

# 新型热障涂层用陶瓷材料及涂层性能计算机数值模拟研究进展

于海鹏<sup>1</sup>, 冯燕<sup>2</sup>, 张红松<sup>3</sup>

(1.河南工程学院 计算机学院, 郑州 451191; 2.郑州铁路职业技术学院 电气工程系, 郑州 450052;  
3.河南工程学院 机械工程学院, 郑州 450007)

**摘 要:** 随着先进涡轮发动机性能的进一步提升, 寻求低热导率、高热膨胀系数的新型陶瓷材料已经成为热障涂层领域的研究热点。计算机数值模拟在新型陶瓷及其涂层性能研究方面发挥了重要作用。综述了新型热障涂层陶瓷材料相结构、热物理性能、力学性能和对应涂层隔热性能、涂层有效热导率及涂层热应力等几个方面国内外计算机数值模拟研究成果, 并指出了以上几个方面计算机数值计算研究存在的不足。未来材料物理性能计算应当多研究元素掺杂及新材料相结构随温度和压力的变化关系, 开发新的数学模型提高热导率、热膨胀系数及各种力学性能参数的计算精度。涂层的隔热性能和有效热导率方面应当进一步系统化, 将各种涂层结构、涂层显微组织、材料组成及导热方式的影响考虑在内, 开发新的计算方法并提高计算精度; 涂层的冲击和残余热应力计算中未引入基体条件(材质、尺寸、粗糙度、温度)、涂层结构、界面形貌、涂层缺陷、单层厚度、服役环境等方面的影响, 并应注重与实验结果进行对比。

**关键词:** 热障涂层; 新型陶瓷材料; 热物理性能; 热应力

**中图分类号:** TG174.442 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-3660(2016)09-0056-09

**DOI:** 10.16490/j.cnki.issn.1001-3660.2016.09.009

## Research Progress of Computer Simulation in New Ceramics for Thermal Barrier Coatings and Coating Properties

YU Hai-peng<sup>1</sup>, FENG Yan<sup>2</sup>, ZHANG Hong-song<sup>3</sup>

(1.School of Computer Engineering, Henan Institute of Engineering, Zhengzhou 451191, China; 2.Department of Electrical Engineering, Zhengzhou Railway Vocational & Technical College, Zhengzhou 450052, China; 3.School of Mechanical Engineering, Henan Institute of Engineering, Zhengzhou 450007, China)

收稿日期: 2016-01-13; 修订日期: 2016-02-13

Received: 2016-01-13; Revised: 2016-02-13

基金项目: 国家自然科学基金(U1304512); 河南省高校科技创新人才支持计划项目(13HASTIT018); 河南省科技攻关计划项目(132102210142); 河南省博士后科研资助项目(2014069)

**Fund:** Supported by State Nature Science Foundation(U1304512), Program for Science and Technology Innovation Talents in Universities of Henan Province(13HASTIT018), Key Project in Science and Technology of Henan Province(132102210142) and Postdoctoral Research Sponsorship in Henan Province(2014069)

**作者简介:** 于海鹏(1979—), 男, 工学硕士, 副教授, 研究方向为材料性能计算机数值模拟。

**Biography:** YU Hai-peng(1979—), Male, Master, Vice Professor, Research focus: computer simulation of material performance.

**通讯作者:** 张红松(1976—), 男, 工学博士, 教授, 主要从事新型热障涂层及其陶瓷材料的研究工作。

**Corresponding author:** ZHANG Hong-song(1976—), Male, Ph.D., Professor, Research focus: new thermal barrier coatings and its new ceramic materials.

**ABSTRACT:** With the further property improvement of advanced turbine engines, searching for new candidate ceramics with low thermal conductivity and high thermal expansion coefficient has become one of the key research directions in the fields of thermal barrier coatings. The computer numerical simulation has played a more important role in the property research of advanced coating ceramics and the corresponding coatings. Research progress of computer simulation in ceramic phase structure, its thermophysical properties, mechanical parameters, coating insulation activity, coating effective thermal conductivity and coating thermal stresses was summarized. The research shortcomings of above several aspects were also indicated. In the future, the structure variation with temperature and pressure of doped elements and new ceramics should be considered. In order to increase the computational precision of thermal conductivity, thermal expansion coefficient and every mechanical parameters, a novel mathematic model maybe developed. The calculation of thermal insulation and effective thermal conductivity of coatings should be further systemized and the influence of structure, microstructure material composition and thermal conduction style must be included. New calculation methods need to be developed in order to increase computational accuracy. In the thermal shocking and residual stresses computation, the effect of substrate conditions (including material, size, roughness and temperature), coating structure, interface morphology, coating defects, layer thickness and working environment must be contained, and the simulation results should be compared with that of experiments.

**KEY WORDS:** thermal barrier coatings; new ceramic materials; thermophysical property; thermal stress

热障涂层由于能有效保护涡轮发动机叶片、燃烧室等关键部件,在发动机的发展过程中具有举足轻重的地位。然而,随着发动机服役环境温度的不断升高,现役的氧化钇部分稳定氧化锆( $\text{Y}_2\text{O}_3$  stabilized zirconia, 简称 YSZ)涂层由于表层材料的高温相变、高温烧结收缩严重等固有缺陷,已难于满足航空发动机发展的需求<sup>[1-3]</sup>。为克服现役 YSZ 涂层的缺点,公认的办法是开发新型具有较低热导率、较高热膨胀系数及良好高温相稳定性能的陶瓷材料,以替代 YSZ 陶瓷。因而,开发新型涂层用陶瓷材料及其涂层性能就成为该领域的研究热点<sup>[4-6]</sup>。目前,已报道的热障涂层新型陶瓷材料主要有掺杂改性氧化锆、 $\text{A}_2\text{B}_2\text{O}_7$  氧化物(A 为稀土元素, B 为 Zr、Ce 及 Hf 四价元素)<sup>[7]</sup>、钙钛矿陶瓷、稀土磷酸盐、磁铅石稀土六铝酸盐、石榴石结构化合物等<sup>[7-12]</sup>。在该领域除用实验方法进行研究之外,广大学者利用计算机模拟技术在新型热障涂层用陶瓷材料的相结构、热物理性能、力学性能、涂层隔热性能及涂层热应力等方面,也做了较多卓有成效的工作。本文就新型热障涂层材料及涂层性能的计算机数值模拟研究方面的研究概况进行了综述。

## 1 新型涂层陶瓷材料性能计算

### 1.1 材料相结构

由于 YSZ 涂层高温相变会加速涂层剥落失效,

新型涂层陶瓷材料的相稳定性就显得格外重要。Stanek 等基于量子力学理论,用 CASCADE 程序计算了  $\text{A}^{3+}\text{B}^{4+}_2\text{O}_7$  部分氧化物的主要固溶机制。研究发现,  $\text{BO}_2$  过量固溶总伴随着  $\text{A}^{3+}$  阳离子空位的形成,在焦绿石与萤石结构的边界处,间隙阳离子对该固溶机制有促进作用,而且焦绿石中  $\text{BO}_2$  过量固溶机制与萤石存在明显差异。在焦绿石氧化物中,氧空位是适应  $\text{A}_2\text{O}_3$  过剩固溶而形成的缺陷,形成的缺陷族会降低每种机制的总能量,但对固溶机制优先性无影响。在  $\text{A}_2\text{Hf}_2\text{O}_7$ 、 $\text{A}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  以及  $\text{A}_2\text{Sn}_2\text{O}_7$  氧化物中,  $\text{BO}_2$  及  $\text{A}_2\text{O}_3$  过量固溶程度均比  $\text{A}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$  和  $\text{A}_2\text{Ru}_2\text{O}_7$  明显<sup>[13]</sup>。在此基础上,Stanek 等对部分  $\text{A}_2\text{Hf}_2\text{O}_7$  氧化物的相结构进行预测发现,不仅已知的  $\text{La}_2\text{Hf}_2\text{O}_7$ - $\text{Gd}_2\text{Hf}_2\text{O}_7$  为焦绿石结构,  $\text{Dy}_2\text{Hf}_2\text{O}_7$ 、 $\text{Ho}_2\text{Hf}_2\text{O}_7$  和  $\text{Er}_2\text{Hf}_2\text{O}_7$  也具有典型的焦绿石结构,这三种钪酸盐在  $(1975\pm 50)$ 、 $(1865\pm 50)$ 、 $(1780\pm 50)$   $^\circ\text{C}$  会发生焦绿石向萤石转变<sup>[14]</sup>,但计算结果尚需实验验证。

张慧玲等<sup>[15]</sup>基于第一原理计算了  $\text{A}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  (A 代表 La、Sm、Nd、Pr、Eu、Dy、Yb 等)的晶格参数及 XRD 和红外图谱,发现这几种稀土锆酸盐的晶格参数随稀土离子半径减小而降低,所计算的  $\text{Sm}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  的 XRD 及红外图谱与实验结果完全一致。从 La 至 Yb,其对应的  $\text{A}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  氧化物的阳离子反位缺陷形成能逐渐下降,晶格无序度逐渐增大。最近的阳离子反位缺陷对焦绿石至萤石的无序转变影响比较明显,氧空位迁移较阳离子容易,且

氧空位扩散系数随着温度升高逐渐增大<sup>[16]</sup>。

Liu 等基于第一原理计算了  $\text{La}_2\text{T}_2\text{O}_7$  (T 代表 Ge、Ti、Sn、Zr 和 Hf, 以下各部分元素顺序与此相同) 等焦绿石型氧化物的结构稳定性, 发现这五种焦绿石氧化物的晶格参数以及 48f 位置阳离子坐标  $x$  值与先前实验报道的结果之间误差小于 1.5%。在 0~50 GPa 净水压力作用下,  $\text{La}_2\text{T}_2\text{O}_7$  的  $x$  值随压力增加而增大, 即这几种焦绿石氧化物在高压下向萤石转变倾向增大, 而  $\text{La}_2\text{Ge}_2\text{O}_7$  则与此相反。因为在高压下,  $\text{La}_2\text{T}_2\text{O}_7$  的 La—O 键收缩程度大于 T—O 键, 使得 A、B 位离子半径比下降, 而  $\text{La}_2\text{Ge}_2\text{O}_7$  的 La—O 键收缩不如 T—O 键明显, 从而使得  $\text{La}_2\text{Ge}_2\text{O}_7$  仍保持焦绿石结构, 其余几种化合物在高压下趋向转变为萤石结构<sup>[17]</sup>。

Feng 等采用 CASTEP 程序计算了独居石结构  $\text{REPO}_4$  (RE 代表 La、Ce、Nd、Sm、Eu 和 Gd, 以下部分元素顺序相同) 氧化物平衡时的晶格常数和相稳定性, 指出这些氧化物的晶格常数及键长与实验结果略微偏低, 由于 4f 外轨道收缩, 其晶格常数随稀土离子半径降低而线性减小。同时通过计算其形核能和形成焓评价了相稳定性, 发现这些  $\text{REPO}_4$  的形核能及形成焓基本上都是比较小的负值, 且形成焓从  $\text{LaPO}_4$  至  $\text{GdPO}_4$  线性增加, 除  $\text{EuPO}_4$  之外,  $\text{REPO}_4$  的形成焓均与实验值比较接近, 重稀土元素对应  $\text{REPO}_4$  氧化物的相稳定性能更好<sup>[18]</sup>。 $\text{Ln}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  (Ln 代表 La、Pr、Nd、Sm、Eu 和 Gd, 以下部分元素顺序相同) 的晶格常数亦随稀土离子半径减小而降低, 所研究的几种  $\text{Ln}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  氧化物的形成焓同样较低, 即表现出良好的相稳定性能<sup>[19—20]</sup>。 $\text{RE}_2\text{Sn}_2\text{O}_7$  (RE 代表 La、Nd、Sm、Gd、Er 和 Yb, 以下部分元素顺序相同) 同样表现出良好的相稳定性能, 从  $\text{La}_2\text{Sn}_2\text{O}_7$  至  $\text{Yb}_2\text{Sn}_2\text{O}_7$ , 其形成焓绝对值随原子序号的增加而逐渐增大, 且与实验结果吻合良好<sup>[21]</sup>。

Wang 等采用分子动力学 LAMMPS 程序计算了  $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7/\text{YSZ}$  材料中四方相至单斜相的相转变, 发现在冷却过程中,  $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7/\text{YSZ}$  材料的体积膨胀比例低于单纯的 YSZ,  $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  的存在促进该相变的发生, 较低的冷却速率下相变程度较高<sup>[22]</sup>。

从以上对新型涂层陶瓷材料相结构数值计算研究状况可知, 目前的研究成果主要集中于计算一元稀土酸盐的晶格常数、缺陷形成能、键长或键能等方面的变化, 很少涉及元素掺杂涂层陶瓷材料的

相结构。即使某一类涂层陶瓷, 也仅计算某几种氧化物晶格常数、键能等, 而非系统计算 XRD 图谱、结构转变、键长、键能等随温度和压力的变化关系, 而且多集中于  $\text{A}_2\text{B}_2\text{O}_7$  型氧化物, 有关  $\text{Ln}_2\text{Ce}_2\text{O}_7$ 、 $\text{InFeZnO}_4$ 、 $\text{LnMgAl}_{11}\text{O}_{19}$ 、 $\text{LaTi}_2\text{Al}_9\text{O}_{19}$ 、 $\text{Ba}_2\text{LnAlO}_5$  等新材料相结构的计算却鲜有报道。

## 1.2 材料的热物理性能

除新型陶瓷材料的相结构之外, 陶瓷材料的热导率和热膨胀系数也是重点计算的性能参数。Liu 等对 Clarke 模型进行了修正, 发现修正后计算得到的  $\text{La}_2\text{T}_2\text{O}_7$  最低热导率与 Clarke 模型结果相比下降 20%, 这主要与  $\text{TO}_2$  型氧化物与  $\text{La}_2\text{T}_2\text{O}_7$  氧化物之间的弹性模量的差异有关, 较弱的 La—O 键起决定性作用<sup>[17]</sup>。

Feng 等用修正的 Slack's 模型计算了  $\text{REPO}_4$  (RE 代表元素与上相同) 在 300~1300 K 之间的最低热导率, 发现仅  $\text{LaPO}_4$  和  $\text{CePO}_4$  热导率变化趋势与实验值比较接近, 其余几种磷酸盐的高温最低热导率偏低, 这主要与高温时  $\text{REPO}_4$  由独居石结构向锆石或磷钇矿的结构转变有关, 弹性模量的各向异性导致最低热导率的各向异性, 而与声子速度的各向异性无关。同时根据方程 (1) 计算了独居石  $\text{REPO}_4$  的热膨胀系数, 其中  $C_p(T)$  和  $C_v(T)$  分别是定温和定压比热,  $\lambda$  是体膨胀系数,  $V(T)$  为晶胞体积,  $B_0(T)$  为等温体积模量。

$$C_p(T) - C_v(T) = \lambda^2 V(T) T B_0(T) \quad (1)$$

结果表明平均线性热膨胀系数在  $(9.7 \sim 10) \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$  之间, 与实验值比较接近<sup>[18]</sup>。用 Cahill 模型得到  $\text{Ln}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  的最低热导率值与实验结果比较接近, 而用 Slack's 模型得到  $\text{Ln}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  的最低热导率仅高温阶段与实验值比较接近, 低温阶段则与实验值存在较大区别<sup>[19]</sup>。Clarke 模型分析表明  $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  和  $\text{Sm}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  最低热导率几乎不存在各向异性, 而  $\text{Nd}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  和  $\text{Gd}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  由于弹性模量的影响而具有明显的各向异性<sup>[20]</sup>。用 Clarke-Slack 模型得到  $\text{RE}_2\text{Sn}_2\text{O}_7$  的高温最低热导率与实验值相近, 低温则差别较大。大质量稀土元素对应的  $\text{RE}_2\text{Sn}_2\text{O}_7$  的低温热导率明显较低, 而各氧化物的高温热导率相差不大, 且高温热导率明显大于  $\text{Ln}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ <sup>[21]</sup>。其热膨胀系数计算值与实验结果相比偏低, 该类氧化物的平均热膨胀系数大于对应的

$\text{Ln}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  [22]。采用 Cahill 模型得到的  $\text{Ln}_2\text{SrAl}_2\text{O}_7$  (Ln 代表 La、Nd、Sm、Eu、Gd 和 Dy, 以下部分元素顺序相同) 的高温最低热导率与实验值相比降低了  $1 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ , 与 YSZ 的热导率则比较接近 [23—24]。由方程 (1) 得到的该类氧化物的体积热膨胀系数在  $(2.3\sim 3.6)\times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$  之间,  $\text{La}_2\text{SrAl}_2\text{O}_7$  和  $\text{Sm}_2\text{SrAl}_2\text{O}_7$  分别具有最小和最大体积膨胀系数, 多数  $\text{Ln}_2\text{SrAl}_2\text{O}_7$  在 [001] 方向上的线性热膨胀系数明显大于 [100] 或 [001] 方向 [23]。

Lin 等采用 Clarke、Cahill 和 Liu 三种模型计算了  $\text{RE}_2\text{SiO}_5$  (RE 代表 Tb、Dy、Ho、Er、Tm、Yb、Lu 和 Y) 的最低热导率, 发现 Clarke 模型计算的结果偏高, 而另两种模型计算的结果比较相近, 更适宜预测各向异性材料的热导率。Slack 模型计算的晶格热导率随稀土元素编号的增加而减小, 但高低温阶段热导率的实验值均与计算结果存在较大偏差 [25]。

Schelling 等基于分子动力学计算了  $\text{A}^{3+}_2\text{B}^{4+}_2\text{O}_7$  (A 代表 La、Pr、Nd、Sm、Eu、Gd、Y、Er、Yb 和 Lu, B 代表 Ti、Ru、Mo、Sn、Zr 和 Pb) 等 40 多种氧化物的热导率和热膨胀系数 (如图 1 所示)。

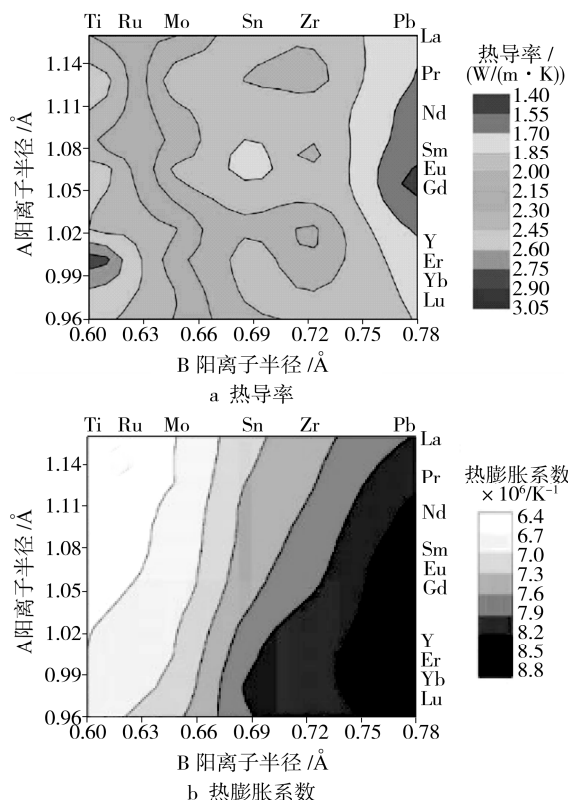


图 1  $\text{A}_2\text{B}_2\text{O}_7$  型氧化物在  $1200\text{ }^\circ\text{C}$  时的热导率和热膨胀系数

Fig.1 Thermal conductivities and thermal expansion coefficients of  $\text{A}_2\text{B}_2\text{O}_7$ -type oxides at  $1200\text{ }^\circ\text{C}$

结果发现, 在  $1200\text{ }^\circ\text{C}$  部分  $\text{Ln}_2\text{Sn}_2\text{O}_7$  以及多数  $\text{Ln}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  和  $\text{Ln}_2\text{Pb}_2\text{O}_7$  表现出较低的热导率, 但高温热膨胀系数偏低 [26—27]。  $(\text{La}_{1-x}\text{Gd}_x)_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  和  $(\text{Y}_{1-x}\text{Gd}_x)_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  两种固溶体室温下的热导率受点缺陷散射的影响比较明显, 在高温阶段时热导率受点缺陷散射的影响较小, 而  $(\text{Sm}_{1-x}\text{Gd}_x)_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  固溶体的热导率受点缺陷的影响较低, 且计算值与实验值相比偏高 [28]。

目前, 新型涂层陶瓷材料的热物理性能的研究对象主要以  $\text{A}_2\text{B}_2\text{O}_7$  型氧化物为主, 而 A 位元素也仅限几种主要稀土, 并未系统研究 16 种稀土元素对应的氧化物的热物理性能, 更无元素掺杂的氧化物固溶体及新出现氧化物的热物理性能的计算报道。材料热导率仅限用各种模型计算最低热导率随温度的变化关系, 且计算结果往往与实验值存在明显偏差, 而对晶格热导率研究偏少。

### 1.3 材料的力学性能

无论是材料的热导率还是热膨胀系数, 其研究过程总是与弹性常数、剪切模量及杨氏模量等材料力学性能密切相关, 因此该方面也是新型涂层陶瓷研究的重点之一。  $\text{La}_2\text{T}_2\text{O}_7$  弹性常数 ( $c_{11}$ 、 $c_{12}$ 、 $c_{44}$ )、体积模量  $B$ 、剪切模量  $G$  和杨氏模量  $E$ , 从  $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$  至  $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  逐渐降低。 [111] 晶向弹性模量最大, 且表现出明显的各向异性, 其中  $\text{La}_2\text{Ge}_2\text{O}_7$  与  $\text{La}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$  的力学性能接近,  $\text{La}_2\text{Hf}_2\text{O}_7$  与  $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  接近 [17], 它们的泊松比为 0.29。对于  $\text{REPO}_4$  氧化物, 其弹性常数  $c_{11}$  和  $c_{22}$  均小于  $c_{33}$ , 除  $\text{La}_2\text{PO}_4$  之外, 其余氧化物的  $c_{55}$  均略低于  $c_{44}$  和  $c_{66}$ 。  $\text{REPO}_4$  的体积模量  $B$  均低于  $150 \text{ GPa}$ , 从  $\text{LaPO}_4$  至  $\text{GdPO}_4$ , 其体积模量从  $107 \text{ GPa}$  增至  $150 \text{ GPa}$ ; 剪切模量  $G$  在  $51\sim 69 \text{ GPa}$  范围内, 与实验值的绝对偏差小于  $4 \text{ GPa}$ 。其硬度 ( $7\sim 10 \text{ GPa}$ ) 与  $\text{Ln}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  ( $8\sim 10 \text{ GPa}$ ) 相当, 但低于  $\text{RE}_2\text{Sn}_2\text{O}_7$  ( $10\sim 12 \text{ GPa}$ ) 和  $\text{RE}_2\text{SrAlO}_7$  ( $12\sim 14 \text{ GPa}$ ); 其杨氏模量  $E$  处于  $135\sim 180 \text{ GPa}$  范围内, (001) 平面的弹性模量各向异性较弱, 其他平面则表现出明显的各向异性, 泊松比接近于 0.3。如图 2a 所示, 该类氧化物的各力学性能参数与稀土离子半径成正比 [18]。

$\text{Ln}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  的弹性常数  $c_{11}$  明显大于  $c_{12}$  和  $c_{44}$ , 其体积模量  $B$  均小于  $200 \text{ GPa}$ , 计算值与实验值的平均偏差约为  $6 \text{ GPa}$ , 杨氏模量  $E$  的计算值在  $73\sim 155$

GPa 范围内,与实验值存在较大偏差(如  $\text{Sm}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  和  $\text{Eu}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  的偏差分别为 19 GPa 和 14 GPa),而剪切模量  $G$  在 205~231 GPa 范围内,与实验值的平均偏差约为 5.5 GPa,泊松比在 0.25~0.3 之间。由图 2b 可知,  $\text{Ln}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  的体积及杨氏模量随原子序数的变化趋势与  $\text{RE}_2\text{PO}_4$  存在明显区别<sup>[19]</sup>。 $\text{RE}_2\text{Sn}_2\text{O}_7$  的弹性常数  $c_{11}$ 、 $c_{12}$  和  $c_{44}$  之间的关系与  $\text{Ln}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  一致,其显微硬度在 14~19 GPa 之间,且与稀土原子序数成正比;体积模量  $B$  同样小于 200 GPa,  $\text{Nd}_2\text{Sn}_2\text{O}_7$  的体积模量最大,其余氧化物的体积模量基本相当;剪切模量  $G$  小于 100 GPa,与稀土原子系数成正比;杨氏模量  $E$  在 240~280 GPa 之间,与稀土原子序数成正比;泊松比在 0.26~0.28 之间,与稀土原子序数成反比<sup>[29]</sup>。

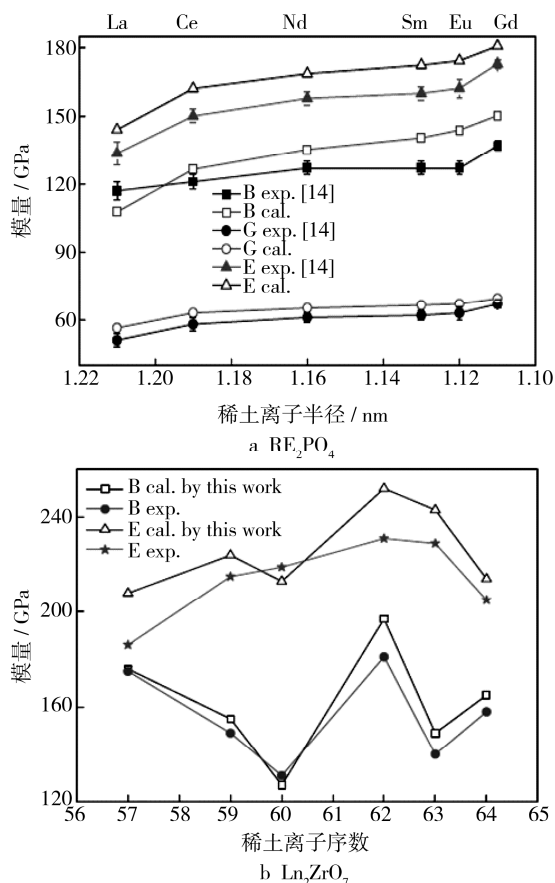


图2 力学性能随稀土离子半径(或原子序数)的变化关系  
Fig.2 Relation between mechanical properties and ion radius or atomic number

$\text{Ln}_2\text{SrAl}_2\text{O}_7$  的弹性常数  $c_{11}$  和  $c_{66}$  略大于  $c_{33}$  和  $c_{44}$ ,  $c_{11}$  和  $c_{33}$  与稀土离子半径成反比;体积模量  $B$  均小于 200 GPa,  $\text{Gd}_2\text{SrAl}_2\text{O}_7$  的体积模量最大,为 188 GPa,  $\text{Eu}_2\text{SrAl}_2\text{O}_7$  的体积模量最小,为 172 GPa;剪切模量  $G$  在 95~110 GPa 之间,  $\text{Gd}_2\text{SrAl}_2\text{O}_7$  和

$\text{La}_2\text{SrAl}_2\text{O}_7$  分别具有最大(110 GPa)和最小剪切模量(99 GPa);杨氏模量  $E$  在 160~270 GPa 之间, [001] 方向的杨氏模量与 [100] 和 [010] 两个方向相比偏低,各向异性较弱<sup>[23]</sup>。

由上可知,虽然对新型材料的力学性能计算有了一定进展,但其计算对象仍然是以一元氧化物为主,有关元素掺杂氧化物以及其他热障涂层陶瓷材料的力学性能鲜有文献报道,而且其计算结果与实验结果存在明显偏差。计算结果与实验之间存在误差可能与实验手段以及所用的计算模型有关,即该方面的实验技术或对应模型仍有待于进一步的优化和改进。

## 2 涂层的隔热性能

周国栋等人采用有限元技术对双陶瓷层热障涂层的隔热性能进行了计算,结果表明陶瓷层总厚度从 100  $\mu\text{m}$  递增至 400  $\mu\text{m}$ ,无论涂层透明与否,涂层表面温度呈线性增加,半透明与不透明涂层的表面温度差别不大,而第二陶瓷层上的表面温度呈线性降低,其透明程度差别不大,且涂层界面处的反射不能降低涂层温度<sup>[30]</sup>。顶层热导率对涂层隔热效果的影响明显大于第二层的热导率<sup>[31]</sup>,这与 M. Han 得出的结果一致<sup>[32]</sup>。Han 等同时指出,对于陶瓷层总厚度为 300  $\mu\text{m}$  的双陶瓷层涂层,涂层厚度相同时,顶层热导率的最佳范围是 0.49~1.65 W/(m·K);若两陶瓷层厚度不同,顶层热导率不能小于 0.2 W/(m·K),文中同时建立了涂层厚度与热导率之间的数学模型<sup>[32]</sup>。但周国栋等人的研究未考虑涂层中的缺陷对其隔热性能的影响,且无对应实验与其计算结果相比较。文政颖等指出,  $\text{Sm}_2\text{Ce}_2\text{O}_7/8\text{YSZ}$  涂层的隔热性能随服役环境温度及陶瓷层厚度的增大而线性增加,但其计算时未考虑涂层热导率的变化及辐射特性的影响<sup>[33]</sup>。

Wang 等<sup>[34]</sup>研究表明,陶瓷层/金属粘结层有无界面热阻时(Interface thermal resistance),涂层隔热温度差分别为 68 K 和 35 K,涂层有效热导率分别为 0.68 W/(m·K) 和 1.3 W/(m·K);若界面为正弦曲线,有无热阻时涂层的隔热效果分别是 64.9 K 和 35.1 K,热导率仍分别是 0.68 W/(m·K) 和 1.3 W/(m·K),隔热效果与界面为直线时差别不大;若考虑涂层实际显微组织,有无热阻时的隔热效果分别为 58.7 K 和 55 K,而涂层的有效热导率分别是

0.86 W/(m·K) 和 0.94 W/(m·K), 即涂层的显微组织对其隔热效果存在明显影响。不考虑陶瓷层内部缺陷时, 在  $\text{La}_2\text{Ce}_2\text{O}_7$ 、微米级 YSZ 和纳米 YSZ 三种涂层中,  $\text{La}_2\text{Ce}_2\text{O}_7$  涂层具有最高的热绝缘温度和最低的热流量。随着气孔尺寸从  $\phi 13.35 \text{ mm} \times 6.8 \text{ mm}$  增至  $\phi 1.93 \text{ mm} \times 9.6 \text{ mm}$ , 涂层隔热性能从 102 K 增至 118 K, 涂层热导率由 0.47 W/(m·K) 减至 0.4 W/(m·K)<sup>[34]</sup> (如图 3a 所示); 随着气孔夹角的增加, 涂层隔热效果略有下降, 气孔主夹角为  $0^\circ$  和  $90^\circ$  时, 涂层热导率分别具有最大值和最小值, 如图 3b 所示<sup>[34—35]</sup>。涂层表面气孔对涂层隔热性能的贡献低于内部气孔, 气孔 (pore) 对涂层隔热性能的贡献明显大于孔隙 (void) 和裂纹 (crack)<sup>[35]</sup>。而 Wei 认为气孔对涂层热导率的影响不如裂纹, 这可能与考虑裂纹长度偏大有关<sup>[36]</sup>。Wang 等还指出,  $\text{La}_2\text{Ce}_2\text{O}_7/\text{YSZ}$ /混合层/基体涂层系统的隔热能力明显大于 YSZ/基体、YSZ/混合层/基体涂层系统; 经过优化后,  $\text{La}_2\text{Ce}_2\text{O}_7/\text{YSZ}$ /混合层/基体涂层系统中各层厚度与基体厚度的比值分别是 0.02、0.04、0.02 和 0.01, 该涂层系统的热导率与 YSZ/基体涂层相比下降了 13.2%<sup>[37]</sup>。尽管 Wang 等考虑了涂层中的

气孔对隔热性能以及涂层热导率的影响, 同时也优化了涂层厚度, 但其在计算中未考虑涂层热辐射及热氧化层的影响, 研究对象仍以单陶瓷层涂层为主, 而对于双陶瓷涂层及其他几种涂层结构则很少涉及, 这可能是未来新型热障涂层性能计算研究的重点。

### 3 涂层热应力

目前对新型热障涂层应力的计算主要包括残余热应力和热冲击应力两部分。文政颖等研究表明, YSZ 层厚度为 0.3 mm 时,  $\text{Sm}_2\text{Ce}_2\text{O}_7/\text{YSZ}$  涂层系统具有最小残余应力, 从表面至金属基体, 涂层热应力逐渐减小<sup>[33]</sup>。刘燕明等指出, 金属基体的厚度、材质及半径对涂层的径向残余应力有明显影响, 但对涂层轴向应力及剪切应力影响不明显,  $\text{Sm}_2\text{Zr}_2\text{O}_7/\text{YSZ}$  涂层的残余应力明显低于单一  $\text{Sm}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  涂层<sup>[38]</sup>。当粘结层厚度为 0.1 mm 时,  $\text{Sm}_2\text{Zr}_2\text{O}_7/\text{YSZ}$  涂层中残余应力最小, 热生长氧化层厚度应控制在 6~10  $\mu\text{m}$  范围内, 陶瓷层的最佳厚度组成为 0.1 mm YSZ+0.9 mm  $\text{Sm}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ <sup>[39]</sup>。Wang 等研究表明,  $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7/\text{YSZ}$  涂层表面具有最大径向应力, 且在一定径向距离范围内几乎保持不变, 而在试样边缘处发生突变; 涂层中的轴向应力和剪切应力远小于径向应力, 且该涂层系统的残余应力明显低于单一  $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  涂层, 这与刘燕明等研究结果一致<sup>[40]</sup>。Abbas 等研究指出, 在  $\text{LaTi}_2\text{Al}_9\text{O}_{10}$ 、YSZ 以及  $\text{LaTi}_2\text{Al}_9\text{O}_{19}/\text{YSZ}$  三种涂层中, 其残余热应力均随氧化层厚度的增加而增大, 三种涂层的径向应力依次减小, 单一涂层与  $\text{LaTi}_2\text{Al}_9\text{O}_{19}/\text{YSZ}$  相比相差近 120 MPa; 而  $\text{LaTi}_2\text{Al}_9\text{O}_{19}/\text{YSZ}$  涂层与单一 YSZ 涂层分别具有最大轴向应力和最小轴向应力, 最大与最小相差近 350 MPa; 剪切应力同样以  $\text{LaTi}_2\text{Al}_9\text{O}_{10}$  层最大,  $\text{LaTi}_2\text{Al}_9\text{O}_{19}/\text{YSZ}$  涂层最小<sup>[41]</sup>。

由于热障涂层特殊的服役环境, 其热冲击应力也是倍受关注。张红松等发现  $\text{Sm}_2\text{Zr}_2\text{O}_7/\text{YSZ}$  涂层表面存在最大径向应力, 而最大轴向应力出现在陶瓷层/粘结层界面处; 涂层表面及两陶瓷层界面处的径向应力随表层厚度的增加而降低, 陶瓷层/粘结层界面处的径向应力、涂层轴向应力则相反;  $\text{Sm}_2\text{Zr}_2\text{O}_7/\text{YSZ}$  涂层冲击应力明显低于单一  $\text{Sm}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  涂层<sup>[42]</sup>。相比之下,  $\text{Sm}_2\text{Zr}_2\text{O}_7/\text{NiCoCrAlY}$  功能梯度涂层的冲击应力更低, 而且基体超过 20

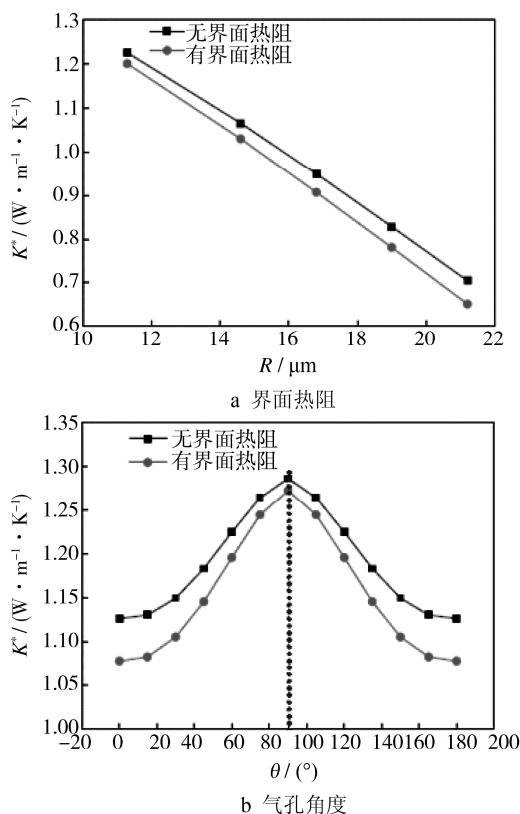


图 3 界面热阻及气孔角度对涂层热导率的影响

Fig.3 Influence of interface thermal resistance and pore angle on thermal conductivity of coatings

mm、直径超过 18 mm 后,涂层的冲击应力变化不大<sup>[43]</sup>,涂层材料成分对冲击应力的影响不明显<sup>[44]</sup>。马建辉等将  $\text{Sm}_2\text{Zr}_2\text{O}_7/\text{NiCoCrAlY}$  梯度涂层的陶瓷层改为  $\text{Sm}_2\text{Zr}_2\text{O}_7/\text{YSZ}$  双层,发现涂层冲击热应力可进一步降低<sup>[45]</sup>。Wang 指出  $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7/\text{YSZ}$  涂层表面的最大径向冲击应力及裂纹尖端应力场因子随循环次数的增加而缓慢增大,该涂层的热应力仍然低于单一  $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  涂层;表面裂纹尖端应力大于涂层内部,涂层内部较大的气孔有助于缓解应力<sup>[46]</sup>,涂层表面的气孔有助于降低涂层表面负载及其累积深度<sup>[47]</sup>。Meng 等分析得出,在  $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7/8\text{YSZ}$  或  $\text{La}_2(\text{Zr}_{0.7}\text{Ce}_{0.3})_2\text{O}_7/\text{YSZ}$  等双陶瓷层热障涂层系统中,第二陶瓷层的热膨胀系数应处在合理范围内,涂层最佳“杨氏模量-热膨胀系数”组合为  $47.796 \text{ GPa} \cdot 10.8029 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ <sup>[48-49]</sup>。Fei 等在  $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  与 YSZ 层之间创造性地增加四层由  $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  和 YSZ 按照不同比例混合而成的过渡层,结果发现,梯度涂层陶瓷层界面处的径向冲击应力与单层  $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  或  $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7/\text{YSZ}$  涂层相比降低了 50~70 MPa,梯度涂层中 60% $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ +40%YSZ/与 40% $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ +60%YSZ 两过渡层界面处的径向热应力最小,在涂层边沿及中心具有较大的轴向拉应力<sup>[50]</sup>。

尽管以上学者对新型热障涂层的热应力进行了一定的研究,但从上述研究可知,目前多集中于等离子喷涂的  $\text{A}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  涂层,尚未见电子束物理气相沉积涂层热应力的研究报道。同时在双陶瓷层计算过程中很少涉及气孔、孔隙以及裂纹等涂层内部缺陷对热应力的影响,虽然部分研究考虑热氧化层的影响,但没有涉及到热氧化层与其他层间的界面形状,也没有考虑基体温度、表面粗糙度等因素对涂层热应力的影响。有限元法是研究热障涂层热应力的重要手段,这在 YSZ 涂层的热应力研究中已经获得重要应用,但在新型热障涂层热应力计算方面还存在很多不足,该方面的研究仍然任重而道远。

## 4 结语

计算机数值模拟已经成为新型热障涂层陶瓷材料及涂层性能研究的一种重要手段,虽然已经取得了一定的进展,但仍存在明显的不足。为了进一步深入研究新型涂层材料及其对应涂层的性能,并为开发新型涂层材料及高性能热障涂层提供理论

指导,未来热障涂层领域计算机数值计算应从以下几个方面开展研究。

1) 系统研究一元及元素掺杂新型热障涂层用陶瓷材料相结构(包括 XRD 图谱、键长、相变温度)、热物理性能及力学性能随温度及压力的变化关系,开发新的数学模型和计算方法,进一步提高计算精度与准确度。

2) 系统开展新型结构涂层的隔热及涂层有效热导率的研究,并注意考察陶瓷层中孔隙、裂纹、界面形貌、界面热阻以及热辐射等因素的影响。

3) 继续开展新型陶瓷材料对应涂层热应力的计算,并逐步在计算中引入涂层结构、界面形貌、缺陷、基体表面形貌、粗糙度及服役环境等方面的影响,并注重与实验结果进行对比。

## 参考文献

- [1] 张红松,杨树森,温倩.  $\text{A}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  型稀土锆酸盐热障涂层研究进展[J]. 表面技术, 2014, 43(8): 135—141.  
ZHANG Hong-song, YANG Shu-sen, WEN Qian. Research Progress of  $\text{A}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ -Type Rare-earth Zirconate Thermal Barrier Coatings[J]. Surface Technology, 2014, 43(8): 135—161.
- [2] HARWICKE C U, LAU Y C. Advances in Thermal Spray Coatings for Gas Turbines and Energy Generation A: A Review[J]. Journal of Thermal Spray Technology, 2013, 6: 564—576.
- [3] BAKER M. Influence of Materials Models on the Stress State in Thermal Barrier Coating Simulations[J]. Surface and Coatings Technology, 2014, 240: 301—310.
- [4] HUA Z X, YU H Z, MING X Z, et al. Thermal Shock Behavior of Toughened Gadolinium Zirconia/YSZ Double-ceramic-layered Thermal Barrier Coatings[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2014, 593: 50—55.
- [5] WINTER M R, CLARJE D R. Oxides Materials with Low Thermal Conductivity[J]. Journal of the American Ceramic Society, 2007, 90: 533—540.
- [6] KUN L, JIAN J T, YU B, et al. Particle in Flight Behavior and Its Influence on the Microstructure and Mechanical Property of Plasma Sprayed  $\text{La}_2\text{Ce}_2\text{O}_7$  Thermal Barrier Coatings[J]. Materials Science and Engineering A, 2015, 625: 177—185.
- [7] 张红松,朱涛,魏媛. 钙钛矿及  $\text{A}_2\text{B}_2\text{O}_7$  型热障涂层用陶瓷材料研究进展[J]. 稀土, 2010, 8: 75—79.  
ZHANG Hong-song, ZHU Tao, WEI Yuan. Research Progress of Perovskite and  $\text{A}_2\text{B}_2\text{O}_7$  Ceramics for Thermal Barrier Coatings[J]. Chinese Rare Earth, 2010, 8: 75—79.
- [8] MAUER G, JARLIGO M O, MACK D E, et al. Plasma-sprayed Thermal Barrier Coatings: New Materials, Processing Issues, and Solutions[J]. Journal of Thermal Spray Technology, 2013, 6: 646—658.

- [9] KUMAR V, BALASSUBRAMANIAN K. Progress Update on Failure Mechanisms of Advanced Thermal Barrier Coatings: A Review[J]. *Progress in Organic Coatings*, 2016, 90: 54—82.
- [10] RAN H L, AN C W, GUANG C Z, et al. Thermo-physical Properties of Rare Earth Hexaaluminates  $\text{LnMgAl}_{11}\text{O}_{10}$  (Ln: La, Pr, Nd, Sm, Eu, and Gd) Magnetoplumbite for Advanced Thermal Barrier Coatings[J]. *Journal of the European Ceramic Society*, 2015, 35: 1297—1305.
- [11] XU Z H, ZHOU X, WANG K, et al. Thermal Barrier Coatings of New Rare Earth Composite Oxide by EB-PVD[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2014, 587: 126—132.
- [12] ZHI X Q, TAYLOR D S, WEI PAN, et al. Thermal Conductivity of the Gadolinium Calcium Silicate Apatites: Effect of Different Point Defect Types[J]. *Acta Materialia*, 2011, 59: 3841—3850.
- [13] STANEK C R, MINERVINI L, GRIMES R W. Nonstoichiometry in  $\text{A2B2O7}$  Pyrochlore[J]. *Journal of the American Ceramic Society*, 2002, 85 (11): 2792—2798.
- [14] STANEK C R, GRIMES R W. Prediction of Rare-earth  $\text{A}_2\text{Hf}_2\text{O}_7$  Pyrochlore Phases[J]. *Journal of the American Ceramic Society*, 2002, 95(8): 2139—2141.
- [15] 张慧玲, 范群波, 王富耻, 等. 稀土锆酸盐焦绿石相结构的第一原理计算[J]. *稀有金属材料与工程*, 2007, 36(S1): 554—557.  
ZHANG Hui-ling, FAN Qun-bo, WANG Fu-chi, et al. First Principle Calculation of Rare Earth Pyrochlore Structure[J]. *Rare Metal Materials and Engineering*, 2007, 36(S1): 554—557.
- [16] FAN Qun-bo, WANG Fu-chi, ZHANG Hui-ling. Study of High-temperature Stability of Pyrochlore Zirconates[J]. *Journal of Beijing Institute of Technology*, 2010, 19(1): 99—102.
- [17] LIU B, WANG J Y, LI Z, et al. Theoretical Elastic Stiffness, Structural Stability and Thermal Conductivity of  $\text{La}_2\text{T}_2\text{O}_7$  (T=Ge, Ti, Sn, Zr, Hf) Pyrochlore[J]. *Acta Materialia*, 2010, 58: 4369—4377.
- [18] FENG J, XIAO B, ZHOU R, et al. Anisotropy in Elasticity and Thermal Conductivity of Monazite-Type  $\text{REPO}_4$  (RE=La, Ce, Nd, Sm, Eu and Gd) from First-Principles Calculations[J]. *Acta Materialia*, 2013, 61: 7364—7383.
- [19] FENG J, XIAO B, WAN C L, et al. Electronic Structure, Mechanical Properties and Thermal Conductivity of  $\text{Ln}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  (Ln=La, Pr, Nd, Sm, Eu, and Gd) Pyrochlore[J]. *Acta Materialia*, 2011, 59: 1742—1760.
- [20] FENG J, XIAO B, ZHOU R, et al. Thermal Conductivity of Rare Earth Zirconate Pyrochlore from First Principles[J]. *Scripta Materialia*, 2013, 68: 727—730.
- [21] FENG F, XIAO B, ZHOU R, et al. Thermal Expansion and Conductivity of  $\text{RE}_2\text{Sn}_2\text{O}_7$  (RE=La, Nd, Sm, Gd, Er and Yb) Pyrochlores[J]. *Scripta Materialia*, 2013, 69: 401—404.
- [22] WANG X Z, LIU X Y, ZHU C, et al. Phase Transition Behavior of Yttria-stabilized Zirconia from Tetragonal to Monoclinic in the Lanthanum Zirconia/Yttria-stabilized Zirconia Coupled-system Using Molecular Dynamics Simulation[J]. *Journal of Molecular Liquids*, 2015, 207: 309—314.
- [23] FENG J, XIAO B, ZHOU R, et al. Anisotropic Elastic and Thermal Properties of the Double Perovskite Slab-Rock Salt Layer  $\text{Ln}_2\text{SrAl}_2\text{O}_7$  (Ln=La, Nd, Sm, Eu, Gd or Dy) Natural Superlattice Structure[J]. *Acta Materialia*, 2012, 60: 3380—3392.
- [24] FENG J, WAN C L, XIAO B, et al. Calculation of the Thermal Conductivity of  $\text{R}_2\text{SrAl}_2\text{O}_7$  (R=La, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy) [J]. *Physics Review B*, 2011, 84, 024302.
- [25] LIN Z T, YA L Z, MIN J W, et al. Theoretical and Experimental Determination of the Major Thermo-Mechanical Properties of  $\text{RE}_2\text{SiO}_5$  (RE=Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu and Y) for Environmental and Thermal Barrier Coatings Applications[J]. *Journal of the European Ceramic Society*, 2016, 36: 189—202.
- [26] SCHELLING P K, PHILLPOT S R, GRIMES R W. Optimum Pyrochlore Compositions for Low Thermal Conductivity[J]. *Philosophical Magazine Letters*, 2004, 84: 127—137.
- [27] CLARKE D R, PHILLPOT S R. Thermal Barrier Coating Materials[J]. *Mater Today*, 2005, 8: 22—29.
- [28] SCHELLING P K. Thermal Conductivity of A-site Doped Pyrochlore Oxides Studied by Molecular-Dynamics Simulation[J]. *Computational Materials Science*, 2010, 48: 336—342.
- [29] FENG J, XIAO B, QU Z X, et al. Mechanical Properties of Rare Earth Stannate Pyrochlores[J]. *Applied Physics Letters*, 2011, 99: 201909.
- [30] 周国栋, 陈树海, 黄继华. 双陶瓷层热障涂层的隔热行为有限元模拟研究[J]. *功能材料*, 2011, 12: 2162—2165.  
ZHOU Guo-dong, CHEN Shu-hai, HUANG Ji-hua. Finite Element Analysis of Thermal Insulation in Double Ceramic Layer Thermal Barrier Coatings[J]. *Function Materials*, 2011, 12: 21620—2165.
- [31] 周国栋, 陈树海, 黄继华. 热传导对双陶瓷热障涂层隔热效果的影响[J]. *材料科学与工艺*, 2012, 4: 1—6.  
ZHOU Guo-dong, CHEN Shu-hai, HUANG Ji-hua. Effect of Thermal Conduction on Thermal Insulation of Double Ceramic Layer Thermal Barrier Coatings[J]. *Materials Science and Technology*, 2012, 4: 1—6.
- [32] MENG H, DONG G Z, HUA J H, et al. Optimization Selection of the Thermal Conductivity of the Top Ceramic Layer in the Double-ceramic-layer Thermal Barrier Coatings Based on the Finite Element Analysis of the Thermal Insulation[J]. *Surface and Coatings Technology*, 2014, 240: 320—326.
- [33] 文政颖, 时蕾, 陈晓鸽, 等.  $\text{Sm}_2\text{Ce}_2\text{O}_7/8\text{YSZ}$  热障涂层残余热应力及隔热性能计算机模拟[J]. *中国陶瓷*, 2015, 8: 23—28.  
WEN Zheng-ying, SHI Lei, CHEN Xiao-ge, et al. Computer Simulation of Residual Stress and Thermal Insula-

- tion Property of  $\text{Sm}_2\text{Ce}_2\text{O}_7/8\text{YSZ}$  Thermal Barrier Coatings[J]. Chinese Ceramics, 2015, 8: 23—28.
- [34] WANG L, ZHANG X H, ZHAO X Y, et al. Effect of Interface on the Thermal Conductivity of Thermal Barrier Coatings: A Numerical Simulation Study[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2014, 79: 954—967.
- [35] WANG L, WANG Y, SUN X G, et al. Influence of Pores on the Thermal Insulation Behavior of Thermal Barrier Coatings Prepared by Atmospheric Plasma Spray[J]. Materials and Design, 2011, 32: 36—47.
- [36] WEI S, CHI F W, BO Q F, et al. Effects of Defects on the Effective Thermal Conductivity of Thermal Barrier Coatings[J]. Applied Mathematical Modeling, 2012, 36: 1995—2002.
- [37] WANG L, ZHANG X H, ZHAO X Y, et al. Design and Optimization of Coating Structure for the Thermal Barrier Coatings Fabricated by Atmospheric Plasma Spraying via Finite Element Method[J]. Journal of Asian Ceramic Societies, 2014, 2: 101—116.
- [38] 刘燕明, 时蕾. 不同基体条件下  $\text{Sm}_2\text{Zr}_2\text{O}_7/\text{YSZ}$  热障涂层的残余应力[J]. 中国陶瓷, 2011(11): 33—37.  
LIU Yang-ming, SHI Lei. Residual Thermal Stresses of  $\text{Sm}_2\text{Zr}_2\text{O}_7/\text{YSZ}$  Thermal Barrier Coatings with Different Substrate Conditions[J]. Chinese Ceramics, 2011 (11): 33—37.
- [39] 魏媛, 李世显. 单层厚度对  $\text{Sm}_2\text{Zr}_2\text{O}_7/\text{YSZ}$  热障涂层残余热应力的影响[J]. 中国陶瓷, 2012(10): 30—34.  
WEI Yuan, LI Shi-xian. Effect of Single-layer Thickness on Residual Thermal Stress in  $\text{Sm}_2\text{Zr}_2\text{O}_7/8\text{YSZ}$  Thermal Barrier Coatings[J]. Chinese Ceramics, 2012(10): 30—34.
- [40] WANG L, WANG Y, SUN G X. Finite Element Simulation of Residual Stress of Double Ceramic Layer  $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7/8\text{YSZ}$  Thermal Barrier Coatings Using Birth and Death Element Technique[J]. Computational Materials Science, 2012, 53: 117—127.
- [41] ABBAS M, LEI G, BO H G. Evaluation of Stress Distribution and Failure Mechanism in Lanthanum Titanium-Aluminum Oxides Thermal Barrier Coatings[J]. Ceramics International, 2013, 39: 5103—5111.
- [42] 张红松, 时蕾. 表面陶瓷层厚度对  $\text{Sm}_2\text{Zr}_2\text{O}_7/8\text{YSZ}$  热障涂层热冲击性能的影响[J]. 中国表面工程, 2013(3): 76—81.  
ZHANG Hong-song, SHI Lei. Influence of Surface Layer Thickness on Thermal Shocking Property of  $\text{Sm}_2\text{Zr}_2\text{O}_7/8\text{YSZ}$  Thermal Barrier Coatings[J]. China Surface Engineering, 2013(3): 76—81.
- [43] 陈晓鸽, 张天彤, 张红松, 等. 离子喷涂  $\text{Sm}_2\text{Zr}_2\text{O}_7/\text{NiCoCrAlY}$  功能梯度热障涂层的热冲击性能[J]. 表面技术, 2012, 41(4): 86—89.  
CHEN Xiao-ge, ZHANG Tian-tong, ZHANG Hong-song, et al. Thermal Shocking Property of Plasma Sprayed  $\text{Sm}_2\text{Zr}_2\text{O}_7/\text{NiCoCrAlY}$  Functional Graded Thermal Barrier Coatings[J]. Surface Technology, 2012, 41(4): 86—89.
- [44] 毕建平, 陈晓鸽, 张红松. 基体条件对等离子喷涂  $\text{Sm}_2\text{Zr}_2\text{O}_7/\text{NiCoCrAlY}$  功能梯度热障涂层热冲击性能的影响[J]. 稀土, 2012(8): 54—58.  
BI Jian-ping, CHEN Xiao-ge, ZHANG Hong-song. Effect of Substrate Conditions on Thermal Shocking Properties of Plasma Sprayed  $\text{Sm}_2\text{Zr}_2\text{O}_7/\text{NiCoCrAlY}$  Functional Graded TBCs[J]. Chinese Rare Earth, 2012(8): 54—58.
- [45] 马建辉, 郭鹏, 张红松.  $\text{Sm}_2\text{Zr}_2\text{O}_7/\text{YSZ}-\text{NiCoCrAlY}$  功能梯度热障涂层热冲击应力[J]. 中国陶瓷, 2013(12): 34—38.  
MA Jian-hui, GUO Peng, ZHANG Hong-song. Thermal Shocking Stress in  $\text{Sm}_2\text{Zr}_2\text{O}_7/\text{YSZ}-\text{NiCoCrAlY}$  Functional Graded Thermal Barrier Coatings[J]. China Ceramics, 2013(12): 34—38.
- [46] WANG L, WANG Y, ZHANG Q W, et al. Finite Element Simulation of Stress Distribution and Development in 8YSZ and Double Ceramic Layer  $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7/8\text{YSZ}$  Thermal Barrier Coatings During Thermal Shock[J]. Applied Surface Science, 2012, 258: 3540—3551.
- [47] WANG L, WANG Y, SUN G X, et al. Influence of Pores on the Surface Microcomposition Mechanical Response of Thermal Barrier Coatings Fabricated by Atmospheric Plasma Spray Finite Element Simulation[J]. Applied Surface Science, 2011, 257: 2238—2249.
- [48] MENG H, HUA J H, HAI S C. A Parametric Study of the Double Ceramic Layer Thermal Barrier Coating Part II: Optimization Selection of Mechanical Parameters of the Inside Ceramic Layer Based on the Effect on the Stress Distribution[J]. Surface and Coatings Technology, 2014, 238: 93—117.
- [49] MENG H, GUO D Z, JI H H, et al. A Parameter Study of the Double-Ceramic-Layer Thermal Barrier Coating Part I: Optimization Design of the Ceramic Layer Thickness Ratio Based on the Finite Element Analysis of Thermal Insulation (Take LZ7C3/8YSZ/NiCoAlY DCL-TBd for an Example)[J]. Surface and Coatings Technology, 2013, 236: 500—509.
- [50] FEI H C, YUN L, FENG Y G, et al. Design, Preparation and Characterization of Graded YSZ/ $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  Thermal Barrier Coatings[J]. Journal of the American Ceramic Society, 2010, 93: 1732—1740.