

## 科普引子 - 材料力学行为中的尺度效应

作者：李巨等 2010/1/14

工程师在设计桥梁、汽车、飞机的时候，需要知道材料的“本构关系”，也就是一块材料在什么应力状态下开始屈服，以什么样的方式变形以至断裂失效等，据以确定其许用应力和安全系数。如果清楚的知道了材料的本构关系，那么很多工程设计（比如斜拉桥还是悬索桥）都可以在计算机里进行，而无需进行多次实体试验。比如现在每一年推出的新款汽车，业界利用计算机仿真已省去了很多的实体碰撞试验；新款汽车的安全性能在知道高性能钢材的本构关系后，可以相当有效的利用计算机模拟进行预测和设计，从而节省了大量的新车研发时间和开支。

汽车、飞机等都是宏观的机器或工具，它们的组件是肉眼可见的。在人类发展的历史上，大部份利用的是这种宏观工具。所以，对它们所用材料的本构关系和性能指标（比如大块钢材、铜、钛合金等）是有比较成熟的认识的。然而，自二十世纪五十年代以来，尤其是八十年代之后，大量的微米甚至纳米尺度机器开始出现在我们生活中。（1000微米=1毫米，1000纳米=1微米）。比如我们用的计算机芯片或手机芯片，里面的金属导线截面已经达到了100纳米尺度，甚至更低。设计这样的芯片也需要知道材料的本构关系，但我们对这种微尺度材料的本构关系所知远少于对传统宏观尺度材料的认识。

在上世纪五十年代，英国材料学家 Ernest Hall 和 Norman Petch 首次发现了材料中一个相当普遍的现象<sup>1-2</sup>，即材料的强度（所能承受的极限应力）与材料的某种特征尺度成一种负幂律关系。结果便是“尺度愈小、强度愈高”。比如，大家可能知道宏观的纯金是一种相当软的材料，用手可以轻而易举地使宏观的金线发生塑性变形。然而，利用先进的纳米压头和测试表征仪器，科学家发现当金线的直径小到纳米尺度时，这种纳米金线的强度能比宏观金线提高几十倍。请注意这里材料本身的化学成分，也就是纯金，并没有改变；而器件形状，如金线的长宽比，也没有改变。导致强化几十倍的原因只是材料外观的绝对尺度由厘米量级缩小为纳米量级。这种尺度效应，归根结底，是由材料内部微观缺陷（如位错、晶界、空位）的多体动力学导致的。

提到缺陷，大家都知道材料是由原子构成的；如果无限多的原子像士兵一样排起整齐的阵列，这就是完美的单晶。完美单晶的力学性质是比较简单的：它的强度非常高，称为理想强度<sup>3</sup>。但实际材料不是完美的单晶，实际强度可以比理想强度小很多。这是因为材料内部总有一些排列不整齐的原子，构成了所谓缺陷(defects)。比如，材料的表面就被认为是一种缺陷。这些缺陷的形核（也就是诞生）、运动和相互作用，很大程度上决定了材料的力学性质，也就是本构关系。许多微观缺陷在一起构成了所谓的“微组织”（microstructure）。材料学的一个中心思想就是“（很多）材料性质是由微组织控制的（Microstructure determines properties）”。仔细观察研究微组织的演化是材料工作者的特长，也就是材料科学基于物理、化学但又不同于物理、化学的主要原因之一。

在我国西安交通大学的金属材料强度国家重点实验室，科学家们专心研究材料的本构关系及其影响因素，包括从建造汽车、飞机等的传统金属材料，到应用于纳米技术如微电子和纳米机电系统（Nano-Electro-Mechanical System）的金属和半导体材料。由于纳米尺度材料的强度比传统材料大很多，设计和应用纳米器件需要一套完全不同的本构关系。在这个国家重点实验室 2009 年新成立的微纳尺度材料行为研究中心（[CAMPnano.org](http://CAMPnano.org)），科学家们正在利用国际最先进的材料表征和力学测试设备，探索微纳米尺度材料的本构关系以及内部微观缺陷的动力学。

古人说得好：“穷幽极微”，“析毫剖芒”。材料内部的一种主要缺陷叫位错，是一种类似于琴弦的线状缺陷。一根位错很小，直径只有一纳米左右，长可达几十个微米。肉眼是根本看不见的，只有在放大几万倍以上的电子显微镜下才可以看到。平常我们用的金属工具，比如刀叉、钥匙里面充满了位错。金属里位错密度经常在  $10^{10}/\text{cm}^2$  量级。这也就是说，一立方厘米的金属里面的位错总长和地球的直径差不多，像许多根面条一样曲折地盘在材料里面。在外加应力下，位错可以形核、扩展；位错之间有长程的相互作用，也可以发生短程的反应；而位错的运动可以导致材料的总体变形。可以这样说，位错和其他微观缺陷在材料里面形成了一个复杂的“生态圈”。乍一听，把位错和动物，把材料和生命科学这样类比有点突兀。但其实这种类比是有些深刻原因的，是较恰当的。一个生物圈的根本需要是外界输入高质量的能源（所谓自由能），说白了就是太阳能；而位错等的形核扩展也需要外界能源，也就是机械能的耗散。生物圈和材料缺陷多体演

化都是所谓“非平衡态”，“复杂”的现象（non-equilibrium complexity）。而材料科学中常用的关键词“微观组织演化”（microstructural evolution）中的“演化”，和生物学中的“进化”（evolution），在英文中是同一个单词，也许并不是一个巧合。

在接受这样类比之后，所谓尺度效应也就不难理解了。显然，在一个小岛上进化出来的生态圈、和在广袤大陆上进化出来的生态圈是可以有巨大差异的。这在生物学中被称为“岛屿效应”。比如在印度尼西亚弗罗斯岛发现的一些古人类残骸身材矮小，成年人的身高也不超过 1 米，被称为“霍比特”人（hobbits）。这叫做大型动物的侏儒化。除了侏儒化之外，岛屿效应还包括小动物的巨型化。在被列入《世界遗产目录》的戈夫岛上有一种巨鼠，它能吞下整个一只信天翁鸟。这种巨鼠的祖先是几十年前随轮船来到岛上的家鼠；几十年之内它们的体形就进化成家鼠 3 倍多，进化的速度是惊人的。岛屿效应的一个重要原因是由于小岛上能承载的生物的总量有限，一个物种更容易灭绝，而新物种的进化也更迅速。在 1835 年，博物学家达尔文乘坐英国海军小猎犬号来到南美洲的加拉帕戈斯群岛，发现了大量异常的物种。这强烈的“岛屿效应”启发了达尔文，在深刻思考了二十年之后发表了惊世骇俗的进化论。

首先提出“愈小、愈强”观点的科学家也许是伽利略。他在 1638 年发表的《关于力学和地上运动两门新科学的对话以及数学证明》一书里写到：“当体积减小时，块体所能承受的总力并不是与体积成正比而缩小的；实际上，体积越小、相对所能承受的力也就越大。所以，一只小狗也许可以驮起两三只同样大小的狗，但我相信一匹马连一匹同样大的马也驮不起来。”这样说开来，社会和军事学中也有“尺度效应”。人类历史上有很多以少胜多的例子。比如公元 23 年的昆阳之战，刘秀的一万多人的军队战胜了王莽的四十多万军队。这不是简单的线性正比规律所能够解释的。“小而强”的一个主要原因是内部组织结构的不同。这与材料的力学行为是相通的。

很多材料是多晶体，也就是许多取向不同的单个晶粒结合起来的块材。块材本身的尺寸可以是宏观的，比如毫米到数米的量级；但单个晶粒的尺寸可以在几十个微米，甚至一个微米以下，其性能是依赖于具体取向的、或者各向异性的。打个比方，晶粒尺寸好比是春秋战国或中世纪欧洲内，不同犬牙交错的小国或藩镇的大小。Ernest Hall 和

Norman Petch 发现的尺度效应，就是多晶块材的强度与晶粒尺寸的负幂律关系。由于“晶粒愈小、强度愈高”，为了提高材料强度，科学家们利用各种方法减小晶粒尺寸。当晶粒尺寸下降到 100 纳米以下，形成所谓“纳米晶”的时候，块材的强度应该是相当高的；而这已被很多实验所证实。对纳米晶力学行为的研究，在九十年代末开始成为主流，在过去十年内取得了很大的进展。除了强度之外，纳米晶的其他性质比如韧性<sup>4-6</sup>，微组织稳定性<sup>7</sup>，和变形机理<sup>8</sup>等等都是研究的热点。请注意这里纳米晶还是宏观的块材，所谓“尺度效应”是指晶粒本身，也就是材料内部组织的一种特征尺度，而不是材料本身的外观尺寸。

在 2004 年，美国空军实验室、劳伦斯利弗莫尔国家实验室和斯坦福大学在《Science》（科学）杂志上发表了关于另一种材料性能尺度效应的论文<sup>9</sup>，也就是单晶材料本身外观尺寸对力学性能的影响。本文开头说道，人类文明在近五十年开始大量使用微小的机器。微机电系统和纳米科技需要大量的微小构件，而不是宏观块材。这种微小构件有大量的表面积，或者说很大的表面与体积比。那么，表面对力学性质的影响是什么呢？文中利用聚焦离子束（Focused Ion Beam，简称 FIB）在镍单晶中刻出了微米量级粗细的小圆柱子，然后用纳米压痕仪对小柱子进行定量的力学测试。结果发现单晶材料本身外观的大小对力学反应也有非常强的影响。如果说纳米晶里的“尺度效应”好比是欧洲小国对经济文化型态的影响，2004 年的发现则与生物学中的“岛屿效应”（也就是大洋中的孤岛）更相像。后续的特征与模拟工作表明，这种尺度效应是基于位错演变行为的差异。“孤岛”的大小对位错群体的演化带来了极大的影响，从而导致了“愈小、愈强”的趋势。

2010 年 1 月 21 日，西安交通大学微纳尺度材料行为研究中心（[CAMPhano.org](http://CAMPhano.org)）在《Nature》（自然）杂志第 463 卷 335-338 页发表了一篇文章，阐述了基于孪晶形变的外观尺度效应。详细情况见[此文](#)。这里我们给一个简单的介绍。孪晶形变是与位错有联系，但又不同于普通位错形变的一种材料变形方式<sup>10</sup>。一般来讲，普通位错形变是在较低应力，而孪晶形变是在较高应力下启动的。西安交通大学研究生余倩在导师们的指导下，在实验中发现钛合金单晶孪晶形变有比普通位错形变更强的外观尺寸效应，也就是“岛屿效应”。而且作者们发现，当外观尺寸小于一个微米左右时，“岛屿效应”将截止，

而材料所能承受的最大流变应力亦呈现出一种接近于所用材料理想强度水平的“应力饱和”的奇异现象。由于孪晶形变控制了许多低对称性金属（比如钛合金、镁合金）、半导体（比如硅）及绝缘体（三氧化二铝）的变形机制，而微小构件所能承受的应力都比较大<sup>11</sup>而有利于孪晶形变，这个发现对微机电系统的设计，特别是材料力学本构关系的理解、模拟和控制，是有着重大实际意义的。

孪晶形变是什么呢？打一个比方，如果说一根位错是一位独行大侠，普通位错形变就是由许多位独行大侠所组成的团体；总体来讲，位错与位错之间的关联是比较弱的。而孪晶则是一个组织非常严密的“帮会”，是一个由几十个，甚至上千个有完全相同理想的大侠（位错）所组成的高度组织化的密排缺陷结构。拿物理学中的一个例子打比方：如果说普通位错形变可以被类比于普通光场辐射或漫散光（太阳、灯泡发的光）的话，那么孪晶形变就可以说是激光辐射。我们知道，普通光场里面掺杂了各种各样的光子：不同频率、偏振的光子在各个不同的方向传播。而激光束里的所有光子，它们的频率、偏振、方向和位相是完全一样的。1917年，爱因斯坦根据量子电动力学在理论上预测激光应该存在。四十年后，美国贝尔实验室终于制造出了激光。激光的关键是所谓“受激辐射”的概念。也就是说，一位大侠的志向在一定条件下可以激发另一位大侠，而得到完全的复制（所谓“志同道合”）。这种链式感染导致了激光。在西安交大这篇《自然》文章中，作者们提出了一个叫“受激滑移”的与激光相似的概念，用来解释为什么许多根密排的位错可以有完全相同的“志向”而组成孪晶。根据“受激滑移”的概念，很容易解释为什么孪晶形变有比普通位错形变更强的外观尺寸效应。而由于理想强度<sup>3</sup>是实际强度的上限，强度饱和的现象和临界尺度也很容易被导出。

#### 文献：

1. Hall, E. O. THE DEFORMATION AND AGEING OF MILD STEEL .3. DISCUSSION OF RESULTS. *Proceedings of the Physical Society of London Section B* **64**, 747-753 (1951).
2. Petch, N. J. THE CLEAVAGE STRENGTH OF POLYCRYSTALS. *Journal of the Iron and Steel Institute* **174**, 25-28 (1953).
3. Ogata, S., Li, J. & Yip, S. Ideal pure shear strength of aluminum and copper. *Science* **298**, 807-811 (2002).
4. Lu, L., Sui, M. L. & Lu, K. Superplastic extensibility of nanocrystalline copper at room temperature. *Science* **287**, 1463-1466 (2000).
5. Wang, Y. M., Chen, M. W., Zhou, F. H. & Ma, E. High tensile ductility in a nanostructured metal. *Nature*

- 419**, 912-915 (2002).
6. Lu, L., Shen, Y. F., Chen, X. H., Qian, L. H. & Lu, K. Ultrahigh strength and high electrical conductivity in copper. *Science* **304**, 422-426 (2004).
  7. Huang, X. X., Hansen, N. & Tsuji, N. Hardening by annealing and softening by deformation in nanostructured metals. *Science* **312**, 249-251 (2006).
  8. Shan, Z. W., Stach, E. A., Wiezorek, J. M. K., Knapp, J. A., Follstaedt, D. M. & Mao, S. X. Grain boundary-mediated plasticity in nanocrystalline nickel. *Science* **305**, 654-657 (2004).
  9. Uchic, M. D., Dimiduk, D. M., Florando, J. N. & Nix, W. D. Sample dimensions influence strength and crystal plasticity. *Science* **305**, 986-989 (2004).
  10. Chen, M. W., Ma, E., Hemker, K. J., Sheng, H. W., Wang, Y. M. & Cheng, X. M. Deformation twinning in nanocrystalline aluminum. *Science* **300**, 1275-1277 (2003).
  11. Suresh, S. & Li, J. MATERIALS SCIENCE Deformation of the ultra-strong. *Nature* **456**, 716-717 (2008).