

## 纳米金属材料的界面力学行为研究\*

魏宇杰

(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** 将常规多晶材料的粗晶粒尺寸缩小到纳米尺度时, 这些纳米晶体材料会呈现出与其对应的粗晶材料迥异的物理现象. 与材料力学行为最相关的是强度及塑形变形机理这两个方面. 考虑到晶界的变形与破坏可能是纳米晶体材料低塑性的根源, 克服纳米晶体材料中强度与韧性之间存在的“熊掌和鱼不可兼得”的问题, 也通常称为晶界工程. 在众多的晶界中, 孪晶界面被发现可同时保持材料的强度和韧性. 本文主要就纳米金属材料中界面的力学行为做一个简要综述, 包含晶界的强化力学机理以及新型孪晶界面的力学行为与揭示内在尺度效应的模型研究.

**关键词** 纳米晶体, 晶界/孪晶界, 强度/塑性, 力学模型

中图法分类号 TG113.2

文献标识码 A

文章编号 0412-1961(2014)02-0183-08

## INVESTIGATION OF MECHANICAL BEHAVIOR OF INTERFACES IN NANOSTRUCTURED METALS

WEI Yujie

State Key Laboratory of Nonlinear Mechanics, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences,  
Beijing 100190

Correspondent: WEI Yujie, professor, Tel: (010) 82544169, E-mail: yujie\_wei@lnm.imech.ac.cn

Supported by National Basic Research Program of China (No.2012CB937500), National Natural Science Foundation of China (Nos.11021262 and 11272327) and Program of “One Hundred Talented People” of Chinese Academy of Sciences

Manuscript received 2013-12-19, in revised form 2014-01-06

**ABSTRACT** When grain sizes of crystals are down to nano-scale, the so-called nanocrystalline materials exhibit distinct physical properties in contrast to their conventional counterparts. The strength and plastic deformation mechanisms were among the most broadly investigated properties from mechanical society. Since deformation and pre-mature failure in interfaces (including grain boundaries, twin boundaries, and interfaces between different media) could be the origin of low ductility in nanocrystalline materials, the effort to evade the strength-ductility trade-off dilemma in nanocrystalline materials, by tuning their interfacial structures/properties, is usually called as interfacial engineering. Twin boundaries stand out among all possible boundary structures for their capability to enhance strength and retain ductility of crystalline metals. In this paper, current understanding about the mechanical behavior associated with interfaces in nanostructured metals is reviewed, with a focus on the strengthening mechanisms played by twin/grain boundaries and current physical models to shed light on the size-effect induced by grain sizes and twin thicknesses.

**KEY WORDS** nanocrystal, grain boundary/twin boundary, strength/ductility, mechanical model

当材料本身或者组成材料的微结构的任意一个特征维度在 1~100 nm 内时, 称为纳米或纳米结构

材料. 因其独特的热、力、光、电、磁等性能, 对纳米结构与纳米结构组成的材料的研究热潮从上世纪末一直延续至今. 一方面, 这些微小结构提供了基础研究领域的新战场: 它们对传统教科书上的许多规律和模型提出了挑战<sup>[1]</sup>——很多时候这些理论和模型接受过对应宏观体系的比照和校验, 但未经受

\* 国家重点基础研究发展计划项目 2012CB937500, 国家自然科学基金项目 11021262 和 11272327, 以及中国科学院百人计划项目资助  
收到初稿日期: 2013-12-19, 收到修改稿日期: 2014-01-06  
作者简介: 魏宇杰, 男, 1974 年生, 研究员, 博士

过纳米结构体系的检验;更多情况下是模型建立的假设中已经将尺度在纳米量级的小系统排除在适用范围外.如何扩展现有理论方法或者发展新理论方法来描述纳米结构所具有的物理特性成为一个重要的研究方向.另一方面,纳米材料在物理、化学、生物等方面所展现出的独特性质,使其在科技发展中得到广泛应用<sup>[2]</sup>,相关的技术创新与大规模工艺制备是研究的难点与热点.作为其中的一个分支,纳米金属材料的兴起源自Gleiter<sup>[3,4]</sup>的一系列工作.1981年,Gleiter<sup>[3]</sup>研究了极细晶粒材料,并讨论它有可能具备不同于玻璃态与晶态物质的特性,因而具有重要意义.随后,Gleiter<sup>[4]</sup>在1989年发表了关于纳米多晶材料的综述,文中指出,将常规多晶材料的粗晶粒尺寸缩小到纳米尺度时,可能出现一系列新的物理现象.在这些所有可能的超常性能中,与材料力学行为最相关的则是强度与塑形变形.

(1) 晶粒小于一定尺度时,由于晶界强化效果,晶粒内位错的运动阻力增加,即Hall-Petch效应<sup>[5,6]</sup>:

$$\sigma_y = \sigma_0 + k_y d^{-1/2} \quad (1)$$

式中, $\sigma_y$ 是平均晶粒尺寸为 $d$ 的多晶体的屈服强度, $\sigma_0$ 一般认为是位错运动的晶格阻力(Peierls晶格阻力<sup>[7]</sup>), $k_y$ 是材料参数.Hall-Petch效应是由实验数据归纳出的多晶材料的强度与晶粒之间的关系,相应的理论解释主要包括Petch<sup>[6]</sup>和Cottrell<sup>[8]</sup>的基于位错塞积的模型——位错塞积产生的应力集中能在相邻晶粒内激发位错,以及Li<sup>[9]</sup>的晶界位错发射模型.总而言之,位错运动是Hall-Petch效应存在的必要条件.

(2) Gleiter<sup>[4]</sup>认为,纳米多晶材料的关键力学特性在于它可能的超塑性能力.由于晶粒尺寸细化带来大量的晶界,这些晶界组成的连通网络可以促进材料的晶界扩散能力,使得材料在保持高强度的同时,也具备很好的延展性(塑形变形能力).在给定外加单轴拉伸载荷 $\sigma$ 时,Coble<sup>[10]</sup>给出了由晶界扩散引起的塑性应变率 $\dot{\epsilon}$ :

$$\dot{\epsilon} = \frac{\sigma}{d^3} \frac{\delta_{gb} D_{gb}}{k_B T} \exp(-Q/(RT)) \quad (2)$$

式中, $\delta_{gb}$ 是晶界特征厚度, $D_{gb}$ 是晶界扩散系数, $Q$ 是蠕变扩散激活能, $R$ 是摩尔气体常数, $k_B$ 是Boltzmann常数, $T$ 是热力学温度.可见,晶粒尺寸越小,蠕变提供的塑性应变率越大.所以,对界面的力学行为研究的关键是研究纳米金属材料的强度和韧性行为.

最近20年来,纳米材料研究涉及不同学科,并发表了海量文章.Koah<sup>[11]</sup>和Tjng<sup>[12]</sup>全面介绍了纳米金属材料的制备及应用.Kumar等<sup>[13]</sup>、Meyers等<sup>[14]</sup>、Zhu等<sup>[15]</sup>和Dao等<sup>[16]</sup>针对纳米材料的力学性能,Wolf等<sup>[17]</sup>和Yamakov等<sup>[18]</sup>关于分子尺度模拟方面的发展,Zhu和Li<sup>[19]</sup>针对纳米结构导致的超高强度,以及Lu等<sup>[20]</sup>在界面工程实现纳米结构材料强韧化方面已经作了全面的综述.Zhu等<sup>[21]</sup>也对纳米晶中出现的孪晶变形机理作了全面的总结.本文主要就纳米金属材料中界面的力学行为做一个简要综述,主要包括晶界强化的力学机理以及新型孪晶界面的力学行为与模型研究.

## 1 界面强化力学机理

从力学特性来看,高强度是纳米金属材料最具吸引力的特点之一.强度的提高是由于晶粒变小时,晶界使得晶粒内位错的运动阻力增加,即Hall-Petch效应.从目前收集到的数据来看,fcc,bcc以及hcp多晶金属都呈现典型的Hall-Petch效应.图1给出了fcc多晶Cu和Ni,bcc多晶Fe,以及hcp多晶Mg的强度随晶粒尺寸的变化<sup>[22]</sup>.由图可见,尽管由于所采用的材料制备方法以及具体工艺上的差异使得数据有一定分散性,但仍可明确看出材料强度从粗晶到纳米多晶与 $d^{-1/2}$ 之间所呈现的线性关系.与预期一致,纳米晶材料在晶粒尺寸小到10 nm左右时,强度出现平台,进一步的晶粒细化反而使强度弱化.这一强度弱化现象,经常在文献中被称为反Hall-Petch效应.但从变形机理的角度而言,可能不是一个适当的称谓,因为这里观察到的强度弱化是由于晶界过量后晶界的塑性变形取代位错塑性机制造成的,与由于位错机制形成的Hall-Petch效应在根源上是不同的.

需要特别指出的是,在由位错塞积导致的Hall-Petch强化转变到晶界的塑性变形机制所控制的强度软化过程中,可能存在由位错发射导致的强化机制,这一过程发生在晶粒尺寸由几十个纳米下降到10 nm左右时.在这个尺寸,由于晶界的吸引,位错难以存在于晶粒中而不能形成位错塞积.因而晶粒内部的变形主要由从晶界发射的位错提供,所发射的位错在穿越晶粒后被对面的晶界吸收.在这个尺度,对位错而言晶界既是源,也是汇.Asaro等<sup>[23-25]</sup>给出了在fcc晶体中,全位错发射所需要的剪切应力:

$$\tau = \alpha \frac{Gb}{d} \quad (3)$$

其中, $\alpha$ 是系数, $G$ 是剪切模量, $b$ 是Burgers矢量模.

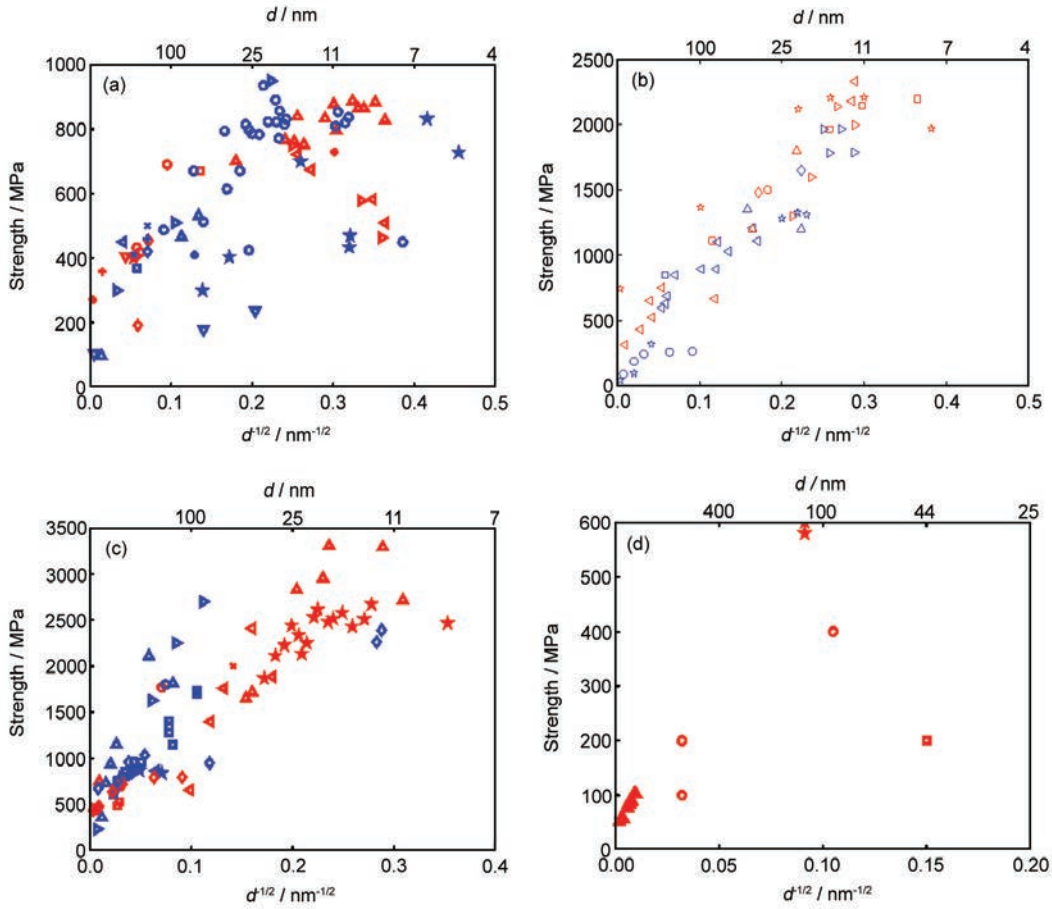


图 1 典型的 fcc, bcc 以及 hcp 多晶金属强度随晶粒的变化<sup>[22]</sup>

Fig.1 Strength of polycrystalline metals as a function of average grain size for typical metals<sup>[22]</sup> ( $d$ —average grain size.

Different symbols in each figure represent different data source, see Ref.[22] for details)

(a) polycrystalline Cu (b) polycrystalline Ni (c) polycrystalline Fe (d) polycrystalline Mg

不全位错发射所需要的剪切应力:

$$\tau_p = \frac{\gamma_{sf}}{b_p} + \alpha \frac{Gb}{3d} \quad (4)$$

其中,  $\gamma_{sf}$  为不全位错发射需要提供的层错能, 而  $b_p$  为不全位错 Burgers 矢量模. 将式(3)与(4)比较可看出, 存在一个临界晶粒尺寸  $d_c$ , 可使位错发射机制由全位错转向不全位错发射:

$$d_c = \beta \frac{Gbb_p}{\gamma_{sf}} \quad (5)$$

Asaro 和 Suresh<sup>[25]</sup>给出了几种典型 fcc 晶体的临界晶粒尺寸. 从式(1)与(3)或(4)的对比可知, 位错发射机制得到的强度和晶粒尺寸的标度率, 与基于位错塞积得到的 Hall-Petch 强化不同. 但目前还没有实验验证式(3)或(4)给出的标度率, 一个可能的原因是, 位错发射机制主导时晶粒尺寸已经很小, 这时晶界的变形也构成了整个塑性变形的重要组成部分, 使得由式(3)或(4)给出的强度与晶粒尺寸成反比的标度率特征不明显. 总结目前关于晶粒对强度及

变形机理的研究成果可知, 随着晶粒尺寸变小, 晶界对强度的影响可大致分为 4 个阶段: 位错塞积(宏观晶粒到 100 nm 左右), 全位错发射(100 nm 左右到几十纳米), 不全位错发射(几十纳米到 10 nm 左右), 晶界变形(主要表现为滑移与扩散, 10 nm 以下)以及晶界变形协调下的晶粒转动机制<sup>[26]</sup>.

针对以上变形机制, 许多研究组发展了相应的连续介质模型来描述纳米金属力学行为. 针对纳米晶在压缩情况下具备的超塑性特征<sup>[27]</sup>, Wang 和 Yang<sup>[28,29]</sup>考虑了晶界扩散、滑移以及晶界变形协调下的晶粒转动机制, 将 Ashby-Verrall 的基于晶界扩散导致的晶粒演化模型发展并应用到纳米晶体的变形过程中, 得到了纳米晶中蠕变率与外载荷及临界应力之差成线性的关系. Wei 和 Gao<sup>[30]</sup>采用连续介质模型, 考虑晶粒与晶界中几种变形机理所提供的应变率的叠加, 得到了晶粒尺寸以及应变率对各变形量机制的影响. 需要指出的是, 类似的连续介质模型通常无法兼顾几类变形机理在实际变形过程中微结

构需要满足的协调条件. 如果要考虑这一点, 通常需要借助有限元计算. Wei 等<sup>[31-34]</sup>针对不同晶粒样本及不同应变率下的变形, 就微观层次各类塑性变形对宏观整体的贡献有详细分析. Schiötz 等<sup>[35]</sup>和 Li 等<sup>[36]</sup>针对这些变形模式开展了分子尺度机理理解方面的计算工作. 到目前为止, 所考虑的理论模型所适用的晶界都是伴随材料细化而产生的, 并不涉及某些经过特殊设计和制备形成的微结构或晶界<sup>[37]</sup>. 下面要讨论的就是在材料中的孪晶界面对多晶体材料力学性能的影响.

## 2 新型孪晶界面的力学行为与模型

普遍而言, 三维的晶界具备5个自由度<sup>[38]</sup>, 其中3个自由度用来描绘两个相邻晶体之间的旋转坐标, 另外2个则表征晶界的自由度(二维的情况下是2个自由度<sup>[39]</sup>). 不同晶界由于其中的原子排序上的差异, 其力学性能也有很大不同. 考虑到晶界的变形与破坏可能是纳米晶体材料低塑性的根源<sup>[31,40]</sup>, 如果要克服纳米晶体材料中强度与韧性之间存在的“熊掌和鱼不可兼得”的问题<sup>[41-43]</sup>, 就需要研究如何能改善晶界特性, 也通常称为晶界工程<sup>[20]</sup>. 在众多的晶界中, 孪晶界面在保持材料的强度、韧性以及导电性能等方面远优于一般晶界<sup>[20,44,45]</sup>, 关于这一领域的研究也方兴未艾<sup>[44-59]</sup>. Lu 等<sup>[20,44,45]</sup>通过调整电沉积过程中所施加电场的幅值-时间曲线, 成功制备了可控孪晶尺寸分布的纳米孪晶 Cu. 尤其可贵的是, 当晶粒尺寸在亚微米尺寸且基本不变的情况下, 该研究团队制备了不同孪晶尺寸的样本, 从100 nm左右到几个纳米, 从而使得系统研究含孪晶晶体材料在强度上的尺度效应成为可能. 他们的研究发现, 孪晶界面的增强效果也存在最优尺寸: 在晶粒尺寸保持不变的情况下, 初始孪晶宽度变窄到约10 nm量级情况下, 材料强度增加; 进一步减小孪晶宽度时, 强度开始降低(见图2<sup>[45]</sup>). 需要指出的是, 伴随孪晶宽度从10 nm至更窄时所造成的强度降低与前面讨论的一般纳米晶材料(如图1)在这个尺度的强度降低不同, 后者是由于过量晶界变形造成的, 而在纳米孪晶中, 晶粒的尺寸基本不变. 关于纳米孪晶材料的力学变形, Lu 等<sup>[20,60]</sup>、Zhu 等<sup>[21]</sup>、Zhu 和 Gao<sup>[61]</sup>已经作了非常详细且深入的综述. 这里主要就孪晶的力学模型方面做介绍.

孪晶界面的存在影响了材料的微观变形机理<sup>[20,45,46,60,61]</sup>, 从而使得纳米孪晶材料与传统纳米材料相比具有很大优势. Jin<sup>[62,63]</sup>仔细研究了位错与孪晶

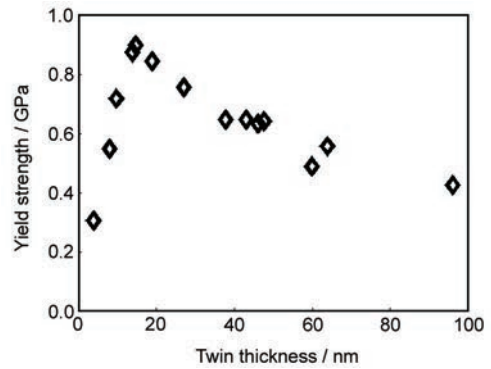


图2 纳米孪晶Cu (平均晶粒尺寸约500 nm)的屈服强度随孪晶宽度的变化<sup>[45]</sup>

Fig.2 Yield strength as a function of twin spacing in nano-twinning polycrystalline Cu with average grain size about 500 nm<sup>[45]</sup>

界面的相互作用, 发现孪晶界面不仅能阻挡位错运动, 而且位错能在孪晶界面发生反应而缓解位错塞积造成的高应力状态. 这一机制与 Lu 等<sup>[45]</sup>的实验观察一致, 有效解释了孪晶界面不仅能增加强度而且对拉伸韧性也有显著提升的现象. Ni 等<sup>[64]</sup>则进一步通过实验研究了位错密度对位错-孪晶界面相互作用的影响, 发现初始位错密度较低的情况下位错在孪晶界面比较容易发生反应, 而在位错密度高的环境中位错-孪晶反应的难度增加.

由于受到孪晶界面的限制, 位错运动可以大致分为平行于孪晶界面或与孪晶界面交叉两类情况, 如图3a<sup>[66]</sup>所示. 依据位错环前沿 Burgers 矢量与滑移方向的不同而进一步细化, 与孪晶面交叉的位错又可能有两类情况, 如图3b<sup>[60]</sup>所示. 在实际变形过程中, 细化后的两类位错初始会存在差异, 从而影响材料的屈服强度; 经过一定变形, 这两者可能趋于同一种模式, 对材料的流动应力及硬化行为产生影响. 对于与孪晶界面斜交的位错, 受限于孪晶宽度的减小, 它们将强化材料强度. 与式(1)类似, 对于位错穿越孪晶界面的情况(图3b中位错II), 孪晶界面导致的屈服强度遵循<sup>[45]</sup>:

$$\sigma_y = \sigma_0(d) + k_T \lambda^{-1/2} \quad (6)$$

式中,  $k_T$  为与孪晶硬化相关的材料常数,  $\lambda$  为孪晶宽度. 式(6)是从实验结果导出的宏观样本和孪晶宽度之间的关系<sup>[45]</sup>, 它反映的是几种位错机制综合作用的结果, 适用于孪晶宽度在几十纳米或更高(但显然要小于晶粒尺寸)的情况. 其背后的机制, 是否也类似于 Hall-Petch 效应, 是位错在孪晶界塞积的结果, 值得进一步的研究. 另外, 需要注意的是, 式(6)中孪晶宽度(至少  $\lambda$  所允许的最大值)所适用的范围

受限于晶粒尺寸  $d$ . 所以围绕 2 个几何参数 ( $d$  和  $\lambda$ ) 之间的尺度效应也需要更深入的研究. 对于位错受限于孪晶界面之间的情况 (图 3b 中位错 I), 在几何上类似于薄膜中的穿透位错<sup>[65]</sup>. 这类位错导致的薄膜强度, 某种程度上可参考薄膜在基底上时, 位错的一端在薄膜与基底的界面上, 一端穿越薄膜在位错表面扩展的运动时的理论描述. 在此塑性变形机制主导下, 薄膜强度与薄膜的厚度之间的关系为<sup>[66-68]</sup>:

$$\sigma_y = \sigma_0(d) + \beta \frac{Gb}{h} \ln\left(\frac{\alpha h}{b}\right) \quad (7)$$

式中,  $\alpha$  和  $\beta$  为无量纲常数,  $h$  为薄膜厚度. 如果将式(7)中的薄膜厚度  $h$  由孪晶宽度  $\lambda$  取代, 则上式描述了该类位错运动模式导致的屈服强度与孪晶宽度之间的关系. 需要注意的是, 薄膜中的扩展位错机制考虑的是位错一端位于薄膜自由表面的情形,

与位错在孪晶表面扩展运动的情况存在一定差异, 值得进一步理论与实验方面的研究. 式(7)考虑的是位错的扩展机制, 适用于初始位错密度较高, 已存在位错滑移来提供塑性变形的情况. 对于位错密度很低, 位错在受限孪晶界面之间的萌生类似于 Frank-Read 源<sup>[69]</sup>机制, 相应的驱动位错萌生的应力一般可以采用式(3)和(4)来描述, 不同的是需要用孪晶宽度  $\lambda$  来取代这 2 个公式中的晶粒尺寸.

对于位错滑移面平行于孪晶面的情况, 其力学性能受动力学因素 (相应的机制来产生可以滑移的位错) 和能量 (所施加的载荷能成功驱动位错运动, 实现塑性变形) 控制. 从动力学的角度来看, 如果初始结构位错密度较低时, 位错萌生是影响材料强度的关键因素之一<sup>[46]</sup>. 有限元计算 (图 4<sup>[46]</sup>) 表明, 孪晶

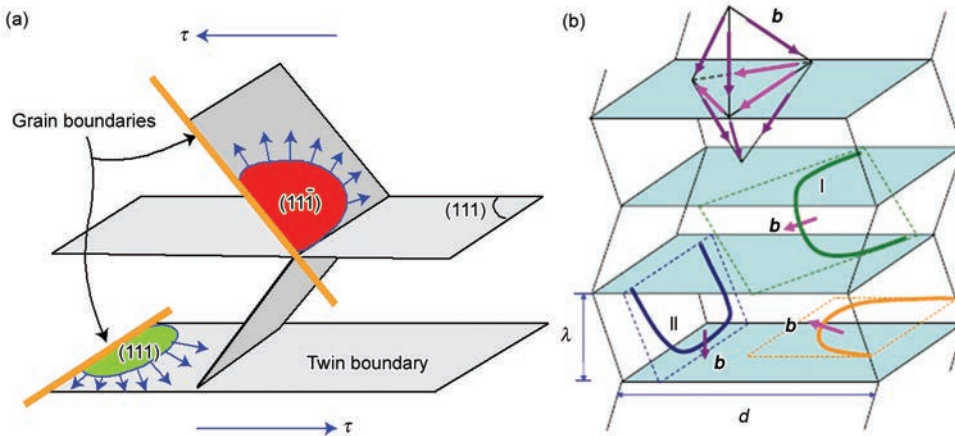


图 3 fcc 纳米孪晶中位错受孪晶界面限制下的可能变形模式<sup>[46,60]</sup>

Fig.3 Possible dislocation activities in nano-twinned fcc metals<sup>[46,60]</sup>

- (a) dislocations could either move parallelly along twin planes or inclined to twin planes in response to the applied shear stress  $\tau$ <sup>[46]</sup>
- (b) for dislocations inclined to twin planes, they could bow out from the segments confined by two neighboring twin planes (type I, illustrated by green dislocation line) or be threading dislocations (type II, illustrated by blue dislocation line)<sup>[60]</sup>

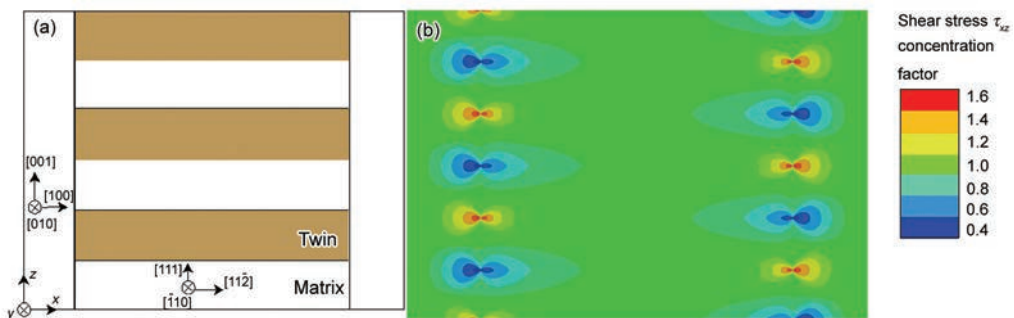


图 4 有限元计算模型及受剪切应力作用下的应力云图<sup>[46]</sup>

Fig.4 Finite-element analysis of stress concentration at the junction of twin planes and GBs by anisotropic elasticity in Cu<sup>[46]</sup>

- (a) sample geometry: alternative matrix and twin layers are bounded by a crystal with different orientation, the sample is subjected to shear strain  $\epsilon_c$ , periodic boundary condition is used
- (b) shear stress contour  $\tau_{xz}$ , stress concentration is clearly seen at the junction of twin boundaries and GBs

界面与晶界的交叉点通常也是应力集中处, 导致变形孪晶的不全位错通常在此萌生. 孪晶宽度变窄时, 出现更多的孪晶界面与晶界的交叉点, Li等<sup>[46]</sup>和Wei<sup>[70]</sup>因此依据位错萌生机制推导了相应的流动应力与孪晶宽度之间的关系:

$$\tau = \frac{\Delta U}{SV^*} - \frac{k_B T}{SV^*} \ln\left(\frac{d \nu_D}{\lambda \dot{\epsilon}}\right) \quad (8)$$

其中,  $\Delta U$  是位错萌生激活能,  $S$  是与局部应力集中和几何结构相关的因子,  $V^*$  是位错激活体积,  $\nu_D$  为Debye频率,  $\dot{\epsilon}$  是宏观加载应变率. 式(8)中右边的第一部分代表了与热无关的材料强度, 而第二部分则是热运动导致材料软化. 可以明显看到, 式(8)中材料强度与孪晶宽度以及晶粒尺寸的关系, 能很好地解释, 当存在孪晶结构的多晶材料没有初始位错且晶粒尺寸不变的情况下, 孪晶宽度变到极窄时会造成强度降低. 如果假定塑性完全由位错萌生控制, 由式(8)给出的强度具备很高的应变率以及温度敏感性. 这要求考虑除位错萌生机制外, 孪晶的变形所需要满足的能量条件. 将孪晶变形当作一个具备特征应变的Eshelby夹杂问题, Wei<sup>[70]</sup>导出了反孪晶/孪晶变形时所需要的临界剪切应力与孪晶宽度以及晶粒尺寸之间的关系:

$$\tau = \tau_1 + \alpha \frac{\pi}{8} \frac{2-\nu}{1-\nu} \frac{\lambda}{d} G e^{\tau} - \frac{2\gamma_{tb}}{\lambda e^{\tau}} \quad (9)$$

其中,  $\nu$  是Poisson比,  $e^{\tau}$  是变形孪晶导致的本征应变,  $\gamma_{tb}$  是孪晶界面能,  $\tau_1$  是不全位错在孪晶界面运动需克服的晶格阻力. 式(9)给出的临界剪切应力与孪晶宽度之间的关系能解释图2中看到的强度随孪晶宽度变小导致的软化行为, 且对应变率不敏感.

综合式(8)和(9)所导出的强度随孪晶宽度变化的关系, 以及实验中观察到的纳米孪晶材料所具备的应变率效应可知, 实际材料中的反孪晶/孪晶变形可能由动力学因素与能量因素同时控制.

### 3 讨论

前面的章节综述了细化晶粒到纳米尺寸时材料在强度及韧性方面的变化, 以及在不同尺度下材料的塑性变形机理及其理论模型. 需要看到的是, 在均质纳米晶金属材料中, 纳米强而脆的行为依然没有越过传统工程材料中强度和韧性之间此长彼消的关系. 纳米孪晶材料可能是突破这种强度和韧性冲突的一个典型成功例子. 理论上, Li等<sup>[46]</sup>和Wei<sup>[70]</sup>预测了减小晶粒尺寸可进一步显著提高纳米孪晶材料的强度. Wei<sup>[71]</sup>给出了最优的孪晶宽度与晶粒尺寸之间的关系:

$$\lambda_T = a_0 \frac{\gamma_{sf} d}{\mu b_p} + a_1 \sqrt{bd} \quad (10)$$

其中,  $a_0$  和  $a_1$  为2个与材料特性相关的系数. 在最优孪晶宽度时, 纳米孪晶材料中的最高强度与晶粒尺寸之间的标度关系遵循:

$$\tau_{\max} = \frac{1}{n} \frac{\gamma_{sf}}{b_p} + \frac{G}{3na_1} \left(\frac{b}{d}\right)^{1/2} \quad (11)$$

上式中  $n$  是一个类似Taylor因子的系数. 图5给出了式(10)与(11)的理论预测与实验及计算对照的结果<sup>[71]</sup>. 可以发现, 理论公式与实验和计算吻合得较好.

从实验上如何实现在不同晶粒尺寸下控制孪晶宽度, 使其分布在最优宽度附近, 将是一个极富挑战性且有意义的工作. 另一方面, 如何将现在的关于纳米孪晶实现fcc晶体强度和韧性两方面提高

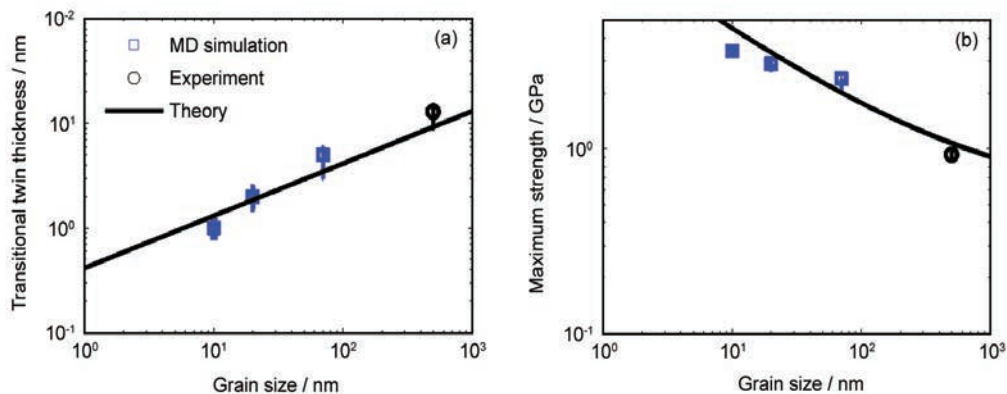


图5 纳米孪晶材料中最优孪晶宽度与晶粒尺寸之间的关系, 以及在最优孪晶宽度时所达到的最高强度与晶粒尺寸之间的关系<sup>[71]</sup>

Fig.5 Predicted translational twin thickness and maximum strength in nano-twinned Cu<sup>[71]</sup>

(a) translational twin spacing as a function of the grain size

(b) the achievable maximum strength vs grain size

的研究成果应用到其他体系的金属材料,并发展出相应的大规模材料制备工艺和设备,有可能极大地促进纳米孪晶结构材料的科学和应用价值.需要重点指出的是,最近出现的多层次纳米结构<sup>[72-74]</sup>,也为克服新型材料在强度和韧性上类似于“鱼和熊掌”之间的特性提供了新的途径.

#### 4 结束语

本文主要介绍了典型界面对纳米金属材料的强度及塑性变形机理这两个方面的影响.讨论了不同晶粒尺寸下,晶界对强度的影响.随着晶粒尺寸下降,多晶材料的塑性变形大致可分为4个阶段:位错塞积(宏观晶粒到100 nm左右),全位错发射(100 nm左右到几十纳米),不全位错发射(几十纳米到10 nm左右),与晶界变形(主要表现为滑移与扩散,10 nm以下)以及晶界变形协调下的晶粒转动机制.同时也讨论了通过改变界面特性,采用孪晶界面来保持材料的强度和韧性这一方向的最新进展,并对新型孪晶界面的力学行为与内在尺度效应的力学模型做了介绍.

#### 参考文献

- [1] Feynman R. *Caltech Eng Sci*, 1960; 23: 22
- [2] Taniguchi N. *Proc Int Conf Prod Eng Tokyo, Part II*, Tokyo: Japan Society of Precision Engineering, 1974: 18
- [3] Gleiter H. In: Hansen N, Leffers T, Lilholt H, eds., *Proc 2nd Riso International Symposium on Metallurgy and Materials Science*, Roskilde: Riso National Laboratory, 1981: 15
- [4] Gleiter H. *Progress Mater Sci*, 1989; 33: 223
- [5] Hall E O. *Proc Phys Soc*, 1951; 64B: 747
- [6] Petch N J. *J Iron Steel Inst*, 1953; 174: 25
- [7] Peirls R. *Proc Phys Soc*, 1940; 52: 34
- [8] Cottrell A H. *Trans Metall Soc AIME*, 1958; 212: 192
- [9] Li J C M. *Trans Metall Soc AIME*, 1963; 227: 239
- [10] Coble R L. *J Appl Phys*, 1963; 34: 1679
- [11] Koch C C. *Structural Nanocrystalline Materials: Fundamentals and Applications*. Cambridge: Cambridge University Press, 2007
- [12] Tjong S C. *Nanocrystalline Materials: Their Synthesis-Structure-Property Relationships and Applications*. London: Newnes, 2013
- [13] Kumar K S, Van Swygenhoven H, Suresh S. *Acta Mater*, 2003; 51: 5743
- [14] Meyers M A, Mishra A, Benson D J. *Prog Mater Sci*, 2006; 51: 427
- [15] Zhu T T, Bushby A J, Dunstan D J. *Mater Technol*, 2008; 23: 193
- [16] Dao M, Lu L, Asaro R J, De Hosson J T M, Ma E. *Acta Mater*, 2007; 55: 4041
- [17] Wolf D, Yamakov V, Phillpot S R, Mukherjee A K, Gleiter H. *Acta Mater*, 2005; 53: 1
- [18] Yamakov V, Wolf D, Phillpot S R, Mukherjee A K, Gleiter H. *Nat Mater*, 2004; 3: 43
- [19] Zhu T, Li J. *Prog Mater Sci*, 2010; 55: 710
- [20] Lu K, Lu L, Suresh S. *Science*, 2009; 324: 349
- [21] Zhu Y T, Liao X Z, Wu X L. *Prog Mater Sci*, 2012; 57: 1
- [22] Wei Y J. *PhD Dissertation*, Massachusetts Institute of Technology, 2006
- [23] Asaro R J, Krysl P, Kad B. *Philos Mag Lett*, 2003; 83: 733
- [24] Zhu B, Asaro R J, Krysl P, Bailey R. *Acta Mater*, 2005; 53: 4825
- [25] Asaro R J, Suresh S. *Acta Mater*, 2005; 53: 3369
- [26] Shan Z W, Stach E A, Wiezorek J M K, Knapp J A, Follstaedt D M, Mao S X. *Science*, 2004; 305: 654
- [27] Lu L, Sui M L, Lu K. *Science*, 2000; 287: 1463
- [28] Wang H, Yang W. *J Mech Phys Solids*, 2004; 52: 1151
- [29] Yang W, Wang H. *J Mech Phys Solids*, 2004; 52: 875
- [30] Wei Y J, Gao H J. *Mater Sci Eng*, 2008; A478: 16
- [31] Wei Y J, Anand L. *J Mech Phys Solids*, 2004; 52: 2587
- [32] Wei Y J, Su C, Anand L. *Acta Mater*, 2006; 54: 3177
- [33] Wei Y J, Bower A F, Gao H J. *J Mech Phys Solids*, 2008; 56: 1460
- [34] Wei Y J, Bower A F, Gao H J. *Acta Mater*, 2008; 56: 1741
- [35] Schiotz J, Tolla F D D, Jacobsen K W. *Nature*, 1998; 39: 561
- [36] Li X Y, Wei Y J, Yang W, Gao H J. *Proc Nat Acad Sci USA*, 2009; 106: 16108
- [37] Ma E. *JOM*, 2006; 58: 49
- [38] Hull D, Bacon D J. *Introduction to Dislocations V*. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2011: 171
- [39] Wu J T, Wei Y J. *J Mech Phys Solids*, 2013; 61: 1421
- [40] Kumar K S, Suresh S, Chisolm M F, Horton J A, Wang P. *Acta Mater*, 2003; 51: 387
- [41] Yip S. *Nat Mater*, 2004; 3: 11
- [42] Zhu Y T, Liao X Z. *Nat Mater*, 2004; 3: 351
- [43] Liddicoat P V, Liao X Z, Zhao Y H, Zhu Y T, Murashkin M Y, Lavernia E J, Valiev R Z, Ringer S P. *Nat Comm*, 2010; 1: No.63
- [44] Lu L, Shen Y, Chen X, Qian L, Lu K. *Science*, 2004; 304: 422
- [45] Lu L, Chen X, Huang X, Lu K. *Science*, 2009; 323: 607
- [46] Li X Y, Wei Y J, Lu K, Lu L, Gao H J. *Nature*, 2010; 464: 877
- [47] Zhou H F, Qu S X, Yang W. *Model Simul Mater Sci Eng*, 2010; 18: 065002
- [48] Wei Y J. *Phys Rev*, 2011; 84B: 014107
- [49] Idrissi H, Wang B J, Colla M S, Raskin J P, Schryvers D, Pardoent T. *Adv Mater*, 2011; 23: 2119
- [50] Jang D, Li X, Gao H, Greer J R. *Nat Nanotechnol*, 2012; 7: 594
- [51] Greer J R. *Nat Mater*, 2013; 12: 689
- [52] Bufford D, Wang H, Zhang X. *Acta Mater*, 2011; 59: 93
- [53] Kulkarni Y, Asaro R J. *Acta Mater*, 2009; 57: 4835
- [54] Zhang J J, Wei Y J, Sun T, Hartmaier A, Yan Y, Li X D. *Phys Rev*, 2012; 85B: 054109
- [55] Tian Y J, Xu B, Yu D L, Ma Y M, Wang Y B, Jiang Y B, Hu W T, Tang C C, Gao Y F, Luo K, Zhao Z S, Wang L M, Wen B, He J L, Liu Z Y. *Nature*, 2013; 493: 385
- [56] Wang J W, Sansoz F, Huang J Y, Liu Y, Sun S H, Zhang Z, Mao S X. *Nat Commun*, 2013; 4: No.1742
- [57] Zhu L, Kou H, Lu J. *Appl Phys Lett*, 2012; 101: 081906
- [58] Wang H T, Tao N R, Lu K. *Acta Mater*, 2012; 60: 4027

- [59] Li Y Q, Zhu L C, Liu Y, Wei Y J, Wu Y X, Tang D, Mi Z L. *J Mech Phys Solids*, 2013; 61: 2588
- [60] Lu L, Lu K. *Acta Metall Sin*, 2010; 46: 1422  
(卢磊, 卢柯. 金属学报, 2010; 46: 1422)
- [61] Zhu T, Gao H J. *Scr Mater*, 2012; 66: 843
- [62] Jin Z H. *Scr Mater*, 2006; 54: 1163
- [63] Jin Z H. *Acta Mater*, 2008; 56: 1126
- [64] Ni S, Wang Y, Liao X, Figueiredo R, Li H, Ringer S, Langdon T, Zhu Y. *Acta Mater*, 2012; 60: 3181
- [65] You Z S, Lu L, Lu K. *Acta Mater*, 2011; 59: 6927
- [66] Matthews J W, Blakeslee A E. *J Cryst Growth*, 1975; 29: 273
- [67] Freund L B. *J Appl Mech*, 1987; 54: 553
- [68] Nix W. *Metall Mater Trans*, 1989; 20A: 2217
- [69] Hosford W F. *Mechanical Behavior of Materials*. Cambridge: Cambridge University Press, 2005: 164
- [70] Wei Y J. *Mater Sci Eng*, 2011; A528: 1558
- [71] Wei Y J. *Phys Rev*, 2011; 83B: 132104
- [72] Fang T H, Li W L, Tao N R, Lu K. *Science*, 2011; 331: 1587
- [72] Liu X C, Zhang H W, Lu K. *Science*, 2013; 342: 337
- [73] Lu X L, Lu Q H, Li Y, Lu L. *Scientific Reports*, 2013; 3: No.3319

(责任编辑:毕淑娟)