

国家自然科学基金重大项目

材料的损伤断裂机理 和宏微观力学理论

黄克智 肖纪美 主编



清华大学出版社

<http://www.tup.tsinghua.edu.cn>

国家自然科学基金重大项目

材料的损伤断裂机理和 宏微观力学理论

黄克智 肖纪美 主编

清华大学出版社

(京)新登字 158 号

内 容 提 要

“材料损伤断裂机理与宏微观力学理论”系国家自然科学基金支持的重大项目(项目批准号为 19392300),经专家组验收,一致认为本项目取得了一批重要成果,并达到了国际先进水平,具有较大的国际影响。本书系统地整理并集中反映了项目的部分成果,主要包括裂端位错发射和断裂位错理论、脆性材料的微裂纹扩展区损伤模型、变形与损伤的局部化理论、面心立方晶体疲劳损伤的取向和晶界效应、材料与薄膜结构的强韧化力学原理以及环境断裂等内容。

本书供从事力学和材料科学的研究人员、教师及研究生学习参考。

图书在版编目(CIP)数据

材料的损伤断裂机理和宏微观力学理论/黄克智,肖纪美主编. —北京:清华大学出版社, 1999

ISBN 7-302-03713-2

I. 材… I. ①黄… ②肖… II. ①材料-损伤(力学)-理论 ②材料-断裂机理 ③材料力学 IV. TB301

中国版本图书馆 CIP 数据核字(1999)第 42882 号

出版者:清华大学出版社(北京清华大学学研大厦,邮编 100084)

<http://www.tup.tsinghua.edu.cn>

印刷者:清华大学印刷厂

发行者:新华书店总店北京发行所

开 本: 787×1092 1/16 印张: 15.5 字数: 364 千字

版 次: 1999 年 12 月第 1 版 2000 年 8 月第 2 次印刷

书 号: ISBN 7-302-03713-2/O·221

印 数: 1001~2000

定 价: 38.00 元

序

材料的破坏过程是力学家与材料学家为之奋斗了近一个世纪的多尺度、跨学科难题。固体力学的破坏过程与流体力学的湍流问题是力学中公认的世纪难题,而且前者甚至比后者还更为复杂,因为流体力学还有一个 Navier-Stokes 方程可以遵循,而固体力学的本构关系与破坏过程还没有公认可遵循的方程。因断裂、疲劳、腐蚀、磨损而造成的破坏占美、日等国每年国民经济总值的 6%~8%。据劳动部统计,我国在 20 世纪 80 年代发生的锅炉和压力容器的爆炸事故比工业化国家高 10 倍(其中恶性事故高 100 倍),人员累计伤亡居国内劳动安全事故第二位。宏观断裂力学的发展曾推动了 30 年来破坏研究面貌的改观,而破坏力学宏微观理论的出现将使人们对材料破坏行为的研究上升到一个新高度,从而将材料宏观失效与其细观结构及更深层次内发生的断裂物理、断裂化学机理相联系,推动力学界思维方式的更新和材料科学的定量化发展。材料的损伤、断裂机理和宏微观力学理论的深入研究将有助于促进力学、材料科学、物理学、化学领域的学科交叉与深化。它通过引入多层次的缺陷背景和损伤、断裂机制,如细观层次的微空洞、微裂纹、界面和剪切带这四种典型破坏基元,和微观层次的疲劳物理损伤、韧脆转变和氢致断裂等断裂机理,来研究材料从变形、损伤至失效的全过程。材料损伤、断裂机理和宏微观力学理论的研究,可为我国在下一个世纪降低破坏现象导致的经济损失及显著减少劳动事故奠定基础,直接或间接导致巨大的经济和社会效益。

以宏微观结合理论为主要科学标志的破坏科学正成为国际当代力学和材料科学交叉领域在 20 世纪 90 年代的研究前沿。美国的各种研究决策机构(NSF, ASME, DARPA, ONR)均大力资助这一新兴科研领域。国际上从 80 年代以来在细观力学、界面力学、细微观计算力学及原子层次断裂机理上取得了重大的学科性突破,并已逐步有效地指导材料强韧化设计和新型结构材料的研究。但这一新兴学科领域尚处于发展阶段。目前理论水平主要局限在模型材料单一因素的研究上,定量化模拟尚不封闭,由细观至微观的连接刚刚起步。实际材料内部的缺陷十分复杂,要建立一个从物质内部结构和缺陷分布来预测和控制其破坏规律的定量学说尚需要进行艰巨的努力。

国家科委与自然科学基金委在“六五”与“七五”期间设立了有关断裂的多项重大项目。如“七五”期间数学部和材料科学工程部分别设立了“金属材料的本构关系与断裂”、“金属材料断裂规律及机理”两个重大项目;中国科学院在“七五”期间设立了“固体的变形、损伤、疲劳、断裂”的院重大项目。上述三项重大项目为材料损伤、断裂机理和宏微观力学理论的研究打下了基础,取得了多项国际瞩目的先进成果。如氢脆和应力腐蚀断裂、弹塑性扩展裂纹尖端场、剪切带与局部流动化理论、高速冲击破坏力学、细观塑性理论、疲劳破坏机理、界面断裂力学与弹塑性缺陷评定方法等均被评价为具有国际先进或领先水平的重要成果。曾获

国家自然科学二等奖 2 项,三等奖 1 项,国家科技进步奖 2 项,国家教委科技进步一等奖和二等奖 5 项,中国科学院科技进步一等奖 1 项,二等奖 2 项,冶金部科技进步二等奖 3 项。中国力学家和材料科学家在材料损伤、断裂机理和宏微观力学理论方面的研究工作已逐步得到国际学术界的承认。

国家自然科学基金与国家攀登项目共同资助了重大项目“材料的损伤、断裂机理和宏微观力学理论”(1993 年 11 月至 1997 年 12 月,项目批准号为 19392300)。本研究项目的总体学术思想是:把微观观察、性能测试、理论模型、数值计算和计算机模拟紧密结合起来。在这一结合路线下,使微观、细观尺度上揭示的变形、损伤和断裂的基本物理规律与定量刻画该物理过程的宏微观力学理论相联系,从而实现具有可操作特色的材料—力学,宏观—细观—微观,实验—计算—理论的三结合,并促进和推动力学和材料科学这两个学科领域的深入发展和相互交缘。

1997 年 12 月 23~24 日,由国家自然科学基金委组织的“材料损伤断裂机理与宏微观力学理论”重大项目验收专家组^①,在清华大学听取了该重大项目和各个课题负责人的汇报,审查了项目和各个课题的总结报告和研究成果目录。项目执行期间,共计发表学术专著 6 部,学术论文 783 篇(其中国际学术刊物中 247 篇,全国性科技期刊中 315 篇,国际会议大会邀请报告 32 篇)。获国家及部委级奖励共 10 项,其中国家自然科学三等奖 2 项,中科院自然科学一等奖 2 项,教委科技进步一等奖 2 项,冶金部科技进步一等奖 1 项。专家组经过了认真的讨论,一致达成下述意见:

1. “材料损伤断裂机理与宏微观力学理论”的重大项目组在国家科委和国家自然科学基金委共同支持下,在 1993 年 11 月至 1997 年 12 月共四年零两个月的期间内完成了项目任务书所规定的各项内容,取得了一批重要成果,造就了一支学术水平高的中青年研究队伍。

2. “八五”期间,重大项目组正在实现力学与材料两个学科研究队伍的结合,该项目组已成为一支能协同进行材料的力学行为研究、处于国际研究前沿的基础性研究队伍。

3. 重大项目组取得了下述学科进展和重要成果:

- (1) 由宏观深入到微细观,在晶体硬化矩阵确定、细观相变塑性本构和原子-连续介质嵌套模型方面取得了重要进展。
- (2) 通过电镜加载原位观察,揭示了位错不均匀发射与纳米裂纹汇合相交织的断裂物理过程,提出了考虑位错发射影响及由位错塞积驱动的准解理断裂的理论模型。
- (3) 利用激光热-力联合加载装置,发现了称为“反冲塞”的新的破坏模式,并提出相应的分析模型。
- (4) 提出了脆性和准脆性材料损伤的微裂纹扩展取向区理论和微裂纹演化的数密度统计理论。
- (5) 建立了可描述细观损伤演化、联系宏-细观损伤变形的损伤演化物理方程,给出了由细观损伤动力学表示的损伤演化率方程;发展了一套可观察、采集细观损伤演化

^① 组长:张兴铃;副组长:高镇同;成员:颜鸣皋,柯伟,伍小平,朱兆祥,刑修三,嵇醒,黄筑平,吴希俊。

的实验和数据处理方法(单脉冲加载和循环加载);建立了可模拟局部化过程的多边形有限元等方法。

- (6) 对多滑移单晶体和具有不同取向与晶界重位因子的双晶体,进行了在疲劳载荷作用下的力学响应和位错结构的精细研究,阐明了多晶体循环应力-应变曲线和晶界疲劳裂纹萌生的特征。
- (7) 建立了热弹性马氏体一类材料相变本构关系的统一热力学理论框架。利用数值模拟展现了由控制相变局部化传播方向而使结构陶瓷增韧的潜力,并在理论指导下初步制备了 Ce-TZP/ Al_2O_3 层状增韧陶瓷。
- (8) 在电致断裂、电致疲劳和电致畸变增韧方面取得重要进展。
- (9) 发现腐蚀和液体金属吸附能促进位错发射和运动,当它发展到临界条件时就导致环境脆断(氢脆,应力腐蚀,液体金属脆)微裂纹的形核。

以上研究成果达到国际先进水平,具有较大的国际影响。建议对该领域的研究继续给予支持。

本书系统地整理并集中反映了项目的部分成果,其中包括上述(2)、(4)~(9)方面的部分成果,现在分章介绍如下。

第 1 章 裂端位错发射和断裂位错理论

材料韧性与脆性行为及其转换机制是断裂物理和力学的关键科学问题之一。1974 年 Rice 和 Thomson 最先提出裂尖发射位错的概念。以后二十多年的研究使人们认识到,裂纹尖端发射位错可能是确定材料韧性-脆性行为最重要的现象之一。但是 Rice 和 Thomson 的理论在裂纹尖端人为地引入了位错芯。这个位错芯是一个非确切的概念,因此难以确切地描述位错成核过程。1992 年 Rice 及其所领导的研究组提出了裂尖位错形核的 Peierls 框架,在原子内聚力思想下研究了不全位错自裂尖的逐步形成过程,摒弃了不准确的位错芯概念。该项研究提出了一个位错形核特征量:不稳定堆垛能,其重要性相当于 Griffith 为描述脆性断裂过程在 1920 年提出的断裂表面能。美国海军研究局(ONR)评价这项研究是近十年来这一领域的最重大的研究发现。以该研究为契机,一批固体力学家的研究开始进入传统的固体物理领域。但是,Rice 等虽然对位错在裂纹尖端的成核过程作了详尽的分析,他们的分析方法难以推广到分析裂纹尖端位错发射的过程。王自强等成功地对裂纹尖端及位错发射过程进行了力学分析,建立了晶体准解理断裂的位错理论。褚武扬等通过大量的原位高倍 TEM 的实验观察,揭示了裂纹尖端无位错区的物理本质,发现了纳米量级微裂纹的形核过程。这些实验观察到的图像,生动地表明纳米裂纹完全不同的演化特征是韧性材料和脆性材料内禀特征本质区别的标志。因此可以认为,在材料细观结构、内部缺陷与材料变形、破坏力学之间开始架起了定量沟通的桥梁。在宏观连续介质力学、细观试验观测、细观力学分析及分子动力学模拟计算的诸层次中逐步建立了定量的跨尺度连接。

第 1 章主要反映中科院力学所、北京科技大学、清华大学等的研究成果。

第 2 章 脆性材料的微裂纹扩展区损伤模型

材料从变形到破坏要经历一个复杂的过程,这个过程中材料损伤程度不断地发展。用什么样的参量来描述材料的损伤,目前得到学术界普遍承认与应用的只有 Gurson 模型中所用的、并经过 Needleman 与 Tvergaard 等人修正的孔洞体积比。提出过各种各样的损伤描述参量,莫衷一是,但是得到较多人认可的不多。例如起自前苏联并在欧洲曾风行一时的、以有效面积概念为基础的折减卸载模量,有些美国学者^①认为有两个缺点:一是“为时太晚”,换句话说,等到材料的卸载模量有所降低时,材料已经濒临破坏了;另一是“过于宏观”,也就是细微观的机制反映不够。本章中针对含微裂纹的固体,提出了一种在取向空间中的微裂纹扩展区的损伤描述方法,可以预测材料拉伸与压缩时各个变形阶段中的细观损伤机制(如张开微裂纹的一次和二次扩展,闭合微裂纹的摩擦滑移、自相似扩展和弯折扩展),分析应力跌落和应变软化所对应的损伤和变形局部化过程以及残余变形的细观机理。并可得到在复杂加载路线下材料的细观损伤演化与各向异性损伤的本构关系。虽然由于脆性材料中多种损伤机制并存,该细观模型不可避免地比较复杂,却是在细观损伤力学中一个重要的尝试。

第 2 章主要反映清华大学的研究成果。

第 3 章 变形与损伤的局部化理论

变形局部化是材料与结构破坏的一种重要模式。在第 3 章中建立了一套较系统的可描述细观损伤演化、联系宏观、细观损伤变形的损伤演化物理方程,从理论上探索损伤形核机理和宏观尺度过程。建立了一套可观察、采集细观损伤演化的实验和数据处理方法(单脉冲加载和循环加载)。提出了在循环加载下损伤局部化是由裂纹群体演化过程所致,损伤位形敏感性和损伤矩响应则是该过程的主要特点;单脉冲加载下局部化的微观机理表明,局部化发展后期微结构间强相互作用是主导因素。形成了从细观力学模型到宏观力学行为的、多晶体材料塑性变形局部化的数值模拟的完整方案和模拟系统。形成了初步理论框架,来深入地认识相变局部化现象以及对裂纹行为的影响,并深入研究了一类陶瓷材料软化失稳和记忆合金的相变行为。

第 3 章主要反映中科院力学所、金属所、清华大学等的研究成果。

第 4 章 面心立方晶体疲劳损伤的取向和晶界效应

本章通过对疲劳损伤与裂纹萌生的晶体学关系的研究,揭示了循环形变物理损伤的本质,为长期争论的“晶体循环应力-应变曲线是否有平台区”的问题提供了结论性的解释。通过对晶界在疲劳损伤早期的作用的研究,揭示了晶界的疲劳开裂主要决定于组元晶体的取

^① 据 A. Needleman 与本书主编之一黄克智在 90 年代初的一次谈话。

向,而不是如文献报道的决定于重位点阵参数表示的晶界结构。

晶界附近的残余应力及其消除、三铝化镍/铝界面的疲劳裂纹萌生、氮化硅基陶瓷晶界相与疲劳性能的关系、界面裂纹尖端的应力应变分析、双晶循环变形损伤计算模拟,以及界面附近三维位移场的测量结果,对于新材料设计和实际应用均有指导作用。

第4章主要反映中科院金属所、北京科技大学等的研究成果。

第5章 材料与薄膜结构的强韧化力学原理

材料强韧化设计应以宏微观断裂力学为纲,涉及到宏观、细观、微观3个层次。强韧化过程的宏观层次研究在于探讨断裂中能量消耗的分割;细观层次研究在于探讨断裂过程的细观演化和断裂路径的细观几何特征;微观层次研究在于探讨断裂分离时原子运动特征。跨层次的计算需要发展多层次交叠的空间离散技术和时间加速计算技术。作为例子,本章介绍了考虑宏细观连接的梯度塑性计算方案和宏细微观三层嵌套模型。此外还概述了课题组在定量表达材料强韧化过程中所发展的力学计算方法,包括宏细观平均化计算方法、层状结构的Hamilton型计算方法、材料强度的统计计算方法。

本章概述了裂尖屏蔽、裂尖形貌控制、尾区耗能控制、裂纹面桥联、裂纹扩展路径控制这5种强韧化机制的力学原理。在上述强韧化机制的指导下,课题组研制出的Ce-TZP/ Al_2O_3 层状增韧陶瓷的断裂韧性比纯Ce-TZP相变增韧陶瓷提高50%;实现超钝化裂尖形貌的半晶高分子材料的动态断裂应变能提高十余倍;在拖带损伤增韧下聚碳酸酯的撕裂模量增加一个量级;在常规微米晶粒的 Al_2O_3 陶瓷中添加5%~15%的SiC纳米相,使制成的纳米陶瓷复合材料的断裂能达到原基体材料的3.5倍。

在薄膜制备研究中得到了均匀、致密的晶态 $\beta\text{-C}_3\text{N}_4$ 超硬薄膜,纳米压痕计测定该膜的体积模量达到349GPa。发展了压入法和接触疲劳对滚法这两种测量膜基结合强度的有效方法。

第5章主要反映清华大学、大连理工大学、北京科技大学、西安交通大学等的研究成果,也包括与美国Princeton大学Z. Suo教授, Illinois大学Urbana-Champaign校区H. J. Hsia和Y. Huang副教授合作研究的成果。

第6章 环境断裂

本章反映了近五年来的创新性成果,它们是:

- (1) 发现金属材料任何脆性裂纹(脆性材料,应力腐蚀,氢脆,液体金属脆)的成核均是位错发射和运动到达临界状态,从而局部应力集中等于原子键合力的结果。
- (2) 各种环境(腐蚀介质、氢、液体金属)通过促进位错的发射和运动,从而在低的外应力下微裂纹就成核。环境能阻碍微裂纹钝化成空洞从而脆性扩展。环境也使塑性应变局部化,从而导致宏观脆断。
- (3) 发现在应力腐蚀体系中钝化膜(或脱合金层)界面会产生附加拉应力,它协助外应

力促进位错发射和运动,导致应力腐蚀。不发生应力腐蚀的体系则测不出膜致拉应力。

- (4) 把氢促进局部塑性变形和氢降低键合力以及氢压相结合,分别提出了氢致韧断、脆断和沿晶断的新理论。
- (5) 发现了一系列新的实验现象:氢和应力促进腐蚀并存在协同作用;发现相间应力腐蚀及阴极腐蚀;1997年国家重点及部门开放实验室评估小组认为,在断裂的微观研究及应力腐蚀这两部分工作达到国际领先水平。

第6章反映北京科技大学的研究成果。

本书第1章由王自强负责编写,第2章由余寿文与冯西桥编写,第3章由白以龙负责编写(其中3.1节由白以龙、凌中执笔,3.2节由洪友士执笔,3.3节由徐永波执笔,3.4节由陆明万、孙庆平执笔),第4章由王中光与林实编写,第5章由杨卫编写,第6章由褚武扬编写。全书结构由黄克智、肖纪美等讨论决定,由黄克智负责审读并提出修改意见。

最后指出,本书远非重大项目(项目批准号:19392300)的全部重要成果,还有例如激光热-力联合加载下“反冲塞”的新破坏模式及分析模型,晶体硬化矩阵确定方法,电致断裂,电致疲劳和电磁增韧方面的成果,以及应变梯度塑性理论方面的成果,因限于篇幅,均未能系统地加以反映,将在今后适当时机介绍。本书的出版得到国家自然科学基金委的资助,特此致谢。

黄克智 肖纪美

1999年4月2日

目 录

第 1 章 裂端位错发射和断裂位错理论	1
1.1 前言	1
1.2 裂端位错行为的实验观察	2
1.2.1 裂端位错发射	2
1.2.2 纳米裂纹形核和演化	4
1.2.3 裂纹尖端原子像	5
1.3 裂端位错发射理论分析	8
1.3.1 早期 Rice-Thomson 理论	8
1.3.2 基于 Peierls 框架的理论模型	10
1.3.3 位错发射理论分析.....	13
1.4 断裂位错理论.....	19
1.4.1 考虑位错发射影响的断裂准则.....	19
1.4.2 准脆性断裂的位错理论.....	23
1.4.3 考虑非线性效应的断裂位错理论.....	31
1.5 裂端位错行为的分子动力学模拟.....	36
1.5.1 计算方法.....	37
1.5.2 裂纹尖端位错发射.....	39
1.5.3 位错发射的不稳定堆垛能.....	41
1.5.4 温度对裂尖位错发射的影响.....	42
1.5.5 裂纹方位与晶体滑移几何对位错发射的影响.....	44
1.5.6 位错列与晶界之间的作用.....	45
1.5.7 三重嵌套模型.....	48
1.5.8 关联参照模型.....	51
参考文献	58
第 2 章 脆性材料的微裂纹扩展区损伤模型	62
2.1 脆性材料拉伸的微裂纹扩展区模型.....	62
2.1.1 单个张开口状微裂纹引起的柔度张量.....	62
2.1.2 三轴拉伸情况下的微裂纹扩展区.....	64
2.1.3 复杂加载下微裂纹扩展区的演化.....	65
2.1.4 脆性损伤材料的本构关系.....	66
2.1.5 准脆性材料本构关系的四个阶段及细观损伤机制.....	67

2.1.6	三维拉伸情况下的软化分析	68
2.1.7	单向拉伸的算例	70
2.2	脆性材料压缩的微裂纹扩展区模型	72
2.2.1	微裂纹的闭合和摩擦滑移	73
2.2.2	闭合微裂纹的自相似扩展及微裂纹扩展区	75
2.2.3	复杂加载条件下微裂纹扩展区的演化及柔度张量的计算	76
2.2.4	微裂纹的弯折扩展	77
2.2.5	单个弯折扩展微裂纹引起的非弹性柔度张量	78
2.2.6	微裂纹弯折扩展的稳定性分析	81
2.2.7	有效柔度张量的计算	83
2.2.8	算例	83
2.2.9	小结	85
2.3	结束语	85
	参考文献	86
第3章	变形与损伤的局部化理论	88
3.1	损伤演化和损伤局部化的规律	88
3.1.1	细观演化实验与方法	88
3.1.2	非均匀损伤变形场的演化理论	95
3.2	疲劳短裂纹群体损伤及其局部化	104
3.2.1	疲劳短裂纹萌生与发展的演化特征	104
3.2.2	裂纹数密度守恒方程的理论和计算结果	106
3.2.3	短裂纹演化行为的计算机模拟	108
3.2.4	裂纹群体损伤演化特征分析	111
3.2.5	疲劳短裂纹群体演化的损伤矩分析	116
3.3	变形局部化形成与微结构演化	118
3.3.1	低碳钢	119
3.3.2	钛合金	122
3.3.3	Al-Li 合金	124
3.3.4	SiCp 颗粒增强 Al-基复合材料	127
3.4	变形局部化的计算模拟与相变局部化	128
3.4.1	多晶体材料塑性变形局部化的数值模拟	128
3.4.2	相变引起的变形局部化与材料失稳现象研究	130
	参考文献	132
第4章	面心立方晶体疲劳损伤的取向和晶界效应	135
4.1	双滑移和多滑移取向单晶体的循环形变	137
4.1.1	循环应力应变响应和初始循环硬化	138

4.1.2	循环应力应变曲线的晶体取向效应	141
4.1.3	铜单晶体在循环形变中形成的形变带	143
4.1.4	位错结构特征及其与晶体取向关系	148
4.2	疲劳损伤的晶界效应	152
4.2.1	双晶体的循环形变特征	152
4.2.2	驻留滑移带与晶界的交互作用及晶界邻域的位错结构	156
4.2.3	疲劳裂纹沿晶界的萌生	160
4.2.4	铜三晶体的循环形变与疲劳损伤	163
4.3	晶体形变的晶体微观力学和有限元分析	164
4.3.1	晶体潜在硬化的指向行为	165
4.3.2	垂直晶界双晶中的应变和分解切应力	167
4.3.3	铜三晶体主滑移系分解切应力的有限元分析	168
4.3.4	铜复晶体主滑移系分解切应力的有限元分析	170
4.4	结语和进一步的工作	171
	参考文献	172

第5章 材料与薄膜结构的强韧化力学原理 175

5.1	引言——强韧材料与中国的技术进步	175
5.1.1	强韧材料构成中国技术起飞的骨架	175
5.1.2	材料强韧化的潜力与范例	176
5.1.3	强韧化的新型薄膜结构与高新技术的发展	177
5.1.4	材料强韧化与宏微观断裂力学	177
5.2	材料强韧化的3个层次	178
5.2.1	裂尖场结构	178
5.2.2	宏观层次：断裂的能量消耗	179
5.2.3	细观层次：断裂过程区与断裂路径	180
5.2.4	微观层次：分离前的原子运动混沌	181
5.3	强韧化过程的力学计算	181
5.3.1	宏细观平均化计算	181
5.3.2	层状结构的细观模拟计算	182
5.3.3	强度的统计计算	182
5.3.4	宏细微观三层嵌套模型	183
5.4	典型强韧化机制的力学原理	184
5.4.1	裂尖屏蔽	184
5.4.2	裂尖形貌控制	186
5.4.3	尾区耗能控制	186
5.4.4	裂纹面桥联	187
5.4.5	裂纹扩展路径控制	188

5.5	强韧化薄膜	189
5.5.1	β -C ₃ N ₄ 超硬薄膜的制备	189
5.5.2	薄膜的界面强度测试	190
5.5.3	约束薄膜的断裂韧性	191
5.6	结束语	191
	参考文献	192
第 6 章	环境断裂	196
6.1	断裂的物理基础	196
6.1.1	断裂和环境断裂	196
6.1.2	位错发射和无位错区	198
6.1.3	微裂纹形核的位错理论	200
6.1.4	韧脆判据	202
6.2	氢致断裂	204
6.2.1	氢在金属中的行为	204
6.2.2	氢促进局部塑性变形	207
6.2.3	氢脆	210
6.2.4	氢致开裂机理	214
6.3	应力腐蚀	219
6.3.1	应力腐蚀基础	219
6.3.2	氢在阳极溶解型应力腐蚀中的作用	223
6.3.3	腐蚀促进局部塑性变形	224
6.3.4	阳极溶解型 SCC 机理	227
	参考文献	231

第 1 章 裂端位错发射和断裂位错理论

1.1 前言

断裂力学的应力强度因子理论和 Griffith 能量理论为线弹性材料脆性断裂提供了重要的理论框架^[1]。Griffith 理论成功地解释了玻璃、陶瓷等脆性材料实测强度远远低于理论强度的内在原因。Griffith 指出：存在于玻璃、陶瓷中的微裂纹是造成这些材料低应力脆断的根源。

Irwin 和 Orowan^[2]对 Griffith 脆断理论作了重大发展,证实了能量释放率可以用更加直观的应力强度因子来表征。提出了材料断裂韧性的新概念,从而为非理想弹性材料的低应力脆断提供了理论基础。

Rice^[2],Cherepanov^[3],Hutchinson^[4],Rice 和 Rosengren^[5]所建立的 J 积分和 HRR 奇性场为弹塑性材料的断裂问题提供了重要的理论基础。但是这些理论建立在经典的连续介质力学框架之上,回避了裂纹尖端真实的物理过程,而把这些物理过程简单地归之为黑盒子。

要想打开黑盒子,弄清裂纹尖端的物理过程,必须对裂纹尖端区域材料的细观结构和缺陷特征及其在外载作用下的演化过程作深入的了解。

材料韧性与脆性行为及其转换机制是断裂物理的关键科学问题。90 年代以来物理学家和力学家围绕着这个挑战性课题进行了大量的研究与探讨。近二十多年的深入研究,使我们清楚地认识到,裂纹尖端发射位错可能是确定材料韧性-脆性行为的最重要现象之一。

最先提出裂尖发射位错概念的是 Rice 和 Thomson^[6]。他们考虑了裂纹与位错之间的交互作用,建立了裂纹尖端发射位错的判据。在此基础上,Thomson^[7]、Weertman^[8]进一步提出了位错屏蔽概念。其后,许多人应用这些概念直接将裂纹尖端形变程度与断裂韧性的增加联系起来,获得材料韧、脆转变判据。

20 世纪 80 年代初期,美国橡树岭国家实验室 Ohr^{[9]~[11]}领导的一个固态物理研究组发表了一系列令人鼓舞的实验结果,掀起了研究裂纹与位错交互作用的热潮。他们利用透射电镜原位拉伸装置对 Ni-Cr 不锈钢,Mo,W,Cu,Al,Ni 和 Nb 及 Fe 等单晶薄膜试样在单向及交变载荷下的裂尖形变特征,特别是裂尖位错发射进行了仔细观察。生动地证实了裂纹尖端发射位错的物理过程,发现了裂尖前方的塑性区是由已发射位错的反塞积群所组成,而在裂纹尖端与塑性区之间存在着一个无位错区。

Burns^[12]描述了 LiF 单晶块体裂纹尖端附近位错分布的蚀坑研究结果。Ohr^[13]推断 Burns 所观察到的位错是由裂纹尖端发射出来的。

Chiao 和 Clarke^[14]关于 SiC 单晶薄膜试样高温下透射电镜原位观察,证实了热激活能对裂尖位错发射的重要作用,并对 Argon^[15]的如下观点给予有力的支持:从裂尖发射的位

错环可以沿着与裂纹前缘相交的滑移面成核和滑出裂尖区域,只要这个滑移面具有最大的分解剪应力。

Lii 等人^[16],Huang 和 Gerberich^[17],Zielinski 等人^[18]及 Marsh 等人^[19]报导了一系列关于铁硅材料(Fe-3wt%Si)裂尖位错发射的实验结果,其中包括 I 型加载下薄膜拉伸试样 TEM 的原位观察;氢环境下袖珍边缺口块体试样裂尖变形特征及亚临界扩展的实验观察。

他们发现,单晶薄膜试样的位错从裂尖沿着两个对称分布的倾斜滑移面发射,形成两条宽度逐渐增加的滑移带。

Narita 等人^[20],Ha 和 Xu^[21]以及 Xu 等人^[22]对于单晶块体试样的实验,同样证实位错从裂端发射及形成无位错区的物理过程。Ha 和 Xu^[21]对铝单晶、铜单晶及 Fe-3%Si 单晶块体试样的实验证实,当滑移面法线与裂纹前沿线夹角 α 等于 90° 时,容易形成无位错区;当 $\alpha \neq 90^\circ$ 时,位错环螺旋线增殖机制可能促成位错不断从裂端发射。

1.2 裂端位错行为的实验观察

80 年代至 90 年代前期已经对裂纹尖端位错行为进行了大量的实验观察。在一定条件下裂纹尖端会发射位错已被大量实验所证实。已发射位错的屏蔽效应及无位错区的存在也得到广泛承认。但是绝大多数实验是针对韧性金属进行的。

对于脆性材料,裂纹尖端会不会发射位错依然是个谜。如果脆性材料裂纹尖端也会发射位错,那么韧性与脆性的物理本质又是什么?

Rice 和 Thomson^[6]的工作将材料分为内禀脆性和内禀韧性两大类。而大量的实验证实^{[16]~[20]},脆性材料在解理断裂之前,通常也伴随有一定数量的位错发射。Ohr^[11]强调裂端发射位错与解理扩展的竞争机制导致了裂纹的 Z 字型扩展。但是对无位错区在裂纹扩展中的作用,尚缺乏深入的认识。

裂纹扩展呈现出多种复杂的物理机制,无位错区(DFZ)在不同机制中所扮演的角色是什么有待进一步探讨。

1.2.1 裂端位错发射

肖纪美、褚武扬领导的研究组对脆性材料裂纹尖端位错行为及纳米微裂纹在无位错区中形核过程进行了系统的实验观察与研究^{[23]~[28]}。

他们选择的脆性材料是 TiAl 和 Ti_3Al+Nb (Ti-24Al+Nb)金属间化合物。块状试样封在 $1 \times 10^{-4} Pa$ 的石英管内,分别在 $1250^\circ C$ (TiAl)和 $1150^\circ C$ (Ti_3Al+Nb)固溶 1.5h,空冷后,再经 $900^\circ C$,2h 均匀化处理。然后切出约 0.2mm 厚的薄片,再用化学或机械的方法减薄至 $30 \sim 50 \mu m$ 。

为了与韧性材料进行对比,他们同时对 310 钢和黄铜进行了相应的实验观察。

他们发现脆性材料(TiAl 和 Ti_3Al+Nb)与韧性材料一样,在透射电子显微镜(TEM)中原位拉伸时,裂纹尖端会发射很多位错。这些从裂尖发射出来的位错,平衡后形成反塞积群。

在最后一个已发射位错与裂纹尖端之间,形成一个无位错区(DFZ),如图 1.1 中 AB 所示。裂尖发射位错并形成 DFZ 之后,往往仍然很尖锐,这是因为沿着裂纹延伸方向发射的螺型位错和刃型位错并不使裂纹钝化。

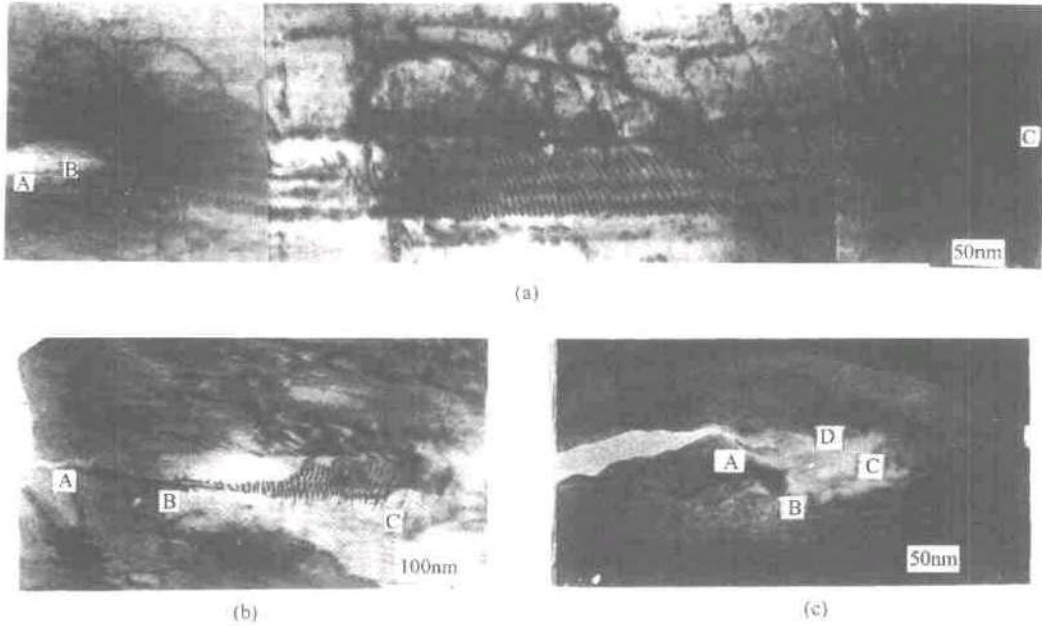


图 1.1 裂尖前方的无位错区(DFZ)

- (a) 韧性材料(310 钢),AB 为 DFZ,BC 是反塞积位错群;
- (b) 脆性材料(Ti_3Al+Nb),AB 为 DFZ,BC 是反塞积位错群;
- (c) 脆性材料($TiAl$)裂尖前方闭合(ABCD 所围)的 DFZ

为了考察无位错的本质,他们在无位错区中获取电子衍射谱。他们发现在一些主衍射斑点附近分裂出一些伴点,这些伴点仅在拉伸过程中才出现,它们和主斑点的间距随衍射斑点指数的升高而增大。图 1.2 显示了典型例子。这些分裂伴点的出现表明无位错区中存在着很强烈的晶格畸变,这是由很大的弹性应变所引起的。他们估算出 DFZ 中的弹性应变约为 0.1(310 不锈钢),0.07(Ti_3Al+Nb)和 0.02($TiAl$)。这清楚地表明,DFZ 是一个高畸变的异常弹性区。

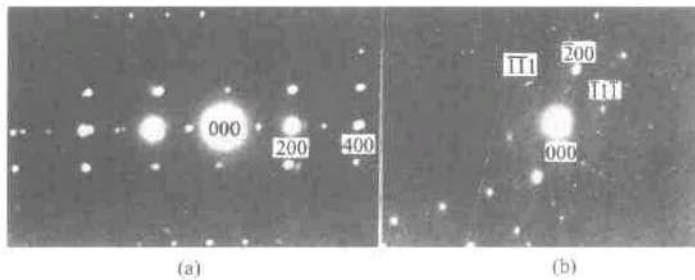


图 1.2 无位错区的选区电子衍射图

- (a) Ti_3Al+Nb ; (b) $TiAl$

1.2.2 纳米裂纹形核和演化

由于裂尖前方的无位错区存在着很高的应力,可以达到原子键合力,因此,纳米裂纹可以在裂纹顶端形核而造成主裂纹的连续扩展。纳米裂纹也可以在 DFZ 中不连续形核^{[23]~[28]}。

图 1.3^[23]表明,310 不锈钢中,D 位置已形成一个长约 10nm 的纳米裂纹;在黄铜的 DFZ 中,a 和 b 位置有两个纳米裂纹(图 1.3(b));图 1.3(c)表明 Ti_3Al+Nb 材料的 DFZ 中,b 处有一个纳米裂纹。

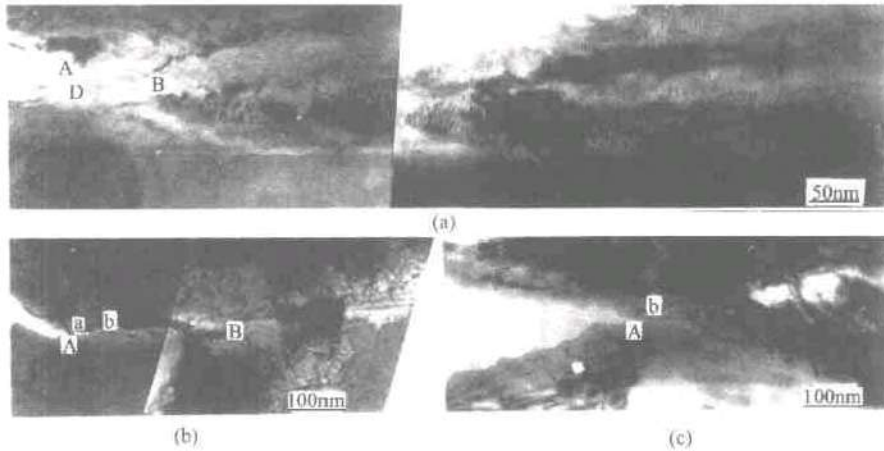


图 1.3 纳米微裂纹在无位错区中不连续形核

- (a) 韧性材料(310 钢),AB 是 DFZ,D 是纳米裂纹;
- (b) 韧性材料(黄铜),AB 是 DFZ,a 和 b 是纳米裂纹;
- (c) 脆性材料(Ti_3Al+Nb),A 是裂尖,b 是纳米裂纹

韧性材料和脆性材料一样,在 DFZ 中会形成纳米级的微裂纹,那么韧性与脆性的本质差别是什么呢?

让我们来考察纳米微裂纹的演化过程。图 1.4^[23]记录了 310 钢中纳米微裂纹的演化过程。图 1.4(a)表明,在 DFZ 中已形成 B,C,D 和 E 4 个纳米裂纹。其中 D 裂纹已钝化成空洞。保持恒位移,D 空洞不断长大,E 裂纹开始钝化成空洞,并出现新的微裂纹 F(图 1.4(b))。在图 1.4(c)中,F 裂纹也已钝化成空洞,并和已连通的 D,E 空洞相连。

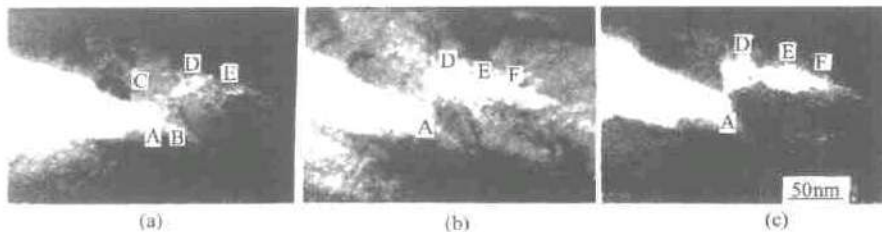


图 1.4 韧性材料(310 钢)中纳米微裂纹钝化成空洞并相互连接的过程

对于脆性材料,纳米微裂纹形核后并不钝化成空洞,而是扩展成解理微裂纹并与主裂纹

连接,或在主裂纹顶端沿解理面开裂。图 1.5 显示了脆性材料 TiAl 中纳米微裂纹形核、自身解理扩展并与主裂纹合并的过程。在恒位移条件下,新的纳米微裂纹又在新的裂纹尖端前方形核。裂纹扩展具有“Z”型模式。因为纳米微裂纹也可以沿 TiAl 的潜在解理面 $\{100\}$, $\{110\}$ 或 $\{111\}$ 上形核,所以图 1.5 中的微裂纹和主裂纹成一角度。

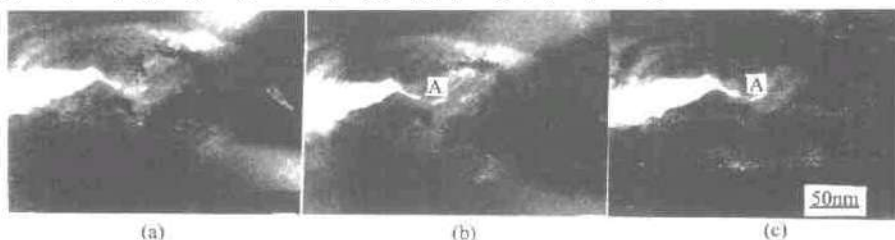


图 1.5 脆性材料(TiAl)中纳米裂纹的形核和解理扩展

图 1.6 表明,纳米微裂纹沿应力最高的解理面形核,导致主裂纹分枝解理扩展。

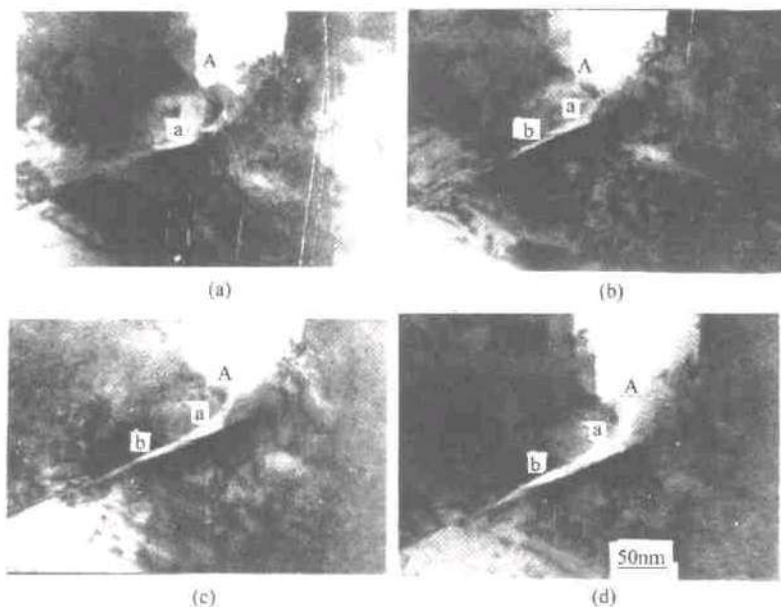


图 1.6 脆性材料(TiAl)中纳米裂纹沿不同解理面的形核和解理扩展

从这些实验观察得到的图像生动地表明,纳米微裂纹完全不同的演化特征是韧性材料与脆性材料内禀特性本质区别的标志。

1.2.3 裂纹尖端原子像

近年来,许多研究工作致力于用 STM 或 AFM 来获得裂纹尖端的原子像^{[29],[30]},但均未成功。早期研究工作主要是对不受载的表面裂纹进行观察。Goken 等人^[30]设计了加载台,原位观察了 NiAl 中的加载裂纹,但这些研究未能揭示裂尖纳米尺度或原子尺度的信息。

李晓冬、王燕斌、褚武扬等人^[31]经过多次探索,发现在获得裂尖原子图形方面,云母是一种比较合适的材料。

他们设计一种有效而简单的加载方法,获得了裂尖的原子排列随加载变化的信息。

1. 实验材料

实验所用的优质白云母是由人工晶体所提供的,是一种层状结构的硅酸盐。其中每层都是由一层含 Al^{3+} 的八面体结构夹在两层 SiO_4 四面体结构中间构成的三明治结构(2:1 stacking),厚度 $c \approx 1\text{nm}$,如图 1.7 所示。 Al^{3+} 位于八面体结构的中心,6 个角点分别由 OH 和 O 原子所占据。四面体结构则由 4 个位于角点的 O 原子和一个位于中心的 Si 原子构成。四面体结构中有 $1/4$ 的 Si^{4+} 被 Al^{3+} 所替代,所造成的电荷不平衡则通过层与层之间的 K^+ 来补偿。四面体结构通过共用角点,在(001)面上构成了一个二维 6 角点阵,点阵常数 $a = 0.519\text{nm}$,每个单胞包含有 3 个 O 原子。

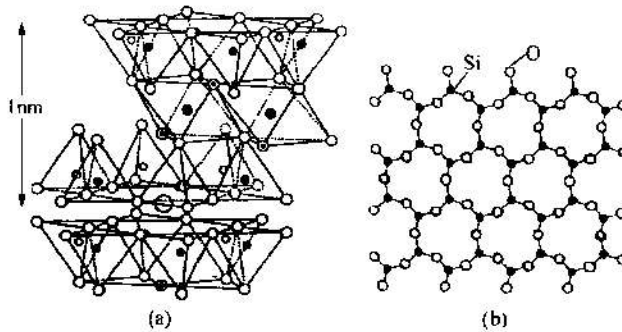


图 1.7 白(优质)云母的结构

2. 实验结果

图 1.8 显示了裂纹样品表面完整区域的点阵像。

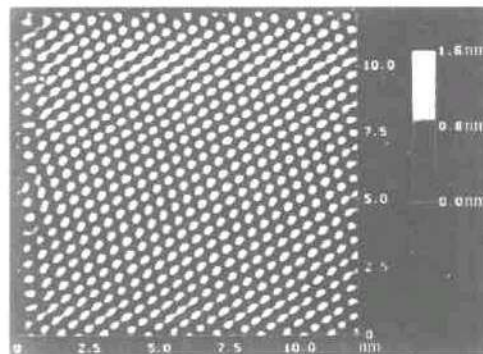


图 1.8 用 AFM 得到的同一裂纹样品表面完整区域的点阵像

图 1.9 是云母表面微裂纹的低倍 AFM 图像。微裂纹的长度约 $100\mu\text{m}$ 。图 1.9(a)给出了形貌图。反映裂纹形貌起伏的梯度图由图 1.9(b)~(d)表示。

图 1.10 是加载后裂尖前方进一步放大后的细节。在单向拉伸加载下,裂纹尖端附近晶

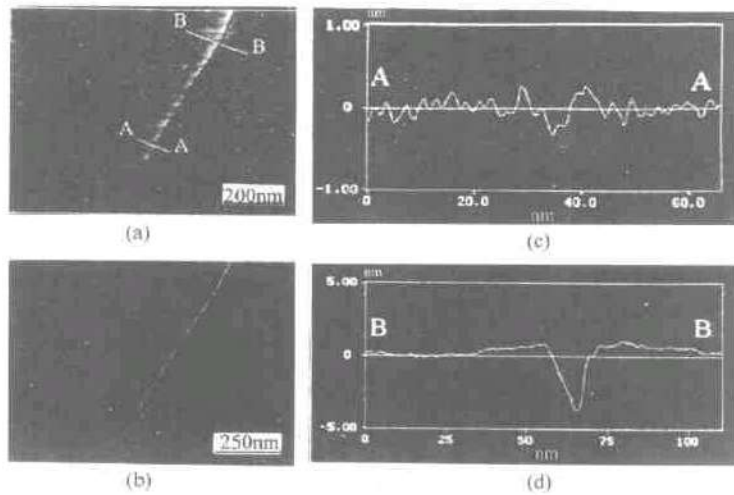


图 1.9 云母表面微裂纹的低倍 AFM 图像

(a) 形貌图；(b) 梯度图；(c) A-A 截面表面起伏；(d) B-B 剖面表面起伏

格发生剧烈畸变，晶格常数变大。在扫描针尖的作用下，这些区域容易附加变形，成像时出现一个阴影区。

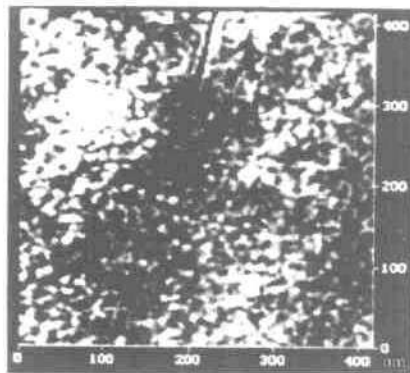
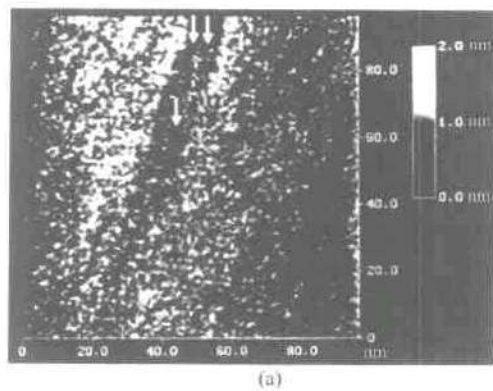
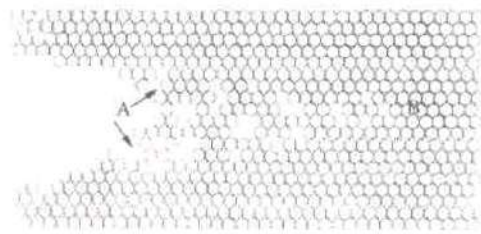


图 1.10 加载裂尖前方的放大像



(a)



(b)

图 1.11

(a) 加载裂尖的高倍 AFM 图像；(b) 反映裂尖分叉的示意图

当裂尖被进一步放大后，裂尖出现了许多分叉，如图 1.11 所示。这些分叉逐渐过渡为空位团的分布。

将裂纹尖端进一步放大,就能获得加载后裂尖 A 附近晶格变形情况。如图 1.12 所示,裂尖附近的晶格严重扭曲,完整晶格六角点阵的排列方式遭到破坏。图 1.12 中 E,F,G 区域的尺寸约 11nm,裂尖前方存在许多空位聚合物。而 E,F,G 区域之外,晶格畸变不是很大,基本上保持了周期性排列。

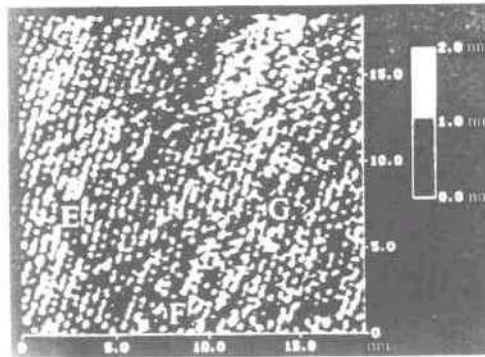


图 1.12 加载裂纹尖端原子尺度的 AFM 像

1.3 裂端位错发射理论分析

1.3.1 早期 Rice-Thomson 理论

Rice 和 Thomson^[6]于 1974 年最先提出了裂纹尖端发射位错理论。设想一个螺型位错沿着与裂纹面共面的滑移面,从裂纹尖端发射出来,如图 1.13 所示。驱动这个螺型位错沿 x 轴方向滑移的剪应力为

$$\tau_{yz} = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi x}} - \frac{\mu b}{4\pi x} \quad (1.1)$$

式中 x 是位错离开裂纹尖端的距离; K_I 是外加的应力强度因子; μ 是剪切模量; b 是 Burgers 矢量的大小。(1.1)式右端的第一项是外加载荷在裂纹尖端产生的奇性应力场;第二项则是位错与裂纹面交互作用产生的象力。对于半无限裂纹,此公式给出的象力是严格正确的。

作用在位错上的驱动力必需与晶格的摩擦力 τ_i 相平衡,由此得到

$$\frac{K_I}{\sqrt{2\pi x}} - \frac{\mu b}{4\pi x} = \tau_i \quad (1.2)$$

方程(1.2)有两个根,它们分别是 x_0 及 x_1 :

$$\sqrt{x_0} = \frac{K_I}{2\sqrt{2\pi\tau_i}} - \frac{\sqrt{K_I^2 - 2\mu b\tau_i}}{2\sqrt{2\pi\tau_i}} \quad (1.3)$$

$$\sqrt{x_1} = \frac{K_I}{2\sqrt{2\pi\tau_i}} + \frac{\sqrt{K_I^2 - 2\mu b\tau_i}}{2\sqrt{2\pi\tau_i}} \quad (1.4)$$

对于给定的材料, μ, b, τ_i 均是材料常数。从公式(1.3)和(1.4)看出, x_0 随着 K_I 的增加而减小, 而 x_1 随着 K_I 的增加而增加。

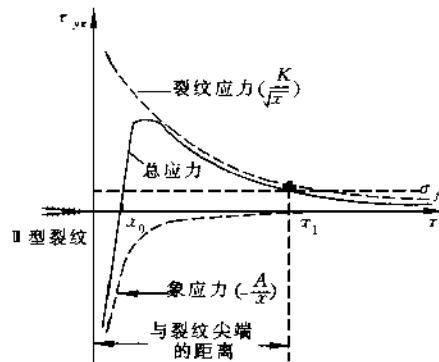


图 1.13 II型裂纹顶端附近作用在位错上的剪应力 τ_{yx}

反之, K_I 随着 x_1 的增加而增加。Rice 和 Thomson^[6]认为, 裂纹尖端存在着一个位错芯, 其半径为 r_c 。只有当位错距裂纹尖端的距离 x_1 超过 r_c , 才可能从裂纹尖端发射出来。因此, 他们提出如下位错发射准则:

$$K_I \geq \frac{\mu b}{2\sqrt{2\pi r_c}} + \sqrt{2\pi r_c} \tau_i \quad (1.5)$$

令

$$K_{Ic} = \frac{\mu b}{2\sqrt{2\pi r_c}} + \sqrt{2\pi r_c} \tau_i \quad (1.6)$$

则(1.5)式变为

$$K_I \geq K_{Ic} \quad (1.7)$$

式中 K_{Ic} 是螺型位错沿着与裂纹面共面的滑移面从裂尖发射的临界应力强度因子。它依赖于剪切模量、Burgers 矢量的大小、晶格的摩擦力及位错芯半径。

类似的分析给出刃型位错沿着与裂纹面共面的滑移面从裂尖发射的条件为

$$K_I \geq K_{Ic} \quad (1.8)$$

式中

$$K_{Ic} = \frac{\mu b}{2(1-\nu)\sqrt{2\pi r_c}} + \sqrt{2\pi r_c} \tau_i \quad (1.9)$$

对于 I 型裂纹, 情况比较复杂, 此时, 刃型位错将沿着两个对称分布的倾斜滑移面从裂尖滑出。成对发射的刃型位错彼此间有交互作用。作用在位于上半平面的刃型位错上的驱动力为

$$\tau_{r\theta} = \frac{K_I}{2\sqrt{2\pi r}} \sin\theta \cos \frac{\theta}{2} - \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)r} - \frac{2\gamma\beta}{\pi} \frac{\sin\theta}{r^2 + \beta^2} \quad (1.10)$$

式中 γ 是表面能; θ 为滑移面与裂纹面之间的夹角; $\beta = r_c e^{3/2}/2$ 。式中右端第一项是外加 K_I 场所产生的剪应力, 第二项是象力, 第三项是裂纹尖端钝化所产生的剪应力。式(1.10)是

Rice-Thomson^[6]给出的估算公式。

由(1.10)式可以推得

$$K_{ic} = \frac{2}{\sin\theta \cos \frac{\theta}{2}} \left\{ \frac{\mu b}{2(1-\nu) \sqrt{2\pi r_c}} + \sqrt{2\pi r_c} \left[\tau_f + \frac{2\gamma\beta}{\pi} \frac{\sin\theta}{r_c^2 + \beta^2} \right] \right\} \quad (1.11)$$

表 1.1 列出各种面心立方及体心立方金属在室温下裂尖发射位错的临界应力强度因子。计算 K_{ic} 时, θ 取值 70° 。表面能 γ , 位错芯半径 r_c 的取值选自 Rice 和 Thomson^[6]、Gahr 等人及 Tyson 等人^[7] 的工作。这些金属室温下, 实验测得的屈服强度取为 τ_f ^[11]。

表 1.1 发射刃型位错的临界应力强度因子

材料	τ_f /MPa	$(K_{ic})_{min}/10^5 \text{Pa} \cdot \text{m}^{1/2}$	$(K_{Ic})_{min}/10^5 \text{Pa} \cdot \text{m}^{1/2}$	$(K_{IIc})_{min}/10^5 \text{Pa} \cdot \text{m}^{1/2}$
Al	20	2.9	0.9	0.6
Cu	15	1.7	1.4	0.9
Ni	34	7.6	2.5	1.7
Fe	54	12.7	4.0	2.7
Nb	25	10.4	2.4	1.6
Mo	240	23.3	7.5	5.0
W	160	29.9	9.8	6.5

1.3.2 基于 Peierls 框架的理论模型

Rice 和 Thomson^[6]的理论, 在裂纹顶端人为地引入了位错芯。这个位错芯难以确切地描述位错成核过程。Argon^[5]建议采用 Peierls 框架描述裂纹尖端位错成核过程。Schoeck^[32]首先给出了一个基于 Peierls 框架的理论分析。Rice 及其合作者^{[33]~[35]}对裂纹尖端位错成核过程作了严格的描述。如同 Peierls-Nabarro 模型, 设想在滑移面两侧存在着分布的位移差(位错), 作用在滑移面上的剪应力与滑错位移动之间遵循 Frenkel 正弦函数规律。

Rice^[33]首先讨论了滑移面与裂纹面共面的情况, 如图 1.14 所示。滑移方向为 x_1 正向。在纯 II 型加载下, 在裂纹前方滑移面两侧, 位移分量 u_2 和 u_3 是连续的, 而位移分量 u_1 有间断。记 $\delta = u_1^+ - u_1^-$ 。作用在滑移面上的剪应力 $\tau_{z1} = \tau = f(\delta)$ 。

考察 J 积分,

$$J = \int_{\Gamma} \left(n_1 W - p_i \frac{\partial u_i}{\partial x_1} \right) dS \quad (1.12)$$

式中 W 是应变能密度; p_i 是面力分量。众所周知, J 积分是与路径无关的。我们估算在两个回路 Γ_{far} 及 Γ_{slit} 上的 J 积分。 Γ_{far} 是远离裂纹尖端的路径, 因

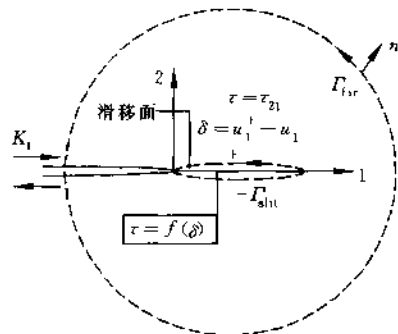


图 1.14 滑移面与裂纹面一致的 II 型裂纹

① 转引自文献[11]。

此,在回路 Γ_{far} 上的 J 积分只依赖于 K_I , 我们有

$$J = G = \frac{(1-\nu)K_I^2}{2\mu} \quad (1.13)$$

另一方面,在回路 Γ_{in} 上, J 积分为

$$J = - \int_0^\infty \sigma_{21} \left(\frac{\partial u_1^+}{\partial x_1} - \frac{\partial u_1^-}{\partial x_1} \right) dx_1 = - \int_0^\infty \tau \frac{\partial \delta}{\partial x_1} dx_1 = \int_0^{\delta_{\text{tip}}} \tau d\delta = \Phi(\delta_{\text{tip}}) \quad (1.14)$$

式中 δ_{tip} 是裂纹尖端的滑错位移; Φ 是内聚力势。在 Γ_{far} 及 Γ_{in} 上算得的 J 积分必须相等, 由此得到

$$G = \frac{(1-\nu)K_I^2}{2\mu} = \Phi(\delta_{\text{tip}}) \quad (1.15)$$

现在来分析内聚力。两个相邻的滑移面之间的相对位移 Δ , 是由它们之间弹性剪切所产生的相对位移及这两个面之间的相对滑错 δ 所组成

$$\Delta = \delta + \frac{\tau}{\mu} h \quad (1.16)$$

式中 h 是两个相邻滑移面之间的间距; τ 是作用在滑移面上的分解剪应力。 τ 与 Δ 之间的关系可用 Frenkel 正弦函数表示

$$\tau = \frac{\mu b}{2\pi h} \sin(2\pi\Delta/b) \quad (1.17)$$

引入势函数 $\Psi(\Delta), \Phi(\delta)$

$$\left. \begin{aligned} d\Psi &= \tau d\Delta \\ d\Phi &= \tau d\delta \end{aligned} \right\} \quad (1.18)$$

由此不难推得

$$d\Psi = d\Phi + \frac{h}{\mu} \tau d\tau \quad (1.19)$$

利用(1.17)式, 导得

$$\left. \begin{aligned} \Psi &= \frac{\mu b^2}{2\pi^2 h} \sin^2\left(\frac{\pi\Delta}{b}\right) \\ \Phi &= \frac{\mu b^2}{2\pi^2 h} \sin^4\left(\frac{\pi\Delta}{b}\right) \end{aligned} \right\} \quad (1.20)$$

由此看出当 $\Delta = \frac{b}{2}$ 时, Φ 与 Ψ 同时达到最大值 $\gamma_{\text{us}} = \frac{\mu b^2}{2\pi^2 h}$ 。 γ_{us} 是一个新的固体物理参数, 称之为不稳定堆垛能。图 1.15 表示了势函数 Φ 与滑错位移 δ 的关系曲线。为了理解 τ 与 δ 之间的关系, 讨论简单立方晶体剪切。如图 1.16 所示, 晶格点阵图 1.16(a)~(d) 分别对应着 τ - Δ 关系曲线上的 a ~ d 点。所有这些图像都表明滑移面上下两块晶体的均匀剪切变形。但剪应力比较大时, 滑移面两侧发生明显的滑错。位置 d 对应着剪应力为零的不稳定平衡状态。此时滑移面上下两侧晶体相对滑错了 $b/2$ 。这是一种不稳定堆垛构形, 造成这种构形所需的能量为 γ_{us} 。

显然当 G 超过 γ_{us} 时, 不存在任何平衡解答。瞬时的位错构形丧失稳定的临界条件为

$$G = \frac{(1-\nu)}{2\mu} K_I^2 = \gamma_{\text{us}} \quad (1.21)$$

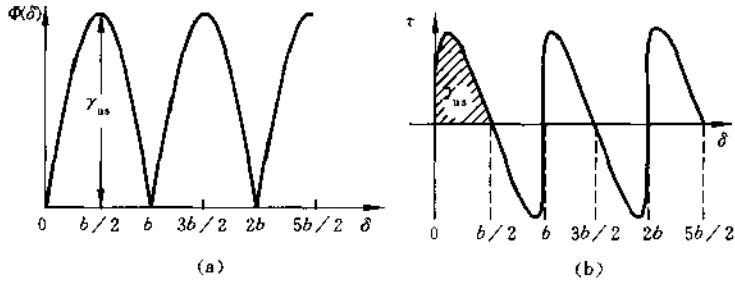


图 1.15

(a) 与滑错位移相关的势能；(b) 剪应力与滑错位移的关系

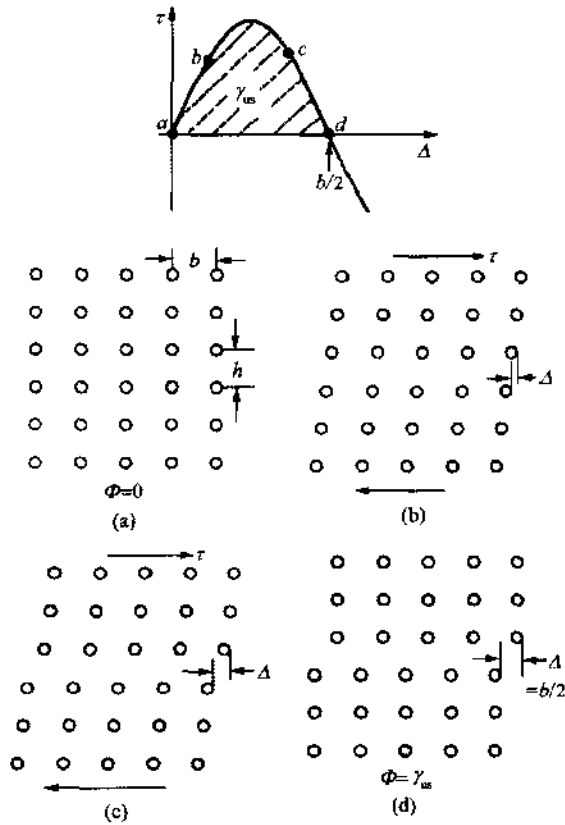


图 1.16 简单立方晶体不同状态剪应力

这也就是裂纹尖端直线位错成核的条件。

从几何构形来考察，当 $\delta_{tip} = \frac{b}{2}$ 时，裂纹尖端确实可以看作是刃型位错位错芯所在位置。

因此，一般说来， $\delta_{tip} = \frac{b}{2}$ 可以看作是判断刃型位错在裂纹尖端成核的标志。

现在讨论裂纹顶端剪应力分布。裂纹前方的剪应力为

$$\tau(r) = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} - \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} \cdot \int_0^\infty \sqrt{\frac{\rho}{r}} \frac{d\delta(\rho)}{r-\rho} d\rho \quad (1.22)$$

式中第二项积分核表征了处于 $r=\rho$ 处的刃型位错 $\left(-\frac{d\delta(\rho)}{d\rho}d\rho\right)$ 在 r 处所产生的剪应力及其与裂纹面交互作用的象力之和。由于裂纹前方内聚力区中连续分布位错将对裂纹产生完全的屏蔽效应,因此,裂纹顶端的应力奇异性应该消失。所以

$$K_I = \frac{-\mu}{\sqrt{2\pi(1-\nu)}} \int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{\rho}} \frac{d\delta(\rho)}{d\rho} d\rho \quad (1.23)$$

将上式代入(1.22)式得

$$\tau(r) = -\frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} \cdot \int_0^\infty \sqrt{\frac{r}{\rho}} \cdot \frac{d\delta(\rho)}{r-\rho} d\rho \quad (1.24)$$

该剪应力应该与内聚力相等,

$$\tau(r) = \frac{\mu b}{2\pi h} \sin\left(\frac{2\pi\Delta}{b}\right) = -\frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} \int_0^\infty \sqrt{\frac{r}{\rho}} \frac{d\delta(\rho)}{r-\rho} d\rho \quad (1.25)$$

方程(1.25)即是关于 $\delta(r)$ 的定解方程。该方程的求解方法将在后面讨论。

对于复合型受载的情况,Beltz 和 Rice^[35]给出了类似的分析,发现 I 型外载的存在将会略微降低位错发射所需要的临界应力强度因子 K_I 值。

1.3.3 位错发射理论分析

Rice^[33], Schoeck^[32], Rice 等人^[34]和 Beltz 和 Rice^[35]对位错在裂纹顶端的成核过程作了详尽的分析。但是他们的分析方法难以推广到分析裂纹顶端位错发射过程。

王自强^[36]对 Rice^[33]提出的模型作了修正,成功地对裂纹尖端位错成核及位错发射过程进行了力学分析。设想滑移面两侧晶体的滑错只在分解剪应力充分大时才能发生。此时,公式(1.16)变为

$$\Delta_x = \begin{cases} \frac{\tau_x h}{\mu}, & \tau \leq \tau_0 \\ \delta_x + \frac{\tau_x h}{\mu}, & \tau > \tau_0 \end{cases} \quad (1.26)$$

式中 τ_0 是理想晶体产生滑错所需的临界剪应力; δ_x 是滑移面两侧相对滑错。类似的,用 δ_y 表示滑移面两侧法向位移间断, Δ_y 表示滑移面两侧的两个相邻原子面之间法向相对位移,则有

$$\Delta_y = \begin{cases} \frac{\sigma_y h}{E}, & \sigma_y \leq \sigma_0 \\ \delta_y + \frac{\sigma_y h}{E}, & \sigma_y > \sigma_0 \end{cases} \quad (1.27)$$

式中 σ_0 是理想晶体滑移面的两侧产生法向位移间断所需要的临界正应力。

对于一般正应力与剪应力共同作用的情况,我们采用如下的内聚力公式^[35]:

$$\left. \begin{aligned} \tau_x &= \tau_{\max} A(\Delta_y) \sin\left(2\pi \frac{\Delta_x}{b}\right) \\ \sigma_y &= \sigma_{\max} B(\Delta_x) \frac{\Delta_y}{L} e^{-\frac{\Delta_y}{L}} \end{aligned} \right\} \quad (1.28)$$

式中 L 是纯拉情况下, 正应力达到 σ_{\max} 时的相邻原子面之间的相对位移,

$$\left. \begin{aligned} A(\Delta_y) &= \left(1 + \frac{\Delta_x}{L}\right) e^{-\frac{\Delta_y}{L}} \\ B(\Delta_x) &= 1 - q \sin^2\left(\pi \frac{\Delta_x}{b}\right) \\ q &= \frac{\gamma_{us}}{2\gamma_s} \end{aligned} \right\} \quad (1.29)$$

式中 γ_s 是表面张力。

图 1.17 表示无限大固体中一条半无限裂纹。 R_1 表示裂纹前方关于滑错位区的内聚力区的尺寸; R_2 表示裂纹前方粘脱区的尺寸。在内聚力区之外不存在滑错位移, 而在粘脱区之外, 不存在法向位移间断。 R_1 和 R_2 是两个待定参数, 它们随着变形的发展而变化。

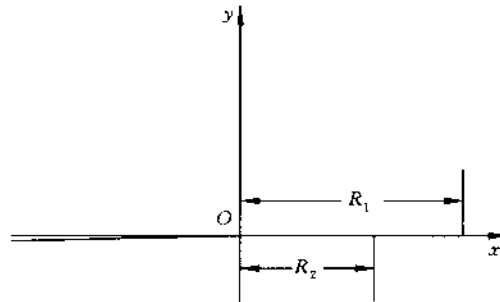


图 1.17 裂纹前方的内聚力区与粘脱区

裂纹前方的面力为:

$$\sigma_y - i\tau_{xy} = \sigma_y^{(0)} - i\tau_{xy}^{(0)} + \frac{2\mu}{(\kappa + 1)\pi i} \int_0^R \frac{\sqrt{\tau} b(\tau)}{\sqrt{x}(x - \tau)} d\tau \quad (1.30)$$

式中 $\sigma_y^{(0)}, \tau_{xy}^{(0)}$ 是外加的奇性应力场, 有

$$\sigma_y^{(0)} + i\tau_{xy}^{(0)} = \frac{K_1 + iK_2}{\sqrt{2\pi r}} \quad (1.31)$$

$$b(\tau) = b_x(\tau) + ib_y(\tau)$$

$\kappa = 3 - 4\nu$ 对平面应变; $\kappa = \frac{3 - \nu}{1 + \nu}$ 对平面应力; $R = \max\{R_1, R_2\}$ 。

方程(1.30)可以改写为

$$\frac{2\mu}{(\kappa + 1)\pi} \int_0^{R_1} \frac{\sqrt{\tau} b_x(\tau)}{x - \tau} d\tau = \sqrt{x} [\tau_{xy} - \tau_{xy}^{(0)}] \quad (1.32a)$$

$$\frac{2\mu}{(\kappa + 1)\pi} \int_0^{R_2} \frac{\sqrt{\tau} b_y(\tau)}{x - \tau} d\tau = \sqrt{x} [\sigma_y - \sigma_y^{(0)}] \quad (1.32b)$$

式中 τ_x, σ_y 等于公式(1.28)表示的内聚力 τ_r, σ_v 。方程(1.32)是复杂的非线性积分方程。

为了有效而精确地求解方程(1.32),王自强^[36]提出了新的分析方法。引入新的自变量 θ, φ ,

$$\left. \begin{aligned} \frac{x}{R_1} &= \frac{1}{2}(1 + \cos\theta), & 0 \leq \theta \leq \pi \\ \frac{x}{R_2} &= \frac{1}{2}(1 + \cos\varphi), & 0 \leq \varphi \leq \pi \end{aligned} \right\} \quad (1.33)$$

采用以下正弦级数展开,

$$\left. \begin{aligned} \frac{\mu}{(\kappa + 1)} \sqrt{\frac{x}{R_1}} b_x(x) &= \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{\infty} \alpha_m \sin(m\theta) \\ \frac{\mu}{(\kappa + 1)} \sqrt{\frac{x}{R_2}} b_y(x) &= \frac{1}{2} \sum_{m=1}^{\infty} \beta_m \sin(m\varphi) \end{aligned} \right\} \quad (1.34)$$

则不难证实

$$\left. \begin{aligned} \frac{\mu}{(\kappa + 1)} \delta_x &= \frac{R_1}{4} \sum_{m=1}^{\infty} \alpha_m V_m(\theta) \\ \frac{\mu}{(\kappa + 1)} \delta_y &= \frac{R_2}{4} \sum_{m=1}^{\infty} \beta_m V_m(\varphi) \end{aligned} \right\} \quad (1.35)$$

$$V_m(\theta) = \frac{\sin\left[\left(m - \frac{1}{2}\right)\theta\right]}{m - \frac{1}{2}} - \frac{\sin\left[\left(m + \frac{1}{2}\right)\theta\right]}{m + \frac{1}{2}} \quad (1.36)$$

$$\left. \begin{aligned} \sqrt{\frac{x}{R_1}} (\tau_{xy} - \tau_{xy}^{(0)}) &= \sum_{m=1}^{\infty} \alpha_m \cos(m\theta) \\ \sqrt{\frac{x}{R_2}} (\sigma_y - \sigma_y^{(0)}) &= \sum_{m=1}^{\infty} \beta_m \cos(m\varphi) \end{aligned} \right\} \quad (1.37)$$

将式(1.28)代入式(1.37),就得到关于系数 $\{\alpha_m\}, \{\beta_m\}$ 的非线性函数方程。在内聚力区及粘脱区内适当选择配置点,让(1.37)式在这些配置点上得以满足,就得到关于系数 $\{\alpha_m, m=1, 2, \dots, M\}, \{\beta_m, m=1, 2, \dots, N\}$ 的非线性代数方程组。利用 Newton-Raphson 方法求解,即可得到有效而精确的解答。

图 1.18 显示了纯 I 型裂纹,裂纹前方的滑错位移在不同外载水平下的分布图。当能量释放率 G 等于不稳定堆垛能 γ_{us} 时,一个完全的刃型位错已在裂纹尖端成核。从图 1.19 可以清楚地看出刃型位错的发射过程。当 $R_1/b=302.5$ 时,已发射的刃型位错已经距离裂纹顶端约 $x_c=5.4b$ 。从该图还可以清楚地看到,在裂纹顶端与已发射位错之间可以存在一个滑移面上下晶体滑错一个晶格常数 b 而后重新理想结合的区域。这个区域也就是众所周知的无位错区。

当已发射位错滑出裂纹顶端区域,就可能塞积在远离裂纹顶端的塑性区内,而在裂纹顶端与塑性区之间出现无位错区。

王自强等人^{[37],[38]}建立了裂端位错成核、位错发射及无位错区的统一模型。塑性区中的已发射位错看作是离散的弹性刃型位错。裂纹顶端附近的内聚力区和粘脱区处理成连续分

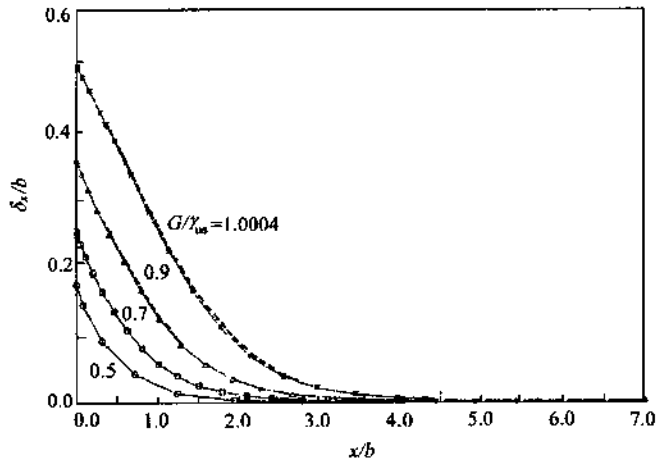


图 1.18 纯 I 型裂纹, 滑错位移分布图

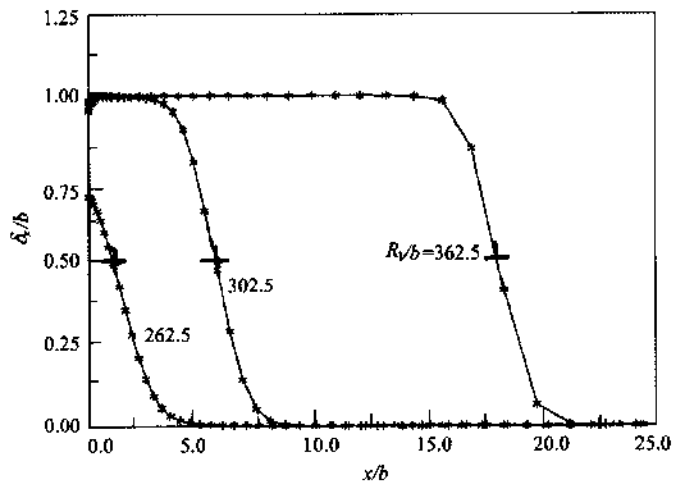


图 1.19 刃型位错发射过程

布的位错。

裂纹前方应力场可表示为

$$\sigma_y - i\tau_{xy} = \sigma_y^{(0)} - i\tau_{xy}^{(0)} + \frac{2\mu}{(\kappa + 1)\pi i} \int_0^R \frac{\sqrt{\tau} (b_x(\tau) + ib_y(\tau))}{\sqrt{x(x-\tau)}} d\tau + \frac{2\mu b}{(\kappa + 1)\pi i} \cdot \sum_{k=1}^n \frac{\sqrt{x_k}}{\sqrt{x(x-x_k)}} \quad (1.38)$$

式中 n 是已发射位错数目; $x_k (k=1, 2, \dots, n, x_k > x_{k+1})$ 是已发射位错在塑性区内的位置; 区间 $[R, x_n]$ 是无位错区。

采用(1.34)式的展开式, 不难导得

$$\left. \begin{aligned} \frac{\mu}{(\kappa+1)}\delta_x &= \frac{R_1}{4} \sum_{m=1}^{\infty} \alpha_m V_m(\theta) + \frac{\mu}{(\kappa+1)}nb, & 0 \leq x \leq R_1 \\ \frac{\mu}{(\kappa+1)}\delta_y &= \frac{R_2}{4} \sum_{m=1}^{\infty} \beta_m V_m(\varphi), & 0 \leq x \leq R_2 \end{aligned} \right\} \quad (1.39)$$

$$\left. \begin{aligned} \tau_{xy} &= \sqrt{\frac{R_1}{x}} \sum_{m=1}^{\infty} \alpha_m (\cos(m\theta) - \cos(m\pi)) + \frac{2\mu b}{(\kappa+1)\pi} \sum_{k=1}^n \frac{\sqrt{x}}{\sqrt{x_k}(x-x_k)}, & x \leq R_1 \\ \sigma_y &= \sqrt{\frac{R_2}{x}} \sum_{m=1}^{\infty} \beta_m (\cos(m\varphi) - \cos(m\pi)), & x \leq R_2 \end{aligned} \right\} \quad (1.40)$$

作用在塑性区内第 j 个离散位错上的剪应力为

$$\tau_{xyj} = \sqrt{\frac{R_1}{x_j}} \sum_{m=1}^{\infty} \alpha_m (T_m(\eta_{1j}) - \cos(m\pi)) + \frac{2\mu b}{(\kappa+1)\pi} \left\{ \frac{1}{2x_j} + \sum_{k=1}^n \frac{\sqrt{x_j}}{\sqrt{x_k}(x_j-x_k)} \right\} \quad (1.41)$$

式中

$$\begin{aligned} T_m(\eta) &= [\eta - \sqrt{\eta^2 - 1}]^m \\ \eta_{1j} &= 2 \frac{x_j}{R_1} - 1 \end{aligned}$$

作用在每个离散位错上的剪应力应该等于晶格的摩擦力 τ_i ,

$$\tau_{xyj} = \tau_i \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (1.42)$$

(1.42)式给出了 n 个补充方程。这样我们就有了足够的方程来确定未知量 $\{\alpha_m\}$, $\{\beta_m\}$ 及 $\{x_k\}$ 。

如果第 1 个已发射位错受阻于障碍物 x_{ob} 处,那我们有约束方程

$$x_1 = x_{ob} \quad (1.43)$$

如果我们忽略裂纹顶端的内聚力区和粘脱区,我们可以得到

$$\frac{K_I}{\sqrt{2\pi x_i}} + A_0 b \left\{ -\frac{1}{2x_i} + \sum_{j=1}^n \frac{\sqrt{x_j}}{\sqrt{x_i}(x_i-x_j)} \right\} = \tau_i \quad (1.44)$$

式中 $A_0 = 2\mu/(\kappa+1)\pi$ 。

裂纹顶端的应力强度因子 K_I^0 为

$$K_I^0 = K_I - \sqrt{2\pi b} A_0 \sum_{i=1}^n \frac{\sqrt{b}}{\sqrt{x_i}} \quad (1.45)$$

图 1.20~图 1.22 给出了若干典型结果,计算中材料参数取为

$$\begin{aligned} \frac{h}{b} &= 1, & \frac{L}{b} &= 0.4, & \nu &= 0.3, \\ \frac{\tau_i}{A_0} &= 0.005, & \frac{\tau_0}{\mu} &= 0.01, & \frac{\tau_{\max}}{\mu} &= 0.159 \end{aligned}$$

图 1.20 显示了纯 I 型裂纹在发射了 10 个和 20 个位错之后,裂纹顶端附近滑错位移的

分布图。图 1.21 给出了已发射位错的位置分布。裂纹顶端的剪应力分布展示在图 1.22 上。在这些图上, N_d 表示已发射位错总数。

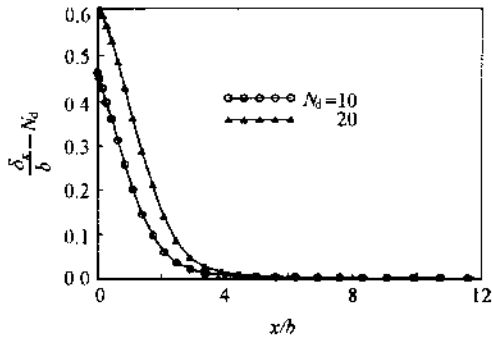


图 1.20 纯 II 型裂纹在发射了 10 个和 20 个位错之后裂纹顶端附近滑移位移的分布图

$$\left(\frac{R_I}{b} = 228.5; \frac{\tau_{ob}}{b} = 5000, \frac{\tau_0}{\mu} = 0.01, \frac{\tau_{max}}{\mu} = 0.159 \right)$$

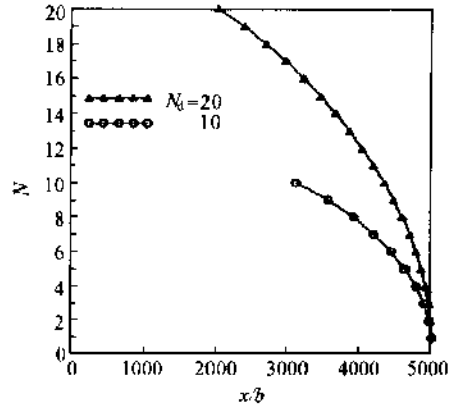


图 1.21 已发射位错的位置分布

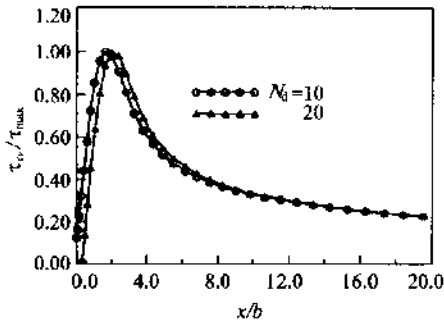


图 1.22 裂纹顶端的剪应力分布图

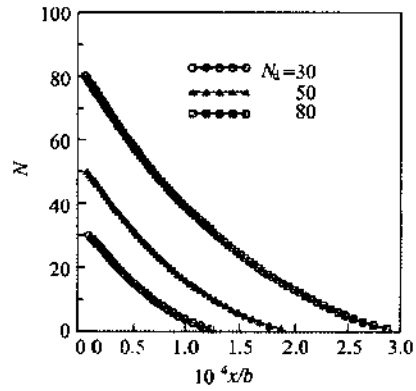


图 1.23 已发射位错在塑性区中的分布

$$(K_{II}^{cr}/\sqrt{\pi b}A = 0.685, \tau_t/A = 0.015)$$

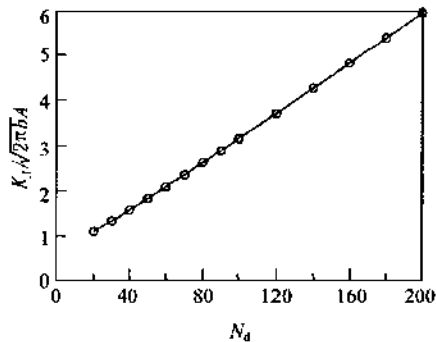


图 1.24 外加应力强度因子与已发射位错数目的关系 ($K_{II}^{cr}/\sqrt{2\pi b}A = 0.685, \tau_t/A = 0.005$)

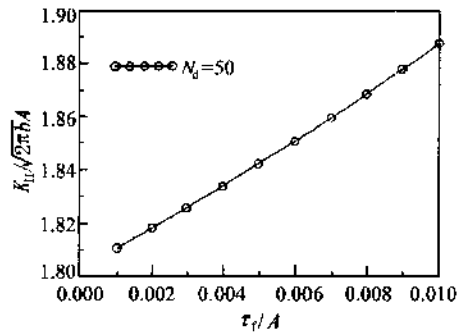


图 1.25 晶格内摩擦力对外加应力强度因子的影响 ($K_{II}^{cr}/\sqrt{2\pi b}A = 0.685, N_d = 50$)

利用方程(1.44)和(1.45),可以在忽略内聚力区和粘脱区影响的前提下,计算已发射位错在塑性区中的分布。图 1.23 给出了一个典型算例。在这个算例中,我们设想裂纹前方不存在障碍。从图上清楚地看出,塑性区内的位错确实以反塞积形式分布。

图 1.24 展现了外加应力强度因子与已发射位错总数之间的关系。而图 1.25 给出了晶格摩擦力对外加应力强度因子的影响。

1.4 断裂位错理论

1.4.1 考虑位错发射影响的断裂准则

固体材料中裂纹脆性断裂通常伴随有相当数量的位错发射。Sinclair 和 Finnis^[39] 建议了一个简单的考虑位错影响的断裂准则,并对纯 I 型裂纹进行简单的分析。他们的模型假定了裂纹沿着原有的面扩展,排除了裂纹分叉扩展的可能性。Lin 和 Thomson^[40] 提出了复合型受载情况下,考虑位错发射影响的断裂准则,他们的模型同样排除了裂纹分叉的可能性。

根据大量的实验观察,Ohr^[11] 指出,裂纹扩展是一个混合交替过程,裂纹尖端的位错发射与裂纹解理扩展可以在同一平面内进行。这意味着裂纹尖端发射了一定数量位错之后,裂纹沿着这些位错所在的滑移面扩展一定距离,然后第二滑移系开动,位错从新的裂纹尖端发射一定数量后,裂纹再沿第二个滑移面扩展一段距离,如此反复,形成了“之”字形(zigzag)扩展。

基于 Ohr^[11] 模型,王自强^[41] 建立了考虑位错发射影响的断裂准则。得到了裂纹尖端发射一定数量位错后裂纹解理扩展的临界条件,详细分析了晶体方位几何、加载方式对临界能量释放率的重要影响。

讨论平面应变问题。设想裂纹前缘线位于一个分解剪应力最大的滑移面内。如图 1.26 所示,滑移面与裂纹面成 θ_0 角度。无穷远处承受复合型载荷 $(k_1 + k_2)$ 。

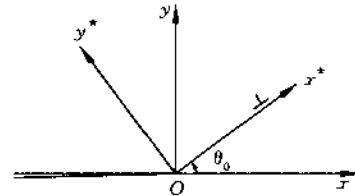


图 1.26 滑移面几何

作用在滑移面上的正应力 σ_θ 和剪应力 τ_θ 可表示为

$$\begin{aligned} \sigma_\theta &= \frac{1}{2} \cos\left(\frac{\theta_0}{2}\right) \frac{k_1(1 + \cos\theta_0) - 3k_2 \sin\theta_0}{(2\pi r)^{1/2}} \\ \tau_\theta &= \frac{1}{2} \cos\left(\frac{\theta_0}{2}\right) \frac{k_1 \sin\theta_0 + k_2(3\cos\theta_0 - 1)}{(2\pi r)^{1/2}} \end{aligned} \quad (1.46)$$

已发射位错所产生的应力强度因子为

$$\left. \begin{aligned} k_{1d} &= - \frac{\mu b_c}{2(1-\nu)(2\pi r_c)^{1/2}} 3\sin\theta_0 \cos\left(\frac{\theta_0}{2}\right) \\ k_{2d} &= - \frac{\mu b_c}{2(1-\nu)(2\pi r_c)^{1/2}} (3\cos\theta_0 - 1) \cos\left(\frac{\theta_0}{2}\right) \end{aligned} \right\} \quad (1.47)$$

式中 b_c 是该刃型位错 Burgers 矢量的大小; r_c 是该位错距裂纹尖端的距离。

引入与滑移面关联的坐标系 Ox^*y^* , 其中 x^* 轴与滑移方向一致, y^* 轴与滑移面垂直。对于 Ox^*y^* 坐标系, 引入应力强度因子

$$\left. \begin{aligned} K_I &= \lim_{r \rightarrow 0} [\sqrt{2\pi r} \sigma_\theta]_{\theta=\theta_0} \\ K_{II} &= \lim_{r \rightarrow 0} [\sqrt{2\pi r} \tau_{r\theta}]_{\theta=\theta_0} \end{aligned} \right\} \quad (1.48)$$

将式(1.46)代入上式, 得

$$\left. \begin{aligned} K_I &= \frac{1}{2} \cos\left(\frac{\theta_0}{2}\right) [k_I (1 + \cos\theta_0) - k_{II} 3\sin\theta_0] \\ K_{II} &= \frac{1}{2} \cos\left(\frac{\theta_0}{2}\right) [k_I \sin\theta_0 + k_{II} (3\cos\theta_0 - 1)] \end{aligned} \right\} \quad (1.49)$$

类似的可以导出

$$\left. \begin{aligned} K_{Id} &= -\frac{\mu b_e}{2(1-\nu)(2\pi r_c)^{1/2}} 3\sin\theta_0 \cos^2\left(\frac{\theta_0}{2}\right) (1 - \cos\theta_0) \\ K_{IId} &= -\frac{\mu b_e}{2(1-\nu)(2\pi r_c)^{1/2}} (2 + 3\cos^2\theta_0 - 3\cos\theta_0) \cos^2\left(\frac{\theta_0}{2}\right) \end{aligned} \right\} \quad (1.50)$$

裂纹尖端局部应力强度因子为

$$\left. \begin{aligned} K_I^{tip} &= K_I + K_{Id} \\ K_{II}^{tip} &= K_{II} + K_{IId} \end{aligned} \right\} \quad (1.51)$$

公式(1.51)的物理意义是很清楚的。裂纹尖端的局部应力强度因子, 小于外加应力强度因子。这种减小是由于已发射位错的屏蔽效应造成的。

Lin 和 Thomson^[40], Rice^[33] 建议刃型位错从裂纹顶端发射的临界条件为

$$K_I^{tip} = K_{Ic} \quad (1.52)$$

式中 K_{Ic} 是位错发射的临界应力强度因子。

依照(1.21)式,

$$K_{Ic} = \sqrt{\frac{2\mu\gamma_{us}}{1-\nu}} \quad (1.53)$$

裂纹沿滑移面分叉扩展的准则为^[41]

$$(K_I^{tip})^2 + (K_{II}^{tip})^2 = K_{Ic}^2 \quad (1.54)$$

式中 K_{Ic} 是 I 型裂纹沿滑移面扩展的断裂韧性。

设想裂纹尖端沿滑移面发射了 N 个刃型位错之后, 裂纹脆性扩展, 扩展前裂尖局部应力强度因子为

$$\left. \begin{aligned} K_I^{tip} &= K_I - \frac{\mu b_e}{2(1-\nu)} \left(\sum_{i=1}^N \frac{1}{(2\pi r_i)^{1/2}} \right) 3\sin\theta_0 \cos^2\left(\frac{\theta_0}{2}\right) (1 - \cos\theta_0) \\ K_{II}^{tip} &= K_{II} - \frac{\mu b_e}{2(1-\nu)} \left(\sum_{i=1}^N \frac{1}{(2\pi r_i)^{1/2}} \right) \cos^2\left(\frac{\theta_0}{2}\right) (2 + 3\cos^2\theta_0 - 3\cos\theta_0) \end{aligned} \right\} \quad (1.55)$$

式中 $r_i (i=1, 2, \dots, N)$ 是第 i 个已发射位错距裂纹尖端的距离。引入下列参数

$$\frac{1}{(2\pi r_c)^{1/2}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{1}{(2\pi r_i)^{1/2}} \quad (1.56)$$

$$C_0 = \frac{\mu b_e}{2(1-\nu)(2\pi r_c)^{1/2} K_{Ic}} \quad (1.57)$$

$$\left. \begin{aligned} C_1 &= C_0 3 \sin \theta_0 \cos^2 \left(\frac{\theta_0}{2} \right) (1 - \cos \theta_0) \\ C_2 &= C_0 \cos^2 \left(\frac{\theta_0}{2} \right) (2 + 3 \cos^2 \theta_0 - 3 \cos \theta_0) \end{aligned} \right\} \quad (1.58)$$

公式(1.55)可表示为

$$\left. \begin{aligned} K_I^{up} &= K_I - NC_1 K_{Ic} \\ K_{II}^{up} &= K_{II} - NC_2 K_{Ic} \end{aligned} \right\} \quad (1.59)$$

将上式代入(1.54)式,得

$$(K_I - NC_1 K_{Ic})^2 + (K_{II} - NC_2 K_{Ic})^2 = K_{Ic}^2 \quad (1.60)$$

上式可改写为

$$N^2(C_1^2 + C_2^2) - 2N(C_1 \cot \psi + C_2) \frac{K_I}{K_{Ic}} + \frac{1}{\sin^2 \psi} \left(\frac{K_{II}}{K_{Ic}} \right)^2 = \rho^2 \quad (1.61)$$

式中

$$\tan \psi = \frac{K_{II}}{K_I}, \quad \rho = \frac{K_{Ic}}{K_I} \quad (1.62)$$

如图 1.27 所示,当外加载荷增加时,应力强度因子 K_I 和 K_{II} 将同时沿着直线 OC 增加。在 A 点, K_I 值达到 K_{Ic} 。第 1 个位错在裂纹尖端成核,然后沿着滑移面滑出裂纹尖端区域,停在距离 r_1 处。此时,局部应力强度因子 K_I^{up} 和 K_{II}^{up} 将从 A 点降至 B_1 点,这种下降是由于第 1 个已发射位错的屏蔽效应造成的。由于位错发射过程快速完成,因此,可以忽略外载在此过程中的变化。当外载继续增加时,局部应力强度因子 K_I^{up} 和 K_{II}^{up} 沿着与 OC 平行的直线 $B_1 A_1$ 增加。在 A_1 点,局部应力强度因子 K_I^{up} 再次达到 K_{Ic} ,第 2 个位错在裂纹顶端成核,并从裂纹顶端发射出来,停在距裂纹尖端 r_2 处。由于已发射位错的屏蔽作用,裂纹尖端的局部应力强度因子减小到 B_2 点。这样的过程反复进行,直至临界点 A_N^* 处,半径 OA_N^* 等于 K_{Ic} ,就会发生沿滑移面的解理扩展。

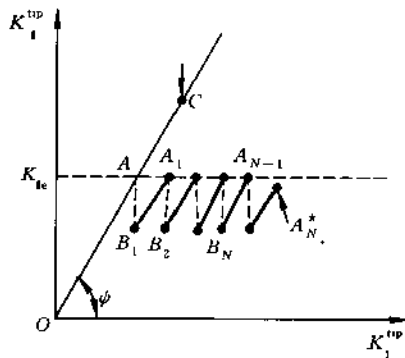


图 1.27 外界载荷和已发射位错屏蔽效应对裂端局部应力强度因子的影响

设想直线 $B_N A_N$ 与水平线 $K_1^0 = K_1$ 相交于 A_N 点。显然 $O A_N^*$ 大于 $O A_N$ ，而小于或等于 $O A_N$ 。所以我们有

$$\rho_{N-1} < \rho \leq \rho_N \quad (1.63)$$

式中

$$\rho_N^2 = N^2(C_1^2 + C_2^2) - 2N(C_1 \cot \psi + C_2)(1 + NC_2) + \frac{(1 + NC_2)^2}{\sin^2 \psi} \quad (1.64)$$

对于给定的外载相位角 ψ 和材料常数 ρ ，由(1.63)和(1.64)式可确定，裂纹解理扩展前已发射位错总数为 N 。将 N 代入(1.61)式，即可求得裂纹解理扩展起始时刻的外加应力强度因子 K_1 ，进而得到 $K_1 = K_1 / \tan \psi$ 。

外载相位角 ψ 是相对于坐标系 Ox^*y^* 定义的。由(1.49)式我们有

$$\tan \psi = \frac{\sin \theta_0 + \tan \psi_0 (3 \cos \theta_0 - 1)}{1 + \cos \theta_0 - \tanh \psi_0 3 \sin \theta_0} \quad (1.65)$$

式中 ψ_0 是相对坐标系 Oxy 定义的外载相位角，

$$\tan \psi_0 = k_1 / k_1$$

表观的临界应力强度因子 K_c 可以定义为

$$K_c^2 = K_1^2 + K_1^2 \quad (1.66)$$

式中 K_1 和 K_1 是裂纹解理扩展起始时刻的外加应力强度因子。表观的临界能量释放率 G_c 为

$$G_c = \frac{1 - \nu}{2\mu} K_c^2 \quad (1.67)$$

作为一种典型计算，我们选择 $\nu = 0.3$, $C_0 = 0.01368$ 。

图 1.28 和图 1.29 给出了 $\theta_0 = 0$ 表观临界能量释放率及已发射位错数目与外载相位角 ψ_0 的关系。从图中清楚看出随着外载相位角 ψ_0 的增加 (k_1/k_1 增加), G_c/G_c 和 N 迅速增加。这意味着随着 k_1 比分的增加, 表观断裂韧性将会明显增加。

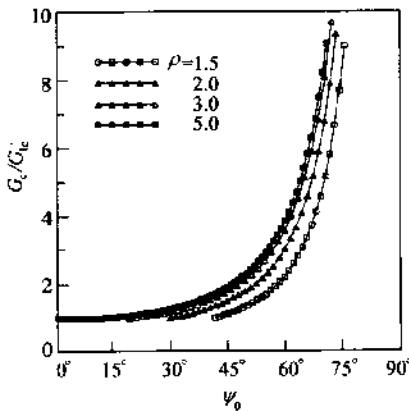


图 1.28 临界能量释放率与外载相位角的关系 ($\theta_0 = 0$)

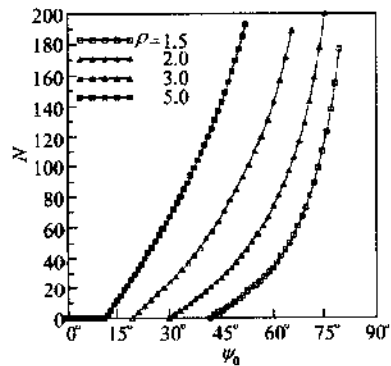


图 1.29 解理起裂前已发射位错数目 ($\theta_0 = 0$)

图 1.30 和图 1.31 展示了 $\theta_0 = 30^\circ$ 时, 表观临界应力强度因子及发射位错总数与外载相位角的关系, 总的倾向与 $\theta_0 = 0$ 的情况一致。

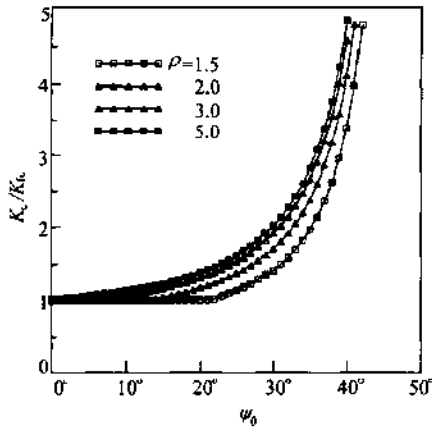


图 1.30 临界应力强度因子与外载相位角的关系 ($\theta_0 = 30^\circ$)

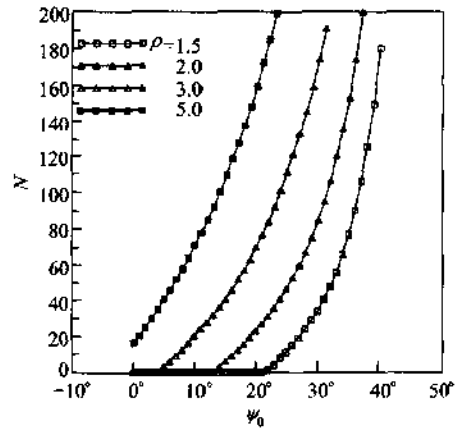


图 1.31 解理起裂前已发射位错数目 ($\theta_0 = 30^\circ$)

1.4.2 准脆性断裂的位错理论

以上分析忽略了晶体各向异性,也未能考虑晶体多个滑移系相继启动的情况。为此,王自强^[42]提出了准脆性断裂的位错理论。

先讨论晶体各向异性的影响。图 1.32 表示二维裂纹问题几何关系及所讨论的滑移面。设想 x_1-x_2 面是各向异性晶体的一个对称面,所以面内问题与反平面问题可以分开处理。

应力和位移可以用 3 个复势函数来表示^[42]:

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{2i} &= 2\text{Re}\left(\sum_{j=1}^3 L_{ij}\Phi_j(z_j)\right) \\ \sigma_{1i} &= -2\text{Re}\left(\sum_{j=1}^3 L_{ij}\mu_j\Phi_j(z_j)\right) \\ u_i &= 2\text{Re}\left(\sum_{j=1}^3 A_{ij}\phi_j(z_j)\right) \quad \Phi(z) = \phi'(z) \end{aligned} \right\} (1.68)$$

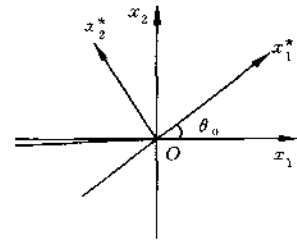


图 1.32 晶体方位与裂纹几何

式中 $\mu_j (j=1,2,3)$ 是 3 个带有正的虚部的复特征值, $z_j = x_1 + \mu_j x_2$ 。矩阵 A, L 是由弹性常数及特征值 μ_j 所决定。

裂纹沿 x_1 方向扩展的能量释放率为

$$G = \frac{1}{4} \mathbf{k}^T (\mathbf{B} + \bar{\mathbf{B}}) \mathbf{k} \quad (1.69)$$

式中 \mathbf{k} 是应力强度因子列阵

$$\mathbf{k} = [k_1, k_2, k_3]^T = [k_{\parallel}, k_{\perp}, k_{\perp}]^T \quad (1.70)$$

\mathbf{B} 为 Hermitian 矩阵, $\bar{\mathbf{B}}$ 为 \mathbf{B} 的复共轭,

$$\mathbf{B} = i\mathbf{A}\mathbf{L}^{-1} \quad (1.71)$$

相对于坐标系 $Ox_1^*x_2^*x_3^*$ (x_3^* 轴与 x_3 轴一致), 我们有相应的矩阵 $\mathbf{A}^*, \mathbf{L}^*, \mathbf{B}^*$,

$$A^* = RA, \quad L^* = RL, \quad B^* = RBR^T \quad (1.72)$$

式中 R 是坐标变换矩阵

$$R = \begin{bmatrix} \cos\theta_0 & \sin\theta_0 & 0 \\ -\sin\theta_0 & \cos\theta_0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (1.73)$$

相对于坐标系 $Ox_1^* x_2^* x_3^*$, 有应力强度因子

$$\mathbf{K} = [K_1, K_2, K_3]^T = [K_1, K_1, K_1]^T \quad (1.74)$$

$$\mathbf{K} = f\mathbf{k} \quad (1.75)$$

实矩阵 f 的表达式见文献[42]。

位于点 (x_0, y_0) 的刃型位错与半无限裂纹的交互作用, 其对应的复势函数可表示为

$$\Phi_i^d(z) = \frac{d_i}{z - s_i} - \frac{1}{2z^{1/2}} \left[\frac{d_i}{z^{1/2} + s_i^{1/2}} + \sum_{j=1}^3 C_{ij} \frac{\bar{d}_j}{z^{1/2} + s_j^{1/2}} \right] \quad (1.76)$$

式中 $s_i = x_0 + \mu_i y_0$, 列向量 \mathbf{d} 及矩阵 \mathbf{C} 为

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{d} &= \frac{1}{2\pi} L^{-1} (\mathbf{B} + \bar{\mathbf{B}})^{-1} \mathbf{b} \\ \mathbf{C} &= L^{-1} \bar{\mathbf{L}} \end{aligned} \right\} \quad (1.77)$$

式中 \mathbf{b} 是刃型位错的 Burgers 矢量。

该刃型位错所产生的应力强度因子为

$$K_i^d = - \frac{q_i}{\sqrt{2\pi r_0}} \quad (1.78)$$

q_i 的具体式子见文献[42]。

裂纹顶端的局部应力强度因子为

$$K_i^{\text{tip}} = K_i + K_i^d \quad (1.79)$$

刃型位错在裂纹顶端成核后从裂端发射的临界条件为

$$K_1^{\text{tip}} = K_{1c} \quad (1.80)$$

对于各向异性材料, 我们有^[33]

$$K_{1c} = \left(\frac{2\mu_{\text{eff}}\gamma_{\text{us}}}{1 - \nu_{\text{eff}}} \right)^{1/2} \quad (1.81)$$

式中 μ_{eff} 是有效剪切模量; ν_{eff} 是有效 Poisson 系数。

裂纹沿滑移面分枝扩展的临界条件为

$$a_{11}(K_1^{\text{tip}})^2 + 2a_{12}K_1^{\text{tip}}K_2^{\text{tip}} + a_{22}(K_2^{\text{tip}})^2 = G_{1c} \quad (1.82)$$

式中 $a_{ij} = (\mathbf{B}^* + \bar{\mathbf{B}}^*)_{ij}/4$

设想在 N 个刃型位错从裂纹顶端发射后, 局部应力强度因子为

$$K_j^{\text{tip}} = K_j - q_j \sum_{i=1}^N \frac{1}{(2\pi r_i)^{1/2}} \quad (1.83)$$

式中 $r_i (i=1, 2, \dots, N)$ 是第 i 个刃型位错距裂纹顶端的距离。引入下述参数

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{(2\pi r_c)^{1/2}} &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{1}{(2\pi r_i)^{1/2}} \\ c_j &= \frac{q_j}{(2\pi r_c)^{1/2} K_{Ic}} = q_0 \frac{(s_{11}s_{22})^{1/2} q_j}{b} \\ q_0 &= \frac{b}{(2\pi r_c)^{1/2} K_{Ic} (s_{11}s_{22})^{1/2}} \end{aligned} \right\} \quad (1.84)$$

公式(1.83)变为

$$K_i^{\text{tip}} = K_i - N c_i K_{Ic} \quad (1.85)$$

将(1.85)式代入(1.82)式,得

$$a_{11}(K_1 - N K_{Ic} c_1)^2 + 2a_{12}(K_1 - N K_{Ic} c_1)(K_2 - N K_{Ic} c_2) + a_{22}(K_2 - N K_{Ic} c_2)^2 = G_k \quad (1.86)$$

该方程可以转化为

$$N^2 c_0 - 2N b_0 \frac{K_2}{K_{Ic}} + a_0 \left(\frac{K_2}{K_{Ic}} \right)^2 = a_{22} \rho_K^2 \quad (1.87)$$

式中

$$\left. \begin{aligned} a_0 &= a_{11} \tan^2 \psi + 2a_{12} \tan \psi + a_{22} \\ b_0 &= a_{11} c_1 \tan \psi + a_{12} (c_1 + c_2 \tan \psi) + a_{22} c_2 \\ c_0 &= a_{11} c_1^2 + 2a_{12} c_1 c_2 + a_{22} c_2^2 \end{aligned} \right\} \quad (1.88)$$

$$\tan \psi = \frac{K_1}{K_2} = \frac{K_I}{K_{II}} \quad (1.89)$$

$$\rho_K = \frac{K_{Ic}}{K_I} \quad (1.90)$$

ρ_K 是断裂韧性 K_{Ic} 与刃型位错从裂纹顶端发射的临界应力强度因子 K_{Ic} 的比值; ψ 是相对于坐标 $Ox_1^* x_2^* x_3^*$ 的外载相位角。

图 1.33 表示了外加载荷和已发射位错的屏蔽效应对局部应力强度因子的影响。

采用 1.4.1 节中的分析方法, 不难求得裂纹沿滑移面解理扩展的表现临界应力强度因子, 及扩展起始时刻的已发射位错总数 N 。

1. 正交各向异性体

对于正交各向异性体, 平面问题包含 4 个弹性常数: s_{11}, s_{22}, s_{12} 和 s_{66} 。引入两个无量纲参数

$$\lambda = \frac{s_{11}}{s_{22}}, \quad \rho = \frac{2s_{12} + s_{66}}{2(s_{11}s_{22})^{1/2}} \quad (1.91)$$

参数 λ 表征 x_1 方向与 x_2 方向杨氏模量各向异性; ρ 表征 x_1-x_2 平面剪切模量各向异性。

特征方程和特征值为

$$\lambda \mu^4 + 2\rho \lambda^{1/2} \mu^2 + 1 = 0 \quad (1.92)$$

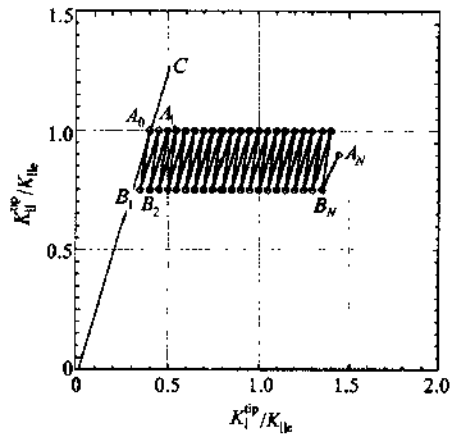


图 1.33 外载及已发射位错对裂端局部应力强度因子的影响

$$\left. \begin{aligned} \mu_1 &= i\lambda^{-1/4}(n+m), & \mu_2 &= i\lambda^{-1/4}(n-m) & 1 \leq \rho \leq \infty \\ \mu_1 &= \lambda^{-1/4}(in+m), & \mu_2 &= \lambda^{-1/4}(in-m) & -1 \leq \rho \leq 1 \end{aligned} \right\} \quad (1.93)$$

矩阵 L 和 B 为

$$L = \begin{bmatrix} -\mu_1 & -\mu_2 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (1.94)$$

$$B = \begin{bmatrix} 2n\lambda^{1/4}(s_{11}s_{22})^{1/2} & i[(s_{11}s_{22})^{1/2} + s_{12}] & 0 \\ -i[(s_{11}s_{22})^{1/2} + s_{12}] & 2n\lambda^{-1/4}(s_{11}s_{22})^{1/2} & 0 \\ 0 & 0 & (s_{44}s_{55})^{1/2} \end{bmatrix} \quad (1.95)$$

相对坐标系 $Ox_1x_2x_3$, 外载相位角 ψ_0 为

$$\tan\psi_0 = k_1/k_2 = k_t/k_l$$

图 1.34 和图 1.35 分别表示临界表观断裂韧性及已发射位错总数与外载相位角 ψ_0 的关系。在计算中参数 q_0 取值 0.054, $\theta_0 = 30^\circ$, $\lambda = 3.0$, $\rho = 0.99999$ 。

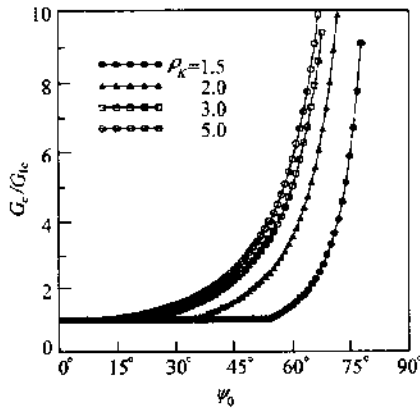


图 1.34 参数 ρ_k 对临界能量释放率的影响

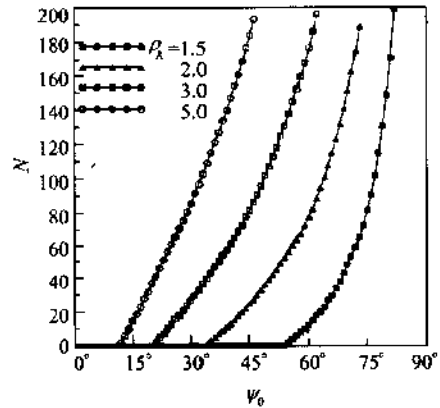


图 1.35 参数 ρ_k 对解理起始扩展前已发射位错数目的影响

2. FCC 晶体

以上的分析,可以直接推广到有多个滑移系相继启动的晶体材料。作为典型例子,讨论 FCC 晶体。晶体定向起着重要作用。为了方便起见,用大写字母标志晶体取向。如图 1.36 所示,裂纹面为 (010) 面,裂纹前缘沿 $[\bar{1}01]$ 方向,用情况 A 表示。当裂纹位于 (111) 面,而裂纹前缘沿 $[\bar{1}01]$ 方向,用情况 B 表示;裂纹位于 $(\bar{1}01)$ 面,裂纹前缘沿 $[\bar{1}01]$ 方向,用情况 C 表示。

从微观角度讲,裂纹顶端发射的位错通常是不全位错。为了分析简单起见,我们只讨论以一定次序发射的成对的不全位错,这些成对的不全位错组成全位错。

面心立方晶体有 12 个滑移系,它由 4 个 $\{111\}$ 滑移面和 3 个 $\langle 110 \rangle$ 滑移方向所组成。图 1.36(b) 显示了情况 A 滑移面轨迹。实线是滑移面 (111) 和 $(1\bar{1}1)$ 与 $x_3=0$ 面的交

线。滑移系 $[1\bar{1}0](111)$ 和 $[0\bar{1}1](111)$ 的同时等量滑移相当于等效滑移系 $[1\bar{2}1](111)$ 上滑移。该等效滑移系的滑移方向平行于滑移面 (111) 与 $x_3=0$ 面的交线。类似的我们有第2个等效滑移系 $[121](1\bar{1}1)$ 。对于面心立方晶体, (010) 面是一个解理面而不是滑移面(对平面应变问题), 因此, $[101](010)$ 不是一个可以接受的滑移系。对于平面应变问题, 只有2个等效滑移系。如果将反向滑移看作是另一个滑移系, 那么我们总共有4个等效滑移系, 6个解理扩展方向。

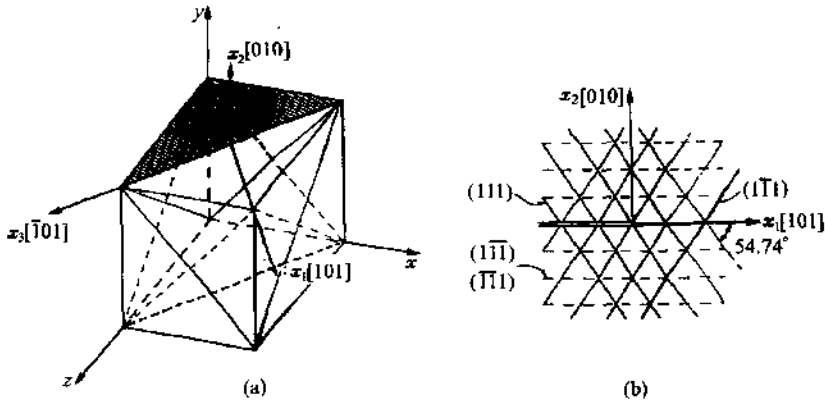


图 1.36 面心立方晶体滑移系及其在平面应变问题中的等效滑移系

为了方便起见, 每个等效滑移系用一个数 $M (=1, 2, 4, 5)$ 表示。裂纹在解理面 (010) 上, 沿 $[101]$ 方向及 $[\bar{1}01]$ 方向扩展分别用 $M=3$ 和 $M=6$ 表示。当然, 每个滑移系也可看作是可能的裂纹扩展方向。图 1.37(a) 显示了等效滑移系。

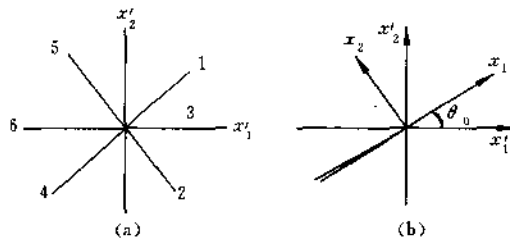


图 1.37 等效滑移系及坐标系的转换

对于面心立方晶体, 晶体主轴分别是 x, y, z 方向。对于这个晶轴坐标系, 晶体具有立方对称性。从坐标系 $Oxyz$ 转向坐标系 $Ox_1x_2x_3$ 的转换矩阵为 R

$$R = \begin{bmatrix} \cos\phi & 0 & \sin\phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\phi & 0 & \cos\phi \end{bmatrix} \quad (1.96)$$

式中 $\phi=45^\circ$ 。

用 σ_c 和 ϵ_c 表示坐标系 $Oxyz$ 中的应力列阵和应变列阵, 而 σ 和 ϵ 表示坐标系 $Ox_1x_2x_3$ 中的应力列阵与应变列阵

$$\left. \begin{aligned} \sigma &= [\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, \sigma_{23}, \sigma_{31}, \sigma_{12}]^T & \varepsilon &= [\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \varepsilon_{33}, \gamma_{23}, \gamma_{31}, \gamma_{12}]^T \\ \sigma_c &= [\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}, \sigma_{yz}, \sigma_{zx}, \sigma_{xy}]^T & \varepsilon_c &= [\varepsilon_{xx}, \varepsilon_{yy}, \varepsilon_{zz}, \gamma_{yz}, \gamma_{zx}, \gamma_{xy}]^T \end{aligned} \right\} \quad (1.97)$$

那么不难证实

$$\sigma = Q\sigma_c, \quad \varepsilon = Q\varepsilon_c \quad (1.98)$$

$$Q = \begin{bmatrix} \cos^2\phi & 0 & \sin^2\phi & 0 & \cos\phi\sin\phi & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sin^2\phi & 0 & \cos^2\phi & 0 & -\cos\phi\sin\phi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cos\phi & 0 & -\sin\phi \\ -\sin(2\phi) & 0 & \sin(2\phi) & 0 & \cos(2\phi) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sin\phi & 0 & \cos\phi \end{bmatrix} \quad (1.99)$$

在坐标系 $Oxyz$ 中, 我们有弹性本构方程

$$\varepsilon_c = S\sigma_c \quad (1.100)$$

式中 S 是晶轴坐标系中的弹性柔度张量,

$$S = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{12} & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} \end{bmatrix} \quad (1.101)$$

利用(1.98)式和(1.100)式, 我们得

$$\varepsilon = s\sigma, \quad s = QSQ^T \quad (1.102)$$

通过一系列运算, 得

$$\left. \begin{aligned} s_{11} &= S_{11}[1 + 2(\rho - 1)\cos^2\phi\sin^2\phi] \\ s_{12} &= S_{12} \\ s_{13} &= S_{12} - 2(\rho - 1)\cos^2\phi\sin^2\phi S_{11} \\ s_{14} &= s_{16} = 0 \\ s_{15} &= S_{11}(\rho - 1)\cos(2\phi)\sin(2\phi) \\ s_{22} &= S_{22} = S_{11} \\ s_{23} &= S_{12} \\ s_{24} &= s_{25} = s_{26} = 0 \\ s_{33} &= s_{11}, s_{34} = s_{36} = 0 \\ s_{35} &= \frac{1}{2}(\rho - 1)\sin(4\phi) \\ s_{44} &= S_{44}, s_{45} = s_{46} = 0 \\ s_{55} &= S_{44} - S_{11}2(\rho - 1)\sin^2(2\phi), s_{56} = 0 \\ s_{66} &= S_{44} \end{aligned} \right\} \quad (1.103)$$

将 $\phi=45^\circ$ 代入上式, 不难发现

$$\left. \begin{aligned} s_{14} = s_{15} = s_{16} = 0, \quad s_{24} = s_{25} = s_{26} = 0 \\ s_{34} = s_{35} = s_{36} = 0, \quad s_{45} = s_{46} = s_{54} = 0 \\ s_{66} = 0 \end{aligned} \right\} \quad (1.104)$$

因此,在坐标系 $Ox_1x_2x_3$ 中,面心立方晶体是正交各向异性体。

以上讨论了情况 A。对于情况 B,如图 1.37(b)所示,从坐标系 $Ox'_1x'_2x'_3$ 到坐标系 $Ox_1x_2x_3$ 还有一个附加的转动。旋转角 $\theta_0 = 54.74^\circ$ 。对于情况 C,旋转角 $\theta_0 = 90^\circ$ 。

3. 计算方法与结果

由于可能出现多个滑移系相继启动的情况,因此,计算需要一步一步地进行。在每一步,我们知道外加应力强度因子 k_1 和 k_2 ,裂纹顶端局部应力强度因子 k_1^{up} 和 k_2^{up} 及 $K_1^{\text{up}}(M)$ 和 $K_2^{\text{up}}(M)$ 。

对于给定的外载相位角 ψ_0 ,我们有

$$k_1 = \tan\psi_0 \cdot k_2, \quad \Delta k_1 = \tan\psi_0 \Delta k_2 \quad (1.105)$$

$$\Delta K_1^{\text{up}}(M) = (f_{11}\tan\psi_0 + f_{12})\Delta k_2 \quad (1.106)$$

式中系数 f_{ij} 依赖于滑移系 M 。对于滑移系 M ,一个位错在裂纹顶端成核,所需要的增量 $\Delta k_2(M)$

$$\Delta k_2(M) = \frac{K_{1c}(M) - K_1^{\text{up}}(M)}{f_{11}\tan\psi_0 + f_{12}} \quad (1.107)$$

显然真实的外载增量 $(\Delta k_2)_0$ 是由极小值 $\min[\Delta k_2(M)]$ 所决定

$$(\Delta k_2)_0 = \min[\Delta k_2(M)], \quad M = 1, 2, 4, 5 \quad (1.108)$$

在这个加载过程中,裂纹有可能解理扩展,因此,需要细心地检查方程(1.82),是否可能在某一阶段,对 6 个可能的扩展方向中的某一个方向已经满足。我们将这个增量步子细分为 100 步子增量步子。对每个子增量步子,局部应力强度因子为

$$K_1^{\text{up}}(M) + \Delta K_1^{\text{up}}(M), \quad K_2^{\text{up}}(M) + \Delta K_2^{\text{up}}(M) \quad (1.109)$$

将上式代入(1.82)式,检查该式是否满足。如果该式在某个子增量步子,对某个可能扩展方向得以满足,还需考察 $K_2^{\text{up}}(M)$ 是否为正。只当 $K_2^{\text{up}}(M) = K_2^{\text{up}}(M) > 0$ 且(1.82)式得以满足时,裂纹才会在下一个位错发射之前扩展。如果在这个 100 步子增量加载过程中,未发现任何可能扩展方向满足(1.82)式,那么一个新的位错将从裂纹顶端发射出来。由于这个位错的屏蔽作用,裂纹顶端局部应力强度因子将有所下降

$$\Delta k_1^{\text{up}} = (\Delta k_1)_0 - C_1(M_0)K_{1c} \quad (1.110)$$

$$\Delta k_2^{\text{up}} = (\Delta k_2)_0 - C_2(M_0)K_{1c} \quad (1.111)$$

式中 $(\Delta k_1)_0, (\Delta k_2)_0$ 是外加的应力强度因子增量; M_0 是这个新发射位错所在的滑移系;系数 $C_1(M_0)$ 和 $C_2(M_0)$ 是针对该滑移系计算的。

图 1.38 和图 1.39 绘出了情况 A 的计算结果。对于铝单晶平面应变问题,材料参数 $\lambda = 1.0, \rho = 0.72^{[42]}$ 。其他材料参数取为

$$\left. \begin{aligned} K_{1c}(M) &= K_{1c}, \quad M = 1, 2, \dots, 6 \\ K_{1e}(M) &= K_{1c}, \quad M = 1, 2, 4, 5 \\ \rho_K &= 2.5, \quad q_0 = \frac{b}{(S_{11}S_{22})^{1/2}(2\pi r_c)^{1/2}K_{1c}} = 0.054 \end{aligned} \right\} \quad (1.112)$$

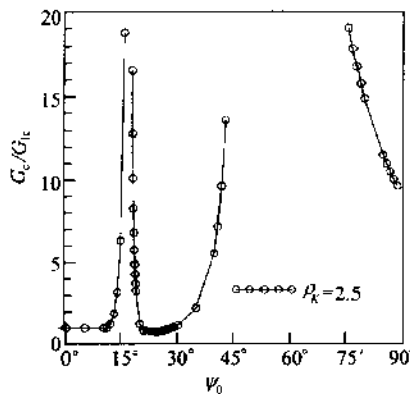


图 1.38 铝单晶情况 A, 临界能量释放率与外载相位角的关系 ($\rho_k=2.5$)

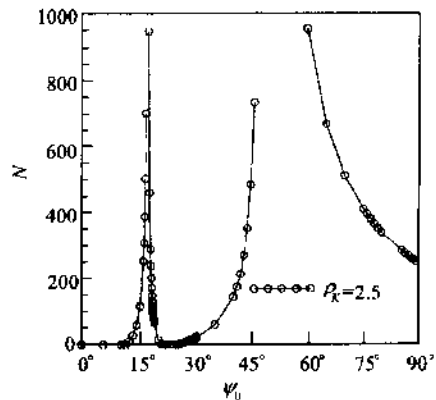


图 1.39 铝单晶情况 A, 解理扩展起始时刻, 已发射位错总数 ($\rho_k=2.5$)

临界能量释放率 G_c 随外载相位角 ψ_0 的变化显示在图 1.38 上。当 $\psi_0 < 11.4^\circ$, 裂纹沿着原有裂纹面解理扩展。扩展前不发射任何位错。当 $11.4^\circ < \psi_0 < 17.4^\circ$, 裂纹将沿着第一滑移系分枝扩展。扩展前, 已有相当数量的位错, 从裂纹尖端沿第一滑移系发射出来。在区间 $15.0^\circ < \psi_0 < 17.4^\circ$, 临界能量释放率 G_c 和裂纹扩展已发射位错总数 N 随着 ψ_0 的增加急剧增加。当 $17.5^\circ < \psi_0 < 20.5^\circ$, 相当数量的位错从裂尖沿第一滑移系发射出来, 然后裂纹沿第 2 个滑移系分枝扩展。在这个区间, G_c 和 N 随 ψ_0 的增加而急剧减小。当 $20.6^\circ < \psi_0 < 25.4^\circ$, 铝单晶的行为像是理想脆性体, 裂纹沿第 2 个滑移系解理扩展, 不发射任何位错。当 $25.5^\circ < \psi_0 < 48.0^\circ$, 第 4 滑移系开动, 相当数量位错从裂纹尖端发射出来后, 裂纹沿第 2 滑移系分枝扩展。临界能量释放率在 $\psi_0 = 49^\circ$ 时达到峰值。当 $49^\circ < \psi_0 < 90^\circ$, 裂纹依然沿第 2 个滑移系分枝扩展, 但 G_c 随 ψ_0 的增加而减小。

情况 B, 裂纹面与第一滑移系的滑移面平行。正如 Zhou 等人^[43]和 Xu 等人^[44]所指出的那样, 位错从裂纹尖端沿倾斜的滑移面发射出来需要克服形成突出物的能量, 因此, 沿倾斜的滑移面发射位错的临界应力强度因子 K_{Ic} 高于沿裂纹延伸面发射位错的临界应力强度因子。

对情况 B, 还计算了放弃假设所有 $K_{Ic}(M)$ 相等, 而代之以以下假设

$$\left. \begin{aligned} K_{Ic}(M) &= K_{Ic}, & M &= 1, 2, \dots, 6 \\ K_{Ic}(M) &= K_{Ic}, & M &= 1, 4 \\ K_{Ic}(M) &= 2K_{Ic}, & M &= 2, 5 \end{aligned} \right\} \quad (1.113)$$

采用两种不同假设(1.112)式和(1.113)式的计算结果都会绘在图 1.40 及图 1.41 中。先考察采用(1.112)式的结果。当 $0^\circ < \psi_0 < 15.0^\circ$, 裂纹沿第 1 滑移面脆性扩展, 不发射任何位错。当 $15.0^\circ < \psi_0 < 30.0^\circ$, 先沿着第 2 滑移系发射相当数量位错, 而后裂纹沿第 1 滑移而扩展。当 $31.0^\circ < \psi_0 < 34.4^\circ$, 第 1 滑移系也开动起来, 位错沿第 2 滑移系及第 1 滑移系发射相当数量之后, 裂纹沿第 1 滑移面扩展。当 $\psi_0 > 34^\circ$, 临界能量释放率 G_c 和已发射位错总数 N 急剧增加, 譬如, $\psi_0 = 34.4^\circ$, $G_c/G_{1c} = 7107$, $N = 6941$ 。

采用假设(1.113)式的计算结果用带有小三角“ \triangle ”的曲线也会绘在图 1.40 和图 1.41 上。

当 $0^\circ \leq \psi_0 < 15.0^\circ$, 结果与前面一样。但是当 $\psi_0 > 15.0^\circ$ 时, 结果与前面完全不同。此时晶体的行为变脆了。当 $17.0^\circ < \psi_0 < 80^\circ$ 由于第 2 滑移系及第 5 滑移系难于发射位错, 因此, 裂纹解理扩展(在解理面(0 1 0)上, 沿[1 0 1]方向)前, 找不到任何位错沿这两个滑移系发射, 只有少量位错沿第 1 滑移系发射。即使 $80^\circ \leq \psi_0 < 90^\circ$, 仍找不到任何位错沿第 2 或第 5 滑移系发射。图 1.40 和图 1.41 清楚地说明外载相位角 ψ_0 对临界能量释放率 G_c 及解理扩展起始时刻已发射位错总数 N 有重要的影响。

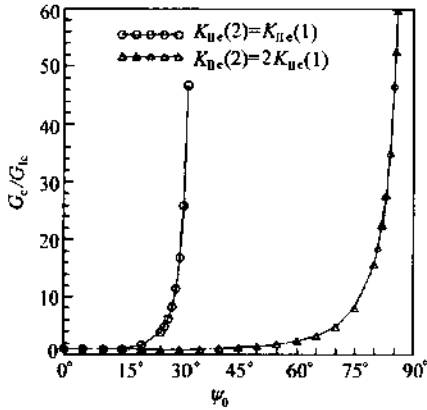
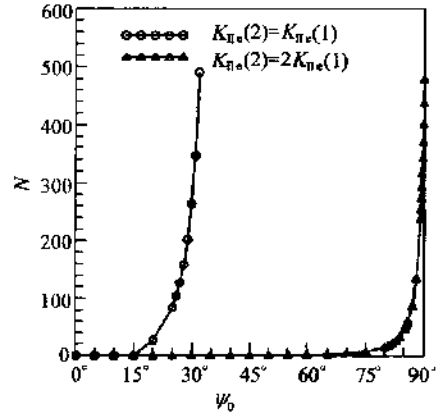


图 1.40 铝单晶情况 B, 临界能量释放率
与外载相位角关系 ($\rho_K = 2.5$)



1.41 铝单晶情况 B, 解理扩展起始时刻
已发射位错总数 ($\rho_K = 2.5$)

1.4.3 考虑非线性效应的断裂位错理论

上节讨论了准脆性断裂的位错理论。在讨论中, 忽略了裂纹尖端的内聚力区和粘脱区, 也忽略了裂尖锐化所产生的非线性效应。

王自强^[41]对滑移面与裂纹面共面的情况分析了裂尖内聚力区和粘脱区对裂尖位错发射及脆性断裂的影响。计算结果表明, 考虑裂尖内聚力区和粘脱区影响的非线性理论给出的临界能量释放率 G_c 稍高于 1.4.2 节中线性理论给出的 G_c 值。面裂纹解理扩展起始时刻裂尖发射位错总数 N , 非线性理论给出的数目多于线性理论给出的数目。图 1.42 和图 1.43 展示了两种理论比较。

王自强^{[37],[48]}又进一步提出了 I 型裂纹, 位错沿一对对称分布倾斜滑移面发射时非线性位错断裂理论。

把位错成核与发射过程看作是纯剪切过程。图 1.44 表示了一对对称分布与裂纹面成 α 角的滑移面。 N_i 表示在一个滑移面上已发射的位错数目。已发射位错的平衡位置用 r_i , $i = 1, 2, \dots, N_i$ 表示。

在裂纹尖端存在着上、下对称分布的内聚力区。在内聚力区内, 滑移面两侧存在着连续分布的滑错位移 δ_r 。

上滑移面内聚力区剪应力平衡方程为

$$\tau[\Delta_r] = \tau_s^{(0)}(r) + A \int_0^R g(r, \rho) b(\rho) d\rho + Ab \sum_{j=1}^n g(r, r_j) \quad (1.114)$$

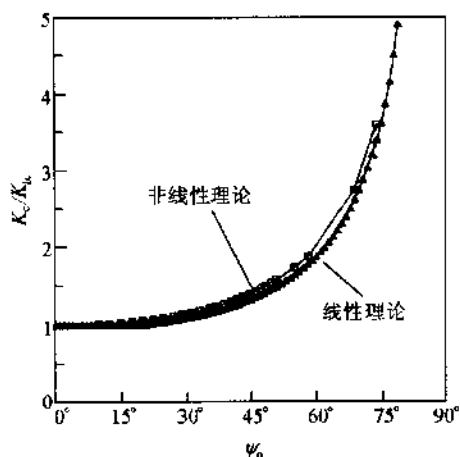


图 1.42 临界应力强度因子与外载相位角的关系 ($\theta_0=0, \rho=2.866$)

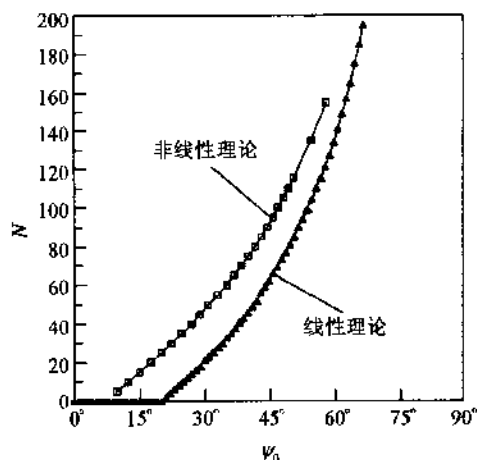


图 1.43 解理扩展起始时刻已发射位错数目 ($\theta_0=0, \rho=2.866$)

式中 $A=2\mu/(\kappa+1)\pi; n=N_d; \tau_{,\theta}^{(0)}(r)$ 是外加应力强度因子 K_1 所产生的奇性应力场,

$$\tau_{,\theta}^{(0)}(r) = \frac{K_1 b}{2 \sqrt{2\pi r}} \sin \alpha \cos \frac{\alpha}{2} \quad (1.115)$$

公式(1.114)右端第2项是上、下内聚力区中连续分布位错所产生的剪应力;第3项是上、下塑性区中已发射离散位错所产生的剪应力。这些剪应力包括了位错与裂纹交互作用所产生的象力。 $\tau[\Delta_r]$ 是内聚力

$$\left. \begin{aligned} \tau[\Delta_r] &= \tau_{\max} \sin\left(2\pi \frac{\Delta_r}{b}\right) \\ \Delta_r &= \delta_r + \frac{\tau}{\mu} h \end{aligned} \right\} \quad (1.116)$$

式中 h 是滑移面法线方向的相邻原子面间距。

对于上滑移面塑性区中的第 i 个已发射位错,有平衡方程

$$\tau_{,\theta}^{(0)}(r_i) + A \int_0^R g(r_i, \rho) b_r(\rho) d\rho + Ab \sum_{j=1}^n [g(r_i, r_j) + Ab [g_0(r_i, r_j) + g_1(r_i, r_j)]] = \tau_i \quad (1.117)$$

式中

$$g(r, \rho) = \frac{2}{r - \rho} + g_0(r, \rho) + g_1(r, \rho) \quad (1.118)$$

函数 $g_0(r, \rho), g_1(r, \rho)$ 的具体公式可见文献[37]、[45]。

作为一个典型算例,选择如下材料参数

$$\frac{h}{b} = 1.0, \quad \nu = 0.3, \quad \tau_i/\mu = 0.002, \quad \tau_{\max}/\mu = 0.1596$$

图 1.45 表示局部应力强度因子与裂尖滑错位移(或剪切位移)的关系曲线。需要指出的是,这里所说的局部应力强度因子是指外加应力强度因子与塑性区中已发射离散位错所产

生的应力强度因子之和,不包括内聚力区所产生的屏蔽效应。

我们设想当局部应力强度因子 K_I^{np} 达到极大值时,裂尖成核的位错就会从裂尖发射出去,塞积在塑性区内。

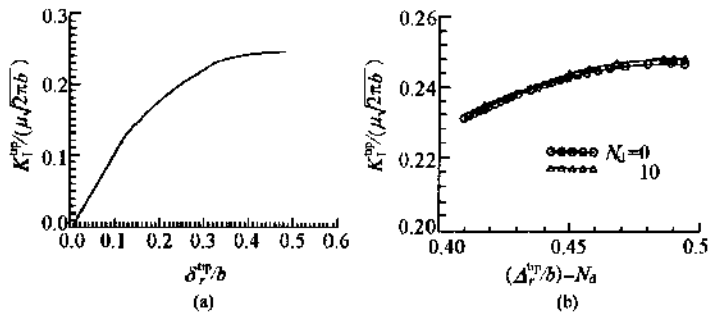


图 1.45 局部应力强度因子变化曲线

(a) 位错发射前, K_I^{np} 与 δ_0^{np} 关系曲线;

(b) N_d 个位错发射后, K_I^{np} 与 $\Delta_0^{np}/b - N_d$ 关系曲线

局部应力强度因子 K_I^{np} 与外加应力强度因子 K_I 关系曲线展示在图 1.46 上。图 1.47 给出了外加应力强度因子 K_I 与 N_d 的关系。

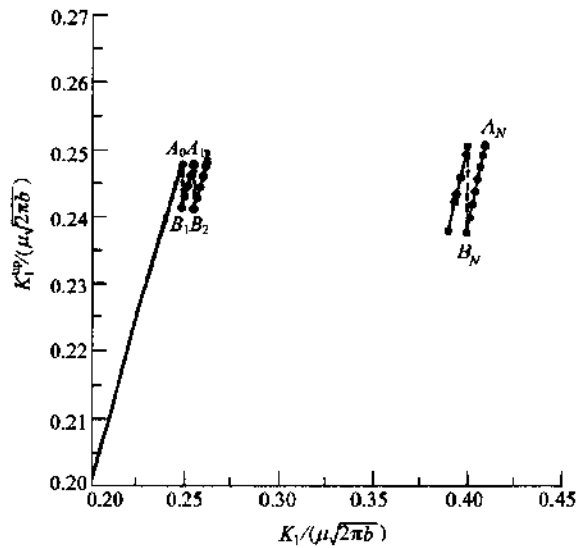


图 1.46 局部应力强度因子与外加应力强度因子关系曲线

外加应力强度因子 K_I 的上包络线 (A_0, A_1, \dots, A_N 点集合) 与 N_d 的关系展示在图 1.48 上。局部应力强度因子 K_I^{np} 的上包络线与 N_d 的关系绘在图 1.49 上。

从这些图上清楚地看出,局部应力强度因子 K_I^{np} 随 N_d 的增加十分缓慢,而外加应力强度因子 K_I 随 N_d 的增加而迅速增加。

朱挺、杨卫和郭田福^[46]采用能量原理对这个问题进行了分析。他们设想总能量由 6 项组成:

$$W_{\text{total}} = W_{\text{self}} + W_K + W_{K-d} + W_{d-d} + W_{\text{ledge}} + W_{\text{lattice}} \quad (1.119)$$

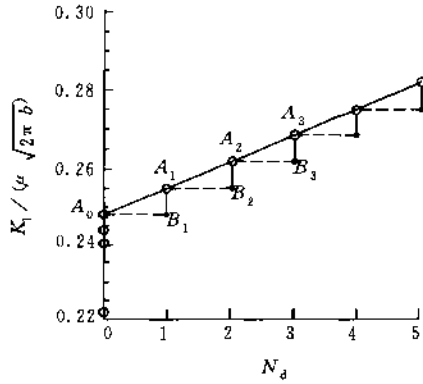


图 1.47 外加应力强度因子与已发射位错数目的关系

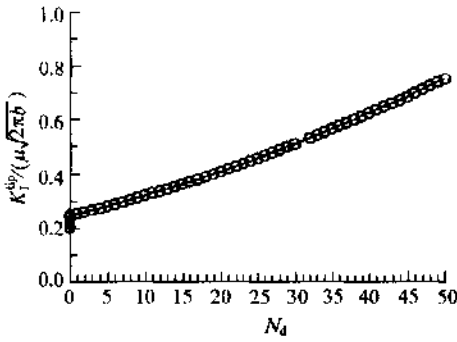


图 1.48 外加应力强度因子上包络线与 N_d 的关系

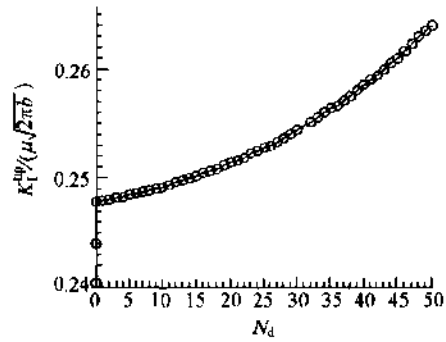


图 1.49 局部应力强度因子上包络线与 N_d 的关系

式中 W_{self} 是位错自身能量; W_K 是裂纹尖端外加 K 场的自身能量; W_{K-d} 是位错与 K 场交互作用能量; W_{d-d} 是不同位错之间交互作用能; W_{ledge} 是产生位错台阶 (ledge) 的能量; W_{lattice} 是克服晶格摩擦力所作的功。

忽略裂纹尖端的内聚力区, 通过能量极小原理, 直接求得离散位错的平衡数目和平衡位置。图 1.50 画出了平衡位错数目 n 与外加应力强度因子的关系。从中清楚地看出, 晶格摩擦阻力 σ_f 的重要影响。

结合有限元计算, 他们还给出了考虑裂纹尖端钝化 (位错发射造成裂端钝化) 对裂端应力场的影响。

如图 1.51 所示, 用半径 $\rho = nbs \sin \alpha$ 的圆缺口近似模拟钝化裂纹。缺口根部的应力场由 3 部分组成:

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^K + \sigma_{ij}^d + \sigma_{ij}^{d-n} \quad (1.120)$$

式中右端第 1 项是外界应力强度因子所产生的应力场; 第 2 项是位错在无穷大物体中所产生的应力场; 第 3 项是位错与缺口交互作用所产生的应力场。外加应力强度因子所产生的应力场可用有效 K 场近似表示为

$$\sigma_{22}^K = \frac{2K^{\text{app}}}{\sqrt{\pi(\rho + 2x_1)}} \left(1 + \frac{\rho}{\rho + 2x_1} \right) \quad (1.121)$$

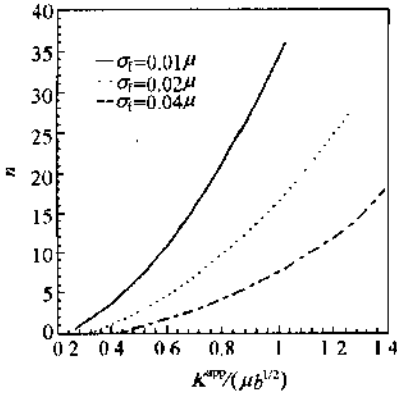


图 1.50 平衡位错数目 n 与外加应力强度因子的关系

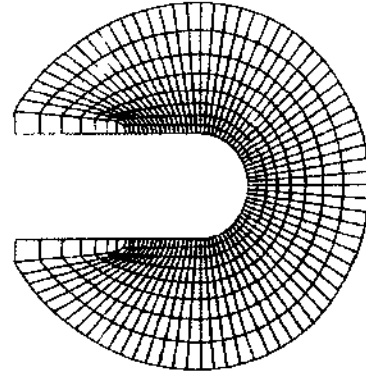


图 1.51 钝化裂纹顶端的有限元网格

位错与缺陷交互作用所产生的应力场 σ_{22}^{d-n} 也可用有效场近似表示为

$$\sigma_{22}^{d-n} = - \frac{2K^{app}}{\sqrt{\pi(\rho + 2x_1)}} \left(1 + \frac{\rho}{\rho + 2x_1} \right) \quad (1.122)$$

采用有限元法可以求得比较精确的应力场分布。

图 1.51 共含有 1709 个四边形等参元和 1792 个节点。外圆的半径取为 $10^4 b$ 。在外边界上, 加上外加的奇性应力场所产生的面力, 而在缺口表面加上与位错应力场所产生的面力相抵消的面力作用。

图 1.52 表示了计算结果。图 1.52(a) 中实线表示有限元计算结果, 虚线则是有效场计算结果。图 1.52(b) 给出的结果均是有限元结果。图中横坐标为与尖端的距离 $/b$ 。

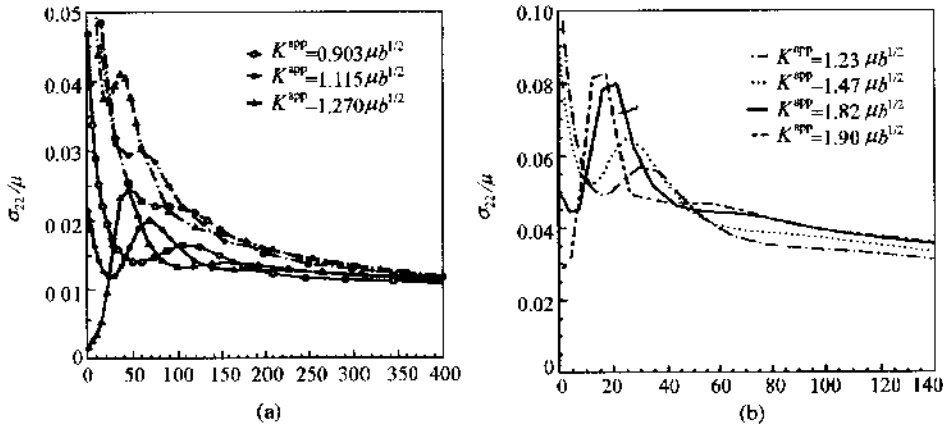


图 1.52 正应力 σ_{22} 在缺口根部前方的分布

(a) $\sigma_t/\mu = 0.002$; (b) $\sigma_t/\mu = 0.006$

从这张图上可清楚地看出, 当外加 K^{app} 比较大时, 最大正应力 σ_{22} 将会在距离缺口根部 $20b \sim 50b$ 处达到。应力峰值偏离缺口根部是由于塑性区靠近缺口, 位错与缺口产生强相互

作用造成的,也是由于位错发射造成裂端明显钝化促成的。

应力峰值进入无位错区,可以用来解释在无位错区纳米微裂纹成核与扩展的实验现象^{[23],[24]}。

1.5 裂端位错行为的分子动力学模拟

材料力学行为的研究一直是力学、材料科学和固体物理领域的重要课题。基于连续介质假设的宏、细观力学已解决了材料的设计、使用和制造加工等方面的许多问题,但在研究微观尺度的缺陷行为时,如位错芯的原子结构、位错动力学、晶界结构、晶界与位错的相互作用、裂纹尖端的晶格结构以及裂纹尖端的位错发射等方面,用连续介质方法不能得到满意的解释。在这一尺度上,主要是材料的离散的晶格特征因素的影响。我们知道,晶体是由大量的原子有序排列而成,材料的强度来源于原子间的相互作用,塑性来源于原子间的相互作用。因此,直接从原子尺度对材料的微观力学行为进行研究显得非常必要。

国际学术界近来取得的几项研究成果为材料微观力学行为的研究奠定了基础。(1) Rice^[33]摒弃位错芯的概念,提出了位错发射不稳定堆垛能 γ_{us} 这一固体物理参数,来描述裂纹尖端的位错发射。确定 γ_{us} 是目前的重要课题。最有效的方法应该是直接基于原子尺度的微观力学方法。(2) 微观实验技术的重要突破^{[47],[48]}。已实现了原子分辨率的观察和测量,为原子尺度微观力学理论分析提供了实验依据。(3) 镶嵌原子法^{[49],[50]}的提出为原子多体势理论注入了活力,它为描述原子尺度的微观过程提供了有力的工具。另外,大容量高速电子计算机的出现,为计算微观力学提供了计算工具,使人规模的计算成为现实。

解决由大量原子组成的非线性多体动力学问题可采用分子动力学方法。这种方法在材料力学性质的研究中已得到了广泛的应用。Bullough^[51]以及 Cotterill 和 Doyama^[52]分别采用 Born-Mayer 和 Morse 势对位错核心的晶格构形及位错的扩展进行了分析和模拟; deCelis 等人^[53]采用 Johnson 和 Morse 势分别对 α -铁和铜中裂纹尖端构形在加载过程中的演化进行了模拟; Wang, Sutton 和 Vitek^[54]采用对势对一系列的对称、不对称倾侧及扭转晶界的晶格结构进行了模拟; Zhou 等人^[56]就晶界偏析对晶界变形和破坏的影响进行了模拟; Baskes 等人^[57]采用多体势对 FCC 晶体中位错的运动及加氢后对位错运动的影响进行了模拟; Kitagawa 等人^{[58],[59]}采用多体势对不同晶体取向中裂纹尖端的位错发射及温度对位错发射的影响进行了分析; Cheung 等人^[60]和 Khantha 等人^[61]分别就温度对裂纹尖端位错发射的影响进行了分析; Hoagland 等人^[62]也就晶体取向与裂纹的几何关系对裂纹尖端的变形和扩展的影响进行了分析; Mullins^[63]和 Tan 等人^[64]实现了连续介质与离散原子晶格的镶嵌计算; Dienes 等人^[65]采用理想化的三角形晶格计算了裂纹尖端的扩展过程。

在以往的分子动力学模拟分析中,很多研究者采用对势函数,但对势连晶体的弹性性质都无法准确描述,其模拟结果只能是定性的。有的研究者采用二维模型或理想模型进行模拟,忽略了晶体变形三维的真实特征,因而不能充分地描述原子的运动。本文采用多体势函数以及真实的三维原子几何模型对原子尺度的动力学过程进行模拟,比较真实地反映了材料的微观动力学过程,计算模拟选择的材料为铜晶体和铝晶体。

1.5.1 计算方法

1. 势函数

在镶嵌原子法的框架下提出的势函数有许多种^{[50],[66],[67]},本文采用的是被广泛使用的由 Finnis 和 Sinclair^[66]根据镶嵌原子法提出的多体势。经 Ackland 等人^[67]的构造,这一多体势函数可用于许多金属的微观过程模拟。假定晶体的总势能为

$$U_{\text{tot}} = - \sum_i \rho_i^{\frac{1}{2}} + \frac{1}{2} \sum_j \sum_{i(i \neq j)} V(r_{ij}) \quad (1.123)$$

式中 ρ 是密度态的二阶矩,可表示成

$$\rho_i = \sum_{j(i \neq j)} \Phi(r_{ij}) \quad (1.124)$$

式中 V 和 Φ 是原子间距 r_{ij} 的函数。

对于本文所采用的 FCC 晶体铜, Ackland 等人采用的函数形式为

$$\left. \begin{aligned} V(r) &= \sum_{k=1}^6 a_k (r_k - r)^3 H(r_k - r) \\ \Phi(r) &= \sum_{k=1}^2 A_k (R_k - r)^3 H(R_k - r) \end{aligned} \right\} \quad (1.125)$$

式中参数 a_k, r_k, A_k, R_k 通过拟合弹性常数、点阵常数、空位形成能、结合能以及压强和体积关系确定。 $H(x)$ 为 Heaviside 函数。该势函数的形式可描述大多数面心立方金属晶体。

2. 求解方法

内部原子遵循牛顿定律

$$\mathbf{F}_i = - \frac{\partial U_{\text{tot}}}{\partial \mathbf{r}_i} = m_i \cdot \dot{\mathbf{v}}_i \quad (1.126)$$

计算中采用了蛙跳法 (leapfrog algorithm)^{[68],[69]}

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_i \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right) &= \mathbf{v}_i \left(t - \frac{\Delta t}{2} \right) + \frac{\mathbf{F}_i}{m_i} \Delta t \\ \mathbf{r}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{r}_i(t) + \mathbf{v}_i \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right) \Delta t \\ \mathbf{v}_i(t) &= \frac{1}{2} \left[\mathbf{v}_i \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right) + \mathbf{v}_i \left(t - \frac{\Delta t}{2} \right) \right] \end{aligned} \quad (1.127)$$

式中 m_i 为第 i 个原子的质量; $\mathbf{v}_i(t)$ 和 $\mathbf{r}_i(t)$ 分别为第 i 个原子的速度和位置。计算中时间步长选为 1.18×10^{-14} s, 因此, 计算结果都是时间步长上非平衡瞬时过程的结果。

第 i 个原子的应力状态可由势函数求出^[68], 即^①

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{2\Omega^i} \sum_j \left[V'(r_{ij}) - \rho_i^{\frac{1}{2}} \Phi'(r_{ij}) \right] \frac{r_{ij}^\alpha r_{ij}^\beta}{r_{ij}} \quad (1.128)$$

① r_{ij}^α 是第 i 个原子及第 j 个原子在 α 方向的坐标分量之差, Ω^i 是第 i 个原子占有的体积。

在定温模拟中,假定计算方胞处于一大热源中,通过能量交换,以保证温度的恒定。方法是这样的:使初始时方胞的原子具有给定温度下的 Maxwell-Boltzmann 分布,当计算中方胞的温度偏离给定温度时,要对方胞内原子的运动速度进行重新标定,使其回到给定的温度^[69]。

3. 晶格与裂纹几何

1.5.2 节和 1.5.4 节所采用的晶格几何相同,裂纹扩展方向为 $\langle 110 \rangle$ 方向,裂纹面为 $\{111\}$ 晶格面,裂纹前缘线为 $\langle 112 \rangle$ 方向(图 1.53(a))。1.5.3 节中,为了研究在全位错运动方向上位错发射的不稳定堆垛能,选取裂纹扩展方向为 $\langle 112 \rangle$ 方向,裂纹面为 $\{111\}$ 面,裂纹前缘线沿 $\langle 110 \rangle$ 方向(图 1.53(b))。1.5.5 节中,选取的参考状态与 1.5.2 节和 1.5.4 节相同,但以 $\langle 112 \rangle$ 为旋转轴旋转,使滑移面与裂纹面成一定的角度,来研究裂纹尖端的韧脆破坏情况(图 1.53(c))。对于 1.5.6 节中的情况,裂纹位于晶粒 1 中,其方位与 1.5.2 节的相同,晶界面位于裂纹前方,与裂纹面垂直,与裂纹前缘线平行(图 1.53(d))。

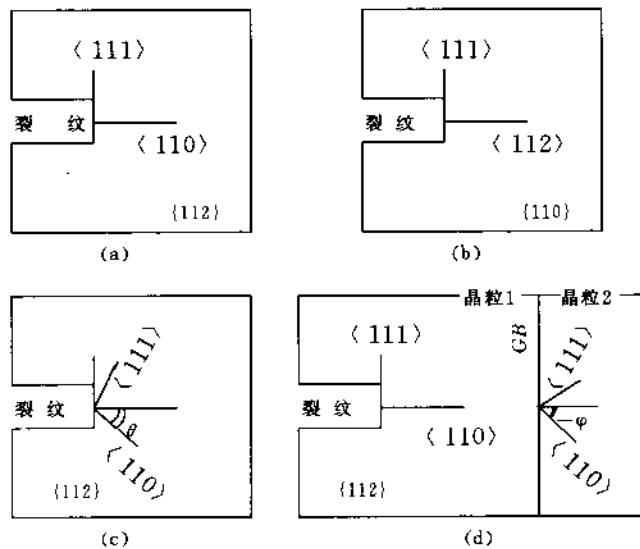


图 1.53 模拟采用的裂纹与晶体几何

由于在 $\langle 112 \rangle$ 方向上采用了 6 层原子面,且沿该方向上采用了周期性条件,因而可以描述原子的三维运动及全位错的分解、发射和运动。

4. 边界条件

对于 1.5.2 节的计算,我们主要采用各向同性 II 型 K 位移场进行模拟,并采用正交各向异性 I 型 K 位移场进行对比计算。1.5.3 节只采用各向同性 I 型 K 位移场。1.5.4 节采用各向异性 II 型 K 位移场。1.5.5 节采用的是各向异性 I 型 K 位移场。1.5.6 节采用的是各向异性 I 型 K 位移场,其弹性常数取晶粒 1 的。

本文的计算中,一般裂纹距位移边界的距离都较远,所以对位错的萌生和发射影响都不

大。但当领先位错接近位移边界时,由于位错不能穿过边界,必然在边界处产生很大的应力集中,所以边界影响很大,本文假定位移边界是位错运动的障碍,由于位错的塞积,必然抑制后续位错的运动和发射,而抑制裂尖的钝化,有利于脆性断裂。

1.5.2 裂纹尖端位错发射

Kitagawa 等人^{[58]、[59]},deCelis^[58]等人,Cheung 等人^[60]曾经对裂纹尖端的位错发射进行过模拟计算,但他们的计算大都是二维分析。我们则注重三维分析^{[70]、[71]}。

采用不同加载速率,对 I 型加载裂纹进行了模拟和分析后我们发现,位错都是以不全位错的形式发射和运动的,两个不全位错之间存在一层错。一全位错可分解为两个 Shockley 不全位错,其分解方式为

$$\frac{1}{2}[\bar{1}10] \rightarrow \frac{1}{6}[\bar{2}11] + \frac{1}{6}[\bar{1}2\bar{1}] \tag{1.129}$$

本文计算的加载速率很高,裂尖位错发射以后,很快被加速到很高的速度,但在离裂尖的一定距离上,运动速度变化不大。由图 1.54 可看出,有两个位错被发射出来。发射的位错构形由图 1.55 给出,裂纹前方有两个不全位错。位错的运动速度与加载速率相关,加载速率越高,位错的运动速度越快。我们发现,刃型不全位错可以以亚声速(小于剪切波速)和超剪切波速运动(大于剪切波速而小于膨胀波速),但达到膨胀波速时,晶格发生破坏。这说明膨胀波速是位错运动的极限速度。

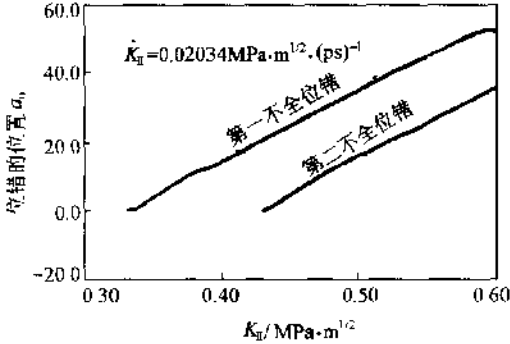


图 1.54 位错位置与加载水平的关系曲线

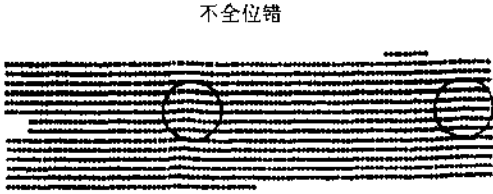


图 1.55 $K_{I\dot{}}=0.48\text{MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$ 时裂尖的原子图像

对应力状态的分析发现,在位错发射之前,分子动力学模拟结果与弹性解结果吻合,但当位错发射之后,弹性解高于模拟结果。图 1.56(a)和图 1.56(b)给出了两者的比较,其加载速率为 $\dot{K}_I=0.05012\text{MPa}\cdot\text{m}^{1/2}/\text{ps}$ 。弹性解由下面公式给出:

$$\sigma_{xy} = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi x}} + \sum_i \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} \sqrt{\frac{x_i}{x}} \frac{b}{x-x_i} \tag{1.130}$$

由于位错核心应力存在奇异性,我们采用 Peierls 位错应力场来修正,即

$$\sigma_{xy} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x}{x^2 + \zeta^2} \quad (1.131)$$

模拟结果与弹性解的这种差别的主要原因可能与高应力部位(裂尖和位错核心)的原子松弛有关。

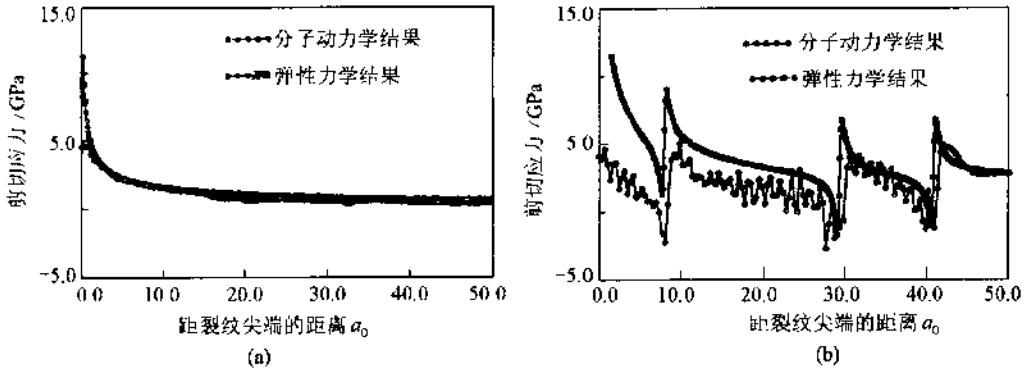


图 1.56 模拟结果与弹性解的比较
(a) 位错发射前; (b) 位错发射后

我们还模拟了加载速率对裂纹尖端发射位错的临界应力强度因子值的影响,并进行了分析(图 1.57 所示)。可以看出,加载速率越高,发射位错的应力强度因子的临界值越大。这一结果可以解释在低加载速率下材料呈韧性断裂,而在高加载速率下则呈脆性断裂的实验现象。

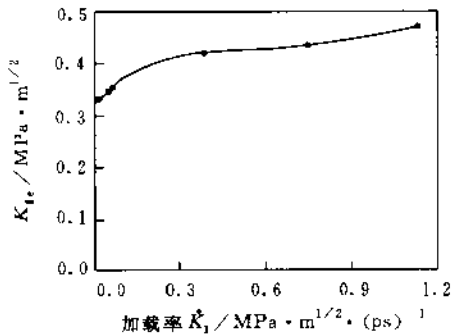


图 1.57 加载速率对位错发射临界应力强度因子的影响

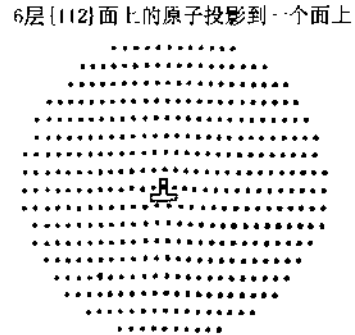


图 1.58 位错核心部位的原子排列

图 1.58 给出了不全位错核心的晶格构形。可以看出,位错核心的原子排列存在较大的畸变,原子在密排面的法向方向上存在较大的位移,因而离散位错和 Peierls 位错都不能较好地描述位错核心附近的应力和位移状态。

对同样的晶格构形,我们也采用正交各向异性 K 位移场边界进行模拟,发现发射位错的应力强度因子的临界值降低,在同样的加载水平下,更多的位错被发射出来^[71]。

1.5.3 位错发射的不稳定堆垛能

Rice^[33]把沿剪切方向施加均匀剪切得到的不稳定堆垛能 γ_{us} 应用于裂纹尖端。但裂纹尖端的剪切应力状态并不均匀,所以有必要分析这种不均匀剪切对位错发射的临界应力强度因子值及不稳定堆垛能的影响。

Cheung 等人^[60],以及 Rice^[72]都计算过 γ_{us} ,但其结果表现出很大的不确定性,我们^[73]曾对此进行过仔细的研究。

从晶格的构形分析我们发现,由于位错是一个自平衡和亚稳定构形,完整位错刚好形成时,从局部来看位错构形不可能失稳(图 1.59(a)),只有继续加载到图 1.59(b)的构形时,才可能发生局部失稳,使发生位错发射(图 1.59(c))。

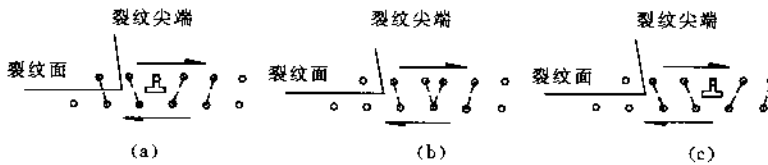


图 1.59 裂纹尖端位错的状态
(a) 亚稳定; (b) 临界; (c) 发射后

图 1.60 给出了分子动力学模拟的晶格构形图。从图可以看到一个不全位错发射了出来,图 1.61 给出了裂纹尖端的裂纹面上下一对原子的剪切应力与相对剪切位移的关系曲线,可以看出,由 Rice^[33]定义的不稳定堆垛能 γ_{us} 并不是不稳定堆垛能,而是位错的形成能。真正的不稳定堆垛能应该是位错的形成能 γ_{us} 加上从位错形成到位错失稳的能量 γ_{dus} ,我们用 Π_{us} 表示,即

$$\Pi_{us} = \gamma_{us} + \gamma_{dus} \quad (1.132)$$

这样,位错发射,即位错发生不稳定堆垛的临界条件为

$$J = \Pi_{us} \quad (1.133)$$

其中, J 为 J 积分。

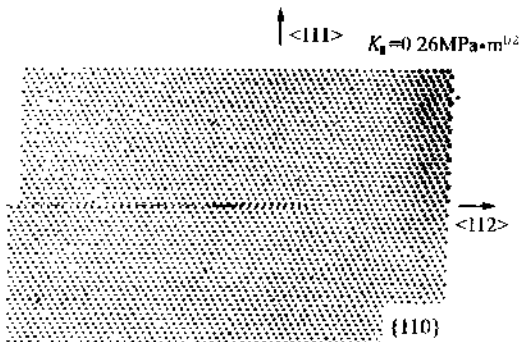


图 1.60 加载后裂尖原子的排列

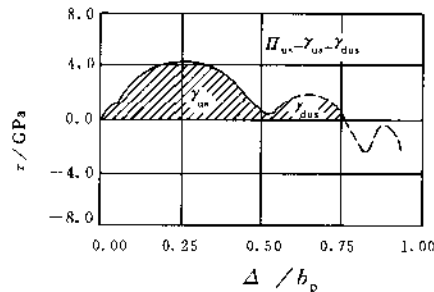


图 1.61 裂尖原子对的剪应力与相对剪切位移曲线

γ_{dis} 对应于剪切应力的不均匀性。与 γ_{us} 相比, γ_{dis} 较小, γ_{us} 是 Π_{us} 的主要部分。这说明形成位错比较困难, 而从形成位错到发射位错则很容易。

1.5.4 温度对裂尖位错发射的影响

Rice 和 Beltz^[34], Khantha 等人^[61]曾研究过温度对位错发射和位错运动的影响, 采用的是热激活和弹性力学方法。我们首先采用分子动力学方法进行模拟分析, 再采用热激活的概念来建立位错发射的临界值与温度之间的关系^[74]。

我们对不同温度下的裂纹尖端位错发射的情况进行了模拟和分析。图 1.62(a) 和图 1.62(b) 分别给出了温度为 100K 和 300K 情况下, 位错位置与加载水平的关系。从模拟结果发现, 随着温度的上升发射位错的应力强度因子的临界值下降, 在相同的载荷水平下, 更多的位错被发射出来。温度较高时, 位错的运动速度不均匀。在某一瞬时, 位错在局部可能发生反向运动。另外, 还发现位错离开裂尖的速度对温度并不敏感, 只是随温度的上升而略微上升。位错的扩展宽度和位错之间的间距对温度的变化也不敏感。图 1.63 给出了对裂纹附近原子的应力取时间和空间平均的剪应力分布, 弹性解也绘于图上。除了非常靠近裂纹尖端以外, 在 0K 时的模拟结果与弹性解一致, 随着温度的上升, 靠近裂纹尖端的应力水平有所上升, 所以由温度诱导的裂尖应力软化在本文的模拟中不存在。

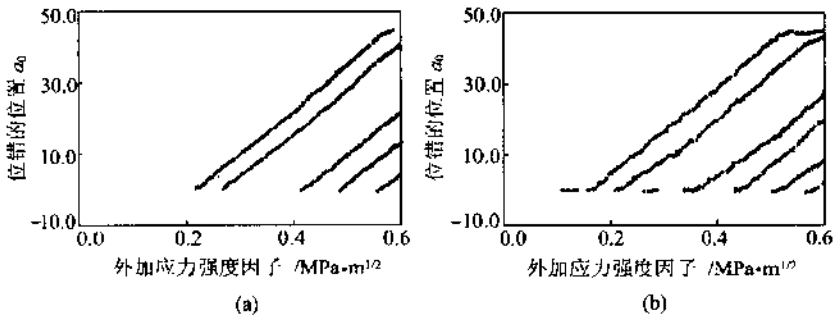


图 1.62 位错位置与加载水平的关系
(a) $T=100\text{K}$; (b) $T=300\text{K}$

下面我们来建立温度与裂尖位错发射临界值之间的关系, 并与分子动力学结果进行比较。

通常, 裂尖位错发射与应力状态及温度有关。假定在 0K 时位错发射需要克服的所有势垒为^[83]

$$\Delta G = Ab^2 \left[\ln \left[\frac{Ab}{K_1^0} \sqrt{\frac{2\pi}{r_0}} \right] - 1 \right] \quad (1.134)$$

则在 0K 时, 位错发射的应力强度因子的临界值为

$$K_{1e}^0 = \frac{Ab}{e} \sqrt{\frac{2\pi}{r_0}} \quad (1.135)$$

式中 e 为自然对数的基底; r_0 为位错核心的宽度; 对刃位错, $A = \mu / [2\pi(1-\nu)]$; μ 为剪切模

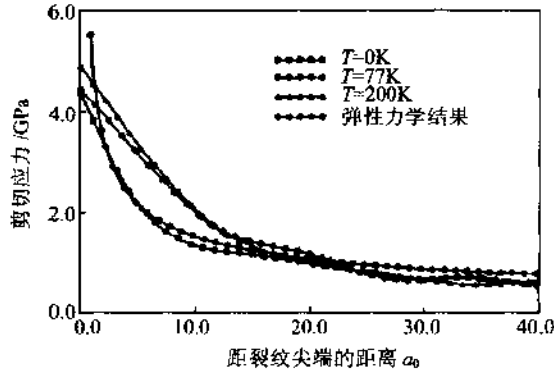


图 1.63 裂纹尖端的应力分布

量; ν 为 Poisson 比; b 为 Burgers 矢量的大小。

根据 Khantha 等人^[61]和 Kitagawa^[59], 我们假定由温度诱导的激活能与温度成线性关系, 即单位位错线长度的激活能为

$$\Delta G_T = \frac{2\alpha k_B T}{b} \quad (1.136)$$

式中 α 为与材料和加载速率有关的参数; k_B 为 Boltzmann 常数。由公式(1.134)和(1.136)得到在温度 T 时, 位错发射的临界条件为

$$Ab^2 \left[\ln \left(\frac{Ab}{K_{Ic}^0} \sqrt{\frac{2\pi}{r_0}} \right) - 1 \right] - \frac{2\alpha k_B T}{b} = 0 \quad (1.137)$$

由此得在温度 T 时, 位错发射的临界应力强度因子为

$$K_{Ic} = K_{Ic}^0 \exp \left(- \frac{2\alpha k_B T}{Ab^3} \right) \quad (1.138)$$

由于 K_{Ic}^0 与材料和加载速率等因素有关, 这里我们取 $T=0K$ 时分子动力学的模拟值 $K_{Ic}^0 = 0.2376 \text{MPa} \cdot \sqrt{\text{m}}$ 。图 1.64 给出了 $\alpha=0.9$ 时方程(1.138)和模拟结果的对比。可以看出, 分子动力学模拟的位错发射的临界应力强度因子值和温度的关系与方程(1.138)相吻合。

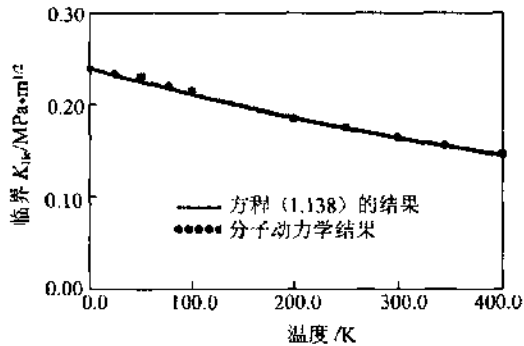


图 1.64 模拟结果与方程(1.138)的比较

1.5.5 裂纹方位与晶体滑移几何对位错发射的影响

Anderson 和 Rice^[75], Rice^[72] 在分析裂纹尖端位错发射时发现, 裂纹方位与晶体滑移的几何关系对裂纹尖端的破坏方式有重要影响。他们采用弹性理论进行分析, 而且采用单个位错的发射和裂纹解理破坏之间的竞争来判定晶体裂纹是韧性断裂还是脆性断裂。Ohr 的实验表明, 金属中的解理破坏经常伴随着大量的位错活动。单个位错的发射不足以说明裂纹呈韧性破坏。实验中还观察到裂纹扩展方向经常是交替地沿着开裂的滑移面扩展, 而不是直线扩展。Hoagland 等人^[62], Kin, Cheung 等人^[76] 曾采用分子动力学方法研究了 Al 的 3 种裂纹与晶体几何的构形, 也发现了晶体几何有重要影响。本节我们采用分子动力学方法来模拟裂纹尖端的破坏方式与裂纹和晶体滑移几何之间的关系, 并与弹性解进行了比较。

我们取不同的方位角 θ 进行模拟分析, 发现当 $0^\circ \leq \theta < 16^\circ$ 时, 裂纹尖端发生沿滑移面的解理开裂, 没有任何位错活动。当 $16^\circ \leq \theta < 25^\circ$ 时, 尽管有位错发射, 并且被发射的位错还远离位移边界, 裂纹还是沿发射位错的滑移面开裂 (见图 1.65(a))。当 $25^\circ \leq \theta < 60^\circ$ 时, 裂纹尖端发射了许多位错, 并在位移边界上产生塞积, 但当塞积达到一定程度时, 裂纹仍然沿位错发射的滑移面开裂 (图 1.65(b))。当 $60^\circ \leq \theta < 90^\circ$ 时, 裂纹尖端发生了复杂的现象: 大量的位错从裂纹尖端发射出来, 并且次滑移系的位错也从裂纹尖端发射出来, 导致了裂纹尖端发生钝化。当 $\theta = 90^\circ$ 时, 发生了超钝化效应。在位错塞积的顶端, 一对 Shockley 不全位错在外力作用下合成一个全位错, 这一全位错发生失稳, 分解为不同滑移面的 Frank 不全位错和 Shockley 不全位错 (图 1.65(c), 它们用双圆圈围绕)。从能量上讲这是一个不利的反应。只

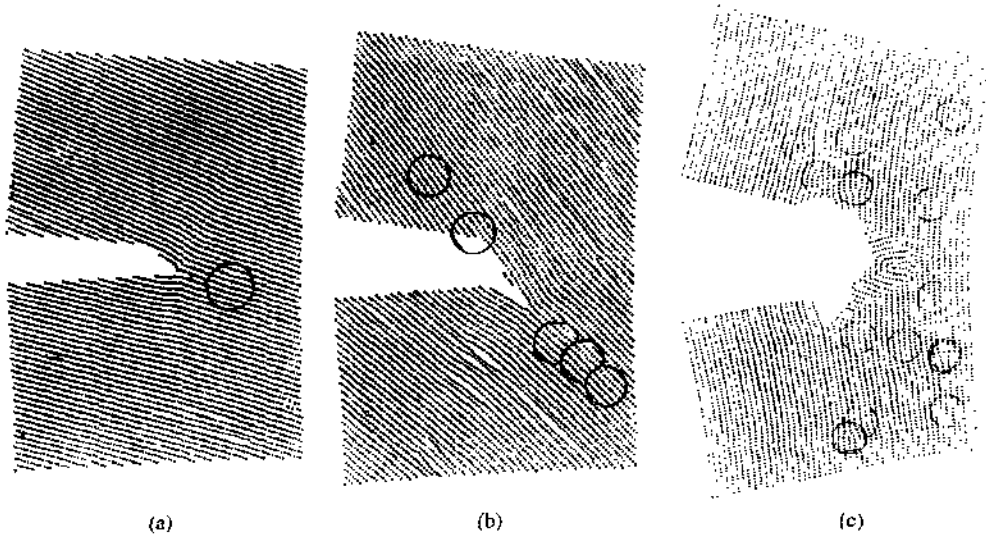


图 1.65

- (a) $K_I = 0.96 \text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$, $\theta = 18^\circ$ 时裂尖的晶格构形;
- (b) $K_I = 1.6 \text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$, $\theta = 45^\circ$ 时裂尖的晶格构形;
- (c) $K_I = 3.5 \text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$, $\theta = 90^\circ$ 时裂尖的晶格构形

有在较大外力作用下才可能发生。Frank 位错是不能滑移的,因而反应后保持不动。而 Shockley 位错是可滑移的,因而反应后离开了塞积部位。

根据 Rice 等^[72],当裂纹面与滑移面之间成 θ 角时, I 型加载下裂纹尖端发射位错的临界应力强度因子为

$$K_{Ic} = \frac{\sqrt{\Pi_{us} p(\theta)}}{f(\theta)} \quad (1.139)$$

式中

$$f(\theta) = \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

$$p(\theta) = \Lambda_{\alpha\beta}^{-1}(\theta)$$

$$\Lambda_{\alpha\beta} = R_{\alpha\gamma} \Lambda_{\gamma\delta} R_{\delta\beta}$$

式中 $\Lambda_{\alpha\beta}$ 是与材料弹性各向异性系数有关的矩阵; R 为旋转矩阵; Π_{us} 是位错发射的不稳定堆垛能^[23]。

由于位错发射的不稳定堆垛能 Π_{us} 与材料、温度和加载率等因素有关,因而有很大的不确定性。这里采用 $\theta=70^\circ$ 时的分子动力学结果来求 Π_{us} 的值为 0.438J/m^2 。图 1.66 给出了采用这一值的方程(1.139)与分子动力学结果。可以看出,虽然最小值都发生在 $\theta=70^\circ$ 时,但两者的结果相差较远。我们研究发现,裂纹尖端原子的排列对裂纹尖端变形的影响较为敏感,并随着外加载荷的变化,裂尖的原子发生弛豫。但弹性解却不能反映这一过程。另外,裂尖发射的位错在裂纹前方受阻时,将抑制裂纹尖端的位错发射,使裂纹易产生脆性破坏。I 型加载下,位错发射后将产生如下 3 种影响:(1) 产生屏蔽效应;(2) 裂尖产生钝化;(3) 裂尖形状的改变导致象力的改变。在以往的研究中,影响(1)得到了较好的考虑,而影响(2)、(3)从弹性理论方面则难以考虑,因而都将它们忽略。从本节分析看,要想建立准确的裂纹破坏的断裂准则,则必须考虑位错发射后的裂纹尖端形状的变化。

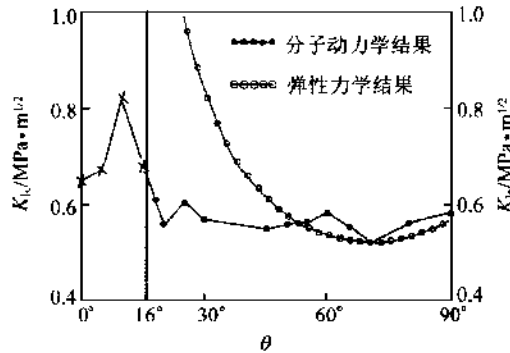


图 1.66 模拟的分子动力学解和公式(1.139)的应力强度因子临界值随 θ 的变化

1.5.6 位错列与晶界之间的作用

位错与晶界之间的交互作用对多晶体硬化及破坏行为具有重要的影响。目前,已有很多

学者采用弹性力学方法进行分析^[77],但弹性方法不能考虑晶界对位错的吸收和发射,也无法考虑晶界在与位错相互作用时的变化。也有的从位错反应的角度进行研究^{[78],[79]},由于对普通大角晶界的位错结构目前还不完全清楚以及晶界结构的多重性,这种反应的方式不能确定。也有的从实验方法进行直接的观测^[48],但动态原位观察这样的相互作用则比较困难。为此,采用分子动力学方法对位错与晶界之间的动态交互作用进行模拟分析则是可行和方便的^[80]。本节对绕 $\langle 112 \rangle$ 轴旋转的不同 φ 角形成的、不同 $\{110\}_1\varphi/\langle 112 \rangle$ 型不对称倾侧晶界,与从裂纹尖端发射的位错列的相互作用进行了分析。

图 1.67(a)和(b)给出了 $\varphi=10^\circ$ 和 $\varphi=-10^\circ$ 的晶界结构,可以看出,晶界由双列位错构成。对于 $\varphi>0^\circ$ 的小角晶界,由混合型位错组成,其刃型分量为 $\frac{1}{4}\langle 110 \rangle$,螺型分量为 $\frac{1}{2}\langle 112 \rangle$ 。由于螺型分量与模拟面的法线方向平行,所以这个分量的位错在图 1.67(a)上观察不到,只观察到负的刃型部分。当 $\varphi<0^\circ$ 时,也由混合型位错组成,但其组成分量与 $\varphi>0^\circ$ 的分量反号。当施加载荷后,小角晶界发生移动,负小角晶界由于含正位错分量,因而向远离裂纹尖端的方向运动,而正小角晶界因负位错分量而向裂纹尖端方向运动。向裂纹尖端运动的位错与从裂纹尖端发射的位错相互作用,从而改变了位错的运动速度。图 1.68(a)给出了从裂纹尖端发射的位错的位置与加载水平之间的关系,可以看出,位错遇到位错群后速度很快减速,穿过位错群后,又加速运动。

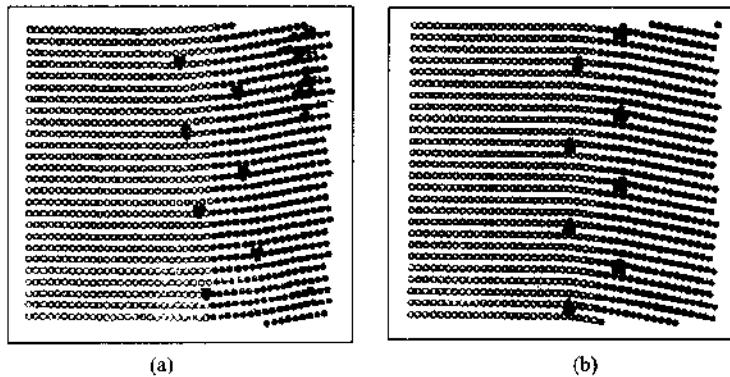


图 1.67 小角晶界的位错结构
(a) $\varphi=10^\circ$; (b) $\varphi=-10^\circ$

对于大角晶界,其晶格结构很复杂,因而位错与晶界的作用方式也比较复杂。在模拟计算中,几乎所有的晶界在加载过程中都发射了位错,这说明对于这一类的晶界,晶界位错发射是较普遍现象。另外,晶界吸收前几个从裂纹发射的位错也是普遍现象,图 1.68(b)给出了 $\varphi=70^\circ$ 时,从裂纹尖端发射的位错的位置与加载水平的关系,可以看出,领先的 3 个位错被晶界吸收后,才使后续位错发生较强的相互作用,而运动速度下降。由裂纹尖端发射的位错列与晶界的作用是一个交替的过程,即塞积、弛豫、再塞积、再弛豫的过程。塞积过程中,晶界上相当于存在一个较大的 Burgers 矢量,产生较强的应力集中,当塞积部位发生失稳后,使应力得以松弛。晶界晶格结构的失稳可导致两种过程,一是使原子沿晶界扩散,导致晶界迁移,改变了原来的晶界方位和结构(图 1.69);另一种是使向邻近晶粒发射位错(图 1.70)。

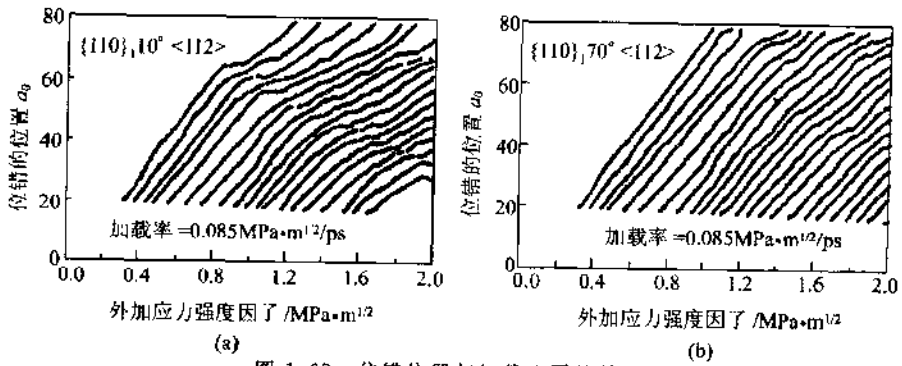


图 1.68 位错位置与加载水平的关系

(a) $\varphi=10^\circ$; (b) $\varphi=70^\circ$

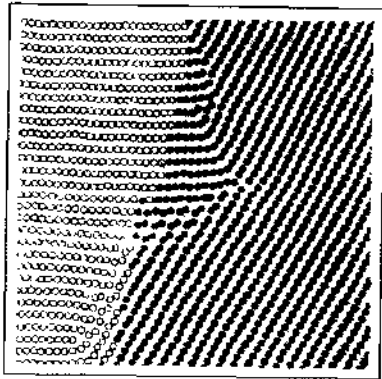


图 1.69 晶界结构和方位的变化, $\varphi=70^\circ$

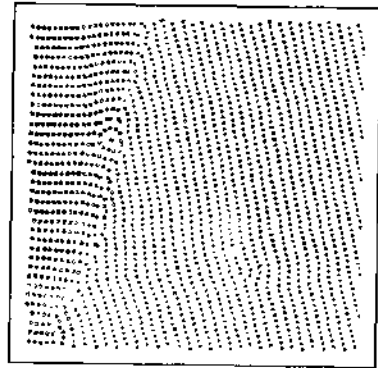


图 1.70 临近晶粒发射位错, $\varphi=-70^\circ$

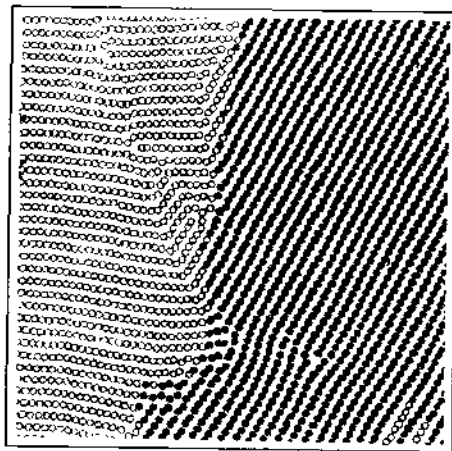


图 1.71 大范围晶格失稳, 导致晶界向两侧晶粒发射位错

对于不同的晶界, 这两个过程都存在, 只是各自占的比例不同。另外, 晶界结构的失稳范围可能较大, 这时的失稳即可向邻近晶粒发射位错, 也可以使离塞积部位较远的位置向邻近

晶粒和本身晶粒发射位错(见图 1.71)。

1.5.7 三重嵌套模型

以上的分析清楚地说明分子动力学模拟方法可以充分体现离散原子(分子)系统的晶体点阵特征,可以真实地描述晶体结构、晶界特征、杂质原子偏聚、空位形成、位错运动、原子迁移和扩散等纳米尺度以下的变形机制与力学行为。

但是现阶段分子动力学方法存在着 4 个方面的缺陷:

(1) 分子动力学模拟采用的多体势是用经验及半经验的方法建立起来的,缺乏可靠的理论基础。

(2) 分子动力学模拟是飞秒至皮秒时间尺度上的原子、分子运动,而宏观力学过程是在微秒、毫秒或更长时间尺度上完成的,两者存在 10^6 量级以上的差异。分子动力学模拟的只是超超短时的原子、分子运动,而不是真实的材料变形断裂过程。

(3) 现有分子动力学分析方法,难以正确模拟温度对材料力学行为的影响。

(4) 现有分子动力学方法通常只能模拟纳米尺度范围内的原子、分子运动,而宏观力学过程通常发生在毫米、厘米乃至更大空间尺度上。

空间尺度大的巨大差异可以通过增大模拟块尺寸来弥补,但这需要使用超级巨型计算机。另一种途径是引入宏观、细观、微观三重嵌套模型来解决。

目前嵌套模型采用分子动力学方法和有限元方法相结合。嵌套模型有一个离散原子和连续介质的交叠层。对交叠层的合理处理是问题的关键。

1982 年 Mullins^[63]首先提出了有限元法和分子动力学相结合的嵌套模型。嵌套模型由两部分组成。内部是离散原子系统的分子动力学模拟块,外面由有限元网格所包围。分子动力学模拟块尺寸较小,约几十纳米至几百纳米。原子之间的相互作用力由原子作用势所决定,其作用力具有一定的力程,这和连续介质的作用力的作用方式并不一样。内部分子动力学模块的原子相互作用能反映裂尖的晶格效应和非线性特征;能描述裂纹尖端的位错发射、裂纹扩展等真实的力学行为。外部有限元法基于连续介质力学假定,描述材料的尺寸可以是细观力学范围的微米量级,也可以是更大范围内的宏观尺寸。嵌套模型的内力在不同区域是用不同方法描述的,适当地处理好两个模块交叠层处的力学量和几何量的传递尤其重要。

在交叠层处,Mullins 对作用在有限元节点上的力 Q 和作用在离散原子上的力 F 建立了联系,用下式表达

$$Q = Ku + NF$$

式中 K 为交叠层处有限元节点的刚度矩阵; N 为插值形函数; u 为有限元节点位移。

此法相当于一种加权平均法,形函数 N 相当于加权因子。按照 Mullins 的计算方案,引起交叠层处作用力产生很大的波动,不易协调。Mullins^[65]应用该模型考虑了对势的长程效应和混合加载对断裂过程的影响。

Kohlhoff 等人^[66]在 1991 年发展了 Mullins 提出的嵌套模型,他将模型分成 4 个区域,区 1 和区 4 分别为离散原子区和有限元区,区 2 和区 3 两个区是离散原子和有限元的交叠层的两个子区。Kohlhoff 将交叠层区细分的目的是为了很好地描述力学量在这个区的过

渡,他指出,交叠层的每一个子区为另一个区提供位移边界条件,具体地说,区2为区4的连续介质区提供位移边界,而区3为原子区1的分子动力学模块提供位移边界条件。按照这个方案,Kohlhoff避免了在交叠层区内直接进行两种介质的集中力运算,保证了变形在交叠层区内的相容性。更重要的是Kohlhoff应用非线性弹性理论对交叠层的介质进行了描述,要求连续介质的弹性常数和离散原子系统的弹性常数在平衡位置附近相等,即要求一阶、二阶、三阶弹性常数相同。这一条件实际上要求在交叠层区2、区3内,原子模型的应力和连续介质模型的应力是等同的。但Kohlhoff在交叠层区没有考虑不连续位移的跨层次穿越,因而无法描述位错穿越交叠层。

谭鸿来和杨卫^[64],杨卫^[87]等人提出了一种三重嵌套模型。下面将对这个模型作比较详细的介绍。

纳观区尺度10nm左右,细观区为外径10 μm 的区域,它与纳观区的结合层需考虑位错传递。细观区内既有随机分布的背景位错,又有来自纳观区的传递位错(从裂纹尖端发射出来,穿过纳观区域进入细观区域)。内径为10 μm 、外径为1mm的区域是宏观的区域,这个区域的力学行为可用弹-粘塑性本构关系来描述。

三重嵌套模型的关键环节是交叠层的过渡。

1. 纳观-细观交叠层模型

图1.72绘出纳观与细观结合的计算模型。把外层细观区划分成480个单元,径向共20层,每层24个单元。有限元网格的内半径10nm,外半径为30 μm 。内层为离散原子系统,内层的半径为12.5nm。在原子与连续介质的交叠层采用自动设计的粒子/连续介质交叠模型,交叠层的径向厚度为4至5个原子间距。在交叠层中粒子与其所处位置有限元物质点有相同的位移和应力。

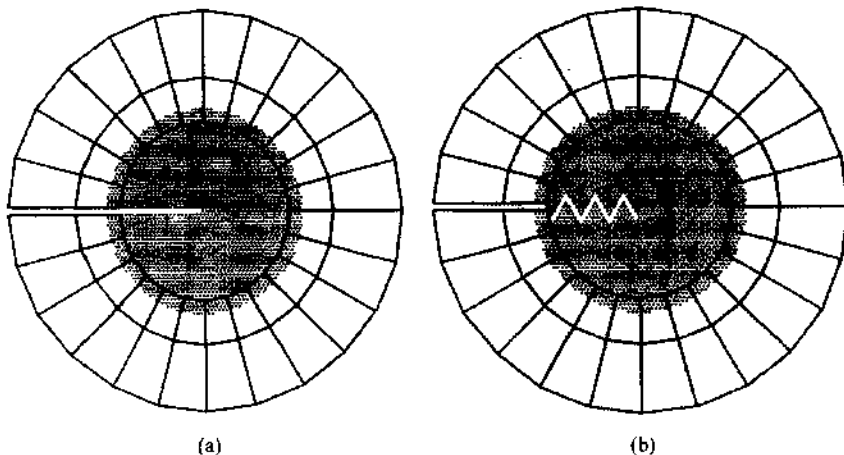


图 1.72 界面断裂原子/连续介质结合模拟的初始构形
(a) 平直界面; (b) 峰峦状界面

作为进一步计算,在细观区内可以随机放置背景位错。细观区域是弹性介质,其塑性变形由嵌含在介质中的诸位错的运动所产生。

耦合的 FEM/MD 计算可由下述矩阵方程来描述

$$\begin{pmatrix} \mathbf{K}_{EE} & \mathbf{K}_{EI} & 0 \\ \mathbf{K}_{IE} & \mathbf{K}_{II} & \mathbf{K}_{IA} \\ 0 & \mathbf{K}_{AI} & \mathbf{K}_{AA} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u}_E \\ \mathbf{u}_I \\ \mathbf{u}_A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f}_E \\ \mathbf{f}_I \\ \mathbf{f}_A \end{pmatrix} \quad (1.140)$$

式中下标“E”表示交叠层之外的有限元外节点自由度；下标“I”表示被原子集合系统覆盖的有限元内节点的自由度；下标“A”表示原子(分子)集合系统所对应的自由度； \mathbf{K} 代表刚度矩阵；向量 \mathbf{f}_E 与 \mathbf{f}_I 既包括远方 K 场所施加的外载，也包括为抵消位错自身应力场而在边界和界面上施加的反向面力； \mathbf{f}_A 表示由原子间作用势所产生的力向量。

2. 位错传递

在一定载荷下，位错可以自然地在裂尖附近形核，并沿着分解剪应力最大的滑移面滑出纳观区域。当位错抵达交接处时，便在地用具有相同 Burgers 矢量的连续介质位错来取代。

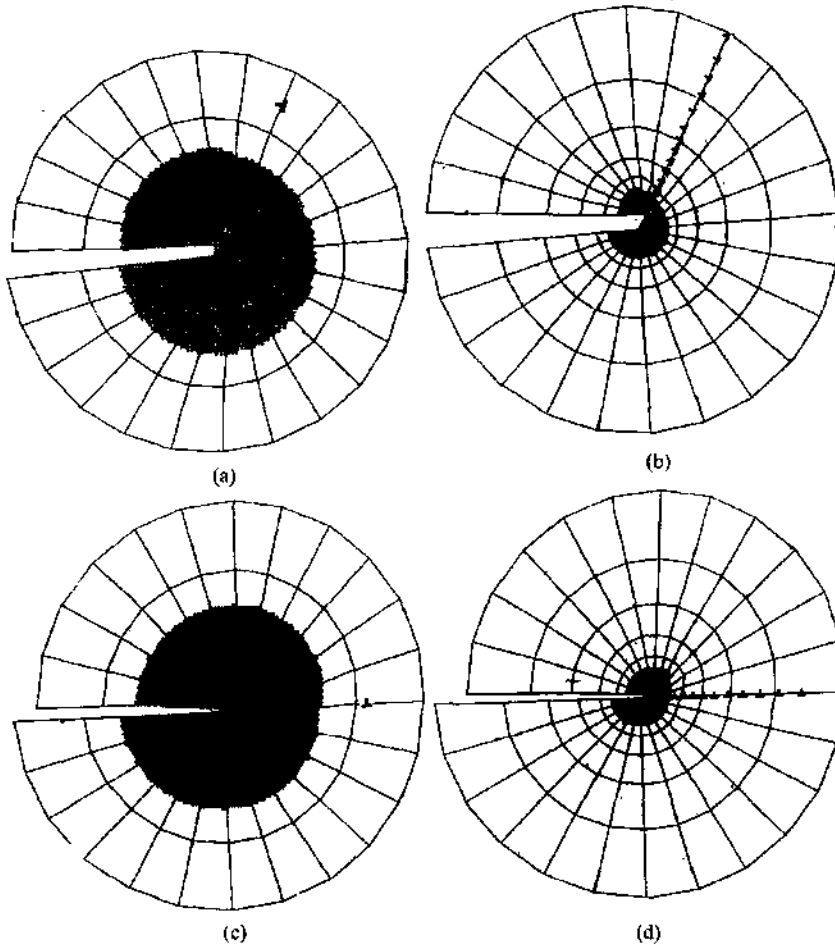


图 1.73 沿平直界面断裂的原子/位错/连续介质模拟 ($|K| = 0.8 \text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$)
 (a) $\psi = 15^\circ, t = 4\text{ps}$; (b) $\psi = 15^\circ, t = 30\text{ps}$; (c) $\psi = 120^\circ, t = 4\text{ps}$; (d) $\psi = 120^\circ, t = 30\text{ps}$

转换后的连续介质位错将在细观区内依照下述公式向前运动:

$$v = \tau b B$$

式中 b 是 Burgers 向量的长度; B 是材料常数, 可由实验确定。

图 1.73 显示了平直界面裂纹(金属陶瓷双材料界面裂纹)位错发射模拟结果。图 1.73 (a)与(c)中,从裂尖发射的第一根位错刚穿过交叠层, $t=4\text{ps}$ 。在图 1.73(b)与(d)中, $t=30\text{ps}$, 6000 个时间步, 已有一串位错列进入细观区域。(a), (b)对应于外载相位角 $\psi=15^\circ$; (c), (d)对应于外载相位角 $\psi=120^\circ$ 。

1.5.8 关联参照模型

嵌套模型的特点是离散的原子(分子)集合系统与连续介质的结合。前者用分子动力学模拟, 后者用有限元法分析。

本小节介绍另一种方法, 其目的也是为了克服分子动力学模拟块体尺寸小所带来的问题。

汤奇恒和王自强^[88]最近提出了关联参照模型, 成功地实施了柔性位移边界条件和较好地解决了位错穿越边界的问题。

1. 力学模型

图 1.74(a)示意一个具有单边裂纹的分子动力学模拟块体, 区 1 为分子动力学模拟的主要区域, 区 2 是分子动力学的边界区, S_R 表示从裂尖发射的位错。

设想一个含单边裂纹的无限大连续体, 如图 1.74(b)。连续介质的弹性常数 E, G, ν 同单晶体铜一样。图中虚线框尺寸与图 1.74(a)分子动力学模拟块体尺寸也一样。真实的分子动力学模拟块体(图 1.74(a))与设想的连续介质(图 1.74(b))有关联。关联参照模型有两个要求:

① 图 1.74(a)的分子动力学模拟块体的边界区 2 的原子位移由其关联的图 1.74(b)连续介质区 2 给出。

② 假定有 $N_T = N_1 + N_3$ 个位错从裂尖发射。图 1.74(b)区 1 的 N_1 个位错, 其位置由图 1.74(a)分子动力学模拟块体的原子构形图确定。图 1.74(b)区 3 中的 N_3 个已发射位错, 其位置由细观力学位错塞积理论确定。

在分子动力学模拟过程中, 上述两个要求是关联参照模型始终要求和保证的。

大量的材料实验和计算结果表明, 一旦 K_I 大于 K_{Ic} 时, 位错从裂尖被发射出来, 而且在不需要继续加载或加载很小时, 位错会继续不断地从裂尖发射。为了用分子动力学来模拟这一物理现象, 在我们下面的计算模拟中, 采用特定的加载方式。当 K_I 大于 K_{Ic} 时, 暂停分子动力学继续加载, 维持载荷不变, 进行分子动力学弛豫, 位错沿滑移面高速运动远离裂纹尖端。因为位错一旦形成, 它是一个不稳定结构, 难以停留在裂尖, 必然会滑移出裂尖区域。

按照关联参照模型要求②, 位错从裂纹尖端发射, 沿着滑移面迅速向晶体内部运动(见图 1.74(b))。从整个无限大系统来看, 位错的出现和位错的运动改变了连续介质的应力场和位移场。自然地, 区 2 的应力场和位移场也将随着变化。按照关联参照模型要求①, 真实

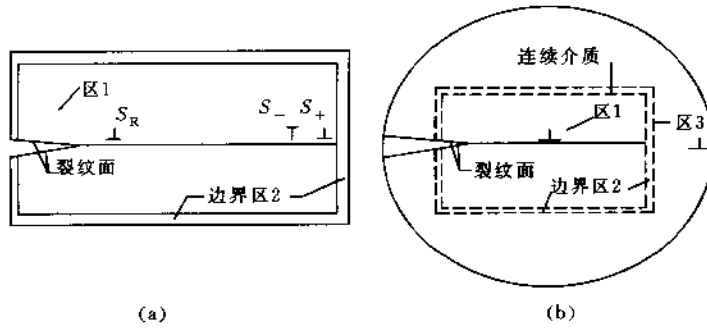


图 1.74 关联参照模型示意图

(a) 分子动力学模拟块体位错发射示意图；(b) 含单边裂纹无限大连续体示意图

的分子动力学模拟块体边界区 2 的位移场随着位错不断运动而改变。因此在分子动力学模拟过程中，边界区 2 原子的位置随着位错的运动需要相应地作调整。因此边界条件实际上是柔性位移边界条件。

含单边裂纹无限大介质的位移场由下式给出：

$$u_l = u_l^A + \sum_{i=1}^{N_T} u_l^D(x, y; x_i) \quad K_1 \geq K_{Ic}, l = 1, 2 \quad (1.141)$$

式中 x_i 为离散位错的位置； u_l^A 为外载荷所对应的位移场； $u_l^D(x, y; x_i)$ 是第 i 个位错所对应的位移； l 表示坐标分量； u_l 是外载荷和位错位置的函数，表达了总的位移场。

当位错运动到右边界时，假想有正负相反的两个位错 S_+ 和 S_- ，裂尖发射的真实位错 S_R 和假想位错 S_- 湮灭，仅存在 S_+ 。通过调整边界，使位错 S_+ 穿越右边界，进入区 3 的连续介质区域。

材料实验还告诉我们，位错一般塞积在距裂尖几个微米处。因此设想在该处或许存在二相粒子，或许存在界面或其他障碍物。进入连续介质区域的位错塞积在几个微米处的障碍物前。离散位错群的塞积位置可根据细观力学的位错塞积理论，由位错所受的应力平衡方程来确定。

2. 基本公式

(1) 位移表达式 在下面的计算中，采用纯 I 型加载和位移边界条件的方式。在位错发射前，位移场仅是 K_I 场；但位错发射后，位移场应由式(1.141)表示。

由线弹性理论可以直接写出在外载荷作用下位移场的表达式。在有单边裂纹条件下，在 $z = z_0$ (这里 z_0 是实数) 处有单个离散位错，相应的位移表达式为

$$2G(u_x + iu_y) = \kappa\phi(z) - \omega(\bar{z}) - (z - \bar{z}) \overline{\Phi(z)} \quad (1.142)$$

$$\Phi(z) = \Omega(z) = \Phi_0(z) + \Phi_R(z) = \frac{B}{z - z_0} \sqrt{\frac{z_0}{z}} \quad (1.143)$$

式中 $\Phi(z)$ ， $\Omega(z)$ 是在具有单边裂纹的无限大介质中，单个位错产生的应力所对应的复变势函数。

$$\phi(z) = \omega(z) = \int \Phi(z) dz = B \ln \frac{\sqrt{z} - \sqrt{z_0}}{\sqrt{z} + \sqrt{z_0}} \quad (1.144)$$

其中 $B = \frac{bA}{i}$; b 是 Burgers 矢量的大小; $A = \frac{G}{(\kappa+1)\pi}$ 。

由位错产生的位移场 $[u_x + iu_y]$ 是位错所在位置 z_0 的函数, 在计算过程中, 主要应用于位错从裂尖被发射后, 停止外载荷的继续加载, 边界区 2 的原子位置随着位错的滑移而作相应变化, 直至位错塞积在微米处。

(2) 离散位错的位置 前面已假设有 N_T ($N_T = N_1 + N_3$) 个位错从裂尖发射。 N_1 表示位错已从裂尖发射, 还没有穿越边界区 2, 其位置可以从原子构形观察到; 进入区 3 的 N_3 个离散位错位置由下面的平衡方程 (1.145) 确定。对纯 II 型加载, 而且滑移而与裂纹面平行时, 所有已发射的位错都在 x 轴上, 位错沿 x 轴塞积或排列的编号从右向左。在区 3 中, 位错位置为 x_i ($i=1, 2, \dots, N_3$), 在区 1 中, 位错位置为 x_i ($i=N_3+1, \dots, N_T$)。

$$\begin{aligned} x_1 &= x_{ob} \\ \tau_i &= \tau_i, \quad i = 2, 3, \dots, N_3 \end{aligned} \quad (1.145)$$

式中 x_{ob} 为第一个位错塞积的位置; τ_i 是第 i 个位错沿滑移方向所受到的剪力, 它包括外场剪应力, 第 i 个位错象力的作用, 所有其他位错和象力的作用; τ_i 是晶格摩擦力。

方程 (1.145) 是非线性方程组, 可以根据 Newton-Raphson 方法求解, 区 3 的 N_3 个位错位置完全确定了。设想第 N_3+1 个位错穿越边界进入区 3, 再一次求解平衡方程组 (1.145), 离散位错群将重新排列, 位错位置的变化对分子动力学模块产生一定的影响。根据区 3 位错塞积的位置变化, 分子动力学模拟块体的边界区 2 将随着调整, 通过这个模型和模拟方法的实施, 必然将连续介质区的位错塞积位置和模拟区的位错滑移建立了联系。从某种角度来说, 这实际上已经突破了分子动力学尺寸小的限制, 从而将细观力学的位错塞积成果成功地应用于分子动力学方法的模拟中。

3. 计算方法

(1) 几何条件 坐标轴 x, y, z 分别取为 $[111], [1\bar{1}0], [11\bar{2}]$ 。沿 x 方向长度为 $500 \times \frac{\sqrt{3}}{6} a_0$; 沿 y 方向长度为 $40 \times \frac{\sqrt{2}}{2} a_0$, 沿 z 方向为 $6 \times \frac{\sqrt{6}}{6} a_0$ 。沿 x 方向, 每 3 层原子构成一个周期, 周期为 $\sqrt{3} a_0/2$; 沿 y 方向, 2 层为一个周期, 周期为 $\sqrt{2} a_0$; 沿 z 方向, 6 层为一个周期, 周期为 $\sqrt{6} a_0$ 。将模拟块体沿 $-x$ 方向去掉 2 层原子形成单边裂纹, 长度为 $120 \times \frac{\sqrt{3}}{6} a_0$, 共有 20000 个原子。

(2) 边界条件 柔性边界条件。

(3) 势函数 应用文献 [89] 构造的金属钼多体势。

(4) 计算方法 采用蛙跳法, 加载速率 $\dot{K}_1 = 0.0706 \text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2}/\text{ps}$ 。

(5) 温度条件 假想被模拟的分子动力学样品与一个很大的热源联在一起。这里 $T = 50\text{K}$ 。在初始时刻, 对被模拟样品的所有原子实施在给定温度下的 Maxwell 速度分布, 在模

拟过程中,被模拟样品的任何位置都具有同样的温度,就是说加载和位错发射等可能引起的温度变化都忽略不计。

大量的实验和计算结果表明,一旦 K_1 大于 K_c 时,位错从裂尖被发射出来,而且在不需继续加载或加载很小时,位错会继续不断地从裂尖被发射。为了用分子动力学来模拟这一物理现象,在我们下面的计算模拟中,采用特定的加载方式,当 K_1 大于 K_c 时停止继续加载,而且维持已加的外载荷不变,仅采用弛豫的方式,达到位错高速运动穿越边界,进入区 3 的目的。

4. 结果与讨论

在目前的模拟中,选定的模拟样品具有下面几个特点:裂纹面与滑移面平行;沿 z 方向具有 6 层原子,原子可以沿 z 方向运动,并且沿 z 方向实施了周期性边界条件;纯剪切加载。这几点基本上保证了从裂尖发射的是刃型位错。根据刃型位错的半原子面几何构型的特点,可以很准确地判断刃型位错的位置。

图 1.75 显示了 8 组位错的位置随时间 t 的变化。每一组位错由 3 个不全位错构成,共有 24 个不全位错全部滑移出了模拟区 1 和边界区 2,没有一个不全位错停留在晶体内部造成塞积现象。

当 K_1 为 $0.668\text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$ 时,第一组的 3 个不全位错全部形成。暂停加载,此时这 3 个不全位错处于不稳定状态,可以看出位错在晶体内部继续滑移。从裂尖发射出来的位错,约在 $5a_0$ 内 (a_0 为晶格常数)处于加速运动状态,但很快达到比较稳定的速度。由于采用了柔性的边界条件和位错穿越边界的方法,从裂尖发射出来的第一组 3 个不全位错顺利地穿越了边界进入了区 3。我们设想位错在距裂尖 $5000a_0$ 处遇到了障碍物,并且塞积在那里。

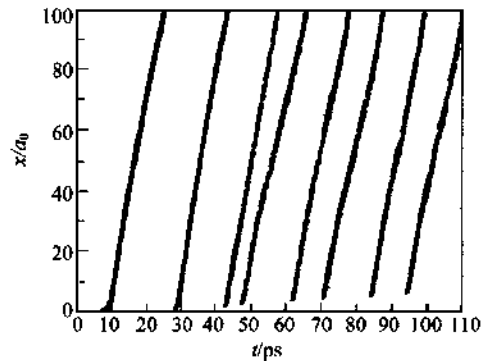


图 1.75 位错位置与时间的关系

在 $5a_0 \sim 100a_0$ 范围内,8 组全位错在晶体内部的滑移速度几乎都一样,约为 $1800\text{m/s} \sim 1950\text{m/s}$ 。此速度小于铝晶体的剪切应力波的速度 (3500m/s)。

发射位错的时间间隔,从微观时间长度上看并不完全一致,由于是 ps 为单位,最长的时间间隔为 20ps (第一组和第二组位错);最短的时间间隔为 6ps (第三组和第四组),从宏观时间尺度看,几乎在连续发射位错,这和实验中观察到位错连续发射的现象是一致的。

从图 1.75 还可以看出,位错之间的相互作用是很强的,而且这种相互作用随着位错远离裂尖越显得明显。这是因为裂纹和位错的相互作用减弱,而位错之间的作用变化不大,相对地来说显得重要。第三组位错和第四组位错之间的间距变化是由窄变宽,位错之间的间距逐渐均匀。

图 1.75 的结果说明了本文指出的关联参照模型、柔性位移边界条件和位错穿越边界的方法是成功的。此方法的优点是消除了固定位移边界对位错运动的限制,比较真实地反映裂

纹与位错、位错与位错之间的相互作用。有助于我们更好地了解和分析位错在裂尖的力学行为。

图 1.76 示意了外力场应力强度因子与时间 t 的关系。结合此图和图 1.75 看出,当 $K_I = 0.668\text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$, 第一组的 3 个不全位错已形成, 暂停加载, 外载荷保持为 $0.668\text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$ 不变, 直至 $t=29\text{ps}$ 时, 第一组的 3 个不全位错滑移出了模拟区, 并且塞积在 $5000a_0$ 处。这时模拟区内没有任何位错, 继续按照 K_I 的速率加载。当 K_I 为 $0.801\text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$ 时, 第二组位错也是以 3 个不全位错的形式从裂尖被发射, 与第一组不全位错发射时的载荷相比较, 此时外载荷约增加了 15%。从第三组位错到第八组位错, 载荷增加得很小, 不足 1%。

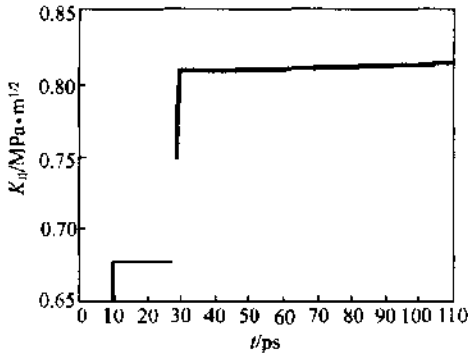


图 1.76 应力强度因子与时间的关系

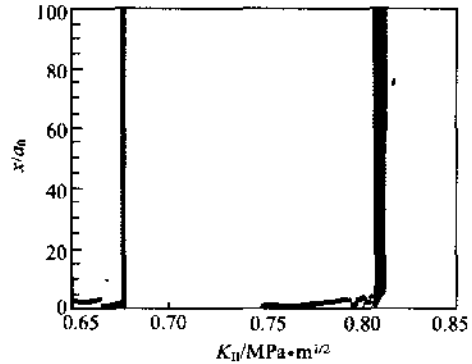


图 1.77 位错位置与应力强度因子的关系

图 1.77 示意了位错距裂尖的位置 X/a_0 与外力场应力强度因子 K_I 的关系。当 3 个不全位错全部形成后, 外载荷保持不变, 约为 $K_I = 0.668\text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$ 时, 位错滑移出了模拟区; 当 K_I 约为 $0.802\text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$ 时, 所有的 8 组位错 (24 个不全位错) 滑移出了模拟区, 此时外载荷增加得很少。

图 1.78 是裂尖原子构形图, 从构形图上可以观察到有 3 个不全位错, 沿着滑移面从左向右滑移。体心立方晶体钼的 3 个不全位错的扩展距离很小, 不足 4 个晶格常数。对于体心立方晶体的全位错是否能分解, 人们一直有争论。因为实验上一直没有观察到, 一部分人认为能分解, 另一部分人则认为不能, 各具理由。根据我们的模拟结果, 尽管体心立方晶体的全位错能分解为 3 个不全位错, 由于扩展的距离很小, 仅是面心立方晶体铜的 $1/5 \sim 1/10$, 实验上不容易观察到。此时应力强度因子 K_I 为 $0.801\text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$, 对应于第四组被发射的位错。

图 1.79 是应力沿裂纹延长线的分布图。由表达式 (1.146), 分子动力学计算得到的结果与修正后弹性解符合得很好。分子动力学计算的应力曲线没有弹性解曲线光滑。结合图 1.79 和 1.80, 位错位于 $60a_0 \sim 65a_0$ 之间。弹性解剪应力采用 K_I 应力场, 位错芯位置的应力用 Peierls 公式 (1.147) 修正, 消除应力奇异性。从应力分布图上看, 应力在位错芯附近波动得很利害, 说明晶体内的位错对应力分布影响很大, 这是由于位错芯附近的原子发生了很大的畸变。

$$\sigma_{kl} = \frac{1}{\Omega_0} \sum_{i,j,l \neq j} \left[\frac{1}{2} \phi' \left(\frac{r_{ij}}{r_{le}} \right) + F' \left(\frac{\rho_i}{\rho_e} \right) \frac{\rho'_{i,j}}{\rho_c} \right] r_{ij}^k r_{ij}^l \quad (1.146)$$

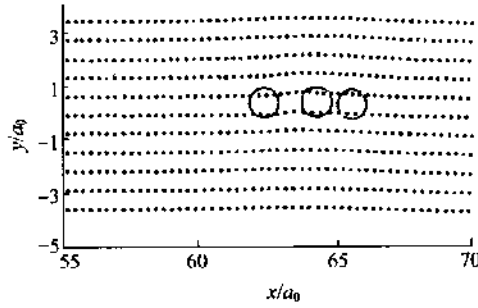


图 1.78 裂尖原子构形图, $K_I = 0.801 \text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$

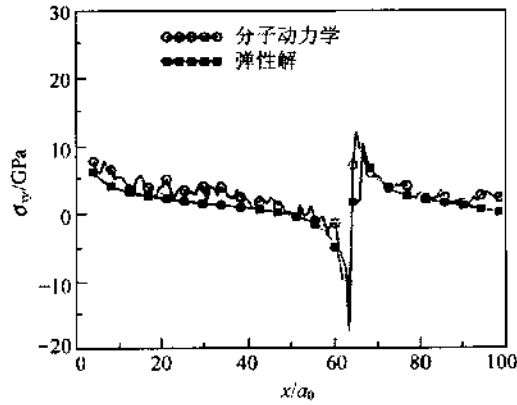


图 1.79 应力沿裂纹延长线的分布, $K_I = 0.802 \text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2} / \text{ps}$

$$\sigma_{xy} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{x}{x^2 + \xi^2} \quad (1.147)$$

式中 k, l 是坐标分量; r_{1c} 是原子的第一近邻; ρ_c 是平衡位置的电子密度; i, j 为原子编号; ξ 为位错芯半径; b 为 Burgers 矢量的大小; G 和 ν 为剪切模量和泊松比。

图 1.80 展示了随着发射的位错数目 N_d ($N_d = N_3$) 的增加, 外载荷对应的应力强度因子和局部应力强度因子的变化。按照 Rice^[33], 位错从裂尖发射后, 位错和裂纹产生相互作用, 导致裂尖附近区域应力场降低, 可用局部应力强度因子 K_I^{tip} 表征裂尖区域的应力大小。局部应力强度因子由 (1.148) 式给出。当 $K_I = 0.668 \text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$ 时, 第一组的 3 个不全位错从裂尖被发射, 从第二组位错直至第八组位错的发射, 外载荷的应力强度因子增加得很小, 但裂尖的局部应力强度因子一直在下降。准静态细观力学得到的结果表明, K_I^{tip} 保持为一常数, 裂尖继续发射位错。因此在动态的位错发射过程中, 不能简单地将局部应力强度因子 K_I^{tip} 作为一个控制参数加以应用。

$$K_I^{\text{tip}} = K_I - 2\sqrt{2\pi}Ab \sum_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{x_i}}, \quad n = N_d \quad (1.148)$$

图 1.81 是进入连续介质区的第 N_i 个位错平衡位置图。选取参数 $\sigma_l/A = 0.02$, $A = G/(\kappa+1)\pi$, G 是剪切模量。用 Newton-Raphson 方法求解平衡方程 (1.145), 得到位错的平

衡位置。此图示意了进入区 3 位错数目 N_d ($N_d = N_3$) 分别为 6, 7, 8 时的位错塞积位置, 位错平衡位置 x/a_0 随着位错数目 N_d 在变化。

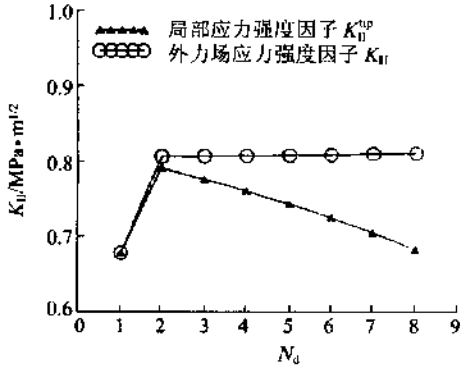


图 1.80 外力场应力强度因子与局部应力强度因子的比较

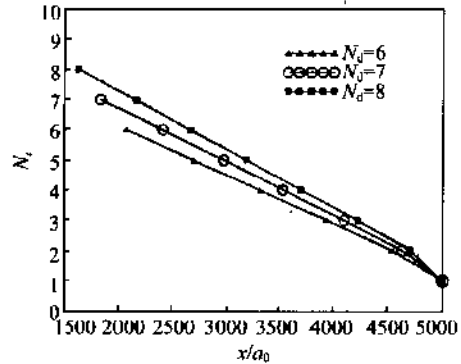


图 1.81 穿越边界的位错群 N_d 在连续介质区 3 的塞积位置, $\sigma_1/A=0.02$, $A=G/(\kappa+1)\pi$

图 1.82 主要是为了显示模拟块体右边界的原子构形图, 该图告诉我们共有 24 个不全位错从这里滑移, 进入了连续介质区 3, 塞积在几个微米处。从该图也可以想象到, 位错在晶体内部遇到了二相粒子、界面等其他杂质时, 会塞积在障碍物前面; 也可以滑移出晶体, 停留在晶体表面。因此从实验中, 在裂纹表面或金属表面可观察到台阶和坎之类的形貌。

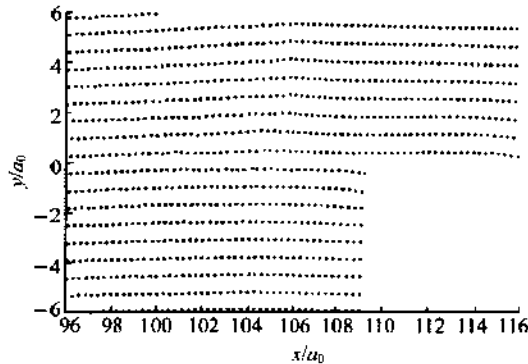


图 1.82 分子动力学模拟块体右边界原子构形图

5. 结论

(1) 本节提出了关联参照力学模型。在柔性位移边界条件下, 提供了位错穿越边界的方法。而且在不太多的原子数目模拟块体中, 允许裂尖发射位错数目大大地增加, 比较真实地反映了裂尖的位错发射现象。

(2) 位错从裂尖发射出来, 约在距裂尖 $5a_0$ 内, 位错处于加速运动状态, 并且很快达到稳定的速度。在 $5a_0 \sim 100a_0$ 范围内, 位错速度约为 $1800\text{m/s} \sim 1950\text{m/s}$, 小于剪切波速。

参 考 文 献

1. Irwin G R. Fracture. In: Ed. Flugge S. Encyclopedia of Physics, Vol. VI. New York: Springer-Verlag, 1958. 551~590
2. Rice J R. A path independent integral and the approximate analysis of strain concentration by notches and cracks. J. Appl. Mech. , 1968,35,379~386
3. Cherepanov G P. On crack propagation in solids. Int. J. Solids. Structs. , 1969,5,863~871
4. Hutchinson J W. Singular behavior at the end of a tensile crack tip in a hardening material. J. Mech. Phys. Solids,1968,16,13~31
5. Rice J R and Rosengren G F. Plane strain deformation near a crack tip in power law hardening material. J. Mech. Phys. Solids,1968,16,1~12
6. Rice J R and Thomson R. Ductile versus brittle behaviour of crystals Phil. Mag. , 1974,29(1): 73
7. Thomson R. Brittle fracture in a ductile material with application to hydrogen embrittlement. J. Mater. Sci. , 1978,13,128
8. Weertman J. Fracture mechanics: a unified view for Griffith-Irwin-Orowan cracks. Acta Metall. 1978, 26,1731
9. Ohr S M and Narayan J. Electron microscope observation of shear cracks in stainless steel single crystals. Phil. Mag. A, 1980,41,81
10. Kobayashi S and Ohr S M. In situ observation of the formation of plastic zone ahead of crack tip in copper. Scripta metall. 1981,15,343
11. Ohr S M. An electron microscopic study of crack tip deformation and its on the dislocation theory of fracture. Mater. Sci. Eng. , 1985,72(1):1
12. Burns S J. Crack tip dislocation nucleation observation in bulk specimens. Scripta Metall. , 1986, 20 (11):1489
13. Ohr S M. Introduction to view point set on dislocation emission from cracks. Scripta Metall. , 1986,20 (11):1465
14. Chiao Y H and Clarke D R. Direct observation of dislocation emission from crack tips in silicon. Acta Metall. , 1989,37(1):203
15. Argon A S. Brittle to ductile transition in cleavage fracture. Acta Metall. ,1987,35(1):185
16. Lii M J, Chen X F, Katz Y and Gerberich W W. Dislocation modeling and acoustic emission observation of alternating ductile/brittle events in Fe-3wt% Si crystals. Acta metall. mater. ,1990,38(12):2435
17. Huang H and Gerberich W W. Crack tip dislocation emission arrangements for equilibrium-- I. Comparisons to analytical and computer simulation models. Acta metall. mater. ,1992,40(11):2873
18. Zielinski W, Lii M J and Gerberich W. Crack tip dislocation emission arrangements for equilibrium -- I. In situ TEM observations of Fe-2wt% Si. Acta metall. mater. ,1992,40(11):2861
19. Marsh P G, Zielinski W, Huang H and Gerberich W W. Crack tip dislocation emission arrangements for equilibrium-- II. Application to large applied stress intensities. Acta metall. mater. ,1992,40(11): 2883
20. Narita N, Higashida K and Kitano S. Dislocation distribution around a crack tip and the fracture toughness in NaCl crystals. Scripta Metall. ,1987,21:1273
21. Ha K F and Xu Y B. Study on the dislocation free zone ahead of the crack tip in bulk metallic single crystals. Acta Metall. ,1990,9:1643
22. Xu Y B, Ha K F and Wang Z G. Dislocation distribution near crack tip of I and II Modes in bulk Al single crystal. J. Appl. Phys. ,1991,69:203
23. 陈奇志,褚武扬. 薄膜中纳米裂纹在无位错区中的形核、钝化或扩展. 自然科学进展,1995,5(6):743

24. Chen Q Z, Chu W Y, Xiao C M. The in-situ observations of initiation and bluntness in ductile fracture. *Scripta Metall Mater.*, 1994, 30(10):1355
25. 乔利杰, 毛兴原, 陈奇志. Nanometer scale crack initiation and propagation behavior of Fe₃Al-based intermetallic alloy. *Metall Mater Trans A.*, 1995, 26:1461
26. 陈奇志, 褚武扬, 肖纪美. The in-situ observation of microcrack nucleation and bluntness in ductile fracture. *Scripta Metall. Mater.*, 1994, 30:1355
27. 张跃, 王燕斌, 褚武扬, 肖纪美. In-situ TEM observation of microcrack nucleation in titanium Aluminide. *Scripta Metall. Mater.*, 1994, 31:279
28. 张跃, 褚武扬, 肖纪美. The observation of cleavage fracture surface by STM. *J. Vac. Sci. Tech.*, B, 1994, 12:1722
29. Müller T, Vehoff H and Neumann P. STM on cracks in brittle materials. *Ultramicroscopy*, 1992, 42~44, 1412
30. Goken M, Vehoff H, Neumann P. Investigations of loaded crack tips in NiAl by atomic force microscopy. *Scripta Metall. Mater.*, 1995, 33:1187
31. 李晓冬, 王燕斌, 褚武扬等. 云母表面加载裂纹尖端的 AFM 研究. *金属学报*, 1997, 33(6):588
32. Schoeck G. Dislocation emission from crack tip. *Phil. Magazine A*, 1991, 63(1):111~120
33. Rice J R. Dislocation nucleation from a crack tip: an analysis based on the peierls concept. *J. Mech. Phys. Solids*, 1992, 40(2):239~271
34. Rice J R and Beltz G E. The activation energy for dislocation nucleation at a crack. *J. Mech. Phys. Solids*, 1994, 42:333
35. Beltz G E and Rice J R. Dislocation nucleation at metal-ceramic interfaces. *Acta Metall.*, 1992, 40:321
36. Wang T C (王自强). Dislocation nucleation and emission from crack tip. *Int. J. Fracture*, 1995, 69(3):295
37. Wang T C. Dislocation behaviours ahead of crack tip. *Int. J. Solids and Stru.*, 1998
38. Wang T C, Wang K R and Zhang Y W. A unified model for dislocation nucleation, emission and dislocation free zone. *Int. J. Fract.*, 1996, 78:227
39. Sinclair J E and Finnis M W. in *Atomics of Fracture*, eds. R. M. Latanision and J. R. Pickens, Plenum Press, New York, 1983, 1047
40. Lin I H and Thomson R. Cleavage dislocation emission and shielding for cracks under general loading. *Acta Metall.* 1986, 34:187
41. Wang T C. Fracture criteria for combined cleavage and dislocation emission. *Phil. Magazine A*, 1996, 74(4):983
42. Wang T C. Dislocation theory of the fracture criterion for anisotropic solids. *Phil. Magazine A.*, 1998, 77(1):31~53
43. Zhou S J, Carlsson A E and Thomson R M. Crack blunting effects on dislocation emission from cracks. *Phys. Rev. Lett.*, 1994, 72:852
44. Xu G, Argon A S and Ortiz M. Nucleation of dislocation from crack tip under mixed modes of loading: implications of brittle against ductile behaviour of crystals. *Phil. Mag. A*, 1995, 72:415
45. Wang T C. Dislocation emission and cleavage process at crack tip. *Key Engineering Materials*, 1998, 145-149:113~122
46. Zhu T, Yang W and Guo T. Quasi cleavage process driven by dislocation pileup. *Acta mater.*, 1996, 44(8):3049
47. Choi H C, Schwartzman A F, Kim K S. *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, 1992, 234, 419
48. Cosandey F, Chan S W and Stadelmann P. Atomic structure and energy of $\sum 5$ tilt boundaries in Gold. *Metall. Trans.*, A, 1990, 21:2299
49. Murray S, Daw M S and Baskes M I. Semiempirical, quantum mechanical calculation of hydrogen embrittlement in metals. *Phys. Revi Letter*, 1983, 50:1285

50. Daw M S and Baskes M I. Embedded-atom method; derivation and application to impurities, surface, and other defects in metals. *Phys. Rev. B*, 1984, 29; 6443
51. Bullough R. Atomic core configuration of an edge dislocation in copper. *Bull. Am. Phys. Soc.*, 1980, 14: 129
52. Cotterill R M and Doyama M. Energy and atomic configuration of complete and dissociated dislocations. *Phys. Rev.*, 1966, 145; 465
53. de Celis B, Argon A S and Yip S. Molecular dynamics simulation of crack tip process in alpha-iron and copper. *J. Appl. Phys.*, 1983, 54; 4864
54. Wang G J, Sutton A P, Vitek V. A computer simulation study of [001] and [111] tilt boundaries; the multiplicity of structure. *Acta metall.* 1984, 32(7); 1093
55. Sutton A P and Vitek V. On the coincidence site lattice and dislocation network model of high angle grain boundary structure. *Scripta metall.*, 1980, 129
56. Zhou S J, Carlsson A E. Dislocation nucleation and crack stability; Lattice Green's-function treatment of cracks in a model hexagonal lattice. *Phys. Rev. B*, 1993, 47; 7710
57. Baskes M I, Daw M S and Foiles S M. The embedded atom method; theory and application. *Mat Res Soc Symp Proc.*, 1989, 141; 31
58. Kitagawa H, Nakatani A. Microstructural aspects to crack extension in a crystalline material in Mechanical behavior of materials-VI, Proc. ICM-VI, Kyoto, 1991, Eds. M. Jono and T. Inoue, Pergamon Press, 111
59. Kitagawa H and Nakatani A. Study on computation modelling for materials with crystalline structure. *Proceeding of JSME, A*, 1993, 59-557, 256
60. Cheung K S, Argon A S and Yip S J. Activation analysis of dislocation nucleation from crack tip in α -Fe. *J. Appl. Phys.*, 1991, 69; 2088
61. Khantha M, Pope D P and Vitek V. Dislocation screening and the brittle-to-ductile transition. *Phys. Rev. Letters*, 1994, 73(5); 684
62. Hoagland R G, Daw M S, Foiles S M and Baskes M I. An atom model of crack tip deformation in aluminum using an embedded atom potential. *J. Mater Res.*, 1990, 5; 313
63. Mullins M, Dokainish M A. Simulation of the (001) plane crack in α -iron employing a new boundary scheme. *Phil. Mag. A*, 1982, 771
64. Tan H L and Yang W. Atomistic/continuum simulation of interface fracture, Part I: atomistic simulation. *Acta Mechanica Sinica*, 1994, 10(2); 151
65. Dienes G J and Paskin A. Molecular dynamic simulations of crack propagation. *J. Phys. Chem. Solids*, 1987, 48; 1015
66. Finnis M W and Sinclair J E. A simple N-body potential for transition metals. *Phil. Mag. A*, 1984, 50, 45
67. Ackland G J, Tichy G, Vitek V and Finnis M W. Simple N-body potentials for noble metals and nickel. *Phil. Mag. A*, 1987, 56; 735
68. Alber I, Bassani J L, et al. Grain boundaries as heterogeneous systems; atomic and continuum elastic properties. *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*, 1992, 339; 555
69. Heermann D W. Computer simulation methods in theoretic physics, 2nd Edition. Springer-Verlag, Berlin, 1990
70. Zhang Y W, Wang T C, Tang Q H. Molecular dynamics simulation of crack tip processes in copper. *Acta mechanica sinica*, 1995, 11(1); 76
71. Zhang Y W, Wang T C, Tang Q H. Simulation of nucleation and emission of dislocation by molecular dynamics method. *J. Appl. Phys.* 1995, 77(6); 2393
72. Rice J R, Beltz G E, Sun Y. in Topics in fracture and fatigue. Eds. A. S. Argon et al., Springer-Verlag, 1992, 1

73. Zhang Y W, Wang T C and Tang Q H. On the unstable stacking criterion for ideal and cracked crystals. *Phil. Mag. A.* ,1995,72(4):881
74. Zhang Y W, Wang T C and Tang Q H. The effect of thermal activation on dislocation process at atomic crack tip. *J. Phys. D: Applied physics*,1995,28,748
75. Anderson P M and Rice J R. Dislocation emission from cracks in crystals or along crystal interfaces. *Scripta Metall.* ,1986,20(11):1467
76. Kin S, Cheung K S and Yip S. Brittle-ductile transition in intrinsic fracture behaviour of crystals. *Phys. Revi. Letter*,1990,65,2804
77. Shiue S T and Lee S B. Effect of grain boundary ledges on mode III fracture. *Phil. Mag A.* ,1993,67(6):1433
78. Lee T C, Robertson I M and Birnbaum H K. An in situ TEM deformation study of the slip transfer mechanisms in metals. *Metall, trans.* 1990,21A,2437
79. Shen Z, Wagoner R H and Clark A T. Dislocation pile up and grain boundary interactions in 304 stainless steel. *Script Metall.* ,1986,20,921
80. Zhang Y W, Wang T C and Tang Q H. Molecular dynamics simulation of a dislocation array from a crack tip with grain boundaries. *Model simul. mater. sci. eng.* ,1996,4,231
81. Zhang Y W, Wang T C and Tang Q H. Brittle and ductile fracture at the atomistic crack tip in copper crystals. *Scripta metall. mater.* ,1995,33(2):267
82. 张永伟,王自强. 分子动力学方法在研究材料力学行为中的应用进展. *力学进展*,1996,26(1):14
83. Li J C M. Computer simulation of dislocation emitted from a crack. *Scripta Metall.* ,1986,20(11):1477
84. 杨顺华. 晶体位错理论基础. 北京:科学出版社,1998
85. Mullins M. Atomic simulation of cracks under mixed loading. *Int. J. Fract.* ,1984,24,189
86. Kohlhoff G, Gumbsch P and Fischmeister H F. Crack propagation in b. c. c. crystals studied a combined finite element and atomistic model. *Phil. Mag. A*,1991,64,851
87. 杨卫. 宏微观断裂力学. 北京:国防工业出版社,1995
88. 汤奇恒,王自强. 关联参照模型和位错发射过程的分子动力学模拟. *力学学报*,1998,30(4):404
89. 汤奇恒,王自强,张永伟. A new n-body potential and its application. *Acta Mech. Sinica*,1996,12(4):358

第2章 脆性材料的微裂纹扩展区损伤模型

在诸如岩石、混凝土、某些陶瓷等脆性材料中,往往存在着大量弥散的微裂纹,微裂纹的形成、扩展和汇合对材料的力学性质产生显著影响,可以导致材料的逐渐劣化直至最后的断裂。近年来,脆性材料的宏、细观损伤研究受到了普遍重视,关于这方面的研究成果和现状,文献[1]~[4]就不同的侧面进行了总结和评述。尽管研究者们已经提出了各种不同的损伤描述方法,进而建立了多种微裂纹损伤的本构模型,但是直到最近为止,仍没有一套比较完整的损伤模型,可以较好地解决在拉伸、压缩以及复杂加载情况下脆性材料从线弹性变形,经过非线性强化阶段和应变软化阶段,直到宏观裂纹形成这一复杂过程中的损伤演化和本构行为。而且总的来讲,现有的损伤模型至少还存在以下两方面的不足。其一,这些模型描述损伤的方法是定义一个标量、矢量或张量作为损伤状态变量,但实际上一点的损伤状态是很复杂的,究竟用多少个参数能够较好地描述是一个尚未解决的问题。而且在复杂的损伤过程中,各个损伤参数的演化规律也是难以确定的,当采用张量形式的损伤变量时这一点变得尤为突出。其二,这些模型都难以处理复杂加载路径的问题。

为此,冯西桥和余寿文^{[5]~[9]}提出用微裂纹扩展区(domain of microcrack growth, DMG)的概念来描述脆性材料的损伤状态。所谓微裂纹扩展区,是指经过加载后,发生扩展的所有微裂纹在取向空间中所占的范围,由一个区域或多个区域的并集组成。换言之,经过一定的加载路径后,法向矢量位于微裂纹扩展区的所有微裂纹都已经发生了扩展。利用这个概念,可以更准确地描述微裂纹的损伤状态,并且能够解决任意复杂加载路径下的损伤演化和本构响应问题,从而建立了一套比较完整的脆性材料的细观损伤模型。本章2.1节以三轴拉伸的情况为例,说明微裂纹扩展区模型的基本思想,2.2节对三轴压缩的情况进行简单的分析,关于准脆性材料的残余应变分析、微裂纹扩展区的测量等问题可参考文献[5]~[15]。

2.1 脆性材料拉伸的微裂纹扩展区模型

2.1.1 单个张开口状微裂纹引起的柔度张量

选取一个代表性体积单元,其尺寸满足以下两方面的要求:一方面该体元从细观角度上看足够大,包含足够多的材料细观结构和微裂纹,从而可以代表材料的统计平均性质;另一方面该体元从宏观角度上看又足够小,可以看作材料的一个质点,因此体元的宏观应力和应变可视为均匀的。假设只有小应变和小转动发生,这对于脆性材料一般是恰当的,同时设基质为线弹性各向同性材料。体元的平均应变张量 $\bar{\epsilon}_i$ 包含两部分,即

$$\bar{\epsilon}_{ij} = \bar{\epsilon}_{ij}^e + \bar{\epsilon}_{ij}^i \quad (2.1)$$

式中 $\bar{\epsilon}_{ij}^e$ 为基质变形引起的弹性应变张量; $\bar{\epsilon}_{ij}^i$ 是所有微裂纹引起的应变张量。 $\bar{\epsilon}_{ij}^e$ 由基质的平均应变得到

$$\bar{\epsilon}_{ij}^e = \frac{1}{V} \int_{V_m} \epsilon_{ij}^e dV = \frac{1}{V} \int_{V_m} S_{ijkl}^0 \sigma_{kl}^e dV = S_{ijkl}^0 \bar{\sigma}_{kl} \quad (2.2)$$

式中 V 为代表性体积单元的体积; V_m 为基质材料所占的体积, 且近似认为 $V_m = V$; S_{ijkl}^0 为基质的柔度张量; ϵ_{ij}^e 和 σ_{ij}^e 分别为细观的应变张量和应力张量; $\bar{\sigma}_{ij}$ 为体元的平均应力张量。这里忽略微裂纹的相互作用而采用 Taylor 模型, 因此假定 $\bar{\sigma}_{ij}$ 等于外加应力张量 σ_{ij} , 即

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{V} \int_{V_m} \sigma_{ij}^e dV = \sigma_{ij} \quad (2.3)$$

于是式(2.2)变成

$$\bar{\epsilon}_{ij}^e = S_{ijkl}^0 \sigma_{kl} \quad (2.4)$$

设基质材料的弹性模量为 E , 泊松比为 ν , 则基质的柔度张量表示为

$$S_{ijkl}^0 = \frac{1}{E} \left[\frac{1+\nu}{2} (\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) - \nu\delta_{ij}\delta_{kl} \right] \quad (2.5)$$

由所有微裂纹引起的应变 ϵ_{ij}^i 由下式得到

$$\bar{\epsilon}_{ij}^i = \sum_{k=1}^{N_c} \bar{\epsilon}_{ij}^{i(\alpha)} \quad (2.6)$$

式中 N_c 为代表性体积单元中的微裂纹总数; $\bar{\epsilon}_{ij}^{i(\alpha)}$ 为第 α 个微裂纹引起的应变,

$$\epsilon_{ij}^{i(\alpha)} = \frac{1}{V} \int_{S_\alpha} \frac{1}{2} (b_i n_j + b_j n_i)^{(\alpha)} dS \quad (2.7)$$

式中 $b_i = [u_i]$ 为微裂纹面上的位移不连续矢量; n_i 为微裂纹的法向单位矢量; S_α 是第 α 个微裂纹的表面积。

现在考察在远处承受均匀载荷的各向同性体中的一个半径为 a 的币状微裂纹。建立整体坐标系 $(ox_1x_2x_3)$ 和对应的局部坐标系 $(ox'_1x'_2x'_3)$, 如图 2.1 所示, 其中 x'_2 轴平行于微裂纹法向矢量 \mathbf{n} , x'_3 轴与 x_1, x_3 轴在同一平面内。于是微裂纹的取向可以用一对角参数 (θ, φ) 表示, θ 和 φ 的取值范围分别为 $0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}$ 和 $0 \leq \varphi < 2\pi$ 。两个坐标系的基矢量转换关系为

$$\mathbf{e}'_i = g'_{ij} \mathbf{e}_j, \quad \mathbf{e}_i = g_{ij} \mathbf{e}'_j \quad (2.8)$$

式中坐标转换矩阵 (g'_{ij}) 及其逆矩阵 $(g_{ij}) = (g'_{ij})^{-1} = (g'_{ij})^T$ 为

$$(g'_{ij}) = (g_{ij})^T = \begin{bmatrix} \cos\theta\cos\varphi & \sin\theta & -\cos\theta\sin\varphi \\ -\sin\theta\cos\varphi & \cos\theta & \sin\theta\sin\varphi \\ \sin\varphi & 0 & \cos\varphi \end{bmatrix} \quad (2.9)$$

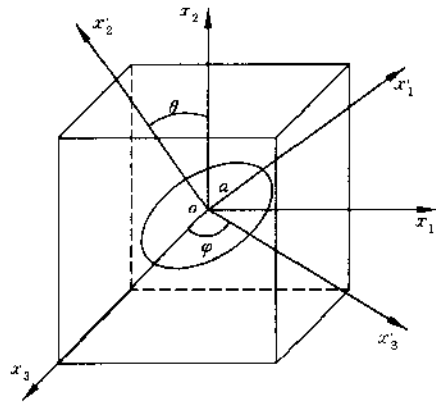


图 2.1 整体坐标系和局部坐标系

其中 $()^T$ 表示矩阵的转置。

对于张开的币状微裂纹,位移不连续矢量为

$$b_i = (a^2 - r^2)^{1/2} B'_{1j} \sigma'_{2j} g'_i \quad (2.10)$$

式中 r 为裂纹面上一点到裂纹中心的距离; B'_{ij} 为微裂纹的张开位移张量,它依赖于材料的柔度张量。由于不考虑微裂纹的相互作用, B'_{ij} 仅依赖于基质的各向同性柔度张量,其非零的元素有

$$B'_{11} = B'_{33} = \frac{16(1-\nu^2)}{(2-\nu)\pi E}, \quad B'_{22} = \frac{8(1-\nu^2)}{\pi E} \quad (2.11)$$

局部坐标系中的应力 σ'_{ij} 与整体坐标系中的应力 σ_{ij} 的转换关系为

$$\sigma'_{ij} = g'_{ik} g'_{jl} \sigma_{kl} \quad (2.12)$$

如果垂直于微裂纹表面的应力分量 σ'_{22} 为压应力,则暂且假设微裂纹面之间由于摩擦力的作用而不发生相对滑移,关于闭合裂纹及其对柔度张量的影响见本书 2.2 节或有关文献。于是微裂纹的位移不连续矢量为

$$b_i = (a^2 - r^2)^{1/2} B'_{jn} g'_{ik} g'_{2k} g'_{il} \sigma_{kl} \langle \sigma'_{22} \rangle \quad (2.13)$$

式中角括号定义如下

$$\langle x \rangle = \begin{cases} 1 & \text{当 } x \geq 0 \\ 0 & \text{当 } x < 0 \end{cases}$$

将式(2.13)代入式(2.7),得

$$\bar{\epsilon}'_{ij}{}^{(\alpha)} = \bar{S}'_{ijkl}{}^{(\alpha)}(a, \theta, \varphi, \sigma_{ij}) \sigma_{kl} \quad (2.14)$$

式中 $\bar{S}'_{ijkl}{}^{(\alpha)}$ 为第 α 个半径为 a 、取向为 (θ, φ) 的微裂纹引起的非弹性柔度张量,以下简记为 \bar{S}'_{ijkl} ,其表达式为

$$\bar{S}'_{ijkl}(a, \theta, \varphi, \sigma_{ij}) = \frac{\pi a^3}{6V} B'_{mn} (g'_{mi} n_j + g'_{mj} n_i) (g'_{nk} n_l + g'_{nl} n_k) \langle \sigma_{kl} g'_{2k} g'_{2l} \rangle \quad (2.15)$$

2.1.2 三轴拉伸情况下的微裂纹扩展区

在实际的脆性材料中,存在大量的晶间裂纹和穿晶裂纹,由于材料细观结构的复杂性、微裂纹相互作用的影响以及损伤材料的各向异性性质,要严格得到微裂纹扩展准则的一般表达式是不可能的。为了方便起见,假设所有微裂纹都处于各向同性的弹性基质中,忽略微裂纹的相互作用对微裂纹扩展准则的影响,并且假设当沿微裂纹边缘的平均能量释放率达到某一临界值时,微裂纹将发生自相似扩展,即微裂纹在原来的平面内扩展,且保持圆形。此时,可以选取如下的微裂纹扩展准则

$$\left(\frac{K'_I}{K'_{Ic}} \right)^2 + \left(\frac{K'_{II}}{K'_{IIc}} \right)^2 = 1 \quad (2.16)$$

式中 K'_I 和 K'_{II} , K'_{Ic} 和 K'_{IIc} 分别为 I 型和 II 型应力强度因子及其临界值, K'_{Ic} 和 K'_{IIc} 的定义为

$$K'_I = 2 \sqrt{\frac{a}{\pi}} \sigma'_{22}, \quad K'_{II} = \left(\frac{4}{2-\nu} \right) \sqrt{\frac{a}{\pi}} [(\sigma'_{21})^2 + (\sigma'_{23})^2]^{1/2} \quad (2.17)$$

设在初始未加载状态,所有微裂纹都具有相同的统计平均半径 a_0 。一旦某一取向为 (θ, φ) 的微裂纹满足了扩展准则(2.16),它将迅速扩展,直到被具有更高强度的能障(如晶界等)所束缚而停止扩展。设所有已发生扩展的微裂纹的统计平均半径为 a_u ,它与材料的细观结构(如晶粒大小)有关。在外加应力 σ_i 作用下,微裂纹的扩展仅与局部坐标系中的以下3个应力分量有关

$$\sigma'_{21} = g'_{21}g'_{1j}\sigma_{ij} \quad \sigma'_{22} = g'_{2i}g'_{2j}\sigma_{ij} \quad \sigma'_{23} = g'_{2i}g'_{3j}\sigma_{ij} \quad (2.18)$$

将式(2.18)和(2.17)代入式(2.16),得到如下的方程

$$\left[\left(\frac{K_{Ic}}{K_{Ic}} \right)^2 g'_{2k}g'_{2s} + \left(\frac{2}{2-\nu} \right)^2 (g'_{1k}g'_{1s} + g'_{3k}g'_{3s}) \right] g'_{2i}g'_{2j}\sigma_{ij} = \frac{\pi}{4a_0} K_{Ic}^2 \quad (2.19)$$

这就是在单调比例加载情况下三维应力状态 σ_{ij} 所对应的微裂纹扩展区的边界应满足的条件。在取向空间 (θ, φ) 中,这一边界所包围的区域是所有发生扩展的微裂纹的取向范围,定义为微裂纹扩展区,它由取向空间中的一个区域或多个区域之并集构成。换言之,如果一个微裂纹的取向 (θ, φ) 位于微裂纹扩展区内,则该微裂纹已经扩展,具有统计平均半径 a_u 。

对于一般的三轴应力状态,所对应的微裂纹扩展区的求解方法可见文献[15]。这里为叙述简单起见,假设3个主应力 σ_1, σ_2 和 σ_3 的方向与 x_1, x_2 和 x_3 的方向相同,此时,方程(2.19)变成

$$A_1 \cos^4 \varphi + A_2 \cos^2 \varphi + A_3 = 0 \quad (2.20)$$

式中

$$\begin{aligned} A_1 &= \sin^4 \theta (\sigma_1 - \sigma_3)^2 \left[\left(\frac{K_{Ic}}{K_{Ic}} \right)^2 - \left(\frac{2}{2-\nu} \right)^2 \right] \\ A_2 &= \sin^2 \theta (\sigma_1 - \sigma_3) \left[2(\cos^2 \theta \sigma_2 + \sin^2 \theta \sigma_3) \left(\frac{K_{Ic}}{K_{Ic}} \right)^2 \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{2}{2-\nu} \right)^2 (\sigma_1 - \cos^2 \theta \sigma_2 + \cos^2 \theta \sigma_3) \right] \\ A_3 &= (\cos^2 \theta \sigma_2 + \sin^2 \theta \sigma_3)^2 \left(\frac{K_{Ic}}{K_{Ic}} \right)^2 + \sin^2 \theta \cos^2 \theta (\sigma_2 + \sigma_3)^2 \left(\frac{2}{2-\nu} \right)^2 - \frac{\pi}{4a_0} K_{Ic}^2 \end{aligned} \quad (2.21)$$

由方程(2.20),容易求得在三维应力 σ_{ij} 的作用下的微裂纹扩展区 $\Omega(\theta, \varphi, \sigma_{ij})$,并表示为

$$\Omega(\theta, \varphi, \sigma_{ij}) = \left\{ 0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}, \varphi_3(\theta, \sigma_{ij}) \leq \varphi \leq \varphi_2(\theta, \sigma_{ij}) \right\} \quad (2.22)$$

式中 $\varphi_3(\theta, \sigma_{ij})$ 和 $\varphi_2(\theta, \sigma_{ij})$ 是 θ 和 σ_{ij} 的两个函数。随着应力的不断增大,越来越多的微裂纹发生扩展,半径从 a_0 变为 a_u 并为能障所束缚而停止扩展。当应力增大到一定程度时,被束缚的微裂纹可以再次发生扩展(见后文)。

2.1.3 复杂加载下微裂纹扩展区的演化

复杂加载路径下脆性材料的损伤演化问题是损伤力学中一直难以解决的问题。举一简单例子,首先将试件单向拉伸进入非线性强化阶段,然后将拉伸方向(或试件)偏转一个角度,但应力的幅值仍保持不变。在这一偏转过程中,会有新的微裂纹发生扩展,同时还有一些

微裂纹发生卸载。对这样的一个简单问题,要较好地描述微裂纹损伤的演化过程,对以往的很多脆性损伤模型来讲都是很困难的。无论是标量、矢量还是张量形式的损伤描述方法,都很难处理这样的复杂加载路径问题。如果采用微裂纹扩展区的概念来描述损伤,则能够用集合的运算方法比较方便地描述复杂加载过程中损伤的演化。

在 Taylor 模型的假设下,忽略微裂纹之间的相互作用,微裂纹的扩展准则不受加载历史的影响。因此,可以将复杂加载路径中的各个应力状态依次代入前面的公式(2.22),得到各个应力状态下的微裂纹扩展区,并取其并集,即为复杂加载路径下的微裂纹扩展区。

为了说明微裂纹扩展区的演化,设在 t 时刻的微裂纹扩展区可以表示为

$$\Omega(t) = \left\{ 0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}, \varphi^-(\theta, t) \leq \varphi \leq \varphi^+(\theta, t) \right\} \quad (2.23)$$

从时刻 t 到 $t + \Delta t$, 应力从 $\sigma_{ij}(t)$ 变成 $\sigma_{ij}(t + \Delta t) = \sigma_{ij}(t) + \Delta\sigma_{ij}$, 按照上面的方法求得应力 $\sigma_{ij}(t + \Delta t)$ 对应的微裂纹扩展区, 并表示为

$$\Omega(\sigma_{ij} + \Delta\sigma_{ij}) = \left\{ 0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}, \varphi_3(\theta, \sigma_{ij} + \Delta\sigma_{ij}) \leq \varphi \leq \varphi_4(\theta, \sigma_{ij} + \Delta\sigma_{ij}) \right\} \quad (2.24)$$

于是在 $t + \Delta t$ 时刻的微裂纹扩展区为以上两个集合之并, 即

$$\Omega(t + \Delta t) = \Omega(t) \cup \Omega(\sigma_{ij} + \Delta\sigma_{ij}) \quad (2.25)$$

2.1.4 脆性损伤材料的本构关系

材料中微裂纹的取向和尺寸可以看作是随机变量,并用概率密度分布函数 $p(a, \theta, \varphi)$ 表示。对不同的材料和微裂纹分布, 概率密度函数 $p(a, \theta, \varphi)$ 可以有不同的形式, 但均需满足如下的归一化条件

$$\int_{a_{\min}}^{a_{\max}} \int_0^{\pi/2} \int_0^{2\pi} p(a, \theta, \varphi) \sin\theta d\theta d\varphi da = 1 \quad (2.26)$$

式中 a_{\min} 和 a_{\max} 为材料中微裂纹的最小半径和最大半径。在本章中, 微裂纹的尺寸只取两个值, 即 $a_{\min} = a_0, a_{\max} = a_u$ 。

在特定情况下, 如果微裂纹在取向空间中均匀分布, 则概率密度函数 $p(a, \theta, \varphi)$ 表示为

$$p(\theta, \varphi) = \frac{1}{2\pi} \quad (2.27)$$

无论加载路径如何, 只要材料损伤的微裂纹扩展区已经确定, 则材料的损伤本构关系可由下式得到

$$\epsilon_{ij} = S_{ijkl} \sigma_{kl} \quad (2.28)$$

式中总体有效柔度张量 S_{ijkl} 包括两部分

$$S_{ijkl} = S_{ijkl}^0 + S_{ijkl}^i \quad (2.29)$$

其中所有微裂纹引起的非弹性柔度张量为

$$\begin{aligned} S_{ijkl}^i = & \int_0^{\pi/2} \int_0^{2\pi} N_c p(\theta, \varphi) \bar{S}_{ijkl}^i(a_0, \theta, \varphi, \sigma_{ij}) \sin\theta d\varphi d\theta \\ & + \int_{\hat{a}(t)}^{\hat{a}(t+\Delta t)} \int_0^{\pi/2} \int_0^{2\pi} N_c p(\theta, \varphi) [\bar{S}_{ijkl}^i(a_u, \theta, \varphi, \sigma_{ij}) - \bar{S}_{ijkl}^i(a_0, \theta, \varphi, \sigma_{ij})] \sin\theta d\varphi d\theta \end{aligned} \quad (2.30)$$

式中代表性体积单元中的微裂纹总数 $N_c = n_c V$; n_c 为单位体积中的微裂纹数目。

以下不妨设代表性体积单元的体积 $V = 1$, 则有效柔度张量表示为

$$S_{ijkl} = S_{ijkl}^0 + \int_0^{\pi/2} \int_0^{2\pi} n_c p(\theta, \varphi) \dot{S}_{ijkl}^1(a_0, \theta, \varphi, \sigma_{ij}) \sin\theta d\varphi d\theta \\ + \iint_{\bar{D}(c)} n_c p(\theta, \varphi) [S_{ijkl}^1(a_u, \theta, \varphi, \sigma_{ij}) - \bar{S}_{ijkl}^1(a_0, \theta, \varphi, \sigma_{ij})] \sin\theta d\varphi d\theta \quad (2.31)$$

其中单个微裂纹引起的非弹性柔度张量为

$$\bar{S}_{ijkl}^1(a, \theta, \varphi, \sigma_{pq}) = \frac{1}{3} \pi a^3 B'_{mn} g'_{2k} g'_{nl} (g'_{mi} n_j + g'_{mj} n_i) \langle \sigma_{ii} g'_{2s} g'_{2t} \rangle \quad (2.32)$$

2.1.5 准脆性材料本构关系的四个阶段及细观损伤机制

一些脆性材料如岩石、混凝土等的应力应变关系往往包括线弹性、非线性强化、应变软化等阶段, 即在外加载荷达到承载极限之前材料会发生一定程度的应变强化, 这一点与某些高强度金属材料的本构行为类似, 但当外加载荷达到承载极限之后, 材料将发生不同程度的应力突然跌落和应变软化现象, 材料的承载能力随变形的增加而减小, 这样的脆性材料常被称为准脆性材料。如图 2.2 所示为准脆性材料在应变加载条件下得到的一条典型的拉伸应力应变曲线^[16]。将该曲线分成四个阶段, 即线弹性阶段(OA)、非线性强化阶段(AB)、应力跌落阶段(BC)和应变软化阶段(CD)。从细观损伤力学的角度看, 准脆性材料变形的上述几个阶段分别对应于微裂纹的弹性变形、稳定扩展、失稳扩展和汇合等细观机制。以下以单向拉伸为例分别讨论这四个阶段的细观损伤机制。

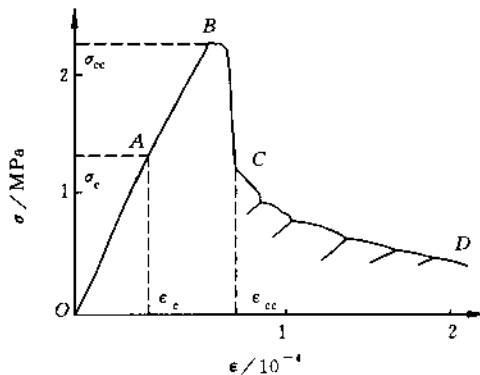


图 2.2 准脆性材料单拉的应力应变曲线^[16]

(1) 线弹性阶段(OA) 当拉伸应力 σ 小于临界拉伸应力 σ_c 时, 材料内部没有损伤演化, 所有微裂纹都只发生弹性变形, 不发生扩展。

(2) 非线性强化阶段(AB) 当拉伸应力 σ 超过 σ_c 但低于材料的最大承载应力 σ_{cc} 时, 材料内发生连续的分佈损伤, 随着应力的增大, 越来越多的微裂纹发生稳定扩展, 半径由 a_0 增大为 a_u , 并为具有比界面更高强度的能障(如晶界等)所束缚而停止扩展。微裂纹扩展区不断增大, 微裂纹对材料有效柔度张量的贡献也随之增大, 于是应力应变关系表现出非线性

和各向异性性质。

(3) 应力跌落阶段(BC) 当应力达到最大承载应力 σ_{cc} 后,某些取向上的微裂纹将穿越晶界的束缚发生二次扩展。类似于式(2.16),微裂纹二次扩展的准则表示为

$$\left(\frac{K'_{I_1}}{K'_{I_{cc}}}\right)^2 + \left(\frac{K'_{II_1}}{K'_{II_{cc}}}\right)^2 = 1 \quad (2.33)$$

式中 $K_{I_{cc}}$ 和 $K_{II_{cc}}$ 分别为基质材料的 I 型和 II 型临界应力强度因子。

一旦准则(2.33)在某取向上得到了满足,该取向上的微裂纹将穿越晶界在基质材料中继续扩展,并发生从连续损伤到损伤局部化的过渡,材料的承载能力开始下降。为方便起见,记

$$\bar{G} = \left(\frac{K'_{I_1}}{K'_{I_{cc}}}\right)^2 + \left(\frac{K'_{II_1}}{K'_{II_{cc}}}\right)^2 \quad (2.34)$$

并把 \bar{G} 称为无量纲的能量释放率。由式(2.17)可知, \bar{G} 正比于应力 σ 的平方和微裂纹半径 a , 即 $\bar{G} \propto \sigma^2 a$ 。在不增加应变的情况下,随着微裂纹的二次扩展,一方面微裂纹尺寸增大, \bar{G} 也随之增大,导致这些微裂纹的继续扩展;另一方面,应力水平的下降导致 \bar{G} 下降。对于没有发生二次扩展的微裂纹,半径 $a = a_0$ 或 $a = a_u$ 保持不变,但应力的下降使得这些微裂纹发生弹性卸载变形。因此,在应力跌落的过程中,只有个别取向上的微裂纹发生二次扩展,而其他大多数的微裂纹只经历着弹性卸载变形,这意味着损伤的局部化。同时,由于应力跌落时应变保持不变,原来由所有微裂纹共同承担的非弹性应变,逐渐集中到由发生二次扩展的少数微裂纹承担,这意味着应变局部化的发生。因此,应力跌落是由连续损伤和均匀变形向损伤局部化和应变局部化过渡的宏观表现,而其本质原因是微裂纹的二次失稳扩展。

在保持应变不变的条件下,随着应力水平的下降,当微裂纹体达到某一最低的能量状态时,微裂纹停止扩展,细观结构达到暂时的稳定状态,对应于应力应变曲线中的 C 点。该状态应满足两方面的条件,其一是微裂纹二次扩展的等式(2.33)成立;其二是基体与所有微裂纹(包括未扩展的、发生一次扩展和二次扩展的)对应变的贡献之和等于外加宏观应变,由这两方面的条件可以确定 C 点的位置,即应力跌落的幅度。

(4) 应变软化阶段(CD) 继续增大宏观应变时,已发生二次扩展的部分微裂纹继续扩展,而其他的微裂纹继续发生弹性卸载,即损伤和应变局部化进一步加剧,随之应力水平下降。因此,应变软化阶段是微裂纹损伤局部化的继续,也是宏观裂纹萌生的开始。

2.1.6 三轴拉伸情况下的软化分析

微裂纹二次扩展的准则为式(2.33),其中 I 型和 II 型应力强度因子 K'_{I_1} 和 K'_{II_1} 的定义同式(2.17);临界应力强度因子 $K_{I_{cc}}$ 和 $K_{II_{cc}}$ 表征着基质材料抵抗微裂纹扩展的能力,认为是微裂纹半径的变化 Δa 的函数。为方便起见,本文假设 $K_{I_{cc}}$ 和 $K_{II_{cc}}$ 均为材料常数。关于 $K_{I_{cc}}$ 和 $K_{II_{cc}}$ 对 Δa 的依赖关系对材料软化行为的影响可参见文献[8]。

设材料承受的三轴拉伸应力状态为 $\sigma_{11} = \sigma_1, \sigma_{22} = \sigma_2, \sigma_{33} = \sigma_3$, 其他 $\sigma_{ij} = 0$, 且设 σ_2 为最大拉伸主应力。

首先确定发生二次扩展的微裂纹的取向。将此应力状态代入式(2.34),得到

$$\begin{aligned}\bar{G} = & \frac{4a_u}{\pi K_{1cc}^2} (\sigma_1 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi + \sigma_2 \cos^2 \theta + \sigma_3 \sin^2 \theta \sin^2 \varphi)^2 \\ & + \frac{4a_u \sin^2 \theta}{\pi K_{1cc}^2} \left(\frac{2}{2-\nu} \right)^2 [\cos^2 \theta (\sigma_2 - \sigma_1 \cos^2 \varphi - \sigma_3 \sin^2 \varphi)^2 \\ & + \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi (\sigma_1 - \sigma_3)^2]\end{aligned}\quad (2.35)$$

将上式对 θ 求导, 可以证明只要满足 $K_{1cc} \leq \frac{2-\nu}{\sqrt{2}} K_{1cc}$, 当 $\theta=0$ 时对于任意的 φ 值都有 $\frac{\partial \bar{G}}{\partial \theta} = 0$,

$\frac{\partial^2 \bar{G}}{\partial \theta^2} \leq 0$, 因此 \bar{G} 在 $\theta=0$ 的方向上取最大值

$$\bar{G}_{\max} = \frac{4a_u \sigma_2^2}{\pi K_{1cc}^2} \quad (2.36)$$

因此在三轴拉伸情况下, 垂直于最大主应力 σ_2 的微裂纹将首先发生二次扩展, 材料的最终断裂面也垂直于最大拉伸主应力的方向。由 $\bar{G}_{\max} = 1$ 得到发生应力突然跌落的条件为最大拉伸主应力达到

$$\sigma_2 = \sigma_{cc} = \frac{K_{1cc}}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a_u}} \quad (2.37)$$

表明由连续分布损伤向损伤局部化的过渡点只与最大主应力有关。

下面给出各个阶段的本构关系。在比例加载条件下, 当最大拉伸主应力 $\sigma_2 < \sigma_c$ 时, 材料的本构关系是线弹性和各向同性的, 有

$$\epsilon_{ij} = (S_{ijkl}^0 + S_{ijkl}^1) \sigma_{kl} \quad (2.38)$$

式中微裂纹对柔度张量的贡献为

$$S_{ijkl}^1 = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} n_c p(\theta, \varphi) \bar{S}_{ijkl}^1(a_0, \theta, \varphi, \sigma_{pq}) \sin \theta d\theta d\varphi \quad (2.39)$$

当 $\sigma_c \leq \sigma_2 < \sigma_{cc}$ 时, 应力应变关系是各向异性的, 表示为

$$\epsilon_{ij} = (S_{ijkl}^0 + S_{ijkl}^1 + S_{ijkl}^2) \sigma_{kl} \quad (2.40)$$

式中

$$\begin{aligned}S_{ijkl}^1 = & \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} n_c p(\theta, \varphi) \bar{S}_{ijkl}^1(a_0, \theta, \varphi, \sigma_{pq}) \sin \theta d\theta d\varphi \\ & - \int_0^{\pi/2} n_c p(\theta, \varphi) \bar{S}_{ijkl}^1(a_0, \theta, \varphi, \sigma_{pq}) \sin \theta d\theta d\varphi\end{aligned}\quad (2.41)$$

$$S_{ijkl}^2 = \int_0^{\pi/2} n_c p(\theta, \varphi) \bar{S}_{ijkl}^2(a_u, \theta, \varphi, \sigma_{pq}) \sin \theta d\theta d\varphi \quad (2.42)$$

当最大拉伸主应力 σ_2 达到 σ_{cc} 后, 立即发生应力跌落。垂直于拉伸方向的微裂纹将发生二次失稳扩展, 而其他大部分微裂纹将发生弹性卸载变形, 即材料发生损伤局部化。由于微裂纹的取向分布可以用概率密度函数 $p(\theta, \varphi)$ 表示, 单位体积内满足 $\theta=0$ 的微裂纹统计平均数目为零, 因此这里认为在一个微小的取向范围 $0 \leq \theta \leq \theta_{cc}$ 内的所有微裂纹发生二次扩展。设单位体积内的所有微裂纹数为 n_c , 则发生二次扩展的微裂纹数目密度为

$$n_{cc} = \int_0^{2\pi} \int_0^{\theta_{cc}} n_c p(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi \quad (2.43)$$

由 $\sigma_2 = \sigma_{cc}$ 以及比例加载条件, 可以从式(2.40)求得应力跌落前的应变张量 ϵ_{ccij} 。在应力跌落过程中的应力和应变变化路径与加载模型相关。例如, 对于应力控制加载的情况, 微裂纹将一直扩展下去, 直到材料的宏观破坏, 因此拉伸过程中观察不到应变软化阶段。这里假设控制最大主应变 ϵ_{22} , 使之缓慢增大, 同时应力张量的各个分量之间保持固定的比例变化。这样经过一定幅值的应力跌落, 材料将达到暂时的稳定状态, 应力停止跌落, 材料进入拉伸软化阶段。在软化阶段的每一时刻, 应满足两方面的关系式: 其一是微裂纹的二次扩展准则即式(2.33), 由此得到二次扩展的微裂纹半径 a_s 与应力张量 σ_{ij} 的关系, 为

$$a_s = \frac{\pi K_{1cc}^2}{4\sigma_2^2} \quad (2.44)$$

其二是基质和所有微裂纹的应变的总和与外加应变相等, 由此得到软化阶段的本构关系

$$\epsilon_{ij} = (S_{ijkl}^0 + S_{ijkl}^1 + S_{ijkl}^2 + S_{ijkl}^3) \sigma_{kl} \quad (2.45)$$

可见, 在材料的应变软化阶段, 有效柔度张量由以下四部分组成:

- (1) 基质材料的弹性变形对柔度张量的贡献 S_{ijkl}^0 , 由式(2.5)表示;
- (2) 没有发生扩展的微裂纹对柔度张量的贡献 S_{ijkl}^1 由式(2.41)表示;
- (3) 发生一次扩展的微裂纹对柔度张量的贡献为

$$S_{ijkl}^2 = \iint_{\Omega} n_c p(\theta, \varphi) \bar{S}_{ijkl}^1(a_u, \theta, \varphi, \sigma_{pq}) \sin\theta d\theta d\varphi - \int_0^{2\pi} \int_0^{\theta_{cc}} n_c p(\theta, \varphi) \bar{S}_{ijkl}^1(a_u, \theta, \varphi, \sigma_{pq}) \sin\theta d\theta d\varphi \quad (2.46)$$

- (4) 发生二次扩展的微裂纹对柔度张量的贡献为

$$S_{ijkl}^3 = \int_0^{2\pi} \int_0^{\theta_{cc}} n_c p(\theta, \varphi) \bar{S}_{ijkl}^1(a_s, \theta, \varphi, \sigma_{pq}) \sin\theta d\theta d\varphi \quad (2.47)$$

由式(2.36)以及 $\epsilon_{22} = \epsilon_{cc22}$, 可以得到应力突然跌落阶段和应变软化阶段的交点以及应力跌落的幅值, 于是就得到了三维比例拉伸情况下脆性材料完整的应力应变关系。

2.1.7 单向拉伸的算例

这里应用微裂纹扩展区模型模拟混凝土试件受单向拉伸时的本构响应, 在复杂加载等情况下的算例可参见文献[15]。对于单拉应力状态 ($\sigma_{22} = \sigma > 0, \sigma_1 = \sigma_3 = 0$), 可求得开始发生微裂纹扩展的临界应力为

$$\sigma_c = \sqrt{\frac{\pi}{4a_0}} K_{1c} \quad (2.48)$$

即当 $\sigma < \sigma_c$ 时材料处于线弹性无损阶段, 当 $\sigma \geq \sigma_c$ 时, 开始有微裂纹发生扩展, 材料进入非线性损伤阶段, 对应的微裂纹扩展区 $\Omega_1(\sigma)$ 为

$$\Omega_1(\sigma) = \{0 \leq \theta \leq \theta_{\max}(\sigma), 0 \leq \varphi \leq 2\pi\} \quad (2.49)$$

如图 2.3 所示, 其中函数 $\theta_{\max}(\sigma)$ 由下式得到

$$\text{tg}^2[\theta_{\max}(\sigma)] = \frac{B_2 - \sqrt{B_2^2 - 4B_1B_3}}{2B_1} \quad (\sigma \geq \sigma_c) \quad (2.50)$$

式中 B_1, B_2 和 B_3 为应力 σ 和材料参数的函数, 为

$$\left. \begin{aligned} B_1 &= -\frac{\pi}{4a_0} K_{Ic}^2 \\ B_2 &= \frac{\pi}{2a_0} K_{Ic}^2 - \left(\frac{2\sigma}{2-\nu}\right)^2 \\ B_3 &= K_{Ic}^2 \left[\left(\frac{\sigma}{K_{Ic}}\right)^2 - \frac{\pi}{4a_0} \right] \end{aligned} \right\} \quad (2.51)$$

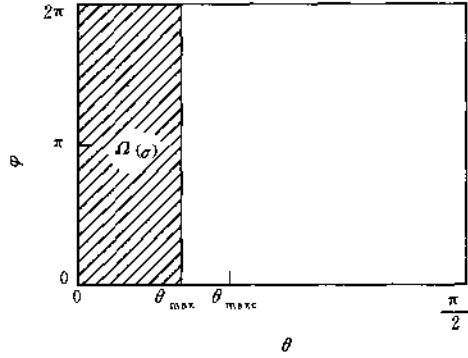


图 2.3 单向拉伸时的微裂纹扩展区

式(2.49)表明在单拉应力 σ 作用下, 所有满足 $\theta \leq \theta_{\max}(\sigma)$ 的微裂纹都发生了扩展, 具有统计平均半径 a_u 。随着应力 σ 的增大, 微裂纹扩展区 $\Omega(\sigma)$ 及其对柔度张量的影响也随之增大。当应力达到 σ_{cc} 时, 微裂纹开始发生二次扩展, σ_{cc} 的表达式为

$$\sigma_{cc} = \sqrt{\frac{\pi}{4a_u} K_{Icc}} \quad (2.52)$$

当 $\sigma \geq \sigma_{cc}$ 时, 垂直于拉伸方向的微裂纹将首先穿越晶界, 在基质材料中失稳扩展, 引起材料内部损伤和变形的局部化。在宏观上这一局部化的过程表现为应力跌落和应变软化, 此时, 微裂纹扩展区保持为下式不变

$$\Omega(\sigma_{cc}) = \{0 \leq \theta \leq \theta_{\max}, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi\} \quad (2.53)$$

式中

$$\theta_{\max} = \theta_{\max}(\sigma_{cc}) \quad (2.54)$$

这里假设所有微裂纹在取向空间中均匀分布, 即概率密度分布函数 $p(\theta, \varphi) = \frac{1}{2\pi}$ 。利用前面的公式, 得到在单向拉伸情况下微裂纹损伤的脆性材料的应力应变关系为

$$\epsilon = \begin{cases} F_0 \sigma & \text{(线弹性阶段 } 0 \leq \sigma < \sigma_c) \\ [F_0 + F_2(\theta_{\max})] \sigma & \text{(非线性强化阶段 } \sigma_c \leq \sigma < \sigma_{cc}) \\ \epsilon_{cc} & \text{(应力突然跌落阶段 } \sigma_{sc} < \sigma \leq \sigma_{cc}) \\ \left\{ F_0 + F_2(\theta_{\max}) + (1 - \cos\theta) \frac{15\rho(2-\nu)}{E} \left[\left(\frac{\pi K_{Icc}^2}{4a_0 \sigma^2} \right)^3 - \gamma \right] \right\} \sigma & \text{(应变软化阶段 } 0 < \sigma \leq \sigma_{sc}) \end{cases} \quad (2.55)$$

式中

$$F_0 = \frac{1}{E} + \frac{\rho}{E}(10 - 3\nu)$$

$$F_2(\theta_{\max}) = \frac{\rho\gamma}{E}(10 - 3\nu - 10\cos^3\theta_{\max} + 3\nu\cos^5\theta_{\max})$$

$$\rho = \frac{16(1 - \nu^2)n_c a_0^3}{45(2 - \nu)}, \quad \gamma = \left(\frac{a_u}{a_0}\right)^3 - 1 \quad (2.56)$$

由式(2.55)得到的一条完整的单拉应力应变曲线如图 2.4 所示,其中采用的材料参数为 $K_{Ic} = 0.08\text{MN}/\text{m}^{3/2}$, $K_{IIc} = 0.16\text{MN}/\text{m}^{3/2}$, $a_0 = 0.26\text{cm}$, $a_u = 0.47\text{cm}$, $E = 31700\text{MPa}$, $\nu = 0.3$, $n_c = 1.8 \times 10^6/\text{m}^3$ 和 $\theta_{cc} = 0.08\text{rad}$ 。可见,由微裂纹扩展区模型得到的应力应变曲线与 Terrien^[16]的实验曲线(图 2.2)是很相似的。

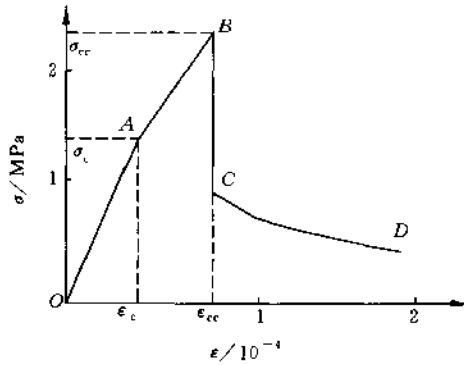


图 2.4 准脆性材料的理论单拉应力应变曲线

2.2 脆性材料压缩的微裂纹扩展区模型

在 2.1 节中,主要考虑的是承拉脆性材料的细观损伤和本构关系,认为微裂纹是张开的、只发生自相似扩展的圆形平面裂纹,面闭合的微裂纹损伤机制没有考虑。事实上,大量的细观实验发现脆性材料如岩石、混凝土在承受压缩载荷时,其细观损伤机制更为复杂^{[17,~[20]}。在压缩情况下,脆性材料的一种重要破坏形式是轴向劈裂,它是由微裂纹的弯折扩展所致,如图 2.5 所示。Horii 和 Nemat-Nasser^{[17],[18]}通过定性的实验和细观力学分析,研究了在不同水平的侧向应力情况下承受三轴压缩的脆性材料的损伤破坏形式。当侧向应力为拉伸应力或很小的压缩应力时,轴向劈裂是其主要的破坏形式,对于中等水平的侧向压力,材料发生层错或宏观剪切破坏。当侧向压力更大时,材料发生脆性到韧性的转变,其应力应变关系与金属相类似。本节只考虑侧向应力的绝对值很小的情况,即材料表现为显著的脆性性质。此时,材料的损伤机制主要是微裂纹的摩擦

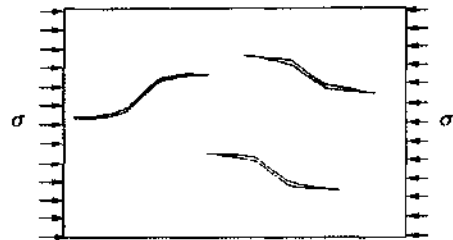


图 2.5 脆性材料的轴向劈裂

滑移、自相似的平面扩展和弯折扩展。

力学家们已经建立了多种模型来研究脆性材料的轴向劈裂及其损伤机理。这些模型增进了人们对脆性材料损伤和变形机制的认识,但并没有很仔细地用于模拟材料的细观损伤演化过程和有效应力应变关系。在压缩情况下,由于微裂纹的闭合和摩擦滑移等,脆性材料的柔度张量是非对称的和各向异性的。针对单调比例加载下的单轴压缩和轴对称的三轴压缩情况,Fanella 和 Krajcinovic^[21]建立了微裂纹损伤演化的本构模型,其中忽略了微裂纹的相互作用。Lee 和 Ju^[22]则在文献[21]的基础上对同样的载荷情况用自洽方法引入了微裂纹的弱相互作用。

本节将微裂纹扩展区的概念推广应用于脆性材料受三维压缩的情况。在 2.2.1 节中,考虑了微裂纹的闭合和摩擦滑移及其对柔度张量的影响。2.2.2 节和 2.2.3 节给出了三维压缩应力下的微裂纹扩展区的演化及损伤材料的有效柔度张量。2.2.4 节和 2.2.5 节分析了微裂纹的弯折扩展机制,给出了单个弯折扩展的微裂纹引起的非弹性柔度张量。2.2.6 节讨论了微裂纹弯折扩展的稳定性与侧向应力的关系,给出了脆性材料轴向劈裂的条件。2.2.7 节建立了多种微裂纹损伤机制并存的本构关系。

2.2.1 微裂纹的闭合和摩擦滑移

选取脆性材料的一个代表性体积单元,它受到均匀的远场应力 σ_{ij} 作用。除了图 2.1 中的整体坐标系 $(ox_1x_2x_3)$ 外,再建立主应力坐标系 $(o\tilde{x}_1\tilde{x}_2\tilde{x}_3)$,它的 3 个轴分别与 3 个主应力 σ_1, σ_2 和 σ_3 的方向相同。设 σ_2 是最大的压缩主应力,而侧向主应力 σ_1 和 σ_3 的绝对值足够小,因而材料表现出明显的脆性性质。

当外加应力 σ_{ij} 较小时,材料中没有微裂纹扩展,此时可以根据微裂纹表面的变形,将微裂纹分为以下三类:

(1) 闭合但没有摩擦滑移的微裂纹,这种微裂纹满足的条件为

$$\sigma'_{22} < 0, \quad -\mu\sigma'_{22} > [(\sigma'_{21})^2 + (\sigma'_{23})^2]^{1/2} \quad (2.57)$$

式中 μ 为微裂纹面间的摩擦系数。式(2.57)是在与整体坐标系相对应的局部坐标系 $(ox'_1x'_2x'_3)$ 中表示的,而在与主应力坐标系相对应的局部坐标系 $(o\tilde{x}'_1\tilde{x}'_2\tilde{x}'_3)$ 中,微裂纹闭合但不发生摩擦滑移的条件与式(2.57)相类似,只需将 σ'_{ij} 用 $\tilde{\sigma}'_{ij} = \tilde{g}'_{ik}\tilde{g}'_{jl}\tilde{\sigma}_{kl}$ 代替,其中 $\tilde{\sigma}_{11} = \sigma_1, \tilde{\sigma}_{22} = \sigma_2, \tilde{\sigma}_{33} = \sigma_3$,其他应力分量 $\tilde{\sigma}_{ij} = 0$ 。微裂纹面之间的接触应力 σ'_{ij} 为

$$\sigma'^c_{22} = \sigma'_{22}, \quad \sigma'^c_{21} = \sigma'_{21}, \quad \sigma'^c_{23} = \sigma'_{23} \quad (2.58)$$

微裂纹的位移不连续矢量为

$$b'_i = 0 \quad (2.59)$$

因此这样的微裂纹对有效柔度张量没有影响。

(2) 闭合且发生摩擦滑移的微裂纹,这种微裂纹应满足的条件为

$$\sigma'_{22} < 0, \quad -\mu\sigma'_{22} \leq [(\sigma'_{21})^2 + (\sigma'_{23})^2]^{1/2} \quad (2.60)$$

此时微裂纹面之间的接触应力为

$$\sigma'^c_{22} = \sigma'_{22}, \quad \sigma'^c_{21} = \frac{-\mu\sigma'_{22}\sigma'_{21}}{\sqrt{(\sigma'_{21})^2 + (\sigma'_{23})^2}}$$

$$\sigma'_{23} = \frac{-\mu\sigma'_{22}\sigma'_{23}}{\sqrt{(\sigma'_{21})^2 + (\sigma'_{23})^2}} \quad (2.61)$$

微裂纹的位移不连续矢量为

$$b'_i = \sqrt{a^2 - r^2} B'_{ij} \sigma'^d_{2j} \quad (2.62)$$

式中对于闭合微裂纹,二阶张量 B'_{ij} 简化为

$$B'_{11} = B'_{33} = \frac{16(1-\nu^2)}{\pi E(2-\nu)}, \quad \text{其他} \quad B'_{ij} = 0 \quad (2.63)$$

微裂纹面变形的驱动应力 σ'^d_{2j} 为

$$\left. \begin{aligned} \sigma'^d_{22} &= \sigma'_{22} - \sigma'^c_{22} = 0 \\ \sigma'^d_{21} &= \sigma'_{21} - \sigma'^c_{21} = \beta\sigma'_{21} \\ \sigma'^d_{23} &= \sigma'_{23} - \sigma'^c_{23} = \beta\sigma'_{23} \end{aligned} \right\} \quad (2.64)$$

其中

$$\beta = 1 + \frac{\mu\sigma'_{22}}{\sqrt{(\sigma'_{21})^2 + (\sigma'_{23})^2}} \quad (2.65)$$

利用整体坐标系与其对应的局部坐标系之间的转换关系式,得到在整体坐标系中闭合微裂纹的位移不连续矢量为

$$b_i = \sqrt{a^2 - r^2} \beta B'_{\mu\nu} g'_{2\mu} g'_{2\nu} g'_{2k} g'_{2l} \sigma_{kl} \quad (2.66)$$

于是,发生摩擦滑移的单个币状微裂纹引起的非弹性应变为

$$\bar{\epsilon}_{ij} = \frac{1}{2V} \int_A (b_i n_j + n_i b_j) dA = \bar{S}^i_{jkl} (a, \theta, \varphi, \sigma_{pq}) \sigma_{kl} \quad (2.67)$$

以下取代表性体元的体积 $V=1$,则由式(2.66),(2.67)以及微裂纹的法向矢量 $n_i = g'_{2i}$,得半径为 a 、取向为 (θ, φ) 的闭合摩擦滑移微裂纹引起的非弹性柔度张量为

$$\bar{S}^i_{jkl} (a, \theta, \varphi, \sigma_{pq}) = \frac{\pi\beta a^3}{3} B'_{\nu\mu} (g'_{2\nu} g'_{2\mu} + g'_{2l} g'_{2k}) g'_{2k} g'_{2l} + g'_{2\nu} g'_{2\mu} \quad (2.68)$$

将满足不等式(2.60)的所有微裂纹的取向范围称为摩擦滑移区,即如果一个微裂纹的取向位于摩擦滑移区内,则该微裂纹是闭合的且发生摩擦滑移。为了方便起见,下面给出在主应力坐标系中的摩擦滑移区。由应力的转换关系 $\tilde{\sigma}'_{ij} = \tilde{g}'_{ik} \tilde{g}'_{jl} \tilde{\sigma}_{kl}$,微裂纹摩擦滑移的条件可重新写为

$$\left. \begin{aligned} A_{1s} \cos^2 \tilde{\varphi} + A_{2s} &< 0 \\ B_{1s} \cos^4 \tilde{\varphi} + B_{2s} \cos^2 \tilde{\varphi} + B_{3s} &\leq 0 \end{aligned} \right\} \quad (2.69)$$

式中

$$\left. \begin{aligned} A_{1s} &= \sin^2 \tilde{\theta} (\sigma_1 - \sigma_3), \quad A_{2s} = \cos^2 \tilde{\theta} \sigma_2 + \sin^2 \tilde{\theta} \sigma_3 \\ B_{1s} &= \sin^2 \tilde{\theta} (1 + \mu^2) (\sigma_1 - \sigma_3)^2 \\ B_{2s} &= \sin^2 \tilde{\theta} (\sigma_1 - \sigma_3) [2\mu^2 (\cos^2 \tilde{\theta} \sigma_2 + \sin^2 \tilde{\theta} \sigma_3) + 2\cos^2 \tilde{\theta} (\sigma_2 - \sigma_3) - (\sigma_1 - \sigma_3)] \\ B_{3s} &= \mu^2 (\cos^2 \tilde{\theta} \sigma_2 + \sin^2 \tilde{\theta} \sigma_3)^2 - \sin^2 \tilde{\theta} \cos^2 \tilde{\theta} (\sigma_2 - \sigma_3)^2 \end{aligned} \right\} \quad (2.70)$$

对于任意一个 $\tilde{\theta}$ 值 $\left(0 \leq \tilde{\theta} \leq \frac{\pi}{2}\right)$, 容易求得满足条件(2.69)式的角 $\tilde{\varphi}$ 的取值范围, 并记作 $\tilde{\varphi}_1(\tilde{\theta}) \leq \tilde{\varphi} \leq \tilde{\varphi}_2(\tilde{\theta})$, 因此应力状态 σ_i 对应的摩擦滑移区在主应力坐标系中表示为

$$\bar{\Pi}(\sigma_i) = \left\{0 \leq \tilde{\theta} \leq \frac{\pi}{2}, \tilde{\varphi}_1(\tilde{\theta}) \leq \tilde{\varphi} \leq \tilde{\varphi}_2(\tilde{\theta})\right\} \quad (2.71)$$

显然, 摩擦滑移区只和当前的应力状态有关, 而与加载历史无关。

(3) 张开的微裂纹, 这种微裂纹满足的条件为

$$\sigma'_{22} \geq 0 \quad (2.72)$$

或表示为

$$A_{1s} \cos^2 \tilde{\varphi} + A_{2s} \geq 0 \quad (2.73)$$

如果 σ_1 或 σ_3 为拉应力, 则存在一个微裂纹张开的取向范围, 并可由式(2.73)求出。关于张开微裂纹对柔度张量的影响见 2.1 节。

2.2.2 闭合微裂纹的自相似扩展及微裂纹扩展区

设在初始状态, 微裂纹均为圆形平面裂纹, 且具有相同的统计平均半径 a_0 , 如图 2.6(a) 所示。随着压缩应力的增大, 摩擦滑移区内的部分微裂纹将发生自相似的平面扩展, 通常被称为 I 型扩展^[21], 但实际上是 I 型和 II 型的复合型扩展。微裂纹半径在瞬间从 a_0 增大到 a_u , 并为具有比界面更高强度的能障(如晶界等)所束缚而停止扩展, 如图 2.6(b) 所示。对于闭合微裂纹, $K'_I = 0$, 复合型的微裂纹扩展准则简化为

$$K'_I = K_{Ic} \quad (2.74)$$

式中闭合微裂纹的 I 型应力强度因子 K'_I 定义为

$$K'_I = \left(\frac{4}{2-\nu}\right) \sqrt{\frac{a}{\pi}} \left[\mu \sigma'_{22} + \sqrt{(\sigma'_{21})^2 + (\sigma'_{23})^2} \right] \quad (2.75)$$

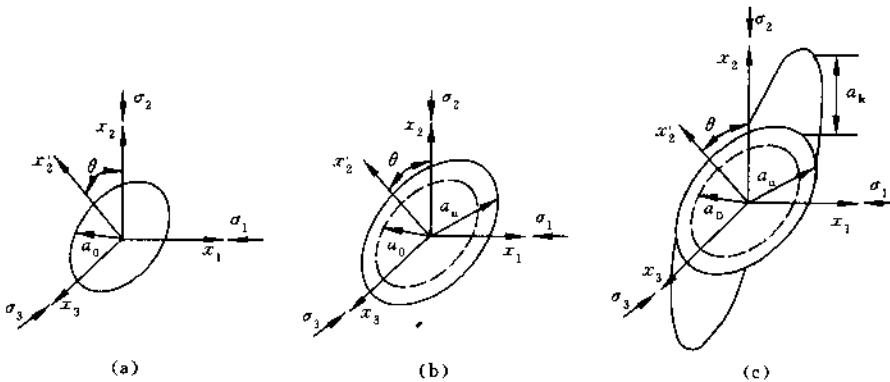


图 2.6 闭合微裂纹的损伤机制

(a) 初始的闭合微裂纹; (b) 微裂纹的自相似扩展; (c) 微裂纹的弯折扩展

类似于式(2.69), 闭合微裂纹发生 I 型自相似扩展的条件在主应力坐标系中表示为

$$C_1 \cos^4 \tilde{\varphi} + C_2 \cos^2 \tilde{\varphi} + C_3 \geq 0 \quad (2.76)$$

式中 C_1, C_2 和 C_3 均为 $\tilde{\theta}$ 的函数,

$$\left. \begin{aligned} C_1 &= -\sin^4 \tilde{\theta} (1 + \mu^2) (\sigma_1 - \sigma_3)^2 \\ C_2 &= \sin^2 \tilde{\theta} (\sigma_1 - \sigma_3) \left[\frac{\mu(2 - \nu) K_{Ic}}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}} - 2\mu^2 (\cos^2 \tilde{\theta} \sigma_2 + \sin^2 \tilde{\theta} \sigma_3) \right. \\ &\quad \left. - 2\cos^2 \tilde{\theta} (\sigma_2 - \sigma_3) + (\sigma_1 - \sigma_3) \right] \\ C_3 &= \sin^2 \tilde{\theta} \cos^2 \tilde{\theta} (\sigma_2 - \sigma_3)^2 \\ &\quad - \left[\frac{(2 - \nu) K_{Ic}}{4} \sqrt{\frac{\pi}{a}} - \mu (\cos^2 \tilde{\theta} \sigma_2 + \sin^2 \tilde{\theta} \sigma_3) \right]^2 \end{aligned} \right\} \quad (2.77)$$

与 2.1 节同样, 将发生自相似扩展的所有微裂纹的取向范围在取向空间中所占的区域称为微裂纹扩展区。由式(2.76)容易求得在单调比例加载条件下, 应力 σ_{ij} 对应的微裂纹扩展区 $\tilde{\Omega}(\sigma_{ij})$, 表示为

$$\tilde{\Omega}(\sigma_{ij}) = \left\{ 0 \leq \tilde{\theta} \leq \frac{\pi}{2}, \quad \tilde{\varphi}_3(\tilde{\theta}, \sigma_{ij}) \leq \tilde{\varphi} \leq \tilde{\varphi}_4(\tilde{\theta}, \sigma_{ij}) \right\} \quad (2.78)$$

式中 $\tilde{\varphi}_3(\tilde{\theta}, \sigma_{ij})$ 和 $\tilde{\varphi}_4(\tilde{\theta}, \sigma_{ij})$ 为 $\tilde{\theta}$ 和应力 σ_{ij} 的两个函数, 由式(2.76)决定。在单调比例加载条件下, 因为只有摩擦滑移区 $\tilde{\Pi}(\sigma_{ij})$ 内的部分微裂纹发生自相似扩展, 所以微裂纹扩展区 $\tilde{\Omega}(\sigma_{ij})$ 是摩擦滑移区 $\tilde{\Pi}(\sigma_{ij})$ 的一个子集。由式(2.78)和 (θ, φ) 与 $(\tilde{\theta}, \tilde{\varphi})$ 间的转换关系式, 应力 σ_{ij} 对应的微裂纹扩展区在整体坐标系中表示为

$$\Omega(\sigma_{ij}) = \left\{ 0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}, \quad \varphi_3(\theta, \sigma_{ij}) \leq \varphi \leq \varphi_4(\theta, \sigma_{ij}) \right\} \quad (2.79)$$

2.2.3 复杂加载条件下微裂纹扩展区的演化及柔度张量的计算

设材料承受复杂加载路径, 在 t 时刻, 材料承受三轴压缩应力 $\sigma_{ij}(t)$, 此时的微裂纹扩展区为 $\Omega(t)$ 。从时刻 t 到 $t + \Delta t$, 应力变为另一三轴压缩应力状态 $\sigma_{ij}(t + \Delta t) = \sigma_{ij}(t) + \Delta\sigma_{ij}$, 该时刻的摩擦滑移区为 $\Pi(\sigma_{ij} + \Delta\sigma_{ij})$ 。将应力 $\sigma_{ij} + \Delta\sigma_{ij}$ 代入式(2.79)得到该应力状态对应的微裂纹扩展区为

$$\Omega(\sigma_{ij} + \Delta\sigma_{ij}) = \left\{ 0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}, \quad \varphi_3(\theta, \sigma_{ij} + \Delta\sigma_{ij}) \leq \varphi \leq \varphi_4(\theta, \sigma_{ij} + \Delta\sigma_{ij}) \right\} \quad (2.80)$$

于是, 在 $t + \Delta t$ 时刻的微裂纹扩展区为 $\Omega(t)$ 与 $\Omega(\sigma_{ij} + \Delta\sigma_{ij})$ 之并集, 即

$$\Omega(t + \Delta t) = \Omega(t) \cup \Omega(\sigma_{ij} + \Delta\sigma_{ij}) \quad (2.81)$$

在整体坐标系中损伤材料的应力应变关系表示为

$$\varepsilon_{ij} = S_{ijkl} \sigma_{kl} = (S_{ijkl}^0 + S_{ijkl}^{I0} + S_{ijkl}^{IS} + S_{ijkl}^{IG}) \sigma_{kl} \quad (2.82)$$

式中 S_{ijkl}^0 为所有张开微裂纹引起的非弹性柔度张量, 已由 2.1 节给出; S_{ijkl}^{IS} 为发生摩擦滑移

但尚未扩展的微裂纹对柔度张量的贡献; S_{ijkl}^G 为发生 II 型自相似扩展的闭合微裂纹对柔度张量的贡献, 且有

$$S_{ijkl}^{IS} = \iint_{\Pi(\sigma_{ij})} n_c p(\theta, \varphi) \bar{S}_{ijkl}^I(a_0, \theta, \varphi, \sigma_{pq}) \sin\theta d\varphi d\theta - \iint_{\Omega_G} n_c p(\theta, \varphi) \bar{S}_{ijkl}^I(a_0, \theta, \varphi, \sigma_{pq}) \sin\theta d\varphi d\theta \quad (2.83)$$

$$S_{ijkl}^G = \iint_{\Omega_G} n_c p(\theta, \varphi) \bar{S}_{ijkl}^I(a_0, \theta, \varphi, \sigma_{pq}) \sin\theta d\varphi d\theta \quad (2.84)$$

式中 Ω_G 为 t 时刻应力 σ_{ij} 作用下所有已经发生 I 型自相似扩展且发生摩擦滑移的闭合微裂纹的取向范围, 即

$$\Omega_G = \Omega(t) \cap \Pi(\sigma_{ij}) \quad (2.85)$$

2.2.4 微裂纹的弯折扩展

随着外加压缩载荷的增大, 微裂纹扩展区内的闭合微裂纹尖端的应力强度因子逐渐增大, 并沿微裂纹前缘产生较大的拉伸应力, 而脆性基质材料抵抗拉应力的能力往往较差, 因此可以采用最大拉应力作为微裂纹弯折扩展的判据。由 I 型裂纹的扩展准则

$$K'_I = K_{Icc} \quad (2.86)$$

以及 I 型和 II 型裂纹尖端的 K 场应力分布, 根据最大应力相等可以近似得到闭合微裂纹弯折扩展的准则为^[21]

$$K'_I = \frac{\sqrt{3}}{2} K_{Icc} \quad (2.87)$$

由闭合微裂纹应力强度因子 K'_I 的表达式(2.75)可以得到 K'_I 达到最大值的微裂纹取向 $(\tilde{\theta}_0, \tilde{\varphi}_0)$, 在此取向上的微裂纹将最先发生弯折扩展, 如图 2.6(c)所示。将 $(\tilde{\theta}_0, \tilde{\varphi}_0)$ 代入式(2.75)和(2.87), 可以进一步求出开始发生微裂纹弯折扩展的临界压缩应力。以 $\sigma_1 = \sigma_3$ 的轴对称情况为例, 此时有

$$K'_I = \frac{4}{2-\nu} \sqrt{\frac{a_u}{\pi}} \left[\sqrt{(\sigma'_{21})^2 + (\sigma'_{23})^2} + \mu \sigma'_{22} \right] = \frac{4}{2-\nu} \sqrt{\frac{a_u}{\pi}} [\sin\tilde{\theta} \cos\tilde{\theta} (\sigma_1 - \sigma_2) + \mu(\sin^2\tilde{\theta} \sigma_1 + \cos^2\tilde{\theta} \sigma_2)] \quad (2.88)$$

对此式求导, 得

$$\frac{\partial K'_I}{\partial \tilde{\theta}} = -\frac{4}{2-\nu} \sqrt{\frac{a_u}{\pi}} (\sigma_1 - \sigma_2) \cos^2\tilde{\theta} (\operatorname{tg}^2\tilde{\theta} - 2\mu \operatorname{tg}\tilde{\theta} - 1) \quad (2.89)$$

于是由 $\frac{\partial K'_I}{\partial \tilde{\theta}} = 0$ 得到最先发生 I 型自相似扩展及弯折扩展的微裂纹取向为

$$\tilde{\theta}_0 = \operatorname{arctg}(\mu + \sqrt{\mu^2 + 1}), \quad 0 \leq \tilde{\varphi}_0 \leq 2\pi \quad (2.90)$$

可见 $\tilde{\theta}_0$ 与 σ_1 和 σ_2 的相对大小无关。于是, 应力强度因子 K'_I 在所有取向中的最大值为

$$(K'_I)_{\max} = K'_I(\tilde{\theta}_0, \tilde{\varphi}_0) = \frac{4}{2-\nu} \sqrt{\frac{a_u}{\pi}} [F_0(\tilde{\theta}_0)(\sigma_1 - \sigma_2) + \mu\sigma_1] \quad (2.91)$$

式中

$$F_0(\tilde{\theta}_0) = \sin\tilde{\theta}_0 \cos\tilde{\theta}_0 - \mu \cos^2\tilde{\theta}_0 \quad (2.92)$$

由式(2.91)和(2.87), 得到开始发生微裂纹弯折扩展的轴向压应力为

$$\sigma_2 = \frac{1}{F_0(\tilde{\theta}_0)} \left[-\frac{\sqrt{3}(2-\nu)K_{Icc}}{8} \sqrt{\frac{\pi}{a_u}} + \mu\sigma_1 \right] + \sigma_1 \quad (2.93)$$

在 $\sigma_1 = \sigma_3$ 的轴对称情况下得到的式(2.90)和(2.93)与文献[21]中的结果相一致。

对于一般的三轴压缩应力情况, 不妨设 $\sigma_1 > \sigma_3$, 用同样的方法得到最先发生弯折扩展的微裂纹取向为

$$\theta_0 = \arctg(\mu + \sqrt{\mu^2 + 1}), \quad \varphi_0 = 0 \quad (2.94)$$

以及开始发生微裂纹弯折扩展的轴向压应力, 与式(2.93)相同。

由式(2.76)以及

$$K'_I \geq \frac{\sqrt{3}}{2} K_{Icc} \quad (2.95)$$

得到在单调比例加载条件下, 应力 σ_{ij} 对应的发生弯折扩展的微裂纹取向满足的条件为

$$C_{1k} \cos^4 \tilde{\varphi} + C_{2k} \cos^2 \tilde{\varphi} + C_{3k} \geq 0 \quad (2.96)$$

式中

$$\begin{aligned} C_{1k} &= -\sin^4 \tilde{\theta} (1 + \mu^2)(\sigma_1 - \sigma_3)^2 \\ C_{2k} &= \sin^2 \tilde{\theta} (\sigma_1 - \sigma_3) \left[\frac{\sqrt{3}\mu(2-\nu)K_{Icc}}{4} \sqrt{\frac{\pi}{a_u}} \right. \\ &\quad \left. - 2\mu^2(\cos^2 \tilde{\theta} \sigma_2 + \sin^2 \tilde{\theta} \sigma_3) - 2\cos^2 \tilde{\theta} (\sigma_2 - \sigma_3) + (\sigma_1 - \sigma_3) \right] \\ C_{3k} &= \sin^2 \tilde{\theta} \cos^2 \tilde{\theta} (\sigma_2 - \sigma_3)^2 \\ &\quad - \left[\frac{\sqrt{3}(2-\nu)K_{Icc}}{8} \sqrt{\frac{\pi}{a_u}} - \mu(\cos^2 \tilde{\theta} \sigma_2 + \sin^2 \tilde{\theta} \sigma_3) \right]^2 \end{aligned} \quad (2.97)$$

对于给定的应力状态, 式(2.96)给出了发生弯折扩展的所有微裂纹的取向范围, 称为弯折扩展区, 在主应力坐标系中记作 $\tilde{\Lambda}(\sigma_{ij})$ 。由 $\tilde{\Lambda}(\sigma_{ij})$ 容易导出整体坐标系中的弯折扩展区 $\Lambda(\sigma_{ij})$ 。

2.2.5 单个弯折扩展微裂纹引起的非弹性柔度张量

对于发生摩擦滑移的微裂纹, 其最大主应力发生在与裂纹面夹角为 $\theta_k = \arcsin \frac{2\sqrt{2}}{3}$ 的方向上, 因此微裂纹刚开始发生弯折扩展时并不是沿最大压应力 σ_2 的方向(即 \tilde{x}_2 轴的方向

向),而是与初始微裂纹而有一个确定的夹角 θ_k ,如图 2.7(a)所示。随着弯折扩展的继续,微裂纹的扩展方向才逐渐趋向于 \tilde{x}_2 轴的方向,并最终引起材料的宏观轴向劈裂。而且当 $\sigma_1 \neq \sigma_3$ 时,微裂纹边缘开始弯折扩展的点也不是在最低位置 A 和最高位置 B 处,而是发生在偏离对称轴 AB 一个小的角度 $\beta_0 = \arctg(\sigma'_{23}/\sigma'_{21})$ 的位置 A' 和 B' 处,因为沿微裂纹边缘中在 A' 和 B' 处的应力强度因子 K'_I 最大。

对图 2.7(a)所示的复杂的三维微裂纹,要获得其张开位移及其对柔度张量贡献的解析表达式是不可能的。Kachanov^[23], Fanella 和 Krajcinovic^[21]等人曾用一系列平面的弯折裂纹来等效这样的空间弯折裂纹,这里采用类似的方法。首先假设微裂纹的弯折扩展方向与最大压缩主应力 σ_2 方向相同而且保持不变,如图 2.7(b)所示,微裂纹弯折扩展部分在 $\tilde{x}_2\tilde{x}_3$ 平面上的投影是椭圆形状的,两个半轴的长度分别为 a_0 和 a_k 。进而再用一系列的二维弯折微裂纹来代替这样的三维弯折微裂纹,每一个二维弯折微裂纹与 $\tilde{x}'_1\tilde{x}'_2$ 平面的夹角为 β ,如图 2.7(b)所示。然而对这样的二维弯折微裂纹仍然得不到张开位移的封闭解。最后,图 2.7(c)中的弯折微裂纹再被图 2.7(d)所示的等效微裂纹来近似代替。构造等效裂纹的方法有多种^{[17],[21]},构造的一种原则是等效微裂纹与实际弯折微裂纹有相同的应力强度因子。本文采用的如图 2.7(d)所示的等效微裂纹是 Fanella 和 Krajcinovic^[21]建议的。

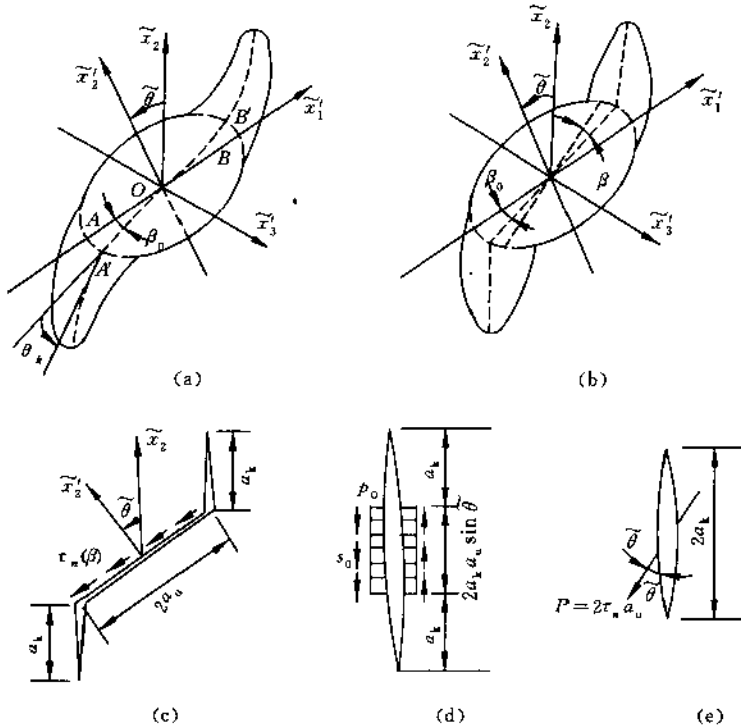


图 2.7 微裂纹的弯折扩展及简化

(a) 弯折扩展的微裂纹; (b) 简化的弯折微裂纹; (c) 二维的弯折微裂纹;
(d) 等效微裂纹^[21]; (e) 另一种等效微裂纹

图 2.7(d)中, p_0 和 s_0 是由于微裂纹面间的摩擦引起的对等效微裂纹的作用力, 分别表

示为

$$\left. \begin{aligned} p_0 &= \frac{\text{ctg}\tilde{\theta}}{\alpha_k} \left(\mu\tilde{\sigma}'_{22} + \sqrt{(\tilde{\sigma}'_{21})^2 + (\tilde{\sigma}'_{23})^2} \right) \\ s_0 &= \frac{1}{\alpha_k \sin\tilde{\theta}} \left(\mu\tilde{\sigma}'_{22} + \sqrt{(\tilde{\sigma}'_{21})^2 + (\tilde{\sigma}'_{23})^2} \right) \end{aligned} \right\} \quad (2.98)$$

式中 α_k 是一个无量纲的修正因子, 是为了保证应力强度因子的相等而引入的, 根据 Horii 和 Nemat-Nasser^[17] 的数值分析结果, 可取 $\alpha_k = 0.25$ 。

发生弯折扩展的微裂纹的位移包括两部分: 其一是沿 β 方向的二维弯折微裂纹的横向张开位移 $\tilde{v}(\beta)$; 其二是 β 截面上的闭合微裂纹面之间的相对摩擦滑移引起的位移 $\tilde{u}(\beta)$, 分别表示为

$$\left. \begin{aligned} \tilde{v}(\beta) &= \frac{4.8(1-\nu^2)}{\pi E} \tilde{\sigma}'_{21} \cos\beta F_1(a_u, \alpha_k, \tilde{\theta}) \\ \tilde{u}(\beta) &= \frac{4.8(1-\nu^2)}{\pi E} \tilde{\sigma}'_{21} \cos\beta F_2(a_u, \alpha_k, \tilde{\theta}) \end{aligned} \right\} \quad (2.99)$$

式中

$$\begin{aligned} F_1(a_u, \alpha_k, \tilde{\theta}) &= \frac{\text{ctg}^2\tilde{\theta}}{\alpha_k} \left[\arcsin\left(\frac{a_1}{a_2}\right) \sqrt{a_2^2 - a_1^2} + a_1 \ln\left(\frac{a_1}{a_2}\right) \right] \\ F_2(a_u, \alpha_k, \tilde{\theta}) &= \frac{\sin^2\tilde{\theta}}{\cos\tilde{\theta}} F_1(a_u, \alpha_k, \tilde{\theta}) \\ a_1 &= \alpha_k a_u \sin\tilde{\theta}, \quad a_2 = \alpha_k a_u \sin\tilde{\theta} + a_k \end{aligned} \quad (2.100)$$

将式(2.99)中的位移分量沿微裂纹前缘 $\left(-\frac{\pi}{2} \leq \beta \leq \frac{\pi}{2}\right)$ 平均, 并通过坐标变换, 得到弯折微裂纹的张开位移及摩擦滑移对有效柔度张量的贡献分别为

$$\left. \begin{aligned} \tilde{S}_{ij,kl}^{k1}(a_u, \alpha_k, \tilde{\theta}, \tilde{\varphi}, \sigma_{ij}) &= 0.6\beta a_u \alpha_k (\hat{g}_{i1}, \hat{g}_{2j} + \hat{g}_{i2}, \hat{g}_{2j}) \tilde{g}'_{2k} \tilde{g}'_{il} B'_{ij} F_1(a_u, \alpha_k, \tilde{\theta}) \\ \tilde{S}_{ij,kl}^{k2}(a_u, \alpha_k, \tilde{\theta}, \tilde{\varphi}, \sigma_{ij}) &= 0.6\beta a_u^2 (\tilde{g}'_{i2} \tilde{g}'_{2j} + \tilde{g}'_{j2} \tilde{g}'_{2i}) \tilde{g}'_{2k} \tilde{g}'_{il} B'_{ij} F_2(a_u, \alpha_k, \tilde{\theta}) \end{aligned} \right\} \quad (2.101)$$

其中

$$B'_{11} = \frac{8(1-\nu^2)}{\pi E}, \quad \text{其他 } B'_{ij} = 0 \quad (2.102)$$

$$\hat{g}_{ij} = \begin{bmatrix} \sin\varphi & 0 & \cos\varphi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\cos\varphi & 0 & \sin\varphi \end{bmatrix} \quad (2.103)$$

于是, 通过主应力坐标系与整体坐标系之间的转换关系式, 得到单个弯折扩展的微裂纹引起的非弹性柔度张量, 在主应力坐标系中表示为

$$\tilde{S}_{ijkl}^{ik}(a_u, \alpha_k, \theta, \varphi, \sigma_{ij}) = [\tilde{S}_{mnu}^{k1}(a_u, \alpha_k, \tilde{\theta}, \tilde{\varphi}, \sigma_{ij}) + \tilde{S}_{mnu}^{k2}(a_u, \alpha_k, \tilde{\theta}, \tilde{\varphi}, \sigma_{ij})] \tilde{g}_{mi} \tilde{g}_{nj} \tilde{g}_{ik} \tilde{g}_{ld} \quad (2.104)$$

式中微裂纹弯折扩展的长度 a_k 将在后文确定。

2.2.6 微裂纹弯折扩展的稳定性分析

为了建立微裂纹弯折扩展的长度 a_k 与外加应力及取向的关系,采用图 2.7(e)所示的等效微裂纹。发生弯折扩展后,微裂纹尖端应力场主要为 I 型的 K 场,正因如此,脆性材料轴向劈裂的断面与拉伸断裂面很相似。对微裂纹尖端的 I 型应力强度因子有贡献的载荷有两部分,其一是由于摩擦剪切应力引起的对弯折裂纹面的作用力,可等效为集中力 P_1 ,

$$P_1 = 2a_u \tau_n \cos \tilde{\theta} \quad (2.105)$$

式中

$$\tau_n = \sqrt{(\tilde{\sigma}'_{21})^2 + (\tilde{\sigma}'_{23})^2} + \mu \tilde{\sigma}'_{22} \quad (2.106)$$

其二是外加宏观应力对微裂纹产生的横向分布力 p^* ,为

$$p^* = \cos^2 \tilde{\varphi} \sigma_1 + \sin^2 \tilde{\varphi} \sigma_3 \quad (2.107)$$

在集中力 P_1 和分布力 p^* 的共同作用下,弯折微裂纹尖端的 I 型应力强度因子为

$$K'_I = \frac{2a_u \tau_n \cos \tilde{\theta}}{\sqrt{\pi a_k}} + \sqrt{\pi a_k} p^* \quad (2.108)$$

由上式及弯折微裂纹的扩展准则 $K'_I = K_{Icc}$,得到微裂纹弯折扩展的长度 a_k 为

$$a_k = \frac{1}{\pi} \left[\frac{K_{Icc} + \text{sgn}(p^*) \sqrt{K_{Icc}^2 - 8p^* a_u \tau_n \cos \tilde{\theta}}}{2p^*} \right]^2 \quad (p^* \neq 0) \quad (2.109)$$

当侧向压力 $p^* = 0$ 时,微裂纹弯折扩展的长度由下式得到

$$a_k = \frac{1}{\pi} \left(\frac{2a_u \tau_n \cos \tilde{\theta}}{K_{Icc}} \right)^2 \quad (2.110)$$

注意到当 a_k 值较大时,式(2.108)给出的应力强度因子与 Horii 和 Nemat-Nasser^[17]的数值结果相符较好,当 a_k 接近于零时,该式不再适用。对于不同的侧向载荷 p^* ,微裂纹弯折扩展的稳定性以及材料的破坏形式也不同,下面分 3 种情况进行讨论。

(1) $p^* = 0$

当 $p^* = 0$ 时,由式(2.109)得到应力强度因子 K'_I 与微裂纹弯折扩展的长度 a_k 的关系曲线,如图 2.8(a)所示。在给定应力状态下, $\frac{\partial K'_I}{\partial a_k} < 0$, K'_I 随着 a_k 的增大而单调下降,当 a_k 趋向于无穷大时 K'_I 趋向于零。当微裂纹弯折扩展的长度达到 a_{kc} 时, $K'_I = K_{Icc}$,微裂纹停止扩展。因此在没有横向作用力 p^* 的情况下,微裂纹的弯折扩展是稳定的。如果外加载荷按比例增加,由式(2.109)知 K'_I 将随之增大,由式(2.110)知微裂纹弯折扩展的长度也增大。如图 2.8(a)所示,如果应力 $\sigma_i^{(2)} = a\sigma_i^{(1)}$ 且 $a > 1$,则相应的微裂纹长度满足 $a_{kc}^{(2)} > a_{kc}^{(1)}$ 。所以,当外加应力达到一定值后,材料将发生宏观的轴向劈裂。

应该指出的是,这里 $p^* = 0$ 并不要求 $\sigma_1 = 0$ 或 $\sigma_3 = 0$,只要在某一取向上的微裂纹满足 $p^* = 0$,即可以发生材料的轴向劈裂。

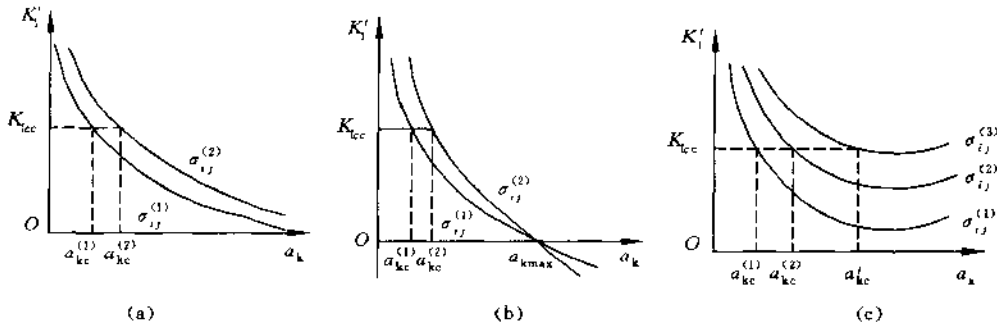


图 2.8 应力强度因子 K_I' 与微裂纹弯折扩展长度 a_k 的关系曲线

(a) $p^* = 0$; (b) $p^* < 0$; (c) $p^* > 0$

(2) $p^* < 0$

当 $p^* < 0$, 应力强度因子 K_I' 和微裂纹弯折长度 a_k 的关系曲线如图 2.8(b) 所示。在给定应力状态下, $\frac{\partial K_I'}{\partial a_k} < 0$, 即当 a_k 增大时 K_I' 随之减小, 且 $K_I' - a_k$ 曲线与 a_k 轴相交。因此当侧向压力 p^* 为负时, 微裂纹的弯折扩展也是稳定的。

当 $p^* < 0$, 存在一个临界长度 a_{kmax} , 使 $K_I'(a_{kmax}) = 0$, 由式(2.108), 得到

$$a_{kmax} = \frac{2a_u \tau_n \cos \tilde{\theta}}{-\pi p^*} \quad (2.111)$$

显然, 如果外加应力单调增加, a_{kmax} 将保持常数, 因此微裂纹弯折扩展的长度 a_k 虽然也增加, 但不可能达到临界值 a_{kmax} 。如果侧向压力 p^* 很小, 临界尺寸 a_{kmax} 足够大, 材料仍有可能发生轴向劈裂。而当 p^* 比较大时, 微裂纹弯折扩展的长度为 a_{kmax} 所限制, 这种损伤机制将不在材料破坏中占主要地位, 材料将不会发生轴向劈裂。此时, 层错 (faulting)、剪切破坏或延性流动将成为材料的主要破坏形式^{[17], [16]}。

应该注意的是, 材料不发生轴向劈裂的必要条件是 σ_1 和 σ_3 均为较大的压应力。

(3) $p^* > 0$

当 $p^* > 0$ 时, 应力强度因子 K_I' 和微裂纹弯折长度 a_k 的关系曲线如图 2.8(c) 所示。在给定应力状态下, $K_I' - a_k$ 曲线有一极小值点, 在 a_k 较小时 $\frac{\partial K_I'}{\partial a_k} < 0$, 而当 a_k 较大时 $\frac{\partial K_I'}{\partial a_k} > 0$ 。因此, 当微裂纹发生弯折扩展的长度 a_k 达到 a_{kc} 时将停止扩展, 随着外加应力的增大, a_{kc} 也增大, 即当 $\sigma_{ij}^{(2)} = \alpha \sigma_{ij}^{(1)}$ 且 $\alpha > 1$ 时, $a_{kc}^{(2)} > a_{kc}^{(1)}$ 。但是与前面两种情况不同的是, 即使侧向正应力 p^* 相对于最大压应力 σ_2 很小, 只要载荷按比例加载到足够大, 微裂纹就将发生失稳的弯折扩展, 而材料将以轴向劈裂的形式破坏。

对于 $p^* > 0$ 的情况, 可由式(2.108)确定微裂纹发生失稳扩展时的临界弯折长度 a_{kc}' 。由于取向为 $(\tilde{\theta}_0, \tilde{\varphi}_0)$ 的微裂纹最先发生弯折扩展, 将 $(\tilde{\theta}_0, \tilde{\varphi}_0)$ 代入式(2.108), 得

$$K_I'(a_k, \tilde{\theta}_0, \tilde{\varphi}_0) = \frac{2a_u \tau_n (\tilde{\theta}_0, \tilde{\varphi}_0) \cos \tilde{\theta}_0}{\sqrt{\pi a_k}} + p^* (\tilde{\varphi}_0) \sqrt{\pi a_k} \quad (2.112)$$

将此式对 a_k 求导, 并令 $\frac{\partial K'_1}{\partial a_k} = 0$, 得

$$a'_{kc} = \frac{2a_u \tau_n(\tilde{\theta}_0, \tilde{\varphi}_0) \cos \tilde{\theta}_0}{\pi p^*(\tilde{\varphi}_0)} \quad (2.113)$$

对于固定的应力状态, 当 $a_k = a'_{kc}$ 时, $K'_1(a_k, \tilde{\theta}_0, \tilde{\varphi}_0)$ 取最小值

$$(K'_1)_{\min} = [8a_u \tau_n(\tilde{\theta}_0, \tilde{\varphi}_0) p^*(\tilde{\varphi}_0) \cos \tilde{\theta}_0]^{1/2} \quad (2.114)$$

令 $(K'_1)_{\min} = K_{1cc}$, 即得到微裂纹弯折扩展失稳时, 外加应力应满足的条件为

$$8a_u \tau_n(\tilde{\theta}_0, \tilde{\varphi}_0) p^*(\tilde{\varphi}_0) \cos \tilde{\theta}_0 = K_{1cc}^2 \quad (2.115)$$

这也就是材料发生轴向劈裂的条件。

2.2.7 有效柔度张量的计算

上面已经考虑了微裂纹的闭合、摩擦滑移、I 型自相似扩展和弯折扩展等细观损伤机制, 于是在多种微裂纹损伤机制并存的情况下脆性材料的有效柔度张量为

$$S_{ijkl} = S_{ijkl}^o + S_{ijkl}^{Io} + S_{ijkl}^{Is} + S_{ijkl}^{Ic} + S_{ijkl}^{Ik} \quad (2.116)$$

式中 S_{ijkl}^{Ik} 是所有发生弯折扩展的微裂纹对柔度张量的贡献。式(2.116)中前 3 项与 2.2.3 节中相同, 而 S_{ijkl}^{Ic} 和 S_{ijkl}^{Ik} 表示为

$$\begin{aligned} S_{ijkl}^{Ic} &= \iint_{n_c} n_c p(\theta, \varphi) \bar{S}_{ijkl}^i(a_u, \theta, \varphi, \sigma_{pq}) \sin \theta d\varphi d\theta \\ &\quad - \iint_A n_c p(\theta, \varphi) \bar{S}_{ijkl}^i(a_u, \theta, \varphi, \sigma_{pq}) \sin \theta d\varphi d\theta \\ S_{ijkl}^{Ik} &= \iint_{n_c} n_c p(\theta, \varphi) \bar{S}_{ijkl}^k(a_u, a_k, \theta, \varphi, \sigma_{pq}) \sin \theta d\varphi d\theta \end{aligned} \quad (2.117)$$

式(2.116)给出的柔度张量计算公式适用于材料承受三轴拉伸、压缩以及复杂加载路径, 但是还没有发生应变软化(即压缩情况下的损伤局部化)的情况。

2.2.8 算例

设材料承受单轴压缩应力, 最大压缩主应力 $\sigma_2 = -\sigma < 0$, 而 $\sigma_1 = \sigma_3 = 0$, 主应力坐标系与整体坐标系重合, 即 $\theta = \tilde{\theta}$, $\varphi = \tilde{\varphi}$ 。

首先计算微裂纹的摩擦滑移区。对于取向为 (θ, φ) 的微裂纹, 其法向的正应力

$$\sigma_{22} = g'_{2i} g'_{ij} \sigma_{ij} = -\cos^2 \theta \sigma \leq 0 \quad (2.118)$$

所以在单轴压缩情况下, 所有微裂纹都是闭合的。微裂纹发生摩擦滑移的条件式(2.69)简化为

$$(\mu^2 \cos^2 \theta - \sin^2 \theta) \cos^2 \theta \sigma^2 \leq 0 \quad (2.119)$$

由此得到单轴压缩应力 σ 对应的摩擦滑移区为

$$\Pi(\sigma) = \left\{ \arctg \mu \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi \right\} \quad (2.120)$$

微裂纹扩展区 $\Omega(\sigma)$ 由式(2.79)确定, 将单轴压缩应力代入式(2.76)和(2.77), 得到

$$\left[\mu \cos^2 \theta \sigma + \frac{(2-\nu)K_{Ic}}{4} \sqrt{\frac{\pi}{a_0}} \right]^2 - \sin^2 \theta \cos^2 \theta \sigma^2 \leq 0 \quad (2.121)$$

整理, 得

$$\kappa \lg^2 \theta - \sigma \lg \theta + \kappa + \mu \sigma \leq 0 \quad (2.122)$$

式中

$$\kappa = \frac{(2-\nu)K_{Ic}}{4} \sqrt{\frac{\pi}{a_0}} \quad (2.123)$$

在单轴压缩情况下, 容易求得最先发生 I 型自相似扩展的微裂纹取向为

$$\theta_0 = \arctg(\mu + \sqrt{\mu^2 + 1}), \quad 0 \leq \theta_0 \leq 2\pi \quad (2.124)$$

开始发生微裂纹扩展的临界压应力为

$$\sigma_c = \frac{(2-\nu)K_{Ic}}{4(\sin \theta_0 \cos \theta_0 - \mu \cos^2 \theta_0)} \sqrt{\frac{\pi}{a_0}} \quad (2.125)$$

当 $\sigma \leq \sigma_c$ 时, 没有微裂纹扩展, 而当 $\sigma > \sigma_c$ 时, 微裂纹扩展区表示为

$$\Omega(\sigma) = \left\{ \arctg \frac{\sigma - \sqrt{\sigma^2 - 4\kappa(\kappa + \mu\sigma)}}{2\kappa} \leq \theta \leq \arctg \frac{\sigma + \sqrt{\sigma^2 - 4\kappa(\kappa + \mu\sigma)}}{2\kappa}, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi \right\} \quad (2.126)$$

类似地由式(2.96)得到开始发生微裂纹弯折扩展的应力为

$$\sigma_k = \frac{\sqrt{3}(2-\nu)K_{Icc}}{8(\sin \theta_0 \cos \theta_0 - \mu \cos^2 \theta_0)} \sqrt{\frac{\pi}{a_u}} \quad (2.127)$$

当 $\sigma > \sigma_k$ 时, 发生弯折扩展的微裂纹的取向范围为

$$\Lambda(\sigma) = \left\{ \arctg \frac{\sigma - \sqrt{\sigma^2 - 4\kappa_k(\kappa_k + \mu\sigma)}}{2\kappa_k} \leq \theta \leq \arctg \frac{\sigma + \sqrt{\sigma^2 - 4\kappa_k(\kappa_k + \mu\sigma)}}{2\kappa_k}, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi \right\} \quad (2.128)$$

式中

$$\kappa_k = \frac{\sqrt{3}(2-\nu)K_{Icc}}{8} \sqrt{\frac{\pi}{a_u}} \quad (2.129)$$

将式(2.120), (2.126)和(2.128)代入式(2.116), 即得到单轴压缩下的脆性材料应力应变关系。参考 Lee 和 Ju^[24]采用的材料实验参数, 取 $K_{Ic} = 0.165 \text{MN/m}^{3/2}$, $K_{Icc} = 0.33 \text{MN/m}^{3/2}$, $K_{Iccc} = 0.495 \text{MN/m}^{3/2}$, 基质材料的弹性模量 $E = 40020 \text{MPa}$, 泊松比 $\nu = 0.2$, 微裂纹的统计平均半径 $a_0 = 0.47 \text{cm}$, $a_u = 0.81 \text{cm}$, 骨料的体积分数 $f_v = 0.39$, 骨料的形状因子 $\alpha_s = 5$ 。由式(2.116)得到的轴向应变 ϵ_{22} 、横向应变 ϵ_{11} 以及体积应变 ϵ_v 随外加应力的变化曲线如图 2.9 中实线所示, 并与实验结果以及 Lee 和 Ju^[24]模型的结果进行了比较, 本文模

型的结果与实验结果相符得较好。和 Lee 等^[24]的模型相比,微裂纹扩展区模型的计算工作量较小,而且能够适用于任意的三维应力状态和复杂加载路径问题。

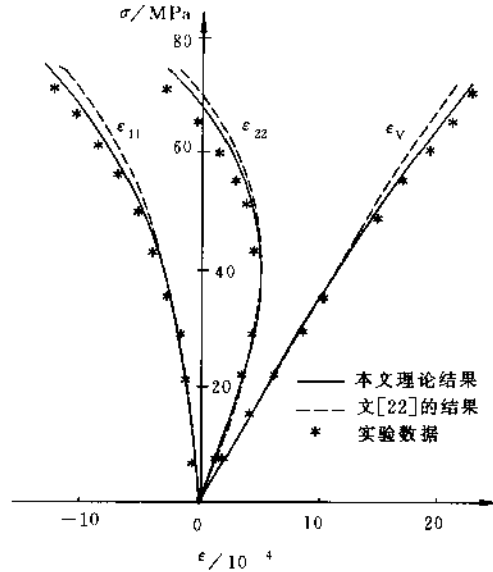


图 2.9 单轴压缩情况下理论与实验结果的比较

2.2.9 小结

本节将微裂纹扩展区的概念推广应用于脆性材料的三轴压缩情况,建立了脆性材料在压缩情况下的细观演化损伤模型。

全面考虑了脆性材料在压缩情况下的细观损伤机制,包括微裂纹的闭合、摩擦滑移、自相似的Ⅱ型扩展、弯折扩展,分别给出了微裂纹发生各种不同变形和损伤的条件、取向范围以及对柔度张量的贡献。

针对不同的侧向压力 $-p^*$,讨论了微裂纹弯折扩展的稳定性。如果主应力 $\sigma_1 \geq 0$ 或 $\sigma_3 \geq 0$ 或者 σ_1, σ_3 为很小的负值,则当最大压缩主应力 σ_2 达到一定水平后会造材料的宏观轴向劈裂,如果 σ_1 和 σ_3 均为较大的负值时,材料不会发生轴向劈裂。而且给出了当 $\sigma_1 > 0$ 或 $\sigma_3 > 0$ 时材料发生微裂纹弯折失稳扩展即材料轴向劈裂的条件。

本节给出的损伤模型可以适用于任意的三维加载以及复杂加载路径问题,而且所用到的数学计算不是很复杂。本节没有涉及微裂纹发生弯折失稳扩展后脆性材料的损伤机制和变形行为,这些问题将另文讨论。

2.3 结束语

本章介绍了脆性材料微裂纹损伤的一套细观力学模型,它以微裂纹扩展区的概念描述

损伤,能够预测脆性材料在三轴拉伸、三轴压缩以及复杂加载路径下从开始加载到发生宏观破坏以前的各个阶段的细观损伤和本构关系,称之为微裂纹扩展区损伤模型。其主要特点如下[3]~[15]:

(1) 区别于以往损伤理论中用标量、矢量和张量形式的内变量描述损伤的方法,该模型用微裂纹扩展区的概念描述脆性材料的微裂纹损伤状态,它以集合的形式出现,因此可以借助于并集、交集的运算方法处理损伤的演化问题,从而可以比较方便地解决任意复杂加载路径下各向异性的损伤演化和本构关系问题。

(2) 材料中大量弥散的微裂纹可以用概率密度函数来表示,每一个币状微裂纹承受复合型的应力场作用,建议用微裂纹前缘平均的无量纲能量释放率作为微裂纹扩展准则。并据此建立了三维应力状态对应的微裂纹扩展区的计算公式,这是处理复杂加载路径问题的基础。

(3) 在拉伸情况下,微裂纹的自相似扩展是主要的损伤机制。而在压缩情况下,损伤机制则复杂得多,包括微裂纹的闭合、摩擦滑移、自相似的Ⅱ型扩展和弯折扩展。本章2.1节讨论了拉伸的情况,2.2节研究了在压缩情况下微裂纹的各种损伤机制及其对材料有效柔度张量的影响,并重点分析了微裂纹的弯折扩展,它是脆性材料轴向劈裂的主要原因。

(4) 脆性材料的本构关系包括线弹性、非线性强化、应力跌落和应变软化四个阶段。该模型分析了各个阶段的细观损伤机制和本构关系,指出应力跌落和应变软化是分布损伤向损伤局部化的过渡引起的,而微裂纹的失稳扩展是损伤局部化和应变局部化的根本原因。将损伤局部化引入材料的损伤本构关系是和以往损伤模型的又一个重要差别。

(5) 实验发现,即使对于脆性很好的材料,如果发生了微裂纹损伤,在卸载后也会存在不同程度的各向异性残余变形。文献[11]在微裂纹扩展区模型基础上,进一步研究了准脆性材料中损伤诱发的残余变形的细观力学机理。认为脆性和准脆性材料中残余变形的产生主要有两方面的原因,其一是微裂纹的扩展释放了材料内部的部分残余应力,其二是微裂纹尖端的细观塑性变形。通过细观力学分析,将这些细观机制的影响引入了本构关系中去。

(6) 在材料发生应力跌落和应变软化的过程中,实际材料的行为有较大的分散性,这与材料细观结构的不均匀性直接相关。本节通过比较简单的数学分析,揭示了材料破坏过程中细观损伤机制的变化以及影响材料本构行为的主要因素,所得到的本构关系代表材料在一定简化情况下的统计平均性质,没有体现实际材料在软化过程中的分散性和尺寸效应。

本章采用了等效弹性介质的方法,并忽略了微裂纹的相互作用以及各种微裂纹损伤机制之间的相互作用,实际上,在微裂纹扩展区的基础上利用自洽方法引入微裂纹的相互作用,并不存在理论上的困难,只是使计算变得比较复杂。此外,冯西桥和Gross^[25]提出了一种简化方法处理复杂加载情况下微裂纹相互作用对本构关系的影响。在多数情况下,这种影响并不明显,因而可以忽略。

参 考 文 献

1. 余寿文,冯西桥. 损伤力学. 北京:清华大学出版社,1997
2. Krajcinovic D. Damage mechanics. Mech. Mater., 1989, 8: 117~197

3. Kachanov M. Effective elastic properties of cracked solids; critical review of some basic concepts. *Appl. Mech. Rev.*, 1992, 45: 304~335
4. Bazant Z P. Mechanics of distributed cracking. *Appl. Mech. Rev.*, 1986, 39: 675~705
5. Feng X Q and Yu S W. A new damage model for microcrack-weakened brittle solids. *Acta Mech. Sinica*, 1993, 9(3): 251~260
6. Feng X Q and Yu S W. Damage model of domain of microcrack growth for microcrack-weakened brittle solids. In: Chien W Z, ed. *Proceedings of the Second International Conference, on Nonlinear Mechanics*. Beijing: Peking University Press, 1993. 299~302
7. Yu S W and Feng X Q. A micromechanics-based model for microcrack-weakened brittle solids. *Mech. of Mater.*, 1995, 20: 59~76
8. Feng X Q and Yu S W. Micromechanical modeling of tensile response of elastic-brittle materials. *Int. J. Solids and Structures*, 1995, 32(22): 3359~3374
9. Feng X Q and Yu S W. Micromechanical modeling of strain softening in microcrack-weakened quasi-brittle materials. *Acta Mech. Solida Sinica*, 1995, 8(2): 121~132
10. 冯西桥, 余寿文. 脆性材料的各向异性损伤及其测量方法. *清华大学学报*, 1995, 35(2): 1~6
11. Yu S W and Feng X Q. Micromechanical damage model for brittle materials with residual strains. In: Eds. by Karahaloo B L, Mai Y W et al. *Proceedings of the Ninth International Conference on Fracture*. 1997, vol. 2: 1167~1174
12. Feng X Q and Yu S W. Experimental method for measuring damage state and micromechanical analysis of softening behaviour of quasi-brittle materials. *Acta Mech. Solida Sinica*, 1998, 8: 629~633
13. Yu S W and Feng X Q. Several problems of damage and fracture mechanics. *Acta Mech. Solida Sinica*, 1995, 8: 270~275
14. Yu S W, Feng X Q, and Qin Q H. On several problems of macro/micro failure mechanics. *Key Eng. Materials*, 1997, 145~149: 51~60
15. 冯西桥. 脆性材料的细观损伤理论和损伤结构的安定分析: [博士学位论文]. 北京: 清华大学, 1995
16. Terrien M. Emission acoustique et comportement post-critique dun beton solliciten traction. *Bull. de Liaison des pontes et chanssees*, 1980, 105: 65~72
17. Horii H and Nemat-Nasser S. Compression induced microcrack growth in brittle solids: axial splitting and shear failure. *J. Geo. Res.*, 1985, 90: 3105~3125
18. Horii H and Nemat-Nasser S. Brittle failure in compression: splitting, faulting and brittle-ductile transition. *Phil. Trans. Royal Soc. London. A*, 1986, 319: 337~374
19. Wong T F. Micromechanics of faulting in Westerly granite. *Int. J. Rock Mech. In. Ser. Geomech. Abstr.*, 1982, 19: 49~64
20. Kranz R L. Microcracks in rocks: a review. *Technonopysics*, 1983, 100: 449~480
21. Fanella D and Krajcinovic D. A micromechanical model for concrete in compression. *Eng. Fract. Mech.*, 1988, 29: 49~66
22. Ju J W. On two dimensional self-consistent micromechanical damage models for brittle solids. *Int. J. Solids Struct.*, 1991, 27: 227~258
23. Kachanov M L. A microcrack model of rock inelasticity. *Mech. Mater.*, 1982, 1: 19~41
24. Lee X and Ju J W. Micromechanical damage models for brittle solids, I: compressive loading. *J. Eng. Mech.*, 1991, 117: 1515~1536
25. Feng X Q and Gross D. An approximate scheme for considering effects of microcrack interaction on overall constitutive relation of brittle solids under complex loading. *Acta Mechanica*, 1999, (in press).

第3章 变形与损伤的局部化理论

3.1 损伤演化和损伤局部化的规律

工程材料在受载过程中会逐渐发生性能劣化,这往往是由于微损伤(如微裂纹、微孔洞等)的积累(图 3.1)。特别是,一旦微损伤在材料的某一部位集中积累演化,这往往就成为宏观破裂的先兆。这个过程很难用针对一条裂纹的断裂力学来处理。因此,人们发展了损伤力学。损伤力学的一个核心问题是连续损伤的演化律,但是现在还没有现成的损伤演化的物理力学规律。于是,人们引入经验的损伤演化律以解决紧迫的工程问题,同时一直在探索基于微损伤演化的物理规律的连续损伤演化律和破坏理论。



图 3.1 一种复合材料在承载过程中出现的微损伤

3.1.1 细观演化实验与方法

细观演化实验是探索损伤演化的物理力学规律的重要组成部分,其宗旨是直观地展示细观损伤演化过程并给出相应的实验规律。本节介绍了力学所非线性连续介质力学开放研究实验室(LNM)在三类力学环境的细观损伤演化实验及其方法,其基本思路是如何实现单调加载条件,并实时地得到损伤演化过程中材料内部发生的损伤及其直观的物理图像。

1. 剪切局部化实验^{[1],[2]}

Hopkinson 扭杆技术是研究剪切局部化中的材料微结构特征和演化过程的重要技术。然而,现有标准 Hopkinson 扭杆是由输入、输出杆中间固连试件构成。该结构存在着应力波对试件的反复加载问题,即应力脉冲对试件加载后在杆系两端反射,形成了再次、甚至后续多次对试件加载。因此,标准扭杆不能确保单脉冲加载条件。图 3.2 是标准扭杆上的实验波形。输出杆上记录的应力波形表明,在第一个加载波后跟随数个具有相近幅度和脉宽的正、反向应力脉冲。显然,这种反复加载不同程度地影响材料在第一次加载后的微结构形貌,由于宏观应力-应变响应曲线是根据第一次加载脉冲计算的,所以在标准扭杆上所做的实验不能保证宏-细观对应研究的准确性。图 3.3 是在标准扭杆上为反复加载破坏的 20 号钢剪切局部化微结构形态。由于反复加载,图中铁素体晶体和珠光体形成的沉析线发生与剪切方向相反的扭折。

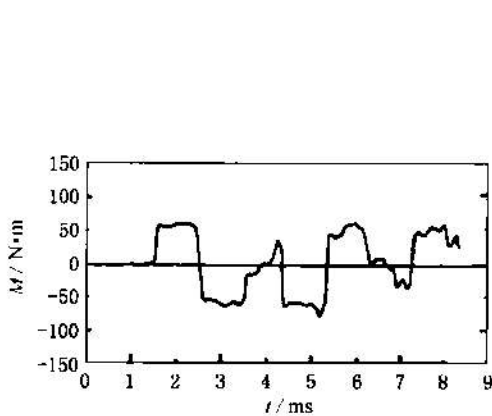


图 3.2 标准扭杆上的实验波形

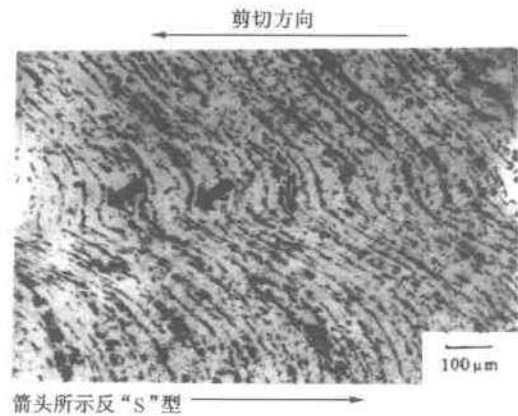


图 3.3 加载破坏的 20 号钢剪切局部化微结构形态

分析表明对试件反复加载是由于应力波在主杆系端部的反射引起的,因此消除反复加载的关键是如何将一次加载波后的所有应力波导出主杆系,并不再进入扭杆。改进扭杆的基本思路是在输入和输出杆前各加一阻抗相同的杆,使到达输入、输出杆端的应力波可完全传入这两附加杆,而在应力波全部进入此两杆后,附加杆又可及时与主杆系脱离。实现改进扭杆主要有两点:

(1) 两附加杆的长度须满足 $L \geq L_i - x_m$, 其中, L_i 为输入杆长度, x_m 为卡头与试件之间的最小距离。这样,在应力波前沿由两卸波杆的自由端反射到入射端之前,应力脉冲全部进入卸波杆。图 3.4 是改进后的 Hopkinson 扭杆及其应力分析。

(2) 设计卸波杆与主杆系的连接方式,须实现两功能:首先,使由试件反、透射的应力波传入卸波杆;其次,当应力脉冲完全进入卸波杆后及时使卸波杆与主杆系脱离。

显然,第一部分由应力波分析即可得到,第二部分则是技术实现。下面简单介绍连接方式的设计。图 3.5 是内推式传动器工作原理,这是利用扭矩波在杆自由端反射后存在角速度差的性质而设计的。传动器由 A、B 两个分别粘在主杆和卸波杆上的连接头和 4 个滑件 C 组成。滑件 C 被置于 A 滑槽内并插入 B 中。当接头 A、B 的转动角速度满足 $\omega_A \geq \omega_B$ 时,扭

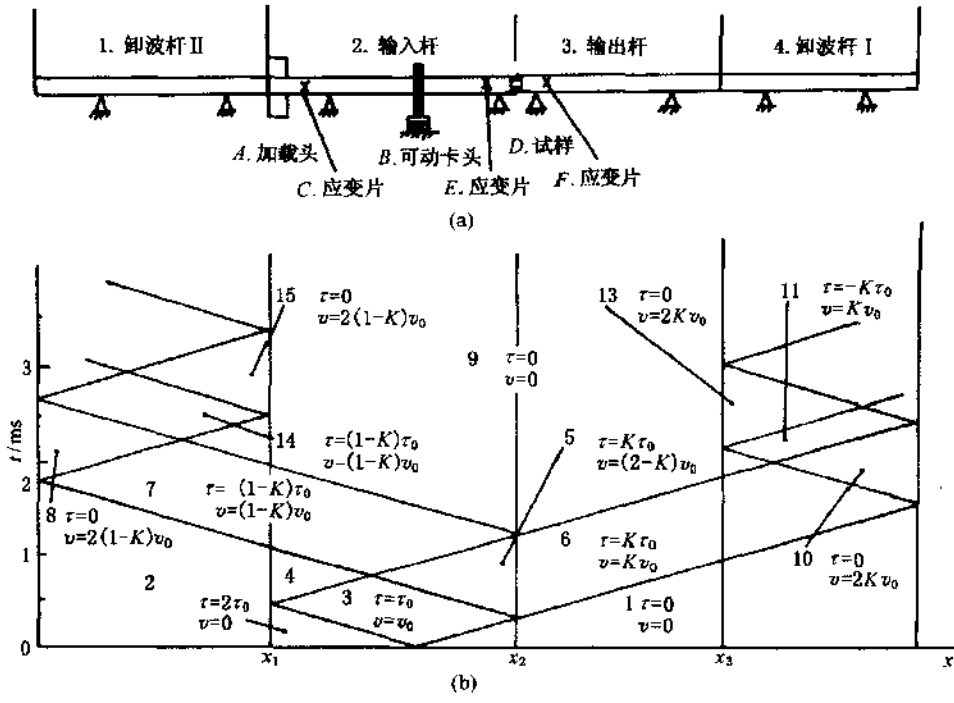


图 3.4 (a) 改进后的 Hopkinson 扭杆；(b) 应力分析

矩波将通过滑件 C 由 A 传至 B。一旦 $\omega_B > \omega_A$ ，滑件 C 将被 B 中斜导槽推回 A 中，从而主杆和卸波杆脱离。采用卸波杆和传动器可直接解决输出杆自由端的应力波导出问题。但对于输入杆前端为加载端，则需重新设计加载系统与传动器的配合，以实现预储存扭矩（加载）和反射波导出。图 3.6 是特别设计的加载系统。棘爪在加载时带动扭杆储存扭矩，使之起到单向限制的固定端作用。一旦扭矩被释放，输入杆连同内轴套一起转动，配合反向的传动器和卸波杆，试件的反射波则可被导出主杆。图 3.7 是改进扭杆的实验波形。图 3.8 是采用改进扭杆获得的完好的剪切局部化微结构形貌（加载条件与图 3.3 的相同）。

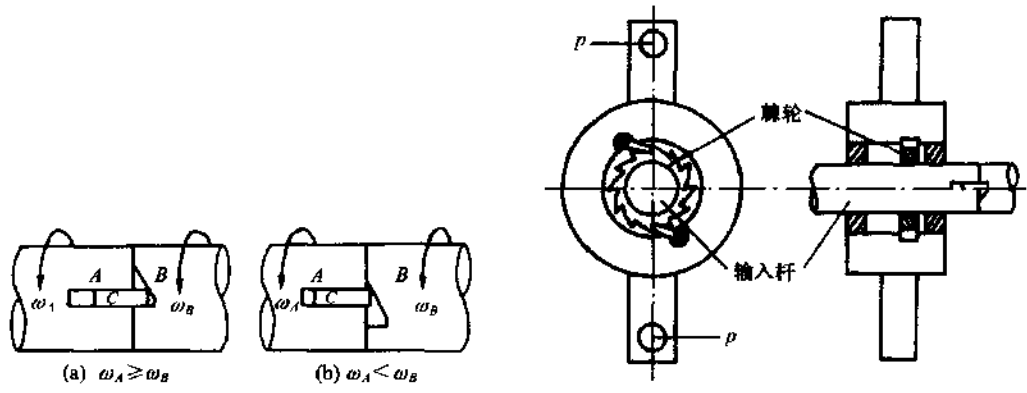


图 3.5 内推式传动器工作原理

图 3.6 特别设计的加载系统

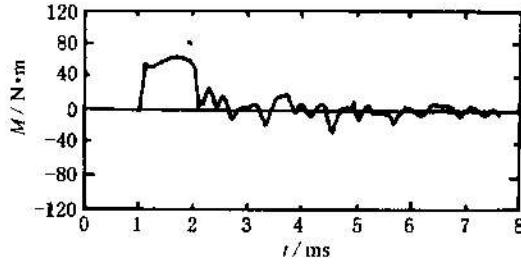


图 3.7 改进扭杆的实验波形

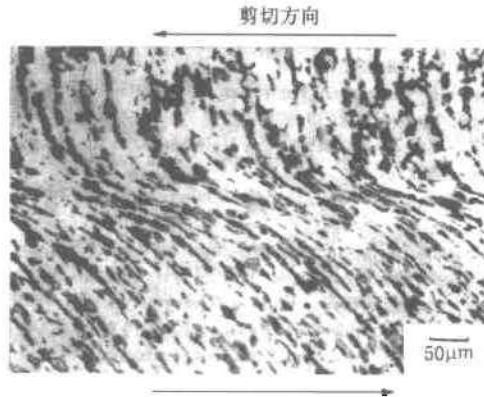


图 3.8 采用改进扭杆获得的剪切局部化微结构形貌

2. 层裂损伤演化实验

层裂是固体在拉伸应力波作用下的一种破坏形式,是大量的、微细观层次上的微损伤经历了成核、长大、连接这一演化过程的结果。实验中控制层裂损伤演化的主要因素有两点——拉伸应力波的幅值和持续时间。显然,在应力幅值不变的情况下,持续时间的变化将直接影响损伤的发展。在层裂损伤演化实验研究方面,力学所 LNM 特别设计了一种实验方法,以考察随时间的推动损伤的演化进程。

层裂损伤演化实验^[3]是在单级轻气炮上进行的。图 3.9(a)是轻气炮筒图。实验时,炮膛内气压驱动飞板撞击靶板(试件),撞击产生的压力波在靶板自由面反射形成拉应力波,拉应力幅值及其持续时间共同控制了试件(靶板)内层裂损伤演化。图 3.9(b)展示平板撞击时应力波在飞板、靶板内的行波图($x-t$ 图)。在靶板内 $a-a$ 位置,拉应力波(反射稀疏波)相遇,其应力幅值达最大,已知飞板、靶板材料,根据材料的弹性声速、飞板及靶板厚度,即可计算该幅值应力波在 $a-a$ 位置持续作用时间 δ_i 。根据飞板的撞击速度决定应力幅值、飞板的厚度决定应力持续时间这一特点,并考虑到应力持续时间对损伤演化的影响,我们设计一组飞板和靶板(图 3.9(c))。在靶环里嵌入 3 个或 4 个小靶板,并在与这些靶板相对应的撞击板位置嵌入 3 个或 4 个直径稍大于靶板的薄片作为飞板。为保证靶板内一维应变有效区域,实验前应根据靶板的直径及所需的脉冲宽度来确定靶板的厚度。这样,通过一次撞击,使厚度不

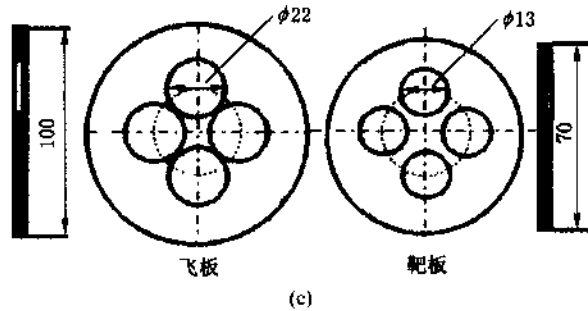
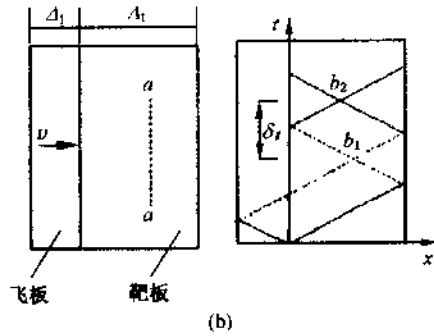
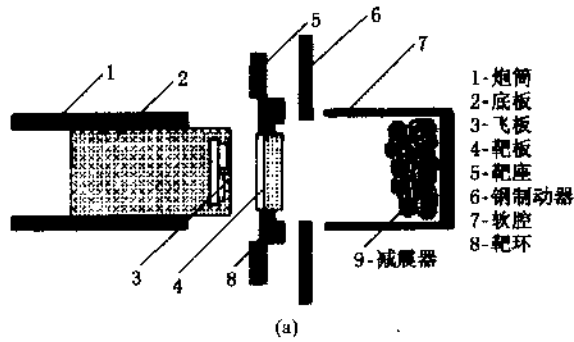


图 3.9

(a) 轻气炮简图；(b) 平板撞击时飞板、靶板内应力波行波图($x-t$)，其中 v 为撞击速度， Δ_f, Δ_t 分别为飞板和靶板厚度；(c) 一组特殊设计的飞板与靶板

同的飞板撞击对应的靶板，将在应力幅值相同而脉冲宽度不同的应力波作用下靶板内产生的不同程度的损伤“凝固”下来，从而得到损伤随时间演化的物理图像。实验中还须注意到飞板与靶板撞击位置的一一对应。由于飞板靶板位置布局对称，二者的撞击倾斜角都被控制在 10^{-3} rad 以内。一般来说，弹在炮膛内飞行时的旋转偏移角 $< 2^\circ$ ，这种小角度的旋转不会影响飞板对靶板的准确撞击。图 3.10 是一组四样品层裂损伤演化实验的波形图。

图 3.11 给出一组 SiC 颗粒增强铝基复合材料的层裂损伤演化实验的微观图像。由图可见，在同一应力水平下，当应力持续时间较短时，样品内观察到的微损伤多是微裂纹(图 3.11(a))；随着应力作用时间增长，这些微裂纹已发展成宏观裂纹(图 3.11(b))。图 3.12 是拉应力-作用时间图($\sigma-t$ 图)。符号“▲”代表了作用在出现宏观层裂的样品的最大拉应力及

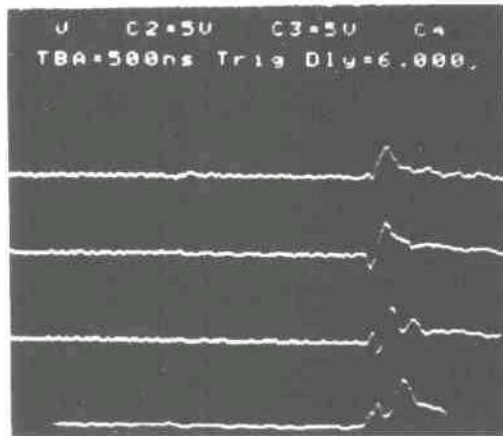


图 3.10 四样品层裂损伤演化实验的波形图

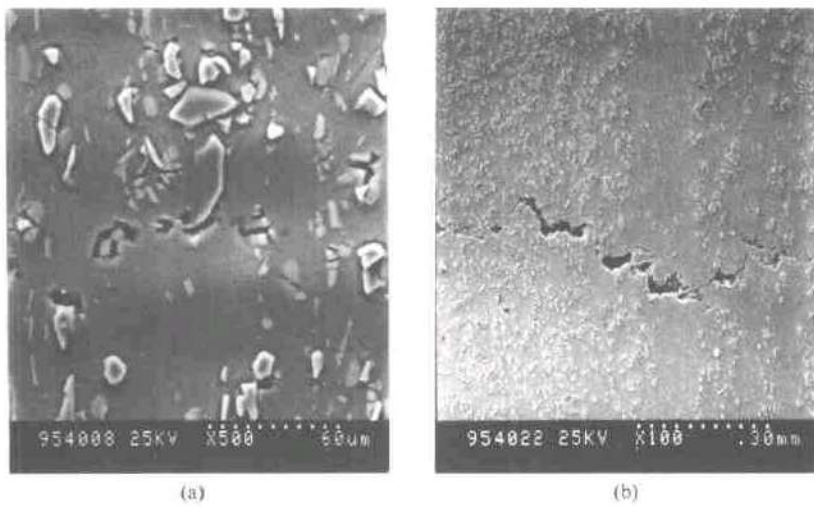


图 3.11 一组 SiC 颗粒增强铝基复合材料的层裂损伤演化实验的微观图像
(a) $\sigma=2.5\text{GPa}$, $t=0.15\mu\text{s}$; (b) $\sigma=2.5\text{GPa}$, $t=0.22\mu\text{s}$

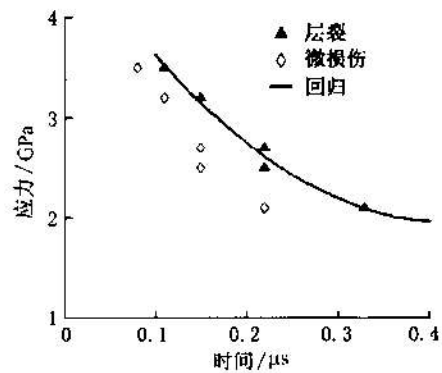


图 3.12 一组 SiC 颗粒增强铝基复合材料的层裂损伤演化实验的应力-时间图

其应力持续时间。在“▲”曲线右上方,样品均已发生宏观层裂,这是应力与应力作用时间共同作用的结果。符号“◇”则代表了作用在出现微损伤的样品上的最大拉应力及其应力持续时间。图中“◇”“▲”曲线展示了在撞击条件下材料中发生的由微损伤到宏观层裂的损伤进程,而该进程是由最大应力水平与应力作用时间共同控制的。

3. 疲劳短裂纹萌生与发展的实验

在若干金属与合金中,疲劳短裂纹的萌生与发展呈现裂纹群体损伤演化的特征。即在疲劳过程的第一阶段——短裂纹阶段,损伤累积由一定数量的短裂纹萌生与发展而构成^[41-49]。短裂纹损伤累积的过程不是取决于个别裂纹的行为,而是由众多的群体裂纹所控制。为了观察和记录短裂纹群体损伤的过程,需要在若干视场区域内观察短裂纹演化的图像。对此,除了使用常规的板状拉伸试样外,我们还设计了一种三角形等应力试样进行循环加载,以获得短裂纹演化的观察结果。对于常规板状拉伸试样,其标距段为等截面,一般只适于应力比 $R > 0$ 的拉-拉载荷条件。而对于我们所设计的三角形板状试样^[10],当对其施加给定的弯曲载荷时,试样等腰三角形标距段的最大应力为常数。这种三角形试样适于进行应力比 $R = -1$ 的循环加载,且具有可供观察的等应力区域。

图 3.13 为所设计的三角形试样,其宽端为固定端,窄端为加载端。窄端与试验机之间通过弹性柔杆相连以实现循环加载。柔性连接的目的在于使试样可沿长度方向适量自由位移,以避免产生附加的拉应力。试样三角形标距段表面的最大拉应力取决于加载端施加的载荷。对于图 3.13 所示的三角形试样,即三角形高与底之比为 2.5,通过计算和实验标定^[10]给出:

$$\sigma = \frac{15P}{at^2} \quad (3.1)$$

或

$$\sigma = \frac{\alpha Ety}{L^2} \quad (3.2)$$

式中 σ 为试样三角形段表面的拉应力; P 为施力端的载荷; t 为试样厚度; E 为试样的弹性模量; y 为施力端的位移; L 为三角形的高; α 为补偿因子,对于图 3.13 所示情况,经计算和标定给出 α 为 1.04。

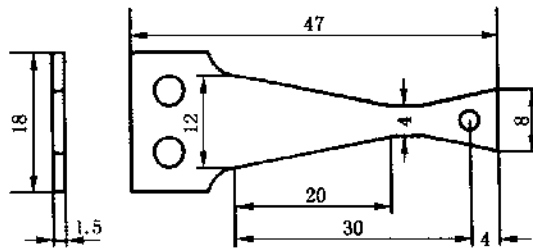


图 3.13 三角形试样示意图 单位: mm

每件试样都预先设定若干试验间隔,对于每次间隔,停机后卸下试样,并用光学显微镜观察试样表面并拍照(为增强对短裂纹的观察效果,可采用偏光照明系统),而后再将试样重新安装到试验装置上进行同样载荷的疲劳试验。下一次间隔时再卸下试样并保持与先前相应的视场进行观察和拍照,于是,所拍的照片定点跟踪了试样表面短裂纹萌生与发展的过程。

图 3.14 是采用三角形等应力试样,对一种熔焊低碳钢疲劳短裂纹随载荷循环周次发展观测得到的一组定点观察照片。该试样表面为抛光后腐蚀,浅色区域为铁素体,深色区域为珠光体。若使用抛光未腐蚀的试样,可更清晰地观察到表面滑移发展成裂纹萌生的过程。获得多组定点观察的照片后,可进一步进行单位面积上短裂纹数增加以及短裂纹生长速率的测定。这类测定可在图像分析仪上进行。

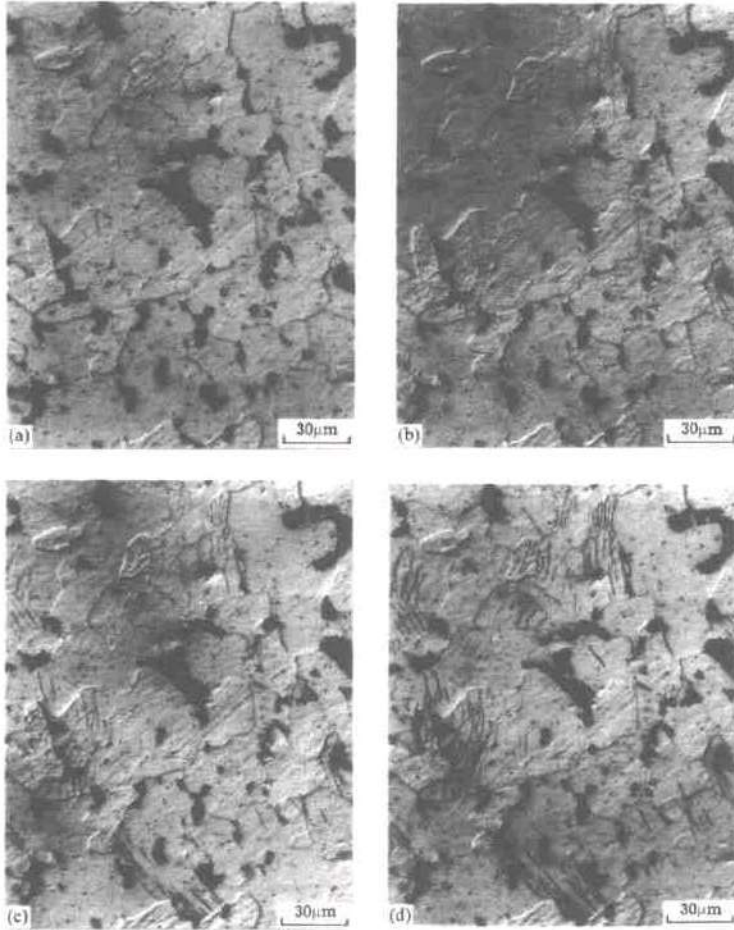


图 3.14 同一视场疲劳短裂纹损伤发展的照片 ($\sigma_{max} = 1.2\sigma_s$, 水平方向平行于拉应力方向)
(a) $n=0$; (b) $n=6000$; (c) $n=30000$; (d) $n=61000$

图 3.15 是常规板状拉伸试样的一个例子,对此类试样同样可以在标距段划分若干小区,在各小区内定点跟踪观察。这类试样适用于 $R > 0$ 的拉-拉疲劳加载。

3.1.2 非均匀损伤变形场的演化理论

本节介绍用统计细观损伤力学的方法处理非均匀损伤变形场的演化。它是基于平均场概念的一种简便途径。它能给出细观损伤群体的统计演化行为,并作为细-宏观描述之间的

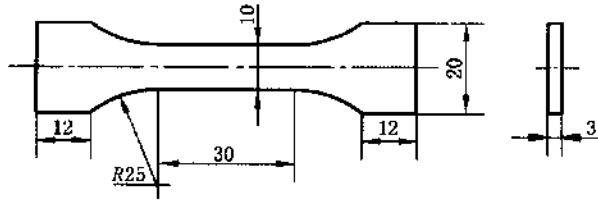


图 3.15 板状拉伸试样示意图 单位: mm

桥梁, 进而给出连续损伤演化律、损伤场演化和损伤局部化的规律。

1. 微损伤的统计演化方程

在统计细观损伤力学中, 单个微损伤用刻画微损伤状态的变量 $p_j, j=1, 2, \dots, J$ (如 p_j 可以是微损伤的位置、尺寸、取向等) 描述。变量 p_j 构成的空间称为描述微损伤的相空间。大量微损伤组成的系统用微损伤的数密度 $n=n(t, p_j)$ 进行统计描述。数密度 n 的意义可举例说明如下。如果选用宏观位置 x 和微损伤的尺寸 c 作为微损伤状态变量 p_j , 那么 $\{x, c\}$ 就构成了描述微损伤的相空间。这样, n 就是单位体积 (如 mm^3)、单位微损伤尺寸 (如 μm) 中的微损伤数目。例如说, 数密度 $n(t, x, c)$ 等于 $10/\text{mm}^3 \cdot \mu\text{m}$, 这表示在时刻 t 、在 x 处的单位空间体积 (mm^3)、尺寸为从 c 到 $c+1\mu\text{m}$ 的微损伤的数目, 此处 t 是广义时间 (如时间, 循环周数等)。在实践中, 常常用到单位空间体积 (mm^3) 中微损伤的密度 N , 它是数密度 n 对 c 从零到无穷大的积分, 例如在金属中可以观察到的微损伤约为 $N \sim (10^3 \sim 10^4)/\text{mm}^3$ 。根据统计物理中刘维和玻尔兹曼的概念, 数密度在相空间应遵守如下演化方程^[11]

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \sum_{j=1}^J \frac{\partial}{\partial p_j} (nP_j) = n_N - n_A \quad (3.3)$$

式中 $P_j = \dot{p}_j$ 是相空间变量的变化率, 如 p_j 是微损伤尺寸, 那么 P_j 就是微损伤的扩展速率; n_N 是微损伤的成核率; n_A 是微损伤的愈合消失率, 微损伤的连接效应包含在扩展和消失项中。

在一维相空间中, 方程 (3.3) 的推导可参见文献 [12]。这里, 我们从力学上解释方程 (3.3) 的物理意义, 很容易看出第一项 $\frac{\partial n}{\partial t}$ 是微损伤的数密度随时间的增量; 和式 $\sum_{j=1}^J \frac{\partial}{\partial p_j} (nP_j)$ 是由于微损伤数密度的流量 nP_j 在单位体积相空间两侧的差值, 在该单位相空间体积内所造成的微损伤数密度的减少量; 方程右侧是源项和汇项。实际上, 方程 (3.3) 与连续介质力学的其他守恒方程: 质量守恒方程、动量守恒方程和能量守恒方程的推导原则是一样的, 形式上也是相似的, 差别仅在于方程 (3.3) 是建立在相空间, 而不是在一般物理空间的。为说明上述演化方程的意义, 下面给出上述微损伤的统计演化方程在两个典型情况下的基本解。

例 1 理想微损伤的演化 (一维)^[13]

理想微损伤是指微损伤之间是统计独立的, 它们之间的相互作用只计及其统计平均效应, 并略去微损伤之间的连接效应。一维是指微损伤只由描写微损伤大小的一个变量 c 刻

画。这时,方程(3.3)和相应的初始条件为

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial (nV)}{\partial c} = n_N \quad (3.4)$$

$n(t, c) = 0$, 当 $t = 0$ 。式中, V 和 n_N 分别是微损伤的两个细观动力学规律: 微损伤的扩展律和成核律,

$$\left. \begin{aligned} V &= V(c, \sigma) \\ n_N &= n_N(c, \sigma) \end{aligned} \right\} \quad (3.5)$$

对于应力保持恒定的情形,以上方程有如下一般形式的解:

$$n(t, c) = \left(\int_{\eta(t, c)}^c n_N(c', \sigma) dc' \right) / V(c, \sigma) \quad (3.6)$$

式中, η 由下面积分 $t = \int_{\eta}^c \frac{dc'}{V(c', \sigma)}$ 的下限决定。但是, 当 $c < c_s(t)$ 时, $\eta = 0$ 。此处, $c_s(t)$ 为微损伤的数密度不再随时间变化的饱和区边界的微损伤尺寸, 它由 η 取为零时, 这个积分的上限决定(图 3.16)。图 3.16 是无量纲的微损伤数密度随微损伤尺度和时间的变化曲线, $\tilde{n} = \tilde{n}(\tilde{c}, \tau)$ 。其中, $\tilde{n} = nV^*/(n_N^*c^*)$, 为无量纲化的数密度; $\tilde{c} = c/c^*$, 是无量纲的微裂纹尺寸; $\tau = V^*t/c^*$ 是无量纲的时间; V^* 是微裂纹扩展的特征速度; c^* 是微裂纹成核的特征尺寸; n_N^* 是微裂纹的特征成核率。十分重要的是, 图中显示出损伤的增量与非饱和区的扩展密切相关。

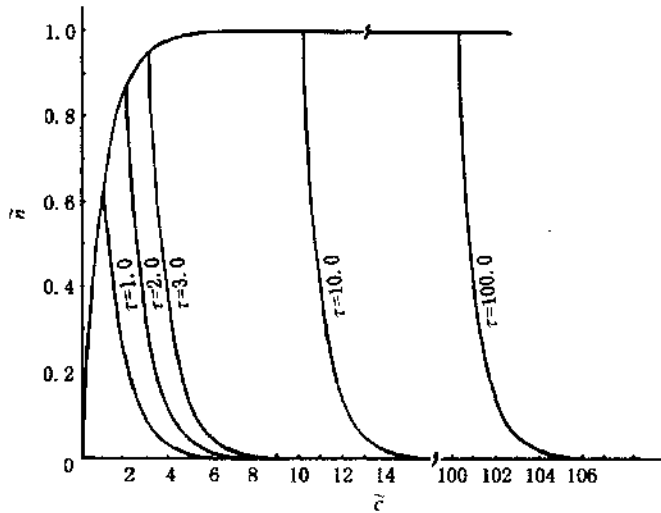


图 3.16 无量纲的微损伤数密度随微损伤尺度和时间的变化曲线 ($\tilde{n}, \tilde{c}, \tau$ 是无量纲化的数密度、尺度和时间, $\eta = 0$)

例 2 理想微损伤的演化(二维)^[14]

此处, 二维是指微损伤由描写微损伤当时大小的变量 c 和其初始大小的变量 c_0 刻画。但是应注意, 微损伤的初始大小不随时间变化, 即 $\dot{c}_0 = 0$ 。这时, 方程(3.3)和相应的初始条件为

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial n_0}{\partial t} + \frac{\partial(n_0 V)}{\partial c} &= n_N \delta(c - c_0) \\ n_0(t, c_0, c) &= 0, \text{ 当 } t = 0 \end{aligned} \right\} \quad (3.7)$$

式中, $n_0 = n_0(t, c, c_0)$ 是二维相空间 $\{c, c_0\}$ 中的微损伤数密度, 根据许多实验观察, 微损伤的扩展律 V 不仅依赖于微损伤的当时尺寸 c , 还依赖于微损伤的初始尺寸 c_0 :

$$V = V(c, c_0, \sigma) \quad (3.8)$$

对于应力保持恒定的情形, 以上方程有如下一般形式的解:

$$n(t, c, c_0) = \begin{cases} 0 & \text{当 } c > c_f \\ n_N(c_0, \sigma) / V(c, c_0, \sigma) & \text{当 } c < c_f \end{cases} \quad (3.9)$$

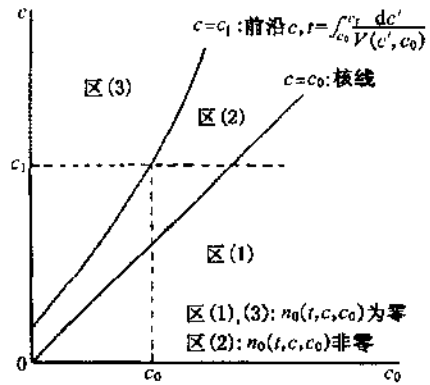


图 3.17 非零解的存在区域

式中 $c_f(t, c_0)$ 是微损伤尺寸的扩展前沿, 并由下面积分

$t = \int_{c_0}^{c_f} \frac{dc'}{V(c', c_0, \sigma)}$ 的上限决定。图 3.17 表示了非零解的存在区域, 显然, 损伤的增量与微损伤尺寸的扩展前沿 $c_f(t, c_0)$ 密切相关。

2. 基于微损伤演化的物理规律的损伤演化律

如何利用上面导出的微损伤统计演化方程, 来建立连续损伤的演化律, 自然是统计细观损伤力学首当其冲的一个任务。首先, 我们假设, 连续损伤 D 可以用微损伤数密度的矩 D_j 来表示:

$$D = D_j = \alpha \int_0^\infty c^j n(t, c) dc \quad (3.10)$$

此处, α 是微损伤的形状因子, 对于球形空洞, $\alpha = \pi/6$ 。当 $j=3$, D_3 表示损伤的体积分。利用前面得到的关于微损伤数密度的演化方程的解(3.9), 可以将损伤矩用微损伤的细观动力学——成核律和扩展律表示出来^[15],

$$D = D_j = \alpha \int_0^\infty dc_0 \int_{c_0}^{c_f} \frac{c^j n_N(c_0, \sigma)}{V(c, c_0, \sigma)} dc \quad (3.11)$$

将其对时间微分, 便可以得到损伤演化律的表达式

$$\dot{D} = \alpha \int_0^\infty c_f^j(t, c_0) n_N(c_0, \sigma) dc_0 \quad (3.12)$$

在这个积分的被积函数中, 只有微损伤尺寸的扩展前沿 $c_f(t, c_0)$ 是时间的函数。因此, 这个公式清楚、定量地表达了前面得到的概念: 损伤的增量与微损伤的扩展前沿密切相关, 这乃是损伤演化律的物理本质。为便于理解, 取 $j=1$, 则由(3.12)式可得

$$\Delta D = \alpha \int_0^\infty c_f n_N dc_0 \Delta t$$

由图 3.18 可知, 微损伤扩展前沿在 Δt 内新扩展的面积 $\Delta S \sim c_f V \Delta t$, 所以,

$$\Delta D(t) \sim \alpha \int_0^{\infty} \Delta S(t) \frac{n_N}{V} dc_0$$

即 $\Delta D(t)$ 由 $\Delta S(t)$ 所控制。

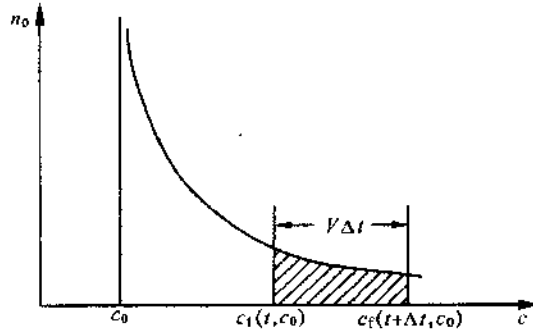


图 3.18 损伤的增量与微损伤的扩展前沿

从另一个角度,对微损伤的演化方程(3.4)两侧同乘 c' ,再对微损伤的尺寸变量 c 积分,根据 D 的定义式(3.10)可以得到损伤演化律的另一个表达式

$$\dot{D} = \alpha \int_0^{\infty} n_N c' dc + \alpha_j \int_0^{\infty} V n c^{j-1} dc \quad (3.13)$$

这表示,损伤演化律可以表示为两部分之和:第一部分仅依赖于微损伤的成核律,并不随时间变化(仅随应力间接依赖于时间),这类损伤称为简单损伤;第二部分则直接依赖于微损伤数密度($n = n(t, c)$)随时间的演化,即损伤的增量依赖于已有的损伤,从而称为复合损伤。

下面我们试图找到损伤演化律的具体表示形式,先看一个最简单的情况。在例1的一维相空间中,假设微损伤的扩展速率 V 是微损伤的尺寸 c 的线性函数, $V \sim c$ 。代入公式(3.13),可以得到损伤演化律是损伤的线性函数^[16]

$$\dot{D} = g_N(\sigma) + g_G(\sigma)D \quad (3.14)$$

实际上,微损伤的扩展速率不像上面说的那么简单。例如,许多研究表明,微损伤的扩展律 V 不仅依赖于微损伤的当时尺寸 c ,还依赖于微损伤的初始尺寸 c_0 。这时,一般不能像上面那样,简单地从微损伤统计演化方程,解析地推导出连续损伤的演化律。下面的数值方法和结果,给出了寻找连续损伤的演化律可能的公式形式的一种办法。这是由偏微分方程、积分、代数式组成的一组方程,其无量纲控制方程组和初、边值条件如下^{[17],[18]}:

$$\frac{\partial n_0}{\partial t} + \frac{\partial(n_0 V)}{\partial c} = n_N \delta(c - c_0) \quad (3.15)$$

$$D = D^* \int_0^{\infty} \int_0^c c^3 n_0 dc_0 dc \quad (3.16)$$

$$\sigma = \frac{\sigma_0}{1 - D} \quad (3.17)$$

$$V = V(c, c_0, \sigma) = c^j (c - c_0)^n (\sigma - 1) \quad (3.18)$$

$$n_N = n_N(c_0, \sigma) = c \exp(-c) (\sigma - 1) \quad (3.19)$$

$$n_0(0, c, c_0, \sigma) = 0 \quad (3.20)$$

$$n_0(t, c, c_0, \sigma) = 0, \quad c \leq c_0 \quad (3.21)$$

式中 V 和 n_N 表示式右侧是参照前人和我们实验结果^{[19],[14]}的数据拟合所取的一种具体函数形式。在这个问题中,除无量纲名义应力 σ_0 外,还含有两个与扩展有关的指数 λ 和 μ 以及一个无量纲损伤数

$$D^* = \alpha n_N^* c^{*3} / V^*$$

α 是个几何因子, n_N^* , c^* 和 V^* 均为材料的特征参数。对于球形孔洞 $\alpha = \pi/6$ 。图 3.19 给出了一算例,无量纲参数取为 $D^* = 0.001$, $\sigma_0 = 1.25$ 以及 $\lambda = 0$, $\mu = 0.2$ 和 0.5 。从算例中可以大致看出损伤演化律的如下一般性趋势:
① 在损伤率轴上的截距是由损伤成核律决定的,这与前面的分析结果是一致的;
② 损伤扩展律对损伤演化速率有明显影响,并以下凸为一般特征,即幂指数大于 1 的幂函数 D^m , $m > 1$;
③ 无量纲名义应力 σ_0 的增高,加快了损伤演化速率,而且应力反馈效应不明显,这样,损伤演化速率通常仍是物性参量、名义应力和损伤变量的函数。考虑到前面指出的截距和下凸性质,大致上,可以将损伤演化律表示为

$$\dot{D} = (A + BD^m)g(\sigma) \quad (3.22)$$

此处假设损伤律对应力的依赖关系,可以用单一的函数 $g(\sigma)$ 表示,此处, σ 是物质单元的真应力。 A 取决于成核律, BD^m 反映了扩展以至连结的效应,即复合损伤。

3. 损伤场的演化方程

为预测实际的工件或构件的破坏,必须研究损伤的空间分布演化。为此,我们将目光从微损伤转向一个从细观看很大(即包括了许多微损伤)面从宏观看很小的体元,即宏观上该体元可视为一个由宏观坐标表征的宏观点。于是,当我们考察由宏观坐标 x 和微损伤尺度 c 组成的相空间,方程(3.3)有如下形式^[20]:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial(nV)}{\partial c} + \nabla \cdot (n\mathbf{v}) = n_N - n_A \quad (3.23)$$

式中 ∇ 是梯度算子; $V = \dot{c}$ 是微损伤的扩展速率; \mathbf{v} 是宏观连续体体元的质点速度。

现考察标量连续损伤。由于微损伤将导致一部分介质失效,现引入损伤场变量 $D(t, \mathbf{x})$ 描写 t 时刻、 \mathbf{x} 处宏观体元中失效介质所占据的体积比例。令一个尺度为 c 的微损伤所导致的平均失效体积为 τ , τ 一般是 c, \mathbf{x}, σ 及 D 的函数,在 τ 中包含微损伤的孔隙及其周围失效介质的体积。类似损伤矩的表达式(3.11),损伤场变量可由下式计算

$$D = \int_0^\infty n(t, c, \mathbf{x}) \tau dc \quad (3.24)$$

对球形孔洞 $\tau = \frac{\pi}{6} c^3$ 。用 τ 乘方程(3.4),然后对 c 积分,并采用如下边界条件

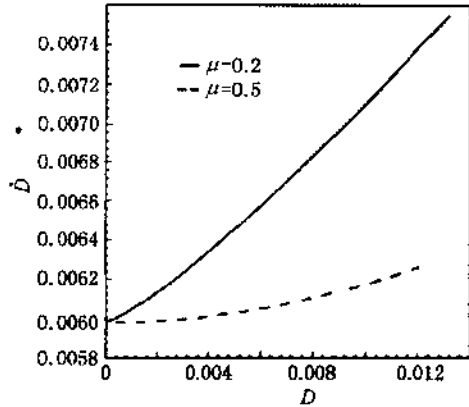


图 3.19 用不同的微损伤扩展率计算的损伤率-损伤曲线($\sigma_0 = 1.25, \lambda = 0$)

$$nV\tau \rightarrow 0, \quad \text{当 } c \rightarrow 0 \text{ 和 } c \rightarrow \infty \quad (3.25)$$

便可得到宏观的损伤场演化方程

$$\frac{\partial D}{\partial t} + \nabla \cdot (D\mathbf{v}) = f \quad (3.26)$$

函数 f 称为损伤动力学函数,它通过如下积分与微损伤的细观动力学相关^[18]

$$f = \int_0^{\infty} n_N \tau dc + \int_0^{\infty} (nV\tau' - n_A \tau) dc \quad (3.27)$$

其中, $\tau' = \frac{\partial \tau}{\partial c}$ 。此式与前面对单元体得到的关于 \dot{D} 的公式(3.13)相当。所以,如前节所述,通常可设 $f=f(\sigma, D)$ 。对于某一物质单元,该函数可用前段的联立方程组(3.15)~(3.21)求出,并可近似拟合表示为式(3.22)的形式

$$\begin{aligned} f &= (A + BD^m)g(\sigma) \\ &= A(1 + \beta D^m)g(\sigma) \end{aligned} \quad (3.22a)$$

此处进一步引入无量纲量 $\beta=B/A$,它反映了复合损伤速率与成核速率的比值,是一个内秉的 Deborah 数。我们将看到这个内秉的 Deborah 数,对损伤演化导致破坏起着关键性的作用。应该强调的是,无论损伤 D 的定义,还是基于微损伤统计演化的损伤场演化方程,都是在欧拉描述下进行的。然而,通常将损伤视为物性的一部分,因此,认为损伤仅出现于本构方程之中,而与空间场方程无直接关系。所以,在内变量形式的连续损伤力学中,假设损伤在本构方程中有随时间的演化率,该演化率是应力和损伤的函数,从而间接地使损伤呈空间分布。但是由方程(3.26)可以看出,从统计力学的原则出发,损伤不仅仅是物性,它本身还受一个由统计力学导出的时、空场方程(3.26)控制。这时,求解连续介质力学的基本守恒方程组(质量,动量,能量)需要补充连续损伤场演化方程。例如,在不计及热效应时,损伤的时空演化应由方程(3.26)和连续性方程和动量方程联立求解

$$\frac{\partial D}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla D + D \nabla \cdot \mathbf{v} = f \quad (3.26)'$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla V - V \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (3.28)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} - V \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = 0 \quad (3.29)$$

式中 $\boldsymbol{\sigma}$ 是应力张量; $V = \frac{1}{\rho}$ 是比容。

4. 一维应变下的损伤局部化

作为一个例子,考察一维应变下的损伤演化。一维应变的定义为

$$u = w = 0, \quad v = v(y) \quad (3.30)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} = 0$$

式中 u, v, w 分别是物质质点在 x, y, z 方向的速度,于是方程组(3.26), (3.28), (3.29) 化为

$$\frac{\partial D}{\partial t} + v \frac{\partial D}{\partial y} + D \frac{\partial v}{\partial y} = f \quad (3.31)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} + v \frac{\partial V}{\partial y} - V \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (3.32)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial y} - V \frac{\partial \sigma}{\partial y} = 0 \quad (3.33)$$

假设变形为准静态,惯性力可略去,那么由(3.33)式可得均匀应力场

$$\sigma = \sigma(t) \quad (3.34)$$

假设如下不等式可表示损伤场不均匀性加剧^{[18],[20]}

$$\left[\frac{\partial \left(\frac{\partial D}{\partial y} \right)}{\partial t} \right] \left/ \left(\frac{\partial D}{\partial y} \right) \right. \geq \frac{\left(\frac{\partial D}{\partial t} \right)}{D} \quad (3.35)$$

利用上面的守恒方程组,这个表示损伤场不均匀性加剧的不等式可以改写为

$$f_D - \dot{\theta} \geq \frac{f}{D} - \frac{v}{D} \frac{\partial D}{\partial y} + D \frac{\frac{\partial^2 v}{\partial y^2}}{\frac{\partial D}{\partial y}} + v \frac{\frac{\partial^2 D}{\partial y^2}}{\frac{\partial D}{\partial y}} \quad (3.36)$$

此处 $f_D = \left(\frac{\partial f}{\partial D} \right)$, $\dot{\theta}$ 是体积应变率。对于小变形,有如下变量间的不等式

$$v \frac{\partial}{\partial y} Z \ll \frac{\partial}{\partial t} Z \quad (3.37)$$

此处 Z 是位移型的变量。根据此不等式,表示损伤场不均匀性加剧的判据不等式就可简化为

$$f_D - \dot{\theta} \geq \frac{f}{D} \quad (3.38)$$

在拉格朗日坐标下,如下判据提供了损伤场不均匀性加剧的下限

$$f_D \geq \frac{f}{D} \quad (3.39)$$

我们将以上两个判据不等式作为发生损伤局部化的临界条件,仔细地推导过程请参考文献[20]。当损伤动力学函数 f 用式(3.22a)表示时,发生损伤局部化的临界条件的下限是

$$D \geq D_c = \left(\frac{1}{\beta(m-1)} \right)^{\frac{1}{m}} \quad (3.40)$$

显然,与复合损伤有关的两个参数(指数 m 和内秉 Deborah 数 β)起着关键性的作用。图 3.20 给出了一个示范性的算例。假设基体是线弹性体,损伤演化律是遵守式(3.22a)的损伤动力学函数 f 。参照一些实验数据,取 $m=2, \beta=100$ 。假设边界条件为一端匀速拉伸,另一端为固定。可以看到,在初始阶段损伤,在一段时间里没有明显的发展,但是到了某一状态,损伤就会在一个位置上集中发展,并导致该处的应变也急剧上升,形成局部化,成为破坏的前兆。从图中可以看到,给出的损伤局部化条件确实比较准确地预言了损伤局部化的发生。

5. 一个应用例子——蠕变破坏的预测

Hayhurst^[21]曾经给出过一批蠕变损伤的实验数据,在一维情况下,所拟合的损伤演化律,此处被取作损伤动力学函数 f

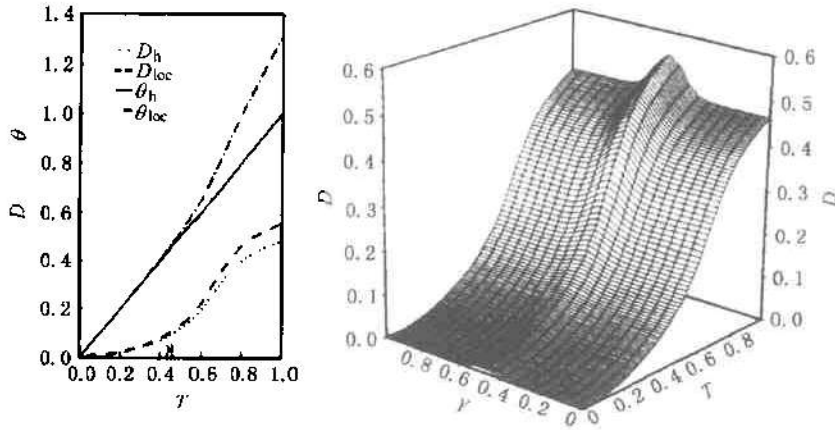


图 3.20 关于损伤局部化条件预言损伤局部化的发生的算例

注: × 为预测的损伤局部化发生的时刻。

$$f = \dot{D} = \Omega(D)g(\sigma) = \frac{1}{(1-D)^\varphi} \frac{\Delta\sigma^x}{(1+\varphi)} \quad (3.41)$$

据此, 设 $D=1$ 时材料发生破坏, Hayhurst 积分上式, 得到破坏时间 $t_f = 1/(\Delta\sigma^x)$ 。事实上, Hayhurst 发现, 明显早于破坏时间 t_f , 试样就发生了急剧变化, 趋于破坏。综合有限元计算和实验观察, 他给出了这个趋于破坏的特征时间 t_r/t_f , 但是, Hayhurst 没有指出哪些物性参数决定这个特征时间和如何定量预测这个特征时间。

根据损伤局部化准则(3.39)式, 损伤局部化发生时的损伤量为 $D_c = 1/(1+\varphi)$, 相应的损伤局部化时间为 $t_c/t_f = 1 - \left(\frac{1}{1+\varphi}\right)^{1+\varphi}$ 。将 Hayhurst 的实验数据拟合成公式(3.22a)的一种修正形式,

$$f = A(1 + \beta(D + D^m))g(\sigma) \quad (3.42)$$

再代入损伤局部化准则, 计算的损伤局部化发生时的损伤量 D_c , 以及相应的参数 m 和 β 也列在 3.1 表中。可以看出, 损伤局部化条件给出的预测值和 Hayhurst 本人根据有限元计算和实验观察提供的特征破坏时间 t_r/t_f , 均表明不能用 $D=1$ 预测破坏。此外, 如前所述, 损伤局部化准则(3.39)式乃是破坏前兆的下限。在表 3.1 中, 损伤局部化准则(3.39)式给出的特征时间的确提前于 Hayhurst 提供的特征破坏时间 t_r/t_f , 而且, 对柔韧的铝和铜, 提前量较多, 这在定性上看来也是合理的。针对我们自己在 3.1.1 节的损伤演化实验, 最近也进行

表 3.1 几种预测准则的预测结果

	Hayhurst 的计算值		按准则(3.39)的预测值		拟合准则(3.42)的计算值		
	φ	t_r/t_f	D_c	t_c/t_f	m	β	D_{c1}
Al	9.5	0.963	0.095	0.650	2.234	144.4	0.098
Cu	6.0	0.831	0.143	0.660	2.261	60.8	0.147
316 钢	1.914	0.713	0.343	0.706	2.386	9.16	0.345

了用损伤局部化的概念预测破坏发生的研究。结果表明,预测结果与对演化过程的观察相当吻合。

6. 小结

(1) 从统计细观损伤力学的基本概念导出,宏观损伤不仅表现为本构方程中的物性(如内变量理论所假设的),它还是依赖于时、空的场变量,并受损伤场演化方程控制。

(2) 损伤动力学函数 f 是连接细观损伤的动力学规律(即成核、扩展和连接)与连续损伤的宏观描述的桥梁。该函数可以用包含微分方程、积分和代数式的一组方程联立求解来获得。

(3) 复合损伤率 f_0 是损伤场不均匀性加剧的根源,无论是内变量理论,还是损伤场理论均导致此结论。而损伤率 f 与损伤不均匀性加剧是间接关系,损伤局部化驱动因素是复合损伤率,而不是损伤率本身的大小,这与一般设想不同。

最后,再一次强调,在统计细观损伤力学中导出形如(3.3)式的数密度演化方程时,采用了局部平均场近似,即在“宏观小、细观大”的体元中,对控制场及细观无序性作了平均化处理^[11]。在实际系统中,细观无序性将导致系统行为的涨落,结果是就统计平均而言,只当损伤局部化的驱动因素超过某个与无序性程度有关的阈值时,才出现真正的损伤局部化。

3.2 疲劳短裂纹群体损伤及其局部化^①

研究表明,在多数金属和合金材料中,疲劳过程第一阶段的损伤程度由短裂纹行为所控制。这里所说的短裂纹,是指其长度与材料的细观组织单元(如晶粒尺度)相当。疲劳短裂纹研究的重要性有两方面:一是传统的理论不能解释短裂纹行为,再是短裂纹损伤阶段可以占据整个疲劳寿命的 80%。

多数关于疲劳短裂纹的研究,包括实验观察和理论分析,往往是以孤立的单条裂纹作为关注的对象。然而,在金属材料中,由短裂纹导致的疲劳损伤往往呈现裂纹群体损伤的特征,即单位面积上的裂纹数随疲劳局次不断增加,大量的短裂纹构成了疲劳累积损伤的程度。

3.2.1 疲劳短裂纹萌生与发展的演化特征

选用一种焊接低碳钢和一种合金结构钢为实验材料,它们的主要化学成分和屈服强度 σ_y 列于表 3.2。两种材料的细观组织均由铁素体和珠光体构成,铁素体的平均晶粒直径 d 亦列于表 3.2。疲劳试验采用图 3.13 所示的三角形试样。当施加确定的外载时,试样三角形段的表面最大拉应力为常数^[10]。这样,可以在较大的等应力区域里观察和测量短裂纹萌生和

^① 参考文献有[5],[22]~[24]。

表 3.2 试验材料的主要化学成分/wt %, σ_y 和 d

材料	C	Si	Mn	Cr	Fe	σ_y /MPa	$d/\mu\text{m}$
焊接钢(A)	0.12	0.55	0.97	/	余	310	22
30CrMnSi(B)	0.30	1.0	0.90	0.90	余	380	18

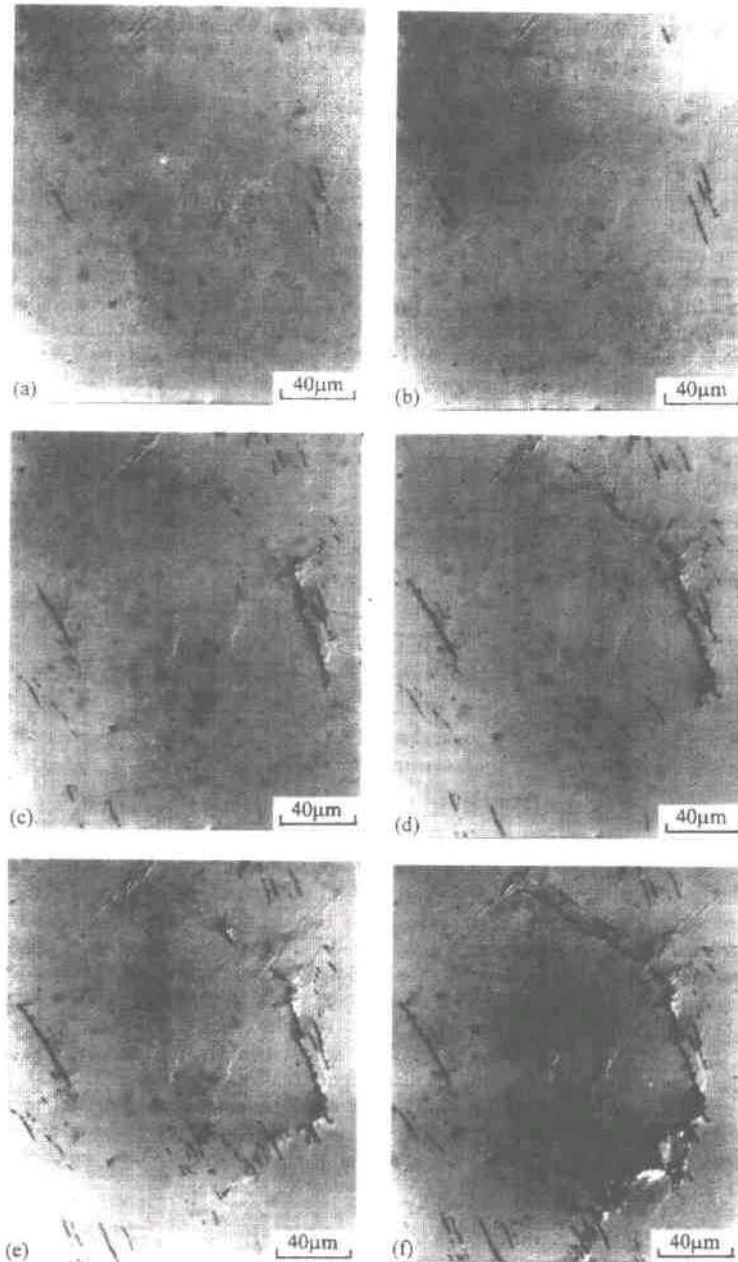


图 3.21 同一视场疲劳短裂纹损伤发展的照片($\sigma_{\max} = 1.1\sigma_y$, 水平方向平行于拉应力方向)

(a) $n=9900$; (b) $n=29700$; (c) $n=69300$; (d) $n=148500$; (e) $n=168300$; (f) $n=207900$

发展的过程。疲劳试验的控制参数为：

频率 $f=8\sim 12\text{Hz}$ ；

应力比 $R=-1$ ；

最大表面拉应力 $\sigma_{\max}=(0.8\sim 1.7)\sigma_y$ 。

对每件试样都设定若干试验间隔，每次间隔停机卸下试样，用光学显微镜观察样品表面并拍照，然后对该样品继续进行同样载荷的疲劳试验，从而跟踪短裂纹的演化过程。此外，还观测了终止试验的样品剖面上的短裂纹形态。

对两种材料试样表面定点跟踪观察表明，疲劳短裂纹萌生于铁素体晶粒区域的滑移带，试样表面单位面积上短裂纹数量随疲劳周次不断增加(如图 3.14 所示)。图 3.21 是对材料 A 的试样的一组定点观察的照片，该试样表面经抛光但未腐蚀。这组照片显示出疲劳短裂纹萌生和发展随疲劳周次变化的图像。图 3.22 示出材料 A 在 $\sigma_{\max}=1.7\sigma_y$ 载荷条件下得到的短裂纹累积数密度随疲劳周次变化的测定结果。注意到累积数达到二分之一时对应着裂纹的平均尺度。图 3.22 表明，在总体上，短裂纹数密度随疲劳周次不断递增，而平均裂纹长度无明显变化。在材料 B 里也观察到同样的趋势(图 3.23)，并注意到，随疲劳周次增加，裂纹长度逐渐集中在 $10\sim 17\mu\text{m}$ 之间，即趋于集中分布在比铁素体平均直径略小的范围。这意味着当短裂纹尖端接近或到达晶粒边界时，生长阻力陡增，导致比晶粒尺度略小的短裂纹数量随疲劳周次发展而增加，明显形成裂纹数密度分布的峰值。从图 3.23 还看到，除了在平均晶粒直径附近存在数密度峰值外，在长度为 $30\mu\text{m}$ 附近还存在一小峰值。初步认为可能是一些裂纹跨越第一个晶粒边界后，受到第二个晶界的阻碍面造成。

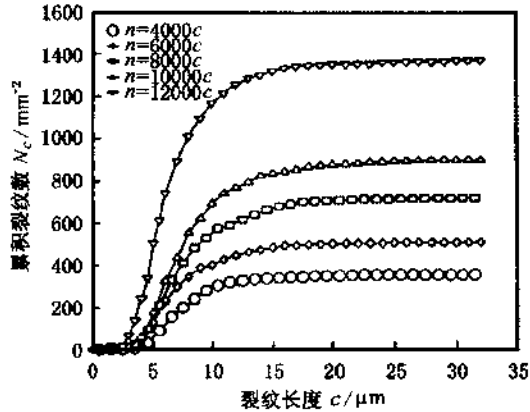


图 3.22 材料 A 短裂纹累积数密度与裂纹尺度及疲劳周次的关系

3.2.2 裂纹数密度守恒方程的理论和计算结果

在短裂纹损伤初期，裂纹之间的相互作用不明显，对此，可以用相空间裂纹数密度演化方程^[1]来描述：

$$\frac{\partial \bar{n}}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{A}\bar{n})}{\partial c} = \bar{n}_N \quad (3.43)$$

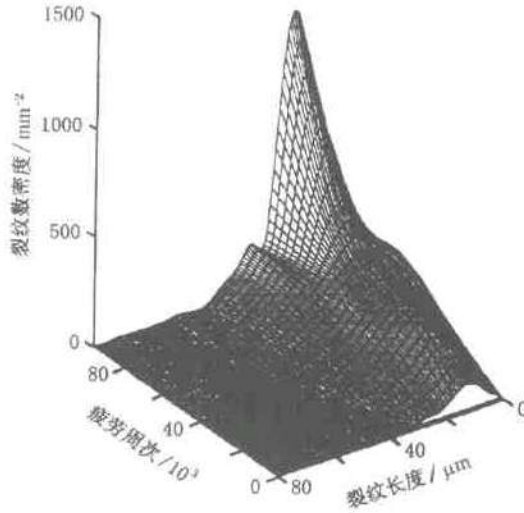


图 3.23 材料 B 短裂纹数密度随裂纹尺度和疲劳周次的变化

式中 \bar{n} 是短裂纹数密度分布函数; \bar{A} 是裂纹扩展速率; \bar{n}_N 是裂纹成核率密度。

短裂纹群体的不断发展构成了损伤累积, 因此, 可以定义一维损伤变量 \bar{D}_1

$$\bar{D}_1 = \bar{\gamma} \int_0^{\infty} \bar{n}(\bar{c}, \bar{t}) \bar{c} d\bar{c} \quad (3.44)$$

式中 $\bar{\gamma}$ 是一无量纲系数。一般地, 存在损伤时的有效应力可表达为

$$\bar{\sigma} = \frac{\sigma_0}{1 - \bar{D}_1} \quad (3.45)$$

其中 σ_0 是 $\bar{D}_1 = 0$ 时的应力。式(3.43)~(3.45)即为本问题的基本方程, 它们的无量纲形式为

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial (An)}{\partial c} = N_g n_N \quad (3.46)$$

$$D_1 = \gamma \int_0^{\infty} n c d c \quad (3.47)$$

$$\sigma = \frac{1}{1 - D_1} \quad (3.48)$$

式中 $\gamma = \bar{\gamma} n^* d^2$, $N_g = \frac{d n_N^*}{A^* n^*}$, $\sigma = \frac{\bar{\sigma}}{\sigma_0}$, $t = \frac{\bar{t} A^*}{d}$; $c = \frac{\bar{c}}{d}$, $A = \frac{\bar{A}}{A^*}$, $n_N = \frac{\bar{n}_N}{n_N^*}$, $n = \frac{\bar{n}}{n^*}$, $D_1 = \bar{D}_1$; d 为铁素体晶粒平均直径; A^* 为裂纹特征速率; n_N^* 为裂纹特征成核率; n^* 为裂纹特征数密度。初始条件和边界条件为

$$c = 0 \text{ 时 } n = 0 \quad (3.49)$$

$$t = 0 \text{ 时 } n = D_1 = 0, \sigma = 1 \quad (3.50)$$

另外, 依据已有的实验结果和相关的理论, 我们设定裂纹扩展速率 A 为如下形式

$$A = \begin{cases} (1-c)(m\sigma - 1) & c \leq 1 \\ c(m\sigma - 1) & c > 1 \end{cases} \quad (3.51)$$

式中 $m = \sigma_0 / \sigma_1^*$, σ_1^* 为裂纹临界扩展应力; 并且设定裂纹成核率 n_N 为

$$n_N = c^2(m'\sigma - 1)\exp(-c) \quad (3.52)$$

式中 $m' = \sigma_0/\sigma_2^*$, σ_2^* 为裂纹成核临界应力。

图 3.24 是计算得到的损伤随时间变化的结果。可见损伤程度越高, 损伤发展的速率越快。进一步的分析得出 dD_1/dt 与 D_1 存在线性关系, 即

$$\frac{dD_1}{dt} = \kappa D_1 + \omega \quad (3.53)$$

从而损伤与时间的依赖关系可以写为

$$D_1 = \frac{\omega}{\kappa} [\exp(\kappa t) - 1] \quad (3.54)$$

式中 κ 和 ω 为拟合系数, 对于所讨论的 $N_g=1.0, m=2.0$ 的情况, $\kappa=1.06, \omega=0.012$ 。

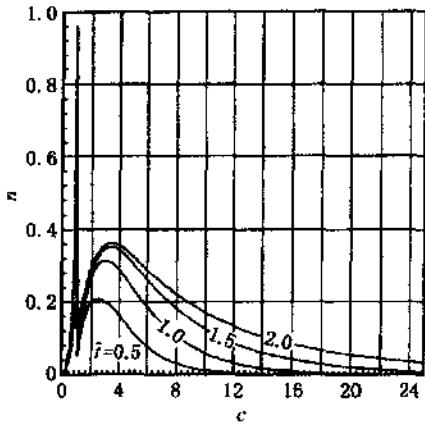


图 3.24 裂纹数密度演化的模拟结果
($N_g=1, m=2$)

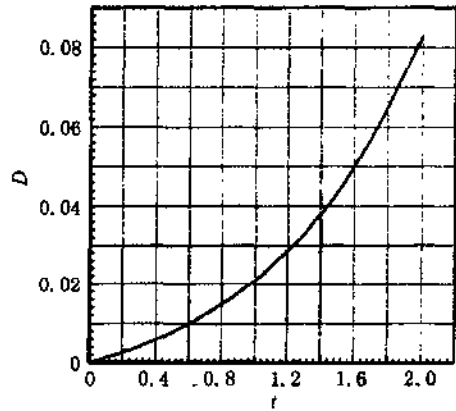


图 3.25 损伤随时间演化的模拟结果
($N_g=1, m=2$)

图 3.25 和图 3.26 是对同一条件下计算结果的另一种表达, 即裂纹数密度与裂纹长度和时间(疲劳周次)的关系。通过将无量纲单位变换为物理单位, 便可对计算结果与实验结果进行比较。对应关系为

$$c = 1 \text{ 对应于 } \bar{c} = d = 18\mu\text{m}$$

$$n = 1 \text{ 对应于 } \bar{n} = 1000/\text{mm}^2$$

$$t = 1 \text{ 对应于 } \bar{t} = 13600 \text{ 周}$$

可以看出, 在 $c=1$ 即平均晶粒直径附近出现了裂纹数密度的峰值; 同时, 在 $30\mu\text{m} \sim 40\mu\text{m}$ 之间形成一小峰值, 两个峰值的位置以及结果整体特征(图 3.26)均与实验结果(图 3.23)基本吻合, 表明所采用的模型以及对 A 和 n_N 的设定可以描述短裂纹损伤初始阶段裂纹群体演化的特征。

3.2.3 短裂纹演化行为的计算机模拟

为了进一步描述短裂纹萌生、长大和汇合的整个过程, 我们采用计算机模拟技术仿真短

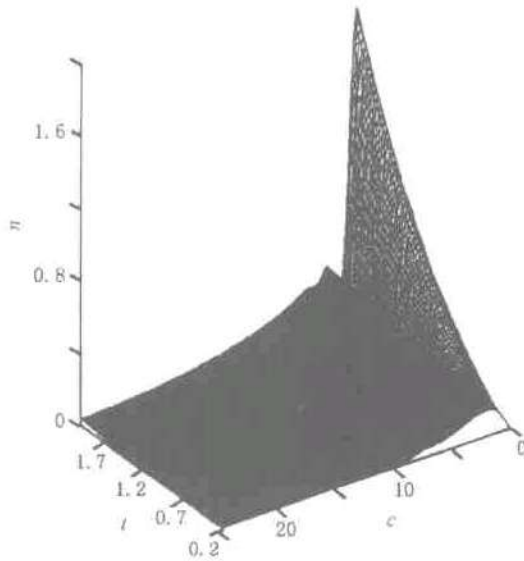


图 3.26 裂纹数密度演化计算结果的三维表示

裂纹群体演化特征。模拟中计及了晶界对短裂纹生长的阻碍作用和裂纹取向的分布特征。

首先,在模拟中构造了六边形的晶粒背景(图 3.27(a)),并作如下规定:

(1) 裂纹随机产生于晶粒阵列中,初始产生的裂纹长度不超过晶粒尺度,在晶粒内裂纹的长度随机分布。

(2) 每个时间步产生相同数量的裂纹,已产生的裂纹以与自身长度成正比的速率生长。

(3) 裂纹端头到达晶界时该裂纹停止生长。当裂纹的长度超过晶粒尺度的 3 倍,则晶界不再阻碍裂纹扩展。

(4) 当相邻裂纹端头的间距 x 满足下列的连接条件时,二者将发生汇合:

$$x \leq c_1 + c_2 - \sqrt{c_1^2 + c_2^2} \quad (3.55)$$

式中 c_1, c_2 分别为相邻裂纹的长度。

其次,依据实验测量和取向因子分析的结果,裂纹取向分布的概率 Q 可表达为^[25]

$$Q = \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} S(\alpha) d\alpha \quad (3.56)$$

式中 α 为裂纹在试样表面的迹线与拉应力方向的夹角,其分布范围为 $45^\circ \sim 135^\circ$; $S(\alpha)$ 是裂纹面的取向因子。

模拟中每个时间步产生的随机裂纹按式(3.56)的概率取值控制裂纹的取向分布。图 3.27(a)~(f)是一次模拟的若干阶段,显示出逼近实验观察到的裂纹萌生、长大、汇合的演化过程。最后由主裂纹的扩展和连接导致裂纹贯穿整个截面(图 3.27(f))。

对于模拟结果,我们采用两个参数以刻画短裂纹萌生、扩展的群体行为。第一个参数是贯穿截面裂纹路径的分形维数 D_F ,并采用如下的定义^[26]:

$$\lg L = \lg L_0 - (D_F - 1) \lg \eta \quad (3.57)$$

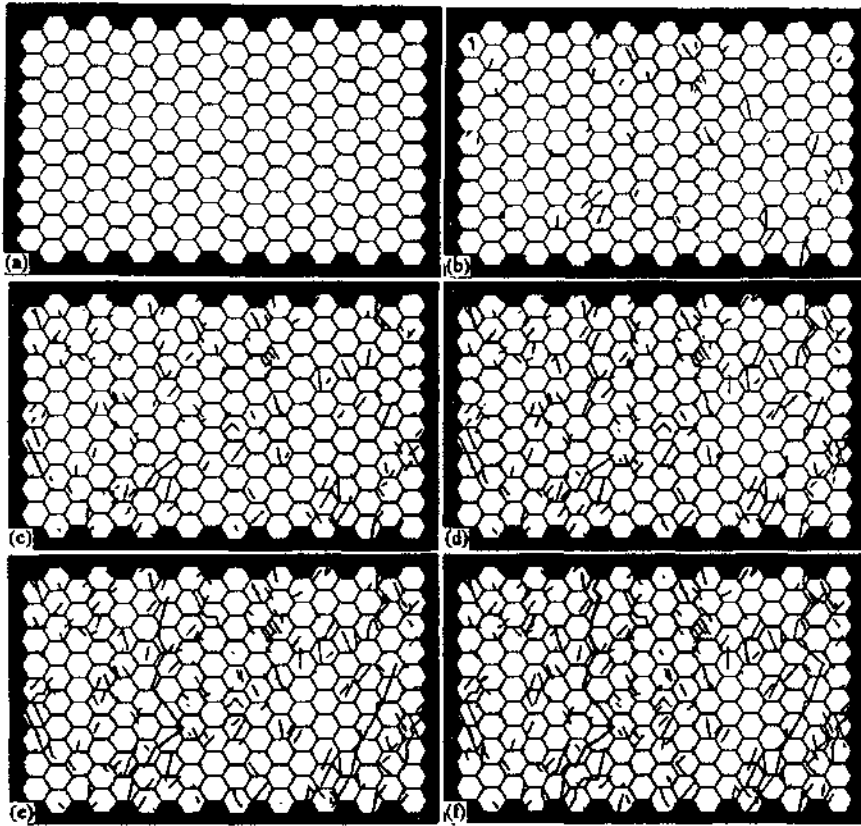


图 3.27 短裂纹演化过程的模拟显示

(a) 初始晶粒背景, 时间步=0; (b) 晶粒内随机产生裂纹, 时间步=3; (c) 裂纹开始跨越晶粒, 时间步=9; (d) 形成若干主裂纹, 时间步=10; (e) 主裂纹生长和连接, 时间步=11; (f) 主裂纹贯穿整个截面, 时间步=12

式中 L 是所测得的长度; L_0 为常数; η 是无量纲测量标尺。若 $\lg L$ 与 $\lg \eta$ 线性相关, 则该裂纹路径具有自相似性, 相应的分维数值即可由该直线的斜率给出。

第二个参数是截面被裂纹贯穿时的临界指数 P_c 。其定义引自逾渗的概念, 即断裂时所有裂纹占据的像素点 A_c 与总像素点 A_t 之比:

$$P_c = \frac{A_c}{A_t} \quad (3.58)$$

图 3.27(f) 是一次模拟的终态, 即主裂纹贯穿整个截面的图像。对应这样的一次模拟结果, 可按上述的定义计算相应的 P_c 值和裂纹路径的 D_F 值。为了考察 P_c 和 D_F 的分布特征, 我们进行了 700 次模拟, 从而得到 P_c 值和 D_F 值各 700 个数据, 图 3.28 和图 3.29 分别是二者的分布结果。从图 3.28 看出, D_F 的数值分布区间较小, 峰值明显, 平均值为 1.041。这一数值接近实验测量得到的结果^[4]。这种分维特征反映出晶界对裂纹生长的阻碍作用造成裂纹路径的曲折性。图 3.29 中 P_c 的分布特征明显不同于前图。 P_c 值发生在较宽的分散带里并近似呈正态分布, 其平均值为 2.65%, 最大和最小的 P_c 值之比为 2.6, 发生在峰值的次数仅为 5%。这一结果表明, 由短裂纹损伤发展导致损伤局部化是一种位形敏感的过程^[25]。这

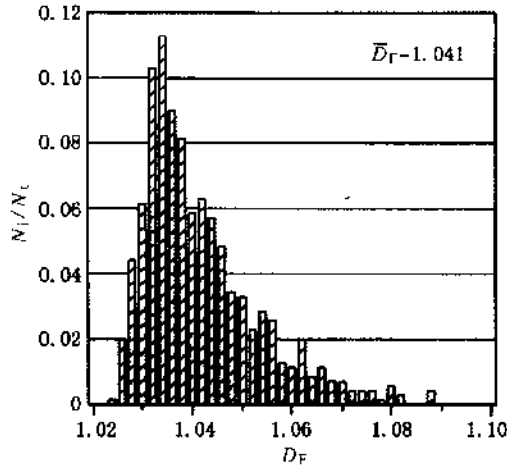


图 3.28 分形维数 D_F 与 N_i/N_c 的关系, N_i : 对应的次数, N_c : 总次数(700)

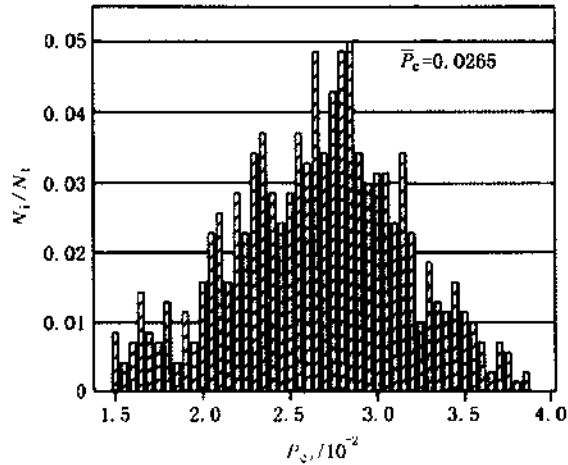


图 3.29 临界指数 P_c 与 N_i/N_c 的关系, N_i : 对应的次数, N_c : 总次数(700)

就是说,对于某种特定的短裂纹位形构成状态,损伤总量较小即可发生裂纹贯穿;而对于另一极端情形的短裂纹位形构成,损伤总量为前者的 2.6 倍才发生破坏。可以认为,裂纹的扩展和汇合与其位形状态的密切相关性是短裂纹损伤群体演化导致损伤局部化过程的重要特征。

3.2.4 裂纹群体损伤演化特征分析

考虑初始裂纹数密度 $n(c, 0) = 0$ 的情况,并令裂纹起始扩展长度阈值为 0,无量纲裂纹数密度演化方程(3.46)具有理论解^[13]:

$$n(c, t) = \frac{1}{A(c)} \int_{\eta(c, t)}^c N_g n_N(\hat{c}) d\hat{c} \quad (3.59)$$

其中, $\eta(c, t)$ 的含义为: 设想 $t=0$ 时刻存在一条尺度为 $\eta(c, t)$ 的裂纹, 此裂纹按速率 $A(c)$ 扩展, 则至 t 时刻裂纹尺度扩展到 c 。在以下的分析中, 裂纹扩展速率和裂纹成核率被设定为

$$A(c) = \begin{cases} 1 - (1 - A_d)c & (c \leq 1) \\ dc & (c > 1) \end{cases} \quad (3.60)$$

$$n_N = \begin{cases} 1 - c/2 & (c \leq 2) \\ 0 & (c > 2) \end{cases} \quad (3.61)$$

式中 A_d 为 $c=1$ 时的裂纹扩展速率, 即裂尖达到晶界时的速率; d 表示材料晶粒的平均尺度。

依据式(3.60)和(3.61)的设定, 可以由式(3.46)计算得到 $n(c, t)$ 随 c 的分布。图 3.30 即为不同时刻 n 与 c 的关系, 同时表明短裂纹群体演化过程存在一“饱和”分布(见图 3.30

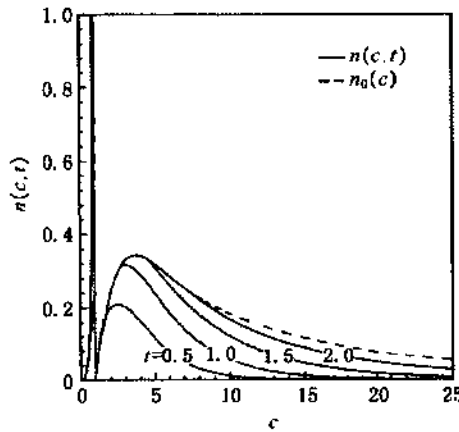


图 3.30 不同时刻 $n(c, t)$ 随 c 的变化 ($A_d=0, d=1$)

中虚线)。这意味着, 随疲劳进程的发展, 裂纹数密度分布逐渐逼近“饱和”分布。为分析方便, 记

$$\alpha = \int_0^{\infty} N_g n_N(c) dc \quad (3.62)$$

$$D_0 = \int_0^{\infty} n(c, t) dc = \alpha t \quad (3.63)$$

式中 D_0 即为裂纹总数。记 c^* 为 t 时刻裂纹分布收敛于“饱和”分布的最大裂纹尺度, 即 t 时刻 $c < c^*$ 区域裂纹数密度收敛于稳态曲线(饱和); 并记相应的非饱和区裂纹总数为 D_0^* 。

注意到 c^* 亦为 $t=0$ 时长度为零的裂纹按 $A(c)$ 规律扩展至 t 时刻的长度, 有

$$\frac{dc^*}{dt} = A(c^*) = \begin{cases} 1 - (1 - A_d)c^* & (c^* \leq 1) \\ dc^* & (c^* > 1) \end{cases} \quad (3.64)$$

由上式解得

$$c^* = \begin{cases} \frac{1}{1 - A_d} \{1 - \exp[-(1 - A_d)t]\} & (t \leq t_0) \\ \beta \exp(dt) & (t > t_0) \end{cases} \quad (3.65)$$

式中 $\beta = A_d^{d/(1-A_d)}$, $t_0 = \frac{1}{d} \ln\left(\frac{1}{\beta}\right)$ 。

尽管由式(3.46)及相应的给定条件,可以得到裂纹数密度演化特征,然而,这还不能确定短裂纹阶段如何向局部化(即主裂纹损伤)转变。一般地,短裂纹阶段的终止和长裂纹阶段的开始可以依据出现具有临界尺度(c_{cr})的裂纹来表征。因此,需要知道作为边界值的最大裂纹尺度 c_{max} 。当 $c_{max} > c_{cr}$,系统进入长裂纹局部化损伤阶段。以下讨论三种情况。

情况 1 令饱和区上界值 c^* 为短裂纹损伤系统的最大裂纹尺度 c_{max} ,即 $c_{max} = c^*$ 。此情况意味着在 $c < c^*$ 区域,裂纹数密度分布达到稳定态。满足 $c^* = c_{max} = c_{cr}$ 的条件即指有一条初始长度为 0 的裂纹发展到临界尺度 c_{cr} 。 c_{max} 可表示为

$$c_{max} = c^* = \begin{cases} \frac{1}{1-A_d} \{1 - \exp[-(1-A_d)t]\} & (t \leq t_0) \\ \beta \exp(dt) & (t > t_0) \end{cases} \quad (3.66)$$

将式(3.63)代入式(3.66),得

$$c_{max} = \begin{cases} \frac{1}{1-A_d} \left[1 - \exp\left(-\frac{1-A_d}{\alpha} D_0\right) \right] & (t \leq t_0) \\ \beta \exp\left(\frac{dD_0}{\alpha}\right) & (t > t_0) \end{cases} \quad (3.67)$$

上式反映了 c_{max} 与 A_d 和 d 的关系。显然存在 $c_{cr} > 1$,这样,由式(3.66)可得短裂纹演化系统适用的时间上界:

$$t_{cr} = t|_{c_{max}=c_{cr}} = \frac{1}{d} \ln\left(\frac{c_{cr}}{\beta}\right) \quad (3.68)$$

图 3.31 显示出 $c_{cr} = 10$ 的计算结果,表明临界转变时间 t_{cr} 随 A_d 和 d 的减小而增加,即小晶粒和晶界阻力较强的材料具有较高的短裂纹群体损伤容限。

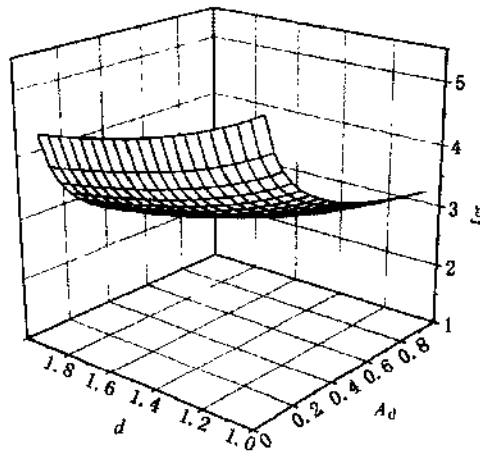


图 3.31 情况 1: t_{cr} 随 A_d 和 d 的变化

情况 2 c_{max} 的判据为 $\int_{c_{max}}^{\infty} n(c)dc = 1$ 。这意味着在损伤区域里至少有一条裂纹其长度大于 c_{max} 。令 t^* 为满足 $c^* = c_{max} \geq c_{cr}$ 的时刻。在 t^* 时刻,且临界裂纹长度 c_{cr} 不小于 2,则非饱

和区裂纹总数为

$$\begin{aligned}
 D_0^* &= \alpha t^* - \int_0^{c_{cr}} \left[\frac{1}{A(c)} \int_0^c N_g n_N(\hat{c}) d\hat{c} \right] dc \\
 &= \alpha t^* - N_g \left(\int_0^1 + \int_1^2 + \int_2^{c_{cr}} \right) \left[\frac{1}{A(c)} \int_0^c n_N(\hat{c}) d\hat{c} \right] dc \\
 &= \alpha t^* - N_g \left\{ \frac{24A_d - 15A_d^2 + 4(4A_d - 3)\ln A_d - 10}{16(1 - A_d)^3} + \frac{5}{8d} + \frac{1}{d} \ln \frac{c_{cr}}{2} \right\} \quad (3.69)
 \end{aligned}$$

以下分别讨论 $D_0^* < 1$ 和 $D_0^* > 1$ 两种情形。

(1) 当 t^* 时刻非饱和区裂纹总数 D_0^* 小于 1 时, 由裂纹数密度守恒可得系统失效时间:

$$t_{cr} = t^* + \frac{1}{\alpha}(1 - D_0^*) = \frac{N_g}{d\alpha} \ln \frac{c_{cr}}{2} + \zeta \quad (3.70)$$

式中

$$\zeta = \frac{1}{\alpha} \left[1 + N_g \frac{24A_d - 15A_d^2 + 4(4A_d - 3)\ln A_d - 10}{16(1 - A_d)^3} + \frac{5N_g}{8d} \right]$$

由式(3.70)可解得 t 时刻最大裂纹长度 c_{max} 与裂纹总数 D_0 之间的关系:

$$c_{max} = 2 \exp \left[\frac{d}{N_g} (D_0 - \zeta) \right] \quad (3.71)$$

图 3.32 表示此情况下 t_{cr} 随 A_d 与 d 的变化 ($c_{cr}=10$)。与图 3.31 相似, 当 A_d 与 d 的值变小, t_{cr} 值变大。

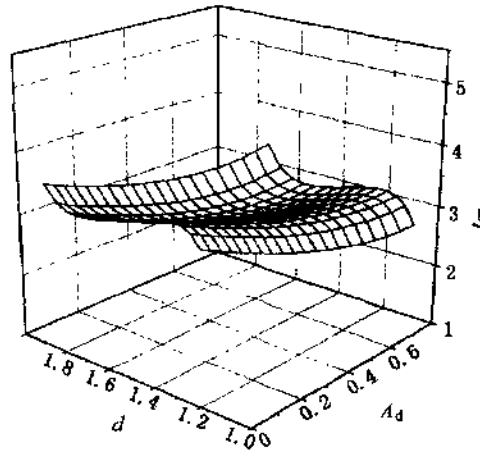


图 3.32 情况 I: t_{cr} 随 A_d 和 d 的变化

(2) 当 t^* 时刻非饱和区裂纹总数 D_0^* 大于 1 时, 由裂纹数密度守恒可得系统失效时间:

$$\tilde{t}_{cr} = t^* - \frac{1}{\alpha}(D_0^* - 1 + \tilde{D}_0) \quad (3.72)$$

式中

$$\tilde{D}_0 = \int_{c^*, t_{cr}}^{c_{cr}} \left(\frac{1}{A(c)} \int_0^c N_g n_N(\hat{c}) d\hat{c} \right) dc - (D_0^* |_{t=t_{cr}} - 1) \quad (3.73)$$

以上二式联立可得关于系统时间的超越方程。在计算中注意到一般不出现 $D_0^* > 1$ 的情况。

情况3 假设 c_{\max} 的判据为: $n(c_{\max}, t)|_{c=c_{\max}} \leq n_{cr}$

$$n_{cr} = \left[\frac{1}{A(c)} \int_0^t N_g n_N(\hat{c}) d\hat{c} \right]_{c=c_{cr}}$$

考虑临界裂纹长度 c_{cr} 不小于 2 的情况, 根据 η 的定义, 有

$$\eta(c_{cr}, t) = \begin{cases} c_{cr} \exp(-dt) & t \leq \frac{1}{d} \ln c_{cr} \\ \frac{1}{1-A_d} \{1 + \tilde{\beta} \exp[(1-A_d)t]\} & t > \frac{1}{d} \ln c_{cr} \end{cases} \quad (3.74)$$

式中 $\tilde{\beta} = -A_d c_{cr}^{-(1-A_d)/d}$ 。从上式可以看出, 只要 $t < \frac{1}{1-A_d} \ln \left[\frac{-1}{\tilde{\beta}} \right]$, 裂纹数密度在 c_{cr} 外就不会饱和。根据式(3.46)的理论解(式(3.59))可得

$$n(c_{cr}, t) = \left[\frac{1}{A(c)} \int_0^t N_g n_N(\hat{c}) d\hat{c} \right]_{c=c_{cr}} = \begin{cases} \frac{N_g(2-\eta)^2}{4c_{cr}} & t \geq \frac{1}{d} \ln \frac{c_{cr}}{2} \\ 0 & t < \frac{1}{d} \ln \frac{c_{cr}}{2} \end{cases} \quad (3.75)$$

由上式, 考虑 $t > \frac{1}{d} \ln \frac{c_{cr}}{2}$ 的情况, 可得 $\eta_{cr} = \eta(c_{cr}, t)|_{n=n_{cr}} = 2 \left(1 - \sqrt{c_{cr} n_{cr} / N_g} \right)$, 代入式(3.74), 得系统失效时间

$$t_{cr} = \begin{cases} \frac{1}{d} \ln \left[\frac{c_{cr}}{2} \frac{1}{1 - \sqrt{c_{cr} n_{cr} / N_g}} \right] & c_{cr} n_{cr} \leq N_g / 4 \\ \frac{1}{1-A_d} \ln \left[\frac{2(1-A_d)(1 - \sqrt{c_{cr} n_{cr} / N_g}) - 1}{\tilde{\beta}} \right] & c_{cr} n_{cr} > N_g / 4 \end{cases} \quad (3.76)$$

图 3.33 表示这种情况下 t_{cr} 随 A_d 与 d 的变化 ($c_{cr} = 10, n_{cr} = 0.1$)。图 3.33 与图 3.31 和图 3.32 具有同样的趋势, 即 t_{cr} 随 A_d 与 d 的减小而增加。

根据式(3.76), 亦可推导出 $c_{\max} - D_0$ 的关系 ($c_{\max} \geq 2$):

$$D_0 = \begin{cases} \frac{\alpha}{d} \ln \left[\frac{c_{\max}}{2} \frac{1}{1 - \sqrt{c_{\max} n_{cr} / N_g}} \right] & c_{\max} n_{cr} \leq N_g / 4 \\ \frac{\alpha}{1-A_d} \ln \left[\frac{2(1-A_d)(1 - \sqrt{c_{\max} n_{cr} / N_g}) - 1}{\tilde{\beta}_1} \right] & c_{\max} n_{cr} > N_g / 4 \end{cases} \quad (3.77)$$

式中 $\tilde{\beta}_1 = A_d c_{\max}^{(1-A_d)/d}$ 。

图 3.34 表示 3 种情况 $D_0 \sim c_{\max}$ 之间的关系。由图 3.34 看出, 裂纹群体中最大裂纹尺度 c_{\max} 随裂纹总数 D_0 的增加呈指数递增。注意到 $D_0 = \alpha t$ (式(3.63)), 图 3.34 亦表示 c_{\max} 随时

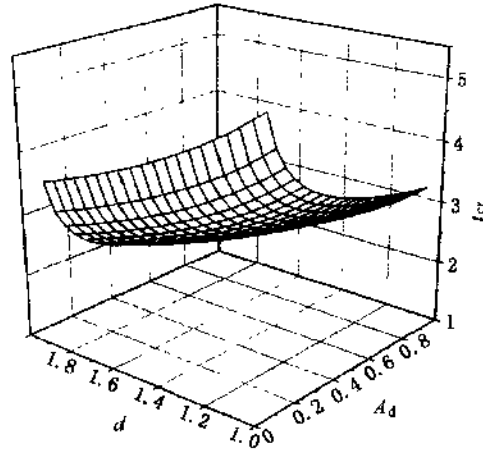


图 3.33 情况 III: t_{cr} 随 A_d 和 d 的变化

间的增加呈指数递增。 c_{cr} 与 c_{max} 有关, 所以当临界裂纹尺度 c_{cr} 较大时, 临界转变时间 t_{cr} 对 c_{cr} 的选取不敏感。此外, 图 3.31~图 3.33 反映了材料性质(由 A_d, d 描述)对转变临界时间 t_{cr} 的影响: t_{cr} 随 d 和 A_d 的减小而增加, 这里 t_{cr} 与材料的疲劳寿命密切相关。当疲劳周次超过 t_{cr} 后, 单条长裂纹成为影响材料疲劳寿命的主要因素, 短裂纹群体演化系统模型不再适用。

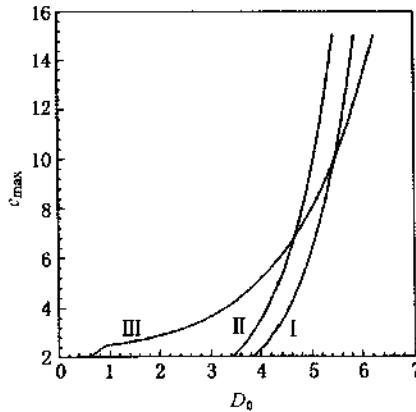


图 3.34 3 种情况 D_0 与 c_{max} 的关系

3.2.5 疲劳短裂纹群体演化的损伤矩分析

为了刻画群体裂纹损伤的程度, 一般地, 可以采用损伤矩系列 D_m 作为参量, 其定义如下:

$$D_m = \gamma \int_0^{\infty} n(c, t) c^m dc \quad (3.78)$$

式中 $m=0, 1, 2, \dots$; γ 是一无量纲参数。容易看出,“0 阶”损伤矩 D_0 与裂纹总数相关;“1 阶”损伤矩 D_1 与裂纹的总长度相关。

1. 0 阶损伤矩

在式(3.46)中,裂纹生长速率 A 只是裂纹长度 c 的函数。然而,在疲劳损伤的不同阶段, A 往往不仅与 c 而且与时间 t 相关。考虑 A 受 c 与 t 独立影响且二者可分离变量,即, $A(c, t) = G(c)T(t)$ 。代入式(3.46),可以得到如下的演化方程

$$\frac{\partial}{\partial t}n(c, t) + T(t) \frac{\partial}{\partial c}[G(c)n(c, t)] = N_g n_N(c) \quad (3.79)$$

解此方程并分析解的结构^[27],得到:当裂纹生长速率 A 与裂纹数密度 n 的分布无关时,解的形式为

$$n(c, t) = \frac{1}{T_0 G(c)} \int_0^c N_g n_N(c') dc' \quad (3.80)$$

式中 T_0 为 $t \rightarrow \infty$ 时 $T(t)$ 的值。注意到 D_0 为裂纹总数,即

$$D_0(t) = \int_0^\infty n(c, t) dc = t \int_0^\infty N_g n_N(c) dc \quad (3.81)$$

在前而所述的实验研究中观察到,裂纹数密度 $n(c, t)$ 随时间(即疲劳周次)单调增加并趋于稳定分布(图 3.23)。由以上分析认为,对此情况,裂纹生长速率主要与裂纹长度和 0 阶损伤矩相关:

$$A = A[c, D_0(t)] \quad (3.82)$$

2. 1 阶损伤矩

1 阶损伤矩 D_1 的定义即为式(3.47),以裂纹数密度演化的思路进行分析,并依据疲劳短裂纹属性设定裂纹速率 A 和裂纹成核率 n_N 的关系式(式(3.60), (3.61)),经过一系列的推演得到^[28]

$$D_1(t) = \begin{cases} [\xi_1 + \xi_2 t + \xi_3 \exp(\bar{A}_d t) + \xi_4 \exp(2\bar{A}_d t) + \xi_5 \exp(dt)] \gamma & t \leq t_0 \\ -\frac{2\gamma t \xi_6}{d} + \frac{\gamma[\exp(dt) - 1](2\xi_6 + \bar{a}d)}{d^2} & t > t_0 \end{cases} \quad (3.83)$$

式中 $\bar{a} = \int_0^\infty N_g c n_N(c) dc$, $\bar{A}_d = 1 - A_d$; $\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4, \xi_5, \xi_6$ 是与 A_d, d, n_N, N_K 等相关的系数; $t_0 = (A_d - 1)^{-1} \ln A_d$ 。

图 3.35 是所得到的计算结果,表明 D_1 随 A_d 和 d 而增加的变化趋势,并显示出 d 的影响更显著。图 3.36 表明 D_1 随 t 呈指数趋势急剧增大。经分析, ξ_6 明显比 $\bar{a}d$ 小;因此,对于 $t > t_0$ 的情况,由式(3.83)有

$$D_1 \approx \frac{\bar{a}\gamma}{d} [\exp(dt) - 1] \quad (3.84)$$

式(3.84)与前述的数值模拟得到的结果(式(3.54))一致,即意味着,一阶损伤矩的率与其自身成线性关系。

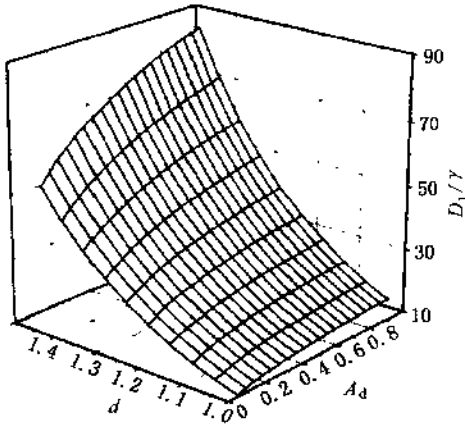


图 3.35 D_1/γ 随 A_d 和 d 的变化 ($t=3.0$)

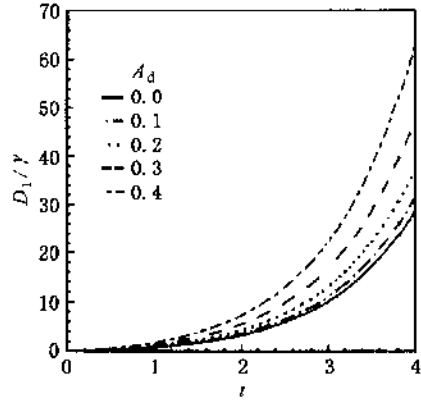


图 3.36 D_1/γ 与 t 的关系 ($d=1$)

3.3 变形局部化形成与微结构演化

变形局部化是金属与合金在承受高速率大应变动态变形(诸如弹丸着靶,爆炸破碎和焊接,动态冲孔,高速切削和成型以及动态拉、压和扭转)过程中经常发生的一种重要变形方式。一旦发生这种变形模式,材料往往会出现突发性的低延性破坏,即在断裂前仅有有限的宏观上的塑性变形。近年来的研究表明,对有些材料,即使在通常加载条件下(如室温拉伸或循环疲劳)有时也会出现这种变形模式。它的特点是塑性应变高度集中于长条形窄带中,一般带宽约在几微米至几百微米之间变化,因试验条件以及材料本身的性质而异。文献中常载有绝热剪切带(adiabatic shear bands)、局部化剪切变形带(localized shear deformation bands)、白色剪切带(white shear bands)以及热塑剪切带(thermo-plastic shear bands),其中以热塑剪切带和局部化剪切带应用较广。

这里首先应当指出的是,由于相同的塑性流变机制,滑移带和剪切带常常容易被混淆。根据大量的研究表明,两者至少有下列两点重要区别:

首先,滑移带常常发生在晶粒内部确定的晶体学平面上,并有确定的晶体学方向;而剪切带则在其带内的某些微观区域内显示出非晶体学的变形特点。剪切带开始形成的最初阶段当然也是从某个晶粒内部的滑移事件开始,并进一步以单滑移或多滑移方式穿过晶界沿剪切方向扩展,最后形成宏观上的剪切带。

其次,由于高速率大应变变形,剪切带内温度升高产生热效应(即热软化),在剪切带形成与发展中起重要作用;而这种热效应对滑移带的形成并非必要。

自从 20 世纪 40 年代变形局部化现象被发现以来,特别是近 20 年来的研究中。力学工作者主要着眼于局部化剪切塑性模型的描述,探讨塑性失稳的临界条件以及演化规律;而材料科学工作者则常常以工程应用为背景,强调局部化剪切形成的条件和微结构特征,以及影响局部化变形的材料因素,从而为优化材料设计,提高工程构件的服役寿命,防止变形局部

化的发生提供实验依据。本文则着眼于后者,将近几年的研究进展简要总结如下。

3.3.1 低碳钢

用于研究的低碳钢^{[29]~[32]}经 850℃保温 30 分钟后空冷,水淬或水淬后 300℃回火处理得到珠光体、马氏体及回火马氏体组织,主要考查材料结构与变形局部化之间的关系。试验是在 Hopkinson 扭杆(SHTB)上进行。平均应变速率为 610、650 和 1500s⁻¹。试样加工成圆轮状,实验段(即受力截面)为薄壁形。有关尺寸和形状以及试验细节可参见文献^[29]。

1. 临界应变

对上述 3 种处理的低碳钢的研究指出,它们存在一个局部化剪切变形产生的应变。即在一定的应变速率下,当受载材料达到确定的应变时,称之为临界应变,局部化剪切变形才可能发生,此时变形从均匀变形向局部化变形转化。测量结果表明:对淬火马氏体钢其临界应变为 0.30,珠光体钢的临界应变为 0.83;而回火组织则居中,临界应变为 0.36。图 3.37 示出了在 3 种处理的钢中观察到的局部化剪切变形的形态,可以看出,变形局部化的发展明显不同。淬火组织(图 3.37(a))的剪切变形发展比较明显,剪切带宽度约为 70~100μm;珠光体组织的剪切带较宽,约为 350~400μm;回火组织则居中,带宽约为 130~150μm 之间。这些结果意味着,局部化剪切变形对材料的强度比较敏感。强度较高,加工硬化能力较低的淬火马氏体钢局部化剪切变形容易发生,剪切带较窄,而回火马氏体钢则次之。比较起来,珠光体钢不容易产生局部化剪切变形,剪切带也较宽。

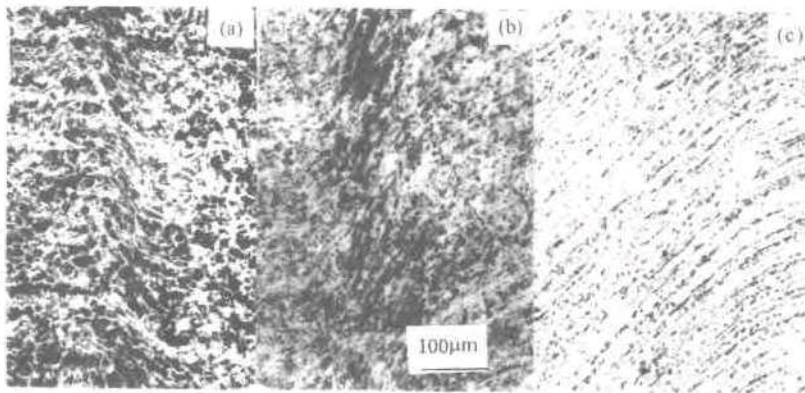


图 3.37 低碳钢中局部化剪切带的形态
(a) 淬火马氏体钢; (b) 回火马氏体钢; (c) 珠光体钢

2. 剪切变形局部化的发展

动态载荷条件下,局部化剪切带的形成与发展是在一个极其短暂的时间内(约几十到几百微秒)完成的,通常很难追踪它的形成与发展的过程。图 3.38 是在改进的 Hopkinson 压杆上对回火马氏体钢局部化剪切变形的发展所观察到的结果。实验发现,材料屈服后仍有一段

较长的加工硬化阶段。约加载到 $550\mu\text{s}$ 时,材料开始塑性失稳,此时平均应变为 0.34,此后材料的承载能力渐渐减小。到 $750\mu\text{s}$ 时局部化变形开始出现,应变为 0.47,剪切带宽度为 $310\mu\text{m}$ (见图 3.38(a))。加载至 $850\mu\text{s}$ 时,局部化变形渐趋明显,剪切带宽变窄(见图 3.38(b))。而到 $890\mu\text{s}$ 时,剪切带宽变为 $100\mu\text{m}$ (见图 3.38(c))。这些结果表明,局部化变形产生后,它有一个发展过程。伴随着变形的进行,局部化渐趋明显,带内应变不断增大,剪切带逐渐变窄。

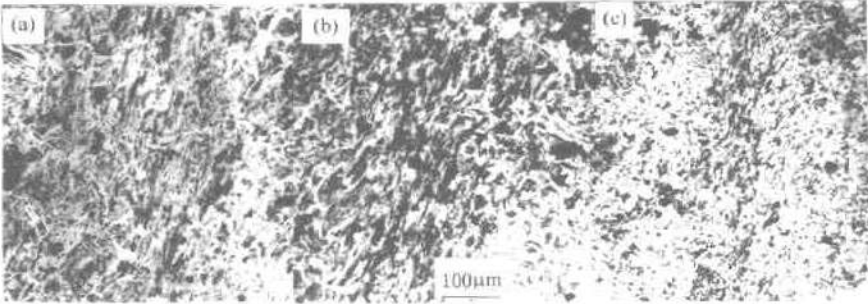


图 3.38 不同加载时间局部化变形的发展
(a) 加载时间 = $750\mu\text{s}$; (b) 加载时间 = $850\mu\text{s}$; (c) 加载时间 = $890\mu\text{s}$

3. 局部化剪切带微结构特征

局部化剪切变形的产生与发展是动态载荷条件下材料应变硬化、应变率硬化和材料软化彼此竞争的结果。材料软化则主要是剪切带内温度升高引起,此外还应包括各种损伤引起材料的软化。材料的软化过程即是材料局部化形成与发展最后导致材料断裂的过程。在此短暂的过程中,剪切带内材料相继发生的一系列极为复杂的包括晶体学的和非晶体学的变形事件,首先是局部化变形形成时某些晶粒的晶体学滑移,而后这些首先启动的滑移系统要么以单滑移,要么以多滑移方式穿过晶界并沿剪切带的长度方向扩展。图 3.39 是在低碳马氏体钢中观察到的一个典型例子。可以看出,来自 A 区的电子衍射斑点敏锐规则,表明此区

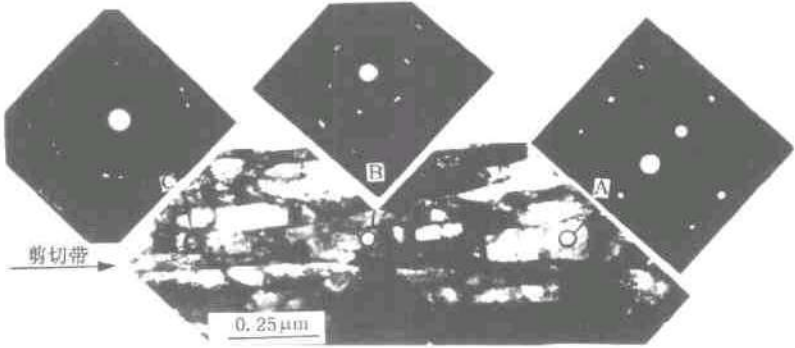


图 3.39 钢中局部化剪切带中晶体学与非晶体学变形特征

内材料的晶体学变形特征,而区域C的衍射为圆环,其上分布着拉长的斑点,表现出非晶体学变形的特征,这是由于高应变速率和大应变下的应变积累在微观上使得带内某些区域(晶粒)产生取向不同的亚结构的结果。此外,从图3.39还可以看出带内位错密度很高,应变分布极不均匀。可以想象,动态载荷下位错活动十分活跃和复杂。下列一组照片显示出界面位错源的启动及位错的动态发射(图3.40(a)),位错运动(图3.41)与位错反应(图3.40(c)),位错胞的形成并沿剪切带方向拉长(图3.39和图3.40(b))以及试样接近断裂时位错胞的崩溃(图3.40(d))。不难看出,位错的发射、增殖与运动在局部化形成与发展中将起到重要作用。剪切带内结构损伤导致材料的软化还表现在微裂纹(或微孔洞)的产生与连接。

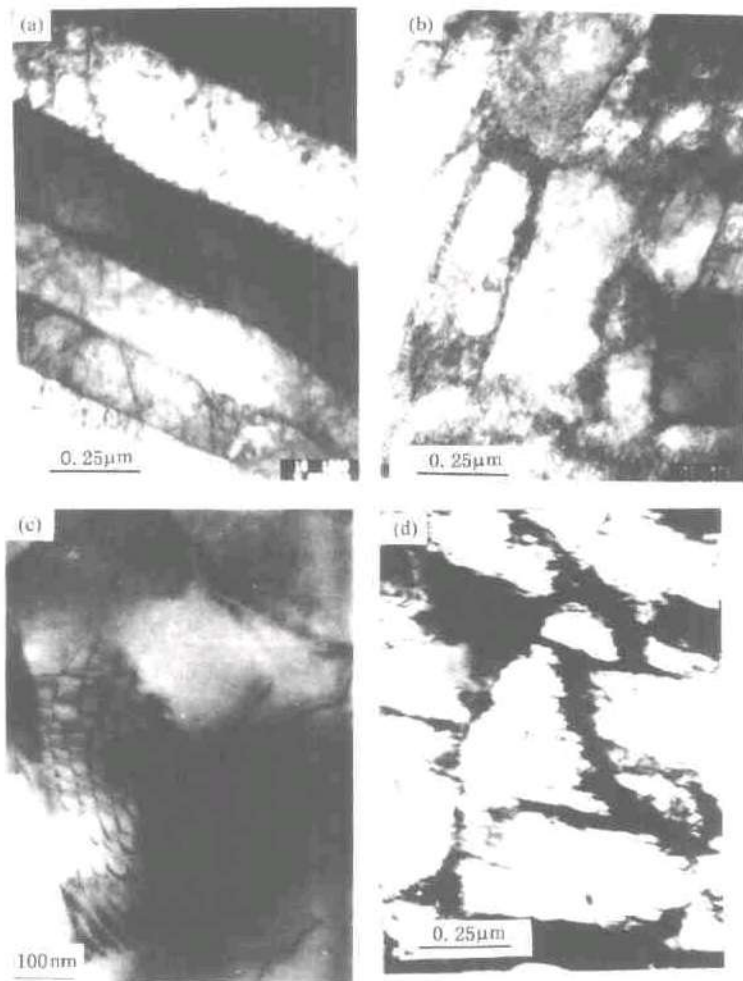


图 3.40 TEM 图像,显示出低碳钢变形局部化过程
 (a) 界面位错源的启动并发射位错; (b) 位错胞的形成并沿剪切方向变形拉长;
 (c) 位错反应 $(1/2[111] + 1/2[1\bar{1}\bar{1}] \rightarrow [100])$; (d) 位错胞的坍塌

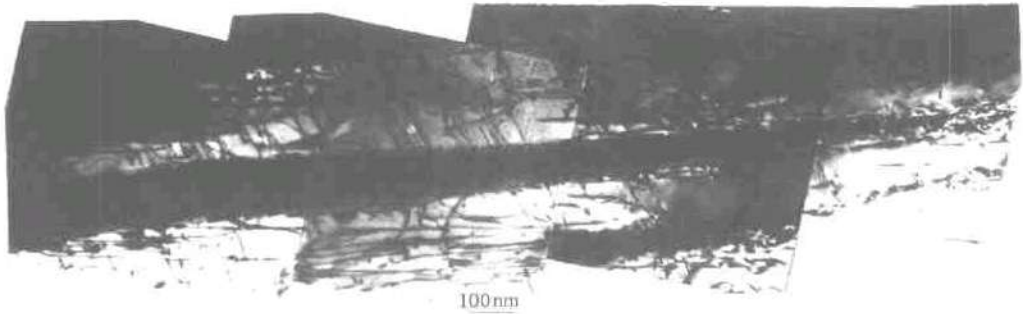


图 3.41 Ti-6Al-4V 合金在动态扭转过程中位错在位错墙间的运动

3.3.2 钛合金

动态载荷下的变形局部化在钛及钛合金^{[33]~[35]}中容易产生,为此,我们选用 Ti-6Al-4V 和 Ti-Al-Zr 合金在改进的 Hopkinson 扭杆和压杆上进行研究。

1. 剪切带和材料失效

动态载荷下材料一旦发生局部化变形,则其承载能力会逐渐降低并最终导致材料沿剪切带断裂,即材料发生失效。前几节的讨论表明,局部化变形形成后有一个进一步发展的过程,即材料软化的过程。在这个过程中,材料在不同层次上表现出物理和力学性质的变化。首先,剪切带温度升高导致材料产生热软化。此外,还应包括微观(位错)层次上的软化。即在动态载荷下各种类型的位错源均可能启动,从而导致位错的动态发射;而在组织结构层次上材料的软化则表现在微裂纹(或微孔洞)的形成、扩展与连接。以上发生在剪切带形成与发展过程中各种层次上的软化事件是彼此关联而又互相促进的。显然,前两者即剪切带内的温升与位错源的启动应该发生在剪切局部化的前期,而随变形局部化的发展必然造成带内微裂纹的形成、扩展与连接,这是导致材料承载能力骤然下降(即材料失效)的主要因素。

图 3.42 显示出了四支 Ti-6Al-4V 合金试样在改进的 Hopkinson 扭杆(SHTB)上以平均应变速率为 310s^{-1} 进行扭转试验获得的应力-应变响应曲线。

试样 1(T938)加载至 $450\mu\text{s}$ (对应于图 3.42 中 1 点),此时刻线没有任何变化,表明试样仍处于均匀变形状态。试样 2 加载至 $550\mu\text{s}$,此时表面刻线开始出现扭折(见图 3.42 中点 2 对应的刻线),表明局部化变形已开始发生。对试样进行高倍观察发现变形已发生局部化,局部化区域的宽度约为 $44\mu\text{m}$,并在局部化区内发现有椭圆形微裂纹,局部化区内最大切应变为 1.07,为平均应变的 5 倍。对试样 3(T9-37)加载至 $650\mu\text{s}$ 时,对应的刻线已出现明显的扭折(见图 3.42 中点 3 对应的图)。微观观察表明,此时局部化变形十分明显,剪切带内的裂纹已开始扩展,靠近裂纹尖端附近的剪切带宽度为 $20\mu\text{m}$,应变高达 2.14。

从应力-应变曲线可以看出(图 3.42 中点 3),此时材料的承载能力(应力)还没有明显降低。而应力跌落到图 3.42 中标有 4 点时,即试样 4(T9-21)加载至 $660\mu\text{s}$ 的时候,剪切带变得更窄,带内裂纹加快扩展并开始聚合(见图 3.43)。此时材料承载能力已降低至临界点

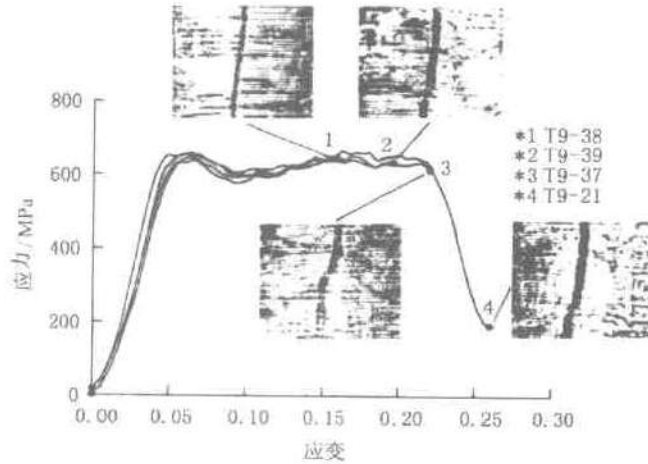


图 3.42 试验合金的应力-应变响应曲线以及不同加载时间对应试样内表面刻线的变形

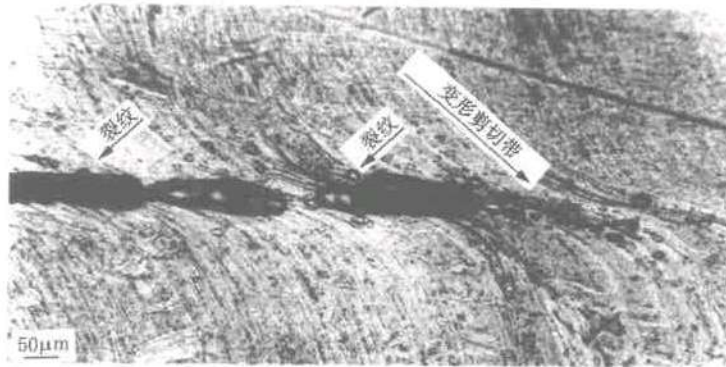


图 3.43 剪切局部化发展后期剪切带内的裂纹扩展与连接

时的三分之一。

从以上观察结果可以看出,动态载荷下变形局部化是一个逐步发展的过程,并伴随材料承载能力的逐渐下降。即剪切局部化开始形成初期并不意味着材料承载能力的完全丧失,而影响材料完全失效的主要因素在于剪切局部化发展后期裂纹的长大和连接。

2. 剪切带与应变突变

对含 Al(4.0%), Zr(1.0%)和 Mo(1.0%)的 Ti 合金进行热处理获得 α 以及 $\alpha+\beta$ 组织。然后加工成圆柱状($\phi 4 \times 4\text{mm}$)试样在 Hopkinson 压杆上进行高速冲击试验。研究结果指出,当应变率较低时,试样仅出现一定程度的墩粗现象,即在压缩方向上变短,而中心部位沿径向向外凸出。当应变率增加到一定值时便可观察到形变剪切带,再进一步提高应变,变形更加集中,局部化渐趋明显,当应变达到一定数值时便可观察到“白色”剪切带,此时带内已出现裂纹的连接,可以认为此应变率为产生“白色”剪切带的临界应变率。图 3.44 是 α 以

及 $\alpha+\beta$ 两种处理的合金动态冲击时试样应变随应变率变化的曲线。可以看出,产生“白色”剪切带时有一个应变突变。此应变跃迁刚好对应“白色”剪切带的形成。它意味着材料内部结构发生明显变化,导致塑性应变的骤然变化(升高)。从功能转化的角度来理解,即外界(Hopkinson 冲击杆)对系统(试样)做功,其中绝大部分功被系统吸收,并以晶格畸变形式储存于剪切带内。试验观察表明“白色”剪切带的形成刚好对应该能量吸收峰的出现,从图3.44可以看出 $\alpha+\beta$ Ti 合金的峰出现在应变率 $1850s^{-1}$ 前后,而 α -Ti 合金的能量吸收峰为 $2000s^{-1}$,它们正是两种合金“白色”剪切带形成的临界应变率。

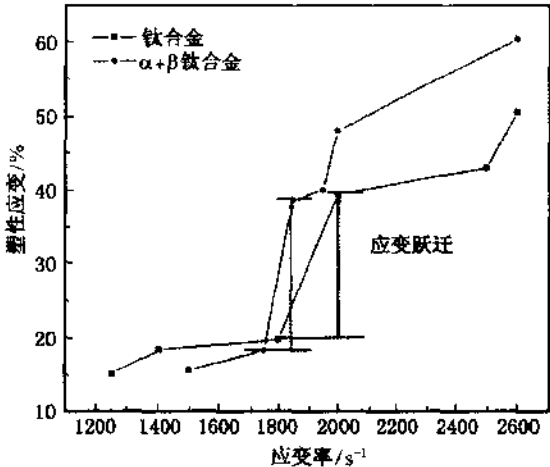


图 3.44 Ti-合金动态冲击应变随应变率变化曲线, 注意应变跃迁对应“白色”剪切带的形成

3.3.3 Al-Li 合金

选择 8090Al-Li 合金^[36]并进行峰时效、欠时效、过时效及自然失效处理后加工成动态冲击试样,研究了变形局部化的演化过程。

1. 形变剪切带与“白色”剪切带

在钛合金中已观察到两种类型的剪切带,即形变带和“白色”剪切带,在 Al-Li 合金中又进一步证实这两种剪切带的存在。图 3.45 是在过时效 8090Al-Li 合金中观察到的形变剪切带和“白色”剪切带。研究表明,变形局部化过程中,形变剪切带形成在先,而后进一步发展便形成“白色”剪切带。换句话说,无论是形变剪切带还是“白色”剪切带,它们是在动态载荷下材料局部化发展不同阶段形成的,本质上没有差别。对“白色”剪切带结构的 TEM 观察也未发现相变的迹象,剪切带内温升的计算值远低于该合金的相变温度。

无论是 Al-Li 合金还是 Ti-合金,研究均一致表明,它们的形成都对应一定的应变和应变率。换句话说,对局部化变形敏感的材料,在一定的应变率下(高应变率),应变到一定程度(大应变)下才能产生形变剪切带或“白色”剪切带。例如,对欠时效 8090Al-Li 合金,形变剪

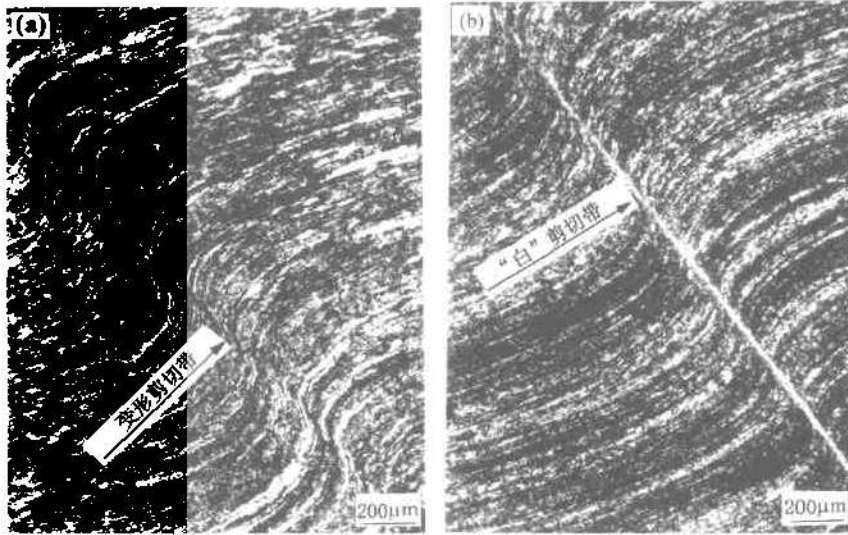


图 3.45 过时效 8090Al-Li 合金中的剪切带

(a) 变形剪切带; (b) “白色”剪切带

切带形成的临界应变率为 2000s^{-1} , 临界应变为 0.17。在此应变率下进一步变形, 当应变增大到 0.21 时便产生“白色”剪切带。对峰值时效合金, 剪切带形成的应变率为 1600s^{-1} , 变形剪切带的形成的临界应变为 0.14, 而“白色”剪切带的临界应变为 0.17。从以上的结果还可以看出, 对同一材料, 强度高的材料剪切带形成的临界应变较小。这与 Ti-合金中获得的结果完全一致。

2. 剪切带—动态再结晶

某些金属与合金在高应变速率 ($\dot{\gamma}/10^3\text{s}^{-1}$) 下经受大应变 ($\gamma > 3$) 时, 在局部化剪切带内常常会出现微米量级的低应变等轴晶粒。研究表明, 这种组织是再结晶的结果。至于这种细小的无畸变晶粒是变形局部化过程中形成的(动态再结晶)还是剪切带形成之后(即静态再结晶)产生的, 目前尚很难确定。

有两种理论模型, 即应变诱发晶界迁移模型(SIBM)和亚晶聚合(SGCM)模型, 常被用来描述再结晶的过程。

对峰时效、欠时效和过时效以及自然时效四种 8090Al-Li 合金的 TEM 观察, 均发现在剪切带的中心出现这种再结晶晶粒。图 3.46 则是对过时效 8090Al-Li 合金经动态冲击压缩 ($\dot{\gamma} \sim 2.0 \times 10^3\text{s}^{-1}$, 剪切带内 $\gamma = 1.5$) 后的 TEM 观察结果。图 3.46(a) 是合金基体的 TEM 图像, 合金基体变形后产生了胞状结构, 对应的椭圆形电子衍射斑点表明试样经受一定程度的变形。当接近于剪切带时, 则显示出具有明确边界的胞状结构并沿剪切带方向拉长, 对应的衍射斑点已拉长近于环状, 如图 3.46(b), 而图 3.46(c) 则是剪切带中心的一个视场, 可以看出拉长的胞状结构已不复存在, 代之则是具有较低位错密度的细小等轴晶粒(晶粒直径约为 $2\mu\text{m}$), 其电子衍射谱为衍射环, 上面分布着断续的斑点。这种细小的晶粒结构很可能是

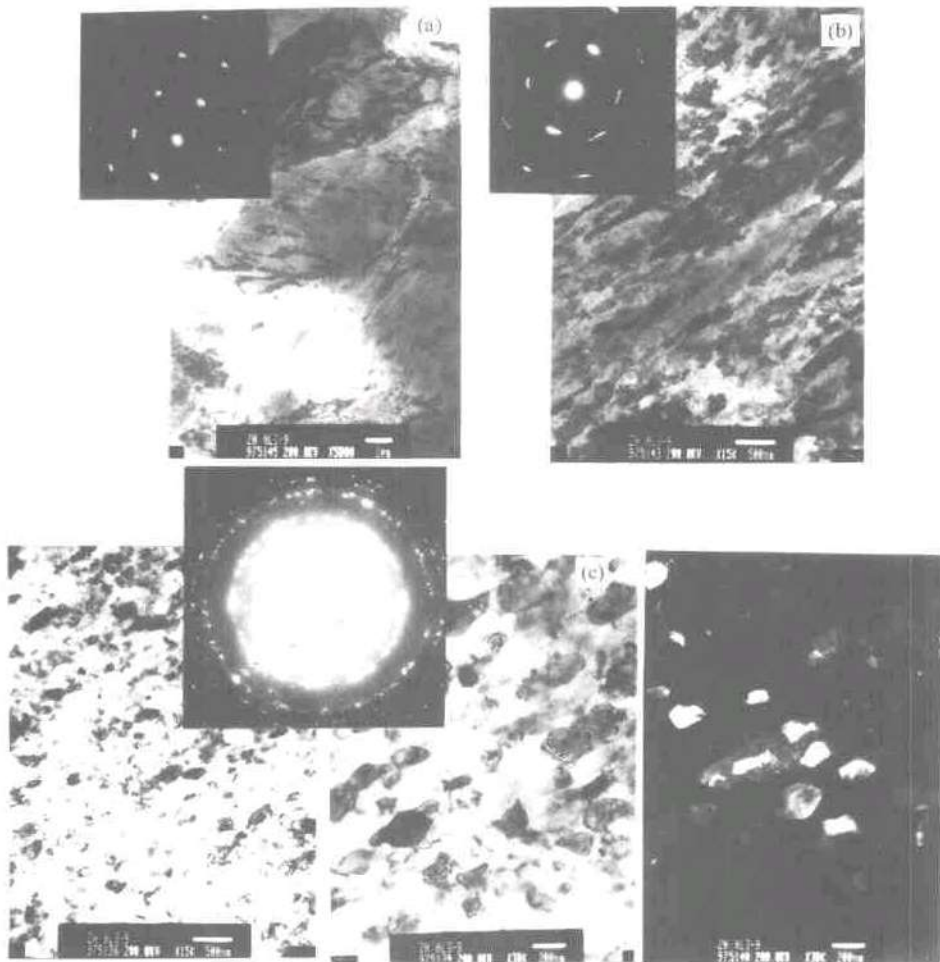


图 3.46 过时效 8090Al-Li 合金动态冲击压缩过程中产生的 TEM 组织形态和对应的电子衍射花样

(a) 基体; (b) 剪切带和基体交界; (c) 剪切带中心

剪切变形过程中产生的再结晶组织。

无论是静态再结晶还是动态再结晶,产生的条件一是应变,二是温度。通常认为动态再结晶的温度为 $(0.4 \sim 0.5)T_m$, T_m 为材料的熔点温度。对 Al-Li 合金,其熔点约为 660°C 。因此动态再结晶温度为 $373 \sim 467\text{K}$ 。在我们动态冲击试样中,可近似认为是绝热过程,或者说 90% 的冲击功转化为热,进而导致剪切带内的温度升高,根据

$$\Delta T = 0.9\tau\gamma/\rho c_p$$

可粗略换算出剪切带内的温度可达 460°C , 式中 $\Delta T = T - T_0$, T_0 为试验开始时温度 (20°C), T 为变形后的温度, ρ 为合金密度, τ, γ 分别为剪切带内的应力和应变, c_p 为热容量, 对 Al-Li 合金, $\rho = 2.5 \times 10^3 \text{kg/m}^3$, $c_p = 1000 \text{J/kg} \cdot ^\circ\text{C}$, $\tau = 200 \text{MPa}$, $\gamma = 6$ 。可见剪切带内的温升比再结晶温度要高出很多。因此用再结晶的机制可以很好地解释剪切带内这些细小晶粒的产生。

3.3.4 SiC_p 颗粒增强 Al-基复合材料^{[35]~[37]}

2024 和 2124Al/SiC_p 两种复合材料用于动态冲击压缩试验。为了探寻产生变形局部化的倾向性和 SiC_p 尺寸的影响。研究中保持 SiC_p 的含量不变,而改变 SiC_p 颗粒的尺寸。

结果指出,对体积分数为 17%,其平均尺寸为 10 μm 的 2024Al/SiC_p 材料,当残余应变为 0.42 时,材料仍表现出均匀变形;进一步增加应变(残余应变为 0.56),变形局部化开始形成;当残余应变进一步增大至 0.65 时,局部化变形进一步发展,剪切带也随之变窄。表明 Al/SiC_p 复合材料也同样存在一个变形局部化形成的临界应变。图 3.47 是在 2124Al/SiC_p 复合材料中观察到的一条局部化剪切带。可以看出一条长直裂纹已沿剪切带形成。

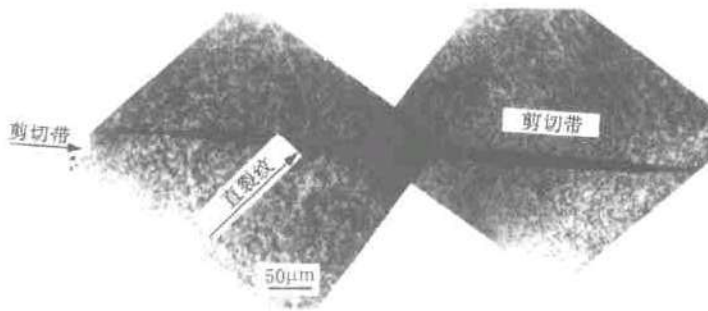


图 3.47 裂纹沿剪切带方向扩展

图 3.48 示出 SiC_p 尺寸对变形局部化倾向性的影响。当 SiC_p 体积分数一定时,小尺寸 SiC_p(3 μm) 的材料已发展出完整的局部化剪切带(图 3.48(a));而平均尺寸较大的(17 μm 和 37 μm)复合材料在相同的试验条件下未观察到明显的变形局部化产生(图 3.48(b)和(c))。这一方面表明,强度较高(SiC_p 较小)的材料,有较强的产生变形局部化的倾向。同时,我们应注意到 SiC_p 尺寸对局部化的形成有明显影响。这十分类似于 δ' 沉淀强化 Al-Li 合金

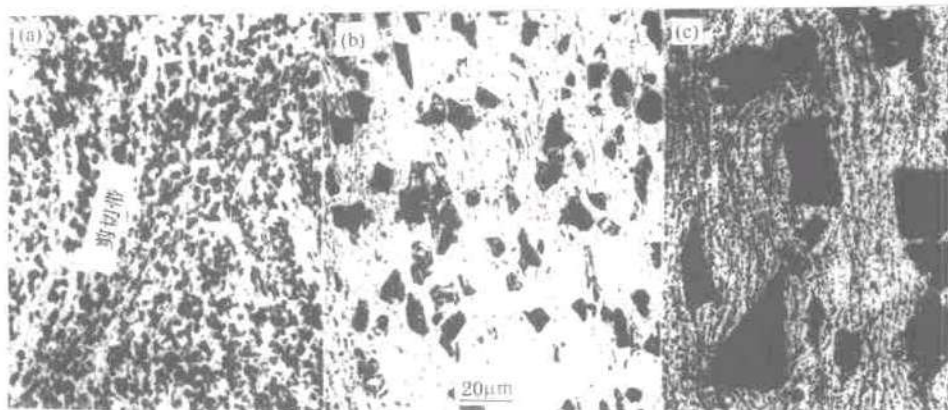


图 3.48 SiC_p 尺寸对变形局部化的影响

的变形情况。

一般来说,粗 δ' 相有利于基体的多滑移;而小尺寸的 δ' 沉淀相则在变形过程中容易被位错剪切而形成平面滑移,从而容易产生变形集中。十分相似的情况是,平均尺寸较小的 SiC_p 复合材料局部化变形十分明显,剪切带中的小颗粒 SiC_p 容易被位错剪切,而大颗粒 SiC_p 的复合材料变形过程中容易发生多重滑移,对塑性流变起到“分流”作用(图 3.48(b)和(c)),因此变形局部化倾向性较小。

结语

在一般受载状态下材料的变形机制,如应变硬化和加工硬化等,已可以用位错理论予以很好的解释。然而,当处于高应变速率和大应变的状态下,材料的变形模式可能会发生明显的变化。变形局部化就是其中的一种重要的也是经常发生的变形方式。由于动态载荷的作用,材料在极为短暂的时间(一般几十微秒至几百微秒)内经历了大应变的变形。伴随局部化的产生与发展,材料会在不同的结构层次上产生各种力学的、物理的和化学的等诸多现象以及它们间的交互作用。本研究提及的一些事实,诸如在动态载荷下各类位错源的启动以及位错发射、增殖与反应,层错和孪晶的产生和交互作用,相变、回复与再结晶,形变剪切带和“白色”剪切带,剪切带的产生及其临界应变、临界应变率和应变跃迁,还有剪切局部化与材料失效等等,均是我们初步的研究结果。限于篇幅,不少重要现象虽在研究中已被注意到,但在本文没作详细介绍,有兴趣的读者可参阅文后提供的有关文献。还有很多与局部化变形有关的冶金或材料因素及其影响,例如剪切局部化萌生地点以及与应力状态和材料本身结构的关系,剪切带内的实际温升及其测量和相变问题等,我们尚没有涉及。总之,鉴于局部化研究的重要理论意义和实际应用价值,近年来人们的研究兴趣有增无减。但系统和深入了解变形局部化的形成条件、它的演化规律以及微结构特征等,并进而为控制变形局部化,优化材料设计,提供实验依据,仍需力学、物理和材料科学界的学者们携手合作,进行长期不懈的努力。

3.4 变形局部化的计算模拟与相变局部化

3.4.1 多晶体材料塑性变形局部化的数值模拟

塑性变形局部化是一种典型的材料不稳定现象,它是材料进入失稳和破坏状态的前兆,对材料破坏机理的研究和材料强度的预测具有重要意义。许多工程材料(包括金属、合金、混凝土、岩石等)在载荷作用下都会首先形成局部化带,在这窄带内剪切应变梯度可以比周围高出几个数量级,然后因局部化带内的微裂纹、微孔洞等损伤不断扩展、连结而导致宏观破坏。关于塑性变形局部化的理论、试验研究和数值模拟是细观力学的重要研究方向之一^[45]。

塑性变形局部化的数值模拟首先涉及采用什么本构关系的问题。目前在多晶体材料本构关系的理论研究中广泛采用自洽模型,包括把晶粒简化为圆球形夹杂的 KBW 模型、经过改进的 Hill 模型等。本文采用数值分析方法,可以放弃有关“自洽”的理论假设,直接把多晶

体材料处理成由单晶体组成的集合体,其中单晶体的本构关系则采用较为简单的平面双滑移系率无关晶体塑性本构模型。

由于晶粒几何形状的复杂性以及局部化带中出现的高应变梯度,若采用常用的数值方法来处理塑性变形局部化的数值模拟问题会遇到一些特殊的困难。如何克服这些数值模拟上的困难是国内外计算力学界普遍关注的问题,也是本课题的主要研究方向。下面分三方面来总结我们的研究成果。

1. 二维任意多边形有限元

对多晶体材料的数值分析目前大多采用有限元方法,因受计算工作量的限制主要是二维有限元计算。由于晶粒的大小参差不齐,几何形状以多边形为主,若沿用现有的三角形或四边形单元,则对每个晶粒都要划分为数十个单元进行计算,导致庞大的计算工作量。

我们针对多晶体材料的细观几何特征,首次给出构造任意 n 边形有限元形函数的一般方法,并给出了五边形和六边形有限元形函数的具体表达式^{[39],[40]}。当 $n=3,4$ 时按此一般构造方法即可得到常用的三角形和四边形单元的形函数,给出了多边形单元的数值积分方法,证明了这样构造的形函数能满足形函数的基本性质,并且当把边数不等的各种多边形单元拼接到一起时相邻单元之间能满足位移连续条件,因而为几何上有效地模拟由各种多边形形状的单晶体组成的多晶体材料打下了良好基础。采用由四、五、六边形混合组成的有限元网格对纯弯梁、小孔应力集中等典型算例进行计算,验证了一般构造方法和相应计算程序的可靠性。

进一步的研究表明,在多晶体材料的数值模拟中,每个单晶晶粒只要用一、二个多边形有限元来模拟就能取得满意的计算结果。由于减少了单元数目,显著地节省了计算工作量。

2. 小波有限元

如何模拟具有高应变梯度的局部化剪切带是塑性变形局部化数值模拟中的关键问题,国内外发表了不少研究论文。早期多采用由 4 个三角形组成的四边形单元进行计算,除了沿四边形边长方向外这种单元还可以在对角线方向上模拟高剪切应变梯度,增加了可能形成局部化剪切带的方向的数目,但应用时仍需预测剪切带的可能方向,以便划分单元时尽可能让四边形的对角线沿这个方向。Ortiz 等人建议在单元插值函数中补充一个带梯度突变的非协调项来表现局部化带的应变非连续性,在计算中一旦形成应变局部化的临界条件得到满足,便加入该非协调项。Belytchko 等人则在原有单元网格划分的基础上附加一个可以是曲线的高应变附加带,带中应变突跳被表示为 Fourier 谱系。

小波变换是近代发展起来的重要数学分支,它在处理局部化现象和带奇异性的偏微分方程上具有特殊的优越性。由于常用有限元的形函数是在单元内光滑连续的多项式,不宜用于描述应变梯度很大的局部化现象,我们利用小波函数的紧致特性,把它以非协调项的形式加入多边形有限元,提出小波有限元的新思想,有效地描述了局部化带具有高应变梯度的几何特征,并将它应用于细观力学中塑性变形与损伤局部化现象的数值模拟。由非协调附加项引进的内部自由度可通过静力凝聚将它们消去^{[41],[42]}。

这种新型的小波有限元能顺利通过分片试验,能自动适应局部化带的形成方向,并能利用小波函数的多分辨率特性自动调整局部化带的宽度。

3. 含损伤参数的晶界单元

多晶体由许多单晶体和晶界组成。理想晶界的理论强度很高,但实际晶界都含有夹杂、微裂纹、微孔洞等损伤。这些损伤随着加载过程发生演化,逐渐扩大、连结、汇合成宏观裂纹而导致材料破坏。尤其是位于局部化剪切带内的晶界影响更大。为此我们基于损伤力学的基本原理建立了含损伤参数的晶界单元模型,用于描述晶界的力学特性,考虑其对多晶体塑性变形局部化以及材料破坏的影响。该模型同时考虑界面法向拉裂和切向剪坏两种破坏形式。当所含损伤参数取特定值时,该模型退化为常用的 Needleman 界面单元^[43]。

本课题综合上述对晶体、晶界和局部化带的描述,形成了数值模拟多晶体材料塑性变形局部化的完整方案,编制了相应计算机程序。完成了多晶体材料均匀单向拉伸平板试件的塑性变形局部化数值模拟^{[41]、[43]、[44]}。计算所得到的局部化带的分布与试验结果相吻合;应力-位移曲线显现了明显的失稳临界点,失稳后局部化带形成,带内的剪切应变迅速增加,应力急剧下降。当晶界强度较弱,且与最大剪应力方向相近时,会诱发局部化带的形成。

本研究成果为研究材料行为的细观演化、建立宏细观尺度间物理特性的联系和预测宏观力学行为提供了数值模拟的手段。

3.4.2 相变引起的变形局部化与材料失稳现象研究

相变是自然界普遍存在的物理现象,在现实材料中存在着各种各样的相变,这些相变过程对材料的物理、力学性能有着十分重要的影响。利用材料的相变特性,可研制出各种新型的材料与结构(如智能材料、微机电系统、生物医学材料与器械等)。因此,认识和掌握这些相变规律,无论对力学或材料科学学科的发展均具有十分重要的意义^[45]。

近三四年来,我们着重对有关相变引起的变形局部化及相变对材料力学行为的影响进行了研究,下面分别就有关单晶材料和多晶材料的研究成果加以总结。

1. 多晶材料——Ce-TZP 增韧陶瓷

我们首先建立了多晶材料宏观相结合相变塑性本构模型(SHY 模型)。由于这一模型考虑了相变过程中材料微结构演化对宏观行为的影响,因而可用来描述多晶和单晶体相变过程的材料软化行为——“自催化形核”^{[46]~[47]}。采用这一模型对 Ce-TZP 陶瓷的一系列行为进行了分析,包括:

(1) 对相变引起的局部化体膨胀剪切带的形成条件及取向进行了理论分析,得到了与实验较为一致的结果^[48]。

(2) 基于上述模型深入研究了氧化锆增韧陶瓷的软化失稳行为,导出了纯体膨胀情况平面应力的局部化条件。首次指出对一组本构参数存在“变形局部化”和“完全相变”两种不同的变形模式,对双向拉伸薄板进行了详细的有限元分析研究^[49]。

(3) Ce-TZP 多晶陶瓷在外加载荷作用下裂纹尖端相变区形状的演化规律,随着材料相

变局部化的发生(材料失稳),裂纹前方相变区形状由传统的规则形貌演化为不规则的狭长与分叉形貌。进一步的研究还表明,这一失稳将导致相变增韧效应的部分丧失或全部丧失,即出现裂尖“负屏蔽”现象^[50]。分析了自催化相变的作用^{[51]、[52]}。

(4)为了解决上述问题,根据材料科学家所提出的“双重尺度增韧”思想,利用上述局部化效应,成功地数值再现了实验中所观察到的“在层状陶瓷复合材料中,由于非相变第二相层的加入,能有效地控制相变区的扩展方向,从而导致大幅度增韧”^[53]。

通过对多晶材料的上述研究:首先从对变形机制的理解出发建立了细观力学模型;然后深入研究了平面问题的软化失稳行为;接着对宏观试件受均匀拉、压变形情况下的局部化(剪切+体膨胀相变带的形成)规律进行预测;最后进一步对非均匀受力试件(缺口、裂纹试件)相变局部化(材料失稳)对断裂行为(裂尖形貌演化)的影响进行研究,数值再现了控制局部化扩展的有效增韧方案。这四个互相关连、互相制约的交叉研究,使得我们能以 Ce-TZP 材料的相变过程为突破口,对多晶材料中相变引起的材料失稳及其对断裂影响的力学描述有了一个初步的认识,在理论上上了一个台阶,形成了一个初步的框架和轮廓^{[48]~[53]}。研究结果曾在 Applied Mech Review 1996 年上作介绍^[54]。

2. 单晶材料——形状记忆合金 Cu-Al-Ni 材料

在上述研究的基础上,近一二年来又进一步对单晶形状记忆合金 Cu-Al-Ni 材料的相变过程及相应的力学行为进行了深入的研究,选择这一研究方向的原因是:首先从理论上讲,单晶是多晶行为的基础,单晶行为的研究有助于加深对多晶行为的理解;其次,单晶行为又有其本身的特色;其三,陶瓷单晶极难制备,而金属单晶则相对较容易;还有,金属单晶(CuAlNi)有着直接的应用前景。这一方向的研究成果有:

(1)通过实验研究我们发现记忆合金(SMA)中的相变与多晶及传统金属中的局部化剪切带存在以下共性及异性:共性在于二者均在物理上表现为材料失效,在几何上存在一个应变间断面,在力学上均有演化和发展,对材料塑性与断裂均有重大影响。两者的不同在于:金属中局部化剪切带表现为一条离散的窄带,带内剪切应变越来越大从而导致断裂,而在 SMA 中带内应变的增加或演变并不是主导因素,通常带内应变为常数,而微结构的演变则表现为应变间断面的传播(可逆运动);金属中局部化剪切带是不可逆的,而 SMA 中的相变是热弹性马氏体相变,微结构及宏观行为可逆(但有能量耗散)。金属中局部化研究多半从连续介质力学角度出发,单晶 SMA 则可直接从晶体学出发,有更为明确的物理基础,尺寸更小,更便于用宏-细-微观相结合的方法来研究。

(2)近来,采用高密度云纹干涉技术,对 SMA 单晶的相变过程进行了宏-细观观测研究,主要结果如下^{[55]、[56]}:

①在国际上首次获得 SMA 清晰的全场变形图,具有高空间分辨率,可测量大应变。揭示了相变局部化在单晶中的形成和传播过程,为进一步的理论及数值分析提供了重要依据。

②实验结果对马氏体相变晶体学唯象理论中的平而不不变应变原理提出质疑,因为实验发现并非所有情况下马氏体与母相的界而均为平面不变面(无畸变,无转动)。

目前对单晶和多晶相变局部化的研究工作仍在继续进行之中,对多晶材料目前集中于 NiTi 多晶记忆合金中相变局部化带的形成及传播过程。对于单晶材料,目前正采用 TEM

(透射电镜)和 AFM(原子力显微镜)研究界面附近的显微结构,继而探讨局部应力场及形成位错的机制,此项研究将为建立单晶双向记忆效应(TWME 界面运动)的力学模型提供强有力的实验依据。有关相变局部化及其传播对材料力学行为的影响这一研究方向的工作才刚刚开始,有许多问题需要从力学上加以探讨和阐明,其中宏-细-微观相结合,力学-物理-材料相结合的理论实验研究是解决这一类问题的关键。

参 考 文 献

1. Xue Q, Shen L T and Bai Y L. A modified split Hopkinson Torsional bar in studying shear localization. *Meas. Sci. Technol.*, 1995, 6:1557~1565
2. Xue Q, Shen L T and Bai Y L. Elimination of loading reverberation in the split Hopkinson torsional bar. *Rev. Sci. Instrum.*, 1995, 66(11):5298~5304
3. Ling Z, Gu Z Y and Shen L T. The extension speed of microcracks occurred in Zr101Al/SiC_p composite under impact loading. In: *Proceedings of 2nd ISIE'96, Beijing, 1996*, 226~230
4. Hong Y S, Lu Y H and Zheng Z M. Orientation preference and fractal character of short fatigue cracks in a weld metal. *J mater Sci.*, 1991, 26:1821~1826
5. Hong Y S, Gu Z Y, Fang B and Bai Y L. Collective evolution characteristics and computer simulation of short fatigue cracks. *Phil. Mag. A.*, 1997, 175:1517~1531
6. Weiss J and Pineau A. Continuous and sequential multiaxial low-cycle fatigue damage in 316 stainless steel. *Advance in Multiaxial Fatigue*. In: *McDowell D L and Ellis R, ed. ASTM STP1191, Philadelphia, 1993*. 183~203
7. Price C E. The progression of bending fatigue in nickel. *Fatigue Fract. Engng. Mater. Struct.*, 1988, 11:483~492
8. Suh C M, Lee J J, Kang Y G et al. A simulation of the fatigue crack process in type 304 stainless steel at 538 C. *Fatigue Fract. Engng Mater. Struct.*, 1992, 15:671~684
9. Goto M. Statistical investigation of the behaviour of small cracks and fatigue life in carbon steels with different ferrite grain sizes. *Fatigue Fract. Engng. Mater. Struct.*, 1994, 17:635~649
10. 洪友士,吕永华,郑哲敏. 一种等应力试样中的疲劳短裂纹行为. *金属学报*, 1990, 26: A46~52
11. Bai Y L, Ke F J and Xia M F. Formation of statistical evolution of microcracks in solids. *Acta Mechanica Sinica*, 1991, (7): 59~66 [白以龙,柯孚久,夏蒙芬. 固体中微裂纹系统统计演化的基本描述. *力学学报*, 1991, 22: 290~298]
12. 夏蒙芬,韩闻生,柯孚久,白以龙. *力学进展*, 1995, 25(1):1; 25(2):145
13. 柯孚久,白以龙,夏蒙芬. 理想微裂纹系统演化的特征. *中国科学 A*, 1990, 33:1447~1459
14. Han W S, Xia M F, Shen L T and Bai Y L. Statistical Formulation and Experimental Determination of Growth Rate of Micrometre Cracks under Impact Loading. *Int. J. Solids and Structures*, 1997, 34 (2): 2905~2925
15. Bai Y L, Han W S and Bai J. A Statistical Evolution Equation of Micro-damage and Its Application. *ASTM STP 1315, D L McDowell, 1997*. 150~162
16. Bai Y L, Xia M F, Ke F J, Han W S and Fang B. A Self-Closed System of Equations of Damage Evolution. *Int. J. Fracture*, 1996, 78: 331~334
17. 白洁,夏蒙芬,柯孚久,白以龙. 含成核尺寸效应的损伤统计演化方程的性质和数值模拟. *力学学报*, 1998, (4)
18. Bai Y L, Xia M F, Ke F J and Bai J. Dynamic Function of Damage and Its Implications. *3rd Int. Symp. On Fracture and Strength of Solids, 1997, Hong Kong*. *Int. J. Key Engineering Materials*, 1998, 145 ~149, 411~420

19. Bai Y L, Ling Z, Luo L M and Ke F J. Initial Development of Microdamage under Impact Loading. *J of Applied Mechanics*, Transactions of the AMSE, 1992, 59(3):622~627
20. Bai Y L, Xia M F, Ke F J and Li H L. Damage Field Equation and Criterion for Damage Localization. In: Wang R ed. *Rheology of Solids with Defects*. Kluwer Publishers, 1998
21. Hayhurst D R, Dimmer P K and Morrison C J. Development of Continuum Damage in the Creep Rupture of Notched Bars. *Phil Trans R Soc London*, 1984, A311:103~129
22. 洪友士,方飙. 短裂纹萌生和发展的细观过程和理论. *力学进展*,1993, 23: 468~486
23. FANG Biao, HONG Youshi and BAI Yilong. Experimental and Theoretical Study on Numerical Density Evolution of Short Fatigue Cracks. *Acta Mechanica Sinica*, 1995, 11: 144~152
24. QIAO Yu and HONG Youshi. An Analysis of Collective Damage for Short Fatigue Cracks Based on Equilibrium of Crack Numerical Density. *Engineering Fracture Mechanics*; 1998, 59: 151~163
25. 洪友士,顾子晏,方飙. 疲劳短裂纹萌生的损伤特征和计算机模拟. *机械强度*,1995, 17: 88~93
26. Pande C S, Richards L E, Louat N et al. Fractal characterization of fractured surfaces. *Acta Metall.*, 1987, 35:1633~1637
27. 乔宇,洪友士. 疲劳短裂纹数密度分布的稳定分析. 见: '96 中国材料研讨会文集, 1996,II(1):102~106
28. HONG Youshi, QIAO Yu. Analysis of Damage Moments in the Collective Evolution of Short Fatigue Cracks. *Key Engineering Materials*, 1998, Vol. 145-149: 399~404
29. Xu Y B, Huang X, Wang Z G and Bai Y L. Formation and microstructure of localized shear band in a low-carbon steel. *Scripta Metall.*, 1990, 24: 571
30. Xu Y B, Wang Z G, Huang X L and Bai Y L. Microstructure of shear localization in low-carbon ferrite-pearlite steel. *Mater. Sci. & Eng.*, 1989, 114:81
31. Xu Y B, Bai Y L, Xue Q and Shen L T. Formation, microstructure and development of localized shear deformation in low-carbon steels. *Acta Mater.* 1996, 44:1917
32. Xu Y B, Bai Y L, Shen L T and Xue Q. Microstructure of shear localization in low-carbon steels. In: Murr L E, Staudhammer K P and Meyers M A, ed. *Metallurgical and Materials Application of Shock-wave and High-strain Rate Phenomena*. Elsevier; 1995. 389
33. Bai Y L, Xue Q, Xu Y B and Shen L T. Characteristics and microstructure in the evolution of shear localization in Ti-6Al-4V alloy. *Mechanics of Materials*. 1994, 17:155
34. Bai Y L, Xue Q, Xu Y B and Shen LT. Microscopic Scaling and microstructural evolution in shear band phenomena. *ibid* (4) :377
35. Yu J Q. Localized shear deformation in Ti alloy and Al/SiC_p composite, Thesis, Institute of Metal Research. Chinese Academy of Sciences, 1997
36. Zhong W L. Structure and evolution of deformation localization in 8090 Al-Li alloy during dynamic loading, Thesis, Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, 1998
37. Ling Z, Xu Y B and Bai Y L. Localized shear deformation in 2124 Al/SiC_p composites during dynamic compression. In: *Proc of APCF'96 Korea*, 1996
38. 陆明万,罗学富,郑长卿. 计算细观力学进展. 见: 黄克智,徐秉业主编. *固体力学发展趋势*. 北京: 北京理工大学出版社, 1995,196~215
39. 范亚玲,张远高,陆明万. 二维任意多边形有限单元. *力学学报*, 1995,27(6):742~746
40. Fan Yaling, Lu Mingwan, Zhang Yuangao. Stress analysis of polycrystalline material based on finite polygon element. 见: *Proc. of 2nd. Int. Symp. on Microstructures and Mechanical Properties of New Engineering Materials*, Beijing, 1995, International academic publishers, 9~14
41. 陆明万,陈勇,刘洋,张雄. 多边形小波有限元与塑性变形局部化. 见: 余寿文,杨卫,郑泉水主编. *固体力学进展——庆贺黄克智院七十七寿辰文集*. 北京: 清华大学出版社,1997,121~126
42. 刘洋,陈勇,陆明万. 塑性变形局部化的小波模拟. *计算力学学报*, 1997,14,增刊
43. 杨培杰. 含损伤晶界有限元与塑性变形局部化: [硕士论文]. 北京: 清华大学,1998

44. Lu Mingwan, Zhou Xu. Finite element simulation of plastic strain localization. 见: Proc. of 2nd. Asia-Pacific Symposium on Advances in Engineering Plasticity and its Application, Beijing, 1994. International academic publishers, 683~688
45. 孙庆平. 固体相变过程中的宏观观力学问题及其研究进展. 力学进展, 1995, 25(3): 303~317
46. Yan W Y, Sun Q P and Hwang K C. A generalized transformation constitutive model (Plenary lecture). 见: Proc. of 3rd. Asia-Pacific Symposium on Advances in Engineering Plasticity and its Applications, Japan, 1996, 9~14 and 21~24
47. Yan W Y, Sun Q P and Hwang K C. A generalized micromechanics constitutive theory of single crystal with thermoelastic martensitic transformation, Science in China (Series A), 1998, 41: 878~886 [中文版 1998, 28(3): 275~282]
48. Yan W Y, Sun Q P and Hwang K C. Analysis of transformation plastic localization in ceramics. Int. J. of Plasticity, 1997
49. Guo T F and Huang K C. Softening instability in transformation plasticity of zirconia-toughened ceramics. Proc. Localized Damage IV, Computer-Aided Assessment and Control, Japan, 1996
50. Guo T F, Sun Q P and Zhang X. The role of autocatalysis and transformation shear on the crack tip zone shape and toughening of zirconia ceramics. Int. J. Solids and Struct., 1997, 34: 31~32, 4213~4236
51. Sun Q P, Li X J and Li Z. Autocatalytic transformation, materials softening and toughening of single and multi-phase Ce-TZP ceramics. Proc. of 9th Int. Conf. on Fracture, Sydney, 1997, 1089~1094
52. Sun Q P and Li X J. The role of autocatalytic transformation on plasticity and toughening. Acta Mechanica Solida Sinica, 8, Special issue, 1995, 473~476
53. Sun Q P, Guo T F, Li X J and Zhang X. Effect of dual-scale microstructure on the toughness of laminar zirconia composite. Int. J. Fracture, 1996, 78: 315~330
54. Fischer F D, Sun Q P and Tanaka K. Transformation induced plasticity. Applied Mechanics Review, ASME, 1996, 49(6): 317~364
55. Sun Q P, Zhang X Y and Xu T T. Some recent advances in experimental study of shape memory alloys. Proc. of IUTAM Symp. on "Micro-and Macrostructural aspects of thermoplasticity", Bochum, August, 1997
56. Zhang X Y, Xu T T, Sun Q P and Tong P. On the full-field deformation of single crystal CuAlNi shape memory alloys — stress induced martensitic transformation. Proc. of IV European Symp. on Martensite Transformations — ESOMAT'97, Enschede, The Netherlands, July, 1997

第 4 章 面心立方晶体疲劳损伤的取向和晶界效应

从 20 世纪 50 年代初开始,人们普遍认识到,不从微观水平上对疲劳的基本过程进行了解,不对整个疲劳过程及其各个阶段的本质进行系统的研究,就不可能有抗疲劳材料和抗疲劳安全设计的进一步发展。基于这种认识,近 40 年来,特别是 70~80 年代,对疲劳损伤机制的研究有了很大的发展。这方面最具结论性意义的研究结果是从高纯材料,特别是从面心立方金属铜单晶体得到的。铜单晶体在高于 10^{-4} 的塑性应变幅的反复作用下,表现起始快速循环硬化,即流变应力随应变的循环作用不断增加。这种循环硬化具有饱和的特征,即流变应力的增加一开始明显,随后减弱,最后达到一个稳定的水平,称为循环饱和应力。如果用饱和分解切应力 τ_s 对外加塑性分解切应变幅 γ_{pl} 作图,就得到循环应力应变曲线(cyclic stress-strain curve, CSSC)。1978 年, Mughrabi^[1] 根据他自己和别人的实验结果,首次报导了单滑移取向铜单晶体的 CSS 曲线(图 1)。它具有与单滑移取向铜单晶体单向拉伸应力应变曲线完全不同的 3 个区域,分别用 A, B 和 C 表示。A 区的塑性分解切应变幅 $\gamma_{pl} \leq 6 \times 10^{-5}$, B 区是一个饱和流变应力与应变无关的“平台区”,平台下端应变 $\gamma_{pl} \approx 6.5 \times 10^{-5}$, 上端应变 $\gamma_{pl} \approx 7.5 \times 10^{-3}$, 而更高应变的 C 区 $\gamma_{pl} \geq 7.5 \times 10^{-3}$ 。区域 A 和 B 对应低应变疲劳,疲劳寿命分别为无限和 10^5 周次以上,而 C 区对应高应变疲劳。

图 4.1 所示的 CSS 曲线的 B 区有某种普遍性,在其他的单滑移取向的面心立方金属单晶体,如镍^[1]和银^[2]中也广泛观察到。B 区的一个明显特点是饱和应力与外加应变幅无关,对于单滑移取向的铜单晶体来说,在约两个数量级的塑性分解切应变幅范围内,室温测量的饱和分解切应力 τ_s 在 28~30MPa 的范围内变动;B 区另一个明显的特点是试样表面在这里出现应变高度集中的驻留滑移带(persistent slip band, PSB),在 B 区的始端,试样标距内出现第一条 PSB,随着塑性分解切应变幅 γ_{pl} 的增大,PSB 的数量增多,在 B 区的末端,试样的标距部分完全由 PSB 占有,形成一条单一的超级驻留滑移带。PSB 是应变局部化的区域,携带了几乎全部滑移形变,CSS 曲线上“平台”的出现与 PSB 的形成密切相关。由于 PSB 是疲劳裂纹优先形核的地点,因此 CSS 曲线平台区(B 区)所涉及的微观机制及其出现的条件,一直是循环形变基本机制研究中的一个热点。这方面的研究虽然取得了很大的进展(作为新近的评论,见文献[3]和[4]),但还有许多问题有待澄清和深入。

首先是关于晶体取向的影响。陈心正和 Laird^[5]测量了标准取向三角形内各种晶体(包括某些靠近取向三角形边的晶体)的饱和分解切应力 τ_s ,发现所有晶体的 τ_s 约为 29MPa。他们认为,循环形变饱和分解切应力 τ_s 和 CSS 曲线上平台区的出现与晶体取向无关。我国学者金能蕴在国外进行的博士论文工作中,研究了双滑移取向的铜单晶体在 $\gamma_{pl} = 3 \times 10^{-3}$ (平台区范围)下的循环形变行为,其结果与单滑移取向晶体的明显不同,而且发现处在标准取

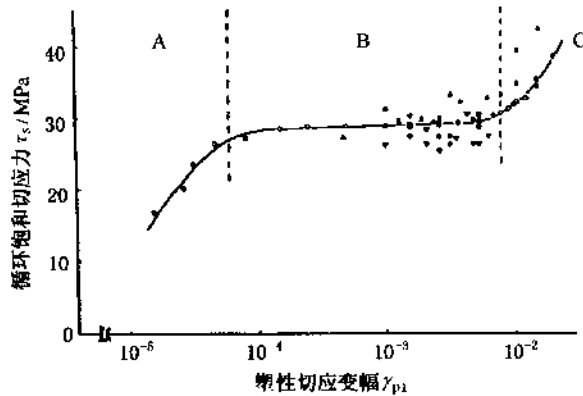


图 4.1 单滑移取向铜单晶体的循环应力应变曲线^[1]

向三角形不同边上的双滑移取向晶体有不同的循环饱和行为^[6]。金能蕴提出了一个位错反应模型,合理地解释了所得实验结果,并根据位错反应的模式和强度,把标准取向三角形划分为七个区域,表示循环形变行为的不同取向关系^[7]。但由于她没有能够给出 CSS 曲线,无法提供有关 CSS 曲线平台区的出现与晶体取向的关系。

其次是关于多晶体的 CSS 曲线是否也存在平台区,它与单晶体的 CSS 曲线有什么差异和联系。1978 年, Bhat 和 Laird^[8]通过分析当时可资利用的数据后认为, CSS 曲线上的平台行为是单晶和多晶金属的普遍特征。但 Mughrabi^[9]通过分析同样的数据却得出截然相反的结论:多晶体的 CSS 曲线不表现出任何清晰的平台。此后引起了关于这一问题的持续的学术争论,直至最近^[10]。在多晶材料中,晶粒的取向是随机分布的,其中有一部分晶粒必然处于双滑移和多滑移取向,而且多晶体中存在着晶界,为保持晶界形变的协调,晶界附近不可避免地出现双滑移和多滑移。把单滑移取向单晶体的循环形变结果直接用于多晶体显然是困难的。研究双滑移和多滑移取向单晶体、不同类型的双晶体和三晶体的循环形变行为,将是阐明多晶体循环形变基本机制的重要和必不可少的途径。

第三是关于疲劳裂纹沿晶界的萌生机制。Kim 和 Laird^{[11],[12]}发现晶界裂纹的萌生与晶界两侧晶粒的高度差,即晶界台阶的形成有密切关系,提出了一个所谓的晶界台阶机制。随后, Mughrabi 等人^[13]发现沿晶疲劳裂纹的萌生常常与驻留滑移带 (PSB) 撞击晶界 (GB) 有关,从而提出了一个与晶界台阶机制完全不同的 PSB-GB 交互作用机制。显然,人们关于沿晶疲劳开裂的基本过程还缺乏统一的认识。由于多晶体的晶粒取向和晶界几何结构难以控制,采用几何结构简单、且易于控制和分析的双晶体和三晶体来研究沿晶疲劳开裂过程和机制,无疑是一条捷径。针对上述问题,1993 年—1997 年期间,在国家自然科学基金委员会的资助下,作者作为负责人承担了重大基金项目“材料损伤、断裂机理和宏观力学理论”中的第 4 子课题“材料界面在疲劳和断裂过程中作用的基础性研究”,在疲劳损伤与裂纹萌生的晶体学关系、晶界在疲劳早期损伤中的作用,以及晶体形变硬化的微观力学和有限元分析等几个方面进行了较深入和系统的研究,取得了若干新的实验和理论成果^{[14]~[53]}。

4.1 双滑移和多滑移取向单晶体的循环形变

在极射赤面投影标准取向三角形中(图 4.2),三角形的三条边分别对应于共轭(001/ $\bar{1}11$)、共面(011/ $\bar{1}11$)和临界(001/011)三种性质的双滑移取向,面标准取向三角形的三个顶点则分别对应着[001]、 $[\bar{1}11]$ 和[011]三种典型的多滑移取向(也见图 4.2)。在过去的三十多年中,关于循环形变机制的基础性研究大多集中在单滑移取向的铜单晶体(例如见总结性文献[3]和专著[4])。金能蕴^[54]、金能蕴和 Winter^{[6]、[55]}曾经在一个塑性分解切应变幅下率先研究了典型双滑移取向铜单晶体[012]、 $[\bar{1}12]$ 和 $[\bar{1}22]$,以及典型多滑移取向铜单晶体[001]的循环形变行为,但未能建立它们的 CSS 曲线。早在 20 世纪 60 年代初,Kemsley 和 Paterson^[56]在考察不同取向铜单晶体的循环加工硬化行为时发现,[001]和 $[\bar{1}11]$ 多滑移晶体具有很高的加工硬化率,非常类似多晶体的行为,而[011]多滑移晶体的加工硬化率明显低于[001]和 $[\bar{1}11]$ 晶体。Lepisto 和 Kettunen^[57]在塑性分解切应变幅 $\gamma_{pl} = 3.0 \times 10^{-4} \sim 2.5 \times 10^{-3}$ 的范围内,系统地研究了 $[\bar{1}11]$ 铜晶体的循环应力应变响应,发现这种取向的铜单晶体具有很高的初始硬化率,没有明显的循环饱和现象,其 CSS 曲线无平台区。他们所得的实验数据分散性很大,所得结果有待进一步证实。

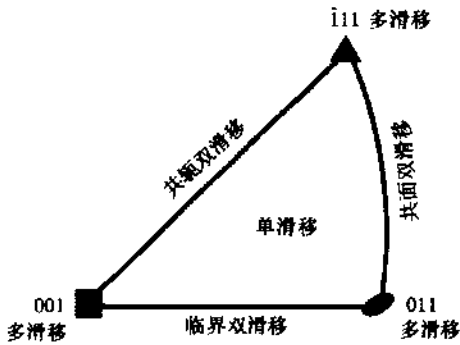


图 4.2 双滑移取向和多滑移取向在标准取向三角形中的位置

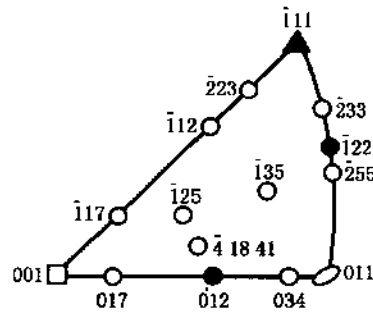


图 4.3 空心圆圈表示本项工作所采用的铜单晶体在标准取向三角形中的位置,实心点为文献[55]所用晶体

本项研究工作在标准取向三角形 3 个边上的不同位置,选取了具有一定代表性的双滑移取向铜单晶 $[\bar{1}17]$ 、 $[\bar{1}12]$ 、 $[\bar{2}23]$ 、[017]、[034]、 $[\bar{2}55]$ 、 $[\bar{2}33]$ 和二个多滑移取向铜单晶体[001]和[011]作为研究对象,还选取了 $[\bar{1}35]$ 、 $[\bar{1}25]$ 和 $[\bar{4}1841]$ 等单滑移取向单晶体进行比较(见图 4.3 用空心圆圈所示的晶体)。实验所用的铜单晶体是用 99.999% 的纯铜,采用 Czochralski 方法生长得到的,用电火花线切割方法从所得晶体切取疲劳试样,试样加载轴的晶体方向用 X 射线 Laue 背反射法标定,偏差在 $\pm 2^\circ$ 以内。疲劳试验前,对试样进行 800 C、1~2h 的真空退火,然后进行电解抛光处理。所有疲劳试验都是采用恒塑性应变幅控制的拉压对称方式,在实验室室温空气环境中进行的。

4.1.1 循环应力应变响应和初始循环硬化

表 4.1 列出了 9 种典型的双滑移和多滑移取向(见图 4.3)铜单晶的循环形变硬化和饱和的实验数据。表中的累积塑性应变变量 $\gamma_{pl,cum} = 4N\gamma_{pl}$ (γ_{pl} 为塑性切应变幅, N 为循环数),

表 4.1 典型双滑移和多滑移取向铜单晶循环硬化和饱和数据

晶体取向	γ_{pl}	$\gamma_{pl,cum}$	$\theta_{0.2}/\text{MPa}$	τ_s/MPa
[117]	1.09×10^{-4}	26.4	31.5	28.09
	4.4×10^{-4}	32.2	48.6	31.23
	1.3×10^{-3}	93.6	39.6	32.04
	3.0×10^{-3}	11.4	73.3	38.32
	5.0×10^{-3}	25.8	100.8	49.58
[112]	1.3×10^{-4}	33.4	6.9	22.6
	3.7×10^{-4}	44.4	6.2	26.9
	7.1×10^{-4}	62.5	11.8	28.7
	9.0×10^{-4}	57.6	10.6	28.8
	1.4×10^{-3}	51.0	13.9	28.6
	2.3×10^{-3}	65.3	22.6	28.7
	3.3×10^{-3}	92.4	36.7	28.2
	4.9×10^{-3}	274.4	45.4	29.6
	7.2×10^{-3}	253.4	58.0	32.9
[223]	1.5×10^{-4}	49.2	17.1	29.6
	3.5×10^{-4}	64.7	19.8	30.2
	7.2×10^{-4}	103.7	26.7	30.3
	1.5×10^{-3}	60.0	30.0	29.4
	3.0×10^{-3}	438.0	53.4	—
[017]	1.2×10^{-4}	40.3	18.3	28.6
	3.0×10^{-4}	45.8	18.9	34.2
	7.0×10^{-4}	78.4	19.0	36.7
	9.4×10^{-4}	90.2	18.1	37.1
	1.5×10^{-3}	108.0	18.1	38.8
	3.0×10^{-3}	132.0	37.0	43.4
	5.2×10^{-3}	74.9	46.0	46.1
	6.5×10^{-3}	68.1	65.0	49.2
[034]	1.1×10^{-4}	19.5	7.5	27.03
	2.8×10^{-4}	37.8	8.4	27.14
	7.4×10^{-4}	32.7	8.6	27.64
	1.7×10^{-3}	83.5	9.8	27.19
	3.4×10^{-3}	100.7	18.3	28.55
	4.3×10^{-3}	102.4	32.8	28.90
	5.15×10^{-3}	122.3	51.1	30.50

续表

晶体取向	γ_{pl}	$\gamma_{pl,cum}$	$\theta_{0.2}/\text{MPa}$	τ_s/MPa
[255]	1.16×10^{-4}	21.6	14.55	28.6
	3.49×10^{-4}	30.1	14.93	30.14
	5.80×10^{-4}	30.60	14.95	31.70
	1.16×10^{-3}	34.60	14.75	30.92
	2.67×10^{-3}	34.92	16.5	33.18
	5.0×10^{-3}	35.04	39.47	35.26
[233]	1.3×10^{-4}	33.8	10.2	25.0
	2.4×10^{-4}	43.8	10.5	28.9
	3.4×10^{-4}	43.5	12.8	30.1
	6.2×10^{-4}	55.2	13.9	30.9
	9.2×10^{-4}	44.2	14.6	31.7
	1.7×10^{-3}	40.8	15.1	32.5
	3.5×10^{-3}	65.8	24.9	33.5
	5.3×10^{-3}	216.2	38.2	35.4
[001]	1×10^{-4}	30.0	32.9	20.30
	2.4×10^{-4}	31.3	34.6	26.7
	2.8×10^{-4}	52.5	48.4	31.53
	6.0×10^{-4}	82.7	51.1	36.16
	7.2×10^{-4}	9.0	42.3	38.62
	1.8×10^{-3}	75.0	55.4	41.09
	3.0×10^{-3}	37.0	67.1	45.63
[011]	1.1×10^{-4}	26.0	7.1	29.2
	2.8×10^{-4}	36.7	6.9	29.3
	7.3×10^{-4}	47.1	8.9	30.7
	1.2×10^{-3}	53.9	9.1	29.6
	2.5×10^{-3}	46.0	11.9	29.5
	3.3×10^{-3}	43.8	12.2	29.9
	5.0×10^{-3}	56.0	14.1	28.8
	7.2×10^{-3}	57.6	14.5	30.9

$\theta_{0.2}$ 为平均初始循环硬化系数, $\theta_{0.2} = \Delta\tau / \Delta\gamma_{pl,cum}$, 其中 $\Delta\gamma_{pl,cum} = 0.2$, τ_s 为循环饱和分解切应力。 $\theta_{0.2}$ 和 τ_s 是表征晶体循环形变行为的两个主要参量。图4.4是由表4.1的数据做出的不同取向铜单晶体的平均初始循环硬化率 $\theta_{0.2}$ 随塑性切应变幅 γ_{pl} 的变化关系曲线。图中的虚线代表典型单滑移取向晶体的 $\theta_{0.2}-\gamma$ 关系, Mughrabi^[1]将它划分为两个阶段: 当 $\gamma_{pl} < 10^{-3}$, $\theta_{0.2}$ 较低, 几乎与 γ_{pl} 无关, 其硬化行为与单向拉伸应力-应变曲线的第I阶段相似, 硬化机制主要是主滑移位错的增殖及其交互作用; 当 $\gamma_{pl} > 10^{-3}$, $\theta_{0.2}$ 随 γ_{pl} 的增大而显著增加, 此时主滑移大量开动, 并伴随有长程内应力的产生和次滑移的开动。从图4.4可以看出, 晶体取向对定量表征循环硬化行为的 $\theta_{0.2}-\gamma_{pl}$ 关系有明显的影

线大致可以分为三类：(1) $\theta_{0.2}$ 的值较低，随 γ_{pl} 的增加无明显变化， $\theta_{0.2}$ - γ_{pl} 关系不表现出单滑移取向晶体的两个阶段，如 $[011]$ 晶体；(2) $\theta_{0.2}$ 的值较高，且随 γ_{pl} 的增加连续上升， $\theta_{0.2}$ - γ_{pl} 关系也不表现出单滑移取向晶体的两个阶段，如 $[\bar{2}23]$ 、 $[\bar{1}17]$ 和 $[011]$ 晶体；(3) 其他晶体，如 $[\bar{1}12]$ 、 $[017]$ 、 $[034]$ 、 $[\bar{2}33]$ 和 $[\bar{2}55]$ 的 $\theta_{0.2}$ - γ_{pl} 关系曲线均呈现出与单滑移取向晶体类似的明显的两个阶段。

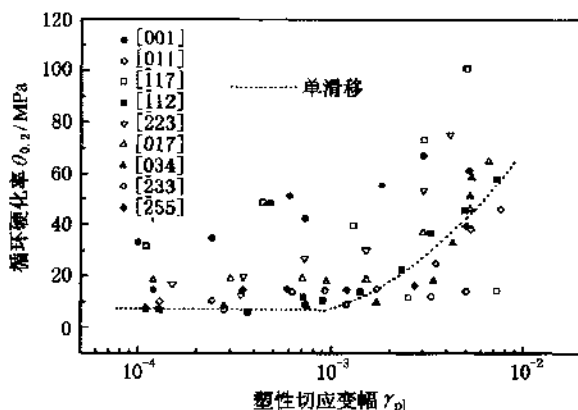


图 4.4 不同取向的铜单晶体的平均初始硬化率 $\theta_{0.2}$ 随塑性分解切应变幅 γ_{pl} 的变化

不同取向铜单晶体的平均初始循环硬化率 $\theta_{0.2}$ 随 γ_{pl} 变化的差异主要与晶体中可能开动的滑移系及其位错反应模式和强度有关。表 4.2 列出了几种典型双滑移取向晶体可能开动的

表 4.2 典型双滑移取向铜单晶开动的滑移系及其 Schmid 因子

晶体取向	滑移系	Schmid 因子, Ω	$Q = \Omega / \Omega_{max}$
[$\bar{1}17$]	主滑移系 $(111)[\bar{1}01]$	0.488	1
	共轭滑移系 $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})[011]$	0.488	1
	临界滑移系 $(\bar{1}11)[101]$	0.432	0.96
	交滑移系 $(1\bar{1}\bar{1})[\bar{1}01]$	0.320	0.71
	共面滑移系 $(111)[1\bar{1}0]$	0.112	0.23
[$\bar{1}12$]	主滑移系 $(111)[\bar{1}01]$	0.408	1
	共轭滑移系 $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})[011]$	0.408	1
	临界滑移系 $(\bar{1}11)[101]$	0.272	0.67
	交滑移系 $(1\bar{1}\bar{1})[\bar{1}01]$	0	0
	共面滑移系 $(111)[1\bar{1}0]$	0.272	0.67
[223]	主滑移系 $(111)[\bar{1}01]$	0.360	1
	共轭滑移系 $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})[011]$	0.360	1
	临界滑移系 $(\bar{1}11)[101]$	0.168	0.47
	交滑移系 $(1\bar{1}\bar{1})[\bar{1}01]$	0.120	0.33
	共面滑移系 $(111)[1\bar{1}0]$	0.288	0.80
[017]	主滑移系 $(111)[\bar{1}01]$	0.457	1
	临界滑移系 $(\bar{1}11)[101]$	0.457	1
	共轭滑移系 $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})[011]$	0.392	0.86
	交滑移系 $(1\bar{1}\bar{1})[\bar{1}01]$	0.343	0.75
	共面滑移系 $(111)[1\bar{1}0]$	0.065	0.14

续表

晶体取向	滑移系	Schmid 因子, Ω	$Q = \Omega / \Omega_{max}$
[034]	主滑移系(111)[$\bar{1}01$]	0.457	1
	临界滑移系($\bar{1}\bar{1}1$)[101]	0.457	1
	共轭滑移系($\bar{1}\bar{1}1$)[011]	0.114	0.25
	交滑移系(1 $\bar{1}1$)[$\bar{1}01$]	0.065	0.14
	共面滑移系(111)[1 $\bar{1}0$]	0.343	0.75
[$\bar{2}55$]	主滑移系(111)[$\bar{1}01$]	0.423	1
	共面滑移系(111)[1 $\bar{1}0$]	0.423	1
	共轭滑移系($\bar{1}\bar{1}1$)[011]	0.151	0.36
	交滑移系(1 $\bar{1}1$)[$\bar{1}01$]	0.106	0.25
	临界滑移系($\bar{1}\bar{1}1$)[101]	0.272	0.64
[$\bar{2}33$]	主滑移系(111)[$\bar{1}01$]	0.371	1
	共面滑移系(111)[1 $\bar{1}0$]	0.371	1
	共轭滑移系($\bar{1}\bar{1}1$)[011]	0.223	0.60
	交滑移系(1 $\bar{1}1$)[$\bar{1}01$]	0.186	0.50
	临界滑移系($\bar{1}\bar{1}1$)[101]	0.148	0.40

的滑移系及其 Schmid 因子, 其中 Q 为反映次滑移开动可能性的几何参量, 它定义为次滑移系与主滑移系的 Schmid 因子之比。一般认为, 当 Q 值大于 0.9 时, 次滑移系可能开动^[56]。对于取向位于 001/ $\bar{1}11$ 边上的某些晶体, 如 [001]、 $[\bar{1}17]$ 和 $[\bar{2}23]$, 主滑移位错与共轭滑移位错反应将形成 Lomer-Cottrell 锁, 位错反应强度很高, 且具有一定的交滑移机会, 因此 $\theta_{0.2}$ 值较高, 且随 γ_p 的增大而增大。尽管 $[\bar{1}12]$ 晶体在形变中也同样能够形成 Lomer-Cottrell 锁, 但几乎不能发生交滑移, 它的 $\theta_{0.2}$ 值较低, $\theta_{0.2}-\gamma_p$ 关系与单滑移晶体类似。对于位处 001/011 边上的临界双滑移取向晶体 [034] 和 [017], 以及位处 011/ $\bar{1}11$ 边上的共面双滑移取向晶体 $[\bar{2}55]$ 和 $[\bar{2}33]$, 其位错反应强度不大, 分别形成可滑的割阶和共面位错, 反应强度均较低, 因此 $\theta_{0.2}-\gamma_p$ 关系曲线表现出类似单滑移取向晶体的结果。至于多滑移取向晶体 [011], (111) $[\bar{1}01]$ (B4) 是主滑移系, 可能开动的次滑移系有 (111) $[\bar{1}10]$ (B5)、 $(\bar{1}\bar{1}1)[101]$ (A3) 和 $(\bar{1}\bar{1}1)[110]$ (A6), 它们的 Schmid 因子相同。但由于一个滑移系的开动将在另一个滑移系上引起潜在硬化, 使得彼此互相制约, 结果次滑移系都难以开动, 且无交滑移机会, 多滑移取向晶体反而表现出单滑移取向晶体的行为, 导致了较低的 $\theta_{0.2}$ 值, 且随 γ_p 增大无明显变化。[011] 晶体的循环硬化行为与同样是多滑移取向的 [001] 晶体 (见图 4.4) 和 $[\bar{1}11]$ ^[57] 晶体的循环硬化行为明显不同, 这说明必须从晶体在形变中实际可能开动的滑移系及其位错反应的强弱去理解硬化行为, 不能简单地根据晶体是否单滑移、双滑移或多滑移取向进行判断。

4.1.2 循环应力应变曲线的晶体取向效应

用表 4.1 中的循环饱和分解切应力 τ_s 对相应的塑性分解切应变幅 γ_p 作图, 可得出各晶体的循环应力应变曲线 (简称 CSS 曲线), 如图 4.5 所示。其中的虚线表示单滑移取向铜晶体的 CSS 曲线。从图 4.5 可知, 所示的不同取向晶体的 CSS 曲线大致可分为三类: ① 类似

单滑移晶体, CSS 曲线表现出明显的平台, 如 $[011]$ 、 $[034]$ 和 $[\bar{1}12]$ 晶体; ② 无明显平台区, 但在一定的 γ_{pl} 范围内呈现准平台, 如 $[\bar{2}33]$ 、 $[\bar{2}55]$ 和 $[017]$ 晶体; ③ 饱和分解切应力 τ_s 随塑性分解切应变幅 γ_{pl} 连续上升, 无任何平台区出现, 如 $[001]$ 和 $[\bar{1}17]$ 晶体。

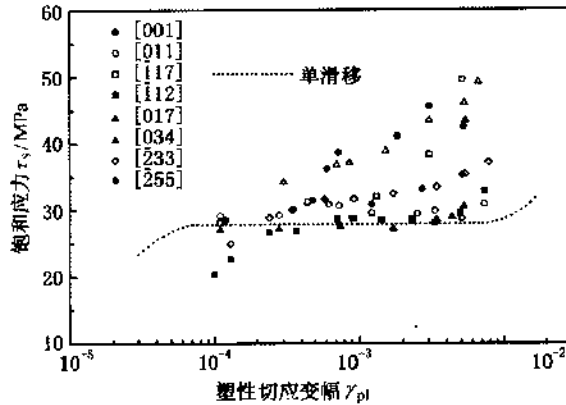


图 4.5 不同取向的铜单晶体的循环应力-应变(CSS)曲线

CSS 曲线的特征不仅反映了基本的循环形变过程, 而且如同单向拉伸的应力-应变曲线一样, 具有重要的工程意义, 是疲劳设计的基本依据。因此在材料的疲劳研究中, CSS 曲线一直是一个被普遍关注的问题。如前所述, 单滑移晶体的 CSS 曲线有 3 个明显不同的区段, 其中在约 $6.5 \times 10^{-5} \sim 7.5 \times 10^{-3}$ 两个数量级的塑性分解切应变幅范围内, 饱和分解切应力 τ_s 保持在约 28MPa 的水平, 在 CSS 曲线上形成一平台区(B 区)。从平台区的始端到末端正好对应着称为驻留滑移带(PSB)的形变集中区的发生、发展和终结。Winter^[59]曾经提出一个由硬相基体与软相 PSB 组成的双相模型来说明平台区的形成。他认为, 循环塑性形变 γ_{pl} 由 PSB 和基体按混合法则共同承担, 即

$$\gamma_{pl} = f\gamma_{PSB} + (1 - f)\gamma_m \quad (4.1)$$

式中 f 为 PSB 的体积分数; γ_{PSB} 是 PSB 中的塑性应变幅; γ_m 是基体中的塑性应变幅, 且 $\gamma_{PSB} \gg \gamma_m$ 。不管 γ_{PSB} 取何值, PSB 总是以 γ_{PSB} 作疲劳循环, 而基体以 γ_m 作疲劳循环。晶体以不同 γ_{pl} 进行形变是通过 PSB 的发展, 调整两相的相对量, 即 f 值来实现的。

晶体取向如何影响上述关于单滑移晶体的实验结果和理论分析是一个值得讨论的问题。首先让我们看看多滑移晶体的结果。根据 Lepisto 和 Kettunen 的实验结果^[57], 可以认为 $[\bar{1}11]$ 晶体的 CSS 曲线无平台区。由图 4.5 可知, $[001]$ 晶体的 CSS 曲线无平台区出现, 饱和应力随塑性应变幅的增加连续上升, 与多晶体的行为类似。但从图 4.5 可以注意到, $[011]$ 多滑移晶体的 CSS 曲线却在一个较宽阔的塑性应变幅范围内表现出明显的平台, 非常类似单滑移晶体的结果。这与前面关于 $[011]$ 晶体平均初始硬化率 $\theta_{0.2}$ 随 γ_{pl} 的变化特征是一致的。由此可见, 多滑移取向并不意味着 CSS 曲线平台区的消失, 重要的是滑移系的开动及其交互作用的强弱。下面让我们看看双滑移晶体的结果。 $[\bar{2}23]$ 、 $[\bar{1}12]$ 和 $[\bar{1}17]$ 是处于 $001/\bar{1}11$ 边上不同位置上的 3 个共轭双滑移晶体(见图 4.3)。由图 4.5 可知, 它们的 CSS 曲线有不同特征。 $[\bar{2}23]$ 晶体在所研究的塑性应变幅范围($1.5 \times 10^{-4} \sim 4.1 \times 10^{-3}$)内无明显的饱和现象, 结果类似于 $[\bar{1}11]$ 多滑移晶体^[57]; $[\bar{1}12]$ 晶体的 CSS 曲线在约 $5.0 \times 10^{-4} \sim 4.0 \times 10^{-3}$ 的塑性

应变幅范围内呈现平台区,与单滑移晶体相比,平台区明显缩短,但 $[\bar{1}17]$ 晶体的 CSS 曲线则无明显的平台区。 $[034]$ 晶体和 $[017]$ 晶体是临界双滑移晶体,它们分别位处 001/011 边的两端附近,分别靠近 $[011]$ 晶体和 $[001]$ 晶体(见图 4.3)。由图 4.5 可知, $[034]$ 晶体的 CSS 曲线在 $\gamma_p=1.0 \times 10^{-4} \sim 4.3 \times 10^{-3}$ 的范围内呈现平台区,平台区的范围比 $[011]$ 晶体的短。而 $[017]$ 晶体的 CSS 曲线只在一个较窄的塑性应变范围内($5.0 \times 10^{-4} \sim 1.5 \times 10^{-3}$)出现一个不明显的准平台。由此可见,对于取向位于 001/011 边上的铜晶体,从 $[011]$ 晶体的较长平台,到 $[034]$ 的较短平台,再到 $[017]$ 的准平台,直至 $[001]$ 晶体平台的消失,清楚地演示出 CSS 曲线平台行为的取向关系。越靠近 $[011]$ 取向,CSS 曲线特征越接近单滑移晶体的结果,而越靠近 $[001]$ 取向,越类似多晶体。由图 4.5 还可看出,对于取向位于 011/ $\bar{1}11$ 边上的共面滑移双晶体来说,从 $[011]$ 晶体有宽阔的平台区到 $[\bar{1}11]$ 晶体平台区的消失,是以共而双滑移取向晶体的准平台行为的出现作为过渡的。

在以上分析讨论的基础上,可以把铜单晶体 CSS 曲线平台行为的取向效应综合示意表示在图 4.6 中。显然,不同于单滑移晶体,晶体取向强烈影响着双滑移和多滑移晶体的循环应力应变行为。CSS 曲线平台区是否出现,以及平台饱和和应力的高低,与晶体中可能开动的滑移系及其位错交互作用的模式和强弱有关。一般来说,当形变主要以多滑移方式进行时,平台区消失。以上结果将有助于进一步理解多晶材料的循环形变行为。

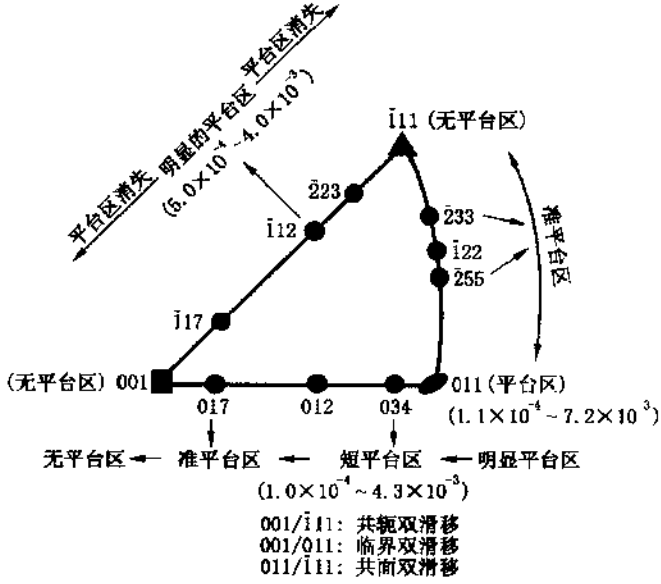


图 4.6 晶体循环应力应变曲线特征与晶体在标准取向三角形中所处位置的关系

4.1.3 铜单晶体在循环形变中形成的形变带

无论是单滑移取向、双滑移取向,抑或多滑移取向的铜单晶体,在循环形变进入饱和后,在试样表面上往往可以观察到驻留滑移带(PSB)和形变带(deformation band, DB)。关于驻

留滑移带的形貌、位错结构和形成机制,以及它们在疲劳裂纹萌生中的作用,一直是近三十多年来材料疲劳基础研究的主题,本文将不赘述。但关于形变带却很少有系统深入的研究。

早在 20 世纪 30 年代末,Barrett 和 Levenson^{[60],[61]}在研究铝单晶体的单向压缩变形时就曾观察到形变带的产生,他们认为形变带是晶体取向相对于周围晶体发生了明显偏转的局部区域。随后 Cahn^[62],Honeycombe^[63]和 Calnan^[64]都发现面心立方晶体在单向拉伸时形成两种宏观形变带:一种称为扭折带,它与主滑移面和滑移方向垂直;另一种称为二次滑移带,它们与滑移面平行,由次滑移线组成。这些关于形变带的早期工作大都建立在单向形变的实验基础上。直到 70 年代,Gostelow^[65]和 Mughrabi^[1]在研究单滑移取向铜单晶体的循环形变时发现,在较高的塑性应变幅($\gamma_{pl} \approx 10^{-2}$)下产生的形变带与传统的扭折带相似。Mughrabi^[1]认为这种形变带的形成与长程内应力的松弛有关。Saletore 和 Taggart^[66]发现 $[\bar{1}22]$ 双滑移取向铜单晶体在低应变疲劳中形成的两类形变带位于 45° 最大剪切平面上,他们认为宏观应力状态是决定形变带产生的根本因素。本项研究发现,在一定的塑性应变幅下,不同滑移取向的铜单晶试样表面都形成明显的宏观形变带,而且这些形变带表现出某种相似性。这里所涉及的晶体有 $[\bar{2}23]$ 、 $[\bar{1}12]$ 和 $[\bar{1}17]$ 共轭双滑移晶体,有 $[034]$ 和 $[017]$ 临界双

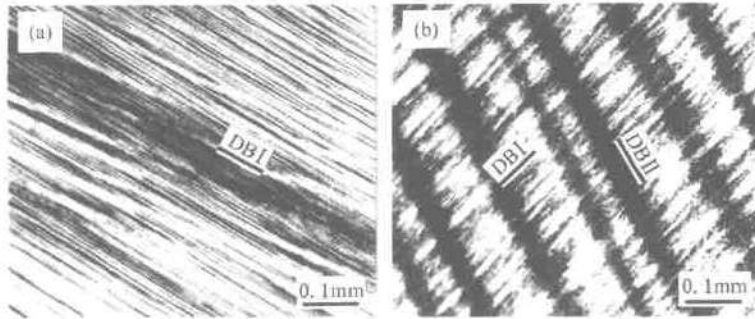


图 4.7 $[\bar{1}12]$ 晶体在不同应变幅下形成的形变带
(a) $\gamma_{pl} = 7.1 \times 10^{-4}$; (b) $\gamma_{pl} = 3.3 \times 10^{-3}$

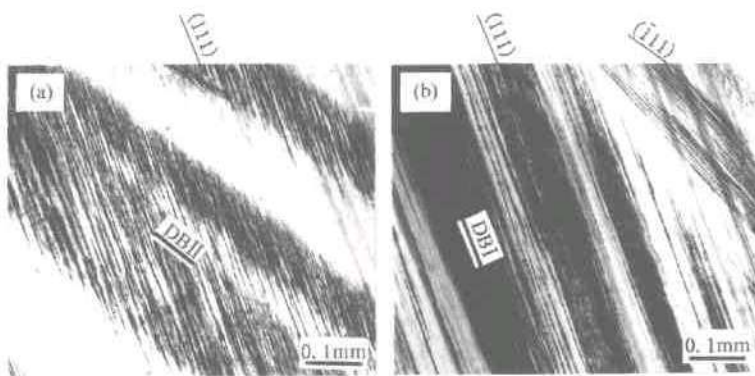


图 4.8 $[017]$ 晶体在不同应变幅下形成的形变带
(a) $\gamma_{pl} = 7.0 \times 10^{-4}$; (b) $\gamma_{pl} = 9.4 \times 10^{-4}$

滑移晶体,有 $[\bar{2}55]$ 和 $[\bar{2}33]$ 共面双滑移晶体,有 $[011]$ 多滑移晶体。

作为例子,图 4.7、图 4.8、图 4.9 和图 4.10 分别表示 $[\bar{1}12]$ 晶体、 $[017]$ 晶体、 $[\bar{2}33]$ 晶体和 $[011]$ 晶体在循环形变饱和后,试样表面形成的宏观形变带。所有晶体都形成简称为 DB I 和 DB II 的两类形变带,但 $[011]$ 晶体还形成第三类形变带 DB III。通过测量可以确定 DB I, DB II 和 DB III 与试样表面的取向关系,并通过简单的晶体学计算可确定它们的惯习面,结果列在表 4.3 中。由表可知,DB I 和 DB II 均不处在 45° 最大切应力平面上,DB I 的惯习面接近主滑移面 (111) ,而 DB II 的惯习面接近传统的扭转面 $\{101\}$,两者呈严格的正交关系。 $[011]$ 晶体中当应变幅较大时出现的 DB III 的惯习面为 (001) ,正好处于 45° 最大切应力平面上。

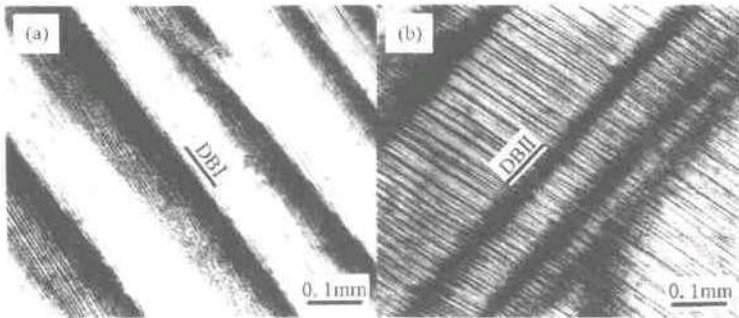


图 4.9 $[\bar{2}33]$ 晶体在 $\gamma_{pl}=3.5 \times 10^{-3}$ 下形成的形变带

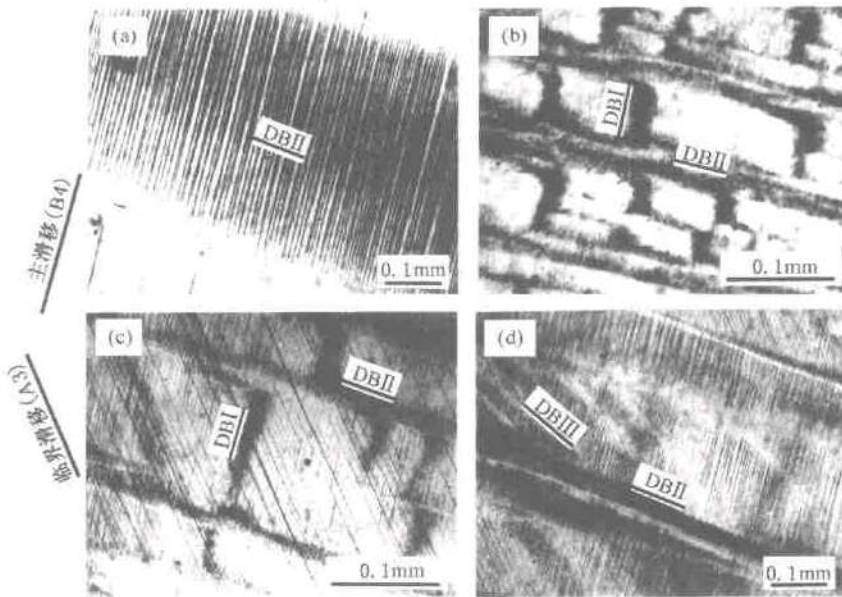


图 4.10 $[011]$ 晶体在不同应变幅下形成的形变带

(a) $\gamma_{pl}=1.2 \times 10^{-3}$; (b) $\gamma_{pl}=2.5 \times 10^{-3}$; (c) $\gamma_{pl}=5.0 \times 10^{-3}$; (d) $\gamma_{pl}=7.2 \times 10^{-3}$

最近翟同广等人^{[67],[68]}在研究铝单晶体的疲劳损伤时,利用扫描电子显微镜电子通道衬度技术和时间分辨声学显微镜对宏观形变带进行了观察,发现它们相对于周围基体发生了大约6°的晶格旋转。他们认为晶格的不可逆旋转是宏观形变带形成的一个可能原因,但未对造成这种旋转的机制给出合理的解释。本项研究从晶体形变几何学的角度分析了循环形变中晶体不可逆旋转产生的过程。

表 4.3 形变带与加载轴及某些晶体学面的几何关系

加载轴	DB 的惯习面	角 度							
		DB I &	DB I &	DB II &	DB I &	DB II &	DB II &	DB I &	DB I &
轴		加载轴	加载轴	加载轴	& (111)	& ($\bar{1}01$)	& (0 $\bar{1}1$)	& ($\bar{1}10$)	& DB I
[011]	DB I (0.49 0.67 0.56) DB II (-0.63 -0.18 0.76) DB III (0 0 1)	60°	24°	45°	7°	11°	—	—	90°
[034]	DB I (0.54 0.64 0.56) DB II (-0.59 -0.12 0.78)	56°	30°	—	4°	14°	—	—	89°
[255]	DB I (0.70 0.57 0.44) DB II (-0.65 -0.76 0.00)	30°	44°	—	9°	—	—	4°	89°
[233]	DB I (0.65 0.57 0.50) DB II (-0.44 -0.25 0.86)	12°	35°	—	7°	23°	—	—	90°
[$\bar{1}12$]	DB I (0.65 0.51 0.57) DB II (-0.64 -0.07 0.77)	24°	59°	—	3°	4°	—	—	89°
[223]	DB I (0.59 0.60 0.54) DB II (-0.64 -0.02 0.77)	23°	59°	—	3°	4°	—	—	88°
[$\bar{1}17$]	DB I (0.65 0.60 0.46) DB II (-0.01 -0.63 0.77)	26°	42°	—	12°	—	6°	—	88°

面心立方单晶体在单向拉伸条件下,晶体轴向朝主滑移方向旋转,在单向压缩条件下,晶体轴向朝主滑移面法向旋转^[69]。而一般认为^[4],在晶体的对称循环加载中,则没有这种取向的变化。其实,在循环加载中,拉压交替进行。如图 4.11 所示,以任意取向晶体 O 为例,当晶体在拉应力作用下,晶体轴向将沿 O 与 $[\bar{1}01]$ 组成的大圆弧向 $[\bar{1}01]$ 方向旋转,由 O 点转到 N 点,其旋转途径为 a ;当变到压应力作用时,晶体轴向将由 N 点沿 N 与 $[111]$ 组成的大圆弧朝 $[111]$ 旋转,其途径为 b 。可见经过一个拉压循环的应变作用,晶体的取向由 O 不可逆地变化到 O' ,随着循环的作用,晶体取向将沿着图 4.11 中箭头所指方向向着 A 点旋转,使不可逆旋转不断累积,最终导致晶体取向发生局部的小角度旋转。由于是向着 $[\bar{1}01]$ 和 $[111]$ 两个方向旋转,从而不难理解形成相互正交的 DB I 和 DB II。

为证实上述讨论的正确性,下面做进一步的晶体形变几何学的分析。单晶体在单向拉伸和压缩途径下,晶体轴向分别朝 $[\bar{1}01]$ 和 $[111]$ 旋转的角度是^[69]

$$\sin\lambda_1 = \frac{L_0}{L} \sin\lambda_0 \quad (4.2)$$

$$\cos\lambda_2 = \frac{L}{L_0}\cos\lambda_0 \quad (4.3)$$

式中 λ_0 为初始加载轴与主滑移方向之间的夹角; λ_1, λ_2 分别为拉伸和压缩应力作用下加载轴发生偏转后与主滑移方向之间的夹角; L_0 为试样的原始长度; L 为试样变形后的长度。

当晶体轴向处于 $[\bar{1}01]$ — $[111]$ 大圆弧上, 且在拉-压应力作用下分别朝 $[\bar{1}01]$ 和 $[111]$ 方向旋转的角度相等时, 这种拉-压循环造成的不可逆旋转将消失。在循环加载情况下, 如果假设在拉伸应力作用下加载轴由 A 点沿 $[\bar{1}01]$ 与 $[111]$ 组成的大圆弧向 $[\bar{1}01]$ 偏转 θ 角到 B 点(见图 4.11), 根据(4.2)式则有

$$\sin(\lambda_0 - \theta) = \frac{L_0}{L}\sin\lambda_0 \quad (4.4)$$

式中

$$L = L_0(1 + \gamma_{pl}\Omega) \quad (4.5)$$

式中 γ_{pl} 为外加塑性切应变幅; Ω 为主滑移系的 Schmid 因子。

由(4.4)式和(4.5)式可得

$$\sin(\lambda_0 - \theta) = \frac{1}{1 + \gamma_{pl}\Omega}\sin\lambda_0 \quad (4.6)$$

如果在压缩应力作用下加载轴沿 $[\bar{1}01]$ 与 $[111]$ 组成的大圆弧向 $[111]$ 也偏转 θ 角, 则加载轴由 B 点位置又恢复到最初的 A 点位置, 不可逆旋转将消失。在这种情况下, 由(4.3)式可得

$$\cos\lambda_0 = \frac{L}{L_0}\cos(\lambda_0 - \theta) \quad (4.7)$$

式中

$$L = L_0(1 - \gamma_{pl}\Omega) \quad (4.8)$$

由(4.7)式和(4.8)式可得

$$\cos(\lambda_0 - \theta) = \frac{1}{1 - \gamma_{pl}\Omega}\cos\lambda_0 \quad (4.9)$$

由(4.6)式和(4.9)式可得

$$\sin^2\lambda_0 = \frac{(2 - \gamma_{pl}\Omega)(1 + \gamma_{pl}\Omega)^2}{4} \quad (4.10)$$

显然, 上式中 $\gamma_{pl}\Omega \ll 1$, 因此可得

$$\sin^2\lambda_0 \approx \frac{1}{2} \Rightarrow \lambda_0 = 45^\circ \quad (4.11)$$

这也就是说, 当晶体取向处于 $[\bar{1}01]$ — $[111]$ 大圆弧上, 且与 $[\bar{1}01]$ 和 $[111]$ 都成 45° , 即 Schmid 因子 $\Omega = 0.5$ 时, 不可逆旋转几乎消失。此时应当不易出现 DB I 和 DB II。为了证实以上分析, 我们特地定向切割了该取向 $[\bar{4}1841]$ 的铜单晶体, 进行循环变形实验。结果发现, 在塑性应变幅 $\gamma_{pl} = 3.3 \times 10^{-3}$ 下, 并未出现 DB I 和 DB II, 表面上只观察到粗的主滑移带。

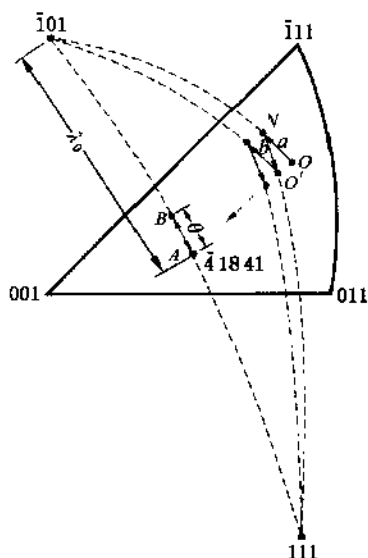


图 4.11 对称循环应变作用下晶体轴向不可逆旋转的示意图

当应变幅增加到 $\gamma_{pl} = 7.7 \times 10^{-3}$ 时,表面上才观察到少量类似 DB I 的形变带,但未出现 DB II 类形变带。这可能是由于在晶体定向和疲劳实验中,不可能使加载轴方向精确定在 $[\bar{4} 18 41]$ 上,在大应变幅下就可能使晶体轴向微弱的不可逆旋转而出现 DB I。但这足以说明 $[\bar{4} 18 41]$ ($\Omega = 0.5$) 取向晶体很难同时出现 DB I 和 DB II 形变带。显然,当加载轴不处于该点位置(如图 4.11 中的 O 点位置)时,随着累积塑性应变量的增大,其加载轴均有朝该位置偏转的倾向。

4.1.4 位错结构特征及其与晶体取向关系

单滑移取向铜晶体的循环形变饱和和位错结构与外加应变幅强烈有关(详见评述论文[3]和[70],以及专著[4]),在 CSS 曲线的平台区,位错组态是由楼梯(ladders)和脉络(veins)组成的“两相”结构,其中楼梯结构对应着表面的驻留滑移带(P SB),当 γ_{pl} 低于平台区的始端,在图 4.1 中的 A 区,位错结构只由脉络组成,而当 γ_{pl} 高于平台区的末端,在图 4.1 中的 C 区,将可能发展迷宫(labyrinth)和胞(cell)结构,它们与多滑移有关。但是,人们关于双滑移和多滑移晶体的循环形变饱和和位错结构还缺乏系统的研究。金能蕴和 Winter^{[6],[7],[55]} 曾经指出,双滑移和多滑移铜单晶体的位错组态与晶体取向,因而与位错反应类型强烈有关。但是这些研究仅局限于一个塑性分解切应变幅($\gamma_{pl} = 3 \times 10^{-3}$)。

作为例子,本文将介绍 $[034]$ 临界双滑移晶体和 $[001]$ 多滑移晶体在不同塑性应变幅循环作用下引入的位错结构。当外加塑性分解切应变幅 $\gamma_{pl} \leq 1.7 \times 10^{-3}$, $[034]$ 晶体的循环饱和和位错结构基本上是相同的。图 4.12 是 $[034]$ 晶体在 $\gamma_{pl} = 1.7 \times 10^{-3}$ 下疲劳到饱和时(111)

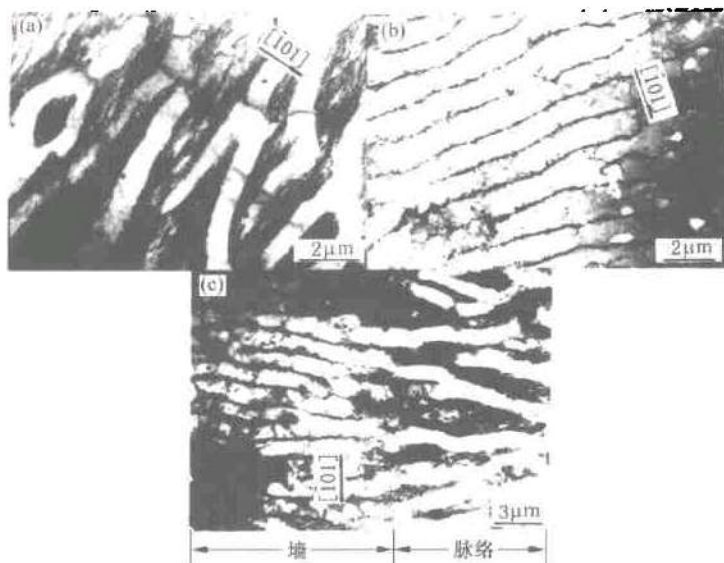


图 4.12 $[034]$ 晶体(111)面上的循环饱和和位错结构($\gamma_{pl} = 1.7 \times 10^{-3}$)

(a) 脉络结构; (b) 墙结构; (c) 脉络和墙混合

截面上的典型位错结构,它们是由位错脉络(图 4.12(a))和位错墙(图 4.12(b))组成,而且发现脉络结构向墙结构转变的例子(图 4.12(c))。当外加应变幅增加到 3.4×10^{-3} 时,位错结构变得比较复杂,图 4.13 是(1 $\bar{2}$ 1)面上的循环饱和位错结构,可以清晰地看到楼梯结构和脉络结构的存在(图 4.13(a))。但是这类结构只占所观察面积的一小部分,大部分面积是由还没有得到充分发展的迷宫结构所占有(图 4.13(b))。迷宫中平均通道的宽度为 $0.7 \mu\text{m}$,约是楼梯结构中梯梁间距的一半。另外,某些迷宫结构已发展成胞结构(图 4.13(c))。同单滑移取向晶体相比,双滑移取向的[034]晶体在较低的应变幅下就发展了迷宫结构,这是因为临界滑移系参与的结果(见表 4.2),这也就使得[034]晶体 CSS 曲线上的平台区变短,平台末端应变幅降低(见图 4.5)。

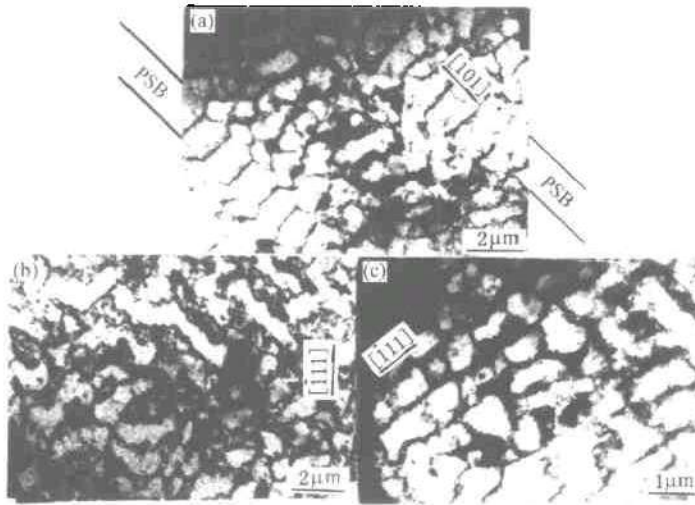


图 4.13 [034]晶体(1 $\bar{2}$ 1)面上的循环饱和位错结构($\gamma_{pl}=3.4 \times 10^{-3}$)
(a) 楼梯和脉络结构; (b) 迷宫结构; (c) 胞结构

本项工作对[001]多滑移晶体在 $\gamma_{pl}=2.4 \times 10^{-4} \sim 3.0 \times 10^{-3}$ 范围内的循环饱和位错结构进行了系统的观察和深入的分析^[24]。当应变幅较高时,由两组相互垂直的墙组成的迷宫结构是经常观察到的典型位错组态,如图 4.14 所示。在图 4.14(a)的情况,膜面平行(1 $\bar{2}$ 0),而图 4.14(b)的膜面平行(210)。由于迷宫结构中一组位错墙几乎与膜面(210)平行,因此在图 4.14(b)中看到一些大的块状墙。通过对图 4.14(a)所示的迷宫结构的几何学和晶体学测定和分析,发现两组墙中的一组总是平行(001)面,而另一组虽然总是垂直于(001)面,但却可能是如下不同的面:(100)、(210)或(120),而以(100)和(210)出现的几率最多。迷宫墙主要由位错碎片(debris)、位错缠结(tangles)和位错圈(loop)组成,由于墙中位错密度很高,但难区分单根位错线。人们已广泛接受,单滑移取向单晶体在疲劳过程中的形变主要通过 PSB 楼梯通道中的螺位错运动来实现。在迷宫结构中也有类似的证据,图 4.15 表示刃型位错由迷宫墙向通道中弓出的例子,其螺型段将向外运动。图 4.16 表示中等应变幅下形成的循环饱和位错结构,它们由均匀的迷宫结构组成,类似高应变幅的情况(图 4.14),这里的迷宫结构墙也是(001)、(100)和(120)类型墙,但是迷宫结构的微观参量,如通道的宽度和墙的体积

分数随应变幅的降低而明显增加。测量表明, $\gamma_p = 4.8 \times 10^{-4}$ 下形成的迷宫墙的体积分数约为 50%, 而高应变幅 ($1.8 \times 10^{-3} \sim 3.0 \times 10^{-3}$) 下的体积分数只有约 10%。当应变幅进一步降低, 例如 $\gamma_p \leq 2.4 \times 10^{-4}$, 位错组态仍然主要是迷宫结构, 但迷宫墙变得不规则, 而且墙之间的通道宽度增大(图 4.17)。

[001]晶体的循环饱和位错结构明显不同于单滑移取向晶体中的所谓“两相”结构, 而是更类似于多晶体中的位错结构^{[71]-[73]}。根据上述结果可见, 即便在低应变幅下, 多滑移晶体也不会发展 PSB 楼梯结构, 因此[001]晶体的 CSS 曲线上不出现平台区是很自然的结果。现

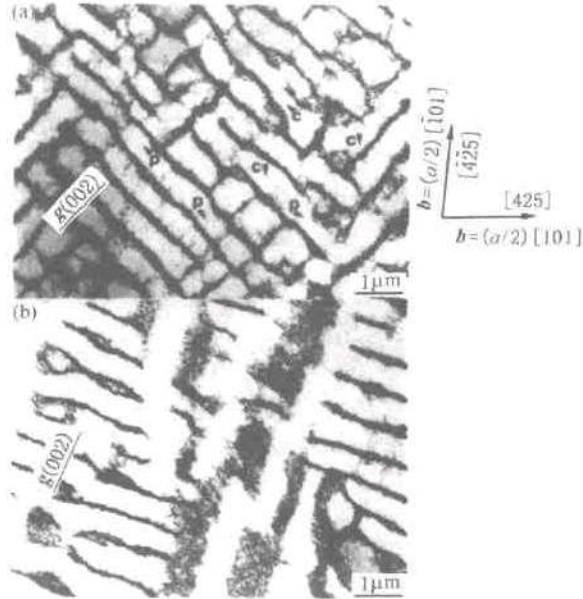


图 4.14 [001]晶体在 $\gamma_p = 1.8 \times 10^{-3}$ 下循环到饱和的位错结构

(a) 膜面平行 $(\bar{1}20)$, $B = (120)$, $g = (002)$; (b) 膜面平行 (210) , $B = (210)$, $g = (002)$

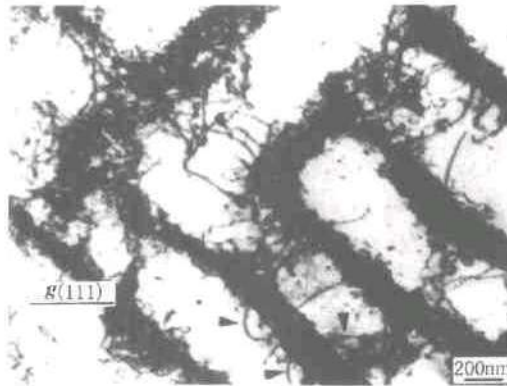


图 4.15 刃型位错由迷宫墙向通道中弓出膜面平行 (210) ,

$\gamma_p = 3.0 \times 10^{-3}$; $B = (\bar{1}21)$, $g = (111)$

在我们似乎有理由说,CSS 曲线上是否存在平台取决于循环形变是以多滑移控制,还是单滑移控制。

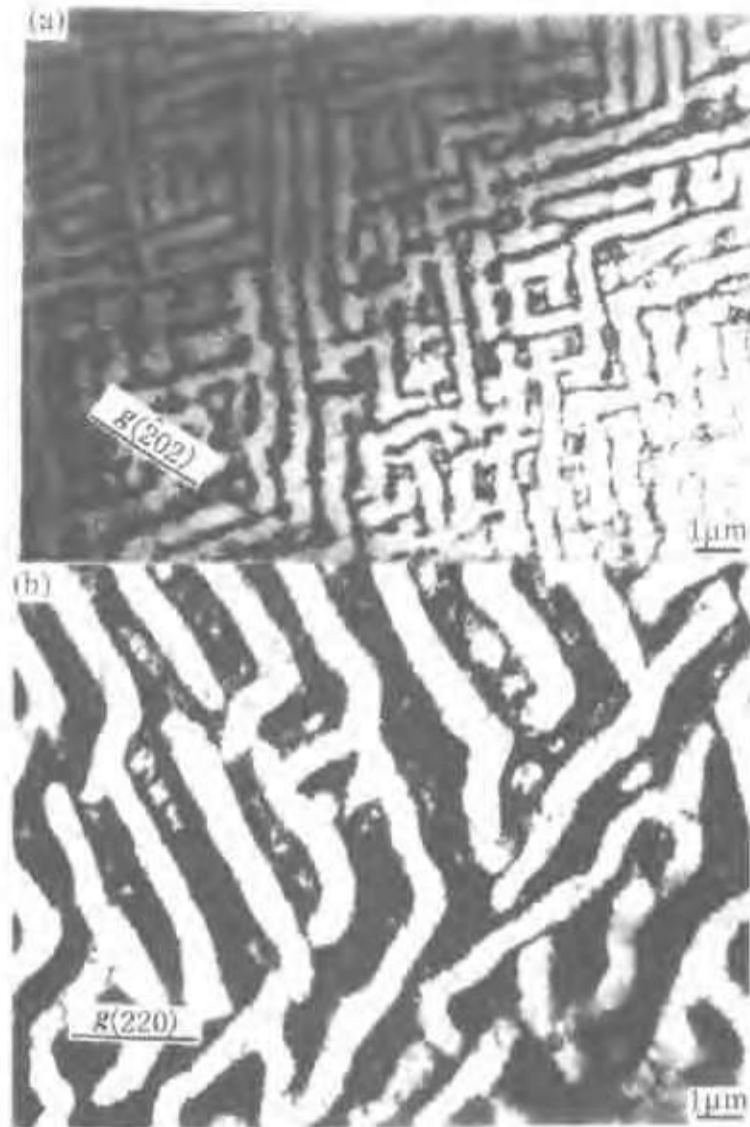


图 4.16 $[001]$ 晶体在中等应变幅作用下形成的迷宫结构
 (a) $\gamma_p = 7.4 \times 10^{-3}$,膜面平行 $(1\bar{2}1)$, $B = (1\bar{2}1)$, $g = (202)$;
 (b) $\gamma_p = 4.8 \times 10^{-3}$,膜面平行 (111) , $B = (\bar{1}11)$, $g = (220)$

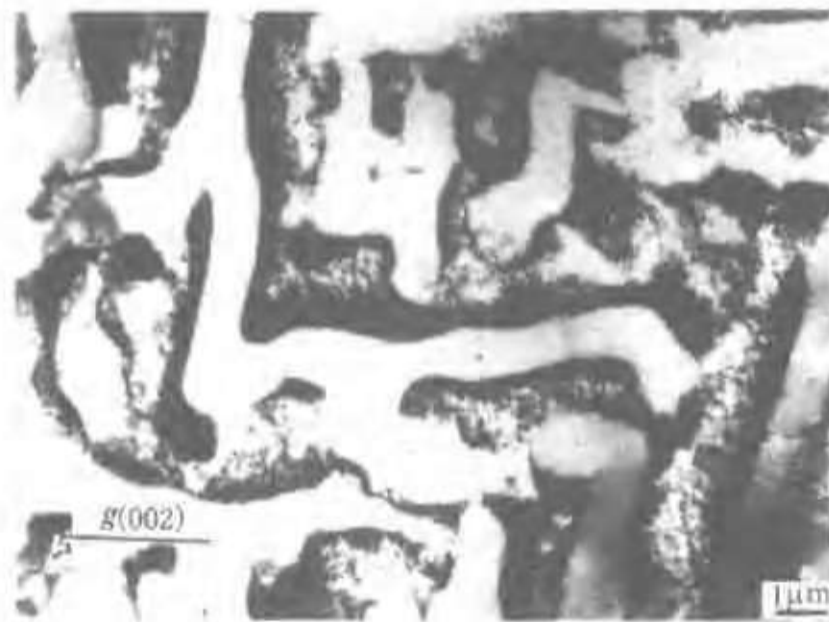


图 4.17 $[001]$ 晶体在低应变幅作用下形成的迷宫结构
 $\gamma_p = 2.4 \times 10^{-3}$,膜面平行 $(\bar{1}20)$, $B = (\bar{1}20)$, $g = (002)$

4.2 疲劳损伤的晶界效应

绝大多数工程材料是多晶体,关于多晶材料的疲劳损伤已有大量的研究,但由于问题的复杂性,其疲劳损伤的基本过程和机制远不如单晶材料清楚。多晶体由大量取向随机分布的晶粒组成,双滑移和多滑移是多晶体大部分晶粒变形的一个基本特征。前面所述的工作证实,双滑移,特别是多滑移单晶体的循环形变行为更加类似多晶体。不过,多晶体中存在大量的不同类型的晶界,如果不考虑它们在循环形变中的作用,就不能完整地描述多晶体的疲劳损伤。因此利用双晶、三晶和复晶来研究循环形变,将会引导我们从最基本的过程方面去了解复杂的多晶材料的疲劳损伤,但由于晶体制备的困难,这方面的工作很少有报导。本节将简单介绍本项研究在这方面所取得的主要结果。

4.2.1 双晶体的循环形变特征

首先介绍平行晶界铜双晶体的有关结果。用扩散焊接技术制备了 $[\bar{1}35]/[\bar{1}35]$ 、 $[\bar{2}35]/[\bar{2}35]$ 和 $[\bar{1}35]/[\bar{2}35]$ 三种平行晶界双晶体(图 4.18(a)),并用 Bridgman 法生长出一种 $[\bar{6}79]/[\bar{1}45]$ 平行晶界双晶体(图 4.18(b)),简称 RB。为了揭示晶界在循环形变中的贡献,将 $[\bar{6}79]$ 与 $[\bar{1}45]$ 组合成一双晶体,但中间没有晶界(图 4.18(c)),简称 CB。所有组成双晶体的组元晶体的取向如图 4.18(d)所示,它们都是单滑移取向。图 4.19 是几种平行晶界双晶体的 CSS 曲线,可见 $[\bar{1}35]/[\bar{1}35]$ 、 $[\bar{1}35]/[\bar{2}35]$ 和 $[\bar{2}35]/[\bar{2}35]$ 的 CSS 曲线均有明显的平台区,但三种双晶体的平台饱和分解切应力 τ_s 不同,表明晶界的强化效应不同。其中 $[\bar{1}35]/$

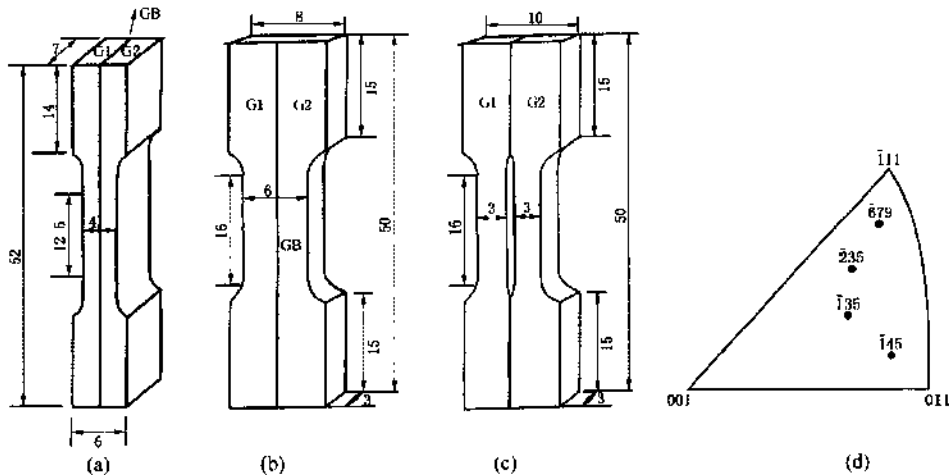


图 4.18 平行晶界双晶体疲劳试样的几何尺寸(单位为 mm)和组元晶体的取向
 (a) $[\bar{1}35]/[\bar{1}35]$ 、 $[\bar{2}35]/[\bar{2}35]$ 和 $[\bar{1}35]/[\bar{2}35]$; (b) $[\bar{6}79]/[\bar{1}45]$ (RB);
 (c) $[\bar{6}79]/[\bar{1}45]$ (CB); (d) 组元晶体取向

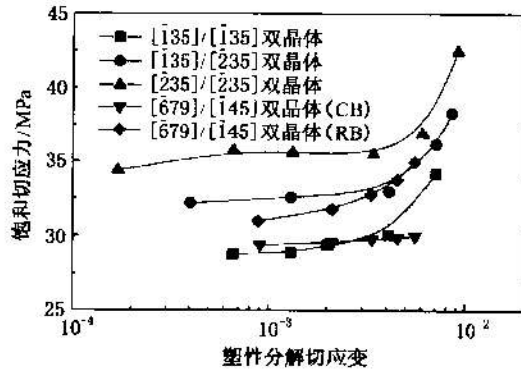


图 4.19 几种平行晶界铜双晶体的循环应力-应变曲线

$[\bar{1}35]$ 双晶体的 τ_s 与组元单晶体的相等,为29~30MPa,说明 $[\bar{1}35]/[\bar{1}35]$ 双晶所含的对称倾侧重位晶界对循环形变饱和行为的影响较小。但 $[\bar{1}35]/[\bar{2}35]$ 和 $[\bar{2}35]/[\bar{2}35]$ 双晶体的 τ_s 分别为32.5MPa和36MPa,明显高于单滑移取向单晶体的 τ_s (28~30MPa),这是因为组元晶体 $[\bar{2}35]$ 比 $[\bar{1}35]$ 更接近双滑移取向。比较图4.19中RB双晶体与CB双晶体的实验结果,可清晰地看出晶界本身对循环形变硬化的贡献。晶界和晶界两边组元晶体的滑移性质是双晶体循环形变特征的主要内在影响因素。图4.20所示的表面滑移特征揭示了 $[\bar{1}35]/[\bar{1}35]$ 与 $[\bar{2}35]/[\bar{2}35]$ 晶界附近滑移特征的差别,它与图4.19中这两种双晶体的CSS曲线特征是一致的。图4.21是 $[\bar{6}79]/[\bar{1}45]$ 双晶体晶界附近的滑移特征,可见 $[\bar{6}79]$ 晶体中晶界附近的主滑移与次滑移交替出现,形成宏观形变带。这种影响区的宽度随应变幅的上升而增大。当

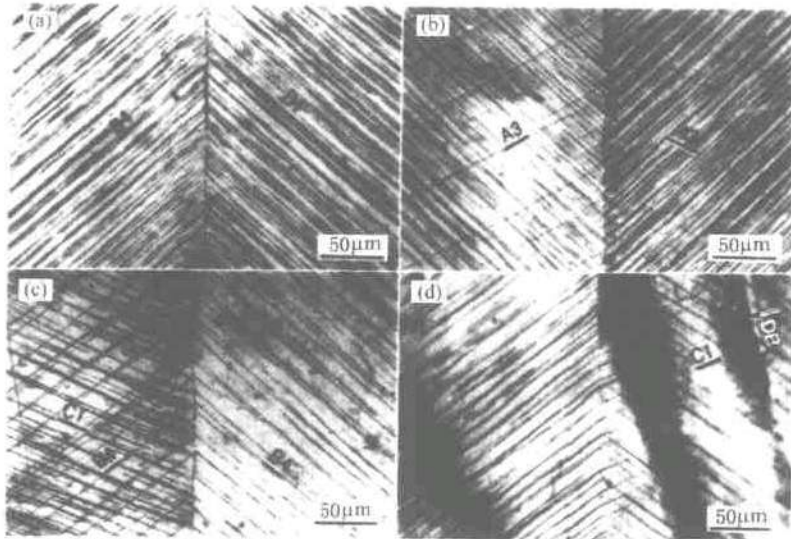


图 4.20 平行晶界铜双晶体的表面滑移形貌

(a) $[\bar{1}35]/[\bar{1}35]$, $\gamma_{pl} = 6.63 \times 10^{-4}$; (b) $[\bar{1}35]/[\bar{1}35]$, $\gamma_{pl} = 1.08 \times 10^{-3}$;
(c) $[\bar{2}35]/[\bar{2}35]$, $\gamma_{pl} = 6.63 \times 10^{-4}$; (d) $[\bar{2}35]/[\bar{2}35]$, $\gamma_{pl} = 6.0 \times 10^{-3}$
图中 B4 代表 $(111)[\bar{1}01]$, A3 代表 $(\bar{1}11)[101]$, C1 代表 $(\bar{1}\bar{1}1)[011]$

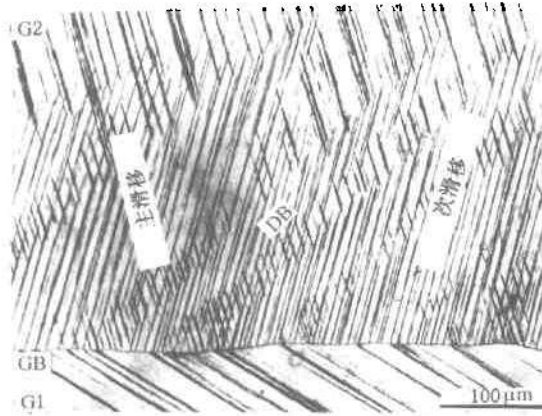


图 4.21 平行晶体双晶体 $[\bar{6}79]/[\bar{1}45]$ 的晶界附近的形变特征(轴向总应变幅 $\epsilon_a = 1.5 \times 10^{-3}$)

应变幅为 1×10^{-3} 时,其宽度约为 $265 \mu\text{m}$,但在 3×10^{-3} 时,增大到 $650 \mu\text{m}$ 。

在多晶体中既有与加载轴平行,也有与加载轴垂直,或成任意角度的倾斜晶界,由于在形变过程中晶界两边晶粒中的形变分配不同,晶界面相对于加载轴的取向将是影响形变中晶界效应的一个重要因素。因此研究具有垂直晶界和倾斜晶界的双晶体的循环形变行为,是深入了解多晶体循环形变行为必不可少的工作。在本项研究中,用 Bridgman 方法生长了 $[\bar{3}45]/[\bar{1}17]$ 、 $[\bar{1}34]/[\bar{1}34]$ 、 $[\bar{5}913]/[\bar{5}79]$ 和 $[\bar{1}23]/[\bar{3}35]$ 四种具有不同组元晶体组合的垂直晶界双晶体。这些双晶疲劳试样的几何尺寸和各组元晶体的取向如图 4.22 所示。下面将重点介绍 $[\bar{3}45]/[\bar{1}17]$ 双晶体的结果^[26],并与其他双晶体进行比较。图 4.23 是用 $[\bar{3}45]/[\bar{1}17]$ 双晶的轴向饱和应力对轴向应变作图得到的 CSS 曲线,为了比较,文献中报导的几种不同晶粒尺寸的铜多晶的 CSS 曲线也表示在图中。由图可知, $[\bar{3}45]/[\bar{1}17]$ 双晶的轴向饱和

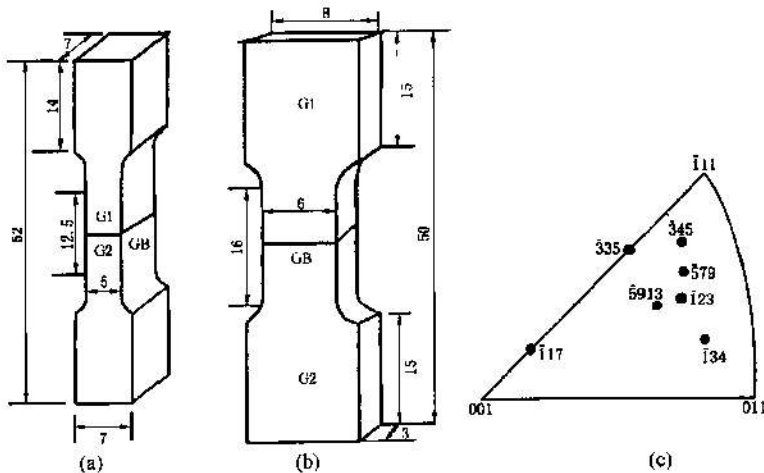


图 4.22 垂直晶界双晶体疲劳试样的几何尺寸(单位为 mm)和组元晶体的取向
(a) $[\bar{3}45]/[\bar{1}17]$ 和 $[\bar{1}34]/[\bar{1}34]$; (b) $[\bar{5}913]/[\bar{5}79]$ 和 $[\bar{1}23]/[\bar{3}35]$; (c) 组元晶体取向

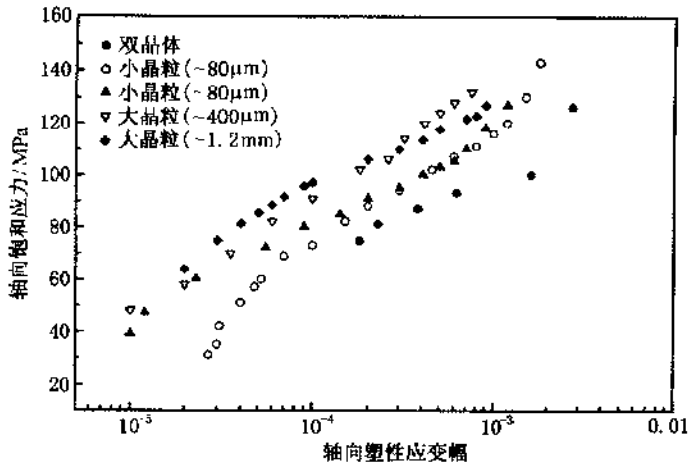


图 4.23 $[\bar{3}45]/[\bar{1}17]$ 双晶体的轴向循环应力-应变曲线
及其与不同晶粒尺寸多晶体的比较

应力均低于几种多晶的轴向饱和应力, CSS 曲线类似多晶, 不呈现明显的平台。图 4.24 是 4 种垂直铜双晶体的轴向应力应变 (CSS) 曲线。比较可见, $[\bar{1}34]/[\bar{1}34]$ 双晶体的饱和应力最低, 有一明显的饱和应力不变区或平台区, $[\bar{5}913]/[\bar{5}79]$ 双晶体的饱和应力高于 $[\bar{1}34]/[\bar{1}34]$, 且 CSS 曲线有两个饱和应力大小不同的平台区, $[\bar{1}23]/[\bar{3}35]$ 双晶体的饱和应力又进一步提高, CSS 曲线上还有一个较短的平台区, 而 $[\bar{3}45]/[\bar{1}17]$ 双晶体的饱和应力明显高于其他 3 种双晶体, 而且饱和应力随应变幅连续上升, 不呈现明显的平台, 但有一准平台。这 4 种双晶体 CSS 曲线和循环饱和应力的这种系统变化是同它们的组元晶体的取向密切相关的。由图 4.22(c) 可知, $[\bar{1}34]/[\bar{1}34]$ 和 $[\bar{5}913]/[\bar{5}79]$ 是单滑移/单滑移组合双晶体, 而 $[\bar{1}23]/[\bar{3}35]$ 和 $[\bar{3}45]/[\bar{1}17]$ 是单滑移/双滑移组合双晶体。由于单滑移取向晶体的 CSS 曲线有明显的平台区, 因此它们的不同组合将产生不同的结果。作为一个例子, 图 4.25 示意地说明了单滑移/双滑移组合双晶体的 CSS 曲线的形成。

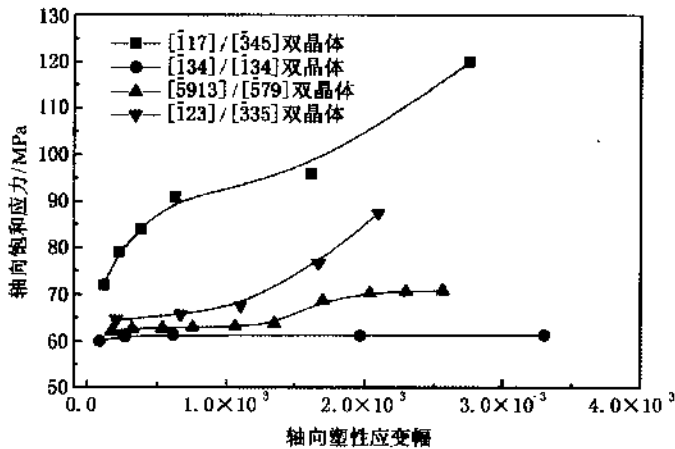


图 4.24 4 种垂直晶界铜双晶体轴向循环应力-应变曲线的比较

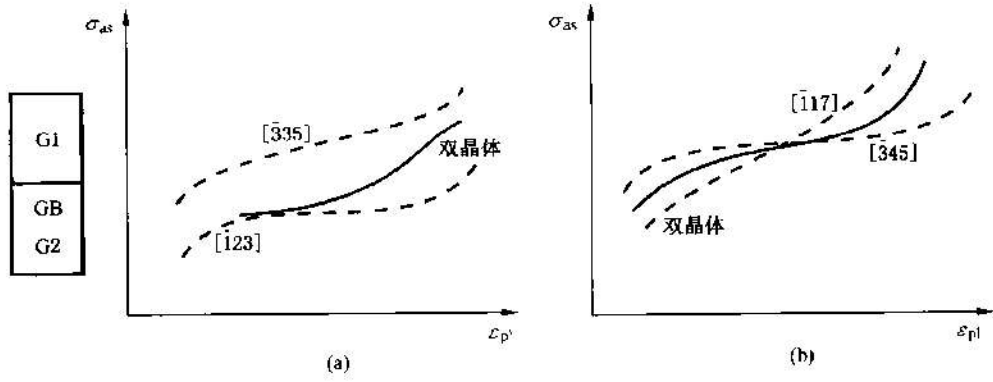


图 4.25 单滑移/双滑移组合双晶体 CSS 曲线形成的示意图
(a) $[123]/[335]$; (b) $[345]/[117]$

4.2.2 驻留滑移带与晶界的交互作用及晶界邻域的位错结构

由于晶界两边的应变不协调,晶界邻域常常出现多滑移,形成晶界影响区。试验证实,驻

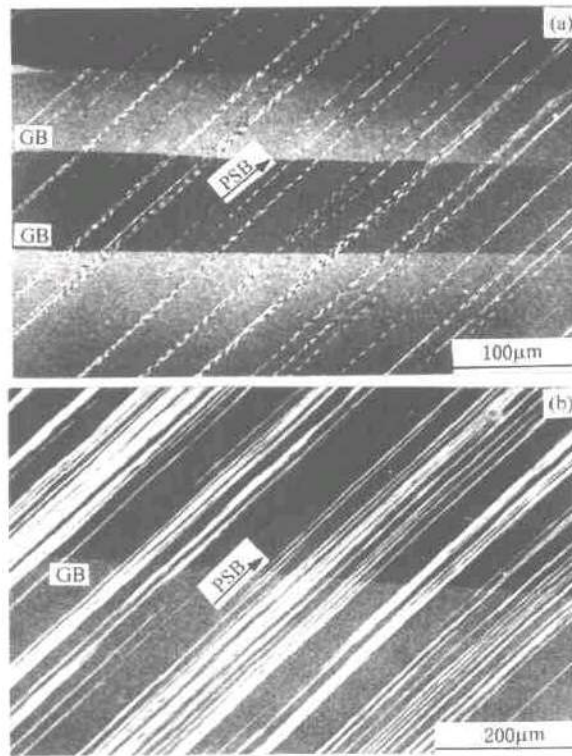


图 4.26 驻留滑移带(PSB)与小角度晶界的交互作用
(a) $\gamma_{pl}=6.4 \times 10^{-3}$; (b) $\gamma_{pl}=3.42 \times 10^{-3}$

留滑移带贯穿整个试样,能够在多晶体的内部晶粒形成^[73],因此它们与晶界的交互作用将会影响循环变形和晶界裂纹萌生的微观过程。但是迄今为止很少有关于这方面工作的报导。本项研究通过对不同晶界双晶体的循环变形研究,初步揭示了PSB与晶界(GB)交互作用的规律和晶界邻域位错结构的特征。

图 4.26 表示驻留滑移带与小角度晶界的交互作用,可以看出晶界两侧的驻留滑移带具有完全的一一对应关系。随塑性应变幅增加,驻留滑移带也相应地增多,但晶界两边的驻留滑移带依然保持一一对应的关系,表明驻留滑移带能够连续地跨过小角度晶界。但当晶界两边晶粒的取向差较大,晶界是大角度时,驻留滑移带将不能连续地跨过晶界,如图 4.27 所

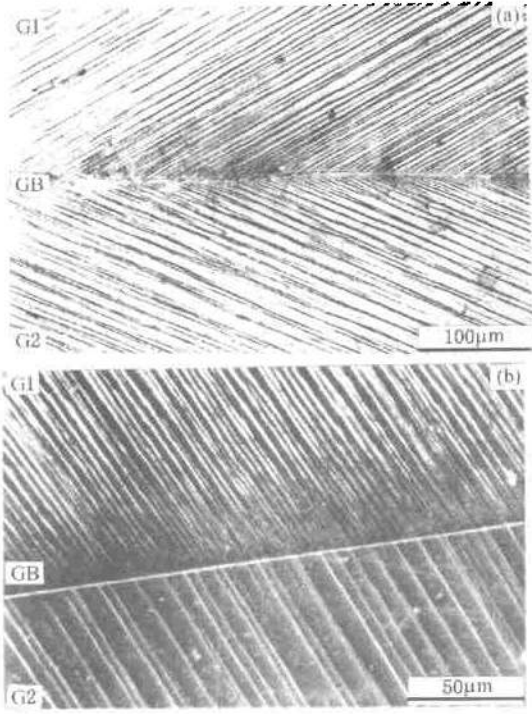


图 4.27 $[\bar{5}913](G_1)/[579](G_2)$ 垂直晶界铜双晶体晶界附近的滑移形貌(轴向塑性应变幅 $\epsilon_p = 1.35 \times 10^{-3}$)
(a) 试样前表面; (b) 试样侧面

示。图 4.28 是用扫描电镜电子通道衬度(SEM-ECC)技术观察到的晶界附近的位错结构,清晰地表明 $[\bar{5}913]$ 晶体中的PSB的楼梯结构不能穿过晶界,而且达到晶界时变得不规则,并在相邻的 $[579]$ 晶体中产生一影响区。在这里人们会提出一个问题,大角度晶界两边晶体中的主滑移面是很少共面的,滑移自然不能跨过晶界,如果大角度晶界两边晶体内的主滑移面共面,情况将会怎样呢?为此,采用晶体定向切割技术切取一倾斜晶界铜双晶体疲劳试样,如图 4.29 所示。该双晶体中公共的(111)面是两个组元晶体的主滑系。因此双晶体 4 个表面上两组元晶体的滑移线应当共线,不受晶界的阻挡。图 4.30 证实了这一点,两组元中的滑移线连续跨过晶界,形成一一对应的关系,即便这里的晶界具有大角度。用 SEM-ECC 技术观

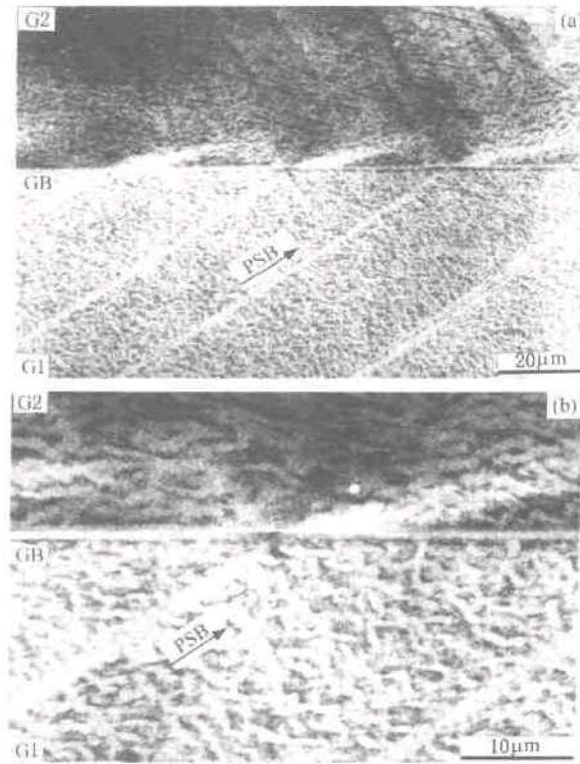


图 4.28 $[\bar{5}913](G1)/[\bar{5}79](G2)$ 垂直晶界铜双晶体中 PSB 楼梯结构与晶界的交互作用
(a) 低倍; (b) 高倍

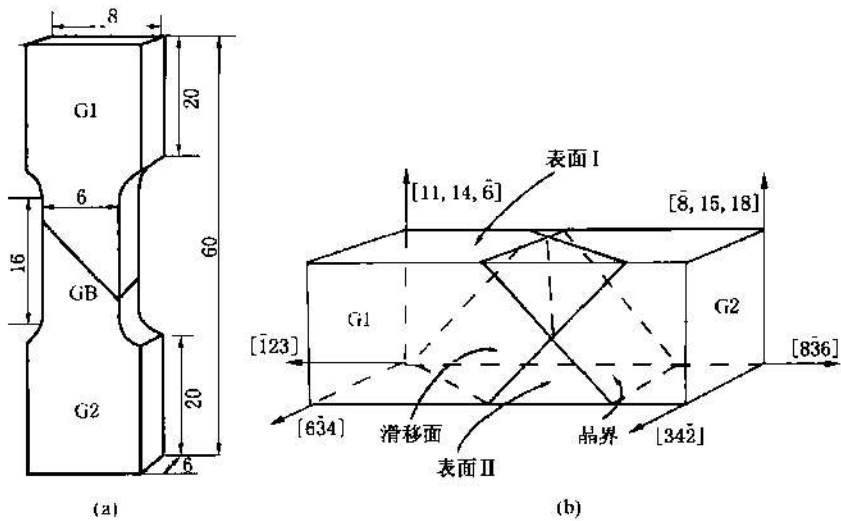


图 4.29 具有公共主滑移面的倾斜晶界铜双晶体 $[\bar{1}23]/[8\bar{3}6]$
(a) 疲劳试样(单位为 mm); (b) 晶体学关系

察晶界附近的位错特征表明(图 4. 31), 两个组元晶体中的 PSB 在总体上是相互贯穿的, 与表面上观察到的滑移形貌(图 4. 30)相对应(图 4. 31(a)), 但 $[\bar{8}36]$ 晶体中形成的 PSB 没

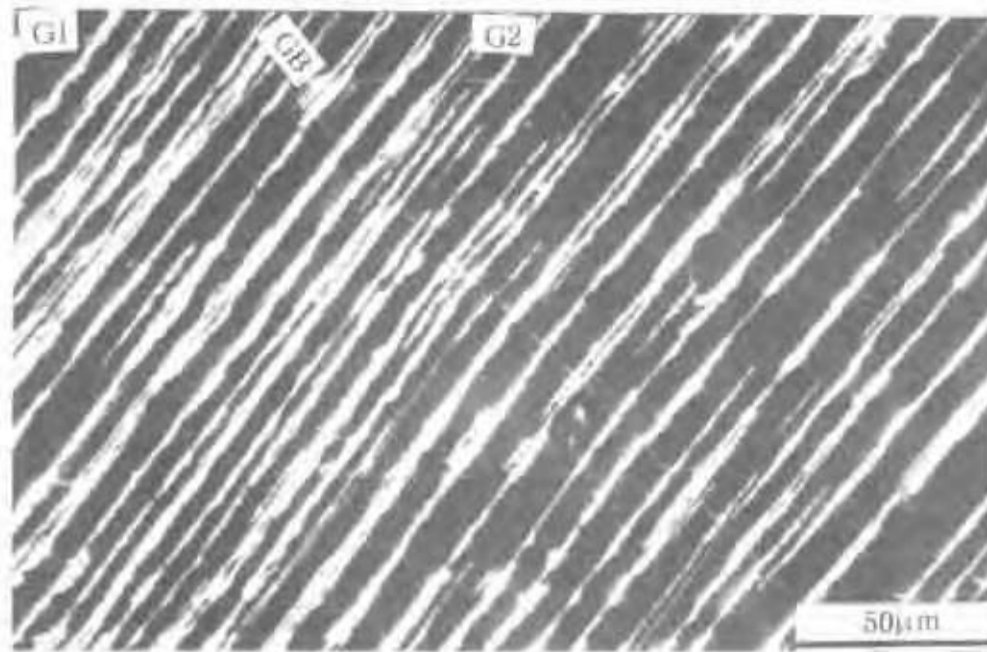


图 4. 30 $[\bar{1}23]/[\bar{8}36]$ 铜双晶体晶界附近的滑移形貌
(轴向塑性应变幅 $\epsilon_p = 9 \times 10^{-3}$)

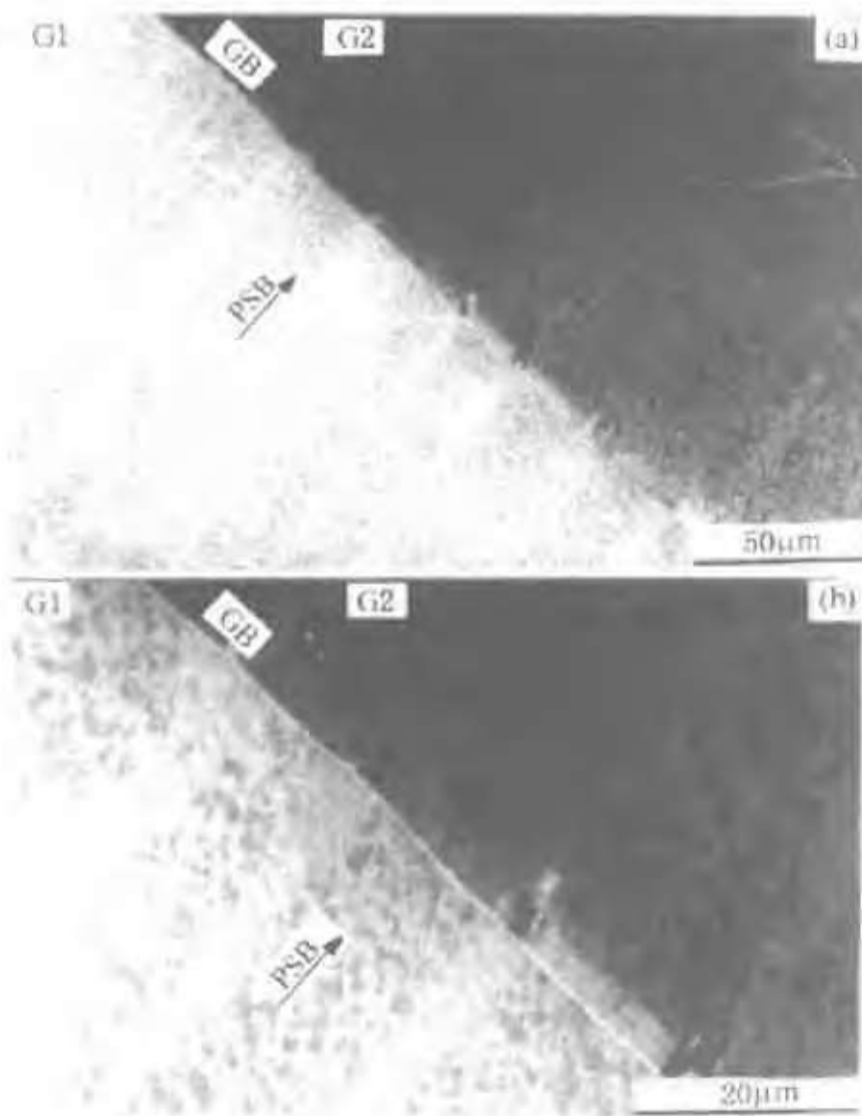


图 4. 31 $[\bar{1}23]/[\bar{8}36]$ 铜双晶体晶界两侧的位错组态
(轴向塑性应变幅 $\epsilon_p = 9 \times 10^{-3}$)
(a) 低倍; (b) 高倍

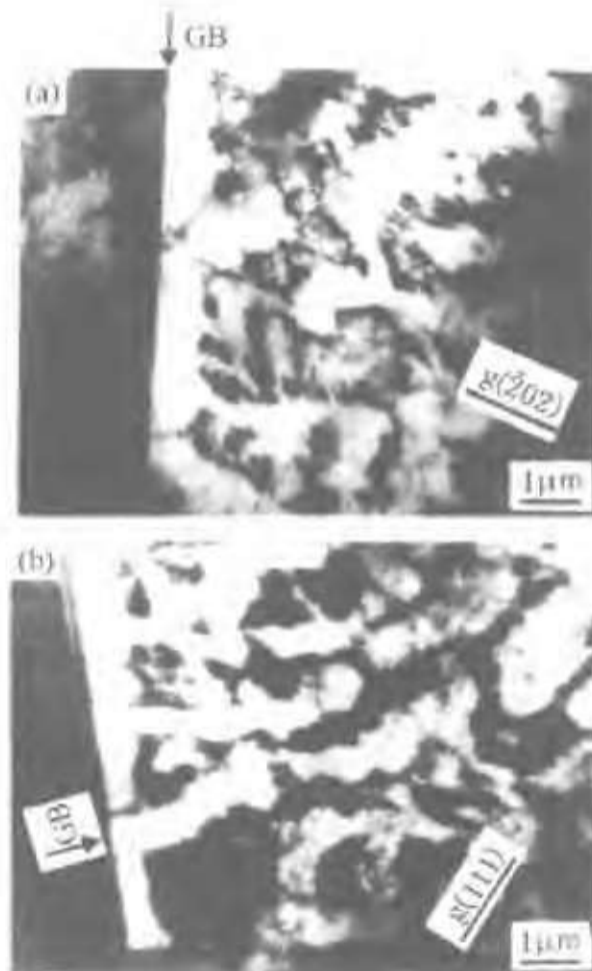


图 4. 32 晶界附近的无位错区(膜面为 $(1\bar{2}1)$)
(a) $[\bar{1}35]/[\bar{1}35]$ 双晶, $\gamma_p = 6.63 \times 10^{-3}$
(b) $[\bar{2}35]/[\bar{2}35]$ 双晶, $\gamma_p = 6.63 \times 10^{-3}$

有典型的梯状结构,使晶界两边的 PSB 表现出不连续(图 4.31(b))。这说明表面上观察到的一一对应的滑移带,在微观位错组态上是不连续的。

Winter 等人^[75]在研究铜多晶的位错结构中,发现晶界附近约 $1\mu\text{m}$ 的范围内存在一位错密度很低的特征区域,他们称为无位错区(dislocation-free zone, DFZ)。最近, Luoh 和 Chang^[74]的研究表明,循环形变铜多晶体中晶界 DFZ 是一个普遍现象。在这里关于双晶体晶界附近位错结构的观察中也发现,当循环形变的应变幅较低,形成以脉络或梯状为主的位错结构时,常常有晶界 DFZ 的存在。图 4.32 是一个例子。

4.2.3 疲劳裂纹沿晶界的萌生

晶界在多晶体的疲劳损伤中起着重要的作用,即使在低应变幅疲劳中,沿晶开裂也是多晶体疲劳破坏的重要形式。Kim 和 Laird^{[11]、[12]},以及 Mughrabi 等人^[14]分别提出了不同模型解释沿晶疲劳开裂现象,但由于都是根据复杂的多晶体的实验结果,未能与晶界的特定几何和结构联系起来。本项研究表明,无论是平行晶界双晶、垂直晶界双晶,还是倾斜晶界双晶,沿晶开裂是一个普遍现象,而且疲劳开裂大都出现在试样表面滑移带与晶界的交截线上。作为一个例子,图 4.33 表示 $[\bar{3}45]/[\bar{1}17]$ 垂直晶界双晶体在不同应变幅下在试样后表面(见图 4.22)诱发的沿晶疲劳裂纹。对于这些疲劳沿晶裂纹的形成可以用 PSB-GB 模型^[13]进行解释(图 4.34)。这个模型的基本思想是 PSB 不能跨过晶界,位错在晶界处的塞积产生的应力集中将导致沿晶开裂。诱发沿晶疲劳裂纹的最小应力与几何参数(图 4.34) α 、 β 有密切

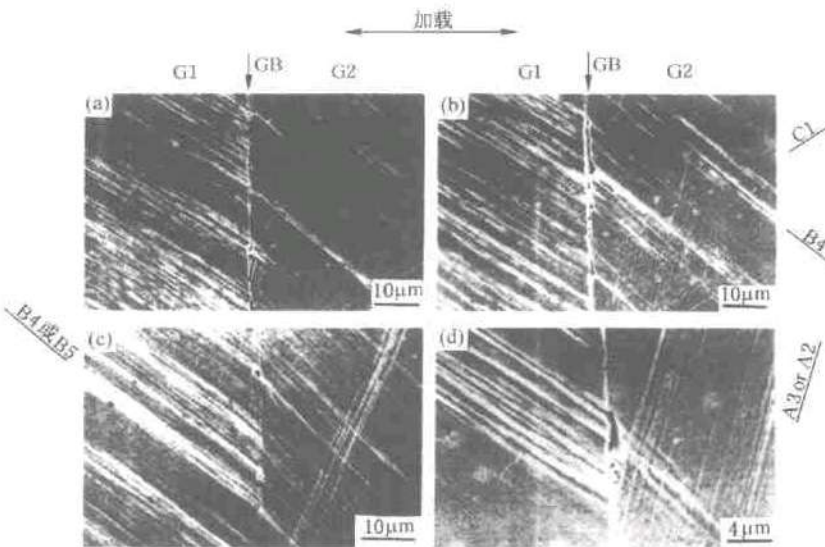


图 4.33 $[\bar{3}45]/[\bar{1}17]$ 垂直晶界双晶体在不同应变幅下的沿晶疲劳开裂
(观察面为试样后背面(图 1.22))

(a) $\gamma_{pl} = 5.4 \times 10^{-1}$; (b) $\gamma_{pl} = 1.63 \times 10^{-3}$; (c) $\gamma_{pl} = 6.45 \times 10^{-4}$; (d) $\gamma_{pl} = 6.45 \times 10^{-3}$

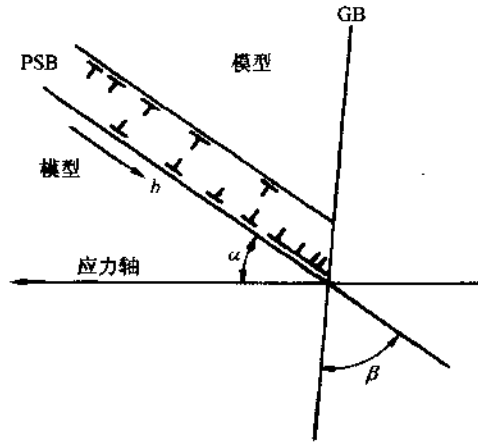


图 4.34 沿晶裂纹萌生的 PSB-PB 模型示意图

关系。其中 α 是加载轴与 PSB 在试样表面迹线的夹角, β 是 PSB 迹线与晶界在试样表面的迹线的夹角。测量了 $[\bar{3}45]/[\bar{1}17]$ 垂直晶界双晶体前后表面和两个侧面上同主滑移面 B、次滑移面 A 和 C 有关的 α 和 β 值(图 4.35), 并列于表 4.4 中。由表可知, 前后表面主滑移面 (B) 的 α 值分别为 32° 和 36° , 与裂纹萌生最佳角度 45° 偏离较小, 两侧表面主滑移面 (B) 的 α 和 β 值分别为 70° 和 86° , 却大大偏离 45° 。实验结果证实, 沿晶裂纹主要在试样的前后表面萌生。但是这种 PSB-GB 模型并不能解释所有的沿晶疲劳开裂现象。所研究的 $[\bar{1}23]/[8\bar{3}6]$

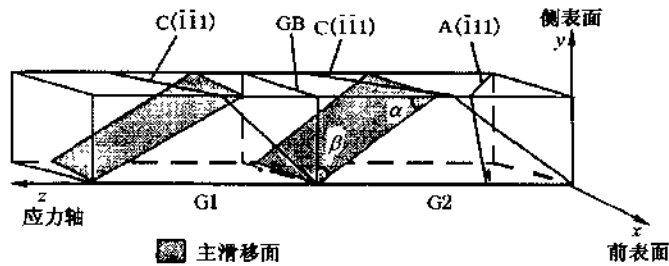


图 4.35 $[\bar{3}45]/[\bar{1}17]$ 双晶活动滑移系与试样的几何关系

表 4.4 $[\bar{3}45]/[\bar{1}17]$ 双晶试样表面滑移迹线的 α 和 β 值

滑移面	前后表面				侧表面			
	G1 $[\bar{3}45]$		G2 $[\bar{1}17]$		G1 $[\bar{3}45]$		G2 $[\bar{1}17]$	
	α	β	α	β	α	β	α	β
B	32°	$\approx 58^\circ$	36°	$\approx 54^\circ$	70°	$\approx 20^\circ$	86°	$\approx 4^\circ$
A			83°	$\approx 7^\circ$			49°	$\approx 41^\circ$
C			34°	$\approx 56^\circ$	21°	$\approx 69^\circ$		

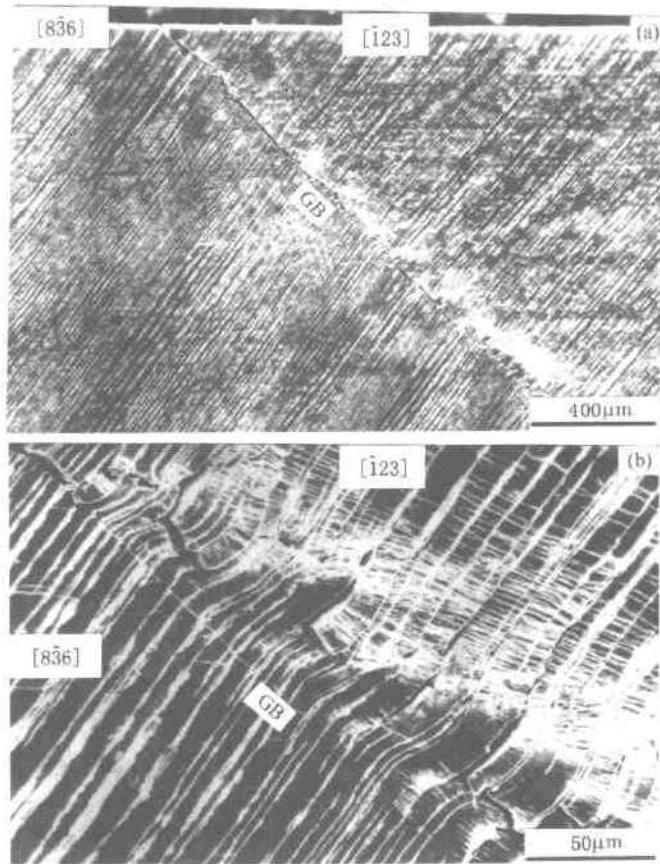


图 4.36 $[\bar{1}23]/[8\bar{3}6]$ 倾斜铜双晶体中的沿晶疲劳开裂
(a) 低倍; (b) 高倍

倾斜晶界铜双晶体的两个组元晶体有着共同的主滑移面, 驻留滑移带连续跨过晶界(见图 4.30 和图 4.31), 但是疲劳裂纹也是沿晶界萌生, 如图 4.36 所示。同时由高倍观察注意到(图 4.36(b)), 裂纹并不是完全沿着晶界的, 而在局部区域偏离晶界。关于这种晶界开裂, 包括一般的倾斜晶界疲劳开裂, 也许可用晶界台阶机制解释^{[1]、[46]}。在关于铝双晶体的疲劳损伤研究中^[35], 发现疲劳裂纹萌生分三个步骤: 首先, 在晶界附近形成微空洞; 其次, 由微空洞发展为微小裂纹; 最后, 微空洞与微小裂纹聚合形成尺度为几微米的裂纹, 它们与晶界平行, 与晶界相距 $3\sim 5\mu\text{m}$ 。根据这一实验结果, 提出了如图 4.37 表示的裂纹萌生模型。这个模型认为, 坐落在晶界影响区(GBAZ)内的

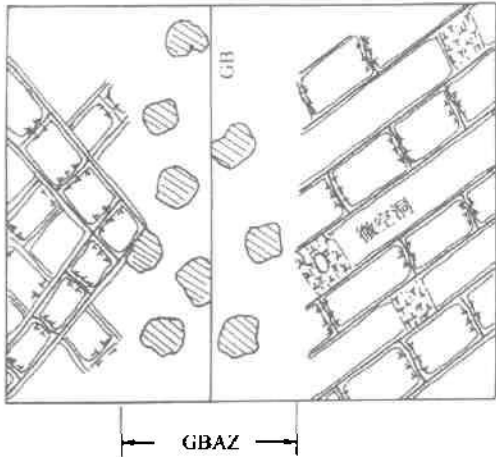


图 4.37 疲劳裂纹在晶界附近萌生的示意图

坐落在晶界影响区(GBAZ)内的

位错偶极子墙中的刃型位错,在GBAZ中内应力的作用下将发生攀移,通过相消,产生大量空位,这些空位的聚集将形成微空洞,进一步发展成靠近晶界的微裂纹。这一模型的另一种可能是,驻留滑移带中产生的大量空位将被晶界吸收,在晶界形成微空洞,进而发展成沿晶裂纹^[50]。

4.2.4 铜三晶体的循环形变与疲劳损伤

在多晶体中,除存在大量的晶界以外,还有大量的3个晶界相交形成的三晶交线,它们如何影响循环形变行为和疲劳损伤特征,迄今未见有研究工作报导。本项研究在有关铜双晶体的工作基础上,进一步进行了铜三晶体的循环形变研究。铜三晶体用 Bridgman 方法生长,厚约 14mm,沿厚度垂直方向切成等厚的 3 块晶体,然后分别平行某一晶界切取三晶疲劳试样 T_1, T_2 和 T_3 (图 4.38),加载轴相应地为 L_1, L_2 和 L_3 。图 4.39 为不同加载轴下 3 个组

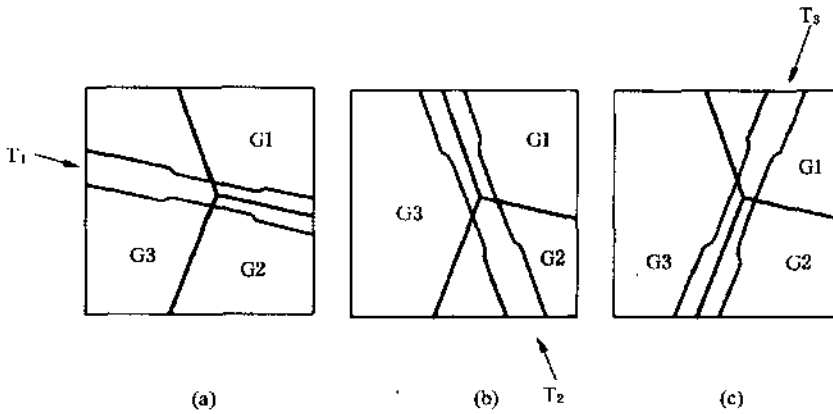


图 4.38 由 G1, G2 和 G3 组成的三晶体和含三晶交线的疲劳试样

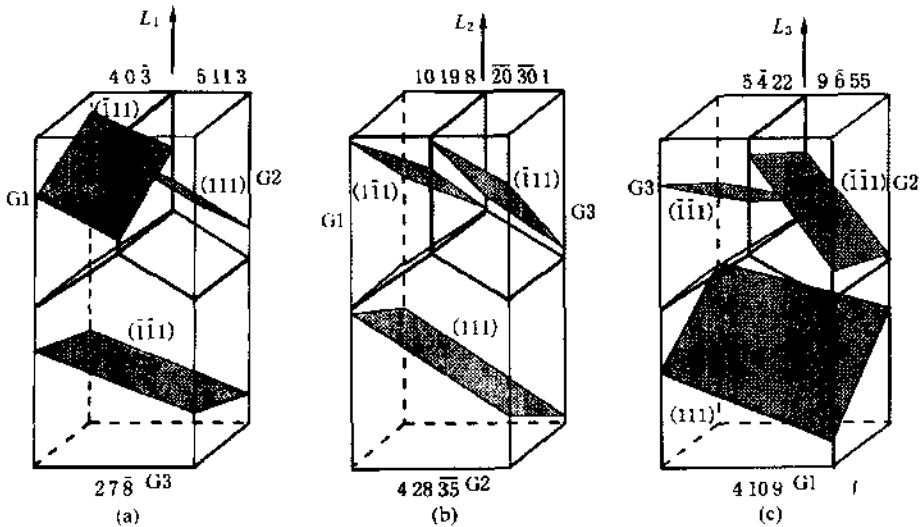


图 4.39 不同加载轴下 3 个组元晶体 G1, G2 和 G3 中启动的主滑系

元晶体中开动的主滑移面,而图 4.40 是 T_2 试样在不同应变幅下三晶交点附近的滑移形貌。可以看出,在不同应变幅下,组元晶体 G1 和 G2 均开动了主滑移系,而 G2 内的三晶交点处却开动了次滑移系,表明 G2 与 G1 和 G3 中间有较大的应变不相容性。图 4.41 是 T_3 试样的表面滑移形貌,各组元晶体开动了主滑移系,并在三晶交点处受阻,当应变幅较大时,出现晶界裂纹,并导致三晶交点开裂。

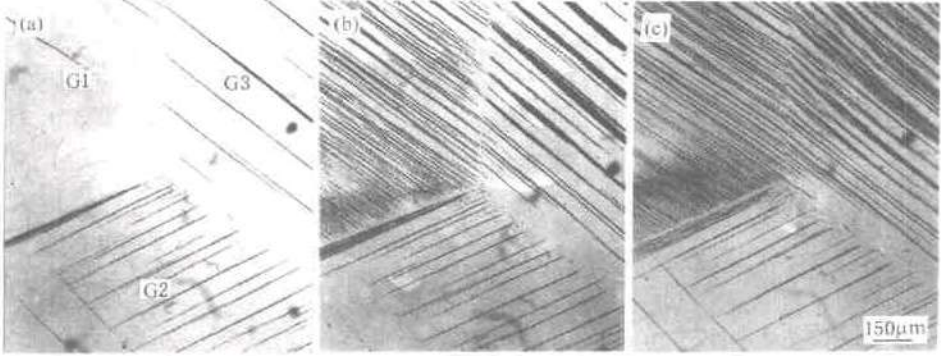


图 4.40 由试样背面(图 4.39(b))观察的 T_2 试样三晶交点附近的滑移形貌
 (a) $\epsilon_{pl}=1.81 \times 10^{-1}$; (b) $\epsilon_{pl}=5.95 \times 10^{-1}$; (c) $\epsilon_{pl}=1.56 \times 10^{-1}$

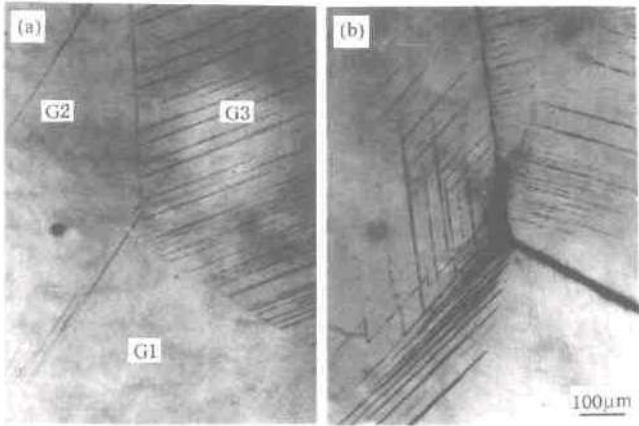


图 4.41 由试样背面(图 4.39(c))观察的 T_3 试样三晶交点附近的滑移形貌
 (a) $\epsilon_{pl}=3.71 \times 10^{-1}$; (b) $\epsilon_{pl}=1.03 \times 10^{-1}$

4.3 晶体形变的晶体微观力学和有限元分析

近 20 年来,由于计算机能力的不断增强及计算技术的蓬勃发展,自 20 世纪 30 年代以来人们一直企盼的由单晶体的实验结果预测多晶体的变形和断裂行为已日渐成为现实,形成了新的交叉学科——晶体微观力学,并成为定量材料设计学科的重要组成部分。实际的晶

体材料是由大量的不同取向的晶粒组成,它们在载荷作用下的变形是各向异性的。在弹性范围内,这种变形的各向异性特性由弹性模量张量唯一确定,已有完备的处理方法^[75]。但塑性变形的应力、应变关系则由具体开动的滑移系所决定,不但是各向异性的,更与加载路径和滑移系开动的历史有复杂的关系,人们对此尚缺乏深入的了解,对于循环加载条件的塑性形变尤其是这样。

4.3.1 晶体潜在硬化的指向行为

对面心立方晶体而言,滑移变形的指向性行为是指 24 组滑移系的开动和硬化过程及其相互影响的规律。关于单向加载下的滑移变形已有较系统的工作^[76],但对于交变载荷作用下的滑移变形规律还很少见诸报导^[77]。下面概述本项研究在这方面所得结果^{[29], [51]}。

单晶体在载荷作用下,当某一滑移系上的分解切应力达到一临界值 τ_c 时,它将开动,产生滑移变形,随后继续变形所需的分解切应力 τ_p 将不断增大 ($\tau_p/\tau_c > 1$),这种现象称为滑移系的自硬化。如某一滑移系产生一定自硬化后停止开动,而促使另一新滑移系开动,一般来说,新滑移系开动的分解切应力将不再是 τ_c ,而是 τ_0 ,则 τ_0/τ_c 或 τ_0/τ_p 表示原未开动滑移系的潜在硬化大小或能力,称为潜在硬化系数 LHR 。

实验所用试料为高纯铝单晶板。首先切取开动滑移系为 $(111)[\bar{1}01]$ (B4)的预形变试样,经拉伸达到预定形变后,再从经预形变的试样上切取潜在硬化实验试样,其取向为 E, F, G 和 H(图 4.42),开动的滑移系相应地为 $(\bar{1}\bar{1}1)[101]$ (A3)或 $A\bar{3}$, $(\bar{1}\bar{1}1)[110]$ (A6)或 $A\bar{6}$ 。如图 4.43 所示,用试样 E2 和 G2 进行 Bauschinger 效应的测试实验,先拉伸到分解切应变 $\gamma \approx 0.2\%$ 后卸载,再反向压缩。由图可近似认为 $\tau_0 \approx 0$,即 $LHR \approx 0$,无明显潜在硬化,但有明显 Bauschinger 效应。作为例子,图 4.44 给出 3 种晶体 E1, G1 和 F2 的潜在硬化试验结果,潜在硬化滑移系在预形变时并未开动,只是在随后因加载路径改变才成为有利开动的滑移系。此时它可以沿两个滑移方向开动,可以设想为受拉(T)或受压(C)屈服。表 4.5 列出几种取向试样的测试结果。可见, $\tau_0 \approx \tau_p$,也就是潜在硬化系数 $LHR \approx 1$,不论第二次变形是受拉,

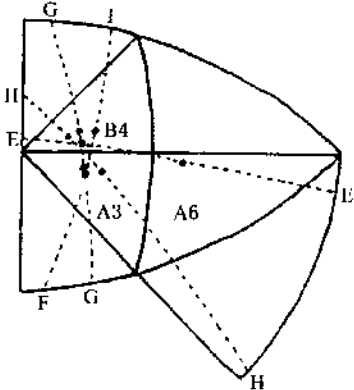


图 4.42 晶体取向和测试的滑移系

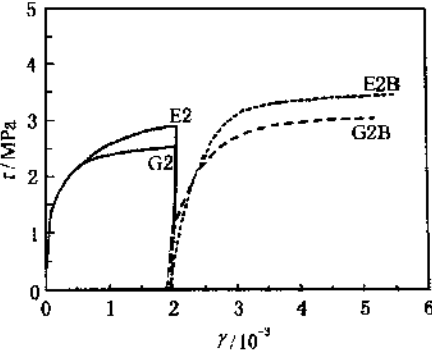


图 4.43 Bauschinger 效应测试曲线

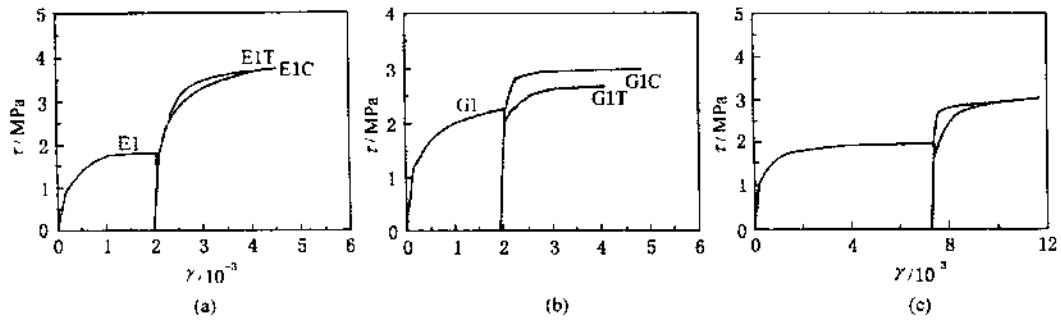


图 4.44 测试潜在硬化的二次变形曲线

(a) 晶体 E1; (b) 晶体 G1; (c) 晶体 F2

表 4.5 Bauschinger 效应和潜在硬化实验结果

试样*	滑移系	Schmid 因子	τ_0/MPa	LHR
E1T	A6	0.470	1.84	1.01
E1C	A $\bar{6}$	0.407	1.83	1.01
F1T	A3	0.5	3.64	1.01
F1C	A $\bar{3}$	0.5	3.02	0.84
F2T	A3	0.5	1.42	0.72
F2C	A $\bar{3}$	0.5	1.87	0.95
G1T	A3	0.495	2.05	0.90
G1C	A $\bar{3}$	0.495	2.18	0.96
E2B	B $\bar{4}$	0.489	≈ 0	≈ 0
G2B	B $\bar{4}$	0.497	≈ 0	≈ 0

* T 表示拉伸, C 表示压缩, B 表示 Bauschinger 效应。

还是受压,其屈服分解切应力相近。这一点与原开动滑移系所表现出的 Bauschinger 效应完全不同。

根据上述实验结果和前人的工作,可对面心立方晶体在复杂加载路径、小变形下的屈服行为和硬化规律作如下描述:单调加载作用时,其硬化遵循三阶段实验规律,在复杂加载条件下,经形变后的 24 组滑移系中,除已开动的滑移系本身因 Bauschinger 效应而在反向受载时屈服分解切应力近于零外,其余 22 组潜在滑移系的开动(或屈服)分解切应力皆可视为与自硬化相同。我们认为,在晶体微观力学的框架内,这一变形-硬化行为规律的描述有足够的实验物理基础,也有相当多的实验数据可作微观力学计算之用。

4.3.2 垂直晶界双晶中的应变和分解切应力

设一由组元晶体 1 $[\bar{3}45]$ 和组元晶体 2 $[\bar{1}2\ 15\ 82]$ 组成的双晶体,受到垂直于晶界的拉伸载荷的作用。拉伸轴沿晶体 1 中的 $[\bar{3}45]$ 方向,主滑移系的 Schmid 因子为 0.392,称晶体 1 为硬取向晶体;拉伸轴沿晶体 2 中的 $[\bar{1}2\ 15\ 82]$ 方向,主滑移系的 Schmid 因子为 0.460,称晶体 2 为软取向晶体。采用 ANSYS 有限元程序对这一双晶体中的应变和主滑移面上的分解切应力进行了计算^[37]。图 4.45 是双晶体的有限元网格划分,网格由 4032 个 8 节点的各向异性三维单元组成,在晶界附近的网格较细。规一化的均匀分布的拉伸载荷作用在试样的顶部和底部。设晶体 1 和晶体 2 中沿 z 方向,即拉伸方向的平均应变分别为 $\epsilon_{zz}^{(1)}$ 和 $\epsilon_{zz}^{(2)}$,通过计算求出 $\epsilon_{zz}^{(2)}/\epsilon_{zz}^{(1)}=2.23$,表明组元晶体 2 容易变形,承担较大的形变。如果令 $\epsilon_{zb}^{(1)}$ 和 $\epsilon_{zb}^{(2)}$ 分别为组元晶体 1 和组元晶体 2 在晶界附近均平均应变,通过计算求得 $\epsilon_{zb}^{(1)}/\epsilon_{zz}^{(1)}=1.177$ 和 $\epsilon_{zb}^{(2)}/\epsilon_{zz}^{(2)}=0.810$ 。这一结果说明,硬组元晶体中晶界附近的应变高于其平均应变,而软组元晶体中晶界附近的应变低于其平均应变。图 4.46 表示晶界附近主滑移面上的分解切应力分布。由图可知,在较硬的组元晶体 1 中,晶界处的分解切应力最大,随着离开晶界,分解切应力迅

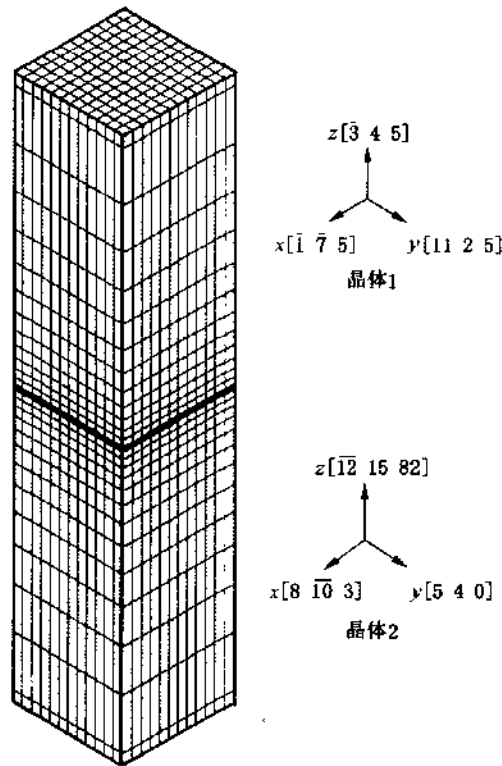


图 4.45 $[\bar{3}45]/[\bar{1}2\ 15\ 82]$ 双晶体的有限元网格
(每个组元晶体的尺寸为 $5\text{mm} \times 5\text{mm} \times 12.5\text{mm}$)

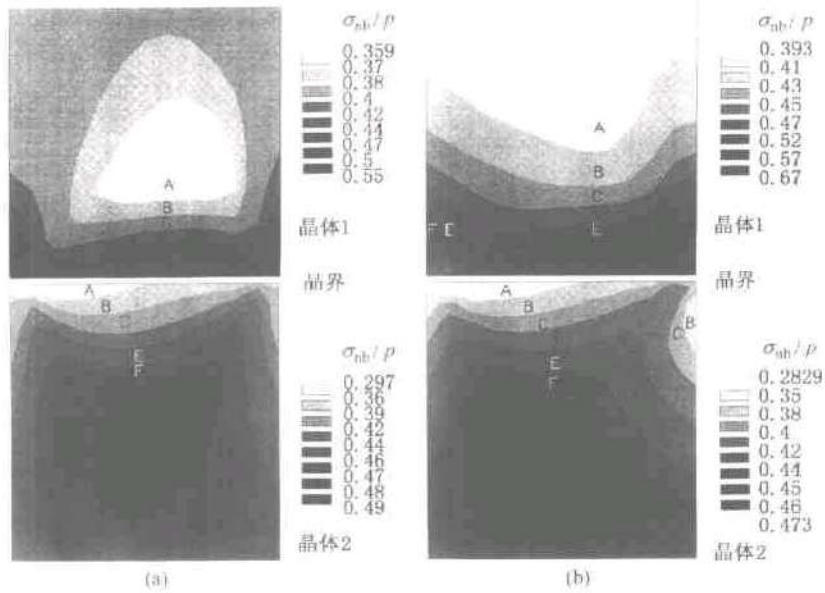


图 4.16 $[315]/[12\ 15\ 82]$ 双晶体晶界附近主滑移面上的分解切应力分布
(a) 中心平行截面; (b) 自由前表面

速下降。与此相反,较软的组元晶体 2 中,晶界附近有着最低的分解切应力,随着离开晶界,分解切应力上升,在离晶界约 2.3mm 处达到最大值。这一结果与前面关于垂直晶界附近的滑移系的开动和晶界影响区形成的实验结果大体是一致的(例如见图 4.27)。

4.3.3 铜三晶体主滑移系分解切应力的有限元分析

图 4.47 是计算所用三晶体模型,沿 z 进行单向拉伸,其晶体学参数如表 4.6 所示⁷⁸¹。

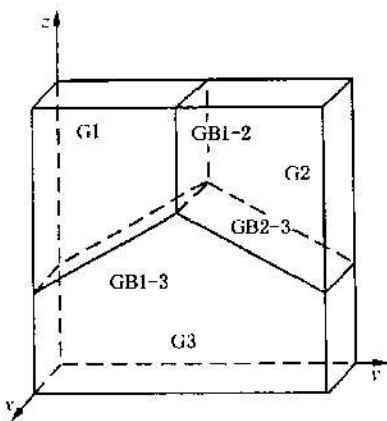


图 4.47 三晶体计算模型图

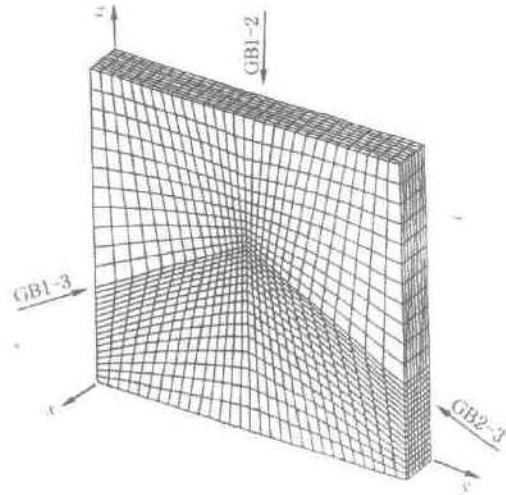


图 4.48 三晶体计算模型的有限单元网格划分

图 4.48 是三晶体试样的单元网格划分,采用 8 节点三维各向异性单元,按平面问题,采用 ANSYS 有限元分析程序进行计算。图 4.49 是拉伸载荷作用下 3 个组元晶体中主滑移系上作用的分解切应力。从图中可以看出,在三晶交点附近和 3 个晶界上所作用的切应力不连续。在 G1 中,三晶交点和两个晶界 GB1-3 和 GB1-2 上的切应力变化梯度较小,而在 G2 和 G3 中,三晶交点处和晶界 GB1-2,GB2-3 和 GB1-3 上的切应力变化梯度较大。这些结果可以用来合理地说明实验中观察到的三晶体的形变特点(例如见图 4.40 和图 4.41)。

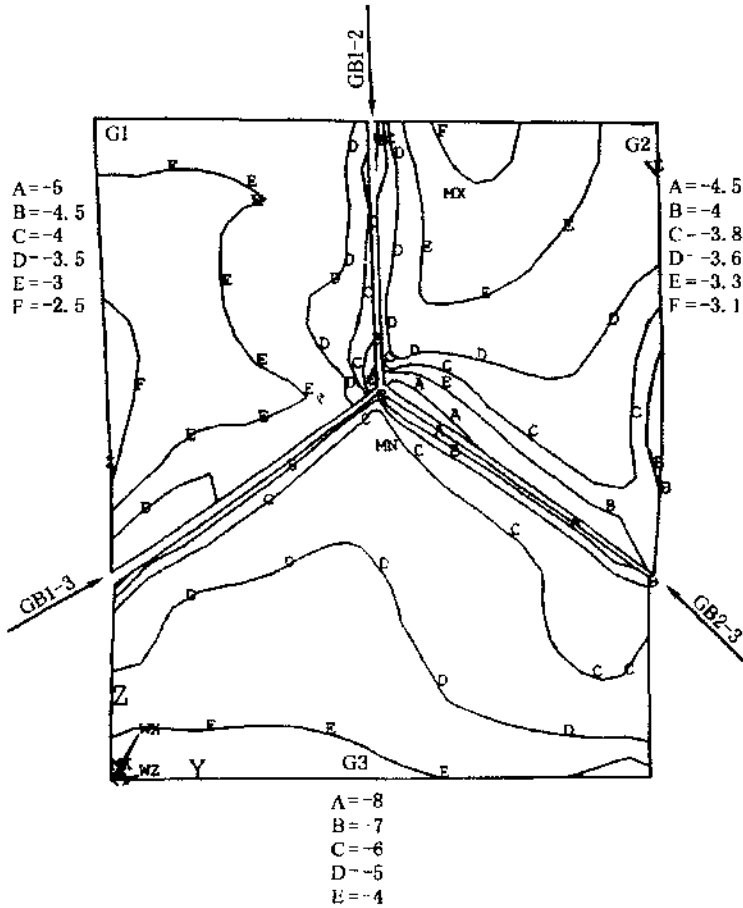


图 4.49 三晶交点附近各组元晶体主滑移系上的分解切应力(应力单位: MPa)

表 4.6 三晶体试样各组元晶体的晶体学参数

组元晶体	x	y	z	主滑移系	Schmid 因子
G1	$[3\bar{1}5]$	$[17\ 54\ 1]$	$[\bar{3}12]$	$(\bar{1}\ \bar{1}\ 1)[\bar{1}10]$	0.467
G2	$[2\bar{1}5]$	$[\bar{3}32]$	$[9\ \bar{1}0\ 2]$	$(111)[0\ \bar{1}1]$	0.45
G3	$[2\bar{3}5]$	$[\bar{1}86]$	$[\bar{9}\ \bar{3}\ 2]$	$(111)[\bar{1}01]$	0.478

4.3.4 铜复晶体主滑移系分解切应力的有限元分析

采用图 4.50 所示的理想二维复晶模型,其中的 $P_1P_2P_3P_4$ 区的网格划分如图 4.51,其他区域的网格与 $P_1P_2P_3P_4$ 区相同。采用 8 节点三维各向异性单元,复晶模型上半部共 7200 个单元。用 ANSYS 有限元分析程序进行计算^[79]。图 4.52 表示沿 x 方向加载时,各晶粒主滑移面上分解切应力的 σ_{nb} 的计算结果。由图可归纳出 σ_{nb} 分布的 5 个特征。首先,每个晶粒内的最大分解切应力总是在某一晶界附近;其次,最大分解切应力晶界只有一侧是最大分解切应力;第三,晶粒 1 与晶粒 2(或晶粒 3)之间的水平晶界的晶粒 2(或晶粒 3)一侧具有最大分解切应力;第四,最大分解切应力不在三晶交点;最后,晶粒 1 内的分解切应力明显低于晶粒 2 和晶粒 3 内的分解切应力。

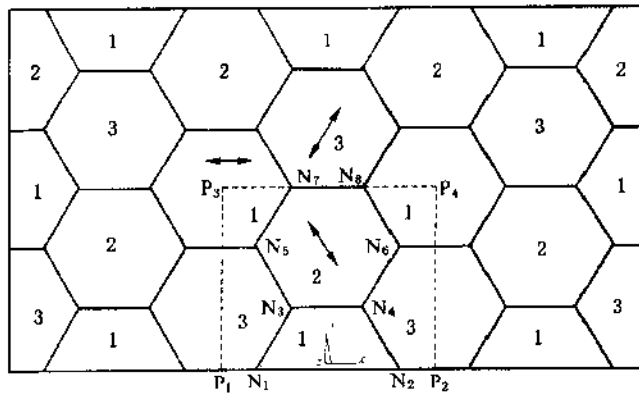


图 4.50 复晶模型的上半部

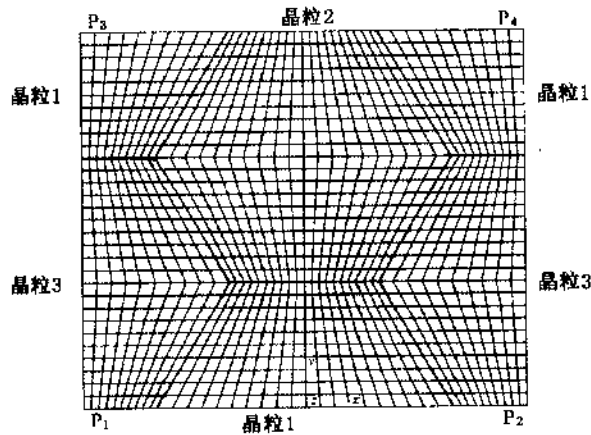


图 4.51 图 47 中 $P_1P_2P_3P_4$ 区的有限元网格划分

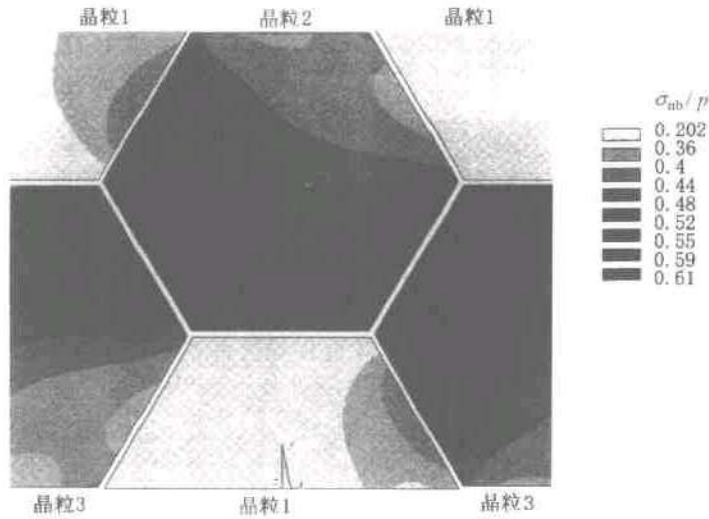


图 4.52 沿 x 方向拉伸时,各晶粒内主滑移面上分解切应力 σ_{ub} 的分布(ρ 是外加拉伸应力)

4.4 结语和进一步的工作

在国家自然科学基金委员会的资助下,通过四名博士研究生、两名硕士研究生、两名博士后和若干研究人员近四年的工作,我们在“面心立方晶体疲劳损伤的取向和晶界效应”方面进行了较深入和系统的工作。从 1994 年到目前为止,在 SCI 收录的国际刊物上和国内核心期刊上发表论文和接受待发表论文近 40 篇,得到了国际同行学者的引用和好评。本文只是这些工作的一个概括和简单总结。

通过对于双滑移和多滑移取向铜晶体的研究,我们揭示了循环形变和疲劳损伤行为沿标准取向三角形 3 个边的系统变化规律,并对“多晶体的循环应力-应变曲线是否存在平台”这一长期争论的学术问题,给出了有说服力的回答,初步建立起单晶体与多晶体循环形变行为之间的联系。另外,还从晶体形变几何学的角度,分析了宏观形变带在循环形变中产生的原因。但是,这方面还有一些问题有待进一步深入和澄清。首先, $[\bar{1}11]$ 多滑移晶体的循环形变研究,由于疲劳试验上的困难,目前所得试验数据还较分散;其次,双滑移和多滑移取向晶体的循环应力应变响应和疲劳损伤随取向的变化规律还缺乏相应的位错结构的系统观察;第三,形变带的出现与晶体取向的关系,它的微观结构及其对疲劳损伤(如裂纹萌生)的影响等还不清楚;第四,环境(温度、介质和加载方式)效应与晶体取向的关系还缺乏研究。

通过对于平行、垂直和倾斜晶界双晶体以及三晶体的研究,我们揭示了循环形变行为与组元晶体取向和晶界约束之间的关系,确定了驻留滑移带连续跨越晶界和形成晶界影响区的条件,考察了现有的晶界疲劳开裂模型的适用条件,提出了空位的作用。相对晶体取向效应来说,我们关于循环形变和疲劳损伤的晶界效应的工作还是初步的,晶界效应比取向效应更为复杂,有更多的问题有待研究。在保证双晶体组元晶体取向一致的前提下,单独考察晶

界结构和晶界取向的影响,虽然存在试样制备上的困难,但却是我们认识晶界对循环形变和疲劳损伤作用机制的必由之路。双晶体毕竟是多晶体高度简化的模型材料,它缺乏其他晶体的约束。因此,要真正了解疲劳损伤的晶界效应,需要在双晶工作的基础上,进一步通过三晶、复晶,直至不同晶粒尺寸的多晶体开展工作,为材料晶界的工程设计提供实验和理论依据。新近发展和应用的扫描电子显微镜电子通道衬度技术(ECC)和电子背散射衍射技术(EBSD)将会在这方面的研究中发挥重要的作用。

在晶体微观力学的框架内,我们对复杂加载路径条件下面心立方晶体屈服和硬化规律进行了实验研究和理论分析,提出了晶体形变和硬化行为的微观力学描述。为了从宏观力学的角度说明实验中观察到的循环形变行为和疲劳损伤的晶界效应,我们尝试着用各向异性有限元分析方法,计算了在单向拉伸载荷作用下双晶体、三晶体和复晶体的晶界附近弹性应力应变场和主次滑移系上的分解切应力分布,计算所得结果与实验观察结果有某种程度的一致。但由于有限元计算模型比较简化和近似,更没有考虑载荷循环带来的加载历史和潜在硬化等问题,循环形变特征与根据单向形变模型预测得到的结果有显著差别是不足为奇的。多年来已提出许多循环塑性力学模型,它们能不同程度解释实验中观察到的循环形变现象,但这方面还有很长的路要走。

参 考 文 献

1. Mughrabi H. *Mater. Sci. Eng.*, 1978, 33:207
2. Mughrabi H, Ackermann F, Herz K. In *Fatigue Mechanisms*, ASTM STP 675, 1979, P. 69
3. Basinski Z S, Basinski S J. *Progress in Materias Science*, 1992, 36:89
4. Suresh S. *Fatigue of Materials*, second edition. Cambridge University Press, 1998
王中光等译. 材料的疲劳, 第2版. 北京: 国防工业出版社, 1999
5. Chen A S(陈心正), Laird C. *Mater. Sci. Eng.*, 1981, 51:55
6. Jin N Y(金能蕴), Winter A T. *Acta Metall.*, 1984, 32:989
7. 金能蕴. *金属学报*, 1988, 24:A311
8. Bhat S P, Laird C. *Scripta Metall.*, 1978, 12:687
9. Mughrabi H. *Scripta Metall.*, 1979, 13:479
10. Liu C D, Bassim M N, You D X. *Acta Metall. Mater.*, 1994, 42:3695
11. Kim W H, Laird C. *Acta Metall.*, 1978, 26 : 777
12. Kim W H, Laird C. *Acta Metall.*, 1978, 26 : 789
13. Mughrabi H, Wang R, Differt K, Essamann U. *ASTM STP 811*, 1983, P. 5
14. Li S X(李守新), Gong B(宫波), Wang Z G(王中光). *Scripta Metall. Mater.*, 1994, 31 : 1729
15. 宫波, 王中光, 张轶伟, 李广义, 张天宜. *金属学报*, 1994, 30 : 431
16. 宫波, 王中光, 张轶伟, 李广义, 张天宜. *金属学报*, 1994, 30 : 439
17. Gong B(宫波), Wang Z G(王中光), Zhang Y W(张轶伟). *Mater. Sci. Eng.*, 1995, A194 : 171
18. Hu Y M(胡运明), Wang Z G(王中光), Li G Y(李广义). *Scripta Mater.*, 1996, 34 : 331
19. Hu Y M(胡运明), Wang Z G(王中光), Li G Y(李广义). *Mater. Sci. Eng.*, 1996, A208:260
20. Hu Y M(胡运明), Wang Z G(王中光). *Scripta Mater.*, 1996, 34 : 1019
21. Gong B(宫波), Wang Z R(王执锐), Wang Z G(王中光). *Mater. Sci. Eng.*, 1996, A210: 94
22. 王中光, 李广义. *自然科学进展 国家重点实验室通讯*, 1996, 6:526(专题评述)
23. Wang M Z(王明章), Lin S(林实), Li C H(李成华), Wang Z G(王中光), Xiao J M(肖纪美). *Scripta Mater.*, 1996, 35 : 1183

24. Hu Y M(胡运明), Wang Z G(王中光). *J. Mater. Sci. Let.*, 1997, 16 : 500
25. Hu Y M(胡运明), Wang Z G(王中光). *Inter. J. Fatigue*, 1997, 19 : 59
26. Hu Y M(胡运明), Wang Z G(王中光). *Acta Mater.*, 1997, 45 : 2655
27. Gong B(宫波), Wang Z R(王执锐), Wang Z G(王中光). *Acta Mater.*, 1997, 45 : 1365
28. Wang Z R(王执锐), Gong B(宫波), Wang Z G(王中光). *Acta Mater.*, 1997, 45 : 1379
29. Hu Y M(胡运明), Wang Z G(王中光). *Mater. Sci. Eng.*, 1997, A, 234-236 : 98
30. 胡运明,王中光. *金属学报*,1997, 33 : 814
31. 胡运明,王中光. *金属学报*,1997, 33 : 824
32. 胡运明,王中光. *自然科学进展*,1997, 7 : 618
33. 胡运明,陈道伦,苏会和,王中光. *材料研究学报*,1997, 11 : 240
34. 宫波,陈道伦,苏会和,王中光. *金属学报*,1997, 33 : 561
35. Li S X(李守新), Chu R Q(初瑞清), Hou J Y(侯建元), Wang Z G(王中光). *Philos. Mag.*, 1998, 77 : 1081
36. Li X W(李小武), Wang Z G(王中光), Li G Y(李广义), Wu S D(吴世丁), Li S X(李守新). *Acta Mater.*, 1998, in press
37. Chen C R(陈昌荣), Li S X(李守新), Wang Z G(王中光). *Mater. Sci. Eng.*, 1998, in press
38. Zhang Z F(张哲峰), Wang Z G(王中光). *Acta Mater.*, 1998, in press
39. Zhang Z F(张哲峰), Wang Z G(王中光). *Phil. Mag. Lett.*, 1998, in press
40. Li X W(李小武), Hu Y M(胡运明), Wang Z G(王中光). *Mater. Sci. Eng.*, 1998, in press
41. Zhang Z F(张哲峰), Li G Y(李广义), Wang Z G(王中光). *Int. J. Fatigue*, 1998, in press
42. 张哲峰,李广义,王中光,李守新. *金属学报*,1998, 34 : 55
43. 李小武,王中光,孙守光,吴世丁,李守新,李广义. *金属学报*,1998, 34 : 545
44. 李小武,王中光,孙守光,吴世丁,李守新,李广义. *金属学报*,1998, 34 : 552
45. 贾卫平,李守新,王中光,李小武,李广义. *金属学报*,1998, 34 : 696
46. Hu Y M(胡运明), Wang Z G(王中光). *Int. J. Fatigue*, 1998, 20 : 463
47. 张轶伟. 双滑移取向铜单晶的循环形变行为: [硕士论文]. 沈阳: 中国科学院金属研究所,1995
48. 胡运明. 铜双晶体的疲劳及其机制的研究: [博士论文]. 沈阳: 中国科学院金属研究所,1997
49. 李小武. 铜单晶体循环形变行为的取向效应: [博士论文]. 沈阳: 中国科学院金属研究所,1998
50. 张哲峰. 铜双晶体的循环形变行为与疲劳损伤机制: [博士论文]. 沈阳: 中国科学院金属研究所,1998
51. 王明章. 铝及其自身复合材料界面交变形变断裂机制及晶体细观力学模拟的研究: [博士论文]. 北京: 北京科技大学, 1995
52. 贾维平. 铜三晶体中循环形变及疲劳裂纹模式和扩展行为的研究: [硕士论文]. 沈阳: 中国科学院金属研究所,1996
53. 初瑞清. 铝双晶循环形变下的裂纹萌生和位错组态的研究: [硕士论文]. 沈阳: 中国科学院金属研究所,1997
54. Jin N Y(金能蕴). *Phil. Mag.*, 1983, A48 : L33
55. Jin N Y(金能蕴), Winter A T. *Acta Metall.*, 1984, 32 : 1173
56. Kemsley D S, Paterson M S. *Acta Metall.*, 1960, 8 : 453
57. Lepisto T K, Kettunen P O. *Mater. Sci. Eng.*, 1982, 83 : 1
58. Chen A S(陈心正), Laird C. *Mater. Sci. Eng.*, 1981, 51 : 111
59. Winter A T. *Phil. Mag.*, 1974,29: 719
60. Barrett C S, Levenson L H. *Trans. Metall. Soc. AIME*, 1939, 135 : 327
61. Barrett C S, Levenson L H. *Trans. Metall. Soc. AIME*, 1939, 137 : 112
62. Cahn R W. *J. Inst. Met.*, 1950-51. 79 : 129
63. Honeycombe R K W. *J. Inst. Met.*, 1951-52, 80 : 45
64. Calnan E A. *Acta Crystall.*, 1952, 5 : 537
65. Gostelow C R. *Met. Sci. J.*, 1971, 5 : 177

66. Saletore M, Taggart R. *Mater. Sci. Eng.* , 1978, 36 : 259
67. Zhai T(翟同广), Martin J W, Briggs G A D. *Acta Metall. Mater.* , 1995, 43 : 3813
68. Zhai T(翟同广), Martin J W, Briggs G A D, Wilkinson A J. *Acta Metall. Mater.* , 1996, 44 : 3477
69. Reid C N. *Deformation Geometry for Materials Scientists*. Pergamon press, 1973
70. Laird C, Charsley P, Mughrabi H. *Mater. Sci. Engng.* , 1986, 81 :433
71. Rasmussen K V, Pederser O B. *Acta Metall.* , 1980, 28 : 1467
72. Charsley P. *Mater. Sci. Engng*, 1981, 47 : 181
73. Winter A T, Pederser O B, Rasmussen K V. *Acta Metall.* , 1981, 29 : 735
74. Luoh T, Chang C P. *Acta Mater.* , 1996, 44 : 2683
75. 钱伟长. 弹性力学. 北京:科学出版社,1956
76. Clarebrough L M, Hargreaves M E. In Chalmers B, King R, ed. *Progress in Metal Physics*,1959. 8
77. Kocks U F, Brown T J. *Acta Metall.* , 1966, 14:87

第 5 章 材料与薄膜结构的 强韧化力学原理

5.1 引言——强韧材料与中国的技术进步

强韧材料构成中国技术起飞的骨架,新型薄膜结构与高新技术的发展密切相关。材料强韧化设计应以宏微观断裂力学为纲,涉及到宏观、细观、微观 3 个层次。强韧过程的宏观层次研究在于探讨断裂中能量消耗的分割;细观层次研究在于探讨断裂过程区的细观演化和断裂路径的细观几何特征;微观层次研究在于探讨断裂分离时原子运动特征。跨层次的计算需要发展多层次交叠的空间离散技术和时间加速计算技术。作为例子,本章介绍了考虑宏细观连接的梯度塑性计算方案和宏细微观三层嵌套模型。此外还概述了课题组在定量表达材料强韧化过程中所发展的力学计算方法,包括宏细观平均化计算方法、层状结构的 Hamilton 型计算方法、材料强度的统计计算方法。

本章概述了裂尖屏蔽、裂尖形貌控制、尾区耗能控制、裂纹面桥联、裂纹扩展路径控制这 5 种强韧化机制的力学原理。在上述强韧化机制的指导下,课题组研制出的 Ce-TZP/ Al_2O_3 层状增韧陶瓷的断裂韧性比纯 Ce-TZP 相变增韧陶瓷提高 50%;实现超钝化裂尖形貌的半晶高分子材料的动态断裂应变能提高十余倍;在拖带损伤增韧下聚碳酸酯的撕裂模量增加一个量级;在常规微米晶粒的 Al_2O_3 陶瓷中添加 5%~15% 的 SiC 纳米相,使制成的纳米陶瓷复合材料的断裂能达到原基体材料的 3.5 倍。

在薄膜制备研究中得到了均匀、致密的晶态 $\beta\text{-C}_3\text{N}_4$ 超硬薄膜,纳米压痕计测定该膜的体积模量达到 349GPa。发展了压入法和接触疲劳对滚法这两种测量膜基结合强度的有效方法。

本章扼要地概述国家自然科学基金会和国家科委攀登项目共同资助的重大项目“材料损伤断裂机理与宏微观力学理论”的 05 课题在“典型材料与微结构的强韧化力学原理”方面的研究。课题主研人员包括:清华大学黄克智院士、杨卫教授、孙庆平教授、梁开明教授、吕荣侠教授、方岱宁教授、郭田福副教授;北京科技大学肖纪美院士、田中卓教授、顾有松教授;大连理工大学唐立民教授、陈浩然教授;西安交通大学何家文教授、徐可为教授。课题与美国 Princeton 大学 Z. SUO 教授, Illinois 大学 Urbana-Champaign 校区的 H. J. Hsia 和 Y. Huang 副教授, Michigan 大学 M. D. Thouless 副教授开展了国际合作。

5.1.1 强韧材料构成中国技术起飞的骨架

材料、信息、能源是支托现代科学技术的三大支柱。材料乃人类文明的基础载体,是经

济、国防和科技现代化的重要依托。结构材料在各类材料中量大面广,对国民经济发展的影响举足轻重。

结构材料的损伤断裂过程(含常规断裂、疲劳断裂、腐蚀断裂等失效过程)是力学家与材料学家多年来尝试解决的跨学科难题。材料破坏导致各种结构的损坏。据美国国家科学基金会统计:美国现有桥梁的40%(即225 826座)为濒临破坏的危险桥梁,其修复的代价高达1300亿美元。老龄反应堆与航空器现为美国社会和人身安全的重要问题。在以信息高速公路为代表的新技术中,材料与微结构的损伤断裂亦是微电子元件与封装可靠性的关键问题。

中国面临着更严重的材料与结构的断裂破坏事故和经济损失。1993年的估计表明我国一年由于材料腐蚀所造成的损失约为1000亿元。结构材料设计理论的落后成为制约我国航空航天工业发展的一个瓶颈。制造业的落后使中国每万台锅炉与压力容器的严重事故率为西方工业国家的近百倍。高温条件下运行的电站锅炉与管道的定寿、延寿与抗蠕变失效是工业界面临的重大课题。国产多层微电子元件与封装的可靠性、微机械的可靠性远低于国际先进水平。强韧材料与结构的发展将构成中国技术起飞之骨架,它支撑着中国的技术起飞和国防建设、制造业、建筑业的发展。

在国家自然科学基金委和国家科委攀登计划共同资助的八五重大项目“材料损伤断裂机理与宏微观力学理论”中,将宏微观力学理论的应用定位于材料的强韧化设计,结合点在微观层次,在国内开创了宏观与微观相结合的材料强韧化设计研究。

5.1.2 材料强韧化的潜力与范例

材料强韧化设计的发展近年来得到以下几个重要因素的推动:

- 结构材料的损伤断裂过程与其导致的各种结构损坏占世界各国国民生产总值的一个有形份额。据美国国家标准局1983年统计:断裂、疲劳、腐蚀等失效过程造成的损失占美国每年国民生产总值的11%。欧洲ESIS在1992年的统计表明:西欧地区由于疲劳、断裂、腐蚀所造成的损失占其国民生产总值的8%。日本通产省给出大致相近的统计数字。这一科技革新动力推动着传统材料向着高强韧的方向发展,并迫切需要寻求材料的宏观强韧性指标与其微结构设计的关联。
- 先进结构材料(如精细陶瓷、分子复合高分子材料、金属基与陶瓷基复合材料、超高强水泥等)都具有材料本身造价昂贵的特征。传统的配方型经验设计法从经济角度上不再可行,从而凸显出宏微观力学作为可定量描述材料设计及加工工艺的理论工具作用。

在材料强韧化设计的实践中,已涌现出若干突出的范例^[1]:

(1) 在各个取向都达到充分强韧化效果的三维编织复合材料,以及用该类工艺制成的整合型构件。

(2) 采用相变增韧技术和抑制自催化相变局部化的叠层技术,科学家们已有可能研制断裂韧性 K_{IC} 达 $25\text{MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$ 的新型结构陶瓷。

(3) 基体强度和模量可成倍提高的分子水平上原位复合的高强度塑料,它也可以视为

在分子水平上的“纤维增强复合材料”。

(4) 标号达 1000~4000 的高强韧水泥。

(5) 具有高疲劳比强度和比强韧性的铝锂合金等新型结构材料。

5.1.3 强韧化的新型薄膜结构与高新技术的发展

超大规模集成电路的发展所提供的亚微米加工技术,使制造毫米乃至微米级的微机械(micromachine)或微系统(microsystem)成为可能。 $5\mu\text{m}$ 的微镊子、 3mm 大小的可运动的汽车、毫米级尺寸的微泵、定子外径为 1.5mm 的平面电磁电机、转子直径为 0.08mm 的电磁电机等微机械在国际上相继问世,其所用的微材料涵盖着从金属至非金属的广阔范围。在以信息高速公路为代表的信息技术中,微电子元器件发展既要进一步微型化,又要提高其可靠性。掌握电子材料在力场和电场下的流动、损伤与断裂规律,是提高微电子集成元件与微电子封装可靠性的关键问题^[2]。由具有感知功能的微传感器、具有电脑功能的微电子元器件及具有驱动功能的微执行器可组成一个集感官、思维和动作于一身的微机电系统(MEMS),并形成了一个称为“力电学(mechatronics)”的新学科。

在以 MEMS 为代表的高新技术结构中,典型的构形为薄膜/基体和多层膜结构。其 3 个主要特征是:尺度小,层状异质,多场耦合。膜基结构和多层膜结构中常存在着高达弹性模量千分之一乃至百分之一量级的应力;薄膜的形状演化所需的时间尺度远低于块体材料;膜基结构的损伤有着层出不穷的形式;膜基结构的可靠性往往是制约高新技术结构发展的瓶颈。因此研究薄膜结构的应力、形状演化、损伤和可靠性便成为一项对高新技术发展有主要意义的工作。

高新技术的薄膜结构常在耦合的力、电、磁、声、光场下工作,因此需要探讨耦合场下的失效机制。用耦合场理论研究薄膜结构的可靠性常会取得意想不到的结果。如在多层共烧致动器(actuator)中使用的铁电型“灵敏”材料在强直流或交流电载下会发生断裂和疲劳现象。最近的研究表明:这些电致失效现象是不均匀电场造成不协调应力,并进而引起断裂或疲劳的结果^{[3]~[8]}。在我国现用微米级集成电路的制造工艺下,由于内导线的材料微结构为亚微米柱状晶而可能造成严重的电迁移问题,造成材料流动失稳和由此耦合产生的约束应力^{[9]~[11]}。

5.1.4 材料强韧化与宏微观断裂力学

结构材料的强韧化设计比功能材料设计更为复杂^[1]。新一代的高强韧结构材料多为含有特定细观结构的非均匀介质。材料细观单元及其构造的动力演化控制了材料的力学损伤破坏过程,从而决定了强度、韧性等宏观力学性能。材料强韧化设计的难点在于:(1) 材料结构的多层次性和诸层次之间的相关性;(2) 强度、韧性等材料性能对材料微结构涨落的非线性依赖性;(3) 材料结构的细微观非均匀性和缺陷结构的强相互作用性;(4) 材料在加工演化、变形和破坏等过程下的热力学非平衡性。

材料强韧化设计应以宏微观断裂力学^[2]为纲。其主要特征是:

(1) 以材料的断裂过程为主线,从材料断裂时推动力和阻力的竞争过程来引入力学场分析和材料的损伤断裂机理。

(2) 从不同层次(从连续介质到原子层次)和跨层次的结合上深入研究材料的损伤、断裂过程,在宏微观力学理论下建立定量的分析模型。要充分考虑不同材料的微结构特征和破坏过程的几何构象。

(3) 在这一基础上,建立针对某一确定材料和某一确定断裂过程的材料强韧化设计原理。

(4) 进一步归纳形成材料强韧化设计的原理库、方法库和断裂过程模型库。

(5) 由此形成材料强韧化设计的专家系统和软件。其功能水平的里程碑标志为:① 强化及韧化原理指导下的定性设计;② 应用专家系统和计算机模拟进行的半定量设计;③ 力学、材料和计算机相结合的准定量设计;④ 具有高可靠度和可修复性的智能预报设计。从而形成较完整的结构材料抗断裂设计方法,辅助用于广大的工程材料的设计。

“八五”期间,我们初步探索了上述过程的前3个步骤。在国家自然科学基金“九五”重大项目“材料的宏微观力学与强韧化设计”中,将对其做进一步完善,并展开对后两个步骤的探索。

5.2 材料强韧化的3个层次

固体材料的破坏状态方程涉及到宏观、细观、微观3个层次。材料破坏研究的多层次性决定了研究的长期性,使之成为力学界和材料科学界锲而不舍的跨世纪难题。材料的强韧化设计同样涉及到宏观、细观、微观3个层次,不同层次设计有其互补性。

本节以断裂过程为主线,首先在宏观、细观、微观3个层次下展述其裂尖场结构的几何构象和场特征;进而分析不同层次下的断裂过程和耗能过程,并概述各层次的主要强韧化机制;最后讨论跨层次的强韧力学计算。

5.2.1 裂尖场结构

断裂过程主要受裂尖场的制约。自裂尖顶点向外扩大,裂尖场随着物质描述层次的不同而显现出如图5.1所示的结构。图5.1(a)描述了从宏观层次到细观层次的过渡,图5.1(b)描述了从细观层次到微观层次的过渡。

为简单起见,仅讨论对称变形(即I型)的情况。如图5.1a所示,裂尖宏观场的外围由 K 场控制。 K 场是仅由应力强度因子 K 作为控制参量的弹性应力、应变和位移场。对小范围屈服的情况,裂尖区由环状的 K 场包围,这时外部的全部几何和载荷信息只能通过 K 值来影响裂尖区。若裂尖区不能由 K 场完全包围,则称为大范围屈服,这时外部的几何和载荷信息便可能直接影响裂尖区。

在 K 场嵌含的宏观塑性区中,又有可能在裂尖附近重新浮现出一个以 J 积分为控制参量的裂尖塑性场,称之为HRR场。HRR场是静止弹塑性裂纹的尖端场,而扩展弹塑性裂纹

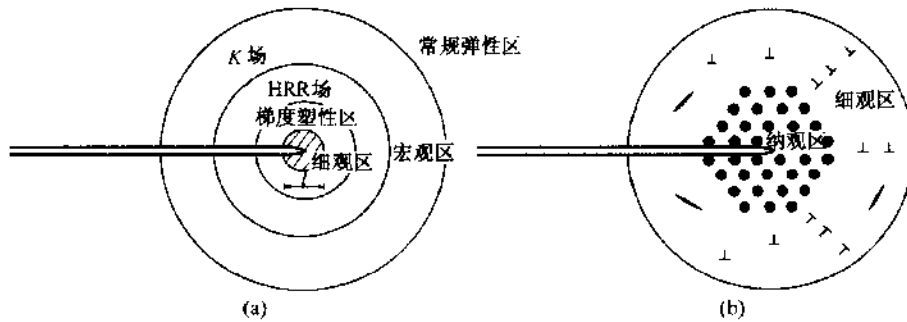


图 5.1 裂尖场结构

(a) 从宏观到细观的过渡结构；(b) 从细观到微观的过渡结构

尖端场的表述尚比较复杂,细致的论述请参见文献[12],[13]。在宏观断裂力学中,还有对于弹性裂尖渐近场的第 2 项(即 T 场)和弹塑性裂尖渐近场的第 2 项(即 Q 场)的讨论,此处不再赘述。 K 场和 HRR 场是在经典连续介质力学理论下推导出的、与材料内尺度和应变梯度无关的裂尖场。

若引进材料内尺度 l ,并在材料本构方程中考虑应变梯度的效应,便可在裂尖得到梯度塑性渐近场。该场仅在裂尖应变的特征变化尺度小于材料内尺度 l 时才起主导作用,其有效范围一般在若干微米以内。梯度塑性渐近场多被 HRR 场包围,是一种介于宏观场和细观场之间的裂纹尖端场。对扩展裂纹,梯度塑性裂尖场的应力显著高于经典的弹塑性裂尖场,表征了裂尖处的高应变梯度对该处生成几何必须位错的抑制作用。本课题组在国际上首次得到若干类弹性和弹塑性梯度材料裂纹尖端场的解析表达式^{[14]~[16]},受到国际断裂界的重视,其中幂硬化材料梯度塑性的裂纹尖端场是国际上首次得到梯度塑性裂纹尖端场的解析表达式。上述成果对解释断裂过程的脆韧转变有指导意义。

梯度塑性尖端场概括地考虑了材料内尺度的影响。若要细致地讨论裂纹尖端区的损伤和离散塑性变形,便需要考虑嵌含梯度塑性尖端场之内的细观损伤区,如图 5.1(a)所示。将该区放大如图 5.1(b)所示,则种种细观结构(如位错、孔洞、微裂纹、界面等)便显示无遗。对细观结构进行几何表征后,便可重新使用连续介质力学理论来进行分析^{[12],[17]}。该类分析可得到细观损伤结构的演化规律^{[18]~[19]}。

图 5.1(b)中最靠近裂纹顶端的区域直接涉及到断裂时的原子分离过程。对这一区域的一个有效的描述方案是分子动力学。若知道原子间相互作用力曲线,便可以在纳观上统一得到原子聚集体的点阵畸变、位错运动、原子分离、孔穴形成等断裂、损伤和塑性变形问题的解答^{[12],[20]}。

5.2.2 宏观层次：断裂的能量消耗

强韧过程的宏观层次研究在于探讨断裂中能量消耗的分割。为简单起见,仅考虑准静态情况,并忽略断裂所伴随的声、光、热、电、磁过程中释放的能量。裂纹扩展时,构件中蕴含的能量流入裂纹尖端区。该能量一部分转化为断裂分离过程中所耗散的(Irwin-Orowan 意义

上的)断裂过程功,一部分转化为在该分离过程中由于裂尖区的高应力而激发的外围塑性耗散功,另一部分转化为断裂牵连过程(如桥联过程)中所耗散的功。后两部分的能量耗散往往远大于第一部分的能量,但第一部分的能量起阀门控制的作用。材料的强韧化在于提高这三部分能量的总和。材料断裂能 J 积分的变化可作为强韧化的衡量指标。

材料强韧增值的研究可归纳为起裂韧度的增值与扩展韧度的增值两个范畴。设材料中已存在一根裂纹。记该裂纹实现起裂所需的 J 积分值为 J_{IC} ,该值与裂纹前方的细观损伤和裂纹的顶端轮廓有关^[1]。现讨论自裂纹起裂至稳恒态扩展这一过程中所产生的韧度增值 $\Delta J = J_{\infty} - J_{IC}$,这里 J_{∞} 指稳恒扩展的 J 积分值,即 J 阻力曲线的水平渐近线。 ΔJ 可通过能量积分来计算^[12]。选择一条围绕裂尖的闭合回路,其对能量积分的贡献有 4 部分:(1) 围绕裂尖的积分 J_{IC} ;(2) 外围道积分 J_{∞} ;(3) 桥联面上的积分;(4) 尾区的积分。于是可得 ΔJ 为

$$\Delta J = 2 \int_0^H U(y) dy + \int_L \sigma_B(x) d\delta(x) \quad (5.1)$$

式中 x 和 y 分别为平行和垂直于裂纹的坐标; δ 为裂纹张开位移; σ_B 为桥联应力; L 代表裂纹桥联段; H 为尾区高度; $U(y)$ 是坐标高度为 y 的物质单元从裂纹前方无穷远处随裂纹扩展面后退至裂纹后方无穷远处后的残余应变能密度。式中第一项代表尾区积分对韧度增值的贡献,第二项代表桥联而积分对韧度增值的贡献,后一项还可以分解为基体桥联和第二相桥联的叠加形式。

5.2.3 细观层次: 断裂过程区与断裂路径

细观层次的强韧化研究在于探讨断裂过程区的细观演化和断裂路径的细观几何特征。断裂过程区长期以来被视为一个黑匣子。断裂过程可分为解理、准解理和延性断裂三类。解理断裂过程可由 Griffith 理论相当精确地表达。准解理过程指位错发射和解理交替或共同出现的过程,它可能由周边介质的强约束^[21]或材料的率敏感性等因素造成,也可能由褚武扬等在本项目第 1 课题中(见本书第 1 章)实验揭示的纳米裂纹形核机制造成。纳米裂纹形核机制包括裂尖无位错区的形成、位错在 DFZ(无位错区)前的反塞积、塞积位错应力场对裂尖应力峰的前移、纳米裂纹形核和与主裂纹汇接等过程^[22]。延性断裂更为复杂。现有的撕裂准则多为基于局部变形(如 COD,CTOA 等)的唯象准则。由于扩展裂纹尖端奇异场的弱奇异性^[13],能量型和强度型准则往往在严格的意义上失效^[12]。流入裂尖区域的能量似乎全耗散于裂纹尾区的塑性变形,而无能量流入裂尖用于材料的分离过程,即所谓“Rice 疑结”。塑性耗散与裂尖分离之间的能量分割需引入一个断裂过程区模型。目前往往用损伤胞元带的办法来处理延性撕裂过程的模拟。

细观层次分析的另外一项任务是确定裂纹的扩展路径。对均匀的脆性材料,内聚单元是一种自身具备探寻断裂路径之功能的计算方案。对压电材料,可在力电耦合的理论下探寻裂纹扩展路径的偏折^[23],对含有残余应力的颗粒复相体,可采用准三维切片中的作用域连接法来一步一步地模拟裂纹扩展路径^[24]。对纤维或层片桥联复合材料的断裂路径,可按照分层断裂与基体断裂的选择准则来确定断裂路径^[25]。

5.2.4 微观层次：分离前的原子运动混沌

强韧过程的微观层次研究在于探讨断裂分离时原子运动的特征^{[12]、[20]}。探讨在宏观力学氛围下,裂纹顶端原子聚集体作为动力系统从确定性运动转为随机或部分随机运动的规律;探讨原子振动混沌模式在裂纹顶端随应力强度因子历史的时间演化和空间传播特征;探讨裂尖各类原子运动形态与材料力学行为(如韧脆转变行为)的关系。该研究为原子层次的材料设计打下基础。对裂纹尖端原子的非线性运动的研究结果,揭示了裂尖原子运动的突变行为与混沌现象。现已发现:

(1) 断裂所伴随的原子断键过程是一个突变过程^[26]。对各种材料可计算其突变释放能。若该突变释放能接近粒子从破碎表面逸出的能量阈值,便可在热激活机制下导致断裂粒子发射(fracto-emission)。该过程可被实验量测,并可用来探测断裂的混沌特征。

(2) 在准静态解理断裂前会发生原子混沌运动的前兆^[27]。该混沌过程由裂尖的 K 场所激发^[28],所需的 K 场仅为准静态下理论断裂韧性值的一半左右。

(3) 位错的发射也具有混沌特征,并形成位错云的时空结构^[29]。裂尖位错发生混沌所需的应力强度因子值亦为准静态理论值的一半。位错云指时空位置飘忽不定的位错概率分布。位错云之间可以出现少量重叠。

(4) 材料韧脆转变决定于解理与位错发射两种混沌模式在时间演化和空间传播特征上的竞争。

5.3 强韧化过程的力学计算

本节概述课题组在定量表达材料强韧化过程中所发展的力学计算方法,包括:宏观平均化计算方法、层状结构的 Hamilton 型计算方法、材料强度的统计计算方法、宏细微观三层嵌套模型。

5.3.1 宏观平均化计算

宏观平均化计算包括单一层次的梯度塑性计算方法和宏观跨尺度计算方法。本课题发展了在外加 K 场下,考虑宏观连接的梯度塑性计算方案。在梯度塑性理论下的详细有限元计算表明^{[14]~[16]},梯度塑性裂纹尖端场大多位于 HRR 场内,但也有一些情况在裂纹尖端并不出现 HRR 场,只出现梯度塑性裂纹尖端场。

课题组针对颗粒复合材料和纤维复合材料的横向性能来探讨宏观跨尺度计算方法。算法包括利用材料细观周期性的胞元模型和强调宏观连接的广义自治模型。

首先讨论胞元模型。胞元是材料的一个基本构元,它嵌含材料细观几何和相结构的要素。取颗粒增强复合材料的细观力学计算为例。胞元应嵌含颗粒形状、颗粒百分比、颗粒分布几何、基体本构、界面状况等要素。我们建立了以胞元模型为基础的三维弹塑性宏观平

均化算法和软件^{[30]~[32]}。该算法可以考察含有不同百分比的球形、立方形、菱形、柱形、椭球形颗粒的复合材料的应力-应变曲线。颗粒分布可以是各种确定性分布,也可以是计算机按一定体积百分比随机生成。界面状况包括理想粘粘与完全脱粘的情况。

自洽方法是一种直接考虑宏观交互作用的研究方法,广义自洽方法则将平均化的胞元与宏观等效介质进行自洽连接。大连理工大学课题组将广义自洽方法与有限元法相结合得到了广义自洽有限元法^{[33]~[34]}。该方法可处理具有复杂细观结构的复合材料,处理非线性的基体本构关系,处理不同的界面几何和物理特征。在这一计算方案下对以 Si/Al 和 B/Al 为代表的金属基复合材料进行了分析,预报了这两类材料的弹性模量、比例极限、屈服极限、后继强化和粘弹性性能^{[35]~[36]}。

通过界面损伤和金属塑性损伤的 Gurson 本构方程的结合,可分析界面强度对金属基复合材料细观损伤运动(基体内孔洞的成核与发展,界面脱粘和增强相断裂)及其宏观性能的影响。定量地描述金属基复合材料细观损伤的三种模式发生和发展的全貌,以及界面在复合材料从脆性损伤模式向韧性损伤模式转换中的关键作用^{[37]~[41]}。

针对纤维增强复合材料和复合材料层板断裂过程的特点,研制了复合材料的断裂模拟软件,该软件能识别复合材料中的断裂路径与强度,有限元网格能够随着裂纹的移动对裂纹尖端聚焦^{[25]、[42]}。

5.3.2 层状结构的细观模拟计算

大连理工大学课题组提出并逐步完善了可对层合结构进行精细应力分析的混合状态半离散半解析方法(Hamilton 层状元)^{[43]、[44]},克服了传统有限元方法求解这类问题时遇到的层间应力不连续、单元网格奇异、计算效率低等困难。提出了一种以位移和层间连续应力分量为变量,沿膜面方向离散,沿膜厚方向解析展开的计算方案,来解决单元网格奇异和不同介质间应力张量既有连续分量(层间应力)又有间断分量所造成的计算困难。其理论基础为 Hellinger-Reissner 变分原理,并引入混合边界项使之成为真正意义的混合变量变分原理。课题组改进了 Hamilton 元的生成原理,在不改变系统方程为 Hamilton 正则方程的前提下,用本构关系把不独立的应力分量表示成独立分量函数。最后在一般曲线坐标系下建立了 Hamilton 元,并克服了一般半解析法不能处理组合边界的困难,因此可在复杂区域应用 Hamilton 元。此项研究为多层介质材料的精细应力分析提供了一个高效的新工具^{[45]~[47]}。

5.3.3 强度的统计计算

脆性材料(如岩石、混凝土、环氧树脂、铸铁等)的强度对微缺陷分布非常敏感;强度不仅与微裂纹的平均密度和平均长度有关,还与微裂纹的长度和密度的涨落有关。其原因在于微裂纹的串接过程取决于微裂纹间的强相互作用。

为揭示强度对微裂纹分布的敏感性,需要采用统计计算。考察简单的共线裂纹情况。假设共线裂纹的平均长度和平均中心距均为已知,但裂纹长度和中心距的涨落可取不同的方差。可按断裂力学和最弱链理论来统计模拟微裂纹的串接过程^[48]。结果表明:(1)脆性材料

的统计强度遵循 Weibull 分布；(2) 裂纹长度和中心距的方差越大，材料的统计强度越差；(3) 材料的尺度越大，由于缺陷的涨落效应，材料的统计强度越差；(4) Weibull 模量仅与裂纹长度和中心距的方差有关，与其平均值无关。含不同分布方差特征的共线裂纹串的混凝土实验定量地验证了上述预测。

由此还可以进而讨论脆性材料中宏观裂纹串接微裂纹的过程^[49]。在给定的远场应力强度因子下，可以用统计计算得到宏观裂纹串接微裂纹的期望长度。对非共线微裂纹的串接过程，可以根据主裂纹和微裂纹的断裂力学计算来得到裂纹串接的统计规律。然后，在该统计规律下，由行走模型得到宏观裂纹垂直偏斜的期望值。这一垂直偏斜期望值在非平行宏观裂纹的交汇过程中非常重要。

5.3.4 宏细微观三层嵌套模型

宏观、细观、微观 3 个层次的结合需要发展多层次交叠的空间离散技术和时间加速计算技术。多层次的空间离散技术包括空间分域技术（即分为具有宏观、细观、微观特征的区域）及不同层次区域的嵌合技术。其技术内涵包括：以嵌盖层与吸收层为特征的缺陷结构透越技术、原子/连续介质的嵌套算法、细微观统计数值计算技术、破坏过程区移动时不同层次区域的跟随-转换技术，等等。多层次计算的一个更艰巨的任务是在不同时间尺度下的时间加速技术。原子运动的特征时间在飞秒量级，它与宏观运动的时间相差十几个量级。需要发展在神经网络算法支持下具有跨层次逐步学习功能的计算技术。

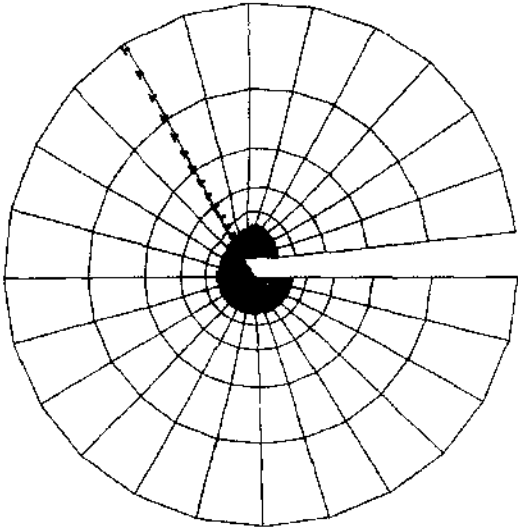


图 5.2 裂尖位错发射的细微观过程

本课题的进行中发展了宏细微观三层嵌套模型^{[50]~[52]}。其主要构成方案如下：(1) 用原子镶嵌模型和分子动力学理论模拟裂尖附近的纳观区行为；(2) 用弹性基体加离散位错来描述细观区行为，位错的运动由位错分解剪应力和位错动力学曲线来支配；(3) 在纳观区与细观区的交界上采用原子/连续介质交叠环和缺陷结构的透越技术，实现了裂尖发射位错的

跨层次传递；(4) 在宏观区采用超弹性/粘塑性大变形本构关系和有限元计算方案；(5) 在纳观区与细观区的交界上采用位错吸收的界面条件。这一原子点阵/连续介质的嵌套算法还可以模拟界面结构与形貌，并在外载上考虑裂尖混合度的影响。我们在原子点阵/连续介质交叠带方案下，首次模拟出从裂尖发射的原子点阵位错运行，并转变为连续介质位错群的动态过程，见图 5.2，并探讨了在不同界面断裂混合度下波折界面对位错发射的抑制作用。实现了从纳观计算力学到细观计算力学、再到宏观计算力学的贯穿。

5.4 典型强韧化机制的力学原理

本节概述 5 种强韧化机制的力学原理，它们是：裂尖屏蔽、裂尖形貌控制、尾区耗能控制、裂纹面桥联、裂纹扩展路径控制。

5.4.1 裂尖屏蔽

在裂尖区存在着诸如位错、微裂纹、相变区、畴变区等的细观结构。裂尖屏蔽指利用这些细观结构使得裂尖的应力强度因子 K_{tip} 小于远场应力强度因子 K_{∞} 的情况。裂尖屏蔽的力学原理模型既可以借助 J 积分来建立，也可以由计算细观结构对裂尖的交互应力强度因子来建立。

1. 位错屏蔽

我们针对北京科技大学对纳米裂纹方面的实验研究(见本书第 1 章)，提出了由裂纹前方无位错区(DFZ)前位错反塞积所驱动的准解理断裂理论^[22]。该模型解释了韧脆机制交织的准解理断裂，并可以定量地预测材料的断裂阻力曲线。对每一根位错，均考虑外载、裂纹表面和其他位错对它的相互作用，并由此得到诸位错在确定外载下的平衡构形。对系统的总能量取最小值，便可以得到裂尖发射位错的根数。得到位错平衡构形和位错根数后，便可以精确计算诸位错对裂尖的屏蔽效应。结果表明：在裂纹顶端存在一无位错区，在该无位错区前方的位错呈反塞积状分布。随 K_{∞} 的增加， K_{tip} 先呈正比上升，在裂尖发射位错后由于屏蔽效应而使 K_{tip} 的上升经锯齿状波动而越来越慢，达到一极大值后随之下降。若材料的本征断裂韧性大于该极大值，则裂尖不断钝化，材料为延性；若材料的本征断裂韧性小于发射第一根位错所需要的 K_{tip} 值，则裂尖不断解理断裂，材料为脆性；若材料的本征断裂韧性小于该极大值，但大于发射第一根位错所需要的 K_{tip} 值，则裂尖在发射一定数量位错后再解理断裂，材料介于韧脆之间。对一类准脆性材料，计算表明可随主裂纹的钝化在裂纹前方某一处出现应力高峰。于是该理论便成功地解释了纳米裂纹形核并随之与主裂纹汇合的机制，阐明了在细观与纳观断裂实验中所观察到的新现象。

2. 相变区屏蔽

相变区屏蔽是精细结构陶瓷强韧化的主要途径之一。作为准备工作，建立了热弹性马氏

体一类材料相变本构关系的统一热力学理论框架,在国际综述性力学年鉴《应用力学进展》上发表^[54]。综合采用高密度光栅、表面形貌仪和激光 Raman 微探针技术,发现了相变陶瓷在均匀及非均匀应力状态下的相变塑性局部化和相变过程中的材料失稳现象,从实验上研究了相变塑性局部化以体膨胀剪切带的形式生成并在材料中的传播方式^{[54]~[55]}。建立了描述单晶体马氏体相变的宏观本构理论,舍弃了在文献[53]中所建议的相变模型中关于相变应变平行于基体偏应力的假定,得到了更为严格的本构关系。

自催化相变是新近试验揭示的一类远离平衡态的材料不稳定现象,如纯弯受拉边的树枝状相变区和裂尖前方的狭长相变区等。本课题组对自催化相变所涉及的增韧行为的研究表明:自催化的力学机制归因于相变软化、长程剪切效应和加载路径三者的关联耦合。引入双尺度微结构,可有效地控制自催化,显著提高含裂纹构件的失稳载荷^[56]。通过有限元计算^{[57]~[58]}揭示了相变剪切对静止裂纹具有负屏蔽效应。采用计及剪切效应的相变模型^[59],进行了变形局部化分析,细致的参数研究揭示了复杂的临界相变行为。对于纯体膨胀相变材料,利用节点释放技术,进行了瞬态裂纹扩展的计算机仿真,得到了不同参数取值的阻力曲线。利用数值模拟展现了控制相变局部化传播方向的结构陶瓷的增韧潜力。

在理论指导下按照 3 种工艺路线制备了 Ce-TZP/Al₂O₃ 层状增韧陶瓷。当层厚小于 20 μm 时,研制的 Ce-TZP/Al₂O₃ 层状增韧陶瓷的断裂韧性比纯 Ce-TZP 相变增韧陶瓷提高 50%^{[59]~[60]}。

3. 畴变区屏蔽

对铁电材料断裂韧性测试的实验数据表明:(1)极化电场可使断裂韧性出现各向异性,裂纹平行于极化方向的断裂韧性高,垂直于极化方向的断裂韧性低;(2)对垂直于极化方向扩展的裂纹来说,在断裂韧性测试时加正电场(即外加电场与极化电场同向)使断裂韧性降低,而加负电场(即外加电场与极化电场反向)却使断裂韧性升高。研究表明:可用裂尖应力场和电场共同激发的 90°畴变模型来解释上述实验现象^{[6]~[8]}。畴变的准则为

$$\sigma_{ij}\Delta\varepsilon_{ij} + E_i\Delta P_i = 2E_c P_s \quad (5.2)$$

式中 σ_{ij} 为应力张量; E_i 为电场向量; $\Delta\varepsilon_{ij}$ 为畴变应变; ΔP_i 为畴变时的极化向量跃迁; E_c 为矫顽电场; P_s 为畴的饱和极化值。

该准则说明:只有当畴变功大于畴变能量阈值时才会发生畴变。在裂纹尖端高度集中的应力场可能促成裂尖附近的 90°畴变^[6]。对均匀电场的情况,电场影响着畴变区的尺寸,却不影响畴变区的形状。这时采取与结构陶瓷相变增韧类似的力学分析,可得畴变所造成的屏蔽应力强度因子 ΔK 为^[6]

$$\Delta K = \frac{Y\gamma_c^2}{(1-\nu^2)P_s E_c} \Omega K_\infty \quad (5.3)$$

式中 γ_c 为畴变应变; ν 为泊松比。该式右方的第一个因式表示弹性应变能与畴变能之比,对常见情况其值域在 10 左右,这一组合描绘出所有材料常数对 ΔK 的影响信息。式(5.3)中右方第二个因子 Ω 为无量纲电场度规函数,其详细表达式在文献[6]中给出,其取值范围为百分之几。该增韧公式可定量地解释极化后材料断裂韧性的各向异性和断裂韧性对正负外加电场的不对称性。

对电场集居于裂纹尖端的情况,畸变区的尺寸与形状都受到电场的影响。这时可采用介电椭圆裂纹体模型^[5],来研究各种可能的材料参数和裂纹形状参数对铁电材料的断裂韧性变化的影响。非均匀电场对断裂韧性的影响颇为复杂,断裂韧性的变化对缺陷的边界条件十分敏感。

若能定量地预测电场对断裂韧性的影响,便可将这一关系应用于铁电致动器的设计和实际运作之中。例如,可通过合理的预先极化来提高铁电材料在所需承载方向的断裂韧性,也可以在铁电致动器的实际运作时通过施加负向电场来提升其断裂韧性。由此可见,研究结果对于发挥铁电致动器的潜力与效率,对提高其可靠性都是十分重要的。

我们首次建立了铁电陶瓷驱动器的电致断裂机理,指出断裂推动力源于裂尖电致伸缩的不均匀^[3]。分析了由复杂的 90°和 180°畸变而产生的开裂、止裂、再开裂过程,定量地阐述了由正负电场交替作用导致的电致疲劳裂纹扩展规律^{[7]、[8]}。

4. 微裂纹屏蔽

微裂纹屏蔽的典型例子是复合材料层板。复合材料层板开始出现穿层裂纹时的载荷仅为最终破坏载荷的 1/3 左右。后 2/3 的承载能力归功于平行穿层裂纹间的屏蔽。文献[61]详细地讨论了复合材料层板破坏时所发生的屏蔽过程,包括初始平行穿层裂纹的互相屏蔽、穿层裂纹与层间裂纹之间的交互屏蔽和层间滑移的屏蔽作用。

5.4.2 裂尖形貌控制

控制裂尖的形貌可以促成裂纹起裂韧度的增值。裂尖形貌往往由断裂过程区的细观损伤所引致。我们详细考察了弹性体共混改性聚丙烯的裂尖形貌,在裂纹前缘的中部(平面应变区),裂尖形貌呈现出尖劈、钝劈、超钝化、矛头等多种形态。这类半晶高分子材料在超钝化裂尖形态下所对应的动态断裂应变能高达尖劈形态下的十余倍^[62]。作为初步研究,我们曾运用超弹性/粘塑性大变形有限元数值模型,再现了材料损伤演化对裂尖形貌的控制作用,模拟出尖劈、钝劈、超钝化、矛头、分叉、三分叉等多种裂尖形貌^[63],但无法建立所用的 Hill 型和 Baushinger 型唯象各向异性损伤常数与具体材料的联系。

随着对裂尖形貌控制这一强韧化机制的深入理解,课题组在弹性体共混改性聚丙烯的增韧机理方面取得系统性进展^[64]。在这一基础上提出宏细观结合的晶态高分子材料的本构关系,利用张量函数表现定理清晰地描述了高分子材料由于链段不可伸长而造成的织构演化过程^{[65]、[66]}。利用描述半晶高分子材料的宏细观链段演化理论模型,得以定量地解释实验中发现的高分子材料(聚丙烯类和聚碳酸酯类)的超钝化增韧机理^[67]。

5.4.3 尾区耗能控制

如式(5.1)所示,对稳态扩展的裂纹,断裂过程所激发的塑性耗能可由尾区的塑性耗能来计算。专著[12]中第 8.3 节叙述了各种弹塑性材料的尾区耗能计算。尾区耗能既取决于材料的应力-不可逆应变曲线的面积,也取决于尾区的高度。尾区高度在相变结构陶瓷的增

韧机制中起决定性作用。对增韧聚碳酸酯类材料的实验研究表明：在裂纹扩展的尾区出现微裂纹状拖带损伤区，区中诸微裂纹垂直于主裂纹过境时的最大主应力。拖带损伤区的出现使尾区的应力得以完全放松，使应力-不可逆应变曲线的全部面积都转化为尾区耗能，提高了材料的增韧效果。由于尾区耗能主要影响扩展韧度的增值，所以该机制主要影响材料的撕裂模量，而不是 J_{IC} 值。该拖带损伤增韧的理论模型解释了聚碳酸酯的实测断裂阻力曲线：加增韧相后，材料 J_{IC} 值变化不大，而材料的撕裂模量却增加了一个量级。

5.4.4 裂纹面桥联

决定裂纹面桥联作用的主要参数是：桥联区的尺度 l 、桥联特征应力 σ_B^{max} 、桥联尾端的张开位移 δ_{max} 。这 3 个参数的乘积给出桥联增韧的一个度量。裂纹面桥联可采用不同的形式，对应着不同的材料强韧化方式。

纤维桥联是最有效的一种桥联方式。在纤维桥联时桥联区尺度和桥联尾端张开位移均可达到登峰造极的地步。连续纤维复合材料层板在拉伸载荷下可以实现全场桥联^[61]，短纤维复合材料的桥联效果亦不弱^[42]。在纤维桥联下，裂纹的扩展呈凸凹不平的路径^[25]。

纤维复合材料在压缩荷载下会由于材料失稳而产生压曲带和折曲带^[68]。在压曲带和折曲带上，基体材料受到破坏（脆性基体产生碎裂，延性基体产生流动），而纤维材料在压曲带和折曲带的扩展中仍起桥联作用。桥联的应力为折曲带中纤维产生过屈曲时的压应力，折曲带的扩展仍可由 J 积分来描述^[69]。实验的整体压缩曲线有上升、陡降（对应于基体破坏）、平台（对应于折曲带扩展）和失效 4 个阶段。我们还对预埋缺陷的受压芳纶复合材料，用光栅法观察了其屈曲驱动层裂和折曲带扩展的复合过程^[70]，见图 5.3 所示。

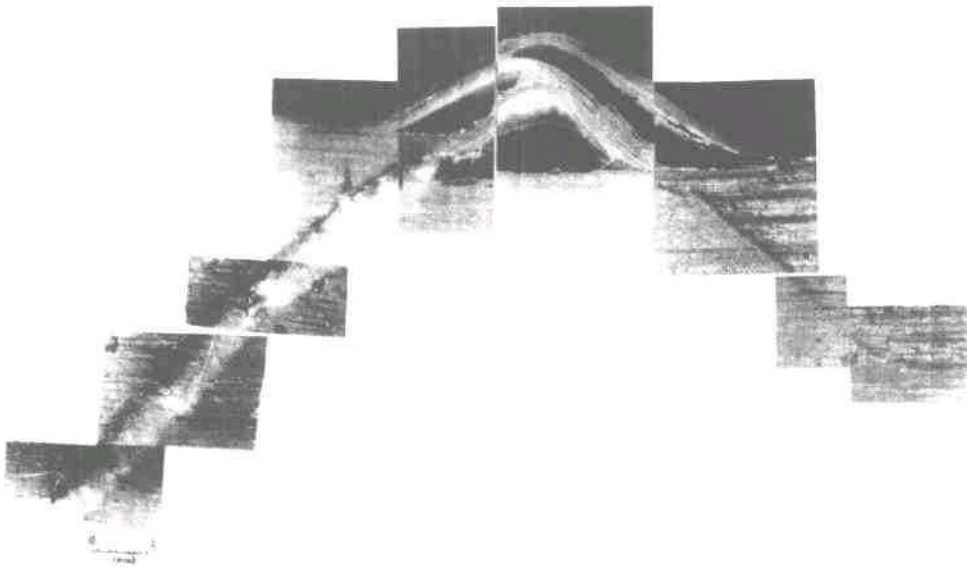


图 5.3 纤维复合材料的屈曲驱动层裂和折曲带扩展

桥联除可由纤维第二相造成,也可以由颗粒第二相造成。颗粒桥联的效果相对较弱,只有在颗粒桥联相既具有较高的流动应力,又具有较高的拉伸应变时才会出现可观的效果。颗粒桥联还可以造成曲线起伏的裂纹前缘,产生由离散颗粒桥联而造成的裂纹钉锚效果。我们利用了这一机制研制了采用聚矾颗粒增韧的环氧基高分子材料^[21]。

颗粒第二相所引发的残余应力还可以造成曲折状的断裂路径,从而在曲折状裂纹尖端造成混合型断裂。曲折裂纹上下表面的啮合可起到啮合桥联的作用。我们针对纳米复相陶瓷分析了这一作用(亦参照下一小节)。在常规微米晶粒的 Al_2O_3 陶瓷中添加 5%~15% 的 SiC 纳米相,可使制成的纳米陶瓷复合材料的断裂能达到了原基体材料的 1.5 倍~3.5 倍^[24]。造成该增韧行为的一项主要机制在于曲折裂纹面的啮合增韧效果。

5.4.5 裂纹扩展路径控制

在含有异质第二相的材料或含有残余应力的材料中,裂纹的扩展路径是曲折的,并可能由基体断裂和层间断裂交叉组成。由控制裂纹的扩展路径可达到多重增韧效果。

首先,断裂过程的能量消耗与裂纹扩展路径有关。脆性材料的断裂表面能正比于断裂表面的面积。裂纹表面越曲折,断裂表面能消耗就越大。对有一定延性的材料,曲折的断裂过程还可能造成断裂能势垒,使得裂纹尖端的应力场加强,引起额外的塑性耗散能。纳米复相陶瓷的增韧机制便在于对裂纹扩展路径的控制。陶瓷材料中添加纳米陶瓷颗粒而产生的残余应力造成主裂纹追随纳米颗粒的折曲式扩展,见图 5.4(a),由此造成三重增韧效果^[24]: (1) 晶界分布的纳米颗粒使晶界断裂转化为穿晶断裂;(2) 晶内分布的纳米颗粒造成曲折的穿晶断裂路径,使得断裂表面增加;(3) 曲折裂纹面的啮合增韧效果。在这 3 种增韧机制下理论预测的纳米陶瓷复合材料断裂韧性随纳米相百分比的变化曲线与实测结果吻合良好,见图 5.4(b)。图中 V_f 表示纳米相的体积百分比。

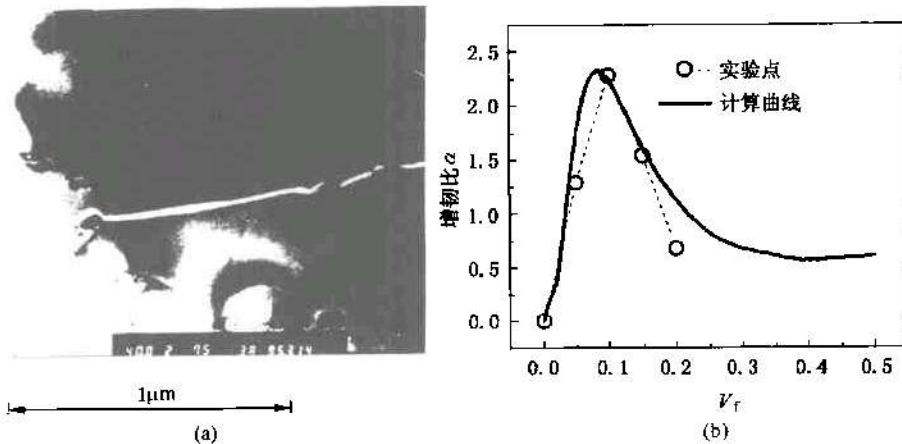


图 5.4 纳米复相陶瓷的增韧

(a) 纳米项诱使裂纹路径偏转; (b) 增韧比 α 随纳米项体积百分比 V_f 的变化

对陶瓷与树脂基复合材料,界面的诱折作用往往对增韧效果起着关键的作用。当主裂纹遭遇基体与第二相的界面时,取决于界面断裂韧性的 J_{IC} 高低,裂纹可穿越第二相或被界面诱折。对后一种选择,界面诱折裂纹爬行到一定高度后,便可能在主裂纹前方诱发微裂纹的再形核,并随之与主裂纹串接。伴随主裂纹扩展而形成的断裂过程区高度取决于界面的诱折作用。该高度与由尾区耗能面产生的增韧效果直接相关。

多相材料的界面在几何上多为折曲界面,由液态到固态的冷凝过程的原子模拟表明折曲界面为一种自然界面构形^[31]。多相材料的界面在物理上多为材料的连续过渡层,或是一种特殊的界面相。关于折曲界面强度与物理界面层的断裂理论可用界面层断裂理论来统一描述^[72]。我们在 J 积分的理论框架下发展、完善了界面层断裂理论。提出物理界面层断裂理论的内外层匹配和积分平均法,导致对断裂混合度控制的新认识。该理论可精确地计算裂尖混合度,并对界面层设计、界面层对断裂韧性的控制有指导意义。对裂纹平行于界面层、裂纹垂直于界面层、裂纹平行于材料不均匀层的3种情况进行了具体计算^{[72]~[73]}。在界面层理论的基础上发展了界面层断裂评价软件。

5.5 强韧化薄膜

5.5.1 β - C_3N_4 超硬薄膜的制备

β - C_3N_4 是加利福尼亚大学伯克利校址的 Cohen 教授在理论计算的基础上提出的超硬材料,其硬度可能超过金刚石。在理论工作方面,已经计算了几种不同形式的 C_3N_4 的晶体结构、结合能和体弹性模量。如果这种物质能在实验室中合成,将表明科学技术的进步已经使人们能够按照自己的意愿设计出具有超级性能的物质。然而,目前在 β - C_3N_4 的实验合成中尚存在以下问题:(1)成膜的致密度差,结晶不好;(2)氮含量普遍较低,只有个别的研究小组达到 $N/C=1.33$;(3)已得到的结构数据还不足以鉴定一个新相。

北京科技大学课题组采用两种方法制备碳氮薄膜:

(1)用注入离子的方法,将大剂量的氮离子注入高纯石墨和碳膜中,形成碳氮薄膜。通过注入基片的选择,注入时的束流、剂量、离子能量和基片温度等注入条件的优选,以及退火条件的变化,研究离子注入碳氮薄膜的形成规律,提高注入的氮量和 N/C 比,促进晶态共价化合物 β - C_3N_4 的形成。

(2)用等离子体化学气相沉积法(MPCVD)在 Si(100)和 Pt 基片上制备碳氮薄膜。通过生长条件的变化(工作气体的比例、工作气压、衬底温度和工艺流程),研究用微波等离子体化学气相沉积法制备碳氮薄膜的规律,进一步优化生长工艺,制备出成分、晶体结构和成键都符合 C_3N_4 要求的晶相薄膜。

当薄膜制得后,课题组用扫描电镜、X 射线衍射、EDX、Auger、XPS、Raman、红外吸收等分析方法对其表面形貌、成分、晶体结构、化学状态、成键情况等进行全面分析检测。用纳

米压痕计测量所制备碳氮薄膜的硬度和弹性模量。

通过本课题的实施,在 β - C_3N_4 研究中取得了下述重要进展^{[74]~[77]}: ① 将 N^- 离子注入高纯石墨,合成了弥散分布于基体中的 β - C_3N_4 晶粒;② 用微波等离子体化学气相沉积得到了均匀、致密的晶态薄膜;③ 薄膜的成分达到理论要求($N/C=1.33$);④ 在 Si 单晶、Pt 多晶衬底上沉积的膜中,得到了成套的 X 射线谱,证明 α - C_3N_4 、 β - C_3N_4 和 p - C_3N_4 的存在;⑤ Raman 谱中出现与理论估算接近的 β - C_3N_4 的特征峰;⑥ 用 STM 得到了特征平面的原子象;⑦ 纳米压痕计测定膜的体积模量达到 349GPa,说明所得的晶相确实是硬材料家族的新成员。

5.5.2 薄膜的界面强度测试

由于薄膜与多层膜的厚度在纳米至微米量级,其材料力学性能数据的测试便成为一个难题。一个可能的解决方法是采用微硬度量测。我们研究了膜基组件的微硬度量测过程,提出了微硬度量测过程的顺序式参数辨识方法^{[78]~[79]}。对膜基的结合强度,西安交通大学研究了两种测量方法:压入法和接触疲劳的对滚法^{[80]~[82]}。

压入法的特点在于用圆锥压头连续加卸载,配以声发射监控加卸载过程中膜开裂和界面剥落情况。课题组选用了不同表面粗糙度的 YT14, M2, 40Cr 基体材料(硬度不同),选用了 CVD, PVD, PCVD 等不同气相沉积工艺来进行 TiN 镀膜。测定膜基剥落时的临界压力 P_c 值,并与划痕法所得的 L_c 值进行比较。结果表明:

- (1) 和 L_c 值一样, P_c 值反映的是膜基体系的承载能力,受基体硬度的影响显著;
- (2) 基体粗糙度是影响结合强度的重要因素,对 P_c 值影响显著;
- (3) 利用 P_c 值测定膜基结合强度的灵敏度高于 L_c 。

课题组还采用弹塑性大变形的有限元分析程序对 $3\mu\text{m}$ 和 $10\mu\text{m}$ 镀层的膜基压入作了分析,结果表明在压入法中界面是被剪开的,即很难出现 I 型开裂,而是 II 型或 III 型的环状开裂。

压入法测定膜基结合强度仍属准静态载荷,而膜基剥落都是在长期循环载荷下产生的。更有效的方法是用对滚的接触疲劳方法来评价结合强度。课题组提出以界面疲劳 σ_c 值作为动态结合强度的判据。接触疲劳方法所加应力小,可限制在弹性加载范围,破坏形式为界面剥落。实验结果表明: σ_c 值与膜基界面的结合状态密切相关,但对膜或基体本身的力学性能却不敏感。划痕法所得的 L_c 值虽在一定程度上反映了结合力的大小,但受膜和基体的影响大,相比之下对界面结合状态的敏感性较差。

以上研究指出提高 TiN 镀层膜基界面结合强度的有效方法为: ① 提高基体表面的粗糙度;② 基体表面的预氮化可增加与 TiN 镀层的结合力;③ 对钢基体界面处改变镀层成分,如用 TiCN,表层再用 TiN 等多层膜。

薄膜残余应力的测定是膜基结构研究中的一个重要问题。进行薄膜 X 射线的结构分析时多用聚焦法(即 Seemann-Bohlin 法或 SB 法)。然而 SB 法用于应力测定时,由于一方面样

品需要转动,破坏了聚焦条件,另一方面必须应用低角线条,使测定精度下降。西安交通大学采用掠射侧倾法测量薄膜的残余应力^{[83]~[85]}。试样按 Bragg-Brenthano(BB)法几何设置并增加一掠射角,应力测定中的试件转角采取 Ψ -测角仪而不是常规的 Ω -测角仪衍射几何。实验结果表明掠射侧倾 BB 法比 SB 法具有较高的精度和重复性。

5.5.3 约束薄膜的断裂韧性

薄膜的断裂韧性与薄膜厚度有关。考察在两侧脆性基体的强约束作用下一延性薄膜的断裂过程^[21]。这时,自裂纹尖端发射的位错塞积在两侧脆性基体与薄膜的界面上,抑制了自裂纹尖端的进一步位错发射。因此,原属延性的薄膜在发射一定量的位错后转为解理断裂。这一过程不断地循环往复,便构成了约束薄膜的准解理断裂过程。在裂纹扩展每一步的位错发射量与薄膜厚度有关,因此可以解析地预测薄膜断裂韧性随薄膜厚度的变化曲线。上述研究进展对阐述断裂过程的脆韧过渡有重要意义。

5.6 结束语

在材料强韧化力学原理上已经揭示出多种机制,包括:尾区耗能机制、相变增韧机制、畴变增韧机制、离散桥联和复合桥联增韧机制、控制裂纹顶端形貌增韧机制、控制裂尖混合度增韧机制等。这些增韧机制得以启迪材料强韧化设计的新思想^{[86]~[87]},如由控制相变局部化传播而增韧的带层状相变阻滞层的结构陶瓷设计、控制细观折曲带演化的多层介质抗压屈曲设计等。尽管本课题在揭示材料的强韧化力学原理方面取得了长足的进展,但强韧化设计水平还停留在用力学的方法来分析解释各种材料力学行为的阶段,未能达到在力学原理上定量设计和试运行具有超级使用性能的各类材料的更高境界。

材料强韧化多层次设计的下一步目标应为:(1)实现从宏观量化到宏观逐级量化的抗断裂设计;(2)实现多层次的材料抗断裂主动设计与智能预报,采用结构承载层与敏感元件混排的方式,利用敏感层对力学信号的感知电学信号来监测材料的完整性;(3)将宏观力学与材料设计的优化策略和专家系统式软件相结合,建立高强韧材料的力学设计新平台,为材料的定量设计与智能预报奠定基础。

强韧化力学原理的深入研究^[88]揭示出两个新的科学问题:(1)尺度问题,即怎样进行不同尺度层次下的宏观过渡,并评价材料中微结构的尺度对其强韧行为的效应;(2)群体演化问题,即如何描述微结构及缺陷作为群体所体现的交互作用和演化动力学对强韧化行为的影响。在宏观力学分析中,并不存在尺度和群体演化的问题。在简单宏观刚度分析中,材料的刚度并不受微结构的尺度和群体演化的强烈影响。但对材料的强度和韧性而言,微结构的尺度和群体演化起着至关重要的作用:尺度效应使纳米材料的强度和韧性显著地不同于常规材料,使微力电系统的可靠性行为显著地不同于常规的机电系统;群体演化效应描述了破坏过程中特有的微细缺陷的扩展、串接、汇合和局部化,展现出材料破坏时特有的图案花样。只有将这两个科学问题研究清楚才能定量地刻画出结构材料的强度与韧性。

参 考 文 献

1. 杨卫, 黄克智, 余寿文. 材料强韧化的宏微观断裂力学理论. 力学与实践, 1991, 13(6):1~9
2. 杨卫. 电致失效力学. 力学进展, 1996, 26(3):338~352
3. Yang W, Suo Z. Cracking in ceramic actuators caused by electrostriction. J Mech Phys Solids, 1994, 42: 649~663
4. Lynch C S, Yang W, Collier L, Suo Z, McMeeking R M. Electric field induced cracking in ferroelectric ceramics. Ferroelectrics, 1995, 166:11~30
5. Zhu T, Yang W. Toughness variation of ferroelectrics by polarization switch under nonuniform electric field. Acta Materialia, 1997, 41: 4675~4702
6. Yang W, Zhu T. Switch-toughening of ferroelectrics gauged by electric fields. J Mech Phys Solids, 1998, 46: 291~311
7. Zhu T, Yang W. Fatigue crack growth in ferroelectrics under alternating electric loading. J Mech Phys Solids, 1999, 47: 81~97.
8. Yang W, Zhu T. Fracture and fatigue of ferroelectrics under electric and mechanical loading. Fatigue & Fracture of Engineering Materials and Structure, 1998, 21: 1361~1370
9. Yang W, Wang W, Suo Z. Cavity and dislocation buckling in electron wind. J Mech Phys Solids, 1994, 42:897~911
10. Thouless M D, Yu H, Zhao Z, Yang W. Damage nucleation during electromigration along an isolated boundary in an elastic medium. J Mech Phys Solids, 1996, 44:371~387
11. Zhao J Z, Yang W. Damage of interconnects by electromigration induced surface evolution. Tsinghua Science and Technology, 1997, 2(2): 574~577
12. 杨卫. 宏微观断裂力学. 北京: 国防工业出版社, 1995
13. Hwang K C, Yu S W, Yang W. Theoretical investigation of crack-tip singularity fields in China. Applied Mechanics Review, 1990, 43:19~33
14. Huang Y, Zhang L, Guo T F, Hwang K C. Near-tip field for materials with strain gradient effects. In: Willis J R ed. IUTAM Symposium on Nonlinear Analysis of Fracture. Cambridge: Kluwer Academic Publisher, 1997. 231~243
15. Huang Y, Zhang L, Guo T F, Hwang K C. Fracture of materials with strain gradient effects. In: Advances in Fracture Research, Proc. ICF9, Invited Plenary Lecture. Sydney, Australia, Vol. 5, Pergamon, 1997. 2275~2286
16. Zhang L, Guo T F, Hwang K C, Huang Y. Mixed mode near-tip fields for cracks in materials with strain gradient effects. J Mech Phys Solids, 1997, 45(3):439~465
17. Yang Wei, Lee W B. Mesoplasticity and Its Applications. Berlin:Springer-Verlag, 1993
18. 杨卫. 细观力学与细观损伤力学. 力学进展, 1992, 22(1):1~9
19. 杨卫. 细观损伤理论进展. 见: 黄克智, 徐乘业主编. 固体力学发展趋势. 北京: 北京理工大学出版社, 1995. 180~195
20. 杨卫, 谭鸿来. 断裂过程的细观力学与纳观力学. 中国科学基金, 1993, 7(4):249~254
21. Hsia K J, Suo Z, Yang W. Cleavage due to dislocation confinement in layered materials. J Mech Phys Solids, 1994, 42:877~896
22. Zhu T, Yang W, Guo T. Quasi-cleavage processes driven by dislocation pileups. Acta Metall Mater, 1996, 44: 3049~3058
23. Zhu T, Yang W. Kink crack growth in ferroelectrics. Int J Solids & Struct, 1999, 36: 5013~5027
24. Tan H L, Yang W. Toughening mechanisms of nano-composite ceramics. Mechanics of Materials, 1998, 30:111~123

25. 杨庆生, 杨卫. 界面断裂的路径选择与数值模拟. 力学学报, 1997, 29(3):354~358
26. Tan H L, Yang W. Nonlinear motion of atoms at a crack tip during cleavage processes. *Int J Fracture*, 1996, 77:199~212
27. Tan H L, Yang W. Catastrophic fracture induced fracto-emission. *J Mater Science*, 1996, 31:2653~2660
28. Yang W, Tan H L. Chaotic atom motion excited by fracture. *Material Science Research International*, 1996, 2:1~12
29. Tan H L, Yang W. Nonlinear motion of atoms at a crack tip during a dislocation emission processes. *J Appl Physics*, 1995, 78:7025~7034
30. Fang D N, Qi H, Tu S D. Elastic and plastic properties of metal-matrix composites: geometrical effects of particles. *Computational Materials Science*, 1996, 6:303~309
31. Fang D N, Liu T Q. On the effect of fiber shape and packing array on elastic properties of fiber-polymer-matrix composites. *Int J Polymeric Mater*, 1997, 34:75~90
32. Fang D N, Liu T Q. Transverse plastic deformation of metal-matrix with randomly arranged continuous fibers. *Computational Materials Science*, 1997, 7:343~350
33. Yang Q S, Tang L M, Chen H R. Self-consistent finite element method: a new method of predicting effective properties of inclusion media. *Finite Elements in Analysis and Design*, 1994, 17
34. 陈浩然, 苏晓风, 郑子良. 广义自治有限元叠代平均化方法. 大连理工大学学报, 1995, 35
35. 陈浩然, 袁彪, 郑子良. 短纤维增强 SiC/Al 复合材料在高温下粘弹性拉伸性能的细观力学分析. 玻璃钢/复合材料, 1995, 2.
36. Chen H R, Su X F, Tang L M. The effect of microstructures on the macroscopic elasto-plastic properties of metal-matrix composites. *Acta Mechanica Solida Sinica*, 1996, 17
37. 陈浩然, 苏晓风, 杨庆生, 郑子良. 界面对多相介质平均弹性性能和应力场的影响. 计算结构力学及其应用, 1994, 11
38. Chen H R, Su X F, Williams F W. The effect of interface on overall average mechanical properties and total stress fields of multi-phase medium materials. *J Computational Mater Sci*, 1995, 4
39. Chen H R, Su X F, Williams F W. The effect of imperfect interphase on overall average mechanical properties and local stress field of multi-phase composite materials. *Composites*, 1995, 26(5):347
40. 苏晓风, 陈浩然. 界面对金属基复合材料轴向弹塑性拉伸性能的影响及局部应力场的分析. 计算力学学报, 1997, 14
41. 周储伟, 杨卫, 方岱宁. 内聚力界面单元与复合材料的界面损伤分析. 力学学报, 1999, 31:372~377
42. 杨庆生, 杨卫. 纤维复合材料损伤过程的数值模拟. 计算力学学报, 1998, 15(2):154~160
43. 邹贵平, 唐立民. 复合材料叠层板的 Hamilton 正则方程及其状态空间有限元法. 复合材料学报, 1994, 11
44. 王治国, 唐立民. 分析复合材料叠层板的三维理论和哈密顿单元方法. 复合材料学报, 1996, 13
45. 邹贵平, 唐立民. 层合圆柱壳壳热应力分析的状态方程及其半解析解法. 力学学报, 1995, 27
46. 齐朝晖, 唐立民. 曲线坐标下的哈密顿体系的建立. 大连理工大学学报, 1997, 37
47. Zou G P, Tang L M. A semi analytical solution for the dynamic response of thick composite plates in Hamilton systems. *Finite Elements in Analysis and Design*, 1996, 21
48. Zhang S L, Li T, Yang W. Statistical strength of brittle solids with strongly interacted microcracks. *Int J Solids Structs*, 1998, 35:995~1008
49. Zhang S L, Yang W. Macrocrack extension by connecting statistically distributed microcracks. *Int J Fracture*, 1998, 90:241~253
50. Yang W, Tan H L, Guo T F. Evolution of crack tip process zone. *Modelling and Simulation in Material Science and Engineering*, 1994, 2(3a):767~782
51. Tan H L, Yang W. Atomistic/continuum simulation of interfacial fracture, Part I: Atomistic simulation. *Acta Mechanica Sinica*, 1994, 10(2):151~162

52. Tan H L, Yang W. Atomistic/continuum simulation of interfacial fracture, Part II: Combined atomistic/dislocation/continuum simulation. *Acta Mechanica Sinica*, 1994, 10(3):237~249
53. Sun Q P, Hwang K C. Micromechanics constitutive description of thermoplastic martensitic transformations. *Advances in Applied Mechanics*, Academic Press. 1996, 31:249~298
54. 孙庆平, 赵智军, 卿新林, 陈渭泽, 戴福隆. ZrO₂ 相变多晶体塑性变形局部化行为的宏观-细观实验研究. *中国科学 A 辑*, 1994, 24(5):383~388
55. Sun Q P, Zhao Z J, Chen W J, Qing X L, Xu X J, Dai F L. Experimental Study of Stress-induced Localised Transformation Plastic Zones in Tetragonal Zirconia Poly-crystalline Ceramics. *J Am Ceram Soc*, 1994, 74(5):1352~1356
56. Hwang K C, Sun Q P. Thermoelastic martensitic transformation induced plasticity-micromechanical modelling, experiments and simulations. Invited plenary lecture at 7th International Conference on Mechanical Behavior of Materials. In: A Bakker ed. *Mechanical Behavior of Materials*. The Hague, Netherlands: Delft Univ. Press. 1995
57. Sun Q P, Guo T F, Li X J, Zhang X. Effect of dual-scale microstructure on the Toughness of laminar zirconia composites. *International J Fracture*, 1996, 78:315~330
58. Guo T F, Sun Q P, Zhang X. The role of autocatalysis and transformation shear in crack tip zone shape and toughness of zirconia ceramics. *Int J Solids Structures*, 1997, 34(31~32):4213~4236
59. Wang D N, Liang K M. Effect of carbon on the toughness of zirconia. *J Mater Sci Lett*, 1997, 17(4):343~344
60. 万菊林, 梁开明等. Ce-TZP/Al₂O₃ 层状复合材料的相变与韧化研究. *硅酸盐学报*, 1997
61. Yang W, Boehler J P. Micromechanics modelling of anisotropic damage in cross-ply laminates. *Int J Solids & Structs*, 1992, 29:1307~1328
62. Yang W, Guo T F, Fu Z L. Crack tip superblunting: experiment, theory and numerical simulation. *Acta Mechanica Sinica*, 1993, 9:131~141
63. Guo T F, Yang W. Crack tip profiles generated by anisotropic damage. *Int J Damage Mechanics*, 1993, 2:364~384
64. 孙以实, 张增民, 付增力, 杨卫. 弹性体共混改性聚丙烯的增韧机理. *高分子学报*, 1995, (1):82~87
65. Chen M X, Zheng Q S, Yang W. A micromechanical model of texture induced orthotropy in planar crystalline polymers. *J Mech Phys Solids*, 1996, 44:157~178
66. Yang W, Chen M X, Zheng Q S. Constitutive modeling of aggregates with evolving inextensible constraints. *Int J Mechanical Sciences*, 1998, 40(2):139~146
67. Chen M X, Yang W, Zheng Q S. Simulation of crack tip superblunting in semi-crystalline polymers. *J Mech Phys Solids*, 1998, 46:337~356
68. Yang W, Wei Y G. Progressive damage along kink bands in fibre-reinforced composite blocks under compression. *Int J Damage Mechanics*, 1992, 1:80~101
69. Wei Y G, Yang W. Post-microbuckling of fibre bridging kink bands under compression. *Acta Mechanica Sinica*, 1993, 9:33~43
70. 魏悦广, 杨卫, 黄克智. 纤维复合材料后微屈曲的理论和实验. *中国科学 A 辑*, 1994, 24:768~776
71. Yang W, Fu Z L, Sun Y S. Bridging toughening of epoxy resin by dispersed thermoplastics. *Acta Mechanica Sinica*, 1989, 5:332~342
72. Yang W, Shih C F. Fracture along an interlayer. *Int J Solids & Structs*. 1994, 31:985~1002
73. 王惠军, 杨卫. 材料不均匀层对垂直裂纹的作用. *复合材料学报*, 1996, 13(1):91~96
74. Gu Y S, Pan L Q, Chang X R, Tian Z Z. Carbon nitride films prepared by ion implantation. *J Mater Sci Lett*, 1996, 15(15):1355~1357
75. Gu Y S, Pan L Q, et al. Two Crystal Phases of C₃N₄ Found in Carbon Nitride Films Prepared by Ion Implantation. *Chin Phys Lett*, 1996, 13(10)
76. Gu Y S, Pan L Q, et al. Formation of β-C₃N₄ by implantation of N⁺ into graphite. *Prog Natural Sci*,

1996, 6(2)

77. 顾有松,段振军,赵敏学,常香荣,田中卓,肖纪美. 晶相 C_3N_4 薄膜的制备. 物理,1997,26(8)
78. 黄建明,杨卫. 膜基组件的微硬度量测与膜体力学参数的顺序辨识. 应用基础与工程学报,1995,3(1):61~66
79. 黄建明,杨卫. 膜基组件微硬度量测的数值模拟. 固体力学学报,1996,17(2):130~134
80. Chen H, Xu K W, He J W. Bonding strengths of PCVD films under cyclic loading. Surface and Coatings Technology, 1995, 74-75:253~258
81. He J W, Bai C D, Xu K W. Improving anticorrosion and mechanical behavior of PACVD TiN. Surface and Coating Technology, 1995, 74-75:387~393
82. Yu L G, Xu K W, He J W. Interfacial fatigue limit as measure of cyclic bonding strenght of hard coatings. Surface Engineering, 1996, 12(1):1~6
83. Yu L G, Xu K W, He J W. A correction of the Seemann-Bohlin Method for stress measurements in thin film. J Appl Cryst, 1994, 27:863~867
84. 徐可为,于利根,何家文. 薄膜应力测定的 X 射线掠射法. 物理学报,1994,43(8):1295~1300
85. Xu K W, He J W. Microstrain-induced additional peak shift and method for determination macrostress in plasma-assisted CVD coatings. Surface and Coatings Technology, 1994, 70:115~120
86. 杨庆生,杨卫,陈浩然,唐立民. 复合材料的宏观性能与参数设计. 力学与实践,1996,18(3):1~7
87. 杨庆生,杨卫. 强韧化材料的细观力学设计. 力学进展,1997,27(2):177~184
88. 杨卫. 固体破坏理论的若干问题. 上海力学,1998,19:289~296

第6章 环境断裂

氢脆、应力腐蚀和液体金属脆(总称环境断裂)是材料在使用中失效乃至发生灾难性断裂事故的重要原因。随着能源的开发、输运和转化,新材料、新工艺的广泛应用,这个问题愈来愈突出。因此,发展具有良好抗环境断裂的新材料、新工艺乃是材料科学工作者急待解决的问题。另一方面,尽管世界各国科学家对环境断裂的规律和机理已进行了大量研究,但对应力腐蚀和氢致开裂的微观机理一直存有争议,这是一个尚未解决而值得深入研究的领域。因此,从1976年以来我们一直从事环境断裂(应力腐蚀,氢脆)的基础研究工作。在“六五”期间获国家科委重大项目的资助,在“七五”和“八五”期间又一直受到国家基金委重大项目 and 一般项目的资助,从而使得我们在环境断裂领域的基础研究能持续20多年,并不断深入下去。在这个领域中我们已在国内一级学报及国外刊物上发表了200多篇论文,曾获国家自然科学二等奖一项,国家教委科技进步一等奖二项,教委、北京市和冶金部科技进步二等奖五项。本章是在我们多年研究的基础上,按我们的学术观点编写的。

环境断裂的本质是环境因素(腐蚀介质或氢)影响形变和断裂的基元过程,从而导致低应力脆断。因而必须从位错层次来进行研究。作为第一步,首先要从位错层次来弄清空气中拉伸时微裂纹的形核机理以及材料韧脆转变的物理本质,这就是本章第1节的内容。本章第2节是氢致开裂,第3节是应力腐蚀。这两节除了介绍氢脆和应力腐蚀的一般规律外,主要是按照我们的学术观点来组织材料,介绍和评述国内外最新的研究成果并重点介绍我们一系列最新的研究成果;从环境(腐蚀介质和氢)影响位错发射、运动入手,从位错层次来研究应力腐蚀和氢致开裂的机理。

6.1 断裂的物理基础

6.1.1 断裂和环境断裂

1. 韧断和脆断

(1) 材料的韧脆性

关于材料的韧脆性目前还没有统一的科学标准。对金属材料来说,按延伸率(断裂应变或面缩率)的大小来区分韧脆性,但是并没有公认的标准。工程上,往往把延伸率 $\delta=5\%$ 作为材料韧脆性的分界线。有人认为,如没有宏观塑性则为脆性材料,宏观塑性较大则为韧性材料,如宏观塑性较小则为半脆性材料。但韧性材料和半脆性材料的界线也不清楚。对材料学家来说,一般只用韧性和脆性两种名词,且分界线很含糊。

断口形貌是判定材料韧脆性的重要判据。对冲击试样,宏观断口如为纤维状则为韧性断口;如是结晶状则为脆性断口。一般把50%结晶状断口作为韧脆的分界线。扫描电镜所揭示的微观断口是区分材料韧脆性的重要依据。韧性材料的显微断口为韧窝;而脆性材料(或处于脆性状态的材料)则显示解理(或准解理)或沿晶断口。当然,也存在例外。例如对某些铝合金,其断裂应变很小,属于脆性材料,但微观断口则由韧窝构成。又如加B的Ni₃Al延伸率 $\delta=50\%$,应属于韧性材料,但其断口由解理或准解理构成。温度、试验条件(如加载方式,试样类型及尺寸)以及试验环境(氢,水介质等)能明显影响材料的韧脆性。

(2) 温度对韧脆性的影响

大部分金属材料(fcc合金除外)随温度下降其脆性倾向升高。在某温度 T_c (对应50%结晶状断口)下就会发生从韧性向脆性的转变。但对大部分fcc材料来说,即使在液氮温度仍具有极好的韧性。温度不会引起fcc材料产生韧脆转变。

(3) 加载条件及试样类型对韧脆性的影响

很多材料压缩时显示韧性,但拉伸时则为脆性。试样中一旦存在裂纹或缺口,则脆性倾向增大。例如,Zr₃Al拉伸时 $\delta=30\%$,显示韧性;但如存在缺口,则为脆性沿晶断裂。裂纹愈长,则脆性倾向也愈大。对中低强度材料,试样愈厚则愈接近平面应变条件,从而脆性倾向愈大。

(4) 环境对韧脆性的影响

这里的环境指材料所接触的有害环境,如各种腐蚀介质、氢以及液体金属。一般来说,上述环境使材料变脆,称为环境脆断,它包括氢脆、应力腐蚀和液体金属脆。对fcc材料,虽然降低温度不能使它变脆,但在环境中却能变脆,即对fcc合金也存在氢脆、应力腐蚀和液体金属脆。

2. 环境断裂

(1) 应力腐蚀

应力腐蚀可分为阳极溶解型和氢致开裂型两类。如水溶液中腐蚀反应的阴极过程是析氢反应,且进入试样的氢控制了裂纹的形核和扩展,则称为氢致开裂型应力腐蚀(如高强度钢在水溶液)。如阴极过程不是析氢而是吸氧(如黄铜在氨水溶液),或虽是析氢但进入试样的氢量不足以引起氢致开裂(如奥氏体不锈钢在MgCl₂溶液),则应力腐蚀由阳极溶解过程所控制,称为阳极溶解型应力腐蚀。应力腐蚀将使材料韧性和塑性下降或在低的外应力下就会导致滞后断裂。对阳极溶解型应力腐蚀,将获得脆性断口(解理或沿晶);对氢致开裂型应力腐蚀,一般获得脆性断口,但也有可能获得韧性断口(如 σ_c 低,外加恒应力较高)。

(2) 氢脆

根据氢的来源可分为内氢脆和外氢脆两类。如原来含有氢的试样在空气中加载称为内氢脆;试样在含氢环境(H₂,加载时电解充氢,氢致开裂型应力腐蚀)中加载称外氢脆。根据塑性损失的可逆性分为可逆氢脆或不可逆氢脆(也称氢损伤)两类。由原子氢扩散、富集所引起的氢致塑性损失以及氢致滞后开裂称为可逆氢脆。氢致相变产生脆化相(氢致马氏体相变,氢化物),氢致化学变化产生CH₄气泡和裂纹(高温高压氢腐蚀),以及氢原子合成H₂引起的鼓泡和裂纹(钢中白点,H₂S中浸泡裂纹,焊接冷裂纹)均是加载前就存在的损伤,称为

不可逆氢脆(或氢损伤)。氢脆将使材料的韧性降低或在低的外应力下就会引起滞后断裂。在大多数情况下将获得脆性断口(准解理式沿晶),但也可能获得韧窝断口(如氢含量低, σ_c 低,或外加恒应力较高)。

(3) 液体金属脆

金属材料与液体金属(Hg, Ga, Gd, Zn等)相接触,就会导致塑性和韧性明显下降,并将获得脆性断口。

3. 环境断裂的表征参量

(1) 塑性(或其他性能)损失

由于氢脆、应力腐蚀甚至液体金属脆都需要在环境中经过一定时间后才能导致裂纹的形核和扩展,因此,只有当拉伸速率特别慢,才能反应环境脆断。分别在空气中和环境中慢应变速率拉伸,测出延伸率 δ_0 和 δ ,则 $I=[(\delta_0-\delta)/\delta_0]\times 100\%$ 称为环境引起的塑性损失, I 愈大,则环境脆性倾向愈明显。

(2) 门槛应力

恒载荷试样在氢脆、应力腐蚀和液体金属环境中,经过一段时间后会就会引起滞后断裂,随外加恒应力 σ 降低,滞后断裂时间 t_F 增加,当 σ 小于临界值 σ_c 之后,经过足够长的时间也不再发生滞后断裂,则 σ_c 就是门槛应力。用一组无裂纹试样加载至不同恒应力,作出 $\sigma-t_F$ 曲线就可求出门槛应力 σ_c ^[1]。

如对一些预裂纹试样加恒载荷,则可获得 K_I-t_F 曲线,由其渐近线就可获得门槛应力强度因子 K_{IH} (指氢致开裂), K_{ISCC} (指应力腐蚀)或 K_{IL} (指液体金属脆)。液体金属脆断的时间依赖性一直未受重视。我们最近的工作表明,铝合金吸附Ga之后无论是在拉应力还是压应力下,裂纹形核时间随外加 K_I 下降而升高,从而可测出裂纹形核的门槛应力强度因子 $K_{IC}=1.7\text{ MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$ ^[2]。

(3) 裂纹扩展速率

环境断裂均需经过裂纹形核、扩展才导致断裂,裂纹扩展速率 da/dt 是衡量环境断裂敏感性的一个重要参量。用预裂纹试样测出裂纹长度 a 随时间的增长曲线,就可求出 da/dt ,一般来说它和 K_I 有关。

6.1.2 位错发射和无位错区

1. 发射位错的临界应力强度因子

I型、II型和III型裂纹发射位错的情况不相同。对于III型裂纹,外加 τ_{yz} 后裂尖发出一组螺位错,裂尖不钝化^[3]。对于II型裂纹,外加 τ_{yz} 后裂尖发出一组共面刃位错,裂尖也不钝化。对于I型裂纹,外加正应力,当裂纹面和滑移面不重合时将沿不同的滑移面发出两组以上的刃位错列,裂尖锐化^[3]。

对III型裂纹,裂尖应力集中 $\tau_{yz}=K_{III}/(2\pi r)^{1/2}$ 是发射位错的动力,它作用在位错上的力为 $F_G=b\tau_{yz}$ 。裂尖自由表面吸引位错(即位错象力,它等于反号位错互作用力的一半),它是

位错发射的阻力,即 $F_s = -\mu b^2/4\pi r$ 。位错要离开裂尖需克服晶格摩擦力 $-\tau_i b$ 。合力为 $F_T(r) = bK_I/(2\pi r)^{1/2} - \mu b^2/4\pi r - \tau_i b$ 。随 r 减小,阻力($\propto r^{-1}$)增大比动力($\propto r^{-1/2}$)增大更明显, r 的最小值应等于位错芯半径 r_0 (约 $1-2b$)。因此,当 $r=r_0$ 时,如果动力大于阻力,即 $F_T > 0$,则位错就能发射并离开裂尖,发射的临界条件为 $F_T(r_0) = 0$,由此可得发射位错的临界应力强度因子 K_{Ic} [3] 为

$$K_{Ic} = \sqrt{2\pi r_0} \left(\frac{\mu b}{4\pi r_0} + \tau_i \right) \quad (6.1)$$

如果裂纹面和滑移面(位错所在面)成 θ 角,则 [3]

$$K_{Ic} = \sec\left(\frac{\theta}{2}\right) \sqrt{2\pi r_0} \left(\frac{\mu b}{4\pi r_0} + \tau_i \right)$$

$$K_{Ic} = \left[\frac{2}{\sin\theta \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)} \right] \left\{ \frac{\mu b}{(1-\nu)\sqrt{8\pi r_0}} + \sqrt{2\pi r_0} \left[\tau_i + 4\gamma e^{3/2} \frac{\sin\theta}{\pi r_0(4+e^3)} \right] \right\} \quad (6.2)$$

式中 γ 为表面能。

2. 无位错区和反塞积群

(1) 无位错区的形成

裂尖发出一组位错后,作用在 A 位错上的力除了 F_T 所表示的三项(裂尖应力场、位错象力以及晶格摩擦力)外,还有其他位错对 A 位错的互作用力。平衡时 $\Sigma F = 0$ (消去 b),从面

$$\frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} - \frac{\mu b}{4\pi r} - \tau_i - \sum \left[\frac{\mu b}{2\pi(x_i - r)} \right] \left(\frac{x_i}{r} \right)^{1/2} = 0 \quad (6.3)$$

可以认为位错连续分布,位错密度为 $f(x)$,在 x 和 $x+dx$ 间的位错数为 $f(x)dx$,用积分代替求和,可求出其解 $f(x)$ [3]。它和裂纹延长线(x 轴)有两个交点 c 和 d ,这就表明,在裂尖前方 oc 之间位错密度 $f(x) = 0$,即 oc 区间无位错,称为无位错区(DFZ);位错处在裂尖前方的 cd 区, $f(x) \neq 0$,它就是塑性区; $x \geq d$, $f(x) = 0$,这个区域是弹性区。实际上位错是离散分布的, $f(x)dx$ 是 dx 内的位错数,在 c 点处 $f(x)$ 最大,位错最密,离裂尖愈远, $f(x)$ 愈小,位错愈来愈稀疏,即位错群反塞积在无位错区的尾部。用数值计算方法可对(6.3)式所列出的 n 个联立方程求解,结果和解析解类似,即在裂尖前方存在一个无位错区 oc ,从 c 点开始位错间距愈来愈大,即位错反塞积于裂尖前方 [4]。应当指出,DFZ 的出现是互作用力平衡((6.3)式)的必然结果。即 DFZ 只能在恒载荷(或恒位移)条件下才能观察到,如果连续加载,(6.3)式只能在瞬时成立,故实验上无法观察到 DFZ。

透射电镜原位观察表明,不论是韧性材料还是脆性金属间化合物 [5]-[7],加载时裂尖首先发射位错;如果保持恒载荷,就会出现一个无位错区(DFZ),位错反塞积于 DFZ 的尾部。如果连续加载则很难发现 DFZ。

(2) 无位错区的尺寸及本质

DFZ 的大小受很多因素的影响,很难量化。计算表明,随外加 K_I 值增大,DFZ 尺寸减小,塑性区增大 [4],[8]。当 τ_i/μ 值增大时,DFZ 尺寸也减小 [4],[8]。裂尖发出的位错数目 n 愈大,DFZ 尺寸愈小 [3]。加载速率愈大,DFZ 尺寸愈小 [9]。通过表面侵蚀,可观察到大块试样(如

LiF, Al 和 Fe-3%Si 单晶)表面存在很宽的 DFZ^[10]。

DFZ 中不存在位错,故应当是一个弹性区,但我们的选区电子衍射表明,DFZ 中存在很大的畸变,应变可高达 0.04~0.08^{[5]~[7]}。用束斑直径为 25 nm 的微区衍射,可测出 DFZ 中的畸变为 0.06(纯 Al)和 0.05(TiAl)。由此可知,DFZ 是一个畸变很大的异常弹性区。

3. 无位错区中的应力分布

如果忽略象力,则裂尖前方应力场 $\tau_{ye}(r)$ 除了外应力引起的应力集中(6.3 式第 1 项)外,还有所有位错的应力场之和(6.3 式第 4 项),利用位错的连续分布函数 $f(x)$,就可求出 $\tau_{ye}(r)$ 。在 DFZ 中应力可以很高,有可能等于原子键合力。对于 I 型裂纹,发射位错后裂尖钝化成一个缺口,利用离散位错有限元法可精确计算尖缺口前方 DFZ 中的应力场^[4]。在尖缺口前方存在两个应力峰值:第一个峰处在缺口顶端,第二个峰在 DFZ 内。这两个峰应力的相对大小和外加 K_I 以及 τ_i/μ 有关。随外加 K_I 增大,缺口顶端的应力集中增大,而 DFZ 中的应力集中相对减小。随 τ_i/μ 值增大,这两个应力集中均增大。当这两个应力峰值之一或两者均等于原子键合力时,就会使微裂纹从原裂纹顶端或 DFZ 中形核,或同时从这两处形核。

4. 位错对裂纹的屏蔽作用

当位错从裂尖发出后它使裂尖 K_I 下降,故起屏蔽作用,因为每个位错的 K_{II} 是负值。裂纹前端有效应力强度因子为 K_{II} ,它是外力引起的 K_{Ia} 和位错引起的 K_{II} 之和, $K_{II} = K_{Ia} + K_{II}$ 。因为 K_{II} 是负值,故 $K_{II} < K_{Ia}$,即裂尖发出的位错对裂尖起屏蔽作用,使裂尖有效应力强度因子 K_{II} 下降。如认为裂尖存在一个片状弹性区(它就是 DFZ),其尺寸为 D ,有限元计算表明^[11]

$$\frac{K_{Ia}}{K_{II}} = f\left(\frac{\gamma}{\sigma_s b}, D, n\right) \quad (6.4)$$

式中 γ 为表面能; σ_s 为屈服应力; b 为位错 Burgers 矢量的值; D 为 DFZ 的宽度; n 为加工硬化系数。

6.1.3 微裂纹形核的位错理论

1. 位错塞积形成微裂纹

位错在障碍处塞积就会产生应力集中,当塞积群前端某处的应力集中等于原子键合力时就会导致微裂纹形核^[12]。由位错理论可知,塞积群前端 r 处的正应力 σ_θ 和 θ 有关,当 $\theta = 70.5^\circ$ 时, σ_θ 有极大值 σ_{max} , 其值为

$$\sigma_{max} = (\tau_a - \tau_l) \sqrt{\frac{4L}{3r}} \quad (6.5)$$

式中 L 为塞积群长度; τ_a 为外加切应力。当 σ_{max} 等于原子键合力 $\sigma_{th} = (E\gamma/b)^{1/2}$ 时,就会产生一个长为 c 的微裂纹。令上式的 $\sigma_{max} = (E\gamma/b)^{1/2}$, $r = c$, 则 $\tau_a = \tau_c$ 就是解理裂纹形核的临界切

应力:

$$\tau_c - \tau_f = \sqrt{\frac{3E\gamma_c}{4Lb}} \quad (6.6)$$

Smith 认为塞积群顶端可形成和塞积群共面的裂纹,裂纹形核应力 τ_c 为^[13]

$$\tau_c - \tau_f = \sqrt{\frac{2\mu\gamma}{\pi L(1-\nu)}} \quad (6.7)$$

2. 位错反应形成微裂纹

Cottrell 指出,bcc 中两个滑移面上的两组 $\langle 111 \rangle/2$ 位错相遇后会反应生成 $[001]$ 不滑移位错。 $[001]$ 不滑位错是刃位错,缺少半个原子面,当 m 个 $[001]$ 不滑位错合并在一起时,就会在其下方形成一个尖劈形的微裂纹。当微裂纹长大时,系统能量下降,则微裂纹就会解理扩展,其条件为 $\sigma mb \geq 2\gamma$ ^[14]。计算表明,构成微裂纹的 $[001]$ 位错数 m 和滑移面上塞积的 $\langle 111 \rangle/2$ 位错数 n 有关,即 $n = 0.13\mu(m-1)/(\tau_s - \tau_f)$ ^[15]。由此可知,裂纹核一旦形成,通过增大不动位错数 m 可使裂纹长大,但这要求滑移面上塞积位错数 n 成 10 倍或几十倍地增大,因为 $\tau_s - \tau_f \leq \tau_s$,而 $\mu = (10^2 \sim 10^3)\tau_s$ (τ_s 为屈服应力)。当 m 增大至裂纹失稳扩展的临界值 $m^* \geq 2\gamma/\sigma b$ 之前,塞积位错的应力集中就有可能在塞积群前端形成新的微裂纹(按 Stroh 或 Smith 机构)。因此,Cottrell 位错反应作为断裂判据并不合理。

3. 无位错区中形成微裂纹

宏观断裂力学认为裂纹前方存在一个塑性区,塑性区中最大应力称为有效屈服应力,即 $\sigma_{\max} = \sigma_y = Q\sigma_s$,即使考虑加工硬化, $Q \leq 5$ 。因此,塑性区中应力不可能等于原子键合力 σ_{th} 。但是,裂尖发射位错后就可能形成一个无位错区(DFZ),它是一个弹性区,因而可用弹性力学来计算 DFZ 中的应力集中。有限元计算说明,DFZ 中存在两个应力峰值,一个处在已钝化的裂纹顶端,另一个应力峰在 DFZ 中^[4]。由于 DFZ 是弹性区,故应力集中的大小并不受限制,它们仅和外加应力 σ_s (或 K_{Ic})、相对摩擦应力 τ_f/μ 以及裂尖钝化程度有关。因此这两个应力峰值或其中之一就有可能等于原子键合力 σ_{th} ,从而导致纳米尺寸的微裂纹在原裂纹顶端或 DFZ 中形核。

裂纹发射位错后就钝化成为一个曲率半径为 ρ 的缺口,缺口前端 DFZ 中的最大应力和 K_{Ic} , τ_f , n 及 ρ 有关,即 $\sigma_{\max} = f(K_{Ic}, \tau_f, n, \rho)$ 。当 $\sigma_{\max} = \sigma_{th}$ 时,微裂纹在缺口顶端形核。这时 K_{Ic} 就是使微裂纹形核的外加临界应力强度因子 K_{II} ,即 $\sigma_{th} = f(K_{II}, \tau_f, n, \rho)$ 。利用数值计算可反过来求出 K_{II} ,即

$$K_{II} = \sigma_{th}/\varphi(\tau_f, n, \rho) \quad (6.8)$$

4. 微裂纹形核的原位观察

通过位错塞积以及 Cottrell 位错反应形成微裂纹是可能的。但在透射电镜中原位拉伸时很难观察到这两类微裂纹,即很难观察到塞积位错群前端存在一个微裂纹(Stroh 机理),以及两列塞积群相交端点出现微裂纹(Cottrell 机构)。透射电镜原位观察表明,无论是韧性材料^[6]还是脆性的金属间化合物^{[6],[7]},拉伸时先发射位错并形成无位错区,随后纳米尺寸的

微裂纹从原裂纹顶端或无位错区中形核,或同时从这两处形核。

韧性材料在裂尖发射位错后,保持恒位移,在 DFZ 中将会形成一个不连续的纳米微裂纹,在恒位移条件下,DFZ 中的微裂纹很快钝化成空洞,随后在 DFZ 中又形成新的微裂纹,并钝化成空洞,它们互相连接就导致韧断^[16]。有时微裂纹首先从原裂纹顶端形核,韧性材料保持恒位移时,微裂纹钝化成缺口,新的微裂纹又从钝化了的裂纹顶端形核并钝化^[17]。在脆性金属间化合物中,纳米微裂纹在 DFZ 中不连续形核后,并不钝化成空洞,而是解理扩展,继续保持恒位移,微裂纹也可从原裂纹顶端形核,这些微裂纹沿解理面扩展就导致脆断^[7]。

如果在透射电镜中连续拉伸,就很难看到无位错区,因为作用在每个位错上的各种力来不及达到平衡就会有新的位错发射及运动,这时就无法确定微裂纹是否在无位错区中择优形核。对韧性材料的原位拉伸观察表明,微裂纹(空洞)可在位错胞壁、亚晶界以及孪晶晶界上形核^[18]。fcc 多滑移开动使裂尖区不断减薄而形成裂纹,它们沿两个滑移方向长大并和主裂纹连接,从而导致 Z 字型扩展^{[19]、[20]}。

对金属间化合物(Ti₃Al+Nb, TiAl),用螺钉加载的恒位移试样在金相显微镜下原位跟踪观察发现,加载时先出现滑移带,当这种局部塑性变形发展到临界状态时,微裂纹在滑移带上形核^[21]。由此可知,薄膜试样的结果可能和块状试样的结果不一致;微裂纹形核可能有多种方式。

6.1.4 韧脆判据

1. 位错发射控制的韧脆判据

Rice 理论认为,如果裂纹发射位错(其临界应力强度因子为 K_{Ic})比解理扩展(其临界值为 K_{Ic})更容易,即 $K_{Ic} < K_{Ic}$,则通过发射位错,裂尖将钝化从而韧断。反之,如 $K_{Ic} > K_{Ic}$,则裂纹首先解理扩展,从而脆断^[22]。当 $K_I < K_{Ic}$ 时,如果发射位错后系统能量改变量 $U(r)$ (r 是离裂尖的距离)随 r 增加而下降,即 $dU/dr < 0$,这就表明发射的位错能离开裂尖,从而 $K_I < K_{Ic}$ 时裂尖能自动发射位错,导致韧断。如 $K_I = K_{Ic}$ 时 $dU/dr > 0$,则位错不能自动发射,由于 K_I 已等于 K_{Ic} ,从而裂纹优先扩展,导致脆断。由此可确定控制材料韧脆性的参量为 r_0/b 和 $\mu b/\gamma$,其中 r_0 是位错中心半径。韧脆判据为^[22]:

$$\left. \begin{array}{l} K_{Ic} < K_{Ic}, \text{ 即 } \frac{r_0}{b} > 1 \quad \text{且 } \frac{\mu b}{\gamma} < 10 \quad \text{韧断} \\ K_{Ic} > K_{Ic}, \text{ 即 } \frac{r_0}{b} < 1; \text{ 或 } \frac{r_0}{b} \geq 1 \quad \text{但 } \frac{\mu b}{\gamma} > 10 \quad \text{脆断} \end{array} \right\} \quad (6.9)$$

对各种材料可算出发射位错的激活能 U ,但对很多晶体来说,计算结果并不合理^[23]。例如 Rice 算出 Zn, W, LiF 和 Si 的 U 值极高,在高温下也不会发射位错,这显然和实验不符。为此,很多人对 Rice 模型进行了修正,试图降低位错应变能(从而降低 U)^{[23]、[24]}。

2. 失稳堆垛能控制的韧脆判据

利用 Peierls 位错模型将发出的位错看成是 Burgers 矢量无限小位错的连续分布,从而引入一个失稳堆垛能 γ_{us} 作为位错形核的阻力。这样就可使发射位错的激活能大大下降^[25]。

Rice 认为, 滑移面上下两层原子的相对滑动为 $b/2$ 时, 堆垛能有极大值, 这时原子处于不稳定状态, 开始发射位错。把发射位错临界状态的最大堆垛能定义为失稳堆垛能 γ_{us} , 它是材料抵抗外力产生韧性(即发射位错)的能力。材料韧脆判据为

$$\left. \begin{aligned} \gamma/\gamma_{us} > \beta & \quad \text{韧断} \\ \gamma/\gamma_{us} < \beta & \quad \text{脆断} \end{aligned} \right\} \quad (6.10)$$

式中 β 是一个常数, 与材料本质、加载方式、几何参数等多种因素有关。很多人认为失稳堆垛能 γ_{us} 是一个新的材料参数。由于它涉及到原子面之间的相对滑移, 目前无法直接测量 γ_{us} , 但可用多种方法来计算 γ_{us} , 如镶嵌原子法(EAM)以及第一原理(量子力学)法。一般来说, 用 EAM 势得到的 γ_{us} 比正弦函数势获得的值要低, 而量子力学计算的 γ_{us} 比正弦函数计算结果要高 50% 以上^[26]。

应当指出, 无论是用(6.9)式还是用(6.10)式, 均以裂尖是否发射位错作为韧脆判据的物理依据。但实验表明, 这个判据对金属材料(包括金属间化合物)是不适合的。因为根据这个判据, 任何材料处于脆性状态时裂尖不发射位错。但透射电镜原位观察表明, 金属材料在任何脆性状态(如金属间化合物在室温^[6]、金属材料应力腐蚀^[27]、氢致开裂^[28]或液体金属脆^[29])均是先发射位错, 当位错发射、运动达到临界状态时, 脆性裂纹才开始从原裂纹尖端或在无位错区中形核。

3. 位错可动性控制的韧脆判据

前两节根据材料的特性, 如 r_0/b 和 $\mu b/\gamma$ 或 γ/γ_{us} , 来判定材料本身的韧脆性, 它以 $K_I \leq K_{IC}$ 时裂尖是否发射位错作为判据。由于热激活能促进位错发射, 因此室温时本质脆性的材料(如 Si)随温度升高也能由脆变韧。这种以位错发射(形核)作为控制因素的韧性脆变机制均以 Rice-Thomson 理论为基础。但由于热激活是个连续过程, 因而位错形核控制机理很难解释在 T_c 温度处突然由脆变韧的实验结果(如 Si), 另外也很难解释加载速率对韧脆转变温度的影响。

以热激活促进位错运动为控制因素的韧脆转变理论认为^[30], 裂尖发射位错很容易, 低温下外加应力强度因子 K_{II} 很小时就会首先发射位错。但发出的位错对裂尖起屏蔽作用, 裂尖有效应力强度因子为 $K_{II} = K_{II} + K_{ID} < K_{II}$, 其中 K_{ID} 是负值, 它是裂尖前方塞积位错引起的应力强度因子, 是裂尖屏蔽程度的度量。随外加应力升高, K_{II} 升高, 与此同时 K_{ID} 的绝对值也升高(从裂尖发出并塞积在裂尖前方的位错数目升高, 从而位错屏蔽效应增大)。但当温度较低时, K_{ID} 较小, 从而当 $K_{II} = K_{IC}(T)$ 时, K_{II} 仍有可能等于材料的 Griffith 断裂韧性 $K_{IC}^* = [2E\gamma/(1-\nu^2)]^{1/2}$, 从而脆断。当温度高于韧脆转变温度 T_c 时, 这时 K_{ID} 的绝对值非常大, 以致即使 $K_{II} = K_{IC}(T_c)$ 时, K_{II} 仍然小于 K_{IC}^* , 从而不发生解理断裂。但外加应力强度因子已等于韧断时的断裂韧性 $K_{IC}(T_c)$, 它远比 K_{IC}^* 高, 故材料韧断。韧脆判据为^[30]

$$\left. \begin{aligned} K_{II} = K_{IC}(T) \text{ 时, } K_{II} = K_{II} + K_{ID} = K_{IC}^* & \quad \text{脆断} \\ K_{II} = K_{IC}(T) \text{ 时, } K_{II} = K_{II} + K_{ID} < K_{IC}^* & \quad \text{韧断} \end{aligned} \right\} \quad (6.11)$$

式中 $K_{IC}^* = \sqrt{2E\gamma/(1-\nu^2)}$ 是 Griffith 断裂韧性。裂尖屏蔽程度 K_{ID} 由裂尖发射出的位错总数以及位错的可动性来决定。(6.11)式的判据可以反映 T_c 对加载速率的依赖性。另外对 Si 的

计算表明,如果裂尖前方只有一个滑移系开动,则韧脆过渡区较宽;如果动作滑移面有 2 个或 3 个,则韧脆过渡区很窄^[30]。

Hirsch 利用离散位错源模型也可解释韧脆转变的突发性以及 T_c 对加载速率的依赖性^[31]。他认为位错并不从整个裂纹前沿发出,而是仅从裂纹前沿某些孤立位置处发出,从这些孤立位错源发出的位错将沿裂纹前沿侧向运动。当整个裂纹前沿均为位错(塑性区)所包围时,则整个裂尖被屏蔽,故 $K_{II} = K_{Ia} + K_{ID}$ 急剧下降,即使当 $K_{Ia} = K_{IC}(T_c)$ 时, K_{II} 仍小于 K_{IC}^* ,从而发生韧脆。但如果 T 很低,则位错侧向运动速率很小,当 $K_{II} = K_{IC}^*$ 时位错仍未包围整个裂纹前沿,从而未被屏蔽的裂纹前沿将解理扩展。但对 Si 的原位观察表明,裂尖发出的位错圈沿动作滑移面扩展,而不是沿裂纹前沿扩展^[30]。

透射电镜原位拉伸表明^{[5]~[7]},无论是韧性材料还是脆性材料,均是首先发射位错,然后才是微裂纹在无位错区中(包括原微裂纹顶端)形核。对韧性材料,这种纳米尺寸的微裂纹一旦形核就钝化成空洞(即使保持恒载荷);而对脆性材料或脆性状态(如应力腐蚀,液体金属吸附,氢脆),纳米微裂纹并不钝化而是解理扩展。这就是韧脆的本质区别,其原因目前尚不清楚。另外,和这个现象相对应的控制方程尚未找到。总之,关于韧脆转变的位错理论目前还不成熟。

6.2 氢致断裂

金属材料在冶炼、加工及使用过程中经常会有氢进入材料中。在某些特殊情况下,氢有有益作用,例如,对钛合金,氢可作为临时合金元素来改善其热加工性能及室温机械性能;金属氢化物可用作储氢材料或电池材料。但在一般情况下,进入材料的氢是极其有害的,使材料产生氢损伤。氢损伤也称氢脆,包括氢压引起的微裂纹(钢中白点、焊接冷裂纹、 H_2S 或酸中浸泡裂纹),高温高压氢腐蚀,氢化物相或氢致马氏体相变,氢致塑性损失以及氢致开裂或断裂。

6.2.1 氢在金属中的行为

1. 氢的溶解度

H_2 分解成 H 而进入金属,平衡时就有 $\frac{1}{2}H_2 \rightarrow H$ 。 H_2 的压力为 P ,固溶 H 的浓度为 C_H ,这个反应的自由焓变化为 $\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln(C_H / \sqrt{P})$ 。平衡时 $\Delta G = 0$,从而就有 $\Delta G^\circ = \Delta H - T\Delta S = -RT \ln(C_H / \sqrt{P})$,由此可得

$$C_H = \sqrt{P} e^{\Delta S/R} e^{-\Delta H/RT} = A \sqrt{P} e^{-\Delta H/RT} = B \sqrt{P} \quad (6.12)$$

式中 ΔH 为溶解热; ΔS 为焓变; $\exp(\Delta S/R) \approx 1$, $B = A \exp(-\Delta H/RT)$,这就是 Sieverts 定律。 C_H 为氢浓度,可以用多种方法来表示,各种氢浓度的换算关系如下:

$$1 \text{ ppm} = 1.12 \text{ cm}^3[\text{H}]/100 \text{ g}[\text{M}] = 1.12 \times 10^{-2} \rho_M \text{ cm}^3[\text{H}]/\text{cm}^3[\text{M}]$$

$$= m \times 10^{-6} [H]/[M] = 5 \times 10^{-7} \rho_M \text{mol}[H]/\text{cm}^3[M] \quad (6.13)$$

式中 m 是质量; ρ_M 是金属密度; $[H]$ 表示氢; $[M]$ 表示基体金属。对能生成氢化物的金属 (V, Nb, Ta, Ti, Zr, Hf, 稀土) 及合金, 氢有两类固溶度。一种称极限固溶度, 它是氢化物全部析出后氢在金属中的固溶度。另一种称全固溶度, 是指包含氢化物中的氢在内的总的氢含量^[32]。极限固溶度随温度升高而升高, $\Delta H > 0$ (即氢溶解在金属中是吸热反应), 室温时 C_H 也极小, 约为 $10^{-3} \sim 10^{-4}$ ppm。但是, 全固溶度却随温度升高而下降, 即 $\Delta H < 0$ (生成氢化物时是放热反应), 如外延至室温, 氢的全固溶度较大, 如对 α -Ti 约为 400 ppm。

2. 氢引起的晶格变化

氢处在间隙位置, 故将产生畸变。一般均认为, H 在 V, Nb, Ta 中的畸变是球对称的, $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 0.044 \sim 0.063$ 。我们对 α -Fe 测出的是四方畸变, $\epsilon_1 = 0.37, \epsilon_2 = \epsilon_3 = -0.11$ ^[33]。在恒温恒压下加入一摩尔氢所引起的金属体积变化称为氢在该金属中的偏摩尔体积 \bar{V}_H , 单位为 cm^3/mol 。实验表明, α -Fe 的 $\bar{V}_H = 1.6 \sim 2.6 \text{cm}^3/\text{mol}$; Nb 的 $\bar{V}_H = 1.5 \sim 2.9 \text{cm}^3/\text{mol}$; V 的 $\bar{V}_H = 1.4 \sim 3.1 \text{cm}^3/\text{mol}$ ^{[1], [33], [34]}; α -Fe 本身的摩尔体积为 $V_{Fe} = 7.092 \text{cm}^3/\text{mol}$ ^[23]。

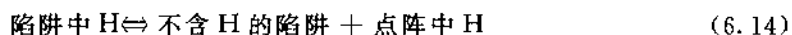
3. 氢致空位

统计力学分析表明, 间隙原子进入金属后将使空位浓度升高。对氢来说也是如此。一方面 H 进入后使固溶体的熵升高, 另一方面, H 进入后基体原子容易跳离平衡点阵位置。尽管 H 使空位浓度升高的热力学计算存在巨大差异^{[35], [36]}, 但氢进入 Ni, Pd 后使热平衡空位浓度升高却已为很多实验所证实^[37]。在充氢的奥氏体不锈钢中发现过饱和空位盘 (在除 H 后不再稳定) 崩塌而形成的位错圈^[35]。

我们用分子动力学方法研究了 Al 的裂尖前方引入 H 之后在加载过程中原子组态的变化。结果发现, H 原子进入后会聚集成气团, 与此同时会产生很多空位及空位团, 氢使平衡空位浓度升高^[38]。

4. 氢陷阱

间隙氢周围存在应变场。另外, 各种晶体缺陷 (如空位、位错、晶界、相界)、第二相 (包括夹杂) 乃至各种溶质元素的周围也存在应力、应变场。这个内应力场能和氢的应变场交互作用, 从而把氢吸引在缺陷或第二相周围 (从而捕获 H)。这种能捕获 H 的缺陷或第二相就称为氢的陷阱 (trap)。恒温时, 处在晶格间隙位置的氢 (固溶的氢, 浓度为 C_H) 和处在陷阱的氢 (浓度为 C_T) 将达到动态平衡, 即



此反应的自由焓变化为 $\Delta G = \Delta G^\circ + RT \ln(C_T/C_H)$, 平衡时 $\Delta G^\circ = -RT \ln(C_T/C_H)$ 。因为 $\Delta G^\circ = \Delta H - T\Delta S = \Delta U + P\Delta V - T\Delta S = \Delta U - T\Delta S = -E_b - T\Delta S$ (上述反应 $\Delta V = 0$), 其中 $E_b = -\Delta U$ 称为陷阱结合能, 由此可知

$$C_T = C_H e^{\Delta S/R} e^{E_b/RT} = C_H A e^{E_b/RT} \quad (6.15)$$

式中 $A = \exp(\Delta S/R)$, ΔS 是 (6.14) 式反应过程中的熵变; C_H 是固溶的氢浓度, 由 (6.12) 式

给出。陷阱中的氢浓度 C_T 和陷阱结合能 E_b 有关, E_b 愈大, C_T 愈高。当 E_b 较小时, 室温时 H 就可以从陷阱中跳出, 从而称为可逆陷阱, 如溶质原子、空位等。如 E_b 较大, 室温时 H 不能跳出陷阱, 称为不可逆陷阱, 如位错中心、晶界、第二相等。对 fcc 的 Ni 和不锈钢, H 陷阱的结合能 E_b 较小, 它们远比 H 在 fcc 晶格中的扩散激活能 $Q=38\text{kJ/mol}$ 要小。

5. 氢富集

(1) 应力引起的氢富集

通过应力诱导扩散, 氢将向高应力区富集, 经足够长的时间后, 氢浓度分布将达到稳定值。如氢应变场是球对称 ($\epsilon_1=\epsilon_2=\epsilon_3$), 则

$$C_s = C_H \exp(\sigma_h \bar{V}_H / RT) \quad (6.16)$$

式中 C_s 是应力作用下的氢浓度; C_H 是无应力时的氢浓度; $\sigma_h = (\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) / 3$ 。

如氢的应变场为非球对称, 则

$$C_s = C_H \exp(-U/RT) = C_H \exp(V \sum \epsilon_i \sigma_i) \quad (6.17)$$

式中 V 是金属摩尔体积; ϵ_i 是氢的摩尔应变场。根据上式, 我们已计算了单向拉伸应力 σ , 单向压缩应力 $-\sigma$, 以及扭转应力 τ 作用下富集的氢浓度分布。

一般认为裂尖前方存在一个塑性区, 从而裂纹钝化成一个曲率为 ρ 的尖缺口, 最大 σ_h 在缺口前方 $x=3.81\rho$ 处, 且 $\sigma_h = \sigma_s(1+\pi)/2^{[1]}$ 。如认为氢的应变场为球对称, 则可利用 (6.16) 式来求塑性区中的最大氢浓度。对钢取 $\bar{V}_H=2.0\text{cm}^3/\text{mol}$, $\sigma_s=1000\text{MPa}$, $T=300\text{K}$, 代入 (6.16) 式可得 $C_s/C_H=5$ 。因此氢富集并不大。如考虑加工硬化, 塑性区中 $\sigma_{h(\max)} > 2\sigma_s$ 。有限元计算表明, 塑性区中 $\sigma_{\max} \leq (5\sim 6)\sigma_s^{[39]}$ 。由于纯金属的 σ_s 远小于 1000MPa , 故总起来说, 如认为裂尖存在塑性区, 则裂尖的氢富集不会超过 10 倍, 即 $C_s/C_H < 10$ 。但加载裂尖发射位错后会形成一个无位错区 (见 6.1 节), 它是一个弹性区, 因而裂尖前方无位错区中的应力可以极高, 例如 $\sigma_{\max}=0.08E$, 对钢则 $\sigma_{\max}=6670\text{MPa}$ 。代入 (6.16) 式可得 $C_s/C_H=2 \times 10^2$ 。如认为氢的应变非球对称, 则应力诱导氢富集将明显升高。计算表明^[39], 最大氢富集浓度在 $\theta = \pm 62^\circ$ 处, 该处 C_s 是裂纹延长线方向 ($\theta=0^\circ$) 的 2 倍, 在离裂尖 $r=5\text{nm}$ 处, $C_s/C_H=200$ 。如认为裂尖存在一个解理区, 则在解理区端点, $C_s/C_H=10^5$ (非球对称应变, $\theta=56^\circ$) 或 10^3 (球对称应变, $\theta=56^\circ$)^[39]。

Ti-30%Mo 恒位移缺口试样 ($\rho=0.76\text{mm}$) 在高温充氩, 加载后保持一定时间让氩富集后卸载, 沿缺口而剖开, 测量氩的相对分布。最大浓度在弹塑性边界 ($R=1\text{mm}$) 处, 该处氩浓度是平均值的 1.35 倍^[40]。即富集度并不大, 这显然和卸载测量有关。用离子探针可直接测量恒位移加载裂尖前方的氢浓度。如对纯 Ni 的测量表明, 在最大静水应力处的氢富集为 $C_s/C_H=3.8^{[41]}$ 。我们对油管钢的测量表明, 当 K_I 较大时, 缺口前端最大 σ_h 处的 $C_s/C_H=4.5^{[42]}$; 对奥氏体不锈钢, $C_s/C_H=3.2^{[43]}$ 。

(2) 位错引起氢富集

因为位错周围存在氢气团, 且位错能带着氢气团一起运动, 因而位错密度高的地方, 氢浓度也高。也可以认为塑性应变愈大的地方, 氢浓度愈高。可以认为氢浓度由外加应力引起的氢富集 C_s 和位错引起的氢富集 C_d 两部分构成, 即 $C=C_s+C_d$ 。

用恒位移缺口试样预充氢后再加载至局部屈服,然后用离子探针原位测量缺口前端的氢分布^{[40]~[43]}。它显示两个氢浓度峰:一个处在缺口顶端,该处塑性应变最大,即 C_e 最大;另一个峰处在缺口前方最大三向应力 σ_h 处,该处 C_e 最大。 C_e 和 C_o 两条分布曲线的叠加就导致缺口顶端存在氢浓度分布的双峰。对油管钢的工作表明,当 K_I 较小时, $C_e/C_H=4.2$,它大于 C_o/C_H 。但当 K_I 较大时 $C_e/C_H=3$,小于 C_o/C_H ^[42]。对纯Ni的测量表明, $K_I=35\text{MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$ 时 $C_e/C_H=5.8$,大于 $C_o/C_H=3.8$ ^[41]。但离子探针束斑直径为 $10\mu\text{m}$,故无法测出缺口顶端附近的高氢浓度分布。对奥氏体不锈钢,最大的 $C_e/C_H=4.2$,大于 C_o/C_H ^[43]。实验表明,慢拉伸过程中动态充氢,则试样中的平均氢浓度是静态充氢的10倍,这表明,塑性应变能促进氢的进入^[44]。

6.2.2 氢促进局部塑性变形

1. 氢促进位错的发射和运动

利用带有环境室的高压电镜,对一系列纯金属(bcc, fcc, bcp)、合金和金属间化合物的原位观察表明^{[45],[46]},在恒应力条件下,通 H_2 可使位错运动速度增大,一旦把 H_2 抽去或通入相同压力的Ar,则位错运动速度立即降低到充氢前的值。氢也使位错源及其发出的位错加速。通入 H_2 ,在更低的外应力下位错就能运动。

我们为透射电镜(TEM)设计了一个专门的恒位移加载台,薄膜试样加载后放入TEM观察,然后取出这个带有试样的加载台,放入 H_2 中(或 H_2O 溶液,或电解充氢),保持一段时间后再放入TEM,从而可研究氢或介质对位错发射、增殖和运动的影响^[47]。由于薄膜试样加载后在室温也能发生蠕变,为此试样加载后预先蠕变 $10\sim 24\text{h}$,然后放入TEM并保持 $0.5\sim 1\text{h}$ 。如恒位移试样在TEM保持过程中裂尖前方位错组态不改变,这就表明蠕变已稳定,在随后的实验中就不再存在热激活的影响。实验表明,小心的实验操作(放入TEM或短时间的放入介质)并不会导致位错的发射、增殖和运动。对 Fe_3Al ^[48]和油管钢^[26]的原位观察表明,把蠕变已稳定的恒位移TEM试样放入 H_2 中(或水溶液中)一定时间后,裂尖位错组态就会发生明显改变,即氢能促进位错的发射、增殖和运动。

我们用分子动力学模拟研究了固溶氢对Al发射位错的影响^[38]。计算表明,当没有氢原子时,加载到 $K_{Ic}=0.11\text{MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$ 时,纯Al裂尖开始发射第一个不全位错,如在裂尖小区域中加入120个H, $C_H=1.44\%$,则 $K_{Ic}=0.06\text{MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$ 就开始发射第一个偏位错。由此可知,当裂尖存在富集的原子氢之后,发射位错的临界应力场强度因子就会大大降低。这就是说,如存在氢,则在更低的应力强度因子下位错就开始发射,从而氢能促进位错的发射^[38]。

2. 氢促进裂尖塑性变形

可以用多种方法原位测量充氢前后裂尖各点塑性应变的变化,从而可判断氢对裂尖塑性变形量以及塑性区($\epsilon_p \geq 0.2\%$ 的区域)大小的影响。利用激光云纹干涉法可使测量精度大大提高,贴上光栅的试样加载后保持一段时间以消除室温蠕变的影响。稳定后纪录裂尖前方的云纹干涉照片,由此可求出位移场和应变场。通 H_2 (或放入水介质)过程中随时观察裂尖

云纹图的变化,一旦发现有明显改变,照相后立即卸载。观察试样表面及内部(通过一层层磨去的方法),看是否存在氢致裂纹。如不出现氢致裂纹,则通 H_2 过程中裂尖前方位移场的变化完全是由氢引起的。对高强度^[28]以及 α -Ti 的测量表明,充氢后缺口前端云纹干涉条纹明显变密。计算表明,充氢后每一点的塑性应变均增大,与此同时,塑性区尺寸(以 $\epsilon=0.2\%$ 的等应变线所围的区域)也增大^[28]。

恒位移缺口试样加载(用螺钉和垫块)后预蠕变一定时间再抛光,清理和干燥缺口内部,把试样放入 H_2 或 H_2S 中一定时间后取出观察,当缺口前端出现新的滑移线时就卸载。如通过逐层抛光后在试样表面及内部均没有氢致裂纹从缺口顶端形核,则新滑移线的出现就是氢引起的。因为初始加载及预蠕变时引起的滑移线已被抛光,氢引起新滑移线出现,就表明氢促进局部塑性变形。根据滑移线所占区域的大小也可判断氢对裂尖塑性区的影响(加载塑性区可根据抛光前的滑移线来判断)^[49]。我们对高强度^[50]、铝合金^[51]和奥氏体不锈钢^[52]的一系列工作表明,充氢(或水中应力腐蚀)后恒位移试样已抛光的缺口(或裂纹)前端会产生新的滑移线,而且新滑移线所占区域也明显大于加载塑性区。这就表明,氢促进局部塑性变形且使塑性区增大。实验表明,当这种氢促进的局部塑性变形发展到临界状态时氢致裂纹就会形核和扩展(在暗场下滑移线发亮,而裂纹是黑线)。

3. 氢促进室温蠕变

对恒载荷试样,蠕变使应变增加,可用应变速率 $\dot{\epsilon}$ 来衡量蠕变程度。对恒位移试样,位移(或应变)保持不变,故蠕变使应力松弛,可用应力弛豫速率 $\dot{\sigma}$ 来衡量蠕变。对纯 Fe 的工作表明,当 $\sigma/\sigma_s \geq 0.6$ 时,蠕变速率随氢含量(充氢电流)升高而升高,如充氢停止,则 $\dot{\sigma}$ 又回到原来值^[1]。对 Ti-6Al-4V 的工作表明,气相充氢后能使蠕变应变以及 $\dot{\epsilon}$ 明显升高^[54]。我们对 321 奥氏体不锈钢的工作表明^[54],在弹性应力范围内($\sigma \leq \sigma_s$),动态充氢对室温 $\dot{\epsilon}$ 没有影响,其原因是进入试样的氢量太少($C_H \leq 1.5 \text{ ppm}$);如加载至塑性变形(8%),这时动态充氢时进入的氢量为 $C_H = 5 \sim 12 \text{ ppm}$,氢使 $\dot{\epsilon}$ 增加 2 倍~5 倍。黄铜圆棒试样在 NaCl 溶液和醋酸钠溶液中恒载荷充氢, $\dot{\epsilon}$ 随充氢电流(即氢浓度)升高而直线上升,可升高 10 倍^[55]。

4. 氢促进应变局部化

Hirth 等对低碳钢和高强度钢的一系列工作表明,充氢后形变不再均匀分布,而是集中在某些区域^[56]。这就是说氢能使形变局部化。对奥氏体不锈钢,对比研究充氢和不充氢试样断裂表面和试样侧面的滑移特征发现,滑移台阶高度以及滑移带间距随氢含量升高而升高,即氢使滑移局部化,使应变局限于很窄的滑移带^{[57],[58],[59]}。这样一来,当整个试样的平均应变还较小时,局部地区的塑性应变就有可能升高到等于临界应变,从而导致氢致裂纹的形核。在 Ni^[59]和高纯 Al^[59]中均发现,氢使滑移局限于少数滑移面。对铁素体不锈钢,未充氢试样滑移带呈波纹状且均匀分布,但充氢后滑移带局限于少数区域,且变得很粗^[60]。如果应变局部化区域中的流变应力低于未形变区,则就将发生形变局部化。当氢使位错运动的能垒降低时,氢浓度愈高,则流变应力愈低。由此可知,当氢浓度不均匀分布时就会产生应变局部化。另外,如氢形成气团能使位错开始运动所需外应力升高,则当位错脱离气团而继续运动时应力下降,这也能导致应变局部化。当氢促进位错运动时氢总是促进形变局部化^[58]。

利用叠区通道花样技术可测量断口附近应变分布。对 Fe-3%Si 单晶的测量表明,在 H₂ 中断裂试样的应变高度集中在断裂表面附近约 40μm 的区域^[61]。

5. 氢促进局部塑性变形的原因

(1) 氢促进位错发射

当溶质沿晶界扩散比晶内扩散更快时,这就表明溶质处在晶界的自由能比晶内更小。这种自由能的差异就会导致晶界迁移。Li 认为,如果氢沿位错管道的扩散比晶格扩散快,则氢和位错结合引起的自由能差就会促进位错运动^[62]。充氢时表层逸度 f^* 很大,位错一旦被发射出来就成为氢的陷阱,一部分氢被位错捕获后,氢的逸度从 f^* 降为 f ,化学驱动力和外应力叠加,促进位错发射。有氢时位错发射的临界应力强度因子从 K_{Ic} 降为 $K_{Ic}(H)$,即^[62]

$$K_{Ic}(H) = \frac{\mu b}{2\pi e} \sqrt{\frac{2\pi}{r_0}} \exp\left[-\frac{nkT}{Ab^2} \ln \frac{f^*}{f}\right] = K_{Ic} \exp\left[-\frac{nkT}{Ab^2} \ln \frac{f^*}{f}\right] \quad (6.18)$$

式中 r_0 是位错中心半径; $A = \mu/(2\pi(1-\nu))$; n 是单位长度位错数目。由于 $f^* > f$, 从而 $K_{Ic}(H) < K_{Ic}$, 氢使发射位错的临界应力强度因子降低,即氢促进了位错的发射。

(2) 氢促进位错增殖

位错是氢的陷阱,位错周围存在氢气团,带氢位错的总能量 U_H (位错线应变能、互作用能及氢的应变能之和)远小于位错本身的应变能 U , 因为互作用能是负值,且很大,为了使位错增殖,必须使 Frank-Read 源突出成半圆,所需外应力 τ_c 就是使位错增殖的临界切应力,即^[15]

$$\tau_c = \frac{2U}{Lb}, \quad \tau_c(H) = \frac{2U_H}{Lb} \quad (6.19)$$

式中 L 是位错源的长度,由于 $U_H < U$, 故 $\tau_c(H) < \tau_c$, 即位错源周围氢气团能促进位错增殖。由于氢的扩散系数很大,故氢气团能跟着位错一起运动,位错源突出成半圆时,系统互作用能仍为 $U_H < U$ 。对 C, N 原子,虽然也能在位错周围形成气团,但它们在 α -Fe 中的扩散系数约为 $10^{23} \text{cm}^2/\text{s}$, 比氢小 10^{18} 倍。因而室温时 C, N 气团不能跟着位错运动。在外力作用下,一旦位错源滑出成弓形时就会和 C, N 气团分离,从而系统应变能又变为 U 。在这种情况下,使位错源增殖所需最小外应力仍为 $\tau_c = 2U/Lb$, 故 C, N 气团不能促进位错增殖。

(3) 氢促进位错运动

因为氢的应变场是非球对称的,在 $[001]$ 方向的外力 σ 作用下, $[111]$ 螺位错周围的 Snoek 气团将会变成不对称分布,从而就有一个沿 $[11\bar{2}]$ 的附加力 F_H 作用在位错上,计算表明^[63], $F_H = \sigma \sqrt{k_1^2 + k_2^2}$, 其中 k_1 和 k_2 是和试样中平均氢浓度 C_H 以及温度 T 有关的常数。 F_H 将协助外应力促进位错运动。沿 $[001]$ 方向的外应力 σ 作用在 $[111]$ 方向螺位错上的外力为 $F_{ex} = \sqrt{2} \sigma b/3$, 它沿 $[1\bar{1}0]$ 方向,故垂直于 F_H 。作用在位错上的合力为 $F = [F_{ex}^2 + F_H^2]^{1/2} = kF_{ex}$, $k = [1 + 9(k_1^2 + k_2^2)/2b^2]^{1/2}$ 。如果认为氢对材料的屈服强度 σ_s (或 τ_s) 没有影响,则当作用在螺位错上的合应力 $\tau = F/b$ 等于 τ_s 时,材料就会发生宏观塑性变形。如把含氢试样产生宏观塑性变形所需的外应力 $\tau_{ex} = F_{ex}/b$ 称为表观屈服应力 $\tau_c(H)$, 则当上式中的 $\tau = F/b = \tau_s$ 时,对应的外应力 $\tau_{ex} = F_{ex}/b = F/kb = \tau_s/k$ 就等于 $\tau_c(H)$, 从而可得

$$\tau_c(H) = \tau_s/k, \quad k = [1 + 9(k_1^2 + k_2^2)/2b^2]^{1/2} \quad (6.20)$$

因为 $k > 1$, 由此可知, $\tau_c(H) < \tau_s$ 。即有氢时使位错运动发生屈服的外应力 $\tau_c(H)$ 小于无氢时的相应值 τ_s , 即氢促进了位错的运动。计算表明, 当 $C_H = 0.18\text{ppm}$ 时, 室温下 $k = 2.3$, $\tau_c(H) = 0.44\tau_s$ [63]。

(4) 氢气团降低位错间的相互作用

相距为 l 的两个共面平行刃位错的相互作用应力为 τ_D 。如果位错周围存在氢气团, 则气团中所有氢原子作用在该位错上的合应力为 $\tau_H < 0$, 故作用在带气团位错上的合力(它就是位错运动的阻力)为 $\tau_D + \tau_H < \tau_D$ 。如没有氢, 则位错运动阻力就是另一位错对它的弹性相互作用力 τ_D (忽略点阵摩擦力, 且认为只存在两个位错)。如运动位错周围存在氢气团, 则运动阻力为 $\tau_D + \tau_H$, 由于 $\tau_H < 0$, 故 $\tau_D + \tau_H < \tau_D$ 。即氢气团的存在使位错运动的阻力下降 τ_H (它等于气团对位错的吸引力)。对 Nb 的计算表明, 当 $C_H = 0.1$ (原子比), 两位错相距为 $l = 3b$, 则 $\tau_H = -0.025E$, $\tau_D = 0.085E$, 即氢气团使位错运动阻力下降约 30% [64]。

6.2.3 氢脆

1. 氢压裂纹

在材料中某些缺陷位置, H 能复合成 H_2 , 室温时它是不可逆反应, 即 H_2 不会再分解成 H。随着进入该缺陷的氢浓度的增加, 复合后 H_2 的压力也增大。当氢压大于屈服强度时就会产生局部塑性变形, 如缺陷在试样表层, 则会使表层鼓起, 形成氢气泡。当氢压等于原子键合力时就会产生微裂纹, 称氢压裂纹。它包括钢中白点、 H_2S 浸泡裂纹、焊接冷裂纹以及高逸度充氢时产生的微裂纹。

(1) 钢中的白点

钢材剖面酸洗后有时可以看到像头发丝一样的细长裂纹, 其宽度一般约 $1\mu\text{m}$, 故也常称为“发裂”。如沿着这些裂纹把试样打断, 在断口上可观察到具有银白色光泽的椭圆形斑点, 故称为“白点”。它实际上是一个内部充满 H_2 的钱币形裂纹。

白点形成的原因一般公认是氢压的作用, 当这个内压超过钢的断裂强度时就导致了发裂(白点)的形核和扩展。钢中的含氢量是决定能否产生白点的基本因素。钢的化学成分和组织结构对白点的产生有很大的影响。奥氏体钢、铁素体钢及莱氏体钢对白点不敏感。容易形成白点的钢主要是重轨钢、合金结构钢和一些合金工具钢。钢在冷却过程中产生的内应力, 即热应力和相变应力, 是促进白点形成的重要因素。防止白点的最根本措施是降低钢中的氢含量, 如低氢冶炼(原料均烘烤), 真空除气等。一旦发现钢包或钢锭中氢含量超标, 则可通过轧后缓冷(堆放在坑中)的方法使过饱和的氢通过扩散而排出。

(2) H_2S 诱发裂纹

碳钢或低合金管线钢在 H_2S 溶液中浸泡时, 即使不存在外应力, 试样内部也会产生微裂纹, 裂纹呈台阶状。如裂纹处在试样表面附近, 则容易在表面引起鼓泡。一般认为, 这是由氢压引起的。 H_2S 在钢的界面上反应生成 H, 它进入试样后就富集在夹杂物(特别是长条状的 MnS)周围(夹杂是氢陷阱), 复合成 H_2 , 产生氢压, 当分子氢压大于临界值时就会产生裂

纹。随着氢的不断进入,这些裂纹向前扩展并互相连接。提高管线钢抗 H_2S 裂纹的措施主要是降低钢中 S 含量;减轻宏观和微观偏析以及使 MnS 夹杂球化。

(3) 焊接冷裂纹

焊接过程是个局部冶炼过程,焊条及大气中的水分会进入熔池变成 H,当进入的氢量较高时,在焊后的冷却过程中就有可能产生氢压微裂纹(类似于钢中白点)。采用低氢焊条;焊前焊条和工件烘烤;焊后工件缓冷等措施就可避免焊接冷裂纹。

(4) 充氢(或酸洗)过程中产生的微裂纹

在酸洗或电解充氢过程中也有可能产生氢压裂纹。一般认为这种裂纹是内部氢压引起的。电解充氢时出现的不可逆氢损伤(氢鼓泡或裂纹)主要是充氢逸度过高引起的。降低充氢电流密度,不加毒化剂(如 As_2O_3 , CS_2 等)或用熔盐充氢代替溶液充氢(见 4.1 节),就可避免充氢过程中出现不可逆氢损伤。

2. 氢致化学变化导致的氢脆(氢腐蚀)

在高温高压氢环境下使用较长时间后,有时在晶界附近能产生很多气泡或裂纹,从而引起构件的失效,这种不可逆损伤一般称为氢腐蚀。在高温高压下 H 进入钢中后与碳化物反应生成甲烷。形成的 CH_4 分子不能从钢中扩散出来,就在晶界夹杂物处形成气泡,并有很大压力。随着 CH_4 的不断形成,气泡不断长大,当气泡中 CH_4 的压力大于材料在该温度下的强度时就会使气泡转化成裂纹。

在钢中加入 Cr, Mo, Ti, V, Nb 等强碳化物的形成元素,它们就能取代 Fe_3C 而形成合金碳化物,这些合金碳化物很难分解,从而可使 P_{CH_4} 大大下降。另外,加入 Cr, Mo 等合金元素会使高温强度升高。总之,改善氢腐蚀的主要途径是加入强碳化物的形成元素(Cr, Mo, Ti, V, Nb)。钢中加入 Cr, Mo, Ti, V 等合金元素后就可使材料在 H_2 中安全使用的温度和压力大大提高。例如碳钢在高压 H_2 中使用温度小于 $250^\circ C$, 否则就会发生氢腐蚀。如加入 $6\%Cr + 0.5\%Mo$, 则使用温度可高于 $600^\circ C$ 。不同钢种在不同 P_{H_2} 下的安全使用温度曲线称为 Nelson 曲线^[1]。利用 Nelson 曲线就可为高温高压 H_2 中工作的压力容器选择合适的材料。

3. 氢致相变导致的氢脆

(1) 氢化物脆

很多金属或合金(如 Ti, Zr, Hf, V, Nb, Ta, RE 等)能形成稳定的氢化物。氢化物是一种脆性中间相,一旦有氢化物析出,材料的塑性和韧性就会下降,即氢化物析出导致材料变脆。这是一种氢致相变引起的氢脆。由于氢化物相引起的氢脆和氢的扩散、富集过程无关,因而即使高速加载(如冲击)或低温试验也能反映出氢化物引起的氢脆。

(2) 氢致马氏体相变

对于不稳定型奥氏体不锈钢(如 Ni, Cr 含量相对低的 304, 321, 316 钢),在室温时是奥氏体,材料的塑性和韧性很好。但如深冷淬火(低于 $-60^\circ C$)或室温冷加工,则部分奥氏体就会转变成马氏体(hcp 的 ϵ 相或 bcc 的 α' 相)。一旦出现马氏体相(它是脆化相),材料的塑性和韧性就明显下降。大量实验表明,不稳定型奥氏体不锈钢在电解充氢时会发生氢致马氏体相变,形成 ϵ 或 α' 马氏体。一般认为,氢致马氏体相变的本质和冷加工诱发马氏体相变相同,

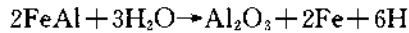
因为充氢时表层会产生很高的压应力,这个局部应力能诱发马氏体相变。另一方面,氢能使奥氏体的堆垛能下降,这就有利于马氏体相变的发生^[1]。

对 Ni, Cr 含量高的稳定型奥氏体不锈钢(310, 310S),深冷淬火和室温冷加工均不会产生马氏体相变。同样在电解充氢时也不会生成 α' 马氏体相,但有可能生成不稳定的 ϵ 马氏体,它在室温容易分解^[1]。加 N 能抑制氢致不稳定 ϵ 马氏体的形成^[1]。

4. 可逆氢脆

前三节所指的氢损伤(氢压裂纹,氢腐蚀,氢致相变)是不可逆的。一旦发生,无法通过中温或室温除氢处理使之恢复。由此造成材料的塑性损失也是不可逆的,故称为不可逆氢脆。

固溶的氢在拉伸过程中通过扩散和富集导致材料塑性下降称为可逆氢脆。因为如在拉伸前或屈服前把试样中的氢除去(室温放置或中温加热),则可使塑性恢复。即使初始氢含量很低(或介质致氢能力很弱),通过应力诱导扩散,氢能逐渐富集,从而也会引起塑性损失。如 FeAl, Fe₃Al, Ni₃Al 等金属间化合物在空气中(含极少量 H₂O,它能分解出 H)拉伸时塑性很低,但在真空或 O₂ 中拉伸,则塑性很高^[64]。这是一种典型的可逆氢脆。通过反应



生成 H 进入试样,在拉伸过程中通过应力诱导扩散而富集,从而在形变的早期阶段裂纹就能形核、扩展,导致材料断裂应变(塑性)明显下降。一旦隔断氢的来源(在真空或 O₂ 中拉伸),则塑性又能恢复。

5. 氢致滞后断裂

在恒载荷(或恒位移)条件下,原子氢通过应力诱导扩散富集到临界值后就引起氢致裂纹的形核、扩展,从而导致低应力(外加应力低于抗拉强度;对预裂纹试样,外加应力强度因子 $K_I < K_{IC}$)断裂的现象称为氢致滞后断裂。所谓滞后是指氢扩散富集到临界值需要经过一段时间,故加载后要经过一定时间后氢致裂纹才会形核和扩展。如把原子氢除去后就不会发生滞后断裂,故它也是可逆的。

(1) 门槛应力

外加恒应力, H 就会通过应力诱导扩散面富集在最大应力处,经过足够长时间后,最大应力处的局部氢浓度由(6.16)式(氢的应变场球对称 $\epsilon_1 = \epsilon_2$)或(6.17)式($\epsilon_1 > \epsilon_2$)给出。虽然外加单向应力 σ ,但夹杂或第二相顶端会产生局部应力集中,可以认为 $\sigma_b = \alpha\sigma$,其中 α 是和夹杂形状有关的应力集中系数。随着外加 σ 的增加, $C_s = C_H \exp(\alpha \bar{V}_H \sigma / RT)$ 也增大,当 C_s 等于临界值 C_{th} 时,就会使氢致裂纹形核、扩展,最终导致滞后断裂。这时所对应的外加应力(能发生氢致滞后开裂的最低外应力)就是氢致滞后断裂的门槛应力 σ_c ,即

$$\sigma_c = \frac{RT}{\alpha \bar{V}_H} (\ln C_{th} - \ln C_H) \quad (6.21)$$

当 $\sigma < \sigma_c$ 时,即使经过无限长时间(应力诱导氢扩散已达到平衡), C_s 也不能等于临界值 C_{th} ,从而不会引起氢致开裂。如果 $\sigma > \sigma_c$,代入(6.16)式算出的平衡氢浓度 C_s 远大于 C_{th} ,由于扩散富集的氢浓度 $C_s^*(t)$ 是随扩散时间(加载时间)而不断增大的,其极限值为 C_s ,即 $C_s^*(t = \infty) = C_s$;当 $\sigma > \sigma_c$ 时, $t = t_F$ 时扩散富集的氢浓度就等于临界值 C_{th} ,即 $C_s^*(t = t_F) = C_{th}$ 。很显

然, σ 愈大, t_F 愈小, t_F 也称为滞后开裂(或断裂)时间。

(2) 门槛应力强度因子 K_{IH}

裂纹前端存在应力集中, 平面应变条件下的三向应力 σ_h 为 $\sigma_h = (\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)/3 = 2(1 + \nu)K_I/3\sqrt{2\pi r}$ 。当 $r \rightarrow 0$ 时 $\sigma_h \rightarrow \infty$, 但实际上晶体结构是不连续的, 其最大应力不会等于无限大。这就是说, 晶体中的裂纹实际上是一个曲率很小的尖缺口, 缺口顶端 ($r = \rho/2, \theta = 0$) 的最大 σ_h 为^[1]

$$\sigma_h = \frac{2(1 + \nu)K_I}{3\sqrt{\pi\rho}} \quad (6.22)$$

代入(6.16)式可知, 随外加应力强度因子 K_I 增大, 通过应力诱导扩散富集的氢浓度 C_s 不断增加, 当 $K_I = K_{IH}$ 时, 经足够长时间后最大氢浓度 $C_s = C_{th}$, 从而引起氢致裂纹的形核和扩展。由此可得

$$K_{IH} = \frac{3RT\pi\rho}{2(1 + \nu)V_H} (\ln C_{th} - \ln C_H) \quad (6.23)$$

K_{IH} 就是氢致滞后断裂的门槛应力强度因子。其物理意义及测量方法和门槛应力 σ_c 完全相同, 惟一的区别是前者适用于含裂纹构件(试样), 后者则适用于无裂纹构件(试样)。

(3) 裂纹扩展速率 da/dt

因为 K_{IH} 远小于断裂韧性 K_{IC} , 因而当 $K_{IH} < K_I < K_{IC}$ 时, 经过一段孕育期后, 通过应力诱导扩散, 富集的氢就会等于临界浓度 C_{th} , 从而引起氢致开裂, 原来的疲劳预裂纹向前扩展。在恒载荷条件, 随氢致裂纹扩展 (a 增大), 裂尖应力强度因子 $K_I = \sigma Y a^{1/2}$ 也不断增大, 当 K_I 增大至 K_{IC} 时, 试样(或构件)就发生滞后断裂。实验可以测出 $a-t$ 曲线, 从而可求出氢致裂纹扩展速率 da/dt 。

6. 氢致断裂断口形貌

无论是慢应变速率拉伸(氢致可逆塑性损失), 还是恒载荷下的氢致滞后断裂, 氢致断裂可能获得韧性断口(韧窝), 也可能获得脆性断口(沿晶, 解理或准解理)^[1]。如氢致断裂是韧窝断口, 则称为氢致(促进)韧断。这时尽管断口形貌是韧窝(它是韧断标志), 但对慢应变速率拉伸来说, 延伸率或而缩率将下降, 即要发生氢致塑性损失。对恒载荷试样来说, 滞后断裂门槛值 (σ_c 或 K_{IH}) 均比无氢时直接拉断的值 (σ_b 或 K_{IC}) 要小, 故仍称为氢脆。氢致韧窝断口和无氢时的韧窝断口可能有些差别(如韧窝更小, 更浅), 但也可能差别不大。

氢致断口形貌显然和材料本身的成分和组织结构有关, 除此之外影响最大的是氢浓度及开裂时外加应力(或外加 K_I) 的大小。对慢拉伸试样, 外加应力一直在改变, 从断口上很难确定不同开裂部位所对应的外加应力值。因而影响断口形貌最主要的因素是氢浓度 C_H 和材料强度。一般来说, 随强度升高, 氢致断口形貌由韧窝变为解理(沿准解理)或沿晶。随 C_H 升高, 断口形貌也由韧窝变为解理或沿晶。

对恒载荷试样, 除了强度和氢浓度外, 开裂部位的 K_I 也是主要因素。因为外加恒载荷下通过应力诱导扩散, 使富集的氢浓度等于临界值后就会使预裂纹试样的裂纹逐渐扩展 (a 增大), 裂尖前方 $K_I = Y\sigma\sqrt{a}$ 也会随裂纹增长而增大, 当 $K_I = K_{IC}$ 时试样就发生滞后断裂。对恒位移试样, 随裂纹扩展 (a 增大), K_I 下降, 当 $K_I = K_{IH}$ 时裂纹就止裂。故恒位移试样靠近疲劳

裂纹区 K_I 高, 止裂区 K_I 低。总之滞后断裂断口上沿裂纹扩展方向不同部位的 K_I 是不同的。大量实验表明, 当 σ_s 和 C_H 中等匹配时, 氢致滞后断口形貌和 K_I 有关。 K_I 高(恒载荷试样的尾部; 恒位移试样靠近预裂纹区), 是韧窝断口; K_I 中等则为准解理和解理断口; K_I 低则为沿晶断口^[65]。但对某些材料, 沿晶断口的 K_{IH} 比解理断口的 K_{IH} 更高。但 K_I 高是韧性断口, K_I 低是脆性断口这一点是普遍的。当然断口形貌随 K_I 的变化明显依赖 σ_s 和 C_H 。并不是每一个氢致滞后断口上均可看到 3 种不同的断口形貌(韧窝, 准解理, 沿晶)。当 σ_s 较高或 C_H 较高或两者均高时, 可获得全部沿晶或解理(准解理)断口; 当 σ_s 较低, 或 C_H 较低或两者均较低时, 氢致断口可以全部是韧窝。

6.2.4 氢致开裂机理

1. 氢压理论

在 H_2 气环境中, H_2 分解成 H 进入金属, 其浓度 C_H 和 \sqrt{P} 成正比(6.12 式)。反过来, 如果溶解在金属中的 H 进入某些特殊区域(如夹界或第二相界面、空位团)就会复合成 H_2 , 即 $2H \rightarrow H_2$, 这时该处的 H_2 气压力 P 就和 C_H^2 成正比, 但由于 H_2 不是理想气团, 压力较高时要用逸度 f 代替, 即(6.12)式变为

$$f = (C_H/B)^2 = C_H^2 \exp(-2\Delta H/RT) \quad (6.24)$$

当局部区域 C_H 很高, 从而按上式算出的逸度换算成压力^[1]后等于原子键合力 σ_{th} , 则就会使局部地区的原子键断裂而形成微裂纹。在高逸度(用 H_2SO_4 溶液, 加毒化剂或高电流密度)电解充氢时, 充氢过程中就会产生氢鼓泡(出现在表层)或氢致微裂纹。它和是否存在外加应力无关, 也不需滞后时间(即不需要应力诱导扩散、富集), 这完全是氢压 P 等于 σ_{th} , 从而使原子键断裂而形成的微裂纹。对 Fe、Al 这类金属及合金, C_H 随温度升高而升高。如冶炼或焊接时进入的 C_H 较高, 它以 H 的形式固溶于晶格, 快冷时, 随着溶解度的降低, H 来不及扩散跑出试样(或构件), 这时 H 将倾向复合成 H_2 , 从而产生氢压, 当按(6.24)式求出的 f 换成 P 等于 σ_{th} 时就会使微裂纹形核。在 6.2.3 节中提到的各种不可逆氢损伤, 如钢中的白点、 H_2S 诱发的裂纹、焊接冷裂纹以及充氢时产生的鼓泡和裂纹, 只能用氢压理论来解释。但对于可逆氢损伤, 如氢致可逆塑性损失以及氢致滞后开裂, 仅仅用氢压理论无法解释。氢致微裂纹或微空洞形核后, H 进入复合成 H_2 产生的氢压可能促进裂纹核的稳定性^[66]或促进其扩展, 但对裂纹形核起控制作用的并不是氢压。

当试样中初始氢浓度很低时, 要想通过位错扫过夹杂或应力诱导扩散使氢浓度升高几个数量级(以便使局部地区氢压等于 σ_{th})非常困难, 甚至根本不可能。最重要一点, 用氢压理论无法解释氢致塑性损失或氢致滞后开裂的可逆性。按氢压理论, 卸载前形成的微裂纹中充满着压力接近 σ_{th} 的 H_2 , 卸载后分子 H_2 不会扩散跑出。重新加载, 尽管平均氢浓度已降低, 但 H 仍可通过扩散(包括应力诱导)进入微裂纹, 使其中的 P 不断增大到等于 σ_{th} , 从而可使氢压裂纹继续不断扩展, 直至断裂。但事实上却不是如此。Fe-3%Si 单边缺口试样在动态充氢条件下慢拉伸, 当氢致裂纹形核后停止拉伸, 这时如果吸出电解液停止充氢(不卸载), 裂纹就将逐渐停止扩展^[67]。待裂纹完全止裂后保持几小时, 再加入电解液继续充氢, 发现充氢

很长时间裂纹也不重新扩展。即使在充氢前增加少量载荷然后再充氢,止裂的裂纹也不重新扩展。然而,如果在重新动态充氢后进行慢速拉伸,虽然拉伸仅使载荷有极微小的增加,但已经止裂的裂纹很快就能重新扩展^[67]。按氢压理论,重新充氢时裂纹应继续扩展,但事实上却不能。这个实验表明,氢致滞后裂纹形核扩展和局部塑性形变有关,氢压的存在并不起控制作用。

2. 氢降低键合力(弱键)理论

氢降低原子键合力理论认为,当局部应力集中 σ_{yy} 等于原子键合力 σ_{th} 时,原子键就破裂,从而微裂纹形核;固溶的原子氢能使原子键合力从 σ_{th} 降为 $\sigma_{th}(H)$ 。这就是说,使氢致微裂纹形核所需的局部应力集中将从 $\sigma_{yy}=\sigma_{th}$ 降为 $\sigma_{yy}(H)=\sigma_{th}(H)$ 。这样一来就会使造成局部应力集中所需的临界外加应力从 σ_c 降为 $\sigma_c(H)$,或使临界应力强度因子从 K_{IC} 降为 K_{IH} 。如局部应力集中为 σ_{yy} ,每单位面积原子数为 n ,则集中力为 σ_{yy}/n ,当它等于原子键合力 σ_{th} 时,微裂纹就形核,即裂纹形核判据为

$$\sigma_{yy} \geq n\sigma_{th} \quad (6.25)$$

Oriani 假定 $\sigma_{th}(H)=\sigma_{th}-\alpha C_s$,其中 α 是比较系数, C_s 为富集后的氢浓度,因而氢致裂纹形核判据为^[1]

$$\sigma_{yy} = n\sigma_{th} - \alpha n C_s \quad (6.26)$$

早期均用线弹性断裂力学来计算 σ_{yy} ,加载裂尖将钝化成一个曲线为 ρ 的尖缺口,最大应力处在缺口顶端,即 $\sigma_{yy}=2K_I/\sqrt{\pi\rho}$ 。Oriani 认为, $\sigma_{yy}=K_I/k\sqrt{\rho}$,其中 k 为数值系数。当(6.25)式满足时,外加应力强度因子就等于断裂韧性 K_{IC} (严格来说是裂纹形核的门槛应力强度因子 K_{II}),即

$$K_{IC} = nk\sqrt{\rho}\sigma_{th} \quad (6.27)$$

代入(6.26)式可得氢致开裂门槛值

$$\frac{K_{IH}}{k\sqrt{\rho}} = \frac{K_{IC}}{k\sqrt{\rho}} - \alpha n C_s \quad (6.28)$$

上式中 C_s 值是指应力诱导扩散富集后的氢浓度,由(6.16)式给出, $C_s=C_H\exp(\sigma_b\bar{V}_H/RT)$, σ_b 由(6.22)式给出,即 $\sigma_b=K_I/q\sqrt{\rho}$,其中 q 也是数值系数。在氢致开裂临界条件, $K_I=K_{IH}$,从而 $\ln(C_s/C_H)=K_{IH}V_H/RTq\sqrt{\rho}$,把它代入上式就可估算 K_{IH} ^[1]。

由 6.1 节的论述可知,金属材料在任何条件下微裂纹形核前加载裂尖将首先发射位错,即首先发生局部塑性变形。从宏观来看,当裂尖区应力等于有效屈服应力 σ_{ys} 时就将产生局部塑性变形,从而裂尖附近应力将等于 σ_{ys} 。即使考虑加工硬化,裂尖及其塑性区中最大应力 σ_{yy} 不会超过(3~5) σ_s 。从而(6.25)式或(6.26)式不会成立,因为 $n\sigma_{th}$ 远大于 $5\sigma_s$ 。在什么情况下局部应力集中才有可能等于原子键合力 $n\sigma_{th}$,从而(6.25)式成立呢?如认为裂尖发射位错后存在一个无位错区,这时在考虑位错列的屏蔽效应后,仍可用线弹性断裂力学来计算裂尖(已钝化成尖缺口)或无位错区中的应力^[4]。当外加应力较高时,尖缺口顶端或无位错区中的应力集中 σ_{yy} 有可能等于键合力^[4],从而(6.25)式和(6.26)式的判据有可能成立。另一种高应力集中来源于位错塞积群。由(6.4)式可知,当位错塞积群(或塞积长度 L)足够大时,塞积

群前端局部应力就可等于 σ_{th} 。总之,只有首先发生局部塑性变形,局部应力集中才有可能等于被氢降低了的原子键合力。由此可知,只有局部塑性变形发展到临界条件,才能通过弱键理论引起氢致开裂。另一方面,键合力随氢浓度 C_H 而线性下降的假定并没有任何实验依据,当氢浓度较高时, σ_{th} 下降应平缓,故对数下降比线性下降更合理。应当指出,(6.25)式和(6.26)式是裂纹形核判据,而不是试样断裂判据。

尽管氢降低原子键合力的物理本质目前并不十分清楚,而且还没有直接的实验证明氢是否能使原子键合力大幅度下降,但氢能降低原子键合力似乎已被广为接受。氢降低原子键合力是否是氢致开裂的决定性因素目前还有争议。但只要氢能降低键合力,就能促进裂纹的形核和扩展,这一点是无可争议的。

对氢致不可逆损伤只能用氢压理论才能解释,但它并不排斥弱键理论。因为固溶的原子氢使原子键合力降低后在更低的内氢压下就可使氢压裂纹形核,在这种情况下,氢压理论占主导地位,氢降低键合力仅占次要地位。对需要通过应力诱导氢扩散、富集后才能导致微裂纹形核的氢致滞后断裂,氢压理论并不占主导地位。在这种情况下氢降低键合力理论是否占主导地位呢?不一定。前面已指出,只有首先发生局部塑性变形,局部应力集中才有可能等于被氢降低了的原子键合力,从而引起氢致裂纹形核。在6.2.2节中已指出氢能促进局部塑性变形,究竟氢促进局部塑性变形还是氢降低原子键合力是氢致裂纹形核的关键,需要进一步研究。

氢降低原子键合力理论中需要进一步研究的问题如下:(1)用什么实验能直接证明氢能降低原子键合力?(2)键合力随氢浓度下降的定量表达式;(3)氢降低键合力和氢促进局部塑性变形是否有关系。利用量子力学第一原理可计算氢对键合力的影响^[68],但工作刚刚开始。

3. 氢降低表面能理论

氢降低表面能理论认为,氢吸附在表面就会使表面能由 γ 降为 $\gamma(H)$ 。根据 Griffith 理论,断裂应力 σ_c 或断裂韧性 K_{IC} 和 $\sqrt{\gamma}$ 成正比,因而当氢使 γ 下降,必然使 σ_c 降为 $\sigma_c(H)$,或使 K_{IC} 降为 K_{IH} ,即

$$\sigma_c(H) = \sqrt{\frac{2\gamma(H)E}{(1-\nu^2)\pi a}} \quad K_{IH} = \sqrt{\frac{2\gamma(H)E}{(1-\nu^2)}} \quad (6.29)$$

但是对金属材料来说,裂纹扩展总会涉及局部塑性变形,从而要消耗塑性变形功 γ_p 。而且 γ_p 远远大于表面能。故这时 σ_c 和 K_{IC} 应当用 Orowan 公式,即 $\sigma_c^2 = (2\gamma + \gamma_p)E/[(1-\nu^2)\pi a]$, $K_{IC}^2 = (2\gamma + \gamma_p)E/(1-\nu^2)$ 。由于 γ 远小于 γ_p ,因此如果氢吸附仅仅降低表面能,而并不使塑性变形功 γ_p 下降,则氢不能使 σ_c 和 K_{IC} 明显下降。我们已导出^[69]

$$\gamma_p(H)/\gamma_p = \rho(H)\gamma(H)/\rho\gamma \quad (6.30)$$

即氢通过降低 γ 和 ρ (氢使应变局部化)从而使 γ_p 或有效表面能 $2\gamma_{eff} = 2\gamma + \gamma_p$ 下降。原子间相互作用力的最大值就是原子键合力 σ_{th} ,而相互作用力曲线下的面积就等于 2γ 。由此可知, σ_{th} 和 γ 有关,其具体关系和所采用的原子相互作用势有关。可以认为, $\gamma = a\sigma_{th}$,其中 $a > 1$ 是数值系数, a 是解理而上原子间距,故可认为表面能 γ 和原子键合力 σ_{th} 成正比。由此可知,氢降低表

面能 γ 和氢降低原子键合力 σ_{th} 是一致的。对 FeAl, 量子力学计算表明^[68], 氢使原子键合力的下降百分数等于氢使表面能下降的百分数。

根据 Gibbs 吸附方程, 表面吸附气体 (如 $H_2, O_2, SO_2, CO, CO_2, CS_2$ 等) 均使表面能下降。吸附 O_2, SO_2, CO 等虽然使 γ 下降, 但并不发生滞后断裂, 也不会使 σ_c (或 K_{IC}) 明显下降。相反, 当 H_2 中混有少量 O_2 或 SO_2, CO, CO_2, CS_2 时, 由于它们在 α -Fe 上的吸附能力比 H_2 更强, 从而阻碍 H 的吸附及进入, 即能减弱或抑制氢致开裂^[1]。由此可知, 吸附虽然能降低表面能, 但并不一定能引起滞后断裂或产生可逆塑性损失。

如果认为氢吸附降低 γ 的同时也能使 γ_p (或 γ_{eff}) 大幅度下降, 则就可解释氢使 σ_c 和 K_{IC} 明显下降的实验事实。但在推导 γ_p 和 γ 的关系, 如 (6.30) 式时, 没有限定吸附物质的本质, 因此, 按 (6.30) 式, 其他气体 (如 O_2, SO_2, CO 等) 吸附降低 γ 的同时也会使 γ_p 下降, 从而也会导致 σ_c 和 K_{IC} 明显下降, 这和实验事实不符。由此可知, 即使 (6.30) 式成立, 也只能从形式上解释氢通过降低 γ 能使 σ_c 或 K_{IC} 明显下降; 但却无法解释 H 吸附和 O_2 (或 SO_2, CO) 吸附的本质区别。即仍然没有找到氢致滞后开裂的本质。按 $\gamma = \alpha \sigma_{th}$, 降低表面能和降低原子键合力本质相同。一般认为, 氧原子进入金属后不会降低原子键合力 σ_{th} , 但 O_2 吸附在表面却会使表面能 γ 下降, 由此可知, 至少对 O_2 来说, 降低 γ 和降低 σ_{th} 并不一致, 其原因有待进一步研究。由此可知, 用氢降低原子键合力来解释氢降低表面能似乎更为合理。

4. 氢致开裂新机理

(1) 氢致裂纹形核的原位研究

利用螺钉和垫块自加载的恒位移试样, 可以研究氢致裂纹的形核和扩展过程, 以及它们和局部塑性变形的关系。把 Ti_3Al+Nb 预裂纹 (或缺口) 恒位移试样放在 $400^\circ C$ 的真空中保持 20min 后抛光, 裂纹前端加载及 $400^\circ C$ 蠕变后产生的滑移线已全部被消除。把加载试样放于 $400^\circ C$ 的 H_2 中, 经 0.5min 后裂纹前方就出现很多直的滑移线, 继续在 H_2 中放置, 则裂尖前方滑移线不断增多^[70]。这就表明, 氢促进了位错的发射、增殖和运动。继续充氢 0.5min, 这时沿滑移带出现氢致微裂纹。继续充氢, 沿滑移带形核的不连续氢致裂纹互相连接。由此可知, 只有当氢促进的位错发射和运动 (即氢致局部塑性变形) 发展到临界状态时, 才使氢致微裂纹沿滑移带不连续形核并解理扩展^[70]。对预充氢的 Ti_3Al+Nb 恒位移试样也有类似结果^[21]。对高强度钢^[63]、铝合金^[51]以及奥氏体不锈钢^[52]的氢致开裂原位研究均获得类似的结果, 即只有当氢促进的局部塑性变形发展到临界条件时, 氢致裂纹才开始形核。氢致裂纹可以从缺口顶端形核^[52], 也可在裂纹前方塑性区中不连续形核^{[50], [51], [70]}。裂纹可沿滑移带形核^[70], 但大多数情况下并不沿滑移带^{[50]~[52]}。恒载荷下, 氢促进局部塑性变形发展到临界条件导致微裂纹形核的过程, 类似于空气中位伸时随载荷增加局部塑性变形发展到临界条件而导致解理裂纹的形核^[21]。

利用带有环境室的 TEM 可原位研究低压 H_2 条件下位错发射和裂纹形核的关系。对一系列材料的研究表明, 试样保持恒位移, 通入低压 H_2 之后首先促进位错增殖和运动, 当它发展到临界条件时就引起氢致裂纹形核和扩展^{[45], [46]}。

我们设计了一个供 TEM 用的恒位移加载台, 从而可原位研究氢致裂纹和氢促进位错发射、运动之间的关系。对 Fe_3Al 的 TEM 试样用恒位移台加载出现微裂纹后, 预蠕变 18h

后位错结构已稳定。在 1atm 的 H_2 中放置 12h 后裂尖位错组态已发生明显改变,但氢致裂纹尚未形核。这表明,氢促进位错发射和运动发生在氢致裂纹之前。只有当氢促进的位错发射、运动达到临界值才会引起氢致裂纹的形核^[48]。

对高强度钢 TEM 试样,无论是放在 H_2 中或在水介质中原位观察,结果完全类似。当氢促进的位错发射、增殖和运动发展到临界条件,局部应力集中等于原子键合力,原子键断开就引起氢致微裂纹的形核;氢致微裂纹可在原裂纹顶端连续形核,也可在裂尖前方无位错区中不连续形核^[28]。

(2) 氢致裂纹和空拉裂纹形核的对比

Ti_3Al+Nb 恒位移试样在空气中加载时裂尖首先出现局部塑性变形。如保持恒位移在空气中放置,则裂尖局部塑性变形不会发生明显变化,解理微裂纹也不会形核。只有增加外应力(或升高 K_I)才能使裂尖局部塑性变形增大(塑性区也增大)。只有当这种外应力引起的局部塑性变形发展到临界条件,才导致解理微裂纹的不连续形核和互相连接^[21]。对 $TiAl$ 也有类似结果^[71]。由此可知,只有当连续加载引起的局部塑性变形发展到临界条件,局部应力集中等于原子键合力,原子键断开从而引起微裂纹形核。由此可知,氢致裂纹和空拉时解理裂纹的形核过程完全类似,裂纹形核和局部塑性变形的关系也相同。两者不同点就在于原子氢本身能促进局部塑性变形。因此,和空拉时相比,在更低的外应力(或 K_I)下,氢致局部塑性变形就会达到临界条件,即氢致裂纹形核所对应的外应力(即门槛应力或门槛应力强度因子)就比空拉时要小。

空拉时微裂纹形核的 TEM 原位观察已在 6.1 节中描述。对脆性金属间化合物,加载时裂尖首先发射位错,只有当外力引起的位错发射和运动达到临界条件,无位错区中的应力集中等于原子键合力,从而引起微裂纹形核^{[6],[7]}。在 TEM 下,氢致解理裂纹形核过程和空拉时解理裂纹的形核完全类似。主要不同之处在于,由于氢对位错发射和运动的促进作用,和空拉相比,在更低的外应力下氢促进的位错发射、运动就能达到临界条件,从而使氢致裂纹形核。

(3) 氢致开裂新机理

氢促进位错发射和运动(即促进局部塑性变形),因此在比空拉时更低的外应力下,氢促进的局部塑性变形就会发展到临界条件,使得局部地区(如裂尖无位错区、位错塞积群前端)的应力集中 σ_y 等于被氢降低了的原子键合力 $\sigma_{th}(H)$,从而导致氢致微裂纹在该处形核。原子氢进入微裂纹就复合成 H_2 产生氢压,它能使微裂纹稳定化,同时也能协助局部应力使之解理扩展。这个氢致开裂新机理考虑了氢促进局部塑性变形,氢降低原子键合力以及氢压的作用。

由于氢的促进作用,和空拉相比,在更低的外应力下氢致局部塑性变形就会达到临界条件,从而在某些地区建立起足够大的应力集中。另外,氢又能降低原子键合力。这样一来,使局部应力等于 $\sigma_{th}(H)$,从而使氢致裂纹形核所需的最低外应力(即门槛应力 $\sigma_c(H)$,或门槛应力强度因子 K_{IH})显然就比空拉时的相应值要低。另一方面,氢促进局部塑性应变的同时也使应变高度局部化。因而当宏观平均应变 $\epsilon_f(H)$ 还很小时,应变集中处的局部应变 ϵ^* 就已等于临界断裂应变 ϵ_f ,从而导致光滑试样早期脆断,即 $\epsilon_f(H) < \epsilon_f$,这就是氢致塑性损失。由于应变局部化,临界氢致塑性区面积远比空拉时的相应值要小,故有氢时塑性变形功(它和面

积有关) $\gamma_p(H)$ 就比空拉时的相应值要小,因而氢致裂纹扩展阻力 $R(H)=2\gamma_{eff}(H)=2\gamma(H)+\gamma_p(H)$ 就比空拉时裂纹扩展阻力 $R=2\gamma+\gamma_p$ 要小。另外,氢降低键合力也使表面能下降,即 $\gamma(H)<\gamma$,从而也可导致 $K_{IH}=[2\gamma_{eff}(H)E/(1-\nu^2)]^{1/2}$ 小于 K_{IC} 。总之,上面的论述表明,从微观上看,氢促进位错发射和运动;但从宏观上看,氢使门槛应力(或应力强度因子)下降,也使临界断裂应变下降,从而使材料变脆。因为只有当氢通过应力诱导扩散、富集到等于临界值 C_{th} 时,才会明显促进局部塑性变形并使应变高度局部化,同时也使 σ_{th} 明显下降,从而在低的外应力下就导致开裂。这就表明,氢致滞后开裂及其力学参量 $\sigma_c(H)$, K_{IH} , $\epsilon_f(H)$ 等,本质上是和扩散富集的氢浓度 C_e 有关。因为 $C_e=C_H f(\sigma, t, V_H, T)$,由此就可定性解释氢致断裂力学参量对试样中可扩散氢浓度 C_H 、应变速率(包含时间 t)、温度 T 的依赖关系。

从定性上看,这个新理论包含了氢促进局部塑性变形理论、氢降低键合力或表面能理论以及氢压理论。可以解释为何从微观上看氢能促进局部塑性变形,但从宏观上看却是氢脆(门槛值下降,断裂应变或延伸率下降,有时断口形貌也由韧变脆)。因为只有扩散、富集的氢浓度 C_e 达到临界值才能使氢的各种影响(氢促进局部塑性变形,降低键合力,形成较大的氢压)变得明显,因此根据这个新理论导出的氢致滞后断裂力学参量,如门槛应力或门槛应力强度因子等,均和 C_e 有关。从而就可定性解释试样中可扩散氢浓度、氢陷阱、温度以及形变速度对氢致开裂敏感性的影响。

根据这个定性理论我们力图进行定量处理,但问题尚未解决。利用裂纹形核的应力判据,即局部应力集中等于被氢降低了的原子键合力就会引起氢致裂纹的形核,可以求出氢致裂纹形核的门槛应力 $\sigma_c(H)$ ^[70];但无法求出裂纹失稳扩展从而氢致滞后断裂的门槛应力。另外,我们仅处理了位错塞积群前端局部应力集中引起的开裂过程;对无位错区中应力集中引起的氢致开裂却无法处理。因为氢通过促进局部塑性能在更低的外应力下就会在裂尖形成无位错区,但是无位错区中的应力集中如何和氢促进位错发射和运动定量地相联系呢?这是问题的关键。我们给出的氢促进空洞形核理论^[66]也比较粗糙,由于利用了能量处理,仅给出空洞可长大的临界尺寸。要计算氢致空洞形核以及氢致韧断(空洞长大,连接)的临界应力或临界应力强度因子还需进一步研究。我们导出了氢致沿晶断裂门槛值的表达式^[69],但推导时仅利用了氢降低表面能理论,氢促进局部塑性变形如何反映,如何量化?总起来看,要使氢致开裂机理量化还有很多工作要做。

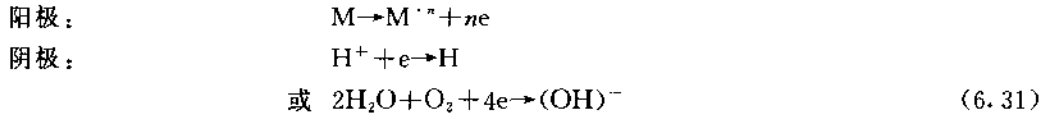
6.3 应力腐蚀

6.3.1 应力腐蚀基础

1. 腐蚀和应力腐蚀

一般所说的腐蚀过程都是一种电化学过程。作为阳极(其电极电位更负)的金属不断溶解,同时放出电子,而这些电子又被阴极(其电极电位更正的那部分)过程所吸收,这样就会

导致阳极金属不断溶解,称之为腐蚀。阴极反应可以是放氢反应,也可以是吸氧反应,即发生在阳极和阴极的电化学反应如下:



式中M代表金属; n 是价数,如 Fe^{+2} , Al^{+3} 等。

一般可把腐蚀分为均匀腐蚀、接触腐蚀、点腐蚀、晶间腐蚀以及应力腐蚀等几大类。

(1) 均匀腐蚀。整个试样(或构件)表面受到均匀的腐蚀,如钢铁的锈蚀。一般来说均匀腐蚀的速度是很慢的,如钢在海水中的腐蚀速度(重量损失)为 $2.5 \times 10^{-5} g/cm^2 \cdot h$ 。有时腐蚀产物能起保护作用。这种均匀腐蚀并不会造成灾难性的事故。

(2) 接触腐蚀。两种电极电位不同的材料在介质中相接触时,就会使电位较负的金属腐蚀加速。与此相反,电位较正的贵金属的腐蚀速度就会减小,从而受到保护(阴极保护)。例如钢铁在海水中与铜、锡、铅以及不锈钢相接触时就会使钢铁的腐蚀加速,特别是在小阳极(钢铁)大阴极(Cu, Sn, 不锈钢等)的情况下,接触腐蚀更为严重。

(3) 点腐蚀。如果金属表面的钝化膜在某些位置处受到破坏或金属表面成分不均匀,存在一些阳极相(如夹杂、第二相沉淀),则腐蚀过程就从这些局部地区开始,从而形成一个一个的蚀坑,称为点腐蚀或孔蚀。点蚀时由于阳极面积较小,故腐蚀速度极大,往往能使构件穿孔。对于无裂纹的试样(或构件),应力腐蚀裂纹往往发源于点蚀坑。

(4) 晶间腐蚀。它也是一种局部腐蚀,即阳极溶解过程沿晶粒边界进行。铝合金和不锈钢易产生晶间腐蚀。现已查明,对不锈钢来说,在热处理(特别是敏化处理)过程中碳和铬结合成碳化铬沿晶界析出,从而使晶界附近的基体贫铬,故成为阳极区,因而腐蚀就沿着这些晶界贫铬区扩展。通过加入稳定碳化物元素(Ti, Nb)并进行稳定化处理,就可避免铁素体及奥氏体不锈钢的晶间腐蚀(马氏体不锈钢不产生晶间腐蚀)。

(5) 应力腐蚀。受力材料在特定环境下产生滞后裂纹,甚至发生滞后断裂的现象称为应力腐蚀。它往往引起灾难性事故,因此近一个世纪以来受到了广泛的重视。

2. 应力腐蚀体系

对每一类材料来说,只能在特定的介质中才产生应力腐蚀。表6.1中列出了常用合金产生应力腐蚀的部分介质^[1]。应当指出,表中所列的介质并非对同一类中的所有合金都适用。例如纯Al, Al-Mn, Al-Si和低Mg(<3%)的Al-Mg合金一般不产生应力腐蚀。

3. 应力腐蚀的特征

应力腐蚀只有在特定的环境下才能发生。此外,它还具有以下一些特点:

(1) 要存在应力(特别是拉应力)才能产生应力腐蚀裂纹。这种应力可以是外加应力,或是加工和热处理过程中引入的残余应力,也可以是腐蚀产物的楔入作用而引起的扩张应力。例如,304L不锈钢退火酸洗后在42% $MgCl_2$ 沸腾溶液中放置3个月,发现断面上有穿晶应力腐蚀裂纹^[1]。这是因为点蚀坑中的固体腐蚀产物比容大,能起到楔子的作用,从而产生横向张应力。应当指出,我们一系列工作表明,压应力在某些情况下也可产生应力腐蚀

裂纹^{[72],[73]}。

表 6.1 产生应力腐蚀的特定介质

材 料	介 质
低 碳 钢	NaOH、硝酸盐溶液、碳酸盐溶液、CO-CO ₂ -H ₂ O
高 强 钢	各种水介质、含痕量水的有机溶剂、沸腾盐溶液、HCN 溶液
奥氏体不锈钢	沸腾盐溶液、高温纯水、含氧离子的水溶液、H ₂ S 溶液、含 Na ⁺ 的盐溶液(如 NaBr, NaH ₂ PO ₄ , Na ₂ SO ₄ 等)、多硫酸、H ₂ SO ₄ +CuSO ₄ 溶液、苛性碱溶液
铝 合 金	湿空气和湿气体、高纯水、含 Cl ⁻ 离子的水溶液、有机溶剂(酮,醇)
钛和钛合金	水溶液、有机溶剂、热盐和熔盐、发烟硝酸、N ₂ O ₄
镁和镁合金	含水空气、高纯水、KCl+K ₂ CrO ₄ 溶液
铜和铜合金	含 NH ₄ ⁺ 的溶液或蒸气、汞盐溶液、SO ₂ 气体、CuSO ₄ 溶液、NaCl 溶液
镍和镍合金	NaOH、氢氟酸、硅氟酸溶液

(2) 应力腐蚀断裂是一种典型的滞后破坏,这和氢致滞后破坏完全类似。对无裂纹拉伸试样,当 σ 还远低于 σ_b 时就能引起应力腐蚀裂纹的产生和扩展。而对预裂纹试样,使裂纹扩展的 K_I 远小于使材料快速断裂的 K_{IC} 。裂纹形核或试样滞后断裂的时间随外加应力或应力场强度因子(K_I)下降而增长。这和描述氢致滞后断裂过程完全类似。由此就可获得不产生应力腐蚀断裂的门槛应力 σ_c 或门槛应力场强度因子 K_{ISCC} 。这就表明,只有当应力场强度因子大于临界值后才能产生应力腐蚀。

(3) 应力腐蚀断裂是一种低应力脆性断裂。因为导致应力腐蚀断裂的最低应力(或 K_I)远小于过载断裂的应力 σ_b (或 K_{IC}),而且断裂前没有大的宏观塑性变形,故应力腐蚀往往会导致无先兆的灾难性断裂事故。

应力腐蚀的微观断口则强烈依赖合金成分、强度级别、环境体系以及 K_I (或 σ)的大小。虽然在某些特殊情况下能获得韧性的应力腐蚀断口,但在大多数条件下是脆性断口(解理、准解理或沿晶)。

(4) 应力腐蚀裂纹的扩展速度一般为 $10^{-6} \sim 10^{-3}$ mm/min,它比均匀腐蚀要快 10^6 倍,而且和裂纹前端 K_I 有关。这一点也和氢致滞后断裂过程类似。

4. 阳极溶解和氢致开裂

如果应力腐蚀阴极反应(6.31式)是放氢,原子氢能进入试样,富集后控制了裂纹的形核和扩展过程,则这一类应力腐蚀(SCC)就属于氢致开裂^[1]。这类 SCC 是第二节氢致滞后断裂的一个特例。如果阴极反应是吸氧,在 SCC 过程中没有 H 的进入,SCC 完全由阳极溶解过程所控制,则称为阳极溶解型应力腐蚀。例如黄铜在氨水溶液中的 SCC 就属于阳极溶解型。另外,如果阴极反应虽然是放氢反应,但进入试样的 H 量不足以引起氢致裂纹的形核,这时 SCC 裂纹的形核仍然由阳极溶解过程所控制,这类 SCC 仍属于阳极溶解型。例如

奥氏体不锈钢在热盐溶液中的 SCC 就属于这一类。

如何来确定某一类 SCC 是属于阳极溶解型还是氢致开裂型,这可以通过以下几种方法进行综合研究。

(1) 电化学研究

一般认为,如果阳极溶解是 SCC 的控制过程,则外加阳极电位必然能促进阳极溶解过程,从而使 da/dt 升高,断裂寿命 t_F 下降。相反,如果氢致开裂是 SCC 的控制过程,则外加阳极电位(或电流)将会抑制 H^+ 的还原过程,从而使进入试样的氢量减少, da/dt 下降,断裂时间 t_F 延长。而阴极极化则正相反。

研究电位对 da/dt 的影响是判断 SCC 机理的重要手段之一。但对大多数 SCC 体系,这种影响比较复杂,单纯靠外加电位对 da/dt 的影响来决定 SCC 的机理是不合适的。例如高强度钢在水中 SCC 是氢致开裂,但无论是阳极还是阴极极化均能促进氢的放出,从而使 da/dt 升高, t_F 下降^{[71],[76]}。对铝合金的 SCC 也有类似情况^{[1],[77]}。由此可知,仅仅用电化学方法无法惟一确定 SCC 的类型。

(2) 门槛值的对比研究

我们用 I 型、II 型和 III 型试样测量了奥氏体不锈钢在 $MgCl_2$ 溶液以及高强钢在水中 SCC 的门槛值 K_{ISCC} ,并和大电流下动态充氢(HIC)的门槛值 K_{IH} 相对比^{[74],[75],[52]}。对奥氏体不锈钢来说, $K_{ISCC} < K_{IH}$ 。因此,如果外加 K_I 大于 K_{ISCC} 而小于 K_{IH} ,这时即使大电流动态充氢,也不会产生氢致开裂,但却能引起 SCC。这表明,SCC 不是进入试样的氢引起的,而是由阳极择优溶解过程所控制。对高强钢在水中的 SCC,情况正相反,它属于氢致开裂。由于 SCC 时进入的氢量比动态充氢时低,故 $K_{ISCC} > K_{IH}$ 。如在水中加入毒化剂以增加试样中的氢含量,可使 K_{ISCC} 或 K_{ISCC} 大幅度下降,但仍低于 K_{IH} (或 K_{IH})^[77]。因此,门槛值的对比研究是区分 SCC 机理的重要方法之一。

(3) 裂纹形核位置的对比研究

对 I 型试样,最大正应力和最大剪应力都处在同一位置,无论是氢致开裂还是阳极溶解型 SCC,裂纹总沿原裂纹面形核和扩展,无法用它来进行裂纹形核位置和扩展方向的对比研究。

但如用 II 型或 III 型试样,情况就不同。对 II 型缺口试样,其最大剪应力在 $\theta=80^\circ$ 处,而最大正应力则在 $\theta=-110^\circ$ 处^[75],由于它们在缺口而上相距较远,故适于研究应力分量在应力腐蚀和氢致开裂中的作用。奥氏体不锈钢在热盐溶液中 SCC 时,II 型试样裂纹在具有最大正应力的 45° 而上形核^[74],I 型缺口试样裂纹沿 $\theta=-110^\circ$ 的最大正应力位置形核^[75]。但动态充氢时情况和 SCC 不同,II 型试样裂纹沿最大剪应力的 0° 面上形核^[74],这是氢促进奥氏体不锈钢室温蠕变,从而使扭转角在恒载荷下不断增大的结果;I 型试样则在最大剪切应力位置 $\theta=80^\circ$ (K_I 高)或最大正应力位置(K_I 低)形核。对高强钢,无论是 II 型还是 III 型,水中 SCC 和动态充氢时裂纹形核位置完全相同^{[77],[78]}。这表明高强钢的 SCC 属于氢致开裂型,而奥氏体不锈钢的 SCC 则属于阳极溶解型。

(4) 断口形貌对比研究

无论是 I 型还是 II 型和 III 型试样,奥氏体不锈钢在热盐溶液中 SCC 的断口形貌和动态充氢时氢致开裂断口形貌完全不同。前者是典型的解理断口(有时会混有一些沿晶断口),后

者则是韧窝断口(K_I 较高)或准解理断口(K_I 较低)^{[52],[79]}。对高强度钢,SCC断口和氢致开裂断口基本一致^{[50],[77]}。因为氢致开裂断口与钢的强度、氢的含量以及 K_I 大小有关,SCC时氢含量低,相当于小电流充氢的情况。断口形貌也可判断奥氏体不锈钢和高强度钢SCC机理。

6.3.2 氢在阳极溶解型应力腐蚀中的作用

1. 应力腐蚀过程中氢的进入和富集

由于裂纹的闭塞效应,裂纹尖端的溶液会酸化。对奥氏体不锈钢来说,整体溶液pH值在4.5~8.2范围时,裂纹尖端的pH值在0.7~2.0之间,钢和铝合金裂纹尖端的pH值为3.5~4.0,钛合金为1.7^[1]。裂纹尖端的酸化现象为氢的析出提供了热力学可能。

我们模拟了裂纹尖端的情况,将321不锈钢放在pH=1的42%MgCl₂沸腾溶液中浸泡200h,则有10~15ppm的氢进入试样^[79]。如加入As₂O₃后,可使氢含量增大到30~40ppm,并使延伸率 δ 下降60%。在200℃长时间烘烤把氢除去以后, δ 可恢复20%(由于点蚀的原因,烘烤后 δ 不能恢复到未浸泡时的水平^[79])。

用离子探针在带载情况下研究了321奥氏体不锈钢恒位移试样在SCC和电解充氢时裂纹前端的氢浓度分布^[79]。结果表明,SCC后基体和裂纹尖端氢浓度分别为9ppm和25ppm;电解充氢后基体氢浓度为24ppm。电解充氢条件下产生氢致开裂的临界浓度 $C_H > 30$ ppm。这说明,不锈钢在SCC过程中氢虽然可以进入试样并在裂纹尖端富集,但其浓度(9ppm)并未达到氢致开裂的临界值。换句话说,该体系的SCC过程是由阳极溶解而不是氢致开裂过程所控制的。

2. 氢对阳极溶解的促进作用

奥氏体不锈钢充氢后阳极极化曲线明显向高电流方向移动,钝化电位区缩小,腐蚀电位也略有升高^[81]。应当指出,如果充氢后立即测量极化曲线,由于氢的析出,会发生氢原子的氧化反应,这样就会使充氢试样的氧化电流密度明显增加。由此可见,充氢后由极化曲线测出的阳极电流增加并不意味着金属的腐蚀电流也一定增加,这很可能是由氢原子氧化电流造成的。

也有人用失重法研究氢对不锈钢和低碳钢腐蚀速度的影响。结果发现,充氢试样的极化曲线和均匀腐蚀速度都比除氢处理的试样有明显的增加,充氢后晶间腐蚀明显。随氢浓度增加,腐蚀速度也增加。我们采用等离子发射光谱仪测量了304和310奥氏体不锈钢在腐蚀溶液中的离子浓度,发现充氢后溶解的离子浓度明显增加,即氢促进了阳极溶解而使腐蚀加速^[81]。

如果氢和外应力对腐蚀不存在交互作用,则预充氢试样拉伸时的溶解速度应该是不充氢拉伸试样的溶解增量和预充氢但不拉伸试样溶解增量之和。但实验表明,充氢拉伸的溶解速度高于它们的叠加,故氢和应力对腐蚀速度的促进作用不是简单叠加,而是存在很强的协同作用^[82]。

3. 氢促进阳极溶解型 SCC

预充氢后可使奥氏体不锈钢在 $MgCl_2$ 溶液中 SCC 的 da/dt 升高 10 倍,同时使门槛值下降 20%^[81]。我们对没有氢脆敏感性的黄铜/氨水 SCC 体系进行了类似的研究:用单边缺口试样在相同的恒载荷下,和不充氢试样相比,充氢试样的 SCC 断裂时间明显降低;相同拉伸速度下,充氢的光滑拉伸试样的断裂载荷比不充氢试样低。两种方法都表明,氢对黄铜在氨水溶液中的 SCC 有明显的促进作用^[83]。

6.3.3 腐蚀促进局部塑性变形

1. 腐蚀钝化膜引起的附加拉应力

一边保护的薄片试样单边充氢,H 进入表层后使晶格膨胀,从而表层部分会伸长,试样的其余部分没有 H,它将阻止表层伸长,从而就会在表层产生一个压应力,它使充氢面鼓出,通过测量(一端悬挂)试样自由端的挠度 δ ,就可算出压应力的大小^[84]。

一边保护的黄铜薄片试样在氨水溶液中自然腐蚀时,表面形成脱锌层,它是充满空位和空位团(由于 Zn 择优溶解)的疏松层。疏松层倾向收缩,但未腐蚀的其余部分将阻碍它收缩,从而就有一个拉应力作用在疏松层上,它使腐蚀面向里凹,腐蚀过程中测出自由端的挠度 $\delta(t)$ 以及疏松层厚度 $d(t)$,就可求出试样上的平均拉应力

$$\sigma = A\delta/d$$
$$A = \frac{Eh^2}{3(1-\nu^2)L^2}$$

式中 L 和 h 是试样的长度和厚度; E 和 ν 是弹性常数。实验表明,腐蚀过程中,拉应力逐渐升高至最大值(约为屈服强度的 20%);在腐蚀过程中这个拉应力一直存在^[84]。

α -Ti 在甲醇溶液中自然腐蚀时,表层将产生钝化膜,它是一种氧化膜。如果钝(氧)化膜长大过程中阴离子(O^{2-} , OH^-)向基体的迁移量很小,主要是金属阳离子向外迁移,则新的钝化膜在钝化膜和溶液的界面上生成。由于金属离子向膜迁移,在金属表层留下很多空位,表层收缩,而其余部分阻碍它收缩,从而在表层(即膜和基体的界面)出现拉应力。测量表明,这个拉应力的最大值接近 α -Ti 的屈服强度^[85]。在腐蚀过程中,这个附加拉应力一直保持最大值,这就表明,膜形成后金属的继续溶解并不需要通过膜的破裂,而是通过金属离子和阴离子进行交换、迁移,穿过钝化膜而进入溶液。

2. 腐蚀促进位错发射和运动

研究位错发射和运动只能用透射电镜(TEM),但由于无法把溶液引入 TEM,故国内外一直没有人从位错层次研究 SCC 过程。我们设计了一个恒位移加载装置,解决了这个问题^[47]。薄膜试样安装在自制的恒位移加载台上,通过螺钉给试样加载。然后把该恒位移试样放入 TEM 中检查。如没有裂纹,则取出再加载,直至孔边出现裂纹为止。把恒位移试样放在干燥器中预蠕变 12~24h,在 TEM 中检查裂尖前方位错组态,然后在 TEM 中再蠕变 0.5~1h,确认裂尖前方位错组态没有任何变化后,就可以认为试样的室温蠕变已达饱和,

即在放入介质之后热激活不会使位错组态发生改变。将预蠕变后的恒位移试样放入腐蚀介质中浸泡一定时间后取出,干燥后放入 TEM 进行原位观察。

黄铜试样预蠕变 15h 后在裂尖前方看不到明显的位错,在 TEM 中继续蠕变 0.5h 以及在去离子水中浸泡 5min 后,裂尖仍不出现位错(见文献[47]图 1(a))。把试样再浸泡 10min,这时从裂尖 A 发出一组反塞积位错 BC,并形成一无位错区 AB(见文献[47]图 1(b))。应当指出,在局部溶解过程中裂尖发出位错后并不钝化,裂尖 A 仍很尖锐,由于 BC 位错反塞积在裂尖前方,它必然是从裂尖 A 发出。这就是说,由于腐蚀(局部溶解),从而在低应力下就能使裂尖发出位错(如没有介质,需通过增大外应力才能使裂尖 A 发出位错),即腐蚀(局部溶解)过程本身促进了位错从裂尖发出。另一试样蠕变 15h 后位错组态已稳定。在去离子水中浸泡 5min 后裂尖前方 BC 位置处已出现了一组新的位错(见文献[47]图 2(b))。浸泡 10min 后,BC 位错已运动离开视场,同时在 DE 间产生了新的位错(见文献[47]图 2(c))。这表明,局部溶解能促进位错的运动。继续浸泡 5min,DE 位错运动出视场,同时在裂纹上方出现和裂纹平行的位错列 FG(见文献[47]图 2(d))。由于 FG 位错平行于裂纹且有一半处于裂尖后方,它显然不是由裂尖发出的,而只能由裂尖右上方的位错源发出。由此可知,局部阳极溶解能使裂尖前方位错源开动,从而促进位错增殖。

Ti₃Al+Nb 试样加载后预蠕变 12h,在 TEM 中继续蠕变(约 1h)过程中裂尖位错组态并不改变,这表明室温蠕变已达到稳态(见文献[86]图 3(a))。把该恒位移试样放入甲醇中浸泡 10min,裂尖前方位错组态已发生了明显的变化,BC 位错群已滑出试样,仅在 D 处留下几个位错(它也可能是新产生的),在原裂纹延长线上新产生一系列塞积位错 EF,而裂纹上方的 GH 位错列则保持不变(见文献[86]图 3(b))。EF 塞积群显然是由裂尖发出,这表明,腐蚀能促进裂尖发出位错。由于腐蚀促进了位错的发出和运动(即促进局部塑性形变),从而使裂尖进一步张开,但这时裂尖并没有扩展,也没有不连续 SCC 裂纹形核。继续浸泡 20min,在 D 处的几个位错也已滑出试样(见文献[86]图 3(c))。

奥氏体不锈钢在室温水溶液中 SCC 时也有类似情况,即在 SCC 裂纹形核之前,腐蚀过程本身就能促进位错发射和运动^[87]。由于上述 SCC 体系均属于阳极溶解型,因此位错的发射和运动并不是氢引起的,而是阳极溶解(腐蚀)过程本身引起的。

阳极溶解过程本身为何能促进位错发射和运动呢?因为 SCC 过程中表层会形成钝化膜(Ti₃Al+Nb 在甲醇,不锈钢在水中)或脱合金层(黄铜在水中),与此同时就会在界面上产生一个附加拉应力(见上一节)。在腐蚀或 SCC 过程中,钝化膜并不破裂,这个附加应力一直存在,且保持很高的值(对黄铜约为 $0.2\sigma_s$,对 α -Ti 约为 σ_s)。这个附加拉应力会叠加在外应力上,因此,当外应力还很小时,合应力(外应力及附加应力之和)就等于临界值,从而引起位错的发射和运动。在空气中加载后保持恒载荷,位错组态保持不变,一旦放入溶液,由于钝化膜的形成,产生附加拉应力,从而引起位错发射、运动和增殖^[27]。这就类似于在空气中增加外应力。

TEM 薄膜试样和大块试样有区别,但用厚试样又无法看到位错,如何能用大块试样来证明腐蚀过程本身能促进局部塑性变形(位错发射和运动)呢?

3. 腐蚀促进裂尖局部塑性变形

利用激光云纹干涉法可测量 SCC 前后裂纹前端位移场(从而可算出应变场)的变化。厚为 5mm 的黄铜单边缺口试样在加载前先用棉球填于试样缺口处,调整光路使干涉条纹处于零级,然后缓慢加载到名义应力 $0.7\sigma_s$ 。保持恒位移,让试样在室温预蠕变 24h 后,这时室温蠕变已达饱和,从而就可排除热激活作用对局部塑性变形的影响。记录稳定位移场的云纹图像,然后在缺口处通过棉球滴加 $1\text{mol/L NH}_3\text{OH} + 5\text{g/L CuCl}_2$ 溶液,原位观察并记录缺口前端位移场的变化,一旦发现位移已发生明显变化,则照相后立即卸载。用光学显微镜观察试样表面和内部(通过逐层磨削),以便确认 SCC 尚未从缺口顶端形核。这就表明,缺口顶端位移场的变化发生在 SCC 形核之前,是由阳极溶解过程本身引起的。如果发现卸载试样中已产生 SCC,则缺口前端位移的变化并不仅仅是溶解的作用,这就需要另换试样重新测量。

对黄铜在氨水溶液^[88]、 α -Ti 在甲醇溶液^[89]中的测量表明,在 SCC 过程中缺口前端位移场等位移线条纹的密度明显升高(见文献[88]图 2)。由位移云纹图可求各点位移,即可算出缺口前端各点的应变,从而可求出 SCC 前后的等应变分布(见文献[88]图 4)。可以看出,SCC 过程中塑性区尺寸($\epsilon \geq 0.2\%$ 的区域)明显增大,与此同时,塑性区中各点的塑性变形量也升高,例如在缺口顶端,应变升高 28%。卸载后对试样表面及内部进行金相检查,在缺口前端没有 SCC 裂纹。由此可知,SCC 过程中缺口前端云纹级数明显增加(从而应变明显增大)发生在 SCC 裂纹形核之前,这就是说,它完全是由阳极溶解(腐蚀)过程本身引起的,即 SCC 过程中金属溶解过程本身能促进局部塑性变形。

4. 阳极溶解促进室温蠕变

1963 年 Kramer 发现阳极溶解能加快 Au 的室温蠕变速度;随后 Uhlig 等证实,阳极溶解(极化)能促进 Cu 和 Fe 的室温蠕变,阳极电流愈大,试样直径愈小,室温蠕变就愈明显^[90]。奥氏体不锈钢在 MgCl_2 溶液中腐蚀能使该温度下的蠕变速度升高^[91]。阳极极化能使不锈钢在 $\text{NaCl} + \text{HCl}$ 溶液中的蠕变速率升高,而且 $\dot{\epsilon}$ 和阳极电流成正比^[91]。

我们用黄铜圆柱试样在 NaCl 及醋酸钠溶液中进行研究^[92]。试样在空气中蠕变到稳态, $\dot{\epsilon} = 1.1 \times 10^{-3}/\text{min}$,加入上述两种介质后,可使稳态蠕变速度上升 90%~130%。如在室温溶液中蠕变至稳态后再加阳极电流,则使 $\dot{\epsilon}$ 明显升高,扣除通电升温引起的影响后, $\dot{\epsilon}$ 随阳极电流 i 线性升高,即 $\dot{\epsilon} = Ai/r^2$,其中 r 是试样半径,在 3.5%NaCl 溶液中, $A = 6.5 \times 10^{-7} \text{cm}^2/\text{mA} \cdot \text{min}$,而在醋酸+醋酸钠溶液中 $A = 1 \times 10^{-7} \text{cm}^2/\text{mA} \cdot \text{min}$ 。

早期认为,溶解时在表层产生的空位或双空位扩散进入金属内部促进刃位错攀移,从而促进室温蠕变。但通过 TEM 下的原位观察发现,溶解(腐蚀)促进的位错发射和运动是滑移而非攀移。因此双空位促进刃位错攀移并不是主要原因,表层附加拉应力促进位错滑移是溶解促进室温蠕变的主要原因。

5. 腐蚀导致塑性应变局部化

早期对 SCC 的试样在 TEM 中研究发现,靠近 SCC 裂纹顶端区,位错密度高且共面排

列；而远离 SCC 裂尖，则位错密度低，且均匀分布^{[93],[94]}。在 SCC 试样表面可发现很多粗滑移带，但在空拉试样中滑移带很细，很均匀^[94]。对黄铜试样在空气中和氨水溶液中慢拉伸后测量试样表面滑移带间距以及滑移带高度^[95]。空拉开始时滑移带间距很大(18 μm)，随应变升高而下降(当 $\epsilon_p=5\%$ 时为 8 μm)。SCC 时一开始滑移带间距很小(1.5 μm)，但逐渐升高。当 SCC 裂纹形核时($\epsilon_p<0.2\%$)滑移带间距(2 μm)远比空拉时(16 μm)要小。另一方面，空拉时滑移台阶高度很小(约 0.1 μm ，极值为 0.3 μm)，但 SCC 时滑移台阶高度将升高 25 倍。由此可知，SCC 使滑移带间距变小，而滑移台阶高度却有数量级的升高^[95]。这就表明在 SCC 过程中，腐蚀促进塑性变形的同时，也使塑性应变高度局部化。

6.3.4 阳极溶解型 SCC 机理

1. 滑移溶解模型

金属浸泡在腐蚀介质中就会形成一层钝化膜，如应力能使位错发生滑移，则滑移台阶将使表面膜破裂，露出无膜的新鲜金属，裸露的金属相对于膜表面是一阳极相，会产生瞬时溶解，接着又会形成新的保护膜，金属受到保护。在应力作用下位错将继续滑移，形成新的台阶，使膜再一次破裂，金属再次溶解。这样，通过滑移—膜破裂—金属溶解—再钝化过程的循环往复，就导致了 SCC 裂纹的形核和扩展^[1]。

按照这个模型，完全是金属溶解导致裂纹连续扩展。如膜破裂后新鲜表面再钝化的速度很快，则裂尖来不及溶解就已再钝化，从而不会发生 SCC。如再钝化速率极慢，就会出现大面积溶解，不会使裂纹侧面受到保护的同时裂尖通过溶解面扩展。因此，只有当膜破裂速度和修复速度相当，SCC 才明显。由这个模型可以看出，SCC 敏感性与应变速度有关。

Parkins 的工作表明，如低碳钢在硝酸盐溶液中在不产生 SCC 的阴极电位区保持(即预蠕变)足够长的时间，则可抑制随后回到开路电位的 SCC。但如在此电位预蠕变时间较短，则回到开路电位后仍能发生 SCC。他认为预蠕变足够长时间后，初始蠕变速率就会降至很低的水平，在回到开路电位后，由于蠕变速率已很低，所形成的应变量不足以保持临界膜破裂速度，故不会产生 SCC。如预蠕变时间短，则回到开路电位后，其应变速度仍高于使膜破裂的临界值，故能产生 SCC^[1]。

我们对黄铜/氨水溶液体系进行了类似的实验。如在不产生 SCC 的电位区(-70mV)阴极保护(预蠕变)时间低于 24h，则回到开路电位(-450mV)后能产生 SCC。但如阴极保护时间大于 24h，则回到开路后就不会发生 SCC。如长时间(48h 或 72h)阴极极化后，更换溶液再回到开路电位，或回到开路电位后保持一段时间(如 48, 72, 120h)再更换溶液，都能很快发生 SCC 断裂^[96]。由此可知，长时间阴极保护对随后开路 SCC 的抑制并不是由蠕变速率降低而使应变停止引起的，而是长时间阴极极化使溶液性质(如离子浓度、pH 值等)发生变化的结果。例如，长时间阴极极化使 Cu^{++} 浓度降低两个数量级，回到开路后虽然 Cu^{++} 浓度有所升高，但仍低于初始值 1~2 个数量级。相反，如阴极极化时间短，则回到开路后 Cu^{++} 浓度很快回到初始值^[96]。

滑移溶解模型虽然获得了较多的实验支持，可以解释 SCC 裂纹的穿晶扩展，以及 SCC

开裂敏感性与应变速度的关系,但在解释断裂面的晶体学取向方面却遇到了困难。例如,对于面心立方结构的奥氏体不锈钢,其滑移面是 $\{111\}$,按照滑移溶解模型,则 SCC 应当发生在该面上,但事实并非如此。按照这个模型预言,SCC 裂纹应在最大剪应力面上形核和扩展,而用 I 型和 II 型(奥氏体不锈钢和黄铜)试样的实验都表明,裂纹在与最大正应力相垂直的面上形核和扩展^{[74]、[75]}。在断口形貌方面,滑移溶解模型也遇到困难。按照阳极溶解理论,膜破裂后有些原子被溶解掉,断面两侧的形貌是不能很好地吻合的,但扫描电镜观察表明,SCC 断面两侧的断口形貌却有很好的匹配关系。滑移溶解模型除了在上述方面遇到困难外,在下列几方面也难以解释:(1)膜破裂溶解是所有金属环境体系的一般倾向,因而无法解释为何只有在特殊的溶液中才发生 SCC(见表 6.1)的事实;(2)尚缺乏水平方向溶解被抑制的解释;(3)实际测量的阳极溶解电流密度比理论计算值要低 3~4 个数量级,虽然 Hoar 认为提高形变速度并让介质流动,可以使阳极溶解电流密度大大提高,但与理论计算值终有差距,另外,这个实验很难被别人重复^[1];(4)按这个理论,SCC 裂纹应当连续扩展,但实验中 SCC 裂纹往往不连续形核。

和滑移溶解模型相类似的是蠕变使膜破裂的模型,它认为膜破裂不是滑移台阶造成的,而是宏观蠕变的综合效应。当时间足够长时,累积的蠕变就足以把保护膜拉断,导致金属的局部溶解。

晶界膜脆断理论认为,SCC 时沿晶界产生一层很弱或很脆的钝化膜,加应力,则垂直应力的晶界膜脆断,金属溶解成裂纹,应力使它张开,溶液进入裂纹,又会形成晶界膜。重复进行就导致沿晶断裂。

2. 择优溶解理论

(1) 沿晶择优溶解

铝合金第二相沿晶界析出,晶界附近形成合金贫化区(无沉淀区)。有些合金第二相的电位比基体更负(如 7075 中的 η 相),是阳极相;有些合金(如 2024)无沉淀区是阳极相。阳极相择优溶解形成空洞(或小裂纹),外加应力使它们张开,从而使新鲜金属暴露在溶液中受到进一步溶解,应力也可使各个空洞或小裂纹之间的基体韧性撕裂,从而使小裂纹互相连接^[1]。这个理论不适用于低碳钢及不锈钢,它本质上是一种应力作用下的晶间腐蚀。某些铝合金能发生晶间腐蚀,但不发生 SCC,反之亦然。因此,即使对铝合金,这个理论也不一定适用^[1]。

(2) 隧道腐蚀

这个模型认为,在共面排列的位错露头或新形成的滑移台阶上,处于高应变状态的金属原子发生择优腐蚀,这种腐蚀沿位错线向纵深发展,形成隧道,在应力作用下,隧道之间的金属产生机械撕裂。当机械撕裂停止后,又重新开始隧道腐蚀,这个过程的反复发生就导致了裂纹的不断扩展,直到金属不能承受载荷而发生超载断裂^[1]。

实验表明,隧道腐蚀并非 SCC 的必要条件。奥氏体不锈钢 SCC 断口形貌多是扇形花样的解理断口或沿晶断口,很少发现带有沟槽(隧道撕裂形成)的平断口,即使有,也只在个别的视场中发现,属于一种伴生现象。所以,这个模型虽然有一定的实验基础,但不能成为 SCC 的主要机理^[1]。

(3) 腐蚀提高表面原子活动性

Galvele 认为^[97], 应力和腐蚀介质使表层原子活动性提高, 产生过饱和的空位(或双空位), 它们迁移到裂尖就导致裂纹连续扩展。应力 σ 做功为 σa^3 , 从而使空位形成能下降 σa^3 , 故应力使空位浓度升高。另一方面, 腐蚀过程中会在表面形成低熔点化合物(如不锈钢在含 Cl^- 溶液中会形成 FeCl_3), 表层金属熔点降低就会促进空位产生。他导出的裂纹扩展速率 $da/dt = D_s [\exp(\sigma a^3/kT) - 1]/L$, 其中 D_s 是表面原子的扩散系数, L 为平均扩散距离。

Sieradgki 算出的 da/dt 比 Galvele 算出的要小 10^8 ^[98], 故认为这个模型完全不适用。事实上在 SCC 过程中并不会形成低熔点化合物。另外, 通过空位扩散导致裂纹扩展肯定是个很慢的过程, 远低于实际的 SCC 速率。

3. 钝化膜致脆机理

Newmen 等认为^[99], 由于腐蚀钝化膜或疏松层的存在, 它阻碍裂尖位错的发射, 按 Rice 韧脆判据(6.9式), 裂尖位错发射受阻就意味着材料变脆。如果钝化膜比基体更硬($\mu^* > \mu$), 则由于膜的存在, 裂尖前方位错的象力要发生改变, 从而使发射位错所需的临界应力强度因子 K_{Ic} 升高, 当 $\mu^*/\mu > 3.5$ 且膜厚 $h > 2\text{nm}$, 则当 $K_I = K_{Ic}$ 时裂尖也不发射位错, 从而脆断(按 Rice 判据)。如果膜比基体更软, 由于膜的点阵常数 a^* 和基体不同, 如错配度 $\epsilon = (a - a^*)/a > 0$, 这时膜受拉, 基体受压, 界面成为位错运动的障碍, 裂尖发出的位错塞积在钝化膜中, 如果膜的障碍作用很强, 当 $K_I = K_{Ic}$ 时仍没有位错穿过膜进入基体, 从而脆断^[99]。

张统一认为他们的计算有问题。他对 II 型裂纹的计算表明^[100], 硬的钝化膜($\mu^* > \mu$)使裂尖有效应力强度因子 K_{II} 升高, 而软膜则降低, 即 $K_{II} \approx K_{Ic} \mu^*/\mu$ 。因此, 硬膜促进裂尖发射位错, 而软膜则阻碍位错发射。

实验表明, 当存在钝化膜时确实能使材料由韧变脆。例如 Cu—30Au 薄片弯曲试样在 NaCl 溶液中阳极极化 30min 后, 表层形成钝化膜, 在溶液中冲击弯曲则获得沿晶断口, 如不存在膜, 则韧断^[101]。黄铜薄片试样在氨水中浸泡产生约 100nm 的脱 Zn 层(疏松层)后立即在 -196°C 拉伸, 则得解理断口, 如取出经过一定时间后再在 -196°C 拉伸则得韧断。如成膜后在溶液中冲击弯曲则为沿晶断, 但如取出“时效”再冲击弯曲则为韧断^[102]。一边保护的 不锈钢薄片在 HCl 溶液中浸泡成膜后, 如在溶液中带膜冲击则得沿晶断口, 如在空气中冲击或把膜刮去再冲击, 均为韧断^[103]。

4. 腐蚀促进局部塑性导致脆断机理

Jones 认为, 滑移使膜破裂, Cl^- 吸附延迟再钝化, 新鲜金属快速阳极溶解, 在表层下方产生的过饱和空位(或双空位)促进位错攀移从而使应变硬化松弛。断裂应力从 σ_i 降为 σ_i^* , 促进了脆性裂纹形核。双空位在(001)解理面上聚集形成微裂纹^[104]。

这个观点最大的错误是认为降低应变硬化就等于降低断裂应力。应变硬化降低可使塑性区中最大应力下降, 但不会使作为材料常数的断裂应力跟着下降。另外, 双空位聚集构成解理裂纹核也不合理, 因为空位盘不可能成为裂纹核。

Kaufman 认为^[105], 金属沿滑移带择优溶解, 由于原子被溶解从而引起局部应力集中, 使该处位错增殖。这种溶解促进的局部应变将使溶解加速, 反过来又会导致应力进一步升

高。溶解使形变进一步局部化从而导致微区韧断(如沿{111}面),微区局部溶解和形变韧断的联合作用就导致宏观脆断。由于 SCC 断口附近位错密度远比其他部位高,从而认为溶解促进局部塑性。但认为溶解使裂纹变尖锐,应力集中升高(从而促进位错运动和增殖)这个观点不对。因为 TEM 原位观察表明,溶解和局部塑性变形将使裂纹钝化而不是锐化。

Magnin 认为^[196],滑移使钝化膜局部破裂,Cl⁻延迟再钝化,裂尖择优溶解形成滑移台阶,从而引起新的应力集中;这种应力集中将使周围位错增殖,即溶解引起应力集中,从而升高局部塑性变形;局部塑性变形引起位错塞积,塞积应力引起微裂纹形核。微裂纹一旦形核,塞积群就被冲垮,裂尖通过滑移而钝化。需要通过再一次的局部溶解而锐化。这个观点仍然认为裂尖原子的消除(溶解)会引起应力集中升高。

5. 应力腐蚀新机理

TEM 原位观察表明,阳极溶解(腐蚀)过程本身能促进位错发射、增殖和运动(见上一节),并形成无位错区(DFZ)^[27]。DFZ 中存在两个应力峰值,其中一个在原裂纹顶端^[4]。随外加 K_I 增大或 DFZ 通过位错运动而不断减薄,这两个峰应力(或其中之一)就有可能等于原子键合力,原子键断开就会形成 SCC 微裂纹。文献[86]图 4 指出了这个过程,当腐蚀促进的位错发射、运动发展到临界值时,SCC 微裂纹从原裂尖处形核(见文献[86]图 4(c))。随着腐蚀促进的位错发射和运动,新的微裂纹又会在 DFZ 中不连续形核(见文献[86]图 4(d))。这些微裂纹的长大和连接就导致 SCC。

黄铜在空气中拉伸时,纳米尺寸的微裂纹一旦形核就立即钝化成空洞,它们互相连接就导致韧断^[27]。但在水介质中,这种纳米尺寸的 SCC 裂纹形核后并不钝化而是沿晶(或解理)扩展。这就是说,介质的存在能阻碍纳米微裂纹的钝化。

应力腐蚀新机理如下:钝化膜(或脱合金疏松层)形成后,金属离子通过和阴离子(O²⁻, OH⁻)的交换,穿过钝化膜进入溶液而不断溶解,与此同时在膜和基体的界面上就产生一个很大的附加拉应力;这个附加应力叠加在外应力上促进位错发射和运动;当腐蚀促进的局部塑性变形(位错发射和运动)达到临界条件,就会使局部应力集中(如无位错区中或位错塞积群前端)等于原子键合力,原子键断开就导致 SCC 微裂纹的形核;介质的存在阻碍裂纹钝化成空洞从而解理或沿晶扩展。由于附加拉应力的协助,在很低的外应力(或外加 K_I)下位错就开始发射和运动,保持恒载荷(或恒 K_I),通过无位错区的不均匀减薄,微裂纹就在其中形核、扩展。这就是说,由于钝化膜引起附加拉应力,产生 SCC 的临界外加应力(门槛应力 σ_c)或门槛应力强度因子 K_{ISCC} 就远比空拉时裂纹形核扩展的相应值要低。由于腐蚀促进局部塑性变形的同时也使应变局部化,SCC 时当整个试样的平均应变还很小时,局部地区的集中应变就已等于裂纹形核的临界应变,从而导致 SCC 裂纹形核和扩展。故 SCC 时的断裂应变(整个试样的平均应变)就远小于空拉时的断裂应变(它等于 SCC 断裂时应变集中区的集中应变)。另一方面,由于介质能阻碍微裂纹钝化成空洞,从而解理或沿晶扩展。这就表明,韧性材料 SCC 断口将从韧窝变成沿晶或解理。总起来说,SCC 时尽管腐蚀过程本身能促进局部塑性变形(位错发射和运动),但最终结果是导致低应力脆断(门槛应力和断裂应变下降,断口由韧变脆)。

参 考 文 献

1. 褚武扬. 氢损伤与滞后开裂. 北京:冶金工业出版社, 1988
2. 刘晓敏, 乔利杰, 褚武扬. 金属学报, 1998, 34: 121
3. Ohr S M. Mater Sci Eng, 1985, 72: 1
4. Zhu T, Yang W, Guo T. Acta Mater, 1996, 44: 3049
5. 陈奇志, 褚武扬, 肖纪美. Acta Metall Mater, 1995, 43: 4371
6. 张跃, 王燕斌, 褚武扬. 中国科学, A 辑, 1994, 24: 551
7. 高克玮, 陈奇志, 褚武扬. 中国科学, A 辑, 1994, 24: 993
8. Anderson P M, Rice J R. Scripta Metall, 1986, 20: 1467
9. Yokobori Jr A T, Isogai T, Yokobori T. Acta Metall Mater, 1993, 41: 1405
10. 随国鑫, 徐永波, 周敬, 哈克富, 王中光. 材料科学进展, 1991, 5: 308
11. Beltz G E, Rice J R, Shih C F, Xiao L. Acta Mater, 1996, 44: 3943
12. Stroh A N. Adv Phys, 1957, 6: 418
13. Smith E, Barnby J F. Metal Sci J, 1967, 1: 56
14. Cottrell A H. Trans AIME, 1958, 212: 192
15. 王燕斌, 褚武扬, 肖纪美. 中国科学, A 辑, 1989, 1069
16. 陈奇志, 褚武扬, 张跃, 高克玮, 谷鹰. 自然科学进展, 1995, 5: 753
17. 陈奇志, 褚武扬, 肖纪美. 中国科学, A 辑, 1994, 24: 291
18. Wilsdorf H G F. Mater Sci Eng, 1983, 59: 1
19. 姚可夫, 唐泳, 陈南平. 金属学报, 1989, 25: A213; 1991, 27: A98
20. 张统一, 黎晶, 褚武扬. 金属学报, 1988, 24: SA134
21. 褚武扬, Thompson A W. Metall Trans, 1992, 23A: 1299
22. Rice J R, Thomson R. Phil Mag, A, 1974, 29: 73
23. Zhang T Y, Hassen P. Phil Mag, A, 1989, 60: 15
24. Schoeck G. Phil Mag, A, 1991, 63: 111; 931
25. Rice J R, Beltz G E. J Mech Phys Solids, 1994, 42: 333
26. Juan Y M, Kaxiras E. Phil Mag, A, 1996, 74: 1367
27. 谷鹰, 高克玮, 黄一中, 褚武扬. 中国科学, E 辑, 1996, 26: 481
28. 李密丹, 吕宏, 褚武扬. 中国科学, E 辑, 1997, 27: 481
29. 宿彦京, 王燕斌, 褚武扬. 中国科学, E 辑, 1997, 27: 397
30. Xin Y B, Hsia K J. Acta Metall Mater, 1997, 45: 1747
31. Hirsch P B, Roberts S G. Acta Metall Mater, 1996, 44: 2361
32. 褚武扬, Thompson A W, Williams J C. Acta Metall Mater, 1992, 40: 455
33. 白清溪, 褚武扬, 肖纪美. Scripta Metall, 1987, 21: 613
34. 张统一, 褚武扬, 肖纪美. Metall, Trans, 1985, 16A: 1649
35. Gavriljuk V G, Bugaev V N, et. Scripta Mater, 1996, 34: 903
36. McLellan R B, Xu Z R. Scripta Mater, 1997, 36: 1201
37. Noh H, Clewley J D, Flanagan T B. Scripta Mater, 1996, 34: 665
38. 周国辉, 万发荣, 周富信, 褚武扬. 中国科学, E 辑, 1998, 28: 1
39. Zhang T Y, Shen H, Hack J E. Scripta Metall Mater, 1992, 26: 139; 27: 1605
40. 吴世丁, 陈廉, 刘民治. 金属学报, 1990, 21: A86
41. Sun S, Shiozawa K, Ga J, Chen N P. Metall Trans, 1995, 26A: 731
42. 于广华, 陈廉, 乔利杰, 褚武扬. 金属学报, 1995, 31: 454
43. 乔利杰, 褚武扬, 毛屋原. Corrosion, 1996, 52: 275

44. Maier H J, Popp W, Kaesche H. *Mater Sci Eng*, 1995, A191:17
45. Robertson I M, Birnbaum H K. *Acta Metall*, 1988, 36:2193; 2289
46. Rozenak P, Robertson I M, Birnbaum H K. *Acta Metall*, 1990, 38:2031
47. 谷懿, 张经武, 褚武扬. *Scripta Metall Mater*, 1995, 32:637
48. 谷懿, 高克玮, 褚武扬. *金属学报*, 1997, 33:709
49. 褚武扬, 肖纪美, 李世琼. *金属学报*, 1981, 17:10
50. 褚武扬, 刘天化, 肖纪美. *Corrosion*, 1981, 37:320
51. 褚武扬, 王燕斌, 肖纪美. *Corrosion*, 1982, 38:561
52. 褚武扬, 王核力, 肖纪美. *Corrosion*, 1984, 40:487
53. Gao G Y, Dexter S C. *Metall Trans*, 1987, 18A: 1125
54. 褚武扬, 丁威, 肖纪美. *金属学报*, 1986, 22:115
55. 谷懿, 褚武扬, 乔利杰. *Corrosion Sci*, 1994, 44:1437
56. Onyewuenyi O A, Hirth J P. *Metall Trans*, 1983, 144:259
57. Abraham D P, Altstetter C J. *Metall Mater Trans*, 1995, 26A:2849
58. Birnbaum H K, Sofronis P. *Mater Sci Eng*, 1994, A176:191
59. McInter W A, Thompson A W, Bernstein I M. *Acta Metall*, 1980, 18:887
60. Huang J H, Altstetter C J. *Met Mater Trans*, 1995, 26A:845
61. Chen S H, Katz Y, Gerberich W W. *Phil Mag A*, 1991, 63:131
62. Li J C M, Park C G, Ohr S M. *Scripta Metall*, 1986, 371: 1447
63. 张统一, 褚武扬, 肖纪美. *中国科学, A辑*, 1986, 316
64. Takasugi T, Misawa T, Saitoh, H. *Mater Sci Eng*, 1995, A192/193:413
65. 褚武扬, 肖纪美, 李文学. *Metall Trans*, 1984, 15A:2087
66. 蒋兴钢, 褚武扬, 肖纪美. *中国科学, A辑*, 1994, 24:668
67. 王燕斌, 褚武扬, 肖纪美. *Metall Trans*, 1988, 19A:1335
68. Fu C L, Painter G S. *J Mater Res*, 1991, 6:719
69. 褚武扬, 乔利杰, 于广华. *中国科学, E辑*, 1996, 26E:411
70. 褚武扬, 肖纪美. *金属学报*, 1992, 28: A67
71. 高克玮, 王燕斌, 褚武扬. *Scripta Metall*, 1992, 26:813
72. 褚武扬, 肖纪美, 王俊文. *Metall Trans*, 1985, 16A:1663
73. 褚武扬, 姚京, 肖纪美. *Corrosion*, 1984, 40:302
74. 乔利杰, 褚武扬, 肖纪美. *Corrosion*, 1987, 43:479
75. 乔利杰, 褚武扬, 肖纪美. *Corrosion*, 1988, 44:50
76. 褚武扬, 肖纪美, 张彦国. *金属学报*, 1984, 30:A232
77. 褚武扬, 肖纪美, 徐伯琪. *Metall Trans*, 1986, 17A:711
78. 张统一, 褚武扬, 肖纪美. *Metall Trans*, 1986, 17A:717
79. 褚武扬, 姚京, 肖纪美. *Metall Trans*, 1984, 15A:729
80. 乔利杰, 褚武扬, 肖纪美. *金属学报*, 1987, 23:A228
81. 乔利杰, 褚武扬, 肖纪美. *中国科学, A辑*, 1991, 12:1218
82. 乔利杰, 褚武扬, 肖纪美. *Metall Trans*, 1993, 24A:959
83. 乔利杰, 徐荣杰, 褚武扬. 肖纪美, *中国腐蚀与防护学报*, 1995, 15:61
84. 吕宏, 高克玮, 褚武扬. *Corrosion Sci*, 1998, 40:1663
85. 吕宏, 高克玮, 褚武扬. *金属学报*, 1997, 33:1262
86. 高克玮, 褚武扬, 王燕斌. *Scripta Mater*, 1997, 36:259
87. 黄一中, 陈奇志, 褚武扬. *J Mater Sci Tech*, 1997, 36:259
88. 张天成, 褚武扬. *金属学报*, 1999, 33:309
89. 吕宏, 张天成, 褚武扬. *J Mater Sci Tech*, 1998, 14:188
90. Uhlig H H. *J Elec Sci*, 1976, 123:1669

91. 黄彦良,曹楚南,林海潮. 金属学报,1993,29:B212
92. 谷颉,褚武扬,乔利杰,肖纪美. 金属学报,1994,30:A232
93. Jani S, Matek M, Meletis E I. Metall Trans, 1991,22A:1;433
94. Meletis E I, Lian K. J Mech Behav Mater,1995,6:69
95. Lian K, Meletis E I. Corrosion, 1996,52:347
96. 谷颉,褚武扬,乔利杰,肖纪美. Corrosion Sci,1994,44:1447
97. Galvelin J R. Corrosion Sci, 1987,27:1
98. Sieradzki S, Friedersdorf F J. Corrosion Sci, 1994,36:669
99. Sieradzki K, Newman R C. J phys Chem Solids 1, 1987,48:1101
100. Zhang T Y, Qian C F. Acta Mater,1996,44:4513
101. Chen J S, Salmeron M, Devine T M. Scripta Metall,1992,26:739
102. Kelly R G, Newman R C. Metall Trans, 1991,22A:531
103. Devasenapathi A, Prasad R C, Raja VS. Scripta Metall Mater,1995,33:233
104. Jones D A. Metall Trans, 1985,16A:1133
105. Kaufman M J, Fink J K. Acta Metall, 1988,36:2213
106. Magnin T, Cheragatti R, Oltra R. Acta Metall Mater,1990,38:1313