

金属材料力学性能的辐照硬化效应

肖厦子^{1,2} 宋定坤¹ 楚海建^{3,4} 薛建明^{2,5} 段慧玲^{1,2,†}

¹ 北京大学工学院力学与工程科学系, 北京 100871

² 北京大学工学院应用物理与技术研究中心, 北京 100871

³ 上海大学应用数学与力学研究所, 上海 200444

⁴ 上海大学理学院力学系, 上海 200444

⁵ 北京大学物理学院, 北京 100871

摘 要 开展金属材料力学性能的辐照硬化研究对抗辐照材料的设计及工程应用具有重要意义. 材料辐照损伤效应主要包括材料原子移位产生的辐照缺陷以及由核反应产生的氢、氦等气体杂质对材料性能的影响. 金属材料的辐照效应主要包括辐照硬化、辐照脆化和辐照蠕变等. 该文主要综述在低温 ($T < 0.3 T_m$, T_m 是材料的熔点温度) 和低辐照剂量下, 由原子移位损伤产生的辐照缺陷所导致的辐照硬化行为, 即受辐照缺陷的影响, 材料的强度会升高. 材料的晶粒尺寸、晶界以及温度等因素对多晶材料的辐照硬化具有重要影响. 金属材料力学性能的辐照硬化研究是个多尺度问题, 其宏观力学性能既取决于微观尺度上辐照缺陷导致晶粒内部结构的变化, 也取决于细观尺度上晶粒间的相互作用. 该文从实验结果、数值模拟和理论模型三方面综述金属材料力学性能的辐照硬化研究进展. 在此基础上, 展望了该领域中存在的主要科学问题.

关键词 金属材料, 辐照硬化, 温度影响, 尺寸效应, 力学性能

中图分类号: O345 文献标识码: A DOI: 10.6052/1000-0992-14-071

收稿日期: 2014-11-27; 录用日期: 2015-04-08; 在线出版日期: 2015-04-14

[†] E-mail: hlduan@pku.edu.cn

引用方式: 肖厦子, 宋定坤, 楚海建, 薛建明, 段慧玲. 金属材料力学性能的辐照硬化效应.

力学进展, 2015, 45: 201505

Xiao X Z, Song D K, Chu H J, et al. Irradiation hardening for metallic materials.

Advances in Mechanics, 2015, 45: 201505

© 2015《力学进展》版权所有

1 引 言

随着传统化石能源等一次性能源的逐渐枯竭以及人类对能源需求的不断增长, 能源问题已成为影响人类生存的重大问题之一. 相比传统能源而言, 核能由于其资源丰富, 能量产值高而在国际上受到广泛重视. 核能可分为核裂变能和核聚变能两种, 目前核裂变能已得到较为成熟的商业应用, 但是其较低的效率和一定的安全问题迫使人们寻求更高效更安全的核能. 相比核裂变能, 核聚变能具有不可替代的优势, 具有核反应原料储量巨大, 放能效率极高以及近乎安全无污染等特点. 因此, 核聚变能被视为解决人类未来能源需求的主导形式之一, 实现可持续可控核聚变, 对解决人类所面临的能源问题具有非凡的意义.

最近数十年, 随着国际核聚变能源的研究不断取得突破性进展, 特别是国际热核聚变实验堆 (ITER) 计划已经获得了较大的成功, 人类有望在不久的将来实现可控的惯性约束核聚变, 从而从根本上解决能源问题. 但是目前国际热核聚变实验堆中仍然存在很多亟需解决的问题, 其中包括如何选取力学性能良好的抗辐照材料, 以保障核聚变反应装置安全可靠的运行. 在核技术的发展过程中, 核材料在辐照条件下的力学性能研究十分重要, 其直接影响到核反应堆服役期间的可靠性和安全性. 可以说, 核技术的每一次发展和进步都和材料抗辐照性能的提升紧密相关. 在聚变反应堆中, 结构材料通常要经受高通量的 14 MeV 中子辐照以及逃逸离子的撞击, 其辐照损伤剂量比现有核电站中材料所经历的损伤剂量高 10^4 倍以上, 并且会伴随有其他嬗变产物氢和氦等, 至今还没有任何抗辐照材料能满足其在力学性能上的要求 (Shimada et al. 2007).

核材料的力学性能与辐照效应密切相关. 辐照效应是指射线或者高能粒子与物质相互作用造成的材料物理、力学性能以及结构上发生变化. 材料辐照损伤效应主要包括材料原子移位产生的辐照缺陷以及由核反应产生的氢、氦等气体杂质对材料性能的影响.

金属材料力学性能的辐照效应包括辐照硬化 (irradiation hardening)、辐照脆化 (irradiation embrittlement)、辐照蠕变 (irradiation creep) 和辐照疲劳 (irradiation fatigue) 等. 该文主要综述在低温 ($T < 0.3 T_m$, T_m 是材料的熔点温度) 和低辐照剂量下, 由原子移位损伤产生的辐照缺陷所导致的辐照硬化行为. 通常, 核反应会产生大量高能中子和离子, 这些高能粒子具有极强的穿透力, 结构材料的晶格原子受其撞击后, 会偏离其原来的位置并形成大量离位原子 (primary knock-on atom, PKA), 这些离位原子通过进一步的级联碰撞过程会演化形成复杂的缺陷结构, 如间隙子 (interstitials)、空位 (vacancies)、位错环 (dislocation loops, DLs)、层错四面体 (stacking fault tetrahedrons,

SFTs) 和空洞 (voids) 等. 在温度和辐照剂量较低的情况下 (辐照损伤强度单位为 dpa, 表示原子平均离位次数), 面心立方晶体 (FCC) 材料中的主要缺陷类型是层错四面体, 而体心立方晶体 (BCC) 材料中的主要缺陷是位错环; 当温度和辐照剂量较高时 (辐照损伤强度较高), 缺陷通常是以空洞的形式存在 (Osetsky & Bacon 2001, 2003; Osetsky et al. 2000). 正是由于这些大量辐照缺陷的存在, 当核材料受外载发生塑性变形时, 其内部位错的运动将受缺陷的影响, 从而较大程度地改变其力学性能, 如辐照硬化、辐照脆化和功硬化系数 (strain-hardening coefficient) 下降等 (Beyerlein et al. 2013).

可以看出, 辐照缺陷对金属材料力学性能影响的研究是一个典型的多尺度问题: 在微观原子尺度上高能粒子与晶格原子的相互作用会改变材料的微观晶体结构, 形成细观晶粒尺度的缺陷, 进而细观层次的晶体辐照缺陷会影响材料宏观多晶尺度的力学性能. 因此, 为了能够系统地分析辐照损伤是如何改变金属材料的力学性能, 须在不同尺度上开展辐照硬化的研究, 在了解相关物理过程和作用机理的基础上, 建立不同尺度之间的联系, 从而对核材料的辐照力学性能进行有效的分析和预测. 为了设计能够满足力学性能要求的抗辐照材料, 深入探索辐照缺陷的形成与演化, 揭示材料变形损伤机理, 并研究金属材料的辐照硬化行为, 已经逐渐成为近年来国内外研究的热点.

金属材料的辐照硬化分析可分为 3 个尺度的研究: 原子尺度 (微观层次)、晶粒尺度 (细观层次) 和多晶尺度 (宏观层次). 在不同尺度下, 辐照硬化的分析有其主要的研究方法和手段 (Wirth et al. 2004), 如图 1 所示. 在原子尺度, 常用的方法主要包括数

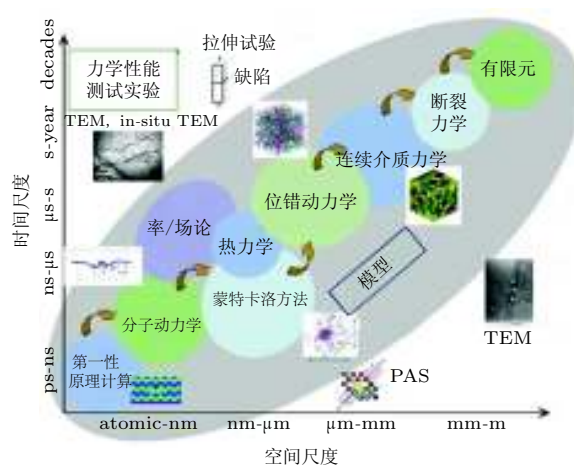


图 1

材料辐照硬化研究的多尺度研究框架 (Wirth et al. 2004). 版权归爱思唯尔出版社所有

值模拟,如第一性原理计算、分子动力学模拟等;在晶粒尺度,理论模型通常为研究辐照硬化提供了有效的途径,如基于连续介质力学的辐照晶体塑性理论;在多晶尺度,金属材料受辐照后的力学性能研究主要通过实验、理论和数值计算等方法. 该文将分别从实验观测、数值模拟和理论模型 3 个方面综述目前国内外关于金属材料在低温低辐照剂量条件下辐照硬化研究的主要进展.

2 金属材料辐照硬化的实验观测

实验观测是研究金属材料辐照损伤效应最直接、最可靠的方法之一. 从 20 世纪中期开始,金属材料的辐照效应逐渐引起人们的关注 (Blewitt et al. 1960),并随着实验条件及观测手段的不断进步和发展,如透射电子显微镜 (transmission electron microscope, TEM) 和扫描隧道显微镜 (scanning tunneling microscope, STM) 等的出现,人们对辐照缺陷如何导致辐照硬化的认识不断深入. 下面,将从辐照缺陷的形成、演化以及其对材料宏观力学性能的影响这 3 个方面介绍相关的实验研究工作.

2.1 辐照缺陷的类型

金属材料受高能粒子辐照之后,晶体内部会形成复杂的缺陷结构,并且缺陷的种类、密度、大小以及性质往往与辐照条件以及材料性质有关. 在辐照的初始阶段,晶体材料中的缺陷主要是点缺陷和空位. 经过一定时间的演化,在低温和低辐照剂量的条件下,体心立方结构材料中的辐照缺陷主要以位错环的形式存在;而在面心立方结构的材料中缺陷类型还与层错能有关,对于层错能较低的材料,层错四面体是主要的缺陷类型 (Osetsky et al. 2000),如 图 2 所示. 当温度较高时,辐照缺陷主要是以空洞的形式存在. 此外,通过嬗变反应还会有氦泡的产生. 位错环可分为两种:空位环和间隙环,分别是辐照产生的空位和间隙原子通过聚集塌陷形成. 层错四面体是一种正四面体结构的缺陷,一般情况下,其一旦形成便非常稳定. 此外,实验观察发现,材料的结构差异对缺陷类型影响较小,例如,对于纳晶和孪晶面心立方材料而言,虽然其内部存在大量的界面结构,但辐照缺陷仍以层错四面体为主 (Nita et al. 2004; Yu et al. 2013),如 图 3 所示.

辐照缺陷的密度与辐照剂量的高低有密切的关系 (Osetsky et al. 2000, Singh et al. 1997). 当辐照剂量较低时,缺陷 (位错环和层错四面体) 密度与辐照剂量基本呈线性关系;图 4 表明,当辐照剂量达到一定量时,缺陷密度会达到饱和,随着辐照剂量的继续增加,缺陷就会演变成以空洞的形式存在. 此外,在一定辐照的剂量下,位错环和层错四面体的尺寸随辐照剂量的变化很小,一般情况下层错四面体的大小在 2~3 nm,位错环的大小在 10 nm 左右 (Fabritsiev & Pokrovsky 2007, Fabritsiev et al. 2004).

最近的研究表明,辐照缺陷的密度还与材料的微结构有关 (Nita et al. 2004, Nita

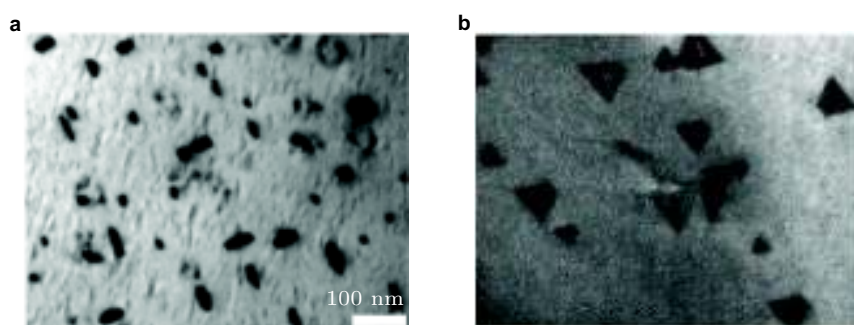


图 2

辐照缺陷, (a) 位错环 (Brimbal et al. 2011). 版权归爱思唯尔出版社所有; (b) 层错四面体 (Briceno et al. 2013). 版权归爱思唯尔出版社所有

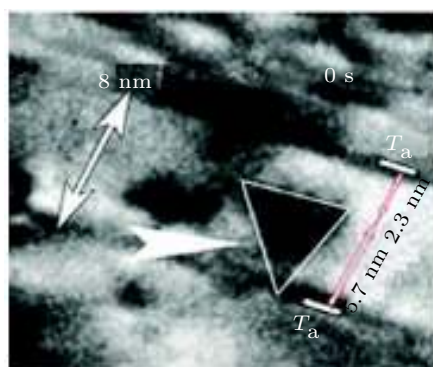


图 3

李晶银中的辐照缺陷层错四面体 (Yu et al. 2013). 版权归自然出版集团所有

et al. 2005, Rose et al. 1997, Sharma et al. 2013, Sharma et al. 2011). 通过对纳晶材料的辐照实验研究, 人们发现随着晶粒尺寸的减小, 晶粒内部的缺陷密度会随之降低, 当晶粒尺寸小于临界尺寸时, 辐照缺陷甚至会消失. 例如, 罗斯等通过对纳米钯和氧化锆进行重离子辐照实验, 发现当氧化锆晶粒小于 15 nm 以及钯晶粒的尺寸小于 30 nm 时, 相应的样品中便不会存在辐照缺陷 (Rose et al. 1997), 如 图 5 所示. 尼特等对纳晶铜辐照之后发现, 尽管辐照缺陷类型仍以层错四面体为主, 但缺陷密度比传统多晶铜的缺陷密度要小很多, 因而纳晶材料体现出良好的抗辐照性能 (Nita et al. 2005). 纳晶材料受辐照之后的缺陷密度之所以比传统多晶材料要低, 主要是由于纳晶材料中较大的晶界比例. 受晶界的影响, 辐照产生的缺陷往往容易迁移到晶界进而被吸收, 这样便降低了晶粒中缺陷的含量, 从而体现出较好的抗辐照性能 (Alsabbagh et al. 2013,

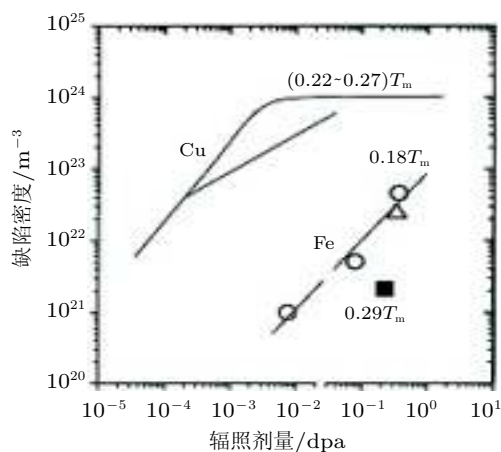


图 4

缺陷密度与辐照剂量的关系 (Osetsky et al. 2000). 版权归爱思唯尔出版社所有

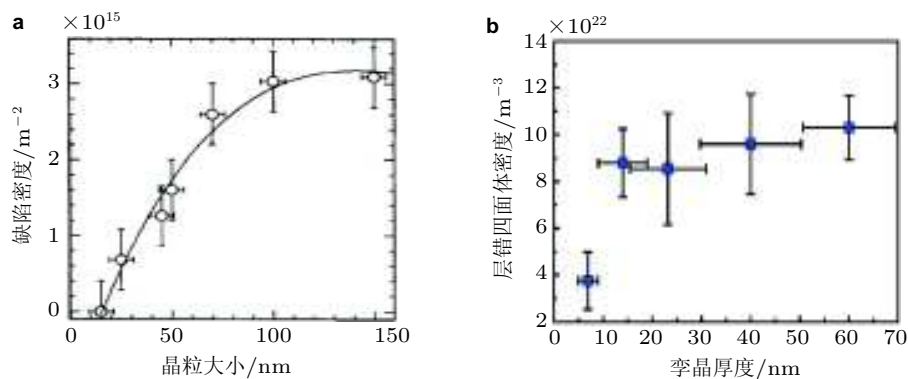


图 5

(a) 氧化锆中缺陷密度与晶粒尺寸的关系 (Rose et al. 1997). 版权归爱思唯尔出版社所有; (b) 银中缺陷密度与孪晶厚度的关系 (Yu et al. 2013). 版权归自然出版集团所有

Matsuoka et al. 2007). 对于孪晶材料而言, 缺陷密度与孪晶界之间的厚度也有关, 随着孪晶厚度的减小, 辐照缺陷密度也会逐渐减少 (Yu et al. 2013), 如图 5 所示, 这说明孪晶材料也是一种潜在的抗辐照材料, 而逐渐受到关注.

辐照缺陷对材料力学性能的影响与缺陷的种类以及温度有关. 通常, 当位错滑移遇到缺陷时, 缺陷会起到钉扎 (pinning) 作用并阻碍位错的继续滑移, 从而导致辐照硬化. 对不同的缺陷而言, 其阻碍位错滑移的强弱能力是不同的; 同样, 温度对缺陷与位错相互作用的强弱也有较大影响 (Fabritsiev & Pokrovsky, 2007, 2009, 2011). 例如, 通过

对纯铜以及铜的合金材料进行不同温度条件下的辐照力学性能研究, 人们发现当温度升高时, 缺陷阻碍位错滑移的能力将减弱, 即温度越高, 滑移位错越容易克服缺陷的阻碍并将缺陷湮灭 (annihilation) (Fabritsiev & Pokrovsky 2007), 如 图 6 所示.

2.2 辐照缺陷的演化

辐照缺陷的演化与其所处的外载环境以及材料自身的微结构有关. 当材料发生塑性变形时, 滑移位错与缺陷的相互作用是缺陷演化的主导方式之一. 滑移位错与缺陷相互作用会改变缺陷的类型以及数量. 例如, 当位错滑移遇到缺陷时, 缺陷可能被转变为其他类型的缺陷进而被湮灭, 或者直接发生湮灭, 从而导致缺陷密度的降低 (Matsukawa et al. 2008, Matsukawa & Zinkle 2004, Robach et al. 2006). 如 图 7 所示, 层错四面体与滑移位错相互作用以后可能导致其直接湮灭 (Robach et al. 2006), 也可能被转换成弗兰克 (Frank) 环 (Matsukawa et al. 2008). 层错四面体在滑移位错相互作用之后, 滑移位错并未消失, 即位错与缺陷的相互作用通常不会改变滑移位错的密度 (Briceno et al. 2013, Matsukawa et al. 2008), 如 图 7 所示.

值得注意的是位错与缺陷之间的相互作用具有很强的空间性, 这会导致受辐照后的材料在外载条件下形成无缺陷 (defect-free) 的位错通道 (dislocation channel), 从而出现高度局域性 (deformation localization) 的塑性变形 (de la Rubia et al. 2000). 实际上, 辐照产生的缺陷在空间的分布并不是无规则的, 对于位错环这样的平面缺陷而言, 环所在平面一般是在 $\{111\}$ 和 $\{100\}$ 平面; 对于层错四面体这种正四面体的缺陷而言, 其相应的层错面通常也是在 $\{111\}$ 平面 (Osetsky et al. 2000). 而对于滑移位错而言, 在不同的晶体体系中, 其也具有特定的滑移体系, 如面心立方结构的晶体内位错是在 $\{111\}$

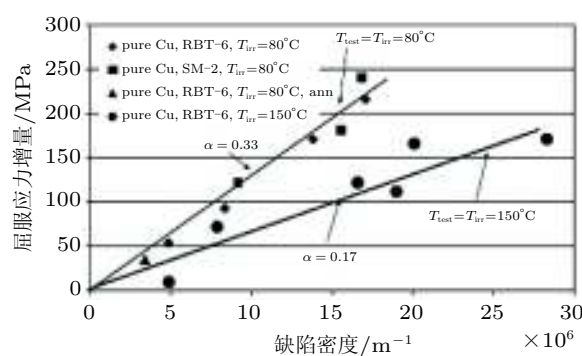


图 6

缺陷与位错相互作用强度系数和温度的关系 (Fabritsiev & Pokrovsky 2007). 版权归爱思唯尔出版社所有

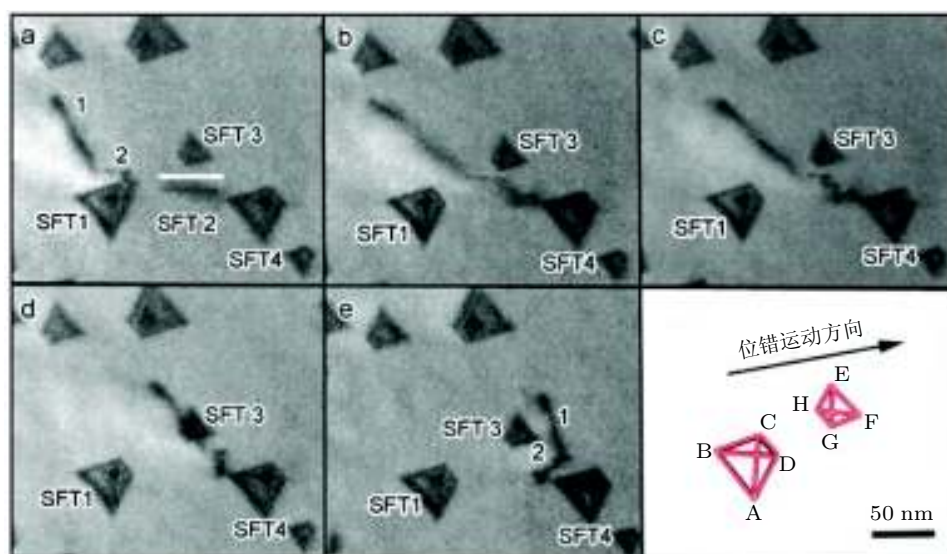


图 7

层错四面体与滑移位错相互作用后发生湮灭而位错仍存在 (Briceno et al. 2013). 版权归爱思唯尔出版社所有

(110) 滑移系上滑移, 体心立方结构的晶体内位错滑移则在 $\{111\}$ $\langle 110 \rangle$, $\{111\}$ $\langle 112 \rangle$ 和 $\{111\}$ $\langle 123 \rangle$ 滑移系. 由此可见, 不同滑移系上的位错与具有特定空间分布的缺陷相互作用具有明显的空间特性. 当在一组相距很近的滑移面上的缺陷与滑移位错相互作用后发生湮灭, 便会形成位错通道, 同时滑移位错所受到的阻力将大大减小, 这样位错沿此滑移面滑移会变得容易, 使得塑性变形在局部区域更容易发生, 于是便会出现高度局域性的塑性变形 (de la Rubia et al. 2000), 如图 8 所示.

此外, 材料自身的微结构对缺陷的演化也具有影响. 例如, 对于受辐照后的纳晶材料, 受大量晶界的影响, 晶粒中靠近晶界的缺陷容易迁移到晶界进而被吸收, 这样导致晶粒中在靠近晶界的区域内的缺陷消失, 形成一个无缺陷区域, 这样的缺陷分布不均匀性会直接影响缺陷在晶粒内的演化 (Nita et al. 2004, Nita et al. 2005). 同样在孪晶材料中, 孪晶界的迁移也会与缺陷相互作用, 实验研究表明, 孪晶晶界也能起到吸收并湮灭缺陷的作用, 进而降低材料中的缺陷密度 (Yu et al. 2013), 如图 9 所示.

2.3 辐照缺陷对力学性能的影响

辐照对材料宏观力学性能的影响已有不少实验工作的研究 (Blewitt et al. 1960, Sharp & Makin 1965, Singh et al. 2012, Singh et al. 2001, Singh et al. 1995, Singh & Zinkle 1993, Victoria et al. 2000, Zinkle & Singh 1993), 主要关注辐照剂量、辐照源和温度对材



图 8

辐照铜变形后出现的位错通道 (de la Rubia et al. 2000). 版权归自然出版集团所有

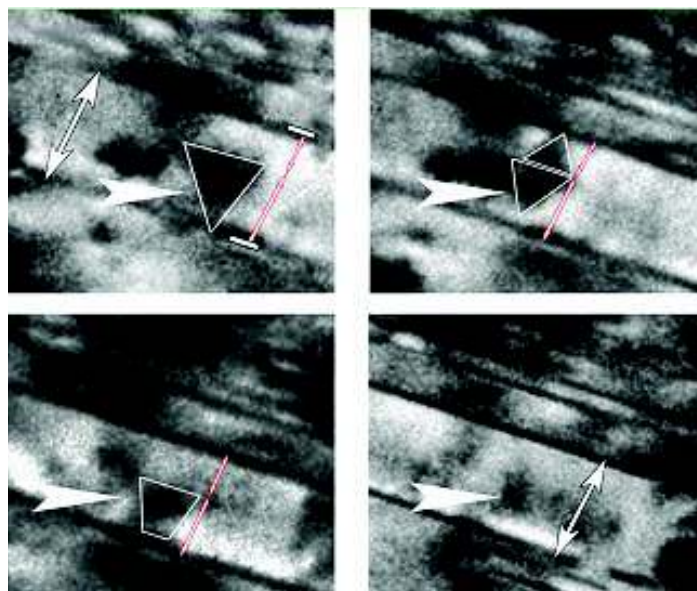


图 9

层错四面体与共格孪晶界作用并且被吸收 (Yu et al. 2013). 版权归自然出版集团所有

料微结构以及力学性能的影响. 在低温和低辐照剂量下, 金属材料受辐照后的力学特性主要体现为辐照硬化、辐照脆化以及功硬化系数下降等.

对于面心立方结构金属材料, 将主要以金属铜为例介绍其辐照力学性能, 其他面心立方结构的金属材料具有类似的辐照效应. 辛格等 (Singh et al. 2001, Singh et al.

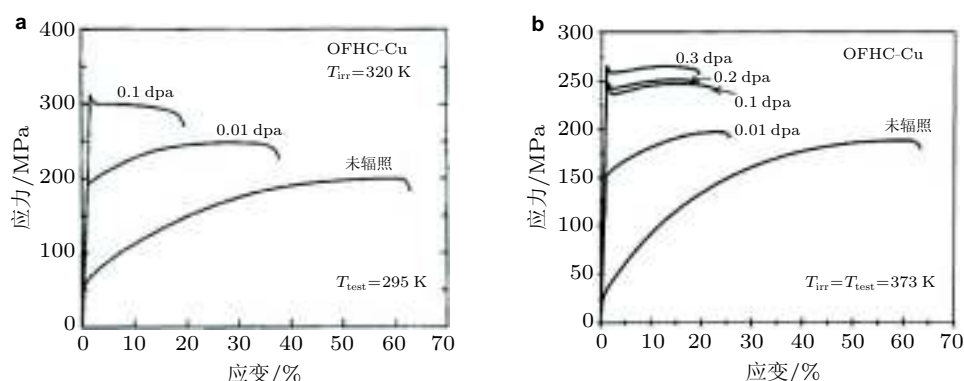


图 10

(a) 铜的辐照应力应变曲线 (295 K) (Singh et al. 1995). 版权归爱思唯尔出版社所有;
(b) 铜的辐照应力应变曲线 (373 K) (Singh et al. 2001). 版权归爱思唯尔出版社所有

1995) 通过对铜和铜的合金材料进行了一系列辐照实验, 发现随着辐照剂量的增加, 材料的屈服应力会不断上升, 同时材料的延展性会不断下降, 特别是当辐照剂量较大时 (辐照损伤强度大于 0.1 dpa), 材料会出现过屈服点应力下降的现象, 即屈服后软化 (post-yield dropping/softening), 如 图 10 所示. 产生屈服后软化的主要原因是当材料发生塑性变形时, 辐照缺陷会阻碍位错的滑移, 使得材料的屈服应力上升, 随着外载增加到足以使得滑移位错将缺陷湮灭或者破坏缺陷的阻碍能力, 位错滑移的阻力将减小, 从而导致驱动位错滑移所需的外界载荷减小, 出现过屈服点后应力下降的现象. 值得注意的是, 这个现象只有当辐照剂量超过一定时才会发生, 实际上过屈服点的流动应力演化来自于两部分机制的竞争: 缺陷湮灭导致流动应力的减小和位错增殖导致流动应力的增加. 当辐照剂量较低时, 缺陷密度较小, 其湮灭对流动应力的影响小于位错增殖的影响, 故不会出现过屈服点流动应力下降的现象; 当辐照剂量较高时, 大量缺陷的湮灭对流动应力的影响大于位错增殖的影响, 故会出现过屈服点后应力下降的现象.

在体心立方结构的金属材料中, 铁及其合金是应用较为广泛的材料, 也是研究的重点 (Jiao & Was 2010; Lee et al. 2001a, 2001b; Luppó et al. 2000). 通过相关实验测试表明, 体心立方结构金属材料受辐照以后的力学性能与面心立方结构材料的基本类似, 其主要的辐照影响同样包括明显的辐照硬化和辐照脆化现象, 同样温度以及材料微观结构对辐照效应也有相应的影响, 如 图 11 所示.

材料的微观结构以及晶粒的尺寸对辐照硬化有显著的影响. 对于单晶材料而言, 当晶粒尺寸较大时, 其辐照硬化效应与多晶材料基本一致 (Victoria et al. 2000), 如 图 12 所示. 但是当晶粒尺寸减小时, 辐照硬化效应将受到尺寸因素的影响. 例如, 基纳等

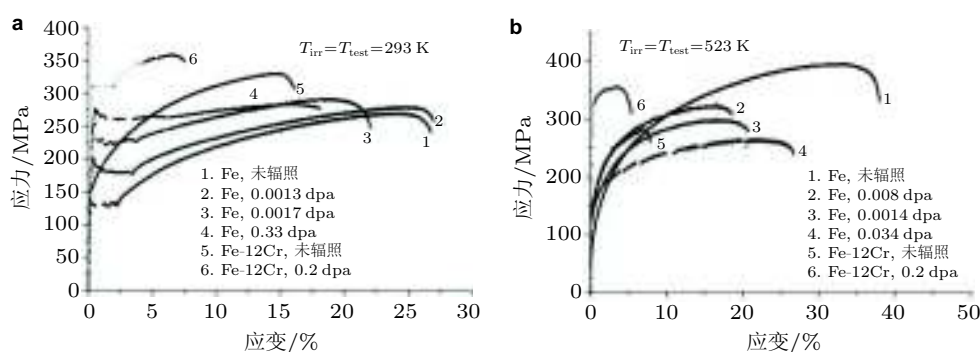


图 11

(a) 铁辐照的应力应变曲线 (293 K); (b) 铁辐照的应力应变曲线 (523 K) (Luppo et al. 2000). 版权归爱思唯尔出版社所有

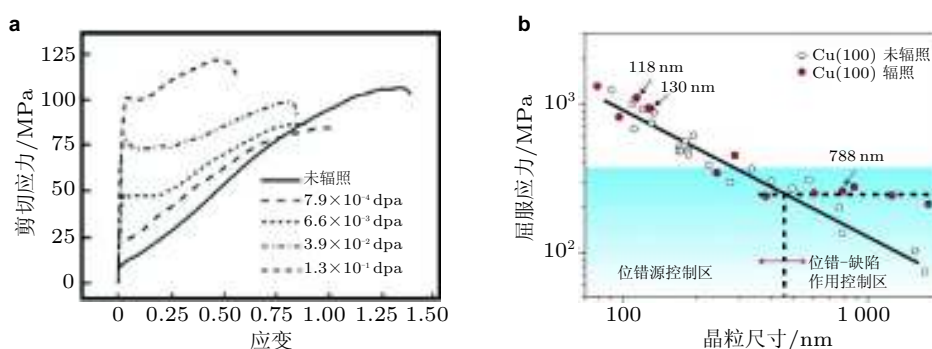


图 12

(a) 单晶铜的辐照应力应变曲线 (Victoria et al. 2000). 版权归爱思唯尔出版社所有; (b) 尺寸和辐照对单晶铜屈服应力的影响 (Kiener et al. 2011). 版权归自然出版集团所有

对样品尺寸从 80 nm 到 1500 nm 的单晶铜进行辐照后的力学性能测试, 发现辐照单晶存在一个临界尺寸, 当单晶尺寸小于临界尺寸时, 尺寸效应对单晶的力学性能起主导作用, 辐照硬化的影响可以忽略; 当尺寸大于临界尺寸时, 辐照硬化将成为主导机制, 单晶尺寸的改变对其力学性能几乎没有影响 (Kiener et al. 2011), 如图 12 所示. 实际上, 当单晶尺寸减小时, 一方面晶粒内部位错源激发位错的难易程度将变得越来越难, 另一方面晶粒内部的位错和缺陷受到单晶自由表面的影响, 将容易从自由表面逃逸, 从而导致晶粒内部的位错以及缺陷密度降低, 这样就降低了辐照缺陷的影响. 所以存在这样的临界尺寸, 当晶粒尺寸小于临界尺寸时, 单晶力学性能是由位错源亏乏机理主导 (dislocation source limitation mechanism); 当晶粒尺寸大于临界尺寸时, 其力学特性主要由位错与辐照缺陷的相互作用决定.

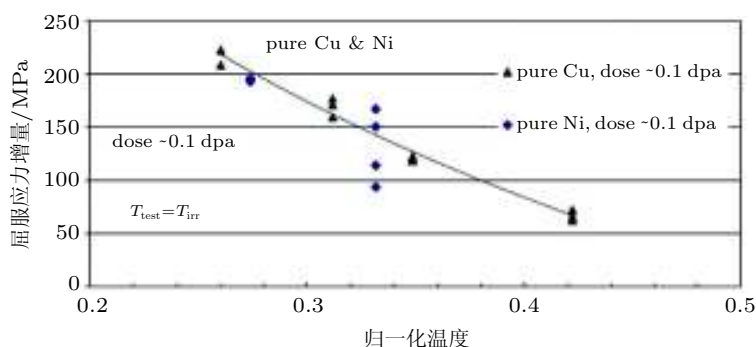


图 13

温度对辐照硬化的影响 (Fabritsiev & Pokrovsky 2011). 版权归爱思唯尔出版社所有

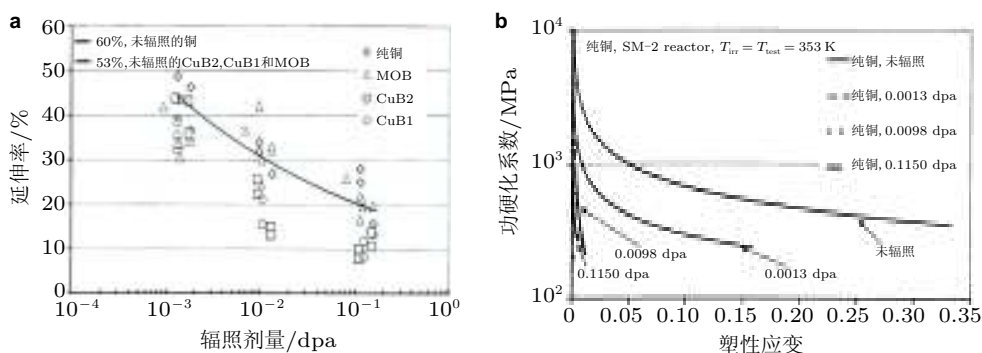


图 14

(a) 材料延展性与辐照强度的关系 (Fabritsiev & Pokrovsky 2003). 版权归爱思唯尔出版社所有; (b) 材料功硬化系数与辐照强度的关系 (Fabritsiev & Pokrovsky 2003). 版权归爱思唯尔出版社所有

温度也会影响材料的辐照硬化行为. 通过在不同温度条件下对面心立方金属材料进行较为系统的研究, 人们发现在相同的辐照条件下时, 温度的上升会使材料辐照硬化的程度减弱 (Fabritsiev & Pokrovsky 2007, 2009, 2011), 如图 13 所示. 类似的实验结果也可以从辛格等 (Singh et al. 2001, Singh et al. 1995) 的辐照实验结果看出 (如图 11 所示), 当辐照剂量在 0.1 dpa 并且温度从 295 K 上升到 373 K 时, 屈服应力则从 300 MPa 下降到 250 MPa 左右. 位错与缺陷相互作用的强弱与位错所处的能量状态有关, 当温度升高, 位错将受热激励使其穿越缺陷的能量阈值下降, 因而克服缺陷阻碍所需的外载降低.

辐照除了会导致材料辐照硬化以外, 还会引起辐照脆化和功硬化系数的降低 (Fabritsiev & Pokrovsky 2003, 2009, Odette et al. 2008, Odette & Lucas 2001). 从图 14 可

以看出, 辐照会使材料的延展性以及功硬化系数较未辐照时有显著的下降, 并且这种影响往往是非常危险的, 工程运用所需要的抗辐照材料必须同时满足一定的强度和韧性, 这样才能保证结构的安全可靠, 所以探索既能具有良好的抗辐照性能又具有较好韧性的材料是当今核材料研究的重点和难点.

本节综述了近期关于辐照缺陷的形成、演化以及其对材料宏观力学性能影响的实验研究进展. 可以看出, 辐照硬化与材料本身的晶体类型、微观结构以及外载环境(辐照剂量和温度)等因素密切相关. 对于不同晶体结构的金属材料(面心立方结构或者体心立方结构), 其总体趋势是一致的, 但是当材料的微观结构发生变化时, 其辐照特性将发生明显变化. 随着近些年微纳米技术的发展, 具有微纳结构的金属材料展现出优于传统多晶材料的辐照力学性能, 例如受纳晶材料较大比例晶界的影响, 晶粒内部辐照缺陷比相同辐照条件下的多晶材料的缺陷密度小, 体现出良好的抗辐照性能, 但是纳晶材料自身的延展性不佳, 故将限制其在抗辐照材料中的应用. 对于具有孪生界面的纳米孪晶材料而言, 其特有的孪生界面使其同样具有良好的抗辐照特性, 同时孪晶材料的延展性能良好, 使其具有发展成为下一代抗辐照材料的潜能而成为研究的热点. 可以看到, 辐照条件下金属材料的力学性能与诸多因素有关, 通过实验研究不同结构材料在不同辐照环境下的力学性能, 能有助于对材料辐照硬化效应微观机理的探索, 从而为研究设计良好的抗辐照材料提供准确可靠的实验依据.

3 金属材料辐照硬化的数值模拟

金属材料受辐照后的宏观力学性能可以通过实验的方法直接观测, 但是金属材料受高能粒子撞击后如何形成各种缺陷以及辐照缺陷在微观层次的演化规律很难直接通过实验方式来研究. 在微观尺度以及细观尺度, 数值模拟为人们研究材料辐照硬化效应的微观机理和力学特性提供了一种可能的方法, 特别是近年来计算机技术的迅猛发展, 使得运用大规模计算方法研究材料辐照硬化的微观机理成为可能, 其中最主要数值模拟方法包括分子动力学(MD)模拟和位错动力学(DD)模拟. 分子动力学模拟完全是基于传统的牛顿力学计算粒子(原子或分子)之间的相互作用, 在粒子间势场确定的基础上, 对不同系综中的粒子进行动力学计算, 通过对每个粒子的位置和速度等信息进行统计分析, 从而得到研究体系所需的宏观物理量(如温度、压强或者应力等). 位错动力学模拟是从细观尺度上研究位错演化以及晶粒材料宏观力学行为的一种有效的方法, 在晶体辐照体系下能够研究位错与缺陷相互作用的机理并预测材料受辐照后的部分宏观力学性能. 辐照缺陷对材料力学性能的影响主要通过其与位错以及晶界的相互作用, 下面将从三方面对材料辐照硬化数值模拟的研究进展进行介绍: 位错与缺陷相互作用、缺陷与晶界相互作用以及辐照缺陷对材料力学性能的影响.

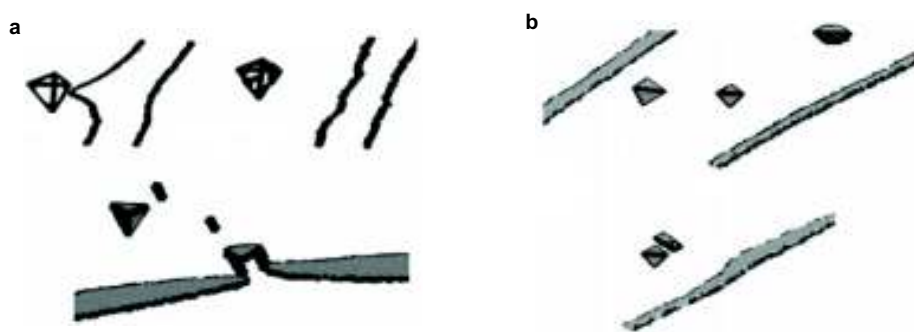


图 15

(a) 层错四面体与螺型位错相互作用; (b) 层错四面体与刃型位错相互作用 (Osetsky et al. 2005). 版权归爱思唯尔出版社所有

3.1 位错与缺陷相互作用

金属材料发生塑性变形是通过晶粒内部的位错滑移, 当材料受到辐照之后, 其晶粒内部会产生大量的缺陷并阻碍位错的滑移, 从而导致辐照硬化的产生. 但是通过实验人们很难直接观察位错与缺陷相互作用的过程. 通过数值模拟的方法, 人们可以从微观层次研究位错与缺陷相互作用的过程, 从而深入理解辐照效应的物理机理.

通过分子动力学模拟研究表明, 刃位错、螺位错以及混合位错与层错四面体的相互作用是很复杂的 (Lee et al. 2007, Lee & Wirth 2009, Wirth et al. 2002). 尽管实验已经直接观测到层错四面体被滑移位错直接吸收而发生湮灭 (Matsukawa et al. 2006, 2008), 但是分子动力学模拟表明层错四面体在与位错相互作用后会经历一系列复杂的演化, 并且这些演化过程与诸多外界因素有关 (Lee & Wirth 2009, Osetsky et al. 2006, Robach et al. 2006). 例如, Osetsky 等利用分子动力学模拟研究了刃位错和螺位错与层错四面体的相互作用, 发现其结果受缺陷大小、几何结构、温度以及加载应变率的影响会产生 5 种可能的结果, 如缺陷部分湮灭、缺陷发生旋转以及缺陷被分割成其他类型的缺陷等情形 (Lee et al. 2007, Osetsky et al. 2006), 见 图 15 所示. 混和位错是晶体中最常见的位错类型, 李等通过分子动力学模拟发现, 混合位错与层错四面体进过一次相互作用很难导致缺陷直接发生湮灭, 而必须经过多次一系列复杂的相互作用才能使缺陷发生湮灭 (Lee & Wirth 2009).

关于位错与辐照产生的位错环之间的相互作用, 也有不少分子动力学模拟的数值研究 (Drouet et al. 2014, Nogaret et al. 2007, Terentyev & Bakaev 2013, Terentyev et al. 2013), 如 图 16 和 图 17 所示. 一般认为位错环与位错的相互作用与几何构型以及位错的性质 (刃位错或者螺位错) 有关, 其结果可能有 (1) 位错环发生剪切; (2) 位错环转

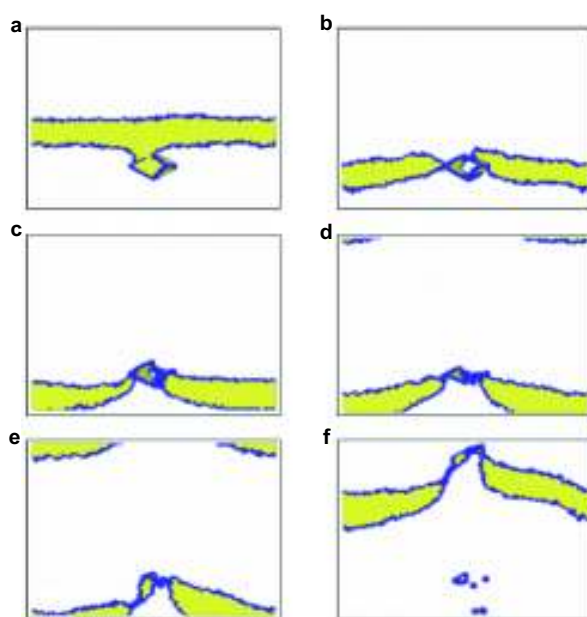


图 16

层错四面体与位错相互作用后发生湮灭 (Saintoyant et al. 2007). (a) 0 ps, (b) 20 ps, (c) 22.5 ps, (d) 25 ps, (e) 100 ps, (f) 140 ps. 版权归爱思唯尔出版社所有

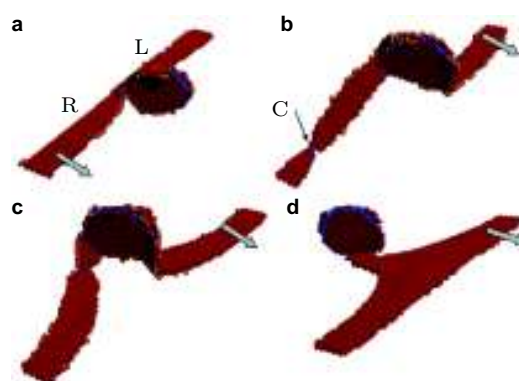


图 17

位错与位错环相互作用 (Terentyev et al. 2013). 版权归爱思唯尔出版社所有

变为其他可滑移的构型; (3) 位错环被吸收 (Nogaret et al. 2007).

3.2 缺陷与界面相互作用

辐照缺陷除了与位错相互作用以外, 还会受材料自身界面的影响并且改变其力

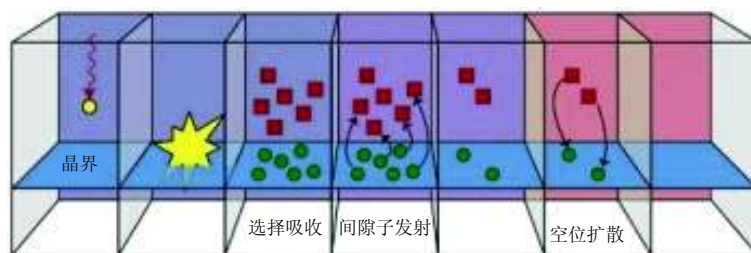


图 18

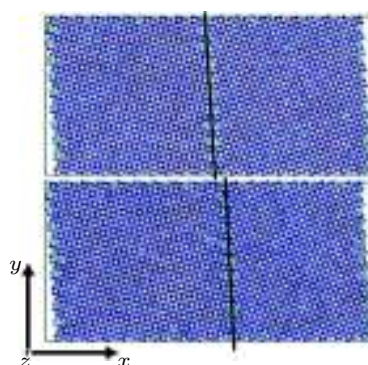
点缺陷和空位受晶界影响 (Beyerlein et al. 2013). 版权归爱思唯尔出版社所有

学性能, 如晶界会吸收大量辐照产生的点缺陷, 使晶粒内部的缺陷密度降低 (Bai & Uberuaga 2013, Bai et al. 2010); 辐照缺陷会引起晶界滑移和迁移 (Beamish et al. 2010; Campaña et al. 2008), 晶界吸收辐照产生的点缺陷之后其晶界内平均摩擦系数会大幅度降低 (Borovikov et al. 2013), 同样辐照缺陷会导致孪晶界的迁移 (Song et al. 2014). 下面将回顾近年来国内外关于缺陷与界面相互作用的分子动力学模拟进展.

关于晶界如何影响金属材料中辐照缺陷的演化, 其研究重点主要集中在面心立方结构材料和体心立方结构材料. 例如对于面心立方材料而言, 人们主要研究了银 (Sugio et al. 1998)、镍 (Samaras et al. 2002, 2003)、铜 (Bai & Uberuaga 2013, Demkowicz et al. 2010, Demkowicz et al. 2008, Demkowicz & Thilly 2011) 等材料晶界对辐照缺陷的影响; 对于体心立方材料而言, 主要以铁 (Perez-Perez & Smith 2000) 为主. 尽管材料性质不一样, 但是晶界对辐照缺陷的影响是一致的: 辐照会产生大量的点缺陷和空位, 其中点缺陷移动的阈值比空位低, 因而更容易迁移到晶界而被吸收, 同时晶界也会激发出点缺陷并移动到晶粒内部与辐照产生的空位中和, 这样便降低了晶粒内部点缺陷和空位的密度, 从而使得由点缺陷和空位通过进一步演化形成位错环和层错四面体的数量减少, 体现出一定的抗辐照作用 (Bai et al. 2010, Beyerlein et al. 2013), 如图 18 所示.

晶界在吸收大量点缺陷以后, 其力学性能也会有较大改变. 作为面对等离子体的第一壁材料, 金属钨辐照力学性能的研究具有重要意义. 人们研究了点缺陷对体心立方结构钨晶界力学特性的影响, 发现当晶界吸收点缺陷以后, 其摩擦系数会大幅度降低, 即晶界吸收的点缺陷会使得晶界滑移变得更加容易, 从而使得晶界的力学性质变软 (Borovikov et al. 2013). 值得指出的, 辐照后晶界的力学行为研究才刚刚开始, 仍存在很多问题值得研究, 如受辐照后晶界的宏观力学性能等.

一般而言, 晶界处于较低的能量状态, 因而能保持其构型并稳定存在. 当受到外界激励如高温、应力作用时, 晶界的结构及其稳定性会发生改变, 从而引起晶界滑移

**图 19**

辐照引起的晶界迁移 (Campañá et al. 2008). 版权归美国物理学会所有

或者晶界迁移. 当晶界受辐照缺陷的影响时, 其结构及稳定性同样会发生改变. 人们通过分子动力学模拟, 研究了辐照缺陷对晶界结构及其稳定性的影响, 发现在辐照条件下, 晶界的滑移或者迁移所需要的外界激励比未辐照条件下的小, 这可能是因为晶界处的辐照缺陷有利于位错成核的发生, 从而使得晶界更加容易滑移或者迁移, 见 **图 19** (Campañá et al. 2008). 为了研究辐照缺陷对孪晶界的影响, 宋等通过对体心立方结构铁中孪晶界面的辐照力学性能研究, 发现 (1) 辐照不仅会产生团簇型的点缺陷, 同时在剪切力的作用下会在孪晶界上形成孪晶位错环, 并引起孪晶界迁移; (2) 孪晶界上的辐照点缺陷可能形核成孪晶位错环 (Song et al. 2014).

3.3 辐照缺陷对材料力学性能的影响

Li 等采用分子动力学模拟的方法研究了辐照下单晶铜的力学行为 (Li et al. 2013, 2014), 该模型体系研究的是轴向加载的铜纳米线, 共包含 11 705 个原子, 在不同入射铜离子的辐照条件下, 观测辐照缺陷的演化过程, 以及对含有缺陷的单晶铜进行拉伸和压缩等力学特性的研究, 如 **图 20** 所示. 在辐照剂量较低的情况下, 单晶铜内主要产生点缺陷: 空位和间隙子, 其中间隙子很容易迁移、扩散并聚集成团, 而空位往往不易迁移. 辐照缺陷会导致单晶铜的杨氏模量发生改变: 压缩杨氏模量随着空位的增加先变大后减小, 而拉伸杨氏模量则随空位的增加一直减小, 如 **图 21** 所示. 辐照前后, 单晶铜的塑性变形都是通过位错在 $\{111\}$ $\langle 112 \rangle$ 滑移系的滑移. 在辐照缺陷处, 位错可以形核并发射出来, 从而减低单晶铜的屈服应力.

采用位错动力学模拟来研究辐照缺陷对材料力学性能的影响逐渐成为近年来数值模拟的有效手段 (Arsenlis et al. 2012, de la Rubia et al. 2000, Khraishi et al. 2002, Li et al. 2011). 例如, 人们利用位错动力学的方法主要研究了体心立方结构铁辐照硬化

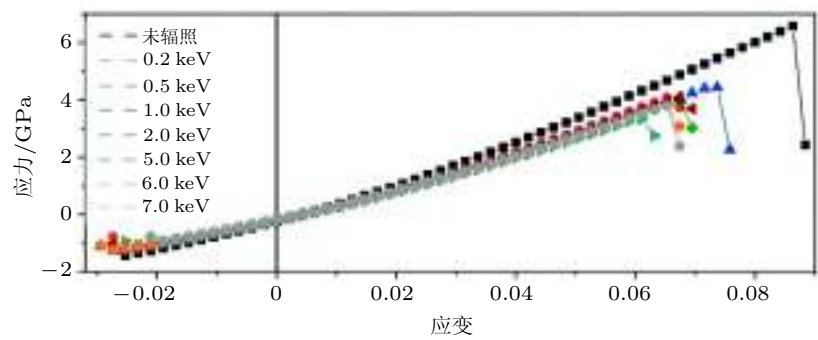


图 20

辐照铜应力应变曲线 (Li et al. 2013). 版权归爱思唯尔出版社所有

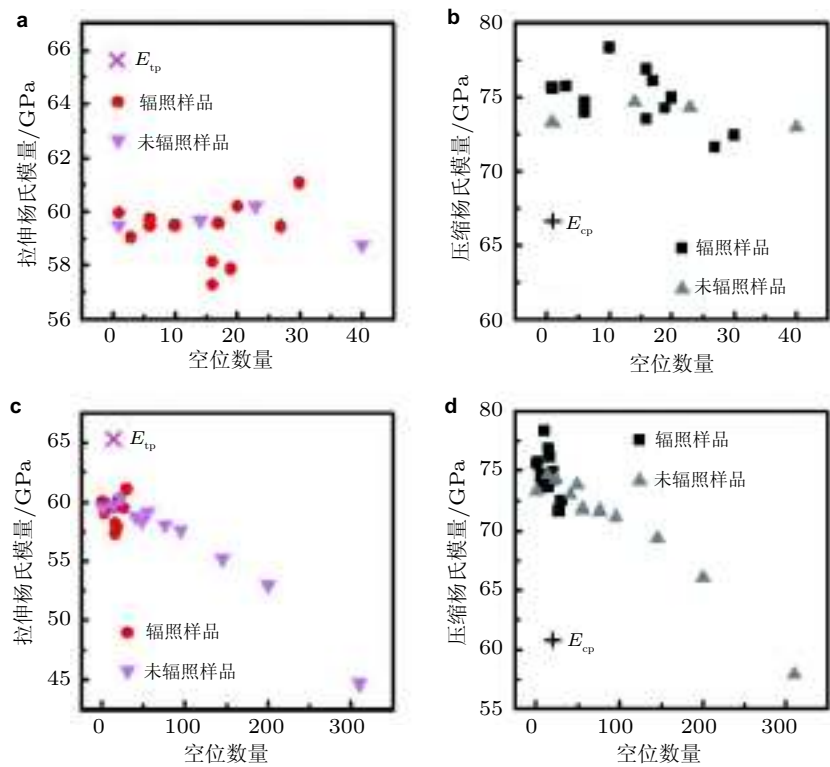


图 21

辐照后铜的拉伸及压缩杨氏模量 (Li et al. 2014). 版权归英国物理学会出版社所有

的机理以及无缺陷的位错通道形成的过程 (Arsenlis et al. 2012), 如 图 22 所示. 该模拟体系采用边长为 $1.3\mu\text{m}$ 的立方体, 其中包含了初始均匀分布的位错及不同密度的位错环, 通过轴向加载分析其宏观力学性能. 随着辐照缺陷 (位错环) 密度的不断上升,

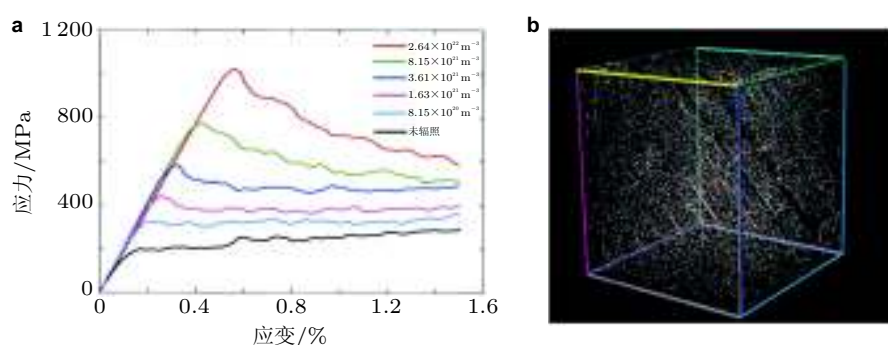


图 22

(a) 辐照铁的应力应变曲线 (Arsenlis et al. 2012). 版权归爱思唯尔出版社所有; (b) 局域性的塑性变形和位错通道 (de la Rubia et al. 2000). 版权归自然出版集团所有

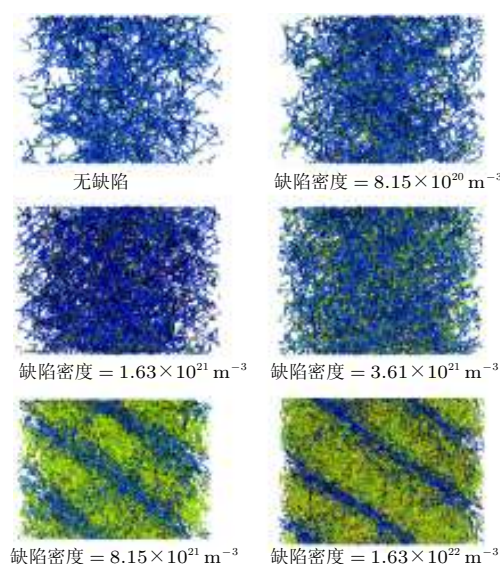


图 23

不同初始位错环密度下的塑性变形 (Arsenlis et al. 2012). 版权归爱思唯尔出版社所有

材料的屈服应力会随之增加, 并且当位错环密度大于 $3.61 \times 10^{21} \text{ m}^{-3}$ 时, 流动应力会在过屈服点后发生明显的下降现象. 为了从微观机制上分析其产生的原因, 人们分析了位错及位错环在发生塑性变形时的演化情况, 从图 23 可以看出, 当初始位错环的密度大于 $3.61 \times 10^{21} \text{ m}^{-3}$ 时, 塑性变形会从原来的均一化变形转变为高度局部化的塑性变形, 并且在 $(1\bar{1}\bar{2})$ 平面形成明显的无缺陷通道. 事实上, 在 $(1\bar{1}\bar{2})$ 平面上其分剪应力最大, 所以在这个平面上的缺陷将最容易被滑移位错湮灭, 一旦缺陷开始发生湮灭,

在其平面上滑移位错遇到的滑移阻力将下降, 这样将导致宏观流动应力的下降, 同时产生局域性的塑性变形并形成无缺陷的位错通道.

本节主要综述了利用数值模拟方法研究辐照缺陷演化的微观机理以及辐照缺陷对结构稳定性和力学性能的影响. 通过数值模拟可帮助了解辐照缺陷演化的物理过程, 同时有助于理解辐照缺陷对材料宏观力学性能的影响. 可以看出, 辐照缺陷自身的演化不仅受材料内在结构的影响, 在发生塑性变形时还会与滑移位错发生复杂的相互作用, 正是这些微观尺度的缺陷和位错的演化导致材料在宏观尺度上体现出辐照硬化. 利用数值模拟的方法研究辐照硬化的机理, 对建立相关辐照理论模型以及设计良好的抗辐照材料具有重要意义.

4 金属材料辐照硬化的理论模型

基于实验观察和数值模拟的结果, 分析相关的变形机理, 建立相关辐照硬化理论模型, 是研究辐照硬化效应并预测辐照缺陷对材料宏观力学性能影响的有效手段. 目前国内外的辐照硬化理论模型主要研究温度范围在 $0.3T_m$ 以下、低辐照剂量时多晶金属材料的力学性质. 纵观辐照硬化的理论模型, 可分为三类: (1) 考虑微观辐照缺陷与宏观辐照硬化联系的辐照硬化模型, 该模型能够定量描述辐照缺陷密度与屈服应力增量的关系, 但是不能描述材料在整个加载过程中的辐照力学行为; (2) 基于传统晶体塑性理论的辐照晶体塑性模型, 该模型将辐照硬化效应考虑到晶体塑性理论框架下, 不仅能够分析材料的辐照硬化行为, 而且通过位错密度和缺陷密度的演化规律, 可以有效描述过屈服点后材料的辐照力学行为, 但没有考虑缺陷与位错的空间相互作用; (3) 辐照晶体张量模型, 该模型在辐照晶体塑性模型的基础上, 较好的考虑了辐照缺陷与位错的空间相互作用, 能够准确地描述辐照缺陷对材料力学性能影响的过程. 下面, 将分别介绍这三类模型的主要内容.

4.1 辐照硬化模型

基于早期对材料受辐照后力学性质的实验观测, 西格和辛格等分别提出了相应的辐照硬化模型来解释有关的辐照现象 (Blewitt et al. 1960, Kojima et al. 1991, Lucas 1993, Odette & Frey 1979, Singh et al. 1997). 金属材料受辐照后, 发生塑性变形时, 其屈服应力会上升, 为了建立微观辐照缺陷与宏观辐照硬化之间的联系, 西格提出了贫原子区硬化 (dispersed barrier hardening, DBH) 模型. 该模型认为辐照硬化来源于辐照缺陷对滑移位错的阻碍, 在奥罗万的强度理论框架下 (Orowan 1942), 辐照硬化对屈服应力的贡献可表示为

$$\tau = \alpha' \mu b \sqrt{Nd} \quad (1)$$

其中, μ 和 b 分别是材料的剪切模量和伯格矢量的大小, N 和 d 分别是缺陷密度和大

小. α' 是缺陷强度参数, 用来描述不同缺陷对辐照硬化的贡献. 实验观察表明, 一般而言对于位错环 $\alpha' \approx 0.3$; 层错四面体 $\alpha' \approx 0.2$; 空洞 $\alpha' \approx 1$. 但是贫原子区硬化模型只能近似预测材料由于辐照缺陷导致的屈服应力增量, 而对于屈服点之后的力学行为如后屈服软化的现象, 贫原子区硬化模型并不能给出相应的理论解释. 为此, 在布卢伊特等工作的基础上 (Blewitt et al. 1960), 辛格等提出了缺陷级联诱导源硬化 (cascade-induced source hardening, CISH) 模型 (Singh et al. 1997), 其主旨思想是认为辐照导致的屈服应力上升来自于法兰克-里德 (Frank-Read) 位错源在辐照条件下难以激发出位错. 但是实验表明, 缺陷级联诱导源硬化模型并不能很好的描述一些合金材料的辐照力学性能 (Robach et al. 2003), 同时也没有考虑辐照效应与辐照剂量的关系 (Singh et al. 1997), 因而具有一定的局限性.

4.2 辐照晶体塑性模型

近年来, 为了能够有效地预测辐照金属材料的宏观力学性能, 人们开始在传统的晶体塑性理论 (Asaro & Rice 1977, Hill 1966, Hill & Rice 1972) 的基础上考虑辐照硬化效应的影响, 进而发展了辐照晶体塑性理论模型, 并且在此基础上分析温度、材料结构等因素对辐照金属力学性能的影响. 传统晶体塑性理论认为位错滑移导致材料发生塑性变形, 滑移系 α 的塑性应变率一般采用幂次法则 (Hutchinson 1976, Peirce et al. 1982)

$$\dot{\gamma}^\alpha = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\tau^\alpha}{\tau_c^\alpha} \right)^{\frac{1}{m}} \text{sign}(\tau^\alpha) \quad (2)$$

其中, $\dot{\gamma}_0$ 和 m 分别是参考应变率和应变率敏感系数, τ^α 是相应滑移系的剪应力分量. τ_c^α 是临界切应力 (CRSS), 表征位错在相应滑移系滑移的难易程度. 对于传统无辐照硬化效应的晶体塑性理论模型而言, 临界切应力一般包括材料固有的晶格阻力 (lattice friction) τ_0 、位错相互作用对位错滑移的阻力 τ_n^α (位错网络形成的背应力 (back stress)) 以及材料微结构对位错滑移的影响 τ_s^α , 如晶体尺寸效应 (Hall 1951, Petch 1953, von Blanckenhagen et al. 2001, 2003) 或者孪晶材料中孪晶界的影响 (Lu et al. 2009). 当考虑辐照硬化效应时, 位错在滑移系上的滑移还会遇到辐照缺陷的阻碍作用 τ_d^α , 故辐照晶体塑性模型中临界切应力的一般形式可表示为

$$\tau_c^\alpha = \tau_c^\alpha(\tau_0, \tau_n^\alpha, \tau_d^\alpha, \tau_s^\alpha) \quad (3)$$

下面, 将简要回顾近年来关于辐照晶体塑性理论模型的研究进展.

在贫原子区辐照硬化模型的基础上, 人们针对面心立方结构材料建立了基于位错密度的辐照晶体塑性模型 (Arsenlis et al. 2004). 在该模型中, 材料强度来源于位错之间的相互作用以及位错与缺陷 (层错四面体) 的相互作用, 并且该模型假设缺陷强度

只与缺陷大小有关同时辐照缺陷的体积分数在塑性变形过程中保持不变. 通过将晶粒辐照本构关系与有限元计算方法结合, 人们分析了宏观多晶辐照铜的拉伸力学性能, 并且能够定性的与实验数据比较, 能够有效的刻画辐照硬化的现象, 并且硬化程度随辐照剂量的增加而上升. 但是该模型假设缺陷密度随加载过程而增加, 这与实验观察和分子动力学模拟的结果相违背.

克里希纳等发展了基于率无关理论的面心立方结构材料辐照晶体塑性模型 (Krishna et al. 2010). 该模型认为临界切应力主要来源于位错相互作用以及位错与缺陷相互作用, 并且其相应的演化规律都基于一定的物理基础. 在晶粒尺度和多晶尺度, 该模型能够较好的描述材料在屈服点前后的辐照力学行为, 包括辐照硬化和后屈服软化以及辐照前后流动应力不重合. 同样结合有限元的方法, 他们利用该模型模拟了辐照多晶铜的力学性能, 并且与相关实验结果吻合较好, 体现出该模型一定的合理性.

在其理论模型的基础之上, 他们进而发展了针对体心立方材料钼的辐照理论模型, 其主要分析了在低温 ($0.05 < T/T_m < 0.2$) 和低辐照剂量时金属钼特有的辐照软化现象 (Krishna & De 2011). 该模型将临界切应力分为热相关和热无关两部分, 其中热无关的部分由位错密度和缺陷密度决定, 而热相关的部分采用温度函数来描述. 通过理论分析, 辐照软化与临界温度有关, 在一定辐照剂量范围内, 临界温度随辐照剂量的上升而降低, 从而导致在一定温度范围内辐照情况下的流动应力比未辐照情况下的更低, 并与相关实验数据吻合较好.

帕特拉和麦克道尔针对体心立方结构材料建立了较为系统的辐照理论框架 (Patra & McDowell 2012, 2013). 该模型不仅分别考虑了辐照产生的点缺陷和位错环随加载过程的演化规律, 还分析了辐照蠕变 (Bullough & Wood 1980, Matthews & Finnis 1988)、位错交滑移 (cross-slip) (Rhee et al. 1998) 和位错攀移 (dislocation climb) (Mansur 1979) 等因素对材料力学性能辐照效应的影响. 通过与有限元方法结合, 该模型能够定性描述辐照产生的局部化塑性变形现象, 并且理论预测的宏观多晶辐照结果与实验数据吻合较好. 但是由于该模型考虑的影响因素较多, 使得模型参数过于复杂.

以上辐照晶体塑性模型都是将辐照硬化效应考虑到传统的晶体塑性理论框架内, 在位错滑移的过程中, 不仅考虑位错相互作用还包含了辐照缺陷对位错运动的阻碍作用, 因而能够体现辐照硬化效应. 在缺陷密度的演化过程中, 位错滑移一般会导致辐照缺陷的湮灭或缺陷性质的改变, 使得缺陷密度随塑性变形而不断降低, 这会导致材料发生局部化塑性变形现象以及当辐照剂量达到一定量时出现过屈服点流动应力下降的情况. 但是在上述辐照理论模型中, 辐照缺陷通常是用标量性质的变量来刻画, 使其不能够有效地描述辐照缺陷与滑移位错的空间相互作用. 通过实验观察和数值模拟表明, 辐照产生的缺陷有自身的特征平面, 而位错滑移也是在特定的滑移系, 所以缺陷与位错的相互作用具有很强的空间性, 为了更加准确地描述缺陷与位错的相互

作用, 其相互作用的空间性必须予以考虑. 此外, 建立从晶粒尺度的辐照本构关系到宏观多晶材料力学性质的跨尺度联系通常采用传统有限元计算方法, 但是值得指出的是有限元方法通常是基于泰勒形式的均一化理论来得到每一个积分点的宏观力学性质 (Taylor 1938), 而忽略了晶粒之间由于取向以及晶界等因素导致的应力分布不均匀性 (Wang et al. 2010a), 同时有限元较大的计算量在一定程度上也限制了其广泛运用, 因而建立更准确更有效的跨尺度手段将具有重要意义, 如弹黏塑性自洽理论 (Coulibaly & Sabar 2011, Paquin et al. 2001, Paquin et al. 1999, Sabar et al. 2002).

4.3 辐照晶体张量模型

最近, 巴顿等分别针对体心立方结构和面心立方结构的辐照金属材料提出了相应的辐照晶体张量模型 (Barton et al. 2013, Xiao et al. 2015a), 较好的考虑了位错环 (体心立方材料中的主要缺陷) 和层错四面体 (面心立方材料中的主要缺陷) 与滑移位错的空间相互作用, 进而能够有效的模拟受辐照影响材料发生塑性变形时产生的局部化塑性变形现象. 如图 24 所示, 当位错滑移平面与缺陷所在特征平面相交时, 滑移位错必定会与缺陷发生相互作用; 当位错滑移平面与位错环所在特征平面平行时, 位错与位错环的相互作用不会发生; 当位错滑移平面与层错四面体所在特征平面平行时, 情况将变得复杂一些, 由于层错四面体具有一定的几何高度, 所以在这种情况下位错与层错四面体仍存在相互作用的概率 (Krishna et al. 2010). 下面将以面心立方结构为例介绍辐照晶体张量模型的具体内容, 同时分析尺寸效应和温度效应对材料辐照力学性能的影响, 关于体心立方结构的辐照晶体张量模型可见参考文献 (Barton et al. 2013).

在辐照面心立方结构材料中, 位错滑移主要受到层错四面体的阻碍作用, 在滑移系 α 中, 辐照硬化效应可表示为 (Xiao et al. 2015a)

$$\tau_d^\alpha = b\mu \sqrt{h_d \sum_{\beta=1}^{N_d} \mathbf{N}^\alpha : \mathbf{H}^\beta} \quad (4)$$

其中, h_d 是缺陷硬化强弱系数, N_d 是缺陷特征平面的数量, 对于层错四面体而言 $N_d = 4$. $\mathbf{N}^\alpha$ 和 $\mathbf{H}^\beta$ 分别是描述位错和缺陷的二阶张量, 其定义为

$$\mathbf{N}^\alpha = \mathbf{n}^\alpha \otimes \mathbf{n}^\alpha \quad (5)$$

和

$$\mathbf{H}^\beta = N_{\text{def}} d_{\text{def}} (\mathbf{I} - \mathbf{n}^\beta \otimes \mathbf{n}^\beta + P_{\text{ann}}^\alpha \delta_\alpha^\beta \mathbf{n}^\beta \otimes \mathbf{n}^\beta) \quad (6)$$

其中, N_{def} 和 d_{def} 分别是缺陷体密度和大小, $\mathbf{n}^\alpha$ 和 $\mathbf{n}^\beta$ 分别是滑移位错和缺陷特征平面的法向量, δ_α^β 是克罗内克符号, P_{ann}^α 是位错与缺陷发生接触的概率 (Krishna et al. 2010). 从数学运算上分析, 在式 (4) 中, $\mathbf{N}^\alpha$ 和 $\mathbf{H}^\beta$ 的缩并意味着当 $\mathbf{n}^\alpha$ 和 $\mathbf{n}^\beta$ 平行时

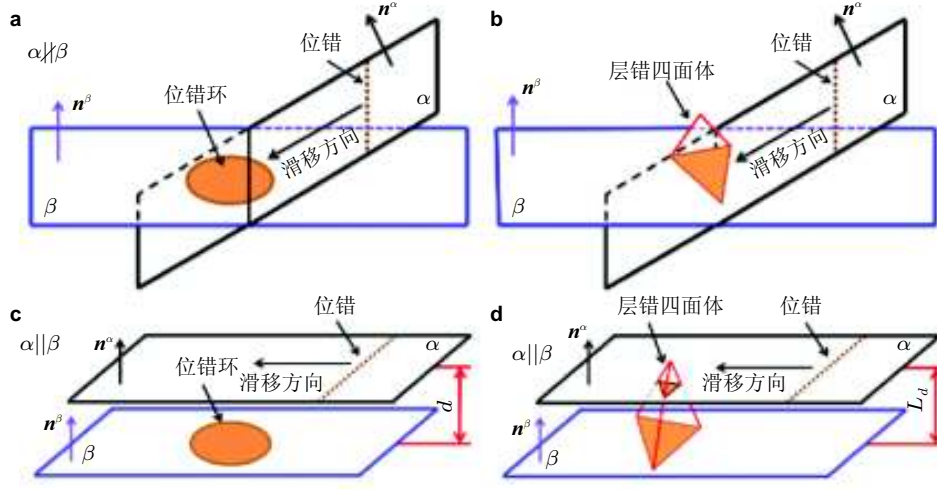


图 24

位错环和层错四面体与位错的空间相互作用 (Xiao et al. 2015a). 版权归爱思唯尔出版社所有

将位错描述张量 $\mathbf{N}^\alpha$ 投影到缺陷特征平面的法向方向, 而当 $\mathbf{n}^\alpha$ 和 $\mathbf{n}^\beta$ 不平行时将位错描述张量 $\mathbf{N}^\alpha$ 投影到缺陷特征平面的切向方向 (Wang et al. 2010b); 从物理意义上分析, 当 $\mathbf{n}^\alpha$ 和 $\mathbf{n}^\beta$ 平行时, $\mathbf{N}^\alpha$ 和 $\mathbf{H}^\beta$ 的缩并表示位错和缺陷的概率接触密度, 而当 $\mathbf{n}^\alpha$ 和 $\mathbf{n}^\beta$ 不平行时, $\mathbf{N}^\alpha$ 和 $\mathbf{H}^\beta$ 的缩并表示位错和缺陷的接触密度. 即根据式 (4)~ 式 (6), 当 $\mathbf{n}^\alpha$ 和 $\mathbf{n}^\beta$ 不平行时

$$\mathbf{N}^\alpha : \mathbf{H}^\beta = N_{\text{def}} d_{\text{def}} [1 - (\mathbf{n}^\alpha \cdot \mathbf{n}^\beta)^2] \quad (7)$$

表示接触密度, 当 $\mathbf{n}^\alpha$ 和 $\mathbf{n}^\beta$ 平行时

$$\mathbf{N}^\alpha : \mathbf{H}^\alpha = P_{\text{ann}}^\alpha N_{\text{def}} d_{\text{def}} \quad (8)$$

表示位错和缺陷的概率接触密度. 滑移位错与缺陷相互作用之后, 缺陷通量(5)蚊因而缺陷密度的演化也与位错和缺陷的空间相互作用有关, 因此, 巴顿等提出了指数缺陷衰减法则 (Barton et al. 2013)

$$\dot{\mathbf{H}}^\beta = -\eta \sum_{\alpha=1}^{N_s} (\mathbf{N}^\alpha : \mathbf{H}^\beta) \mathbf{N}^\alpha |\dot{\gamma}^\alpha| \quad (9)$$

其中, η 是缺陷湮灭系数, 对于面心立方结构而言 $N_s = 12$. 从式 (9) 可以看出, 在 β 平面的缺陷演化受到所有滑移系上位错的影响, 并且这种影响是空间性的.

通过建立辐照晶体张量模型, 不仅可以预测材料的辐照硬化行为, 还可以详细的分析缺陷与位错演化的细节. 如图 25 所示, 在不同的滑移系中缺陷和位错的演化规律是完全不一样的, 同时辐照缺陷会影响滑移位错密度的演化. 当同时考虑材料的尺寸效应和辐照效应时, 其力学性能变得更加复杂. 基纳等对不同尺寸的辐照单晶铜进行了力学性能研究, 发现在一定的辐照剂量下材料存在一个临界尺寸, 当单晶尺寸在临界尺寸之上时, 辐照效应是影响材料力学性能的主要因素; 而当单晶尺寸小于临界尺寸时, 尺寸效应占主导作用 (Kiener et al. 2011). 在上述辐照晶体张量模型的基础上考虑晶粒尺寸效应的影响, 需分析两部分影响因素: (1) 晶粒大小对位错激发 (对单晶而言) 或者位错滑移 (对多晶而言) 难易程度的影响, (2) 晶粒大小对位错以及缺陷分布的影响.

对单晶和多晶而言, 尺寸效应对材料屈服应力的影响可以用如下经验公式 (Kraft et al. 2010) 给出

$$\sigma_y = \sigma_0 + kd^n \quad (10)$$

其中, σ_y 和 σ_0 分别表示材料的屈服应力和体材料的屈服强度, d 是材料的几何尺寸. k 和 n 是材料常数. 对于多晶材料, $n = -0.5$, 式 (10) 即大家熟知的霍尔 - 佩奇 (Hall-Petch) 关系 (Cottrell 1958, Hall 1951, Li 1963). 对于单晶材料, n 一般从 -0.5 到 -1 (Kiener et al. 2011, Uchic et al. 2009). 可以看到, 随材料尺寸的减小, 其屈服应力都会增加. 但是, 值得注意的是, 单晶和多晶的尺寸效应机理是完全不一样的. 多晶材料体现的霍尔 - 佩奇效应来自于滑移位错在晶界处的堆积 (dislocation pile-up) 阻碍位错的进一步滑移, 而单晶材料的尺寸效应则是由于位错亏源硬化机理, 即随着单晶尺寸的减小, 晶粒内部的位错源数减少, 使得激发位错产生塑性变形越来越难, 另一方面可

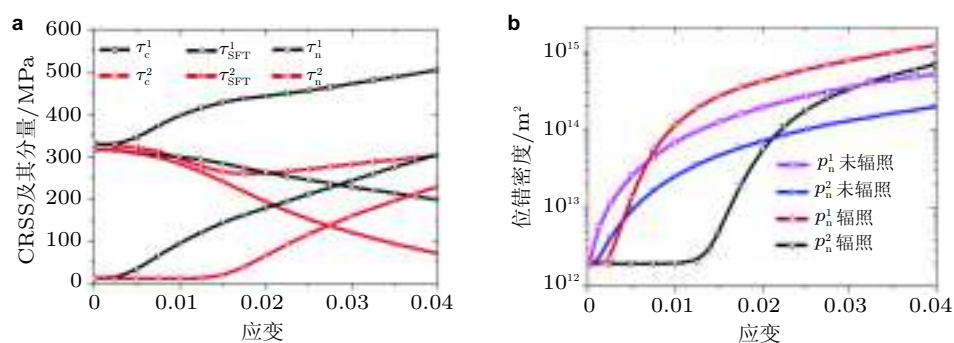


图 25

(a) 临界切应力及其分量在不同滑移的演化; (b) 位错密度在不同滑移的演化 (Xiao et al. 2015a). 版权归爱思唯尔出版社所有

滑移位错滑移到自由表面时会从表面逃逸, 导致位错密度减少, 故为保证有足够的位错滑移产生塑性变形, 外界载荷的激励就必须随单晶尺寸的减小而增加 (Kraft et al. 2010; von Blanckenhagen et al. 2001, 2003). 因而, 尺寸效应对材料屈服应力的贡献 τ_s^α 可表示为

$$\tau_s^\alpha = \begin{cases} kd^{-0.5}, & \text{多晶} \\ \frac{1}{s} \frac{\mu}{2\pi} \frac{b}{q} \ln \frac{\kappa q}{b}, & \text{单晶} \end{cases} \quad (11)$$

其中, s 和 κ 是材料常数, $q = d/3$ 是位错源尺寸 (Kraft et al. 2010). 此外, 晶粒尺寸对位错及缺陷分布具有影响: 首先, 受单晶自由表面或者多晶晶界的影响, 靠近晶粒自由表面或者晶界的表面区域内的位错和辐照缺陷会通过自由表面逃逸或者被晶界吸收, 从而使得表面区域内的位错和缺陷密度减少; 其次, 晶粒尺寸的减少会导致位错激发越来越难. 因此, 晶粒尺寸的减小会导致位错之间相互作用的强度以及位错与缺陷相互作用的强度减弱. 为有效考虑晶粒表面效应的影响, 可采用芯壳模型 (Xiao et al. 2015a), 如图 26 所示. 该模型将晶粒分为芯和壳两部分: 在壳区域, 受自由表面或者晶界影响, 位错和缺陷消失; 在芯区域, 位错相互作用及位错与缺陷相互作用不受表面效应影响. 故位错相互作用及位错与缺陷相互作用的有效区域的体积比 f_V^n 和 f_V^d 为

$$f_V^n = f_V^d = \left(\frac{d - 2\omega}{d} \right)^\varsigma \quad (12)$$

其中, ω 是壳区域的宽度, $2 \leq \varsigma \leq 3$ 是描述几何构型的参数. 故考虑尺寸效应对缺陷硬化强弱系数 h_d 的影响

$$h_d = h_{d0} f_V^n f_V^d = h_{d0} \left(\frac{d - 2\omega}{d} \right)^{2\varsigma} \quad (13)$$

其中, h_{d0} 表示体材料的缺陷硬化强弱系数. 从式 (13) 可以看出, 随着晶粒尺寸的减小, 缺陷硬化强弱系数会变小, 体现出晶粒尺寸导致的表面效应对辐照效应的影响.

对于单晶体材料的辐照力学性能, 辐照会导致材料发生明显的辐照硬化现象, 同时在辐照剂量为 0.1 dpa 时, 会出现过屈服应力点流动应力下降的现象. 当同时考虑尺寸效应和辐照效应时, 位错源硬化机理和位错与缺陷相互作用机理会相互竞争主导材料的力学行为: 对于不同的单晶材料在不同的辐照条件下, 会存在一个临界尺寸, 在临界尺寸之下, 材料的力学性能受位错源硬化机理控制; 而在临界尺寸之上时, 辐照效应会主导材料的力学特性, 如图 27 所示.

除了辐照效应和尺寸效应, 温度也是将影响金属材料力学性能的辐照效应. 温度的影响主要包括三部分:

第一, 温度的变化会改变材料的弹性常数. 早在 20 世纪六七十年代, 已有大量的理论和实验研究表明材料的弹性常数与温度有关, 并且由瓦西尼提出的经验公式能够

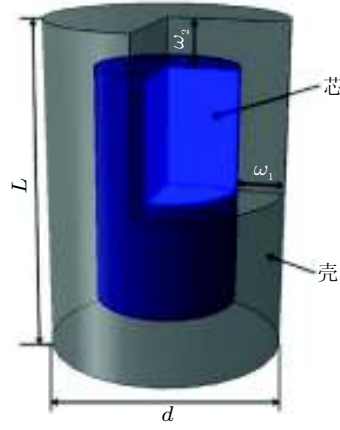


图 26

芯壳模型示意图 (Xiao et al. 2015a). 版权归爱思唯尔出版社所有

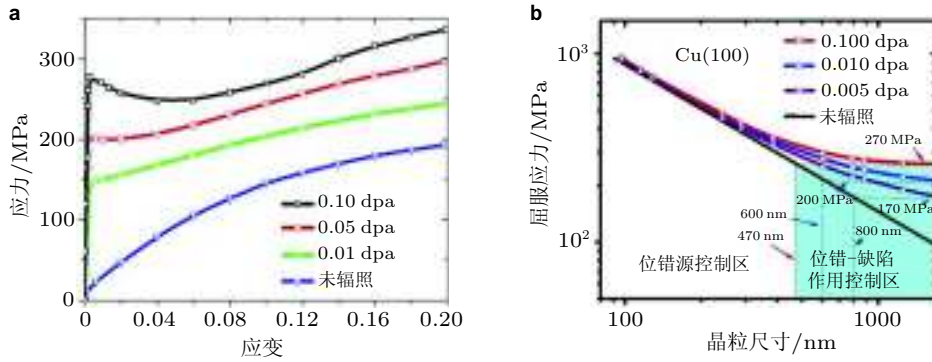


图 27

(a) 单晶铜辐照应力应变曲线; (b) 尺寸和辐照效应对屈服应力的影响 (Xiao et al. 2015a). 版权归爱思唯尔出版社所有

很好地拟合大部分实验数据 (Varshni 1970)

$$C_{ij}(T) = C_{ij}^0 - \frac{s_{ij}}{\exp(T_0/T - 1)} \quad (14)$$

其中, C_{ij}^0 是 0K 时的弹性常数, s_{ij} 和 T_0 是实验拟合参数. 因而温度相关的剪切模量可表示为 (Zhang et al. 2013)

$$\mu(T) = \sqrt{C_{44}(T)(C_{11}(T) - C_{12}(T))/2} \quad (15)$$

第二, 温度会影响位错密度的演化过程. 位错密度的演化包括位错增殖和位错湮

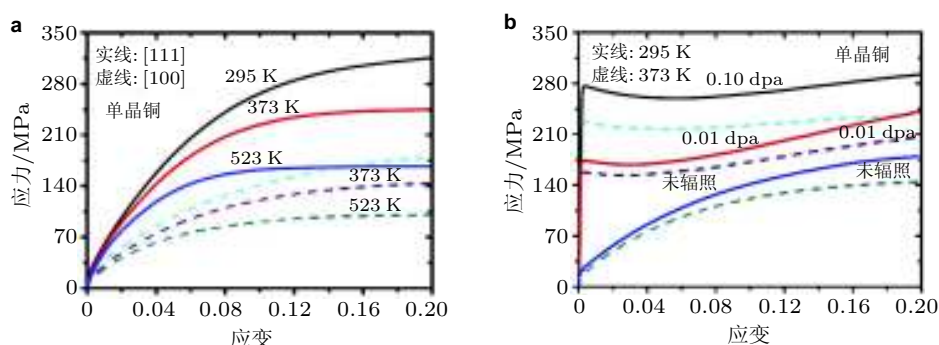


图 28

(a) 未辐照单晶铜不同温度不同加载方向的应力应变曲线; (b) 单晶铜不同温度不同辐照条件下的应力应变曲线 (Xiao et al. 2015b). 版权归爱思唯尔出版社所有

灭, 根据考克斯和麦肯热激理论 (Kocks 1977, Mecking & Kocks 1981), 位于滑移系 α 上的位错密度 ρ_n^α 的演化可表示为

$$\dot{\rho}_n^\alpha = \dot{\gamma}^\alpha \left[k_1 \sqrt{\rho_n^\alpha} - k_2^\alpha (\dot{\epsilon}, T) \rho_n^\alpha \right] \quad (16)$$

其中, k_1 是与温度无关且率无关描述位错增殖的系数, k_2^α 是与温度和率相关描述位错湮灭的系数 (Beyerlein & Tome 2008). 温度的上升会导致位错湮灭机制的增强, 从而使得饱和位错密度下降, 在宏观上导致材料的流动应力减低, 如图 28 所示. 此外, 位错密度的演化会影响缺陷密度的演化, 故温度也会影响缺陷密度的演化.

第三, 温度的变化会影响位错相互作用以及位错与缺陷相互作用的强弱. 通过实验发现, 缺陷硬化强弱系数 h_d 会随温度的升高而降低, 这表明在较高温度下, 滑移位错穿越并湮灭辐照缺陷会变容易, 从而所需的外界载荷下降, 如图 28 所示.

本节主要综述了国内外相关辐照硬化理论模型的研究进展. 总的来说, 目前的辐照硬化理论已经取得一定的研究进展, 能够在低辐照剂量和低温条件下, 较好的描述辐照对金属材料力学性能的影响, 包括辐照硬化、功硬化系数下降、过屈服点后应力下降以及局部化塑性变形现象等. 但值得指出的是, 目前仍然存在很多领域亟需理论工作的研究, 如高辐照剂量和高温环境下的辐照理论模型、辐照导致材料脆化的理论分析以及不同结构材料 (如纳米和孪晶材料) 的辐照力学模型等. 可以看到, 辐照理论模型的研究通病是假设的可靠性与合理性又需要与辐照实验观察和数值模拟的结果相验证. 深入开展辐照理论模型的研究对了解材料辐照效应的机理以及设计良好的抗辐照材料具有很重要的意义.

5 展望

金属材料辐照力学性能的研究在固体力学和材料科学领域已获得一定的发展, 通过实验、数值模拟和理论研究的手段, 在微观尺度, 人们对辐照缺陷的形成、演化以及其与位错或者材料微纳结构相互作用的机理有了较为全面的认识; 在宏观尺度, 人们对辐照缺陷导致材料发生辐照硬化和辐照脆化等机制的研究取得了阶段性的成果. 随着实验设备和表征手段的不断提升、大规模数值计算能力不断增强以及辐照理论模型的不断完善, 从微观尺度深入研究缺陷的演化过程和塑性变形时的物理机制将对材料受辐照后宏观力学性能的理论研究提供良好的支持, 并为设计具有优良抗辐照性能的结构材料提供可靠的实验数据和理论支持. 目前, 该领域的研究有如下几方面值得重视:

(1) 高辐照剂量和高温条件下材料的辐照力学性能. 在下一代聚变反应堆中材料主要处于高辐照和高温环境, 因此, 开展极端条件下, 金属材料力学性能的辐照效应研究具有重要的意义. 高辐照剂量会使材料中的缺陷以空洞为主, 在外载条件下, 空洞可能发生长大现象, 同时位错与空洞的相互作用也将影响材料宏观力学的性能, 开展相关数值模拟、实验研究以及理论分析工作, 研究具有辐照空洞结构材料的力学特性是亟需解决的问题之一.

(2) 辐照脆化的微观机理和理论分析. 辐照效应最主要的特征包括辐照硬化和辐照脆化. 关于辐照硬化物理机理的认识已比较清晰, 并且理论分析也较为完善. 但是现有关于辐照脆化的研究较为有限, 通过大规模分子动力学模拟不同微纳结构受辐照缺陷影响下的断裂特性以及建立理论模型预测辐照材料的断裂行为是非常具有挑战性的工作.

(3) 辐照缺陷与位错相互作用的深入研究. 辐照缺陷会阻碍滑移位错的运动导致辐照硬化, 同时滑移位错运动受到阻碍后可能发生交滑移或者攀移现象, 从而绕过缺陷继续滑移. 这种交滑移现象将导致材料内形成一定宽度的无缺陷滑移通道, 从而导致局部塑性变形的产生. 深入分析位错与缺陷相互作用的各种机理对理解金属材料受辐照影响后的宏观力学性能具有重要意义.

(4) 纳米结构金属材料的辐照力学性能. 随着近年来纳米技术的不断发展, 新型纳米结构金属材料展现出优于传统多晶材料的力学性能, 如同时具有较高的强度和良好的韧性. 通过对纳米晶和孪晶材料的辐照实验发现, 其产生的缺陷比多晶材料少, 体现出良好的抗辐照性能. 但是对于纳米结构金属材料的辐照性能研究仍然十分有限, 通过大规模分子动力学研究辐照缺陷与晶界或者孪晶界的相互作用对其机理的理解将有重要的意义, 同时开展纳米结构金属材料的辐照力学性能测试将为理论分析预测提供基础.

(5) 金属材料力学性能辐照硬化研究的多尺度框架. 有效预测金属材料力学性能的辐照效应是一个典型的多尺度问题, 其主要包括了两个尺度的跨越: 原子尺度 (微观层次) 到晶粒尺度 (细观层次) 以及晶粒尺度 (细观层次) 到多晶尺度 (宏观层次) 的跨越. 从晶粒尺度的辐照晶体塑性模型到多晶尺度的宏观材料力学性能的预测可采用有限元和细观力学等方法, 但是建立从原子尺度的辐照损伤与晶粒尺度的辐照晶体力学行为的联系仍需大规模数值计算的系统性研究.

总之, 关于辐照对金属材料力学性能影响的研究仍有许多亟待深入研究的课题, 这些课题既具有物理与材料学科的背景, 更具有力学学科的特征, 需要力学工作者的参与, 甚至主导. 随着对辐照效应机理的进一步理解和理论与实验工作的进一步深入, 将为设计具有良好力学性能的抗辐照材料及其在工程中的实际应用奠定坚实的基础.

致 谢 国家杰出青年科学基金项目 (11225208) 和上海市东方学者项目资助.

参 考 文 献

- Alsabbagh A, Valiev R Z, Murty K L. 2013. Influence of grain size on radiation effects in a low carbon steel. *Journal of Nuclear Materials*, **443**: 302-310.
- Arsenlis A, Rhee M, Hommes G, Cook R, Marian J. 2012. A dislocation dynamics study of the transition from homogeneous to heterogeneous deformation in irradiated body-centered cubic iron. *Acta Materialia*, **60**: 3748-3757.
- Arsenlis A, Wirth B D, Rhee M. 2004. Dislocation density-based constitutive model for the mechanical behaviour of irradiated Cu. *Philosophical Magazine*, **84**: 3617-3635.
- Asaro R J, Rice J R. 1977. Strain localization in ductile single-crystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **25**: 309-338.
- Bai X M, Uberuaga B P. 2013. The influence of grain boundaries on radiation-induced point defect production in materials: A review of atomistic studies. *Jom*, **65**: 360-373.
- Bai X M, Voter A F, Hoagland R G, Nastasi M, Uberuaga B P. 2010. Efficient annealing of radiation damage near grain boundaries via interstitial emission. *Science*, **327**: 1631-1634.
- Barton N R, Arsenlis A, Marian J. 2013. A polycrystal plasticity model of strain localization in irradiated iron. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **61**: 341-351.
- Beamish E, Campa   C, Woo T K. 2010. Grain boundary sliding in irradiated stressed Fe-Ni bicrystals: a molecular dynamics study. *Journal of Physics: Condensed Matter*, **22**: 345006.
- Beyerlein I J, Caro A, Demkowicz M J, Mara N A, Misra A, Uberuaga B P. 2013. Radiation damage tolerant nanomaterials. *Materials Today*, **16**: 443-449.
- Beyerlein I J, Tome C N. 2008. A dislocation-based constitutive law for pure Zr including temperature effects. *International Journal of Plasticity*, **24**: 867-895.
- Blewitt T H, Coltman R R, Jamison R E, Redman J K. 1960. Radiation hardening of copper single crystals. *Journal of Nuclear Materials*, **2**: 277-298.
- Borovikov V, Tang X Z, Perez D, Bai X M, Uberuaga B P, Voter A F. 2013. Influence of point defects on grain boundary mobility in bcc tungsten. *Journal of Physics-Condensed Matter*, **25**: 035402.

- Briceno M, Kacher J, Robertson I M. 2013. Dynamics of dislocation interactions with stacking-fault tetrahedra at high temperature. *Journal of Nuclear Materials*, **433**: 390-396.
- Brimbal D, Decamps B, Barbu A, Meslin E, Henry J. 2011. Dual-beam irradiation of alpha-iron: Heterogeneous bubble formation on dislocation loops. *Journal of Nuclear Materials*, **418**: 313-315.
- Bullough R, Wood M H. 1980. Mechanisms of radiation-induced creep and growth. *Journal of Nuclear Materials*, **90**: 1-21.
- Campaña C, Boyle K, Miller R. 2008. Grain boundary motion assisted via radiation cascades in bcc Fe. *Physical Review B*, **78**: 134114.
- Cottrell A H. 1958. The 1958 institute of metals division lecture—theory of brittle fracture in steel and similar metals. *Transactions of the American Institute of Mining and Metallurgical Engineers*, **212**: 192-203.
- Coulibaly M, Sabar H. 2011. New integral formulation and self-consistent modeling of elastic-viscoplastic heterogeneous materials. *International Journal of Solids and Structures*, **48**: 753-763.
- de la Rubia T D, Zbib H M, Khraishi T A, Wirth B D, Victoria M, Caturla M J. 2000. Multiscale modelling of plastic flow localization in irradiated materials. *Nature*, **406**: 871-874.
- Demkowicz M J, Bellon P, Wirth B D. 2010. Atomic-scale design of radiation-tolerant nanocomposites. *Mrs Bulletin*, **35**: 992-998.
- Demkowicz M J, Hoagland R G, Hirth J P. 2008. Interface structure and radiation damage resistance in Cu-Nb multilayer nanocomposites. *Physical Review Letters*, **100**: 136102.
- Demkowicz M J, Thilly L. 2011. Structure, shear resistance and interaction with point defects of interfaces in Cu-Nb nanocomposites synthesized by severe plastic deformation. *Acta Materialia*, **59**: 7744-7756.
- Drouet J, Dupuy L, Onimus F, Mompiau F, Perusin S, Ambard A. 2014. Dislocation dynamics simulations of interactions between gliding dislocations and radiation induced prismatic loops in zirconium. *Journal of Nuclear Materials*, **449**: 252-262.
- Fabritsiev S A, Pokrovsky A S. 2003. The effects of grain size and helium accumulation on radiation hardening and loss of ductility of pure copper for ITER application. *Fusion Engineering and Design*, **65**: 545-559.
- Fabritsiev S A, Pokrovsky A S. 2007. Effect of irradiation temperature on microstructure, radiation hardening and embrittlement of pure copper and copper-based alloy. *Journal of Nuclear Materials*, **367**: 977-983.
- Fabritsiev S A, Pokrovsky A S. 2009. Effect of irradiation temperature and dose on SHC of pure Cu. *Journal of Nuclear Materials*, **386-88**: 268-272.
- Fabritsiev S A, Pokrovsky A S. 2011. Effect of irradiation temperature and dose on radiation hardening of some pure metals. *Journal of Nuclear Materials*, **417**: 940-943.
- Fabritsiev S A, Pokrovsky A S, Ostrovsky S E. 2004. Effect of the irradiation-annealing-irradiation cycle on the mechanical properties of pure copper and copper alloy. *Journal of Nuclear Materials*, **324**: 23-32.
- Hall E O. 1951. The deformation and ageing of mild steel. 3. Discussion of results. *Proceedings of the Physical Society of London Section B*, **64**: 747-753.
- Hill R. 1966. Generalized constitutive relations for incremental deformation of metal crystals by multislip. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **14**: 95.
- Hill R, Rice J R. 1972. Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **20**: 401.

- Hutchinson J W. 1976. Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline metaterials. *Proceedings of the Royal Society of London Series a-Mathematical and Physical Sciences*, **348**: 101-127.
- Jiao Z, Was G S. 2010. The role of irradiated microstructure in the localized deformation of austenitic stainless steels. *Journal of Nuclear Materials*, **407**: 34-43.
- Khraishi T A, Zbib H M, De La Rubia T D, Victoria M. 2002. Localized deformation and hardening in irradiated metals: Three-dimensional discrete dislocation dynamics simulations. *Metallurgical and Materials Transactions B-Process Metallurgy and Materials Processing Science*, **33**: 285-296.
- Kiener D, Hosemann P, Maloy S A, Minor A M. 2011. In situ nanocompression testing of irradiated copper. *Nature Materials*, **10**: 608-613.
- Kocks U F. 1977. Theory of an obstacle-controlled yield strength-report after an international workshop. *Materials Science and Engineering*, **27**: 291-298.
- Kojima S, Zinkle S J, Heinisch H L. 1991. Radiation hardening in neutron-irradiated polycrystalline copper: Barrier strength of defect clusters. *Journal of Nuclear Materials*, **179**: 982-985.
- Kraft O, Gruber P A, Moenig R, Weygand D. 2010. Plasticity in confined dimensions. *Annual Review of Materials Research*, **40**: 293-317.
- Krishna S, De S. 2011. A temperature and rate-dependent micromechanical model of molybdenum under neutron irradiation. *Mechanics of Materials*, **43**: 99-110.
- Krishna S, Zamiri A, De S. 2010. Dislocation and defect density-based micromechanical modeling of the mechanical behavior of fcc metals under neutron irradiation. *Philosophical Magazine*, **90**: 4013-4025.
- Lee E H, Byun T S, Hunn J D, Yoo M H, Farrell K, Mansur L K. 2001a. On the origin of deformation microstructures in austenitic stainless steel: Part I—Microstructures. *Acta Materialia*, **49**: 3269-3276.
- Lee E H, Yoo M H, Byun T S, Hunn J D, Farrell K, Mansur L K. 2001b. On the origin of deformation microstructures in austenitic stainless steel: Part II—Mechanisms. *Acta Materialia*, **49**: 3277-3287.
- Lee H J, Shim J H, Wirth B D. 2007. Molecular dynamics simulation of screw dislocation interaction with stacking fault tetrahedron in face-centered cubic Cu. *Journal of Materials Research*, **22**: 2758-2769.
- Lee H J, Wirth B D. 2009. Molecular dynamics simulation of the interaction between a mixed dislocation and a stacking fault tetrahedron. *Philosophical Magazine*, **89**: 821-841.
- Li D, Zbib H, Garmestani H, Sun X, Khaleel M. 2011. Modeling of irradiation hardening of polycrystalline materials. *Computational Materials Science*, **50**: 2496-2501.
- Li J C M. 1963. Petch relation and grain boundary sources. *Transactions of the Metallurgical Society of Aime*, **227**: 239.
- Li W, Sun L, Xue J, Wang J, Duan H. 2013. Influence of ion irradiation induced defects on mechanical properties of copper nanowires. *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms*, **307**: 158-164.
- Li W N, Xue J M, Wang J X, Duan H L. 2014. Mechanical properties of self-irradiated single-crystal copper. *Chinese Physics B*, **23**: 036101.
- Lu K, Lu L, Suresh S. 2009. Strengthening materials by engineering coherent internal boundaries at the nanoscale. *Science*, **324**: 349-352.
- Lucas G E. 1993. The evolution of mechanical property change in irradiated austenitic stainless-steels. *Journal of Nuclear Materials*, **206**: 287-305.
- Luppo M I, Bailat C, Schaublin R, Victoria M. 2000. Tensile properties and microstructure of 590 MeV proton-irradiated pure Fe and a Fe-Cr alloy. *Journal of Nuclear Materials*, **283**: 483-487.

- Mansur L K. 1979. Irradiation creep by climb-enabled glide of dislocations resulting from preferred absorption of point-defects. *Philosophical Magazine a-Physics of Condensed Matter Structure Defects and Mechanical Properties*, **39**: 497-506.
- Matsukawa Y, Osetsky Y N, Stoller R E, Zinkle S J. 2006. Destruction processes of large stacking fault tetrahedra induced by direct interaction with gliding dislocations. *Journal of Nuclear Materials*, **351**: 285-294.
- Matsukawa Y, Osetsky Y N, Stoller R E, Zinkle S J. 2008. Mechanisms of stacking fault tetrahedra destruction by gliding dislocations in quenched gold. *Philosophical Magazine*, **88**: 581-597.
- Matsukawa Y, Zinkle S J. 2004. Dynamic observation of the collapse process of a stacking fault tetrahedron by moving dislocations. *Journal of Nuclear Materials*, **329**: 919-923.
- Matsuoka H, Yamasaki T, Zheng Y J, Mitamura T, Terasawa M, Fukami T. 2007. Microstructure and mechanical properties of neutron-irradiated ultra-fine-grained SUS316L stainless steels and electrodeposited nanocrystalline Ni and Ni-W alloys. *Materials Science and Engineering a-Structural Materials Properties Microstructure and Processing*, **449**: 790-793.
- Matthews J R, Finnis M W. 1988. Irradiation creep models—An overview. *Journal of Nuclear Materials*, **159**: 257-285.
- Mecking H, Kocks U F. 1981. Kinetics of flow and strain-hardening. *Acta Metallurgica*, **29**: 1865-1875.
- Nita N, Schaeublin R, Victoria M. 2004. Impact of irradiation on the microstructure of nanocrystalline materials. *Journal of Nuclear Materials*, **329-333**: 953-957.
- Nita N, Schaeublin R, Victoria M, Valiev R Z. 2005. Effects of irradiation on the microstructure and mechanical properties of nanostructured materials. *Philosophical Magazine*, **85**: 723-735.
- Nogaret T, Robertson C, Rodney D. 2007. Atomic-scale plasticity in the presence of Frank loops. *Philosophical Magazine*, **87**, 945-966.
- Odette G R, Alinger M J, Wirth B D. 2008. Recent developments in irradiation-resistant steels. *Annual Review of Materials Research*, **38**: 471-503.
- Odette G R, Frey D. 1979. Development of mechanical property correlation methodology for fusion environments. *Journal of Nuclear Materials*, **85-6**: 817-822.
- Odette G R, Lucas G E. 2001. Embrittlement of nuclear reactor pressure vessels. *Jom-Journal of the Minerals Metals & Materials Society*, **53**: 18-22.
- Orowan E. 1942. A type of plastic deformation new in metals. *Nature*, **149**: 643-644.
- Osetsky Y N, Bacon D J. 2001. Defect cluster formation in displacement cascades in copper. *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms*, **180**: 85-90.
- Osetsky Y N, Bacon D J. 2003. Atomic-scale modelling of primary damage and properties of radiation defects in metals. *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms*, **202**: 31-43.
- Osetsky Y N, Bacon D J, Serra A, Singh B N, Golubov S I. 2000. Stability and mobility of defect clusters and dislocation loops in metals. *Journal of Nuclear Materials*, **276**: 65-77.
- Osetsky Y N, Rodney D, Bacon D J. 2006. Atomic-scale study of dislocation-stacking fault tetrahedron interactions. Part I: mechanisms. *Philosophical Magazine*, **86**: 2295-2313.
- Osetsky Y N, Stoller R E, Rodney D, Bacon D J. 2005. Atomic-scale details of dislocation-stacking fault tetrahedra interaction. *Materials Science and Engineering a-Structural Materials Properties Microstructure and Processing*, **400**: 370-373.

- Paquin A, Berbenni S, Favier V, Lemoine X, Berveiller M. 2001. Micromechanical modeling of the elastic-viscoplastic behavior of polycrystalline steels. *International Journal of Plasticity*, **17**: 1267-1302.
- Paquin A, Sabar H, Berveiller M. 1999. Integral formulation and self-consistent modelling of elastoviscoplastic behavior of heterogeneous materials. *Archive of Applied Mechanics*, **69**: 14-35.
- Patra A, McDowell D L. 2012. Crystal plasticity-based constitutive modelling of irradiated bcc structures. *Philosophical Magazine*, **92**: 861-887.
- Patra A, McDowell D L. 2013. Continuum modeling of localized deformation in irradiated bcc materials. *Journal of Nuclear Materials*, **432**: 414-427.
- Peirce D, Asaro R J, Needleman A. 1982. An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single-crystals. *Acta Metallurgica*, **30**: 1087-1119.
- Perez-Perez F J, Smith R. 2000. Structural changes at grain boundaries in bcc iron induced by atomic collisions. *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms*, **164**: 487-494.
- Petch N J. 1953. The cleavage strength of polycrystals. *Journal of the Iron and Steel Institute*, **174**: 25-28.
- Rhee M, Zbib H M, Hirth J P, Huang H, de la Rubia T. 1998. Models for long-/short-range interactions and cross slip in 3D dislocation simulation of BCC single crystals. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **6**: 467-492.
- Robach J S, Robertson I M, Lee H J, Wirth B D. 2006. Dynamic observations and atomistic simulations of dislocation-defect interactions in rapidly quenched copper and gold. *Acta Materialia*, **54**: 1679-1690.
- Robach J S, Robertson I M, Wirth B D, Arsenlis A. 2003. In-situ transmission electron microscopy observations and molecular dynamics simulations of dislocation-defect interactions in ion-irradiated copper. *Philosophical Magazine*, **83**: 955-967.
- Rose M, Balogh A G, Hahn H. 1997. Instability of irradiation induced defects in nanostructured materials. *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms*, **127**: 119-122.
- Sabar H, Berveiller M, Favier V, Berbenni S. 2002. A new class of micro-macro models for elastic-viscoplastic heterogeneous materials. *International Journal of Solids and Structures*, **39**: 3257-3276.
- Saintoyant L, Lee H J, Wirth B D. 2007. Molecular dynamics study of the interactions between dislocation and imperfect stacking fault tetrahedron in Cu. *Journal of Nuclear Materials*, **361**: 206-217.
- Samaras M, Derlet P M, Van Swygenhoven H, Victoria M. 2002. Computer simulation of displacement cascades in nanocrystalline Ni. *Physical Review Letters*, **88**: 125505.
- Samaras M, Derlet P M, Van Swygenhoven H, Victoria M. 2003. Radiation damage near grain boundaries. *Philosophical Magazine*, **83**: 3599-3607.
- Sharma G, Mukherjee P, Chatterjee A, Gayathri N, Sarkar A, Chakravartty J K. 2013. Study of the effect of alpha irradiation on the microstructure and mechanical properties of nanocrystalline Ni. *Acta Materialia*, **61**: 3257-3266.
- Sharma G, Sarkar A, Varshney J, Ramamurty U, Kumar A, Gupta S K, Chakravartty J K. 2011. Effect of irradiation on the microstructure and mechanical behavior of nanocrystalline nickel. *Scripta Materialia*, **65**: 727-730.
- Sharp J V, Makin, M J. 1965. Microstrain in neutron irradiated copper crystals. *Philosophical Magazine*, **12**: 427.
- Shimada M, Campbell D J, Mukhovatov, V, Fujiwara, M, Kirneva, N, Lackner, K, Nagami, M, Pustovitov, V.D, Uckan N, Wesley J, Asakura N, Costley A E, Donne A J H, Doyle E J, Fasoli A, Gormezano C,

- Gribov Y, Gruber O, Hender T C, Houlberg W, Ide S, Kamada Y, Leonard A, Lipschultz B, Loarte A, Miyamoto K, Osborne T H, Polevoi A, Sipps A C C. 2007. Progress in the ITER Physics Basis - Chapter 1: Overview and summary. *Nuclear Fusion*, **47**: S1-S17.
- Singh A, Tao N R, Dao M, Suresh S. 2012. Repeated frictional sliding properties of copper containing nanoscale twins. *Scripta Materialia*, **66**: 849-853.
- Singh B N, Edwards D J, Toft P. 2001. Effect of neutron irradiation and post-irradiation annealing on microstructure and mechanical properties of OFHC-copper. *Journal of Nuclear Materials*, **299**: 205-218.
- Singh B N, Foreman A J E, Trinkaus H. 1997. Radiation hardening revisited: role of intracascade clustering. *Journal of Nuclear Materials*, **249**: 103-115.
- Singh B N, Horsewell A, Toft P, Edwards D J. 1995. Temperature and dose dependencies of microstructure and hardness of neutron-irradiated OFHC copper. *Journal of Nuclear Materials*, **224**: 131-140.
- Singh B N, Zinkle S J. 1993. Defect accumulation in pure FCC metals in the transient regime - A review. *Journal of Nuclear Materials*, **206**: 212-229.
- Song D K, Li X G, Xue J M, Duan H L, Jin Z H. 2014. Irradiation-enhanced twin boundary migration in BCC Fe. *Philosophical Magazine Letters*, **94**: 361-369.
- Sugio K, Shimomura Y, de la Rubia T D. 1998. Computer simulation of displacement damage cascade formation near sigma 5 twist boundary in silver. *Journal of the Physical Society of Japan*, **67**: 882-889.
- Taylor, G I. 1938. Plastic strain in metals. *Journal of the Institute of Metals*, **62**: 307-324.
- Terentyev D, Bakaev A. 2013. Interaction of a screw dislocation with Frank loops in Fe-10Ni-20Cr alloy. *Journal of Nuclear Materials*, **442**: 208-217.
- Terentyev D, Bakaev A, Osetsky Y N. 2013. Interaction of dislocations with Frank loops in Fe-Ni alloys and pure Ni: An MD study. *Journal of Nuclear Materials*, **442**: S628-S632.
- Uchic M D, Shade P A, Dimiduk D M. 2009. Plasticity of micrometer-scale single crystals in compression. *Annual Review of Materials Research*, **39**: 361-386.
- Varshni Y P. 1970. Temperature dependence of the elastic constants. *Physical Review B-Solid State*, **2**: 3952-3958.
- Victoria M, Baluc N, Bailat C, Dai Y, Luppo M I, Schaublin R, Singh B N. 2000. The microstructure and associated tensile properties of irradiated fcc and bcc metals. *Journal of Nuclear Materials*, **276**: 114-122.
- von Blanckenhagen B, Gumbsch P, Arzt E. 2001. Dislocation sources in discrete dislocation simulations of thin-film plasticity and the Hall-Petch relation. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **9**: 157-169.
- von Blanckenhagen, B, Gumbsch, P, Arzt, E. 2003. Dislocation sources and the flow stress of polycrystalline thin metal films. *Philosophical Magazine Letters*, **83**: 1-8.
- Wang H, Wu P D, Tome C N, Huang Y. 2010a. A finite strain elastic-viscoplastic self-consistent model for polycrystalline materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **58**: 594-612.
- Wang Y, Weissmuller J, Duan H L. 2010b. Mechanics of corrugated surfaces. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **58**: 1552-1566.
- Wirth B D, Bulatov V V, de la Rubia T D. 2002. Dislocation-stacking fault tetrahedron interactions in Cu. *Journal of Engineering Materials and Technology-Transactions of the Asme*, **124**: 329-334.
- Wirth B D, Odette G R, Marian J, Ventelon L, Young-Vandersall J A, Zepede-Ruiz L A. 2004. Multiscale modeling of radiation damage in Fe-based alloys in the fusion environment. *Journal of Nuclear Materials*, **329**: 103-111.

- Xiao X Z, Song D K, Xue J M, Chu H J, Duan H L. 2015a. A size-dependent tensorial plasticity model for FCC singlecrystal with irradiation. *International Journal of Plasticity*, **65**: 152-167.
- Xiao X Z, Song D K, Xue J M, Chu H J, Duan H L. 2015b. A self-consistent plasticity theory for modeling the thermo-mechanical properties of irradiated FCC metallic polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **78**: 1-16.
- Yu K Y, Bufford D, Sun C, Liu Y, Wang H, Kirk M A, Li M, Zhang X. 2013. Removal of stacking-fault tetrahedra by twin boundaries in nanotwinned metals. *Nature Communications*, **4**: 1377-1377.
- Zhang H M, Dong X H, Du D P, Wang Q. 2013. A unified physically based crystal plasticity model for FCC metals over a wide range of temperatures and strain rates. *Materials Science and Engineering a-Structural Materials Properties Microstructure and Processing*, **564**: 431-441.
- Zinkle S J, Singh B N. 1993. Analysis of displacement damage and defect production under cascade damage conditions. *Journal of Nuclear Materials*, **199**: 173-191.

(责任编辑: 唐少强)

Irradiation hardening for metallic materials

XIAO Xiazi^{1,2} SONG Dingkun¹ CHU Haijian^{3,4} XUE Jianming^{2,5}
DUAN Huiling^{1,2,†}

¹State Key Laboratory for Turbulence and Complex System, Department of Mechanics and Engineering Science, College of Engineering, Peking University, Beijing 100871, China

²HEDPS, Center for Applied Physics and Technology, Peking University, Beijing 100871, China

³Shanghai Institute of Applied Mathematics and Mechanics, Shanghai 200444, China

⁴Department of Mechanics, College of Sciences, Shanghai 200444, China

⁵Physics School of Peking University, Beijing 100871, China

Abstract Investigations on irradiation hardening of metallic materials have much significance for the design of anti-irradiation materials and engineering applications. Both irradiation-induced defects and gaseous impurities produced by nuclear reactions have dramatic irradiation effects on the mechanical properties of materials, which include irradiation hardening, irradiation embrittlement and irradiation creep, etc. In this paper we are concerned with irradiation hardening, i.e., the strength of materials increases with irradiation, under low irradiation doses and low temperatures of $T < 0.3 T_m$ with T_m the melting temperature. Besides, other factors such as the grain size, the grain boundary and the temperature affect mechanical behaviors of irradiated polycrystalline materials. The study of irradiation hardening of metallic materials is a multi-scale problem, for which the macroscopic mechanical behaviors of irradiated materials are determined by both the change of interior structures with irradiation at micro-scale and the interactions among irradiated grains at meso-scale. This paper reviews experimental results, numerical simulations and theoretical models for irradiation hardening of metallic materials. Some scientific problems for future study are also presented.

Keywords metallic materials, irradiation hardening, temperature effect, size effect, mechanical behaviors

Received: 27 November 2014; accepted: 8 April 2015; online: 14 April 2015

[†] E-mail: hlduan@pku.edu.cn

Cite as: Xiao X Z, Song D K, Chu H J, et al. Irradiation hardening for metallic materials.

Advances in Mechanics, 2015, 45: 201505

© 2015 *Advances in Mechanics*.



段慧玲, 女, 北京大学理学博士 (2005), 长江学者特聘教授, 固体力学博士生导师; 北京大学工学院力学与工程科学系系主任、兼固体力学学科点主任, 北京大学“高能量密度物理数值模拟”教育部重点实验室副主任. 美国机械工程师协会 (ASME) 主办杂志 *Journal of Engineering Materials and Technology* 的副主编、*Scientific Reports* 等多个杂志的编委; 中国力学学会理事, 副秘书长, 流固耦合专业委员会委员, 固体力学专业委员会生物材料及仿生专业组副组长, 对外交流与合作委员会委员. 近年来, 在非均质材料的弹性力学基本问题、复杂形貌固体表面的弹性理论及浸润理论、薄膜异质结构的力学理论及应用等方面取得了重要的科研成果. 在国内外学术杂志、学术会议上发表学术论文 100 余篇, 其中, 科学引文索引 (SCI) 收录论文 70 多篇, 包括 *Nature Communications*, *Proceedings of the National Academy of Science*, *Advanced Materials*, *Physical Review Letters*, *Advances in Applied Mechanics*, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, *Physical Review B*, *Proceedings of the Royal Society A* 等国际期刊, SCI 论文被他人 SCI 引用 1 300 多次. 有 7 篇论文被评为高引用论文和热点论文; 其中有两篇论文入选国际“基本科学指标”(ESI) 高引用论文, 他引均超过 180 次. 在 IUTAM Symposium、国内外学术会议和多所大学做大会报告、主旨报告和邀请学术报告五十多次. 主持国家杰出青年科学基金、预研探索重大项目、国家自然科学基金面上项目、全国优秀博士学位论文作者专项基金和德国洪堡基金会校友研究组联合基金等多项科研项目; 参加国家自然科学基金重点项目和 973 国家基础研究发展计划等.