DOI：10.13234/j.issn.2095-2805.2025.7.266 中图分类号：TM911 文献标志码：A

锂离子电池硅负极断裂的相场法模拟

张 可[1]，刘 靖[2]，房冉冉[1]，王 维[1]
(1.山东石油化工学院智能制造与控制工程学院，东营 257061；2.北京科技大学材料科学与工程学院，北京 100083)

摘要：相场断裂方法通过定义序参量来表示裂纹，利用系统最小能量变分原理得到描述裂纹发展的控制方程。通过对控制方程的推导，建立了相场理论的框架，包括基于能量原理建立相场断裂损伤演化方程和边界条件。对含缺口平板进行了拉伸和剪切模拟，断裂路径和支反力均与文献结果吻合。利用相场方法模拟了锂离子电池不同直径硅负极充电时的裂纹扩展问题，结果表明：较大直径(400 nm)硅颗粒在充电时由于表面受到较大拉应力，很快发生开裂并向内部扩展，且断裂能量释放率对裂纹扩展影响较大，能量释放率较小时，起裂点较多，裂纹密度较大；小直径(100 nm)硅颗粒在充电时内部发生断裂，且其断裂时间要早于大尺寸硅颗粒。

关键词：相场法；锂离子电池；硅纳米颗粒；断裂

Phase Field Method for Simulation of Fracture of Silicon Anode in Lithium-ion Batteries

ZHANG Ke[1], LIU Jing[2], FANG Ranran[1], WANG Wei[1]
(1. School of Intelligent Manufacturing and Control Engineering, Shandong Institute of Petroleum and Chemical Technology, Dongying 257061, China; 2. School of Materials Science and Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China)

Abstract: In the phase field fracture method, the crack is represented by defining an order parameter, and the governing equation describing the crack development is obtained by using the minimum energy variational principle for the system. In this paper, the framework of phase field theory was established through the derivation of governing equations, including the establishment of phase field fracture damage evolution equation and boundary conditions based on the energy principle. Tensile and shear simulations were carried out on a plate with a notch, and the fracture path and support reaction were in good agreement with the results reported in the literature. The crack propagation of lithium-ion batteries with different diameters of silicon anode during charging was simulated using the phase field method. Results show that the large-diameter (400 nm) silicon particles quickly exhibit crack during charging due to the large tensile stress on their surfaces, and the crack propagates inwards. The fracture energy release rate has a great influence on the crack propagation, and a small energy release rate results in more crack initiation points and a high crack density. In comparison, internal fracture appears in small-diameter (100 nm) silicon particles during charging, and the fracture time is earlier than that of large-sized silicon particles.

Keywords: Phase field method; lithium-ion battery; silicon nanoparticle; fracture

锂离子电池因为具有高能量密度、高放电电压、自放电率低等优点，成为目前电子设备中的主要供能元件。在“双碳”目标下，新能源汽车的爆发增长又使得锂离子电池的重要性日益突出[1]。获取更高能量密度、低成本及长寿命的锂离子电池变得越来越迫切[2-3]。

锂离子电池的性能退化与电极材料的锂化断裂现象有着密切的联系，因此电极材料的锂化断裂

收稿日期：2022-10-11；**修回日期：**2023-02-15，2023-02-27；
录用日期：2023-03-07；**网络首发日期：**2023-04-17
基金项目：东营市科学发展基金资助项目(DJ20211014)
This work is supported by the Science Development Foundation of Dongying under the grant DJ20211014

问题是锂离子电池的核心问题之一，其对电池的安全性、可靠性、耐久性有重要影响。提升电池性能需要对电极材料锂化断裂行为进行深入研究。对于断裂理论的研究，早在 1921 年 Griffith[4]通过对玻璃的脆性断裂研究，提出了基于能量的断裂理论，当裂纹扩展释放的能量高于产生新的断裂表面需要的表面能时裂纹开始扩展。Irwin 通过改进上述理论，将其使用范围由脆性材料扩展到准脆性材料[5]，并于 1957 年提出应力强度因子作为描述裂纹尖端受力情况的基本参量[6]。Francfort 和 Marigo[7]提出断裂变分原理，通过对固体所需要的能量进行最小化处理以确定裂纹扩展时所需要的驱动力，不需要提前预知裂纹扩展路径，但表面能中的边界积分不易处理(裂纹边界待求)。

数值模拟[8]是揭示锂离子电池电极材料内部断裂损伤机理的有效手段，目前模拟断裂的数值方法主要有几何描述方法和非几何描述方法 2 类，前者包括单元删除法、界面单元法等，后者包括扩展有限元法、相场断裂法等。几何描述方法由于收敛性差、裂纹路径不够准确而应用较少。扩展有限元法属于间断界面处理方法，需要通过特殊的裂纹追踪技术(如水平集法 (level sets)[9]、快速推进法(fast marching)[10])来追踪裂纹面，这些方法在处理三维以及多裂纹问题上显得尤为繁琐，目前大多处理一些单裂纹面的简单三维问题。相场断裂法因避免了繁琐的裂纹面追踪受到科研工作者的极大关注。相场断裂方法通过一系列的微分方程描述断裂物理过程，在模拟裂纹的起裂、传播、分叉等现象中表现出了一定特点，已经成为研究断裂问题的重要方法之一[11]。

近些年，学者们提出了多种相场损伤模型。文献[12]结合相场理论，通过引入相场序参量对离散裂纹拓扑进行了正则化处理，建立了断裂面的弥散表达式，为相场断裂模型的发展奠定了坚实的理论基础；文献[13]为弹性固体中裂纹扩展的相场模型建立了一个热力学框架，并采用多场有限元方法开展了裂纹扩展的数值模拟；文献[14]提出了 1 种可以增强鲁棒性且与速率无关的分子算法相场模型；文献[15]建立了可用于研究各向异性材料断裂过程的相场模型。随着相场损伤模型在脆性材料、准脆性材料越来越广泛的运用，部分学者[16-20]利用相场法对弹塑性材料进行断裂研究，进一步拓展了相场法在研究材料损伤方面的应用。

本文将相场方法引入锂离子电池硅负极断裂研究，介绍相场断裂方法的基本原理，模拟验证经典含缺口平板的单轴拉伸和剪切。建立锂离子微纳硅负极充电的相场模型，模拟充电时的裂纹扩展问题，研究不同尺寸及能量释放率条件下的裂纹扩展规律。结果表明，相场方法适用于模拟锂离子电池负极材料的断裂过程。

1　断裂相场法相关理论

1.1　裂纹拓扑的相场近似

对于一维问题，考虑横截面为 Γ、长度为 L 的无限长杆，其占据空间 $B=\Gamma\times L$，$L=[-\infty,+\infty]$。假设杆件在轴向位置 $x=0$ 处有一条裂纹，Γ 为完全断裂裂纹面。这种尖锐的裂纹拓扑可以用辅助场变量 $d\in[0,1]$来描述，其中，$d=0$ 表示材料未断裂状态，$d=1$ 表示材料完全断裂状态。将辅助场变量 $d(x)$表示为裂纹相场，常采用的表达形式为

$$d(x)=\mathrm{e}^{-|x|/\ell} \tag{1}$$

式中，ℓ 为控制裂纹宽度的参数，当 $\ell\to 0$ 时表示尖锐裂纹。该函数满足狄利克雷型边界条件：$d(0)=1$ 和 $d(\pm\infty)=0$。尖锐裂纹和相场描述的扩散裂纹如图 1 所示，图中展示了不同宽度控制参数 ℓ 对扩散裂纹的影响，图 1(b)和 1(c)的宽度控制参数分别为 ℓ_1 和 ℓ_2，且 $\ell_1<\ell_2$。

对 $d(x)$求导可得

$$d(x)-\ell^2\ddot{d}(x)=0 \tag{2}$$

该微分方程实质为具有变分原理的 Euler-Lagrange 方程，对其构造的泛函 $I(d)$ 可表示为

$$I(d)=\frac{1}{2}\{d^2+\ell^2\dot{d}^2\}\mathrm{d}x \tag{3}$$

$$d(x)=\mathrm{Arg}\{\inf_{d\in W} I(d)\} \tag{4}$$

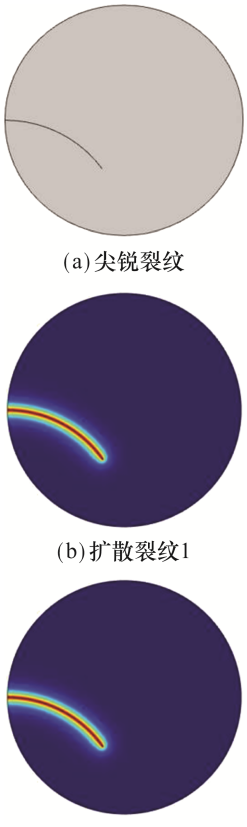
式中，$W=\{d\,|\,d(0)=1,d(\pm\infty)=0\}$。式(4)表示 $I(d)$ 取得最大下界时序参量 d 的集合。又由 dV=Γdx 和 $I(d=\mathrm{e}^{-|x|/\ell})=\ell\Gamma$，可定义泛函 $\Gamma_\ell(d)$ 为

$$\Gamma_\ell(d)=\frac{1}{\ell}I(d)=\int_B\frac{1}{2\ell}\{d^2+\ell^2\dot{d}^2\}\mathrm{d}V=\int_B\gamma(d,\dot{d})\mathrm{d}V \tag{5}$$

式中：$\Gamma_\ell(d)$ 为整个区域 B 上的裂纹集合，其与裂纹宽度控制参数 ℓ 有关；$\gamma(d,\dot{d})$ 为一维条件下单位体积的裂纹表面密度函数，在更高维度上可以表示为

$$\gamma(d,\nabla d)=\frac{1}{2\ell}(d^2+\ell^2\nabla d^2) \tag{6}$$

式中，∇ 为拉普拉斯算子。



(a) 尖锐裂纹

(b) 扩散裂纹1

(c) 扩散裂纹2

图 1 尖锐裂纹和扩散裂纹

Fig. 1 Sharp crack and diffusion crack

满足式(4)的欧拉-拉格朗日方程为

$$\begin{cases}d^2-\ell^2\nabla d=0 & \text{在}B\text{内}\\ \nabla d\cdot\boldsymbol{n}=0 & \text{在}\partial B\text{上}\end{cases} \tag{7}$$

式中，$\boldsymbol{n}$ 为垂直于固体边界的外法线向量。

1.2 系统能量函数分析

对于各项同性线弹性固体，固体总弹性应变能表示为

$$E(\boldsymbol{u},d)=\int_B\psi(\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}),d)\mathrm{d}V \tag{8}$$

式中：$\boldsymbol{u}$ 为位移张量；$\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u})$ 为应变张量；$\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u})=\frac{1}{2}\cdot(\nabla\boldsymbol{u}+\boldsymbol{u}\nabla)$，$\psi(\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{u}),d)$ 为单位体积的弹性应变能。因为弹性应变能对拉应力和压应力是等同的，而只有拉应力促进裂纹的扩展，所以文献[21]和文献[11]对弹性应变进行拉压分解，则有

$$\psi(\boldsymbol{\varepsilon},d)=[g(d)+k]\psi_0^+(\boldsymbol{\varepsilon})+\psi_0^-(\boldsymbol{\varepsilon}) \tag{9}$$

式中：$g(d)$为和断裂时序参量 d 有关的函数，$g(d)$ 需满足 $g(d)=(1-d)^2$，其中 $g(0)=1$ 表示材料未破坏，$g(1)=0$ 表示材料完全断裂；k 为保证计算收敛的无穷小量，$0<k\ll1$；$\psi_0^+(\boldsymbol{\varepsilon})$、$\psi_0^-(\boldsymbol{\varepsilon})$ 分别为由拉应力和压应力引起的应变能密度，其中，$\psi_0^+(\boldsymbol{\varepsilon})$ 因为断裂而释放，所以在其前面乘上 $g(d)$。$\psi_0^\pm(\boldsymbol{\varepsilon})$ 的计算式为

$$\psi_0^\pm(\boldsymbol{\varepsilon})=\lambda\langle\varepsilon_1+\varepsilon_2+\varepsilon_3\rangle_\pm^2/2+\mu(\langle\varepsilon_1\rangle_\pm^2+\langle\varepsilon_2\rangle_\pm^2+\langle\varepsilon_3\rangle_\pm^2) \tag{10}$$

式中：ε_1、ε_2、ε_3 为应变张量 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 的 3 个主应变；λ、μ 为拉梅常数；算符 $\langle a\rangle_\pm=(a\pm|a|)/2$

裂纹扩展会形成新的表面，增加系统表面能。弹性自由能和断裂表面能构成了断裂问题系统自由能，总自由能的最小化控制裂纹扩展。根据 Griffith 断裂理论，将扩展单位面积裂纹所需要的能量定义为 G_c，则扩展 $\Gamma_\ell(d)$ 的裂纹表面所需要的能量 $W_\mathrm{c}(d)$ 为

$$W_\mathrm{c}(d)=\int_B G_\mathrm{c}\gamma(d,\nabla d)\mathrm{d}V \tag{11}$$

综上，固体总势能泛函表达式为

$$\psi(\boldsymbol{u},d)=\int_B\{[(1-d)^2+k]\psi_0^+(\boldsymbol{\varepsilon})+G_\mathrm{c}[\frac{1}{2\ell}(d^2+\ell^2\nabla d^2)]\}\mathrm{d}V \tag{12}$$

由式(12)可得，相场演化控制方程为

$$\frac{G_\mathrm{c}}{\ell}(d-\ell^2\nabla d)-2(1-d)\psi_0^+(\boldsymbol{\varepsilon})=0 \tag{13}$$

裂纹在加载和卸载过程中不会愈合，所以，为满足不可逆条件，文献[12]对 $\psi_0^+(\boldsymbol{\varepsilon})$ 进行处理，并

引入历史状态变量 $H(x,t)$，即

$$H(x,t)=\max_{\tau\in[0,t]}\psi_0^+(\boldsymbol{\varepsilon}) \tag{14}$$

此历史变量物理含义为历史最大拉伸弹性能驱动裂纹扩展。基于此可得，裂纹扩展的相场控制方程为

$$2(1-d)H-\frac{G_c}{\ell}(d-\ell^2\nabla d)=0 \tag{15}$$

数值模拟采用交错算法依次求解位移场和相场，其收敛性相比整体求解更好。相场和位移场的初始值为已知，在固体边界加载位移初始位移增量 Δu，由线弹性理论计算位移场，由位移场可求应变，然后更新历史状态变量 H，进而代入相场控制方程求解相场，随着位移增量不断增加，对历史状态变量和相场不断更新，直至算出最后加载步的位移场和断裂相场。

2　数值验证

为验证本文理论的准确性，对经典的含缺口平板模型进行模拟验证，并与文献[14]的模拟结果进行比较。模型的几何尺寸和边界条件如图 2 所示，平板底端固定，左侧中间预制一条长度为边长一半的裂纹，采用文献[14]给定的材料参数：拉梅系数 λ=121.15 GPa，μ=80.77 GPa，泊松比 ν=0.3，能量释放率 G_c=2.7 kN/m，裂纹长度参数 ℓ = 0.015 mm，加载步 Δu=1×10^{-5} mm，拉伸和剪切的加载总步数分别为 600 步和 2 000 步。

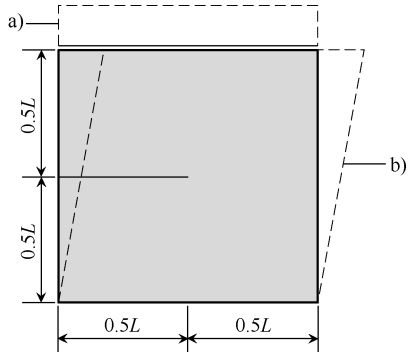


图 2　含缺口平板单边拉伸和剪切模型

Fig. 2 Unilateral tensile and shear model of plate with notch

裂纹扩展的模拟结果对比如图 3 所示，从图中可以看到，利用相场法进行的裂纹扩展结果和文献结果非常吻合，说明相场断裂法适用于材料裂纹扩展的模拟研究。

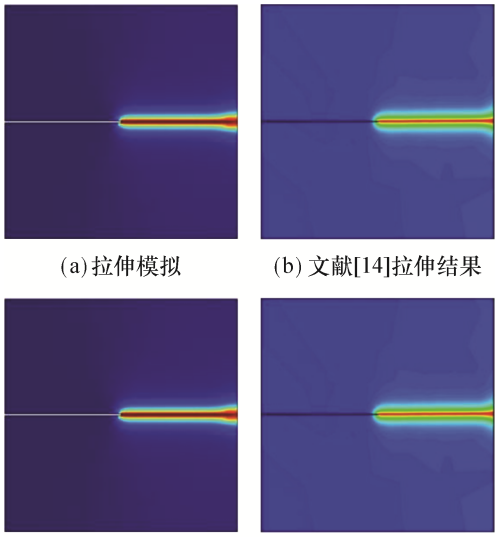


图 3　含缺口平板单边拉伸和剪切模拟和文献[14]的结果对比

Fig. 3 Comparison between simulation results of unilateral tensile and shear of plates with defects and results obtained by References [14]

进一步对比，图 4 为本文模拟得到的力−位移曲线和文献[14]的结果，从图中可以看到，2 条曲线的最大反作用力基本一致，峰前的反作用力和位移关系都为线性增加，作用力达到峰值后急剧下降。从图 3 和图 4 的分析结果看，本文的数值模拟方法准确可行。

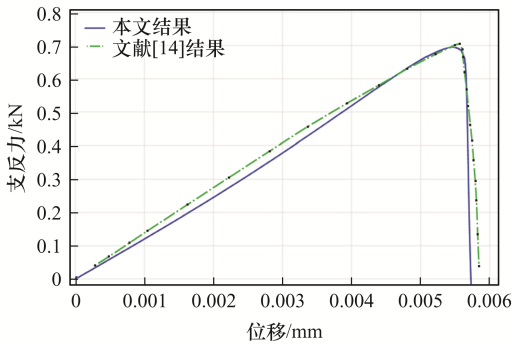


图 4　力−位移曲线对比

Fig. 4 Comparison of force-displacement curve

3 硅纳米颗粒电极的断裂模拟

硅因为具有高容量而被视为最有前景的锂离子电池负极材料之一，但其在充放电过程中体积变化大，易产生开裂，导致电池容量快速衰减，因此硅负极的断裂行为研究对提高电池寿命具有重要意义。相关研究[22-26]表明，降低硅电极材料尺寸可使得应变松弛，开裂减少，但即使电极材料采用微纳结构也无法完全克服体积变化带来的断裂问题，因此，有必要深入研究硅负极材料在充、放电过程中的变形和破坏机理。本节采用相场法模拟硅颗粒在充电过程中的断裂现象，取颗粒截面进行研究，近似为平面应变。充电过程中锂离子扩散进入硅负极，将锂化界面上的化学反应作为扩散问题考虑，锂离子的扩散场方程可推导得

$$\frac{\partial c}{\partial t}=Mk_{\mathrm{B}}T\left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 c}{\partial y^2}\right)-\frac{Mc\Omega}{N_{\mathrm{A}}}\left(\frac{\partial^2 \sigma}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 \sigma}{\partial y^2}\right)-\frac{Mc\Omega}{N_{\mathrm{A}}}\left(\frac{\partial \sigma}{\partial x}\frac{\partial c}{\partial x}+\frac{\partial \sigma}{\partial y}\frac{\partial c}{\partial y}\right) \tag{16}$$

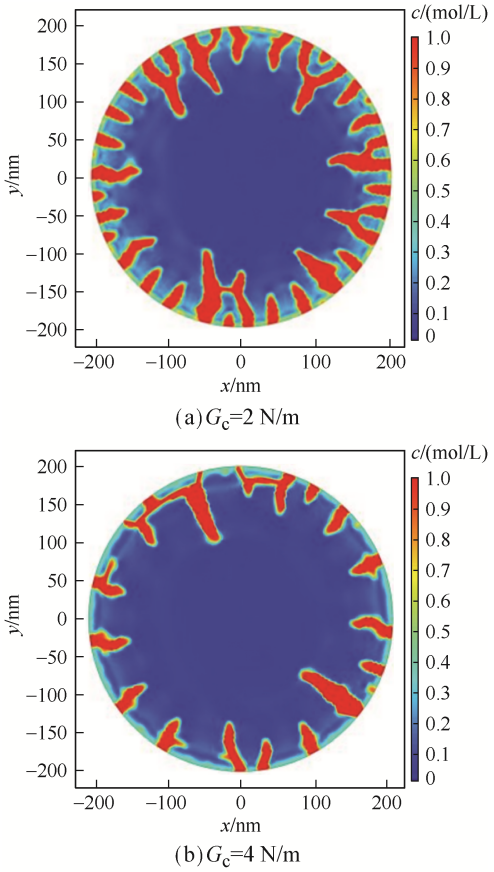
式中：M 为锂离子摩尔迁移率；k_{B} 为玻尔兹曼常数；T 为开尔文温度；c 为锂离子浓度；Ω 为偏摩尔体积；N_{A} 为阿伏伽德罗常数。建立硅颗粒锂化的相场模型，模型参数见表 1。

表 1 模型参数

Tab. 1 Model parameters

参数	数值
E/GPa	80
泊松比 ν	0.22
偏摩尔体积 Ω/(m^3/mol)	8.5×10^{-6}
T/K	298.15
断裂能量释放率 G_{c} / (N/m)	2、4
锂离子摩尔迁移率 M /[m^2/(J·s)]	500
玻尔兹曼常数 k_{B} / (J/K)	1.38×10^{-23}
阿伏伽德罗常数 N_{A}/mol^{-1}	6.02×10^{23}
纳米线直径/nm	400

采用不同断裂能量释放率即 G_{c} 分别为 2、4 N/m，在相同充电时间 10 s 的研究结果如图 5 所示。从图 5 中可以看到，充电过程中裂纹先从表面萌生然后往中心扩展。根据 Griffith 的断裂能量理论，断裂能量释放率越高，则裂纹扩展需要的能量越多，裂纹越不容易扩展；G_{c} 为 2 N/m 时，裂纹起裂点较多，裂纹扩展相对容易，裂纹密度较大；G_{c} 为 4 N/m 时，起裂点明显减少，相同时间内的裂纹密度也较小。



(a) G_{c}=2 N/m

(b) G_{c}=4 N/m

图 5 充电 10 s 时不同能量释放率的硅纳米颗粒(直径 400 nm)断裂

Fig. 5 Fracture of silicon nanoparticles with different energy release rates during charging 10 s (400 nm in diameter)

硅颗粒在锂化过程中，锂化膨胀的外层部分受到内部未锂化部分约束，外层会产生环向压应力，此时裂纹不会扩展。但上述模拟结果显示，断裂由外部开始，外层开裂由环向拉应力引起，因此可以判断在锂化过程中，颗粒表面的环向应力存在由压变拉的过程，这一转变过程与材料的塑性变形和两相(贫锂相和富锂相)结构有关。

文献[27]运用原位透射电子显微镜 TEM(transmission electron microscope)对硅颗粒(直径 620 nm)的锂化开裂进行了研究，经过 3 s 锂化时间的结果如图 6 所示，可以看到，硅颗粒在锂化过程中表面

产生裂纹且向内部扩展，与本文模拟结果较吻合。

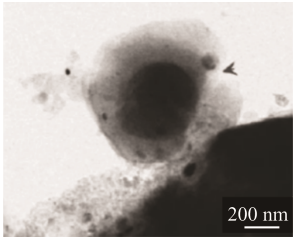


图 6　硅颗粒在锂化过程中开裂[27]

Fig. 6 Cracking of silicon particles during lithiation[27]

对直径为 100 nm 的硅颗粒充电过程进行了模拟，$G_c = 4$ N/m 、时间 = 5 s 时裂纹相场断裂情况如图 7 所示。从图中可以看到，粒子在锂化时间为 5 s 时，外表面没有开裂，但内部产生了断裂区(图中深色序参量为 1 表示开裂)，对比 400 nm 情况可知硅电极的断裂具有尺寸效应，尺寸较小时断裂发生在颗粒内部，且小直径颗粒的开裂时间要早于大直径颗粒。这种断裂的尺寸效应可以从不同颗粒尺寸的曲率分析，如图8所示。充电时硅颗粒由外部

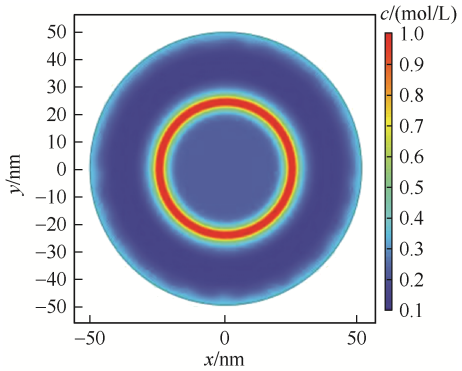


图 7　硅颗粒在锂化过程中的裂纹相场(直径 100 nm)

Fig. 7 Crack phase field of silicon particles during lithiation (100 nm in diameter)

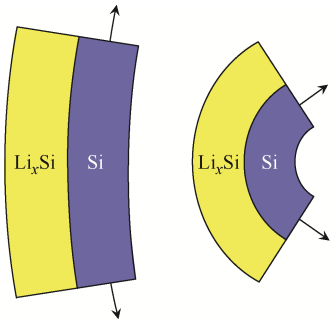


图 8　不同直径颗粒锂化应力示意

Fig. 8 Schematic of lithiation stress of particles with different diameters

向内进行锂化，外部锂化相对内部未锂化相产生拉应力，曲率越小，同体积的锂化相作用于非锂化相的体积越少，其内部拉应力越大，进而导致内部出现裂纹。

4　结语

针对锂离子电池硅负极材料断裂问题，本文利用相场理论方法，以总势能泛函为基础建立相场断裂理论模型，对经典含缺口平板进行拉伸和剪切的裂纹扩展模拟，验证了模型的准确性。通过建立锂离子电池硅负极的相场断裂模型，模拟研究了充电过程中不同能量释放率和不同尺寸微纳硅颗粒的断裂行为，包括起裂位置、裂纹数量、裂纹扩展速度等。较大直径(400 nm)硅颗粒在充电时由于表面受到较大的拉应力，先很快开裂，然后向内扩展，断裂能量释放率对裂纹扩展影响较大，较小的能量释放率，其起裂点较多，裂纹密度较大；小直径(100 nm)硅颗粒在充电时内部发生开裂，且其断裂时间要早于大尺寸硅颗粒。针对硅负极纳米颗粒，较高的能量释放率和较小尺寸的纳米颗粒可降低裂纹的扩展。

参考文献：

[1] 舒俊豪, 武小花, 杨佳珞, 等. 新能源汽车动力电池安全问题分析及改进趋势综述[J]. 电源学报, 2025, 23(3): 354-362.
Shu Junhao, Wu Xiaohua, Yang Jialuo, et al. Review of analysis and improvement trend of new energy vehicle power battery safety issues [J]. Journal of Power Supply, 2025, 23(3): 354-362. (in Chinese)

[2] 罗伟林, 张立强, 吕超, 等. 锂离子电池寿命预测国外研究现状综述[J]. 电源学报, 2013, 11(1): 140-144.
Luo Weilin, Zhang Liqiang, Lü Chao, et al. Review on foreign status of life prediction of lithium-ion batteries [J]. Journal of Power Supply, 2013, 11(1): 140-144. (in Chinese)

[3] 赵沁峰, 蔡艳平, 王新军. 锂离子电池全生命周期剩余使用寿命预测[J]. 电源学报, 2024, 22(2): 197-204.
Zhao Qinfeng, Cai Yanping, Wang Xinjun. Remaining

useful life prediction for full life cycle of lithium-ion battery [J]. Journal of Power Supply, 2024, 22(2): 197-204. (in Chinese)

[4] Griffith A A. The phenomena of rupture and flow in solids [J]. Philosophical Transactions of the Royal Society of London Series A, Containing Papers of a Mathematical or Physical Character, 1921, 221(582-593): 163-198.

[5] Irwin G R. Fracturing of metals [J]. American society for Metals, Cleveland, 1948, 147: 19-19.

[6] Irwin G R. Analysis of stresses and strains near the end of a crack traversing a plate [J]. Journal of Applied Mechanics, 1957, 24(3): 361-364.

[7] Francfort G A, Marigo J J. Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem [J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1998, 46(8): 1319-1342.

[8] 张研, 曹永娣. 用于储能系统锂电池 pack 热设计的仿真计算与实验研究[J]. 电源学报, 2019, 17(6): 193-198.
Zhang Yan, Cao Yongdi. Simulation calculation and experimental study of thermal design for lithium battery pack used in energy storage system [J]. Journal of Power Supply, 2019, 17(6): 193-198. (in Chinese)

[9] Gravouil A, Moës N, Belytschko T. Non-planar 3D crack growth by the extended finite element and level sets: part II: level set update [J]. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2002, 53(11): 2569-2586.

[10] Sukumar N, Chopp D L, Béchet E, et al. Three-dimensional non-planar crack growth by a coupled extended finite element and fast marching method [J]. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2008, 76(5): 727-748.

[11] 张豪, 于继东, 裴晓阳, 等. 相场断裂方法发展概况[J]. 高压物理学报, 2019, 33(3): 128-139.
Zhang Hao, Yu Jidong, Pei Xiaoyang, et al. An overview of phase field approach to fracture [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2019, 33(3): 128-139. (in Chinese)

[12] Bourdin B, Francfort G A, Marigo J J. Numerical experiments in revisited brittle fracture [J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2000, 48(4): 797-826.

[13] Miehe C, Welschinger F, Hofacker M. Thermodynamically consistent phase-field models of fracture: variational principles and multi-field FE implementations [J]. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2010, 83(10): 1273-1311.

[14] Miehe C, Hofacker M, Welschinger F. A phase field model for rate-independent crack propagation: robust algorithmic implementation based on operator splits [J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2010, 199(45-48): 2765-2778.

[15] Teichtmeister S, Kienle D, Aldakheel F, et al. Phase field modeling of fracture in anisotropic brittle solids [J]. International Journal of Non-Linear Mechanics, 2017, 97: 1-21.

[16] Duda F P, Ciarbonetti A, Sánchez P J, et al. A phase-field/gradient damage model for brittle fracture in elastic–plastic solids [J]. International Journal of Plasticity, 2015, 65: 269-296.

[17] Ambati M, Gerasimov T, De Lorenzis L. Phase-field modeling of ductile fracture [J]. Computational Mechanics, 2015, 55(5): 1017-1040.

[18] Borden M J, Hughes T J R, Landis C M, et al. A phase-field formulation for fracture in ductile materials: Finite deformation balance law derivation, plastic degradation, and stress triaxiality effects [J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2016, 312: 130-166.

[19] Alessi R, Ambati M, Gerasimov T, et al. Comparison of Phase-field Models of Fracture Coupled with Plasticity [M]. Advances in Computational Plasticity, 2018.

[20] Alessi R, Marigo J J, Maurini C, et al. Coupling damage and plasticity for a phase-field regularisation of brittle, cohesive and ductile fracture: one-dimensional examples [J]. International Journal of Mechanical Sciences, 2018, 149: 559-576.

[21] Amor H, Marigo J J, Maurini C. Regularized formulation of the variational brittle fracture with unilateral contact: numerical experiments [J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2009, 57(8): 1209-1229.

[22] Su Xin, Wu Qingliu, Li Juchuan, et al. Silicon-based nanomaterials for lithium-ion batteries: a review [J]. Advanced Energy Materials, 2014, 4(1): 1300882.

[23] Aricò A S, Bruce P, Scrosati B, et al. Nanostructured materials for advanced energy conversion and storage

devices [J]. Nature Materials, 2005, 4(5): 366-377.

[24] Guo Yuguo, Hu Jinsong, Wan Lijun. Nanostructured materials for electrochemical energy conversion and storage devices [J]. Advanced Materials, 2008, 20(15): 2878-2887.

[25] Szczech J R, Jin Song. Nanostructured silicon for high capacity lithium battery anodes [J]. Energy & Environmental Science, 2011, 4(1): 56-72.

[26] Ji Liwen, Lin Zhan, Alcoutlabi M, et al. Recent developments in nanostructured anode materials for rechargeable lithium-ion batteries [J]. Energy & Environmental Science, 2011, 4(8): 2682-2699.

[27] Liu Xiaohua, Zhong Li, Huang Shan, et al, Size-dependent fracture of silicon nanoparticles during lithiation[J]. ACS Nano, 2012, 6(2): 1522-1531.



张可

作者简介：

张可(1986—)，男，硕士，讲师。研究方向：新型锂离子电池电极材料。E-mail：158397177@qq.com。

刘靖(1965—　)，女，通信作者，博士，副教授。研究方向：轧钢生产过程组织性能控制，复合板制备技术。E-mail：liujing@mater.ustb.edu.cn。

房冉冉(1989—　)，女，硕士，讲师。研究方向：空间纳米材料的力学特性。E-mail：1016272074@qq.com。

王维(1989—　)，女，硕士，讲师。研究方向：材料表面处理技术。E-mail：459084179@qq.com。

(责任编辑：陈国珍)