

Macro-micro-mechanics and
Strengthening and
Toughening Design of Materials

材料的宏微观力学 与强韧化设计

国家自然科学基金重大项目

主 编

黄克智 王自强

Hwang Keh-Chih Wang Tzuchiang



清华大学出版社



Springer

Macro-micro-mechanics and
Strengthening and
Toughening Design of Materials

材料的宏微观力学 与强韧化设计

国家自然科学基金重大项目

主 编
黄克智 王自强



清华大学出版社

内 容 简 介

“材料的宏微观力学与强韧化设计”系国家自然科学基金继“八五”重大项目(19392300)之后在“九五”期间支持的重大项目(1998年3月至2001年12月,项目批准号19891180)。经专家组验收,一致认为本项目的研究工作处于国际前沿,取得了一批重要成果。本书系统地整理并集中反映了项目的部分成果,主要包括:材料的尺度效应与尺度律、应变梯度塑性理论、统计细观损伤力学和跨尺度耦合的特征表征、多项复合材料有效性质的相互作用直推法、压电介质力-电冲击瞬态响应、铁电材料本构关系、脉冲激光致合金表层快速熔凝及其对力学性能的影响、典型材料的强韧化设计等内容。

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

材料的宏微观力学与强韧化设计/黄克智,王自强主编. —北京:清华大学出版社,2003
ISBN 7-302-06721-X

I. 材… II. ①黄…②王… III. ①材料力学②材料-韧性-强化-设计 IV. TB30

中国版本图书馆CIP数据核字(2003)第045585号

出 版 者: 清华大学出版社 地 址: 北京清华大学学研大厦

<http://www.tup.com.cn> 邮 编: 100084

社 总 机: 010-62770175 客户服务: 010-62776969

组稿编辑: 陈朝辉

印 刷 者: 三河市印务有限公司

发 行 者: 新华书店总店北京发行所

开 本: 787×1092 1/16 印张: 18.25 字数: 398千字

版 次: 2003年7月第1版 2003年7月第1次印刷

书 号: ISBN 7-302-06721-X/O·301

印 数: 1~1500

定 价: 58.00元

序

国家自然科学基金与国家攀登项目在“八五”期间共同资助的重大项目“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19392300)取得的部分成果已经整理成专著出版(见《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,1999年12月)。为了进一步发展这一成果,国家自然科学基金委员会在“九五”期间批准设立国家自然科学基金重大项目“材料的宏微观力学与强韧化设计”(1998年3月至2001年12月,项目批准号19891180)。该重大项目设立五个研究课题:

1. 材料的多尺度力学行为和尺度效应(杨卫,黄克智,王自强,诸武扬,黄永刚,高华健等);
2. 微结构和缺陷体的交互作用和演化动力学(白以龙,王自强,郑泉水,徐永波等);
3. 信息材料的宏微观力学研究(余寿文,杨卫,黄克智,方岱宁,诸武扬等);
4. 表面、界面梯度材料的非均匀结构与破坏行为(段祝平,余寿文,洪友士,陈宜宁等);
5. 典型先进材料的强韧化设计与实现(吴学仁,陈大明,洪友士,郑泉水,方岱宁,顾海澄等)。

2002年1月29—30日,由国家自然科学基金委组织的“材料的宏微观力学与强韧化设计”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,一致达成了以下结论性意见:

【国家自然科学基金委员会于2002年1月29日至30日组织召开了重大项目“材料的宏微观力学与强韧化设计”(批准号19891180)的结题验收会。验收专家组听取了重大项目主持人及五个课题负责人的汇报,审查了各个课题的工作进展情况和研究成果目录,并进行了认真的讨论,取得了一致意见。

专家组认为:该重大项目在国家自然科学基金委员会的领导下和许多单位的大力支持下,在项目学术领导小组的有效组织下,经过课题组全体成员四年的努力,高质量地全面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。共出版学术著作8部,发表学术论文541篇(其中SCI登录291篇,另EI登录59篇),作国际会议邀请报告33次,获得部级奖励7项,专利8项,全国优秀博士论文3篇。在此期间,培养和锻炼了一支学术水平高的中青年研究队伍与硕、博士生,在项目组出站的博士后19名,获学位的博士

¹ 组长:郑哲敏;副组长:伍小平;成员:李和娣,沈亚鹏,张行,黄筑平,郑晓静。

生 43 名、硕士生 31 名,有 21 名中青年学术带头人在迅速成长。此外,该项目的成员还进行了广泛的学术交流与国际合作,举办国际学术会议 2 次,国内学术会议 2 次,双边讨论会 1 次。

专家组认为:该课题组正在逐步实现力学与材料两个一级学科研究内容和队伍的结合。加强了实验研究工作,发现了一些新的现象,并在此基础上进行了深入的理论分析,取得了下述学科进展和重要成果:

1. 应用纳米云纹技术测量了单晶硅位错芯和裂尖前方 4 纳米变形场;
2. 提出了基于位错机制的应变梯度塑性 (MSG) 理论和不含高阶应力的应变梯度塑性理论;
3. 提出了一种纳米晶体中计及尺寸效应的塑性变形机制,可与纳米晶铜的超塑性试验结果符合;
4. 发展了非均匀损伤变形场的演化理论,建立了具有不同近似级别的描述微损伤集体演化的跨尺度封闭方程组,并进行了数值模拟,提出了一个二维细观群体交互作用损伤演化的新方法;
5. 提出多项非均匀材料本构关系的相互作用直推法 (IDD 法),具有简单、精确和普适的优点;
6. 提出了由于电畴转动引起的电致疲劳裂纹扩展机理和理论模型,得到了电致疲劳发展规律的曲线;
7. 提出了铁电/压电材料的宏-微观非线性本构关系模型;
8. 发现了形状记忆合金伪弹性变形非惯习面并建立了相应的理论模型;
9. 揭示了热障涂层材料在热/力联合加载下表面与界面裂纹形成与发展的规律,提出了改善涂层性能的若干重要复合工艺。揭示了脉冲激光熔凝过程的温度场演化及微结构形态及其对疲劳抗力和摩擦磨损性能的影响规律;
10. 应用上述有关成果,开发制备出一种力学性能优异的层状陶瓷复合材料,在基本保持基体强度水平的前提下,其断裂韧性提高到基体 2.2 倍。

本项目的研究工作处于国际前沿,其中若干重要成果具有国际先进水平,例如上述 2, 4, 5, 8 等项,总体评价为特优。】

本论文集共收集了该基金重大项目的九项成果。其中杨卫的“材料的尺度效应与尺度律”从两个方面探讨了材料的尺度效应与尺度律,即由于裂尖小尺度造成的变形由连续至离散化特征,和由于材料微结构的特征尺度和统计分布所造成的尺度效应,并进而探讨了上述效应的尺度律。黄克智,魏悦广,黄永刚的“MSG 应变梯度塑性理论和固体尺度效应”介绍了近年发展的基于位错机制的应变梯度塑性 (Mechanism-based strain gradient plasticity, MSG) 理论及其应用,该项成果是清华大学、中科院力学所、美国伊利诺伊大学、德国马克普朗克金属研究所的合作研究成果。王自强、陈少华的“不含高阶应力的应变梯

度理论”提出了一种不含高阶应力的转动梯度理论及一种不含高阶应力的应变梯度理论，及该理论的应用。白以龙，汪海英，夏蒙旻，柯孚久的“统计细观损伤力学和跨尺度耦合的特征表征”介绍统计细观损伤力学和其中包含的跨尺度的特征表征，提供了现有的连续损伤力学中起核心作用的损伤演化率的物理基础，并说明了其近似程度。郑泉水、牡丹旭的“多项复合材料有效性质的相互作用直推法及其应用”提出了一种新的考虑复合材料中夹杂相互作用的方法——相互作用直推法（IDD 法），它与目前广泛应用的 Mori-Tanaka 一样具有简单的解析表达形式，但具有更好的精度。余寿文，古斌的“压电介质力-电冲击的瞬态响应与界面裂纹对弹性波的散射”介绍压电介质中界面裂纹在力-电冲击荷载下的瞬态响应以及弹性波的散射问题。方岱宁，吕炜，黄克智的“铁电材料的本构关系”介绍了宏细观力学统一的本构理论模型以及实验研究成果。洪友士，赵亦兵，安中胜，王会才的“脉冲激光致合金表层快速熔凝及其对微结构和力学性能的影响”和周洋，吴学仁，方岱宁，郑泉水，颜悦，魏悦广的“典型先进材料的强韧化设计与实现”展示了力学与材料学科研究相结合的研究成果。应指出，本论文集并不反映项目的全部成果；有一些重要成果，由于时间与篇幅的限制，没有收集进来，例如铁电材料的断裂与疲劳，形状记忆合金新的实验现象与理论模型，热障涂层材料力学等。

项目组全体成员感谢国家自然科学基金委的支持和领导。感谢各项目执行单位的大力支持。感谢验收专家组的评价和鼓励。最后，感谢基金委，清华大学出版社对本文集出版的支持。对张帆同学的精心编辑，在此一并感谢。

项目主持人 黄克智 王自强

2003 年 4 月

目录

材料的尺度效应与尺度律	杨 卫 1
MSG 应变梯度塑性理论和固体尺度效应	黄克智, 魏悦广, 黄永刚 26
不含高阶应力的应变梯度理论	王自强, 陈少华 73
统计细观损伤力学和跨尺度耦合的特征表征	白以龙, 汪海英, 夏蒙芬, 柯孚久 92
多相复合材料有效性质的相互作用直推法 及其应用	郑泉水, 牡丹旭 115
压电介质力-电冲击的瞬态响应与界面裂纹对弹性波的散射	余寿文, 古 斌 138
铁电材料的本构关系	方岱宁, 吕 炜, 黄克智 177
脉冲激光致合金表层快速熔凝及其对微结构和力学性能的影响	洪友士, 赵亦兵, 安中胜, 王会才 215
典型先进材料的强韧化设计与实现	周 洋, 吴学仁, 方岱宁, 郑泉水, 颜 悦, 魏悦广 246

材料的尺度效应与尺度律

杨 卫

(清华大学工程力学系, 北京, 100084)

摘要 本章从两个方面探讨材料的尺度效应与尺度律。首先, 讨论当逐步逼近裂纹尖端时, 由于裂尖小尺度造成的变形由连续至离散化特征, 以及它对材料的断裂行为所产生的影响。然后, 讨论由材料微结构的特征尺度和统计分布所造成的尺度效应, 并进而探讨可表达上述效应的尺度律。所探讨的微结构包括晶粒和微裂纹。所列举的材料包括: 纳米晶体材料、纳米复相陶瓷、单晶体、脆性材料、薄膜材料等。

1 引言

人类对自然界的认识涉及到宇观(宇宙尺度)、宏观(地球尺度)、宏观(人体尺度)、微观(微米尺度)和纳观(纳米尺度)等层次, 力学在每一层次都各有其研究前沿。复杂的力学行为牵涉到多个主导层次的关联问题。力学工作者既应关注同属连续介质这一物质层次的从宇观、宏观、宏观到微观的关联, 也应关注原子—分子—团簇—细观组态群体的跨物质层次的力学现象。

固体变形直至破坏, 跨越了从原子结构到宏观的 9 至 11 个尺度量级^[1]。细观结构上的细微缺陷, 在力场的作用下, 往往会非线性地涌现为整体的破坏, 这使得科学家难于预测破坏性的突发灾难、难以设计材料微结构的力学效应。尺度效应是反映材料宏微观跨层次性的核心科学问题^[2]。尺度效应常源于不同的物理学机制。这一多源特征既赋予尺度效应的复杂性, 又为其蕴藏了丰富的研究内容。因此成为力学工作者在 21 世纪的一项重要工作。

关于微纳米结构的尺度效应研究受到三项技术发展的推动。其一来自于材料科学与工程, 尤其是对更强固、更轻、更韧和更具有多功能性的材料需求^[3]。其二来自于信息技术的飞速发展, 包括以 NEMS 为代表的微电子器件, 以光绝缘体、光导体、光半导体为代表的光电子器件, 多尺度力学行为将对其能带结构有重要影响^[4, 5]。其三来自近年来纳米科学与技术发展的推动^[6]。

本章从两个方面探讨材料的尺度效应与尺度律。第二节讨论当逐步逼近裂纹尖端时, 由于小尺度造成的变形由连续至离散化特征, 以及它对材料的断裂行为所产生的影响。第

本节讨论由材料微结构的特征尺度和统计分布所造成的尺度效应，并进而探讨可表达上述效应的尺度律。所探讨的微结构包括晶粒和微裂纹。所列举的材料包括：纳米晶体材料、纳米复相陶瓷、单晶体、脆性材料、薄膜材料等。

2 裂纹尖端场的尺度效应

2.1 裂纹尖端场的多尺度结构

断裂过程可分为解理、准解理和延性断裂三类^[1]。解理断裂过程可由 Griffith 理论精确地表达。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^[7]、材料的率敏感性^[8]、或纳米裂纹形核造成。纳米裂纹的形核机制包括裂尖无位错区的形成、位错在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^[9, 10]。延性断裂更为复杂，它由孔洞形核、长大及与主裂纹的汇聚所表征。

2.2 宏观裂纹尖端场的交互作用

认识材料断裂过程的关键在于韧脆转变。实验表明固态材料在低温时常呈现为脆性，而韧性可随温度升高而大大增加。从低温脆性段到高温韧性段之间有一个韧性快速变化区，其定量表征为韧性—温度曲线上的韧脆转变温度。除温度外，应变率也影响断裂韧性。高应变率下易于导致脆性断裂。温度可表征原子聚集体构形变化之可动性，可动性越高，固体容纳变形场的能力就越大。应变率则定义对材料施加变形的速度。两者间的竞争导致材料韧性的上述行为。

诸如位错、微裂纹、相变区和畴变区等不均匀微结构会与裂纹尖端形成丰富的互动作用。对裂纹尖端的屏蔽即为一例。在诸种不均匀微结构作用下，实际的近尖端应力强度因子 K_{tip} 可低于远场应力强度因子 K_{∞} 。裂纹屏蔽的效应可用计算互动应力强度因子或 J 积分的方法来定量表征。

2.3 裂纹与位错的交互作用

自裂纹尖端的位错发射是制约材料韧脆转变的关键事件^[11, 12]。许多学者探讨了位错对裂纹尖端的屏蔽作用。由能量最低的要求可确定裂尖处的位错组态，即塞积位错的平衡个数和诸位错的平衡位置^[10]。位错屏蔽呈现三种可能的响应：解理断裂过程，这时不产生位错发射；准解理断裂过程，表现为一定量位错发射后的跟进解理断裂；延性断裂过程，解理由不断位错发射所抑制。



图 1 在主裂纹尖端 A 前方 B 处出现纳米裂纹^[9]

在准解理过程中，纳米裂纹的形成是一个具有特色的多尺度行为。图 1 表达了 Chen 等^[9]对纳米裂纹形成的实验观察。主裂纹自左侧中部进入图 1 的观察框。大写字母 A 标记了主裂纹尖端的位置。虽然从主裂纹尖端已经发射出众多位错，但裂纹前方仍存在着一个无位错区。当主裂纹受载时，一个尺度为 10 nm ~ 20nm 的纳米裂纹在主裂纹前方 B 处出现。Zhu 等^[10]通过位错力学分析首次诠释了在钝化的主裂纹前方存在拉应力的峰值区，由此触发了纳米裂纹的形成。准解理断裂过程可由主裂纹钝化、位错发射、主裂纹前方应力峰形成、纳米裂纹形核、主裂纹与纳米裂纹串接这一多尺度过程的不断重复所刻画，不妨称之为位错塞积驱动的准解理断裂过程^[10]。

Peierls 构架

位错形核的静态理论以 Peierls-Nabarro 模型为里程碑，其发展见文[13-20]。Peierls 位错模型为韧脆竞争机制提供了更合理的解释。一个 Volterra 位错表示在位移场上产生一个 Burgers 向量的跳跃；而一个 Peierls 位错表示在裂纹顶端点阵错配的逐渐累积，且累积量通过晶面作用律与点阵面的传递力所联系。采用 Peierls 构架来研究自裂纹尖端位错发射，可消除位错核半径这个不确切的参数，并从周期点阵的角度上提供了一个合理的位错芯结构。Peierls 位错模型与量子力学的结合还可给出位错芯尺寸。在应力-滑移量曲线下，从零滑移至临界滑移 $b/2$ 下的面积即为发射一个 Peierls 位错所需要做的功。该功称为不稳定堆垛能 γ_{us} 。在 Peierls 构架下，韧脆转变成为 Griffith 断裂能（表征解理）和不稳定堆垛能（表征位错发射）间的竞争。

对不稳定堆垛能有多种估算方法。最简单的方法来自于 Frenkel 估算，即假定晶面作用律为正弦曲线。其结果为 $\gamma_{us}^{Frenkel} = \mu b^2 / 2\pi^2 h$ 。在镶嵌原子模型^[21]下对不稳定堆垛能的估算值约为 Frenkel 估算的 70%。更精确的计算可在密度泛函的框架下由简化的量子力学计

算给出。对 BCC 晶体，螺位错芯的纳观结构呈三瓣台阶状，具有非共面纳观位错芯结构。Ngan^[22]发展了一种空间上等三分位的 Peierls-Nabarro 位错理论来描述其结构。

位错瞬态发射与速率效应

自裂尖的位错发射具有瞬态特征，该特征丰富了韧脆转变的行为。分子动力学计算表明^[23-25]自裂纹尖端发射位错的速度可达到剪切波速的三分之一左右。对一类材料，Tan 与 Yang^[26]证明位错发射过程从本质上是瞬态的，位错通过一个原子运动的灾变过程自裂尖形成，该过程突然释放的能量使位错处于瞬态运动状态。

静态位错发射理论认定材料响应只能在韧性和脆性中二者居一：不是裂纹的解理延伸；就是由位错发射而止裂。从而忽视了应变率对其的影响。实验表明材料的韧脆转变受到应变率的强烈影响。位错发射的瞬态特性导致一个有趣的情景，即要想让形核的位错逃逸出裂尖，就必须有一定量的过射。于是，便存在一个位错发射的逃逸速度。仅有哪些高于逃逸速度运行的位错才可能离开裂纹尖端，低于逃逸速度的裂纹将会被裂尖重新捕获。然而，形成一个高速运动位错则需要更高的激活能。Yang 等^[27]从连续介质力学的角度上讨论了这一问题。当加载率变化时，解理和位错发射的响应各有不同。材料的解理行为是一个由 Griffith 型能量准则所制约的断键过程。许多实验和原子模拟^[24]表明：该过程仅与裂纹顶端解理面上的应力分布有关。与此相反，激发一个瞬态位错的载荷水平却依赖于加载率，见图 2。该图绘出了在静态和动态发射位错时所需要的激活能。施加的能量释放率越大，所需要的激活能就越小。图 2 中的诸曲线表明位错发射的速度越快，其激活能就越高。

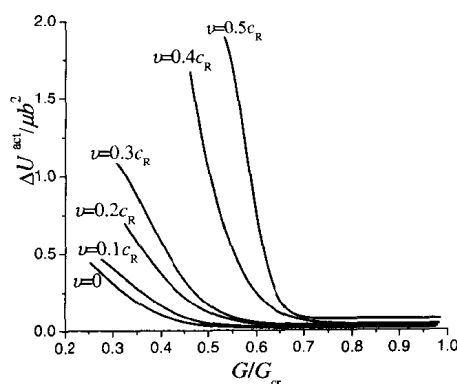


图 2 二维归一化激活能 $\Delta U^{\text{act}} / (\mu b^2)$ 随 G/G_{cr} 的变化，位错运行速度分别为 $v/c_R = 0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$ ^[27]

上述结果可用来解释韧脆转变的速率效应。在缓慢加载下，即便从裂尖的位错发射需要高额的激活能，也有充裕的时间来进行位错发射。因此，当外加应力强度因子显著低于其解理断裂值时，便得以实现位错发射。在快速加载下，有限的加载周期仅允许低激活能的位错自裂尖逃逸。为降低激活能垒，只能提高外加的能量释放率。于是，瞬态位错发射

的载荷水平便与加载率密切相关。快加载有利于解理或脆性断裂，慢加载有利于位错发射或韧性断裂。材料在低加载率下的韧脆转变来源于激活位错所能利用的时间，从而使位错可挣脱激活能垒来实现自裂尖的瞬态逃逸。

2.4 云母加载下的裂纹尖端原子像

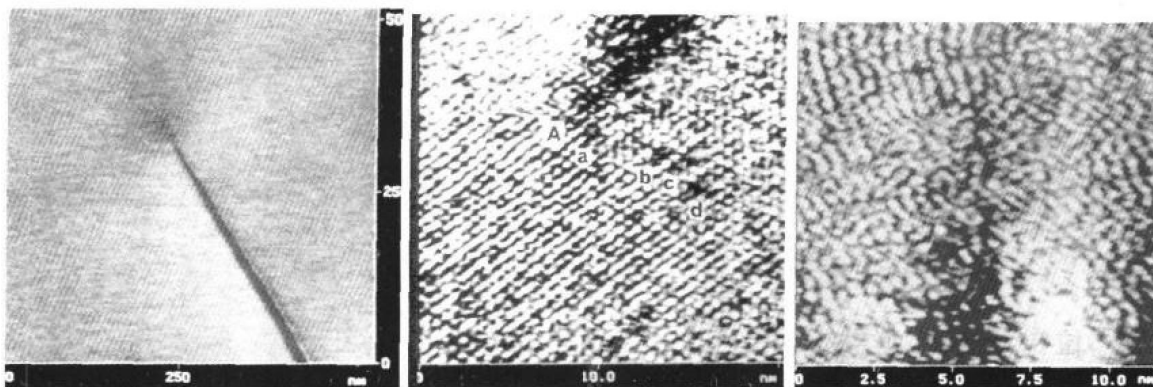


图3 云母加载的裂尖原子像^[28]

北京科技大学课题组用原子力显微镜 (AFM) 研究云母加载裂尖原子像^[28]。研究发现：加载前裂尖原子排列规则；加载后裂尖前方 10nm 区域内原子排列混乱；在 100nm 范围内畸变较大，形成一个凹坑区。见图 3。

2.5 纳米云纹法

云纹干涉法可达到 3000 线/mm 的栅线密度，即亚微米级分辨率。Kishimoto^[29]提出的电子束云纹法可达到 10000 线/mm 的栅线密度，是目前能达到的最高水平。Dai 和 Xing^[30]最近提出纳米云纹法，利用晶格点阵作为云纹法的光栅。由于晶格常数在 0.2nm 至 0.4nm 量级，因此光栅的位移分辨率可达到亚纳米的量级。兼之以条纹倍增技术，纳米云纹法可望达到 0.1nm 的位移分辨率。纳米云纹法在透射电镜下以高倍率拍摄晶格像，在照相底片上形成线密度为数十线/mm 的晶格像。用相同栅线密度的标准单向光栅与晶格像叠合，使光栅的栅线方向沿指定晶向。将叠合后的标准单向光栅与晶格像置于 Fourier 滤波光路，选取第一级衍射谱，在滤波孔后可以观察到亮暗相间的云纹，代表垂直于单向光栅的等位移线。

对应于 y 方向位移可用 $u_y = N_y p / M$ 进行计算，其中 N_y 为条纹级数， p 为参考栅的节距， M 为电镜放大倍率。原子的层间滑移量可表示为 $\delta = lb / L$ ，其中 l 为层间滑移引起的云纹错位量， L 为云纹间距， b 为 Burgers 矢量的模。也可以用云纹图识别位错，条纹相交与中断之处即为刃位错的发生地，见图 4。

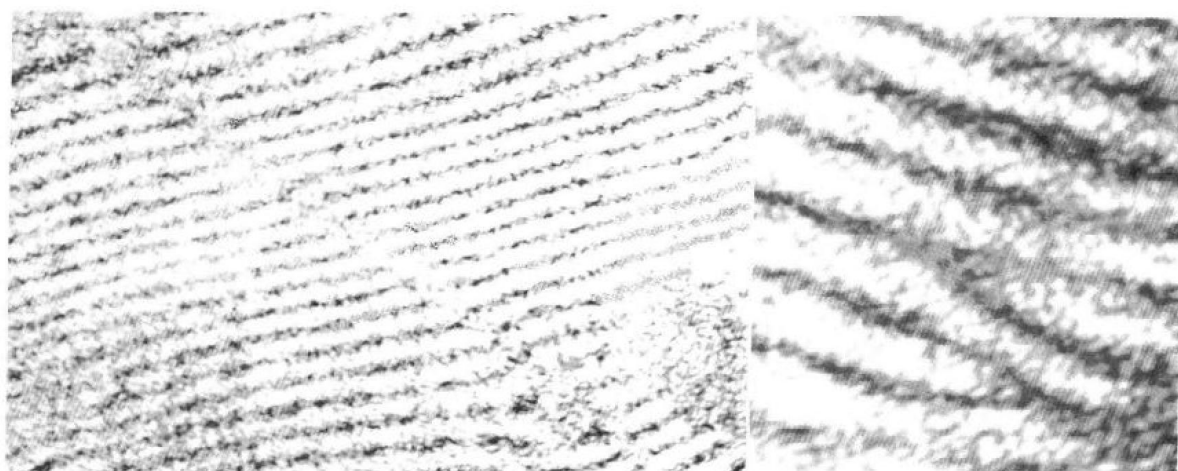


图4 纳米云纹法观测的堆垛层错（左图）和位错偶（右图）^[31]

2.6 位错场的纳观结构

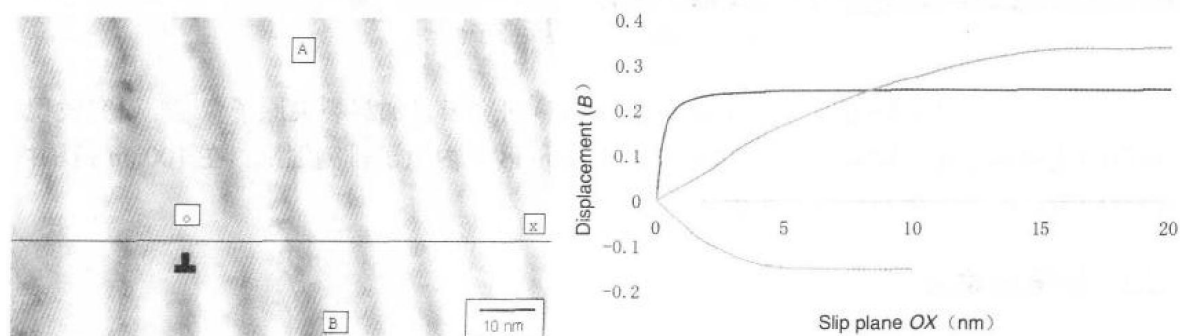


图5 位错芯的纳观变形场

左图：纳米云纹法所得的水平位移条纹图；右图：与 P-N 位错解的比较^[31]

位错力学场的纳观结构包括了丰富的内容。对 FCC 晶体来说，可由共面的 Peierls-Nabarro 理论来分析其位错芯结构。邢永明等^[31]利用纳米云纹法量测位错芯的变形场，见图 5 左图。该变形场（上下两条线）与 P-N 位错（中间变化较陡的线）的预测并不定量一致，见图 5 右图。对并发的 Peierls 位错，发现了反常的长位错芯。

2.7 硅单晶体的纳观裂纹尖端场测量

单晶硅具有良好的晶格结构和狭窄的韧脆转换温度。有鉴于此，在纳观断裂的实验研究中多以单晶硅为研究的背景材料。实验^[32]从 Si 单晶{111}面的片状样品上截取试样，机械减薄至 30 μm 厚，再经离子减薄至穿孔。在离子减薄过程中，局部残余应力在孔边造成的微小裂纹可视为预制裂纹。裂纹尖端呈纳米级尖锐，用螺旋测微仪沿径向对透射电镜载物台的铜网施加径向 2 μm 的预压缩位移，然后把试件用胶粘结于铜网上，待胶固化后卸掉

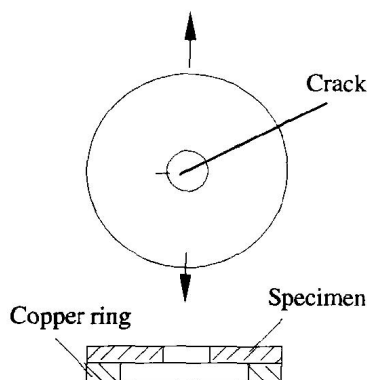


图6 单晶硅断裂试件的制备

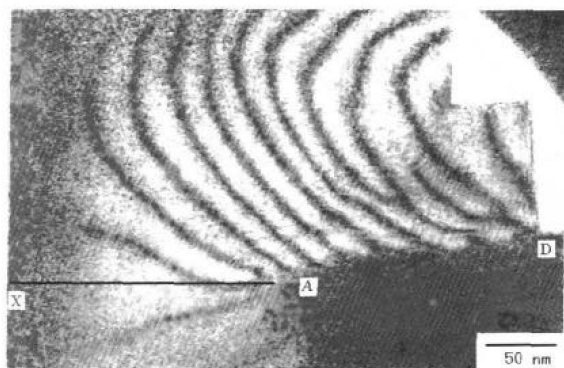


图7 裂尖的云纹图^[32]

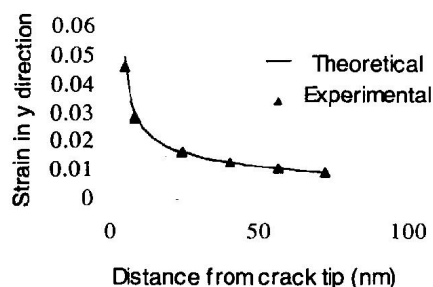


图8 裂尖的应变分布^[32]

加在铜网上的载荷。利用铜网的回弹力给单晶硅薄膜施加垂直于[110]晶向的拉伸载荷，形成I型裂纹见图6。裂纹导向于沿极易解理的[110]方向。图7为裂纹尖端的云纹图。裂纹位于水平位置，裂尖从右向左自D点扩展到A点。在D点斜上方有若干处云纹条纹中断点和交汇点，对应于位错的芯区。这表明，伴随着载荷的增加，在裂尖附近的滑移系上开始发射位错，发出的位错滞留在裂纹附近，并随即发生沿裂尖的解理扩展。裂尖前方应变分布规律对于研究纳观破坏机理至关重要。由图7可测得裂尖前方沿AX线的y向应变，绘于图8。测量的区域逼近至裂尖4nm处，比以往的裂尖位移量测结果细化了约2个量级。该图将测量结果与线弹性断裂力学理论预测结果做了比较。在平面应力状态下的K场应变为 $\varepsilon_y = K(1-\nu)/(E\sqrt{2\pi x})$ ，硅单晶的杨氏模量和泊松比分别为 107GPa 和 0.3。这里 $K \approx 1.21\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$ 为I型裂纹应力强度因子，与单晶硅在[110]向的断裂韧性测量值 ($0.8\text{MPa}\sqrt{\text{m}} \sim 1.2\text{MPa}\sqrt{\text{m}}$) 相近。由图8可见，理论值与实验值吻合较好；裂尖应变可以达到5%，所对应的面内等双轴应力高达7.6GPa。当I型裂纹沿[110]方向且裂尖为纳米级尖锐时，从裂尖只有少量位错发出。观察到的微观破坏机制为：发射少量位错后裂纹解

理扩展以及在发射完整位错前裂纹解理扩展，前者对应于缓慢加载后起裂，后者对应于裂纹阶梯式快速扩展。

为了凸显位错发射，可将图 7 所示的云纹图叠加载波条纹来得到图 9 所示的云纹图。载波条纹的叠加是由改变参考栅频率，或在参考栅与晶体照片之间进行刚性转动而实现的。图 9 在 y 向叠加的载波虚应变为 $\varepsilon = -0.035$ ，刚体转动为 $\alpha = 0.011$ 弧度。从所示的云纹图中可观察到两类位错：一类是位于 D 点上方的完整位错；另一类为延展而成的部分位错。部分位错由拐折为 $b/3$ 和 $2b/3$ 的两部分连接而成。

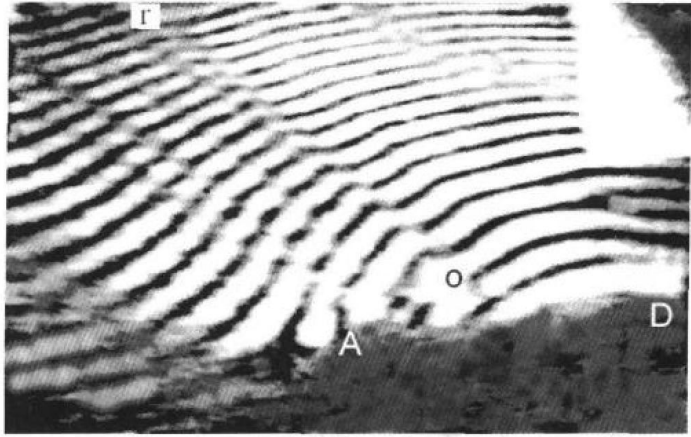


图 9 沿着 or 线的 Peierls 型位错（带有负载波条纹）^[32]

2.8 离散体系的裂纹尖端场

裂纹尖端场的原子级离散特征可采用分子动力学方法来模拟。扩大计算规模的一个可能办法在于将原子模拟与连续介质远场相耦合，其典型代表为“柔性边界方法”^[33]。该方法将包含缺陷的原子区镶嵌在一个或者多个外部区域中，后者的自由度随一定规则而调整。如位错或裂尖处的连续介质弹性解可用于建立围绕该类缺陷的原子构型。Thomson 等^[34]对整个系统使用格林函数。在格林函数方法中，晶格原子通过短程非线性势与近邻原子相互作用，算出晶格中的静态缺陷结构。采用分层次的计算方法，先算完整晶格的格林函数，再算更复杂的缺陷晶格，最后对非线性结构问题进行收敛逼近。

宏观、细观、纳观诸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、纳观特征的区域）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；细观和纳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一转换和无缝连接技术。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和多层次的逐级时间更新技术。对不要求具有速率过程（如位错移动、空位扩散等）预测能力的问

题，也可以采用各种原子冻结技术来实现加速计算。Kohloff 等^[35]提出一种“原子—有限元耦合方法”，通过一排或者多排包含数个原子的体单元所形成的过渡区将内部原子区域和外部有限元区域耦合起来。这些体单元的顶点坐标随各体单元内所含原子的应力和位移平均值而更新。Yang 等^[23]、Tan 与 Yang^[24, 25]发展了宏细纳观三层嵌套模型。其构成方案为：(a) 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；(b) 用弹性基体加离散位错来描述细观区行为，位错的运动由位错动力学曲线支配；(c) 在纳观区与细观区的交界上采用原子/连续介质交叠带和缺陷结构的透越技术，以实现裂尖发射位错的跨层次传递；(d) 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；(e) 在纳观区与细观区的交界上采用位错吸收条件。该原子点阵/连续介质的嵌套算法还可以模拟界面结构与形貌。

断裂过程的纳观层次研究在于探讨断裂分离时原子运动特征^[26, 36, 37]。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；探讨裂尖原子运动形态与材料韧脆转变行为的关系。对裂纹尖端原子的非线性运动的研究结果揭示出裂尖原子运动的突变行为与混沌现象。现已发现：(1) 在准静态解理断裂前会发生原子混沌运动的前兆^[36]，该混沌过程所需的 K 场激发值仅为准静态下理论断裂韧性值的一半；(2) 位错的发射也具有混沌特征，并形成位错云的时空结构^[26]，裂尖位错发生混沌所需的应力强度因子值亦仅为准静态理论值的一半，位错在时空位置上飘忽不定的概率分布造成位错云；(3) 材料韧脆转变取决于解理与位错发射两种混沌模式在时间演化和空间传播的竞争。

2.9 纳观裂纹的愈合

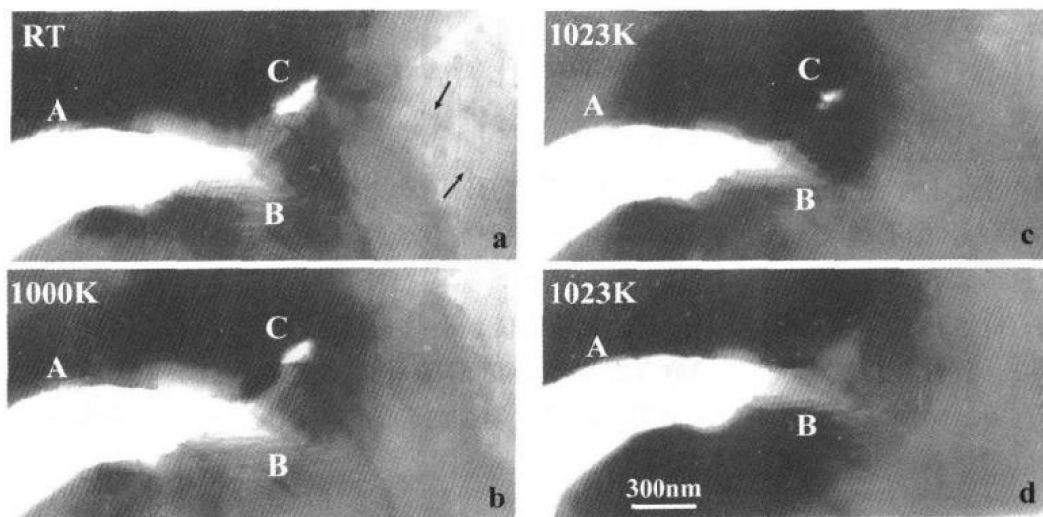


图 10 Fe 单晶裂纹试件的热愈合^[38]

微裂纹愈合的 TEM 研究

北京科技大学课题组利用 TEM 来研究微裂纹愈合^[38]。Fe 单晶在 TEM 中拉伸至出现 300nm 孤立的微裂纹。卸载后放在 TEM 的加热台上加热并原位观察。观察结果见图 10。图 10a 表明：主裂纹 AB 前方有一个 300nm 的微裂纹 C，箭头表示位错。加热至 950K 裂纹未改变。但升温至 1000K，微裂纹 C 开始愈合，见图 10b。加热至 1023K，裂纹进一步愈合，见图 10c。在 1023K 保温 5 分钟，裂纹完全愈合，见图 10d^[38]。

图 11a 表明，在主裂纹侧边存在两个微米尺寸的裂纹 OP 和 ST。加热至 863K，两个微裂纹开始愈合，见图 11b。加热至 973K，微裂纹 OP 完全愈合，而微裂纹 ST 尚未完全愈合，见图 11c。

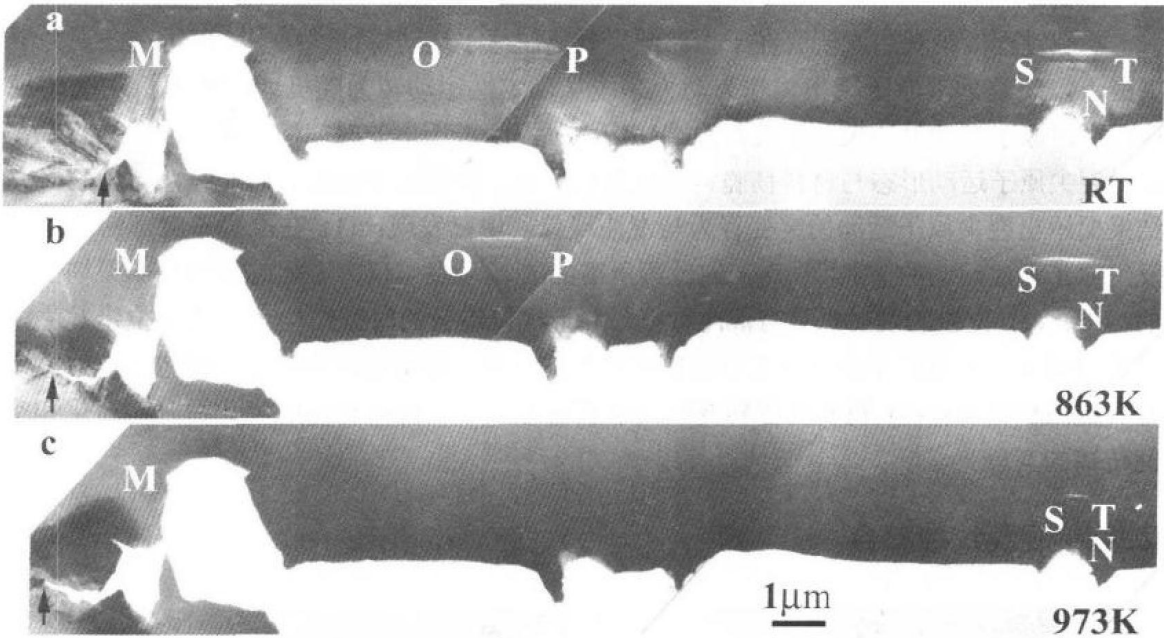


图 11 Fe 单晶裂纹试件的热愈合^[38]

微裂纹愈合的分子动力学研究

该课题组还对 Al 和 Cu 微裂纹愈合过程进行了分子动力学研究^[39-41]。Al 和 Cu 模拟加热至 700K 时，中心裂纹不发生愈合，见图 12a。但加载至临界温度（800K-850K）时，裂纹开始愈合，与此还伴随着位错的产生和运动，见图 12b。裂纹完全愈合后产生大量 Shockley 位错和 Frank 位错，见图 12c。加压也能使裂纹愈合，同时伴随着位错的产生和运动。加一个小的压应力可使裂纹愈合的临界温度下降。使裂纹愈合的临界值温度和裂纹面取向有关。如预先在晶体中引入位错，则可使裂纹愈合的临界温度或临界压应力下降，引入的位错愈多，影响愈明显。