

较大塑性变形下纳晶镍剪切带的演化模型

Shear Band Evolution of Nanocrystalline Ni Under Obvious Plastic Deformation

周剑秋¹, 张 舒², 王 璐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)

ZHOU Jian-qi¹, ZHANG Shu², WANG Lu²

(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)

摘要: 较大塑性变形下, 采用 TEM 原位拉伸实验揭示了纳晶镍内剪切带演化的微观机制, 优化了微观力学模型。结果表明: 在纳米尺度范围内, 随着晶粒尺寸的增加, 应变软化的趋势越来越明显, 剪切带宽度也随着增加; 晶粒尺寸降低将导致纳晶材料中剪切带的产生提前; 内部特征长度的值随着晶粒尺寸的增加呈现先增加后下降的特点; 剪切带内的塑性应变分布为: 在剪切带两个边界处应变为零, 在剪切带中央剪切塑性应变达到最大值。

关键词: 塑性变形; 剪切带; 纳晶材料

doi: 10.3969/j.issn.1001-4381.2013.11.011

中图分类号: O346 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-4381(2013)11-0062-08

Abstract: At obvious plastic deformation stage, an *in-situ* TEM tensile testing for the nanocrystalline Ni was conducted to investigate the microscopic physical mechanisms during the development of shear bands. Thus, a corresponding model was optimized. The results show that in the nanometer scale, with the increasing of grain size, shear band width increases and the trend of strain softening becomes more obvious. The generation of shear band in smaller grain is earlier than that in bigger grain. The intrinsic length scale increases first with the increasing of grain size and then decreases. The distribution of shear strain in shear band is also obtained. The value of shear strain is zero at two boundaries of the shear band and is the maximum at center of the shear band.

Key words: plastic deformation; shear band; nanocrystalline material

纳晶材料明显塑性情况下变形不再是均匀的, 而是发生较大的局部化变形, 并且这种局部大变形内的微观机理也不同于均匀的小塑性变形。同时, 局部大塑性变形导致纳晶材料的延展性不高^[1,2], 这已经成为纳晶材料开发和应用的一个主要障碍。最初, 一些科学家^[3,4]将纳晶材料较低的延展性归因于材料内部存在的夹杂物和孔隙, 但是近些年来高致密度无杂质的纳晶材料内同样出现了局部的大塑性变形情况^[5-7]。究其原因, 科学家们^[6-16]发现这种延性的降低主要是由局部化变形产生的剪切带引起的。CHENG 等^[6]发现在纳米 Cu 拉伸过程中存在有剪切带产生和发展的现象。DALLA TORRE 等^[7]及 SANDERS 等^[17]也在纳米 Ni、纳米 Pb 的实验过程中报道了剪切带的发现。KOCH^[18]认为纳晶金属材料

中极易发生不稳定的塑性变形, 即应变局部化。这种局部大塑性变形(剪切带化形式尤为显著)在塑性流动过程中扩展, 使材料失去了有效的应变硬化能力而使试样过早的断裂。简言之, 由于局部软化带的形成及快速扩展, 使纳晶金属材料呈现出延性较差的特征。因此, 探究纳晶材料明显塑性变形下的微观机理和变形模式, 并在其基础上优化纳晶材料局部大塑性变形(剪切带)的演化发展模型显得至关重要。本工作以纳晶镍为研究对象, 首先利用原位透射电镜技术考察了纳晶镍剪切带演化发展过程中的微观机理, 然后据此优化了纳晶镍内剪切带演化发展的理论模型, 该模型成功地预测了剪切带的晶粒尺寸相关性和剪切带演化过程中宽度的变化及带内的应变的分布。经与实验结果比较, 验证了该模型的合理性。

1 纳晶镍剪切带内的微观变形机理

本工作对纳晶镍进行了 TEM 原位拉伸实验。TEM 型号为 JEM-200CX, 首先, 把纳晶镍加工成矩形试样 (9.0mm 长, 3.0mm 宽, 0.055mm 厚), 并在此试样两端开有小孔 (洞的直径 1.0mm, 中心距为 5mm) 以便施加载荷。然后利用 MTP-1A 磁力驱动双喷射电解减薄器对该矩形试样减薄, 在中心穿孔, 电解液为体积分数 25% 的硝酸和体积分数 75% 的无水乙醇, 液氮冷却。最后, 把试样固定在透射电子显微镜下对其逐步增加载荷, 观察试样内微结构的变化

图 1 为在拉伸过程中电沉积纳晶镍内一组晶粒在大应变条件下的 TEM 照片。从中可以观察到晶界扩散的证据, 这种扩散是由晶界滑移和晶粒的合并共同来承担的。图 1(a) 是这组晶粒的初始状态, 此时应变为 4.8%, 在此状态中, 由位错堆积而产生的应力场会在晶界处形成一个化学势梯度, 这种化学势梯度促使晶粒内原子从晶界的一侧向另一侧扩散^[19]。随着应力的增加, 白色箭头标记的颗粒群在化学势梯度的推动下开始迁移。当应变达到 5.8% (图 1(b)), 晶粒群开始和另一晶粒接触, 这表明随着原子

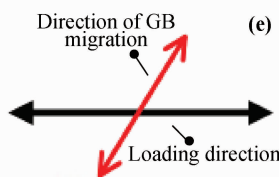
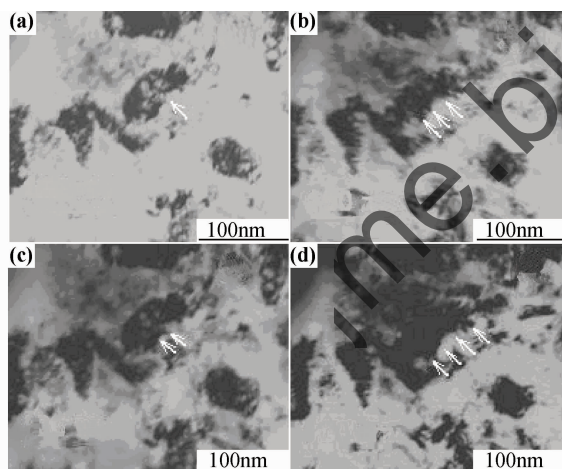


图 1 纳晶镍 TEM 原位拉伸微结构图

(a)应变 4.8%; (b)应变 5.8%; (c)应变 6.4%;

(d)应变 6.8%; (e)晶界扩散和晶粒合并的演化方向

Fig. 1 In-situ TEM micrographs of nanocrystalline Ni

(a) strain at 4.8%; (b) strain at 5.8%; (c) strain at 6.4%;

(d) strain at 6.8%; (e) evolution directions of grain

boundary diffusion and merge of grains

的扩散, 晶粒之间有了合并的趋势, 这一点在 WEI 等的研究结果中也有报道^[20]。随后, 如图 1(c) 所示, 当应变达到 6.4% 时出现晶粒合并, 这可能就是局部大塑性变形能够导致纳晶材料软化的原因。随着应力的进一步增加, 则有更多的晶粒滑动/攀升和合并 (图 1(d)), 这表明剪切带快速地形成。图 1(e) 给出了晶界扩散和晶粒合并的演化方向, 可见晶界扩散和晶粒合并的方向与 DIC 实验中观察到的剪切带的演化方向以及剪切带的倾角比较接近。该结果表明晶界扩散是随着晶界滑动/攀升的进行而产生, 最终导致晶粒的合并, 这在局部剪切中有重要的作用。

2 剪切带演化发展的多尺度模型

根据 TEM 原位拉伸实验观察, 在明显塑性变形阶段晶界位错机制首先是塑性变形的主要承担者。然后, 随着应变的增加, 由位错滑动/攀移承担的晶界扩散机制逐渐增加, 并最终导致晶粒合并, 促进了剪切带的发展。因此, 在优化剪切带的本构模型过程中, 晶界位错机理和晶界扩散机理的相对贡献需要明确。本工作引入一个表示这两种微观机制在剪切带的发展过程中的相对贡献的重要动态参数 Ψ 。因此, 在局部剪切过程中的应变率 $\dot{\epsilon}_{vp}$ 在给定的压力 σ 下可以被写为:

$$\dot{\epsilon}_{vp} = (1 - \Psi)\dot{\epsilon}_{dislocation} + \Psi\dot{\epsilon}_{diffusion} \quad (1)$$

$$\dot{\epsilon}_{diffusion} = \dot{\epsilon}_{gbs} + \dot{\epsilon}_{gc} \quad (2)$$

式中: $\dot{\epsilon}_{diffusion}$ 和 $\dot{\epsilon}_{dislocation}$ 分别是晶界扩散和晶界位错对剪切带发展贡献的应变率, $\dot{\epsilon}_{gbs}$ 和 $\dot{\epsilon}_{gc}$ 是晶界滑动/攀升和晶粒合并的应变率。

2.1 剪切带内由晶界位错主导的应力应变关系

对拉伸断裂后的纳晶镍试样断口附近的微观组织进行了 TEM 观察, 如图 2 所示, 从中可以看出一些位错堆积在纳晶镍内晶界内部, 这表明位错滑移将会在晶界内活动。

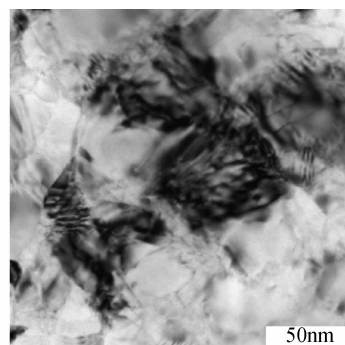


图 2 纳晶镍试样断口附近的 TEM 微观组织图

Fig. 2 TEM micrograph of NC Ni sample in shear band after the tensile test

同时,WEI 等^[21]和 ZHU 等^[22]认为:在纳晶材料中位错将由完全位错向部分位错转变。因此,本工作认为纳晶镍剪切带演化过程中的塑性变形机理由晶界部分位错滑移逐渐向晶界扩散机制转化,直至晶粒合并的出现。在剪切带变形的初级阶段,部分晶界位错占主导地位,是纳晶材料塑性变形的主要承担者。在理想的晶界位错沿晶界滑移的过程中,完全位错的伯格矢量用部分位错的伯格矢量来代替,记为 $b_p = b/\sqrt{3}$,其中, b 为完全位错的伯格矢量。根据位错密度理论,由位错控制的塑性应变率可以由公式(3)确定^[23]

$$\dot{\epsilon}_{\text{dislocation}} = \dot{\epsilon}_0 \left(\frac{\sigma}{\sigma_0} \right)^p \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{-p/2} \quad (3)$$

其中 ρ 是部分位错密度, ρ_0 是 ρ 的初始值。 $\dot{\epsilon}_0, \sigma_0$ 是给定温度下的材料参数。对于纳米晶金属材料, p 是与应变率敏感性 m 相关的参数。WEI 等^[24]证明,应变率敏感性是和晶粒尺寸 d 和温度 T 密切相关的。因此,参数 p 可以表示为

$$\frac{1}{p} = m = \frac{k_B T}{\varphi b_p} \frac{1}{\chi(\alpha\sqrt{\rho}d + \beta\sqrt{d})} \quad (4)$$

其中 k_B 是玻尔兹曼常数, φ 是移动位错扫过的距离, d 为晶粒尺寸。 χ, α 和 β 是材料常数。在晶界位错机制中,位错密度 ρ 演变是由两个动态过程决定的:无热位错储存量 ρ_+ 和位错的湮灭量 ρ_- 。在一个给定应变 ϵ_d

下,位错密度可以写成:

$$\rho(\epsilon_d) = \rho_+(\epsilon_d) + \rho_-(\epsilon_d) \quad (5)$$

Capolungo 等^[25]提出了位错无热存储模型^[26]。根据此模型部分位错密度的演变随着应变的变化可以表述如下:

$$\frac{d\rho}{d\epsilon_d} = \frac{d\rho_+}{d\epsilon_d} + \frac{d\rho_-}{d\epsilon_d} = \frac{M}{b_p} \left(\frac{1}{d} + \nu\sqrt{\rho} \right) - k_{20} \left(\frac{\dot{\epsilon}_d}{\dot{\epsilon}_0} \right)^{-1/q} \rho \quad (6)$$

式中: M 和 ν 分别是泰勒因子和比例因子, k_{20} 为常数, q 是与温度成反比的常数。

2.2 剪切带内由晶界扩散机理主导的应力应变关系

根据实验结果,随着应变的增大,剪切带内的部分位错滑移机制逐渐停止,而晶界控制的机理——晶界扩散对剪切带的发展贡献越来越大。基于原位 TEM 实验观察结果,可以认为剪切带内晶界扩散机理由晶界位错的滑移/攀移和晶粒合并来承担。图 3 给出了由位错的滑移/攀移和晶粒合并共同控制的晶界扩散机制示意图。此变形机理是剪切带发展的重要驱动力,这个过程可以阐述如下:如图 3(a)所示,首先经过大应变下的位错堆积,两组位错在晶界处形成一个位错墙(晶界 AB),然后这两组位错分别在应力引起的化学势梯度作用下沿着各自的滑移系从晶界的一侧滑

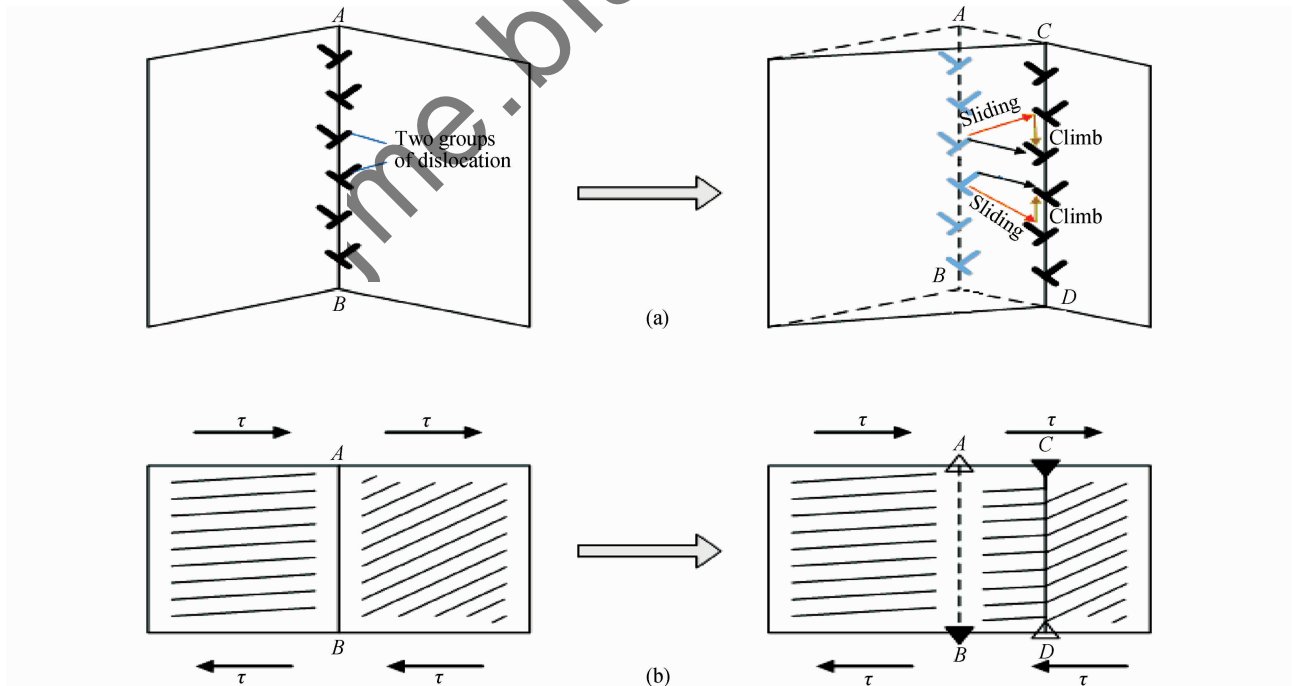


图 3 晶界扩散机制示意图

(a) 两组位错通过滑移/攀移引起的晶界迁移; (b) 特殊的旋转扩散诱发晶粒长大

Fig. 3 Schematic of grain boundary diffusion mechanism

(a) grain boundary migration accompanied by the sliding and the climbing of dislocations;

(b) a special rotation mechanism induces the grain coalescence

移到另一侧,并且这两组位错在晶界另一侧攀移而重组。此过程伴随着原子的扩散,从而使原子穿过晶界黏附在另一晶粒上,这促使了晶界的迁移。与此同时,晶界迁移扫过的区域内(ABCD),形成一种特殊的旋转位移^[27]。这是一个特殊的旋转扩散变形,它能使该区域的晶格方向逐渐倾向于剪切带方向,如图 3(b)所示,从而导致了晶粒的长大。因此,晶界扩散过程诱发晶粒长大并促进了剪切带传播。

本工作认为晶界的滑移和攀移是通过扩散流动调节的,相应的方程可以写成

$$\sigma = \eta'_i \dot{\epsilon}_{\text{gbs}} + \sigma_p \quad (7)$$

其中 η'_i 是一个动态黏性系数,它代表晶界滑动变形的黏性行为, σ_p 是门槛应力。在方程式(7)中, η'_i 与 d 、扩散系数 D_b 有关, σ_p 主要取决于晶粒尺寸大小 d 。Ashby 和 Verrall^[28] 假设晶界位错密度与所施加应力成正比,并给出了纳米晶体材料晶界滑移的模型:

$$\dot{\epsilon}_{\text{gbs}} = A \left\{ \frac{\sigma}{d} \right\} \left(\sigma - \frac{0.72\Gamma}{d} \right) D_b \quad (8)$$

其中 Γ 是晶界能量, A 是常数。通过比较方程(7)和方程(8),可以发现

$$\eta'_i = \frac{d}{\sigma D_b A}, \sigma_p = \frac{0.72\Gamma}{d} \quad (9)$$

这样,在方程(7)和(9)可以作为由晶界滑动和攀移主导的应力应变关系。

文献[29,30]表明:纳晶材料晶粒的合并与长大需要的应力相当大。由于晶粒的合并与长大主要发生在剪切带内,且此过程与剪切应力相互耦合,使剪切带发展过程中晶粒合并和长大的启动应力相对较小。同时,此过程还涉及了一种旋转变形,这种旋转变形也使得晶粒合并与长大的启动外加应力不会很高。Romanov 等^[31] 利用了旋转位移的能量和旋转极子之间的相互作用能理论提出一个晶粒合并的临界剪切应力,相应方程为:

$$\tau_c = \frac{Gb}{4\pi(1-\nu)d} \ln \left(\frac{0.54\alpha'd}{b} \right) \quad (10)$$

式中: G 是剪切横量, ν 是泊松比, α' 是位错芯参数。

从原子尺度来说,晶界合并过程和晶界化学势梯度导致的晶界处原子缺失有关^[20]。本工作假设晶粒合并的基本过程是原子从晶界的一个界面到另一个界面的热激活跳跃过程。对于在准静态变形的纳晶金属,应力驱使下的原子跳跃可以认为是原子的快速扩散过程^[32]。这样,晶粒合并对纳晶晶体整体塑性流动速率的影响可以表示为

$$\dot{\epsilon}_{\text{diffusion}} = B \frac{\Omega D_b \delta}{k_B T} \frac{\sigma}{d^3} \quad (11)$$

式中: δ 是晶界厚度, Ω 是原子体积, B 是常数。

2.3 动态参数 Ψ 的确定

FEDOROV 等^[33] 认为晶界滑移可以将硬三晶交点转化为软三晶交点,当这一过程发生在某些局部区域时,纳晶金属材料的塑性流动不均匀变形机制将会出现,即为剪切带化现象将发生。本工作沿用软硬三晶交点的概念,把动态参数 Ψ 定义为在给定区域内软三晶交点占整体三晶交的比例,则 $1-\Psi$ 就是硬三晶交占整体三晶交的比例。为了定量描述动态参数 Ψ 的演变,本工作描绘了对应于图 1 中原位拉伸 TEM 显微图像(a)~(d)的拓扑结构图,并且利用位错能量方法和特征角理论^[33] 确定了软硬三晶交点的个数。图 4 给出了软硬三晶交点在不同应变情况下(对应于图 1 中显微图像(a)~(d))的分布图,图中红色球代表硬三晶交,绿色球代表软三晶交。从图 4 中可以看出:在晶界滑移开始时,软三晶交点的数量分数大约是 24% (图 4(a))。作为对塑性变形行为的响应,软三晶交点的数量分数随着塑性应变的增加而增加。在应变 $\epsilon = 5.8\%$, $\epsilon = 6.4\%$, $\epsilon = 6.8\%$ 时,软三晶交点数量分数达到 42% (图 4(b)), 60% (图 4(c)), 78% (图 4(d)), 这三幅图分别对应图 1 中的显微 TEM 照片(b), (c) 和 (d)。这种现象表明:随着应变的增加,晶界位错滑移机制和晶界扩散机制对剪切带演化发展的贡献不断变化,晶界扩散机制对纳晶镍试样内剪切带整体应变率随着应变的增加而不断增大。

3 剪切带内应变梯度演化

通常,连续介质应变梯度模型可由连续介质非局部模型通过泰勒级数展开而获得。根据 KRONER, ERINGEN 和 EDELEN 提出的早期非局部模型^[34], 非局部塑性剪应变 $\bar{\gamma}_p$ 可以表达为其本身所对应的参数 γ_p 的加权平均,该计算在 y 周围长度为 L 的邻域内进行,对于本工作的一维问题而言:

$$\bar{\gamma}_p = \frac{1}{L} \int_L g(\xi) \gamma_p(y+\xi) d\xi \quad (12)$$

式中 y 代表与剪切带传播方向垂直的坐标上的一点, ξ 为从点 y 到其邻域内任一点的距离, $g(\xi)$ 代表某一权函数,它随 ξ 至 y 距离的增加而单调下降,微结构相互作用的广泛程度由权函数中所包含的内部长度参数决定。取高斯分布的权函数 $g(\xi)$ 为:

$$g(\xi) = \exp(-\xi^2/4l^2) \quad (13)$$

式中: l 为剪切带传播过程中涉及的材料内部长度参数。

将公式(12)中的局部剪切应变 $\gamma_p(y+\xi)$ 在点 $\xi=0$ 附近采用泰勒级数展开,考虑到各向同性假设,将

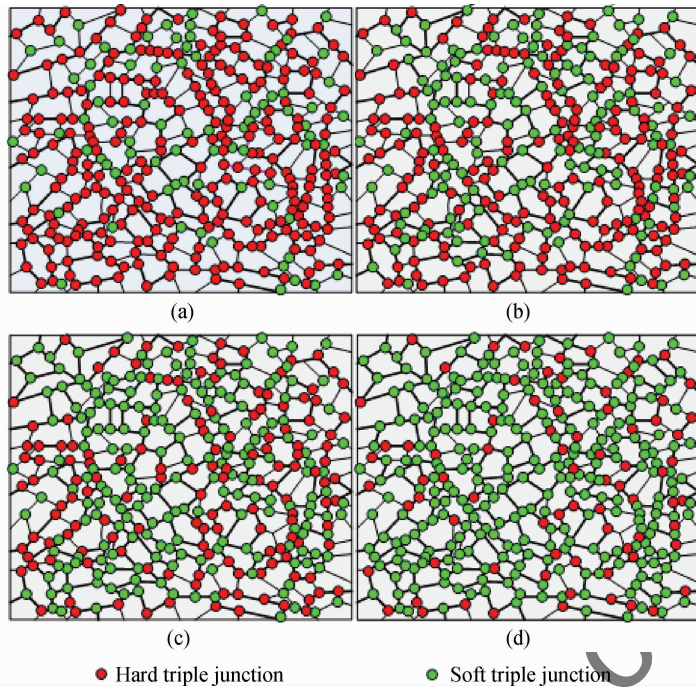


图4 软硬三晶点对应于图1 (a)应变 4.8%; (b)应变 5.8%; (c)应变 6.4%; (d)应变 6.8%

Fig. 4 Distribution of hard and soft triple junctions in the same area corresponding to fig. 1

(a) strain at 4.8%; (b) strain at 5.8%; (c) strain at 6.4%; (d) strain at 6.8%

各奇次项消去并保留前二项,可以得到

$$\bar{\gamma}_p = \sum_{n=0,2} \int_L \frac{1}{n!L} g(\xi) \frac{d^n \gamma_p(y)}{dy^n} \xi^n d\xi \quad (14)$$

将公式(13)代入(14),本工作可以得到非局部塑性剪应变 $\bar{\gamma}_p$ 的新表达式:

$$\bar{\gamma}_p = \gamma_p(y) + l^2 \frac{d^2 \gamma_p(y)}{dy^2} \quad (15)$$

由于已经通过微观本构方程确定了纳米晶体镍试样的应力-应变关系,所以纳晶镍试样的切向弹性模量 E_i^t (在应变软化阶段应力-应变曲线切线斜率的绝对值)和切向泊松比 ν_i^t 在给定应力水平 $\Delta\sigma_i$ 下(相应应变是 $\Delta\epsilon_i$)可以写成

$$E_i^t = \frac{\Delta\sigma_i}{\Delta\epsilon_i} \quad (16)$$

$$\nu_i^t = \frac{1}{2} - \left(\frac{1}{2} - \nu\right) \frac{E_i^t}{E} \quad (17)$$

式中: E, ν 是对应粗晶材料的弹性模量和泊松比。这样,切向软化剪切模量 (c_i^t) 是切向弹性模量和切向泊松比的函数,可以写成:

$$c_i^t = \frac{E_i^t}{2(1 + \nu_i^t)} \quad (18)$$

因此,剪切带传播过程中的流动切应力 τ_i 可以表示成

$$\tau_i = \tau_p - c_i^t \bar{\gamma}_p \quad (19)$$

这里 τ_p 是剪应力峰值。将方程(15)代入方程

(19),可以得到在剪切带一点上切应变表达式:

$$\tau_i = \tau_p - c_i^t (\gamma_p(y) + l^2 \frac{d^2 \gamma_p(y)}{dy^2}) \quad (20)$$

在这里,假定剪切带在对应应力水平 σ_i 的应变处的宽度为 w_i 。这样,可以得到在 $y = \pm w_i/2$ 处的边界条件 $\gamma_{pi} = 0$ 。由此,在 y 轴方向上的局部剪应变可以表示为

$$\gamma_{pi} = \frac{\tau_p - \tau_i}{c_i^t} [1 - \cos(y/l) / \cos(w/2l)] \quad (21)$$

为获得导致剪切带最快下降分支的解,需要条件 $d\gamma_{pi}/dw_i = 0$ 。这样可以分别求得最小的非平凡解 w_i 和剪切带的局部塑性应变:

$$w_i = 2\pi l \quad (22)$$

$$\gamma_{pi} = \frac{\tau_p - \tau_i}{c_i^t} [1 + \cos(y/l)] \quad (23)$$

根据文献[35],内部长度 l_i 在给定应力状态下可以表述如下:

$$l_i = k_s \frac{M^2 \alpha^2 (c_i^t)^2 b}{\sigma_i^2} \quad (24)$$

这里 k_s 是与晶粒大小和动态参数有关的结构参数,可以写成

$$k_s = \Psi [1 - \frac{(d - \delta)^3}{d^3}] \quad (25)$$

需要注意的是对于常规粗晶金属,此结构参数的值可以认为是 0,这表明了剪切局部化对粗晶金属来说不是敏感的。由于剪切局部化的一个重要结果是纳

晶金属的应力承受能力下降,所以剪切带宽度会随着剪切带增长而扩大。

4 剪切带多尺度模型的验证

4.1 实验值与模型预测值的比较

图 5 给出了纳晶镍真实应力应变曲线的模型预测值和实验测试值的比较,所用的材料参数(纳晶 Ni)如表 1 所示。可以看出模型预测的应力应变曲线与实验数据在相当宽的应变范围内都吻合得很好。

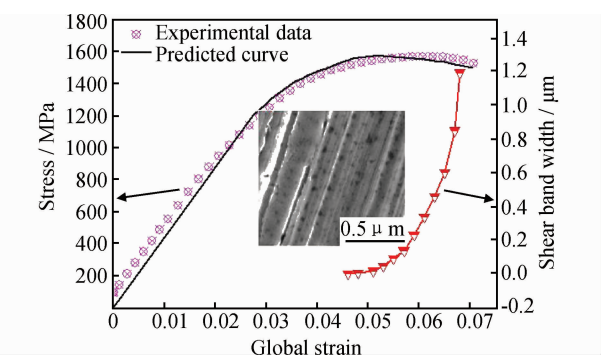


图 5 纳晶镍(平均晶粒尺寸为 20nm)应力应变曲线模型预测值与实验测试值的比较以及单轴拉伸载荷下纳晶镍内剪切带宽度随应变的变化发展

Fig. 5 Comparison between the predicted and experimental results on the stress-strain relation and the development of shear band width for the NC Ni sample with mean grain size of 20nm under uniaxial tensile load

表 1 纳晶 Ni 计算过程中的材料参数

Table 1 Material parameters used in calculation for the NC Ni

Description	Notation	Value
Distance swept by mobile dislocation	ϕ	$0.5 \times 10^{-9} \text{ m}$
Magnitude of the burgers vector	b	0.249nm
Proportionality factor	χ	0.05
Proportionality factor	α	0.33
Proportionality factor	β	$15.8 \text{ GPa} \cdot \text{nm}^{1/2}$
Taylor orientation factor	M	3.06
Proportionality factor	ν	0.3
Numerical constant	k_{20}	23.5
Numerical constant	q	21.25
Diffusion coefficient	D_b	2.6×10^{-18}
Shear modulus	G	76.9GPa
Atomic volume	Ω	$1.09 \times 10^{-29} \text{ m}^3$
Numerical constant	A	3×10^{10}
Numerical constant	B	1

比较 JIA 等^[8]测试的纳晶 Cu 和本工作中纳晶 Ni 的剪切带化行为可以发现:纳晶 Cu 中剪切带的启动比纳晶 Ni 的要早很多,这主要是由于两种纳晶材料的制备方法不同而造成的。纳晶 Cu 是采用原位固结方

法得到的,其在制备过程中已经储存了大量的位错,因此在力学测试过程中材料不能再承担位错滑动,从而在塑性变形刚刚开始时便进入软化阶段,剪切带迅速出现。而在本工作利用电沉积方法制备的纳晶 Ni 中,塑性变形开始阶段能够承担一部分位错滑移变形,应力不会立即进入软化阶段,所以剪切带不会很快出现,只有当晶界扩散机制占主导时,剪切带化行为才会显现。同时,图 5 也显示了模型预测的纳晶镍内剪切带宽度随整体应变的发展情况,可以观察到在软化阶段剪切带随着应力的减小逐渐扩大,其宽度均在亚微米级。这与实验中观察到的纳晶镍中剪切带的宽度基本一致,如图 5 中插入的纳晶镍剪切带的 SEM 的显微图片,该显微图片中显示了一系列宽度在亚微米范围(0.3~0.8 μm)的平行剪切带线。

4.2 晶粒尺寸对剪切带化行为的影响

纳晶金属的力学行为与晶粒尺寸有着密切的关系。CARSLY 等的研究成果^[11]表明晶粒尺寸的大小对纳晶金属中剪切带的产生和生长具有明显作用。本工作选择 5 种不同晶粒尺寸(10, 20, 50, 100, 200nm)的纳晶镍作为研究对象,分析了剪切带对晶粒尺寸的依赖性。图 6 显示了不同晶粒尺寸的纳晶镍在恒定应变率 10^{-4} s^{-1} 下的应力应变曲线。从图 6 可以发现:较细晶粒纳晶镍的应力应变曲线只表现出非常轻微的应变软化行为或者是完美的塑性变形行为。随着晶粒尺寸的增加,应变软化的趋势越来越明显。尽管如此,必须注意到这种行为只发生在纳米尺度范围内,而粗晶材料将不会出现应变软化行为。事实上,纳米结构材料的塑性变形更加不稳定,更加易于发生局部大塑性变形,并且在纳米尺度内,较大晶粒尺寸的材料软化行为更强烈,这主要是由于晶界扩散影响区的增大。

图 7 给出了在应变速率为 10^{-4} s^{-1} 时不同晶粒尺

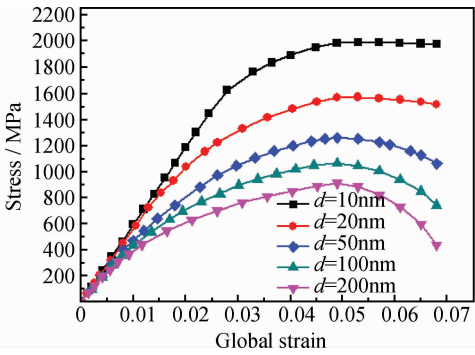


图 6 不同晶粒尺寸的纳晶镍在恒定应变率为 10^{-4} s^{-1} 下模型预测的应力应变关系

Fig. 6 Predicted stress-strain relations of NC Ni with different grain sizes at constant strain rate of 10^{-4} s^{-1}

寸的纳晶镍内剪切带宽度随着整体应变的变化。可见,在纳米尺度范围内,剪切带宽度随着晶粒尺寸的增加而逐渐大,剪切带的宽度在几微米到几十微米范围内,这与先前的文献中报道的纳晶金属中剪切带的宽度基本一致^[6,8,9]。同时,较细晶粒的纳晶材料中剪切带的产生较早,这主要是因为细晶粒纳晶材料中晶界扩散比大晶粒扩散发生的早且强烈,这也就是较小晶粒纳晶材料中剪切带更清晰的原因。

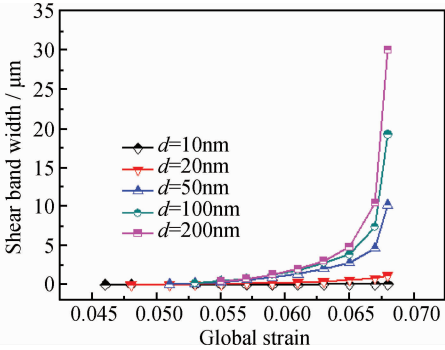


图 7 在应变率为 10^{-4}s^{-1} 下纳晶镍剪切带宽度随着整体应变的变化曲线

Fig. 7 Evolution of predicted width of shear band with increasing global strain under the strain rate of 10^{-4}s^{-1}

为了考察纳晶材料中内部特征长度对剪切带发展演化的影响,图 8 给出了不同塑性应变下内部特征长度随着晶粒尺寸的变化曲线。从图 8 可以看出:内部特征长度 l 的值在小晶粒尺寸范围内随着晶粒尺寸的增加而迅速增加,随着晶粒尺寸进一步增大后又逐渐下降。由于 l 值可以代表纳晶材料内晶界扩散的强弱,因此图 8 结果意味着剪切带的启动将随着晶粒尺寸的增加变得越来越困难,直至无剪切带的发生。相反,较细晶粒尺寸范围内的纳晶材料更倾向于发生局部大塑性变形,即剪切带。其次,从图 8 还可以看出内部特征长度 l 存在一峰值,这说明对于超细晶粒的纳晶材料,其中也不易产生剪切带,而是在晶粒尺寸为 100nm 左右时,材料的塑性变形更容易局部化。这些结果表明:当晶粒尺寸比较大时,应变软化机制可能不再起作用,因为较大的晶粒内很容易产生晶内位错,并且为位错的交叉滑移留下更多空间,这样使材料硬化从而发生均匀变形。当晶粒尺寸在 100nm 左右时,内部特征长度 l 最大,这时由晶界位错控制的晶界扩散机制迅速发展并占据主导地位,从而导致剪切带的产生和发展。

4.3 剪切带内塑性剪切应变的分布

本工作的剪切带多尺度模型同样能够预测剪切带内塑性应变的分布情况。图 9 给出了晶粒尺寸为

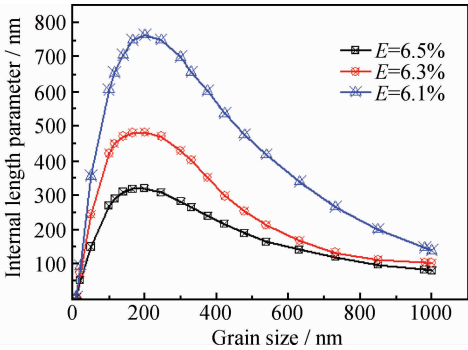


图 8 内部特征长度 l 在不同整体塑性应变下随晶粒尺寸的变化

Fig. 8 Variation of internal length l with grain size at different global plastic strain

20nm 的纳晶镍试样在应变率为 10^{-4}s^{-1} 时不同整体应变下对应的剪切带内塑性应变的分布以及剪切带宽度的变化。从此图可以清晰地看出:在剪切带内的塑性应变的分布是不均匀的,在剪切带两个边界处应变为 0,应变随着位置趋向于剪切带中央而逐渐增加,并且在剪切带中央剪切塑性应变达到最大值。同时,剪切带内塑性变形的演变在初期阶段是比较缓慢的,但是当应变达到应变软化阶段时(应变值较大),剪切塑性应变迅速增加,这表明在较大应变阶段晶界位错机制衰减作用而晶界扩散机制占主导地位。

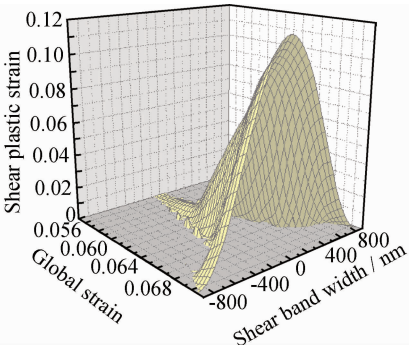


图 9 平均晶粒尺寸为 20nm 的纳米晶体镍试样在单向拉伸时不同整体应变下的剪切带内塑性应变分布以及剪切带宽度变化

Fig. 9 Distribution of shear plastic strain across the shear band width varied with global strain for the NC Ni sample with mean grain size of 20nm under uniaxial tension

5 结论

- (1)随着晶粒尺寸增加,剪切带宽度也随着增加,较细晶粒的纳晶材料中剪切带的产生较早。
- (2)在剪切带内的塑性应变的分布是不均匀的,应变随着位置趋向于剪切带中央而逐渐增加,并且在剪

切带中央剪切塑性应变达到最大值。

(3)讨论了晶粒尺寸对剪切带内部特征长度尺寸的影响以及在不同晶粒尺寸下内部特征长度尺寸对剪切带启动的作用,结果表明内部特征长度尺寸对剪切带演化发展影响显著。

参考文献

- [1] 周宇松,吴希俊,许国良,等. 大尺寸纳米铜和银的制备及其微观缺陷与力学性能[J]. 中国有色金属学报, 2000, 10(4): 465—469.
ZHOU Yu-song, WU Xi-jun, XU Guo-liang, et al. Synthesis, microdefects and mechanical properties of large bulk nanocrystalline silver and copper[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2000, 10(4): 465—469.
- [2] 周宇松, 吴希俊. 纳米金属的力学性能[J]. 力学进展, 2001, 31(1): 62—69.
ZHOU Yu-song, WU Xi-jun. Mechanical properties of nanocrystalline metals[J]. Advances in Mechanics, 2001, 31(1): 62—69.
- [3] WEERTMAN J R, FARKAS D, HEMKER K, et al. Structure and mechanical behavior of bulk nanocrystalline materials[J]. MRS Bull, 1999, 24(2): 44—50.
- [4] 卢柯, 卢磊. 金属纳米材料力学性能的研究进展[J]. 金属学报, 2000, 36(8): 785—789.
LU Ke, LU Lei. Progress in mechanical properties of nanocrystalline materials[J]. Acta Metallurgica Sinica, 2000, 36(8): 785—789.
- [5] SCHWAIGER R, MOSER B, DAO M, et al. Some critical experiments on the strain-rate sensitivity of nanocrystalline nickel[J]. Acta Mater, 2003, 51(17): 5159—5172.
- [6] CHENG S, MA E, WANG Y M, et al. Tensile properties of in-situ consolidated nanocrystalline Cu[J]. Acta Mater, 2005, 53(5): 1521—1533.
- [7] DALLA TORRE F, VAN SWYGENHOVEN H, VICTORIA M. Nanocrystalline electrodeposited Ni: microstructure and tensile properties[J]. Acta Mater, 2002, 50(15): 3957—3970.
- [8] JIA D, RAMESH K T, MA E. Impedance spectral studies of sol-gel alumina-silver nanocomposites[J]. Acta Mater, 2003, 51(12): 3495—3509.
- [9] WEI Q, JIA D, RAMESH K T, et al. Evolution and microstructure of shear bands in nanostructured Fe[J]. Appl Phys Lett, 2002, 81(7): 1240—1242.
- [10] PANI A V, PANIN A A, IVANOV Y F. Deformation macro-localisation and fracture in ultrafine-grained armco iron[J]. Mater Sci Eng A, 2008, 486(1—2): 267—272.
- [11] CARSLEY J E, FISHER A, MILLIGAN W W, et al. Mechanical behavior of a bulk nanostructured iron alloy[J]. Metall Mater Trans A, 1998, 29(9): 2261—2271.
- [12] HUNG P C, SUN P L, YU C Y, et al. Inhomogeneous tensile deformation in ultrafine-grained aluminum[J]. Scripta Mater, 2005, 53(6): 647—652.
- [13] SANZOZ F, DUPONT V. Atomic mechanism of shear localization during indentation of a nanostructured metal[J]. Mater Sci Eng C, 2007, 27(5—8): 1509—1513.
- [14] FU H H, BENSON D J, MEYERS M A. Computational description of nanocrystalline deformation based on crystal plasticity[J]. Acta Mater, 2004, 52(15): 4413—4425.
- [15] WEI Y J, ANAND L. Grain-boundary sliding and separation in polycrystalline metals: application to nanocrystalline fcc metals[J]. J Mech Phys Solids, 2004, 52(11): 2587—2616.
- [16] WARNER D H, SANZOZ F, MOLINARI J F. Atomistic based continuum investigation of plastic deformation in nanocrystalline copper[J]. Int J Plast, 2006, 22(4): 754—774.
- [17] SANDERS P G, EASTMAN J A, WEERTMAN J R. Elastic and tensile behavior of nanocrystalline copper and palladium[J]. Acta Mater, 1997, 45(10): 4019—4025.
- [18] KOCH C C. Ductility in nanostructured and ultra fine-grained materials: recent evidence for optimism[J]. J Metastable Nano-cryst Mater, 2003, 18: 9—19.
- [19] OVID'KO I A, SHEINERMAN A G. Enhanced ductility of nanomaterials through optimization of grain boundary sliding and diffusion processes[J]. Acta Mater, 2009, 57(7): 2217—2228.
- [20] WEI Y J, BOWER A F, GAO H J. Enhanced strain-rate sensitivity in fcc nanocrystals due to grain-boundary diffusion and sliding[J]. Acta Mater, 2008, 56(8): 1741—1752.
- [21] WEI Y J, SU C, ANAND L. A computational study of the mechanical behavior of nanocrystalline fcc metals[J]. Acta Mater, 2006, 54(12): 3177—3190.
- [22] ZHU B, ASARO R, KYSL 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.
- [23] KIM H S, ESTRIN Y. Phase mixture modeling of the strain rate dependent mechanical behavior of nanostructured materials[J]. Acta Mater, 2005, 53(3): 765—772.
- [24] WEI Q, CHENG S, RAMESH K T, et al. Effect of nanocrystalline and ultrafine grain sizes on the strain rate sensitivity and activation volume: fcc versus bcc metals[J]. Mater Sci Eng A, 2004, 381(1—2): 71—79.
- [25] CAPOLUNGO L, JOCHUM C, CHERKAoui M, et al. On the elastic-viscoplastic behavior of nanocrystalline materials[J]. Int J Plast, 2007, 23(4): 561—591.
- [26] KOCKS U F, MECKING H. Physics and phenomenology of strain hardening[J]. Prog Mater Sci, 2003, 48(3): 171—273.
- [27] GUTKIN M Y, OVID'KO I A. Grain boundary migration as rotational deformation mode in nanocrystalline materials[J]. Appl Phys Lett, 2005, 87(25): 251916—1—3.
- [28] ASHBY M F, VERRALL R A. Diffusion-accommodated flow and superplasticity[J]. Acta Metall, 1973, 21(2): 149—163.
- [29] GIANOLA D S, VAN PETEGEM S, LEGROS M, et al. Stress-assisted discontinuous grain growth and its effect on the deformation behavior of nanocrystalline aluminum thin films[J]. Acta Mater, 2006, 54(8): 2253—2263.
- [30] FARKAS D, FROSETH A, VAN SWYGENHOVEN H. Grain boundary migration during room temperature deformation of nanocrystalline Ni[J]. Scripta Mater, 2006, 55(8): 695—698.

- HE Fang-cheng, WANG Zheng, SHI Li-jun. Ultrasonic testing technique for the inspection of defects in the corner of composites[J]. *Journal of Materials Engineering*, 2011, (7): 80—84.
- [2] 税国双, 汪越胜, 曲建民. 材料力学性能退化的超声无损检测与评价[J]. *力学进展*, 2005, (1): 52—68.
- SHUI Guo-shuang, WANG Yue-sheng, QU Jian-min. Advances in nondestructive test and evaluation of material degradation using nonlinear ultrasound[J]. *Advances in Mechanics*, 2005(1): 52—68.
- [3] 邓明晰, PRICE D C, SCOTT D A. 兰姆波非线性效应的实验观察[J]. *声学学报*, 2005, (1): 37—46.
- DENG Ming-xi, PRICE D C, SCOTT D A. Experimental observations of nonlinear effects of Lamb waves[J]. *Acta Acustica*, 2005, (1): 37—46.
- [4] NAGY P B. Fatigue damage assessment by nonlinear ultrasonic materials characterization[J]. *Ultrasonics*, 1998, 36(1—5): 375—381.
- [5] CANTRELL J H, YOST W T. Nonlinear ultrasonic characterization of fatigue microstructures[J]. *International Journal of Fatigue*, 2001, (23): 487—490.
- [6] SHUI G S, KIM J Y, QU J, et al. A new technique for measuring the acoustic nonlinearity of materials using Rayleigh waves[J]. *NDT & E International*, 2008, 41(5): 326—329.
- [7] 吴斌, 颜丙生, 何存富, 等. AZ31 镁合金早期力学性能退化非线性超声检测[J]. *航空材料学报*, 2011, 31(1): 87—92.
- WU Bin, YAN Bing-sheng, HE Cun-fu, et al. AZ31 magnesium early mechanical performance degradation nondestructive testing using nonlinear ultrasonic[J]. *Journal of Aeronautical Materials*, 2011, 31(1): 87—92.
- [8] PRUELL C, KIM J Y, QU J, et al. A nonlinear-guided wave technique for evaluating plasticity-driven material damage in a metal plate[J]. *NDT & E International*, 2009, 42(3): 199—203.
- [9] BABY S, NAGARAJA K B, OMPRAKASH C M, et al. Creep damage assessment in titanium alloy using a nonlinear ultrasonic technique[J]. *Scripta Materialia*, 2008, 59(8): 818—821.
- [10] KIM J Y, JACOBS L J, QU J, et al. Experimental characterization of fatigue damage in a nickel-base superalloy using nonlinear ultrasonic waves[J]. *Journal of the Acoustical Society of America*, 2006, 120, (3): 1266—1273.
- [11] LIU M H, KIM J Y, JACOBS L, et al. Experimental study of nonlinear Rayleigh wave propagation in shot-peened aluminum plates-feasibility of measuring residual stress[J]. *NDT & E International*, 2011, 44(1): 67—74.
- [12] 邓明晰. 复合结构界面粘接强度的声-超声评价研究[J]. *应用声学*, 2005, 24(5): 292—299.
- DENG Ming-xi. Nondestructive evaluation of adhesive strength of composite structures using an acousto-ultrasonic approach[J]. *Applied Acoustics*, 2005, 24(5): 292—299.
- [13] 张谦琳, 胡建恺. 复合材料的超声检测新技术 I. 声-超声技术[J]. *应用声学*, 1995, 14(4): 38—42.
- ZHANG Qian-lin, HU Jian-kai. New techniques of ultrasonic testing on composite materials I. The acousto-ultrasonic technique[J]. *Applied Acoustics*, 1995, 14(4): 38—42.
- 基金项目: 国家自然科学基金项目(11172034); 中央高校基本科研业务费支持项目(2011JBM263)
- 收稿日期: 2012-05-08; 修订日期: 2013-07-27
- 作者简介: 税国双(1971—), 男, 博士, 副教授, 研究方向为固体中的波传播理论及应用, 非线性超声检测, 联系地址: 北京交通大学土建学院(100044), E-mail: gsshui@bjtu.edu.cn
- ent-enhanced damage models[J]. *Int J Numer Meth Eng*, 2000, 49(6): 811—832.
- [35] MA L, ZHOU J Q, ZHU R T, et al. Effects of strain gradient on the mechanical behaviors of nanocrystalline materials[J]. *Mater Sci Eng A*, 2009, 507(1—2): 42—49.
- 基金项目: 国家自然科学基金(10872087); 霍英东青年教师基金(101005); 湖北省优秀中青年人才项目(Q20111501)
- 收稿日期: 2012-06-20; 修订日期: 2013-04-10
- 作者简介: 周剑秋(1972—), 男, 博士, 教授, 主要研究方向为先进材料的力学性能, 联系地址: 湖北省武汉市武汉工程大学流芳校区特 1 号(430073), E-mail: yzjqcc@sohu.com.

(上接第 69 页)

- [31] ROMANOV A E, KOLESNIKOVA B A L, OVID'KO I A, et al. Disclinations in nanocrystalline materials: Manifestation of the relay mechanism of plastic deformation[J]. *Mater Sci Eng A*, 2009, 503(1—2): 62—67.
- [32] BOWER A F, WINIGER E. A two-dimensional finite element method for simulating the constitutive response and microstructure of polycrystals during high temperature plastic deformation[J]. *J Mech Phys Solids*, 2004, 52(6): 1289—1317.
- [33] 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.
- [34] ASKES H, PAMIN J, DE BORST R. Dispersion analysis and element-free Galerkin solutions of second-and fourth-order gradi-