

金属/陶瓷界面断裂的原子尺度研究

梁立红^{1,3*}, 付雪琼^{1,3}, 魏悦广²

(1. 中国科学院力学研究所, 北京 100190;

2. 北京大学工学院, 北京 100871;

3. 中国科学院大学工学院, 北京 101408)

摘要: 金属/陶瓷界面在化工、机械、电子以及航空航天领域有广泛应用, 如航空发动机叶片由于较高的服役温度, 合金基底上往往要沉积或涂覆上一层耐高温、抗氧化的陶瓷涂层作为热保护, 金属/陶瓷界面的稳定性直接影响了器件的服役性能和寿命。因此金属/陶瓷界面的失效吸引了广泛的研究兴趣, 为了理解界面的基本断裂机制, 对金属/陶瓷界面断裂的原子尺度研究具有重要意义。本文针对 Ag/MgO 界面采用分子力学方法, 系统研究了共格界面和含位错的半共格界面的拉伸和剪切行为, 发现了界面本征特性、厚度效应以及缺陷效应。对共格界面揭示了独立于整体结构厚度的界面本构、以及理想的界面强度和界面断裂韧度等界面特征参数。研究还表明整体结构的断裂方式依赖于结构的厚度: 随厚度增加, 拉伸断裂从连续断裂转变为灾变突断。界面剪切呈现周期特征, 每周期界面位移随加载开始缓慢增加, 界面断裂时呈现突跳, 对应原子键断裂、界面滑移一个单胞; 随厚度增加, 由于金属和陶瓷的弹性应变能增加, 第一周期突跳前的界面位移增加。对含有位错的半共格界面的研究表明, 无论拉伸还是剪切, 界面强度都较理想强度降低。拉伸情况, 界面不再是均匀断裂而是从位错核开始; 剪切情况界面滑移对应位错运动, 滑移周期比起共格界面大大减小, 界面位移比共格界面增加, 随加载变得连续。缺陷效应从一定程度解释了界面强度和断裂位移在微观和宏观尺度上的差异。

关键词: 金属陶瓷界面; 分子动力学; 界面本构; 尺度效应; 缺陷效应

*基金项目: 国家自然科学基金项目 (11672296, 11372318)

通讯作者: 梁立红, 1974 年 4 月, 副研, 表界面和微纳米力学以及脆性涂层损伤失效, E-mail: lianglh@lnm.imech.ac.cn