

文章编号:1000-0887(2004)01-0035-07

# 各向异性双晶和三晶体晶界 附近应力场分析

万建松, 岳珠峰

(西北工业大学 工程力学系,西安 710072)

(本刊编委岳珠峰来稿)

**摘要:** 采用率相关晶体滑移有限元程序对不同取向晶粒构成的双晶体和三晶体在晶界和三晶交点附近的应力集中特性进行了计算分析。双晶体的数值结果表明,不同取向晶粒的晶界附近应力场具有较大的应力梯度,存在应力集中现象;三晶体由于晶界之间的相互作用使得三晶交点可能造成应力集中地,也可能不造成应力集中,晶界附近的应力结构与双晶体晶界附近的应力结构亦不相同,这主要取决于三个晶粒的晶体取向。对双晶体和三晶体的分析说明,不同取向的晶粒具有不同的变形规律。因此研究金属材料的损伤、断裂问题至少需要采用晶体滑移理论从细观的角度分析不同晶粒之间的相互作用。

**关键词:** 双晶; 三晶; 应力场; 晶体滑移有限元; 滑移系

**中图分类号:** TG111.91 **文献标识码:** A

## 引 言

多晶体由单晶体构成,但是多晶体的应力应变响应并不是单晶体的简单平均和叠加,因为当多晶体发生形变时,组成多晶体的单晶体各自发生复杂的非均匀变形,特别是晶界的存在会造成应力应变局部化的问题。因此晶粒与晶界是多晶材料变形、损伤、断裂的两个基本方面。过去对多晶体特性研究大都采用宏观方法,例如基于晶体塑性理论的自洽方法,这些方法在一定程度上揭示了多晶材料的变形、损伤、断裂特征。然而,随着研究的深入,需要进一步揭示晶粒、晶界的特征以及它们的相互作用规律。总的来说,目前对晶界效应的研究大体有两种方法,一是从实验的角度来研究晶界的作用,另一类是试图发展理论模型来模拟晶界的效应。过去对双晶体的弹性应力分析表明,晶界的存在,显著地改变了宏观的均匀应力场,在晶界附近造成了应力集中<sup>[1]</sup>;Tvergaard 等从理论上分析了三晶交点附近的弹性应力场<sup>[2]</sup>,并应用到陶瓷分析中,用渐近线法和数值方法得到了三晶交点附近的应力水平有可能急剧增加,指出了三晶交点的应力不但依赖于材料的各向异性,而且依赖于相互间的晶体取向,他们同时又指出,虽然应力集中通常是由于相邻晶粒取向不同而产生的,但这并不确保三晶交点一定有应力集中。Weiss 等用该理论对多晶体冰块中的三晶交点进行了分析<sup>[3]</sup>,得到了较为满意的结果。目

• 收稿日期: 2001-10-16; 修订日期: 2003-08-07

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(50005016);航空基金资助项目

作者简介: 万建松(1975—),男,福建建宁人,博士(E-mail: jswan@mail.nwpu.edu.cn);

岳珠峰(联系人),Tel/Fax: 86-29-8495540; E-mail: zfyue@nwpu.edu.cn

前分析晶界特性的理论模型大多为弹性模型,迄今尚未见用晶体塑性理论来分析晶界和三晶交点处的应力和滑移系开动情况. 本文采用率相关晶体滑移本构模型,并把该模型编制成 ABAQUS<sup>[4]</sup>中的材料用户子程序(UMAT)对双晶体和三晶体的晶界特性进行了分析.

## 1 晶体滑移有限元模型

### 1.1 晶体滑移本构模型

在晶轴坐标系下,弹性的应力应变关系可以表示为

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C}\boldsymbol{\varepsilon}, \quad (1)$$

式中

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} &= \{\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, \sigma_{12}, \sigma_{13}, \sigma_{23}\}, \\ \boldsymbol{\varepsilon} &= \{\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \varepsilon_{33}, \varepsilon_{12}, \varepsilon_{13}, \varepsilon_{23}\}, \\ \mathbf{C} &= \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

如果计算坐标系( $xyz$ )不是晶轴系,二者的转换关系为

$$\mathbf{C}^{xyz} = \mathbf{A}\mathbf{C}\mathbf{A}^T, \quad (2)$$

式中  $\mathbf{A}$  为转换矩阵

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} l_1^2 & m_1^2 & n_1^2 & 2l_1m_1 & 2l_1n_1 & 2m_1n_1 \\ l_2^2 & m_2^2 & n_2^2 & 2l_2m_2 & 2l_2n_2 & 2m_2n_2 \\ l_3^2 & m_3^2 & n_3^2 & 2l_3m_3 & 2l_3n_3 & 2m_3n_3 \\ l_1l_2 & m_1m_2 & n_1n_2 & l_1m_2 + l_2m_1 & l_1n_2 + l_2n_1 & m_1n_2 + m_2n_1 \\ l_1l_3 & m_1m_3 & n_1n_3 & l_1m_3 + l_3m_1 & l_1n_3 + l_3n_1 & m_1n_3 + m_3n_1 \\ l_2l_3 & m_2m_3 & n_2n_3 & l_2m_3 + l_3m_2 & l_2n_3 + l_3n_2 & m_2n_3 + m_3n_2 \end{bmatrix},$$

$l, m, n$  为计算坐标与晶轴坐标夹角的方向余弦.

晶体学本构模型的详细描述可见文献[5,6]. 为文章的完整性,下面简要介绍其主要方面.

本文采用率相关晶体滑移模型,分切应力  $\tau^{(a)}$  定义为

$$\tau^{(a)} = P^{(a)}\boldsymbol{\tau}, \quad (3)$$

剪切应变速率  $\dot{\gamma}^{(a)}$  采用如下形式的幂函数

$$\dot{\gamma}^{(a)} = \dot{\gamma}_0^{(a)} \left[ \frac{\tau^{(a)}}{g^{(a)}} \right] \left( \left| \frac{\tau^{(a)}}{g^{(a)}} \right| \right)^{1/m-1}, \quad (4)$$

式中  $g^{(a)}$  称为参考剪切应力,  $\dot{\gamma}_0^{(a)}$  称为参考剪切应变速率.  $m$  为应变速率敏感指数,当  $m \rightarrow 0$ , 为应变速率无关的情况.  $g^{(a)}$  表征了晶体当前应变硬化状态,  $g^{(a)}$  的演化可由下式确定

$$\dot{g}^{(a)} = \sum_{\beta=1}^N h_{a\beta} |\dot{\gamma}^{(\beta)}|, \quad (5)$$

$h_{a\beta}$  称为硬化系数,它决定了滑移系  $\beta$  中的滑移剪切应变对滑移系  $\alpha$  所造成的硬化,  $h_{a\beta}$  为  $\gamma$  的

函数,  $\gamma = \sum_{\beta=1}^N |\gamma^{(\beta)}|$  为累积滑移应变.

在 ABAQUS 用材料用户子程序 UMAT 中数值计算的关键是如何获得(4)式,时间步长  $\Delta t$  中的剪切应变增量为  $\Delta\gamma^{(\alpha)}$  可表示为

$$\Delta\gamma^{(\alpha)} = \gamma^{(\alpha)}(t + \Delta t) - \gamma^{(\alpha)}(t). \quad (6)$$

根据 Peirce 提出的切线系数法<sup>[6]</sup>,  $\Delta\gamma^{(\alpha)}$  可由下式计算

$$\Delta\gamma^{(\alpha)} = [(1 - \theta)\dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) + \theta\dot{\gamma}^{(\alpha)}(t + \Delta t)]\Delta t. \quad (7)$$

其中  $0 \leq \theta \leq 1$ , 不同的  $\theta$  对应不同的欧拉方法. 用式(4)的泰勒展开式来近似表示上式中的最后一项,则有

$$\begin{aligned} \dot{\gamma}^{(\alpha)}(t + \Delta t) &= \dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \tau^{(\alpha)}}\right)_t \Delta\tau^{(\alpha)} + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \mathbf{g}^{(\alpha)}}\right)_t \Delta\mathbf{g}^{(\alpha)} = \\ &= \text{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \left(\frac{\tau^{(\alpha)}}{\mathbf{g}^{(\alpha)}}\right)^{1/m} \left[1 + \frac{1}{m} \left(\frac{\Delta\tau^{(\alpha)}}{\tau^{(\alpha)}} - \frac{\Delta\mathbf{g}^{(\alpha)}}{\mathbf{g}^{(\alpha)}}\right)\right], \end{aligned} \quad (8)$$

式中,  $\text{sgn}(\cdot)$  表示  $(\cdot)$  的符号,  $\Delta\tau = \dot{\tau}\Delta t$ ,  $\Delta\mathbf{g}^{(\alpha)} = \dot{\mathbf{g}}^{(\alpha)}\Delta t$ , 进一步可把(7)写成如下形式

$$\begin{aligned} \Delta\gamma^{(\alpha)} &= \dot{\gamma}_t^{(\alpha)}\Delta t + \frac{\theta\Delta t^2\dot{\gamma}_t^{(\alpha)}}{m\tau^{(\alpha)}}[\mathbf{R}^{(\alpha)}:\mathbf{D}] - \\ &= \frac{\theta\Delta t^2\dot{\gamma}_t^{(\alpha)}}{m\tau^{(\alpha)}} \sum_{\beta} \mathbf{R}^{(\alpha)}:\mathbf{P}^{(\beta)}\dot{\gamma}^{(\beta)} - \frac{\theta\Delta t^2\dot{\gamma}_t^{(\alpha)}}{m\mathbf{g}^{(\alpha)}} \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} \text{sgn}(\dot{\gamma}^{(\beta)})\dot{\gamma}^{(\beta)}. \end{aligned} \quad (9)$$

上式可简记为

$$\sum_{\beta} N_{\alpha\beta}\Delta\gamma^{(\beta)} = (\dot{\gamma}_t^{(\alpha)} + \mathbf{Q}^{(\alpha)}:\mathbf{D})\Delta t, \quad (10)$$

式中

$$\dot{\gamma}_t^{(\alpha)} = \dot{\gamma}^{(\alpha)} \text{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \left(\left|\frac{\tau^{(\alpha)}}{\mathbf{g}^{(\alpha)}}\right|\right)^{1/m}, \quad (11)$$

$$\mathbf{Q}^{(\alpha)} = \frac{\theta\Delta t\dot{\gamma}_t^{(\alpha)}}{m\tau^{(\alpha)}} \mathbf{R}^{(\alpha)}, \quad (12)$$

$$N_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} + \frac{\theta\Delta t\dot{\gamma}_t^{(\alpha)}}{m} \left[\frac{\mathbf{R}^{(\alpha)}:\mathbf{P}^{(\beta)}}{\tau^{(\alpha)}} + \text{sgn}(\tau^{(\beta)}) \frac{h_{\alpha\beta}}{\mathbf{g}^{(\alpha)}}\right]. \quad (13)$$

对于固定  $\theta$  和应变速率敏感指数  $m$ , 当时间增量  $\Delta t$  足够小,  $N_{\alpha\beta}$  的逆矩阵存在.

## 1.2 用户子程序 (UMAT) 的实现

如果 ABAQUS 中的材料模型和算法不能满足用户的需要, 它提供了一个强有力的材料用户子程序 UMAT, 以帮助用户把自己的材料模型和算法结合进 ABAQUS. ABAQUS 是采用 Newton-Raphson 方法求解非线性有限元平衡方程<sup>[4,7]</sup>

$$\sum (\int \mathbf{B}^T \mathbf{J} \mathbf{B} dV) \mathbf{C}^k = \mathbf{P}(t + \Delta t) - \sum \int \mathbf{B}^T [\boldsymbol{\sigma}(t) + \Delta\boldsymbol{\sigma}(\Delta\mathbf{u}^k)] dV, \quad (14)$$

$$\Delta\mathbf{u}^{k+1} = \Delta\mathbf{u}^k + \mathbf{C}^k, \quad (15)$$

式中,  $\mathbf{B}$  是位移增量与应变增量转换矩阵,  $\Delta\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{B}\Delta\mathbf{u}$ . 应力增量是应变增量的函数, 因此也是位移增量的函数. 方程(14)给出了第  $k$  次迭代对位移的修正. 当用 Newton-Raphson 迭代方法求解有限元平衡方程时, 需要给出方程(14)的 Jacobin 矩阵  $\mathbf{J} = (\partial\Delta\boldsymbol{\sigma}/\partial\Delta\boldsymbol{\varepsilon})_{t+\Delta t}$ , 也就是在用户子程序中需要更新的 DDSDD 矩阵. 如果 Jacobin 矩阵不容易写成显式的表达式, 可以采用弹性刚度代替, 即“常刚度”法. 求解过程中, ABAQUS 程序传入  $t$  时刻的应变以及应变增量, 用户子程序求解应力增量并更新应力, 即得到  $t + \Delta t$  时刻的应力值. 如果 Jacobin 矩阵可以写成显式的表达式, 需要更新的 DDSDD 矩阵, 这样可以加快收敛的速度. 如果  $t + \Delta t$  时刻值的求解需要用到  $t$  时刻的值, 这时需要定义保存过程变量的数组 STATEV (NSTATV), 定义了

这个数组后,一定要更新 STATEV 的值.

### 1.3 率相关晶体滑移有限元模型参数

假定晶体材料八面体滑移系族启动,共有 12 个滑移系,滑移系族可写成  $\{111\} \langle 110 \rangle$ ,并假定所有滑移系服从相同的硬化规律.

有限元计算采用的几何模型如图 1 所示. 计算时都采用三维实体单元. 全部计算采用 20 节点等参元,  $3 \times 3 \times 3$  阶积分. 部分材料参数见表 1,晶粒局部坐标和整体坐标的相互取向关系用欧拉角表示<sup>[8]</sup>,晶粒欧拉角见表 2. 边界条件由下述描述

$$u_{iz} = 0, z = 0; u_{ix} = 0, x = 0; u_{iy} = 0, y = 0; u_{iz} = U, z = L.$$

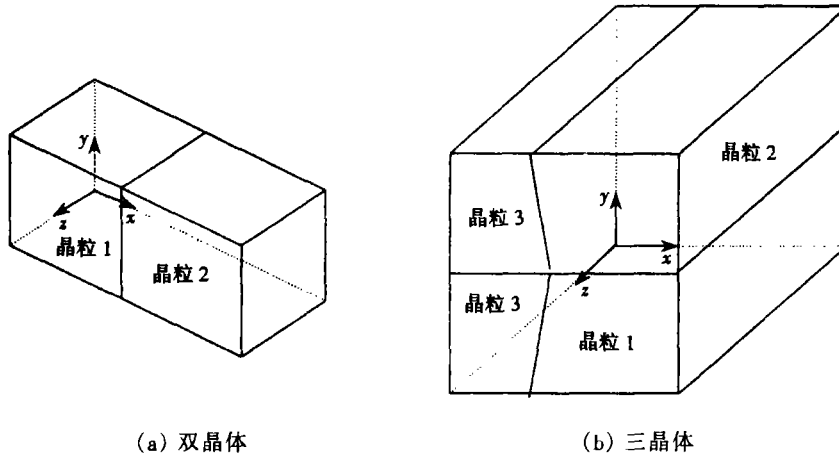


图 1 几何模型

表 1

材料参数值

$E/(\text{MPa})$	$\nu$	$G/(\text{MPa})$
62 780	0.33	26 300

表 2

晶体欧拉角<sup>[8]</sup>

	晶粒 1	晶粒 2	晶粒 3
双晶体 1	0.0, 0.0, 0.0	93.72, 105.93, 170.27	
双晶体 2	0.0, 0.0, 0.0	60.31, 110.91, -157.16	
双晶体 3	0.0, 0.0, 0.0	92.86, 88.15, -179.08	
三晶体 1	0.0, 0.0, 0.0	93.72, 105.93, 170.27	67.23, 76.53, -93.59
三晶体 2	93.72, 105.93, 170.27	67.23, 76.53, -93.59	60.31, 110.91, -157.16

## 2 结果与讨论

### 2.1 双晶体

图 2 给出了双晶体 1 的 Mises 应力等值线,图 3 给出了双晶体 2 的 Mises 应力等值线,图 2、3 说明晶界的存在改变了晶粒内部单一应力场的分布,晶界处存在应力集中现象. 图 4 给出了双晶体 3 的 Mises 应力等值线. 由于双晶体 3 中两晶粒取向的性质大体相当,故晶界的影响不是很显著,晶界附近的应力场分布基本上是对称的,应力场分布也接近均匀分布. 因此,晶界处是否存在应力集中同晶粒的取向有极大的关系,并不是在所有取向晶粒构成的晶界处都存在应力集中. 但一般来说,只要组成双晶体的两个晶粒存在取向性质的偏差,根据位移协调性

的要求,都将会造成晶界附近应力集中现象和大的应力、应变梯度,进而造成变形的局部化。

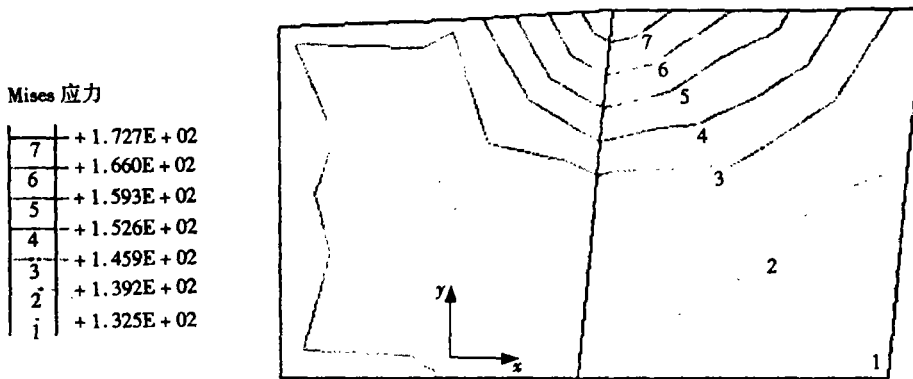


图2 双晶体 1 Mises 应力等值线

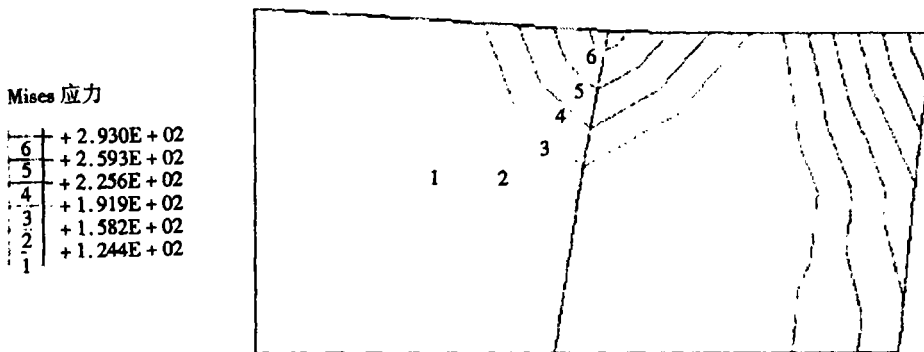


图3 双晶体 2 Mises 应力等值线

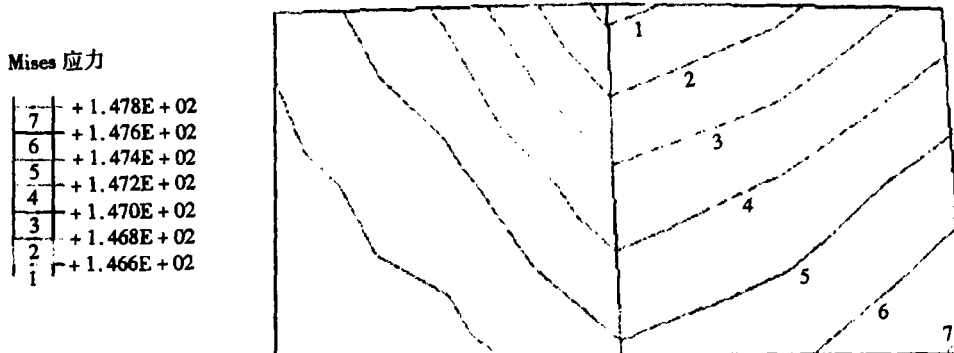


图4 双晶体 3 Mises 应力等值线

## 2.2 三晶体

图5给出了三晶体1的Mises应力等值线,图6给出了三晶体2的Mises应力等值线,等效应力等值线图表明晶界和三晶交点处有较大的应力梯度,但是在晶界处是否造成应力集中同晶粒的取向相关。三晶体中晶界附近的应力结构与双晶体中的亦不相同。一些研究人员认为,三晶粒交点处会造成应力集中现象,本文的有限元结果表明,三晶交点可能是应力集中之地,但也可能不造成应力集中,这主要取决于三个晶粒的取向以及晶界的相互作用。

## 2.3 简要的讨论

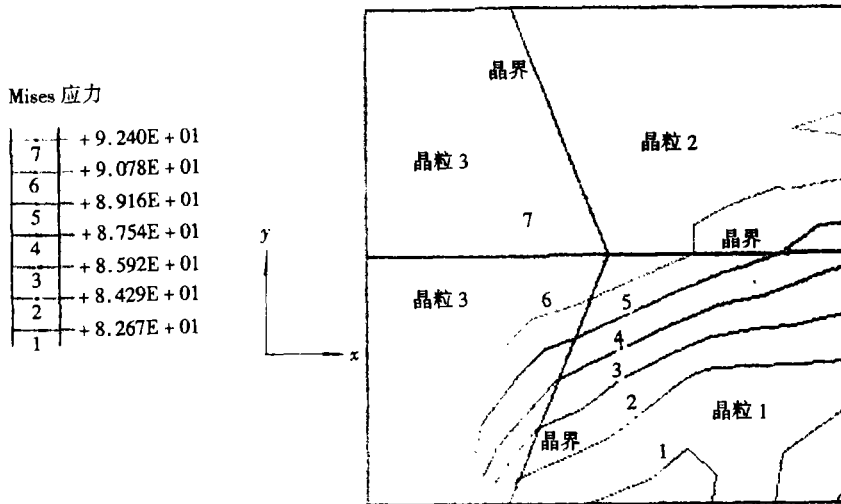


图 5 三晶体 1 Mises 应力等值线

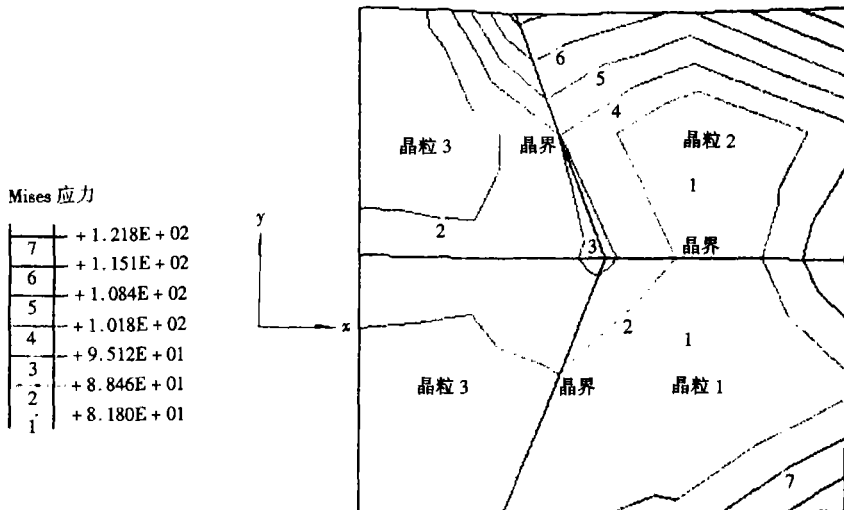


图 6 三晶体 2 Mises 应力等值线

双晶体和三晶体有限元分析结果可说明:晶界处应力具有较大的应力梯度,呈现复杂的变化规律,这种规律与晶粒取向以及晶界的相互作用密切相关。一般来说,双晶体晶界处存在应力集中现象;对于三晶体,由于三晶体中两个晶界的相互作用使得三晶体晶界附近的应力重新分布,进而导致三晶体中晶界附近的应力结构也不同于双晶体。三晶交点(三晶体 1)可能是应力集中之地,但也不可能不造成应力集中(三晶体 2),这主要与三个晶粒取向相关,此结论与文[2,9~10]结论相吻合。因此不同取向晶粒,将导致不同的变形,损伤和失效规律以及变形(屈服),损伤和失效的局部化。特别是对于多晶材料,由于组成多晶材料的晶粒取向是随机的,具有多个晶界存在而且具有相同取向性质的晶粒的概率极小,故晶界的效应对材料的变形、损伤、断裂具有重要的意义。因此要解决金属材料的断裂问题,用常规的方法即均匀应力场是不行的,必须对晶界的力学响应进行细致和深入的研究工作,采用晶体滑移理论从细观的角度分析不同晶粒之间的相互作用,为解决金属材料损伤、断裂问题提供了一种新的思路和方法。

## [参 考 文 献]

- [1] Peralta P, Schober A, Laird C. The anisotropic elastic stress of the bicrystals[J]. *Materials Science and Engineering, Ser A*, 1993, 169(1): 43—51.
- [2] Tvergaard V, Hutchinson J W. The stress characters of tricrystals [J]. *J Am Ceram Soc*, 1988, 71(3): 157—163.
- [3] Weiss J, Schulson E M, Forst H J. Analysis of stress on the triple junction grain boundary of Ice crystals [J]. *Phil Mag A*, 1996, 73(7): 1385—1392.
- [4] Hibbt, Karlsson, Sorensen Inc. *ABAQUS User's Manual*[M]. U S A Pawtucket: HKS, Inc, 2000.
- [5] Peirce D, Asaro R J, Needleman A. An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystal[J]. *Acta Metall Mater*, 1982, 30: 1087—1119.
- [6] Peirce D, Asaro R J, Needleman A. Material rate dependence and localized deformation in crystal solids[J]. *Acta Metall Mater*, 1983, 31(12): 1951—1976.
- [7] 杨晓光. 粘塑性材料结构的有限元分析方法[J]. *航空动力学报*, 1998, 13(4): 380—384.
- [8] Becker R. Effects of strain localization on surface roughening during sheet forming[J]. *Acta Mater*, 1998, 46(4): 1385—1401.
- [9] 岳珠峰, 吕震宙, 李海燕. 各向异性双晶和三晶体弹塑性应力场分析[J]. *计算力学学报*, 1999, 16(4): 445—452.
- [10] YUE Zhu-feng, LÜ Zhen-zhou. Grain boundary-induced shielding of Ni-base single crystals: experimental and analytical study[J]. *J Mater Sci Technol*, 1999, 15(5): 463—468.

## Stress Distribution Near Grain Boundary in Anisotropic Bicrystals and Tricrystals

WAN Jian-song, YUE Zhu-feng

(Department of Engineering Mechanics, Northwestern Polytechnical University,  
Xi'an 710072, P. R. China)

**Abstract:** The rate dependent crystallographic finite element program was implemented in ABAQUS as a UMAT for the analysis of the stress distributions near grain boundary in anisotropic bicrystals and tricrystals, taking the different crystallographic orientations into consideration. The numerical results of bicrystals model with the different crystallographic orientations shows that there is a high stress gradient near the grain boundaries. The characteristics of stress structures are dependent on the crystallographic orientations of the two grains. The existing of triple junctions in the tricrystals may result in the stress concentrations, or may not, depending on the crystallographic orientations of the three grains. The conclusion shows that grain boundary with different crystallographic orientations can have different deformation, damage, and failure behaviors. So it is only on the detail study of the stress distribution can the metal fracture be understood deeply.

**Key words:** bicrystal; tricrystal; stress field; rate dependent crystallographic finite element; slip system