

考虑晶粒几何形状的尺度效应*

郭 辉, 郭 兴 明

(上海大学, 上海市应用数学和力学研究所, 上海 200072)

(本刊编委郭兴明来稿)

摘要: 复合材料方法中的混合律方法在研究纳米晶体材料力学性能时得到了广泛的使用, 准确得出各相的体积分数对该方法结果的准确性具有十分重要的影响. 将纳米晶体看成由晶界、晶粒和三相晶三相组成的复合材料, 根据晶粒具有多面体的几何特点, 用二维的三相复合的正多边形模型来研究纳米晶体力学性能的尺度效应, 对于不同几何形状的晶粒采用对应的正多边形模型, 这样我们就可以更加准确地得到各相的体积分数, 从而更好地预测纳米晶体材料的力学性能.

关键词: 纳米晶体; 正多边形模型; 屈服应力; 体积分数; 晶界

中图分类号: TB383; TG115.5 **文献标识码:** A

引 言

众所周知, Hall-Petch 关系(H-P 关系)^[1,2] 在粗晶粒尺度范围内能够很好地反应晶粒尺寸与屈服应力或硬度之间的关系

$$\sigma_y = \sigma_0 + k_y d^{-n}, H = H_0 + k_H d^{-n},$$

其中 σ_y 为屈服应力, σ_0 为晶格摩擦应力, H 为硬度, H_0 为单晶硬度, k_y 和 k_H 是正常系数, d 为晶粒的直径. 式中 n 的典型值为 0.5, 文献[3] 认为某些材料 n 应取值为 1. 但这一关系只适用于晶粒尺寸较大的时候, 当晶粒尺寸在纳米尺度下小于 100 nm 时, 大量的试验结果表明纳米晶体材料的屈服应力或硬度与晶粒尺寸间的关系表现出反 H-P 关系^[3,8]. 为了解释这种反 H-P 关系, 并得到一个在纳米尺寸范围也适用的新的尺度依赖关系, 在过去的十几年中不少研究者提出了一些新的模型, 也有一部分工作在原有 H-P 关系基础上进行修正. 围绕纳米晶体力学性能的尺度效应所进行的工作主要是从两个方面展开的: 一是从纳米晶体变形物理机制上来研究, 如晶界的扩散蠕变^[9,10], 晶界的相互作用^[11], 晶界滑移^[12-13], 三相晶的扩散蠕变^[14] 和三相晶的旋转位移^[15,16], 也有同时考虑晶界位错和三相晶综合效应^[17]; 另一个是复合材料方法中混合律方法, 文献[18] 应用该方法描述多晶材料. 这种方法在描述纳米结构材料的 H-P 关系中得到广泛使用, 其主要思想是用非常简单的混合律方法来预测具有复杂结构固体的宏观力学性能, 即是把纳米晶体材料看成多相复合材料, 其宏观物理量为各相分量乘以各自的

* 收稿日期: 2006_07_10; 修订日期: 2006_12_07

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10472061); 上海市科委基础研究重点基金资助项目(04JC14034); 教育部博士点基金资助项目(20060280015); 上海市重点学科建设基金资助项目(Y0103)

作者简介: 郭兴明(联系人, E-mail: xmguo@mail.shu.edu.cn).

体积分数之和. 这种方法能够简单有效地预测纳米晶体的力学性能, 但在求解各相体积分数时存在一定的问题, 并且没有考虑各相几何形状和特性的相互作用. 对于纳米晶体材料, 文献[19_22]采用了两相复合材料模型(晶粒和晶界相)来研究纳米晶体的尺度效应, 文献[23]用三相模型(晶粒、晶界和三叉晶相)讨论了三叉晶对纳米晶粒力学性能的影响, 并得出了晶粒尺寸与屈服应力的关系, 文献[24_25]用四相模型(晶粒、晶界、三叉晶和四结晶相)得到了晶粒尺寸与屈服应力之间的关系, 文献[26]用四相模型并且考虑到纳米晶体的空隙率的尺度效应, 文献[27_28]也采用了两相模型, 并同时考虑了晶界扩散蠕变的影响. 文献[29]对较早的一些模型做了综述性介绍.

在混合律的方法中, 文献[19_20, 23]将晶粒假设为一正方形形状的多相复合模型, 文献[21]中假设晶粒为球形, 并用一个两相复合的圆模型作为纳米晶体材料的代表性单元, 文献[24_25]则用三维的四相复合的立方体模型来作为纳米晶体材料的代表性单元. 关于晶界的厚度有两种做法: 一种是认为晶界的厚度为一常数, 例如文献[19_20, 25_26]都定义其值为 1 nm, 文献[22]认为不同的纳米晶体材料晶界的厚度是不一样的, 如 Cu 的晶界厚度为 2 nm, Ni-P 为 1.41 nm; 第二种则认为晶界的厚度与晶粒尺寸是相关的, 晶界厚度是晶粒尺寸的一个函数^[21, 23_24].

我们知道, 在纳米尺寸范围内, 界面的体积分数变得很高, 有些达到 49%^[30]. 当晶粒尺寸只有几个纳米时, 三叉晶的体积分数将变得非常大, 它对纳米晶体材料力学性能的影响将会是十分显著的. 鉴于此, 当我们采用混合律方法来研究纳米晶体材料的力学性能时, 尽可能准确地反应各相的体积分数就显得尤为重要, 同时在晶粒尺寸非常小时还应考虑三叉晶对纳米晶体的影响.

1 模型的建立

本文将文献[23]为基础, 将纳米晶体材料看成由晶界、晶粒和三叉晶三相组成的复合材料, 如图 1b 所示. 考虑到纳米晶体材料的晶粒具有多面体的几何特点, 我们采用三相复合的正多边形模型作为纳米晶体材料的代表性单元, 对于不同的几何形状的晶粒采用不同的正多边形模型. 如图 1a, 晶粒形状为立方体的可以采用正方形模型; 如图 2a, 晶粒形状为正四面体的可以采用正三角形模型; 而图 3a 形状的晶粒则可以采用正六边形模型, 如图 3b. 与此类似地, 我们还可以将其它一些晶粒形状采用与之对应的正多边形模型. 这即是说, 晶粒的面数越多, 采用的正多边形模型的边数也越多, 反过来, 我们采用的正多边形模型的边数越多, 就代表多面体晶粒的面数越多.

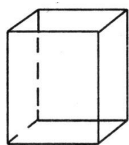


图 1a 立方体形状晶体

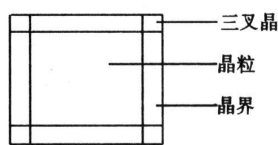
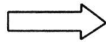


图 2b 正方形模型

由于正多边形为对称结构, 对于一个 n 条边的正多边形模型, 可以取出模型的 $1/n$ 来进行分析(如图 3b 中的阴影部分). 如图 4 所示, θ 为正多边形一条边所对应的内角, 其值为 $2\pi/n$, $n = 3, 4, 5, 6, \dots$, w 代表晶界的厚度, d 为晶粒的直径, o 为正多边形的形心. 正多边形模型的面积和三叉晶、晶界及晶粒的面积分别表示为 s 、 s_{ij} 、 s_{gb} 和 s_g :

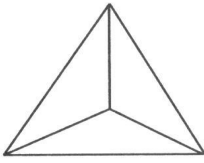


图 2a 正四面体形状晶体

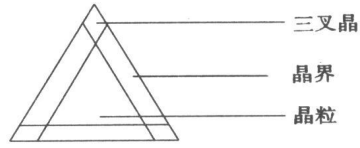
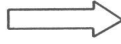


图 2b 三角形模型

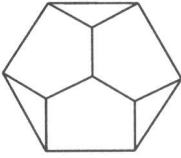


图 3a 正十二面体晶体

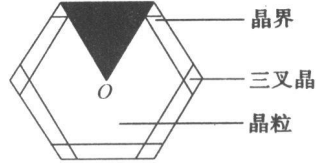


图 3b 正六边形模型

$$s = nd^2 \tan(\theta/2)/4, \quad (1)$$

$$s_{ij} = nw^2/4\sin(\theta), \quad (2)$$

$$s_{gb} = nw[2d \tan(\theta/2) - w \tan(\theta/2) - w/\sin(\theta)]/4, \quad (3)$$

$$s_g = n(d-w)^2 \tan(\theta/2)/4. \quad (4)$$

三叉晶、晶界及晶粒相所占的体积分数分别表示为 f_{ij} 、 f_{gb} 和 f_g ，则有

$$f_{ij} = \frac{s_{ij}}{s} = \frac{w^2 \cot(\theta/2) \csc(\theta)}{2d^2}, \quad (5)$$

$$f_{gb} = \frac{s_{gb}}{s} = \frac{w[2d - w - w \cot(\theta/2) \csc(\theta)]}{d^2}, \quad (6)$$

$$f_g = \frac{s_g}{s} = \frac{(d-w)^2}{d^2}. \quad (7)$$

因此,

$$E = E_g f_g + E_{gb} f_{gb} + E_{ij} f_{ij}, \quad (8)$$

$$\sigma_y = \sigma_g f_g + \sigma_{gb} f_{gb} + \sigma_{ij} f_{ij}, \quad (9)$$

式中 σ_g 、 σ_{gb} 、 σ_{ij} 和 E_g 、 E_{gb} 、 E_{ij} 分别表示晶粒相、晶界相、三叉晶界相的屈服应力和弹性模量。

将式(5)、(6)、(7)式代入式(9)则可以得到

$$\sigma_y = \sigma_g + \frac{2w(\sigma_{gb} - \sigma_g)}{d} + \frac{w^2[2(\sigma_g - \sigma_{gb}) + (\sigma_{ij} - \sigma_{gb}) \csc^2(\theta/2)]}{2d^2}. \quad (10)$$

类似文献[23], 得到

$$\frac{2w(\sigma_{gb} - \sigma_g)}{d} = k_{hp} d^{-1/2}, \quad (11)$$

其中 σ_{gb} 、 σ_g 、 k_{hp} 为常数, 而晶界的厚度 w 与晶粒尺寸 d 相关, $w = f(d)$,

$$w = f(d) = k_m d^{1/2}, \quad (12)$$

$$k_m = \frac{k_{hp}}{2(\sigma_{gb} - \sigma_g)}. \quad (13)$$

由图 4 可知: $d > w/\sin(\theta)$, 且 $d > k_m^2/\sin^2(\theta)$, 将式(12) 带入式(5)、(6)、(7) 可得到纳米晶体材料三相所占体积分数表达式

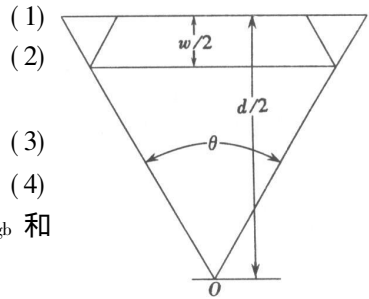


图 4 计算简图

$$f_{ij} = \frac{k_m^2 \cot(\theta/2) \csc(\theta)}{d}, \quad (14)$$

$$f_{gb} = \frac{k_m [2d^{1/2} - k_m - k_m \cot(\theta/2) \csc(\theta)]}{d}, \quad (15)$$

$$f_g = \frac{(d - k_m d^{1/2})^2}{d^2}. \quad (16)$$

将式(14)、(15)、(16)代入式(8)和(9)可以得到

$$\sigma_y = \sigma_g + 2k_m(\sigma_{gb} - \sigma_g)d^{-1/2} + k_m^2 [2(\sigma_g - \sigma_{gb}) + (\sigma_{ij} - \sigma_{gb}) \csc^2(\theta/2)] d^{-1/2}, \quad (17)$$

$$E = E_g + 2k_m(E_{gb} - E_g)d^{-1/2} + k_m^2 [2(E_g - E_{gb}) + (E_{ij} - E_{gb}) \csc^2(\theta/2)] d^{-1/2}. \quad (18)$$

令 $x = d^{-1/2}$, 式(17)可表示为

$$\sigma_y = \sigma_g + 2k_m(\sigma_{gb} - \sigma_g)x + k_m^2 [2(\sigma_g - \sigma_{gb}) + (\sigma_{ij} - \sigma_{gb}) \csc^2(\theta/2)] x^2/2. \quad (19)$$

由式(19)可知, 当 $x = 2(\sigma_{gb} - \sigma_g)/k_m [2(\sigma_{gb} - \sigma_g) + (\sigma_{gb} - \sigma_{ij}) \csc^2(\theta/2)]$ 时 σ_y 达到临界值, 则有临界尺寸 $d_0 = k_m^2 [2(\sigma_{gb} - \sigma_g) + (\sigma_{gb} - \sigma_{ij}) \csc^2(\theta/2)]^2 / 4(\sigma_{gb} - \sigma_g)^2$, 临界尺寸与 θ 有关, 即与我们采用的何种正多边形模型有关的, 当 $\sigma_{ij} > \sigma_{gb}$ 时, 采用的模型的边数越多, 得到的临界尺寸越小; 而当 $\sigma_{ij} < \sigma_{gb}$ 时, 采用的模型边数越多, 得到的临界尺寸越大. 当 $d > d_0$ 时, 屈服应力与晶粒尺寸关系表现为正H_P关系; 当 $k_m^2 / \sin^2(\theta) < d < d_0$ 时, 屈服应力与晶粒尺寸关系表现为反H_P关系.

2 计算结果

2.1 三相模型

由式(14)、(15)和(16)可知, 晶粒和界面(界面由三叉晶和晶界组成)的体积分数与 θ 无关, 即与我们采用的何种正多边形模型无关, 而当把界面相再分成三叉晶相和晶界相两相后, 二者的体积分数与 θ 有关, 这即是说: 在同一尺寸下, 采用不同的正多边形模型三叉晶和晶界的体积分数是不一样的, 但二者的和(即界面的体积分数)是相同的, 而这正好体现了纳米晶体多面体的几何特点.

对于 Ni₃P, $k_m = 3.72 \times 10^{-5} \text{ m}^{1/2}$ (参数来自文献[23], 本文定义的晶界厚度是文献[23]的两倍, 由式(13)知 k_m 是文献[23]中的两倍). 采用不同正多边形模型所求得的各项体积分数见图5, F_{3ij} 和 F_{3gb} 分别表示用正三角形模型得到的三叉晶和晶界的体积分数, F_{4ij} 和 F_{4gb} 、 F_{5ij} 和 F_{5gb} 、 F_{6ij} 和 F_{6gb} 等分别表示用正四、五、六边形模型等得到的三叉晶和晶界的体积分数. 很明显, 当晶粒尺寸只有几个纳米时, 三叉晶的体积分数相当的大(见图5), 此时三叉晶的力学性能对晶体的力学性能具有重要的影响. 随着晶粒尺寸的增大, 三叉晶的体积分数也逐渐变得越来越小, 与文献[31]用十四面体来作为 Ni₃P 晶粒的几何形状所得结果一致. 在相同的晶粒尺寸下, 采用正三角形模型时得到的三叉晶的体积分数最小而晶界的体积分数最大, 但界面的体积分数与所采用的何种正多边形模型无关. 这说明在相同的晶粒尺寸下, 多面体晶粒的面数越多, 三叉晶的体积分数越大, 而晶界的体积分数却越小.

对于 Ni₃P 晶体, 同样用文献[23]中的参数, $\sigma_{ij} = 2710 \text{ MPa}$ 、 $\sigma_{gb} = 9200 \text{ MPa}$ 、 $\sigma_g = 3940 \text{ MPa}$ 、 $E_g = 204 \text{ GPa}$ 、 $E_{gb} = 184 \text{ GPa}$ 、 $E_{ij} = 143 \text{ GPa}$ 、 $k_{hp} = 0.39 \text{ MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$. 这里分别用正三角

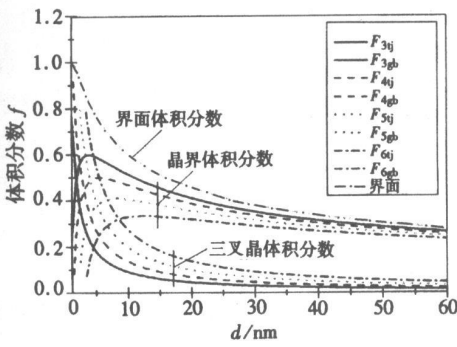
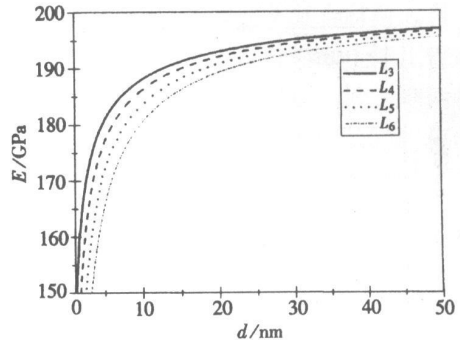
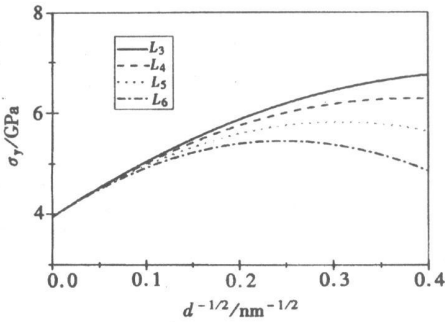
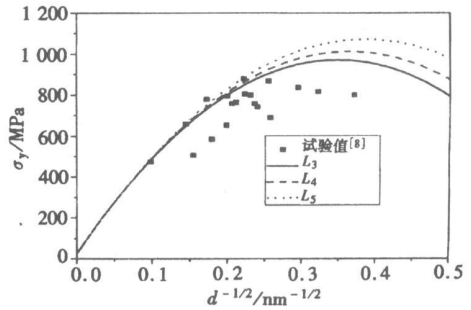
图5 Ni₃P 各相体积分数图6 Ni₃P 的弹性模量与晶粒尺寸关系图7 Ni₃P 的屈服应力与晶粒尺寸关系

图8 Cu 的屈服应力与晶粒尺寸关系

形、正四边形、正五边形和正六边形模型来计算,如图6和图7所示, L_3 、 L_4 、 L_5 、 L_6 分别表示用正三角形、正四边形、正五边形和正六边形模型计算结果。可以看出在相同的晶粒尺寸情况下,用正三角形模拟得到的弹性模量值最大,用正六边形模拟得到的弹性模量值最小,并且随着晶粒尺寸的增大,各条曲线也在逐渐靠近。而当晶粒的尺寸很小时,用不同的多边形模拟所求得的弹性模量和屈服应力值差别是比较大的,这是因为晶粒尺寸很小时三叉晶和晶界的体积分数都很大,并且用不同正多边形模型计算出来的体积分数是不一样的,它们对纳米晶体的力学性能的贡献也会不一样,所以计算出来的屈服应力和弹性模量自然也就会有很大差别。

对于Cu,取文献[23]中的参数, $\sigma_{ij} = 1000 \text{ MPa}$ 、 $\sigma_{gb} = 900 \text{ MPa}$ 、 $\sigma_g = 25 \text{ MPa}$ 、 $k_{hp} = 0.172 \times 10^6 \text{ Pa} \cdot \text{m}^{1/2}$,采用不同正多边形模型的计算结果见图8,显然用正三角形模型计算时与试验值^[8]更加吻合。

对于Ni, $\sigma_{ij} = 2350 \text{ MPa}$ 、 $\sigma_{gb} = 2060 \text{ MPa}$ 、 $\sigma_g = 400 \text{ MPa}$ 、 $k_{hp} = 0.66 \times 10^6 \text{ Pa} \cdot \text{m}^{1/2}$,采用不同正多边形模型的计算结果见图9。很明显,用正六边形模型计算时与试验值^[32]比较吻合。

若纳米晶体材料的三叉晶、晶界和晶粒的屈服应力(或弹性模量)始终不变,而晶粒的几何形状是可以控制的。我们从式(19)可以看出,在同一晶粒尺寸下,当 $\sigma_{ij} < \sigma_{gb}$ ($E_{ij} < E_{gb}$)时,多面体晶粒的面数越多,其屈服应力(弹性模量)也越小,如图6和图7,此时为了得到更好的力学性能,制备该晶体材料时应该控制晶粒的面数尽可能少;当 $\sigma_{ij} > \sigma_{gb}$ ($E_{ij} > E_{gb}$)时,多面体晶粒的面数越多,屈服应力(弹性模量)越大,如图8和图9,此时为了得到更好的力学性能,制备该晶体材料时应该控制晶粒的面数尽可能多; $\sigma_{ij} = \sigma_{gb}$ ($E_{ij} = E_{gb}$)的情况将在2.2节作更为详细的讨论。

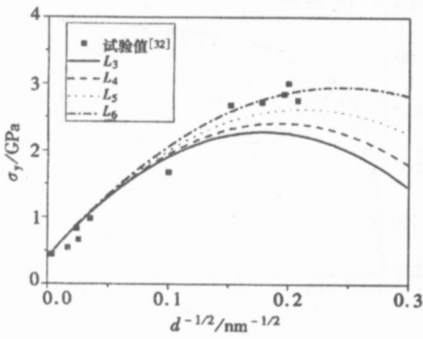
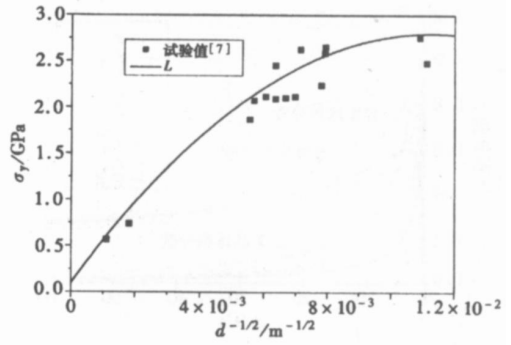


图 9 Ni 的屈服应力与晶粒尺寸关系

图 10 Fe 的屈服应力与晶粒尺寸关系
(L 为正多边形模型理论值)

2.2 两相模型

当三叉晶与晶界的屈服强度和弹性模量相同时,此时由三相复合模型变为两相复合模型.

将 $E_{ij} = E_{gb}$, $\sigma_{ij} = \sigma_{gb}$ 分别代入式 (18) 和 (19) 得到

$$E = E_g + 2k_m(E_{gb} - E_g)d^{-1/2} + k_m^2(E_g - E_{gb})d^{-1}, \quad (20)$$

$$\sigma_y = \sigma_g + 2k_m(\sigma_{gb} - \sigma_g)x + k_m^2(\sigma_g - \sigma_{gb})x^2. \quad (21)$$

由式 (20)、(21) 可知,晶体的弹性模量和屈服应力将与我们采用的何种正多边形模型无关,即把晶体看成晶粒和界面两相复合材料,此时用不同正多边形计算的屈服应力或弹性模量与晶粒尺寸之间的曲线完全相同.因此当我们把晶体看成两相复合材料时,没有考虑到晶粒的几何形状特点.文献[21]采用了两相复合圆模型,这里采用文献[21]中 Fe 的参数来进行计算, $\sigma_{ij} = \sigma_{gb} = 2800 \text{ MPa}$ 、 $\sigma_g = 100 \text{ MPa}$ 、 $k_{hp} = 0.48 \text{ MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$.如图 10 所示,可以看出对于 Fe 用两相复合模型计算的结果与试验结果是比较相符的,但只有在三叉晶的屈服应力与晶界的屈服应力值非常接近时,用两相复合模拟才能得到比较好的结果.根据文献[23]的数据, $\sigma_{ij} = 3000 \text{ MPa}$ 、 $\sigma_{gb} = 2800 \text{ MPa}$,二者的值比较接近.

3 结 论

由于纳米晶体具有多面体几何结构特点,我们可以采用正多边形模型来预测纳米晶体材料的力学性能.多面体晶粒的面数越多,要采用相应边数的正多边形模型.当我们用一个边数比较多的正多边形来计算时,就代表了所计算的晶粒的面数也比较多.

本文采用正多边形复合材料模型来预测纳米晶体材料的力学性能,计及纳米晶粒的几何形状,可以更加真实准确地反映出纳米晶体的力学性能,体现出明显的尺度效应.主要有以下结论:

1) 当晶粒的尺寸很小时,三叉晶和晶界所占晶体的体积分数很大,此时他们对晶体的力学性能影响十分显著.而当晶粒的尺寸较大时,晶粒的体积分数较大,此时晶粒的力学性能占主导作用,三叉晶和晶界相的影响比较小.在相同的晶粒尺寸下,多面体晶粒的面数越多,三叉晶的体积分数越大,而晶界的体积分数却越小.

2) 当 $\sigma_{ij} > \sigma_{gb}$ ($E_{ij} > E_{gb}$) 时,为了得到更好的力学性能,制备该晶体材料时应该控制晶粒的面数尽可能多;当 $\sigma_{ij} < \sigma_{gb}$ ($E_{ij} < E_{gb}$) 时,为了得到更好的力学性能,制备该晶体材料时应该控制晶粒的面数尽可能少.

3) 如果三叉晶与晶界的屈服应力相同, 此时是把纳米晶体材料看成两相复合材料. 当真实的三叉晶与晶界的屈服应力(弹性模量)值相差比较小时, 两相的复合材料模型也能比较好的预测纳米晶体的力学性能, 并且此时采用的多边形模型与多边形的边数无关, 这也说明两相复合材料不能反映出纳米晶体的几何结构特点; 若三叉晶和晶界的屈服应力(弹性模量)值相差很大时, 应该用三相的复合材料模型来计算.

[参 考 文 献]

- [1] Hall E O. The deformation and aging of mild steel: III discussion of results[J]. Proc Phys Soc B, 1951, **64**(1): 747_753.
- [2] Petch N J. The cleavage strength of polycrystals[J]. J Iron Steel Inst, 1953, **174**(5): 25_28.
- [3] Gleiter H. Nanocrystalline materials[J]. Prog Mater Sci, 1989, **33**(4): 223_315.
- [4] Nieman G W, Weertman J R, Siegel R W. Microhardness of nanocrystalline palladium and copper produced by inert gas condensation[J]. Scripta Metall, 1989, **23**(13): 2013_2018.
- [5] Palumbo G, Erb U, Aust K T. Triple line disclination effects on the mechanical behaviour of materials[J]. Scripta Metall Mater, 1990, **24**(12): 2347_2350.
- [6] Lu K. Nanocrystalline metals crystallized from amorphous solids: nanocrystallization, structure, and properties[J]. Mater Sci Eng R, 1996, **16**: 161_221.
- [7] Mallow T R, Koch C C. Grain growth in nanocrystalline iron prepared by mechanical attrition[J]. Acta Mater, 1997, **45**(5): 2177_2186.
- [8] Sanders P G, Eastman J A, Weertman J R. Elastic and tensile behavior of nanocrystalline copper and palladium[J]. Acta Mater, 1997, **45**(10): 4019_4025.
- [9] Masumura R A, Hazzledine P M, Pande C S. Yield stress of fine grained materials[J]. Acta Mater, 1998, **46**(13): 4527_4534.
- [10] Yamakov V, Wolf D, Phillpot S R, et al. Grain boundary diffusion creep in nanocrystalline palladium by molecular dynamics simulation[J]. Acta Mater, 2002, **50**(1): 61_73.
- [11] Scattergood R O, Koch C C. A modified model for hall_petch behavior in nanocrystalline materials [J]. Scripta Mater, 1992, **27**(9): 1195_1200.
- [12] Hahn H, Padmanabhan K A. A model for the deformation of nanocrystalline materials[J]. Philosophical Magazine B, 1997, **76**(44): 559_571.
- [13] Fedorov A A, Gutkin M Yu, Ovid'ko I A. Transformations of grain boundary dislocation pile_ups in nano_ and polycrystalline materials[J]. Acta Mater, 2003, **51**(4): 887_898.
- [14] Fedorov A A, Gutkin M Yu, Ovid'ko I A. Triple junction diffusion and plastic flow in fine grained materials[J]. Scripta Mater, 2002, **47**(1): 51_55.
- [15] Gutkin M Yu, Kolesnikova A L, Ovid'ko I A, et al. Disclinations and rotational deformation in fine grained materials [J]. Phil Mag Lett, 2002, **82**(12): 651_657.
- [16] Ovid'ko I A. Materials science: deformation of nanostructures[J]. Science, 2002, **295**(2395): 2386_2386.
- [17] Gutkin M Yu, Ovid'ko I A. Yield stress of nanocrystalline materials: role of grain grainboundary dislocations, triple junctions and coble creep[J]. Philosophical Magazine, 2004, **84**(9): 847_863.
- [18] Kocks U F. Relation between polycrystal deformation and single crystal deformation[J]. Metal Trans, 1970, **1**(55): 1121_1143.
- [19] Carsley J E, Ning J, Milligan W W, et al. A simple, mixtures_based model for the grain size dependence of strength in nanophase metals[J]. Nanostruct Mater, 1995, **5**(4): 441_448.
- [20] Konstantinidis D A, Aifantis E C. On the "anomalous" hardness of nanocrystalline materials[J]. Nanostruct Mater, 1998, **10**(7): 1111_1118.

- [21] Benson David J, FU Hsueh_hung, Meyers Marc André'. On the effect of grain size on yield stress: extension into nanocrystalline domain[J]. *Mat Sci Eng A*, 2001, **319/ 321**: 854_861.
- [22] Song H W, Guo S R, Hu Z Q. A coherent polycrystal model for the inverse Hall_Petch relation in nanocrystalline materials[J]. *Nanostruct Mater*, 1999, **11**(2): 203_210.
- [23] XIANG Qing, GUO Xing_ming. The scale effect on the yield strength of nanocrystalline materials[J]. *Internat J Solids and Structures*, 2006, **43**(9): 7793_7799.
- [24] Wang N, Wang Z, Aust K T, et al. Effect of grain size on mechanical properties of nanocrystalline materials[J]. *Acta Metal Mater*, 1995, **43**(2): 519_528.
- [25] Kim H S. A composite model for mechanical properties of nanocrystalline materials[J]. *Scripta Mater*, 1998, **39**(8): 1057_1061.
- [26] Kim H S, Bush M B. The effects of grain size and porosity on the elastic modulus of nanocrystalline materials[J]. *Nanostruct Mater*, 1999, **11**(3): 361_367.
- [27] Kim H S, Estrin Y, Bush M B. Plastic deformation behaviour of fine grained materials[J]. *Acta Mater*, 2000, **48**(2): 493_504.
- [28] Kim H S, Estrin Y. Phase mixture modeling of the strain rate dependent mechanical behavior of nanostructured materials[J]. *Acta Mater*, 2005, **53**(3): 765_772.
- [29] Gutkin M Yu, Ovid'ko I A, Pande C S. Theoretical models of plastic deformation process in nanocrystalline materials[J]. *Rev Adv Mater Sci*, 2001, **2**(1): 80_102.
- [30] Tjong S C, Chen Haydn. Nanocrystalline materials and coating[J]. *Math Sci Engg R*, 2004, **45**(1): 1_88.
- [31] Zhou Y, Erb U, Aust K T, et al. The effects of triple junctions and grain boundaries on hardness and Young's modulus in nanostructured Ni₃P[J]. *Scripta Mater*, 2003, **48**(6): 825_830.
- [32] Zhao M, Li J C, Jiang Q, et al. Hall_Petch relationship in nanometer size range[J]. *J Alloy Compd*, 2003, **361**(1/2): 160_164.

Scale Effect and the Geometric Shapes of Grains

GUO Hui, GUO Xing_ming

(Shanghai Institute of Applied Mathematics and Mechanics, Shanghai University,
Shanghai 200072, P. R. China)

Abstract: The "rule_of_mixture" approach has become one of the widely spread ways to investigate the mechanical properties of nano_materials and nano_structures, and it is very important for the simulation results to exactly compute phase volume fractions. The nanocrystalline(NC) materials were treated as three_phase composites consisting of grain core phase, grain boundary (GB) phase and triple junction phase, and a two_dimensional three_phase mixture regular polygon model was established to investigate the scale effect of NC materials mechanical properties due to the geometrical polyhedron characteristics of crystal grain. For different multi_sides geometrical shapes of grains, the corresponding multi_sides regular polygon model was adopted to obtain more precise phase volume fractions and exactly predict the mechanical properties of NC materials.

Key words: nanocrystalline (NC) material; phase mixture regular polygon models; yield stress; volume fractions; grain boundary (GB)