

钢中脆硬粒子裂纹形成机理^{*}

朱 亮^{1)†} 张爱华²⁾

¹⁾ 甘肃工业大学甘肃省有色金属新材料省部共建国家重点实验室, 兰州 730050)

²⁾ 甘肃工业大学电气工程与信息工程学院, 兰州 730050)

(2003 年 3 月 26 日收到, 2003 年 4 月 28 日收到修改稿)

钢中的脆硬粒子对钢的解理脆断有直接的影响, 解理断裂源大都发生在脆硬粒子上. 根据微裂纹形成的热力学模型, 利用钢中脆硬粒子开裂时所释放的弹性应变能、位错塞积弹性能、所产生的表面能, 对脆硬粒子裂纹形成机理进行分析. 模型计算表明, 正应力和位错塞积力都是脆硬粒子开裂的必要条件, 这与实验事实相符; 同时给出脆硬粒子开裂的临界条件计算方法, 计算发现, 脆硬粒子临界开裂应力不仅取决于脆硬粒子尺寸及表面能, 而且与晶粒直径有一定的相关关系, 当晶粒直径较小时, 这种关系与实验测定的材料解理断裂应力与晶粒尺寸的关系一致, 说明整体失稳解理断裂的控制环节为脆硬粒子开裂; 当晶粒直径较大时, 脆硬粒子临界开裂应力就小于材料解理断裂应力, 说明脆硬粒子尺寸的微裂纹向晶粒中扩展成为材料整体失稳解理断裂的控制环节.

关键词: 解理断裂, 裂纹形核, 脆硬粒子

PACC: 6220M, 8140N, 4630N

1. 引 言

许多研究发现, 钢中的脆硬粒子对钢的解理脆断有直接的影响, 断口分析也表明, 解理断裂源大都发生在脆硬粒子上. 引起解理断裂裂纹形核的脆硬粒子在不同的钢种中有不同的形式, 在含碳量较高的钢中, 主要是碳化物^[1]; 在低碳钢及其焊缝中, M-A 组元、晶间碳化物、夹杂物均能引起解理断裂^[2,3]; 在新型的细晶粒钢中, TiN 常存在于钢中用于抑制晶粒长大, 但同时又是引起解理断裂的主要脆硬粒子^[4]. 可见, 脆硬粒子的开裂成为解理断裂的首要因素, 有必要对钢中脆硬粒子的开裂的机理进行全面研究. 早期的研究发现, 在低碳钢中, 只有当局部发生塑性变形后, 才能引起解理断裂, 在此基础上, Strobl^[5]提出了位错塞积成核模型, 当位错运动在晶界碳化物或夹杂物上被阻塞时, 引起这些脆硬粒子的开裂形成微裂纹, 随后向周围晶粒中扩展; 但没有考虑正应力对脆硬粒子形成微裂纹的作用, 而且在其结论中没有表现出脆硬粒子尺寸对断裂应力的影响. 但实验发现^[1,6], 尺寸较大的粒子容易形成微裂纹, 且大部分开裂碳化物的裂纹方向与正应力的

方向成 90°. Smith^[7]认为脆硬粒子尺寸的微裂纹向晶粒中扩展是解理断裂的控制环节, 扩展的动力有两部分, 一是与铁素体晶粒尺寸有关的位错阻塞力, 二是正应力, 但在该模型中并没有反应铁素体晶粒尺寸对微裂纹扩展的依赖性^[8], 但是, 晶粒尺寸与钢的断裂和疲劳有直接的关系^[9,10], 细化晶粒已成为目前工程上提高材料韧性的主要工艺手段. 还有研究认为^[11], 解理断裂的控制环节随材料组织特点以及应力状态的变化而改变, 在一定条件下, 脆硬粒子开裂就会导致最终的失稳解理断裂; 但有时只是解理裂纹形成的最初阶段, 最终的失稳解理断裂根据随后裂纹是否通过晶界来控制. 无论如何, 从工程应用的安全考虑, 控制脆硬粒子开裂具有更实际的意义. 本文从多晶体变形的位错理论及微裂纹扩展的能量的平衡条件出发, 研究钢中脆硬粒子形成微裂纹的机理.

2. 脆硬粒子裂纹形核模型

多晶体材料受到外加应力时, 首先在切应力较集中的晶粒内产生滑移, 由于相邻晶粒晶格取向的差异, 滑移带将阻碍在晶界上, 或第二相粒子及夹杂

^{*} 甘肃省科技攻关项目(批准号: GS002-A25-021)资助的课题.

[†] E-mail: zhul@gsut.edu.cn

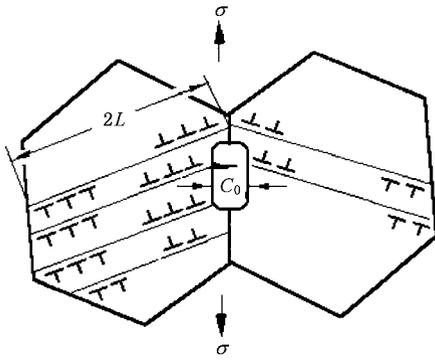


图1 晶界脆硬粒子开裂

物脆硬粒子上,在其上形成位错塞积产生应力集中.当此应力超过某一临界值时,就触发相邻侧晶粒内的位错运动,使位错塞积能释放,促进吕德斯带的扩展.但是,由于晶界第二相粒子的存在,以及晶格取向的差别,不是所有的位错塞积都能触发相邻侧晶粒内的位错运动,即使发生屈服以后,总有相当一部分位错阻塞在晶界上,或第二相粒子上,如图1所示.由位错理论可知,作用在距位错塞积群顶端 \$r\$ 处的最大正应力为

$$\sigma_{\perp} = \tau_e \sqrt{\frac{4L}{3r}}, \quad (1)$$

式中 \$L\$ 是位错塞积群的长度,对于多晶体假设位错源在晶粒的中心, \$L = d/2\$, \$d\$ 为晶粒的直径, \$\tau_e = \tau - \tau_i\$, \$\tau\$ 是滑移面上外加切应力, \$\tau_i\$ 是位错运动摩擦力.在靠近位错塞积群的顶端,即 \$r\$ 等于原子间距时, \$\sigma_{\perp}\$ 很容易大于原子的键合力,使脆硬粒子的原子键断裂,是否能形成裂纹,取决于裂纹形成过程中的能量变化.

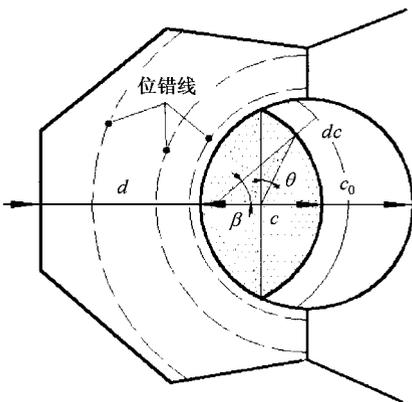


图2 脆硬粒子微裂纹形成

如图2所示,直径为 \$c_0\$ 球形的脆硬粒子,受到

外加的正应力为 \$\sigma\$ 和旁边晶粒位错塞积群的联合作用,假设脆硬粒子在与正应力方向垂直的截面上开裂,而且在裂纹扩展过程中,裂纹前缘点始终处在半径为 \$c_0/2\$ 的圆弧上,形成一个近似椭圆形的微裂纹,用椭圆的短轴 \$c\$ 表示裂纹的扩展长度,根据文献[12],椭圆形的微裂纹的应力强度因子为

$$K_1 = \sigma \sqrt{\frac{\pi c}{2Q}} \left(\frac{c}{2c_0 - c} \cos^2 \theta + \sin^2 \theta \right)^{\frac{1}{4}}, \quad (2)$$

式中

$$Q = 1 + 1.466 \left(\frac{c}{2c_0 - c} \right)^{0.825}.$$

由图2可以得到

$$\theta = \arctan \frac{c_0 \cos \beta + c - c_0}{c_0 \sin \beta}.$$

裂纹扩展过程中所释放的应变能

$$\begin{aligned} U_1 &= - \int_0^c \int_0^{\beta} G \frac{c_0}{2} d\beta dc \\ &= - \int_0^c \int_0^{\beta} \frac{(1 - \nu^2) K_1^2}{E} \frac{c_0}{2} d\beta dc, \end{aligned} \quad (3)$$

式中的积分上限

$$\beta = \arccos \left(1 - \frac{c}{c_0} \right),$$

其中 \$G\$ 为裂纹能量释放率, \$E\$ 为脆硬粒子弹性模量, \$\nu\$ 为泊松比.

当晶粒中的滑移带阻碍在脆硬粒子上时,某滑移面上的位错塞积群的顶端位错线缠绕在脆硬粒子上.如果位错源处于晶粒的中心,位错群的一端阻塞在脆硬粒子上,另一端阻塞在晶界上,两边的位错符号相异,这样的位错群称为双端位错阻塞.根据文献[13],对于双端位错阻塞,如果位错塞积群的长度为 \$2L\$,在平行于滑移面的有效切应力 \$\tau_e\$ 的作用下,单位长度位错塞积的弹性能为

$$E_d = \frac{\pi(1 - \nu)\tau_e^2 L^2}{2\mu}, \quad (4)$$

式中 \$\mu\$ 为晶粒的剪切模量.如果位错塞积群的顶端的脆硬粒子开裂,位错塞积的弹性能可释放.假设脆硬粒子位于两晶粒的晶界上,且产生长度为 \$c\$ 的裂纹,如图2所示,脆硬粒子开裂部分与位错塞积群的顶端位错线接触的位错线长度为

$$l = c_0 \arccos \left(1 - \frac{c}{c_0} \right),$$

形成裂纹过程中所释放的位错塞积的弹性能

$$U_2 = - E_d l = - \frac{\pi(1 - \nu)\tau_e^2 L^2 c_0}{2\mu} \arccos \left(1 - \frac{c}{c_0} \right). \quad (5)$$

因为脆硬粒子开裂发生在塑性变形区, τ_c 与晶粒直径 d 之间存在著名的 Hall-Petch 关系

$$\tau_c = k_y d^{-\frac{1}{2}} = 2^{-\frac{1}{2}} k_y L^{-\frac{1}{2}}, \quad (6)$$

k_y 为晶粒尺寸梯度参数, 是滑移带穿过晶界时局部应力强化的度量, 表征着启动或产生可动位错的难易程度, 与晶粒的尺寸无关, 但与晶界的形态直接相关. 下面根据位错理论加以分析, 已经产生滑移的晶粒中的位错群塞积在晶界上, 当位错塞积群前端的应力集中超过临界应力 τ_c 时, 触发另一侧的晶粒发生滑移, 根据方程 (1), 即可表示为

$$\tau_c \sqrt{\frac{4L}{3r}} \geq m\tau_c,$$

其中, m 是取向因子, 表示在多晶体变形时, 正应力与滑移面上的分切应力之间的关系, 一般取平均值 $m = 2.9^{[14]}$, 取等号时化简可得 Hall-Petch 关系

$$\tau_c = \frac{\sqrt{3}}{2} m\tau_c r^{\frac{1}{2}} L^{-\frac{1}{2}}. \quad (7)$$

比较方程 (6) 和方程 (7), 可得

$$k_y = \sqrt{\frac{3}{2}} m\tau_c r^{\frac{1}{2}}, \quad (8)$$

其中, r 是距位错塞积群前端的距离, 可理解为相邻晶粒中位错启动源距位错塞积群顶端的距离. 对无碳化物存在晶界, r 只相当于晶界的宽度, 若晶界有脆硬粒子存在, 位错塞积力要穿过不易发生变形的脆硬粒子使相邻晶粒中的位错启动, r 应与第二向粒子的尺寸成正比, 即

$$r = \lambda c_0, \quad (9)$$

其中, λ 是脆硬粒子的形状因子, 它反映当位错塞积力要穿过脆硬粒子使相邻晶粒中的位错启动时, 脆硬粒子的形状的影响, 对于平板形状脆硬相, $\lambda = 1$; 球形脆硬粒子的 λ 应该比平板形状的小. 实际组织中, 脆硬粒子在晶界的尺寸分布有一定的随机性, 通过测定晶粒尺寸与屈服应力的关系所得到的晶粒尺寸梯度参数 k_y , 是滑移带穿过各种不同晶界时局部应力强化的平均度量, 试验发现^[15], 它随碳化物尺寸的增加而增大, 当脆硬粒子尺寸由 $2\mu\text{m}$ 增加到 $5\mu\text{m}$ 时, k_y 由 $0.22 \text{ MPa m}^{1/2}$ 变化到 $0.36 \text{ MPa m}^{1/2}$, 由方程 (8) 和方程 (9) 可估算出 $\tau_c \approx 50 \text{ MPa}$. 将方程 (7) 方程 (8) 和方程 (9) 代入方程 (5) 可得

$$U_2 = -\frac{3\lambda\pi(1-\nu)m^2\tau_c^2Lc_0^2}{8\mu} \arccos\left(1 - \frac{c}{c_0}\right). \quad (10)$$

$$U_3 = 2s\gamma = c_0^2\gamma \arccos\left(1 - \frac{c}{c_0}\right) - \gamma(c_0 - c)\sqrt{2cc_0 - c^2}, \quad (11)$$

其中 s 是脆硬粒子开裂的面积, γ 为脆硬粒子的表面能.

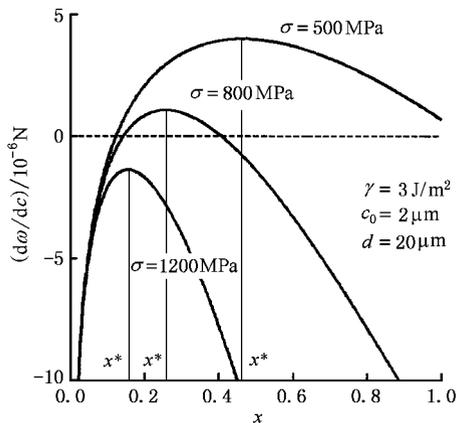


图3 脆硬粒子裂纹形成过程的能量变化率
形成裂纹后总的能量变化

$$\omega = U_1 + U_2 + U_3.$$

将 ω 对 c 求导数, 就可以得出脆硬粒子裂纹扩展到长度 c 时, 系统能量的变化率

$$\frac{d\omega}{dc} = \frac{dU_1}{dc} + \frac{dU_2}{dc} + \frac{dU_3}{dc}, \quad (12)$$

方程 (12) 右边前两项为裂纹的扩展动力, 第三项是裂纹的扩展阻力. 当 c 在 0 到 c_0 的范围内, 如果都存在 $d\omega/dc \leq 0$, 意味着裂纹的扩展动力大于起扩展阻力, 裂纹将贯穿整个脆硬粒子, 而 $d\omega/dc = 0$, 即为脆硬粒子开裂的临界条件. 由于方程 (3) 存在椭圆积分, 无法对方程 (12) 解析求解, 只能在给定相关参数后进行数值求解. 图 3 是在材料组织特性参数 c_0, L 确定的情况下, 在不同的正应力 σ 作用的条件下, 方程 (12) 的数值计算结果. 横坐标 x 为裂纹的相对长度, $x = c/c_0$, 可以看出, x 在 0 到 1 的范围内, $d\omega/dc$ 只在 x^* 处存在一个最大值. 因此, 脆硬粒子开裂的临界条件为

$$\left. \frac{d\omega}{dc} \right|_{c=c^*=x^*c_0} = 0. \quad (13)$$

方程 (13) 中的 c^* 可根据 $\frac{d^2\omega}{dc^2} = 0$ 求得.

3. 讨 论

3.1. 位错塞积对脆硬粒子开裂的作用

如果不考虑形成裂纹过程中所释放的位错塞积

形成裂纹后的表面能变化

弹性能,即忽略方程(12)中的第二项 U_2 ,对方程(12)进行数值计算,可得到如图4所示的结果.在图4的计算中,正应力为4000MPa,大约为金属材料裂纹前沿所能达到的最大应力,因为裂纹前沿的最大应力 $\sigma_{\max} = Q\sigma_s$,即使考虑加工硬化, Q 也不会大于5.尽管如此,在裂纹的扩展的最初阶段,系统能量的变化率仍大于0.也就是说,没有位错塞积力的作用,脆硬粒子不可能开裂.这一结论与许多学者的实验结果^[2]一致,即Griffith裂纹只有在屈服以后才能发生.因为只有屈服以后才能产生足够大的位错塞积力.

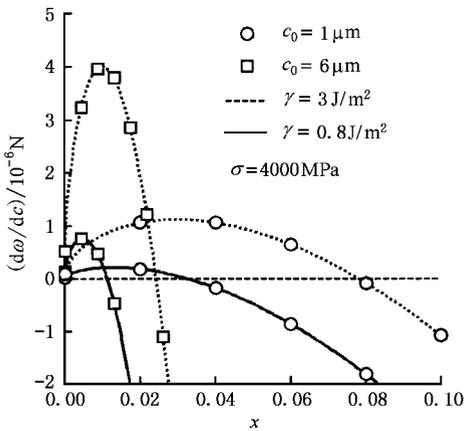


图4 忽略位错塞积弹性能的作用时脆硬粒子裂纹形成过程的能量变化率

3.2. 正应力对脆硬粒子开裂的作用

如果不考虑形成裂纹过程中所释放的应变能,即忽略方程(12)中的第一项 U_1 ,对方程(12)进行数值计算,可得到如图5所示的结果.可以看出,如果

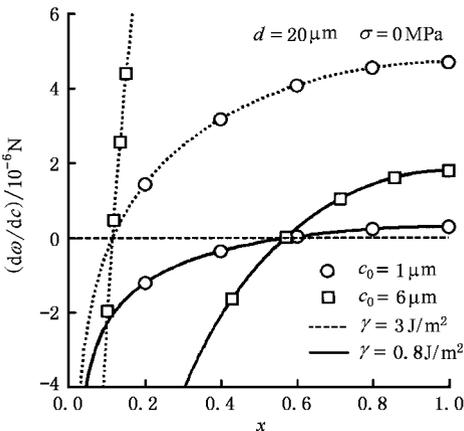


图5 正应力为零时脆硬粒子裂纹形成过程的能量变化率

没有正应力的作用,当裂纹扩展到一定长度时,系统能量的变化率总要大于0,也就是说,没有正应力的作用,脆硬粒子也很难开裂.Gurland^[1]通过观察卸载试样中碳化物开裂的情况发现,大部分开裂碳化物的裂纹方向与正应力的方向成 90° ,这一结论可以很好地解释以上实验结果.

正应力和位错塞积力都是脆硬粒子开裂的必要条件,二者缺一不可.可以看出,在脆硬粒子开裂的开始阶段,位错塞积起主要作用,随后,主要靠正应力使裂纹贯穿整个脆硬粒子.

3.3. 显微组织对脆硬粒子开裂的影响

根据方程(13)所表示的脆硬粒子开裂的临界条件,可以计算出晶粒直径、脆硬粒子的尺寸及表面能与脆硬粒子临界开裂应力 σ_c 的关系,如图6所示.可以看出,脆硬粒子的表面能增加和尺寸减小,都会使脆硬粒子临界开裂应力升高.因此,可以解释解理断裂源往往发生在尺寸较大的脆硬粒子上,而且某些成分的脆硬粒子更容易开裂^[1,2].同时还可以看出,在脆硬粒子的表面能和尺寸一定的情况下,脆硬粒子临界开裂应力与晶粒直径的平方根倒数有一定的线性关系,当晶粒直径超过某一临界值时,这种线性关系不再存在,脆硬粒子临界开裂应力急剧下降,其晶粒直径临界值主要取决于脆硬粒子的表面能.

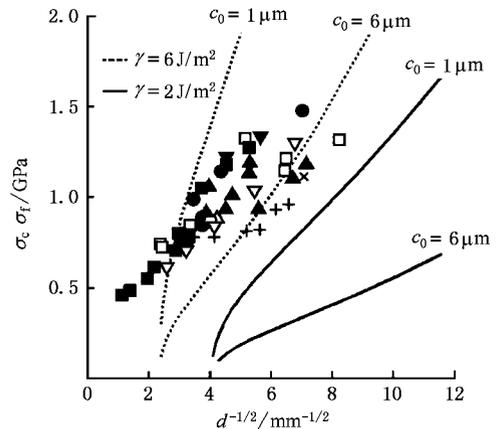


图6 脆硬粒子临界开裂应力及解理断裂应力与晶粒直径的相关关系

当然,脆硬粒子开裂不等于材料最终的失稳解理断裂,普遍认为,钢的解理断裂过程由裂纹形核和裂纹扩展两个环节来控制,首先脆硬粒子临界开裂形成微裂纹,接着向旁边晶粒中扩展,形成晶粒尺寸的裂纹,随后有选择性地向周围晶粒中扩展.在上述

过程中, 尽管裂纹的应力强度因子随裂纹尺寸的增大而增大, 但材料的有效表面能在发生变化, 一般认为, 由于裂纹在晶粒基体中扩展时要产生位错滑移, 使其有效表面能远大于其理想表面能($2\text{J}/\text{m}^2$); 尤其是裂纹通过晶界时, 由于晶界两侧晶粒的解理面的晶格取向差异, 要产生一定量的塑性变形, 使其有效表面能更大^[9]. 通过实验测定的材料解理断裂应力, 应该是裂纹能通过最困难环节时的应力. 图 6 中的符号点是实验测定的解理断裂应力 σ_f 与晶粒直径的平方根倒数相关关系^[8], 不同的符号表示来自不同的文献, 同时也表示出各种不同的材料, 也就是说, 它们各自含有的脆硬粒子有不同的种类和尺寸大小. 与模型的计算结果比较可以看出, 实测值所处的范围为脆硬粒子表面能为 $2\text{—}6\text{J}/\text{m}^2$, 尺寸为 $1\text{—}6\mu\text{m}$, 这与实验测定值相吻合. 值得注意的是, 当晶粒直径超过某一临界值时, 模型计算的脆硬粒子临界开裂应力急促下降, 而实测的材料解理断裂应力与晶粒直径的平方根倒数始终保持线性关系, 其原因可作如下分析. 当晶粒直径较小时, 方程(12)中第二项所表示的位错塞积力较小, 脆硬粒子开裂较为困难, 整体失稳解理断裂的控制环节为脆硬粒子开裂, 因此, 在这种情况下, 脆硬粒子临界开裂应力就等于解理断裂应力; 当晶粒直径较大时, 方程(12)中

第二项所表示的位错塞积力较大, 脆硬粒子容易开裂, 脆硬粒子尺寸的微裂纹向晶粒中扩展成为整体失稳解理断裂的控制环节. 因此, 在这种情况下, 脆硬粒子临界开裂应力小于解理断裂应力.

4. 结 论

1. 根据钢中脆硬粒子开裂时所释放的弹性应变能、位错塞积弹性能, 所产生的表面能, 分析了脆硬粒子裂纹形核的热力学条件, 进而推导出了开裂的临界条件的计算方法.

2. 模型计算表明, 正应力和位错塞积力都是脆硬粒子开裂的必要条件, 二者缺一不可. 这与实验事实相符.

3. 在晶粒尺寸较小时, 脆硬粒子临界开裂应力与晶粒直径的平方根倒数有一定的线性关系, 脆硬粒子的尺寸越大及表面能越小, 其斜率越小, 这种关系与实验测定的解理断裂应力与晶粒尺寸的关系一致, 说明整体失稳解理断裂的控制环节为脆硬粒子开裂; 当晶粒直径较大时, 脆硬粒子临界开裂应力就小于解理断裂应力, 说明脆硬粒子尺寸的微裂纹向晶粒中扩展成为整体失稳解理断裂的控制环节.

-
- [1] Gurland J 1972 *Acta Metallurgica* **20** 735
- [2] Hahn G T 1984 *Metallurgical Transactions A* **15A** 947
- [3] Chen J H, Zhu L and Ma H 1990 *Acta Metallurgica and Material* **38** 2527
- [4] Balart M J, Davis C L and Strangwood M 2000 *Material Science and Engineering A* **284** 1
- [5] Stroh A N 1957 *Advances in Physics* **6** 418
- [6] Lindley T C, Oates G and Richards C E 1970 *Acta Metallurgica* **18** 1127
- [7] Smith E 1966 *Physical Basis of Yield and Fracture* (Inst. of Physical and Physical Soc. Oxford) p36
- [8] Curry D A and Knott J F 1978 *Metal Science* **12** 511
- [9] Xin X S 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 107 (in Chinese) [邢修三 1999 物理学报 **48** 107]
- [10] Li M J *et al* 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2095 (in Chinese) [李眉娟等 2003 物理学报 **52** 2095]
- [11] Chen J H, Zhu L and Wang G Z 1993 *Metallurgical Transactions A* **24A** 659
- [12] Zhang X 1992 *Stress Intensity Factor Calculation in Fracture Mechanics* (Beijing: Defense Industry press) p166—167 (in Chinese) [张 行 1992 断裂力学中应力强度因子的解法(北京:国防工业出版社)第 166—167 页]
- [13] Jagannadham K, Marcinkowski M J 1984 *Unified Theory of Fracture* (Trans Tech Publication) I-25
- [14] Baker T N 1983 *Yield, Flow and Fracture of Polycrystals* (Applied science publishers) 7
- [15] F Brian Pickering 1992 *Constitution and Properties of Steel* (Cambridge: VCH), 47

Mechanism of crack formation at hard brittle particles in steels^{*}

Zhu Liang¹⁾ Zhang Ai-Hua²⁾

¹⁾(State Key Laboratory of Gansu New Non-ferrous Metal Materials , Gansu University of Technology , Lanzhou 730050 , China)

²⁾(College of Electrical and Information Engineering , Gansu University of Technology , Lanzhou 730050 , China)

(Received 26 March 2003 ; revised manuscript received 28 April 2003)

Abstract

Hard brittle particles can have an important influence on cleavage fracture in steels , and can act as cleavage initiators. Considering the strain elastic energy and the dislocation pile-up elastic energy to be released , and surface energy to be produced , during the hard brittle particle cracking , the mechanism of crack formation at hard brittle particles in steels was studied by a thermal dynamic model. It has been demonstrated theoretically that both normal stress and dislocation pile-up at the hard brittle particles are necessary for its cracking. Furthermore , a criterion for hard particle cracking has been derived , by which the critical cracking stress for the hard brittle particle was predicted not only to depend on its size and surface energy , but also to have correlations with the grain size. Their correlations are the same as the relationship between the fracture stress determined experimentally and the grain size in the case of finer grain constituents. It can be indicated that in such a situation the hard brittle particle cracking is responsible for the ultimate cleavage fracture of the material. In the case of coarser grain constituents , the critical cracking stress for the hard brittle particle is smaller than the fracture stress determined experimentally. This indicated that propagating a particle-size crack into the surrounding ferrite matrix is the critical event for the ultimate failure of the material.

Keywords : cleavage fracture , cleavage initiation , hard brittle particle

PACC : 6220M , 8140N , 4630N

^{*} Project supported by the Key Technologies R&D Program of Gansu (Grant No. GS002-A25-021).