

·学科进展·

固体尺度效应宏微观关联理论和方法的研究进展

魏悦广*

(中国科学院力学研究所非线性力学开放实验室,北京 100080)

[摘要] 简要综述了近年来微米尺度金属试样的实验结果及尺度效应现象、关于考虑尺度效应的唯象学理论——塑性应变梯度理论、关于金属/陶瓷界面断裂的宏、微观理论结果的差异及尺度效应、关于薄膜脱胶问题的尺度效应及近年来提出和发展的几种材料细观结构的断裂过程区模型。较系统地刻划了固体力学尺度效应宏微观相互关联的理论和方法。

[关键词] 尺度效应, 塑性应变梯度理论, 薄膜脱胶, 断裂过程区模型

近年来,随着人们对固体材料强度和破坏机理研究和探索的不断深入,同时也随着实验技能的不断提高,人们对材料力学行为的认识已由宏观层次逐步向着细、微观层次不断深入。通过对一些新现象的探索和研究,例如对金属材料在细观层次所表现出的尺度效应的研究,已经带动了一新的、更精细的并计及尺度效应的唯象学理论——塑性应变梯度理论的提出、不断完善及进一步应用。在此基础上,结合材料破坏的细观结构断裂过程区模型,可刻划出材料由细观微结构特征到宏观力学行为的全过程。人们试图通过这一思路,进一步建立一细观的关联理论以实现与微观理论和与考虑尺度效应的宏观唯象学理论之间的尺度关联,从而最终实现从微观、细观到宏观各层次间比较完整地、系统性地尺度关联。

值得指出的是,近年来在固体尺度效应和跨尺度关联方面的研究中,我国学者也做出了大量的开拓性的工作。限于篇幅,本文仅就国际上近年来围绕尺度效应唯象学理论开展的宏微观关联研究作一简要综述。

1 尺度效应

在金属材料的宏观实验中通常所得到的一些普遍性结论也可在传统弹塑性理论的框架下直接进行预测,例如:压痕实验中所测量出的材料硬度值与所采用的刚性压头的尺度无关;由扭转试验测出的材

料剪应力应变曲线仍是单一曲线,与试样直径等几何量无关;由板弯曲试验测出的材料应力应变曲线仍是单一曲线,与板的厚度等几何参量无关,等等。近年来,随着实验技能的提高,人们对更小型的试样甚至对微型试样进行上述实验,其结果揭示出不少由宏观实验和传统理论难以给出及预测出的新现象。例如:Stelmashenko 等人^[1]对单晶钨材料所做的压痕实验和 Ma 等人^[2]对单晶铜做的压痕实验,均测出材料硬度值当压头直径(在材料表面处的尺寸)小于 10 微米后随压头尺寸的减小急剧上升;Fleck 等人^[3]在对纯铜所做的扭转实验时测出的材料剪应力应变曲线当试样的直径小于 30 μm 后随直径的减小也急剧上升;Stolken 等人^[4]近来在对镍材料板试样所做的弯曲实验中所测出的弯曲应力应变曲线当板的厚度小于 25 μm 后随板厚度的减小急剧上升,等等。上述各现象均为尺度效应。对脆性材料来说,特别是对脆性工程材料,如陶瓷和混凝土等,这种尺度效应早在几个世纪以前就已经被人们所认知^[5],在此情况下,尺度效应即使是在宏观层次也很明显。然而对于金属材料,特别是对如前所述的纯的金属材料,尺度效应的发现则是在近年来而且是在微米层次。如何描述金属材料这种尺度效应呢?显然由传统弹塑性理论是无法刻划这种尺度效应的,因为在传统弹塑性理论中(本构关系中)没有任何表征长度变化的特征参量。为此,近年来相继提出和发展了不同类型、不同形式的新理论——塑

* 1999 年度国家杰出青年科学基金获得者。
本文于 2000 年 2 月 28 日收到。

性应变梯度理论^[6-10],以刻划材料的上述尺度效应。塑性应变梯度理论的结构特征可简述为:在传统弹塑性理论的框架下,增加考虑位移二阶导数项(应变梯度项)的影响(以不变量形式出现在本构关系中),而这些应变梯度不变量与传统应变不变量之间在长度量纲上将存在差异,为此,在本构关系中引入了若干个长度参量对两者进行量纲匹配,而由这些长度参量刻划上述金属材料在微米层次所表现的尺度效应;在传统弹塑性理论可适用的范围,应变梯度项的影响可忽略不计。为了保持理论的完整性,也相应地定义了与应变梯度功共轭的应力梯度量,并发展了适合应变梯度情况的数值方法^[11]。通过将塑性应变梯度理论应用于刻划金属材料的尺度效应,可见该理论是成功的。例如 Begley 等人^[12]分析了压痕实验;Fleck 等人^[3]分析了铜丝的扭转现象;Stolken 等人^[4]分析了镍材料板弯曲时的现象。应用塑性应变梯度理论可以有效地刻划金属材料在微米层次所表现出的尺度效应,同时人们也注意到微米尺度恰好也是微机械的尺度层次和范围^[13-15],要实现微机械的可靠性设计并最终实现其可靠性工作,对微机械机理的正确认识和合理刻划将是非常重要的。期望应变梯度理论的应用将有助于实现上述目标。

2 界面断裂问题的尺度效应

除了上述基本力学问题所存在的尺度效应之外,界面的断裂问题也存在尺度效应。例如,金属/陶瓷的界面断裂现象,当裂纹沿界面扩展时,如果从微观理论(如电子密度泛函理论)直接计算并得到界面的分离应力的峰值,该值可达到大约 10 Gpa^[16,17],但由传统的弹塑性理论分析得到界面的分离应力峰值最大只能达到大约 1 Gpa^[18-21]。近来 Lipkin 等人^[22]的陶瓷/金属界面断裂实验也显示出界面的分离应力对于强界面来说可以达到很高的值;可以通过界面处理的工艺手段实现强弱界面。例如,他们通过不同的界面处理工艺,可获得不同强度的界面。然而对于不同强弱的界面,裂尖的断裂韧性值变化并不大,而断裂所需的外力功却有很大的变化,甚至可相差一百多倍。这说明强弱界面的主要差异表现在分离应力的大小上。而由传统弹塑性理论无法预测强界面的力学特征。对于刻划象裂纹扩展这种具有能量耗散的过程,需要发展塑性应变梯度流动理论并由该理论来描述。Wei 等人^[23]基于 Fleck 和 Hutchinson^[7]塑性应变梯度理论的框架

发展了塑性应变梯度流动理论,严格推导出应变梯度流动理论的完整结构,依此为基础分析了裂纹的定常扩展问题,结果显示裂纹扩展时裂纹前方分离应力的峰值可达到材料屈服应力的 10 倍以上。从而实现了微观理论结果与宏观唯象学理论结果之间的尺度关联。

3 薄膜脱胶问题的尺度效应

进一步运用 Wei 和 Hutchinson^[23]的塑性应变梯度流动理论探讨薄膜脱胶机理及尺度效应。对于薄膜脱胶问题而言,薄膜厚度的影响以及塑性变形的表征将是问题的关键。对于金属薄膜沿陶瓷基界面的脱胶或者陶瓷渡层沿金属基界面的脱胶问题,如果采用传统弹塑性理论进行分析(即不考虑尺度效应),随着薄膜厚度的减小,薄膜脱胶时将发生大范围的塑性屈服现象,随着界面粘结强度的增加,塑性变形急剧增大以致于塑性变形完全屏蔽了界面裂纹的扩展,故无法由传统理论预测强界面的脱胶现象^[21,24]。采用塑性应变梯度流动理论进行分析,即考虑尺度效应,塑性变形的大小则是确定的值,薄膜脱胶时分离应力的峰值、总体断裂韧性以及薄膜中残余应力的大小将是塑性应变梯度理论中微尺度参量的函数^[25],如此可通过实验方法测出微尺度参量的具体取值。

4 细观结构断裂过程区模型

在研究界面断裂或薄膜脱胶问题时,除了通过塑性应变梯度理论中的特征长度来刻划材料的尺度效应之外,通常还通过定义微尺度层次的不同断裂过程区模型来建立微结构对材料宏观特性的影响。其中几个主要的断裂过程区模型为:(1)相嵌断裂过程区模型^[18,19,26]。该模型是基于裂纹面分离应力与张开位移的关系(该关系最初由微观过程模拟得出)发展起来的,即在这个关系的基础上,该模型将裂纹面的分离过程假设为拉断—分布的非线性弹簧的过程来刻划,由弹簧的变形能和弹簧中承受载荷的峰值刻划裂纹尖端抵抗断裂破坏的能力;其中变形能表示断裂韧性,载荷的峰值表示材料抵抗断裂的能力。材料的宏观力学特征将完全由这两个细观结构参量刻划;(2)无位错核模型^[27]。这是基于裂纹扩展的实验观测现象发展起来的,即裂纹扩展时由实验观测出裂尖始终存在一微小的无位错发射的弹性核随裂尖一起向前移动。如果在平面应变条件下考虑这个细观结构,将它的弹性核的厚度作

为一细观参量(为简化模型,通常假设弹性核的长度远大于其厚度),另外取环绕裂尖的J积分路径位于弹性核内,通过计算J积分可得到裂尖的断裂韧性。这样可由弹性核的厚度和裂尖断裂韧性两个参量刻画裂纹扩展时材料的宏观力学特征;(3)统一模型^[28]。对于相嵌断裂过程区模型与无位错核模型,从表面上看似乎是两个完全独立无关的模型,但实际上两个模型是有联系的。如果考虑统一模型为无位错核模型在裂纹尖端前方弹性核内有一粘聚力区,粘聚力区由连续分布的非线性弹簧来刻画,当弹簧的刚度趋于无限大时,则对应无位错核模型;当弹簧的刚度接近于常规弹簧刚度时,则对应于相嵌断裂过程区模型。这样前两个模型就分别是统一模型的特例——极限情况。真实的断裂过程区可能就象统一模型描述的这样,既有无位错发射的弹性核存在,又有一使裂纹面相互分离的粘聚力断裂过程区。可见统一模型比较全面地、完整地表征了材料的实际断裂过程。统一模型包括三个模型参数,即:裂尖断裂韧性,弹性核厚度以及弹簧承受力的峰值。

上述模型虽然简单,而它们均能够在较大程度上通过几个细观结构参量表征出材料强度、韧性、断裂和破坏等总体性能。

5 结论与讨论

有了考虑微尺度效应的唯象学理论——塑性应变梯度理论,可以直接对固体由宏观到细观的行为进行描述和刻画;结合细观结构的断裂过程区模型,可对固体材料的力学特性进行模拟和预测。为了对材料由微观到宏观的整体性能进行预测,实现由微观到宏观理论间的尺度关联,基于上述尺度效应的唯象学理论,可进一步发展——既可与微观理论相关联又能够与计及尺度效应的唯象学理论相关联的细观理论。首先通过这一理论,实现塑性应变梯度理论中微尺度的系统性取值。

与以往固体尺度效应关联理论和方法的框架的构思不同,这里由考虑尺度效应的塑性应变梯度理论代替传统弹塑性理论。这样做可以极大地缩小细观尺度的范围,从而可有效地减小细观尺度范围内材料的复杂性和困难,有助于建立和实现从微观到宏观的尺度关联。

参 考 文 献

- [1] Stelmashenko N A, Walls M G, Brown L M et al. Microindentations on W and Mo oriented single crystals: An STM study. *Acta Metall Mater.*, 1993, **41**: 2 855.
- [2] Ma Q, Clarke D R. Size dependent hardness of single crystals. *J. Mater. Res.*, 1995, **10**(4): 853.
- [3] Fleck N A, Muller G M, Ashby M F et al. Strain gradient plasticity: Theory and experiment. *Acta Metall. Mater.*, 1994, **42**: 475.
- [4] Stolken J S, Evans A G. A microbend test method for measuring the plasticity length scale. *Acta Mater.*, 1998, **46**: 5 109.
- [5] Bazant Z, Chen E P. Scaling of structural failure. *Appl. Mech. Rev.*, 1997, **50**(10): 593.
- [6] Fleck N A, Hutchinson J W. A phenomenological theory for strain gradient effects in plasticity. *J. Mech. Phys. Solids*, 1993, **41**(12): 1 825.
- [7] Fleck N A, Hutchinson J W. Strain gradient plasticity. *Adv. Applied Mech.*, 1997, **33**: 295.
- [8] Gao H, Huang Y, Nix W D, Hutchinson J W. Mechanism-based strain gradient plasticity-I. Theory. *J. Mech. Phys. Solids*, 1999, **47**: 1239.
- [9] Aifantis E C. On the role of gradients in the localization of deformation and fracture. *Int J. Engng. Sci.*, 1992, **30**: 1279.
- [10] 黄克智,黄永刚编著. 固体本构关系,北京:清华大学出版社,1999: 383.
- [11] Chen J Y, Wei Y, Huang Y et al. The crack tip fields in strain gradient plasticity: the asymptotic and numerical analyses. *Eng. Fract. Mech.*, 1999, **64**: 625.
- [12] Begley M R, Hutchinson J W. The mechanics of size-dependent indentation. *J. Mech. Phys. Solids*, 1998, **46**(10): 1 089.
- [13] Ho C M, Tai Y C. Micro-electro-mechanical-systems(MEMS) and fluid flows. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 1998, **30**: 579.
- [14] 余寿文. 复杂微力-电系统的微尺度力学,力学进展,1995, **25**(2): 249.
- [15] 魏悦广. 机械微型化所面临的科学难题——尺度效应,世界科技研究与发展,1999, **21**(6).
- [16] Hong T, Smith J R, Srolovitz D J. Theory of metal-ceramic adhesion. *Acta metall. Mater.*, 1995, **43**(7): 2 721.
- [17] Evans A G, Hutchinson J W, Wei Y. Interface adhesion: effects of plasticity and segregation. *Acta mater.*, 1999, **47**(15): 4 093.
- [18] Tvergaard V, Hutchinson J W. The relation between crack growth resistance and fracture process parameters in elastic-plastic solids. *J. Mech. Phys. Solids*, 1992, **40**: 1 377.
- [19] Tvergaard V, Hutchinson J W. The influence of plasticity on mixed mode interface toughness. *J. Mech. Phys. Solids*, 1993, **41**: 1 119.
- [20] Wei Y, Hutchinson J W. Mixed mode interface toughness of metal/ceramic joints. *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, 1996, **409**: 163.
- [21] Wei Y, Hutchinson J W. Nonlinear delamination mechanics for thin films. *J. Mech. Phys. Solids*, 1997, **45**(7): 1 137.
- [22] Lipkin D M, Clarke D R, Evans A G. Effect of interfacial carbon on adhesion and toughness of gold-sapphire interfaces. *Acta Mater.*, 1998, **46**(13): 4 835.
- [23] Wei Y, Hutchinson J W. Steady-state crack growth and work of fracture for solids characterized by strain gradient plasticity. *J. Mech. Phys. Solids*, 1997, **45**(8): 1 253.
- [24] Wei Y, Hutchinson J W. Interface strength, work of adhesion and plas-

[1] Stelmashenko N A, Walls M G, Brown L M et al. Microindentations on W and Mo oriented single crystals: An STM study. *Acta Metall Mater.*

- ticity in the peel test. *Int. J. Fracture*, 1998, **93**: 315.
- [25] 魏悦广. 金属薄膜沿陶瓷基界面脱胶的微尺度力学研究, *中国科学 A*, 2000, **30**(2).
- [26] Needleman A. A continuum model for void nucleation by inclusion debonding. *J. Applied Mech.*, 1987, **54**: 525.
- [27] Suo Z, Shih C F, Varias A G. A theory for cleavage cracking in the presence of plastic flow. *Acta metall. Mater.*, 1993, **41**: 1 551.
- [28] Wei Y, Hutchinson J W. Models of interface separation accompanied by plastic dissipation at multiple scales. *Int. J. Fracture*, 1999, **95**: 1.

RESEARCH ADVANCES OF MACROSCOPIC/MICROSCOPIC THEORIES OF LINKAGE FOR SIZE EFFECTS OF SOLIDS

Wei Yueguang

(LNM, Institute of Mechanics, CAS, Beijing 100080)

Abstract A concise review for the research advances of the macroscopic/ microscopic theories of linkage on size effects of solids is presented in the paper. The main considerations include the following cases. Firstly, the recent experimental results and size effect phenomena of pure metal specimens with micro-scale size are summarized. Secondly, strain gradient plasticity theory, which is a size effect consideration and a phenomenological theory is introduced. Thirdly, the difference between macroscopic theory results and microscopic theory results for metal/ceramic interface cracking and size effects are discussed. Fourthly, size effects in thin film delamination are proposed. Finally, the commonly used several fracture process zone models with microstructures are reviewed. The contents described above delineate the linkage of macroscopic/ microscopic theories for size effects of solids systematically.

Key words size effects, strain gradient plasticity, thin film delamination, fracture process zone models

·资料·信息·

朱作言副主任会见留美学者杨向中博士



2000年5月12日下午,国家自然科学基金委员会副主任朱作言院士会见了著名留美学者杨向中博士。杨向中博士是美国康涅狄格大学动物系副教授和生物技术中心转基因动物实验室主任,2000年晋升为全职教授。

1999年6月,杨向中博士领导的研究小组宣布了小牛AMY的诞生。这是美国第一次用成年动物体细胞克隆的动物,为此,杨向中博士获得了极高的荣誉和获得多项的奖励,中国驻美国大使馆为庆祝他在克隆研究上的成就而举行了专门的宴会。

在会见时,杨向中博士就继续作好双方共同资助的旨在吸引海外留学人员为国服务的“中国桥”项目和更好地发挥海外留学人员的作用提出了建议,并希望国内高度重视克隆研究。朱作言副主任希望海外高水平的留学人员能参与国家自然科学基金项目的评审工作,以促进基金项目的评审机制与国际接轨,同时,他还希望海外学者能为提高国内学术刊物的水平和帮助国内学者在海外高水平学术刊物发表论文作出贡献。

(国际合作局 汤锡芳 供稿)