

# 随机晶界分布和连通性对晶间破坏行为的影响\*

李剑荣 虞吉林

(中国科学技术大学,中国科学院材料力学行为和设计重点实验室,合肥,230026)

**摘要** 采用随机有限元方法研究了两个具有相同不均匀材料属性和相同随机晶界含量但不同随机晶界分布的特殊多晶体样本在准静态拉伸下的晶间破坏行为,发现随机晶界连通性强的样本的断裂能比较低.在不同随机晶界含量下分别构造的50个晶界随机分布的样本的计算结果表明,断裂能与平均晶界连通数的关联并不明显,甚至还出现了相反的结果,即在相同随机晶界含量下,平均晶界连通数大的计算样本的断裂能反而大.

**关键词** 随机晶界分布,晶界连通性,晶间破坏

## 0 引言

晶界是固体材料中的一种面缺陷,它在金属与合金中广泛存在.晶界的力学性能强烈依赖于其类型和结构.晶界可分为小角晶界、重位晶界和随机晶界,实验表明<sup>[1]</sup>,重位晶界(包括  $\theta = 1$  的小角晶界)的断裂应力往往是随机晶界的数倍,裂纹主要沿随机晶界扩展,重位晶界不开裂.在多晶体的沿晶破坏过程中,裂纹优先在随机晶界形成,沿着与之连接的随机晶界扩展.在晶间破坏中随机晶界的分布和形态起着关键的作用<sup>[2]</sup>.利用现有晶界结构及其有关性质的知识,通过“晶界设计”发展性能优良的多晶材料,通过晶界工程方法提高多晶材料的性能,发展具有优良力学性能的材料已经得到了许多应用<sup>[3]</sup>.

材料的断裂性能依赖于随机晶界的分布和含量,晶界特征分布和晶界连通性的最佳组合被认为是提高获得需要的材料力学性能的一个关键途径<sup>[1,4]</sup>.如果把随机晶界互相连通的个数定义为晶界连通数(或晶界连通长度),那么,即使有相同的随机晶界的含量,但晶界连通数不同,其对裂纹的阻力也是不相同的.Watanabe<sup>[1]</sup>认为在随机晶界含量相同的情况下,随机晶界连通数大的材料断裂性能会比较差,更容易发生晶间断裂.

本文采用随机有限元数值模拟的方法研究了晶界连通性和随机晶界含量对多晶材料沿晶断裂性能的影响.首先构造了两种特殊的随机晶界含量相同但晶界连通性不同的随机晶界分布,分析了它们的损伤破坏过程,讨论了晶界连通性在其中的作用.然后在不同随机晶界含量下分别构造了50个晶界随

机分布的样本,分析了它们的晶界连通性,计算了断裂能,综合分析了晶界连通性和随机晶界含量对材料断裂性能的影响.

## 1 随机有限元模型

### 1.1 材料本构

铝是面心立方晶体,单晶体的弹性常数为<sup>[5]</sup>

$$C_{11} = 108.2 \text{ GPa}, C_{12} = 61.3 \text{ GPa}, C_{44} = 28.5 \text{ GPa}, 2C_{44}/(C_{11} - C_{12}) = 1.22.$$

最后一个参数  $2C_{44}/(C_{11} - C_{12})$  表征了材料的弹性各向异性,铝单晶体的各向异性很小.晶体的塑性变形主要通过位错滑移进行,位错的滑移在一个晶粒内部是不联系的,是沿特定滑移面和方向进行,而且随变形的发展晶粒内部将形成更复杂的结构如位错胞和亚晶等结构<sup>[6]</sup>.对于多晶体塑性变形和织构演化,弹塑性晶体滑移有限元可以给出很好的预报<sup>[7]</sup>.由于本文主要关心多晶体的晶间破坏行为,因此多晶体的塑性仍然按宏观连续介质力学模型处理,计算中晶粒采用如下的2阶段强化的本构<sup>[8]</sup>

$$\sigma = \begin{cases} E \epsilon & (\epsilon \leq \epsilon_0) \\ \epsilon_0 + E(\epsilon - \epsilon_0) & (\epsilon_0 < \epsilon \leq \epsilon_{01}) \\ \epsilon_{01} + k(\epsilon - \epsilon_{01})^{1/2} & (\epsilon_{01} < \epsilon) \end{cases} \quad (1)$$

其中,  $\epsilon_0$ 、 $\sigma_0$  分别为屈服时的等效应变和应力,  $E$  为强化第1阶段的应变硬化模量,  $\epsilon_{01}$  和  $\sigma_{01}$  分别为第1阶段结束时的等效应变和应力,  $k$  为材料参数.

### 1.2 界面处理

在本文的二维计算模型中晶界被处理成能承受

\* 2004-04-14 收到第1稿,2004-10-18 收到修改稿.

一定法向和切向应力的无厚度界面,采用 ABAQUS/EXPLICIT 软件中的“点焊接”(Spot Weld)接触模型<sup>[9]</sup>,该模型即为 Camacho-Ortiz 的线性内聚力模型<sup>[10]</sup>中不考虑界面摩擦的情况,晶界破坏判据可由下式给出

$$\left( \frac{\max(n, 0)}{n_{cr}} \right)^2 + \left( \frac{s}{s_{cr}} \right)^2 = 1.0 \quad (2)$$

式中,  $n$  为晶界的法向应力且以拉为正,  $s$  为晶界的切向应力,  $n_{cr}$  为晶界的破坏法向应力,  $s_{cr}$  为晶界的破坏切向应力. 晶界破坏后的行为由下式控制

$$\left( \frac{\max(n, 0)}{s_{cr}} \right)^2 + \left( \frac{s}{c} \right)^2 = \left( 1.0 - \frac{n}{c} \right)^2 \quad (3)$$

其中,  $c$  为晶界破坏开始后的应变增长,  $c$  为材料参数表征了材料的界面韧性. (5) 式表示晶界的破坏是应力逐渐释放的过程,当晶界达到临界破坏应力时,开始发生损伤,能够承受的应力下降,直到局部应变增量  $(\epsilon)$  达到  $c$  后,晶界才完全失效.

### 1.3 计算模型

采用 ABAQUS/EXPLICIT 软件<sup>[9]</sup>对考虑多晶体的沿晶破坏过程进行了数值研究. 计算中采用的多晶体的几何模型和有限元网格如图 1 所示,晶界处理如图 2 所示,为了让晶界能够随机开裂,计算中采用了重节点技术,即在相同位置布置了 2 对重节点,而在三叉晶界位置布置了 3 对重节点. 模型中总共有 115 个晶粒,304 个晶界,划分成 3745 个节点,1200 个 3 节点平面应力单元(单元类型为 CPS3).

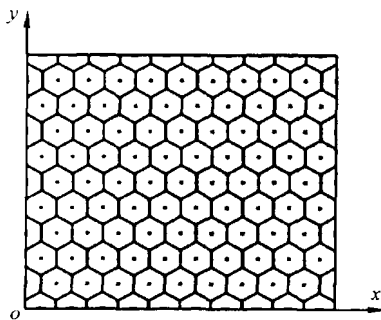


图 1 多晶体的几何模型和有限元网格

计算模型为 17.32 mm × 15 mm,只考虑单向拉伸情况( $x$  方向拉伸  $y$  方向自由或  $y$  方向拉伸  $x$  方向

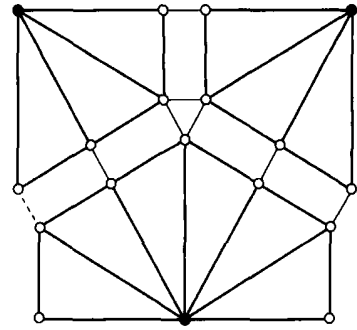


图 2 晶界示意图

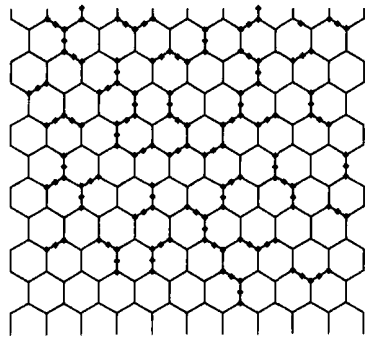
自由). 模型的晶粒尺寸约为 1.70 mm. 每个晶粒被剖分成 12 个单元(边界的晶粒可能只包含 3 或 6 个单元),属于同一晶粒的 12 个单元具有相同的材料属性. 多晶体中的晶粒的弹性按各向同性处理(因为铝单晶体的各向异性很小),考虑晶粒的三种典型取向( $\langle 001 \rangle$ 、 $\langle 011 \rangle$  和  $\langle 111 \rangle$ ),三种取向的弹性模量分别为 62.7 GPa、71.7 GPa 和 75.3 GPa<sup>[8]</sup>,泊松比取为 0.31,认为多晶体中这三种取向的晶粒数是随机相等的. 晶粒的屈服应力是随机选取的,总体满足正态分布,分布的均值是宏观材料的屈服应力 17.4 MPa,分布的方差取 1 MPa,而  $E$  取 2.4 GPa,  $\epsilon_{01} - \epsilon_0 = 10^{-4}$ ,  $k = 45$  MPa. 晶界的行为由 (2) 和 (3) 式决定,特殊晶界的法向强度取为 32 MPa,切向强度为 16 MPa,随机晶界的法向强度取为 16 MPa,切向强度为 8 MPa,  $c$  为  $5.77 \times 10^{-6}$ . 材料密度为  $2.7 \times 10^3$  kg/m<sup>3</sup>,加载速度为 0.866 mm/s.

## 2 计算结果和分析

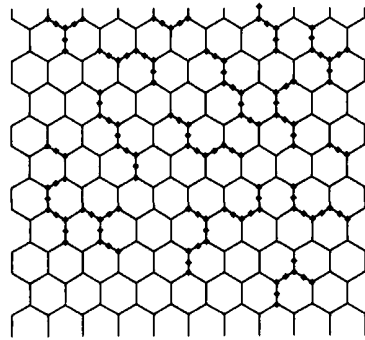
### 2.1 两个特殊样本的计算结果

采用数值模拟的方法研究了晶界连通性对材料断裂性能的影响. 首先构造了两种随机晶界含量相同但晶界连通性不同的随机晶界分布,如图 3 所示,模型的随机晶界数均为 60,模型 A 中独立的随机晶界数为 34,模型 B 的独立的随机晶界数为 17. 定义:晶界连通长度 = 随机晶界总数/独立的随机晶界数,则模型 A 的晶界连通长度为 1.765,模型 B 的晶界连通长度为 3.529,模型 B 的晶界连通性远比模型 A 的强.

在  $x$  方向加载,  $y$  方向自由的情况下,模型 A 和 B 的沿晶破坏图象分别如图 4(a) 和 (b) 所示. 在模型 A 中总共破坏的晶界数为 42 个,而初始损伤阶段开裂的晶界数为 37 个;模型 B 中总共破坏的晶界数为 49 个,而初始损伤阶段开裂的晶界数为 43

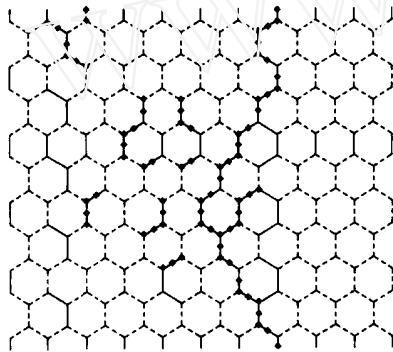


(a) 模型 A

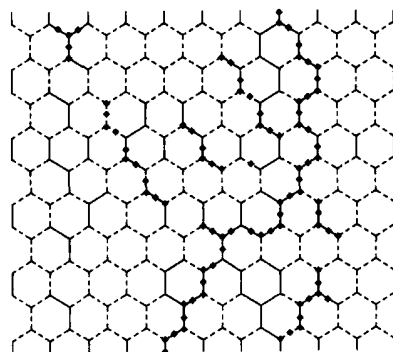


(b) 模型 B

图 3 两种不同晶界连通性的随机晶界分布



(a) 模型 A



(b) 模型 B

图 4 沿晶破坏图像

个. 因此尽管在初始损伤阶段模型 B 消耗的能量要比模型 A 的高,但在持续加载损伤阶段模型 A 消耗的能量比模型 B 的要高. 模型 A 和 B 的宏观应力(合力/截面积)-应变(变形量/长度)曲线见图 5. 断裂能  $G_f = \int \sigma d\epsilon$  综合了材料的强度和韧度,是材料断裂韧性比较好的度量. 模型 A 的断裂能为  $0.00887 \text{ mJ/mm}^3$ ,而模型 B 的断裂能为  $0.00677 \text{ mJ/mm}^3$ .

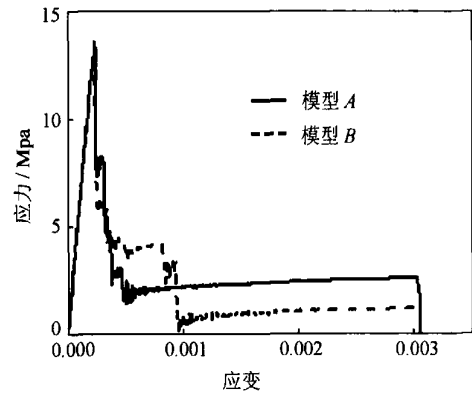


图 5 模型 A 和 B 的应力-应变曲线

### 2.2 统计计算结果分析

在不同随机晶界含量(随机晶界数分别为 40、60、80 和 100)下分别构造了 50 个晶界随机分布的样本,对每一个样本分别进行了在  $x$  方向加载和  $y$  方向加载的两种工况计算. 对每一个计算样本分析和统计了晶界连通性,计算了断裂能. 这些随机分布样本的晶界连通长度的分布范围比较窄. 而且接近正态分布的形式,区间中间的样本数很密集.

对大量样本的计算结果进行了分析,在相同的随机晶界含量下,样本的断裂能与晶界连通长度的关系进行了统计分析,图 6 为四种随机晶界含量下断裂能和晶界连通长度的关系. 结果发现断裂能与晶界连通长度的相关性并不明显,甚至还出现了与 Watanabe 预测相反的结果,如图 6(a)、(b)和 (c)所示. 即在相同随机晶界含量下,晶界连通长度大的计算样本的断裂能反而大,这和 2.1 的两个模型的计算结果不一致.

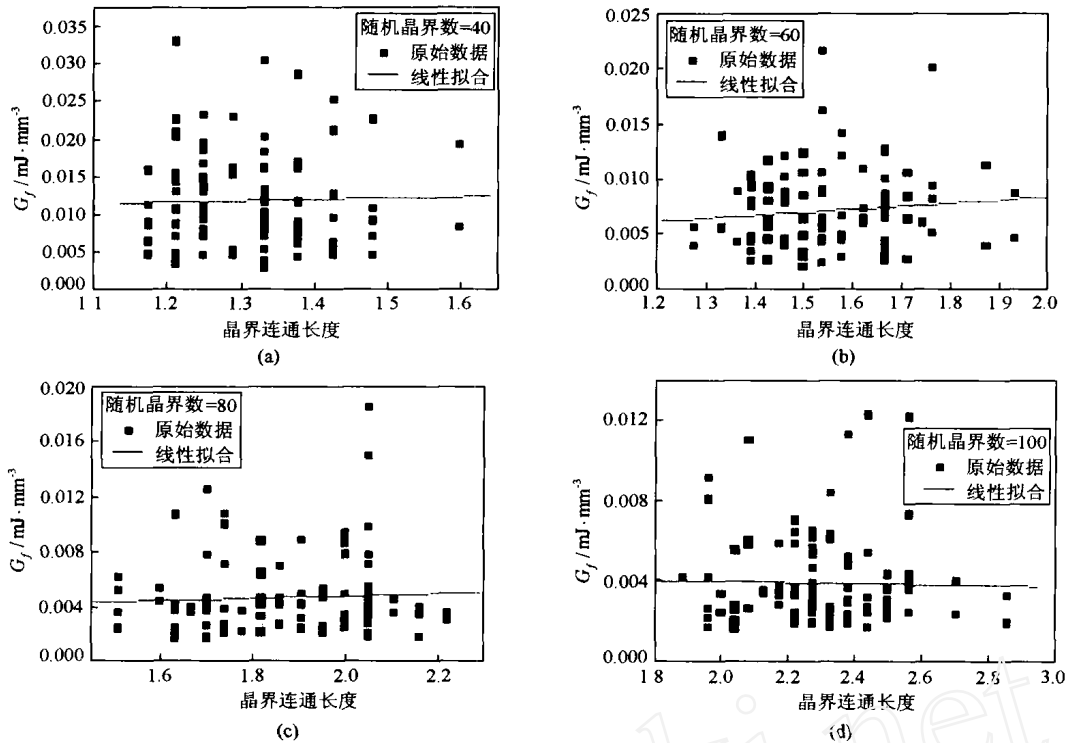


图 6 随机晶界数不同时断裂能-晶界连通长度的关系

### 3 结论

本文对 Watanabe 提出的通过晶界特征分布和晶界连通性的最佳组合来提高材料力学性能的观点进行了数值的验证. 首先设计与 Watanabe 的设想<sup>[1]</sup>相仿的两个随机晶界分布的多晶体样本, 分别计算了  $x$  方向加载和  $y$  方向加载下的力学行为, 数值计算结果和 Watanabe 设想的一致. 然而, 在不同随机晶界含量下分布构造的 50 个晶界随机分布的样本的计算结果表明, 断裂能与平均晶界连通数的关系并不明显, 甚至还出现了相反的结果, 即在相同随机晶界含量下, 平均晶界连通数的计算样本的断裂能反而大.

从一组结果相反的样本对比来看, 随机晶界相关性强的分布样本的随机晶界更集中在一些局部区域, 而这些局部区域的间隔较大, 因此加载过程容易多处区域发生损伤, 导致破坏路径的分叉较多, 相应地提高了破坏的断裂能. 而晶界连通性弱的分布样本的随机晶界比较分散, 随机晶界的间隔较小, 加载过程局部发生微损伤后, 很容易沿着危险的应力路径与周围的随机晶界串接起来, 破坏主要沿一条主路径发生, 破坏的断裂能可能反而小. 此外, 当多条随机晶界串接起来时, 其空间构型并不都是伸展开的, 许多是缠绕的或卷曲的, 等效的随机晶界长度要小得多, 因此

含有这种随机晶界的分布样本的真正等效含量还要小一些. 当随机晶界含量小时, 含量对断裂性能起的影响很大. 对某些晶界连通长度大的分布样本由于等效随机晶界含量小, 因此其断裂性能可能反而高.

另外, 在计算模型中没有设置穿晶的破坏路径, 而晶界连通长度大的分布样本出现损伤时, 微裂纹的长度会比较大, 因此局部应力集中可能更容易引起穿晶破坏, 而这种情况在本文没有考虑.

因此晶界连通性的影响是一个比较复杂的问题, 不能简单地以某个统计参数来衡量, 还要考虑具体晶界分布的空间形态以及穿晶破坏, 需要进一步做深入的研究分析.

### 参 考 文 献

- 1 Watanabe T. The impact of grain boundary character distribution on fracture in polycrystals. *Mater Sci Eng*, 1994, A176, 39~49
- 2 Watanabe T. An approach to grain boundary design for strong and ductile polycrystals. *Res Mech*, 1984, 11, 47~84
- 3 Lehockey E M, Palumbo G, Aust K T, Erb U, Lin P. On the role of intercrystalline defects in polycrystal plasticity. *Scripta Mater*, 1998, 39, 341~346

- 4 Watanabe T, Tsurekawa S. The control of brittleness and development of desirable mechanical properties in polycrystalline systems by grain boundary engineering. *Acta Mater*, 1999, 47 (15): 4171 ~ 4185
- 5 陈洪荪. 金属的弹性各向异性. 北京:冶金出版社, 1996
- 6 Hansen N, Huang X. Microstructure and flow stress of polycrystals and single crystals. *Acta Mater*, 1998, 46: 1827 ~ 1836
- 7 Dao M, Li M. A micromechanics study on strain - localization induced fracture initiation in bending using crystal plasticity. *Philos Mag A*, 2001, 81: 1997 ~ 2020
- 8 李剑荣, 王曦, 虞吉林. 粗晶粒铝多晶试件拉伸变形局部化的数值模拟. *金属学报*, 2001, 37(7): 717 ~ 722
- 9 Hibbitt, Karlsson, Sorensen. Inc, ABAQUS/Explicit User's Manual V5.7. 1997
- 10 Camacho G T, Ortiz M. Computational modelling of impact damage in brittle materials. *Int J Solids Struct*, 1996, 33: 2899 ~ 2938

## THE IMPACT OF RANDOM GRAIN BOUNDARY DISTRIBUTION AND CONNECTIVITY ON INTERGRANULAR FRACTURE OF POLYCRYSTALLINE MATERIALS

Li Jianrong      Yu Jilin

( Key Laboratory of Mechanical Behavior and Design of Materials, USTC, CAS, Hefei, 230026)

**Abstract** A 2-D stochastic finite element method (SFEM) is used to investigate the intergranular failure behavior of two specific samples with same heterogeneous material distribution and same fraction of random boundaries while their configuration of random boundaries are different. It is found that the sample with low random grain boundary connectivity has low fracture energy. However, the statistic results of groups with different fraction of random grain boundaries (each group contains fifty samples) show that the relationship between fracture energy and average random grain boundary correlation number is uncertain. Some contrary results also appear, i. e., with the same fraction of random grain boundaries, some samples with larger grain boundary correlation length show higher fracture energy.

**Key words** random grain boundary distribution, grain boundary connectivity, intergranular fracture