

晶体塑性变形离散滑移模型及有限元分析¹⁾

潘文科

(中国科学技术大学五系,合肥 230026)

王自强 张永伟

(中国科学院力学研究所,北京 100080)

摘要 基于韧性单晶体实验现象,建立了描述晶体塑性变形的离散滑移模型.该模型的主要特点是:晶体滑移变形在宏观上是不均匀的,滑移带的分布是离散的.利用晶体塑性理论对模型进行了有限变形有限元分析,计算结果揭示了晶体滑移的离散行为,模拟的应力-应变曲线与实验曲线相吻合.

关键词 晶体塑性,离散滑移,有限变形

引言

材料在形成过程中不可避免地存在缺陷.对于金属材料来说,这些缺陷将会导致不均匀性.大量的晶体实验表明,由于材料内部位错源分布的离散性及微观、细观分布的不均匀性,晶体的滑移变形不会在内部各处同时产生,而是首先在晶体内某一部分产生.由一个或多个位错沿晶体滑移面运动产生滑移线,多条滑移线紧邻密排组成滑移带,而滑移带又可以形成滑移带束,随着外部载荷的不断增大,试样表面又可形成吕德斯带.基于实验现象,在第 1 节提出了晶体塑性变形的离散滑移模型.在第 2 节给出了晶体的本构关系.计算结果在第 3 节给出,结论和讨论在最后给出.

1 晶体塑性变形离散滑移模型

限于讨论平面问题,对于面心立方晶体,设想该平面的法线方向与晶轴 $[011]$ 方向平行.对于体心立方晶体,仅考虑主滑移系的话,设想该平面法线方向与晶轴 $[100]$ 方向平行.通过滑移系的等效,可以将空间中实际滑移系等效为平面应变问题中的三个滑移系^[1,2].晶体承受平面内单调增加外载荷.为了能描述晶体滑移的离散特征,我们可以考虑建立两类离散滑移模型.

第一类是将晶体划分为很多带,这些带的方位与等效后的平面内的晶体位错的滑移方向相一致.可以设想同一条带内晶体材料单元的硬化规律及材料参数均相同,而不同带内材料单元由于其空间位置的不同,其缺陷分布亦可能不同,因而其硬化规律中材料参数亦可能不相同,可以按照某种随机分布的规律来描述这些参数.上述这类模型适合于描写晶体中二相粒子含量较高,二相粒子尺寸大小及空间分布很不规则,晶粒内部微观缺陷的空间分布很不规则的情况.

第二类模型是本文将要分析的模型.设想晶体随着变形的发展在不同方位上呈现出若干簇分布比较规则的滑移带,这里所说的滑移带是指实验观察中的滑移带束.首先出现的是第一簇易

1) 国家自然科学基金资助项目.

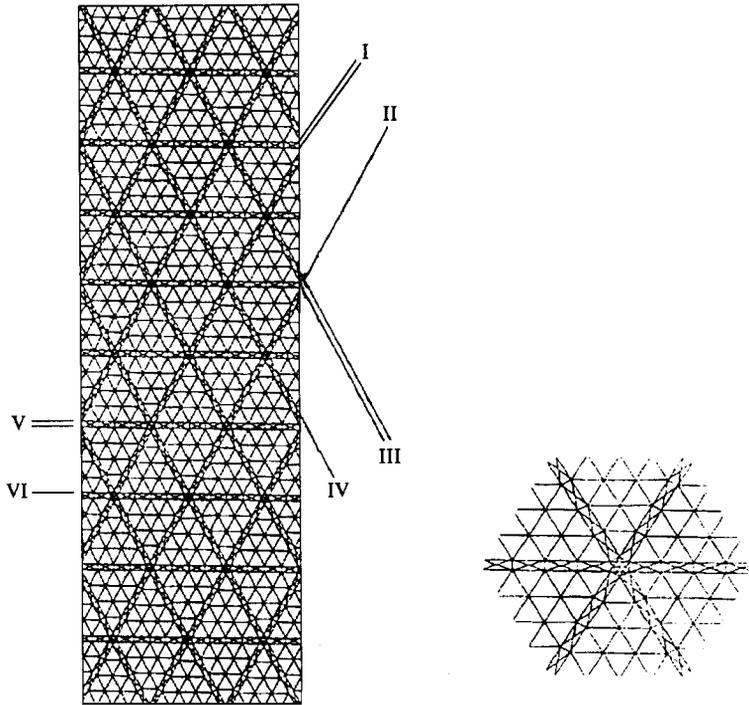
1995 - 10 - 7 收到第一稿,1996 - 09 - 11 收到修改稿.

滑移带. 这些易滑移带之间的间距为 s_1 , 每条滑移带宽为 b_1 , $s_1; b_1$ 的具体数值可以通过实验观测来确定. 随着变形的增加, 晶体又会在同一方位上或者在另一方位上产生第二簇滑移带, 第二簇滑移带的间距为 s_2 , 带宽为 b_2 . 随着变形的进一步增加, 又可能出现第三簇滑移带 究竟会出现多少簇滑移带将随材料的不同而不同, 同时也依赖于变形的大小. 上面所说的方位是指晶体学中的滑移方向. 这种模型适合于晶体中二相粒子及夹杂的含量较少, 且尺寸较小, 空间分布也比较规则, 晶粒内部微观缺陷分布也比较均匀的情况.

作为一种理想化的力学模型, 我们将不同方位上的滑移带分为 M 簇, 设想滑移带簇的相邻滑移带间距为 s , 滑移带宽度为 b . 当 s 的值取为零时, 表示晶体内所有区域均可产生滑移剪切应变, 若 s 的值大于零, 表示晶体内局部区域未产生滑移剪切变形, 仍然为弹性. 当然不同滑移带簇的相邻滑移带间距 s 和滑移带宽度 b 可以不同. 设 M 簇滑移带均遵守 Bassani-Wu^[3] 的硬化规律, 但每一簇滑移带的初始临界分解剪应力 σ_0 和硬化系数 H 各不相同. 第 i 簇滑移带的初始临界分解剪应力及硬化系数分别为 $(\sigma_0)_i, (H)_i$, 第二簇相应为 $(\sigma_0)_{ii}, (H)_{ii}$, ..., 第 M 簇相应为 $(\sigma_0)_M, (H)_M$. 晶体内部材料单元的滑移系数与穿过该材料的滑移带簇个数相同, 滑移系的滑移方向为滑移带簇的位向. 如果只有一个滑移带簇穿过该材料微元, 则该材料微元为一个滑移系, 如有 k 簇滑移带穿过, 则有 k 个滑移系.

单晶体硬化规律采用 Bassani-Wu 硬化规律

$$H = F(\sigma) G(\sigma), \quad \sigma = 1, N, \dots, H = qH \quad (1)$$



(a) 有限元初始网格和不同的滑移带簇

(a) Initial finite element mesh and different slip band

(b) 局部网格放大图

(b) Amplification of the local mesh

图 1 晶体离散滑移模型

Fig. 1 Discrete slip model of crystals

其中

$$F(\dot{\gamma}) = H_s + (H_0 - H_s) \operatorname{sech}^2 \left[\frac{(H_0 - H_s)}{s - 0} \dot{\gamma} \right]$$

同 $G(\dot{\gamma}); =, 找 N, \quad 方位 1 + \sum_{i=1}^N f \tanh \left[\frac{M(\dot{\gamma})}{0} \right]$

www.cnki.net

(6)

对于非临界滑移系有

$$\dot{\gamma} < \dot{\gamma}_c, \quad \tau(\dot{\gamma}) = 0 \quad (7)$$

对于开动滑移系,其滑移剪切率为

$$\left. \begin{aligned} \dot{\gamma} &= \sum_{i=1}^N g_i^{-1}(\dot{\gamma}) : D \\ g_i &= H_i + P_i(\dot{\gamma}) \end{aligned} \right\}$$

$$\left. \begin{aligned} \nabla &= L : D \\ L &= L_c - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N g_{ij}^{-1} (\cdot) \otimes (\cdot) \end{aligned} \right\}$$

(10)

3.1 小变形有限元分析

设想第 1, 2, 3 号滑移带簇对于小变形情况是难滑移带簇, 即这类型的带内材料单元不产生滑移剪切变形, 只有第 4, 5, 6 号滑移带簇在滑移带的方向上可以产生滑移剪切变形. ($b_1/b_2 = 1.01/10.0$).

(a) 理想塑性晶体

对于真正的理想塑性晶体, 当晶粒屈服后其弹塑性模量张量将变为零, 因而无法用切线刚度法的有限元程序计算下去. 为了避免这一困难, 计算中取饱和应力值略高于初始临界分解剪应力 σ_0 值. 取 $(\sigma_s)_I = (\sigma_s)_{II} = (\sigma_s)_V = 1.001 \sigma_0$, $(H_0)_I = (H_0)_{II} = (H_0)_V = 0.001 \sigma_0$, 其它硬化系数均相同, 取为

$$f = 0.0, \quad q = 0, \quad H_s = 0.0, \quad \sigma_0 = 0.002 \sigma_0, \quad \sigma_0 = 60.84 \text{ MPa}$$

由于第 1, 2, 3 号滑移带簇不产生塑性变形, 只要在这些滑移带簇的滑移带方位上的初始临界分解剪应力给一个很大数值即可. 晶体材料弹性模量 $E = 1000 \sigma_0$, 泊松比 $\nu = 0.3$.

图 2(a) 是在上述参数下的晶体宏观应力-应变曲线. 由于是小变形, 宏观应力达到饱和值后曲线并不下降

沿第 4 号滑移带簇的中间滑移带将单晶体切开, 假设滑移带斜面上的分解剪应力为 T , 则由平衡条件得

$$T = \sigma / (\sin 60^\circ \cos 60^\circ) \doteq 2.31 \sigma$$

其中 T 是晶体端部所受的名义拉应力值, 当滑移带内应力 σ 达到屈服应力 σ_s 时, 晶体两端名义应力 T 达到最大值 $T_{\max} = 2.31 \sigma_s = 2.31 \sigma_0$, 由此与图 2(a) 相比知道, 有限元结果与理论分析相一致.

(b) 硬化晶体

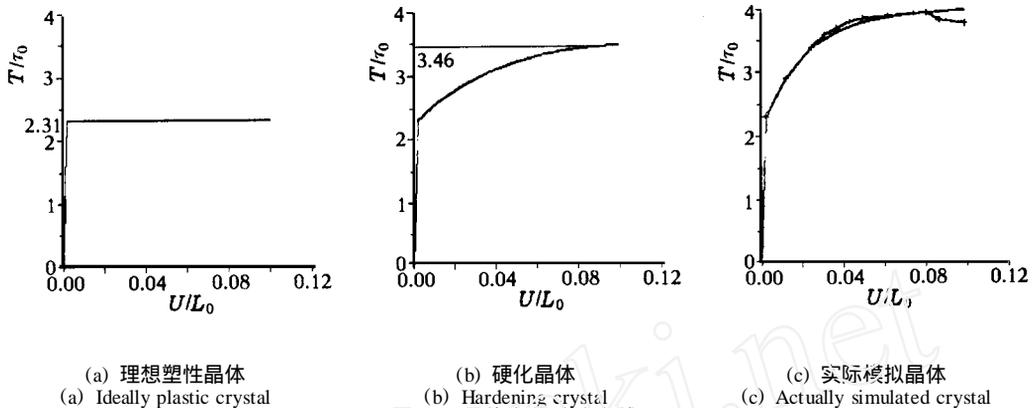


图2 晶体应力-应变曲线
Fig. 2 Calculated crystal stress-strain curve

上面计算了理想塑性情况,现在考虑单晶体有一定硬化能力的情况.取 $(\epsilon_s)_I = (\epsilon_s)_{II} = (\epsilon_s)_V = 1.50 \epsilon_0$, $(H_0)_I = (H_0)_{II} = (H_0)_V = 8.90 \epsilon_0$, 取其它所有参数与上面理想塑性情况相同.

图2(b)是此种情况下的名义应力-工程应变曲线图.同样由于是小变形,其饱和时的名义应力值可通过理论计算出来.饱和时 $\epsilon = \epsilon_s$, 则有 $T_{max} = 2.31 \times \epsilon_s = 2.31 \times 1.50 \epsilon_0$, 即 $T = 3.46 \epsilon_0$, 由此知理论分析与有限元计算结果相一致.

图3(a), (b)分别表示在工程应变 $e = 0.063$ 时的最大主应变等值线图 and 第一滑移系的等滑移量图.从这两个图可以看出,滑移带内变形较大,滑移带外变形较小,晶体离散滑移特征很明显.

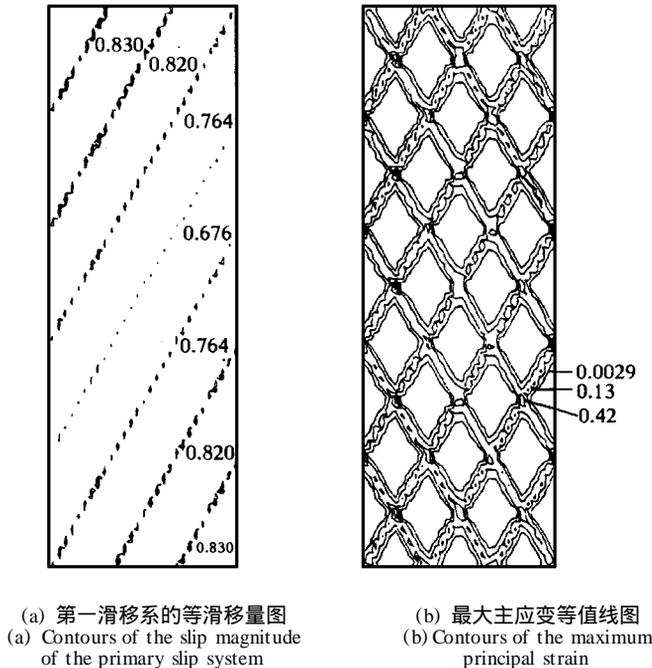


图3 在工程应变 $e = 0.063$ 下的硬化晶体
Fig. 3 Hardening crystal under an engineering strain of $e = 0.063$

(c) 实验应力-应变曲线的模拟

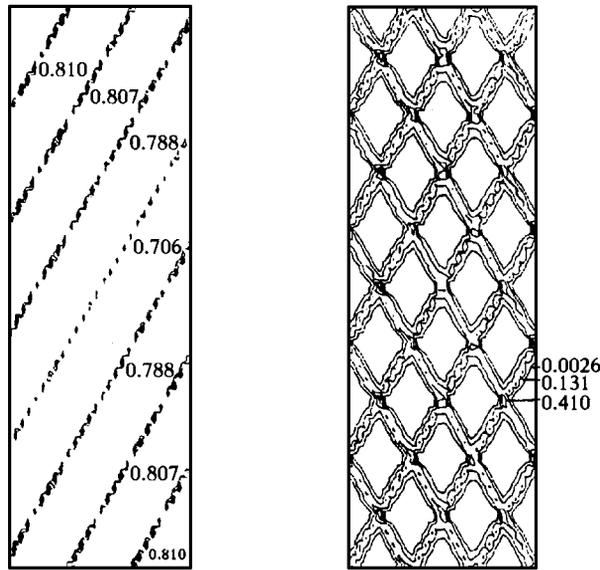
如果我们知道离散滑移模型中滑移带的硬化规律,那么就可以通过有限元法去模拟晶体在外力作用下的响应,但这样的硬化规律还难于测量.通常的单晶体硬化规律是用较大的单晶体通

过实验测得,相当于将离散滑移带中的剪切变形在整个单晶体内平均.因此对实验所得的单晶体硬化规律应作相应的处理.本文模拟计算中采用适当调节初始参数的办法,通过试算取下列初始参数

$$\begin{aligned}
 (H_0)_I &= (H_0)_{II} = (H_0)_V = 17.80 \text{ }_0, & (H_s)_I &= (H_s)_{II} = (H_s)_V = 0.0 \\
 (s)_I &= (s)_{II} = (s)_V = 1.65 \text{ }_0, & (f)_I &= (f)_{II} = (f)_V = 1.0 -
 \end{aligned}$$

其它参数: $\nu = 0.002$, $q = 0.0$, $E = 1\,000.0 \text{ }_0$, $\alpha = 0.3$, $\sigma_0 = 60.84 \text{ MPa}$.

模拟的名义应力-工程应变曲线如图 2(c) 中的实线,标以 ' + ' 的曲线为实验曲线^[2]. 从图中可以看出两者非常接近.图 4(a), (b) 分别为对应于工程应变 $e = 0.063$ 时的最大主应变等值线和第一滑移系等滑移量图.从上述两图同样可以看出离散滑移的特征.



(a) 第一滑移系的等滑移量图
(a) Contours of the slip magnitude of the primary slip system
(b) 最大主应变等值线图
(b) Contours of the maximum principal strain

图 4 在工程应变 $e = 0.063$ 下的实际模拟晶体
Fig. 4 Actually simulated crystal under an engineering strain of $e = 0.063$

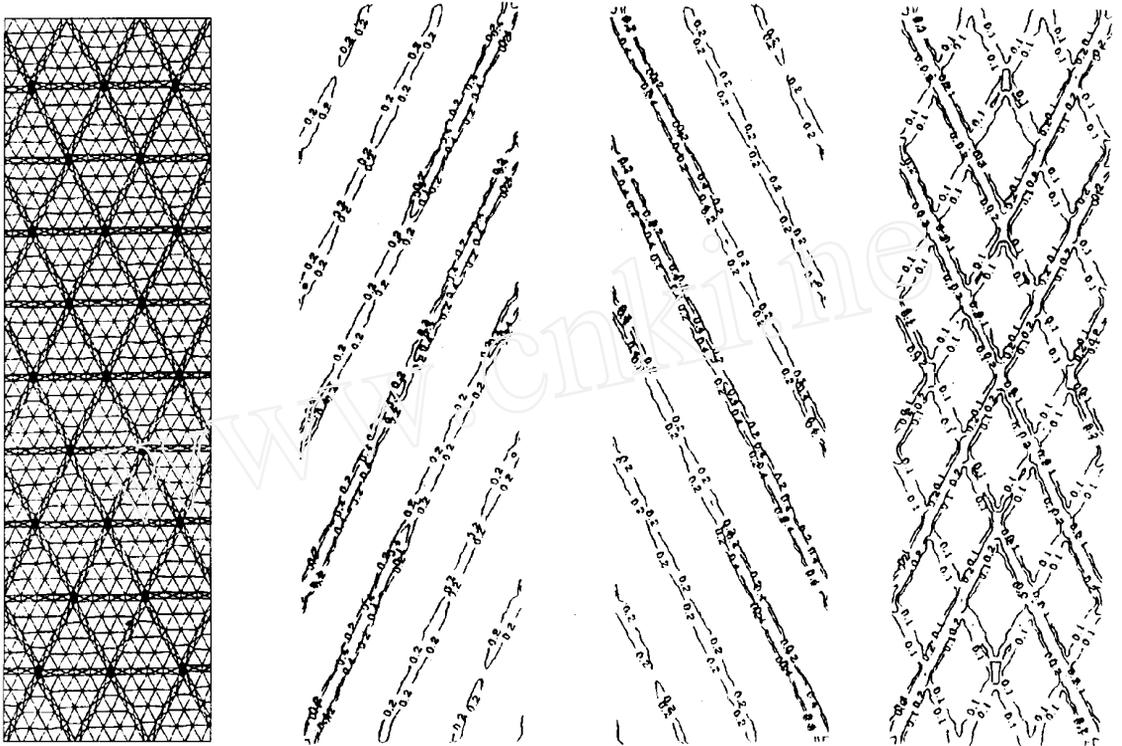
3.2 大变形有限元分析

上一节我们做了小变形的有限元分析,假设模型中第 I, II, V 滑移带簇产生滑移塑性变形,但是随着变形的逐渐增加,晶体内的应力不断升高,最终会导致第 I, II, V 滑移带簇产生滑移塑性变形.

(a) 大变形离散滑移有限元计算

对于这种情况,我们的目的主要是考察大变形下离散滑移模型的变形特征.滑移带宽度较窄的第 I, II, V 滑移带簇的硬化规律同小变形情况相同,而第 III, IV, VI 滑移带簇的硬化规律亦取为 Bassani-Wu 硬化规律.计算时取下列参数: $(H_0)_I = (H_0)_{III} = (H_0)_V = \text{ }_0$, $(H_0)_{II} = (H_0)_{IV} = (H_0)_{VI} = 1.40 \text{ }_0$, 其它所有参数均相同,并取为: $H_0 = 17.80 \text{ }_0$, $H_s = 0.0$, $s = 1.80 \text{ }_0$, $f = 1.0 -$, $q = 0.0$. 利用上述初始参数对图 1 所示的有限元模型进行计算,边界条件仍为(10)式.图 5(a) 表示试样在工程应变 $e = 0.083$ 时的有限元网格变形图,图 5(b) ~ (d) 分别表示在同

一应变水平下的第一、二滑移系的等滑移量图和最大主应变等值线图,从这些图形可以看出大变形下的晶体离散滑移特征



(a) 有限元网格变形图 (a) Deformed finite element mesh
 (b) 第一滑移系的等滑移量图 (b) Contours of the shear strain of the primary slip system
 (c) 第二滑移系的等滑移量图 (c) Contours of the shear strain of the secondary slip system
 (d) 最大主应变等值线图 (d) Contours of the maximum principal strain

图 5 工程应变 $e = 0.083$ 下的结果
 Fig. 5 Under engineering strain $e = 0.083$

(b) 实验应力-应变曲线模拟

假设离散滑移情况下的晶体硬化规律仍为 Bassani-Wu 硬化规律,但其中的硬化系数需要重新确定,为了能与实验相比较,硬化规律中的参数可以用小变形时模拟结果作为初始参考值,结合等效硬化的概念和物理现象来对参数作适当调整,从而可以模拟实验.考虑到大变形的因素滑移带簇内的滑移系间的交互作用应取的较小.通过试算,最后取如下值: 对于第 I, III, V 簇滑移带的初始参数为 $(H_0)_I = (H_0)_{III} = (H_0)_V = 17.80 \text{ MPa}$, $(s_0)_I = (s_0)_{III} = (s_0)_V = 1.65 \text{ MPa}$, $(f_0)_I = (f_0)_{III} = (f_0)_V = 0.05(1.0 - \dots)$. 其它参数 $H_s = 0.0$, $\sigma_0 = 0.002$, $q = 0.0$.

对于第 II, IV 簇滑移带的硬化规律取为普通的 Bassani-Wu 硬化规律,初始参数为: $(s_0)_{II} = (s_0)_{IV} = (s_0)_{VI} = 1.70 \text{ MPa}$. 其它参数与第 I, III, V 滑移带簇对应参数相同.

模拟的应力-应变曲线结果见图 6,图中带实心圆为有限元模拟曲线,带有“+”为实验曲线^[2],从图中可以看出模拟的应力-应变曲线与实验曲线基本吻合.

图 7(a) ~ (d) 分别表示对应名义应变 $e = 0.1202$ 时的有限元网格图、第一滑移系和第二滑移系等滑移量图和最大主应变等值线图.以上图形同样反映晶体变形的离散滑移模式.

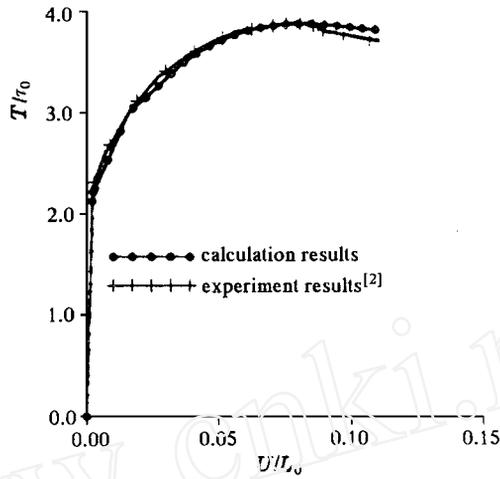
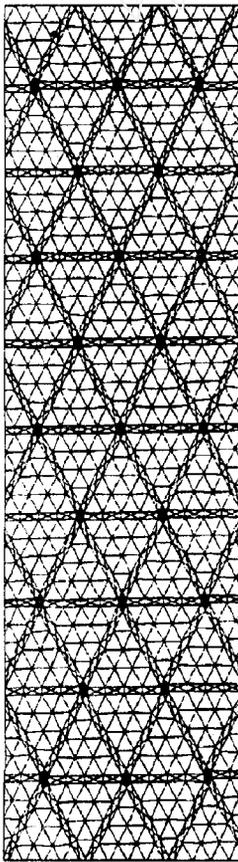
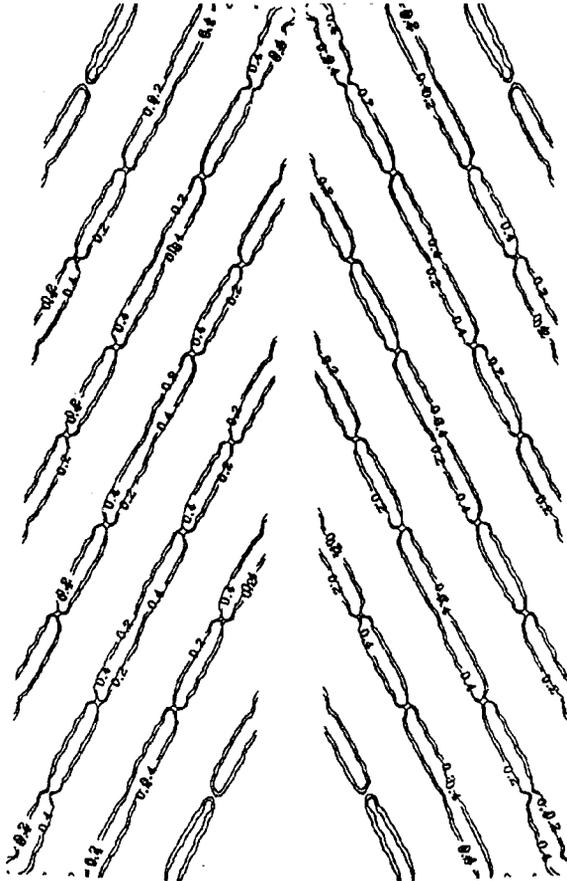


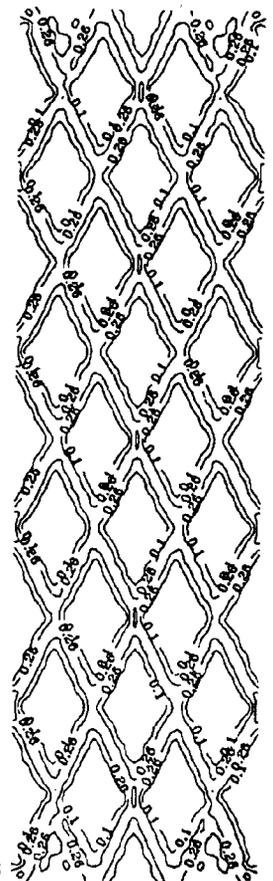
图 6 名义应力-工程应变曲线:“·”表示计算结果,“+”表示实验结果^[2]
 Fig. 6 Stress-strain curve: “·” Calculation results, “+” Experiment results



(a) 有限元网格变形图
 (a) Deformed finite element mesh



(b) 第一滑移系的等滑移量图
 (b) Contours of the shear strain of the primary slip system
 (c) 第二滑移系的等滑移量图
 (c) Contours of the shear strain of the secondary slip system



(d) 最大主应变等值线图
 (d) Contours of the maximum principal strain

图 7 工程应变 $e = 0.1202$ 时的结果
 Fig. 7 Under engineering strain $e = 0.1202$

4 结论及讨论

综上所述,可以得出下列结论:

1) 本文在分析实验现象的基础上,提出了离散滑移的概念,建立了相应的力学模型.为了实现在二维情况下的有限元数值模拟,编制了对应于模型的有限元网格形成及单元特性程序.

2) 为了考察离散滑移模型的可行性,对晶体实验曲线进行了数值模拟.离散滑移硬化规律中的初始参数值是以已有的硬化参数的值通过等效硬化处理后的值作为初始参考值,通过适当调节而得到.

3) 通过本文小变形和大变形的计算,成功地用离散滑移模型模拟了实验应力-应变曲线,模拟结果与实验结果相吻合.

4) 有限元计算所得出的变形模式同样正确地反映了晶体离散滑移特征.

讨论:

计算中初始参数的选取是一个较为困难的问题,直接输入各种初始参数进行逐一计算,势必导致庞大的计算量,进一步的工作可以结合数学规划的办法,根据各种初始参数的取值范围,通过实验曲线来计算出各种参数的值.

另外一个较为困难的是滑移带尺寸的确定问题,因为实际滑移带的宽度是一个渐变的过程,进一步可以通过有限元法来逐步跟踪,使滑移带逐步按实验规律变化,相应改变有限元网格,这样就可以较完全地进行离散滑移的分析和计算.

参 考 文 献

- 1 王自强. 晶体塑性理论极值原理. 中国科学, 1988, 31: 425 ~ 435
- 2 Peirce D, Asaro RJ, Needleman A. An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals. *Acta Metall*, 1982, 30: 1087 ~ 1119
- 3 Bassani JL, Wu TY. Latent hardening in single crystal. *Appl Mech Rev*, 1990, 43: 320 ~ 327
- 4 McHugh PE, Asaro JR, Shih CF. Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals. *Acta Metall Mat*, 1993, 41: 1461 ~ 1477
- 5 Harren SV, Asaro RJ. Nonuniform deformations in polycrystals and aspects of the validity of the Taylor model. *J Mech Phys Solids*, 1989, 37(2): 191 ~ 232
- 6 Lee EH. Decomposing of finite deformation. *J Appl Mech*, 1979, 27: 445 ~ 452

DISCRETE SLIP MODEL OF CRYSTALS AND FINITE ELEMENT ANALYSIS

Pan Wenke

(Dept of Mechanics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

Wang Ziqiang Zhang Yongwei

(Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

Abstract Based on the experiment results of single crystals, a discrete slip model is established to describe the crystal plastic deformation. The main characteristics of the model is that the slip deformation of the crystal is macro-inhomogeneous and the distribution of slip bands is discrete. Crystal plastic theory and finite element method are used to analyse the finite deformation of the model. Digital results display the discrete characteristics of the crystal slip deformation. The calculated stress-strain relation is identical with that of the experiment.

Key words crystal plasticity, discrete slip, finite deformation