

# 考虑晶界滑错的金属多晶体响应的自洽方法

潘文科 王自强

(中国科学技术大学) (中国科学院力学研究所)

## 提 要

本文首先建立含有三种介质(各向异性基体、各向异性夹杂、界面层)的平面应变夹杂模型。将基体和夹杂位移场展开为多项式级数,假设界面层很薄,运用变分原理得出这一问题的近似解。将上述夹杂问题的解和 HILL 自洽方法相结合,给出了考虑晶界滑错效应的金属多晶体弹塑性响应。

关键词:金属多晶体,滑错,自洽方法。

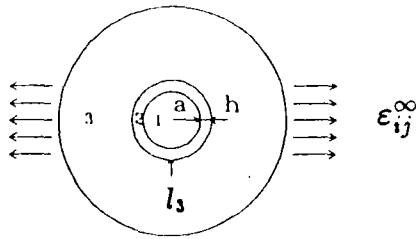
## 0 引言

多晶体在高温下晶界行为对多晶体总体响应有较大影响。对于高纯度低熔点的金属多晶体来说,在常温下变形过程中亦观察到明显的晶界滑错现象。因此有必要建立考虑晶界效应的多晶体本构关系。Hutchinson<sup>[1]</sup>、T. H. Lin<sup>[2]</sup>、MuHugh<sup>[3]</sup>、Harren<sup>[4]</sup>、Tokuda<sup>[5]</sup>等都作过多晶体弹塑性响应计算,但他们均未考虑多晶体中晶界的作用。本文将晶界看作是厚度较薄的一层物理界面,在第 1 节建立了考虑晶粒之间相互作用的平面应变夹杂模型,并用变分原理得出这一问题的近似解。第 2 节将自洽方法和本文夹杂问题的解相结合,给出了考虑晶界效应的多晶体弹塑性响应。结论在最后给出。

## 1 滑错柱形夹杂模型

图 1 为包含三种介质的柱形夹杂模型。无限大基体中含有一无限长柱形夹杂,夹杂和基体可以为各向异性材料,夹杂和基体间为厚度较薄的界面层。对这一夹杂问题很难找出其解析解。本文采用变分原理的方法求出这一问题的近似解。利用高斯公式,图 1 所示系统的总能量的变分为(取单位长度):

本文收到日期:1995 年 12 月 25 日



1. 夹杂 2. 界面层 3. 基体  
图 1 夹杂模型(平面应变问题)

$$\delta\Pi = \delta U_1 + \delta U_2 + \int_{S_3} (\sigma_{ij} - \sigma_{ij}^\infty) \delta \epsilon_{ij} dS + \sigma_{ij}^\infty \int_{l_3} n_i \delta u_j dl = 0 \quad (1)$$

其中,  $U_1$ 、 $U_2$  分别为夹杂和界面层的弹性变形能,  $S_3$  表示整个基体,  $l_3$ 、 $n_i$  分别为基体的内边界及其外法线方向单位向量。

假设夹杂内的位移场及弹性本构关系为:

$$\begin{cases} u_x = \sum_{m_1, m_2=0}^{\infty} a_{m_1 m_2} x^{m_1} y^{m_2} \\ u_y = \sum_{m_1, m_2=0}^{\infty} b_{m_1 m_2} x^{m_1} y^{m_2} \end{cases} \quad (2)$$

$$\sigma = g : \epsilon \quad (3)$$

假设基体位移场及弹性本构关系为:

$$\begin{cases} u_x = \sum_{m_1, m_2=0}^{\infty} A_{m_1 m_2} r^{-2(m_1+m_2)} x^{m_1} y^{m_2} + \epsilon_{1j}^\infty x_j \\ u_y = \sum_{m_1, m_2=0}^{\infty} B_{m_1 m_2} r^{-2(m_1+m_2)} x^{m_1} y^{m_2} + \epsilon_{2j}^\infty x_j \end{cases} \quad (4)$$

$$\sigma = G : \epsilon \quad (5)$$

其中, 向量  $\sigma = [\sigma_x \sigma_y \tau_{xy}]^T$ ,  $\epsilon = [\epsilon_x \epsilon_y \gamma_{xy}]^T = [\epsilon_{11} \epsilon_{22} 2\epsilon_{12}]^T$

假设界面层很薄, 其变形可近似表示为:

$$\epsilon_r \doteq [u_r]/h \quad \gamma_{r\phi} \doteq [\mu_\phi]/h \quad (6)$$

其中符号“ $[\cdot]$ ”表示界面内外层差值。界面的弹性本构关系为:

$$\sigma_r = E_r \epsilon_r, \tau_{r\phi} = G_\phi \gamma_{r\phi} \quad (7)$$

其中  $E_r$ 、 $G_\phi$  分别为界面层的法向和切向模量。

通过一系列的推导, (1) 可表示为

$$\sum_{m, p=0}^{\infty} [\delta a_{p2}^T d a_m + \delta A_{p2}^T D A_m + \delta \bar{A}_p^T (\Gamma A_m + H)] - \sum_{m, p=0}^{\infty} \delta A_{p2}^T \sigma^\infty T_p = 0 \quad (8)$$

其中

$$a_p = [a_{p_1 p_2} \ b_{p_1 p_2}]^T, A_m = [A_{m_1 m_2} \ B_{m_1 m_2}]^T \quad (9)$$

$$\bar{A}_m = (a+h)^{-(m_1+m_2+1)} A_m - a^{m_1+m_2-1} a_m \quad (10)$$

$$d_{ij} = \bar{g}_{ij} : \beta; D_{ij} = \bar{G}_{ij} : \bar{\beta} \quad (11)$$

$$\bar{\beta}_{ij} = \bar{\beta}_{ij} + 4(m_1+m_2)(p_1+p_2)\gamma_{ij} - 2(p_1+p_2)m_i\beta_{ji}^* - 2(m_1+m_2)p_j\beta_{ji}^* \quad (12)$$

$$\bar{g}_{ij} = \begin{bmatrix} g_{i_1 j_1} & g_{i_1 j_2} \\ g_{i_2 j_1} & g_{i_2 j_2} \end{bmatrix}; \bar{G}_{ij} = \begin{bmatrix} G_{i_1 j_1} & G_{i_1 j_2} \\ G_{i_2 j_1} & G_{i_2 j_2} \end{bmatrix} \quad (13)$$

对式(13), 当  $i=1$  时,  $i_1=1, i_2=3$ , 当  $i=2$  时,  $i_1=3, i_2=2$ , 当  $j=1$  时,  $j_1=1, j_2=3$ , 当  $j=2$  时,  $j_1=3, j_2=2$ 。(8)式中的  $\sigma^\infty$  为二阶张量, 即:

$$\sigma^\infty = \begin{bmatrix} \sigma_x & T_{xy} \\ T_{yx} & \sigma_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \sigma_{22} \end{bmatrix} \quad (14)$$

另外,  $T_p, \beta, \bar{\beta}, \gamma, \beta^*$  为三角函数的显式积分, 而  $H, \Gamma$  为含介质弹性常数和三角函数的积分。

由(8)式可以得出一组关于未知系数  $a_m, A_m$  的线性方程组, 求解此方程组, 通过应变与位移间关系及本构方程, 即可求出夹杂、基体内的应变和应力。取夹杂内的平均应变作为夹杂的特征应变, 从而可以求出远场应变同夹杂特征应变之间的关系, 即:

$$\bar{\epsilon}_c = A : \epsilon^\infty \quad (15)$$

## 2 多晶滑错体的自洽模型

多晶体是由大量随机取向的晶粒所组成, 晶粒之间的界面相当于本文夹杂模型中的界面。当  $E_p, G_p$  很大时, 晶粒之间相当于固联; 若  $G_p$  趋于零, 晶粒之间可以自由滑错。

多晶体宏观应力率、应变率和瞬时弹性模量张量分别为  $\dot{\Sigma}, \dot{E}$  和  $L$ , 则:

$$\dot{\Sigma} = L : \dot{E} \quad (16)$$

对于第1节所述夹杂模型, 采用增量形式, 无穷远处应变相当于  $E$ , 则有:

$$\bar{\epsilon}_c = A_c : E \quad (17)$$

晶粒的瞬时弹塑性模量张量为  $L_c$ , 则单晶本构为:

$$\bar{\sigma}_c = L_c : \bar{\epsilon}_c \quad (18)$$

多晶体总应力率定义为所有晶粒应力率的体积平均, 由(16)、(17)、(18)得:

$$L = \{ L_c : A_c \} \quad (19)$$

其中, 符号  $\{ \cdot \}$  表示体积平均。

晶粒的弹塑性模量张量  $L_c$  与晶粒中滑移系的状态密切相关。若滑移系上的分解剪应力和临界分解剪应力相等, 即  $\tau^{(\alpha)} = \tau_{cr}^\alpha$ , 则该滑移系称为临界滑移系, 对此滑移系有:

$$\begin{cases} \dot{\tau}^{(\alpha)} = \dot{\tau}_{cr}^{(\alpha)} = \sum_{\beta=1}^N H_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)}, & \dot{\gamma}^{(\alpha)} > 0 \\ \dot{\tau}^{(\alpha)} \leq \dot{\tau}_{cr}^{(\alpha)} = \sum_{\beta=1}^N H_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)}, & \dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0 \end{cases} \quad (20)$$

$N$  为晶粒滑移系总数,  $H_{\alpha\beta}$  为硬化系数。与文献[3]同样的推导, 对临界滑移系有:

$$\begin{cases} P^{(\alpha)} : L^0 : D = \sum_{\beta=1}^N g_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} & \dot{\gamma}^{(\alpha)} > 0 \\ P^{(\alpha)} : L^0 : D = \sum_{\beta=1}^N g_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} & \dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0 \end{cases} \quad (21)$$

其中

$$P^{(\alpha)} = \frac{1}{2} (M^{(\alpha)} \otimes S^{(\alpha)} + M^{(\alpha)} \otimes S^{(\alpha)}) \quad (22)$$

$$g_{\alpha\beta} = H_{\alpha\beta} + P^{(\alpha)} : L^0 : P^{(\beta)} \quad (23)$$

$S^{(\alpha)}, M^{(\alpha)}$  和  $L^0$  分别为滑移系的滑移方向和滑移面法线方向及晶粒弹性模量张量。由式(21)可求出滑移剪切率  $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 。最后可导出晶粒弹塑性本构方程:

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_c &= L_c : D \\ L_c &= L^0 - \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=1}^N g_{\alpha\beta}^{-1} (P^{(\alpha)} : L^0) \otimes (P^{(\beta)} : L^0) \end{aligned} \quad (24)$$

### 3 多晶滑错体的弹塑性变形行为

#### 3.1 考虑晶界滑错时的多晶体宏观剪切模量 $(K_r = \frac{E_r \alpha}{Eh}, K_\phi = \frac{G_\phi a}{Eh})$

表1给出了五种不同金属材料在晶界法向固联 ( $K_r = 10000$ )、晶界切向固联 ( $K_\phi = 10000$ )和晶界切向自由滑错 ( $K_\phi = 0.0$ )情况下宏观剪切模量和泊松比的变化。对多晶铝来说,晶界切向自由滑错和固联时的宏观剪切模量分别为  $\bar{G}$  和  $G$ ,  $\bar{G}/G = 0.541$ ,这一结论与仲政<sup>[6]</sup>的理论结果和有限元计算结果相一致,亦与 S. Shibata<sup>[7]</sup>的结果  $\bar{G}/G = 0.51$  相近。从此表可以看出,由于晶体结构及单晶模量的差异,导致  $\bar{G}/G$  的不同,但总的趋势是随着晶界面的滑错,总体剪切模量降低,而泊松比相应增加。

表1 五种金属材料晶界可沿切向自由滑动和不滑动时的剪切模量和泊松比(材料模量单位是 GPa)

	$\eta_1$	$\eta_2$	$\eta_3$	$G$	$\bar{G}$	$\bar{G}/G$	$\nu$	$\bar{\nu}$	$\bar{\nu}/\nu$
铝	76.9	23.5	28.5	25.88	13.99	0.541	0.348	0.435	1.250
铜	137.1	23.5	75.4	35.61	18.03	0.506	0.347	0.437	1.259
铅	41.7	3.7	14.4	6.20	3.04	0.490	0.409	0.462	1.130
镍	180.4	49.6	124.7	69.48	35.78	0.515	0.295	0.417	1.414
钨	299.0	151.5	151.4	151.4	80.68	0.533	0.283	0.411	1.452

#### 3.2 FCC 多晶滑错体的弹塑性

由于三维计算将耗费大量的机时,因而本文将 FCC 多晶体简化为平面应变问题中的三个滑移系<sup>[3]</sup>。设  $\tau_0$  是单晶体的初始临界分解剪应力,则简化后三个滑移系的初始临界分解剪应力分别为  $\sqrt{3}\tau_0, 2\sqrt{3}\tau_0, 2\sqrt{3}\tau_0$ 。计算中单晶体的硬化规律取为 Taylor 各向同性硬化,即  $H_{\alpha\beta} = H$ ,晶粒弹性模量  $E = 1000\tau_0$ ,泊松比  $\nu = 1/3, H/G = 0.1$ 。晶粒之间相互作用即晶界的影响是通过第1节的夹杂模型来实现的。本文计算中夹杂内部位移展开式系数取48项,基体内部位移展开式系数共取96项。为了考察问题的收敛性,将夹杂内部位移展开式系数取为63项,基体内部位移展开式系数取120项,上述计算结果的最大相对误差不超过0.5%。

首先计算晶界层刚硬情况下多晶体的应力-应变关系。图2和图3分别表示单向拉伸

和纯剪情况下多晶体的应力-应变曲线。图中带实心圆或空心方块曲线表示界面无滑错(应用 Eshelby 解)的计算结果,带空心圆曲线为应用本文自洽模型的计算结果。从这两个图形可以看出二者基本一致。

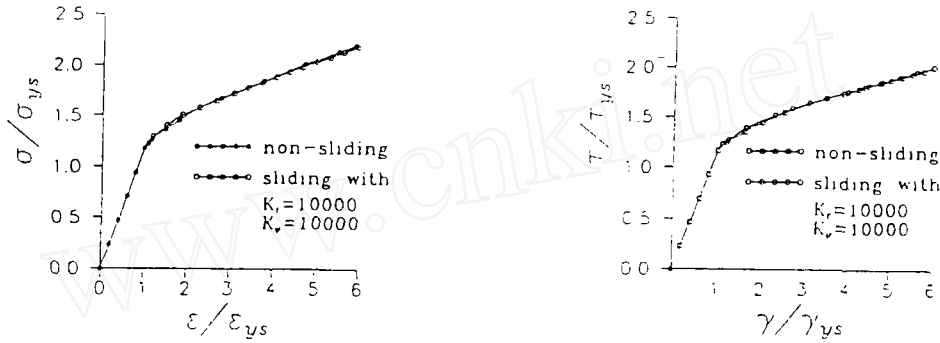


图 2 界面无滑错和晶界很硬时多晶体拉伸应力-应变曲线 图 3 界面无滑错和晶界很硬时多晶体剪应力-剪应变曲线

上面的计算均假设界面参数在变形过程中保持不变。实际上随着变形的增加,一般情况下晶界的刚度会逐渐降低,即晶界的刚度取决于变形历史。为了模拟这一机制,假设晶界层的剪应力和剪应变服从下列关系:

$$\begin{cases} \frac{\tau}{\tau_0} = \frac{\gamma}{\gamma_0} & \gamma \leq \gamma^0 \\ \frac{\tau}{\tau_0} = \left(\frac{\gamma}{\gamma_0}\right)^n & \gamma > \gamma^0 \end{cases} \quad (25)$$

采用率形式,有:

$$\begin{cases} \dot{\tau} = G_\phi^0 \dot{\gamma} & \gamma \leq \gamma^0 \\ \dot{\tau} = n \left(\frac{\gamma}{\gamma^0}\right)^{n-1} G_\phi^0 \dot{\gamma} & \gamma > \gamma^0 \end{cases} \quad (26)$$

这里,  $\tau^0, \gamma^0, G_\phi^0$  分别为界面层的初始屈服剪应力、弹性极限剪应变和初始弹性切向剪切刚度。图 4 和图 5 分别表示界面切向模量为常量和界面切向模量按(26)式变化的拉伸和剪切应力-应变图,  $K_r = 10000, \tau^0/\tau_0 = 1.05, n = 0.1$ 。从这两幅图可见晶界特性对多晶宏观应力-应变关系有较大影响。

#### 4 结论

(1) 本文给出了无限大各向异性基体中含有一无限长柱形各向异性夹杂且界面层可以滑错的级数形式的近似解。

(2) 对多种金属多晶体的计算表明,由于晶粒界面切向的滑错,总体剪切模量降低,而泊松比相应增加。

(3) 将本文夹杂模型的解与自洽方法相结合,可以考虑晶界特性对多晶体宏观弹塑性响应的影响。通过二维模型的计算可以看出,晶界滑错对多晶体总体响应有显著影响。

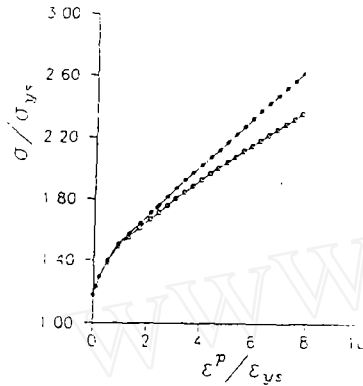


图4 多晶体在不同的界面切向模量下的拉应力-塑性应变曲线(带实心圆曲线:  $K_{\phi} = K_{\phi}^0 = \frac{G_2^0}{Eh} = 10$ , 带空心圆曲线:  $K_{\phi}$  按(26)式变化)

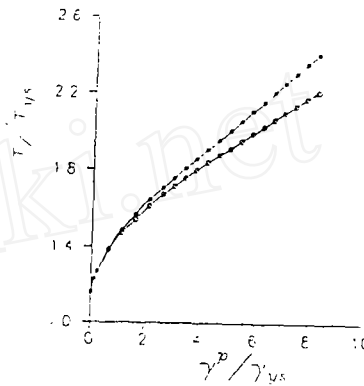


图5 多晶体在不同的界面切向模量下的剪应力-塑性应变曲线(带实心圆曲线:  $K_{\phi} = K_{\phi}^0 = \frac{G_2^0}{Eh} = 10$ , 带空心圆曲线:  $K_{\phi}$  按(26)式变化)

### 参 考 文 献

- [1] Hutchinson J. Proc Roy Soc Lond, 1970, A319:247
- [2] Lin T H, Ito Y M. J Mech Phys Solids, 1966, 4:543
- [3] McHugh P E, Asaro J R, Shih C F. Acta metall Mat, 1993, 41:1461
- [4] Harren S V, Asaro R J J, Mech Phys Solids 1989, 37(2):191
- [5] Havlicek F, Tokuda M, Hino S, Ratochvil J K. Int J Plasticity, 1992, 8:4
- [6] Zheng Z, Yang W, HWang K C. Scientia Sinica, Ser. A, 1992:496
- [7] Shibata S, Jasiuk I, Mori T, Mura T Mech mater 1990, 9:229

## SELF-CONSISTENT METHOD OF POLYCRYSTAL RESPONSE BY CONSIDERING THE SLIDING OF GRAIN BOUNDARY

Pan Wenke

(University of Science and Technology in China)

Wang Tzuchiang

(Institute of Mechanics, Chinese Academy of Science)

### Abstract

The model of plain strain inclusion firstly established, which includes three kinds of materials, namely, the anisotropic matrix, the anisotropic inclusion and the thin interface layer. Secondly, displacement fields both in the matrix and in the inclusion may be expressed in terms of polynomial se-

ries. Then, if the interface layer is very thin, by using the variational method, the solution of the inclusion problem may be obtained. Lastly, by the use of the Hill's self-consistent method taking due consideration of the above solution, the influence of the grain boundary on the elastic-plastic deformation of polycrystal may be obtained.

**Keywords:** Metal polycrystal, sliding, self-consistent method.

www.cnki.net