

- [9] A. S. Barker, Jr., *Phys. Rev. Lett.*, **28**(1972), 892.
- [10] N. Marschall and B. Fisher, *Phys. Rev. Lett.*, **28**(1972), 811.
- [11] B. Fisher, N. Marschall, and H. J. Quiesser, *Surf. Science*, **34**(1973), 50.
- [12] V. V. Bryksin, Yu M. Gerbstein, and D. N. Mirlin, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **51**(1972), 901.
- [13] H. J. Falge and A. Otto, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **56**(1973), 2.
- [14] E. Schuller, G. Borster, and H. J. Falge, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **69**(1975), 467.
- [15] J. Schoenwald, E. Burstein and J. M. Elson, *Solid State Comm.*, **12**(1973), 185.
- [16] C. K. Chen, A. R. B. de Castro, and Y. R. Shen, *Optical Lett.*, **4**(1978), 393.
- [17] F. DeMartini and Y. R. Shen, *Phys. Rev. Lett.*, **36**(1976), 216.
- [18] F. DeMartini, G. Giuliani, P. Mataloni, E. Palange, and Y. R. Shen, *Phys. Rev. Lett.*, **37**(1976), 440.
- [19] F. DeMartini, M. Colocci, S. E. Kohn, and Y. R. Shen, *Phys. Rev. Lett.*, **38**(1977), 1223.
- [20] C. K. Chen, A. R. B. de Castro, Y. R. Shen and F. DeMartini, *Phys. Rev. Lett.*, **43**(1979), 946.
- [21] G. Borstel and H. J. Falge, *Appl. Phys.*, **16**(1978), 211.
- [22] 霍崇德、黄锡毅, 物理学报, **29-12**(1980), 1581.

固体物理在研究材料断裂中的应用

龙期威

(中国科学院金属研究所) (中国科学院固体物理研究所)

固体的断裂是工程结构材料较常发生的现象。研究固体的断裂问题,对于工程上的实际需要有很重要的意义。当前,从工程力学的角度研究固体断裂问题是比较多的,应用的和基础的研究均已不少。人们在实践中也逐渐地认识到从另外一个角度,即金属学及金属物理等方面进行研究也很重要。宏观和微观相结合的问题在国内外学术界提出来了。“断裂物理”这个术语近几年在国内已逐渐流行。的确,把材料断裂的力学研究和物理研究结合起来,对于了解材料断裂过程必然会更加全面和深入。

固体物理属于和实际关系较密切的基础学科。它的某些理论方法和实验技术用到研究材料断裂问题能直接应用于实际;而一些断裂过程中的基本物理问题,如能深入到固体物理的微观层次来研究则又是很有学术意义的。

一、位错理论和工程断裂力学分析

以研究晶体位错为对象得到很大发展的位物理

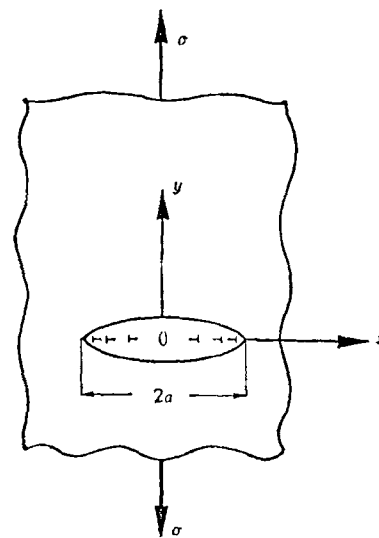


图1 裂纹的位错塞积群模型^[1]

错普遍概念和理论方法可以移植到裂纹的力学分析上来,并可用来直接解决工程断裂分析问题^[1]。

设想原子排列很完整的晶体,顺着—排原子面切开一个口,然后两边用力拉开达到就好

像割开的地方多了一排原子面一样。此时，切口以外的材料内的应力场就好像存在一根位错线一样，除了加载产生的应力 σ^A 以外，还迭加了一个位错应力场 σ^D 。裂纹位错和通常位错不一样，它并不真实存在多的半排原子面。

作为宏观裂纹，在裂纹面的表面应是自由的。如果只有单个位错显然还难于满足这个要求。因为切口两边的原子相距还不够远，电子云的重迭部分还不够小，两边原子的相互作用力还不足以小到可以忽略的程度。所以，对于宏观裂纹，还必须设想拉的更开一些，要求切口处多几排“虚”的半排原子面，也就是设想一定密度分布的“虚”的位错塞积群才能组成宏观裂纹。这就是宏观裂纹的位错塞积群模型。

可以证明，作用到领先塞积位错上的力和作用到宏观裂纹尖端上的力是相似的。在数学上，可以把塞积位错的行为和断裂力学分析宏观裂纹的结果相对比，计算出断裂力学的基本参量——应力强度因子 (K)。

在裂纹面上，自由表面的条件要求外加应力和位错塞积群产生的应力（是位错密度分布的函数）之和等于零^[1]。

$$\sigma_{yy}^A + A \int_{-a}^a \frac{D(x')dx'}{x-x'} = 0, \quad (1)$$

其中 $D(x)$ 是位错密度分布函数，

$$A = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \quad (\text{刃型}).$$

(1)式一般是奇异积分方程。

解此方程可以得到位错密度分布函数 $D(x)$ ，再由 $D(x)$ 可以得到裂纹顶端应力强度因子 K ，它是裂纹长度和载荷应力的函数^[1,2]。

$$K^2 = 2\pi^3 A^2 \lim_{x \rightarrow a} (a-x) D^2(x). \quad (2)$$

另一方面，材料抵抗裂纹扩展的能力，如断裂韧性 K_{Ic} 是可以测量的。当裂纹长度或载荷应力增加到一定数值，使 $K(\sigma, a) \geq K_{Ic}$ 时，材料即断裂。

利用位错理论计算应力强度因子的方法原则上已被认为是可用方法之一，有的手册中已介绍。但是，对各种具体问题，需要解 (1) 式的奇异积分方程。所以，以实际应用为目的，寻求

一些简单的解法是很必要的。文献 [2, 3] 报道了利用车贝雪夫多项式解此方程的办法。文中把此法用到计算半无限边裂纹情形，其结果和有的手册中用通常断裂力学方法计算出的表达式相似；而且对于旋转圆盘的中心孔边裂纹（汽轮机叶轮），计算出的结果和有限元法比较相对差别仅 2—15%。图 2 中，

$$F \left(\frac{a}{R_2 - R_1} \right) = \frac{K}{\sigma_0 \sqrt{\pi a}}, \quad (3)$$

σ_0 为无裂纹时中心孔边应力。

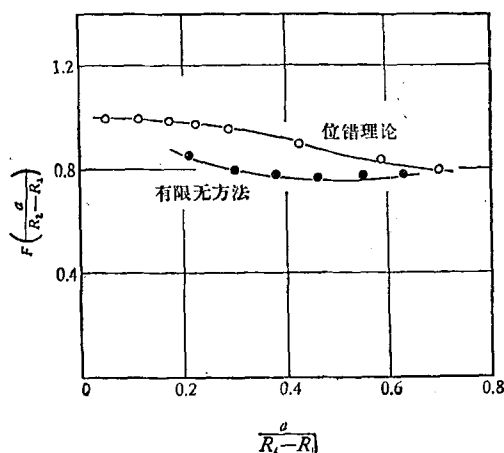


图 2 旋转圆环中心孔边裂纹的应力强度因子
(a 为裂纹长度； R_1 和 R_2 相应为圆环的内、外半径)

位错理论方法有两个特点：(1) 计算量小。因为用了模型近似，得的是解析形式的解（尽管有些复杂情况需要经验方法和近似处理），所以不用数值计算机即可很快估计出应力强度因子来，这对于及时判断工程的安全情况是有利的。(2) 可能应用面广。从奇异积分方程的建立可知，只需知道材料无裂纹时的裂纹位置处的 $\sigma^A(x)$ 即可，而这个量从设计或模型的光弹性应力测量是可以得到的。譬如一桩用位错理论计算汽轮机叶轮中心孔边裂纹的应力强度因子所用的 $\sigma^A(x)$ 数据就是来自生产厂的设计数据^[3]。

从晶体位错理论（特殊）到位错的普遍概念（一般），再由位错的普遍理论到裂纹材料的断裂理论（新的特殊）得到了不少好的效果。例如，Eshelby^[4] 在分析作用到晶体位错上的力

时，曾提出过关于作用到弹性奇点上力的弹性能量动量张量理论。现在，我们可以把裂纹顶端看成是另一种奇异特性的弹性奇点，利用弹性能量动量张量理论去分析裂纹，可以导出 J 积分的形式以及复合型断裂的极限载荷^[2]。再如，Cottrell-Bilby 曾经计算过溶质原子向位错中心扩散的动力学过程，现在我们把位错的奇异性代以裂纹顶端的奇异性，则可以计算氢原子向裂纹顶端迁移的动力学过程，这对于了解氢致应力开裂过程很有意义，国内外均有类似的工作^[2]。

二、断裂表面能的点阵动力学模型

人们对断裂过程的认识也是不断向深入结构层次发展的。1971年意大利固体物理教授 Caglioti 及其同事们提出了关于固体脆断表面能的简单点阵动力学模型(如图3)^[5]。这个模型虽然很简单很初步，但是由于他在他主持的1974年第61次费密国际物理讲座中作了介绍，在国际上有一定影响，而且曾引起一些人的讨论。他们的理论方法又用到了量子统计中的格林函数，颇引人注意。

这个模型的主要特点是把晶体点阵拉开的过程用一个晶格热振动过程和它在能量上等价。他把材料的脆断视为两步：(1)晶体原子间振动达到一定能量 γ_1 ，在断裂面两边的两排原子达到局部熔化的幅度；(2)晶体进一步再得到更多的能量 γ_2 ，原子间距进一步拉开到沸点那样的程度，即行断裂。

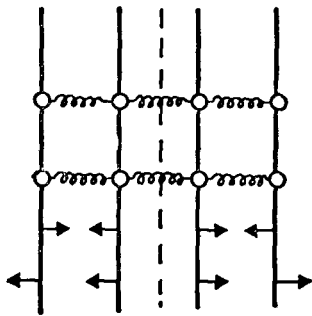


图3 脆断的晶格振动模型^[5]

$$\gamma_s = \gamma_1 + \gamma_2. \quad (4)$$

晶面之间产生振动，实际上是一个沿垂直于晶面方向的一维振动。

他们还认为 γ_s 的能量 90% 左右来自 γ_1 ，所以对 γ_1 作较为细致地计算可以抓住 γ_s 的主要过程。Caglioti 等用晶格振动理论对 γ_1 进行了估算。这显然还是过于简单，因为快到熔点的状态，原子热振动的非线性部分的作用会很大。尽管如此，他们还是大胆地作了尝试，得到了和实验及其他理论在数量级上相符的结果。

$$\gamma_1 = nk_1 \overline{u_m^2}, \quad (5)$$

$$\gamma_2 = nk_B \Delta T_{bm}, \quad (6)$$

其中 k_1 为原子面间力常数， n 为单位面积原子密度， $\overline{u_m^2}$ 为原子热振动振幅均方值，

$$\Delta T_{bm} = T_b - T_m$$

为沸点熔点温差， k_B 为玻耳兹曼常数。

应用点阵格林函数，Boffi 把 $\overline{u^2}$ 的表达式写成下式(见文献[5])。

$$\overline{u^2} = \frac{3\hbar}{M} \int_0^{\omega_m} d\omega \tilde{g}(\omega^2) \operatorname{ctgh} \left(\frac{\beta}{2} \hbar \omega \right), \quad (7)$$

其中

$$\tilde{g}(\omega^2) = -\frac{1}{3rN\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \operatorname{Im} \times \sum_{lpa} M_p G_{aa}(lp, lp, \omega^2 - i\epsilon)$$

而 G_{aa} 是点阵格林函数， N 是原胞的数目， M_l 是第 l 个晶胞，第 p 个原子的质量， r 是单位晶胞中的原子数。

尽管他们把 $\overline{u^2}$ 的格林函数表达式写出来了，但作者们并没有真正用格林函数方法去具体计算 $\overline{u^2}$ ，从而算出 γ_1 ；而是借用简单的 Debye 模型再一次近似处理后得到

$$\overline{u^2} = \frac{9k_B T}{M\omega_D^2}. \quad (8)$$

把 T 代以 T_m ， $\overline{u^2}$ 就成为 $\overline{u_m^2}$ ，而此式正是 Lindemann 的经验公式。这样就可以把 γ_1 求出来，然后加上 γ_2 即得 γ_s 。作者继 1971 年工作之后还作了一点改进，即除了考虑最近邻以外，还考虑了次近邻等。

计算 γ_s 对于了解断裂过程到底有多大实际意义值得考虑。临界裂纹扩展力 $G_c = 2\gamma_s$ 。

的情形只有在类似极低温的条件下才近似正确。在一般情形, 裂纹顶端出现塑性区, 断裂时塑性功耗 γ_p 往往比 γ_s 大很多。

$$G_c = 2(\gamma_s + \gamma_p) \approx 2\gamma_p.$$

人们往往认为 γ_s 在 G_c 中是可以忽略的不重要的量。但是, 人们也逐渐认识到, 范性和弹性之间是相互联系的, 范性过程中包含弹性的因素。例如据 Tezelman 的分析^[7],

$$\gamma_p = \gamma_s \cdot [\text{位错组态函数}], \quad (9)$$

γ_s 在 γ_p 中作为乘积因子出现。可以看出, 如果位错组态一定, 从相对变化的意义上讲, γ_s 的变化对 G_c 也是很有影响的。

正确的物理模型和精确的计算方法可能使理论计算结果和实验一致; 但是反过来, 符合实验的各种理论则并不一直都是百分之百正确的, 甚至也有可能是错误的。如果物理模型欠缺造成的正偏差和计算方法上的负偏差互相抵消, 使你的最终结果看起来似乎与实验和其他理论一致, 但也可能是假象。因此, 对于物理模型的合理性进行仔细地讨论仍是很必要的。象上述 Caglioti 等提出的“熔化-沸腾”模型, 如果考虑到从固体到熔化还有一个无序化过程, 必须加上潜热; 再将点阵动力学中的一些熟知关系代入得到^[6]

$$\gamma_s = nk_B(\Delta T_{bm} + 0.6T_m) + \lambda_s, \quad (10)$$

其中 λ_s 为一层单位面积的原子的熔化潜热。(10)式结果和实验及弹性理论相比同数量级。

把脆断视为“熔化-沸腾”模型总还是不大自然, 因为: (1) 受力往往是单轴拉伸, 而不似晶格热振动那样系三维问题; (2) “熔化-沸腾”模型人为地引入了一个结构无序化转变(熔化)过程, 这并不反映晶体受力解理断裂过程那样仍然保持晶态。因此, 需要考虑从另一角度上着手。我们曾经用线性响应理论方法, 计算 $\langle u_a \rangle$ 对外力 F_a 的线性响应关系, 此结果在文献[8]中也有所报道。

固体表面的电子理论对于表面能也能作出估算, 这个理论问题在七十年代还比较活跃。1979年 Langreth 的一篇评论性短文作了概括的介绍^[9]。

三、裂纹顶端塑性区的正电子湮灭实验

前面曾经提到, 一般实际材料加载时, 裂纹顶端总有塑性形变产生。Orowan 和 Irwin 把 Griffith 的理论推广到裂纹前端具有小范围屈服的情形。他们用裂纹前端塑性功耗(有效表面能) γ_p 代替真正表面能 γ_s 。临界应力强度因子 K_{Ic} 及临界裂纹扩展力 G_{Ic} 仍可作为表征材料的韧性值。

$$G_{Ic} \approx 2\gamma_p = \frac{K_{Ic}^2}{E'}. \quad (11)$$

一般地说, K_{Ic} 的大小是和开裂时塑性区尺寸及裂纹尖端张开位移联系在一起的。在 I 型加载情形^[9]:

$$\begin{aligned} R_{\max} &= 0.157(K_I/\sigma_y)^2, \\ R_{\min} &= 0.036(K_I/\sigma_y)^2, \\ \delta_c &\cong 0.5 \frac{J_e}{\sigma_y} = 0.5 \frac{K^2}{\sigma_y E'}, \end{aligned} \quad (12)$$

R_{\max} 和 R_{\min} 相应为塑性区最大和最小尺寸, δ_c 为裂纹尖端张开位移, σ_y 为材料屈服强度, J_e 为 J 积分。由(12)式可知,

$$K_{Ic} \approx 0.8E\delta_c/\sqrt{R_{\max c}}.$$

由此可见, 对于塑性区的研究和了解就显得非常重要了。

当前从金属学的角度进行研究已是不少。譬如 K_{Ic} 的物理意义, 脆性断裂的显微机制及其与 K_{Ic} 之间的联系等等都有不少工作。从固体物理学的角度, 如缺陷电子态的角度去探索也是值得尝试的。缺陷电子态可以当作一把尺子, 缺陷电子态的某一适当值可以当做弹性到塑性区的临界值, 由此可以定出塑性区的大小、形状。缺陷电子态又可以当作一种探针。如果裂纹扩展的机制不是连续地向前推进而是在裂纹顶端塑性区某处先产生微裂纹然后和主裂纹连通, 断续地向前扩展(如氢脆开裂), 可以预期, 在即将产生微裂纹的局部地区将可能产生电子态的某种异常变化。

缺陷电子态的理论是比较复杂的, 特别是位错的电子态理论更是难于处理。所以, 我们

认为在目前的发展阶段,先抓实验是比较现实的。

正电子湮灭技术是近来研究缺陷电子态的有效工具^[10]。基本原理和方法请参阅本刊简要介绍^[11,12]。缺陷(点缺陷、位错等)对正电子的捕获将使正电子在固体中和电子产生湮灭效应的平均寿命(τ)增高,多普勒展宽的线形变窄,线形参量 S 变大。

图4^[13]给出单边缺口试样加载到不同应力水平卸载后的 τ_1 和 S 参量的相对值。对比参考样品为经同样处理但未加载的无裂纹试样,其参量为 τ_0, S_0 。可以看出,载荷大约在 $1600 \pm 50\text{kg}$ 以下, τ_1 和 S 参量相对值均无大的变化,此时样品处于弹性阶段。其后,随载荷再度增加, τ_1 与 S 相对值随即增加。可见,正电子湮灭技术对范性形变是相当灵敏的,特别是多普勒展宽还有测得结果快,样品不必太小等特点。由此,我们令 $S/S_0 \approx 1$ 为弹性向塑性过渡的边界。 $S/S_0 > 1$ 时即反映已发生了塑性变形。

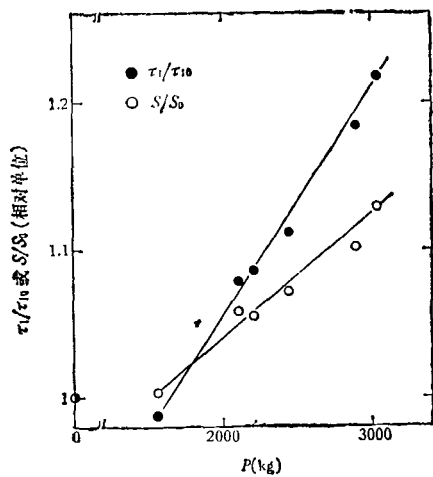


图4 单边缺口试样的 τ_1 和 S 参量的相对变化与载荷 P 的关系^[13]

图5表示沿裂纹方向自尖端开始测量不同距离处,正电子湮灭多普勒展宽的线形参量(S)的变化。实验指出, S 参量随距离增长而逐渐下降到无裂纹样品参考值。这表示,裂纹顶端塑性区的缺陷密度分布是不均匀的,近距离处,塑性应变大,亦即缺陷密度大($S-1, S-6$ 样品

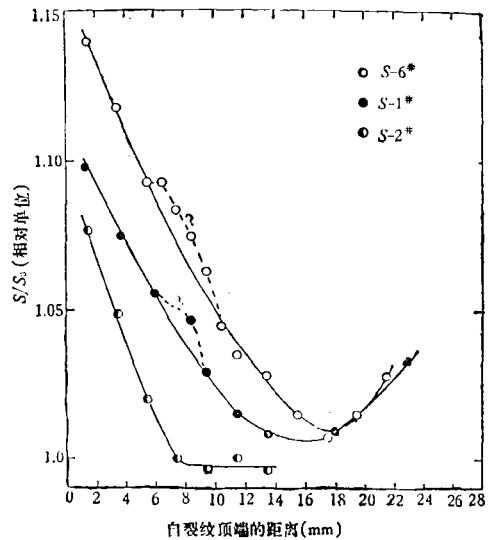


图5 S/S_0 在塑性区内的变化^[13]

的 S 参量在大距离后又复升高可能是韧带屈服所致,加载水平: $S-6 > S-1 > S-2$ 。

如果把 S 参量降到对比样品数值($S/S_0 \approx 1$)

处的距离当作塑性区大小。实验指出,正电子湮灭测出的塑性区大小和一般断裂力学计算值合理地相近^[13]。

在图5上还可以看出在6—10mm范围内随着载荷的加大, S 参量有点偏离单调下降的趋势。这是否可能就是缺陷的偏聚,以及进一步加载会不会形成微裂纹则还需要进一步实验判别。

四、缺陷和力学性质研究的展望

关于“固体缺陷和力学性质”这个领域,人类的认识也是不断向深入结构层次发展的,而各个不同分支领域的深化情况则又各不一样。关于固体的弹性性质的研究,三十年代已深入到电子结构;关于固体范性性质的研究,四十年代已深入到点阵原子过程(位错);关于裂纹材料的断裂性质,向微观过程进军还只是开始。在上述这些问题中,最关键最难解决的还是范性性质有关的微观过程。弹塑性断裂力学的问题也涉及范性。历来很多固体物理书籍都很少涉

及固体范性性质的内容。Seitz把固体范性理论还未自然地建立在近代量子理论上作为他未收入他的《近代固体理论》的原因之一^[14]。

1974年在意大利召开的第61次费密国际物理讲习会反映出一种新的学术动向^[5]：一些固体物理工作者正在重视研究缺陷的电子声子过程，企图把原子结构和力学性质联系起来，实现微观和宏观相结合。1981年7月初在意大利再次召开的第82次费密国际物理讲习会：“金属材料的力学和热学行为”，再次讨论了这方面的问题。

我国金属物理工作者早在1959年全国固体物理学术会议（北京）上就提出过深入到电子、原子间力研究力学性质的问题。以后的历次金属物理方面的学术会议也都反映了这方面的内容。现在看来似乎有两方面的工作是值得注意的：（1）研究那些主要由电子、声子过程（或者表现为原子间势函数）起作用的力学性质过程，譬如屈服强度或者断裂韧性的温度依赖关系^[15]以及前述脆断表面能的点阵动力学模型等。这类工作的实际意义是明显的，但物理模型则较简单而初步，理论方法也包含较多的近似。（2）探讨结构层次和更深层次之间的关系，即相对意义上的现象和本质的关系，如国外关于点缺陷的电子、声子理论，位错的声子场理论等^[16-18]。最近Wadati^[19]总结了他们近年来把量子场论方法引入晶体及位错等缺陷的普遍理论的尝试引起缺陷理论工作者新的注意。这类工作在物理理论上进了一步，而实际意义则间接些。

“固体缺陷和力学性质”这个领域的发展对“断裂物理”的发展关系密切。这些年，无论在缺陷态的基础理论或是在基础理论的实际应用都有所尝试，而且有一些苗头。这大大加速了新的突破的进程，需要我们密切注意，急起直追。我们认为，从下述两个方面开展工作是十分必要的：一方面学习实际知识，促进微观和

宏观相结合，物理和工程技术相结合，以期真正在实际应用中做出贡献。这就需要和材料工程、材料科学很好的合作。另一方面，加深和扩大理论基础，把近代理论物理和理论化学的方法引入到这个领域中来，促进缺陷理论研究向深度发展。这需要和理论物理、理论化学及数学力学的密切合作。

参 考 文 献

- [1] B. A. Bilby and J. D. Eshelby, *Fracture*, edited by H. Liebowitz, Academic Press, New York and London, Vol. 1 (1968), 100.
- [2] Lung Chi-wei (龙期威), *Scientia Sinica*, Vol. XXIII, 4 (1980), 441.
- [3] 龙期威, *金属学报*, 14-2 (1978), 118.
- [4] J. D. Eshelby, *Solid State Physics*, edited by Seitz and Turnbull, Vol. 3 (1956), 100.
- [5] G. Caglioti, in *Atomic Structure and Mechanical Properties of Metals*, Proc. Int. School Phys. "E. Fermi" Course L.XI, edited by Caglioti, (1974), 1.
- [6] Lung Chi-wei (龙期威), Sun Shiah-kai (孙校开), Shyung Liang-yueh (熊良猷) and Chiang Chion (姜健), *International Centre for Theoretical Physics Preprints and Internal Reports*, IC/79/132, (1979), Trieste.
- [7] A. S. Tetelman, *Fracture of Solids*, 20(1963), 461.
- [8] D. C. Langreth, *Comments on Solid State Physics*, 8-5 (1978), 120.
- [9] 北京钢铁研究院金属物理室, *工程断裂力学(上册)*, 国防工业出版社, (1977) 86, 332.
- [10] *Positrons in Solids*, edited by P. Hautojärvi, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, (1979), 89.
- [11] 倪蕙苓, *物理*, 6 (1979), 543.
- [12] 周宗源、伍必和, *物理*, 6 (1980), 535.
- [13] 季国坤、姜健等, *金属学报*, 17-6 (1981), 677.
- [14] F. Seitz, *The Modern Theory of Solids*, (1940), V, McGraw-Hill.
- [15] 龙期威、何青、周敬, *Scientia Sinica*, 13(1964), 160; *物理学报*, 21-6 (1965), 1264.
- [16] N. H. March, *Atomic Structure and Mechanical Properties of Metals*, Proc. Int. School Phys. "E. Fermi" Course L.XI, edited by Caglioti, (1974), 120.
- [17] V. Gallina, C. P. Galloto and M. Omini, *Phys. Stat. Sol.*, 10(1965), 601.
- [18] G. Cortellazzi, S. Boffi et al., *J. Appl. Phys.*, 44-4 (1973), 1518.
- [19] M. Wadati, *Phys. Reports*, 50-2 (1979), 87.