

三叉结点对铜-铋三晶断裂行为的影响*

王 静 吴希俊 王 颖

中国科学院固体物理研究所, 合肥 230031

1992 年 11 月 13 日收到

系统地研究了〈110〉取向倾侧铜-铋三晶的断裂行为, 并与铜-铋双晶的结果比较, 结果表明: 三叉结点对不同取向的铜-铋三晶的断裂行为产生不同程度的影响, 使得同一晶界在铜-铋三晶和双晶中有不同的断裂行为, 三叉结附近的高内应力引起范性形变的不均匀性, 使三晶中出现滑移多相性和晶粒的旋转. 结合三叉结点附近应力场的计算, 对此进行了讨论.

PACC: 6200, 6170, 6116D

一、引 言

实验^[1,2]和理论计算^[3,4]都表明, 铋在铜晶界的偏聚使铜晶界弱化并变脆, 后来的研究^[5,6]又发现铜-铋晶界偏聚和晶界脆性具有晶体取向效应, 吴希俊等人^[7]对此在铜-铋双晶中做了系统的研究, 得出了 $\sigma-\theta$ 曲线. 但在铜-铋三晶中晶界的断裂行为、三叉结点对此的影响至今缺乏研究. 本工作用定向生长的铜三晶, 通过拉伸实验、原位拉伸实验分析研究了三个结点对铜-铋三晶晶界的断裂行为的影响.

二、实验方法

选用 99.999% 纯铜材料, 用垂直 Bridgeman 方法生长出三种〈110〉取向倾侧晶界的铜三晶. 三晶取向为

$$\begin{aligned} & \sum 33a(441)159.95^\circ + \sum 11(332)129.52^\circ + \sum 3(111)70.5^\circ, \\ & \sum 33b(118)121.02^\circ + \sum 11(332)129.52^\circ + \sum 3(112)109.47^\circ, \\ & \sum 11(332)51.48^\circ + 83^\circ + 46^\circ. \end{aligned} \quad (1)$$

X 射线测角仪检验结果表明, 三晶旋转轴〈110〉和取向误差均在 $\pm 0.5^\circ$ 内. 用线切割机将三晶加工成均匀部分尺寸为 $12 \text{ mm} \times 4 \text{ mm} \times 2 \text{ mm}$ 的拉伸试验并保证主晶界垂直于拉伸轴. 所用试样与 0.05 wt% 铋 (99.999% 纯度) 一起密封在 $\phi 30 \text{ mm} \times 200 \text{ mm}$ 的抽真空的石英管中, 真空度达 $4 \times 10^{-5} \text{ Torr}$, 在 900°C 退火 24h 使铋气相扩散进试样. 随后在 550°C 保温 24h 后随炉冷却使铋平衡偏聚到晶界^[8]. 室温拉伸测试是在 Instron1185 材料

* 中国科学院重大项目资助的课题.

试验机上进行的,横梁移动速率为 0.5 mm/min. 原位拉伸观察是在自行设计的拉伸台上拉伸,在金相显微镜下观察完成的.

三、实验结果

1. 由于三叉结点的作用,铜-铋晶界在双晶和三晶中的断裂行为不同. 在双晶中, $\Sigma 33a46^\circ$ 混乱晶界都是沿晶界脆性断裂,断裂应力非常低,大约为 3 MPa. $\Sigma 33b$ 、 $\Sigma 3$, 小角晶界都是穿晶断裂,断裂应力非常高,大约为 20 MPa. $\Sigma 11$ 是沿晶界撕裂,断裂应力居中,大约为 14 MPa. 双晶中断裂应力与晶界取向关系如图 1. 三晶拉伸结果如表 1. 由此可见,由于晶界通过三叉结点而相互作用,使得三晶中晶界的断裂行为,不仅与其自身的结构有关,而且与周围的晶界有关.

表 1 三晶拉伸结果(应变速率为 $5 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$)

三晶名称	晶界名称	断裂应力/MPa	断裂方式
三 晶 $\Sigma 33a + \Sigma 11 + \Sigma 3$	$\Sigma 33a$	3.08	沿 $\Sigma 33a$ 脆性开裂传至三叉点受阻,转为穿晶断裂
	$\Sigma 11$	14.08	三叉点附近的应力集中,使该处 $\Sigma 33a$ 开裂,后穿晶断裂
	$\Sigma 3$	19.8	滑移带加深形成剪切裂纹,穿晶断裂
三 晶 $\Sigma 33b + \Sigma 11 + \Sigma 3$	$\Sigma 33b$	13.6	三叉点处由于高内力形成裂纹,后沿 $\Sigma 33b \Sigma 11$ 撕裂
	$\Sigma 11$	11.2	同上
	$\Sigma 3$	19.03	滑移带形成裂纹穿晶断裂
三 晶 $\Sigma 11 + 46^\circ + 83^\circ$	46°	3.02	沿 46° 混乱晶界脆性开裂,后沿 $\Sigma 11$ 撕裂
	$\Sigma 11$	15.2	穿晶断裂
	83°	未 作	

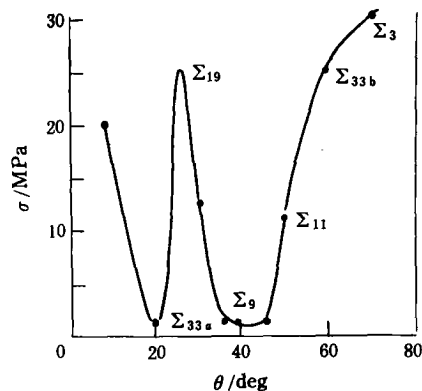


图 1 双晶的断裂应力 σ 与晶界的取向差 θ 角之间的关系曲线

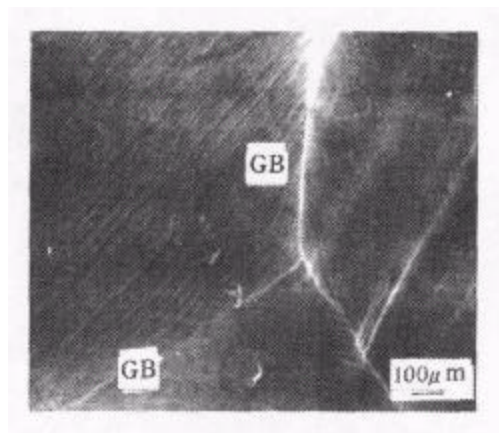


图 2 $\Sigma 33b + \Sigma 11 + \Sigma 3$ 的多相滑移线

2. 由于三叉结点附近的高内应力,三晶中出现晶粒的相对旋转和滑移多相性. 晶粒

间的相对旋转,越远离三叉结点,旋转越大.远离三叉结点的晶粒按原来的滑移系规则形变,但在靠近晶界的区域,有二次滑移出现,这些区域的边界,称为 interface A 三叉结点附近,形变集中于此,且由于塑性形变的不均匀性,裂变成许多区域,限制这些区域边界的是类似于晶界的界面,称为 interface B,interface B 一般是另一晶界的外延.远离三叉结点,interface B 消失,如图 2.

四、讨 论

根据上述结果,可以得出如下结论:三晶中的晶界断裂行为,不仅具有结构敏感性,而且与晶界间通过三叉结点的相互作用有关.这归结于由于三叉结点的存在,使得当同一晶界周围的另两个晶界不同时,裂纹形成的两个条件满足程度不同(这两个条件是:(1)垂直于晶界的正应力大于晶界结合, $\delta_y > \delta_m$; (2)垂直于晶界的正应力与平行于晶界的剪切应力之比要足够大, $\delta_y/\tau_T > \delta_m/\tau_m$),致使同一晶界例如 $\Sigma 33a$,在不同三晶中的断裂行为不同.

关于三晶中的滑移多相性和晶粒的旋转,可以从滑移受阻于晶界和三叉结点引起内应力分布不均匀来解释,这可以从计算中看出.根据 Kossel 方法来确定晶粒取向的 x_1, x_2, x_3 坐标轴与宏观坐标轴 X_1, X_2, X_3 的关系,从而得到形变增加过程中,在给定点晶格变化的情况与一个晶粒内晶格取向的不同.

旋转 $W^{(e)}$ 可以由下列方法得到:

让 $A^{(0)}$ 为初始状态(未变形时),给定晶粒的交换矩阵.假设塑性形变增加,上述晶粒分为(1),(2)两区域,相应的两矩阵为 $A^{(1)}, A^{(2)}$.

状态(0)与(1),(2)间的晶格旋转为

$$W_{kj}^{e(1)} = (A_{ji}^{(1)} - A_{ji}^{(0)})A_{ki}^{(0)},$$

$$W_{kj}^{e(2)} = (A_{ji}^{(2)} - A_{ji}^{(0)})A_{ki}^{(0)}.$$

在一个晶粒内的旋转为

$$\Delta W_{kj}^e = (A_{ji}^{(2)} - A_{ji}^{(1)})A_{ki}^{(0)} \quad (2)$$

晶格旋转 W^e 与塑性形变场 β^p 间的关系可以从相符

条件推导出.滑移系(k)由垂直于其滑移面的法矢量

$n(k)$ 来定义,在 P 点开动的滑移方向为 $m(k)$,塑性形变场 β^p 表示为

$$\beta_{ij}^p = \sum_k n_i(k)m_j(k)r(k), \quad (3)$$

用 β^e 来表示总形变场,则 ϵ^e, β^p 分别为其弹性和塑性形变部分,相符条件为

$$\text{curl} \beta^e = 0, \quad (4)$$

即

$$\epsilon_{ijk} W_{ki,j}^e = \epsilon_{ijk} (\epsilon_{ki,j}^e + \beta_{ki,j}^p), \quad (5)$$

ϵ_{ijk} 为排列矢, ϵ^e 与 W^e 比较可以忽略不计.在晶界相交于一直线情况下,在 $P(r, \theta)$ 点的塑性形变可写为

$$\beta^p = \beta^{p(1)} + \sum_i \Delta \beta^{pi} Y(\theta - \theta_i), \quad (6)$$

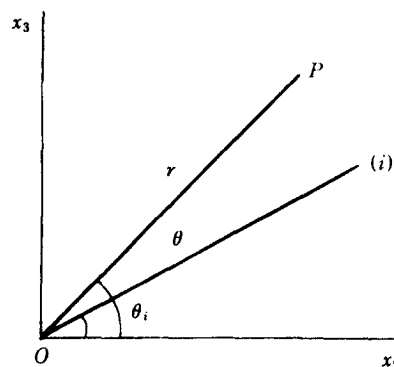


图 3

其中 $\Delta\beta^{pi}$ 为在有关界面 (i) 上的塑性形变的不连续. $Y(\theta - \theta_i)$ 为 Heaviside 函数,

$$Y(\theta - \theta_i) = \begin{cases} 1 & \text{当 } \theta > \theta_i; \\ 0 & \text{当 } \theta < \theta_i. \end{cases} \quad (7)$$

而 θ_i 为界面 (i) 在平面 (X_2, X_3) 的交线于 X_2 的夹角 (OX_1 平行于三叉线). 最后的关系式为

$$\sum_i a_{pk} \Delta W_{qi}^{ei} = \sum_i (b_{pk} \Delta \beta_{qi}^{pi} + a_{pk} \Delta \epsilon_{qi}^{ei}) \quad (8)$$

A_{pk} 和 b_{pk} 仅依赖于 θ_i .

通过实验观察在晶粒内和区域内的滑移系来检验, 上式在实验误差范围内是正确的.

下面推导内应力. 相符条件 (4) 式可以表示为总应变场 ϵ^i 的函数,

$$\text{即} \quad \epsilon_{ikl} \in_{jmn} \epsilon_{lm, kn}^i = 0, \quad (9)$$

ϵ^i 包括塑性应变 ϵ^p 和弹性形变 ϵ^e 两部分.

$$\text{定义} \quad \eta = \text{in} \epsilon^e = - \text{in} \epsilon^p, \quad (10)$$

内应力场由位错的连续理论导出, 内应力可以表示为 η 的函数,

$$\sigma_{ij} = - \frac{\mu}{4\pi} \iiint [2\eta_{ij} - \frac{\eta_{kk}}{(1-\nu)} (\delta_{ij} + \rho_{,i} \rho_{,j})] \frac{d\nu}{\rho}, \quad (11)$$

其中 $\rho = |r - r'|$, μ 为切变模量, ν 为泊松比.

我们考虑 i 界面 ($i > 3$) 的一个交叉结, 被界面分开的晶粒 (k) 有一规则塑性形变 $\epsilon^{p(k)}$. 在任一点 $p(r, \theta)$ 的塑性应变 $\epsilon^p = \epsilon^{p(1)} \sum_i \Delta \epsilon^{pi} Y(\theta - \theta_i)$. $\Delta \epsilon^{pi}$ 为塑性形变场在界面 (i) 的不连续, 被认为常数. 且笛卡儿坐标系中有 $\sum_i \Delta \epsilon_{ki}^{pi} = 0$.

在柱坐标系下晶粒中任一点 P 的内应力场可由如下式子表示:

$$\begin{aligned} \sigma_{rr} = & - \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} \sum_i \{ [(\Delta \epsilon_{rr}^i + \nu \Delta \epsilon_{zz}^i) (2\delta \cos^2 \varphi_i) - (\Delta \epsilon_{rr}^i + \Delta \epsilon_{zz}^i) \sin \varphi_i \cos \varphi_i + \Delta \epsilon_{r\theta}^i] \\ & + [- (\Delta \epsilon_{rr}^i + \nu \Delta \epsilon_{zz}^i) \sin 2\varphi_i - \Delta \epsilon_{r\theta}^i] \log \frac{r}{R_i} \}, \\ \sigma_{\theta\theta} = & - \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} \sum_i \{ [(\Delta \epsilon_{rr}^i + \nu \Delta \epsilon_{zz}^i) (2\delta \sin^2 \varphi_i) + (\Delta \epsilon_{rr}^i + \Delta \epsilon_{zz}^i) \sin \varphi_i \cos \varphi_i] \\ & + [(\Delta \epsilon_{rr}^i + \nu \Delta \epsilon_{zz}^i) \sin 2\varphi_i - \Delta \epsilon_{r\theta}^i] \log \frac{r}{R_i} \}, \\ \sigma_{zz} = & - \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} \sum_i \{ [(\Delta \epsilon_{zz}^i + \nu \Delta \epsilon_{rr}^i) 2\delta - \Delta \epsilon_{r\theta}^i] + [- 2\nu \Delta \epsilon_{r\theta}^i] \log \frac{r}{R_i} \}, \\ \sigma_{r\theta} = & - \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} \sum_i \{ [- (\Delta \epsilon_{rr}^i + \nu \Delta \epsilon_{zz}^i) \delta \sin 2\varphi_i + (\Delta \epsilon_{rr}^i + \Delta \epsilon_{zz}^i) \sin^2 \varphi_i] \\ & + [- (\Delta \epsilon_{rr}^i + \nu \Delta \epsilon_{zz}^i)] \cos 2\varphi_i \log \frac{r}{R_i} \}, \\ \sigma_{rz} = & - \frac{\mu}{\pi} \sum_i \{ [\Delta \epsilon_{rz}^i (\delta \cos \varphi_i)] + [- \Delta \epsilon_{rz}^i \sin \varphi_i] \log \frac{r}{R_i} \}, \\ \sigma_{\theta z} = & - \frac{\mu}{\pi} \sum_i \{ [(- \Delta \epsilon_{rz}^i) (\delta \sin \varphi_i)] + [(- \Delta \epsilon_{rz}^i) \cos \varphi_i] \log \frac{r}{R_i} \}, \end{aligned} \quad (12)$$

其中 $\varphi = \theta - \theta_i$, $\delta = \pi \operatorname{sgn} \varphi - \varphi$, R_i 为依赖于限制条件的一个常数. 且此解满足 $\operatorname{div} \sigma = 0$.

在笛卡尔坐标系中的解可由(12)式推出. 从(12)式等号右端中可以看出第一括号的项依赖于 θ , 第二括号内的不依赖于 θ , 因此内应力可以下式表示:

$$\sigma(r, \theta) = F(\theta, \theta_i, \Delta \epsilon^{-\nu_i}) + G(\theta_i, \Delta \epsilon^{-\nu_i}) \log r,$$

F, G 为通常函数.

为了确定已开动的滑移系的性质和它们在晶粒内的局域. 我们计算在各滑移系的切应力 $\tau(g_i)$ 的增量. 切应力 $\tau(g_i)$ 的计算是在整个应力场中, 让 ΔE_{33} 和 $\Delta \Sigma_{33}$ 代表宏观参数的给定增量. 已开动的滑移系 G_i 是那些有满足下面不等式的切应力增量的滑移系:

$\Delta \tau(g_i) > H_{ij} \Delta \gamma(g_i)$, H_{ij} 为物质的潜硬化矩阵, $\gamma(g_i)$ 为在已开动滑移系 g_i 上的切应变, $\Delta \gamma(g_i)$ 可表示为 ΔE_{33} 的函数, 当一个新的滑移由这种方法发现后, 它要计入内应力的下一级计算.

总之, $\tau(g_i)$ 和 θ 表现出一样的变化, 这种变化则解释了所观察的区域形成. $G\{\log r\}$ 项对 $\tau(g_i)$ 的贡献在近三叉点处比远离三叉点处要大得多. 从实验中可以看出, 区域的形成可以降低 $G\{\log r\}$ 项对 $\tau(g_i)$ 的贡献, 即可以解除内应力.

- [1] E. Voce and A. P. C Hollows, *J. Inst. Metals*, **73**(1947), 323.
- [2] Hondros. E. D and Mclean. D., *Phil. Mag.*, **29**(1974), 771.
- [3] A. P. Sutton and V. Vitek, *Acta Met.*, **30**(1982), 2011.
- [4] 吴希俊、李广海、蔡民、邱强、汤奇恒, Proc. MRS-90(international) Beijing August 18—20, (1990).
- [5] A. Roy, V. Erb and H. Gleiter, *Acta Met.*, **30**(1982), 1847.
- [6] J. D. Russel and A. T. Winter, *Scripta Metall.*, **19**(1985), 575.
- [7] 吴希俊、李广海、邱强、蔡民, *Scripta Metall.*, **24**(1990), 2129.
- [8] A. Frackiewicz and Biscondi, *J. De Physique Colloque C4 Supplement*, **46**(1985), 497.

INFLUENCE OF TRIPLE JUNCTION ON THE FRACTURE BEHAVIOR IN COPPER-BISMUTH TILT TRICRYSTAL

WANG JING WU XI-JUN WANG YING

Institute of Solid State Physics, Academia Sinica, Hefei 230031

(Received 13 November 1992)

ABSTRACT

The fracture behavior of $\langle 110 \rangle$ tilt Cu-Bi tricrystals were studied and a contrast with that of Cu-Bi bicrystals was made. The results indicate that the triple junction affected the fracture behaviors of Cu-Bi tricrystals and made a grain boundary exhibit different fracture modes in bicrystal and tricrystal. The high internal stress near triple junction produced incompatibility of plastic deformation, as well as appearing of inhomogeneity of plastic glide and lattice rotation. These are discussed by calculating stress field near triple junction.

PACC: 6200; 6170; 6116D