

文章编号: 1000-4750(2014)07-0229-05

超细晶粒对纳晶材料断裂韧性的影响

周剑秋¹, 韩雪平²

(1. 武汉工程大学机电工程学院, 武汉 430073; 2. 南京工业大学机械与动力工程学院, 南京 210009)

摘 要: 为了研究纳米晶体材料的断裂韧性, 该文建立了一个包含两种晶粒的材料模型: 超细晶粒(2nm~4nm)和普通纳晶晶粒(20nm~100nm)。超细晶粒可以看作普通纳晶晶粒三晶交的组成部分, 并称包含超细晶粒的三晶交为超级三晶交, 且均匀地分布在普通纳晶的基体中。裂纹尖端的应力集中会引起晶间滑移, 晶间滑移又会导致超级三晶交处刃型位错的产生。该文研究了超级三晶交处的位错对临界应力强度因子的影响, 结果表明超细晶粒的存在有效地提高了纳米晶体材料的断裂韧性。

关键词: 纳米晶体材料; 超细晶粒; 位错; 断裂韧性; 应力强度因子; 裂纹

中图分类号: O346 文献标志码: A doi: 10.6052/j.issn.1000-4750.2012.09.0667

EFFECTS OF ULTRAFINE GRAINS ON FRACTURE TOUGHNESS OF NANOCRYSTALLINE MATERIALS

ZHOU Jian-qi¹, HAN Xue-ping²

(1. School of Mechanical and Electrical Engineering, Wuhan Institute of Technology, Wuhan 430073, China;

2. College of Mechanical and Power Engineering, Nanjing University of Technology, Nanjing 210009, China)

Abstract: In order to study the fracture toughness of nanocrystalline, a material model was proposed. The model contains two types of grains: the ultrafine grains (ranging from 2 nm to 4 nm) and the normal nanograins (ranging from 20 nm to 100 nm). The ultrafine grains could be treated as a part of triple junctions, denoted as super triple junctions, and evenly distributed in the conventional nanocrystalline matrix. In the framework of our model, stress concentration near crack tip initiates intergrain sliding that leads to the generation of edge dislocations at super triple junctions. The effect of dislocation at a super triple junction on the critical intensity factors was studied. The results show that the existence of the ultrafine grains effectively enhances the fracture toughness of nanocrystalline.

Key words: nanocrystalline materials; ultrafine grains; dislocation; fracture toughness; stress intensity factor; crack

纳晶材料由于其独特的力学性能而引起了广泛的研究^[1-2]。一般而言, 相对于粗晶材料, 纳晶材料虽然具有高强度但其延性和断裂韧性都很低, 这种低韧性和低延性在很大程度上影响了纳晶材料的工程应用^[1-4]。Youssef等^[5]通过球磨和原位低温球磨加压方法制取了无缺陷纳晶 Cu, 在单轴拉伸过程中, 该试样表现出了高强度、高塑性及可持续的应变硬化行为。通过透射电镜(TEM)发现, 该

试样存在大量的超细晶粒(晶粒尺寸为 2nm~4nm), 其中晶粒尺寸为 2nm 的晶粒体积分数占 2%~3%。由此可以认为这些极细小晶粒的存在一定对纳晶材料的力学性能(强度和断裂韧性)起着非常重要的作用。

迄今为止, 已经有不同的学者对这种超细晶粒的特性进行了研究。如 Gleiter^[6]指出这些超细晶粒具有一些新奇的特性如原子结构及材料密度都可

收稿日期: 2012-09-13; 修改日期: 2012-11-16

基金项目: 国家自然科学基金项目(11272143); 湖北省优秀中青年人才项目(Q20111501); 霍英东青年教师基金项目(101005)

通讯作者: 周剑秋(1972-), 男, 江苏人, 教授, 博士, 博导, 从事先进材料力学行为研究(E-mail: yzjqcc@sohu.com).

作者简介: 韩雪平(1988-), 男, 江西人, 硕士生, 从事纳晶材料力学行为研究(E-mail: xuepinghan@tom.com).

以改变, 这些特性可能适合位错的吸收和发射。Satta 等^[7]通过分子动力学模拟将一个晶粒放入到三晶交的地方, 结果发现只有当该晶粒的尺寸大于 $6a_0$ (a_0 是晶格常数) 时它才能稳定存在。Trelewicz^[8] 等对 3nm~150nm 的 Ni-W 合金进行了纳米压痕研究, 并指出当晶粒尺寸小于 10nm~20nm 时, 材料存在一个由多晶向玻璃态的转化。以上文献都是讲细小晶粒本身的, 而并未研究细小晶粒对材料整体力学性能的影响。Bobylev^[9] 等建立了一个理论模型来描述纳晶材料中晶间滑移对裂纹扩展的影响, 在此模型中, 裂纹尖端的应力集中引起晶间滑移, 晶间滑移引起三晶交处位错的产生, 位错产生的应力影响裂纹的扩展, 该模型的计算结果显示: 晶间滑移使纳晶 Al、Ni 和 3C-SiC 的断裂韧性增加了 10%~30%。受此模型的启发, 本文建立了包含 2 种晶粒的材料模型, 并从理论上描述了超细晶粒的存在对纳晶材料断裂韧性的影响。

1 理论模型

1.1 位错的产生与增长

一般情况下, 在晶体材料中裂纹有两种扩展方式: ① 裂纹从晶粒中穿过(穿晶裂纹); ② 裂纹从晶粒之间穿过(晶间裂纹)。本文只考虑穿晶裂纹, 如图 1 所示, 裂纹长度为 l , 裂纹尖端在晶界处, 并与最近三晶交的距离为 r ($r < l$)。值得注意的是, 本文提出的这个模型(如图 1 所示)是一个特殊的情况, 即超细晶粒位于普通晶粒的三晶交处。由于超细晶粒的尺寸及其特殊性, 论文认为超细晶粒是三晶交的一部分, 这种包含超细晶粒的三晶交称为超级三晶交, 并均匀地分布在普通纳晶的基体中, 如图 1(a)所示。

裂纹尖端的应力集中会引起晶间滑移, 根据晶间滑移的基本理论^[10-11]可知, 晶间滑移会引起三晶交 T 区域的剪应力集中。根据固体的缺陷理论, 三晶交包含一个位错, 这个位错的伯格斯矢量随着剪应力的增大而增大^[11]。本文假设晶间滑移发生在晶界的一部分上, 即裂纹尖端和超级三晶交之间, 并且此晶间滑移使超级三晶交处产生了一个刃型位错。一般情况下, 三晶交能够阻止晶界位错在三晶交处滑移从而阻止晶界滑移^[10], 当晶界位错所受的剪切应力达到一个临界值时, 该位错就能够穿过三晶交。相对普通三晶交而言, 由于超细晶粒的特殊性质及结构, 晶界位错穿过超级三晶交就需要更多

的能量。这就使得超级三晶交成为晶界位错滑移的一个更强的屏障。

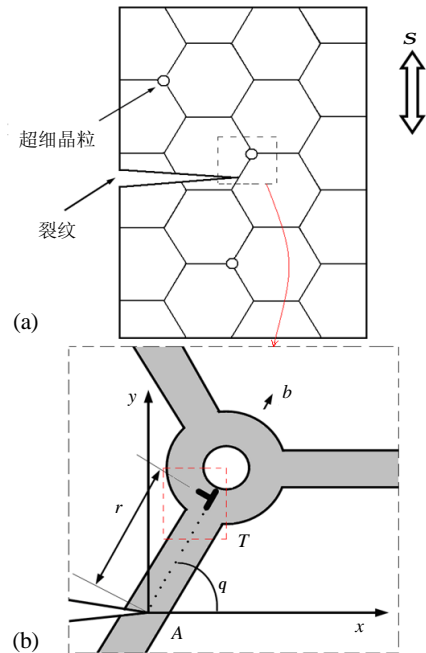


图 1 包含超细晶粒的纳晶材料的裂纹, 放大部分是距裂纹尖端最近三晶交处的刃型位错

Fig.1 Crack in a deformed nanocrystalline material containing ultrafine nanograins. Inset highlights the formation of an edge dislocation located at the triple junction nearest to the crack tip

Szulfarska 等^[12]通过模拟发现不全位错从晶间非晶态处发射; 计算机模拟^[13]也显示在晶态-非晶态的纳米层状结构材料中, 不全位错从非晶层中发射。另外, Zhao 等^[14]通过分子动力学模拟研究了不同截面形状单晶硅纳米线的塑性变形行为, 结果表明, 位错滑移是材料的主要变形机制, 不同截面形状对材料的力学行为有显著的影响。Bobylev 等^[11]建立了一个理论模型来描述纳晶材料中不全位错从非晶态的晶界处发射进入晶内的过程。根据以上模型, 假定三晶交处位错的伯格斯矢量随着晶间滑移引起的剪应力的增大而增大。如图 2 所示, 随着剪应力的增加, 三晶交处位错的伯格斯矢量从 b' 变成了 b'' 。当剪应力达到临界值 t_c 时, 该位错分解为一个不动的刃型位错和一个不全刃型位错, 该移动不全位错滑进晶粒内部并留下堆垛层错, 如图 3 所示。在位错分离时我们认为裂纹应力强度因子达到最大值, 如果载荷继续增大, 裂纹将会扩展。

根据最近提出的 AKK 模型^[15]可知, 位错从晶界处发射进入晶粒内部所需的临界应力可表示为^[15-16]:

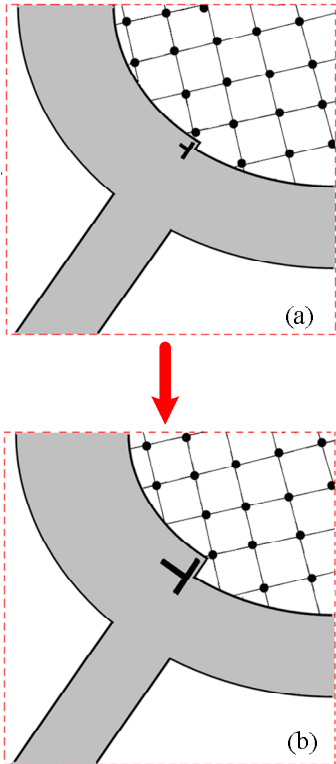


图2 超级三晶交处位错的伯格斯矢量随着加载增加而增加(此图是图1(b)虚线部分的放大图)

Fig.2 Growth of the Burgers vector magnitude of the dislocation at super triple junction with increased unfinished plastic shear (This figure is the magnified inset of the part in the red wireframe shown in Fig. 1(b))

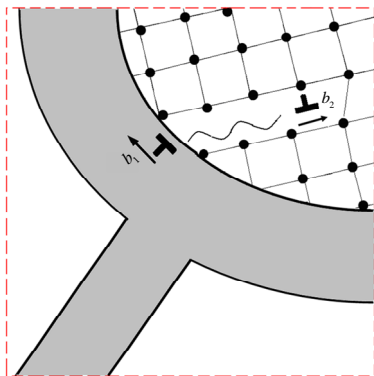


图3 三晶交处位错分解为一个不动位错和一个移动不全位错, 移动不全位错滑进超细晶粒内, 伴随着堆垛层错(波浪线)的生成(此图是图1(b)虚线部分的放大图)

Fig.3 Splitting of the dislocation at triple junction results in the formation of both a residual immobile dislocation and a mobile partial dislocation that glides in a ultrafine grain. The glide of the partial dislocation is accompanied by the formation of stacking fault (wavy line) (This figure is the magnified inset of the part in the red wireframe shown in Fig. 1(b))

$$\frac{t_c}{G} \approx \frac{1}{3} \frac{b_1}{d} + \frac{a-1}{a} \frac{G}{Gb_1} \quad (1)$$

$$a = d/d_{eq} \quad (2)$$

其中: G 为堆垛层错能; d 为晶粒尺寸; G 为剪切模量; b_1 为位错的伯格斯矢量; d_{eq} 为最小平衡距离。

1.2 位错对纳晶材料断裂韧性的影响

由于超细晶粒的存在, 超级三晶交能够阻碍伯格斯矢量更大的位错。为了研究三晶交位错对纳晶材料断裂韧性的影响, 本文将用标准裂纹扩展准则, 这个准则是以基于使弹性能减小的驱动力和阻止裂纹自由面扩张力的平衡。这个准则可以写成:

$$\frac{1-n}{2G} (K_I^2 + K_{II}^2) = 2g \quad (3)$$

其中: n 是泊松比; G 是剪切模量; g 是新自由面的特殊能; K_I 和 K_{II} 是与裂纹扩展方向为法线和切线方向的应力强度因子。在本文中, 假定裂纹扩展方向与加载方向垂直。系数 K_I 和 K_{II} 分别为:

$$K_I = K_I^s + k_I^d, \quad K_{II} = k_{II}^d \quad (4)$$

其中: K_I^s 为外载荷 s 下的应力强度因子; k_I^d 和 k_{II}^d 是位错产生的应力强度因子, 如图1所示。

根据宏观力学, 晶间滑移导致了位错的生成和裂纹尖端位错的发射, 晶间滑移对裂纹的扩展可以用有效断裂韧性 K_{IC}^* 表示。在这种情况下, 位错的存在改变了 K_{IC}^* 的值, 裂纹扩展的临界状态可以写为^[7] $K_I^s = K_{IC}^*$, 通过式(3)和式(4)可以发现:

$$K_{IC}^* = \sqrt{\frac{4Gg}{1-n} - (k_{II}^d)^2} - k_I^d \quad (5)$$

下面计算应力强度因子 k_I^d 和 k_{II}^d 。如图1(b)所示, b 是位错的伯格斯矢量, r 为位错到裂纹尖端的距离, q 是伯格斯矢量与坐标轴 Ox 的夹角。位错引起的应力强度因子 k_I^d 和 k_{II}^d 可写为^[15]:

$$k_I^d = -\frac{3\pi Db \sin q \cos(q/2)}{\sqrt{2\pi r}} \quad (6)$$

$$k_{II}^d = -\frac{3\pi Db [\cos(q/2) + 3\cos(3q/2)]}{2\sqrt{2\pi r}} \quad (7)$$

式中, $D = G/2\pi(1-n)$ 。

在晶间滑移条件下, 伯格斯矢量 b_2 随着剪应力增加而增加。在准静态条件下, 伯格斯矢量 b_2 与一个最小的能量变化值 ΔW 相关, 此能量变化即为位错产生过程的能量变化。如图1(b)所示, 根据参考文献[7]可知, 能量变化 ΔW 可写成:

$$\Delta W = \frac{Db_2}{2} \left(\ln \frac{r}{r_c} + 1 \right) - br \left(\frac{K_I^s \sin q \cos(q/2)}{\sqrt{2\pi r}} - t_c \right) \quad (8)$$

其中, r_c 为位错核心半径。

由条件 $\partial(\Delta W)/\partial b = 0$ 可知:

$$b = \frac{(1-\nu)\sqrt{2\pi r}(K_I^\sigma \sin\theta \cos(\theta/2) - \tau_c \sqrt{2\pi r})}{G[\ln(r/r_c) + 1]} \quad (9)$$

式中:

$$K_I^\sigma = \frac{\tau_c \sqrt{8\pi r}}{\sin\theta \cos(\theta/2)} \quad (10)$$

式中, 裂纹尖端与最近三晶交的距离 r 与晶粒尺寸没有直接的关系。但根据图 1(b)可知, r 在 $0 < r \leq d/2$ 的范围内, 为了建立 d 与 K_{IC}^* 的关系, 本文设定 $r = \varphi d/2$, 其中, $0 < \varphi \leq 1$ 。

2 结果与讨论

三晶交处位错的伯格斯矢量随着剪应力的增大而增大。当剪应力达到临界值 τ_c 时, 该位错就会分解而进入超细晶粒内部。本文以纳晶镍为例, 其相关材料参数如表 1 所示。根据式(1)可知, 位错发射分解所需的临界剪切应力 τ_c 与晶粒尺寸 d 的关系如图 4 所示。从图中可以看出 τ_c 随着晶粒尺寸 d 的减小而增大, 尤其是当晶粒尺寸 d 降到几个纳米时, τ_c 有一个突然的上升, 这可以解释超细晶粒的高强度。

表 1 用于计算的纳晶镍的材料参数

Table 1 Materials parameters used in calculations for Ni

参数	符号	数值
剪切模量	G	73GPa
泊松比	ν	0.34
伯格斯矢量	b_1	0.249nm
新自由面的特殊能	γ	1.725Jm ⁻²
位错核心半径	r_c	0.1nm
比例因子	φ	1
比例常数	Γ/Gb_1	1/100
最小平衡距离	δ_{eq}	0.5nm

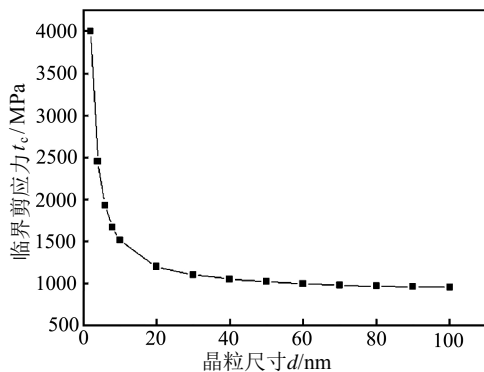


图 4 临界剪应力 τ_c 与晶粒尺寸的关系

Fig.4 Dependence of critical shear stress τ_c on grain size

为了表征晶间滑移产生的位错对裂纹扩展的影响, 需要对比 K_{IC}^* 和 $K_{IC} = \sqrt{4G\gamma/(1-\nu)}$ 的值, 其

中 $K_{IC} = \sqrt{4G\gamma/(1-\nu)}$ 表示在没有位错条件下纳晶材料的断裂韧性, 也就是晶间滑移被抑制的条件下的断裂韧性。本文采用镍作为研究对象, 其相关参数如表 1 所示。由文献[9]可知, 当位错的滑移方向与 x 轴的夹角 $\theta = 70^\circ$ 时, 应力强度因子 K_{IC}^* 达到最大值, 因此, 本文假定 $\theta = 70^\circ$, 则图 5 显示了 K_{IC}^*/K_{IC} 与超细晶粒和基体晶粒尺寸的关系。结果显示:

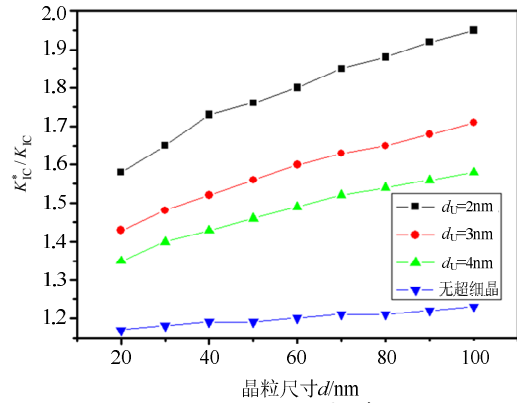


图 5 对纳晶镍, 在不同的超细晶粒尺寸下, K_{IC}^*/K_{IC} 与普通纳晶晶粒尺寸的关系

Fig.5 K_{IC}^*/K_{IC} as a function of grain size for various ultrafine grain sizes in nanocrystalline Ni

1) 在没有超细晶粒存在的条件下, 晶间滑移可以使材料的断裂韧性增加 11%~13%。 K_{IC}^*/K_{IC} 随着晶粒尺寸的增加而有轻微的增加。

2) 当存在超细晶粒的时候, 纳晶材料的断裂韧性相比没有超细晶粒的条件下明显增加。例如: 当 2nm 的超细晶粒存在于晶粒尺寸为 100nm 的基体中时, 基体材料的断裂韧性几乎增加了 100%, 这也与前面讲到的超细晶粒可以使材料的断裂韧性增加相符合。

3) 当超细晶粒尺寸被固定为特定值时, K_{IC}^*/K_{IC} 随着基体晶粒尺寸的增加而增加。例如超细晶粒尺寸为 2nm 时, 当基体的晶粒尺寸从 20nm 增加到 100nm 时, K_{IC}^*/K_{IC} 可以增加 26%。相反, 当基体的晶粒尺寸减小时, K_{IC}^*/K_{IC} 也减小, 从而使材料由韧性向脆性转变。

4) 当基体的晶粒尺寸不变时, K_{IC}^*/K_{IC} 随着超细晶粒尺寸的增加而减小。例如: 基体的晶粒尺寸为 100nm 时, 当超细晶粒的尺寸由 2nm 增加到 4nm, K_{IC}^*/K_{IC} 减小了 28%。这是因为随着晶粒尺寸的减小, 临界应力 τ_c 增加, 如图 4 所示。

本文只考虑了基体的晶粒尺寸在 20nm~100nm

之间,这是因为:①当晶粒尺寸小于20nm时,纳米晶体材料的塑性变形机理主要为晶界滑移、晶界蠕变、晶界迁移和晶粒旋转,而不是晶格位错滑移;②当晶粒尺寸增加时,晶界位错的攀移将变得困难,从而不能促进裂纹的钝化。所以,这个模型不适用于晶粒尺寸超过几百纳米的材料。

3 结论

本文建立了一个理论模型研究一种特定纳晶材料的断裂韧性,此特定情况指的是尺寸为2nm~4nm的超细晶粒均匀分布于尺寸为20nm~100nm的晶粒基体中。裂纹钝化和扩展受裂纹尖端晶间滑移的控制,晶间滑移产生三晶交位错,此位错对裂纹起屏蔽作用。模拟计算结果发现超细晶粒的存在能增加纳晶材料的断裂韧性,如当尺寸为2nm的晶粒存在于尺寸为100nm的纳晶基体中时,此超细晶粒可使基体的断裂韧性增加1倍。另外,超细晶粒的增韧效果与其尺寸密切相关,如当超细晶粒的尺寸从4nm降低到2nm时,材料的断裂韧性增加了28%。

参考文献:

- [1] Meyers M A, Mishra A, Benson D J. Mechanical properties of nanocrystalline materials [J]. *Progress Materials Science*, 2006, 51(4): 427—556.
- [2] Dao M, Lu L, Asaro R J, et al. Toward a quantitative understanding of mechanical behavior of nanocrystalline metals [J]. *Acta Mater*, 2007, 55(12): 4041—4065.
- [3] 王兆希, 施惠基. 面外约束对韧性材料的断裂韧度的影响[J]. *工程力学*, 2007, 24(11): 19—24.
Wang Zhaoxi, Shi Huiji. Effect of out-of-plane constraint on ductile fracture toughness [J]. *Engineering Mechanics*, 2007, 24(11): 19—24. (in Chinese)
- [4] 杨圣奇, 蒋昱州, 温森. 两条断续预制裂纹粗晶大理岩强度参数的研究[J]. *工程力学*, 2008, 25(12): 127—134.
Yang Shengqi, Jiang Yuzhou, Wen Sen. Study on the strength parameters of coarse marble with two pre-existing cracks [J]. *Engineering Mechanics*, 2008, 25(12): 127—134. (in Chinese)
- [5] Youssef K M, Scattergood R O, Murty K L, et al. Ultrahigh strength and high ductility of bulk nanocrystalline copper [J]. *Applied Physics Letters*, 2005, 87(9): 091904-1—091904-3.
- [6] Gleiter H. Our thoughts are ours, their ends none of our own: Are there ways to synthesize materials beyond the limitations of today [J]. *Acta Mater*, 2008, 56(19): 5875—5893.
- [7] Satta A, Pisanu E, Colombo L, et al. Microstructure evolution at a triple junction in polycrystalline silicon [J]. *J Phys Condens Matter*, 2002, 14: 13003—13008.
- [8] Trelewicz J R, Schuh C A. The Hall-Petch breakdown in nanocrystalline metals: A crossover to glass-like deformation [J]. *Acta Mater*, 2007, 55(17): 5948—5958.
- [9] Bobylev S V, Mukherjee A K, Ovid'ko I A, et al. Effects of intergrain sliding on crack growth in nanocrystalline materials [J]. *International Journal of Plasticity*, 2010, 26(11): 1629—1644.
- [10] Fedorov A A, Gutkin M Y, Ovid'ko I A. Transformations of grain boundary dislocation pile-ups in nano-and polycrystalline materials [J]. *Acta Mater*, 2003, 51(4): 887—898.
- [11] Bobylev S V, Mukherjee A K, Ovid'ko I A. Emission of partial dislocations from amorphous intergranular boundaries in deformed nanocrystalline ceramics [J]. *Scripta Mater*, 2009, 60(1): 36—39.
- [12] Szlufarska I, Nakano A, Vashista P A. Crossover in the mechanical response of nanocrystalline ceramics [J]. *Science*, 2005, 309: 911—914.
- [13] Wang Y, Li J, Hamza A V, et al. Ductile crystalline-amorphous nanolaminates [J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2007, 104: 11155—11160.
- [14] Yang Z Y, Lu Z X, Zhao Y P. Shape effects on the yield stress and deformation of silicon nanowires: A molecular dynamics simulation [J]. *Journal of Applied Physics*, 2009, 106: 023537-1—023537-6.
- [15] Asaro R J, Krysyl P, Kad B. Deformation mechanism transitions in nanoscale fcc metals [J]. *Philos Mag Lett*, 2003, 83(12): 733—743.
- [16] Zhu B, Asaro R J, Krysyl P, et al. Transition of deformation mechanisms and its connection to grain size distribution in nanocrystalline metals [J]. *Acta Mater*, 2005, 53(18): 4825—4838.
- [17] Zhang T Y, Li J C M. Image forces and shielding effects of an edge dislocation near a finite length crack [J]. *Acta Metall Mater*, 1991, 39(11): 2739—2744.