

固体相变过程中的宏微观力学问题 及其研究进展*

孙庆平

清华大学工程力学系, 北京 100084

提要 固体相变过程中的力学问题是近年来国际上固体力学与材料科学交叉领域中的一个研究热点, 本文就作者在从事与相变有关的力学研究中所涉及到的问题以及国内外进展作一简述和展望, 以引起国内学者的关注。

关键词 相变固体; 本构理论; 细观力学; 材料增强增韧; 材料不稳定性; 材料微结构设计

1 引言

相变指的是当外界约束(如电场、磁场、温度或应力等)作连续变化时, 在特定的条件下, 物相发生突变^[1]。相变现象普遍存在于自然界和各工程技术领域。相变固体指在外加应力、温度等环境因素作用下可发生相变的固体材料。相变固体力学则是从宏微观相结合的角度定量研究相变固体在外加载荷作用下的力学行为以及与材料内部相变过程的关系。进入80年代以来, 相变固体力学的研究发展十分迅猛, 特别是众多的国际力学与材料领域著名学者如 J. W. Hutchinson, B. Budiansky, A. H. Heuer, A. G. Evans, J. K. Knowles, C. M. Wayman 等携手合作参与并推动这一领域的研究, 使得相变力学成为当今固体力学最为活跃的前沿领域之一。这一势态的形成一方面与当代科学技术的高速发展和各种新材料(如记忆合金、新型结构陶瓷、TRIP 钢和各种智能材料)的研制和开发应用密切相关, 另一方面也集中体现了近年来固体力学与材料科学、物理学高层次结合的这一国际发展趋势。它的迅速崛起必将大大推动固体力学与材料科学、固体物理学交叉学科的发展。国际力学界最具权威性的综述性刊物“应用力学评论”(Appl. Mech. Rev.)将相变固体力学列为未来固体力学的十大基础前沿研究领域之一^[2]。

由于相变问题本身为横跨多学科(力学、物理学、材料科学等)多尺度(微观、细观、

* 本研究受国家自然科学基金重大项目“材料损伤、断裂机理和宏微观力学理论”资助。

宏观)的研究领域,因此作为研究固体中各种相变过程与宏观力学响应因果关系的相变固体力学,在研究尺度上可以从原子(如相变动力学、晶体学、形核理论等)至纳米、微米和毫米尺度(如相变变体、多晶体晶粒以及多相复合材料)。在研究方法上除采用连续介质力学、细观力学、计算和实验力学的方法以外,相变力学还将综合、借鉴和吸取固体物理学、材料科学等领域有关相变研究的理论、思想、方法和实验手段。不同材料体系中不同尺度上相变力学规律的研究构成了相变力学极其丰富的研究内容,相变力学将在这一跨学科、跨尺度的研究中形成自己的研究特色和理论体系。当前相变力学的研究主要集中于①相变固体本构关系^[2-24],②相变对材料力学性能的影响。前者以马氏体相变为核心,后者则突出体现在相变强韧化与材料力学性能优化设计的研究^[24-38]。本文仅围绕上述两个方面简要介绍这一领域的国内外研究成果,目的在于与国内同行共同探讨其未来的发展,以提高我国固体相变力学的研究水平。

2 相变固体本构关系

众所周知,固体本构关系一直是固体力学与材料科学交叉学科十分活跃的研究领域,但相变固体本构关系的研究则远落后于传统金属材料。固体中相变种类繁多,仅无扩散位移式相变就有如钢和记忆合金中的马氏体相变、BaTiO₃合金中的铁电相变,FeNi合金中的铁磁相变,以及陶瓷合金ErRh₄B₄中的高温超导相变等多种,其中广泛存在于多种结构材料和功能材料(如钢、ZrO₂结构陶瓷、形状记忆合金等)中的马氏体型相变是近年来相变本构理论中研究得最多的一种机理。特别是结构陶瓷相变增韧现象的发现^[25,33,39]以及各种形状记忆合金的开发和应用^[40,41]大大促进了马氏体相变本构理论与实验的研究。近10年来国际上在这一领域所取得的突破性进展包括:①热弹性马氏体一级相变热力学理论框架的确立^[16](Falk,1980);②细观力学理论成功地用于多晶体相变塑性及相变塑性局部化现象的描述^[7,13,42];③有限变形热弹性理论应用于位移相变的连续介质力学分析以及材料不稳定性的分析(Abeyaratne,1992)^[9,10]。此外,统计力学方法用于记忆合金应力应变关系的推导^[11-14],以及晶体塑性理论用于描述相变塑性行为^[17]等也是近年来受到关注的研究课题。相变本构研究中另一重要进展是材料科学中的微结构分析测试手段与力学分析相结合用于相变塑性本构行为研究,深化了人们对相变力学行为的认识。分别介绍如下:

2.1 朗道唯象理论模型

Falk(1980)^[16]根据热弹性马氏体记忆合金应力应变曲线与铁电体电场极化强度关系之间的相似性,将Landau-Devonshire描述铁电一级相变理论用于形状记忆合金的单晶体(严格地说只是变体)并选取微观切应变作为序参量,从而得到了一维情况下Helmholtz自由能以及不同温度下应力应变关系的解析表达式。但在三维情况下,应变是一个二阶对称张量,在Helmholtz自由能表达式中需引入很多材料常数,而且有些高阶常数很难通过实验确定。根据马氏体相变的晶体学特征,引入一些适当的简化假设,可以减少自由能函数中的项数,而且不影响结果的可靠程度^[76]。但是,在温度变化诱导的马氏体相变体中,不同的马氏体变体形成自适应结构,使应变能达到最小,从宏观上看,相变体几乎没有形状改变,但从微观观察,相变体内部有细化孪晶结构,内部有变形存在,因此,存在着微观场和宏观场不一致的问题,使得微观上的序参量选择不能直接对应物体的宏观响应,即从Landau

型理论中很难直接得到相变现象的宏观响应描述。同样,对于非均匀相变或多晶体材料马氏体相变,也存在类似的问题^[77]。虽然可以类似于多晶体的弹塑性理论,引入一些平均方法,但单晶体马氏体相变的 Landau 型应力应变关系具有高阶非线性,使得平均化方法的利用存在很大的数学技术困难。Falk^[78] 利用了一些简化措施,在这方面做了一些尝试,但目前尚未见其它报道。

Landau 理论结合连续介质热力学,可以描述马氏体变体间或马氏体与母体间的畴壁移动或形核现象。界面可以被视作变形梯度不连续面,它们没有任何内部结构,也没有界面能存在^[79]。在形状记忆合金中,这种处理是可行的。若将界面视为有限宽度,变形梯度连续变化,则应变梯度对能量的贡献必须加以考虑。在 Landau-Ginzburg 理论中,自由能函数中补充了应变梯度的能量项。利用一维 Ginzburg-Landau 理论,选择惯习面上的剪切变形为序参量,Falk^[80] 得到了畴壁的结构和能量。结合连续介质热力学理论^[81,82],对应于畴壁移动问题,可以得到两个扭结型和两个孤立子型的孤波解。没有外力不能移动的扭结型解代表马氏体和母体或马氏体间的单个畴壁;孤立子解则对应于在母体中马氏体的形核或相反的情况。为了解释这些结果,Falk^[83] 详细讨论了这些解的稳定性,其中解的存在性和唯一性已由 Sprekels^[84] 等证实。但是一维 Ginzburg-Landau 理论只能应用到仅包含一个界面或一些平行界面的单晶,具有很大的局限性^[85]。另外,序参量的不同选取,可得到不同类型的 Landau 型唯象理论^[85-87],孰优孰劣,尚难定论。Landau 理论属平均场理论,并不能考虑具体材料相变过程中的内部结构变化,但由于能很好地描述记忆合金的主要本构特征(如伪弹性、铁弹性、软模和形状记忆现象等),加上 Landau 理论本身是具有高度概括性和深刻理论背景的普适理论,它自然受到力学界的高度重视,特别是当该理论处理相变问题的思想和方法与晶体学和细观力学相结合后非常有希望用于多晶体三维非比例加载本构关系的研究。总之,Landau-Devonshire 理论为研究热弹性马氏体相变本构关系提供了一个好的热力学理论框架,并为定量地研究相变问题提供了一个理论起点。

2.2 相变细观本构理论

以研究具体材料微结构演变与相变固体宏观力学行为之间的关系为宗旨的相变细观本构理论近年来得到了较大的发展。固体相变所具有的各种典型细观结构演化过程(如单晶和多晶体中马氏体相变)为蓬勃发展的细观力学提供了广阔的用武之地。相变细观本构研究的迅速发展不仅得益于细观力学对相变过程的成功描述,同时也得益于来自材料科学对不同尺度上相变规律研究的日益成熟^[43-45]。细观力学与相变力学密不可分,著名力学家 Eshelby^[46-48] 关于椭球相变夹杂应力场分析方面的开创性研究,不仅是当今细观力学的奠基性工作之一,同时也成为相变力学研究的嚆矢^[49]。目前马氏体相变细观本构理论研究中首先要解决的问题是细观结构及其演化的力学描述,推导材料自由能函数变化规律的关键一步是如何处理相变应力场之间的交互作用,下面分两个方面来阐述这一研究中自洽方法的应用及最新研究成果。

2.2.1 Mori-Tanaka 均值自洽理论^[3,7]49-55]

Mori-Tanaka 理论在材料构元细观平均场的意义下十分简洁地给出了相变应力场交互作用的表达式,其自洽性质的证明已由 Benveniste^[54] 给出。因此这一细观力学模型近年来得到了较多的重视并成功地应用于相变多晶体和两相复合材料本构理论的研究。孙庆平

等^[3-8]按图1所示的建模思想,对于以形核控制、变体偏应力择优取向和体积分数演变为主导的多晶热弹性马氏体等晶粒相变过程,导出材料构元的 Helmholtz 自由能表达式为

$$\begin{aligned} \Phi(E, T, f, f^r, \langle \varepsilon^{pd} \rangle_{V_r}) = & \frac{1}{2} (E - f \langle \varepsilon^p \rangle_{V_1}) : C(T) : (E - f \langle \varepsilon^p \rangle_{V_1}) \\ & - \frac{1}{4} B_1(T) g^2 f^r + \frac{1}{2} B_1(T) \langle \varepsilon^{pd} \rangle_{V_r} : \langle \varepsilon^{pd} \rangle_{V_r} (f^r)^2 \\ & - \frac{3}{2} B_2(T) (\varepsilon^{pv})^2 (f - f^2) + 6\gamma_s f / d_0 + \Delta G^{p \rightarrow m}(T) f \end{aligned} \quad (1)$$

式中 $E, T, f, f^r, \langle \varepsilon^{pd} \rangle_{V_r}, C(T), \gamma_s, d_0, \Delta G^{p \rightarrow m}(T)$ 分别为宏观应变、温度、马氏体体积分数、具有长程切变晶粒所占体积分数、晶粒特征偏应变的平均值,弹性刚度张量、表面能、晶粒直径和相变化学自由能。与 Landau 唯象理论相呼应,可自然地引入一组“序参量”

(或内变量)来描述材料内部结构的变化,则上述按细观力学方法导出的自由能表达式与 Landau-Devonshire 一级相变平均场理论所给出的自由能变化规律十分相似,揭示出不同尺度、不同材料体系中相变规律的内在一致性。根据正、反向相变过程的能量耗散分析,并引入广义强化因子 α ,可分别导出下列形式应力空间正、反向相变的“屈服”条件(及其演化规律),从而建立完整的多晶体相变细观本构理论。

$$\begin{aligned} F_f(\Sigma, T, f, f^r, \langle \varepsilon^{pd} \rangle_{V_r}) = & \frac{g}{\sqrt{3}} J(S_{ij} - f^r B_1(T) \langle \varepsilon_{ij}^{pd} \rangle_{V_r}) \\ & + 3\varepsilon^{pv}(\Sigma_m - f B_2(T) \varepsilon^{pv}) - C_0(T, f) = 0 \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} F_r(\Sigma, T, f, f^r, \langle \varepsilon^{pd} \rangle_{V_r}, t') = & 3\varepsilon^{pv}(\Sigma_m - f B_2(T) \varepsilon^{pv}) \\ & + (S_{ij} - f^r B_1(T) \langle \varepsilon_{ij}^{pd} \rangle_{V_r}) \varepsilon_{ij}^{pd}(t') - C_1(T, f) = 0 \end{aligned} \quad (3)$$

式中 g 为相变特征常数, J 为应力偏量的第二不变量, $B_1(T), B_2(T)$ 和 ε^{pv} 为材料常数, t' 为过去某时刻。在上述反向相变本构方程描述中,非比例正向相变历史对反向相变过程的影响可通过正向相变记忆函数 $\bar{f}(t')$ 来刻画^[7]。对第一、二类重取向过程,可分别导出“屈服”面方程为^[4,5]

$$F_{rcf}(\Sigma, T, f^r, \langle \varepsilon^{pd} \rangle_{V_r}) = \frac{g}{\sqrt{3}} J(S_{ij} - f^r B_1(T) \langle \varepsilon_{ij}^{pd} \rangle_{V_r}) - C_2(f, T) = 0 \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \bar{F}_{rc}(\Sigma, T, f^r, \langle \varepsilon^{pd} \rangle_{V_r}, t') = & \frac{g}{\sqrt{3}} J(S_{ij} - f^r B_1(T) \langle \varepsilon_{ij}^{pd} \rangle_{V_r}) \\ & - (S_{ij} - f^r B_1(T) \langle \varepsilon_{ij}^{pd} \rangle_{V_r}) \varepsilon_{ij}^{pd}(t') - D_0^{\sigma c 2} = 0 \end{aligned} \quad (5)$$

上述本构理论可以清楚地刻划复杂加载路径下各种机制起主导作用时材料屈服面的演化规律,如屈服面的交叉(如图2所示)、平移和膨胀,伪弹-铁弹演变以及反向相变屈服面的尖点结构(如图3)等。宋固全,黄克智、孙庆平近来对这一模型又进一步作了改进^[37]。

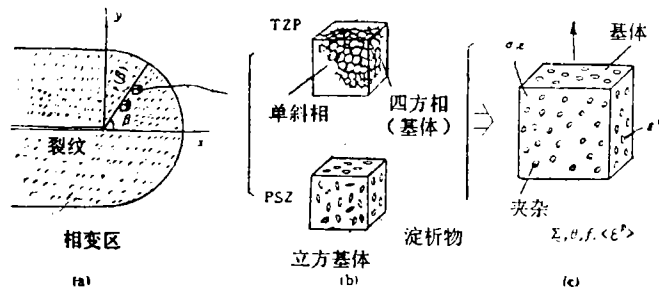


图1 (a)宏观相变区; (b)宏观相变化区内的材料构元; (c)其细观力学模型^[3]

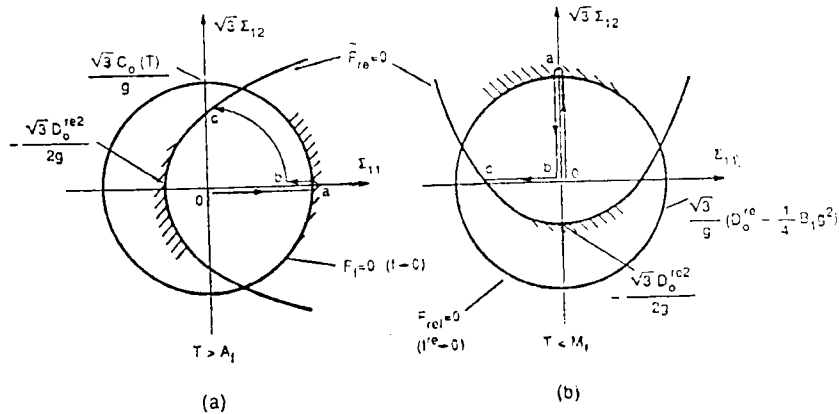


图2 不同相变机制所对应的应力空间屈服面示意图^[4]
(a)高温 ($T > A_f$), (b)低温 ($T < M_f$)

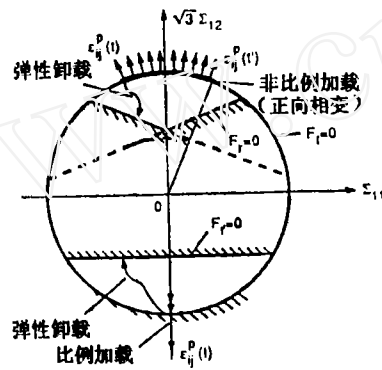


图3 比例加载与非比例加载条件下的正反向相变屈服面的示意图^[4]

作为细观本构理论的一个重要应用,上述模型可用来计算陶瓷裂纹尖端由应力诱发相变所导致材料韧性增值^[33,37]。上述细观本构理论的另一个重要应用是对于材料不稳定性的描述,它大大推广了著名的 BHL (Budiansky, Hutchinson, Lambropoulos) 理论^[24]的应用范围,并且为相变塑性局部化现象以及裂尖相变局部化区形貌的数值模拟和屏蔽计算提供了关键的理论模型(见下节)。

2.2.2 相变的晶体塑性模型

Patoor, Eberhardt 和 Berveiller 等^[17,18]对热弹性马氏体的纯相变塑性行为 (pure

transformation plasticity) (以区别于相变与母相滑移的耦合塑性 (coupled transformation plasticity)), 从相变的晶格变形出发, 采用 WLR (Wechsler, Lieberman and Read) 相变晶体学理论, 分别导出单晶体和多晶体的运动学方程为

$$\dot{E}_{ij}^{PT} = \sum_n R_{ij}^n \dot{f}^n \quad (6)$$

$$\dot{E}_{ij}^{PT} = g \sum_N F^N \sum_n R_{ij}^{nN} \dot{f}^{nN} \quad (7)$$

其中 \dot{E}_{ij}^{PT} 为宏观相变塑性应变率, g 为相变特征常数, R_{ij}^n , \dot{f}^n 分别为单晶 (或晶粒) 中第 n 个变体的取向张量和相变率, f^n 为变体体积分, N 为晶粒数, F^N 为第 N 个晶粒的体积分, R_{ij}^{nN} , \dot{f}^{nN} 分别为第 N 个晶粒中第 n 个变体的取向张量和体积分, \sum 为求和符号。对单晶体记忆合金, 考虑应力诱发相变情况下 Gibbs 自由能的变化, 其中关键的相变变体交互作用能项, 可表示为

$$E_{int} = V \left[\sum_n g^2 E^n f^n + \frac{1}{2} \sum_{n,m} g^2 H^{nm} f^n f^m \right] \quad (8)$$

式中 V 为构元体积, E^n 表示单个变体与母相的交互作用, H^{nm} 表示不同变体间的交互作用能矩阵。系统 Gibbs 自由能为温度 T , 外加应力 σ_{ij} 和内变量 f^n 的函数, 由热力学平衡条件可分别导出变体 n 的相变条件和演化方程, 最终将单晶体宏观相变塑性增量本构关系表示成

$$dE_{ij}^{PT} = \sum_n R_{ij}^n \sum_m (H^{nm})^{-1} \left(R_{kl}^{nm} d\sigma_{kl} - \frac{B^m}{g} dT \right) \quad (9)$$

其中 B^m 为材料常数。多晶体的相变过程比单晶体复杂得多, Lipinski 和 Berveiller^[67] 发展了一种新的自洽方法来描述多晶体的相变本构, 但较为复杂。Paton^[18] 采用较简单的基体-夹杂弹塑性自洽方案, 多晶体中各个晶粒 (夹杂) 的均匀应变由式 (9) 单晶体本构来描述。对单轴拉伸应力状态, 可进一步假定每个晶粒中只有一个变体产生, 因而可使本构计算大为简化。上述晶体相变塑性模型均可很好地描述单轴拉伸下 Cu-Zn-Al 单晶体和多晶体的相变塑性行为。另外, 基于相变时宏观塑性的体膨胀和剪切效应, 发展了类似于 Drucker-Prager 准则的相变塑性屈服条件, 可较好地拟合比例加载条件下的实验结果^[18,31,32]。近来, 严文裔^[88] 在上述研究工作基础上, 建立了单晶体的晶体塑性细观本构模型, 发展和改进了上述工作, 这一研究成果可用来分析单晶体的相变塑性局部化行为。

相变的晶体塑性模型可对单晶、多晶体的变形给以准确清晰的运动学描述, 但通常计算量较大, 特别是非比例加载的情况, 无法得到本构关系的显式形式。另外现有的晶体塑性模型中对相变形核机制如自催化作用以及重取向过程的力学描述目前尚未见报道。

2.2.3 其它模型

对钢中相变力学行为的研究主要集中在马氏体相变塑性 (TRIP) 现象的本构描述上, 围绕 Greenwood-Jonson 和 Magee 两种机理所进行的理论模型和数值计算工作可参见 Leblond 等人^[10,29] 和 Fisher 的工作^[22,23], 以及最近 Stringfellow 等人^[21] 关于非热弹性合金中马氏体相变的研究工作。钢中马氏体相变塑性的重要特点是相变塑性与传统塑性通

常是耦合的（在记忆合金的双向记忆效应中也存在类似的耦合），这使得问题的描述变得更为复杂，Leblond^[19,20] 等对此作过详细分析，限于篇幅，这里不作介绍。

2.3 相变的连续介质热弹性理论研究

这是近年来相变本构研究中颇引人注目的一个方向（R. Abeyaratne & J. K. Knowles^[58-60]，R. D. James^[10,61] 等）。连续介质力学对热弹性相变的近期研究主要集中在两个方面。首先，利用能量极小化方法得到物体的稳定构形，它对应于物体自由能泛函的势阱。在一定的条件下，物体的稳定平稳构形可以多相共存，因此物体的自由能泛函必须有多个能量势阱，对应于物体中共存的不同相，如在马氏体相变中，它对应于母相和不同的马氏体相变体。因此，自由能函数是非凸的，应力和应变关系是非单调的。在一维情况，对于三线性材料，Abeyaratne^[9,60,89] 等人得到了三个势阱的自由能泛函，在相界的两边为均匀变形，它的值在自由能函数的强椭圆区域内。对于高维情况，问题变得复杂，一般母相和马氏体的变形梯度张量不满足 Hadamard 相容条件，这样使能量极小的变形和相界所分隔开的母相与马氏体的均匀变形状态不对应。事实上，一个能量极小的变形有时往往不存在，人们必须寻找一个极小化序列代替极小值^[61]，这和实验中所观察到的孪晶结构相吻合^[90,91]。

相变固体的一般研究由 Eriksen^[91]，James^[92]，Gurtin^[93] 等人给出。而对于多相共存的各向同性材料反平面剪切问题的解虽在80年代早期已被给出，但在这些解中涉及到了物体中一些部分失去了椭圆性，只能说此解是不稳定的。而对于变形是亚稳态的，即物体构形是稳定的，物体中每一部分变形都是处于椭圆区域内，而每一相的变形所对应的椭圆区域在变形空间中是不相连的，它的解析解目前大部分仅限于一维或轴对称问题，如 Abeyaratne 和 Knowles 的一系列工作，对于稍复杂的一些问题（如三维反平面剪切问题）的研究，主要有 Silling^[94]，Rosakis^[64]，Fried^[95]，Swart 和 Homles^[96] 等人的工作。他们的研究表明马氏体的相界有尖点存在。

连续介质力学对热弹性相变研究的另外一个方面就是物体向着稳定构型的演化过程。对于一般的连续介质热弹性理论，它本身不能刻划物体从一相转变到另一相的准静态或动态过程。因为这个特殊的初边值问题缺乏解的唯一性。因此关于热弹性相变问题的一个完整本构描述应包含3部份：①有多个能量势阱的自由能泛函；②能提供相界上驱动力和相界扩展速度及温度与其它因素关系的动力学方程；③正、反向相变的形核临界条件，它规定了相变的初始点，这实际上和连续介质塑性理论中的屈服准则及流动法则完全类似。Abeyaratne 和 Knowles 等的一系列工作讨论了一维下的各种情况^[9,58-60,89]，其中材料为三线性，形核准则基于临界驱动力和热激活理论。但对于高维情况，自由能泛函的确定，马氏体相内的孪晶及其细化结构，以及随着维数的增加而带来的数学技术困难，都将给问题的求解增添不少障碍，目前仅见在二维反平面剪切时 Silling^[92] 给出了马氏体板条动态长大的渐近解。总之，热弹性理论在研究位移相变时表征材料的自由能函数（依赖于变形梯度和温度）具有多重能量阱，每个能量阱与一相（或相的某一变体）相对应。相转变中的形核准则和动力学关系式（类似于经典塑性中的屈服条件和流动法则）加上材料的自由能函数便构成热弹性相变的一个完整本构理论描述。这一理论宏观上可看成是 Landau 相变理论在连续介质力学中的推广，细观上则着眼于形核和相界面的运动。Abeyaratne 和 Knowles 对于应力应变关系为分段线性的材料，提出具有3个能量阱的自由能函数，并基于临界驱动力和热激活理论分别得

到形核准则和动力学关系,并用这一理论描述形状记忆合金的应力应变关系。Abeyaratne^[21]对这一领域的研究作了综述,目前的最新研究动态包括①弹性材料中马氏体板条的动态生长^[22];②晶格点阵中马氏体相变与分叉^[23,24];③相变与材料不稳定性等^[25]。

2.4 相变塑性及其微结构演化的宏观实验研究

宏观相结合的实验研究对于相变力学的迅速发展起了十分重要的作用,成为近年来材料科学与力学成功结合的重要标志之一,特别是对ZrO₂结构陶瓷的宏观力学行为与显微结构的关系所进行的系统的实验研究,具有代表性的工作有:①I.W.Chen^[26-32]等对Ce-TZP和Mg-PSZ相变陶瓷伪弹性、形状记忆、相变塑性屈服、热弹性马氏体等方面的宏观实验研究,这一出色的研究成果在国际力学与材料的刊物中引用率极高;②关于Mg-PSZ和Ce-TZP陶瓷裂纹尖端相变区形貌及马氏体含量分布规律的宏观实验研究^[33];③相变对疲劳裂纹扩展规律的影响^[34];④自催化形核导致的相变塑性局部化行为(见图4—图6)以及对裂纹局部化相变区的宏观实验研究^[35-37]等。⑤材料微结构拓扑学特性的定量表征以及体视学和定量金相的应用,建立微结构与宏观性质的定量关系。另外在形状记忆合金方面,已对单晶以及大晶粒多晶体变形行为进行了宏观实验研究,图7至图8分别为ZrO₂陶瓷^[37-39]和Cu-Zn-Al记忆合金多晶体在单轴拉伸应力状态下采用高密度云纹所记

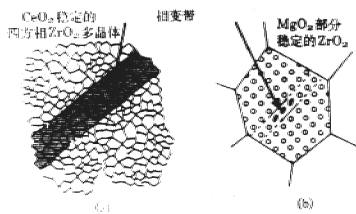


图4 (a) 细晶粒Ce-TZP多晶体的宏观体视膨胀剪带; (b) 大晶粒MgO-PSZ内的细观体视膨胀剪带^[33]

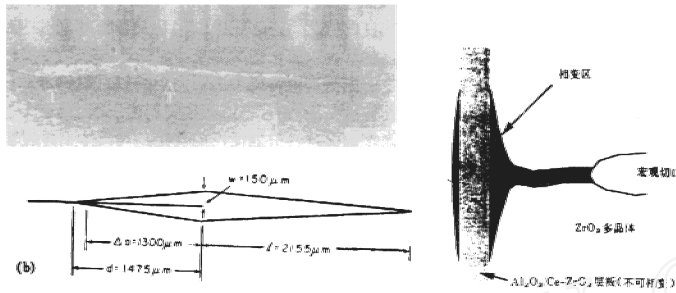


图5 (a) 裂纹尖端狭长相变区形貌,箭头分别表示初始和扩展后的裂纹尖端位置; (b) 裂纹尖端相变区尺寸示意图^[33]

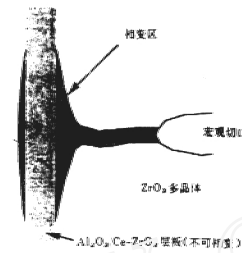


图6 裂纹前方设置第二相亚结构(如Al₂O₃层板)导致裂纹前方相变局部化区沿垂直裂纹方向传播^[33]

录到的试件全场等位移条纹图^[99-100]。上述宏微观相结合的研究不仅可以大大深化人们对相变现象的认识并为理论模型的建立和验证提供实验依据,更重要的是实验中新的现象和机理的发现不断地向已有的理论提出挑战,从而推动学科的发展。相变增韧以及控制相变局部化增韧(见下节)就是典型的例子。

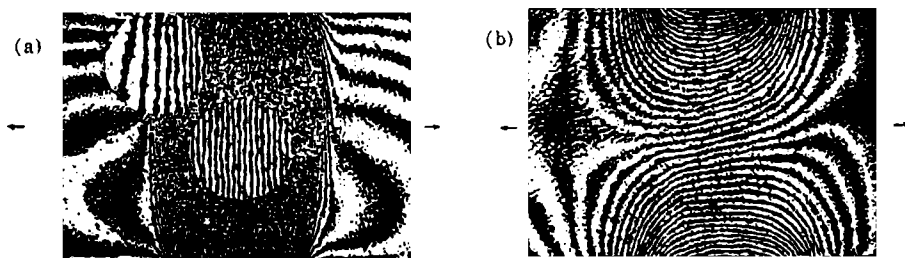


图7 ZrO₂相变陶瓷在单轴拉伸下的试件等位移条纹图^[99]
(a)轴向位移等位移条纹图; (b)横向位移等位移条纹图

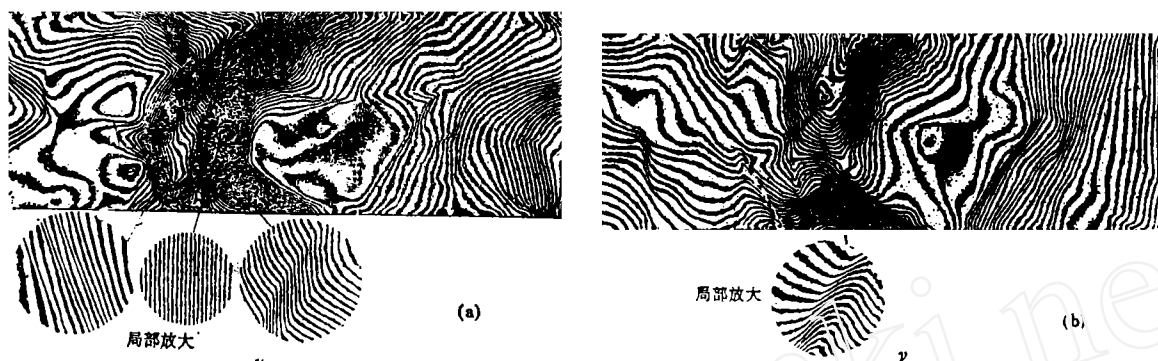


图8 CuZnAl形状记忆合金多晶体在单轴拉伸下的试件面内等位移条纹图^[100]
(a)轴向位移等位移条纹图(载荷 $F=31.07\text{kg}$); (b)横向位移等位移条纹图

3 相变对材料力学性能的影响

相变广泛存在于各种材料之中,从纳米、微米及毫米尺度的微电子封装元件和铁电驱动器(actuator)到宏观的结构部件(如双相钢和陶瓷发动机部件)在其制造和使用过程中发生的各种相变对结构力学性能(如强度、韧性、寿命等)的影响是相变力学的另一重要研究课题,限于篇幅,下面仅选取材料强韧化和新材料设计中的几个典型的例子来说明相变力学在这一领域中的应用。

3.1 相变与结构陶瓷强韧化

ZrO₂系列精细陶瓷中马氏体相变和增韧现象的发现^[28,39,67]以及80年代初以著名的BHL理论^[24]为代表的结构陶瓷相变屏蔽理论的提出是相变力学这一跨学科研究的一个成功的范例,其中关于裂纹屏蔽(或尾区耗能)的思想不仅成功地解释了结构陶瓷的相变增韧现象,同时也极大地带动和促进了结构陶瓷中微裂纹屏蔽、晶须增韧、纤维增强增韧的研究,是当代新型结构陶瓷材料强韧化理论的核心内容之一^[33]。

3.2 相变局部化与材料强韧化设计

近年来 Cc-TZP 陶瓷中相变塑性局部化现象 (图 4) 的发现^[29,32,68-71] 大大推进了现有的相变本构理论和增韧研究。Stam^[42] 按照孙庆平等^[5] 所提出的包括临界和亚临界相变在内的陶瓷相变塑性细观本构理论对相变塑性局部化条件进行了计算, 结果表明它依赖于材料的强化因子 $\alpha(T)$, 剪切系数 h_c , 泊松比 ν 和载荷比 ρ (平面应变)。严文裔^[101] 等从更一般的角度对相变多晶体的变形局部化行为进行了理论分析, 理论计算结果与陶瓷的实验值相吻合。具有双重意义的是, 一方面已有的研究表明相变局部化的机制为自催化形核 (Autocatalytic nucleation), 并且所导致的裂纹前方狭长的相变区形貌 (图 5) 将大大削弱相变对裂尖的屏蔽作用; 另一方面, 通过改变材料的微结构可有效地控制局部化的传播方向 (图 6), 从而在裂纹前方和尾区形成大面积的屏蔽区, 大幅度地提高材料的韧性。相变本构理论的目标在于揭示上述局部化行为及其传播的内在规律并为裂纹尖端局部化形貌的数值模拟提供关键的力学模型。初步的研究成果已表明相变细观本构理论所具有的潜在能力。相变力学研究一旦与材料强韧化研究相结合便迅速导致了“双重尺度微结构设计”和“控制局部化传播增韧”这一新的增韧力学理论的提出。预计, 相变局部化和控制局部化增韧研究将是继 80 年代初相变增韧高潮之后, 90 年代陶瓷增韧领域中又一引人注目的热点之一。

3.3 铁电陶瓷的断裂与损伤研究

铁电陶瓷驱动器在外加电场作用下由于电致伸缩所导致的断裂行为是铁电相变导致材料力学性能改变的又一个例子。图 9 是电极附近电致伸缩的极化方向的示意图, 最新研究表明电致伸缩将导致裂纹的扩展^[102]。铁电相变过程中, 畴界与晶界交点处应力的对数奇异性所导致的微裂纹损伤对寿命的影响是当前的另一重要研究内容。

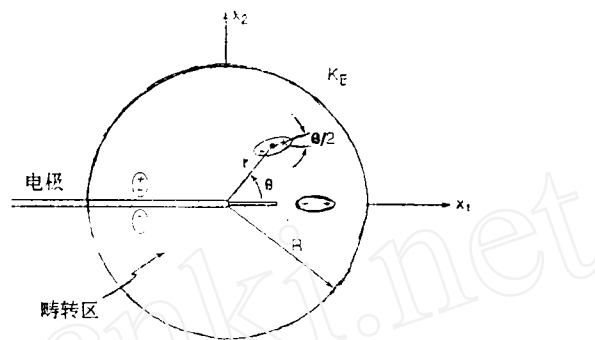


图 9 电极附近电致伸缩的极化方向示意图^[102]

4 发展趋势

90 年代相变固体力学的研究继续朝着基础和应用两个主要方向发展, 一个方向是以固体材料相变过程力学规律的描述, 即相变本构理论为核心, 另一个方向则是集中于诸如材料强韧化、断裂过程分析和新材料设计等研究课题。宏观与细观相结合, 力学与材料科学和物理学相结合仍然是这一领域研究的重要特征, 在未来 10 年内, 相变固体力学有可能取得重要发展的方向如下:

(1) 相变与材料不稳定性。按照热力学, 相变本身对应着系统平衡稳定性的丧失, 因而马氏体相变中作为应变间断面的相界面的出现则是平衡微分方程丧失椭圆性的必然结果, 即相变在细观上必然是呈局部化特征的。然而这种细观或微观尺度上的不稳定性所导致的局部化能否形成宏观变形的局部化则与具体材料的显微结构和热力学环境密切相关。相变局部化可看作是材料本构描述的一种失稳, 作为材料不稳定性的重要表现形式, 相变塑性局部化研究一开始便显示其重要的理论和应用价值 (如裂尖树枝状相变区^[70] 形貌用现有理论无法描述 (如图 10)), 受到国际力学和材料学界的普遍重视, 前不久在以色列海法市举行的

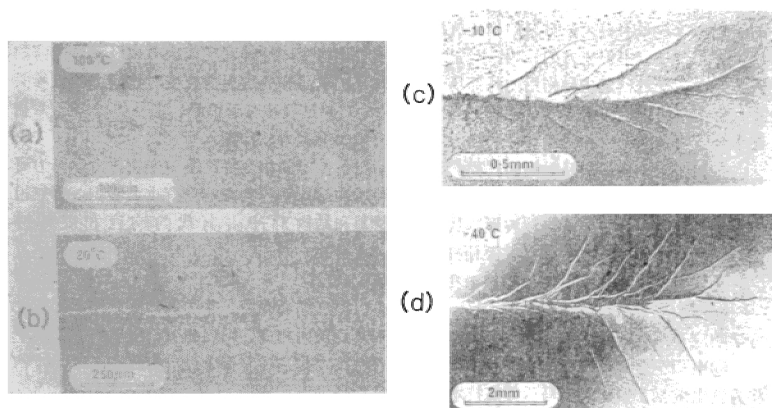


图 10 不同温度下的瓷 Ce-TZP 裂尖相关区的形貌照片^[17]
(a) 100°C; (b) 20°C; (c) -10°C; (d) -40°C

稳定性”研究。在金属大变形局部化塑性不稳定性分析方面已做了大量的研究工作^[13,24]。相变与材料不稳定性研究的重要课题包括:

①相变变形局部化的宏-微观跨尺度实验研究和量测技术,综合运用力学和材料科学的(X射线、Raman光谱仪、高密度云纹等)现代实验手段,以揭示局部化过程中宏观量与显微结构演变对应关系,为理论分析提供清晰的物理过程图象和关键的实验比较。

②基于细观力学分析和材料具体物理机制以及细观过程相变局部化现象(包括起始条件与演化)的连续介质力学(本构关系)描述,有希望在对一、二种典型材料和显微结构(如多晶体 Ce-TZP 结构陶瓷,自催化形核过程)的研究中首先取得突破。

③物理学相变的近代理论(如软模理论、重正化群理论等)在局部化现象研究中的应用,相变与分形等。

④马氏体相变涉及两相界面的运动(宏观的或微观的),界面的稳定性和相变区(如裂尖)形态的演变与局部化的关系。

⑤相变与不稳定性研究中的有效数值计算技术,包括裂尖局部化区形貌的演化以及局部化传播过程的数值模拟等。

⑥相变变形局部化向脆性损伤(如 ZrO₂相变增韧陶瓷)以及向延性损伤(如记忆合金)演化的过程及其相互耦合作用。

(2) 相变本构关系。在相变力学未来研究中本构理论仍占据核心地位。随着相变细观机制研究的不断成熟和细观力学(micromechanics)的发展,细观方法的作用将得到进一步加强,它代表了今后相变本构研究的一个重要方向,进一步的研究课题包括:

①首要是加深对所研究的具体材料中相变的细、微观力学过程的理解,进而对起控制主导作用的机制的力学表征和细观力学进行研究。相变是一个联系宏-细-微观多重尺度的复杂的物理现象,目前对某些材料的相变所涉及的各个尺度上的力学过程本身并不完全清楚。

②相变过程中偏应力的作用。对于马氏体型位移相变,外加宏观偏应力以及基体内部偏应力是对相变过程起主导作用的外部场(驱动力),单晶相变宏观切应变对偏应力的依赖关系(特别是当偏应力趋于零(相应地温度趋于 M_s)的过程)对于单晶、多晶体本构行为描述十分重要,应结合相变晶体学、热力学、动力学、细观力学作深入研究。

③相变为一典型涉及时间的过程,材料在动态条件下的相变特性是相变固体力学行为研究的一个重要的组成部分,它对于材料的动态性质和结构物的动态响应有重大影响,例如相变会强烈地改变介质中冲击波波形,从而改变材料和结构对冲击荷载的响应和破坏特征^[103]。相变固体的动态本构关系研究目前基本是空白。

④聚合物中的相变以及贝氏体相变的本构研究。

⑤复杂应力路径下相变本构关系,包括应力、温度循环载荷、非比例加载条件下材料的力学响应及对载荷历史的依赖关系,这样同时涉及到正向相变、反向相变、重取向等过程。

⑥电-磁-力学现象的本构描述,铁电相变的完整本构描述有待于进一步建立。这一研究将为铁电微驱动器和压电马达等高技术产品的设计提供理论依据。

⑦铸造和热处理过程中相变行为的研究。

(3)新材料设计。某些相变固体(如记忆合金和铁电陶瓷)为集感知和驱动为一体的功能材料,同时,相变固体常具有耗散能量和贮存能量的极大能力和变形的可恢复性。可利用相变固体上述独特性能进行新材料设计以达到传统材料所无法具备的性能。例子有近年来兴起的智能复合材料(smart composite)和高抗冲结构复合材料(shock resistant composite)细观力学微结构设计和伪弹性增韧研究等^[104],进一步的研究课题包括:

①智能复合材料的细观力学研究。由于其力学响应强烈地受细观结构的影响,相变力学分析的引入将促进智能复合材料细观结构的最优设计,以达到人们期待的综合材料性能。研究内容包括功能材料本构行为以及空间排列方式与形态对智能复合材料宏观力学性能的影响、智能复合材料在不同温度和载荷环境下的变形机制及相应的细观力学表征等。

②新型抗冲击复合材料的强韧化闭环设计。发展轻型抗冲击结构材料对于诸如太空平台的建造至关重要,要求材料具有巨大的能量吸收能力和变形可恢复性。在材料强韧化原理指导下的分析表明,相变固体将成为上述超级结构材料设计的最佳候选材料之一。研究的内容包括:相变体积膨胀导致的残余压应力对其它增强相界面裂纹的闭合作用以及对纤维断裂和曲屈的抑制作用;受冲击载荷时相变局部化带的快速传播所形成的耗散冲击能量的分析以及对应力集中的快速释放等等。

总之,相变固体力学行为的研究内容极其丰富,既有重要的学术价值又有明确的应用背景。相变固体力学是一个刚刚兴起的学科分支,它的发展不仅需要固体力学领域内部理论、实验与计算诸方面的相互密切合作,更有待于力学与材料科学、固体物理等不同学科间的进一步相互交叉与渗透,相变力学是力学家在今后与材料学家、物理学家携手合作可以做极有意义的贡献的领域。

参 考 文 献

- 1 冯端等著, 《金属物理学》第二卷, 相变, 凝聚态物理学丛书, 科学出版社 (1990)
- 2 Carroll M M, et al. *Appl. Mech. Rev.*, **38** (1985); 1301—1308, 程屏芬译, 固体力学的基础, 力学进展, **16**, 4 (1986): 517—528
- 3 Sun Q P (孙庆平), Hwang K C (黄克智), Yu S W (余寿文), *J. Mech. Phys. Solids*, **39** (1991): 507—524
- 4 Sun Q P, Hwang K C, *J. Mech. Phys. Solids*, **41** (1993): 1—17
- 5 Sun Q P, Hwang K C, *J. Mech. Phys. Solids*, **41** (1993): 19—33
- 6 Sun Q P, Hwang K C, *Proc. of IUTAM Symposium on CRFDM*, July, 1991, Beijing Springer-Verlag, Beijing University Press (1991): 188—201
- 7 Sun Q P, Hwang K C, *Adv. in Appl. Mech.*, **31** (1993): 249—298, Academic Press, New York,
- 8 Sun Q P, Yu S W, Hwang K C, *Acta Mechanica Sinica*, **6** (1990): 141—150
- 9 Abeyaratne R, *Proc. of 18th ICTAM*, Aug. 22—28, Haifa, Israel
- 10 James R D, *J. Mech. Phys. Solids*, **34** (1986): 359—394
- 11 Achenbach M, et al. *Int. J. Solids Struct.*, **22** (1986): 171—193
- 12 Achenbach M, *Int. J. Pla.*, **5** (1989): 371—395
- 13 Miller I, *Eur. J. Mech., A/Solids*, **11** (1992): 173—184
- 14 Miller I, Xu H, *Acta Metall. Mater.*, **39** (1991): 263—271
- 15 Bondaryev E N, Wayman C M, *Metall. Trans.*, **19A** (1988): 2407—2413
- 16 Falk F, *Acta Metall.*, **28** (1980): 1773—1780
- 17 Pattoor E, Eberhardt A, Berveiller M, *Acta Metall.*, **35** (1987): 2779—2789
- 18 Pattoor E, Eberhardt A, Berveiller M, *Arch. Mech.*, **40** (1988): 775—794
- 19 Leblond J B, et al. *J. Mech. Phys. Solids*, **34** (1986): 395—410
- 20 Leblond J B, et al. *Int. J. Pla.*, **5** (1989): 551—591
- 21 Stringfellow R G, et al. *Acta Metall. Mater.*, **30** (1992): 1703—1716
- 22 Fisher F D, Tanaka K, *Int. J. Solids Struct.*, **29** (1992): 1723—1728
- 23 Fisher F D, *Acta Metall. Mater.*, **38** (1990): 1535—1546
- 24 Budiansky B, Hutchinson J W, Lambropoulos J C, *Int. J. Solids Struct.*, **19** (1983): 337—355
- 25 Evans A G, Cannon R M, *Acta Metall.*, **34** (1986): 761—800
- 26 Evans A G, *J. Am. Ceram. Soc.*, **73** (1990): 187—206
- 27 Lambropoulos J C, *Int. J. Solids Struct.*, **22** (1986): 1083—1106
- 28 McMeeking R, Evans A G, *J. Am. Ceram. Soc.*, **65** (1982): 242—246
- 29 Reyes-Morel P E, Chen I W, *J. Am. Ceram. Soc.*, **71** (1988): 343—353
- 30 Reyes-Morel P E, et al. *J. Am. Ceram. Soc.*, **71** (1988): 648—657
- 31 Chen I W, Reyes-Morel P E, *J. Am. Ceram. Soc.*, **69** (1986): 181—189
- 32 Chen I W, Reyes-Morel P E, *Proc. of Mater. Res. Soc. Symposium, Series 78* (1987): 75
- 33 孙庆平, 黄克智, 余寿文, 力学进展, **20** (1990): 289—302
- 34 Sun Q P, et al. *J. Am. Ceram. Soc.*, **74** (1991): 671—674
- 35 Sun Q P, et al. *Acta Mechanica Solida Sinica*, **4** (1991): 251—258
- 36 Sun Q P, Hwang K C, *Acta Mechanica Sinica*, **8** (1992): 136—139
- 37 杨卫, 力学与实践, **13** (1991): 1—9
- 38 杨卫, 力学进展, **22** (1992): 1—9
- 39 Garvie R C, Hannink R H, Pascoe R T, *Nature (London)*, **258** (1975): 703—704
- 40 Delaey L, et al. *J. Mater. Sci.*, **9** (1974): 1521—1544
- 41 Otsuka K, Shimizu K, *Int. Metals Rev.*, **31** (1986): 93—113
- 42 Stam G Th M, Giessen V, Meijers P, *Int. J. Solids Struct.*, **31** (1994): 1923—1948
- 43 Christian J W, *Metall Trans. A*, **13A** (1982): 509
- 44 Wayman C M, Phase transf. in solids, *MRS Symposium Proc. Vol. 21*, Thomas Tsakalalos(ed), North Holland, (1983): 657—667
- 45 Olson G B, Cohen M, *Proc. of the Int. Conf. on Solid-Solid Phase Transf.*, Hubert, et al. (eds), Pittsburgh, U.S.A., (1981): 1145—1164
- 46 Eshelby J D, *Proc. R. Soc. London, Ser A*, **241** (1957): 376—396
- 47 Eshelby J D, In: *Progress in Solid Mechanics* (eds Sneddon N, Hill R), Vol. II, North-Holland Pub., Amsterdam (1961): 89—140

- 43 Eshelby J D. In: *Solid State Physics* (eds. Seitz F, Turnbull D.), Vol. 3, Academic Press, New York (1956) : 79—144
- 49 Mura T. *Micromechanics of Defects in Solids*, Martinus Nijhoff, The Hague, The Netherlands (1987)
- 50 Mori T, Tanaka K. *Acta Metall.*, **21** (1973) : 571—574
- 51 Weng G. J. *J. Mech. Phys. Solids*, **38** (1990) : 419—441
- 52 Tandon G P, Weng G T. *Composites Science and Technology*, **27** (1986) : 111—132
- 53 Lin S C, Yang C C, Mura T. *Int. J. Solids, Struct.*, **29** (1992) : 1859—1872
- 54 Benveniste Y. *Mech. of Mater.*, **6** (1987) : 147—157
- 55 Tandon G P, Weng G J. *J. Applied Mechanics*, **55** (1988) : 127—135
- 56 黄克智, 孙庆平. *上海力学*, **14**, 2 (1993)
- 57 Lipinski P, Perveiller M. *Int. J. Plasticity*, **5** (1989) : 149—172
- 58 Abeyaratne R, Knowles J K. *Int. J. Solids Struct.*, **24** (1988) : 1021—1044
- 59 Abeyaratne R, Knowles J K. *J. Mech. Phys. Solids*, **38** (1990) : 345—360
- 60 Abeyaratne R, Knowles J K. *Archs. ration. Mech. Analysis*, **114** (1991) : 119—154
- 61 Ball J M, James R D. *Archs. ration. Mech. Analysis*, **100** (1987) : 15—52
- 62 Silling S A. *J. of Elasticity*, **28** (1992) : 143—164
- 63 Ericksen J L. *J. of Elasticity*, **28** (1992) : 55—78
- 64 Rosakis P. *J. Mech. Phys. Solids*, **40** (1992) : 1163—1195
- 65 Marshall D B, et al. *J. Am. Ceram. Soc.*, **73** (1990) : 2659—2666
- 66 Ritchie R O. *Mater. Sci. Eng.*, **A103** (1988) : 15—28
- 67 Evans A G, Heuer A H. *J. Am. Ceram. Soc.*, **63** (1980) : 241
- 68 Tsai J F, et al. *J. Am. Ceram. Soc.*, **74** (1991) : 678—681
- 69 Marshall D B. *Ceramic Bulletin*, **71** (1992) : 969—973
- 70 Rose L R F, Swain M V. *Acta Metall.*, **36** (1988) : 955—962
- 71 Yu C-S, Shetty D K. *J. Am. Ceram. Soc.*, **72** (1989) : 921—928
- 72 Sun Q P, et al. *Prcc. of AEPA '92*, Hong Kong, Dec. 1992, Elsevier Science Publisher. (1992)
- 73 Anand L, et al. *Int. J. Plasticity*, **6** (1990) : 1—9
- 74 Needleman A, et al. *Appl. Mech. Rev.*, **45**, 3 Part 2 (1992)
- 75 Tsai J F, et al. *J. Am. Ceram. Soc.*, **73** (1990) : 2992—3001
- 76 Falk F, Koropka P. *J. Phys.: Condens. Matter*, **2** (1990) 61—77
- 77 Falk F. *J. De Physique*, **43** (1982) : C4—3
- 78 Falk F. *Int. J. Engng. Sci.*, **27** (1989) : 277—284
- 79 Falk F, Seibel R. *Int. J. Engng. Sci.*, **25** (1987) : 785—796
- 80 Falk F. *Z. Phys. B*, **51** (1983) : 177—185
- 81 Falk F. *Z. Phys. B*, **54** (1984) : 159—167
- 82 Falk F. *J. Phys. C*, **20** (1987) : 2501—2509
- 83 Falk, F, et al. *Phys. Rev. B*, **36** (1987) : 3031—3041
- 84 Sprekels J, Zheng S. *Physica D*, **39** (1989) : 59
- 85 Barsh G R, Krumhansl J A. *Phys. Rev. Lett.*, **53** (1984) : 1069
- 86 Barsh G R, Krumhansl J A. *Metall. Trans. A*, **19** (1988) : 761
- 87 朱国全. 清华大学博士学位论文 (1995)
- 88 严文裔等. 清华大学博士学位论文 (1995)
- 89 Abeyaratne R, Knowles J K. *J. Mech. Phys. Solids*, **41** (1993) : 541—574
- 90 Bhattacharya K. *Acta Metall. Mater.*, **39** (1991) : 2431—2444
- 91 Ericksen J L. *J. Thermal Stress*, **6** (1981) : 107—119
- 92 James R D. *Arch. Rational Mech. Analysis*, **77** (1981) : 143—176
- 93 Gurtin M E. *Arch. Rational Mech. Analysis*, **84** (1983) : 1—29
- 94 Silling S A. *J. Elast.*, **19** (1988) : 241—284
- 95 Fried E. *J. Elast.*, **31** (1993) : 71—123
- 96 Swart P J, Holmes P J. *Arch. Rational Mech. Analysis*, **121** (1992) : 37—85
- 97 孙庆平, 赵智军, 卿新林, 陈谓泽译, 戴福隆. *中国科学*, **24**, 4 (1994) : 383—388
- 98 Sun Q P, Zhao Z J, Chen W Z 等. *J. Am. Ceram. Soc.*, **77** (1994) : 1352—1356
- 99 卿新林. 清华大学博士学位论文 (1993)
- 100 卿新林, 孙庆平, 严文裔, 戴福隆. *力学学报*, 待发表

- 101 Yan W Y (严文裔), Sun Q P, Hwang K C. Submitted to *Int. J. Solid & Struct.* for publication
102 Yang W (杨卫), Suo Z G, to appear in *J. Mech. Phys. Solids*, 1994.
103 唐志平. 冲击相变基础. 中国科技大学讲义 (1992.12)
104 Sun Q P, *Acta Mechanica Sinica*, 10, 2 (1994) : 162--168
105 Marshall D B, et al, *J. Am. Ceram. Soc.*, 74 (1991) : 2979--2987

MICRO-AND MACRO-MECHANICS PROBLEMS IN THE PROCESS OF SOLID-PHASE TRANSFORMATIONS AND THEIR RESEARCH ADVANCES

Sun Qingping

Department of Engineering Mechanics, Tsinghua University, Beijing
100084, P. R. China

Abstract The mechanics of phase transformation in solids is a very active research area in the cross-field of solid mechanics and materials science. This paper makes a brief description of the research results in recent years and the research trend of this fast growing interdisciplinary.

Keywords *phase-transforming solid; constitutive theory; micromechanics; toughening and strengthening of materials; material instability; material design*