

金属穿晶脆性断裂统计理论^{*}

邢修三

(北京理工大学应用物理系, 北京 100081)

(1998 年 4 月 16 日收到; 1998 年 5 月 18 日收到修改稿)

讨论了金属穿晶脆性断裂统计理论. 根据穿晶裂纹和晶界作用的界面能模型及断裂非平衡统计理论框架, 推导出了裂纹扩展速率、断裂强度、断裂韧性、脆性—韧性转变温度及其统计分布函数随晶粒尺度和界面能变化的公式.

PACC: 6220M; 0540J; 8140N

1 引 言

金属多晶体由大量尺度和取向都不同的晶粒及晶粒间的晶界组成. 晶界对金属的力学性质起着重要作用. 在穿晶脆性断裂中, 晶界会提高金属的强度和韧性, 降低其脆性—韧性转变温度. 晶界的这种效应, 已有不少实验报道^[1-4], 但缺少系统的理论研究. 本文从裂纹穿晶的界面能模型出发, 在作者提出的固体断裂非平衡统计理论^[5-8]框架内, 从理论上研究了晶界在金属多晶体穿晶断裂过程中的作用, 统一地给出了断裂强度、断裂韧性、脆性—韧性转变温度及统计分布函数随晶粒尺度和界面能变化的公式.

2 裂纹穿晶的界面能模型

当脆性金属多晶体中的裂纹穿过晶界时, 由于改变取向与引起较大的范性变形^[2], 比穿过相同厚度的单晶体要消耗更多的能量. 这样晶界对穿晶裂纹的扩展起了阻挡作用. 由于目前缺乏裂纹穿过晶界的微观理论, 我们利用界面能模型, 把晶界的阻挡效应看成是大的界面能效应. 换言之, 即认为晶界的界面能远大于相同材料单晶体的表面能, 正是这种大的界面能起了晶界的阻挡作用.

设 γ 表示多晶体金属的总平均有效表面能, γ_m 表示单晶体的有效表面能, γ_g 表示晶界的平均界面能, b_1 表示晶界的平均宽度, d 表示晶粒的平均直径, $2c_g$ 表示长度为 $2c$ 的裂纹穿过晶界总长度. 因多晶体金属的总表面能 γ 由单晶体表面能 γ_m 和晶界界面能 γ_g 组成, 故有

$$4\gamma c = 4\gamma_m(c - c_g) + 4\gamma_g c_g = 4\gamma_m c \left(1 - \frac{b_1}{d}\right) + \frac{4\gamma_g b_1 c}{d}, \quad (1)$$

^{*} 国家自然科学基金(批准号: K19672008)资助的课题.

其中

$$c_g = \frac{b_1 c}{d}. \quad (2)$$

通常情况下, $b_1 \ll d$. 将(2)式代入(1)式, 得

$$\gamma = \gamma_m + \frac{b_1}{d} \gamma_g. \quad (3)$$

对于金属^[9], 可取 $b_1 \simeq 10^{-9} \text{ m}$; 根据以上讨论, $\gamma_g \gg \gamma_m$, 如设 $\gamma_g \simeq 10^4 \gamma_m$. 结合二者并代入(3)式, 则有以下结果:

$$\begin{aligned} \text{对粗晶粒, 如 } d \gg 10^{-4} \text{ m, 则 } \gamma_m \gg \frac{b_1}{d} \gamma_g, \text{ 因而有} \\ \gamma \simeq \gamma_m. \end{aligned} \quad (3a)$$

在这种情况下, 单晶体表面能起主要作用, 晶界界面能可略去. 换言之, 在这种粗晶粒中, 晶界对于穿晶裂纹扩展的阻挡效应可以略去.

$$\begin{aligned} \text{对细晶粒, 如 } d \leq 10^{-5} \text{ m, 则 } \frac{b_1}{d} \gamma_g \gg \gamma_m, \text{ 因而有} \\ \gamma \simeq \frac{b_1}{d} \gamma_g. \end{aligned} \quad (3b)$$

在这种情况下, 晶界界面能起主要作用, 单晶表面能可以略去. 换言之, 在这种细晶粒中, 穿晶裂纹扩展的阻力主要来自晶界界面能.

下面所有关于晶界对穿晶脆性断裂过程影响的讨论, 都与(3), (3b)式有关.

3 裂纹扩展速率

如上所述, 由于可将晶界对穿晶裂纹扩展的阻挡效应化成大的界面能效应, 裂纹扩展速率必将受这种效应影响. 下面将给出穿晶裂纹扩展速率随界面能和晶粒尺度变化的公式.

按照连续介质模型, 裂纹的静能为^[1]

$$U = 4\gamma c - \frac{\pi(1-\nu^2)\sigma^2 c^2}{E}, \quad (4)$$

动能为

$$T = \frac{k\rho\sigma^2 c^2 \dot{c}^2}{2E^2}, \quad (5)$$

其中 $\dot{c}$ 为裂纹扩展速率, σ 为作用于裂纹的外应力, E 为杨氏模量, ν 为泊松比, ρ 为金属密度, k 为常数, $\left[\left(\frac{2\pi}{k}\right)^{1/2} = 0.38\right]$ ^[1].

根据总能量守恒原理^[5,6], 得裂纹扩展动力学方程如下:

$$\begin{aligned} c\ddot{c} + \dot{c}^3 + \frac{\dot{c}}{\sigma} \frac{cc\dot{c}^2}{\sigma} + \frac{E^2}{k\rho\sigma^2 c} \left[4\gamma - \frac{2\pi(1-\nu^2)\sigma^2 c}{E} \right] \dot{c} \\ - \frac{E^2}{k\rho\sigma^2 c} \left[\frac{2\pi(1-\nu^2)\sigma^2 c}{E} \right] \dot{\sigma} = 0, \end{aligned} \quad (6)$$

其中 $\dot{\sigma} = \frac{d\sigma}{dt}$ 为外应力的增加率, $\dot{c} = \frac{dc}{dt}$ 为裂纹扩展速率.

当 c 和 $\dot{c}$ 都较小时, 由(6)式解得裂纹扩展速率

$$\dot{c} \simeq \frac{\pi(1-\nu^2)\sigma\dot{\sigma}c^2}{2\gamma E}. \quad (7)$$

将(3)式代入(7)式得

$$\dot{c} \simeq \frac{\pi(1-\nu^2)\sigma\dot{\sigma}c^2}{2E\left(\gamma_m + \frac{b_1}{d}\gamma_g\right)}. \quad (8)$$

对细晶粒, (8)式变为

$$\dot{c} \simeq \frac{\pi(1-\nu^2)d\sigma\dot{\sigma}c^2}{2Eb_1\gamma_g}. \quad (8a)$$

在这种情况下, 裂纹扩展速率 $\dot{c}$ 正比于晶粒尺度 d , 反比于晶界界面能 γ_g .

当 c 和 $\dot{c}$ 都大时, 由(6)式解得裂纹扩展速率

$$\dot{c} \simeq \dot{c}_m \left[1 - \frac{2c_k}{c} + \frac{c_k^2}{c^2} + \frac{\dot{c}_k^2 c_k^2}{\dot{c}_m^2 c^2} \right]^{1/2} \simeq \dot{c}_m \left(1 - \frac{c_k}{c} \right). \quad (9)$$

这里利用了 $\dot{c}_k \ll \dot{c}_m$, 其中

$$\dot{c}_m = \left[\frac{2\pi(1-\nu^2)}{k} \left(\frac{E}{\rho} \right) \right]^{1/2} = 0.36 \left(\frac{E}{\rho} \right)^{1/2} \quad (10)$$

为裂纹在固体材料中的最高传播速率, c_k 为临界裂纹长度. (9), (10)式所表达的理论结果是与实验^[1]一致的. 由(9)式还可见, 当裂纹高速穿晶传播时, 不论晶粒尺度的大小如何, 晶界的阻挡效应都不再存在.

4 平均断裂强度和断裂韧性

根据断裂非平衡统计理论^[5-8]与上节有关裂纹扩展速率的结果, 金属脆性断裂过程可看成是由大量微裂纹的统计成核长大和单个主裂纹的传播两阶段组成的. 前者是低速的(见(7), (8)式), 后者是高速的(见(9), (10)式). 因裂纹是以接近声速的高速传播, 故只要有一条裂纹传播, 材料将立即断裂, 我们就把裂纹的传播应力叫做断裂强度. 由于材料内部微观成分、缺陷等微观结构的不均匀性, 对于宏观成分、工艺条件及外形尺寸相同的固体材料, 各个试样的断裂强度、断裂韧性等与断裂有关的力学量是互不相同的, 遵循一定的统计规律. 为此, 反映固体材料特性的宏观力学量则应取相应力学量的统计平均值. 下面我们给出脆性金属平均穿晶断裂强度和断裂韧性随晶粒尺度和界面能的变化公式.

设 $W_f(\sigma)d\sigma$ 为断裂强度的统计分布函数, 它表示金属试样的断裂强度在 σ 和 $\sigma+d\sigma$ 间的概率; $W_f(K)dK$ 为断裂韧性的统计分布函数, 它表示金属试样的断裂韧性在 K 和 $K+dK$ 间的概率. $W_f(\sigma)d\sigma$ 和 $W_f(K)dK$ 都满足归一化条件, 即 $\int_0^\infty W_f(\sigma)d\sigma = 1$, $\int_0^\infty W_f(K)dK = 1$.

平均断裂强度为

$$\bar{\sigma}_f = \int_0^{\infty} \sigma W_f(\sigma) d\sigma \quad (11)$$

平均断裂韧性为

$$\bar{K} = \int_0^{\infty} K W_f(K) dK \quad (12)$$

根据金属脆性断裂非平衡统计理论^[5,6]及(3)式,穿晶脆性断裂强度的统计分布函数为

$$W_f(\sigma) d\sigma = \frac{3}{\pi(1-\nu^2)} \frac{N\alpha_l \left(\gamma_m + \frac{b_1}{d} \gamma_g \right) E}{c_k \sigma^2} \exp \left[-\frac{3 \left(\gamma_m + \frac{b_1}{d} \gamma_g \right) E}{2\pi(1-\nu^2) c_k \sigma^2} \right] \\ \times \exp \left\{ -\alpha_l \sigma \exp \left[-\frac{3 \left(\gamma_m + \frac{b_1}{d} \gamma_g \right) E}{2\pi(1-\nu^2) c_k \sigma^2} \right] \right\} \\ \times \exp \left\{ -N \left[1 - \exp \left[-\alpha_l \sigma \exp \left[-\frac{3 \left(\gamma_m + \frac{b_1}{d} \gamma_g \right) E}{2\pi(1-\nu^2) c_k \sigma^2} \right] \right] \right] \right\} d\sigma, \quad (13)$$

式中 $N = MV$ 为裂纹总数,其中 V 为金属试样体积, M 为裂纹密度; α_l 为材料常数. 应指出,由于本文用的是裂纹连续介质模型,故用 $\frac{2}{3} c_k$ 取代了过去位错模型^[5,6]中的 $\left(\frac{b}{L} \right)^{1/2} \frac{1}{N_0 L^2}$.

穿晶脆性断裂韧性的统计分布函数为

$$W_f(K) dK = \frac{3}{\sqrt{\pi}(1-\nu^2)} \frac{N\alpha_l \left(\gamma_m + \frac{b_1}{d} \gamma_g \right) E}{\sqrt{c_k} K^2} \exp \left[-\frac{3 \left(\gamma_m + \frac{b_1}{d} \gamma_g \right) E}{2(1-\nu^2) K^2} \right] \\ \times \exp \left\{ -\frac{\alpha_l K}{\sqrt{\pi c_k}} \exp \left[-\frac{3 \left(\gamma_m + \frac{b_1}{d} \gamma_g \right) E}{2(1-\nu^2) K^2} \right] \right\} \\ \times \exp \left\{ -N \left[1 - \exp \left[-\frac{\alpha_l K}{\sqrt{\pi c_k}} \exp \left[-\frac{3 \left(\gamma_m + \frac{b_1}{d} \gamma_g \right) E}{2(1-\nu^2) K^2} \right] \right] \right] \right\} dK. \quad (14)$$

将(13)式代入(11)式,得平均穿晶脆性断裂强度的表达式为

$$\bar{\sigma}_f \simeq \left[\frac{3 \left(\gamma_m + \frac{b_1}{d} \gamma_g \right) E}{2\pi(1-\nu^2) c_k \ln(MV)} \right]^{1/2}. \quad (15)$$

对细晶粒, (15)式变为

$$\bar{\sigma}_f \simeq \left[\frac{3 b_1 \gamma_g E}{2\pi(1 - \nu^2) d c_k \ln(MV)} \right]^{1/2}. \quad (15a)$$

若考虑位错存在内阻力 σ_i , 则(15), (15a)式应变为

$$\bar{\sigma}_f \simeq \sigma_i + \left[\frac{3 \left(\gamma_m + \frac{b_1}{d} \gamma_g \right) E}{2\pi(1 - \nu^2) c_k \ln(MV)} \right]^{1/2} \quad (16)$$

$$\bar{\sigma}_f \simeq \sigma_i + \left[\frac{3 b_1 \gamma_g E}{2\pi(1 - \nu^2) d c_k \ln(MV)} \right]^{1/2}. \quad (16a)$$

将(14)式代入(12)式, 得平均穿晶脆性断裂韧性的表达式为

$$\bar{K}_{Ic} \simeq \left[\frac{3 \left(\gamma_m + \frac{b_1}{d} \gamma_g \right) E}{2(1 - \nu^2) \ln(MV)} \right]^{1/2}, \quad (17)$$

对细晶粒, (17)式变为

$$\bar{K}_{Ic} \simeq \left[\frac{3 b_1 \gamma_g E}{2(1 - \nu^2) d \ln(MV)} \right]^{1/2}. \quad (17a)$$

若考虑位错存在内阻力 σ_i , 则(17), (17a)式应变为

$$\bar{K}_{Ic} \simeq K_{Ic}^0 + \left[\frac{3 \left(\gamma_m + \frac{b_1}{d} \gamma_g \right) E}{2(1 - \nu^2) \ln(MV)} \right]^{1/2}, \quad (18)$$

$$\bar{K}_{Ic} \simeq K_{Ic}^0 + \left[\frac{3 b_1 \gamma_g E}{2(1 - \nu^2) d \ln(MV)} \right]^{1/2}, \quad (18a)$$

其中

$$K_{Ic}^0 = \sigma_i \sqrt{\pi c_k}.$$

(16a), (18a)式是与经验公式^[1,2,4] $\sigma_f = \sigma_i + kd^{-1/2}$ 及 $K_{Ic} = K_{Ic}^0 + \beta d^{-1/2}$ 随晶粒尺度 d 变化的形式是一致的. 但是根据本理论结果, 这种经验公式只适用于细晶粒, 不适用于粗晶粒. 只有(16), (18)式才对大小晶粒都适用.

5 脆性—韧性转变温度

脆性金属的断裂韧性随温度升高而增加. 当温度升到某个临界值时, 断裂韧性突然显著增加, 脆性金属变成韧性的(本文讨论的脆韧断裂都是穿晶的, 不讨论沿晶断裂). 这个临界温度叫做脆性—韧性转变温度. 下面给出穿晶脆性金属的脆性—韧性转变温度及其统计分布函数公式.

为要了解断裂韧性如何随温度变化, 只需知道(17), (17a)式中哪个物理量显著随温度变化即可. 由于有效界面能与有效表面能都主要是由裂纹扩展单位面积所消耗的范性变形能决定的, 而范性变形是随温度增加的. 根据文献[10], 应有

$$\gamma_g = \gamma_g^0 \exp(-u/k_B T), \quad (19)$$

其中 T 为温度, k_B 为玻耳兹曼常数, u 为激活能, γ_g^0 为常数.

将(19)式代入(17a)式,得

$$\bar{K}_{1c} \simeq \left[\frac{3 b_1 \gamma_g^0 E \exp(-u/k_B T)}{2(1-\nu^2) d \ln(MV)} \right]^{1/2}. \quad (20)$$

这就是穿晶脆性断裂韧性随温度变化的表达式.

若 T_t 为脆性—韧性转变温度, K_{1c}^t 为 T_t 处的断裂韧性,则由(20)式得

$$\frac{u}{k_B T_t} = \ln \left[\frac{3 b_1 \gamma_g^0 E}{2(1-\nu^2) (K_{1c}^t)^2 \ln(MV)} \right] - \ln d. \quad (21)$$

(21)式给出的脆性—韧性转变温度 T_t 随晶粒尺度 d 细化而降低的形式,是与实验给出的经验公式^[11,12] $\frac{1}{T_t} = A - B \ln d$ 相一致的. 显然,由于利用了(17a)式,(21)式亦仅适用于细晶粒,不适用于粗晶粒.

同样,金属试样的脆性—韧性转变温度亦应遵循某种统计分布函数 $W_f(T) dT$, 它表示金属试样的脆性—韧性转变温度在 T 与 $T+dT$ 间的概率. 显然, $W_f(T) dT$ 亦应满足归一化条件 $\int_0^\infty W_f(T) dT = 1$.

根据概率论,应有 $W_f(T) dT = W_f(K) \left| \frac{\partial K}{\partial T} \right| dT = W_f(T) \theta_t dT$ $\left(\theta_t \equiv \left| \frac{\partial K_{1c}}{\partial T} \right|_{T_t} \right)$. 将

(14),(20)式代入此式,得穿晶脆性—韧性转变温度的统计分布函数为

$$\begin{aligned} W_f(T) dT &\simeq \frac{3 N \alpha_t b_1 \gamma_g u^2 E}{4 \sqrt{\pi} (1-\nu^2) d \sqrt{c_k} \theta_t^2 k_B T^4} \exp \left[-\frac{3 b_1 \gamma_g u^2 E}{8(1-\nu^2) d \theta_t^2 k_B^2 T^4} \right] \\ &\times \exp \left\{ -\frac{2 \alpha_t \theta_t k_B T^2}{\sqrt{\pi c_k} u} \exp \left[-\frac{3 b_1 \gamma_g u^2 E}{8(1-\nu^2) d \theta_t^2 k_B^2 T^4} \right] \right\} \\ &\times \exp \left\{ -N \left[1 - \exp \left[-\frac{2 \alpha_t \theta_t k_B T^2}{\sqrt{\pi c_k} u} \exp \left[-\frac{3 b_1 \gamma_g u^2 E}{8(1-\nu^2) d \theta_t^2 k_B^2 T^4} \right] \right] \right] \right\} dT. \quad (22) \end{aligned}$$

实验证明脆性—韧性转变温度确是分散的,但是迄今却未见它们是否遵循何种统计分布规律的报道. 因此本文所给出的脆性—韧性转变温度的统计分布公式仅可看成是一个理论预言,正确与否,有待今后实验检验.

为了进一步了解断裂韧性如何随温度和晶粒尺度的变化,我们先指出(14)式可进一步近似模拟成^[7,8] Weibull 统计分布,即

$$\begin{aligned} W_f(K) dK &= -\frac{\partial R(K)}{\partial K} dK, \\ R(K) &\simeq \exp \left\{ -\left[\Gamma \left(\frac{n+1}{n} \right) \frac{K}{K} \right]^n \right\}, \quad (23) \end{aligned}$$

其中 $R \equiv R(K)$ 为可靠性. 由(20),(23)式得

$$K_{1c} \simeq \frac{(-\ln R)^{1/n}}{\Gamma \left(\frac{n+1}{n} \right)} \bar{K}_{1c} \simeq \frac{(-\ln R)^{1/n}}{\Gamma \left(\frac{n+1}{n} \right)} \left[\frac{3 b_1 \gamma_g^0 E e^{-u/k_B T}}{2(1-\nu^2) d \ln(MV)} \right]^{1/2}. \quad (24)$$

对两个不同的可靠性 R 和 R' (其他各量相同),则它们断裂韧性之差为

$$\Delta K_{1c} = K_{1c} - K'_{1c} \simeq \frac{[(-\ln R)^{1/n} - (-\ln R')^{1/n}]}{\Gamma \left(\frac{n+1}{n} \right)} \left[\frac{3 b_1 \gamma_g^0 E e^{-u/k_B T}}{2(1-\nu^2) d \ln(MV)} \right]^{1/2}. \quad (25)$$

由(24), (25)式可见, K_{Ic} - T 曲线不只一条, 而是连续分布的无数条. 每条曲线都有它的可靠性. 温度 T 愈高, 晶粒尺度 d 愈小, 则两个断裂韧性之差 ΔK_{Ic} 亦愈大. 这种变化形式是与实验相符的^[12].

6 结 语

晶界对穿晶脆性裂纹扩展的阻挡效应可由界面能模型描述. 小裂纹在细晶粒金属中低速扩展时, 其速率正比于晶粒尺度, 反比于晶界界面能. 大裂纹高速传播时, 不论晶粒尺度的大小如何, 晶界都失去其对低速裂纹所显示的阻挡效应. 基于这些结果和断裂非平衡统计理论, 我们推导出了穿晶脆性断裂强度、断裂韧性、脆性—韧性转变温度及它们的统计分布函数随晶粒尺度和界面能变化的公式, 结果与实验基本相符.

- [1] M. F. Kanninen, C. M. Popelar, *Advanced Fracture Mechanics* (Oxford University Press, New York, 1985).
- [2] M. Szepanski, *The Brittleness of Steel* (John Wiley & Sons Inc., New York, 1963).
- [3] R. W. Cahn, *Physical Metallurgy*, 2nd edition (North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1974).
- [4] R. W. Armstrong, *Eng. Fract. Mech.*, **28**(1987), 529.
- [5] Xing Xiu-san, *Acta Physica Sinica*, **29**(1980), 718(in Chinese).
- [6] Xing Xiu-san, *Eng. Fract. Mech.*, **24**(1986), 45.
- [7] Xing Xiu-san, *Advances in Mechanics*, **21**(1991), 153(in Chinese).
- [8] Xing Xiu-san, *Eng. Fract. Mech.*, **55**(1996), 699.
- [9] G. A. Chadwick, D. A. Smith, *Grain Boundary Structure and Properties* (Academic Press, London, 1976).
- [10] Hirsch P. B., *Acta Metallurgica Sinica*, **33**(1997), 225(in Chinese).
- [11] A. H. Stroh, *Adv. Phys.*, **6**(1957), 418.
- [12] F. M. Beremin, *Metall. Trans. A*, **14**(1983), 2277.

A STATISTICAL THEORY OF TRANSGRANULAR BRITTLE FRACTURE FOR METALS*

XING XIU-SAN

(Department of Applied Physics, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081)

(Received 16 April 1998; revised manuscript received 18 May 1998)

ABSTRACT

A statistical theory of transgranular brittle fracture for metals is discussed. According to the continuum model of interface energy describing the interaction between transgranular brittle crack and grain boundaries and nonequilibrium statistical theory of fracture, the crack growth rate, fracture strength, fracture toughness, brittle-ductile transition temperature and their statistical distribution functions changing with grain size and interface energy are derived in a unified theory.

PACC: 6220M; 0540J; 8140N

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. K19672008).