

3 碲烯范德华异质结的应用探索

3.1 光电探测器

Jinrong Yao 等科研人员将研究目光投向了 Te 与 CdS 构建的范德华异质结。他们通过系统的实验研究与性能表征发现, Te/CdS 范德华异质结具有极高的载流子迁移率。这一关键特性使得该异质结在光电信号的快速响应与高效传输方面具备显著优势。在光电探测器中, 载流子迁移率直接影响着探测器对光信号的捕捉速度和转换效率, 高迁移率能够让探测器更迅速地将光信号转化为电信号, 从而实现对微弱光信号的精准探测。因此, Te/CdS 范德华异质结凭借其出色的载流子迁移性能, 有望成为设计高性能光电探测器的核心材料体系, 为光电探测技术在成像、通信、环境监测等领域的升级提供有力支撑^[2]。

3.2 太阳能电池

太阳能电池作为清洁能源利用的重要载体, 其能量转换效率是衡量性能的核心指标。Wu K 及其团队致力于开发基于 2D Te 与过渡金属二硫族化合物构建的异质结太阳能电池, 并报道了一系列具有优异性能的研究成果^[3]。其中, Te 与 WS₂ 形成的异质结太阳能电池, 其功率转换效率 (PCE) 高达 18.8%; 而 Te 与 WTe₂ 构建的异质结太阳能电池, 功率转换效率更是达到了 22.5%。这一效率水平在同类二维材料异质结太阳能电池中表现突出, 充分体现了碲烯与过渡金属二硫族化合物之间良好的界面匹配性和电荷传输特性。

3.3 低功耗逻辑电路

利用碲烯的可调掺杂特性 (通过栅压调控实现 n 型 / p 型转变), 与 MoS₂ 构建异质结逻辑电路, 成功实现反相器、与非门等基础单元。该器件还被证实可作为反相器工作, 且能通过光照实现关闭功能。这种多功能器件兼具集成模块的紧凑性, 拓宽了碲基异质结的应用范围, 也为碲基器件在集成电路领域的应用提供了参考。^[4]

4 结语

当前碲烯范德华异质结研究虽已在电子、光电、能源等领域展现出独特优势, 但其发展仍面临诸多关键挑战。在材料制备层面, 大面积高质量碲烯单晶及异质结的可控制备存在均匀性不足、产率低的问题, 难以满足器件规模化应用需求; 界面调控方面, 缺陷与应力分布的精准表征缺乏有效手段, 界面电荷转移与能带对齐机制的定量研究仍待深化; 稳定性上, 碲烯在空气环境中的氧化降解机制尚未完全明晰, 导致器件长期工作可靠性受限; 器件集成环节, 从实验室原型到规模化制造的工艺兼容性仍需突破。

但是, 通过技术创新与多学科交叉融合, 这些挑战有望逐步攻克。制备技术上, 原子级精准转移与原位生长技术的发展将实现高质量异质结的可控制备; 表征手段上, 球差电镜、角分辨光电子能谱等先进技术的应用将深化界面机制

认知; 稳定性提升可通过表面修饰与封装技术实现; 功能拓展方面, 多元二维材料协同的异质结设计或将诱导超导、拓扑量子效应等新奇物理现象, 理论模拟与机器学习辅助的物性预测将加速高性能器件开发, 推动碲烯范德华异质结在 6G 毫米波通信、红外成像、柔性能源等领域从基础研究迈向产业化应用, 为下一代电子信息与能源技术提供核心材料支撑。

参考文献

- [1] Novoselov, Kostya S., et al. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 306.5696 (2004): 666-669.
- [2] Yao J, Chen F, Li J, et al. Mixed-dimensional Te/CdS van der Waals heterojunction for self-powered broadband photodetector. *Nanotechnology*, 32.41 (2021): 415201.
- [3] Wu K, Ma H, Gao Y, et al. Highly-efficient heterojunction solar cells based on two-dimensional tellurene and transition metal dichalcogenides. *Journal of Materials Chemistry A*, 7.13 (2019): 7430-7436.
- [4] Cheng, Yue, et al. Multifunctional optoelectronic devices based on two-dimensional tellurium/MoS₂ heterojunction. *Applied Physics Letters*, 125.17 (2024).
- [5] Bach, Thi Phuong Anh, et al. 2D van der Waals heterostructure with tellurene floating-gate for wide range and multi-bit optoelectronic memory. *ACS nano*, 18.5 (2024): 4131-4139.
- [6] Yang, Hengyu, et al. "A ternary composite with TeO₂/Te heterostructure towards reversible six-electron transfer for advanced aqueous zinc batteries." *Chemical Engineering Journal* 507 (2025): 160410.
- [7] Wu W, Qiu G, Wang Y, et al. Tellurene: its physical properties, scalable nanomanufacturing, and device applications. *Chemical Society Reviews*, 47.19 (2018): 7203-7212.
- [8] Zeng L H, Lin S H, Li Z J, et al. Fast, self-driven, air-Stable, and broadband photodetector based on vertically aligned PtSe₂/GaAs heterojunction. *Advanced Functional Materials*, 28.16 (2018): 1705970.
- [9] Zhu Z, Cai X, Yi S, et al. Multivalency-driven formation of Te-based monolayer materials: a combined first-principles and experimental study. *Physical review letters*, 119.10 (2017): 106101.
- [10] He Z, Yang Y, Liu J W, et al. Emerging tellurium nanostructures: controllable synthesis and their applications. *Chemical Society Reviews*, 46.10 (2017): 2732-2753.
- [11] Wang Y, Qiu G, Wang R, et al. Field-effect transistors made from solution-grown two-dimensional tellurene. *Nature Electronics*, 1.4 (2018): 228-236.
- [12] Berweger S, Qiu G, Wang Y, et al. Imaging carrier inhomogeneities in ambipolar tellurene field effect transistors[J]. *Nano letters*, 19.2 (2019): 1289-1294.

Numerical Simulation Analysis of Stress Intensity Factor of TC21 Titanium Alloy Based on Extended Finite Element Method (XFEM)

Yang Gao¹ Chenchao Tian¹ Juan Zhang¹ Hao Zhang¹ Anqi Chen²

1. Xi'an Hantang analysis and Testing Co., Ltd, Xi'an, Shaanxi, 710016, China

2. Northwest Institute for Nonferrous Metal Research, Xi'an, Shaanxi, 710016, China

Abstract

TC21 titanium alloy, as a high-strength, high-toughness, damage-tolerant structural titanium alloy, is widely used in the defense, military, aerospace fields. In aerospace applications, it is often subjected to multi-field coupling conditions such as force field and temperature field. Therefore, quantitatively studying its fatigue damage tolerance performance is of great significance. This paper focuses on the stress intensity factor K , an important indicator in the fatigue crack growth process, and conducts theoretical calculations and crack growth numerical simulations based on XFEM. The results analysis proves that the simulation results are relatively close to the actual situation, with an error of less than 5% compared to the theoretical calculation results, which can accurately reflect the crack growth process of three-dimensional CT specimens. At the same time, it also verifies the existence of the "tunnel effect" in the crack growth process, that is, the growth rate of internal cracks is often greater than that of surface cracks.

Keywords

CT specimen; XFEM; crack propagation; Stress intensity factor

基于扩展有限元 XFEM 的 TC21 钛合金应力强度因子数值模拟分析

高阳¹ 田晨超¹ 张娟¹ 张浩¹ 陈安琦²

1. 西安汉唐分析检测有限公司, 中国·陕西 西安 710016

2. 西北有色金属研究院, 中国·陕西 西安 710016

摘 要

TC21 钛合金作为一种高强高韧、损伤容限型结构钛合金在国防军工、航空航天领域应用广泛, 其在航空航天应用场景中多处于力场、温度场等多场耦合工况下, 因此, 量化研究其疲劳损伤容限性能具有非常重大的意义。本文针对疲劳裂纹扩展过程中应力强度因子 K 这一重要指标, 分别进行了理论计算和基于 XFEM 的裂纹扩展数值模拟; 通过结果分析证明了该模拟结果和实际情况较为接近, 与理论计算结果误差在 5% 以内, 可以准确的反映三维 CT 试样裂纹扩展过程; 同时也验证了裂纹扩展过程“隧道效应”的存在, 即内部裂纹的扩展速率往往大于表面裂纹。

关键词

CT 试样; XFEM; 裂纹扩展; 应力强度因子 K

1 引言

钛合金作为一种重要的结构金属, 其具有强度高、耐腐蚀性好、耐热性高、密度低等特点而被广泛用于航空航天领域。其中 TC21 钛合金在高性能航空及航天飞行器结构件制造中有着巨大的应用前景, 作为航空航天用主承力结构件其多处于力场、温度场等多场耦合工况下, 对其疲劳性能提出了更高要求^[1-2], 为了适应飞机及航天器疲劳损伤容限设计

准则的要求, 必须对其损伤容限性能进行研究。断裂韧性、裂纹扩展速率则是表征损伤容限性能的重要指标, 其中应力强度因子 K 作为表征裂纹扩展速率的重要参数, 通过试验或数值模拟的方式对其进行研究具有重要意义。

目前对断裂韧性、裂纹扩展速率的试验方案都是基于 MTS、INSTRON、Zwick 等主流试验平台及设备, 通过 COD 规采集裂纹扩展数据及一定系统性柔度修正方案测得裂纹扩展速率的数据, 但以上方案都是根据 ASTM E647-2015^[3] 和 GB/T 6398-2017^[4] 规范中对 CT 试样应力强度因子计算解析公式的二维平面应变假设, 这与实际三维试样在裂纹扩展试验中的应力状态存在差异, 实际情况中由于

【作者简介】高阳 (1994–), 男, 中国陕西宝鸡人, 本科, 助理工程师, 从事材料力学性能研究。

“隧道效应”的存在，内部裂纹的扩展速率往往大于表面裂纹。因此，可自定义裂纹状态的计算机数值模拟方案成为热点^[5-6]，目前主要方案有 Abaqus 的扩展有限元（XFEM）、ANSYS、Workbench、FRANC 3D 等。

本工作只针对裂纹扩展过程中典型峰值最大应力强度因子 $K_{\max}$ 的结果值进行研究，对满足 ASTM E647-2015 标准的同规格紧凑拉伸裂纹扩展 CT 样品分别进行 XFEM 裂纹扩展模拟以及理论计算得到裂纹扩展过程中不同裂纹长度下的最大应力强度因子 $K_{\max}$ 值，并通过以上结果来分析 TC21 钛合金在裂纹扩展过程中的规律。

2 扩展有限元（XFEM）的理论基础

扩展有限元法由 Belytschko 教授于 1999 年提出，其基于单位分解理论很大程度上降低了对网格划分的依赖度，引入能够反映裂纹面不连续性的 Heaviside 函数以及可以反映裂纹尖端渐进位移场奇异性的附加函数来描述单元内部的间断属性，使有限元网格与裂纹扩展同时相互独立而存在，允许裂纹穿过某个网格单元继续扩展，从而能够模拟任意形状、任意路径的裂纹。单元内任意点 x 的位移可以表示为：

$$u_{XFEM}(x) = \sum_{j=1}^n N_j(x) u_j + \sum_{h=1}^{mh} N_h(x) [H(x) - H(x_h)] a_h + \sum_{k=1}^{mt} N_k(x) \left[\sum_{l=1}^4 (F_l(x) - F_l(x_k)) b_k^l \right]$$

其中， n 为单元常规有限元节点数， N_j 为形函数， u_j 为常规有限元节点自由度向量， mh 为裂纹面两边增强节点数， $H(x)$ 是点 x 处的 Heaviside 函数值， $H(x_h)$ 是增强节点 h 处的 Heaviside 函数值， a_h 为裂纹面两边增强节点自由度向量； mt 裂尖增强节点数， $F_l(x)$ 是裂尖增强函数在点 x 处的值， $F_l(x_k)$ 是裂尖增强函数在点 k 处的值， b_k^l 为裂尖增强节点自由度向量。

而对于点 x 处的 Heaviside 函数值 $H(x)$ 值，在裂纹上方时取 1，在裂纹下方时取 -1，即：

$$H(x) = \begin{cases} 1, & x - x^* \geq 0 \\ -1, & \text{其他} \end{cases}$$

其中 x 为考察点， x^* 为距离点 x 处最近的裂纹面上的点。

同时，对于各向同性材料， $F_l(x)$ 函数可经过一系列线性解析，在裂尖极坐标系中，其表达式为：

$$F_l(r, \theta) = \left[\sqrt{r} \sin \frac{\theta}{2}, \sqrt{r} \cos \frac{\theta}{2}, \sqrt{r} \sin \theta \sin \frac{\theta}{2}, \sqrt{r} \sin \theta \cos \frac{\theta}{2} \right]$$

其中 (r, θ) 为点 x 处于裂尖极坐标系下的坐标。

经上述内容即可将点 x 处的 Heaviside 函数值 $H(x)$ 和裂尖增强函数 $F_l(x)$ 值确定，从而确定单元内任意点 x 的位移 $u_{XFEM}(x)$ ，精确量化的描述裂纹尖端的位置和状态。

3 TC21 钛合金裂纹扩展模拟

3.1 裂纹扩展模拟参数

在利用 Abaqus 有限元模拟软件进行裂纹扩展模拟前需

要 TC21 钛合金的弹性模量、密度等基本材料参数，但由于 Abaqus 数值模拟软件中必须保证各个参量的单位制统一，因此本工作中涉及的应力、载荷、长度的单位分别设置为 MPa、N、mm，同时对应于本文讨论的应力强度因子数值的单位则为 $\text{MPa} \cdot \text{mm}^{1/2}$ ，针对于此次试验的 TC21 钛合金锭进行取样做了基本的静力学试验得到了如下表 1 的材料参数：

表 1 TC21 钛合金基本材料参数

材料参数	数值	单位
弹性模量	113000	MPa
泊松比	0.33	/
密度	4.5×10^{-3}	g/mm^3
屈服强度	1015	MPa
抗拉强度	1147	MPa
状态	退火态 (M)	/

同时，模拟依据试验依据 ASTM E647-2015 规范中关于裂纹扩展标准 CT 试样的尺寸要求，设计裂纹扩展 CT 试样模型尺寸如图 1。

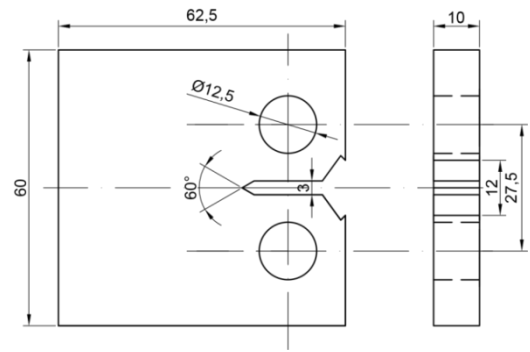


图 1 CT 试样模型尺寸图

3.2 裂纹扩展数值模拟

本节将基于 Abaqus 2020 数值模拟软件的扩展有限元（XFEM）模块，对 TC21 钛合金标准 CT 试样模型进行数值模拟得到对应条件下的应力强度因子 K 值，并加以分析。

本工作中的裂纹扩展数值模拟三维模型采用满足 ASTM E647-2015 规范的图 1 标准样品尺寸，在 Abaqus 2020 有限元模拟软件的 part 模块中创建如图 2(a) 的 CT 试样三维模型。

基于 Abaqus 的 XFEM 模块可以实现动态裂纹的扩展过程，但是在此过程中 Abaqus 的历程输出无法实时输出并保存应力强度因子 K 值，因此本模拟在静态力学下，对多组特定裂纹长度的有限元模型进行单次静态模拟，在设置裂纹长度 a 为 15.0mm、17.5mm、20.0mm、22.5mm、25.0mm、27.5mm、30.0mm 的情况下，分别进行模拟并输出对应的应力强度因子 K 值。

首先，在创建好的 CT 试样三维模型中引入对应长度的裂纹面，在材料属性中输入对应的弹性模量、泊松比等材料