

纳米孪晶金属塑性变形机制*

卢 磊 尤泽升

(中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家(联合)实验室, 沈阳 110016)

摘要 本文综述了纳米孪晶金属材料的塑性变形机制。通过分析纳米孪晶二维结构变形时可启动的滑移位错类型, 揭示纳米孪晶金属塑性变形的 3 种位错机制, 即位错塞积并穿过孪晶界机制, Shockley 不全位错诱导孪晶界迁移机制以及贯穿位错在孪晶片层内受限滑移机制。通过改变加载方向与孪晶界面的相对取向可实现这 3 类位错机制的可控转变。

关键词 纳米孪晶金属, 变形机制, 位错滑移, 各向异性, 力学性能

中图法分类号 TG146

文献标识码 A

文章编号 0412-1961(2014)02-0129-08

PLASTIC DEFORMATION MECHANISMS IN NANOTWINNED METALS

LU Lei, YOU Zesheng

Shenyang National Laboratory for Materials Science, Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences,
Shenyang 110016

Correspondent: LU Lei, professor; Tel: (024)23971939, E-mail: llu@imr.ac.cn

Supported by National Basic Research Program of China (No.2012CB932202) and National
Natural Science Foundation of China (Nos.51071153 and 51371171)

Manuscript received 2013-11-05, in revised form 2013-12-17

ABSTRACT A brief overview is provided about the plastic deformation mechanisms in nanotwinned metals. The unique two-dimensional nanoscale twin lamellae lead to different dislocation slip systems activated during plastic deformation. It has been revealed that there are three distinctly different dislocation-mediated deformation mechanisms in nanotwinned metals, namely dislocation pile-up against and slip transfer across twin boundaries, Shockley partials gliding on twin boundaries leading to twin boundary migration, and threading dislocations slip confined by neighboring twin boundaries. It is further demonstrated that these three dislocation-mediated mechanisms are switchable upon changing in the loading direction with respect to twin boundaries.

KEY WORDS nano-twinned metal, deformation mechanism, dislocation slip, anisotropy, mechanical property

近 10 年来, 低能态共格孪晶界由于其明显优于传统非共格界面的特殊强韧化效应而受到材料科学界的广泛关注^[1-3]。尤其是纳米尺度共格孪晶界面不仅能够有效阻碍位错的运动, 表现出类似于传统晶界强化的效果^[1,4-6]; 同时, 孪晶界附近可提供丰富的位错存储空间(不同于晶界强化)^[4,7], 从而保证材料足够的加工硬化与稳定塑性变形能力^[8-10]。除优异的强塑性匹配外, 在单调或循环加载过程中, 纳米孪

晶金属还表现出较好的结构稳定性^[11-13]、高疲劳寿命和疲劳持久极限^[11,14]以及低疲劳裂纹扩展速率^[15]。

纳米孪晶金属优异的综合力学性能源于其独特的塑性变形机制。大量实验测试^[7,16-18]、计算模拟^[19-22]和理论分析^[23-25]研究结果显示, 位错-孪晶界的交互作用是决定纳米孪晶金属宏观性能的本征原因, 而这本质上不同于多晶体材料中晶格位错以及位错-晶界之间的交互作用。位错与孪晶界面的交互作用十分复杂, 这种复杂性不仅取决于孪晶界面的特殊性, 还与启动位错类型密切相关。事实上, 孪晶的微观结构特征(如孪晶片层厚度、孪晶长度、孪晶界取向、晶体取向等)以及外在加载方式、受力状

* 国家重点基础研究发展计划项目 2012CB932202 以及国家自然科学基金项目 51071153 和 51371171 资助

收到初稿日期: 2013-11-05, 收到修改稿日期: 2013-12-17

作者简介: 卢 磊, 女, 1970 年生, 研究员, 博士

DOI: 10.3724/SP.J.1037.2013.00697

态等均会直接影响变形过程中可启动位错类型, 从而显著影响位错与孪晶界的反应结果。因此, 为了解释纳米孪晶金属的宏观力学行为与微观变形机制的直接联系, 澄清纳米孪晶结构的特殊强韧化机制, 本文结合有关纳米孪晶金属力学行为和塑性变形机制的最新研究结果, 从 fcc 孪晶金属的可动滑移系的分析出发, 着重评述涉及纳米孪晶结构的 3 类典型位错机制、性能特点及特殊的塑性变形各向异性, 并讨论如何调控微观变形机制而实现宏观力学性能设计。

1 位错滑移的硬模式和软模式

fcc 多晶体金属的塑性变形由位错在 12 个等效的 $\{111\} <110>$ 滑移系上滑动实现。引入各类缺陷限制位错运动是强化材料的常用方法。其中缺陷的三维结构尺寸和界面特征是决定位错滑移的主要因素。例如, 在纳米晶体材料中, 其三维方向上极小的晶粒尺寸和非共格晶界能有效约束位错滑移, 因此通常认为 12 个滑移系是等效的。与此明显不同的是, 纳米孪晶结构具有 2 个典型微观结构特征尺寸: 即孪晶片层厚度(垂直孪晶界的尺寸)和孪晶长度(平行于孪晶界的尺寸)。由于大多数孪晶界均可穿过整个晶粒, 后者一般对应于晶粒尺寸, 因此, 这 2 个特征尺寸往往决定于具体的制备工艺。例如, 脉冲电解沉积方法制备的纳米孪晶 Cu, 晶粒尺寸普遍较大(亚微米~微米尺度), 孪晶片层厚度可在几纳米到百纳米范围内可控调节^[4], 而高速磁控溅射制备的纳米孪晶 Cu 晶粒尺寸最小仅为 50 nm 左右, 孪晶片层厚度为 5 nm^[26]。尽管如此, 孪晶长度普遍比孪晶厚度至少大一个数量级。因此, 纳米孪晶结构具

有典型的各向异性, 倾斜和平行孪晶界的位错滑移因特征尺寸的不同而遇到明显不同的阻碍(尺寸效应)^[23,24], 这直接导致 12 个滑移系不再相互等效。

fcc 金属基体和孪晶的滑移系通常可用 Thompson 双四面体表示^[27]。根据滑移系与孪晶片层的相对位向关系(图 1), 纳米孪晶金属滑移系分为以下 3 种类型: (1)硬模式 I, 滑移面和滑移方向均倾斜于孪晶界; (2)硬模式 II, 滑移面倾斜于孪晶界, 而滑移方向平行于孪晶界; (3)软模式, 滑移面和滑移方向均平行于孪晶界。根据 Thompson 双四面体, 以 (111) 晶面作为孪晶面(图 1 的 ABC 面)为例, 表 1 列出了所有滑移系的 Miller 指数及所属类型。对于硬模式 I 和 II, 滑移面倾斜于孪晶界, 位错滑移受到孪晶界限制, 承受较大阻力。而软模式中, 位错平行孪晶界或沿孪晶界滑动, 孪晶界的阻碍作用很弱^[28]。

在塑性变形过程中, 启动的滑移系属于硬模式还是软模式取决于多种因素, 如晶体取向、孪晶界取向、受力状态以及位错滑移临界应力的相对大小。一般情况下, 塑性变形的主滑移系即为获得最大分切应力的滑移系, 因此, 分析不同晶体取向和受力状态的 Schmid 因子就可以确定所对应的主滑移及其与孪晶界的位向关系, 进而确定位错滑移模式。但是, 在纳米孪晶金属中, 由于孪晶界对位错滑移阻力方向性和尺度依赖性同时存在, 还必须考虑各滑移系开动所需临界应力值。下面, 首先回顾 2 类分别具有 $<110>$ 织构的等轴纳米孪晶 Cu 和 $<111>$ 织构的柱状纳米孪晶 Cu 的主导塑性变形机制, 理解晶体学织构、孪晶界取向以及孪晶片层厚度等微观结构参数如何影响材料的宏观力学行为和微观塑性变形机制, 随后探讨利用微观变形机制的可调控

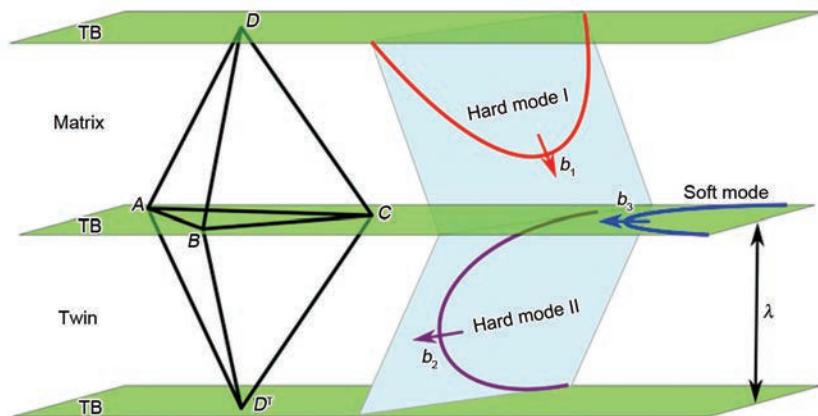


图 1 Thompson 双四面体与纳米孪晶片层的相对位向关系

Fig.1 A schematic showing the relative orientation between a double Thompson tetrahedron and twin lamellae (The double Thompson tetrahedron represents the $\{111\} <110>$ slip systems in the two adjoining lamellae and TB hereinafter represents twin boundary)

表1 fcc纳米孪晶金属的滑移系类别
Table 1 Slip system categories in fcc nanotwinned metals

No.	Category	Slip plane	Slip direction	Miller index
1	Hard mode I	DBC	DB	(111)[011]
2		DBC	DC	(111)[110]
3		DAC	DA	(111)[101]
4		DAC	DC	(111)[110]
5	Hard mode II	DAB	DA	(111)[101]
6		DAB	DB	(111)[011]
7		DBC	BC	(111)[101]
8	Soft mode	DAC	AC	(111)[011]
9		DAB	AB	(111)[110]
10		ABC	AB	(111)[110]
11	Soft mode	ABC	AC	(111)[011]
12		ABC	BC	(111)[101]

Note: Planes DBC, DAC, DAB and ABC are the faces of the Thompson tetrahedron (Fig.1), which represent the four possible {111} slip planes; and directions DB, DC, DA, BC, AC and AB are the edges of the Thompson tetrahedron (Fig.1), which correspond to the six <110> slip directions of the fcc structure

节实现宏观力学性能设计的可行性.

2 纳米孪晶金属塑性变形的3类典型位错机制

2.1 位错塞积并穿过孪晶界机制

利用脉冲电沉积技术, 本文作者前期工作^[1,4]率先制备出含有高密度纳米孪晶的纯Cu样品. 其微观结构由尺寸为400~500 nm的三维等轴超细晶粒构成, 晶粒内部则嵌入间距小于100 nm的共格孪晶界, 并且大部分孪晶界均垂直于沉积面并随机分布, 样品呈显著的<110>面外织构^[4]. 研究^[4]发现, 等轴纳米孪晶Cu的屈服强度 σ_y 随平均孪晶片层厚度 λ 的变化趋势与纳米晶体Cu中强度随晶粒尺寸的变化趋势一致, 均遵从Hall-Petch关系^[29,30]

$$\sigma_y = \sigma_0 + k_{TB} \lambda^{-1/2} \quad (1)$$

式中, σ_0 为晶格摩擦阻力, k_{TB} 为孪晶界强化的Hall-Petch斜率^[4]. 等轴纳米孪晶Cu屈服强度的Hall-Petch关系表明, 塑性变形过程中, 位错主要沿倾斜于孪晶界的{111}滑移面向孪晶界运动, 但最终因孪晶界阻滞效应而在孪晶界附近塞积. 随着变形的增加, 塞积群的领先位错在应力集中驱动下与孪晶界反应而穿过孪晶界进入下一个孪晶片层. 透射电镜(TEM)观察发现, 拉伸变形后孪晶界上往往聚集大量残余位错, 而孪晶片层内部位错密度

较低^[4,7]. 孪晶界缺陷的积累一方面降低孪晶界共格性, 使孪晶界发展为位错发射源, 但同时也提高后续位错运动的阻力, 贡献加工硬化.

原子尺度分子动力学(molecular dynamics, MD)模拟显示, 当位错穿过孪晶界时, 根据入射位错的性质和类型, 孪生界上可能产生可动Shockley位错、不可动Frank位错或位错锁以及相邻孪晶片层内的层错等. 例如, 在Cu中, 螺位错可交滑移到孪晶片层的滑移面上而不在孪晶界上留下残余位错, 而非螺位错与孪晶界相遇时可分解为进入孪晶片层的位错和留在孪晶界的可动Shockley不全位错^[31,32]. 此过程中, 孪晶界不断吸纳位错而承担较大的塑性变形.

为了理解样品中各晶粒的塑性变形, 有必要对<110>织构等轴纳米孪晶Cu的滑移系类型进行分析. 选定样品坐标系的z轴为沉积方向, x轴为面内拉伸方向(图2a). 对于理想的[110]丝织构, [110]平行z轴, 各晶粒的取向可用(111)孪晶界与x轴的夹角 α 表示. 图2b为不同取向角 α 对应的基体各滑移系的Schmid因子. 当 α 介于125°~160.5°之间时, 拉伸方向与孪晶面夹角接近45°, 软模式滑移系(表1中11, 12滑移系)具有最大的Schmid因子, 最有可能开动; 当 α 介于0°~35°和160.5°~180°之间, 即孪晶面与拉伸方向接近平行, 硬模式II滑移系(表1中7, 8滑移系)的Schmid因子最大; 当 α 取其它值时, 硬

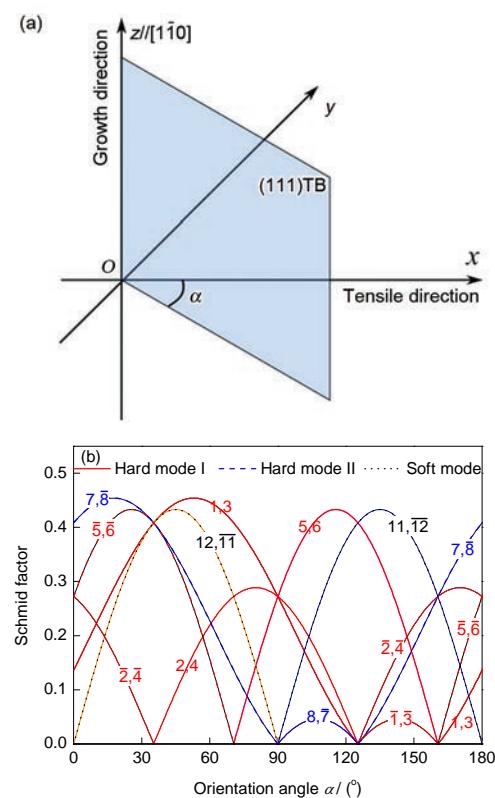


图 2 [1-10] 织构纳米孪晶 Cu 的 Schmid 因子分析

Fig.2 Schmid factor analysis in [1-10] textured nanowinned Cu

(a) schematic defining the sample coordinate
 (b) variations of Schmid factors as a function of orientation angle α (α is the angle between twin plane (111) and the loading axis, as shown in Fig.2a. The numbers in the curves hereinafter correspond to the slip system number in Table 1, with overscore numbers representing the associated slip systems with reversed slip directions, for example, $\bar{1}$ represents (1-11) [0-1-1])

模式 I 滑移系具有最大的 Schmid 因子。可见, 在 <110> 织构纳米孪晶金属中, 受孪晶界与加载轴相对取向控制, 各晶粒可能因启动不同性质的滑移系而对整体的力学响应, 如强化或加工硬化, 具有不同的贡献。Shabib 和 Miller^[33,34]认为, 这种不同孪晶取向复合效应对材料强度和韧性的匹配具有重要的贡献。

2.2 不全位错平行孪晶界滑移机制

本文作者前期工作^[35]在 <110> 织构纳米孪晶 Cu 中发现, 当平均孪晶片层厚度小于 15 nm 时, 样品屈服强度反而随孪晶片层厚度减小而降低, 而加工硬化率和拉伸塑性始终随孪晶片层厚度减小而单调增加。TEM 观察发现, 纳米孪晶金属的极值强度现象源自于主导塑性变形机制由位错穿越孪晶界

向 Shockley 不全位错沿孪晶界滑移的转变。这些 Shockley 不全位错可能来源于电沉积过程引入的生长孪晶界面上的高密度台阶^[35]。例如, 对于 4 nm 片层厚度的样品, 孪晶界上高密度沉积位错(约 10^{14} m^{-2})的运动即可贡献高达 0.2% 的塑性应变, 这可能直接导致样品宏观屈服^[35]。Li 等^[36]通过大规模 MD 模拟和位错形核动力学理论进一步揭示, 当孪晶片层厚度小于某一临界尺寸, Shockley 不全位错亦可能直接从孪晶界与晶界交接处形核, 并倾向于沿孪晶面向晶粒内部运动。在这种情况下, 位错晶界形核过程主导材料的强度和塑性变形^[36]。

实验^[35]与计算结果^[36]表明, 纳米孪晶金属中硬模式(位错穿过孪晶界)和软模式(位错沿孪晶界滑移)的竞争关系具有明显的尺度效应。一般地, 滑移系开动的条件为 $\sigma m > \tau_R$ (σ 为外加应力, m 为 Schmid 因子, τ_R 为滑移系开动的临界阻力)。细化孪晶片层可以降低 Shockley 不全位错由孪晶界台阶或孪晶界与晶界交接处形核并滑移的临界应力^[36], 即降低软模式滑移系的临界应力 τ_R 使之明显低于硬模式滑移系的临界应力, 这导致不具有最大 m 值的软模式滑移系亦可优先开动。例如, 假设软模式滑移系 τ_R 降至硬模式滑移系的 1/2, 图 2b 中 11 和 12 软模式滑移系在 α 介于 $16^\circ \sim 77^\circ$ 和 $104^\circ \sim 168^\circ$ 的晶体取向中均可优先开动, 即约 70% 的晶体取向均可开动软模式滑移系。这种尺度效应随孪晶片层厚度减小而不断增强, 因此, 当孪晶片层厚度小于某临界厚度时, 软模式位错滑移开始主导塑性变形, 导致材料出现软化现象。

2.3 贯穿位错受限滑移机制

等轴纳米孪晶的力学行为研究^[4,23]表明, 在超细晶粒内部引入随机纳米孪晶可以同时获得高强度和良好塑性。然而, 单纯引入高密度孪晶并不能保证良好的强塑性匹配。例如, 利用高速磁控溅射法^[26,37,38]和直流电解沉积技术制备的柱状纳米孪晶金属, 获得的纳米尺度孪晶大多平行于生长面, 呈 <111> 丝织构^[39,40]。室温单向拉伸测试显示, 尽管柱状纳米孪晶 Cu 仍表现出较高屈服强度, 却往往仅显示有限的拉伸塑性, 特别是晶粒尺寸较小的溅射沉积样品^[40]。拉伸方向平行于大部分孪晶界, 可能影响塑性变形过程中可动滑移系类型及其与孪晶界的位向关系和相互作用。考虑样品的 [111] 丝织构及孪晶界的择优取向分布, 如选定样品坐标系 z 轴为沉积方向, x 轴为面内拉伸方向, 则柱状纳米孪晶 Cu 内大多数晶粒

的[111]孪晶面法向平行于 z 轴, 并且各晶粒取向可由孪晶面内[1 $\bar{1}$ 0]方向与 x 轴的夹角 β 确定(图3a). 图3b为[111]织构纳米孪晶Cu不同取向角 β 对应的基体各滑移系的Schmid因子. 可见, 当拉伸方向平行孪晶面时, 表1中7~9(均为硬模式II)滑移系具有最大的Schmid因子, 最可能优先开动. 这些滑移系的共同特征是: 滑移面倾斜于孪晶界, 但滑移方向均平行于孪晶界. 而硬模式I(表1中1~6)滑移系具有较小的Schmid因子, 相对难以开动. 软模式滑移系Schmid因子均为0, 完全被抑制. 值得注意的是, 对于一些特殊取向晶粒, 变形方向平行孪晶面内<110>晶向, 即 $\beta=0^\circ, 60^\circ$ 或 120° , 硬模式I和II滑移系具有相同Schmid因子(图3b), 可能同时开动.

为了进一步理解硬模式II滑移系开动后与孪晶界的交互作用, You等^[40]观察了拉伸变形后样品的微观结构. 在<111>织构纳米孪晶中可以清楚观察到横跨于相邻孪晶界且贯穿整个孪晶片层的几组位错, 与随机取向纳米孪晶金属中位错在孪晶界附近聚集的情形明显不同. 因此, 当外加应力平行于

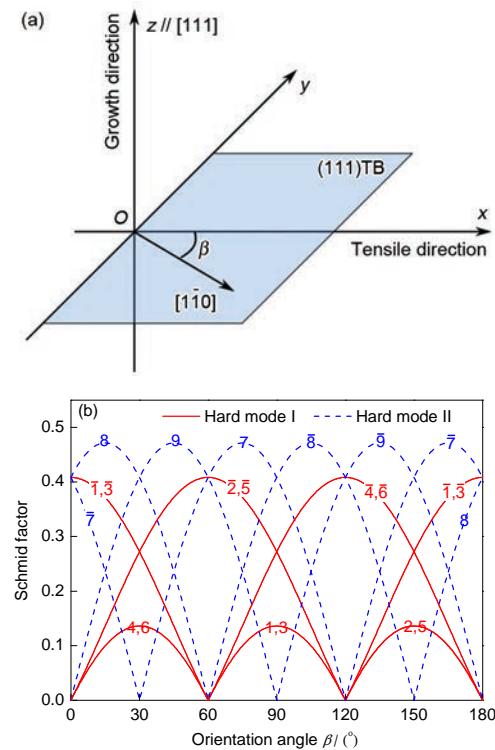


图3 [111]织构纳米孪晶Cu的Schmid因子分析

Fig.3 Schmid factor analysis in [111] textured nanotwinned Cu

- (a) a schematic defining the sample coordinate
- (b) variations of Schmid factors as a function of orientation angle β (β is the angle between [1 $\bar{1}$ 0] direction in the twin plane and the loading axis, as shown in Fig.3a)

孪晶界时, 位错形核后倾向于沿相邻孪晶界所构成的纳米片层通道向晶粒内部运动, 并最终在晶界处塞积. 这种特殊的位错行为多见于纳米多层膜或薄膜材料^[41~44], 一般称之为贯穿位错(threading dislocation). 如果贯穿位错滑移主导塑性变形过程, 则 σ_y 随 λ 的变化趋势可以用受限层滑模型(confined layer slip, CLS)表示^[41,42]:

$$\sigma_y = \sigma_{y0} + \xi \frac{\mu b}{\lambda} \ln\left(\frac{\eta\lambda}{b}\right) \quad (2)$$

式中, σ_{y0} 为位错晶格滑移阻力; μ 为剪切模量; b 为 Burgers 矢量模; ξ 和 η 为待定常数, 与位错类型、晶体取向及位错/孪晶界反应等参数有关. 利用此CLS模型, 取 $\sigma_{y0} = (72 \pm 50)$ MPa, $\xi = 0.16 \pm 0.02$, $\eta = 0.40 \pm 0.06$, 可以很好地拟合孪晶片层厚度在4.5~70 nm之间的柱状纳米孪晶Cu的实验数据^[40], 说明当拉伸方向平行于孪晶界时, 主导塑性变形的位错机制转变为贯穿位错在纳米孪晶片层内平行于孪晶界的受限滑移. 这种特殊的位错运动过程, 不但减少了不可动位错在孪晶界的积累, 降低加工硬化率, 同时由于位错倾向于在晶界附近聚集, 也导致晶界区域发生更大的塑性变形和动态回复^[40]. 因此, 硬模式II滑移系及贯穿位错受限滑移机制的开动显著影响样品整体的加工硬化, 是导致柱状纳米孪晶金属有限拉伸塑性的主要原因^[40].

3 纳米孪晶金属塑性变形的各向异性

纳米孪晶金属塑性变形具有3种不同的位错机制, 分别为位错滑移并穿过孪晶界, Shockley不全位错形核并沿孪晶界滑移, 以及贯穿位错在纳米孪晶片层内受限运动. 尽管在具有不同孪晶片层厚度和晶体学织构的样品中已观察到这3种位错行为, 但如何选择性控制某类位错机制的启动是个尚待解决的问题. 前文分析表明, 在柱状纳米孪晶Cu中, 拉伸方向平行于择优取向孪晶界导致硬模式II滑移系优先启动并主导其拉伸塑性变形. 这里, 进一步考虑其它变形方向对塑性变形过程中启动滑移系类型的影响. 对柱状纳米孪晶金属, 仍然选择如图3a所示的样品坐标系, 则沿 $-z$ 和 $-(z+x)$ 方向压缩时变形方向与孪晶界分别呈 90° 和 45° 夹角. 图4显示这2个压缩方向下不同取向角 β 对应的基体各滑移系的Schmid因子. 可以看出, 相对于孪晶界的变形方向可以显著改变起主导滑移系与孪晶界的位向关系. 对于 90° 压缩, 只有滑移面和滑移方向均倾斜于孪晶界的硬模式I滑移系(表1中1~6滑移系)的Schmid因子均为0.272, 如图4a所示. 因此, 硬模式I

的 6 个滑移系可以等效开动。而其余的硬模式 II 和软模式滑移系因分切应力均为 0 而被完全限制。对

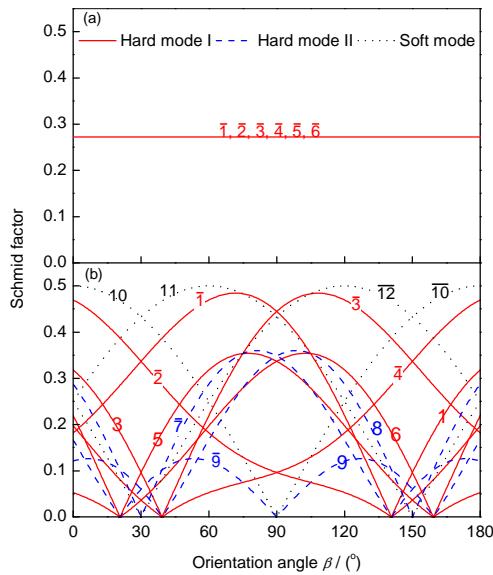


图 4 [111] 织构纳米孪晶 Cu 相对于孪晶界不同方向压缩的 Schmid 因子分析

Fig.4 Variations of Schmid factors as a function of orientation angle β in [111] textured nanotwinned Cu compressed in different directions with respect to (111) twin plane (Orientation angle β and the sample coordinate are defined as shown in Fig.3a)

(a) 90° (b) 45°

于 45° 压缩实验, 孪晶面具有最大的分切应力。图 4b 显示平行孪晶界的软模式滑移系(表 1 中 10~12 滑移系)在 45° 压缩时获得最大 Schmid 因子而可能优先开动。综合这些分析, 柱状纳米孪晶金属相对于孪晶界 90°, 0° 和 45° 塑性变形中开动的滑移系分别属于硬模式 I, 硬模式 II 和软模式。

不同方向的压缩实验有助于进一步理解不同滑移系类型的开动对纳米孪晶金属的强度、塑性和加工硬化行为的影响^[45]。结果表明, 对于 90° 压缩和 0° 压缩, 样品具有较高强度, 屈服强度分别为 (598 ± 31) 和 (463 ± 16) MPa, 但均表现出较小的加工硬化能力。与此明显不同的是, 45° 压缩使样品在较低应力 (230 ± 19) MPa 下屈服, 但是样品屈服后表现出较强的加工硬化能力。加载方向的变化可以显著影响纳米孪晶金属的屈服强度和加工硬化行为。90° 压缩屈服强度与 0° 压缩和 45° 压缩屈服强度比值分别为 1.29 和 2.65, 明显高于考虑了样品织构的 Taylor 模型预测值^[45], 因此, 具有择优取向纳米孪晶的纯 Cu 样品显著的力学各向异性不仅与其较强的<111>织构有关, 更可能源自微观结构上位错与孪晶界的交互作用的取向依赖性。压缩变形后样品 TEM 观察证明, 不同滑移系开动后与孪晶界的交互作

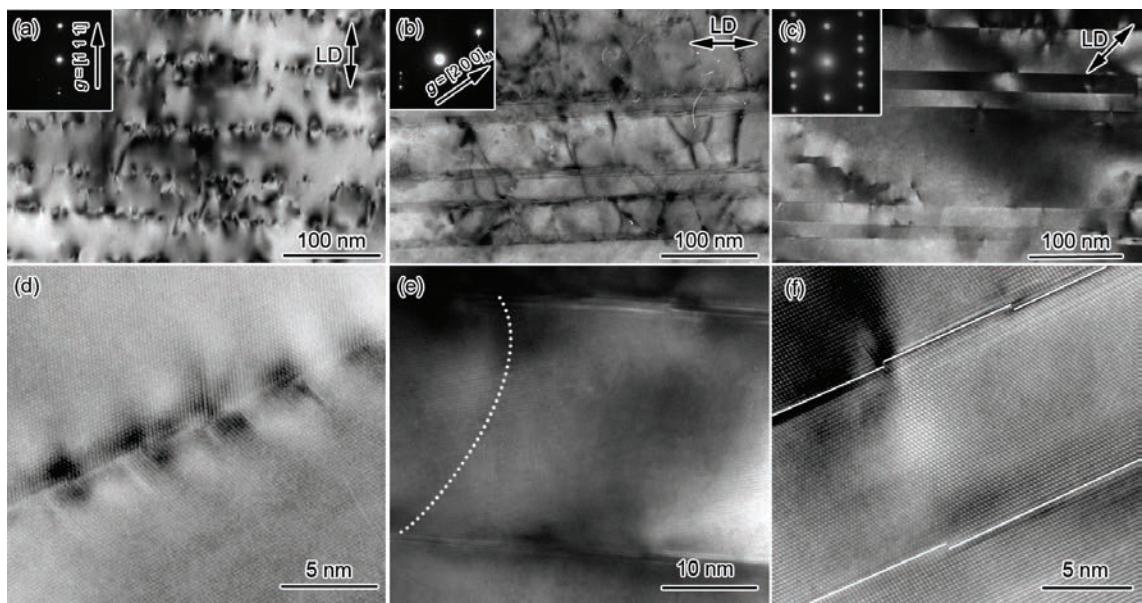


图 5 柱状纳米孪晶 Cu 相对于孪晶界不同方向压缩变形的微观结构观察^[45]

Fig.5 Microstructure observations of columnar-grained nanotwinned Cu compressed at 90°, 0°, and 45° with respect to TBs^[45] (LD represents the loading direction. To reveal the dislocation types more clearly, tilting experiments were carried out, and Figs.5a and b are bright-field images under two-beam conditions with $g=[111]$ (normal to twin boundary) and $g=[200]_M$ (where M represents matrix lamellae), respectively)

(a, d) 90° compression with a strain of about 5%

(b, e) 0° compression with a strain of about 6%

(c, f) 45° compression with a strain of about 7%

用机制不同。与沉积态样品平直干净的共格孪晶界相比, 90°压缩变形后孪晶界上出现高密度位错(图5a)^[45]。图5d^[45]高分辨TEM图像清楚显示了集中于孪晶界附近的位错形态。这些位错可能是塞积于孪晶界的入射位错, 或是位错与孪晶界反应后留下的Shockley不全位错或Lomer-Cottrell位错锁, 这与位错理论分析和MD模拟结果相符^[46-48]。在这种情况下, 高密度孪晶界有效阻碍位错滑移, 从而贡献了高强度。而0°压缩变形后微观形貌多为穿过整个孪晶片层的贯穿位错和较少的残留在孪晶界的位错(图5b^[45])。高倍图像(图5e^[45])显示, 在这种情况下, 孪晶界上并无类似于90°压缩变形后形成的塞积位错或层错。这说明当变形方向平行于孪晶界时, 位错倾向于在相邻孪晶界约束下沿孪晶片层向晶粒内部运动。此时, 位错滑移并未直接受孪晶界阻碍, 而是仅受相邻孪晶界的约束, 因此, 纳米孪晶金属表现出相对较低的强度。

与90°和0°压缩变形导致孪晶界或孪晶片层内部高密度位错聚集的情况明显不同, 45°压缩变形后孪晶片层内部只存在少量位错(图5c^[45]), 但孪晶界上存在高密度的Shockley不全位错台阶(图5f^[45])。Shockley不全位错往往在孪晶界与晶界的交接处形核并沿孪晶界滑动, 导致孪晶界迁移和孪生或退孪生^[49-51]。需要强调的是, 位错易于沿共格孪晶界滑动是纳米孪晶结构的重要特性, 明显不同于其它具有非共格界面的层状材料。而45°压缩变形过程中, 不全位错沿孪晶界滑移和增殖是样品表现出显著加工硬化的重要原因。

不同加载方向压缩实验和微观结构观察证明, 改变加载轴与孪晶界的相对方向可以有目的地改变纳米孪晶金属的塑性变形机制。垂直孪晶界时, 位错滑移并穿过孪晶界的过程起主要作用, 滑移系属于硬模式I; 平行孪晶界时, 变形机制转变为孪晶片层内贯穿位错受限滑移, 滑移系属于硬模式II; 与孪晶界呈45°时, Shockley不全位错沿孪晶界滑移及孪晶界迁移开始控制塑性变形, 滑移系属于软模式。随纳米孪晶金属塑性变形位错机制的改变, 其宏观力学行为, 如屈服强度、加工硬化率及塑性变形能力等均发生明显变化。孪晶界主导位错行为的取向依赖性是导致择优取向纳米孪晶金属强塑性各向异性的主要原因。

4 结语与展望

利用大量实验测试、微观结构观察, 并结合计算模拟和理论分析可不断加深对纳米孪晶金属塑性变形机制的理解。纳米孪晶金属的微观结构参数(如孪晶片层厚度、孪晶长度、晶粒取向以及孪晶界取向等)均可影响其塑性变形中的具体位错机制和宏观力学行为。但是, 如何有目的地设计这些微观结构参数的组合以获得综合力学性能的最优化仍是尚未解决的问题, 需要进一步优化样品制备工艺和完善晶体塑性模型计算。

目前, 大部分研究主要集中在纳米孪晶Cu, 而其它类型纳米孪晶金属的塑性变形机制尚缺乏系统研究^[52-54]。特别是材料层错能在很大程度上可能改变不同模式滑移系的竞争关系, 影响孪晶界主导的强化、塑性和孪晶界稳定性^[21,22]。即使在纳米孪晶Cu中, 力学行为也仍存在许多不清楚的问题。例如, 纳米孪晶金属塑性变形初期位错如何形核与扩展? 复杂应力状态是否影响主导纳米孪晶塑性变形的位错机制? 以上问题的理解对纳米孪晶结构断裂韧性和损伤容限问题研究尤显重要。

参考文献

- [1] Lu L, Shen Y F, Chen X H, Qian L H, Lu K. *Science*, 2004; 304: 422
- [2] Lu K, Lu L, Suresh S. *Science*, 2009; 324: 349
- [3] Zhu T, Li J. *Prog Mater Sci*, 2010; 55: 710
- [4] Shen Y F, Lu L, Lu Q H, Jin Z H, Lu K. *Scr Mater*, 2005; 52: 989
- [5] Zhang X, Misra A, Wang H, Nastasi M, Embury J D, Mitchell T E, Hoagland R G, Hirth J P. *Appl Phys Lett*, 2004; 84: 1096
- [6] Zhang X, Misra A, Wang H, Shen T D, Nastasi M, Mitchell T E, Hirth J P, Hoagland R G, Embury J D. *Acta Mater*, 2004; 52: 995
- [7] Lu L, Schwaiger R, Shan Z W, Dao M, Lu K, Suresh S. *Acta Mater*, 2005; 53: 2169
- [8] Chen X H, Lu L. *Scr Mater*, 2007; 57: 133
- [9] Chen X H, Lu L, Lu K. *Scr Mater*, 2011; 64: 311
- [10] Lu L, You Z S, Lu K. *Scr Mater*, 2012; 66: 837
- [11] Shute C J, Myers B D, Xie S, Barbee Jr T W, Hodge A M, Weertman J R. *Scr Mater*, 2009; 60: 1073
- [12] Shute C J, Myers B D, Xie S, Li S Y, Barbee Jr T W, Hodge A M, Weertman J R. *Acta Mater*, 2011; 59: 4569
- [13] Hodge A M, Furnish T A, Shute C J, Liao Y, Huang X, Hong C S, Zhu Y T, Barbee Jr T W, Weertman J R. *Scr Mater*, 2012; 66: 872
- [14] Pan Q S, Lu Q H, Lu L. *Acta Mater*, 2013; 61: 1383
- [15] Singh A, Tang L, Dao M, Lu L, Suresh S. *Acta Mater*, 2011; 59: 2437
- [16] Shen Y F, Lu L, Dao M, Suresh S. *Scr Mater*, 2006; 55: 319
- [17] Lu L, Dao M, Zhu T, Li J. *Scr Mater*, 2009; 60: 1062

- [18] Lu L, Zhu T, Shen Y, Dao M, Lu K, Suresh S. *Acta Mater*, 2009; 57: 5165
- [19] Wu Z X, Zhang Y W, Srolovitz D J. *Acta Mater*, 2009; 57: 4508
- [20] Wu Z X, Zhang Y W, Srolovitz D J. *Acta Mater*, 2011; 59: 6890
- [21] Asaro R J, Kulkarni Y. *Scr Mater*, 2008; 58: 389
- [22] Kulkarni Y, Asaro R J. *Acta Mater*, 2009; 57: 4835
- [23] Dao M, Lu L, Shen Y F, Suresh S. *Acta Mater*, 2006; 54: 5421
- [24] Jerusalem A, Dao M, Suresh S, Radovitzky R. *Acta Mater*, 2008; 56: 4647
- [25] Asaro R J, Suresh S. *Acta Mater*, 2005; 53: 3369
- [26] Zhang X, Wang H, Chen X H, Lu L, Lu K, Hoagland R G, Misra A. *Appl Phys Lett*, 2006; 88: 173116
- [27] Hartley C S, Blachon D L A. *J Appl Phys*, 1978; 49: 4788
- [28] Zhu T, Gao H. *Scr Mater*, 2012; 66: 843
- [29] Hall E O. *Proc Phys Soc London*, 1951; 64B: 747
- [30] Petch N J. *J Iron Steel Int*, 1953; 174: 25
- [31] Jin Z H, Gumbsch P, Ma E, Albe K, Lu K, Hahn H, Gleiter H. *Scr Mater*, 2006; 54: 1163
- [32] Jin Z H, Gumbsch P, Albe K, Ma E, Lu K, Gleiter H, Hahn H. *Acta Mater*, 2008; 56: 1126
- [33] Shabib I, Miller R E. *Modell Simul Mater Sci Eng*, 2009; 17: 055009
- [34] Shabib I, Miller R E. *Acta Mater*, 2009; 57: 4364
- [35] Lu L, Chen X, Huang X, Lu K. *Science*, 2009; 323: 607
- [36] Li X, Wei Y, Lu L, Lu K, Gao H. *Nature*, 2010; 464: 877
- [37] Merz M D, Dahlgren S D. *J Appl Phys*, 1975; 46: 3235
- [38] Hodge A M, Wang Y M, Barbee Jr T W, *Scr Mater*, 2008; 59: 163
- [39] Anderoglu O, Misra A, Wang J, Hoagland R G, Hirth J P, Zhang X. *Int J Plast*, 2010; 26: 875
- [40] You Z S, Lu L, Lu K. *Acta Mater*, 2011; 59: 6927
- [41] Misra A, Hirth J P, Hoagland R G. *Acta Mater*, 2005; 53: 4817
- [42] Nix W. *Metall Mater Trans*, 1989; 20A: 2217
- [43] Freund L B. *J Appl Mech*, 1987; 54: 553
- [44] Matthews J W, Blakeslee A E. *J Cryst Growth*, 1975; 29: 273
- [45] You Z, Li X, Gui L, Lu Q, Zhu T, Gao H, Lu L. *Acta Mater*, 2013; 61: 217
- [46] Deng C, Sansoz F. *Acta Mater*, 2009; 57: 6090
- [47] Deng C, Sansoz F. *Nano Lett*, 2009; 9: 1517
- [48] Cao A J, Wei Y G, Mao S X. *Appl Phys Lett*, 2007; 90: 151909
- [49] Hu Q, Li L, Ghoniem N M. *Acta Mater*, 2009; 57: 4866
- [50] Li L, Ghoniem N M. *Phys Rev*, 2009; 79B: 075444
- [51] Jang D, Li X, Gao H, Greer J R. *Nat Nanotechnol*, 2012; 7: 594
- [52] Idrissi H, Wang B, Colla M S, Raskin J P, Schryvers D, Pardoens T. *Adv Mater*, 2011; 23: 2119
- [53] Bufford D, Wang H, Zhang X. *Acta Mater*, 2011; 59: 93
- [54] Lu K, Yan F K, Wang H T, Tao N R. *Scr Mater*, 2012; 66: 878

(责任编辑:肖素红)