

热障涂层相关金属/陶瓷界面失效的原子尺度研究

梁立红^{3*}, 付雪琼

中科院力学所, 北京市北四环西路 15 号, 100190

*Email: lianglh@lnm.imech.ac.cn

热障涂层体系层裂往往发生在热生长氧化铝层与镍基合金粘结层之间, 为了理解这一金属/陶瓷界面失效的物理机制, 人们针对相关金属/陶瓷界面的断裂问题开展了大量原子尺度模拟研究[1-2]。针对Ni/Al₂O₃界面的第一原理计算显示, 一定量的杂质稀土钪元素可提高该界面的黏附性能及分离功[3]。但第一原理方法受计算规模所限, 不易刻划较大尺度界面的失效行为。分子动力学方法是一种选择, 其中界面势函数是一难点, 对系列金属/氧化镁(氧化铝), 经第一原理反演得到的对势参数已被证明可以有效刻划界面黏附性能[4-5]。因此本工作基于对势针对典型的Ag/MgO和Ni/Al₂O₃的界面失效开展了系列原子尺度研究。分子动力学模拟结果发现金属/陶瓷界面剪切本构呈周期准脆行为, 剪切一个周期内界面剪应力逐渐增加达到剪切强度值后突然下降, 界面剪切位移由之前缓慢连续增加突跳至下一个平衡位置, 呈阶越形式, 理想界面剪切是原子断键机制; 对含有位错的缺陷界面, 界面强度和周期位移都减小, 界面位移从理想界面的阶越形式变得相对连续化, 界面剪切是位错滑移主导。对理想界面拉伸情况, 随厚度增加断裂灾变特征变得显著; 含位错界面的强度也比理想界面降低, 灾变特征弱化。通过分析相关的能量机制, 揭示了微观界面失效行为的缺陷和厚度效应; 结合原子结合能和位错滑移力的温度效应理论分析, 以期理解宏观高温界面失效机制。

关键词: 界面强度; 厚度效应; 位错影响

参考文献

- [1] Zhang, X.; Zhang, B.; Mu, Y. et al. *Acta Mater.* **2017**, **138**: 224.
- [2] You, X. M.; Liang, L. H.; Y. Wei. *Comp. Mater. Sci.* **2018**, **142**: 277.
- [3] Smith, J. R.; Jiang, Y.; Evans A. G. *Int. J. Mat. Res.* **2007**, **98**: 12.
- [4] Long, Y.; Chen N. X. *Surf. Sci.* **2008**, **602**: 46.
- [5] Long, Y.; Chen N. X. *J. Phys.: Condens. Matter.* **2009**, **21**: 315003.

³ 感谢国家自然科学基金(项目号: 91860102,11672296)的资助。