

# 断裂过程的细观力学与纳观力学

杨 卫 谭鸿来

(清华大学工程力学系)

[摘要] 宏观断裂力学 40 余年的发展有其辉煌的成就,也有着不可逾越的局限性。本文探索打开断裂过程区的黑匣子之更深层次的研究——即细观断裂力学与纳观断裂力学。这类研究的开展将可能使控制宏观氛围的力学参量与断裂物理机制和损伤几何图象实现定量的结合。

## 一、宏观断裂力学的成就与局限性

### 1. 裂纹尖端奇异场与断裂参数

宏观断裂力学的主要成就之一在于:对若干类典型材料模型和裂纹运动规律,建立了控制裂纹尖端附近某一环带域的特征奇异场。如弹性介质裂尖区的 K 场(准静态、动态,均匀材料、界面,各向同性,各向异性),幂硬化介质静止裂纹的 HRR 场,幂硬化介质扩展裂纹的高-黄场,率敏感材料静止裂纹的 RR 场,扩展裂纹的 HR 场,等等<sup>[1]</sup>。这些裂尖奇异场的共同特征是:(1)它们在裂尖附近某一环带区占优,从而提供了一个控制裂尖断裂过程的力学场氛围;(2)对大多数裂尖场来说,该力学氛围的强弱受单参数控制,该参数概括性地录入了载荷信息、裂纹几何信息及部分材料信息;(3)往往可用渐近分析的方法来一劳永逸地揭示这类奇异场的空间构造。上述特征使裂纹尖端奇异场的研究成为宏观断裂力学的核心命题,并得以建立具有良好操作性的宏观断裂准则。

然而,裂纹尖端奇异场的确立并不总是成功的,下述典型问题说明了某些在奇异场研究方面不可逾越的困难:

#### (1) 有效域问题

在很多情况下奇异场得以占优的有效域出现残缺。对弹塑性双材料界面裂纹问题和准静态弹塑性扩展裂纹问题,大规模有限元的详尽计算表明:裂尖奇异场的有效域即便存在,也是很小的。这种微弱残缺的氛围能否控制裂尖的断裂过程是令人怀疑的。

#### (2) 自治场问题

在若干典型情况下(如以率敏感扩展裂纹的 HR 解为代表一大类弹塑性扩展裂纹场),渐近场正则条件的引入使裂尖奇异场出现自治(autonomas)特征。这时,裂尖断裂过程的力学控制氛围与外载条件和几何因素无关,无法根据裂尖奇异场来建立断裂准则。

#### (3) 非裂纹型尖端

本文于 1993 年 4 月 1 日收到

裂纹顶端所出现的塑性大变形与损伤可能根本改变裂尖形貌<sup>[2]</sup>,从而破坏了推导裂尖顶端奇异场的前提。

## 2. 断裂判据

现有的宏观断裂准则可分为三类:(1)具有热力学意义。基于流入裂纹尖端过程区能量的准则,如能量释放率 $G$ ;(2)具有力学意义。基于裂尖过程区氛围强度的准则,如应力强度因子 $K$ 准则;(3)具有变形几何学意义。基于裂尖形貌的经验性、半经验性准则,如 $COD$ , $CTOD$ , $CTOA$ 等准则。 $J$ 积分准则兼具上述三重意义。

然而,上述准则仍不是具有断裂物理意义的准则,力学家们也很难清晰地勾勒出它们与断裂过程区的物理分离过程(即价键断裂过程)的明确对应关系。上述准则与物理断裂过程的对应是模糊的,也很难确定是否组成了充分必要之联系。前两类准则只能确定某种断裂趋势,即注入的能量或/和外部力学环境可促成断裂,但仍难于判定断裂是否即刻发生。而后一类判据则唯象学意味更浓,也就更难建立它与真实断裂过程的科学联系。

## 3. 断裂过程区

在宏观断裂力学中,断裂过程区是一个不可捉摸的黑匣子。根据对断裂过程的某种预计:如大变形、损伤、细观结构等,宏观力学家们可大致估算出这一断裂过程区的尺寸。更重要的是:在若干成功的例子里,可由宏观断裂力学的方法确定出该断裂过程区的氛围。然而,黑匣子内所发生的断裂事件却无法用宏观断裂力学的理论加以描述。

断裂过程区研究的第一个基本问题在于建立过程区内的本构关系。首先,过程区内的损伤过程可能严重地影响到其平均本构关系,因此考虑软化的本构方程和损伤演化方程便成为必需。此外,在更靠近裂尖的尺度上无法将损伤现象视为连续分布场,而需赋予它们真实的离散几何图象。最后,当非常靠近裂尖时,连塑性行为也不应视为连续的,而应看做离散的位错在弹性基体中的运动。

断裂过程区研究的第二个基本问题在于确定裂纹顶端的轮廓。该轮廓是材料裂尖处塑性大变形和损伤的共同产物,其几何形状带着材料细微结构的印记。

断裂过程区研究的第三个基本问题在于阐明过程区根部的分离条件。这一分离条件需以应力作用下的价键分离为基础,兼顾裂纹顶端轮廓、细观损伤几何和细观韧带失稳。

综上所述,宏观断裂力学40余年的发展有其辉煌的成就,也有着不可逾越的局限性,以下两节探索打开断裂过程区的黑匣子之更深层次的研究——即细观断裂力学与纳观断力学。

# 二、细观断裂力学

## 1. 细观力学与纳观力学

科学文献中常见的术语“微观”包含着若干具有不同力学分析特征的层次。从最粗糙的意义来说,可将其划分为“细观”与“纳观”两类范畴。细观力学这一提法源于钱学森先生的倡导,它旨在用连续介质力学的方法去研究具有细观结构固体之变形及破坏行为<sup>[3,4]</sup>。细观力学的应用尺度一般在微米上下,这时英文微米(micron)与细观力学(micromechanics)有很好的关联。而纳观力学(nanomechanics)则深入到更微细的纳米层次(nanoscope)。纳观力学的研究对象可以是纳米晶体、纳米材料,但更通常是对一般固体材料在纳观尺度下力学行为的研究。而这一研究将是90年代乃至21世纪固体力学横跨材料科学而与固体物理相结合

的学科前缘。

## 2. 计及损伤的断裂理论

宏观断裂力学的局限性促成了损伤力学自70年代末的兴起。连续介质损伤力学(CDM)力图唯象地表达断裂过程区内的材料损伤行为,因缺少损伤物理与损伤几何内涵而声势渐弱。但它在实际问题上较易应用,且造成了力学家们扬弃完整连续介质模型的观念性突破。与此同时,细观损伤力学飞速发展<sup>[4]</sup>,其学科优点主要在于对“损伤”赋予了真实的几何形象和具有力学意义的演化方程。作为宏观断裂先兆的四种细观损伤基元是:微孔洞损伤与汇合;微裂纹损伤与临界串接;界面损伤(含滑错、空穴化与断裂);变形局部化带与沿带损伤。

宏观裂纹的断裂过程区中嵌含有一个细观损伤区,在该区内的损伤发展和物质分离过程分别受损伤演化过程和临界损伤条件所控制。细观损伤力学用连续介质力学的方法研究具有细观损伤结构的固体材料,并运用均匀化的方法提炼出含损伤宏观本构方程与损伤演化方程<sup>[3-5]</sup>。计及损伤的断裂理论可实现下述成果:

### (1) 模拟断裂方式

在Gurson类模型下已成功地模拟出各种光滑与缺口试样的断裂方式(参见文[5]中第8章),如光滑单位圆试棒的断口可模拟为剪锥杯状,而光滑平面应变拉伸试件的断口为斜坡面,成功地解释了大量实测结果。

### (2) 模拟断裂路径

力学家们可利用损伤致裂理论定量表达二相粒子、界面等材料微细结构对断裂路径的控制,并进而阐述与此相关的材料增韧力学。

### (3) 模拟裂尖形貌

损伤生成的裂尖形貌千姿百态。据Yang, Guo, Tan<sup>[2]</sup>所进行的大变形超弹性/粘塑性/各向异性损伤有限元详尽计算,由改变Bauschinger型各向异性损伤参数,可模拟出尖劈、钝劈、超钝化、矛头、双分叉、三分叉等6种裂尖形貌。

## 3. 裂尖区的离散塑性理论

从微米或介于微米与纳米之间的尺度来看,弹性变形行为仍可视作连续的,而塑性变形必须处理为离散的。也就是说,裂尖区的塑性变形可视为在弹性连续介质中所嵌含的间距为微米量级之离散位错的运动行为。

在裂纹尖端附近的位错可分为两类:即自裂尖发射的钝化位错和裂尖可能会与之遭遇的背景位错<sup>[6]</sup>。后者的分布间距为微米量级,而与裂尖遭遇后所产生的钝化量却低于纳米量级。所以,若自裂尖源源不断的位错发射机制受到有效抑制的话,裂尖将保持纳米级尖锐。位错在固体中的运动及其聚集模式的变化可由位错计算力学来模拟。其基本要素为:(1)位错段(或位错环)自身场的解析解;(2)强奇异性剔除计算技术;(3)位错线段在分解剪应力驱动下的运动方程;(4)位错形核的能量涨落控制及位错核设置;(5)位错群体图象的数值模拟。

在上述模型下可对固体材料的断裂属性加以分类。若裂尖发射的钝化位错受到抑制,或解理断裂先于裂尖位错发射而发生,则出现典型的脆性解理断裂。反之,若裂尖源源不断地发射位错而造成钝化,则呈现典型的韧性断裂。介于这两者之间的一个有趣的情况是:在裂尖附近的位错驱动力具有一个(不稳定)凸峰,这时该凸峰的全部位错均被驱赶出境并阻滞在其外围,而域内偏裂尖一侧的位错全被吸入裂尖表面。于是该区域(在经历了一定量的位

错扫掠后)的即时响应表现为弹性,形成了塑性区包围下嵌在裂尖附近的瞬态弹性核,在文献中称为无位错区(DFZ)。材料的断裂是由弹性核的解理断裂所造成,且弹性核开裂后又可以在重新在扩展裂纹形成DFZ并继而断裂。这一过程可不断重复,形成准解理断裂形貌。

在连续塑性区中嵌含小尺度(几百个纳米至几微米)弹性核的准解理断裂过程还可以在裂尖难于连续发射位错的场合下观察到<sup>[6]</sup>(如陶瓷/金属界面层)。这时弹性核内的应力在很大程度上取决于裂尖的钝化半径,而外围塑性区的存在对弹性核内的应力赶快屏蔽作用。该模型的优越之处在于把断裂过程与具有物理背景的材料解理强度相联系,从而实现断裂力学与断裂物理的初步贯穿。

#### 4. 界面层断裂理论

界面层断裂理论是细观断裂力学取得成功的一个范例。传统的数学界面模型导致近尖端处解的病态,即应力的振荡与位移的相互贯穿。Rice所提的“小范围接触”模型尽管绕过这一问题,但其断裂混合度的定义(乃至于界面断裂准则的建立)却依赖于一个无明确定义的长度量。界面层断裂理论假定从一相至另一相的界面结构呈连续过渡,或界面呈曲折状,于是可用一个物理界面层(或界面相)来代替数学界面。该模型不仅能避免应力振荡、位移相互贯穿等病态行为,还可以唯一确定出稳定的近尖端断裂混合度,从而为界面层设计,近尖端断裂混合度调控和材料增韧提供了用武之地。

### 三、纳观断裂力学

#### 1. 纳观力学的引入

对固体断裂过程的本质理解必须在细观力学与纳观力学的结合角度上才能实现。细观破坏过程的四种基本构元(孔洞、微裂纹、界面失效、变形局部化带)的起源和演化描述必须在纳观尺度才能完全阐明,这时其破坏状态方程能够借助于物理失效法则(如原子结合力曲线)实现封闭。也就是说,从宏观到细观再到纳观的层次深入将导致从唯象认识学到损伤机制学再到断裂物理学的概念突破。由于近几年来对细观力学认识的深入,并由于连续介质/粒子嵌套构形概念的提出,以及由于大规模计算手段的发展、高分辨率电镜技术和单原子探测技术(如隧道扫描电镜、原子力显微镜)的突破,使这一固体力学的学科进展在近几年内成为可能。

#### 2. 纳观断裂力学的研究方法

纳观断裂力学体现了从经典的固体力学向固体物理层次的深入。它扬弃了宏观力学的连续介质假设,直接深入到原子层次,通过研究粒子在势函数作用下的运动来讨论固体在纳观尺度下的断裂行为。

纳观断裂力学认为:晶格密排面的分离导致材料解理断裂;密排面沿晶格方向的错移导致由裂尖钝化而造成的韧性。它运用分子动力学和蒙特卡罗方法,模拟纳米量级空间尺度上的细微结构和飞秒至皮秒量级时间尺度上的原子运动,再现破坏的纳观过程。纳观断裂模拟的真实性依赖于原子间作用势描述的准确程度。以往常用原子对势来描述原子间的键合。但对势不能确切表达弹性模量 $C_{12}$ ,  $C_{44}$ ,且当原子所处环境与规整晶格排列有偏差时,对势表达是不充分的。对原子对势理论的一个有效的修正是Daw和Baskes提出的原子镶嵌方法(Embedded Atom Method)。该方法在对势基础上,引入了原子所处位置的电子密度对势能的影响,

考虑了原子周围的晶格环境,为描述微观缺陷下原子运动提供了有效工具<sup>[7]</sup>。

### 3. 均相固体断裂的纳观过程

研究内含一条原子尺度尖锐裂纹的均相固体,在边界层裂纹几何构形下计算模拟不同混合度时的裂尖破坏形貌。在原子模型中可以清晰地看到位错在离散基体中的发射和解理断裂两种相互竞争的机制,以及由此演变而成的裂尖形貌。计算模拟表明,纳观原子尺度的裂尖形貌和宏观的裂尖形貌有某种自相似的性质,而不同的纳观裂尖形貌对应于不同的宏观断裂行为。

### 4. 界面断裂的纳观过程

首先考察理想的平直物理界面,这时两相材料之间没有相互扩散混合。用纳观力学的方法研究理想界面内的裂纹,模拟同一 $K$ 值、但不同混合度 $\psi$ 下的加载。该纳观原子模型得以揭示一种双材料在不同混合度下可能表现出不同韧脆特性。另外,当加载速率不一样时,破坏的微观图象也不尽相同。在慢加载时,其裂尖演化过程表现为位错滑移或解理断裂,或两者兼而有之;而快加载时,破坏的过程不仅表现为以上两种基本形式或其叠加,还可能在某一滑移带局部出现空位团等纳观损伤<sup>[2]</sup>。

实际的界面总有一定的界面结构。综合应用蒙特卡罗方法、原子交换方法、分子动力学方法,可计算模拟实际界面形成的工艺过程,即再现两种材料加热混合后的冷却凝聚过程或在冷基底上的第二相热沉积过程。通过模拟刚冷却时粒子的快速热运动和碰撞能量交换,以及冷却至一定程度后的长时间粒子蠕动过程和室温下的平衡过程,可得到锯齿状的界面结构。锯齿的倾角及转向交错与晶格取向有关,高度为几个纳米,且具有一定的分形特征。通过这种锯齿状界面上两种材料形成一种犬牙交错的接合层,这与铝/碳化硅晶须界面在清晰电镜下的原子尺度观察结果相一致。

若沿着该锯齿晶界开出一条裂纹并经弛豫平衡,必然比理想界面裂纹更接近于真实情况。这时,沿晶格取向的齿状界面必然对裂纹尖端位错的发射有很大影响。改变混合度 $\psi$ ,在某些条件下界面对位错发射起诱发形核形用;而在另外一些条件下,硬脆材料相中隆起的齿状峰则可能抑制低界面处位错的发射。随着 $K$ 场加大,裂纹尖端附近的裂纹上下表面发生运动。当近尖端混合度配置基本为张开型时,界面的锯齿形状无碍于上下裂纹面的移动;而当近尖端混合度配置以滑开型为主时,锯齿界面为会发“闭锁”现象,对裂纹尖端场造成屏蔽。关于界面韧度的大量实验观察表明,断裂韧性随着混合度的上升而增加,这在纳观原子模型中可得到很好的解释。

## 四、结束语

关于固体断裂过程的细观力学与纳观力学研究将导致宏微观定量贯穿的断裂理论,其数值实现可借助限宏观/细观/纳观三重嵌套模型。这时纳观区的尺度的半高为10纳米左右的内嵌原子断裂构形,具有曲折界面。细观区为外径10微米的古币状区域,其与纳观区的结合层需考虑位错传递,以及位错半原子列没入连续介质的技术。细观区内既有初始随机生成的背景位错,又有自纳观区接力传递的裂尖钝化位错。这些离散位错在弹性连续介质内的运动由位错计算力学模拟,并按位错动力学曲线的规律滑行。内径为10微米、外径为1毫米的宏观外环区用弹-粘塑性大变形模型计算。宏观区与细观区的界面除满足应力连续外,还应容纳

自细观区移出位错的累积错配位移效应。宏观外环区的外边界则给定界面 K 场, 在确定混合度下按指定的加载率增加  $|K|$  值。上述模型可望实现固体断裂过程的宏微观定量模拟。

上述宏观/细观/纳观三重嵌套模型还可以模拟其他宏微观力学问题, 如间隙原子造成的腐蚀致脆问题, 膜基界面结构和界面结合强度, 先进复合材料的界面层工艺设计, 表面离子注入和表面强化, 裂尖晶格相变问题等等。对这一研究领域的深入开拓将可能使控制宏观氛围的力学参量与断裂物理机制和损伤几何图象实现定量的结合。

### 参 考 文 献

- [1] Hwang K. C., Yu S. W., Yang W., Theoretical investigation of crack-tip singularity fields in China, *Appl. Mech. Rev.*, **43** (1990), 19-33.
- [2] Yang W., Guo T. F., Tan H. L., Evolution of crack tip process zones, IUTAM Sympo. on Computational Mechanics of Materials, Brown Univ., USA, June 15-18, 1993.
- [3] 杨卫, 孙庆平, 黄克智, 余寿文, 固体的宏细观本构理论与断裂, 自然科学进展, 待发表, (1993)。
- [4] 杨卫, 细观力学与细观损伤力学, 力学进展, **22**, 1 (1992) 1-9.
- [5] Yang W., Lee W. B., *Mesoplasticity and Its Applications*, Springer-Verlag, (1993).
- [6] Suo Z., Varias A. G., Shih C. F., A theory for cleavage cracking in the presence of plastic flow, to appear in *Acta Metall.*, (1993).
- [7] Foiles, S. M., Baskes M. I., Daw M. S., Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys, *Phys. Rev. B*, **33** (1986), 7983-7991.

## MICROMECHANICS AND NANOMECHANICS FOR A FRACTURE PROCESS

Yang Wei      Tan Honglai

(Dept. of Engineering mechanics, Tsinghua University)

### Abstract

The 40 years development in the macroscopic theory of fracture is featured by the remarkable achievements on the one hand, and insurmountable limitations on the other hand. The present paper explores new and more profound approaches, namely microscopic and nanoscopic fracture mechanics, to unlock the black box of fracture process zones. The researches of this kind endeavor to obtain a quantitative link between the mechanics parameters controlling the annular outside field and the physical mechanisms, as well as damage geometry, within the fracture process zone.