

铜单晶循环变形饱和阶段疲劳裂纹萌生 及表面区域内应力分布的模拟*

杨继红^{1,2)} 张新平²⁾ Y. W. Mai²⁾ 李勇³⁾

- 1) 沈阳师范大学物理科学与技术学院, 沈阳 110034
2) Centre for Advanced Materials Technology (CAMT), School of Aerospace, Mechanical and Mechatronic Engineering, The University of Sydney, NSW 2006, Australia
3) 中国科学院金属研究所, 沈阳 110016

摘要 利用扫描电镜电子通道衬度 (SEM-ECC) 技术观察了循环变形饱和阶段 Cu 单晶样品中近表面区域的位错微结构。在样品边缘一些条带状或斑点状呈黑色的位错组织区, 利用离散位错动力学方法模拟了该区的位错微结构, 并计算了与此位错微结构相对应的内应力分布。模拟和计算结果表明, 黑色区是内应力出现最大值区, 即应力集中区, 它与驻留滑移带 (PSB) 中的不均匀变形有关, 是疲劳裂纹萌生最可能的位置。模拟和计算结果很好地解释了这一现象。

关键词 Cu 单晶, 循环变形, 疲劳裂纹萌生, 离散位错动力学, 内应力分布

中图法分类号 TB111.8

文献标识码 A

文章编号 0412-1961(2005)01-0009-06

SIMULATION OF INTERNAL STRESSES NEAR THE SURFACE AND FATIGUE CRACK NUCLEATION FOR A COPPER SINGLE CRYSTAL IN CYCLIC DEFORMATION SATURATION STAGE

YANG Jihong^{1,2)}, ZHANG Xinping²⁾, Y. W. MAI²⁾, LI Yong³⁾

1) College of Physics and Technology, Shenyang Normal University, Shenyang 110034

2) Centre for Advanced Materials Technology (CAMT), School of Aerospace, Mechanical and Mechatronic Engineering, The University of Sydney, NSW 2006, Australia

3) Institute of Metal Research, The Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016

Correspondent: YANG Jihong, Tel: 61-2-93518607, E-mail: jihong.yang@aeromech.usyd.edu.au

Supported by Australian Research Council through a Large Research Scheme Grant (A10009166)

Manuscript received 2004-01-07, in revised form 2004-04-19

ABSTRACT SEM-ECC technique was employed to observe and characterize the dislocation microstructures during the saturation stage of cyclic deformations in a copper single crystal. Some band-like or spot-like dark zones were found in the dislocation microstructures, which located either at the edge region of the deformed specimen or at the interface between the dislocation matrix and the PSB. To interpret the experiment results, the near surface dislocation microstructure were simulated and the internal stress distributions induced by those dislocations were calculated by using discrete dislocation dynamics method. The simulation results show that near the free surface region, the maximum internal stresses or stress concentration appear at the dark zones which correspond to the interfaces between the PSB and the dislocation matrix or the PSB-matrix-surface interfaces, meaning that fatigue cracks initiate preferentially at these dark zones. The simulated results can well explain the observed ones.

KEY WORDS copper single crystal, cyclic deformation, crack nucleation, discrete dislocation dynamics, internal stress distribution

裂纹萌生和短裂纹扩展是循环载荷下构件疲劳寿命

的两个主要阶段^[1-3]。疲劳裂纹萌生和整个疲劳裂纹扩展过程由循环塑性变形所控制, 因此, 疲劳裂纹在塑性变形程度较高的位置萌生。对于面心立方单晶, 疲劳裂纹萌生在样品表面; 对于工程用单晶高温合金, 疲劳裂纹在孔洞或样品近表面处萌生^[4]。大量的研究^[5-14]表明, 对于

* 收到初稿日期: 2004-01-07, 收到修改稿日期: 2004-04-19

作者简介: 杨继红, 女, 1966 年生, 博士

面心立方纯金属单晶体, 驻留滑移带 (PSB) 的形成是疲劳裂纹萌生的根源. 单晶体在低应变幅和中等应变幅疲劳条件下, 循环变形达到饱和后不久 (即变形局域化后) 形成的驻留滑移带 PSB 是唯一产生裂纹的地点 [7-9]. Hunsche 和 Neumann [8] 以及 Ma 和 Laird [9] 已经得到了裂纹在界面萌生的直接实验证据, 后者使用尖角切割技术、空气中对铜单晶体疲劳裂纹扩展进行了较系统的研究. 发现 PSB 由挤出和真正的侵入组成, 并且所有裂纹都起源于侵入, 优先的疲劳裂纹形核位置为隔绝的侵入和 PSB/ 基体界面. 基于以上实验事实, Antonopoulos 等 [10], Essmann 等 [11], Tanaba 和 Mura [12] 提出了疲劳裂纹沿 PSB 与基体界面萌生的理论模型. 近来, Repetto 和 Ortiz [14] 基于沿 PSB 与基体界面萌生疲劳裂纹这一事实, 提出了沿 PSB 萌生疲劳裂纹的微观塑性模型, 并采用有限元方法计算了萌生疲劳裂纹所需的循环数. 然而, 人们对于疲劳裂纹沿 PSB 与基体界面萌生的机制以及疲劳裂纹萌生期间近表面区域的应力分布特征仍然不是很清楚, 需要进一步的实验和理论研究工作.

近年来, 我们对疲劳 Cu 单晶中位错微观结构的形成和演化以及 PSB 的形成过程进行了 SEM-ECC 观察与计算机模拟, 得到了许多有意义的结果 [15-17]. 在前期工作的基础上, 本研究利用 SEM-ECC 技术观察了疲劳 Cu 单晶中循环变形饱和阶段近表面区域的位错微结构, 利用离散位错动力学的方法对近表面区域由位错引起的内应力分布进行了模拟与计算, 并讨论了疲劳裂纹萌生的最可能位置.

1 实验结果

实验采用纯度为 99.999% 的高纯无氧电解铜为原料, 采用 Bridgman 方法生长出圆柱状单晶, 用 Laue 背散射法定其取向为 $[\bar{1}23]$, 误差不超过 $\pm 2^\circ$, 此方向也是外加载荷的加载轴方向. 采用线切割机切割成厚度和宽度均为 7 mm, 长度为 60 mm 的试样. 其中工作段长度为 16 mm, 工作段宽度为 5 mm. 用机械和电解抛光方法对试样表面进行光亮处理, 以便进行后续观察. 实验在室温下空气中进行, 采用 Shimadzu 电液伺服疲劳试验机对试样进行恒塑性应变幅控制的拉-压对称循环加载, 载荷模式为三角波, 控制轴向塑性应变幅 $\gamma_{pl} = 2 \times 10^{-3}$, 频率为 0.2 Hz. 在实验过程中, 当循环变形达到饱和阶段后, 在 20000 cyc 时中断疲劳实验, 试样卸载后在 Cambridge S-360 型扫描电子显微镜中采用 SEM-ECC 技术观察其变形特征和位错结构.

图 1 给出了分切应力与循环周次的关系曲线. 可以看出, 随着循环周次的增加分切应力增加, 直到大约 1500 cyc 左右达到饱和, 饱和分切应力大约为 27 MPa. 循环变形达到饱和阶段后, 在 20000 cyc 时试样边缘的位错微结构的 ECC 观察结果如图 2 所示. 图中可以清晰地看

到, 位错组织主要是脉络和 PSB 结构; 其中 PSB 穿过整个晶体直至试样表面, PSB 与样品表面的夹角大约为 45° , 即沿着晶体的主滑移面方向. PSB 中的位错结构为梯形位错墙结构, 位错墙的平均厚度为 $0.22 \mu\text{m}$, 平均间距为 $1.8 \mu\text{m}$ (图 2a). 同时, 在样品边缘区域的 PSB 中, PSB 与基体的界面处或 PSB 与基体和自由表面的界面处出现了一些带状 (图 2a) 或斑点状 (图 2b) 的黑色微区. 这些黑色区域的位错结构显然与基体和 PSB 中的位错结构都不相同, 它很可能是 PSB 中的一些严重塑性变形区, 表明在循环变形的饱和阶段 PSB 中的变形是不均匀的. 因此, 疲劳裂纹很可能在试样边缘的那些黑色区域中萌生. 由于实验观察的局限性, 对于这些黑色区域特征的了解很有限. 因此, 利用离散位错动力学的方法对循环变形饱和阶段近表面区域由位错引起的内应力进行模拟计算与分析, 对于解释和理解以上实验观察结果是极其重要的.

2 模型与基本方程

2.1 假设与模型

根据实验观察, 在基体脉络和 PSB 墙中主要是刃型位错分布且正负刃型位错的数目近似相等, 只有极少量的螺型位错, 而在基体和 PSB 的通道中主要是螺型位错分布且正负螺型位错的数目近似相等, 只有极少量的刃型位错 [1]. 为了简化模拟和计算, 做如下基本简化假设:

(1) 在基体脉络和 PSB 墙中只有刃型位错分布, 而在基体和 PSB 的通道中只有螺型位错分布.

(2) 刃型位错都是分布在主滑移面 (111) 上正负数目近似相等的平行直刃型位错.

(3) 螺型位错都是左螺型位错与右螺型位错数目近似相等的平行直螺型位错段.

(4) 由于处理的是自由表面附近的问题, 因此可利用自由边界条件, 且必须考虑位错镜像力的作用.

图 3 为计算机模拟所用位错结构模型的示意图, 该模

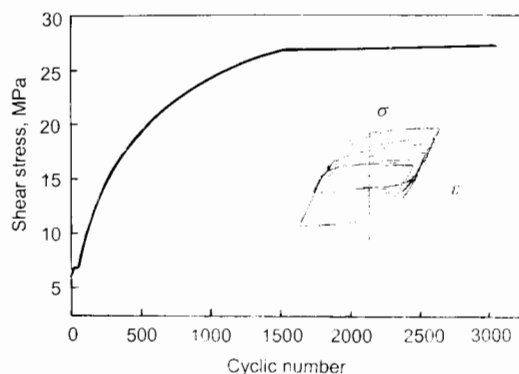


图 1 分切应力随循环周次的变化

Fig. 1 Variation of the resolved shear stress with cycling number and the inset showing the development of the hysteresis loops

型是从图 2 给出的实验观察结果简化而来的. 模拟单元中包含三个互相平行的 PSB, 其中两个 PSB (即图 3 顶端和底部的两个 PSB) 形成低于初始自由表面的侵入, 而另一个位于中间的 PSB 形成超出初始自由表面的突起. 因此, 可以考虑紧密相间的 PSB 间的相互作用. 目前尚未见其他研究者的考虑过这种相互作用. 平行的直刃型位错沿 z 方向, 被放置在 xOy 平面上. x 方向即 $[\bar{1}01]$ 取向为位错滑移方向, y 方向的 $[111]$ 取向为滑移面法向方向, xOy 面为 $(\bar{1}2\bar{1})$ 面. 平行的直螺型位错段平行于 x 方向, 随机地分布在基体和 PSB 的通道里; 刃型位错根

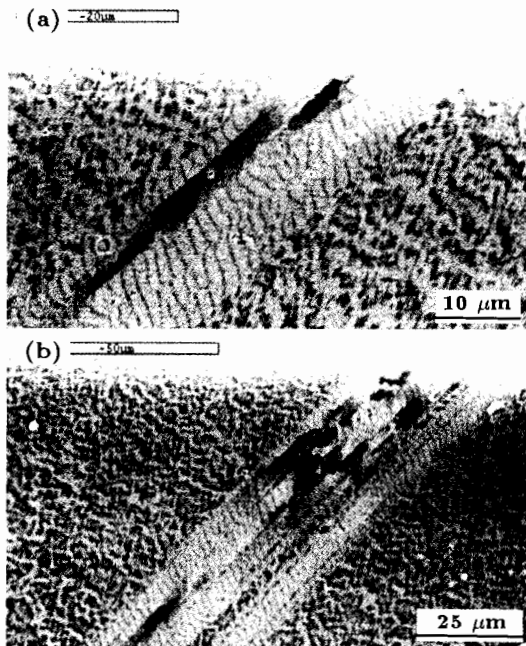


图 2 20000 cyc 疲劳循环时 Cu 单晶样品边缘位错微观结构的 ECC 观察结果

Fig.2 Dislocation structure observed by ECC technique at 20000 cyc at the edge of a copper single crystal specimen

- (a) band-like dark zones
- (b) spot-like dark zones

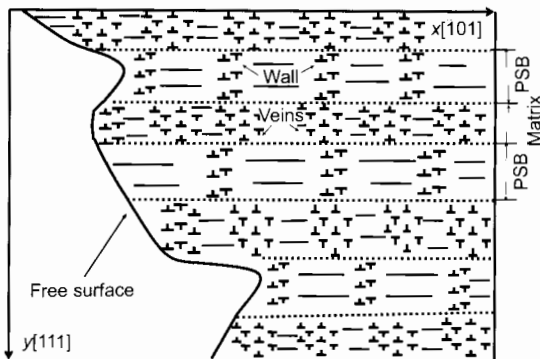


图 3 计算机模拟位错微观结构示意图

Fig.3 Schematic of dislocation structures on the $(\bar{1}2\bar{1})$ plane for computer simulation

据实际的实验观察结果 (见图 2), 被随机地分布在基体脉络和 PSB 墙中.

2.2 近自由表面刃型位错产生的应力场

刃型位错与自由平面边界的相互作用如图 4a 所示. 图 4 中给出了一个位于 $(-l, 0)$ 的实在刃型位错 E 和一个位于 $(+l, 0)$ 的镜像位错 E'. 很明显, 这就是引入虚拟的镜像位错来取代真实存在的自由表面. 图 4a 中所示半无限弹性介质中的总应力场是三部分贡献之和, 即实在位错 E、镜像位错 E'、以及补充部分之和. 这个应力场的剪切分量和 y 方向正应力分量的表示式如下^[18]

$$\sigma_{yy} = \frac{\mu b l}{\pi(1-\nu)r^6} [4(l-x)^3 y + 6(l-x^2)xy + 4(l-x)y^3 - 2xy^3] \quad (1)$$

$$\sigma_{xy} = \frac{-\mu b l}{\pi(1-\nu)r^6} [(l-x)^4 + 2x(l-x)^3 - 6xy^2(l-x) - y^4] \quad (2)$$

其中 μ 为切变模量, b 为 Burgers 矢量的模, ν 为 Poisson 比.

2.3 近自由表面螺型位错产生的应力场

螺型位错与自由平面边界的相互作用如图 4b 所示. 图中给出了一个位于 $(-l, 0)$ 的实在螺型位错 S 和一个位于 $(+l, 0)$ 的镜像位错 S'. 图中所示半无限弹性介质中的总应力场是两部分贡献之和, 即实在位错 S 和镜像位错 S' 贡献之和. 这个应力场的剪切分量和 y 方向正应力分量的表示式如下^[18]

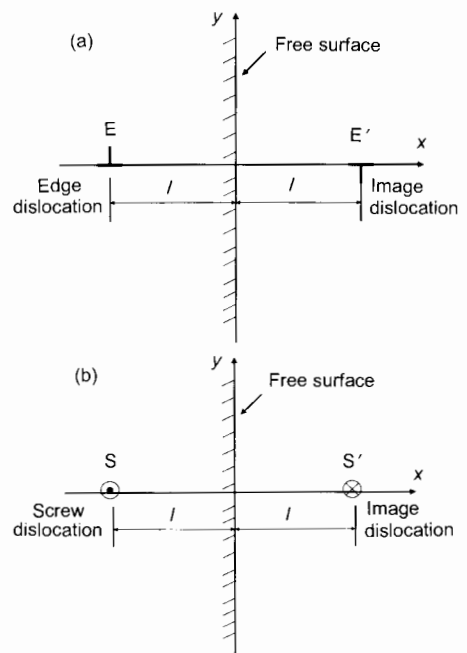


图 4 平行于自由表面的位错和它的镜像位错

Fig.4 Edge (a) and screw (b) dislocations parallel to a free surface and their image dislocations

$$\sigma_{xy} = \frac{\mu b}{2\pi} \left[\frac{y}{(1-l)^2 + y^2} - \frac{y}{(x+l)^2 + y^2} \right] \quad (3)$$

$$\sigma_{yy} = 0 \quad (4)$$

选用计算机显示器的 600×500 个像素点作为模拟场, 它代表 $6 \mu\text{m} \times 5 \mu\text{m}$ 的试样尺寸, 它可以位错分布显示在屏幕上. 正负平行刃型位错分布在 xOy 面上, 位错密度大约为 $3 \times 10^{14} \text{m}^{-2}$, 平行的直螺型位错段的密度大约为 10^{12}m^{-2} 的量级. 计算中所用 Cu 的切变模量 $\mu = 42 \text{GPa}$, $b = 0.26 \text{nm}$, $\nu = 0.3$. 根据叠加原理, 在模拟区域内 xOy 面上任意一点的内应力为模拟单元中所有其它位置的刃型位错与螺型位错所产生应力的叠加.

3 模拟结果与讨论

在变形后的金属晶体中, 内应力的形成是变形过程中位错分布不均匀所带来的必然结果. 这些内应力在位错富集的硬区 (即位错脉络和位错墙里) 起到增加外应力的作用, 而在位错贫乏的软区 (即基体或 PSB 的通道中) 起到背应力的作用 [19].

首先, 根据实验观察结果和位错结构的模拟计算模型 (参照图 2 和图 3), 以及其他研究者的研究结果 [1,20], 对铜单晶中循环变形饱和阶段近自由表面的位错微观结构进行模拟. 模拟结果如图 5 所示, 其中符号 “+” 代表正刃型位错, 符号 “o” 代表负刃型位错, 平行线代表螺型位错段. 其次, 根据位错微观结构的模拟结果, 利用离散位错动力学计算近自由表面附近的内应力及其分布场. 然后, 利用数值分析软件 Origin 绘出内应力分布的灰度图和轮廓图, 进而分析由位错所引起的内应力的分布特征. 虽然图 5 所模拟的位错微观结构有一定的随机性, 但对于分析内应力的分布特征并没有太大的影响.

与图 5 所示位错结构相对应的内应力在 x 方向的剪切分量和在 y 方向的正应力分量的灰度图和轮廓图分别如图 6 和图 7 所示. 在图 6 和图 7 灰度图中, 白色亮点对应于具有内应力为正的最大的微区, 而黑色斑点对应于内应力为负的最大值的微区. 为了确定自由表面附近不同区域的内应力分布特征, 在模拟应力场中不同区域分别放置水平和垂直方向的测量线. 在测量线上内应力分布的变化分别示于水平和垂直方向的图注框里, 见图 6, 7.

为了研究循环变形条件下疲劳裂纹萌生期间 PSB 中内应力剪切分量的分布特征, 在图 6a 中水平线被放置在 PSB 中, 在此 PSB 中内应力剪切分量的分布如图 6a 中顶端水平方向图注框中的锯齿形曲线所示. 从图中水平方向图注框中的曲线可以清晰地看到, 在此 PSB 的通道中内应力的剪切分量几乎是零, 但在墙附近和墙里, 这一值突然跳到 90MPa 左右, 且正负值在一个位错墙的两

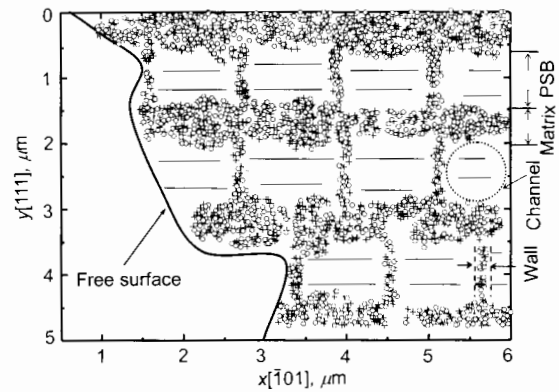


图 5 循环变形饱和阶段近自由表面附近位错微观结构的模拟结果

Fig.5 Simulated dislocation structures during the saturation stage near the free surface (+—positive edge dislocation; o—negative edge dislocation)

边交替出现. 这可能是由于从 PSB 通道到 PSB 位错墙位错分布的不连续性所引起的. 同理, 为了研究从 PSB 通道到基体脉络内应力的变化特征, 沿垂直于 PSB 的方向放置一直线并让该线从基体脉络穿过并通过 PSB 通道 (如图 6a 右边的竖直线). 从图 6a 右边垂直方向图注框中的应力变化曲线可以看到, 在 PSB 通道中内应力的剪切分量几乎是零, 但在 PSB 与基体的交界面处, 内应力的剪切分量却突然跳升到 200MPa 左右. 显然, 从 PSB 通道到基体脉络内应力剪切分量的变化幅度比从 PSB 通道到基体脉络内应力剪切分量的变化幅度要大得多, 主要原因可能是由于基体脉络中的位错密度比 PSB 中位错墙密度要大很多. 为了分析基体脉络中内应力剪切分量的分布特征, 在图 6b 中水平测量线被放置在基体脉络中. 从图中上端水平方向图注框中的锯齿形应力分布曲线可以清楚地看到, 脉络中内应力的剪切分量大小和方向都随机地变化. 图 6 中垂直测量线被放在 PSB 位错墙中, 因此可以分析从 PSB 位错墙到基体脉络内应力的剪切分量的变化趋势. 在图中右边垂直方向图注框中的应力变化曲线可以看到, 从 PSB 位错墙到基体脉络中, 内应力的剪切分量在 PSB 与基体的交界面处发生急剧地变化, 在交界面处出现最大值. 为了研究 PSB 与基体交界面处内应力的分布特征, 在图 6c 中水平测量线被放置在 PSB 与基体交界面处. 从图 6c 上端水平框中的锯齿形分布曲线可以清楚地看到, 在 PSB 位错墙与基体脉络的交界面处内应力的剪切分量出现最大值. 从图中右边垂直框中的锯齿线我们也可以发现内应力剪切分量的极值也可以出现在 PSB 通道与基体脉络的交界面处或 PSB 位错墙与基体脉络交界面与自由表面交界的侵入处.

内应力在 y 方向的正应力分量对螺型位错的攀移运

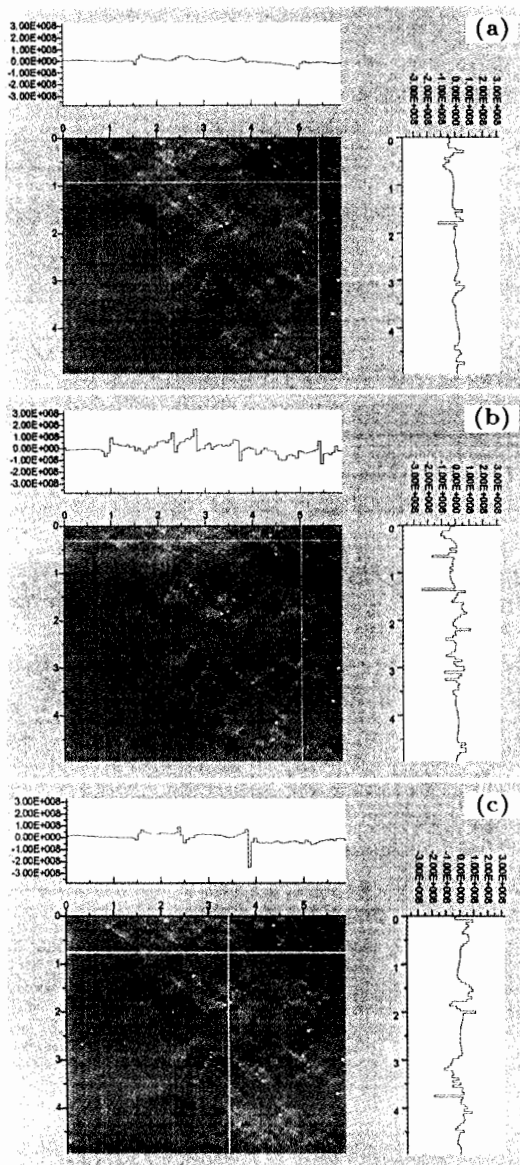


图 6 内应力在 x 方向的剪切分量的灰度和轮廓图

Fig.6 The gray scale and profile graphs of the shear component of internal stresses (Pa) along x direction (a) the horizontal line is placed in a PSB, and the vertical line crosses over three PSBs from dislocation matrices (veins) to PSB channels (b) the horizontal line is placed in a dislocation matrix (vein), and the vertical line crosses over three PSBs from dislocation matrices to dislocation walls of PSB (c) the horizontal line is placed in the interface between a PSB and a dislocation matrix, and the vertical line locates near the surface

动起重要作用. 因此, 有必要计算和分析内应力在 y 方向的正应力分量. 内应力在 y 方向的正应力分量的灰度和轮廓图如图 7 所示. 可以看到近自由表面附近 y 方向的正应力分量与剪应力分量的分布特征几乎完全相同. 还需指

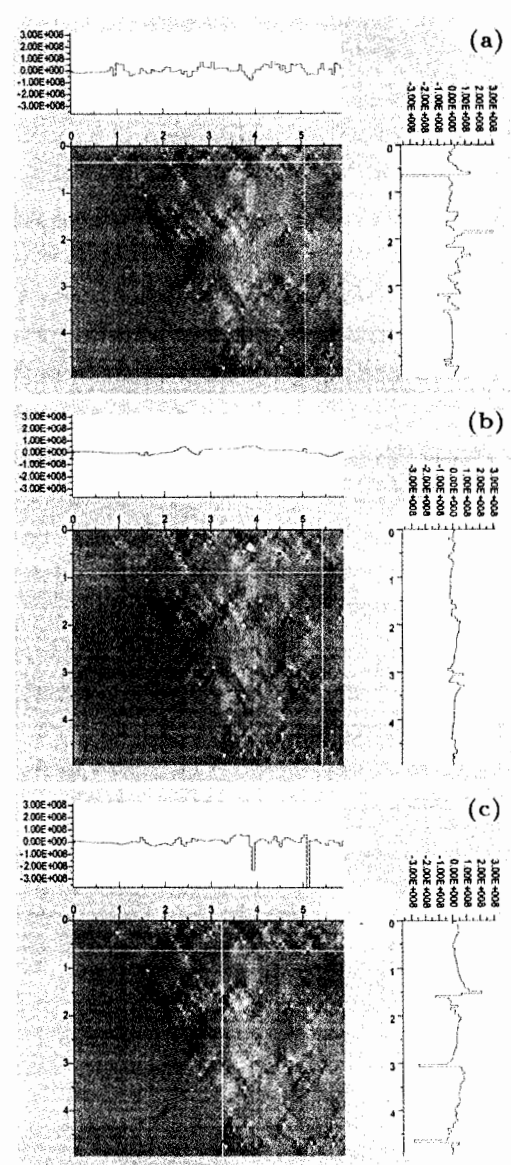


图 7 内应力在 y 方向的正应力分量的灰度和轮廓图

Fig.7 The gray scale and profile graphs of the normal component of internal stresses (Pa) along y direction (a) the horizontal line is placed in a PSB, and the vertical line crosses over three PSBs from dislocation matrices (veins) to PSB channels (b) the horizontal line is placed in a dislocation matrix (vein), and the vertical line crosses over three PSBs from dislocation matrices to dislocation walls of PSB (c) the horizontal line is placed in the interface between a PSB and a dislocation matrix, and the vertical line locates near the surface

出, 在一个经受循环载荷的真实样品中外部载荷引起的外应力的分布对疲劳裂纹的萌生也有重要作用. 目前, 综合考虑内应力和外应力对疲劳裂纹萌生的迭加作用的研究工作正在进之中, 研究结果将在后续文章中报道.

4 结论

(1) 在循环变形饱和阶段 Cu 单晶中, 近自由表面附近的 PSB 通道中的内应力几乎为零; 但在 PSB 位错墙附近内应力突然跳升, 可达 90 MPa 左右; 且在一个 PSB 位错墙的两边正负内应力交替出现. 从一个 PSB 通道到基体脉络附近, 内应力的值从几乎是零突然增大, 且增幅比从一个 PSB 通道到 PSB 位错墙要大得多. 从 PSB 通道到基体脉络的交界处个别地方会出现内应力的最大值.

(2) 沿着 PSB 方向, 在基体脉络中内应力的大小和方向都随机地变化. 垂直于 PSB 方向, 在一个 PSB 位错墙里内应力的大小和方向都随机地变化, 但变化幅值要比在基体脉络中小得多, 在 PSB 位错墙和基体的交界面处内应力突然跳升到最大.

(3) 近自由表面附近内应力的最大值不仅出现在 PSB 与基体的交界面处, 也出现在 PSB 与基体和自由表面的交界面的侵入处.

(4) 在面心立方单晶体中, 疲劳裂纹最可能在 PSB 与基体的交界面处或在 PSB 与基体和自由表面的交界面处萌生, 即实验所观察到的那些黑色微区.

参考文献

- [1] Suresh S. *Fatigue of Materials*. UK, Cambridge: Cambridge University Press, 1998: 132
- [2] Miller K J, de Los Rios E R. *Short Fatigue Crack*. London: European Structural Integrity Society Publication, 1992: 55
- [3] Zhang X P, Wang C H, Chen W, Ye L, Mai Y W. *Scr Mater*, 2001; 44: 2443
- [4] Lukás P, Kunz L. *Mater Sci Eng*, 2001; A 314: 7
- [5] Forsyth P J E. *Nature*, 1953; 171: 172
- [6] Katigiri K, Omura A, Koyanagi K, Awatani J, Shiraishi T, Kaneshiro H. *Metall Trans*, 1977; 8 A: 1769
- [7] Basinski Z S, Pascual R, Basinski S J. *Acta Metall*, 1983; 31: 591
- [8] Hunsche A, Neumann P. *Acta Metall*, 1986; 34: 207
- [9] Ma B T, Laird C. *Acta Metall*, 1989; 37: 325
- [10] Antonopoulos J G, Brown L M, Winter A T. *Philos Mag*, 1976; 34: 549
- [11] Essmann U, Gösele U, Mughrabi H. *Philos Mag*, 1981; 44 A: 405
- [12] Tanaka K, Mura T. *J Appl Mech*, 1981; 48: 97
- [13] Sauzay M, Gilormini P. *Fati Frac Eng Mater Struct*, 2000; 23: 573
- [14] Repetto F A, Ortiz M. *Acta Mater*, 1997; 45: 2577
- [15] Yang J H, Li Y, Li S X, Ma C X, Li G Y. *Mater Sci Eng*, 2001; 299 A: 51
- [16] Yang J H, Li Y, Cai Z, Li S X, Ma C X, Han E H, Ke W. *Mater Sci Eng*, 2003; 345 A: 164
- [17] Li S X, Li Y, Li G Y, Yang J H. *Philos Mag*, 2002; 82A: 867
- [18] Yang S H. *Principle of Dislocation Theory in Crystals*. 2nd ed, Beijing: Science Press, 1998: 81
(杨顺华. 晶体位错理论基础 (第一卷). 第 2 版, 北京: 科学出版社, 1998: 81)
- [19] Mughrabi H. *Mater Sci Eng*, 2001; 309-310 A: 237
- [20] Holzwarth U, Essmann U. *Appl Phys*, 1993; 57 A: 131