

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](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”期间数理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 单个张开币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^[1]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微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问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,位错环蜷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 $\text{Ti}_3\text{Al}+\text{Nb}$ (Ti-24Al+Nb)金属间化合物。块状试样封在 $1 \times 10^{-4}\text{Pa}$ 的石英管内,分别在 1250°C (TiAl)和 1150°C ($\text{Ti}_3\text{Al}+\text{Nb}$)固溶 1.5h,空冷后,再经 900°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 $30 \sim 50\mu\text{m}$ 。

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 $\text{Ti}_3\text{Al}+\text{Nb}$)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。

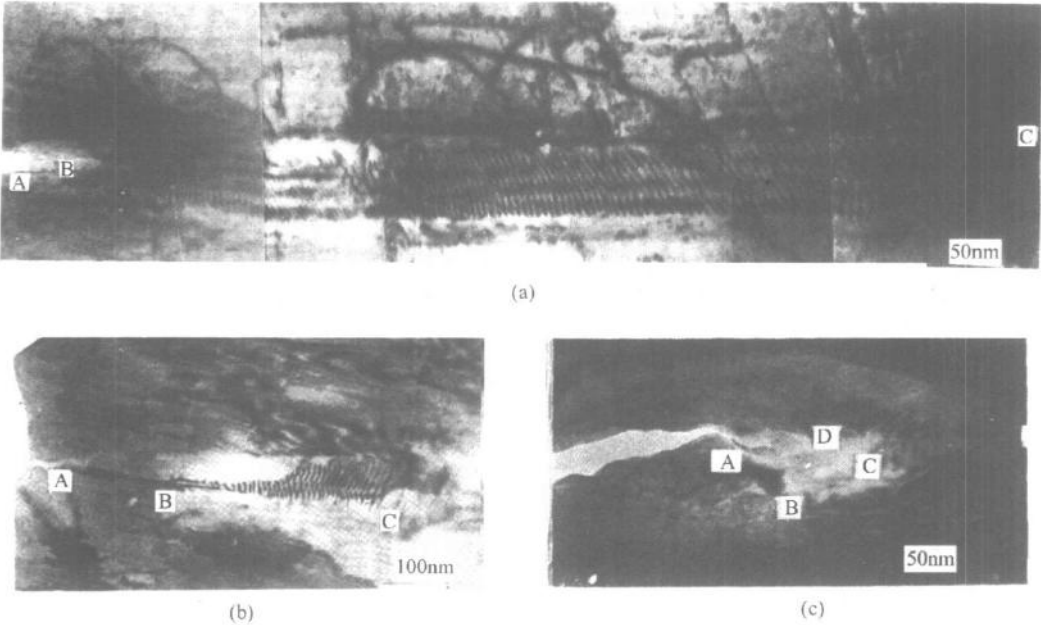


图 1.1 裂尖前方的无位错区(DFZ)

- (a) 韧性材料(310 钢),AB 为 DFZ,BC 是反塞积位错群;
- (b) 脆性材料($\text{Ti}_3\text{Al}+\text{Nb}$),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($\text{Ti}_3\text{Al}+\text{Nb}$)和 0.02(TiAl)。这清楚地表明,DFZ 是一个高畸变的异常弹性区。

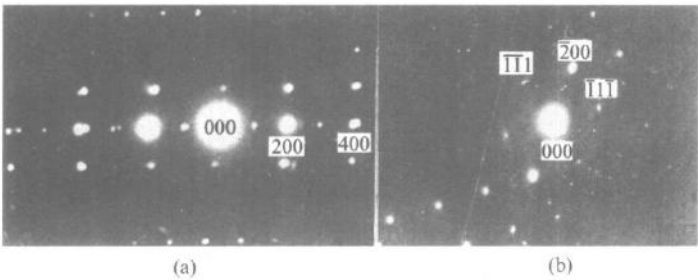


图 1.2 无位错区的选区电子衍射图

- (a) $\text{Ti}_3\text{Al}+\text{Nb}$; (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 $\text{Ti}_3\text{Al}+\text{Nb}$ 材料的 DFZ 中,b 处有一个纳米裂纹。

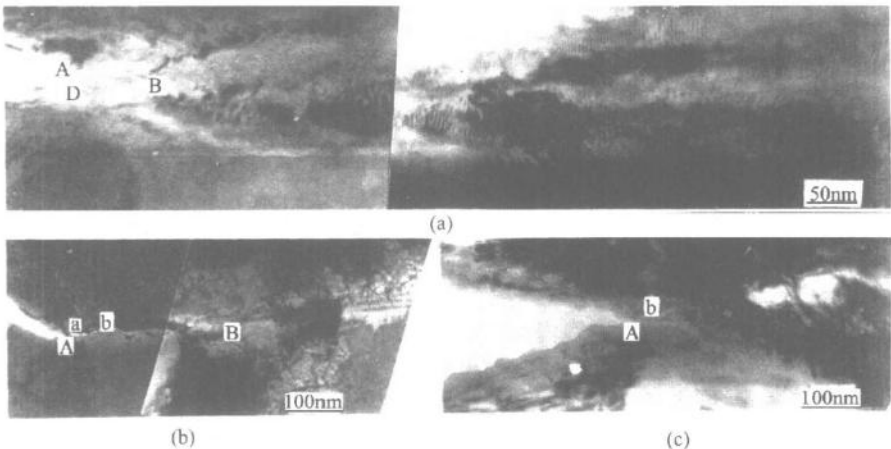


图 1.3 纳米微裂纹在无位错区中不连续形核

- (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($\text{Ti}_3\text{Al}+\text{Nb}$),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。

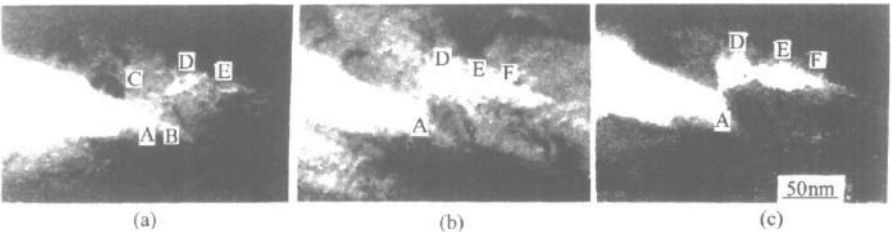


图 1.4 韧性材料(310 钢)中纳米裂纹钝化成空洞并相互连接的过程

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