

考虑晶界效应的多晶体有限变形分析*

潘文科

张永伟 王自强

(中国科技大学五系, 合肥, 230026) (中国科学院力学研究所, 北京, 100080)

摘要 将晶界及其影响区综合考虑, 建立了考虑晶界效应的力学模型, 结合晶体塑性理论, 利用有限变形有限元法对多晶体进行数值模拟。数值结果显示了细观层次下晶粒变形场的特点, 理论计算同实验定性一致。

关键词 晶界, 滑移, 滑错, 晶体塑性, 有限变形

1 引言

多晶体是由很多随机取向的晶粒和晶粒与晶粒之间的界面所组成。一般情况下金属多晶体的晶界宽度很小。尽管金属晶界很薄, 但往往对金属材料总体性能有较大影响。有关多晶体的研究工作已有不少, 早期的可以追溯到 Taylor^[1]的刚塑性模型, 后来 T. H. Lin^[2]进一步考虑了晶粒的弹性变形。上述文章中未考虑到晶粒与晶粒间的相互作用。Hershey^[3]首先提出自治的思想, 并应用于多晶体计算, Kröner^[4]、Budiansky 和 Wu^[5]利用著名 Eshelby^[6]解发展了自治模型, 再后来 Hill^[7]进一步完善了多晶体自治模型。T. H. Lin^[8]、McHugh、Asaro 和 Shih C. F.^[9], Harren 和 Asaro^[10], Tokuda^[11]将多晶体简化为由一些理想晶粒组成的集合体, 利用 Kelvin 解或有限元法对多晶体进行直接模拟, 但他们均将晶界视为几何界面, 只考虑到晶界两侧晶粒的定向不同, 而未考虑到晶界本身的物理性质。仲政、杨卫^[12]等提出“自治-有限元法”对滑错多晶体进行了数值模拟。本文将晶界及其影响区综合起来看作是有一定厚度的界面层, 该界面层的力学性质与晶粒内部不同, 由于引入了界面层; 界面的滑错变形和扩容变形均能自然地考虑在内。利用界面层模型, 结合晶体塑性理论, 可以对多晶滑错体的塑性变形进行有限元分析。

2 晶界模型及变形运动学描述

为了便于后面的计算, 本文只考虑二维情况。假设多晶体所受载荷为平面内载荷, 晶界垂直于此平面。对于面心立方晶体(FCC), 设想该平面的法线方向与晶轴[011]方向平行, 而对于体心立方晶体(BCC), 仅考虑主滑移系的话, 设想该平面的法线方向与晶轴[100]方向平行。由于晶界中含有位错, 因而在外力作用下, 位错有可能沿着晶界面滑动, 从而产生滑移塑性变形。随着变形的逐渐增加, 位错之间会相互缠结, 又由于晶界具有阻碍位错运动的特

* 本文得到国家自然科学基金资助。

1995-10-16 收到。

点,因此位错又可能会在晶界处大量的塞积,这样就会引起晶界处的应力升高,从而使晶界在其法线方向上产生正应变,即晶界产生扩容变形。对于一般只考虑滑移剪切变形的晶体塑性理论来说难以考虑扩容系所产生的正应变。本文所考虑的晶界材料单元包含一个滑移系和一个扩容系。滑移系的滑移面为晶界面,而滑移方向沿着晶界面的切线方向。扩容系的涵义是指晶界在晶界面的法线方向上可以产生正应变。扩容系的扩容方向是晶界面的法线方向。有关滑移引起塑性变形的数学描述已很完善^[13],下面给出晶界法向扩容变形的运动学描述。如图1所示,xoy面为滑移面(晶界面),扩容方向为z轴方向(滑移面的法线方向),扩容应变 ε ,塑性变形梯度

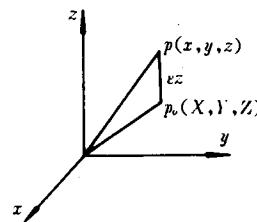


图1 扩容系引起的塑性变形

$$\mathbf{F}' = \mathbf{I} + \varepsilon \mathbf{M} \cdot \mathbf{M}^T \quad (1)$$

$$\dot{\mathbf{F}}' = \dot{\varepsilon} \mathbf{M} \cdot \mathbf{M}^T \quad (2)$$

若采用Update-Lagrange方法,则:

$$\mathbf{F}' \cdot (\mathbf{F}')^{-1} = \dot{\varepsilon} \mathbf{M} \cdot \mathbf{M}^T \quad (3)$$

为方便起见,记滑移系上的分解剪应力为 $\tau^{(a)}$, $a=1, \dots, N$, N 是滑移系总数,滑移剪切率为 $\dot{\gamma}^{(a)}$,扩容系上的正应力为 $\tau^{(N+1)}$,扩容应变率为 $\dot{\gamma}^{(N+1)}$ 。假设由滑移及扩容引起的塑性变形速度梯度张量是由这两类变形系的叠加而成,则:

$$\mathbf{F}' \cdot (\mathbf{F}')^{-1} = \sum_{a=1}^N \dot{\gamma}^{(a)} \mathbf{S}^{(a)} \cdot \mathbf{M}^{(a)T} + \dot{\gamma}^{(N+1)} \mathbf{M}^{(N+1)} \cdot \mathbf{M}^{(N+1)T} \quad (4)$$

塑性变形率及旋率分别为:

$$\mathbf{D}' = \sum_{a=1}^{N+1} \mathbf{P}^{(a)} \dot{\gamma}^{(a)} \quad (5)$$

$$\boldsymbol{\Omega}' = \sum_{a=1}^{N+1} \mathbf{W}^{(a)} \dot{\gamma}^{(a)} \quad (6)$$

其中:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{P}^{(a)} = \frac{1}{2} (\mathbf{S}^{*(a)} \cdot \mathbf{M}^{*(a)T} + \mathbf{M}^{*(a)} \cdot \mathbf{S}^{*(a)T}), \\ \mathbf{W}^{(a)} = \frac{1}{2} (\mathbf{S}^{*(a)} \cdot \mathbf{M}^{*(a)T} - \mathbf{M}^{*(a)} \cdot \mathbf{S}^{*(a)T}) \end{array} \right. , \quad a = 1, \dots, N \quad (7)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{P}^{(N+1)} = \frac{1}{2} (\mathbf{F}^* \cdot \mathbf{M}^{(N+1)} \cdot \mathbf{M}^{*(N+1)T} + \mathbf{M}^{*(N+1)} \cdot \mathbf{M}^{(N+1)T} \cdot \mathbf{F}^{*T}) \\ \mathbf{W}^{(N+1)} = \frac{1}{2} (\mathbf{F}^* \cdot \mathbf{M}^{(N+1)} \cdot \mathbf{M}^{*(N+1)T} - \mathbf{M}^{*(N+1)} \cdot \mathbf{M}^{(N+1)T} \cdot \mathbf{F}^{*T}) \end{array} \right. \quad (8)$$

\mathbf{S}^* 、 \mathbf{M}^* 分别为变形后的滑移方向和滑移面法线方向矢量。

$$\mathbf{S}^{*(a)} = \mathbf{F}^* \cdot \mathbf{S}^{(a)}, \quad \mathbf{M}^{*(a)} = (\mathbf{F}^*)^{-1T} \cdot \mathbf{M}^{(a)} \quad (9)$$

\mathbf{F}^* 为弹性变形梯度,总的变形梯度 \mathbf{F} ^[14]

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^* \cdot \mathbf{F}' \quad (10)$$

滑移系上的分解剪应力为

$$\tau^{(a)} = \tau : P^{(a)}, \quad a = 1, 2, \dots, N \quad (11)$$

扩容系上的正应力为

$$\tau^{(N+1)} = \tau : (M^*{}^{(N+1)} \cdot M^*{}^{(N+1)T}) \quad (12)$$

将变形率和旋率分解为弹性与塑性部分之和：

$$D = D^* + D' \quad (13)$$

$$\Omega = \Omega^* + \Omega' \quad (14)$$

假设晶体的弹性行为不受变形的影响，最后可以推得：

$$\nabla \tau = L_c : D - \sum_{a=1}^{N+1} \lambda^{(a)} \dot{\gamma}^{(a)} \quad (15)$$

其中：

$$\lambda^{(a)} = P^{(a)} : L_c + \beta^{(a)}, \quad a = 1, 2, \dots, N \quad (16a)$$

$$\lambda^{(N+1)} = P_i^{(N+1)} : L_c + \xi^{(N+1)} \quad (16b)$$

$$\beta^{(a)} = W^{(a)} \cdot \tau - \tau \cdot W^{(a)}, \quad a = 1, 2, \dots, N \quad (17a)$$

$$\xi^{(N+1)} = -(\tau \cdot P_i^{(N+1)T} + P_i^{(N+1)T} \cdot \tau) \quad (17b)$$

$$P_i^{(N+1)} = (F^*)^{-1T} \cdot M^{(N+1)} \cdot M^{(N+1)T} \cdot (F^*)^{-1} \quad (18)$$

假设滑移剪切率和扩容应变率与分解剪应力和扩容正应力之间符合幂次关系，即：

$$\dot{\gamma}^{(a)} = \dot{a}^{(a)} \frac{\tau^{(a)}}{g^{(a)}} \left| \frac{\tau^{(a)}}{g^{(a)}} \right|^{1/m-1}, \quad a = 1, 2, \dots, N, N+1 \quad (19)$$

$g^{(a)}$ 是第 a 系的当前应变硬化值，一般取增量形式为：

$$\dot{g}^{(a)} = \sum_{\beta=1}^{N+1} H_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} \quad (20)$$

在实际计算中，为了保证计算精度，采用前置梯度法^[13]来计算滑移剪切率和扩容应变率。

t 时刻到 $t+\Delta t$ 时刻的应变增量：

$$\Delta \gamma^{(a)} = \gamma^{(a)}(t + \Delta t) - \gamma^{(a)}(t) \quad (21)$$

在 Δt 时间内进行线性插值，有：

$$\Delta \gamma^{(a)} = [(1-\theta)\dot{\gamma}^{(a)}(t) + \theta\dot{\gamma}^{(a)}(t + \Delta t)]\Delta t \quad (22)$$

其中 $0 \leq \theta \leq 1$ ，对(19)式进行 Taylor 展开来近似计算 $\dot{\gamma}^{(a)}(t + \Delta t)$

$$\begin{aligned} \dot{\gamma}^{(a)}(t + \Delta t) &= \dot{\gamma}^{(a)}(t) + \left. \frac{\partial \dot{\gamma}^{(a)}}{\partial \tau^{(a)}} \right|_t \Delta \tau^{(a)} + \left. \frac{\partial \dot{\gamma}^{(a)}}{\partial g^{(a)}} \right|_t \Delta g^{(a)} \\ &= \text{Sgn}(\tau^{(a)}) \dot{a}^{(a)} \left[\frac{\tau^{(a)}}{g^{(a)}} \right]^{1/m} \left[1 + \frac{1}{m} \left(\frac{\Delta \tau^{(a)}}{\tau^{(a)}} - \frac{\Delta g^{(a)}}{g^{(a)}} \right) \right] \end{aligned} \quad (23)$$

$$\Delta \tau^{(a)} = \dot{\tau}^{(a)} \Delta t \quad (24a)$$

$$\Delta g^{(a)} = \dot{g}^{(a)} \Delta t \quad (24b)$$

由 $\dot{\tau}^{(a)}$ 及 $\dot{g}^{(a)}$ 的表达式最后可得：

$$\sum_{\beta=1}^{N+1} M_{\alpha\beta} \Delta \gamma^{(\beta)} = F^{(a)} \quad (25)$$

其中：

$$M_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} + \left(\frac{\theta \Delta t \dot{\gamma}^{(a)}}{m} \right) \left[\frac{\lambda^{(a)} : P^{(a)}}{\tau^{(a)}} + \text{Sgn}(\tau^{(a)}) \frac{H_{\alpha\beta}}{g^{(a)}} \right] \quad (26a)$$

$$F^{(a)} = \left[\dot{\gamma}_i^{(a)} + \left(\frac{\theta \Delta t \dot{\gamma}_i^{(a)}}{m \tau^{(a)}} \right) \lambda^{(a)} : D \right] \Delta t \quad (26b)$$

适当选取 $\Delta t, M_{ab}$ 矩阵就会正定, 由(25)式即可求出滑移剪切应变和扩容正应变增量.

3 计算结果

本文采用有限变形有限元法对上述模型进行数值模拟, 采用 Update-Lagrange 法描述, 有限元列式基于下列变分方程^[15]:

$$\int_v \left[L_{ijkl} \tilde{D}_{kl} \tilde{D}_{ij} - 2\sigma_{ik} D_{kl} \tilde{D}_{ij} + \sigma_{ik} \frac{\partial V_m}{\partial x_k} \frac{\partial V_m}{\partial x_l} \right] dv = \int_s T_i \tilde{V}_i ds \quad (27)$$

由于采用率相关本构关系(19)式及前置梯度法计算 $\Delta\gamma$, 因而上式中 L_{ijkl} 为弹性模量张量. 在上式中已忽略体积力, T_i 为外力率, V_i, D_{ij} 分别为速率和变形率, $\tilde{V}_i, \tilde{D}_{ij}$ 为虚速率和虚变形率.

计算模型见图 2 所示, 多晶体中含有 23 个晶粒, 晶粒定向近似随机分布. 边界条件为:

$$\begin{cases} X = 0 & \dot{u} = 0 & \dot{\tau}_{xy} = 0 \\ X = L & \dot{u} = U & \dot{\tau}_{xy} = 0 \\ Y = 0 & \dot{\tau}_{xy} = 0 & \dot{\tau}_{yy} = 0 \\ Y = H & \dot{\tau}_{xy} = 0 & \dot{\tau}_{yy} = 0 \end{cases} \quad (28)$$

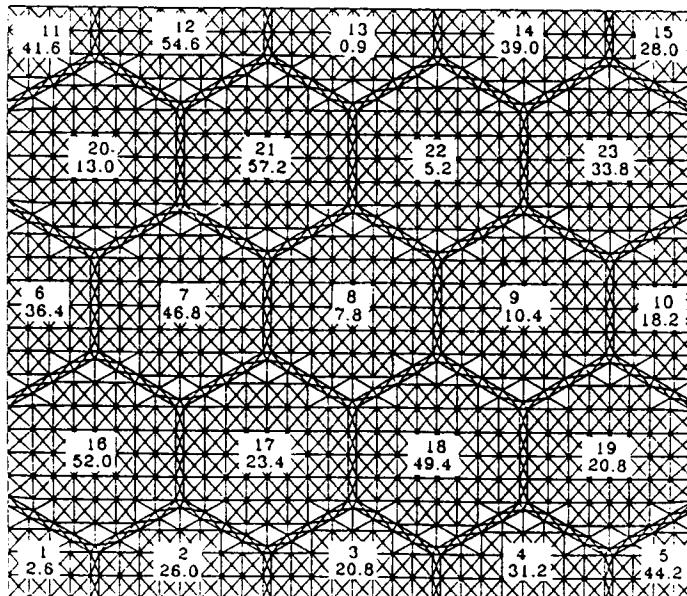


图 2 多晶体有限元初始网格及晶粒取向图
(实数为晶粒取向角度, 整数为晶粒编号)

硬化规律取为 Asaro 硬化律:

$$H(\gamma) = H_s + (H_0 - H_s) \operatorname{sech}^2 \left(\frac{H_0 - H_s}{\tau_s - \tau_0} \gamma \right) \quad (29a)$$

$$H_{\alpha\beta} = H(\gamma)[q + (1 - q)\delta_{\alpha\beta}] \quad (29b)$$

计算中晶粒单元取为平面三滑移系^[9],晶界内单元为一个滑移系,晶界法线方向只考虑弹性变形,实际计算中只要给扩容系一个很高的初始临界正应力即可。晶粒和晶界的弹性性质相同,弹性模量 $E=1000\tau_0$, $\nu=0.3$,晶粒的初始临界分解剪应力和晶界滑移系的初始临界分解剪应力相同,其值均为 τ_0 。硬化规律中初始参数取为: $H_0=8.9\tau_0$, $H_s=0.0$, $\tau_0=60.84$ MPa, $q=1.2$,参考滑移率 $\dot{a}=0.001$,率相关指数 $m=0.005$ 。

本文计算模型中使用三角形单元,单元总数为3708个,节点总数为1919个。所给边界条件相当于在多晶体垂直于 x 轴两端截面在 x 方向施以位移加载,而在另外两侧为自由边。

图3(a)、(b)、(c)、(d)分别表示多晶体在工程应变 $e=0.03, 0.06, 0.10, 0.15$ 下的 ε_z 等值线图。从图3(a)可以看出,如图晶粒 Schmidt 因子较大,则晶粒内部变形相对较大,如晶粒7,取向 $\varphi=46.8^\circ$,Schmidt 因子较大,其内部变形最大值也是多晶体全场最大值。另一晶粒5,取向 $\varphi=44.2^\circ$,Schmidt 因子也较大,但由于其变形要受到边界的约束而未表现出最大的应变值。但是从图3(a)、(b)、(c)、(d)看,随着变形的不断增加,这一现象逐渐变的不明显。

图4(a)、(b)、(c)、(d)表示沿垂直于 x 轴截面 ($x/L=0.184$) 在变形 $e=0.03, 0.06, 0.10, 0.15$ 情况下的 ε_z 沿 y 方向分布图,图4(e)、(f)、(g)、(h)表示的涵义同图4(a)、(b)、(c)、(d),但截面位置为 ($x/L=0.559$)。

图5(a)、(b)、(c)、(d)表示垂直于 x 轴截面 ($y/H=0.25$) 的 ε_z 沿 x 方向分布图,对应的总体工程应变分别为 $e=0.03, 0.06, 0.10, 0.15$,从图中可以看出晶界在 x 方向的应变非常小,而晶粒内部的应变要大得多。图5(e)~(h)表示的涵义同图5(a)~(d),但截面变为 ($y/H=0.5$),可以得出相同的结论,这一结论亦与文献[16]上的实验结果相一致(实验见图6)。

4 结论及讨论

综上所述,可以得出下列结论:

(1) 本文将晶界及其影响区看作是有一定厚度的界面层,建立了考虑晶界滑错和扩容的多晶滑错体塑性理论模型。

(2) 当总体变形较小时,一般 Schmidt 因子较大的晶粒内部变形相对较大,但随着变形的进一步增加,由于相邻晶粒取向因素及晶界的影响,这种现象变的不明显。

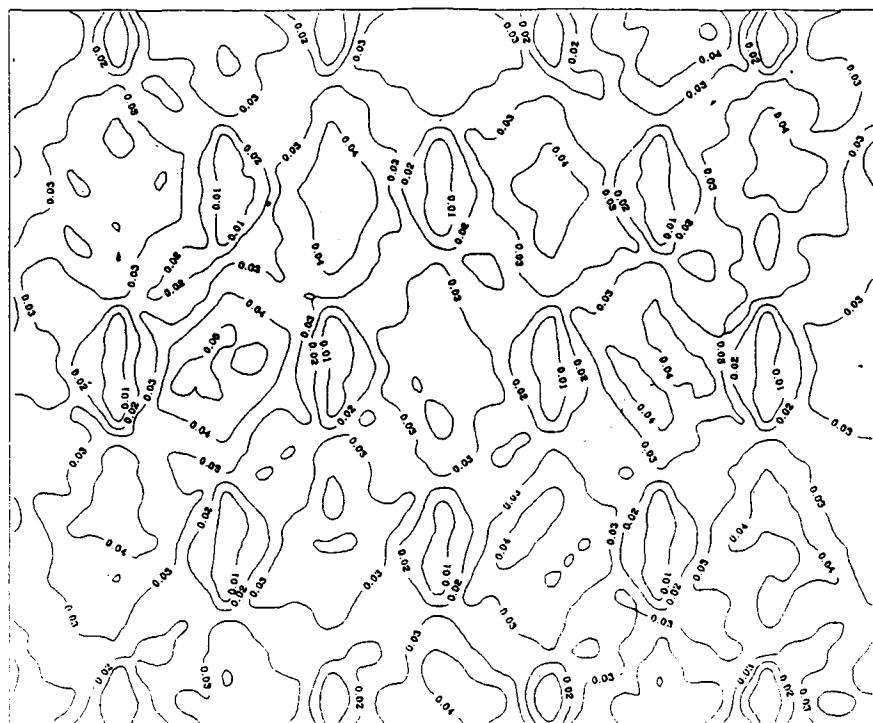
(3) 对于晶界沿晶界面切线方向滑动而不能沿晶界面法向扩容情况,一般晶界变形较小,晶粒内应变相对较大。

(4) 宏观多晶体塑性变形分布很不均匀,各晶粒内部变形亦不均匀。

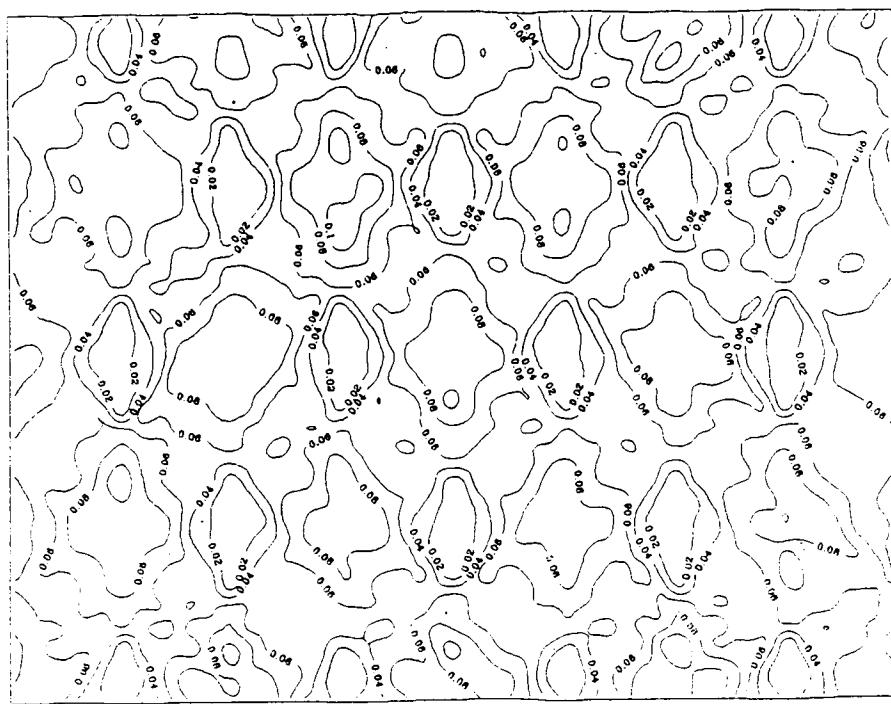
(5) 有限变形有限元数值模拟结果与多晶实验结果定性一致。

讨论:

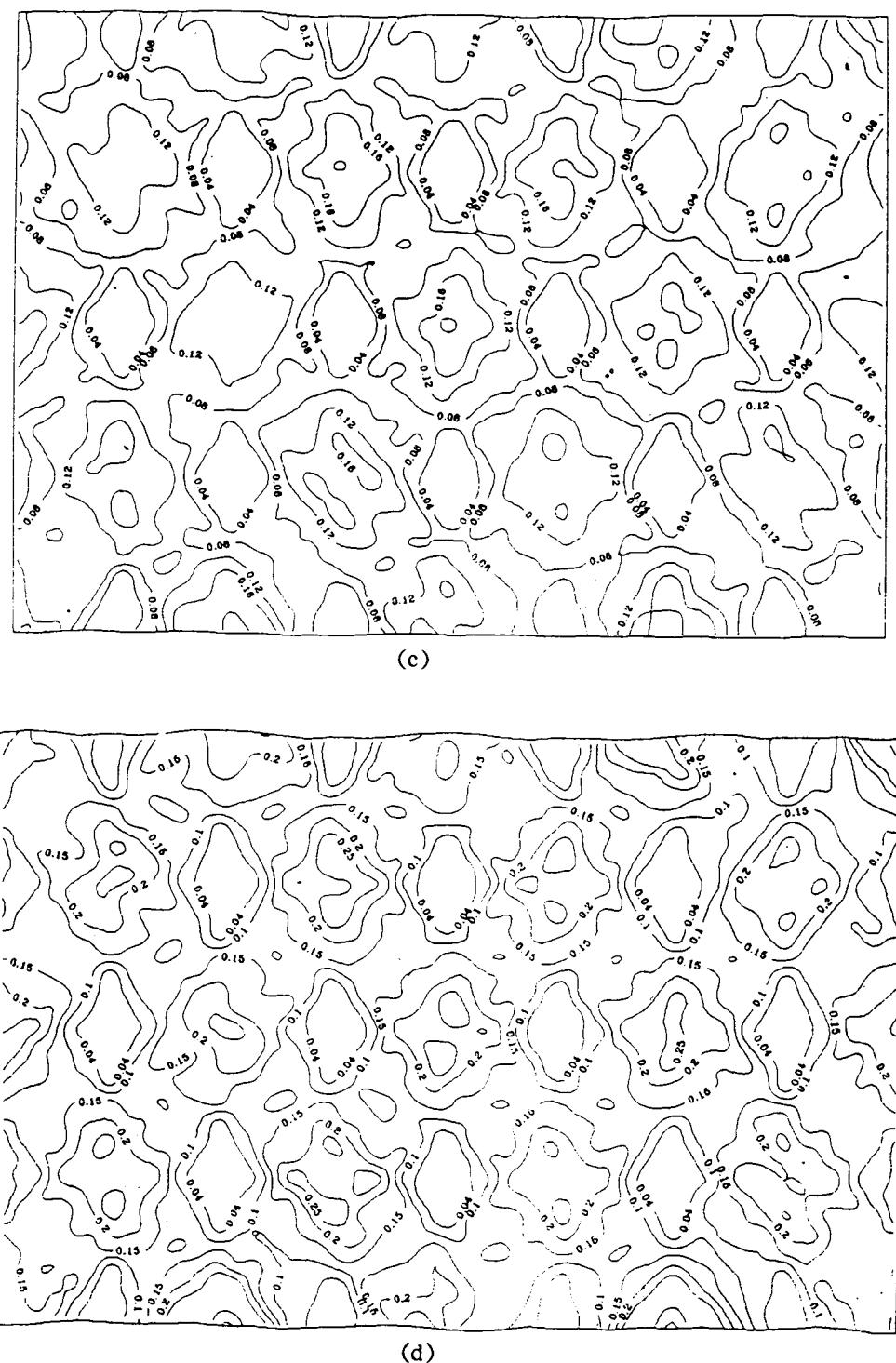
本文的模型为二维模型,晶粒内部有三个滑移系,晶界为一个滑移系和一个扩容系。实际中的晶粒滑移系的空间交互作用较为复杂,晶界的几何形状和物理特性亦非常复杂,在未来的研究中,一方面可以通过高技术实验来测量晶界模型中的某些参数,另一方面可以结合细观实验中某些测出的细观量并利用数学规划的办法来获得模型中的其它参数,从而可以实现较为精确的多晶体响应计算。



(a)



(b)

图3 多晶体在不同工程应变 e 下的 ϵ_p 等值线图(a) $e=0.03$ (b) $e=0.06$ (c) $e=0.10$ (d) $e=0.15$

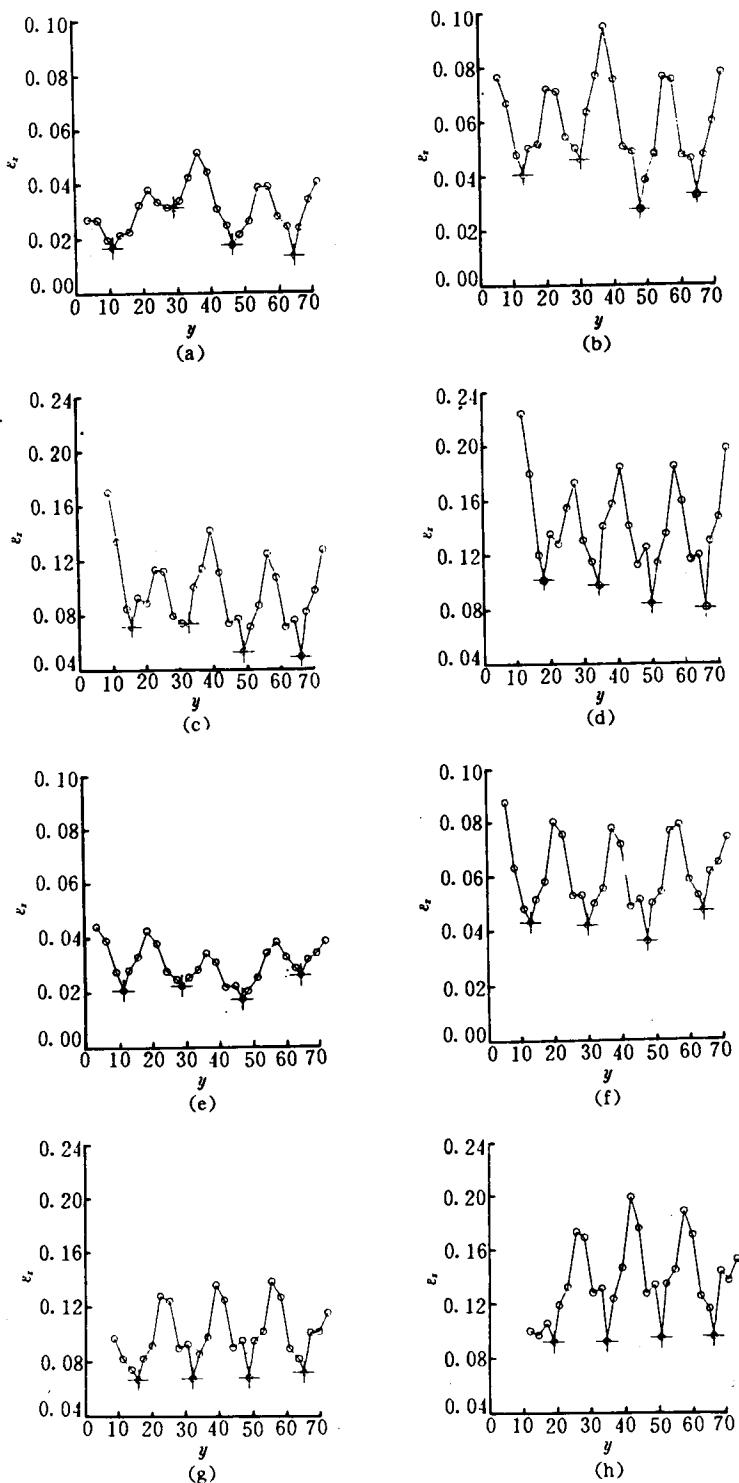


图4 垂直于 x 轴截面应变 ϵ_z 沿 y 轴方向分布 上2排截面位置($z/L=0.184$),下2排($z/L=0.559$)对应的工程应变: (a)、(e): $e=0.03$, (b)、(f): $e=0.06$, (c)、(g): $e=0.10$, (d)、(h): $e=0.15$

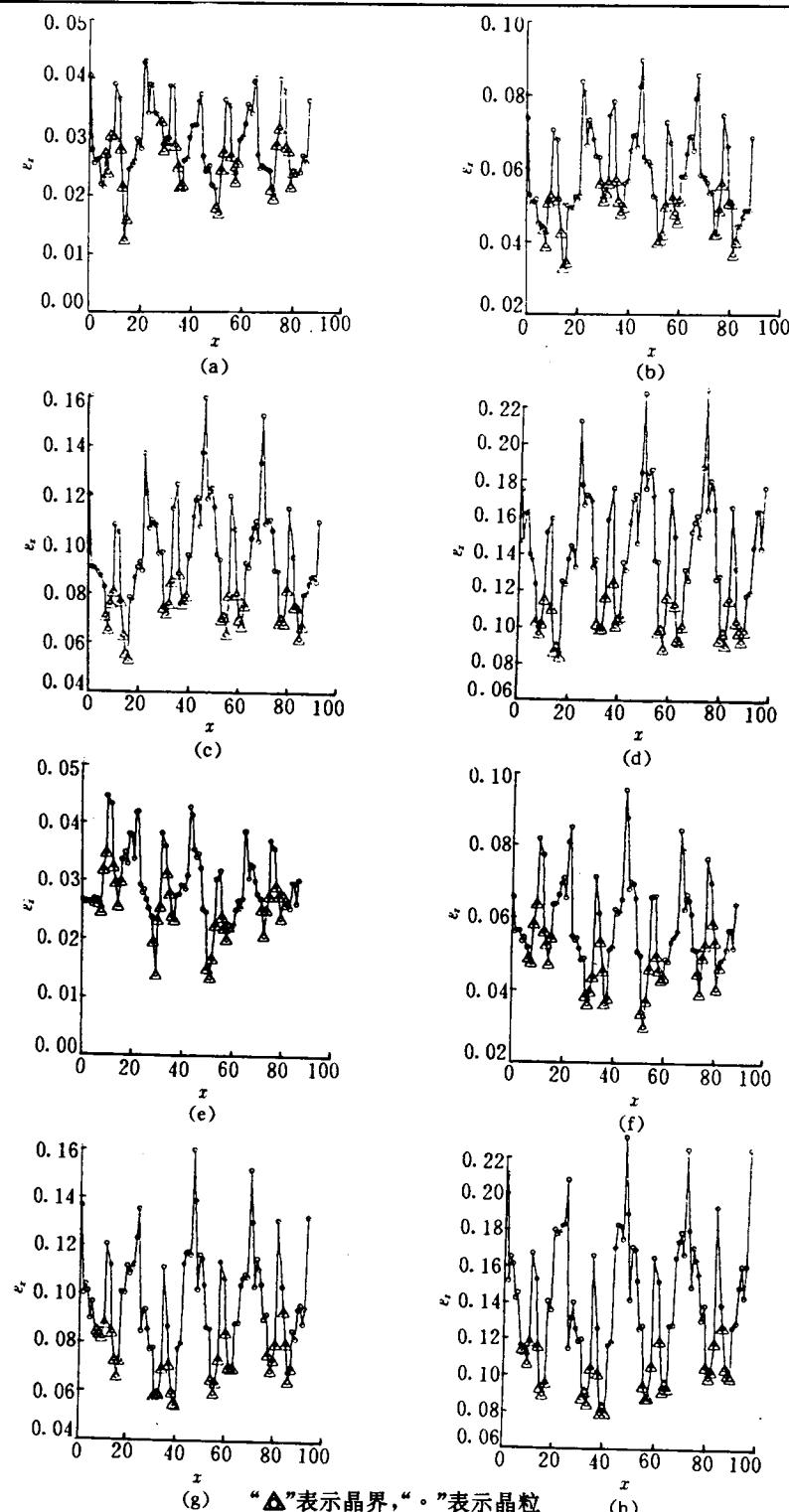


图 5 垂直于 y 轴截面上的单元应变 ϵ_x 沿 x 轴方向分布 上 2 排截面位置 ($y/L=0.25$)，下 2 排 ($y/L=0.5$) 对应的工程应变：(a)、(e)： $e=0.03$ ，(b)、(f)： $e=0.06$ ，(c)、(g)： $e=0.10$ ，(d)、(h)： $e=0.15$ 。

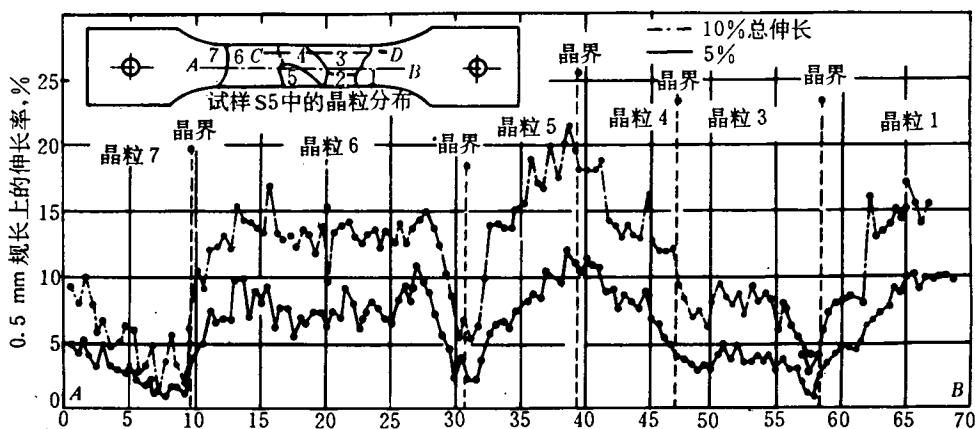


图 6 铝多晶局部伸长的变化

参考文献

- 1 Taylor G I. The plastic dysfunction of metals. *J Inst Met*, 1938, 63:307
- 2 Lin T H. Analysis of elastic and plastic strains of a face-centred cubic crystals. *J Mech Phys Solids*, 1957, 5:143
- 3 Hershey A V J. The elasticity of an isotropic aggregate of anisotropic cubic crystals. *J Appl Mech*, 1954, 21:236
- 4 Kroner E. On the plastic deformation of polycrystals. *Acta Metall*, 1961, 9:155
- 5 Budiansky B, Wu T T. Theoretical prediction of plastic strains of polycrystals. *J Appl Mech*, 1962, 29:1175
- 6 Eshelby J D. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems. *Proc Roy Soc*, 1957, A241:376
- 7 Hill R. Continuum micro-mechanics of elastoplastic. *J Mech Phys Solids*, 1965, 13:213
- 8 Lin T H. A new slip theory of plasticity. *Advances in Appl Mech*, 1971, 11:255
- 9 McHugh P E, Asaro R J, Shih C F. Computational modeling of metal matrix composite materials- I , isothermal deformation patterns in ideal microstructures. *Acta Metall Mat*, 1993, 41:1461
- 10 Harren S V, Asaro R J. Nonuniform deformation in polycrystals and aspects of the validity of the taylor model. *J Mech Phys Solids*, 1989, 37(2):191
- 11 Havlicek F, Tokuda M, Hino S, Kratochvil J. Finite element method analysis of micro-macro transition in polycrystalline plasticity. *Int J Plasticity* 1992, 8:47
- 12 Zhong Z, Yang W, Hwang K C. Micromechanics modelling of sliding polycrystals. *Scientia Sinica*, 1992, ser A:496
- 13 Peirce D, Asaro R J, Needleman A. An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals. *Acta Metall*, 1982, 30:1087
- 14 Lee E H. Elastic-plastic deformation at finite strains. *J Appl Mech*, 1969, 36:1
- 15 王自强, 张晓堤. 有限变形有限元分析, 中国科学院研究生院学报, 1986, 3(2):59
- 16 Urie V M, Wain H L. Some phenomena on deformation of polycrystalline metal. *J Inst Metals*, 1952, 81:153

FINITE DEFORMATION ANALYSIS OF POLYCRYSTAL BY CONSIDERING THE INFLUENCE OF GRAIN BOUNDARY

Pan Wenke

(Department 5 of University of Science and Technology of China, Hefei, 230026)

Zhang Yongwei Wang Tzuchiang

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

Abstract By synthetically considering grain boundary and its influence zone, the micromechanical model of polycrystal is established for considering the influence of grain boundary. By using crystal plastic theory and finite deformation finite element method, numerical simulation is carried out for the model. Numerical results display the macroscopic characteristic of deformation fields of grains. Calculated results are in qualitatively agree with experimental results.

Key words grain boundary, slip, slid, crystal plasticity, finite deformation