组分为  $1 - n$ 。TGO 生长过程中氧浓度  $c, \text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$ ; TGO 体积分数  $n$  的控制方程,如下式所示:

$$\frac{\partial c}{\partial t} - \nabla \cdot (J) = -M\zeta(1 - n)c, \quad (1)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \zeta(1 - n)c. \quad (2)$$

式中: $\nabla$  为梯度算子, $\zeta$  为 TGO 的反应速率常数, $\text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ ;  $M$  为氧在  $\text{Al}_2\text{O}_3$  中的摩尔浓度, $\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$ 。

扩散通量  $J, \text{mol} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$  与化学势  $\mu, \text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$  的关系,如式(3)所示:

$$J = -\frac{Dc}{RT}\nabla\mu. \quad (3)$$

式中: $D$  为扩散系数, $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ;  $R$  为理想气体常数, $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ;  $T$  为热力学温度,  $\text{K}$ 。

基于热力学理论,应力影响下的化学势,如式(4)<sup>[10]</sup>所示:

$$\mu = \mu_0 + RT\ln C_i - \Omega\sigma_h. \quad (4)$$

式中: $\mu_0$  为与应力无关的标准化学势, $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$ ;  $\sigma_h$  为静水压力,  $\text{MPa}$ ;  $\Omega$  为偏摩尔体积, $\text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ ;  $C_i$  为浓度分数。

扩散系数  $D$  依赖于热力学温度和应力状态的表达式,如式(5)所示:

$$D = D_{\text{ref}} e^{\left[ \frac{E_{\text{act}}}{R} \left( \frac{1}{T_{\text{ref}}} - \frac{1}{T} \right) \right]} e^{\left( \frac{\gamma\Omega\sigma_h}{RT} \right)}. \quad (5)$$

式中: $D_{\text{ref}}$  为无应力作用下的扩散系数, $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ;  $E_{\text{act}}$  为扩散活性能, $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$ ;  $T_{\text{ref}} = 298.15 \text{ K}$  为参考温度, $\gamma$  为正无量纲系数,表示扩散活性能线性依赖于静水应力的程度。

### 1.2 界面氧化多场耦合的本构方程

诸多研究表明,在热障涂层界面氧化过程中, TGO 的生成会导致体积膨胀,目前国内外学者通常使用 PBR (Pilling-Bedworth Ratio) 值,即发生氧化后生成的氧化物与所消耗金属的体积比来描述这一现象。LOEFFEL 等<sup>[7]</sup>研究表明,在热障涂层界面氧化过程中,化学反应生成  $\text{Al}_2\text{O}_3$  的 PBR 值为 1.28,这导致涂层内产生较大的生长应变和应力,因此需要在大变形理论框架下定义 TGO 生长过程中产生的变形。假设热障涂层  $A_0$  的表面积为  $\partial A_0$ ,其氧化前的状态为参考构型。经过时间  $t$  后发生氧化,此时其氧化变形为  $A_t$ ,表面积变为  $\partial A_t$ ,氧化后的状态为现时构型。函数  $x = \chi(X, t)$  将在  $A_0$  上的任意物质点映射为在  $A_t$  里的空间点,则变形梯度  $F$  的定义,如式(6)所示:

$$F = \nabla_x \chi. \quad (6)$$

式中: $\nabla_x$  为相对于  $X$  的梯度算子。根据标准 Lee 乘式分解法,变形梯度  $F$  分解为弹性变形梯度  $F^e$  和生长变形梯度  $F^s$ ,如式(7)所示:

$$F = F^s F^e. \quad (7)$$

将 TGO 的自由生长视为各向同性生长,其生长变形梯度,如式(8)所示:

$$F^s = \begin{bmatrix} g & 0 & 0 \\ 0 & g & 0 \\ 0 & 0 & g \end{bmatrix}. \quad (8)$$

式中: $g$ 为沿3个方向的伸长比,表达式如式(9)所示:

$$g = 1 + \beta(c - c_0). \quad (9)$$

热障涂层 TGO 生长过程中的力平衡方程可以由动量守恒得到,并且不同构型下的平衡方程有所区别,分别建立当时构型和参考构型的力平衡方程。

设单位质量  $\rho$  所受的体力矢量为  $f(x, t)$ , 由动量守恒定律可得式(10):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V \rho v dv &= \int_V \rho \frac{dv}{dt} dv \\ &= \oint_{\partial V} \sigma n da + \int_V \rho f dv \\ &= \int_V \operatorname{div} \sigma dv + \int_V \rho f dv. \end{aligned} \quad (10)$$

在当前构形中 Euler 描述的运动方程, 如式(11)所示:

$$\operatorname{div} \sigma + \rho f = \rho a. \quad (11)$$

式中: $dv/dt = a(x, t)$ 为加速度。式(11)也称为 Cauchy 第一运动律, 亦称 Cauchy 动量方程。其中  $\operatorname{div}$  为当前构形中的散度算子。

在参考构型中, 设单位质量所受的体力矢量为  $f_0(X, t)$ , 则相应的动量守恒定律可写为:

$$\begin{aligned} \int_{\partial V_0} P N dA + \int_{V_0} \rho_0 f_0 dV &= \frac{d}{dt} \int_{V_0} \rho_0 V dV \\ &= \int_{V_0} \rho_0 A dV. \end{aligned} \quad (12)$$

式中: $P$ 为第一类皮奥拉-基尔霍夫应力(简称PK1, MPa),  $N$ 为参考构形中面积微元  $dA$  的外法线,  $PN$ 表示  $P$ 和  $N$ 二者间的点积。 $dV/dt = a_0(X, t)$ 则为参考构形中质点的加速度,  $V$ 为参考构形中质点的速度。对式(12)应用格林定理, 则得到用非对称的两点张量所表示的参考构形中拉格朗日描述下的运动方程:

$$\operatorname{Div} P + \rho_0 f_0 = \rho_0 a_0. \quad (13)$$

式(13)称为布辛涅斯克动量方程, 其中  $\operatorname{Div} P = \nabla_x \cdot P$ 表示参考构形中的散度。

$$T = F^{-1} P = F^{-1} J \sigma F^{-T}. \quad (14)$$

再将 PK2 和 PK1 之间的关系式(14)代入式(13), 则可给出通过 PK2 表示的运动方程:

$$\operatorname{Div}(FT) + \rho_0 f_0 = \rho_0 a_0. \quad (15)$$

式(15)称为基尔霍夫动量方程, 由柯西应力  $\sigma$  和 PK1 的关系可知  $\sigma = PF^T/J$ , 将该式代入  $\sigma = \sigma^T$ , 得到用 PK1 所表示的等价对称性条件:

$$PF^T = FP^T. \quad (16)$$

在热障涂层界面氧化过程中, TGO 内的第二类  $P$ - $K$  应力和弹性 Green-Lagrange 应变张量  $E^e$  之间的关系由本构关系确定。从热力学第一定律和第二定律出发, 得到 TGO 的本构关系:

$$T = \frac{\partial \psi}{\partial E^e}. \quad (17)$$

式中: $\psi$ 为系统的 Helmholtz 自由能,  $J \cdot m^{-3}$ , 表达式为:

$$\psi = J^c \left[ \frac{1}{2} \mu (I^e - 3) + \lambda (\ln J^e)^2 - \mu \ln J^e \right]. \quad (18)$$

式中,  $I^e$  表示 Green 应变张量的第一不变量。结合式(17)和式(18), 可得热障涂层界面氧化过程中涂层内第二类  $P$ - $K$  应力, MPa 的表达式:

$$T = J^c [\mu I + (\lambda \ln J^e - \mu) (C^e)^{-1}]. \quad (19)$$

式中: $I$ 为单位张量,  $(C^e)^{-1}$ 为弹性变形张量, 可表示为:

$$(C^e)^{-1} = (F^e)^{-1} \cdot (F^{eT})^{-1}. \quad (20)$$

式中: $(F^e)^{-1}$ 为弹性变形梯度张量的逆,  $(F^{eT})^{-1}$ 为弹性变形梯度张量转置的逆。

在大变形条件下, 用 Cauchy 应力表示当时构型的应力状态, 度量每变形单位面积上的力。因此需要将第二类  $P$ - $K$  应力转换为柯西应力, MPa:

$$\sigma = J^{-1} F \cdot T \cdot F^T. \quad (21)$$

## 2 数值模拟

### 2.1 几何模型与网格划分

热障涂层氧化界面一般是凸凹不平的, 文章使用平面应变模型, TGO 层的几何形貌为理想余弦曲线的一个周期, 即:

$$y = 15 \cos(\pi x/30). \quad (22)$$

由于基层对 TGO 生长的影响特别小, 因此建模过程中忽略基底。使用 COMSOL Multiphysics 6.20 进行有限元模型, TC 层厚度为 135  $\mu m$ , BC 层厚度为 165  $\mu m$ , TGO 经过预氧化处理后会有有一定的厚度, 取 1  $\mu m$ 。

图 1 为建立的几何模型及网格划分, 采用物理场控制的三角形平面应变单元, 单元数共 14 960 个, 在 TGO 生长的关键区域做了网格加密处理以保证求解的精度。该网格已通过网格无关验证。

### 2.2 材料参数和边界条件

假定 TC 层、TGO 层、BC 层的材料都是各向同性且均质, 各层材料界面间连接紧密, 不存在缺陷和

微裂纹。在建模过程中,除了必要的材料参数(如杨氏模量、泊松比等)以外,由式(1)与式(2)可知,扩散与反应系数对模型的准确性有较大的影响。为便于计算,假定氧在各层的扩散系数为定值,仿真模拟所需要的参数,如表1所示。

有限元模型的边界条件包括 TGO 生长模型的边界条件和位移的边界条件。为了保证模型在左右两侧的变形一致,在左右边界采用连续的周期性边

界条件;模型的底端  $Y$  方向位移固定,限制模型不发生  $Y$  方向的移动;模型上表面自由,不做任何限制;TGO 的初始值  $n$  为 1,BC 和 TC 层为 0;氧浓度在模型底端为 0;外界环境内的氧穿过 TC 层到达 BC 层上表面,考虑到 TC 层氧的渗透率较高,将氧浓度在 TGO 层的上表面设置为  $1.55 \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}$ 。文章主要考虑恒温状态下 TGO 的生长,故氧化温度固定为  $1000 \text{ }^\circ\text{C}$ ,氧化时间为  $1000 \text{ h}$ 。

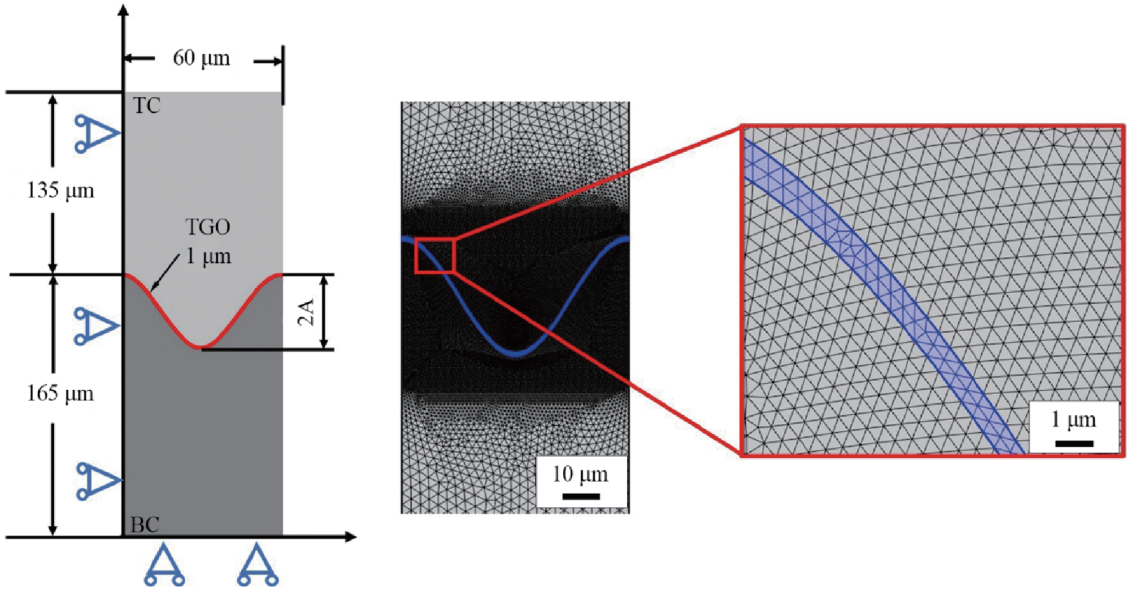


图1 几何模型及网格划分

Fig. 1 Geometric model and meshing

表1 各层材料属性参数<sup>[11-13]</sup>

Table 1 Material property parameters of each layer<sup>[11-13]</sup>

	$E/\text{GPa}$	$\nu$	$D/(\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1})$	$R/(\text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	$M/(\text{mol} \cdot \text{m}^{-3})$
TC	22	0.12	—	—	—
TGO	320	0.25	$2.0 \times 10^{-13}$	$1.0 \times 10^{-4}$	$1.1 \times 10^{-5}$
BC	110	0.33	$8.0 \times 10^{-13}$	$1.0 \times 10^{-4}$	$1.1 \times 10^{-5}$

### 3 结果与讨论

#### 3.1 TGO 生长分析

随着氧化过程的进行,在 TGO 厚度不断增加的同时,不均匀程度也在增强。波峰和波谷处的 TGO 生长速率不同,如图 2 所示,在尖锐的波峰处厚度明显大于平坦的波谷处,波峰处厚度达到波谷处的 1.55 倍,这种现象是由于界面不同位置处曲率改变造成的。界面凸起处会导致局部氧浓度更高。例

如,孤立颗粒整体被氧环境完全包围,而平坦表面仅有一半区域暴露于氧化环境,凹面结构的氧暴露程度则更低。因此,凸面区域的氧化扩散速率显著高于凹面区域。在大曲率的尖锐波峰处,氧达到富集,而在波谷处氧最少,因此氧富集的区域也就是 TGO 生长速率较快的区域。在粗糙度较大的区域,涂层加速生长,导致局部不稳定性增加,进而诱发更大的应力,这一区域往往是裂纹萌生和扩展甚至涂层失效剥落的位置。

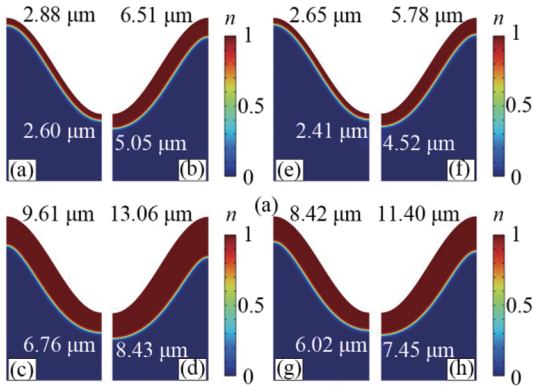


图2 是否考虑耦合效应 TGO 生长规律对比

Fig.2 Comparison of TGO growth behavior with and without coupling effects

(a) 50 h; (b) 300 h; (c) 600 h; (d) 1 000 h;  
 (e) 50 h(耦合); (f) 300 h(耦合);  
 (g) 600 h(耦合); (h) 1 000 h(耦合)。

如图3所示, TGO 生长动力学近似于抛物线规律, 即氧化初期, TGO 生长速率较快, 随着反应的进行, 生长速率趋于稳定。TGO 生长规律与氧扩散的机理有关。氧向内扩散的机理包括氧沿晶界扩散和氧气通过陶瓷层的孔隙和裂纹扩散进入, 氧沿晶界扩散和表面扩散都属于短路扩散, 这种短路扩散导致 TGO 在氧化开始阶段的快速形成。而在稳定氧化阶段, 结构致密的 TGO 对氧扩散起到屏障作用, 不断变厚的 TGO 减缓了氧的扩散速率。耦合效应下, TGO 总体生长趋势仍符合抛物线规律, 但耦合效应抑制了 TGO 的生长。

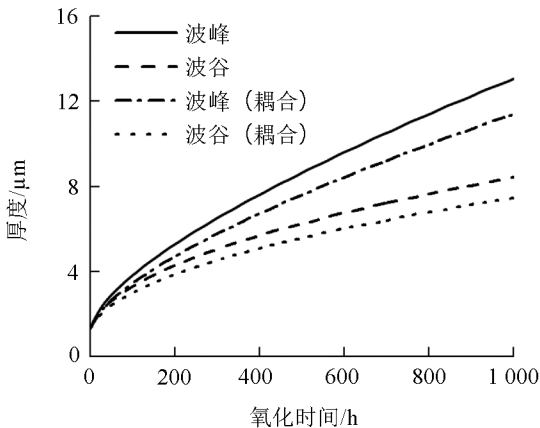


图3 波峰和波谷处 TGO 生长情况

Fig.3 TGO growth behavior at the peaks and valleys

耦合效应对于 TGO 生长的影响, 主要体现在应力抑制了氧的扩散, 从而抑制 TGO 的生长。耦合作

用的微观机理为: 在 TGO 生长变形较大的区域, 附近的应力场发生畸变, 提高了扩散的能量势垒, 从而抑制了氧的扩散。对比不考虑耦合效应的情况, 耦合效应使波峰处 TGO 厚度减少了 14.60%, 波谷处减少了 13.10%。以上分析表明, 耦合效应在抑制 TGO 生长的同时, 也提高了 TGO 生长的非均匀程度, 由此推测耦合效应会提高涂层内的应力水平。

### 3.2 位移分析

新生成的 TGO 会沿垂直于界面的内部晶界形成, 导致 TGO 层发生横向生长位移。TGO/BC 界面的 X 方向位移, 如图4所示。可以看出, X 方向的位移呈现反对称分布, 即在波峰和波谷处始终保持为 0, 在对称位置处位移大小相等、方向相反, X 方向的最大位移发生在 TGO 的波峰和波谷之间。

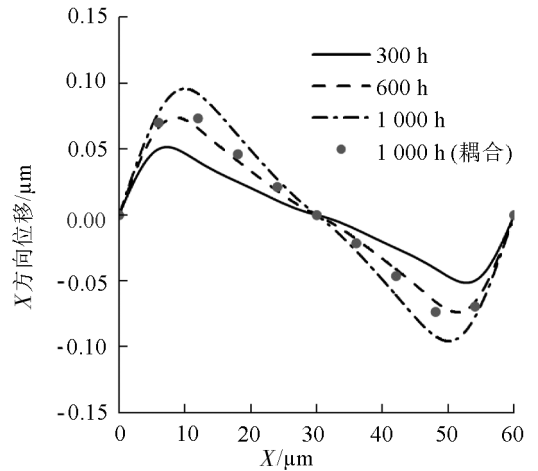


图4 TGO/BC 界面 X 方向位移分布

Fig.4 Distribution of X-direction displacement at the TGO/BC interface

随着氧化过程的进行, X 方向的最大位移逐渐增大至  $0.096 \mu\text{m}$ , 并且最大位移发生的位置从半高宽位置不断向中心波谷处靠近。多场耦合效应影响下, 最大位移降低为  $0.08 \mu\text{m}$ 。模型 X 方向位移的发生条件符合 RHINES-WOLF 模型<sup>[14]</sup>。RHINES 与 WOLF 提出, 只有当新氧化物沿垂直于界面的晶界形成时, 才会产生横向应变, 且这一过程需要氧向内扩散与金属离子向外扩散同时发生。此外, 涂层氧化过程中会出现褶皱现象, 褶皱现象是应变能释放的一种形式。褶皱的出现通常预示着氧化层即将发生剥落失效。褶皱现象会因为 TGO 波峰与波谷产生的变形而加剧, 仿真结果可以有力的解释实验中观察到的褶皱现象。

TGO/BC 界面的  $Y$  方向位移,如图 5 所示。

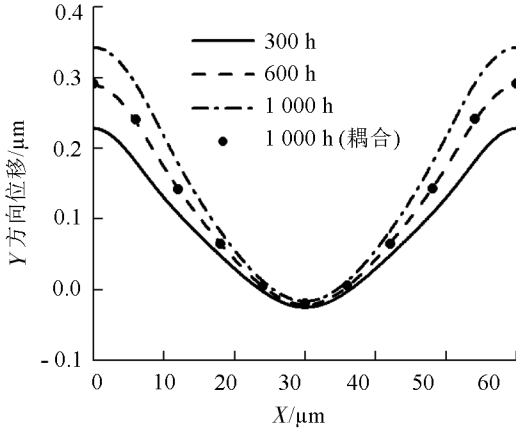


图 5 TGO/BC 界面  $Y$  方向位移分布

Fig. 5 Distribution of  $Y$ -direction displacement at the TGO/BC interface

$Y$  方向位移呈现对称分布。在不考虑耦合效应情况下,最大位移达到  $0.34 \mu\text{m}$ ,发生在 TGO 波峰处;最小位移为  $-0.02 \mu\text{m}$ ,发生在 TGO/BC 界面的

波谷处。这种位移分布的结果加大了 TGO 界面的粗糙程度。由  $Y$  方向位移随着时间的变化曲线可以看出,随着氧化过程的进行,波峰处的位移明显增大,但波谷处  $Y$  方向的位移变化很小,且多场耦合效应对波峰处抑制效果更显著。

### 3.3 应力分析

TBC 系统内的应力分布很大程度上受到涂层内部层与层之间的结构波动情况的影响。APS 工艺沉积表面需要足够的粗糙度以满足 BC 层的附着需要,高粗糙度会增加层间界面的结合强度,但涂层在服役过程中,TGO 层的曲率会使刚性位移受到抑制,从而产生局部应力。当基体粗糙度增加或 BC 层粗糙度降低时,BC 层中的内应力会增加。同时,高温环境下波峰和波谷之间粗糙度增大会造成应力集中现象并促使裂纹萌生。重点研究  $1\,000\text{ }^\circ\text{C}$  等温氧化过程中由 TGO 非均匀生长和各层之间材料参数不匹配导致的应力演化,采用在当前构形的真实应力(即柯西应力),来描述应力状态。TGO/BC 层  $X$  方向应力,如图 6 所示。

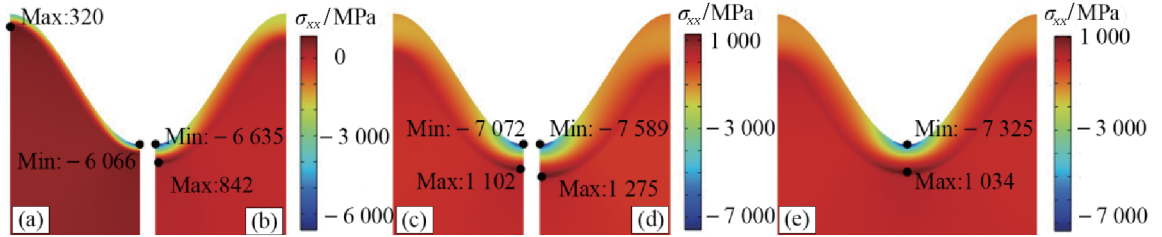


图 6 TGO/BC 层不同氧化时间  $X$  方向应力分布

Fig. 6  $X$ -direction stress distribution in the TGO/BC layer at different oxidation times

(a) 50 h; (b) 300 h; (c) 600 h; (d) 1 000 h; (e) 1 000 h (耦合)。

拉应力集中在 TGO/BC 界面的波峰处;压应力集中在 TC/TGO 界面的波谷处。在不同氧化时间下, $X$  方向的最大压应力总是位于 TGO 层上界面的波谷处,并且氧化  $1\,000\text{ h}$  后最大可达  $-7\,589\text{ MPa}$ 。无论 TGO 层是否平坦,其横向生长变形总会引发应力,因为生长变形会导致面内延伸,而这种延伸会受到 BC 层材料约束。因此,横向生长应变始终是应力产生的关键因素。从 TGO 波谷上界面至下界面过程中,压应力开始减小并转变为拉应力,氧化  $1\,000\text{ h}$  最大拉应力可达  $1\,275\text{ MPa}$ ,位于 TGO/BC 界面处。

如图 7 所示,观察  $X$  方向应力-时间曲线可得到,随着氧化过程的进行,最大拉应力和压应力都在

不断增大。考虑耦合效应时,相比不耦合的情况,最大拉应力减小了  $17.30\%$ ,最大压应力减小了  $3.60\%$ 。这是由于耦合效应减小了  $X$  方向的应变,从而改变了应力的分布情况。

涂层内部的平面应力及 TC/BC 界面韧性的退化是引起 TBC 失效的主要原因。拉应力引发沿 TC/TGO 界面在峰处及附近 TC 层内的裂纹,同时随着热暴露程度的加深,TGO 层的生长导致涂层界面发生应力逐渐增大,进而导致裂纹在非峰处的拉应力集中区开裂。另外,涂层峰区发生界面分层也会促进非峰区产生裂纹。因此, $Y$  方向的应力是导致裂纹萌生和扩展的主要原因。

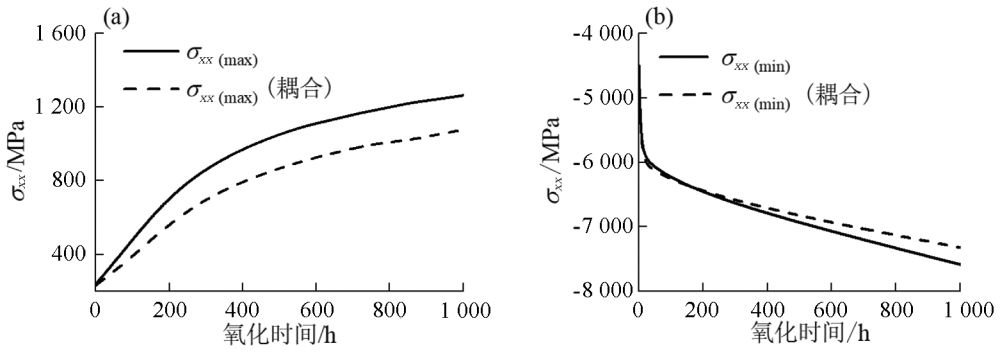


图7 TGO/BC层X方向最大拉应力和压应力随时间变化

Fig. 7 Variation of the maximum X-direction tensile and compressive stresses in the TGO/BC layer

(a)最大拉应力;(b)最大压应力。

如图8所示,为TGO和BC层内的Y方向的柯西应力分布,图中红色部分为拉应力,蓝色为压应力,可以看到拉应力主要分布在TGO/BC界面,压应力主要位于TGO上界面;最大拉应力位于TGO/BC界面的波峰附近,最大压应力集中在TGO上表面的半高宽位置,这与SHEN等<sup>[11]</sup>的研究结果相

符。逐渐增大的拉应力,是引起BC/TGO界面分层的关键因素。如图9所示,考虑多场耦合的情况下,最大压应力为-3 195 MPa,相比于不耦合的情况增加了8.40%,而最大拉应力为1 067 MPa,相比于不耦合的情况减小了12.50%。

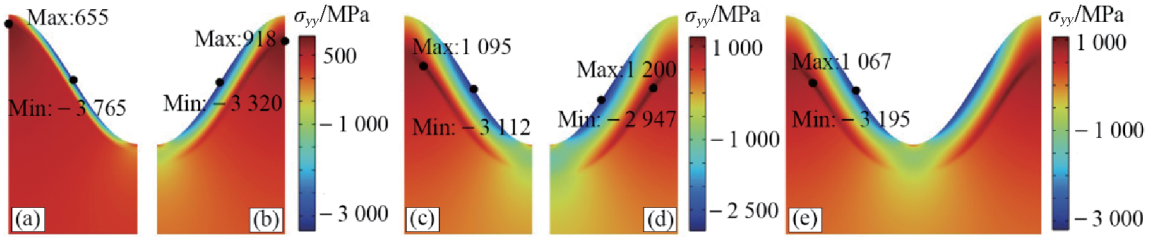


图8 TGO/BC层Y方向柯西应力分布

Fig. 8 Y-direction Cauchy stress distribution in the TGO/BC layer

(a)50 h;(b)300 h;(c)600 h;(d)1 000 h;(e)1 000 h(耦合)。

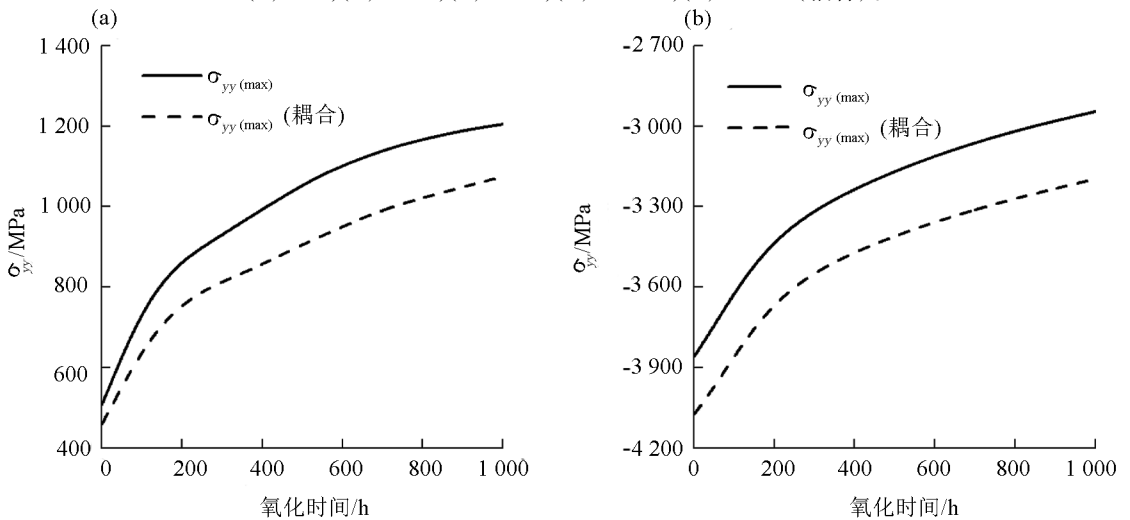


图9 S22方向最大拉应力和压应力随时间的变化关系

Fig. 9 Variation of the maximum tensile and compressive stresses in the S22 direction

(a)最大拉应力;(b)最大压应力。

如图 10 所示,从各层内  $Y$  方向应力分布可以看出, TGO 和 BC 层内的应力水平比 TC 层内高一个数量级,这是因为生长应变主要发生于 BC/TGO 的界面处,并且 TGO 主要成分氧化铝的弹性模量较大。

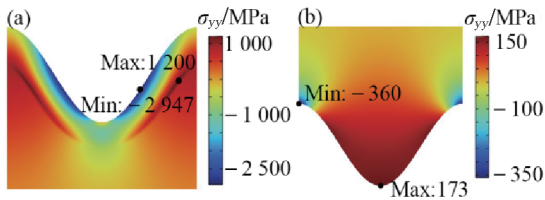


图 10 TBCs 各层  $Y$  方向柯西应力分布

Fig. 10  $Y$ -direction Cauchy stress distribution in various layers of the TBCs

(a) BC + TGO 层; (b) TC 层。

TC 层内, TGO 层的压应力会驱动其自身发生面外变形,从而导致 TC 层波谷区域的拉应力集中与波峰区域压应力集中。拉应力主要在波谷处,最大值为 173 MPa; 压应力集中在波峰处,最大值为 359 MPa, TC 层内大部分区域为拉应力。HU 等<sup>[15]</sup>的研究成果也证实了 TBCs 系统当中  $Y$  方向的柯西应力具有相近的结论。由于 TC 层是脆性材料,开裂强度较低,所以虽然 TC 层内应力小于 TGO 附近区域,但仍有可能在应力集中处开裂导致破坏。

## 4 结论与展望

从大变形理论出发,建立了热障涂层界面氧化的大变形热-化-力耦合生长和破坏的理论模型,采用有限元模拟了热障涂层界面氧化的 TGO 形貌和应力的演化规律,揭示了多场耦合效应导致的应力协助扩散的作用机理,分析了 TGO 生长和应力演化规律。通过研究分析,主要得出以下结论:

在高温服役环境下, TGO 生长动力学符合抛物线规律,并且氧在界面波峰处的扩散速率要大于波谷处,导致 TGO 呈现出非均匀生长,使得界面粗糙度增大。 $X$  方向位移呈现反对称分布,最大位移发生在波峰和波谷之间,进而引发褶皱现象。耦合效应对氧元素扩散起抑制作用,降低了 TGO 生长厚度但提高了生长的非均匀性。热-化-力耦合的机制在于应力通过改变化学势从而影响氧的扩散通量。氧扩散过程中,自由扩散占主导地位,应力对氧扩散起到了抑制作用。化学势是扩散的驱动力,应力对整个体系做功,增加了体系的内能,所以扩散的驱动力

需要克服更高的能垒才能实现原子的迁移。

热障涂层界面氧化的生长应力随氧化时间而增大,在 TGO/BC 界面的波峰附近,主要为拉应力;在 TGO 上表面的波谷处,表现为压应力;在 TC 层内,最大拉应力位于波谷处,最大压应力位于波峰处。耦合效应减缓了 TGO 的生长过程,从而使得涂层内部应力水平总体降低。

研究建立了热障涂层界面氧化大变形的热-化-力耦合理论,偏重于理论研究,实验验证需要在接下来的研究中继续完成,且目前尚缺乏有效的实验手段对耦合效应进行分析,将在未来构建热-化-力耦合实验平台。同时,研究重点关注 TGO 等温生长过程的生长应力,缺乏热循环条件下 TBCs 中热失配应力的分析以及蠕变效应对 TBCs 层间应力的影响,需要在以后的工作中加以完善。

## 参考文献:

- [1] SONG J B, WANG L S, DONG H, et al. Long lifespan thermal barrier coatings overview: materials, manufacturing, failure mechanisms, and multiscale structural design[J]. *Ceramics International*, 2023, 49(1): 1.
- [2] 李卫军, 魏磊, 刘国良. 发动机涡轮叶片热障涂层剥落原因分析[J]. *失效分析与预防*, 2022, 17(1): 41.
- [3] 王炫力, 刘爽, 谢敏, 等. 稀土氧化物掺杂对  $Y_3Al_5O_{12}$  热障涂层材料热膨胀性能的影响[J]. *内蒙古科技大学学报*, 2023, 42(1): 58.
- [4] MIN L, WANG Z, HU X, et al. A chemo-thermo-mechanical coupled phase field framework for failure in thermal barrier coatings[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2023, 411: 116044.
- [5] ZHANG X, ZHONG Z. A coupled theory for chemically active and deformable solids with mass diffusion and heat conduction[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2017, 107: 49.
- [6] WAGNER C. Reaktionstypen bei der oxydation von legierungen[J]. *Zeitschrift Für Elektrochemie, Berichte der Bunsen-Gesellschaft Für Physikalische Chemie*, 1959, 63(7): 772.
- [7] LOEFFEL K, ANAND L. A chemo-thermo-mechanically coupled theory for elastic-viscoplastic deformation, diffusion, and volumetric swelling due to a chemical reaction[J]. *International Journal of Plasticity*, 2011, 27(9): 1409.
- [8] ZHOU Q Q, YANG L, NIE M, et al. A chemothermo-mechanically constitutive theory of high-temperature in-

terfacialoxidation in alloys under deformation[J]. Science China Technological Sciences,2023,66(4):1018.

- [9] HILLE T S, TURTELTAUB S, SUIKER A S J. Oxide growth and damage evolution in thermal barrier coatings [J]. Engineering Fracture Mechanics, 2011, 78 ( 10 ) : 2139.
- [10] LIU W, YU W, SHEN S. Chemomechanical analysis for interfacial reactions between  $\gamma$ -TiAl alloy and glass-ceramic coating in micro/nano scale[J]. Journal of the American Ceramic Society,2018,101(12):5675.
- [11] SHEN Q, LI S Z, YANG L, et al. Coupled mechanical-oxidation modeling during oxidation of thermal barrier coatings [J]. Computational Materials Science, 2018, 154:538.
- [12] LIM L Y, MEGUID S A. Temperature dependent dy-

amic growth of thermally grown oxide in thermal barrier coatings[J]. Materials & Design,2019,164:107543.

- [13] 李沈洲. 基于小变形的热障涂层界面氧化力耦合生长分析[D]. 湘潭:湘潭大学,2017.
- [14] RHINES F N, WOLF J S. The role of oxide microstructure and growth stresses in the high-temperature scaling of nickel[J]. Metallurgical Transactions,1970,1:1701.
- [15] HU Z C, WANG L, ZHUANG M X, et al. Influence of internal oxidation of the bondcoat on the residual stress around the TGO and failure modes of the APS-TBCs: a finite element simulation study [J]. Ceramics International, 2021,47(4):5364.

(责任编辑:祁鑫)

(上接第36页)

- [11] 龚小强. 外源添加物对园林绿化废弃物蚯蚓堆肥影响研究[D]. 北京:北京林业大学,2019.
- [12] GONG X, LI S, CHANG S X, et al. Alkyl polyglycoside and earthworm (*Eisenia fetida*) enhance biodegradation of green waste and its use for growing vegetables [J]. Ecotoxicology and Environmental Safety, 2019, 167:459.
- [13] BELDA R M, MENDOZA-HEMÁNDEZ D, FORMES F. Nutrient-rich compost versus nutrient-poor vermicompost as growth media for ornamental-plant production [J]. Journal of Plant Nutrition and Soil Science, 2013.

- [14] 王峰, 缪丽娟, 张明月, 等. 牛粪矿物混合蚯蚓堆肥中堆制物  $P_b$  和  $C_d$  吸附性能变化[J]. 农业工程学报, 2021,37(6):197.
- [15] 孔令玮, 王孔檀, 麦力文, 等. 不同生物利用度碳源对蚯蚓堆肥影响分析[J]. 中国农业科技导报, 2024,26(7):199.
- [16] 王晋, 雷凯能, 武小燕, 等. 典型稀土矿区土壤微生物碳循环功能基因组组成特征及影响因素研究[J]. 内蒙古科技大学学报, 2024,43(3):205.
- [17] 温欣, 黄显武, 尚海丽. 开采沉陷对地表变形影响的试验研究[J]. 内蒙古科技大学学报, 2022,41(4):329.

(责任编辑:张利萍)