

均值自洽理论与多晶本构模拟*

仲政** 杨卫 黄克智

(清华大学工程力学系, 北京 100084)

摘 要

本文提出了一种多晶体本构关系的近似理论分析框架——均值自洽模式, 将仅适用于球形或椭球形固连夹杂均匀变形的 Hill 自洽模型推广到适用于任意形状夹杂(固连或滑错)的情况。立方体晶粒多晶体和界面可自由滑错球形晶粒多晶体的本构模拟结果表明了该理论的合理性与可行性。

关键词: 均值自洽理论, 多晶体, 弹塑性本构关系

一、引 言

在迄今所提出的多晶体本构模型中, Hill 自洽模型^[1]是应用得较为成功的一个。但 Hill 自洽模型基于固连椭球夹杂的 Eshelby 解^[2], 只能适用于椭球状晶粒, 这一局限性导致两点不足: 一则实际晶粒的形状千姿百态, 用球或椭球来模拟, 无法拼接成完整的连续体; 二则在变形过程中可能发生晶界滑错等非协调晶界变形行为^[3], 而 Hill 自洽模型却排斥了这种变形模式。上述缺点使 Hill 自洽模型的应用范围受到很大的限制, 因此有必要发展更具有一般性的多晶体本构理论。

本文从等效夹杂法^[4]的基本原理出发, 引入平均本征应变等微区均值量, 采用合理的数学近似, 建立了多晶体本构关系的近似理论分析框架——均值自洽模式以及相应的精度估计, 将 Hill 自洽模型推广到适用于任意形状夹杂或晶粒(固连或滑错)的情况。利用均值自洽模式对立方体晶粒多晶体的本构模拟结果比球形晶粒多晶体的 Hill 自洽模拟结果更接近实际值, 并弥补了球形晶粒不能拼接成完整连续体的缺陷, 相应的误差分析亦表明了所提出的均值自洽模式的合理性与可行性。进而将均值自洽模式应用于考虑晶界滑错的多晶体(简称为多晶滑错体)的本构关系研究, 在界面可自由滑错(但不留下间隙与重叠)的球形晶粒多晶体这一确定的增柔上限模型下, 定量地探索了晶界滑错对材料刚度降低所可能造成的最大效应, 并获得了晶界滑错量的闭式估算公式。

均值自洽理论除了可应用于晶体塑性(包括金属高温蠕变, 超导材料塑性加工及织构形成等)的本构关系研究外, 还适用于散体材料(如泥沙、谷物等), 弱界面纤维复合材料和颗粒复合材料(如固体燃料火箭发动机的药柱等)的本构关系研究。

本文 1991 年 2 月 8 日收到, 1991 年 9 月 16 日收到修改稿。

* 国家自然科学基金和霍英东教育基金共同资助项目。

** 现在同济大学工程力学系工作。

文中张量的实体用黑正体字母表示, 张量的分量用带下标的字母表示, 并且采用求和约定。张量的一些运算记号如下:

$$\sigma \cdot n = \sigma_{ij} n_j, \quad \sigma \cdot \varepsilon = \sigma_{ik} \varepsilon_{ki},$$

$$\mathbf{C}:\varepsilon = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}, \quad \sigma:\varepsilon = \sigma_{ij} \varepsilon_{ij},$$

式中 $\mathbf{C}$ 为弹性张量, σ 与 ε 各为应力与应变张量, n 为外法向向量。

二、均值自治理论

1. 均值自治模式

Hill 自治理论的基本思想, 是将如图 1(a) 所示的由足够多晶粒所组成的多晶构元 D 中的每一晶粒看作是如图 1(b) 所示的内埋于无限介质基体中的夹杂 Ω , 夹杂的弹性张量即为单晶的弹性张量 $\mathbf{C}^*$, 而基体的弹性张量则为多晶的弹性张量 $\bar{\mathbf{C}}$ 。如果在无限远处作用着均匀应变 ε^∞ 或均匀应力 σ^∞ , 则上述问题根据等效夹杂法的基本原理^[4]可进一步分解为如下两个问题:

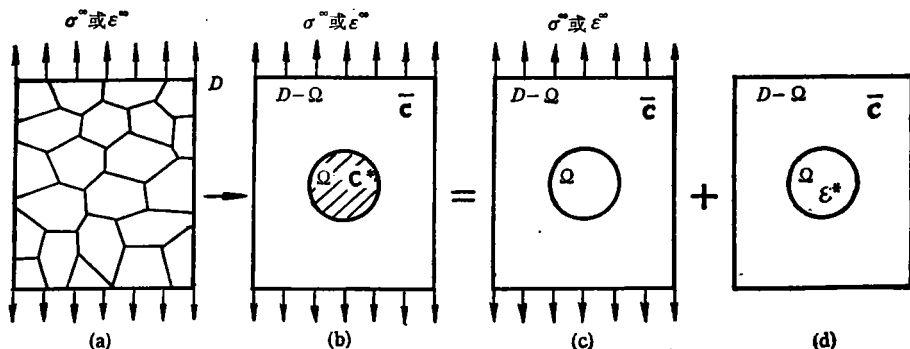


图1 自治模型和等效夹杂法的分解示意图

(1) 如图 1(c) 所示的均匀无限介质在无限远处作用着均匀应变 ε^∞ 或均匀应力 σ^∞ 的问题;

(2) 如图 1(d) 所示的含均质夹杂的无限介质, 夹杂 Ω 内作用着等效本征应变 ε^* 的问题。

等效本征应变的作用等价于基体和夹杂弹性张量不同所带来的影响。对于椭球形状夹杂, Eshelby^[2] 证明了等效本征应变 ε^* 在夹杂 Ω 内部是均匀的, 并且图 1(d) 中夹杂内部的实际应变 ε^i 与等效本征应变有如下关系:

$$\varepsilon^i = \mathbf{S}:\varepsilon^*, \quad (1)$$

这里 $\mathbf{S}$ 即为著名的 Eshelby 张量, 在 Ω 内为常值。但是在外载作用下其他形状夹杂内部的等效本征应变 ε^* 并不均匀, 亦不存在类似于(1)的关系式。因此以往的自治模型仅适用于椭球形状(包括球)夹杂的情况。

为了克服上述局限性, 我们引入任意岛状夹杂内部的平均本征应变、平均应变和平均应力等微区均值来代替椭球夹杂情况下的均匀本征应变、均匀应变和均匀应力, 即定义任意物理量 $\mathbf{A}$ 在任意形状夹杂 Ω 内的均值 $\bar{\mathbf{A}}$ 为

$$\mathbf{A} \triangleq \frac{1}{V_D} \int_D \mathbf{A} dv, \quad (2)$$

V_D 是域 D 的体积, dv 是体积微元。可以证明存在如下近似关系¹⁾:

$$\tilde{\epsilon}^i \approx \tilde{\mathbf{S}} : \epsilon^*, \quad (3)$$

$\tilde{\mathbf{S}}$ 称为类 Eshelby 张量, 以表明它与椭球夹杂 Eshelby 张量既有联系又有区别的特点, 它是由下式定义的逐点变化张量 $\mathbf{S}$ 在夹杂内部的平均值:

$$S_{ijkl}(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2} \int_D C_{mnpq} \{G_{im,nj}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') + G_{jm,ni}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')\} dv, \quad (4)$$

这里 $\mathbf{x}$ 是点的位置矢量, $G_{ij}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ 为 Navier 弹性力学方程的 Green 函数, $(\cdot)_{,i}$ 表示对坐标 x_i 的导数。对于固连的椭球夹杂情况, 有 $\mathbf{S} = \mathbf{S}_0$ 。

设图 1(b) 所示的夹杂内部总体平均应变为 $\tilde{\epsilon}$, 总体平均应力为 $\tilde{\sigma}$, 则利用近似关系(3)式和图 1 的等效夹杂法分解可以求得

$$\tilde{\epsilon} = \mathbf{A}_C : \epsilon^* \quad (5)$$

或

$$\tilde{\sigma} = \mathbf{B}_C : \sigma^*. \quad (6)$$

(5), (6) 两式分别对应无限远处作用均匀应变或均匀应力的情况。 $\mathbf{A}_C, \mathbf{B}_C$ 分别称为类应变集中系数张量和类应力集中系数张量, 它们反映了夹杂内部平均应变、平均应力与远场总体应变、总体应力的确定关系, 并且有

$$\mathbf{A}_C = \mathbf{A}_0 : \mathbf{A}_1, \quad \mathbf{B}_C = \mathbf{B}_0 : \mathbf{B}_1, \quad (7)$$

这里 $\mathbf{A}_0, \mathbf{B}_0$ 分别为图 1(c) 所示问题的应变集中系数张量和应力集中系数张量, 而 $\mathbf{A}_1, \mathbf{B}_1$ 分别是图 1(d) 所示问题的应变集中系数张量和应力集中系数张量, 且有:

$$\mathbf{A}_1 = (\mathbf{C}^* + \mathbf{L}^*)^{-1} : (\mathbf{L}^* + \bar{\mathbf{C}}), \quad \mathbf{B}_1 = (\mathbf{C}^{*-1} + \mathbf{L}^{*-1})^{-1} : (\mathbf{L}^{*-1} + \bar{\mathbf{C}}^{-1}) \quad (8)$$

而

$$\mathbf{L}^* = \bar{\mathbf{C}} : (\mathbf{S}^{-1} - \mathbf{I}). \quad (9)$$

对于夹杂界面固连的情况还有

$$\mathbf{A}_0 = \mathbf{B}_0 = \mathbf{I}, \quad (10)$$

$\mathbf{I}$ 为单位四阶张量。定义任意物理量 $\mathbf{A}$ 在构元 D 域内的平均值 $\{\mathbf{A}\}$ 为

$$\{\mathbf{A}\} = \frac{1}{V_D} \int_D \mathbf{A} dv. \quad (11)$$

V_D 为域 D 的体积。则自洽条件可以写为

$$\{\sigma\} = \sigma^*, \quad (12)$$

$$\{\epsilon\} = \epsilon^*. \quad (13)$$

与 Hill 自洽理论不同, 由于采用了近似关系式(3), 因而上述两个自洽条件不能同时满足, 只能要求满足一个。利用(12)或(13)式可以得到

$$\bar{\mathbf{C}} = \{\mathbf{C}^* : \mathbf{A}_C\} \quad (14)$$

或

$$\bar{\mathbf{M}} = \{\mathbf{C}^{*-1} : \mathbf{B}_C\}, \quad (15)$$

1) 仲 政, 多晶滑移体的细观变形过程与本构关系, 清华大学博士论文, 1990.

这里 $\bar{\mathbf{C}}$ 和 $\bar{\mathbf{M}}$ 分别为多晶的宏观弹性张量和柔度张量。上述诸方程即为本文所提出的均值自洽模式的基本方程。利用自洽方程(14)或(15)便可由单晶的本构关系求得多晶的本构关系。

2. 精度估计

下面讨论引用近似关系式(3)所带来的误差。直接舍去(3)式的误差呈下述二阶小量的表观形式:

$$\Delta \bar{\epsilon}^i = \frac{1}{V_0} \int_0 (\Delta \mathbf{S}) : (\Delta \epsilon^*) dv, \quad (16)$$

$$\text{式中} \quad \Delta \mathbf{S} = \mathbf{S}(x) - \tilde{\mathbf{S}}, \quad \Delta \epsilon^* = \epsilon^*(x) - \tilde{\epsilon}^*, \quad (17)$$

分别代表 $\mathbf{S}(x)$ 和 $\epsilon^*(x)$ 围绕其均值 $\tilde{\mathbf{S}}$ 和 $\tilde{\epsilon}^*$ 的波动。但是用(16)式来进行误差估计实际很不方便,因此本文引入另一种自洽误差来作为精度估计的判据。如前所述,由于采用了近似关系式(3)导致了自洽条件(12)和(13)之一不能满足,因此可以利用这一个不能满足的自洽条件作为误差判据,定义自洽误差为

$$\delta_s = \| \{ \mathbf{A}_c \} - \mathbf{I} \| \quad (18)$$

$$\text{或} \quad \delta_\sigma = \| \{ \mathbf{B}_c \} - \mathbf{I} \|, \quad (19)$$

式中 $\| \cdot \|$ 表示某种可使四阶张量绝对收敛的范数,(18)和(19)式分别对应自洽条件(13)和(12)式。用(18)或(19)式来进行误差分析更方便也更能反映采用近似关系式(3)给预计多晶宏观变形行为所带来的误差。本文提出的均值自洽模式来源于 Hill 自洽模型并进行了推广,它的实质在于以数学上的合理近似来达到物理模拟的逼真。

三、立方体晶粒多晶的本构模拟

本节利用均值自洽模式来计算立方体晶粒所组成的多晶的宏观弹性常数。立方体有角点和棱边,可拼接成完整连续体。

考虑如图2所示的边长为 $2a$ 的立方体晶粒,设单晶的弹性张量 $\mathbf{C}^*$ 具有立方对称性,可简记为下述三参量形式^[4]:

$$\mathbf{C}^* = (3\eta_1, 2\eta_2, 2\eta_3), \quad (20)$$

式中 η_1, η_2, η_3 为单晶的三个弹性常数。如果晶粒取向随机分布,则多晶宏观上呈弹性各向同性,弹性张量 $\bar{\mathbf{C}}$ 可记为

$$\bar{\mathbf{C}} = \left(\frac{2\bar{G}(1+\bar{\nu})}{1-2\bar{\nu}}, 2\bar{G} \right), \quad (21)$$

这里 $\bar{G}, \bar{\nu}$ 分别为多晶的宏观剪切模量和 Poisson 比。

利用各向同性弹性无限介质中含立方体夹杂的均匀本征应变问题的解^[4],可以求得立方体夹杂的类 Eshelby 张量为^[1]

$$\tilde{\mathbf{S}} = (\alpha, \beta, \gamma), \quad (22)$$

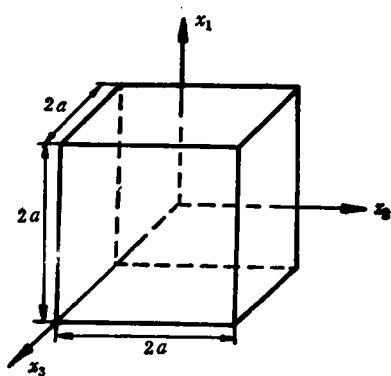


图2 立方体晶粒

1) 见 498 页脚注。

表 1 5 种立方晶系材料立方晶粒和球形晶粒弹性常数计算结果与实际值的比较

材料	η_1	η_2	η_3	立方体晶粒		球形晶粒		实际值		$\delta_s = A_\beta - 1 $ (%)	$\Delta = \frac{\bar{G}_方 - \bar{G}_球}{\bar{G}_球}$ (%)
	$N/m^2 \times 10^{10}$			$\bar{G}_方$ ($N/m^2 \times 10^{10}$)	$\bar{\nu}_方$	$\bar{G}_球$ ($N/m^2 \times 10^{10}$)	$\bar{\nu}_球$	$\bar{G}_实$ ($N/m^2 \times 10^{10}$)	$\bar{\nu}_实$		
铝	7.69	2.35	2.85	2.62	0.347	2.64	0.346	2.4—2.6	0.355	0.7	0.8
铜	13.71	2.35	7.54	4.62	0.348	4.82	0.342	4.6	0.37	4.2	4.1
铅	4.17	0.37	1.44	0.82	0.407	0.87	0.403	0.54	0.43	5.0	5.7
镍	18.04	4.96	12.47	8.42	0.298	8.69	0.292	8.0	0.336	3.2	3.1
钨	29.90	15.15	15.15	15.14	0.283	15.14	0.283	13.4	0.35	0.0	0.0

而

$$\begin{cases} \alpha = \frac{1}{3} \left(\frac{1+\bar{\nu}}{1-\bar{\nu}} \right), \beta = \frac{1}{3} \left(\frac{1-2\bar{\nu}}{1-\bar{\nu}} \right) + \frac{3}{\pi(1-\bar{\nu})} I, \\ \gamma = \frac{2}{3} - \frac{2}{\pi(1-\bar{\nu})} I, \end{cases} \quad (23)$$

式中

$$I = \frac{1+\sqrt{3}}{2} - \sqrt{2} + \ln \frac{\sqrt{3}-1}{2-\sqrt{2}} \approx 0.1747. \quad (24)$$

将(20)–(22)式代入(7)式可求类应变集中系数张量,进而将自洽方程(14)的体积平均化为对所有取向的平均可得:

$$\begin{cases} \frac{2\bar{G}(1+\bar{\nu})}{3(1-2\bar{\nu})} = \eta_1, \\ \frac{2\eta_2}{\bar{G}(1-\beta) + \beta\eta_2} + \frac{3\eta_3}{\bar{G}(1-\gamma) + \gamma\eta_3} = 5. \end{cases} \quad (25)$$

解上述联立方程组即可由单晶的弹性常数 η_1, η_2, η_3 求得多晶的宏观弹性常数 $\bar{G}, \bar{\nu}$.

将体积平均化为对所有取向的平均后有:

$$\{A_c\} = (1, A_\beta), \quad (26)$$

式中

$$A_\beta = \frac{\bar{G}}{5} \left(\frac{2}{\bar{G}(1-\beta) + \beta\eta_2} + \frac{3}{\bar{G}(1-\gamma) + \gamma\eta_3} \right). \quad (27)$$

因此对于立方体晶粒,自洽误差 δ_s 可定义为

$$\delta_s = |A_\beta - 1|. \quad (28)$$

表 1 给出了用立方体晶粒模型算得的 5 种立方晶系多晶的剪切模量 $\bar{G}_方$ 、Poisson 比 $\bar{\nu}_方$ 以及用球形晶粒 Hill 自洽模型求得的剪切模量 $\bar{G}_球$ 、Poisson 比 $\bar{\nu}_球$,同时还给出了取自文献 [7] 的实测剪切模量和 Poisson 比以便比较。表中还列出了自洽误差 δ_s 以及反映立方体与球形状影响的偏差 Δ 。从表 1 的结果可以得出如下结论: (1) 5 种金属均有 $\delta_s \leq 5\%$, 说明均值自洽模式在数学处理上的近似是合理的; (2) 立方体晶粒的结果比球形晶粒的结果更接近实际值; (3) 5 种金属均有 $\Delta \leq 5.7\%$, 说明在接近各向同性的情况下, 仅就刚度估计而言, 立方体晶粒与球形晶粒的结果相差不很大。考虑到球形晶粒和立方体晶粒分别为实际等轴晶粒形状的两种极端情况, 所以在无更好替代方案时, 用球形晶粒模型仍是可行的。

四、多晶滑错体的本构模拟

下面利用均值自洽模式来研究晶界可发生无间隙滑错的多晶体即多晶滑错体的本构关系。为简单起见, 仅以界面剪应力为零的自由滑错体为例, 这种情况适用于晶界强度远低于晶内强度的多晶体(如高温蠕变情况)或者颗粒滑错体(如散体材料, 谷物, 粉末冶金材料等), 对于更一般情况则可提供一种计及晶界滑错影响的上限模型。这里假定晶粒为球形。

1. 多晶滑错体的宏观弹性模量

设单晶的弹性张量 $\mathbf{C}^*$ 具有立方对称性, 晶粒取向随机分布, 则多晶滑错体宏观弹性张量 $\bar{\mathbf{C}}$ 为各向同性张量, $\mathbf{C}^*$ 和 $\bar{\mathbf{C}}$ 的表达式见(20), (21)式。

利用各向同性弹性无限介质中含界面可自由滑错球形夹杂的均匀本征应变问题的解^[8,9], 可求得界面自由滑错球形夹杂的类 Eshelby 张量为¹⁾

$$\tilde{\mathbf{S}} = (\alpha, \beta), \quad (29)$$

$$\text{而} \quad \alpha = \frac{1+\bar{\nu}}{3(1-\bar{\nu})}, \quad \beta = \frac{16(7+5\bar{\nu})(4-5\bar{\nu})}{75(21+\bar{\nu})(1-\bar{\nu})}. \quad (30)$$

由于夹杂界面发生了滑错, 因此图 1(c)所示问题的应变集中系数 $\mathbf{A}_0$ 和应力集中系数 $\mathbf{B}_0$ 不再为单位张量, 可以求得*

$$\mathbf{A}_0 = (1, \beta) = \left(1, \frac{8(7+5\bar{\nu})}{5(21+\bar{\nu})}\right), \quad (31)$$

$$\mathbf{B}_0 = \left(1, \frac{161-65\bar{\nu}}{5(21+\bar{\nu})}\right). \quad (32)$$

将(20), (21), (31)式和(8)式第一式代入(7)式第一式, 可求得总体应变集中系数张量 $\mathbf{A}_c$, 进而代入自洽方程(14)式可得如下求解宏观弹性常数 $\bar{G}, \bar{\nu}$ 的方程组:

$$\begin{cases} \frac{2\bar{G}(1+\bar{\nu})}{3(1-2\bar{\nu})} = \eta_1, \\ \frac{2\eta_2}{\bar{G}(1-\beta) + \beta\eta_2} + \frac{3\eta_3}{\bar{G}(1-\beta) + \beta\eta_3} = \frac{5}{\bar{\beta}}. \end{cases} \quad (33)$$

表 2 是根据上述方程组求得的 5 种多晶金属在晶界自由滑错情况下的宏观剪切模量 $\bar{G}$ 和 Poisson 比 $\bar{\nu}$, 表中还同时给出了由晶界不滑错的球形晶粒自洽模型算出的宏观剪切模量 G 和 Poisson ν 以便比较。从表中可知这五种材料由于晶界自由滑错而导致宏观剪切模量降低约 $\frac{1}{2}$ 。而 Poisson 比有较大提高, 这是由于体积模量不变, 而剪切模量降低, 相对增大了不可压缩的倾向, 导致 Poisson 比增高。

2. 多晶滑错体的大变形塑性本构分析

对于大变形塑性本构分析, 需采用增量形式本构方程。设单晶和多晶的本构关系分别为

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{C}_i^* : \mathbf{D}, \quad \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \bar{\mathbf{C}}_i : \bar{\mathbf{D}}, \quad (34)$$

这里 $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$, $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 分别为单晶和多晶的平均 Kirchhoff 应力, $\mathbf{D}$ 和 $\bar{\mathbf{D}}$ 分别为单晶和多晶的平均变形率, $\mathbf{C}_i^*$ 和 $\bar{\mathbf{C}}_i$ 分别为单晶和多晶的切线刚度张量, 而客观应力率 $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 和 $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 的表达式分

1) 见 498 页脚注。

表 2 5 种多晶体晶界滑错与不滑错时的宏观弹性常数比较*

材 料	η_1	η_2	η_3	$\bar{G}$	G	$\bar{G}/G$	$\bar{\nu}$	ν	$\bar{\nu}/\nu$
铝	7.69	2.35	2.85	1.43	2.64	0.54	0.41	0.35	1.19
铜	13.71	2.35	7.54	2.62	4.82	0.54	0.41	0.34	1.20
镍	18.04	4.96	12.47	4.58	8.69	0.53	0.38	0.29	1.31
铅	4.17	0.37	1.44	0.49	0.87	0.56	0.44	0.40	1.10
钨	29.90	15.15	15.14	7.90	15.14	0.52	0.38	0.28	1.34

* $\eta_1, \eta_2, \eta_3, \bar{G}, G$ 的单位均为 $\text{N}/\text{m}^2 \times 10^{10}$.

别为

$$\dot{\bar{\epsilon}} = \dot{\epsilon} - \omega \cdot \bar{\epsilon} + \bar{\epsilon} \cdot \omega, \quad \dot{\bar{\epsilon}} = \dot{\epsilon} - Q \cdot \bar{\epsilon} + \bar{\epsilon} \cdot Q, \quad (35)$$

式中(·)表示物质导数,而 ω 为单晶的某种平均旋率如晶格(或其他内禀结构)的平均旋率, Q 是由各个单晶的 ω 产生的宏观旋率,将由(37)式给出.

假定在无限远处作用着均匀变形率 D^∞ ,则采用与第二节完全类似的推导,只需要用变形率、客观应力率和切线刚度代替第二节中的应变、应力和弹性模量,并且要求 $\dot{\bar{\epsilon}} = \{\dot{\bar{\epsilon}}\}$,便可得到自治方程

$$\bar{C}_t = \{C_t^*: A_C\} \quad (36)$$

以及 ω 和 Q 之间的关系式

$$Q \cdot \bar{\epsilon} = \{\omega \cdot \bar{\epsilon}\}. \quad (37)$$

(36)和(37)式给出了弹塑性大变形多晶本构模拟的基本公式,由此可算出任意各向异性的多晶体宏观切线刚度张量.作为一个示范性特例,考虑由晶界可自由滑错的各向同性球形晶粒组成的多晶体,设 K_i 和 G_i 为单晶的切线体积模量和切线剪切模量, $\bar{K}_i$ 和 $\bar{G}_i$ 为多晶的宏观切线体积模量和宏观切线剪切模量,此时自治方程(36)化为

$$\begin{cases} \bar{K}_i = K_i, \\ \frac{G_i}{\bar{G}_i(1-\beta) + \beta G_i} = \frac{1}{\bar{\beta}}, \end{cases} \quad (38)$$

$\beta, \bar{\beta}$ 表达式仍同(30)和(31)式,仅需将 $\bar{\nu}$ 改为 $\bar{\nu}_i$.

在比例加载下,率形式本构方程可积分为全量型本构方程,这时由(36)式可得

$$\bar{C}_s = \{C_s^*: A_C\}, \quad (39)$$

式中 C_s^* 和 $\bar{C}_s$ 分别为单晶和多晶的割线刚度张量,这时还可证明

$$\bar{\omega} = \bar{Q} = 0. \quad (40)$$

对体积不可压缩的各向同性特例,可得到

$$\frac{\bar{G}_s}{G_s} \approx 0.59, \quad (41)$$

式中 G_s 和 $\bar{G}_s$ 分别为单晶和多晶的割线剪切模量.

3. 部分晶粒滑错的多晶本构分析

由于晶粒取向差别,在真实多晶体中可能只有一部分晶粒发生了晶界滑错,设滑错晶粒体积百分数为 f ,将滑错晶粒和不滑错晶粒分别视为不同相,仍采用自由滑错假设,则可得到自治方程

$$\begin{cases} \frac{\bar{G}_t(1+\bar{\nu}_t)}{1-2\bar{\nu}_t} = \frac{G_t(1+\nu_t)}{1-2\nu_t}, \\ \frac{fG_t\bar{\beta}}{\bar{G}_t(1-\beta) + \beta G_t} + \frac{(1-f)G_t}{\bar{G}_t(1-\beta^E) + \beta^E G_t} = 1, \end{cases} \quad (42)$$

这里

$$\beta^E = \frac{2(4-5\bar{\nu}_t)}{15(1-\bar{\nu}_t)}, \quad \beta = \frac{16(7+5\bar{\nu}_t)(4-5\bar{\nu}_t)}{75(21+\bar{\nu}_t)(1-\bar{\nu}_t)}, \quad \bar{\beta} = \frac{8(7+5\bar{\nu}_t)}{5(21+\bar{\nu}_t)}, \quad (43)$$

而 $\bar{\nu}_t$ 为对应于切线模量的 Poisson 比。

在线弹性情况下, 切线模量即为弹性模量, 这时上述式中的下标 t 可略去。图 3 给出了纯铝 ($G = 2.5 \times 10^{10} \text{N/m}^2$, $\nu = 0.335$) 单晶和多晶的剪切模量之比 $\bar{G}/G$ 和 Poisson 比之比 $\bar{\nu}/\nu$ 与 f 的关系曲线。从图中可看出随着滑错晶粒百分数的增加, 多晶剪切模量逐渐降低, 而 Poisson 比则逐渐上升, 由不滑错情况逐步过渡到全部自由滑错情况。图 3 中另一条逐渐降低的虚线则为线性强化情况下体积不可压缩材料单晶和多晶的切线剪切模量之比 $\bar{G}_t/G_t$ 的曲线。

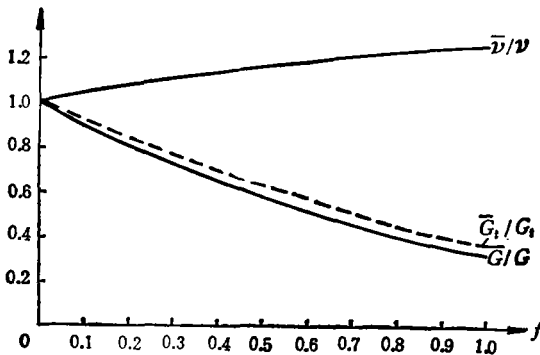


图 3 单晶和多晶模量之比随 f 的变化曲线

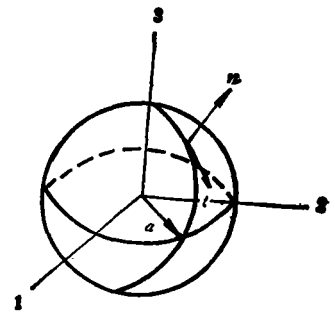


图 4 球形晶粒

4. 晶界滑错量的上界估算

下面在比例加载条件下对图 4 所示的球形晶粒的晶界滑错量进行估算。引入 Somigliana 位错场来模拟晶界滑错变形。可以求得沿滑错面切向 t 的相对滑错量为

$$[u_t] = -\frac{7(7-5\bar{\nu}_t)}{3(21+\bar{\nu}_t)} at \cdot (\mathbf{H}:\boldsymbol{\epsilon}^\infty) \cdot \mathbf{n}, \quad (44)$$

式中 a 为晶粒半径, $\bar{\nu}_t$ 为多晶的割线 Poisson 比, $\boldsymbol{\epsilon}^\infty$ 为远场应变, $\mathbf{n}$ 为单位法向向量, 而各向同性四阶张量 $\mathbf{H}$ 可记为

$$\mathbf{H} = \left(\frac{4-2\bar{\nu}_s}{1+\bar{\nu}_s} - \frac{\bar{K}_s}{K_s}, \frac{7-5\bar{\nu}_s}{8-10\bar{\nu}_s} + \frac{\bar{G}_s}{G_s} \right), \quad (45)$$

这里 $\bar{K}_s, \bar{G}_s$ 分别为多晶的割线体积模量和剪切模量, 而 K_s 和 G_s 分别为单晶的割线体积模量与剪切模量。(44)式表明晶界滑错量与晶粒半径 a 和远场应变 $\boldsymbol{\epsilon}^\infty$ 成正比。上述晶界滑错量是在球形晶粒自由滑错假设下求得的, 是实际滑错量的上界。

五、结 论

1. 本文所建立的均值自治模式能有效计及由于晶粒形状非椭球和晶界滑错而导致的不均

匀变形对多晶本构的影响。

2. 立方体晶粒的均值自洽本构模拟结果比球形晶粒的 Hill 自洽模型结果更接近实际值。
3. 晶界滑错造成多晶剪切刚度降低与 Poisson 比升高。

参 考 文 献

- [1] Hill, R., *J. Mech. Phys. Solids*, **13**(1965), 89; 213.
- [2] Eshelby, J. D., *Proc. Roy. Soc. London*, **A241**(1957), 376.
- [3] Zhong, Z. (仲政), Yang, W. (杨卫), Hwang, K-C. (黄克智), *Acta Mechanica Sinica*, **7**(1991), 4.
- [4] Mura, T., *Micromechanics of Defects in Solids*, Revised Edition, Martinus Nijhoff Publishers, 1987.
- [5] Hutchinson, J. W., *Proc. Roy. Soc. London*, **A319**(1970), 247.
- [6] Chiu, Y. P., *J. Appl. Mech.*, **44**(1977), 587.
- [7] 飯田修一等编, 物理学常用数表(张质贤等译), 科学出版社, 1979.
- [8] Mura, T. & Furuhashi, R., *J. Appl. Mech.*, **51**(1984), 308.
- [9] Huang, J. H. et al., *IUTAM Symposium on Constitutive Relations for Finite Deformation of Polycrystalline Metals*, Beijing, 1991.