文章编号:1000-0887(2015)04-0404-10

ⓒ 应用数学和力学编委会,ISSN 1000-0887

考虑化学氧化效应时热障涂层氧化物的生长规律*

柴怡君, 林 晨, 李跃明

(机械结构强度与振动国家重点实验室(西安交通大学), 西安 710049)

摘要: 基于考虑氧化效应的 Fick 定律以及 Voigt 均匀性假设的氧化区两相材料的本构关系,开发了 ABAQUS 用户单元子程序.并基于重构的可反映热障涂层界面真实形貌的二维有限元模型,计算分析了氧化效应对 TGO 生长规律的影响,以及 TC-TGO 和 BC-TGO 界面的应力场分布.结果表明,未考虑氧化效应仅能获得 TGO 均匀生长的模拟结果,而考虑氧化效应得到了 TGO 的非均匀生长结果; 且考虑氧化效应相对于不考虑氧化效应时的界面应力处于较高水平.此外, 探索了氧化效应大小对 TGO 生长的影响规律, 发现氧化效应大则能促进 TGO 的不规则生长, 氧化效应小则相反.

关 键 词: 热障涂层; 热生长氧化物; 扩散-氧化模型; 氧化效应

中图分类号: O344 **文献标志码:** A

doi: 10.3879/j.issn.1000-0887.2015.04.008

引 言

热障涂层是一种耐高温、防氧化、耐腐蚀的涂层,广泛应用于燃气轮机热端金属部件表面,对提高燃气轮机的工作温度起到重要作用[1-3].热障涂层主要由陶瓷层(top coat,TC)和粘结层(bond coat,BC)构成[4].其中 BC 能有效地阻止金属基体被氧化和腐蚀,同时也能提高 TC 和金属基体的粘结性;TC 具有比金属基体低的热传导系数,是涂层耐高温的主要结构.热结构承受力学载荷作用,其材料高温力学性能变得非常关键,其中高温氧化行为受到特别关注[5].燃气轮机服役中,TC 和 BC 之间会形成一层很薄且致密的热生长氧化物(thermal grown oxide, TGO),对于热障涂层(thermal barrier coating, TBC)的性能和寿命有着重要的影响,比如提高了热障涂层的耐高温腐蚀性能,但由于 TGO 层较薄,具有易产生应力集中、开裂等特点,在服役中容易造成涂层的失效[6-7].

TBC 失效的形式一般有热生长氧化物引起的失效和热应力失配引起的失效[8].影响 TBCs 寿命的因素有很多,从涂层失效的诱因上可分为应力、烧结、氧化、腐蚀等所致[9].TGO 作为导

* **收稿日期:** 2014-09-24; **修订日期:** 2015-01-06

基金项目: 国家重点基础研究发展计划(973 计划)(2013CB035704); 国家自然科学基金(11472206)

作者简介: 柴怡君(1991—),女,河南新乡人,硕士生(E-mail: cyj1991@ stu.xjtu.edu.cn);
李跃明(1961—),男,江苏无锡人,教授,博士生导师(通讯作者. E-mail: liyueming@ mail.xjtu.edu.cn).

致涂层失效的重要原因,是热障涂层应用中急需解决的问题之一.

基于上述,本文主要开展了如下研究工作:基于电子显微镜(scanning electron microscope, SEM)切片图像信息的模型重构方法[10],重构了可反映热障涂层界面真实形貌的二维重构有限元模型;基于考虑氧化效应的 Fick 定律及氧化相变区的等应变本构关系开发了用户单元子程序,并进行数值模拟,得到了 TGO 的生长规律以及 TC-TGO 界面和 BC-TGO 界面的应力场;探索了氧化效应大小对 TGO 生长的影响.结果表明,不考虑氧化效应 TGO 呈现均匀生长,而考虑氧化效应时 TGO 呈现出非均匀生长;考虑氧化效应相对于不考虑氧化效应时的界面应力处于较高水平;氧化效应大则促进 TGO 的生长,且 TC-TGO 界面上任意位置点 TGO 的厚度变化均不相同.

1　扩散-氧化反应模型

Fick 定律是描述气体扩散现象的宏观规律,可表示为

$$\dot{c}_{O_2} = D\nabla c_{O_2},$$

其中,c_{O_2} 为氧气浓度,D 为氧气的扩散系数.对于热障涂层,在氧化阶段 TGO 的生成需要不断消耗氧气,造成氧气浓度的不断变化.为考虑此效应,借用碱硅酸反应劣化的扩散-反应的概念[11],文献[12]对 Fick 定律进行了修改,计入考虑氧化效应的氧化项 $S(c_{O_2})$,得到

$$\dot{c}_{O_2} = D\nabla c_{O_2} + S(c_{O_2}), \tag{1}$$

其中 $S(c_{O_2}) = -A\dot{\xi}$ 为氧化项,$\dot{\xi}$ 为氧化体积分数 ξ 随时间的变化率 $\dot{\xi} = \gamma(1-\xi)c_{O_2}$.

另外,考虑到氧化过程中的材料相变,假设氧化区材料为金属材料(BC)和氧化相(TGO)的两相材料,基于 Voigt 均匀性假设可得到氧化区两相材料的应力应变关系[13]:

$$\boldsymbol{\sigma} = (1-\xi)\boldsymbol{D}_{BC} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{BC}^{th} - \boldsymbol{\varepsilon}_{BC}^{p}) + \xi\boldsymbol{D}_{TGO} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_{TGO}^{th} - \boldsymbol{\varepsilon}_{TGO}^{p} - \boldsymbol{\varepsilon}_{TGO}^{g}), \tag{2}$$

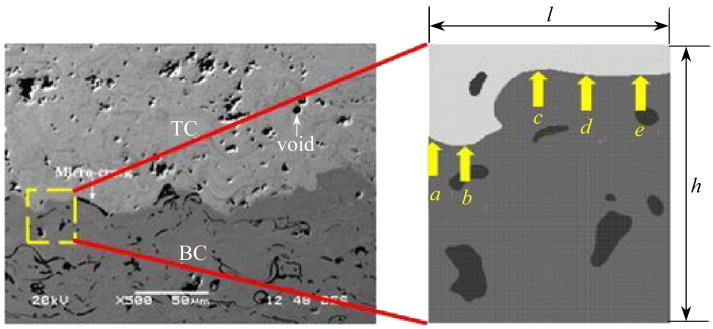
其中 $\boldsymbol{D}_{BC}$ 为 BC 相的弹性矩阵,$\boldsymbol{D}_{TGO}$ 为 TGO 相的弹性矩阵;$\boldsymbol{\varepsilon}_{BC}^{th}$,$\boldsymbol{\varepsilon}_{BC}^{p}$ 分别为 BC 相的热应变和塑性应变;$\boldsymbol{\varepsilon}_{TGO}^{th}$,$\boldsymbol{\varepsilon}_{TGO}^{p}$ 分别为 TGO 相的热应变、塑性应变.$\boldsymbol{\varepsilon}_{TGO}^{g}$ 是由于 BC 相的氧化反应生成 TGO 而产生的体积应变,可通过 Pilling-Bedworth 比率计算获得[14].

离散式(1)和(2),基于 ABAQUS 开发了用户单元子程序,结合边界条件,可以计算得到热障涂层中 TGO 的生长规律以及应力分布情况.

2　基于 SEM 二维图像信息的有限元网格重构

热障涂层的微观结构在氧化失效过程中起了重要的作用.一般建立的 TC-TGO 和 BC-TGO 界面模式多为标准正弦形状的有限元网格模型且得到了广泛应用.这种界面模式理想化的模型在研究反映 TBCs 失效的规律中发挥了重要作用,但现实的 TBCs 都含有微孔隙、微裂纹等缺陷,采用理想化模型对于研究 TBCs 真实的失效机理存在一定局限性.为此,本文采用一种基于 SEM 图像的重构方法[10],它通过改变数码图片中的灰度阈值来定义不同的材料属性,进而与 TBCs 的结构相对应,构建 TBCs 的有限元模型.采用该方法,二维图像中任何和像素大小相等的微结构特征都可以被完整反映在重构的模型中.

采用 SEM 图像重构方法,对 TBCs 模型进行有限元模型重构,如图 1(a)所示的图像信息,取计算模型的尺寸($l \times h$)为 25 μm×28 μm;形成结点数 66 516,单元数 66 000 的网格模型,如图 1(b)所示.



(a) 热障涂层显微 CT 照片　　(b) 热障涂层二维重构有限元模型

(a) The micro-CT picture of TBC　　(b) The SEM image-based reconstruction model

图 1　基于图像信息重构的网格模型

Fig. 1　The image-based reconstruction model

图 1 所示重构的有限元网格模型可真实反映 TBCs 形貌的微观构型,由此可获得较为真实的数值计算结果.

3　数值计算条件

3.1　边界条件

本文的数值计算采用如图 2 所示的边界条件.考虑到 TBCs 模型的对称性,对右边界在 x_1 方向进行位移约束.由于基体的尺寸远大于 TBCs 尺寸,故服役过程中 TBCs 的变形对基体的影响可忽略不计,因此在下边界约束了 x_2 方向的位移.上边界添加了高温和等氧气浓度条件,TBCs 在 120 s 内由室温 25 ℃升至 1 225 ℃高温,并在此高温下服役 50~500 h,最终在 120 s 内冷却至室温 25 ℃;在高温作用的 50~500 h 内,TBCs 上表面的氧气浓度值始终相等,根据文献[15]中氧气浓度 c_R 与局部氧气压力 p_{O_2},将 c_R 定为 2.5 mol/m^3.

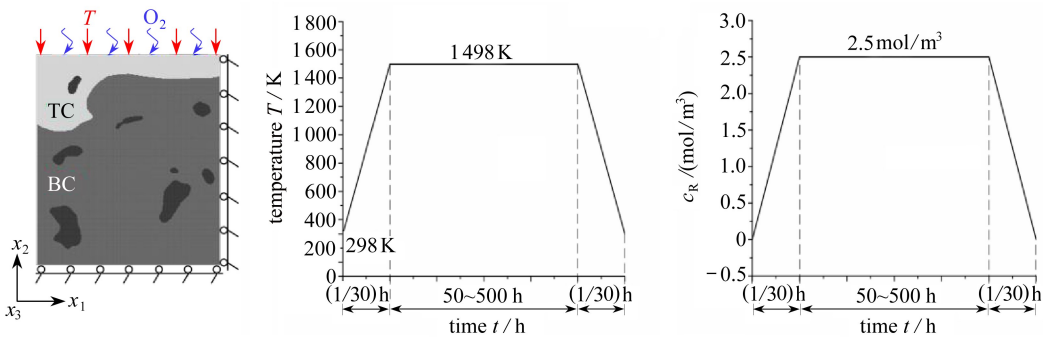


图 2　数值分析边界条件与载荷条件

Fig. 2　The geometry boundary and load conditions

3.2　计算参数

由于冷却时间相对于高温作用时间很短,假设扩散-氧化反应只发生在高温阶段.TBCs 结构中的微孔隙、微裂纹的氧气扩散系数远远大于 BC 和 TGO 的氧气扩散系数,可把它视为无穷大.根据文献[16],假定 BC 和 TGO 的氧气扩散系数相等,即 $D_{BC} = D_{TGO}$.式(1)中的常数 γ 可根据实验观察 TGO 生长过程通过一系列计算得到[17].本文所使用的各个参数取值如表 1、2 所示.

表 1　不同温度下的力学参数

Table 1　The temperature-dependent mechanics parameters

T/℃	TC[14]			BC[14]				TGO[14]				substrate[16]
	E/GPa	ν	$10^{-6}\alpha$ /℃$^{-1}$	E/GPa	ν	$10^{-6}\alpha$ /℃$^{-1}$	σ_y/MPa	E/GPa	ν	$10^{-6}\alpha$ /℃$^{-1}$	σ_y[18] /MPa	$10^{-6}\alpha$/℃$^{-1}$
20	48	0.1	9.7	200	0.3	12.3	426	400	0.23	8	10	12
200	47	0.1	9.8	190	0.3	13.2	412	390	0.23	8.2	10	–
400	44	0.1	9.9	175	0.31	14.2	396	380	0.24	8.4	10	–
600	40	0.11	9.9	160	0.31	15.2	362	370	0.24	8.7	10	–
800	34	0.11	10	145	0.32	16.3	284	355	0.25	9	10	16
1 000	26	0.12	10.1	120	0.33	17.2	202	325	0.25	9.3	1	–
1 100	22	0.12	10.1	110	0.33	17.7	114	330	0.25	9.5	1	–

表中，E 分别为 TC 相、BC 相、TGO 相的弹性模量；同理，ν 为 Poisson(泊松)比，α 为热膨胀系数.

表 2　扩散氧化参数

Table 2　The diffusion and oxidation parameters

	parameter	value
oxygen diffusion in TC	D_{TC}/(m^2/s)	∞
oxygen diffusion in micro-defects	$D_{\text{micro-defects}}$/(m^2/s)	∞
oxygen diffusion in BC[16]	D_{BC}/(m^2/s)	3.5×10^{-14}
oxygen diffusion in TGO[16]	D_{TGO}/(m^2/s)	3.5×10^{-14}
reference value for oxidation reaction	γ/(m^3/(mol·s))	1.25×10^{-4}
	A/(mol/m^3)[19]	0.24×10^{6}

4　计算结果与讨论

在扩散-氧化反应模型式(1)中，$A\dot{\xi}$ 代表氧化效应.为考察氧化效应的影响程度，本文主要进行了以下两方面数值计算：

1) 考虑(及不考虑)氧化效应，计算获得 TGO 生长的规律、以及热障涂层中 TC-TGO 界面和 BC-TGO 界面的应力场.

2) 通过改变氧化项的系数 A，考察热障涂层中 TC-TGO 界面的特定位置点处氧化物热生长变化，从而获得氧化效应的大小对 TGO 生长的影响规律.

如图 1 所示的 TBC 界面形貌模型中，选定 TC-TGO 界面上的 5 个位置点：a，b，c，d，e 分别取系数 A 为 0.16，0.2，0.24，0.4，0.6 和 0.8，计算获得不同时间段内各点 TGO 厚度的变化.

4.1　基于扩散-氧化模型的数值模拟结果

4.1.1　TGO 的生长规律

1) 不考虑氧化效应 TGO 的生长规律

取式(1)中的系数 $A=0$，即为不考虑氧化效应的情形.为模拟发生氧化生长的过程，引入了一个氧气浓度的临界值 c_0，认为氧气浓度值大于或等于临界值时相应位置的 BC 相即被氧化.为获得此临界值，以不同的临界浓度值试算 TGO 生长的厚度，当临界浓度 $c_0=0.002$ 时，计算的结果与文献[20]中的实验数据相吻合，如图 3 所示.

因此，采用 $c_0=0.002$，计算不考虑氧化效应时高温下 TBC 中 TGO 的生长，结果如图 4(a)

所示.可以看到,在氧化过程中 TGO 呈现均匀生长的现象.

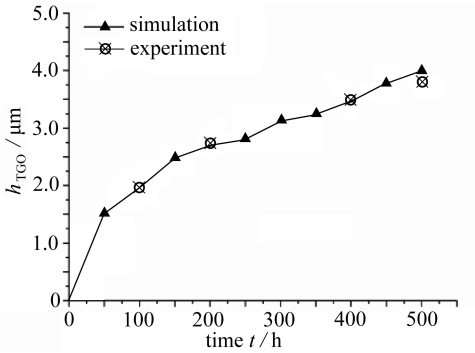
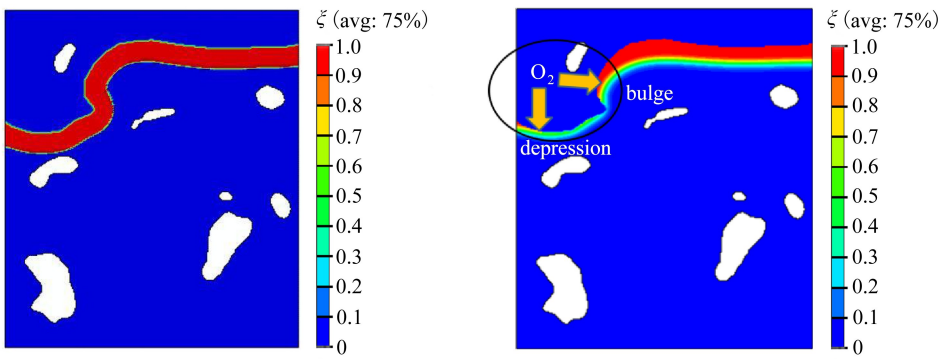


图 3 高温氧化过程中有限元数值模拟和实验所得 TGO 厚度随时间变化的比较

Fig. 3 Comparison of the oxide thickness vs. oxidation time between experimental data and FE simulation results



(a) 不考虑氧化效应的氧化过程 (b) 考虑氧化效应的的氧化过程

(a) The oxidation process without oxidation effect (b) The oxidation process with oxidation diffusion

图 4 TBC 氧化过程模拟

Fig. 4 The simulation of oxidation process in the thermal barrier coating

2) 考虑氧化效应时 TGO 的生长规律

根据式(1)及(2),计算获得到了考虑氧化效应时 TGO 的生长云图,如图 4(b)所示.可以看到:

① TGO 呈现非均匀生长现象,这是由于 TC 内氧气的梯度分布引起界面局部氧气浓度不同,从而导致 TGO 不均匀生长,浓度高的地方氧化速率快从而氧化物生长快, 浓度低则相反[19].

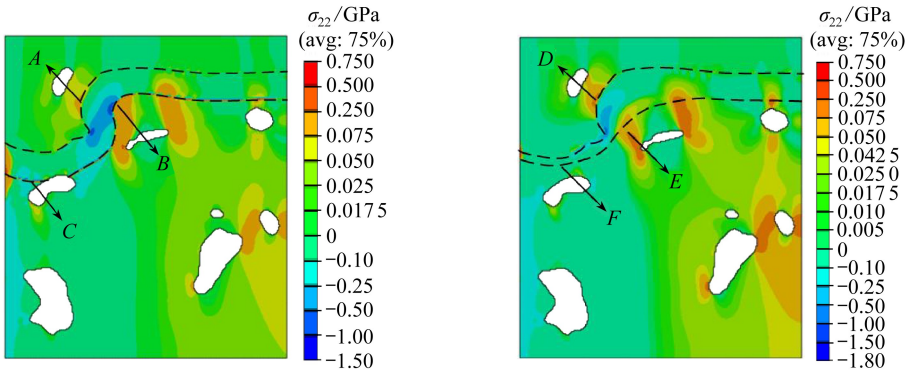
② 图 4(b)中圈出部分的凹陷处氧化层厚度较小,而侧面凸起处的氧化层厚度较大.这是由于在 TC-TGO 表面,氧气的浓度并不相同,在黑框内氧气可与凹陷处和侧面突起处的界面材料同时发生氧化反应,因此凹陷处可被用于氧化反应的氧气量减少了,从而在凹陷处的氧化物生长较慢,即 TGO 的厚度较薄.

4.1.2 TC-TGO 界面和 BC-TGO 界面的应力场

由于 TC-TGO 和 BC-TGO 界面上应力是产生裂纹、并导致热障涂层失效的原因之一,因此这里考察两个界面上沿 x_2 方向的 σ_{22} 应力分布.

1) 高温(1 225 ℃)氧化 200 h 时,热障涂层应力场分布

高温氧化过程中,TGO 的形成及其相变变形是导致界面应力产生的主要原因.不考虑与考虑氧化效应的应力分布分别如图 5(a)、5(b)所示.

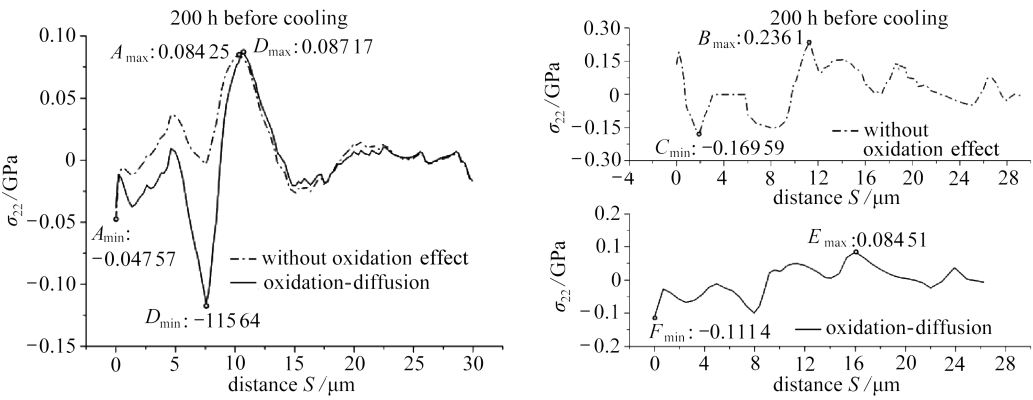


（a）不考虑氧化效应　　（b）考虑氧化效应

（a）Without oxidation effect　　（b）With oxidation diffusion

图 5　1 225 ℃时 σ_{22} 分布云图

Fig. 5　Contours plots of stress component σ_{22} along axis x_2 at the temperature of 1 225 ℃



（a）TC-TGO 界面 σ_{22} 应力　　（b）BC-TGO 界面 σ_{22} 应力

（a）Stress σ_{22} along the TC-TGO interface　　（b）Stress σ_{22} along the BC-TGO interface

图 6　1 225 ℃时界面的 σ_{22} 应力曲线

Fig. 6　Stress σ_{22} along the interface at the temperature of 1 225 ℃

① TC-TGO 界面的突起 A，D 处受拉应力.TC-TGO 界面右端较为平滑，使得 TGO 在此位置不会产生明显的向上隆起或向下凹陷，从而不考虑及考虑氧化效应时，此位置 TC-TGO 界面应力水平均维持在一个较低值.

如图 5(b)所示，考虑氧化效应时，由于 TGO 在下凹 F 处较薄，在侧凸起 D 处和平滑处较厚，这就使得下凹处产生更明显凹陷，从而产生较大的压应力.

而由显示界面应力值的图 6(a)可见，1 225 ℃，不考虑氧化效应时 TC-TGO 界面（A 处）最大拉应力值为 84.25 MPa；考虑氧化效应时（D 处）最大拉应力值为 87.17 MPa.

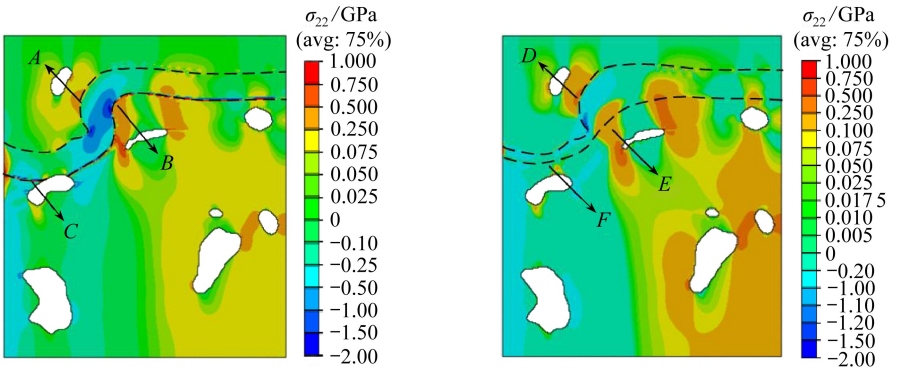
② BC-TGO 界面的突起 B，E 处受拉应力.不考虑氧化效应时，TGO 呈现均匀生长（如图 4(a)）；考虑氧化效应时，TGO 呈现非均匀生长（如图 4(b)）.不考虑氧化效应时，BC-TGO 界面起伏较大，在肩部凸起 B 处拉拽 BC 层材料，产生较大的拉应力；考虑氧化效应时，BC-TGO 界面相对平缓，在界面 E 处产生较小的拉应力.

而由图 6(b)可见，1 225 ℃，不考虑氧化效应时，BC-TGO 界面（B 处）最大拉应力值为 236 MPa；考虑氧化效应时（E 处）最大拉应力值为 84.51 MPa.

BC-TGO 界面的下凹处 C,F 受压应力.TGO 对其下方的 BC 造成挤压并拉拽其上方的 TC,因此相应的 BC-TGO 处受压,而 TC-TGO 处受拉.

从图 6(b)可见,1 225 ℃,不考虑氧化效应时 BC-TGO 界面(C 处)最大压应力值为 169.6 MPa;考虑氧化效应时(F 处)最大压应力值为 111.4 MPa.

2)高温氧化 200 h 后的冷却阶段(25 ℃),热障涂层的应力场分布

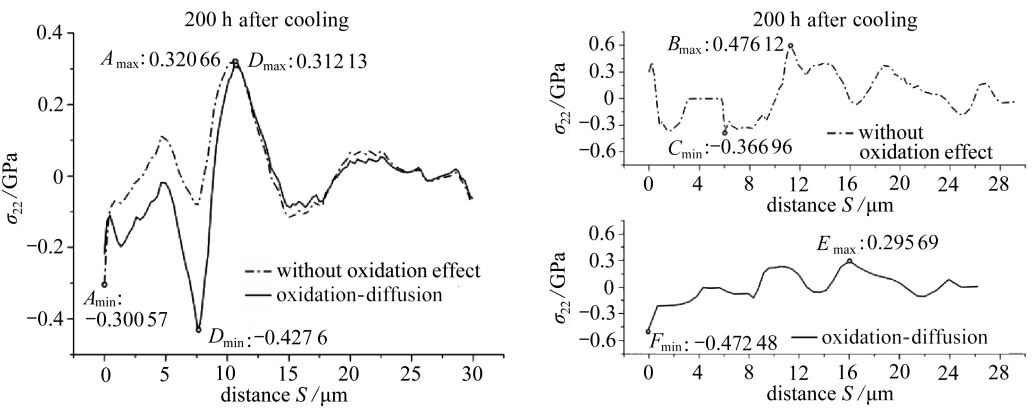


(a) 不考虑氧化效应　　(b) 考虑氧化效应

(a) Without oxidation effect　　(b) With oxidation diffusion

图 7　25 ℃时 σ_{22} 分布云图

Fig. 7　Contours plots of stress component σ_{22} along axis x_2 at the temperature of 25 ℃



(a) TC-TGO 界面 σ_{22} 应力　　(b) BC-TGO 界面 σ_{22} 应力

(a) Stress σ_{22} along the TC-TGO interface　　(b) Stress σ_{22} along the BC-TGO interface

图 8　25 ℃时界面的 σ_{22} 应力曲线

Fig. 8　Stress σ_{22} along the interface at the temperature of 25 ℃

冷却阶段时,考虑和不考虑氧化效应的应力分布形式与高温时的应力分布形式基本一致,但各点处的拉压应力值明显升高,这主要是由于各层材料间的热膨胀失配产生的应力加剧了 TGO 的变形所致.

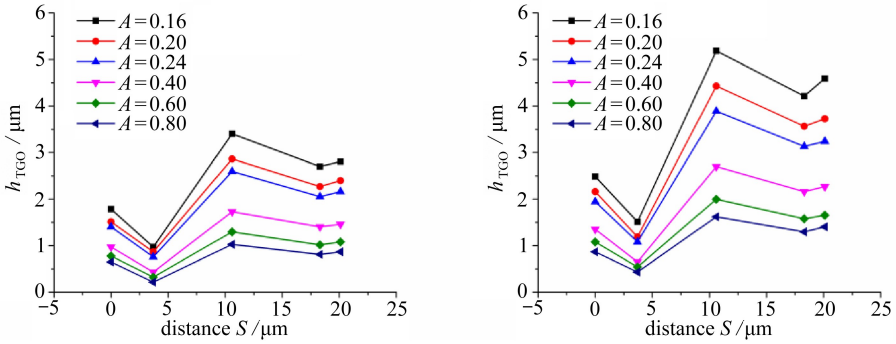
冷却状态下,不考虑及考虑氧化效应时的应力分布分别如图 7(a)、7(b)所示.

① 由图 8(a)可见,25 ℃时,不考虑氧化效应时 TC-TGO 界面(A 处)最大拉应力值为 320.66 MPa;考虑氧化效应时(D 处)最大拉应力值为 312.13 MPa.

② 由图 8(b)可见,25 ℃时,不考虑氧化效应时 BC-TGO 界面(B 处)最大拉应力值为 476.12 MPa;考虑氧化效应时(E 处)最大拉应力值为 295.69 MPa.

4.2　氧化效应的大小对 TGO 生长的影响数值模拟结果

对式(1)中的氧化项 $A\dot{\xi}$ 的系数 A 取值 0.16, 0.2, 0.24, 0.4, 0.6 和 0.8,分别计算不同时间段内图 1 所示 5 个点的氧化物厚度的变化如图 9 所示.



(a) 100 h　　(b) 200 h

图 9　不同 A 值下 TC-TGO 界面上各位置点的 TGO 厚度变化曲线

Fig. 9　The thickness curves of TGO at different points on the TC-TGO interface for different values of A

从图 9 中可见:

① 在一定的高温阶段下,对于固定位置点(例如 a 点),随着 A 值的增大,该点的 TGO 厚度逐渐减小.产生该现象的原因是 A 代表着单位体积的金属被完全氧化所消耗的氧气摩尔数, A 值越大表示金属被氧化需要的氧气量越多,即相同氧气量时产生的氧化物少;反之 A 值越小则产生的氧化物多.

② 对于固定的 A 值(例如 A = 0.16),图 9 所示 5 个点中位置点 c 的 TGO 厚度最大,位置点 b 的 TGO 厚度最小.此曲线较形象地反映了图 4(b)中 TGO 的生长情况.

③ 在 A 的变化量一定的情况下(例如 A 值由 0.16 变为 0.2),图 9 中所示 5 个位置点 TGO 厚度的变化随着 A 值的变化呈现出不均匀性,即每个点的 TGO 厚度变化量均不相等.

综上所述,氧化效应的大小对 TGO 的生长有着重要影响;氧化效应大反映 TGO 的不规则生长.

5　结　　论

本文首先基于电子显微镜切片图像信息的模型重构方法, 重构了反映热障涂层界面真实形貌的二维有限元模型.随后开发了基于考虑氧化效应的 Fick 定律和 Voigt 均匀性假设的氧化区两相材料本构关系的用户单元子程序, 数值计算了氧化效应对 TGO 生长的影响.结果表明:

1) 不考虑氧化效应时预测的 TGO 呈现均匀生长,而考虑氧化扩散时 TGO 呈现出非均匀生长的现象.

2) 考虑氧化效应相对于不考虑氧化效应时的界面应力处于较高水平.

3) 氧化效应大则促进 TGO 的生长,且 TC-TGO 界面上任意位置点 TGO 的厚度变化均不相同.

参考文献(References):

[1]　Hille T S, Turteltaub S, Suiker A S J. Oxide grown and damage evolution in thermal barrier coatings[J]. *Engineering Fracture Mechanics*, 2011, **78**(10): 2139-2152.

[2]　Clarke D R, Oechsner M, Padture N P. Thermal barrier coatings for more efficient gas-turbine

engines[J]. *Materials Research Society*, 2012, **37**(10): 891-898.

[3] Belle W, Marijnissen G, Van Lieshout A. The evolution of thermal barrier coatings-status and upcoming solutions for today's key issues[J]. *Surface and Coatings Technology*, 1999, **120**: 61-67.

[4] Miller R A. Current status of thermal barrier coatings—an overview[J]. *Surface and Coatings Technology*, 1987, **30**(1): 1-11.

[5] 杨帆, 刘彬, 方岱宁. 基于相场方法的铁基合金高温氧化与生长应力分析[J]. 应用数学和力学, 2011, **32**(6): 710-717.(YANG Fan, LIU Bin, FANG Dai-ning. Analysis on high-temperature oxidation and the growth stress of iron-based alloy using phase field method[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2011, **32**(6): 710-717.(in Chinese))

[6] Karlsson A M, Hutchinson J W, Evans A G. A fundamental model of cyclic instabilities in thermal barrier systems[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2002, **50**(8): 1565-1589.

[7] 黄霞, 丁军, 曾祥国. 热障涂层系统中 TGO 应力生成的数值模拟[J]. 机械设计与制造, 2007(12): 199.(HUANG Xia, DING Jun, ZENG Xiang-guo. Numerical simulation of stress generated in TGO in thermal barrier systems[J]. *Machinery Design & Manufacture*, 2007(12): 199.(in Chinese))

[8] 华佳捷, 张丽鹏, 刘紫薇, 王墉哲, 林初城, 曾毅, 郑学斌. 热障涂层失效机理研究进展[J]. 无机材料学报, 2012, **27**(7): 680-686.(HUA Jia-jie, ZHANG Li-peng, LIU Zi-wei, WANG Yong-zhe, LIN Chu-cheng, ZENG Yi, ZHENG Xue-bin. Progress of research on the failure mechanism of thermal barrier coatings[J]. *Journal of Inorganic Materials*, 2012, **27**(7): 680-686.(in Chinese))

[9] 韩萌, 黄继华, 陈树海. 热障涂层应力与失效机理若干问题的研究进展与评述[J]. 航空材料学报, 2013, **33**(5): 83-98.(HAN Meng, HUANG Ji-hua, CHEN Shu-hai. Research progress and review on key problems of stress and failure mechanism of thermal barrier coating[J]. *Journal of Aeronautical Materials*, 2013, **33**(5): 83-98.(in Chinese))

[10] HUANG Ming, LI Yue-ming. X-ray tomography image-based reconstruction of microstructural finite element mesh models for heterogeneous materials[J]. *Computational Materials Science*, 2013, **67**: 63-72.

[11] Ulm F J, Coussy O, Li K F, Larive C. Thermal-chemo-mechanics of ASR-expansion in concrete structures[J]. *Journal of Engineering Mechanics-ASCE*, 2000, **126**(3): 233-242.

[12] 林晨, 黄明, 李跃明. 考虑微观真实结构特征的热障涂层系统化学-热-力学三场耦合失效机理研究[C]//CSTAM2013-A31-1949, 中国力学大会-2013, 西安, 2013.(LIN Chen, HUANG Ming, LI Yue-ming. The research on the failure mechanisms under chemo-thermal-mechanical coupled affect in thermal barrier coatings based on the real microstructures features[C]//CSTAM2013-A31-1949, *Chinese Conference of Theoretical and Applied Mechanics* -2013, Xi'an, 2013.(in Chinese))

[13] Dormieux L, Kondo D, Ulm F J. *Microporomechaines*[M]. John Wiley & Sons, 2006.

[14] Busso E P, Qian Z Q, Taylor M P, Evans H E. The influence of bondcoat and topcoat mechanical properties on stress development in thermal barrier coating systems[J]. *Acta Materialia*, 2009, **57**(8): 2349-2361.

[15] Loeffel K, Anand L, Gasem Z M. On modeling the oxidation of high-temperature alloys[J]. *Acta Materialia*, 2013, **61**(2): 399-424.

[16] Rösler J, Böker M, Volgmann M. Stress state and failure mechanisms of thermal barrier coat-

ings: role of creep in thermal grown oxide[J]. *Acta Materialia*, 2001, **49**(18): 3659-3670.

[17] Martena M, Botto D, Fino P, Sabbadini S, Gola M M, Badini C. Modeling of TBC system failure: stress distribution as a function of TGO thickness and thermal expansion mismatch[J]. *Engineering Failure Analysis*, 2006, **13**(3): 409-426.

[18] Evans A G, Mumm D R, Hutchinson J W, Meier G H, Pettit F S. Mechanisms controlling the durability of thermal barrier coatings[J]. *Progress in Materials Science*, 2001, **46**(5): 505-553.

[19] Evans H E. Oxidation failure of TBC systems: an assessment of mechanisms[J]. *Surface and Coatings Technology*, 2011, **206**(7): 1512-1521.

[20] Busso E P, Lin J, Sakurai S. A mechanistic study of oxidation-induced degradation in a plasma-sprayed thermal barrier coating system—part I: model formulation[J]. *Acta Materilia*, 2001, **49**(9): 1515-1528.

Growth Trend of Thermal Grown Oxide in TBCs Under Chemical Oxidation Effect

CHAI Yi-jun, LIN Chen, LI Yue-ming

(*State Key Laboratory for Strength and Vibration of Mechanical Structures (Xi'an Jiaotong University)*, *Xi'an* 710049, *P.R.China*)

Abstract: A user element subroutine of ABAQUS was developed, based on the Fick's law involving the oxidation effect and the constitutive relationship of the 2-phase material in the oxidation zones according to the Voigt model. With a 2D element model which was constructed to reflect the real interface morphology of the thermal barrier coatings, numerical analysis of the oxidation effect on the growth trend of thermal grown oxide (TGO) and the stresses along the top coat (TC)-TGO and the bond coat (BC)-TGO interfaces was made. The numerical results show that, without the oxidation effect only uniform growth of TGO is predicted, while with the oxidation effect non-uniform growth of TGO is achieved. The stresses along the TC-TGO and BC-TGO interfaces with the oxidation effect are at higher levels compared to those without the oxidation effect. Moreover, the greater the oxidation effect is, the more irregular the growth of TGO becomes.

Key words: thermal barrier coating; thermal grown oxide; diffusion-oxidation reaction model; oxidation effect

Foundation item: The National Basic Research Program of China (973 Program) (2013CB035704); The National Natural Science Foundation of China (11472206)