

钛合金 TC4 表面医用氧化物陶瓷涂层的 残余热应力分析

doi:10.3969/j.issn.1674-7100.2022.01.005

丁一帆 单湘衡
袁乾鸿 王皓
汤迎红 丁泽良

湖南工业大学
机械工程学院
湖南 株洲 412007

摘要: 采用有限元方法分析了钛合金 TC4 表面分别溅射沉积的 4 种医用陶瓷涂层 Ta₂O₅、Nb₂O₅、ZrO₂ 和 TiO₂ 的残余热应力分布情况,并以 Ta₂O₅ 涂层为例,研究涂层的厚度与结构对残余热应力最大值的影响。结果表明,4 种氧化物涂层的残余热应力都表现为拉应力,且应力最大值均位于涂层/基体结合界面的外边缘,其中残余热应力最大值最大的是 Ta₂O₅ 涂层(32.2 MPa),其次是 Nb₂O₅(19.7 MPa)和 ZrO₂ 涂层(10.2 MPa),最小是 TiO₂ 涂层(1.03 MPa)。当涂层厚度由 1 μm 增加到 4 μm 时,Ta₂O₅ 涂层的残余热应力最大值呈现先减小后增大的变化趋势,其中涂层厚度为 2.5 μm 时的残余应力最大值最小。对于不同结构的 Ta₂O₅ 涂层来说,在表面层厚度或涂层总厚度相同的情况下,残余热应力最大值由小到大的涂层结构依次为梯度涂层、复合涂层、单层涂层。

关键词: 钛合金;氧化物涂层;有限元分析;残余热应力

中图分类号: TG174.4

文献标志码: A

文章编号: 1674-7100(2022)01-0032-08

引文格式: 丁一帆,单湘衡,袁乾鸿,等.钛合金 TC4 表面医用氧化物陶瓷涂层的残余热应力分析[J].包装学报,2022,14(1):32-39.

0 引言

陶瓷材料具有许多优良性能,如熔点高、硬度大和化学稳定性好,广泛用于航空航天、机械、电子和化工等行业^[1-2]。近年来,Ta₂O₅、ZrO₂等氧化物陶瓷因在耐蚀、耐磨和生物相容性方面表现出优异性能,成为医用植入体表面改性的热点材料^[3-5]。例如:溅射沉积的 Ta₂O₅ 陶瓷涂层能明显提高钛合金的耐磨性和耐蚀性^[6];微弧氧化 ZrO₂ 陶瓷涂层大大提高了

镁合金的耐蚀性,并表现出良好的骨诱导性^[7];纳米多孔 TiO₂ 涂层能增强 Ti 表面的亲水性和体外生物相容性^[8];用溶胶-凝胶法制备的 Nb₂O₅ 涂层不仅增强了钛合金的耐蚀性,而且提高了钛合金表面的湿润性和细胞的黏附力,表现出良好的生物相容性^[9]。但是,由于陶瓷涂层与金属基体的热膨胀系数不匹配,涂层/基体结合界面会出现较大的残余热应力,从而导致涂层附着性能差,易发生开裂和脱落^[10]。

为提高涂层结合性能,国内外学者对涂层结构开

收稿日期:2021-10-22

基金项目:湖南省自然科学基金资助项目(2019JJ60059,2020JJ6079);湖南省教育厅科学研究基金资助项目(20A159)

作者简介:丁一帆(1991-),男,湖南株洲人,湖南工业大学硕士生,主要研究方向为表面涂层材料,

E-mail:245341761@qq.com

通信作者:丁泽良(1966-),男,湖南攸县人,湖南工业大学教授,博士,主要从事表面涂层与特种加工研究,

E-mail:10176@hut.edu.cn

展了大量的优化研究^[11-14]。试验研究方法工作量大、周期长,且成本高、效率低。利用有限元方法对涂层残余应力进行预测,揭示残余应力的分布特征,可为优化涂层成分与结构、缓解界面应力和提高结合性能提供重要参考。R. Ali 等^[15]采用有限元方法分析了 Ti-TiN 多层涂层结构的残余应力,确定了能降低残余应力的最佳膜层厚度,并通过划痕实验证明了结构优化后的多层涂层的附着力较原有结构提高 18% 以上。E. Bemporad 等^[16]采用有限元方法分析了缓冲层 Ti 的厚度和位置对 Ti/TiN 多层结构残余应力的影响,利用划痕试验揭示了涂层的残余应力与其附着力之间的内在联系,即残余应力越大,涂层结合性能越差。

目前关于有限元方法分析生物医用涂层残余应力的报道较少。另外,在医用材料领域,钛合金 TC4 是应用最多的植入材料,而 Ta₂O₅、Nb₂O₅、ZrO₂ 和 TiO₂ 是涂层材料的研究热点。为此,本文采用 ANSYS14.0 软件,对钛合金 TC4 表面分别溅射沉积 Ta₂O₅、Nb₂O₅、ZrO₂ 和 TiO₂ 的 4 种医用氧化物涂层的残余热应力进行有限元分析,并以 Ta₂O₅ 涂层为例,分析涂层的厚度与结构对涂层残余热应力最大值的影响,以期为氧化物涂层的设计与制备提供一定的理论参考。

1 数值分析

1.1 几何模型

钛合金 TC4 涂层试样的几何模型为圆柱体,如图 1 所示。TC 基体的高和半径均为 25 μm,涂层厚度为 H μm。由于模型的结构具有对称性,为提高运算速度,选取模型中轴剖面的 1/2 进行分析。

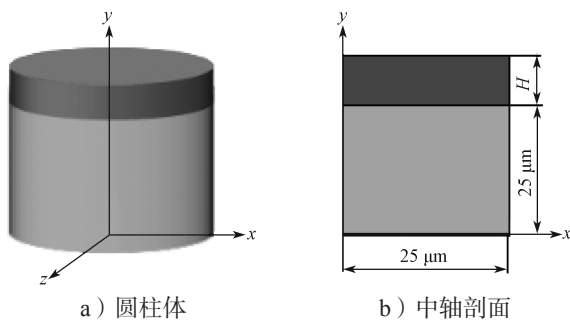


图 1 几何模型

Fig. 1 Geometric model

1.2 有限元模型

采用 ANSYS14.0 软件中 PLANE13 二维平面热耦合单元对几何模型进行网格划分,在对称轴位置施加位移约束。涂层与基体的结合界面附近存在较

大的应力梯度和严重的应力集中现象,为提高分析精度,对该区域的网格进行细分。图 2 为涂层/基体系统的有限元分析模型。

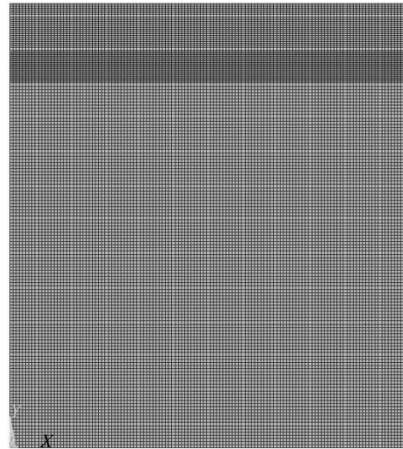


图 2 有限元分析模型

Fig. 2 Finite element analysis model

1.3 边界条件及物性参数

磁控溅射涂层通常是在室温环境下进行,但是在涂层沉积过程中,高能粒子对基体表面的连续轰击会使基体表面的温度达到 70 °C 以上^[17]。因而,设定涂层沉积温度 t_1 为 70 °C,室温 t_2 为 25 °C。由于涂层与基体之间的热膨胀系数存在差异,温度变化(设为 t_3 , $t_3=t_1-t_2$)使得沉积后的涂层与基体结合界面产生残余热应力。为了简化分析,提出如下假设^[18]: 1) 涂层没有缺陷; 2) 涂层粘接良好,不会脱落; 3) 涂层材料为各向同性,并忽略温度对材料热物性参数的影响; 4) 涂层沉积时为无应力状态,只分析冷却后的残余热应力。表 1 为钛合金 TC4 和氧化物陶瓷的热物性参数^[19-23]。

表 1 材料的热物性参数

Table 1 Thermophysical parameters of materials

材料	弹性模量 / GPa	热膨胀系数 / 10^{-6} K^{-1}	导热率 / ($\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$)	泊松比
TC4	114	8.9	6.70	0.34
Ta ₂ O ₅	140	3.6	33.00	0.23
Nb ₂ O ₅	60	5.8	0.98	0.20
ZrO ₂	205	10.0	2.00	0.31
TiO ₂	230	9.0	11.70	0.27

2 结果与分析

2.1 不同氧化物涂层的残余应力分布

在 TC4 钛合金表面分别溅射沉积 Ta₂O₅、Nb₂O₅、ZrO₂ 和 TiO₂, 涂层的厚度均为 3 μm。通过 ANSYS14.0

软件分析得到图3所示的涂层残余应力云图。

由图3可知,基体和涂层的残余热应力均表现为拉应力,但涂层的残余热应力明显大于基体的残余热应力。另外,4种氧化物涂层的残余热应力最大值均位于涂层与基体结合界面的外边缘。其中,残余应力最大值最大的是 Ta_2O_5 涂层(32.2 MPa),其次是 Nb_2O_5 涂层(19.7 MPa)和 ZrO_2 涂层(10.2 MPa),最小的是 TiO_2 涂层(1.03 MPa)。这主要是由于4种涂层与TC4的热膨胀系数差异不同所致。由表1可知,4种氧化物涂层中,与TC4钛合金热膨胀系数差异最大的是 Ta_2O_5 涂层,其次是 Nb_2O_5 和 ZrO_2 涂层,最小的是 TiO_2 涂层。涂层与基体之间的热膨胀系数差异越大,其结合界面的残余热应力越大^[24]。Xie L. L.等^[25]通过有限元方法研究了SiC过渡层的界面特征,及其对等离子喷涂ZrC基涂层残余应力的影响,发现纯谷形态的正弦波界面能降低界面残余应力,降低涂层开裂的风险,并通过试验验证了分析结果。可见,在厚度相同的情况下,上述4种氧化物涂层中,与TC4钛合金结合性能最好的是 TiO_2 涂层,最差的是 Ta_2O_5 涂层。

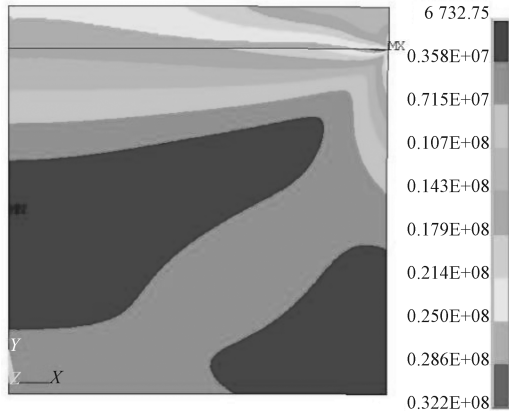
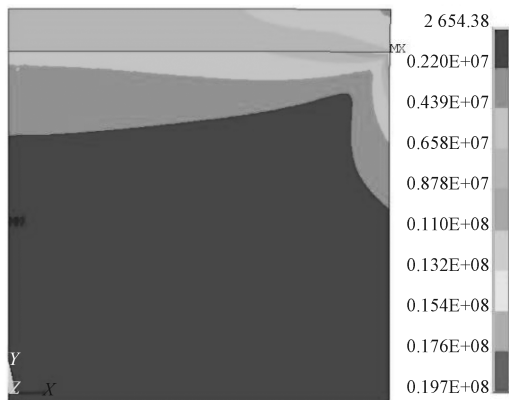
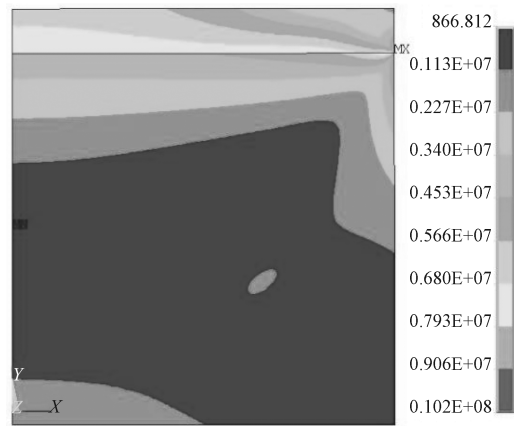
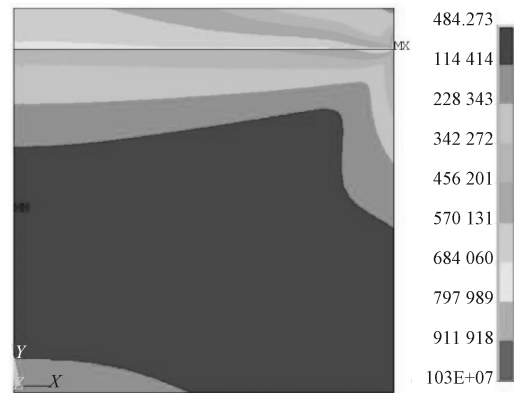
a) Ta_2O_5 b) Nb_2O_5 c) ZrO_2 d) TiO_2

图3 不同氧化物涂层的残余应力云图

Fig. 3 Residual stress nephogram of different oxide coatings

2.2 涂层厚度对残余热应力的影响

根据2.1节的分析结果,选择与TC4钛合金的热膨胀系数相差最大的 Ta_2O_5 涂层作为研究对象,分析涂层厚度对残余热应力的影响。设定涂层厚度为1.0~4.0 μm ,步进为0.5 μm ,得到图4所示残余热应力最大值随涂层厚度的变化曲线。

由图4可知,当 Ta_2O_5 涂层厚度由1 μm 增加到4.0 μm 时,涂层中的残余热应力最大值呈现先减小后增大的趋势,其中厚度为2.5 μm 时的残余热应力最大值最小(31.9 MPa)。基于涂层残余应力与结合力之间的关系,可以推断,随着涂层厚度的增加, Ta_2O_5 涂层的结合力呈现先增加后减小的趋势,当厚度为2.5 μm 时,结合力较大。该现象与卓国海^[26]的研究结论一致。由于涂层的制备成本与其厚度有关,较大的厚度会导致制备成本增加。因此,设计涂层时,需选择合适的涂层厚度,以降低涂层的残余热应力和制备成本。

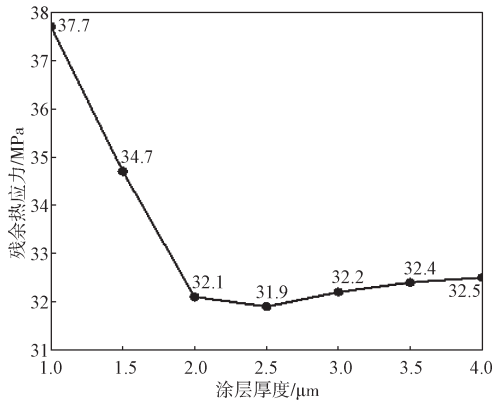


图4 涂层厚度对残余热应力最大值的影响

Fig. 4 Effect of coating thickness on the maximum value of residual thermal stress

2.3 涂层结构对残余热应力的影响

涂层结构对残余热应力的大小和分布有很大影响^[15-16]。为此,以Ta₂O₅涂层为例,分析单层涂层、复合涂层和梯度涂层3种结构涂层的残余热应力分布特征。如图5所示,S-Ta₂O₅涂层为单层Ta₂O₅;C-Ta₂O₅复合涂层共3层,即中间层Ti和Ti-Ta₂O₅复合层(Ti+50%Ta₂O₅)以及表面层Ta₂O₅;G-Ta₂O₅梯度涂层共6层,即中间层Ti和Ti-Ta₂O₅梯度层(含成分梯度变化的4个Ti+xTa₂O₅层)以及表面层Ta₂O₅。根据Liu Y. M.等^[27]的研究结果,中间层厚度为0.3 μm左右时,涂层/基体系统具有最佳的结合强度。设C-Ta₂O₅复合涂层中Ti层和Ti+50%Ta₂O₅层的厚度均为0.3 μm,G-Ta₂O₅梯度涂层中的Ti层及成分梯度变化的4个Ti+xTa₂O₅层的厚度均为0.3 μm。

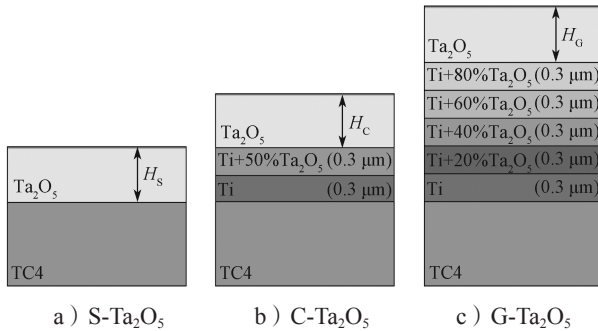


图5 涂层结构示意图

Fig. 5 Schematic diagram of the coating structure

涂层材料Ta₂O₅和Ti的热物性参数分别见表1和表2。Ti-Ta₂O₅复合材料的热物性参数由复合材料的混合原理来确定^[28]。Ti-Ta₂O₅复合材料的弹性模量公式^[28]为

$$E_c = E_a V_a + E_b V_b, \quad (1)$$

式中: E_c 、 E_a 、 E_b 分别为复合材料、Ta₂O₅、Ti 的弹性模量;

V_a 、 V_b 分别为 Ta₂O₅、Ti 的体积分数, $V_b = 1 - V_a$ 。

Ti-Ta₂O₅ 复合材料的热膨胀系数^[28]为

$$\alpha_c = \frac{\sum \alpha_i E_i V_i}{\sum E_i V_i}, \quad (2)$$

式中: α_c 为涂层材料的平均热膨胀系数;

α_i 、 E_i 、 V_i 分别为涂层中各材料的热膨胀系数、弹性模量和体积分数。

由公式(1)和公式(2)计算得到的C-Ta₂O₅复合涂层和G-Ta₂O₅梯度涂层的热物性参数见表2。

表2 涂层材料的热物性参数

Table 2 Thermophysical parameters of coating materials

材料	弹性模量 / GPa	热膨胀系数 / 10 ⁻⁶ K ⁻¹	导热率 / (Wm ⁻¹ K ⁻¹)	泊松比
Ti	116.0	9.00	17.0	0.41
Ti+20%Ta ₂ O ₅	120.8	7.75	20.2	0.37
Ti+40%Ta ₂ O ₅	125.6	6.59	23.4	0.34
Ti+50%Ta ₂ O ₅	128.0	6.04	25.0	0.32
Ti+60%Ta ₂ O ₅	130.4	5.52	26.6	0.30
Ti+80%Ta ₂ O ₅	135.2	4.53	29.8	0.27

1) 表面层厚度相同时,不同结构Ta₂O₅涂层的残余热应力

假定表面层Ta₂O₅的厚度均为2.5 μm,即图5中的 $H_s = H_c = H_g = 2.5 \mu\text{m}$,那么S-Ta₂O₅涂层、C-Ta₂O₅复合涂层和G-Ta₂O₅梯度涂层的总厚度分别为2.5, 3.1, 4.0 μm。通过有限元分析得到图6所示的残余热应力云图。

由图6可知,3种涂层的残余热应力均表现为拉应力,而且残余热应力最大值均出现在相邻层热膨胀系数差异最大的结合界面。其中,S-Ta₂O₅涂层的残余热应力最大值(31.9 MPa)出现在Ta₂O₅涂层和TC4基体的结合界面(见图6a),C-Ta₂O₅复合涂层的残余热应力最大值(29.6 MPa)出现在Ti-Ta₂O₅复合层与中间层Ti的结合界面(见图6b),而G-Ta₂O₅梯度涂层的残余热应力最大值(27.5 MPa)则位于Ti+20%Ta₂O₅层与中间层Ti的结合界面(见图6c)。结果表明,相比于单层和复合涂层,梯度涂层的最大残余热应力值分别约下降了13.8%和7.1%。这是因为Ti-Ta₂O₅复合材料的热膨胀系数介于Ti和Ta₂O₅之间,将其作为中间层能缓解Ta₂O₅涂层与

TC4 基体之间热膨胀系数的失配问题，从而降低了涂层 / 基体系统的界面应力，且 Ti-Ta₂O₅ 梯度层层数越多，涂层 / 基体结合界面的应力梯度越小。该分析结果与刘榕芳等^[29]的研究结论一致。

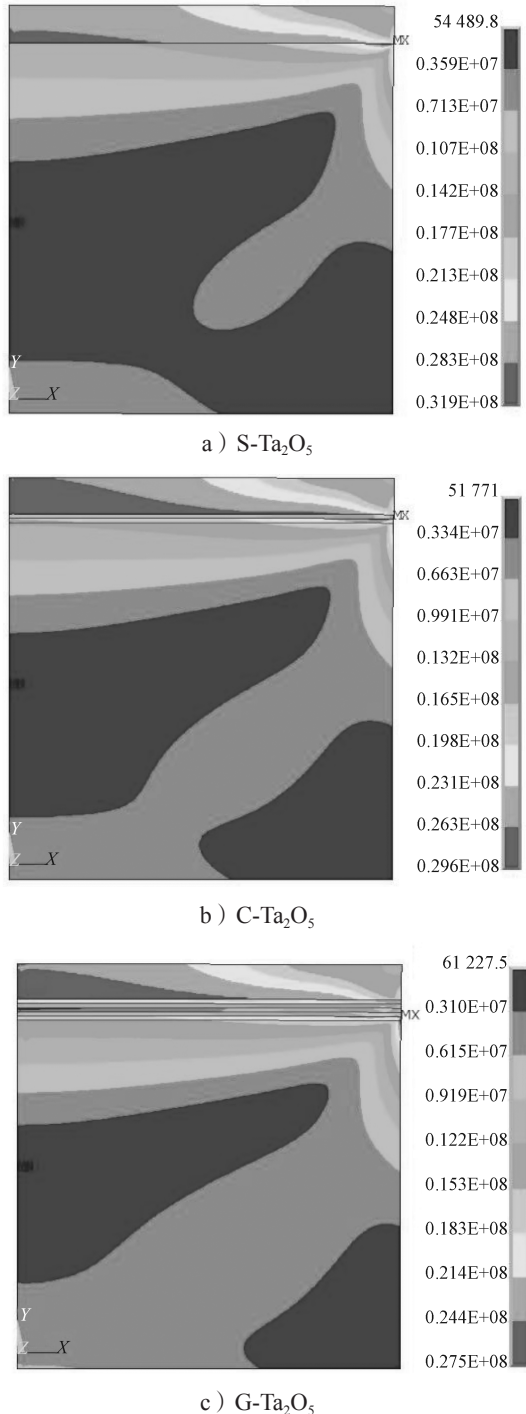


图 6 表面层厚度相同情况下不同结构 Ta₂O₅ 涂层的残余热应力云图

Fig. 6 Residual stress nephogram of Ta₂O₅ coating of different structures with the same surface layer thickness

2) 涂层总厚度相同时，不同结构 Ta₂O₅ 涂层的残余热应力

设涂层的总厚度为 4.0 μm，Ti 层、Ti-Ta₂O₅ 复合层以及 Ti-Ta₂O₅ 梯度涂层中各层的厚度均为 0.3 μm，那么图 5 中 H_S、H_C、H_G 分别为 4.0、3.4、2.5 μm。通过分析得到图 7 所示的不同结构 Ta₂O₅ 涂层残余热应力最大值。

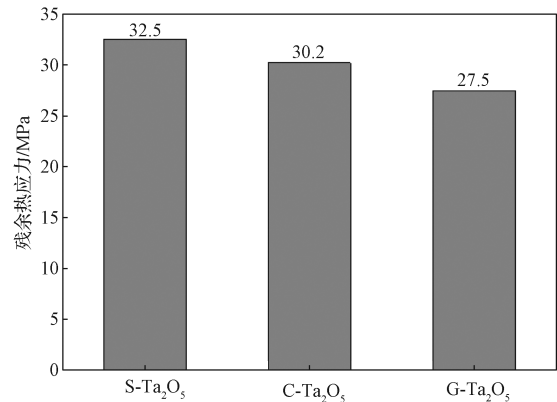


图 7 涂层总厚度相同情况下不同结构 Ta₂O₅ 涂层的残余热应力最大值

Fig. 7 Maximum residual thermal stress nephogram of Ta₂O₅ coating of different structures with the same total thickness

由图 7 可知，在涂层总厚度相同的情况下，G-Ta₂O₅ 梯度涂层的残余热应力最大值为 27.5 MPa，较单层涂层（32.5 MPa）和复合涂层（30.2 MPa）的残余热应力最大值分别降低 15.4% 和 8.9%。这是由于梯度结构使 TC4 基体到 Ta₂O₅ 涂层的热膨胀系数等热物性参数呈梯度变化，减小了涂层与基体之间的性能差异，从而降低了涂层 / 基体系统的残余热应力^[30]。该分析结果与文献[19]、[31]的报道一致。另外，通过优化中间梯度层的结构，还可以进一步降低残余热应力，提高涂层的结合性能。

4 结论

利用有限元方法分析了钛合金 TC4 表面分别溅射沉积的 Ta₂O₅、Nb₂O₅、ZrO₂ 和 TiO₂ 的 4 种氧化物涂层的残余热应力分布情况，并以 Ta₂O₅ 涂层为例，研究了涂层的厚度与结构对残余热应力最大值的影响，得到如下结论：

1) 当涂层厚度为 3 μm 时，TC4 钛合金表面的 Ta₂O₅、Nb₂O₅、ZrO₂ 和 TiO₂ 涂层中的残余热应力均表现为拉应力，应力最大值均出现在涂层与基体结

合界面的外边缘。涂层与基体的热膨胀系数差异越大, 涂层中的残余热应力最大值越大。相比之下, 4 种氧化物涂层中, 残余热应力最大值最大的是 Ta_2O_5 (32.2 MPa), 其次是 Nb_2O_5 (19.7 MPa) 和 ZrO_2 (10.2 MPa), 最小的是 TiO_2 (1.03 MPa)。

2) 当涂层厚度由 1 μm 增加到 4 μm 时, $TC4Ta_2O_5$ 涂层的残余热应力最大值呈现先减小后增大的趋势, 其中厚度为 2.5 μm 时的残余热应力最大值最小。

3) 对于单层、复合层和梯度层结构的 Ta_2O_5 涂层来说, 当表面层厚度均为 2.5 μm 时, G- Ta_2O_5 梯度涂层的残余热应力最大值为 27.5 MPa, 比单层涂层 (31.9 MPa) 和复合涂层 (29.6 MPa) 分别降低 13.8% 和 7.1%; 当涂层总厚度为 4 μm 时, 梯度结构涂层的残余热应力最大值 (27.5 MPa) 比单层涂层 (32.5 MPa) 和复合涂层 (30.2 MPa) 分别降低 15.4% 和 8.9%。

参考文献:

- [1] RAKSHIT R, DAS A K. A Review on Cutting of Industrial Ceramic Materials[J]. Precision Engineering, 2019, 59: 90-109.
- [2] AYODE OTITOJU T, UGOCHUKWU OKOYE P, CHEN G T, et al. Advanced Ceramic Components: Materials, Fabrication, and Applications[J]. Journal of Industrial and Engineering Chemistry, 2020, 85: 34-65.
- [3] 崔福斋, 郭牧遥. 生物陶瓷材料的应用及其发展前景[J]. 药物分析杂志, 2010, 30(7): 1343-1347.
CUI Fuzhai, GUO Muyao. Applications of Bioceramics and Its Future[J]. Chinese Journal of Pharmaceutical Analysis, 2010, 30(7): 1343-1347.
- [4] 向阳, 王义, 朱程鑫, 等. 氧化物/氧化物陶瓷基复合材料研究进展[J]. 现代技术陶瓷, 2020, 41(6): 394-404.
XIANG Yang, WANG Yi, ZHU Chengxin, et al. Research Progress of Oxide/Oxide Ceramic Matrix Composites[J]. Advanced Ceramics, 2020, 41(6): 394-404.
- [5] ALANYALI H, KECELI S A. A Study on the Evaluation of the Cytotoxicity of Al_2O_3 , Nb_2O_5 , Ta_2O_5 , TiO_2 and ZrO_2 [J]. Turkish Journal of Engineering and Environmental Sciences, 2004, 28: 49-54.
- [6] HU W, XU J, LU X L, et al. Corrosion and Wear Behaviours of a Reactive-Sputter-Deposited Ta_2O_5 Nanoceramic Coating[J]. Applied Surface Science, 2016, 368: 177-190.
- [7] 陈宏, 郝建民. 医用镁合金 ZrO_2 陶瓷膜制备及其骨生物活性研究[J]. 稀有金属材料与工程, 2014, 43(1): 150-153.
CHEN Hong, HAO Jianmin. Study on Preparing of ZrO_2 Ceramic Coating and Bone Biological Activity of Magnesium Alloys for Medicine[J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2014, 43(1): 150-153.
- [8] HAN C M, KIM H E, KOH Y H. Creation of Hierarchical Micro/Nano-Porous TiO_2 Surface Layer Onto Ti Implants for Improved Biocompatibility[J]. Surface and Coatings Technology, 2014, 251: 226-231.
- [9] VELTEN D, EISENBARTH E, SCHANNE N, et al. Biocompatible Nb_2O_5 Thin Films Prepared by Means of the Sol-Gel Process[J]. Journal of Materials Science: Materials in Medicine, 2004, 15(4): 457-461.
- [10] ZHANG X C, GONG J M, TU S D. Effects of Spraying Condition and Material Properties on the Residual Stress in Plasma Spraying[J]. Journal of Materials Science and Technology, 2004, 20(2): 149-153.
- [11] POULON-QUINTIN A, FAURE C, TEULÉ-GAY L, et al. A Multilayer Innovative Solution to Improve the Adhesion of Nanocrystalline Diamond Coatings[J]. Applied Surface Science, 2015, 331: 27-34.
- [12] CAPOTE G, LUGO D C, GUTIÉRREZ J M, et al. Effect of Amorphous Silicon Interlayer on the Adherence of Amorphous Hydrogenated Carbon Coatings Deposited on Several Metallic Surfaces[J]. Surface and Coatings Technology, 2018, 344: 644-655.
- [13] LIANG J, YIN X Y, LIN Z Y, et al. Microstructure and Wear Behaviors of Laser Cladding In-Situ Synthetic $(TiB_x+TiC)/(Ti_2Ni+TiNi)$ Gradient Composite Coatings[J]. Vacuum, 2020, 176: 109305.
- [14] 程西云, 何俊, 王如团. 梯度涂层结构设计制备及应用研究现状[J]. 润滑与密封, 2010, 35(11): 111-114.
CHENG Xiyun, HE Jun, WANG Rutuan. The Structure Design of Function Graded Material Coating and Its Application Development[J]. Lubrication Engineering, 2010, 35(11): 111-114.
- [15] ALI R, SEBASTIANI M, BEMPORAD E. Influence

- of Ti-TiN Multilayer PVD-Coatings Design on Residual Stresses and Adhesion[J]. *Materials & Design*, 2015, 75: 47-56.
- [16] BEMPORAD E, SEBASTIANI M, CASADEI F, et al. Modelling, Production and Characterisation of Duplex Coatings (HVOF and PVD) on Ti-6Al-4V Substrate for Specific Mechanical Applications[J]. *Surface and Coatings Technology*, 2007, 201(18): 7652-7662.
- [17] DING Z L, ZHOU Q, WANG Y, et al. Microstructure and Properties of Monolayer, Bilayer and Multilayer Ta₂O₅-Based Coatings on Biomedical Ti-6Al-4V Alloy by Magnetron Sputtering[J]. *Ceramics International*, 2021, 47(1): 1133-1144.
- [18] 张海波, 丁泽良, 单湘衡, 等. 镁合金表面 TaC/TaC-Mg/Mg 梯度涂层的残余热应力分析 [J]. *包装学报*, 2020, 12(5): 45-51.
ZHANG Haibo, DING Zeliang, SHAN Xiangheng, et al. Analysis of Thermal Residual Stresses of TaC/TaC-Mg/Mg Gradient Coating on Magnesium Alloy[J]. *Packaging Journal*, 2020, 12(5): 45-51.
- [19] 周 泉. 医用钛合金表面 Ta₂O₅/Ta₂O₅-Ti/Ti 复合涂层的制备与性能研究 [D]. 株洲: 湖南工业大学, 2020.
ZHOU Quan. Preparation and Properties of Ta₂O₅/Ta₂O₅-Ti/Ti Composite Coating on Titanium Alloy for Medical Application[D]. Zhuzhou: Hunan University of Technology, 2020.
- [20] MITTERHUBER L, KRAKER E, DEFREGGER S. Structure Function Analysis of Temperature-Dependent Thermal Properties of Nm-Thin Nb₂O₅[J]. *Energies*, 2019, 12(4): 610.
- [21] CHEN H C, HUANG C Y, CHENG P W. Stress Mechanisms of SiO₂ and Nb₂O₅ Thin Films Sputtered on Flexible Substrates Investigated by Finite Element Method[J]. *Surface and Coatings Technology*, 2018, 344: 449-457.
- [22] AZoNetwork UK Ltd.. Zirconia (ZrO₂)-Material, Properties and Applications of Zircalox Ceramics by International Syalons[EB/OL]. [2021-05-28]. <https://www.azom.com/article.aspx?ArticleID=4507>.
- [23] 闫翔宇, 袁 颖, 张树人, 等. SiO₂-TiO₂/聚四氟乙烯复合材料的制备及热膨胀性能 [J]. *复合材料学报*, 2013, 30(6): 108-113.
YAN Xiangyu, YUAN Ying, ZHANG Shuren, et al. Fabrication and Thermal Expansion Behavior of SiO₂-TiO₂ Ceramic Filled PTFE Composites[J]. *Acta Materialiae Compositae Sinica*, 2013, 30(6): 108-113.
- [24] 熊华平, 吴世彪, 陈 波, 等. 缓解陶瓷/金属连接接头残余热应力的方法研究进展 [J]. *焊接学报*, 2013, 34(9): 107-112, 118.
XIONG Huaping, WU Shibiao, CHEN Bo, et al. Progress of Methods for Decreasing Residual Thermal Stresses in Ceramic /Metal Joints[J]. *Transactions of the China Welding Institution*, 2013, 34(9): 107-112, 118.
- [25] XIE L L, WANG L, NIU Y R, et al. Influence of Interface Morphology of Transition Layer on the Residual Stresses of Plasma Sprayed ZRC-Based Coatings Examined by Finite Element Simulations[J]. *Ceramics International*, 2019, 45(10): 13037-13045.
- [26] 卓国海. 类金刚石薄膜的膜/基界面调控及其机械力学性能研究 [D]. 赣州: 江西理工大学, 2015.
ZHUO Guohai. Research on Interface Regulation and Mechanical Properties of Diamond-Like Carbon Films[D]. Ganzhou: Jiangxi University of Science and Technology, 2015.
- [27] LIU Y M, LI L H, CAI X, et al. Effects of Pretreatment by Ion Implantation and Interlayer on Adhesion between Aluminum Substrate and TiN Film[J]. *Thin Solid Films*, 2005, 493: 152-159.
- [28] 卢 平, 刘佐民. 基于 α 因子的复合材料弹性模量混合律模型 [J]. *武汉理工大学学报*, 2008, 30(9): 19-23.
LU Ping, LIU Zuomin. Mixed-Mode of Elastic Modulus Composites Based on the α Factor[J]. *Journal of Wuhan University of Technology*, 2008, 30(9): 19-23.
- [29] 刘榕芳, 肖秀峰, 林岚云, 等. 电沉积 HA/TiO₂ 复合涂层的结合强度和热稳定性研究 [J]. *无机化学学报*, 2004, 20(2): 225-230.
LIU Rongfang, XIAO Xiufeng, LIN Lanyun, et al. Study on the Bonding Strength and Thermal Stability of Electrodeposition HA/TiO₂ Composite Coating[J]. *Chinese Journal of Inorganic Chemistry*, 2004, 20(2): 225-230.
- [30] 谭 超, 何卫锋, 曹 鑫, 等. 多层梯度结构对 TiAlSiN 涂层摩擦磨损性能的影响 [J]. *中国表面工程*, 2018, 31(3): 68-76.
TAN Chao, HE Weifeng, CAO Xin, et al. Effects of Gradient Multilayer Structure on Tribological Property of TiAlSiN Coating[J]. *China Surface Engineering*, 2018, 31(3): 68-76.

- [31] 张显程, 徐滨士, 王海斗, 等. $ZrO_2/NiCoCrAlY$ 功能梯度涂层残余应力分析 [J]. 材料热处理学报, 2005, 26(2): 86-89.
ZHANG Xiancheng, XU Binshi, WANG Haidou, et al. Analysis on the Residual Stresses in Functionally

Gradient $ZrO_2/NiCoCrAlY$ Coatings[J]. Transactions of Materials and Heat Treatment, 2005, 26(2): 86-89.

(责任编辑: 邓 彬)

Analysis of Residual Thermal Stress of Medical Oxide Ceramic Coating on TC4 Titanium Alloy

DING Yifan, SHAN Xiangheng, YUAN Qianhong, WANG Hao, TANG Yinghong, DING Zeliang

(College of Mechanical Engineering, Hunan University of Technology, Zhuzhou Hunan 412007, China)

Abstract: The residual thermal stress distribution characteristics of Ta_2O_5 , Nb_2O_5 , ZrO_2 , and TiO_2 medical oxide ceramic coatings on TC4 titanium alloy were analyzed via the finite element method, and the influence of coating thickness and structure on the maximum residual thermal stress value of Ta_2O_5 layer was investigated. The results show that the residual thermal stress in the four oxide coatings is tensile, and the maximum stress value is located at the outer edge of the coating/substrate interface. Among them, Ta_2O_5 coating has the highest maximum residual thermal stress value (32.2 MPa), followed by Nb_2O_5 coating (19.7 MPa) and ZrO_2 coating (10.2 MPa), and then TiO_2 coating (1.03 MPa). When the coating thickness increases from 1 μm to 4 μm , the maximum residual thermal stress value of Ta_2O_5 coating decreases first and then increases. Ta_2O_5 layer with 2.5 μm thickness shows the smallest maximum residual stress value. For Ta_2O_5 coatings with different structures, the maximum residual thermal stress value in ascending order is gradient coating, composite coating, single-layer coating.

Keywords: titanium alloy; oxide coating; finite element analysis; residual thermal stress