

弹性薄膜的撕裂问题时,采用了一种不同于 Kim 的弯曲模型的方法,除已脱胶部分之外,薄膜的脱胶过程由平面应变弹性有限元方法模拟,在分析过程中采用黏聚力模型来刻画韧性薄膜沿基体界面被撕裂或脱胶过程,所得结果无论是在定性还是定量上均与 Kim 的梁弯曲模型结果有很大区别。

鉴于几种关于韧性薄膜撕裂模型对结果预测的不一致,几位学者联名倡议提出开展关于薄膜撕裂实验刻画模型有效性检验的国际合作。在倡议中指出无论采用何种方法,都须采用黏聚力模型来刻画界面断裂过程。而此后有很多工作都采用黏聚力模型来刻画界面。

如果考虑残余应力的影响,涂层或黏结于基体上的薄膜或多层材料中的单独片层等均不可避免地承受着残余应力的作用。薄膜中的残余应力的主要来源于沉积过程,外延,以及热膨胀失配等因素。承受应力状态的薄膜/基体体系往往在边缘处产生很强的应力集中,极易导致其在该处界面起始层裂发生。如何评价残余应力对薄膜/基体体系界面的影响也显得至关重要。

本文将对撕裂试验以及热失配引起残余应力作用下的薄膜/基体体系的界面层裂行为展开研究。薄膜/基体体系界面采用混合性黏聚力模型来刻画。研究了对不同薄膜材料参数和不同界面参数情况下的撕裂行为,给出了撕裂力和界面分离功以及界面分离强度等参数之间的关系,并对界面层裂模式进行了分析。同时对多角度撕裂的界面破坏形式进行了系统的研究,给出了稳态撕裂力及相角与撕裂角度之间的关系。

对由于热失配引起残余应力作用下的薄膜/基体体系的界面层裂行为的研究。假设薄膜和基体材料分别为弹性材料和弹性材料。研究了对不同薄膜材料参数和不同界面参数情况的界面层裂发生机制,给出了层裂发生时临界温度荷载与薄膜/基体几何参数、材料参数以及模型参数之间的关系。

关键词: 薄膜/基体, 界面层裂, 撕裂试验, 热失配, 黏聚力模型

#### MS12 CCTAM2009-003111 基于第一性原理的金属/氧化物界面结合强度与宏观韧性的系统性研究

江勇\*, 魏悦广\*\*, John. R. Smith\*, John W. Hutchinson<sup>+</sup>, Anthony G. Evans\*

\* 美国加州大学圣芭芭拉分校材料系, 圣芭芭拉 93106, yjiang@engr.ucsb.edu

\*\* 中国科学院力学研究所, 北京 200030

<sup>+</sup> 美国哈佛大学工程与应用科学学院, 剑桥

总结介绍作者们多年来发展的基于第一性原理的系统性研究金属/氧化物界面结合强度和宏观韧性的策略方法。以应用广泛的  $\gamma$ -Ni/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 界面为例, 从第一性原

理出发, 建立合理的物理和热力学模型, 依据基于量子力学的电子密度泛函的系列计算, 能够有效分析和描述温度、界面化学配比、元素的热力学活度、合金成分、杂质等对界面结合强度的影响和作用关系。计算表明在感兴趣的温度区间 (1300~1600K), 界面的平衡相结构为富 Al 相 (Al-rich), 但靠近理想化学配比相 (Stoichiometric) 的相界。在可能共存的这两种界面中, 富 Al 相界面的结合强度较高, 约三倍于理想化学配比相界面。有害杂质硫有在界面富集的强烈趋向, 并因此严重削弱界面强度 (可降低 ~70%)。而稀土元素钆对此类界面存在至少 3 种强化机理, 包括有效钉扎硫, 直接增强界面键能, 和取代界面上的硫。针对界面宏观韧性的评估, 通过第一性原理密度泛函方法, 直接计算不同荷载模式 (Mode I, II 和 Mixed Mode) 下的总能-位移关系, 进而转化为相应的曳引力-位移关系, 通过拟合得到一个统一化 (适用于任何荷载模式) 的界面势函数。将这个基于第一性原理的界面势函数与内聚力模型 (Cohesive Zone Model) 的整合, 可以对沿界面的不同晶体学取向 ( $\langle 110 \rangle$  and  $\langle 112 \rangle$  of  $\gamma$ -Ni) 的稳态断裂展开弹性有限元模拟。以较弱的理想化学配比相界面为例, 首次获得对界面韧性与荷载混合度 (Mode Mixity) 及不同晶体学断裂取向的相关性的预测。关键词: 第一性原理, 密度泛函, 金属/氧化物界面, 界面结合强度, 界面韧性

#### MS12 CCTAM2009-003112

##### 热障涂层的动静态热力耦合响应

冯雪

清华大学航天航空学院, 北京 100084

采用涂层技术进行热防护逐渐成为航空航天发动机热防护的重要选择。航空航天发动机热障涂层工作在非常复杂和恶劣的力热耦合环境下, 迫切要求发展新型的热障涂层材料和结构, 建立完整的实验方法与理论体系来描述热障涂层中应力的起源、演化、分布及涂层应力引起的材料和结构失效, 以提高热障涂层在使用中的可靠性和可用性。在稳态温度环境下, 对于热障涂层/基体结构, 涂层与涂层之间, 涂层与基体之间存在剪力作用, 分别建立各层涂层和基体的平衡方程, 通过界面的连接条件和系统结构的边界条件可以确定各层涂层和基体的应力分布, 建立起系统曲率与涂层应力及层间剪力之间的关系, 从而实现多场耦合作用下应力测量。在热冲击作用下, 根据传热方程, 得到热冲击温度分布的解析表达, 完成热障涂层结构的热冲击荷载下瞬态应力分析。通过理论分析涂层应力从瞬态到稳态的转变过程, 并给出热冲击 (热震) 分析。国家自然科学基金委近空间飞行器重大研究计划资助项目 (90816007), 教育部全国百篇优秀博士学位论文基金 (2007B30)。

关键词: 热障涂层, 热力耦合, 热冲击, 动静态分析