

晶体硬化系数表示式及材料常数标定*

梁乃刚 徐 彤 王自强

(中国科学院力学研究所, 北京 100080)

摘要 从均匀变形率场中各种取向滑移系硬化的基本特征出发, 提出了新的单晶硬化系数表示式, 内含 12 个材料常数, 各有明确的物理意义. 进而以精确模拟宏观力学性质为目标, 利用非线性规划理论建立了一种准确可靠又行之有效的材料常数标定方法. 作为例子, 使用非线性规划中的改进 Gauss-Newton 法与梯度法相结合的算法, 根据典型单轴拉伸实验曲线确定了铜与铝单晶的材料常数, 预测了它们在多种位向上拉伸变形时的应力应变响应, 与实验结果吻合良好.

关键词 潜在硬化 单晶硬化系数 材料常数标定

Hill^[1], Hill 和 Rice^[2] 等完成了晶体塑性变形几何学与运动学的严格描述以后, 晶体塑性理论能否得到实际应用在很大程度上取决于能否成功地描述单晶硬化规律. 正如王自强^[3] 所说, 晶体塑性理论中最困难的问题莫过于确定硬化系数.

继承与发展 Taylor 与 Elam 对晶体硬化微观机理的研究工作, 人们做了大量的实验观察与理论分析探讨单晶硬化规律. 80 年代初, Asaro^[4] 提出了单晶硬化的双曲函数表示式, 并且于定量分析剪切带的形成条件. 近来, Bassani^[5] 重新考证了次开动滑移系开动的临界条件, 指出潜在硬化的主要作用是提高滑移硬化的切线模量而不是次开动滑移系的临界分解剪应力. 中国学者从 80 年代开始, 也开展了这方面的研究工作^[3,6]. 然而, 现有理论预测与实验结果之间都还存在明显偏差. 另外, 由于晶体材料宏观应力应变响应与材料常数之间呈现异常复杂的非线性隐函数关系, 如何标定材料常数的问题长期悬而未决. 提出精确实用的单晶硬化系数表示式及材料常数标定方法成为发展与应用塑性细观力学的关键问题, 也是本文的目的. 为了进一步讨论方便, 本节中先回顾一下晶体塑性理论的几个重要关系式, 其详细推导过程可在 Asaro^[4] 的论文中找到.

记第 α 个滑移系的滑移面法线方向矢量为 $n^{(\alpha)}$, 滑移方向矢量为 $m^{(\alpha)}$ (两者在初始状态均为单位矢量), 滑移率为 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$, 分解剪应力率为 $\dot{\tau}^{(\alpha)}$, 对称与反对称的取向张量为

$$P^{(\alpha)} = \frac{1}{2} (m^{(\alpha)} \otimes n^{(\alpha)} + n^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)}) \text{ 与 } W^{(\alpha)} = \frac{1}{2} (m^{(\alpha)} \otimes n^{(\alpha)} - n^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)}), \quad (1)$$

则塑性应变率

1993-05-10 收稿, 1994-08-11 收修改稿

* 国家自然科学基金资助项目

$$D^p = \sum_{\alpha=1}^N \dot{\gamma}^{(\alpha)} P^{(\alpha)}. \quad (2)$$

记 T 为 Kirchhoff 应力, 而

$$B^{(\alpha)} = W^{(\alpha)} \cdot T - T \cdot W^{(\alpha)}, \quad (3)$$

弹性应变率与分解剪应力率将分别是

$$D^e = C^e : \left(\hat{T} + \sum_{\beta=1}^N \dot{\gamma}^{(\beta)} B^{(\beta)} \right) \text{ 与 } \dot{\tau}^{(\alpha)} = A^{(\alpha)} : \left(\hat{T} + \sum_{\beta=1}^N \dot{\gamma}^{(\beta)} B^{(\beta)} \right), \quad (4)$$

式中

$$A^{(\alpha)} = P^{(\alpha)} + B^{(\alpha)}; C^e. \quad (5)$$

\hat{T} 是 Kirchhoff 应力 T 的 Jaumann 率, 而 C^e 是弹性柔度张量; $\sum_{\beta=1}^N \dot{\gamma}^{(\beta)} B^{(\beta)}$ 一项是由有限变形几何非线性效应引入的, 变形不大时忽略该项不引起明显误差.

1 背应力耦合强化与切线模量耦合强化

处于塑性应变率场 D^p 中的滑移系, 不论开动与否, 其临界分解剪应力都随塑性变形的展而变; 同时, 次开动滑移系开动时原已开动滑移系的切线模量也会改变. 文献中统称上述两类现象为潜在硬化, 前一种硬化效应为背应力耦合强化, 而后一种为切线模量耦合强化.

背应力耦合强化的微观物理机制异常复杂, 将其作为两滑移系之间的耦合强化作用处理时需要考虑种种不同的相对取向. 但将晶体作为连续介质对待时, 微观上不均匀滑移的平均化表征量是均匀塑性应变率场 D^p . 因而可以把背应力耦合强化作为均匀塑性应变率场对各个滑移系的强化效应处理, 不管 D^p 是在何种滑移系组合开动状态中形成的. 也就是说, 任何滑移系组合开动状态产生的背应力耦合强化效应将是相同的, 只要它们形成的 D^p 相同. 这样, 一个滑移系的背应力耦合强化将由它与 D^p 的相对位向决定, 不必分别考虑它与各开动滑移系两两之间的相对取向.

实验证明, 只要分解剪应力达不到滑移系正向或反向开动的临界值, 滑移系不会开动. 在六维应力空间中, 这个范围被两个超平面限定. 对应各滑移系的超平面有个内包络面, 就是宏观上的屈服面. 因而, 如果选用比例极限点作为屈服点, 晶体材料的屈服面演化方式提供了推测背应力耦合强化规律的依据.

Philips 与 Tang^[7] 的试验结果表明, 多晶金属材料的后继屈服面具有 3 个明显的特征. 一、存在显著的 Bauehinger 效应: 加载时, 屈服面整体随载荷移动并伴有形状改变; 二、几乎无横向伸缩效应: 屈服面沿垂直于加载方向的尺寸基本保持不变; 三、存在不同程度的尖点效应: 屈服面上加载点附近曲率增大而相反向对应部位变得更平坦.

根据前两个特征可以推断背应力耦合强化依赖于六维空间中滑移系的取向张量 $P^{(\alpha)}$ 相对于应变率张量 D^p 的取向, 而且可以被认为正比于两者夹角的余弦, 即

$$\dot{\tau}_{\text{back}}^{(\alpha)} = \lambda P^{(\alpha)} : D^p = \lambda \sum_{\beta=1}^N \dot{\gamma}^{(\beta)} P^{(\alpha)} : P^{(\beta)}; P^{(\beta)} = \lambda \sum_{\beta=1}^N P_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)}, P_{\alpha\beta} = P^{(\alpha)} : P^{(\beta)}. \quad (6)$$

式中 λ 为背应力耦合强化模量, 随塑性变形的发展而变化. 它控制了后继屈服面上加载点处的曲率. λ 的值越大, 加载点处的屈服面越平坦. 当 $\lambda=0$ 时, 尖点效应最明显, 正如 Hutchinson^[8] 所预测的那样. 适当选取 λ 即可模拟出上述第三个特征.

于是, 可将滑移系的开动条件描述为

$$\begin{cases} \tau^{(\alpha)} = \tau_{\alpha}^{(\alpha)} \text{ 而且 } \dot{\epsilon}^{(\alpha)} > \dot{\epsilon}_{\text{back}}^{(\alpha)}, \text{ 则 } \gamma^{(\alpha)} > 0 \text{ 而且 } \dot{\epsilon}_{\alpha}^{(\alpha)} = \dot{\epsilon}^{(\alpha)}, \\ \tau^{(\alpha)} < \tau_{\alpha}^{(\alpha)} \text{ 或者 } \dot{\epsilon}^{(\alpha)} \leq \dot{\epsilon}_{\text{back}}^{(\alpha)}, \text{ 则 } \gamma^{(\alpha)} = 0 \text{ 而且 } \dot{\epsilon}_{\alpha}^{(\alpha)} = \dot{\epsilon}_{\text{back}}^{(\alpha)}. \end{cases} \quad (7)$$

滑移系开动时, 其分解剪应力率应当等于背应力率与滑移硬化率之和, 即

$$\dot{\tau}^{(\alpha)} = \dot{\tau}_{\text{active}}^{(\alpha)} + \dot{\tau}_{\text{back}}^{(\alpha)} = h^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} + \lambda \sum_{\beta=1}^N P_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)}, \quad (8)$$

式中 $h^{(\alpha)}$ 是滑移硬化模量, 它由滑移系自身硬化与切线模量耦合强化共同决定.

用 $h_{\alpha\beta}$ 表示总硬化模量, 由上式可得

$$h_{\alpha\beta} = h^{(\alpha)} \delta_{\alpha\beta} + \lambda P_{\alpha\beta}. \quad (9)$$

结合 (7~9) 式, 滑移硬化律的表达式为

$$\begin{cases} \dot{\tau}^{(\alpha)} = \sum_{\beta=1}^N h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)}, & \text{当 } \dot{\gamma}^{(\alpha)} > 0, \\ \dot{\tau}^{(\alpha)} \leq \sum_{\beta=1}^N h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)}, & \text{当 } \dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0. \end{cases} \quad (10)$$

上式符合 Hill 与 Rice^[2] 提出的硬化律统一表达式. 针对处于临界状态, 即 $\tau = \tau_{+\alpha}$ 或 $\tau = \tau_{-\alpha}$ 的滑移系, 可将上式写成下列矩阵形式的不等式方程组

$$\begin{bmatrix} h^{(1)} + \lambda P_{11} & \lambda P_{12} & \lambda P_{13} & \lambda P_{14} & \cdots & \lambda P_{1N} \\ \lambda P_{21} & h^{(2)} + \lambda P_{22} & \lambda P_{23} & \lambda P_{24} & \cdots & \lambda P_{2N} \\ \lambda P_{31} & \lambda P_{32} & h^{(3)} + \lambda P_{33} & \lambda P_{34} & \cdots & \lambda P_{3N} \\ \lambda P_{41} & \lambda P_{42} & \lambda P_{43} & h^{(4)} + \lambda P_{44} & \cdots & \lambda P_{4N} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \lambda P_{N1} & \lambda P_{N2} & \lambda P_{N3} & \lambda P_{N4} & \cdots & h^{(N)} + \lambda P_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{\gamma}^{(1)} \\ \dot{\gamma}^{(2)} \\ \dot{\gamma}^{(3)} \\ \dot{\gamma}^{(4)} \\ \cdots \\ \dot{\gamma}^{(N)} \end{bmatrix} \geq \begin{bmatrix} \dot{\tau}^{(1)} \\ \dot{\tau}^{(2)} \\ \dot{\tau}^{(3)} \\ \dot{\tau}^{(4)} \\ \cdots \\ \dot{\tau}^{(N)} \end{bmatrix}, \quad (11)$$

其中“=”号适用于 $\dot{\gamma} > 0$ 的滑移系, “>”号适用于 $\dot{\gamma} = 0$ 的滑移系. 不难看出, 式中的系数矩阵是对称正定的, 这保证了解的存在与唯一.

2 材料常数与本构方程

(6~11) 式中的背应力耦合强化模量 λ 由塑性变形的历史决定. 塑性变形伊始, 不同滑移系开动引起的位错增值与位错反应很明显, 以后逐渐趋于饱和. 因而可以设想 λ 随塑性变形的发展而减小, 故可假设

$$\lambda = H_c e^{-\eta \Gamma}, \text{ 其中 } \Gamma = \sum_{\alpha=1}^N |\dot{\gamma}^{(\alpha)}|, \quad (12)$$

式中材料常数 H_c 与 η 分别代表初始背应力耦合强化模量与衰减系数, 而 Γ 表征塑性变形发

展的程度。于是

$$\lambda = H_c e^{-\eta \left(\sum_{\alpha=1}^N |\gamma^{(\alpha)}| \right)} \quad (13)$$

按照 Asaro^[4] 的单滑移硬化模量的表达式, 单滑移状态的滑移硬化模量

$$h^{(\alpha)} = (H_0 - H_s) \operatorname{sech}^2 \left(\frac{H_0 - H_s}{\tau_s - \tau_0} \gamma^{(\alpha)} \right) + H_s, \quad (14)$$

其中 H_0 是初始滑移硬化模量, H_s 是饱和滑移硬化模量, τ_0 是初始状态临界分解剪应力, τ_s 是饱和状态临界分解剪应力, 都是材料常数。

按照 Bassani^[5] 的多滑移系状态硬化模量表达式, 多滑移时的滑移硬化模量

$$h^{(\alpha)} = \left[(H_0 - H_s) \operatorname{sech}^2 \left(\frac{H_0 - H_s}{\tau_s - \tau_0} \gamma^{(\alpha)} \right) + H_s \right] \left[1 + \sum_{\beta=1}^N f_{\alpha\beta} \tanh \left(\frac{\gamma^{(\beta)}}{\gamma_0} \right) \right] (f_{\alpha\alpha} = 0), \quad (15)$$

表 1 $f_{\alpha\beta}$ 取值表

滑移系编号	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	(n, m)
1	0	a_3	a_4	a_2	a_2	a_5	a_4	a_1	a_3	a_5	a_4	a_4	(111, $\bar{1}01$)
2	a_3	0	a_1	a_4	a_5	a_2	a_2	a_4	a_3	a_4	a_4	a_5	(111, $0\bar{1}1$)
3	a_4	a_1	0	a_3	a_4	a_2	a_2	a_5	a_4	a_3	a_5	a_4	($\bar{1}\bar{1}1$, $0\bar{1}1$)
4	a_2	a_4	a_3	0	a_1	a_4	a_5	a_2	a_5	a_3	a_4	a_4	($\bar{1}\bar{1}1$, 101)
5	a_2	a_5	a_4	a_1	0	a_3	a_4	a_2	a_4	a_4	a_3	a_5	($\bar{1}\bar{1}1$, 101)
6	a_5	a_2	a_2	a_4	a_3	0	a_1	a_4	a_4	a_5	a_3	a_4	($\bar{1}\bar{1}1$, 011)
7	a_4	a_2	a_2	a_5	a_4	a_1	0	a_3	a_5	a_4	a_4	a_3	($\bar{1}\bar{1}1$, 011)
8	a_1	a_4	a_5	a_2	a_2	a_4	a_3	0	a_4	a_4	a_5	a_3	($\bar{1}\bar{1}1$, $\bar{1}01$)
9	a_3	a_3	a_4	a_5	a_4	a_4	a_5	a_4	0	a_2	a_1	a_2	(111, $\bar{1}10$)
10	a_5	a_4	a_3	a_3	a_4	a_5	a_4	a_4	a_2	0	a_2	a_1	($\bar{1}\bar{1}1$, 110)
11	a_4	a_4	a_5	a_4	a_3	a_3	a_4	a_5	a_1	a_2	0	a_2	($\bar{1}\bar{1}1$, $\bar{1}10$)
12	a_4	a_5	a_4	a_4	a_5	a_4	a_3	a_3	a_2	a_1	a_2	0	($\bar{1}\bar{1}1$, 011)

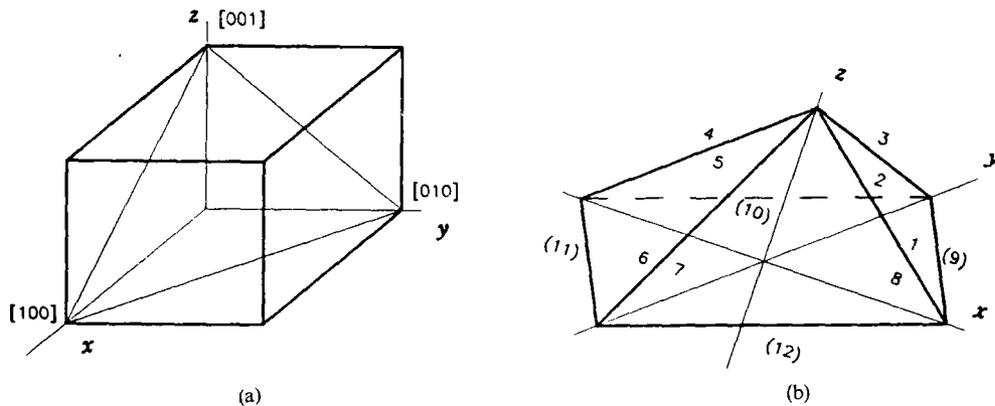


图 1 FCC 单晶的主滑移面、易滑移方向与滑移系取向及编号
(a) 一个主滑移面及 3 个易滑移方向, (b) 滑移系取向及编号

式中 $f_{\alpha\beta}$ 是第 β 个滑移系对第 α 个滑移系的切线模量耦合强化系数, 由滑移系之间的相对取向决定(见表 1), 其中滑移系的编号见图 1, 取值不同的系数有 5 个. 上式中的 γ_0 依赖于耦合强化达到饱和的快慢程度, 也是材料常数, $\gamma^{(\beta)}$ 是第 β 个滑移系的滑移量.

根据上述 12 个材料常数, 可以使用单晶本构方程预测其宏观应力应变响应. 大变形条件下金属单晶的刚度一般都很小, 使用柔度张量表达的本构方程更便于保证计算精度. 为此, 将(4)式代入(10)式可得

$$\begin{cases} \sum_{\beta=1}^N h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} = A^{(\alpha)} : \left(\hat{T} + \sum_{\beta=1}^N \dot{\gamma}^{(\beta)} B^{(\beta)} \right), & \text{当 } \dot{\gamma}^{(\alpha)} > 0, \\ \sum_{\beta=1}^N h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} \geq A^{(\alpha)} : \left(\hat{T} + \sum_{\beta=1}^N \dot{\gamma}^{(\beta)} B^{(\beta)} \right), & \text{当 } \dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0. \end{cases} \quad (16)$$

不妨假设上式是针对所有开动的滑移系写出的. 记

$$\kappa_{\alpha\beta} = h_{\alpha\beta} - A^{(\alpha)} : B^{(\beta)} = h_{\alpha\beta} - B^{(\alpha)} : C^c : B^{(\beta)} - P^{(\alpha)} : B^{(\beta)}, \quad (17)$$

可得

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \left(\sum_{\beta=1}^N \kappa_{\alpha\beta}^{-1} A^{(\beta)} \right) : \hat{T}. \quad (18)$$

将上式代入(2)式与(4)式得到

$$D = D^c + D^p = \left(C^c + \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=1}^N \kappa_{\alpha\beta}^{-1} A^{(\alpha)} \otimes A^{(\beta)} \right) : \hat{T}. \quad (19)$$

这就是用柔度张量表示的率型本构方程. 尽管(1)式中的 $P^{(\alpha)}$ 与(3)式中的 $B^{(\beta)}$ 都是二阶对称张量, 但不能保证 $P^{(\alpha)} : B^{(\beta)} = B^{(\beta)} : P^{(\alpha)}$. 既然不总有 $\kappa_{\alpha\beta} = \kappa_{\beta\alpha}$, (16)式又是不等式方程组, 直接由(16)式求滑移率并不方便. 然而, (10), (11)式中的系数矩阵是对称正定的, 可以将 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 的一组猜想值代入(4)式中第二个式子, 求得 $\tau^{(\alpha)}$ 的尝试值, 再利用(11)式求出 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 更为精确的尝试值, 反复迭代直到精度达到满意程度, 最后使用

$$D = D^c + D^p = C^c : \left(\hat{T} + \sum_{\alpha=1}^N \dot{\gamma}^{(\alpha)} B^{(\alpha)} \right) + \sum_{\alpha=1}^N \dot{\gamma}^{(\alpha)} P^{(\alpha)} = C^c : \hat{T} + \sum_{\alpha=1}^N \dot{\gamma}^{(\alpha)} A^{(\alpha)} \quad (20)$$

算出应变率. 应当强调指出, 虽然(11)式也是不等式方程组, 不同于一般的线性方程组. 但与滑移系开动的约束条件一起形成一个典型的线性规划问题. 由于系数矩阵对称正定, 解存在而且唯一, 可以利用线性规划的单纯形算法求解.

3 材料常数的标定方法

单晶材料的力学性质常常通过单轴拉伸试验测定. 最为常见的试验结果是载荷与伸长比曲线. 而试验曲线与单晶材料常数之间呈现非常复杂的隐函数关系, 无法通过传统实验分别将上述 12 个材料常数逐个测量出来. 然而, 合理的硬化系数表示式与恰当的材料常数值应当保证理论预测与实验结果的良好吻合. 因而, 可从材料常数的猜想值出发, 利用上节的本构方程得到理论预测曲线, 通过与实验结果的对照, 逐步修正材料常数, 直到两者满意吻合. 本文将利用非线性规划理论, 将材料常数作为决策变量, 将理论预测与实验结果的偏差定义为

目标函数. 通过最小化算法标定材料常数.

单晶体的应力应变响应与晶体取向关系很大, 通常需要沿多种取向拉伸试验的数据. 计算时每一种取向的实测结果中各选几个样本点, 以保证标定结果的可靠性. 记第 i 个样本点的实测与理论预测值分别为 y_i^* 与 $y_i (i=1, 2, \dots, N)$, 可定义目标函数为

$$F(x_j) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (y_i - y_i^*)^2, \quad (21)$$

式中 $x_j (j=1, 2, \dots, M)$ 是代表材料常数的决策变量. 定义目标函数时也可以对各个样本点进行加权处理, 数学处理过程是类似的.

从一组猜想的材料常数出发, 用 (21) 式计算目标函数的值. 按照非线性规划中的单纯形法^[9], 就能逐步找到使目标函数极小的决策变量, 实现材料常数标定. 如果使用非线性规划中的梯度算法, 或收敛较快但计算程序略为复杂的 DFP 以及 BFGS 算法^[10], 需要计算目标函数的梯度

$$\frac{\partial F}{\partial x_j} = \sum_{i=1}^N (y_i - y_i^*) \frac{\partial y_i}{\partial x_j}, \quad (22)$$

其中的 $\frac{\partial y_i}{\partial x_j}$ 可由一阶差商代替. 用二阶差商代替

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_j \partial x_k} = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial y_i}{\partial x_j} \frac{\partial y_i}{\partial x_k} + (y_i - y_i^*) \frac{\partial^2 y_i}{\partial x_j \partial x_k} \right], \quad (23)$$

式中的 $\frac{\partial^2 y_i}{\partial x_j \partial x_k}$ 时计算量很大, 精度也难以得到保证, 效果不理想. 不过, 当材料常数的猜想值偏差不大时, 可以设想 y_i 近似为各材料常数的线性函数, 于是 $\frac{\partial^2 y_i}{\partial x_j \partial x_k} \approx 0$, 而

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_j \partial x_k} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial y_i}{\partial x_j} \frac{\partial y_i}{\partial x_k}. \quad (24)$$

若使用改进 Gauss-Newton 算法, 决策变量的修正公式为

$$\{x_k\}(\text{新}) = \{x_k\}(\text{旧}) - \mu \left[\frac{\partial^2 F}{\partial x_j \partial x_k} \right]^{-1} \left\{ \frac{\partial F}{\partial x_j} \right\}, \quad (25)$$

式中 μ 是使目标函数达到最小的待定系数. 计算结果表明, 使用改进 Gauss-Newton 法与梯度法相结合的算法很有效, 决策变量的修正公式为

$$\{x_k\}(\text{新}) = \{x_k\}(\text{旧}) - \mu \left[\frac{\partial^2 F}{\partial x_j \partial x_k} + v \delta_{jk} \right]^{-1} \left\{ \frac{\partial F}{\partial x_j} \right\}, \quad (26)$$

式中 v 是一个正常数. 显然, v 越大, 搜索方向越接近梯度方向.

4 数值例子

图 1(a) 中画出了面心立方晶体的一个主滑移面以及该滑移面上的 3 个易滑移方向. 图 1(b)

中画出了 12 个滑移系的取向与编号。在单轴拉伸试验时,一个拉伸方向对应于极射赤面图中的一个点,见图 2,其中“110”,“010”与“001”分别表示图 1 中的 x, y 与 z 轴方向,“ $\bar{1}11$ ”与“011”分别代表 $\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}, \frac{\sqrt{3}}{3}, \frac{\sqrt{3}}{3}\right)$ 方向与 $\left(0, \frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2}\right)$ 方向。由于几何对称性,研究拉伸变形特性时只需要考虑图 2 中阴影部分曲边三角形中的点所对应的晶体取向^[11]。

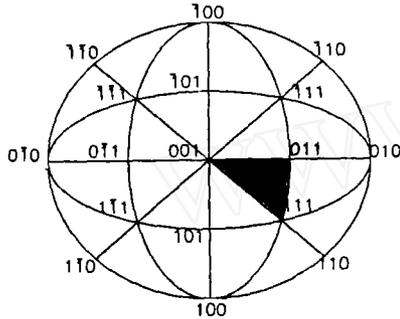


图 2 面心立方晶体的极射投影图

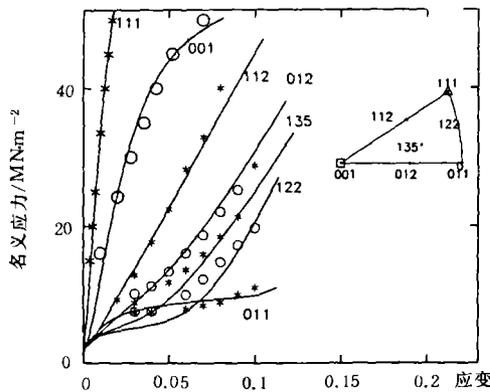


图 4 铜单晶沿不同位向拉伸时的名义运动-应变曲线

— 为理论预测线, ○, * 为实验点

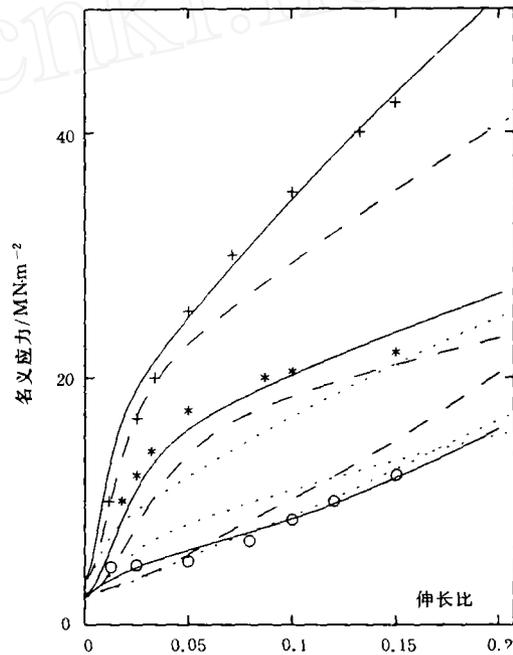


图 3 铝单晶沿不同位向拉伸时的名义应力-伸长比曲线

+ 为沿[111]拉伸实验点, * 为沿[001]拉伸实验点, ○ 为沿[168]拉伸实验点; 虚线为猜想值预测线, 点线为中间值预测线, 实线为优选值预测线

图 3 中的 3 条实线是铝单晶理论预测曲线, 材料常数为 $H_0/\tau_0=21.9$, $H_s/\tau_0=2.90$, $\tau_s/\tau_0=2.13$, $\gamma_0=0.005$, $a_1=5.67$, $a_2=6.31$, $a_3=0.065$, $a_4=13.03$, $a_5=3.63$, $H_c/\tau_0=1.61$, $\eta=0.073$, 其中, τ_0 是初始临界分解剪应力。理论预测和文献[11]的实验结果很接近。图 4 中的铜单晶理论预测曲线是由 $H_0/\tau_0=36.2$, $H_s/\tau_0=3.36$, $\tau_s/\tau_0=2.31$, $\gamma_0=0.0017$, $a_1=2.38$, $a_2=2.89$, $a_3=0.38$, $a_4=23.70$, $a_5=1.14$, $H_c/\tau_0=0.76$, $\eta=0.08$ 算得的。它们与 Franciosi^[12] 的实验结果也很接近。图 3 与图 4 表明, 本文得到的硬化系数表示式体现了单晶沿各种位向拉伸变形时的力学特征。这说明本文中所采用的几个假定是可以接受的。

图 3 中的 3 条虚线是根据猜想的材料常数算得的, 3 条点划线是根据优化过程得到的中间结果算得的, 3 条实线是根据材料常数的优化结果算得的。优化迭代时使用 (26) 式, 计算中

取 v 为 0.1 ~ 1.0 时收敛很快, 将这 3 组曲线实验结果进行比较说明本文提出的材料常数标定方法是可行的。

5 结论与讨论

本文从均匀变形率场中不同取向滑移系硬化的基本特征出发, 提出了一种单晶硬化系数表示式。各材料常数物理意义明确, 能足够精确地预测单晶材料沿各种晶体学取向拉伸变形时的宏观力学行为。硬化矩阵形式简单、对称正定, 可以用线性规划理论判断滑移系开动状态, 求得其滑移率。本文提出的材料常数标定方法行之有效。

本文中铝与铜单晶的材料常数是依据文献[11]和[12]的试验结果标定的。不同文献中报道的试验数据分散程度较大, 需要进一步做深入细致的理论分析与试验验证工作。此外, 多晶材料中的晶粒受杂质、缺陷、晶界约束等因素的影响, 与单晶材料的性质有所不同, 不能完全照搬单晶的材料常数与硬化系数表示式, 有必要进一步探讨。

参 考 文 献

- 1 Hill R. Generalized constitutive relations for incremental deformation of metals and crystals by multislip. *J Mech Phys Solids*, 1966, 14:95~102
- 2 Hill R, Rice J R. Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain. *J Mech Phys Solids*, 1972, 20: 401~413
- 3 王自强. 晶体塑性理论——Hill 自治理论. 见: 王仁、黄克智、朱兆祥编, 塑性力学进展. 北京: 中国铁道出版社, 1988. 198~216
- 4 Asaro R J. Micromechanics of crystal and polycrystal. In: Hutchinson J W, Theodore Wu Y eds. *Advances in Applied Mechanics*. New York, London: Academic Press, 1983. 23:1~115
- 5 Bassani J L. Single crystal hardening. *Appl Mech Rev*, 1990, 43(5):320~327
- 6 杨卫. 塑性变形的微观研究. 见: 王仁、黄克智、朱兆祥编, 塑性力学进展. 北京: 中国铁道出版社, 1988. 179~198
- 7 Phillips A, Tang J. The effect of loading path on the yield surface at elevated temperature. *Int J Solids Structures*, 1972, 8:463~474
- 8 Hutchinson J W. Elastic-plastic Behavior of polycrystalline metals and composites. *Proc Roy Soc London, A*. 1970(319): 247~272
- 9 Nelder J A, Mead R. A simplex method for function minimization. *Computer J*, 1965, 7:308~316
- 10 Brodli K W. In: Jacobs David A H ed. *The State of the Art in Numerical Analysis*. London: Academic Press, 1977. Ch 1
- 11 Honeycombe R W K. In: Edward A ed. *The Plastic Deformation of Metals*, 2nd ed. Australia, 1984. Ch. 4
- 12 Franciosi P. The concepts of latent hardening and strain hardening in metallic single crystals. *Acta Metall*, 1985, 33(9): 1601~1612