

纳米晶材料变形行为的微观力学分析*

兰姣霞¹ 洪友士^{2**}

(¹军事交通学院基础部,天津,300161)

(²中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室,北京,100190)

摘要 将纳米晶材料视为包括晶粒和晶界的两相复合材料.基于能量平衡概念推导出纳米晶材料的增量本构关系.最后将本文发展的模型用于纯铜的单轴拉伸实验,讨论了晶粒大小、形状和晶粒分布的影响,并将模型预测的结果和已有的实验结果进行比较.

关键词 纳米晶材料,微观力学,应变能,纯铜

0 引言

诸多物理学家利用分子动力学模拟研究了纳米晶材料的塑性变形行为,如 Schiotz 等^[1-3], Van Swygenhoven 等^[4,5], Yamakov 等^[6-8]和 Tschoopp 等^[9].模拟表明纳米晶材料中存在着比较明显的晶粒和晶界两相.当材料由粗晶向纳米晶转变时,其变形机制也相应发生了变化,即由位错占主导地位变形机制向晶界占主导地位的变形机制转变.当晶粒尺寸较大时,位错在晶界处产生,此时主要的变形机制是由位错塞积和运动引起材料的塑性变形;当晶粒尺寸继续减小时,位错运动会受到抑制,此时主要的变形机制是晶界相的塑性变形.在研究纳米晶材料的变形机制时,如果不考虑扩散蠕变机制的作用,那么在塑性变形过程中就仅存在两种主要的变形机制,即位错变形机制和晶界变形机制.

本文认为当平均晶粒尺寸小于 50 nm 时,晶界变形为材料主要的塑性变形机制.此时基于纳米晶材料塑性变形机制和内变量理论从微观力学角度推导出纳米晶材料的增量本构关系.最后将本文发展的模型用于纯铜的单轴拉伸实验研究,并将模型计算得到的结果和已有的实验值进行比较.

1 微观力学模型

1.1 内变量理论

内变量理论^[10,11]以热力学的基本原理为基础,不仅需要建立应力-应变之间的关系,而且还需要基于能量平衡推导出微结构的演化方程.此时除定义瞬态应变外,还需引入内变量来描述加载过程中材料微结构的变化情况.

考虑材料的单位体积元,状态变量为应变张量 ϵ_{ij} ,绝对温度 T 以及内变量 ϑ_{ij} .也就是说,变量 ϵ_{ij} , T 以及 ϑ_{ij} 就可以完整地描述材料的热力学状态.由热力学第一、二定律可得:

$$dW = dU - TdS + Td^{(i)}S \quad (1)$$

其中 U 为系统的内能, W 为外力对系统所作的功, S 为熵函数,而 $d^{(i)}S \neq 0$ 表示系统内部产生的熵,是不可逆增量.

假如单元上的应力场用 σ_{ij} 表示,则外力对系统所作的功:

$$\sigma_{ij} d\epsilon_{ij} = \left[\frac{\partial U}{\partial \epsilon_{ij}} - T \frac{\partial S}{\partial \epsilon_{ij}} \right] d\epsilon_{ij} + \left[\frac{\partial U}{\partial \vartheta_{ij}} - T \frac{\partial S}{\partial \vartheta_{ij}} \right] d\vartheta_{ij} + \left[\frac{\partial U}{\partial T} - T \frac{\partial S}{\partial T} \right] dT + Td^{(i)}S_{ij} \quad (2)$$

如果对于单纯热过程,则式(2)可以简化为:

$$\left[\frac{\partial U}{\partial T} - T \frac{\partial S}{\partial T} \right] dT + Td^{(i)}S = 0 \quad (3)$$

* 国家自然科学基金项目(10772178,10721202)资助.
2008-10-16 收到第 1 稿,2009-05-15 收到修改稿.

** 通讯作者. Tel: 010-82543966, E-mail: hongys@imech.ac.cn.

由于 $Td^{(i)}S = 0$, 因此式(3)成立的充要条件为:

$$\frac{\partial U}{\partial T} - T \frac{\partial S}{\partial T} = 0 \tag{4}$$

引入另一状态函数, 系统的 Gibbs 自由能 $= U - TS$, 则式(2)可以简化如下:

$$ij d_{ij} = \frac{\partial}{\partial ij} d_{ij} + \frac{\partial}{\partial \delta_{ij}} d_{\delta_{ij}} + Td^{(i)}S \tag{5}$$

由文献^[11]可知:

$$Td^{(i)}S = A_{ij} d_{ij} + B_{ij} d_{\delta_{ij}} \tag{6}$$

将式(6)代入式(5)可得:

$$ij d_{ij} = \left(\frac{\partial}{\partial ij} + A_{ij} \right) d_{ij} + \left(\frac{\partial}{\partial \delta_{ij}} + B_{ij} \right) d_{\delta_{ij}} \tag{7}$$

由于 ij, δ_{ij} 为无关的状态变量, 因此有以下两式成立:

$$ij = \frac{\partial}{\partial ij} + A_{ij} \tag{8}$$

$$\frac{\partial}{\partial \delta_{ij}} + B_{ij} = 0 \tag{9}$$

式(8)表示的是材料的本构方程, 而式(9)表示的内变量的演化方程.

利用时间导数代替微分形式, 可将式(6)重新表示如下:

$$= A_{ij} \dot{ij} + B_{ij} \dot{\delta}_{ij} \tag{10}$$

其中 \dot{ij} 为耗散函数. 引入正交条件, 则有:

$$A_{ij} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \dot{ij}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial \dot{ij}} \cdot \dot{ij} \right)^{-1} \frac{\partial}{\partial \dot{ij}} \tag{11}$$

$$B_{ij} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \dot{\delta}_{ij}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial \dot{\delta}_{ij}} \cdot \dot{\delta}_{ij} \right)^{-1} \frac{\partial}{\partial \dot{\delta}_{ij}} \tag{12}$$

1.2 增量本构关系

当晶粒形状是球形时, 晶粒相的体积分数为 $v_f = (d-w)^3/d^3$. 其中, d 为晶粒尺寸的大小, w 为晶界的厚度. 本文认为晶界的厚度随着晶粒尺寸的变化而变化, 即 $w = kd^{-1/2}$, 且 $k = 0.000016 \text{ nm}^{3/2}$.

当晶粒形状是椭球时, 其方程表示如下:

$$\frac{(x_1 - x_1)^2}{a_1^2} + \frac{(x_2 - x_2)^2}{a_2^2} + \frac{(x_3 - x_3)^2}{a_3^2} = 1$$

其中 $a_i (i = 1, 2, 3)$ 是椭球是半轴长, 椭球的中心位于 $x = (x_1, x_2, x_3)$. 特别地, 如果假设晶粒的形状是球棒时 ($a_2 = a_3 = a - a_1$), 则晶粒的体积分数为:

$$v_f = \frac{(a-w)(a-w)^2}{a^3}$$

其中 $\mu = a_1/a, a = d/(2\sqrt{3})$.

为形状参数, 表示椭球的扁平程度.

注意到 J_2 理论在金属塑性中的适用性, 因此屈服函数为:

$$f(\sigma_{ij}^{cm}) = \sqrt{J_2} - \left[y + \frac{k_y}{\sqrt{d}} \right] = 0 \tag{13}$$

其中 d 为晶粒直径大小, y, k_y 是与温度相关的材料常数, $J_2 = S_{ij}S_{ij}/2$ 为应力偏量的第二不变量.

$$S_{ij} = \sigma_{ij} - \frac{1}{3} \sigma_{kk} \delta_{ij} \tag{14}$$

考虑单位体积元, 承受塑性应变的球形晶粒随机分布在基体中. 本文中, 将塑性应变 ϵ_{ij}^p 作为内变量. 假如塑性应变不存在时仅由施加的外力所引起的应变场用 ϵ_{ij}^0 来表示. 根据 Colonnnett 理论^[12]可知, 当 ϵ_{ij}^p 和 ϵ_{ij}^0 共同存在时的系统的总能量等于这两种应变分别单独存在时的总能量之和. 首先研究材料仅承受外加应变场 ϵ_{ij}^0 时系统的能量表达式.

假如单元仅仅承受外加应变场 ϵ_{ij}^0 , 则弹性应变能表示如下:

$$U = \frac{1}{2} \int_D (\epsilon_{ij}^0 + \epsilon_{ij}^p) (\sigma_{ij}^0 + \sigma_{ij}^p) dv \tag{15}$$

其中 ϵ_{ij}^0 为所施加的外部应变, σ_{ij}^0 是当晶粒和基体的弹性模量相同时所对应的应力场; 而 $\epsilon_{ij}^p, \sigma_{ij}^p$ 为当晶粒和基体的弹性模量不同时所对应的干扰应力、应变场. u_i 表示单元边界上的干扰位移场, 则有:

$$u_i = 0, \text{ 在 } S \text{ 上} \tag{16}$$

利用式(16), 经过推导式(15)可写为:

$$U = \frac{1}{2} \int_D \epsilon_{ij}^0 \sigma_{ij}^0 dv - \frac{1}{2} \int_D \epsilon_{ij}^p \sigma_{ij}^0 dv - \frac{1}{2} \int_D (\epsilon_{ij}^p \sigma_{ij}^p - v_f \epsilon_{ij}^p \sigma_{ij}^p) dv \tag{17}$$

其中 σ_{ij}^* 是根据等效夹杂理论^[12]引入的本征应变, v_f 是晶粒相的体积分数.

对于各向同性、球形晶粒而言, 式(17)可表示如下:

$$U = \frac{1}{2} (2\bar{\mu} I_{ijkl}^1 + \bar{T}_{ijkl}^2) \epsilon_{ij}^0 \epsilon_{kl}^0 \tag{18}$$

其中,

$$I_{ijkl}^1 = \frac{1}{2} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \tag{19}$$

$$I_{ijkl}^2 = \delta_{ij} \delta_{kl} \tag{20}$$

$$\bar{\mu} = \mu - v_f \mu_1 + 2\mu_2 + 2\mu_3 \tag{21}$$

$$\bar{\mu} = \mu - v_f \mu_1 \tag{22}$$

$$\mu_1 = \frac{2(\mu - \mu^g)}{a_1} \quad (23)$$

$$\mu_2 = \frac{-\mu^g}{a_1} - \frac{2a_2(\mu - \mu^g)}{a_1(a_1 + 3a_2)} - \frac{3a_2(-\mu^g)}{a_1(a_1 + 3a_2)} \quad (24)$$

$$a_1 = 2(1 - \nu_f)(\mu^g - \mu)S_1 + 2\mu \quad (25)$$

$$a_2 = 2(1 - \nu_f)(\mu^g - \mu)S_2 + (1 - \nu_f)(\mu^g - \mu)S_1 + 3(1 - \nu_f)(\mu^g - \mu)S_2 + \quad (26)$$

$$S_1 = \frac{2(4 - 5)}{15(1 - \nu_f)} \quad (27)$$

$$S_2 = \frac{5 - 1}{15(1 - \nu_f)} \quad (28)$$

其中 μ, μ^g, μ^s 分别为基体和晶粒的 Lamé 系数, ν_f 为基体材料的泊松比.

由于本文不考虑变形过程中温度的变化, 则状态变量仅为整体应变张量 ϵ_{ij} 和内变量 ϵ_{ij}^p . 单元的整体应变可以表示为:

$$\epsilon_{ij} = \epsilon_{ij}^0 + \epsilon_{ij}^D \quad (29)$$

其中 ϵ_{ij}^D 是由晶粒内塑性变形导致的体积平均应变. 如果基体和晶粒的弹性模量相同, 则有 $\epsilon_{ij}^D = \nu_f \epsilon_{ij}^p$; 如果基体和晶粒的弹性模量不同, 利用等效夹杂理论^[13]可得 $\epsilon_{ij}^D = \nu_f B_{ijkl} \epsilon_{kl}^p$.

此处仅考虑晶界相(假设为理想塑性材料)的塑性变形, 为了简单起见, 认为晶界相的塑性变形 ϵ_{ij}^{pm} 是均匀的. 则由于晶界相塑性变形导致的整体塑性应变为:

$$\epsilon_{ij}^D = \epsilon_{ij}^{pm} - \nu_f B_{ijkl} \epsilon_{kl}^{pm} = (I_{ijkl}^1 - \nu_f B_{ijkl}) \epsilon_{kl}^{pm} \quad (30)$$

其中,

$$B_{ijkl} = B_1 I_{ijkl}^1 + B_2 I_{ijkl}^2 \quad (31)$$

$$B_1 = \frac{2\mu^g}{C_1} \quad (32)$$

$$B_2 = \frac{\mu^g}{C_1} - \frac{2\mu^g C_2}{C_1(C_1 + 3C_2)} - \frac{3\mu^g C_2}{C_1(C_1 + 3C_2)} \quad (33)$$

$$C_1 = 2[\mu^g + (1 - \nu_f)(\mu^g - \mu)(S_1 - 1)] \quad (34)$$

$$C_2 = \mu^g + 2(1 - \nu_f)[2S_2(\mu^g - \mu) + (S_1 - 1)(\mu^g - \mu) + 3S_2(\mu^g - \mu)] \quad (35)$$

因此当单元仅仅承受外加应变场 ϵ_{ij}^0 时的弹性应变能为:

$$W_1 = \frac{1}{2} (2\bar{\mu} I_{ijkl}^1 + \bar{I}_{ijkl}^2) [\epsilon_{ij} - (I_{ijmn}^1 - \nu_f B_{ijmn}) \epsilon_{mn}^{pm}] \cdot [I_{klmn}^1 - (I_{klmn}^1 - \nu_f B_{klmn}) \epsilon_{mn}^{pm}] \quad (36)$$

下面考虑材料仅承受塑性应变 ϵ_{ij}^{pm} , 则系统的能量表达式如下:

$$W_2 = \frac{1}{2} \int_D \epsilon_{ij} [I_{ij} - \epsilon_{ij}^{pm} (I_{ij} - \nu_f B_{ijkl})] dv \quad (37)$$

其中:

$$(I_{ij} - \nu_f B_{ijkl}) = \begin{cases} 1, & x \in V_k \\ 0, & x \notin V_k \end{cases} \quad (38)$$

V_k 表示的是晶粒相所占有的区域.

由于单元边界上不存在应力, 有:

$$\int_D \epsilon_{ij} n_j dv = \int_D \epsilon_{ij} n_j u_i ds - \int_D \epsilon_{ij,j} u_i dv = 0 \quad (39)$$

因此, 式(37) 可以表示如下:

$$W_2 = - \frac{1}{2} \int_k \epsilon_{ij} \epsilon_{ij}^{pm} dv = - \frac{1}{2} \nu_f \int_k \epsilon_{ij} \epsilon_{ij}^{pm} \quad (40)$$

其中 ϵ_{ij} 为晶粒内由塑性变形导致的应力场, 表达式如下:

$$\epsilon_{ij} = D_{ijkl} \epsilon_{kl}^{pm} \quad (41)$$

其中:

$$D_{ijkl} = D_1 I_{ijkl}^1 + D_2 I_{ijkl}^2 \quad (42)$$

$$D_1 = 2(1 - \nu_f) \mu (S_1 - 1) B_1 \quad (43)$$

$$D_2 = (1 - \nu_f) \{ 2B_2 \mu (S_1 - 1) + B_1 [2\mu S_2 + (S_1 - 1) + 3 S_2] + 3B_2 [2\mu S_2 + (S_1 - 1) + 3 S_2] \} \quad (44)$$

因此系统的整体能量为:

$$W = \frac{1}{2} (2\bar{\mu} I_{ijkl}^1 + \bar{I}_{ijkl}^2) [\epsilon_{ij} - (I_{ijmn}^1 - \nu_f B_{ijmn}) \epsilon_{mn}^{pm}] \cdot [I_{klmn}^1 - (I_{klmn}^1 - \nu_f B_{klmn}) \epsilon_{mn}^{pm}] - \frac{1}{2} \nu_f D_{ijkl} \epsilon_{ij}^{pm} \epsilon_{kl}^{pm} \quad (45)$$

单位体积的能量耗散率为:

$$\dot{W} = (1 - \nu_f) \dot{\epsilon}_{ij}^{cm} \dot{\epsilon}_{ij}^{pm} \quad (46)$$

其中 $\dot{\epsilon}_{ij}^{cm}$ 满足式(13).

将式(45) 分别代入式(9)、(8) 可以得到塑性变形率和本构关系如下两式:

$$\dot{\epsilon}_{ij}^{cm} = \frac{(I_{ijmn}^1 - \nu_f B_{ijmn}) \dot{\epsilon}_{mn}^{pm} + \nu_f D_{ijmn} \dot{\epsilon}_{mn}^{pm}}{1 - \nu_f} \quad (47)$$

$$\dot{\epsilon}_{ij} = (2\bar{\mu} I_{ijkl}^1 + \bar{I}_{ijkl}^2) [\dot{\epsilon}_{kl} - (I_{klmn}^1 - \nu_f B_{klmn}) \dot{\epsilon}_{mn}^{pm}] = \bar{C}_{ijkl} [\dot{\epsilon}_{kl} - (I_{klmn}^1 - \nu_f B_{klmn}) \dot{\epsilon}_{mn}^{pm}] \quad (48)$$

加载准则如下式所示:

$$f(\dot{\epsilon}_{ij}^{cm}) = 0, \quad \frac{\partial f}{\partial \dot{\epsilon}_{ij}^{cm}} \cdot \dot{\epsilon}_{ij}^{cm} > 0 \quad (49)$$

将式(48) 代入式(47), 并利用式(49) 可以得到:

$$\frac{\partial f}{\partial \dot{\epsilon}_{ij}^{cm}} \{ (I_{ijkl}^1 - \nu_f B_{ijkl}) \bar{C}_{klmn} \dot{\epsilon}_{mn}^{pm} + [\nu_f D_{ijmn} - (I_{ijkl}^1 - \nu_f B_{ijkl}) \bar{C}_{klab} (I_{abmn}^1 - \nu_f B_{abmn})] \dot{\epsilon}_{mn}^{pm} \} = 0 \quad (50)$$

由 Prandtl-Reuss^[13] 流动法则可知:

$$\dot{\epsilon}_{mn} = \dot{\epsilon}_{cm} \frac{\partial f}{\partial \sigma_{mn}} \quad (51)$$

将式(51)代入式(50)可得:

$$\dot{\epsilon}_{mn} = \frac{\frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} [(I_{ijkl} - \nu_f B_{ijkl}) \bar{C}_{klmn}]}{\frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} [(I_{ijkl} - \nu_f B_{ijkl}) \bar{C}_{klab} (I_{abkl} - \nu_f B_{abkl}) - \nu_f D_{ijmn}] \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}}} \dot{\epsilon}_{ij} \quad (52)$$

将式(52)代入式(51),然后再代入式(48),可以得到纳米晶材料增量形式的应力-应变关系如下:

$$\dot{\epsilon}_{ij} = C_{ijkl}^p \dot{\epsilon}_{kl} = \bar{C}_{ijmn} \left[I_{mnlk} - (I_{mnab} - \nu_f B_{mnab}) \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ab}} \frac{\dot{\epsilon}_{kl}}{\dot{\epsilon}_{ij}} \right] \dot{\epsilon}_{kl} \quad (53)$$

2 计算结果与讨论

本节利用式(53)通过编程计算研究纯铜在单轴拉伸荷载(即 $\epsilon_{11} > 0$, 其余 $\epsilon_{ij} = 0$)下的力学响应,讨论了考虑晶粒分布和不考虑晶粒分布两种情况.计算中晶粒相和晶界相的剪切模量和泊松比分别为 $\mu^s = 42.1 \text{ GPa}$, $\nu^s = 0.3$ 和 $\mu = 25.26 \text{ GPa}$, $\nu = 0.33$ ^[14],所施加的宏观应变率为 $\dot{\epsilon} = 10^{-3} / \text{s}$.

图1表示的是不考虑晶粒尺寸的情况下(即:认为所有的晶粒尺寸均相等且为球形晶粒)不

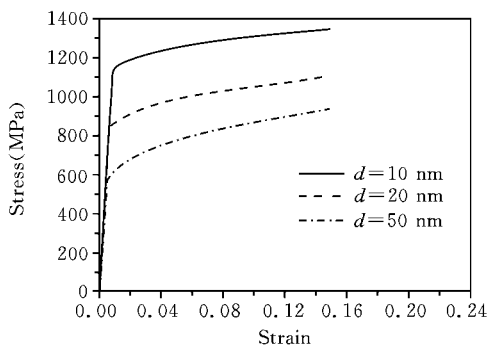


图1 不同晶粒尺寸在相同应变率下(1 × 10⁻³/s)的应力-应变关系

Fig. 1 Stress-strain relations of different grain size with strain rate of 1 × 10⁻³/s

同晶粒尺寸在相同应变率下的应力-应变曲线.可以看出,随着晶粒尺寸的减小,材料的流动应力会得到显著的增加,且应变硬化能力降低.

不考虑晶粒尺寸分布但是考虑了晶粒形状的影响结果如图2所示.图2表示晶粒尺寸为50 nm时参数 β 的影响.由图可以看出,应力随着参数 β 的增加而增大,当 $\beta = 1.0$ 时应力为最大值.

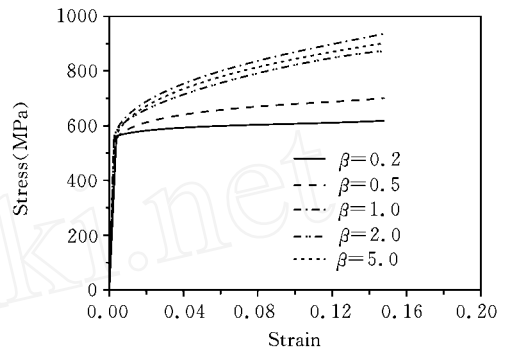


图2 当 $d = 50 \text{ nm}$ 时,参数 β 对应力-应变关系的影响

Fig. 2 Stress-strain relations for different parameter values with grain size of 50 nm

下面考虑晶粒分布的影响.图3表示的是纯铜平均晶粒大小为23 nm时的晶粒分布图^[15].而图4表示的是平均晶粒大小为23 nm时,考虑晶粒分布对结果的影响.由图可以看出,当不考虑晶粒分布时会导致结果值偏高.

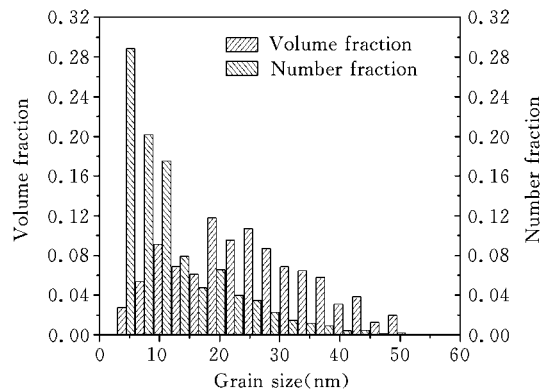


图3 $\bar{d} = 23 \text{ nm}$ 晶粒分布图^[15]

Fig. 3 Statistical distribution of grain size for copper^[15]. About 270 grains were measured for the sample

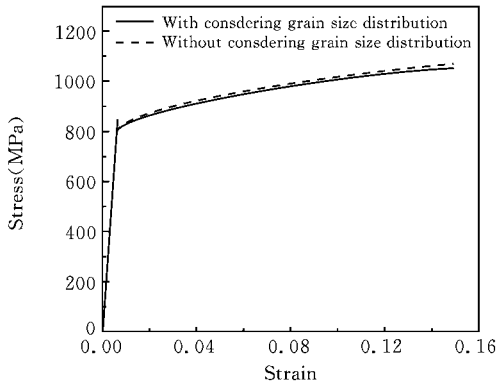


图 4 $\bar{d}=23$ nm 应力-应变关系

Fig. 4 Stress-strain relations for copper with average grain size of 23 nm

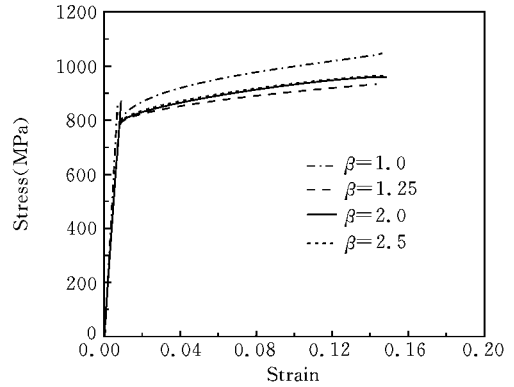


图 6 $\bar{d}=23$ nm, $\beta > 1.0$ 应力-应变关系

Fig. 6 Stress-strain relation for different parameter values larger than one with average grain size of 23 nm

图 5 和图 6 表示的是平均晶粒大小为 23 nm 时参数 β (即考虑晶粒形状) 的影响. 结果表明应力随着参数 β 的增加而变化, 当 $\beta = 1.0$ 时应力为最大值.

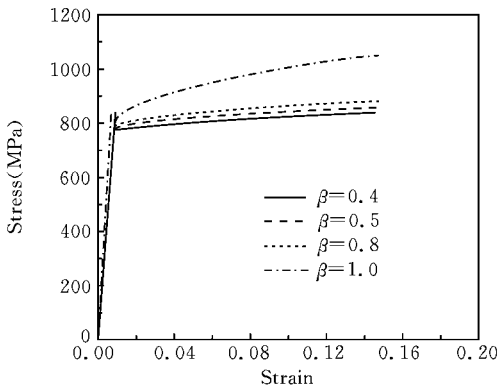


图 5 $\bar{d}=23$ nm, $\beta < 1.0$ 应力-应变关系

Fig. 5 Stress-strain relation for different parameter values less than one with average grain size of 23 nm

最后将模型计算得到的结果与已有的实验结果^[16,17]进行比较如图 7 所示, 结果表明两者吻合较好.

4 结论

本文认为当晶粒尺寸小于 50 nm 时, 晶界相变

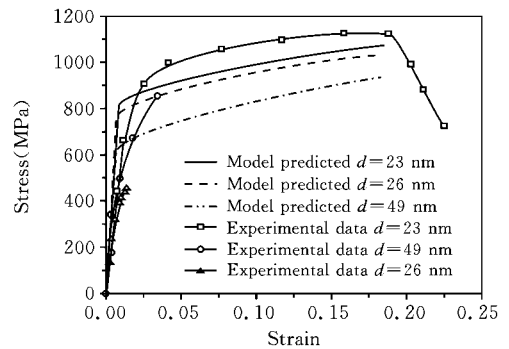


图 7 模型预测值与实验结果^[16,17]的比较

Fig. 7 Comparison of stress-strain relations predicted by present model with experimental data^[16,17]

形为主要的塑性变形机制, 基于内变量理论和纳米晶材料的塑性变形机制从微观力学的角度推导了纳米晶材料的增量本构关系. 主要结论有: 材料的流动应力随着晶粒尺寸的减小而显著增加, 且应变硬化能力降低; 应力随着参数 β 的增加而增加, 但当 $\beta = 1.0$ 时增至最大; 相对于晶粒均匀分布而言, 考虑晶粒分布时应力值偏小; 模型计算结果和已有实验值吻合较好.

参考文献

[1] Schiotz J, Di Tolla F D, Jacobsen K W. Softening of nanocrystalline metals at very small grain sizes [J].

- Nature, 1998, 39: 561-563.
- [2] Schiotz J, Jacobsen K W. A maximum in the strength of nanocrystalline copper [J]. Science, 2003, 301: 1357-1359.
- [3] Schiotz J, Vegge T, Di Tolla F D, Jacobsen K W. Atomic-scale simulations of the mechanical deformation of nanocrystalline metals[J]. Physical Review B, 1999, 60: 11971-11983.
- [4] Van Swygenhoven H, Spaczer M, Caro A. Microscopic description of plasticity in computer generated metallic nanophase samples: a comparison between Cu and Ni [J]. Acta Materialia, 1999, 47: 3117-3126.
- [5] Van Swygenhoven H, Weertman J R. Deformation in nanocrystalline metals[J]. Materials Today, 2006, 9 (5): 24-31.
- [6] Yamakov V, Wolf D, Phillpot S R, Gleiter H. Grain boundary diffusion creep in nanocrystalline palladium by molecular dynamics simulation[J]. Acta Materialia, 2002, 50: 61-73.
- [7] Yamakov V, Wolf D, Salazar M, Phillpot S R, Geitner H. Length-scale effects in the nucleation of extended dislocations in nanocrystalline Al by molecular dynamics simulation[J]. Acta Materialia, 2001, 49: 2713-2722.
- [8] Yamakov V, Moldovan D, Rastogi K, Wolf D. Relation between grain growth and grain boundary diffusion in a pure material by molecular dynamics simulations[J]. Acta Materialia, 2006, 54: 4053-4061.
- [9] Tschopp M A, McDowell D L. Grain boundary dislocation sources in nanocrystalline copper [J]. Scripta Materialia, 2008, 58: 299-302.
- [10] Rice J R. Inelastic constitutive relations for solids: an internal-variable theory and its application to metal plasticity[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1971, 19: 433-455.
- [11] Zrger Z. Introduction to Thermomechanics[M]. 2nd, rev. ed. Amsterdam: North-Holland, 1983: 42-80.
- [12] Mura T. Micromechanics of Defects in Solids[M]. Martinus Nijhoff publishers, 1982: 1-201.
- [13] Hill R. The Mathematical Theory of Plasticity[M]. London: Oxford University Press, 1950: 34-90.
- [14] Kim H S, Estrin Y, Bush M B. Plastic deformation behavior of fine-grained metals[J]. Acta Materialia, 2000, 48: 493-504.
- [15] Youssef K M, Scattergood R O, Murty K L, Koch C C. Ultratough nanocrystalline copper with a narrow grain size distribution[J]. Applied Physics Letters, 2004, 85: 929-931.
- [16] Sanders P G, Eastman J A, Weertman J R. Elastic and tensile behavior of nanocrystalline copper and palladium[J]. Acta Materialia, 1997A, 45: 4019-4025.
- [17] Youssef K M, Scattergood R O, Murty K L. Ultra-high strength and high ductility of bulk nanocrystalline copper[J]. Applied Physics Letters, 2005, 87: 091904-091907.

MICROMECHANICS ANALYSIS FOR DEFORMATION BEHAVIOR OF NANOCRYSTALLINE MATERIALS

Jiaoxia Lan¹ Youshi Hong²

(¹ *The Basic Department, The Academy of Military Transportation PLA, Tianjin, 300161*)

(² *State Key Laboratory of Nonlinear Mechanics (LNM), Institute of Mechanics,
Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100190*)

Abstract Nanocrystalline (NC) materials can be treated as composite materials consisting of two phases, i. e. grain domain and grain boundary. In this paper, the incremental stress-strain relation is derived from the view point of energy balance. As a result, the stress-strain relation of different grain sizes is obtained, and also applied to the case of pure copper under uniaxial tension. In addition, the effects of grain shape and statistical distribution of grain sizes on the stress-strain relation are discussed, and the results predicted by the present model are compared with experimental data.

Key words nanocrystalline materials, micromechanics, strain energy, pure copper