

国家自然科学基金项目 (51601218)
江苏省自然科学基金项目 (BK20160235)
江苏高校优势学科建设工程资助项目

基于多晶体塑性模型的多晶体材料 大变形行为研究

Study on Large Strain Behavior of Polycrystalline Materials
Based on Polycrystal Plasticity Model

郭晓倩 马 超 张连英 茅献彪 著

中国矿业大学出版社

China University of Mining and Technology Press

国家自然科学基金项目(51601218)

江苏省自然科学基金项目(BK20160235)

江苏高校优势学科建设工程资助项目

基于多晶体塑性模型的多晶体 材料大变形行为研究

郭晓倩 马 超 张连英 茅献彪 著

中国矿业大学出版社

内 容 提 要

本书共分7章,主要讲述了多晶体塑性模型中的弹黏塑性自洽模型,并利用此模型对多晶体材料的大变形行为进行了数值模拟研究和预测;分析了模型中不同自洽方法的作用,并给出了对不同自洽方法适用性和预测能力的评价;针对镁合金材料,利用数值模拟方法对其塑性变形机制进行了系统的研究,分析了孪晶在塑性变形机制中的作用及其对镁合金力学性能的影响。

本书可供固体力学、金属材料等相关领域的高等院校的师生、科研院所的科研工作者参考使用。

图书在版编目(CIP)数据

基于多晶体塑性模型的多晶体材料大变形行为研究 /
郭晓倩等著. —徐州:中国矿业大学出版社, 2017.3

ISBN 978 - 7 - 5646 - 3474 - 2

I. ①基… II. ①郭… III. ①多晶—晶体模型—变形—研究 IV. ①O4—33

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2017)第 055343 号

书 名 基于多晶体塑性模型的多晶体材料大变形行为研究
著 者 郭晓倩 马 超 张连英 茅献彪
责任编辑 章 毅 夏 然
出版发行 中国矿业大学出版社有限责任公司
(江苏省徐州市解放南路 邮编 221008)
营销热线 (0516)83885307 83884995
出版服务 (0516)83885767 83884920
网 址 <http://www.cumtp.com> E-mail: cumtpvip@cumtp.com
印 刷 徐州中矿大印发科技有限公司
开 本 787×1092 1/16 印张 9.25 字数 251 千字
版次印次 2017 年 3 月第 1 版 2017 年 3 月第 1 次印刷
定 价 36.00 元

(图书出现印装质量问题,本社负责调换)

前 言

随着材料加工工艺的发展,金属材料塑性变形机制的研究成为当前最热的课题之一。从数值计算角度研究金属材料的大变形行为,为深入了解材料塑性变形机制奠定了基础。本书以具有 FCC 和 HCP 晶体学结构的金属材料为研究对象,利用弹黏塑性自洽(EVPSC)模型中的不同自洽模型,通过数值模拟方法,对多晶体塑性模型在多晶体材料大变形行为中的作用进行了系统的研究。主要工作和研究成果如下:

① 基于已有的 EVPSC 模型,考虑孪晶形成时引起的应力松弛,通过引入两个新参数来描述孪晶临界分解剪切应力的变化规律,建立了新的孪晶成核、扩展和生长的模型,实现了对孪晶形成过程的完整描述。

② 利用 Taylor 模型和 EVPSC 模型中的多种自洽模型,对初始各向同性的 OFHC 在多种加载方式下(单轴拉伸、压缩、平面应变和简单剪切)的流变行为和微观织构演化规律进行了研究,并讨论了潜在硬化系数对织构演化预测结果的影响。从应力—应变和织构演化两方面对不同模型的表现进行了评价,结果表明相互作用刚度介于 Secant(硬)和 Tangent(软)模型之间的自洽模型能比 Taylor 模型更好地预测出 FCC 材料的大变形行为。

③ 借助于考虑弹黏塑性自洽模型的有限元计算程序,对 OFHC 铜在扭转大变形中的行为进行了预测,得到了应力—应变响应、Swift 效应和织构演化的规律,揭示了多晶体塑性模型在 FCC 材料扭转大变形中的作用机制,给出了初始剪切应变对扭转变形中织构演化的影响规律。研究表明对铜的扭转大变形,Tangent 模型的预测结果跟其他模型有明显的差异,不建议用于 FCC 材料的扭转大变形行为模拟预测。

④ 从晶格应变角度,分析了多晶体塑性模型对标准 316 奥氏体不锈钢在单轴拉伸加载下的塑性变形影响,评价了不同自洽模型的预测能力;将不同模型的预测结果与中子衍射实验测得的数据对比,发现晶格应变预测结果对多晶体塑性模型的选择较敏感,Tangent 模型的预测结果与实验值偏离得最多,而介于“最硬”Secant 模型和“最软”Tangent 模型之间的自洽模型,即 Affine 模型和 Meff 模型,结果与实验值吻合得最好。

⑤ 针对具有 HCP 晶体学结构的镁合金 AZ31 轧制板材进行了单轴拉压实验和自由扭转大变形实验,并利用 EVSPC 模型,给出了变形机制相对开启量、孪晶体积分数变化和织构演化规律,分析了镁合金的塑性变形机制和力学性能,揭示了扭转过程中孪晶对

基于多晶体塑性模型的多晶体材料大变形行为研究

Swift 效应的作用,对比了孪晶与退孪晶(TDT)和主导孪晶系模型(PTR)的预测晶格应变和织构演化规律,结果表明:TDT 模型的预测结果与实验观测更接近。

本书的研究成果丰富了晶体塑性模型的基本理论,也为金属材料大变形行为的研究提供了重要依据。

著 者

2016 年 10 月

目 录

1	绪论	1
1.1	研究背景及意义	1
1.2	国内外研究现状	2
1.3	本书研究内容与方法	20
1.4	本书的主要创新点	22
2	多晶体弹黏塑性自洽本构模型	24
2.1	单晶体塑性本构模型	24
2.2	多晶体塑性本构模型	29
2.3	李晶模型	32
2.4	弹黏塑性自洽模型的数值实施	36
2.5	本章小结	37
3	多晶体塑性模型对 FCC 材料大变形行为的影响	39
3.1	计算模拟参数的确定	40
3.2	多种加载方式下的预测结果	42
3.3	潜在硬化系数的作用	51
3.4	不同多晶体塑性模型的评价	56
3.5	本章小结	57
4	多晶体塑性模型对 FCC 材料反向扭转行为的影响	59
4.1	大变形扭转问题的提出和解决方法	59
4.2	计算模型的建立	61
4.3	模拟计算结果	64
4.4	不同多晶体塑性模型的评价	74
4.5	本章小结	75
5	多晶体塑性模型对晶格应变预测的影响	77
5.1	中子衍射测量晶格应变原理及结果	79

5.2	模型参数的确定	81
5.3	晶格应变的模拟结果	83
5.4	不同多晶体塑性模型的评价	88
5.5	本章小结	88
6	基于弹黏塑性自洽模型的镁合金 AZ31 的大变形行为	90
6.1	镁合金 AZ31 轧制板材的单轴拉压变形	91
6.2	镁合金 AZ31 轧制板材自由扭转变形	95
6.3	镁合金 AZ31 挤压棒材的晶格应变预测及两种孪晶模型对比	100
6.4	本章小结	111
7	结论与展望	113
7.1	主要研究结论	113
7.2	研究工作展望	115
	参考文献	117

CHAPTER 1

绪 论

1.1 研究背景及意义

材料是人类文明技术进步的标志。人们习惯用石器时代、青铜时代和铁器时代来表达人类文明史的不同阶段,而我们也亲身经历了从钢铁时代朝向以硅芯片为代表的电子材料时代的过渡。金属材料在一个国家的国民经济中占有举足轻重的地位,因为金属材料的资源比较丰富,已积累了一整套相当成熟的生产技术,有组织大规模生产的经验,产品质量稳定,价格低廉、性能优异。金属材料不仅在人们生活用品,如炊具、包装材料等中有着重要应用,更是航空航天、国防军事、汽车、电子通信等工业领域的重要材料。随着先进制造技术的飞速发展,在确保产品形状、尺寸精度的同时,更加注重产品的内部质量和材料的稳定性。金属塑性成形过程已不仅要满足产品形状的基本要求,更重要的是通过材料塑性变形提高产品的综合机械和力学性能。材料的塑性变形不但可以改变材料的外形和尺寸,而且能够使材料的内部组织和各种性能发生变化,在变形的同时,伴随着变性(显微组织的变化、亚结构的变化、性能的变化、形变织构、残余应力)。探讨塑性变形机制,寻求塑性变形过程中材料微观组织、性能变化规律,进而可根据成形件预订的组织 and 性能要求来优化变形工艺参数和技术方案,从而达到优质、高效、低耗制造的要求。

自 20 世纪 30 年代以来,晶体塑性变形一直是金属物理学家和力学家热心探索的研究课题。晶体塑性理论从塑性变形的物理本质出发,考虑材料变形的微观机制,描述了晶体材料的塑性各向异性及其演化,还描述了位错运动导致晶体材料塑性变形的物理现象,更精确地描述了晶体的塑性行为。目前对金属塑性变形机制的研究工作已经不仅局限于研究金属的宏观塑性流动行为,还包括内部微观组织研究和力学性能的预测和控制。金属材料大多数都是晶粒的集合,即多晶体,理论上描述多晶体材料的塑性变形可分为数学塑性理论和物理塑性理论。数学塑性理论基于一些来源于实验结果的假定条

件,以一般的数学列式来表征、解释和预测材料的宏观性能。虽然数学塑性理论比较简明易用,但其列式中往往还有多个难通过实验确定的待定系数,另外材料塑性变形引起的微观组织演化对材料性能的影响也无法用数学塑性理论来描述。晶体塑性理论是物理塑性理论中的一个典型代表^[1]。材料的组织和结构与其宏观塑性变形能力是密切相关的,因为材料的组织和结构决定了材料的塑性变形能力,而材料的塑性变形会影响材料的微观组织和结构,进而影响材料的塑性变形能力。晶体塑性理论正是从材料的晶体结构出发,考虑与宏观塑性变形机制相关的微观变形机制(如滑移、孪晶),并据此合理地修改和补充常规的数学塑性理论,这样反过来也能更好地理解材料的塑性变形,从而提供了一条进行材料复杂行为研究和工程应用的崭新途径^[2]。

本书的研究是基于多晶体材料塑性变形模拟中的一些问题,特别是弹黏塑性自洽(Elastic Visco-plastic Self-consistent, EVPSC)模型中的多种自洽方法对不同晶体结构的金属材料大变形行为预测的适用性,重点对具有面心立方体(Face Centered Cubic, FCC)晶体学结构的材料进行研究分析,从宏观应力—应变、微观织构演变和晶格应变角度评价不同自洽方法的预测能力和适用性。针对塑性变形机制,对复杂的密排六方体(Hexagonal Close Packed, HCP)晶体结构的镁合金材料在单轴拉压和扭转大变形下的行为进行系统的研究,更好地了解镁合金塑性变形中不同滑移和孪晶机制的作用。通过对镁合金 AZ31 挤压棒材的晶格应变预测,分析比较两种孪晶模型的作用。研究多晶体材料塑性变形机制及在各种状态下的塑性变形行为,不仅可以丰富和发展金属塑性变形的理论体系,对于开发具有高成形性能的金属合金材料及优化金属塑性加工工业更是具有重要的理论指导意义。利用多晶体塑性模型研究多晶体的塑性变形机制,从根本上了解材料的塑性变形,为实际的材料加工成形提供理论依据,这也是本书研究的意义所在。

1.2 国内外研究现状

金属塑性是指材料加载变形后全部卸载仍然残留的永久变形。金属的塑性变形和它的晶体结构特征密切相关。不同的晶体结构使金属材料在微细观上具有不同的对称性、滑移系统以及位错运动形式,从而导致其宏观性能出现显著差异,因此晶粒内部的细观力学行为对金属的力学性能起着确定性作用。金属的塑性变形机制包括滑移、孪晶、不对称变形、非晶机制和晶界滑移。在常温下,塑性形变的基本方式主要为滑移和孪晶两种。

多晶体金属材料,由于各晶粒的取向不同和晶界的存在,其塑性变形较为复杂,主要有以下特点:① 各晶粒变形的不同时性和不均匀性。多晶体金属由于各晶粒取向不同,在受外力作用时,某些晶体取向有利的晶粒先开始滑移变形,而那些取向不利的晶粒则只有在继续增加外力或晶粒转动到有利的取向时才开始滑移变形。因此,金属材

料的织构越不均匀,则起始的塑性变形不同同时性和不均匀性越显著。② 各晶粒变形的相互协调性。多晶体金属作为一个连续整体,不允许各个晶粒在任一滑移系自由变形,否则必将导致晶界开裂,这就要求各晶粒之间能协调变形,为此,每个晶粒必须能同时沿几个滑移系进行滑移,或在滑移的同时产生孪晶变形,以保持材料的整体性。由于多晶体金属的塑性变形需要进行多系滑移,因而多晶体金属的应变硬化率比相同的单晶体金属高。

为从根本上解决多晶体材料塑性变形对加工制造带来的问题,国内外众多学者围绕金属合金塑性变形机制开展了大量研究。但目前为止,对金属合金的塑性变形机制还缺乏全面的认识,更未能建立起完整解释所有温度区间、应变速率下以及材料本身因素对金属合金变形行为的理论支持体系,这也成为制约多晶体材料发展的一个瓶颈。研究多晶体材料塑性变形机制及在各种状态下的塑性变形行为,不仅可以丰富和发展金属塑性变形的理论体系,对于开发具有高成形性能的金属合金材料及优化金属塑性加工工业更是具有重要的理论指导意义。

1.2.1 晶体塑性变形的滑移机制

晶体的塑性变形是通过平行于一定晶体学平面(即滑移面)的滑移引起的。滑移的机制就是位错在滑移面内的运动。滑移面和滑移方向往往是金属晶体中原子排列最密的晶面和晶向。这是因为原子密度最大的晶面其面间距最大,点阵阻力最小,因而容易沿着这些面发生滑移。至于滑移方向为原子密度最大的方向是由于最密排方向上的原子间距最短,即位错 b 最小。

不同晶体结构的常见滑移系和滑移方向见表 1-1^[3]。面心立方晶体的滑移面是 $\{111\}$,滑移方向是 $\langle 110 \rangle$ 。体心立方晶体的滑移面通常是 $\{110\}$,还有可能是 $\{112\}$ 和 $\{123\}$,而最容易开启的滑移方向都是 $\langle 111 \rangle$ 。而对于对称性比较低的密排六方体材料,滑移面一般是基面 $\{0002\}$,也可能是棱柱面 $\{10\bar{1}0\}$,这取决于 c/a 轴的比值。当 c/a 大于理想或接近理想堆垛时的值(1.633)时,如镁(Mg),滑移面是基面,滑移方向是 $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 。而当 $c/a < 1.633$ 时,如锌(Zn),滑移面是棱柱面 $\{10\bar{1}0\}$ 或锥面 $\{11\bar{2}2\}$,滑移方向是 $\langle 11\bar{2}0 \rangle$,也可能是 $\langle 11\bar{2}3 \rangle$ 。

由于激活基面滑移系所需的临界分解剪切应力(Critical Resolved Shear Stress, CRSS)相对其他滑移系较低,基面滑移系对多晶体的塑性变形贡献较多。但是,由于基面滑移系中只有两个独立的滑移系统,而任意材料的形状改变需要 5 个独立滑移系统的开启,所以必然有其他滑移系的开启来贡献更多的应变。HCP 结构单晶中,最易开启的晶体学方向是 3 个 $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 或 $\langle a \rangle$ 密排方向。三组平面包含该滑移方向,分别是:基面 $\{0002\}$ 、棱柱面 $\{10\bar{1}0\}$ 和锥面 $\{10\bar{1}1\}$ 滑移,如图 1-1 所示^[4]。滑移方向 $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 都是垂直于 c 轴,不能够提供平行于 c 轴的拉伸或缩短的变形。为了能够协调沿 c 轴方向的应变,沿着 $\langle c+a \rangle$ 方向的滑移或者孪晶必须开启。就镁合金而言,常见的滑移机制包括

表 1-1 一些金属晶体的滑移面及滑移方向^[3]

晶体结构	金属举例	滑移面	滑移方向
面心立方晶体	Cu, Ag, Au, Ni, Al	{111}	$\langle 110 \rangle$
	Al(在高温)	{100}	$\langle 110 \rangle$
体心立方晶体	α -Fe	{110}	$\langle 111 \rangle$
		{112}	$\langle 111 \rangle$
		{123}	$\langle 111 \rangle$
	W, Mo, Na(于 $0.08 \sim 0.24T_m$)	{112}	$\langle 111 \rangle$
	Mo, Na(于 $0.26 \sim 0.50T_m$)	{110}	$\langle 111 \rangle$
	Na, K(于 $0.8T_m$)	{123}	$\langle 111 \rangle$
	Nb	{110}	$\langle 111 \rangle$
密排六方体	Cd, Be, Te	{0002}	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$
	Zn	{0002}	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$
		{11\bar{2}2}	$\langle 11\bar{2}3 \rangle$
	Be, Re, Zr	{10\bar{1}0}	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$
		{0002}	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$
	Mg	{11\bar{2}2}	$\langle 10\bar{1}0 \rangle$
		{10\bar{1}1}	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$
		{10\bar{1}0}	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$
	Ti, Zr, Hf	{10\bar{1}1}	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$
		{0001}	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$

注： T_m ——熔点,用绝对温度表示。

基面 $\langle a \rangle$ 滑移、棱柱面 $\langle a \rangle$ 滑移和锥面 $\langle c+a \rangle$ 滑移。基面和棱柱面滑移一共可以提供 4 个独立滑移系统，一阶锥面滑移也可提供 4 个独立滑移系。然而从结晶学角度看，一阶锥面滑移可以看作是基面和棱柱面交滑移的结果，也就是说，即使前三种滑移系全部开启的情况下也最多可以提供 4 个独立滑移系统。根据前面提到的材料塑性变形需要 5 个独立滑移系相互协调共同完成，二阶锥面滑移系 $\langle c+a \rangle$ 的开启就变得尤为重要^[5-6]。一般认为，基面滑移是镁合金中最容易开启的滑移系。室温下，单晶镁基面滑移开启所需要的临界剪切应力(CRSS)大约为 $0.45 \sim 0.81 \text{ MPa}$ ^[7-8]，且随温度升高变化很小，即对温度变化不敏感。然而棱柱面和锥面滑移的 CRSS 相对而言要高很多，大约为基面滑移的 $48 \sim 100$ 倍^[7-10]，并且对温度很敏感，随着温度的升高而急剧减小，当温度达到 $300 \text{ }^\circ\text{C}$ 以上时，棱柱面滑移的 CRSS 可以降低到与基面滑移的值相近。对于 $\langle c+a \rangle$ 锥面滑移来说，在镁合金塑性变形过程中相对不容易启动，其 CRSS 在不同温度范围内均高于其他滑移系^[9]，但也随着温度升高而有所降低，在中高温阶段也是一种非常重要的变形机制。有研究表明 $\langle c+a \rangle$ 位错主要形成位置包括：近表面和晶粒之间的界面或者

不连续的孪晶界处;晶粒内部非均匀位置如 $\langle a \rangle$ 位错和 $\langle c \rangle$ 位错交界处^[11]。

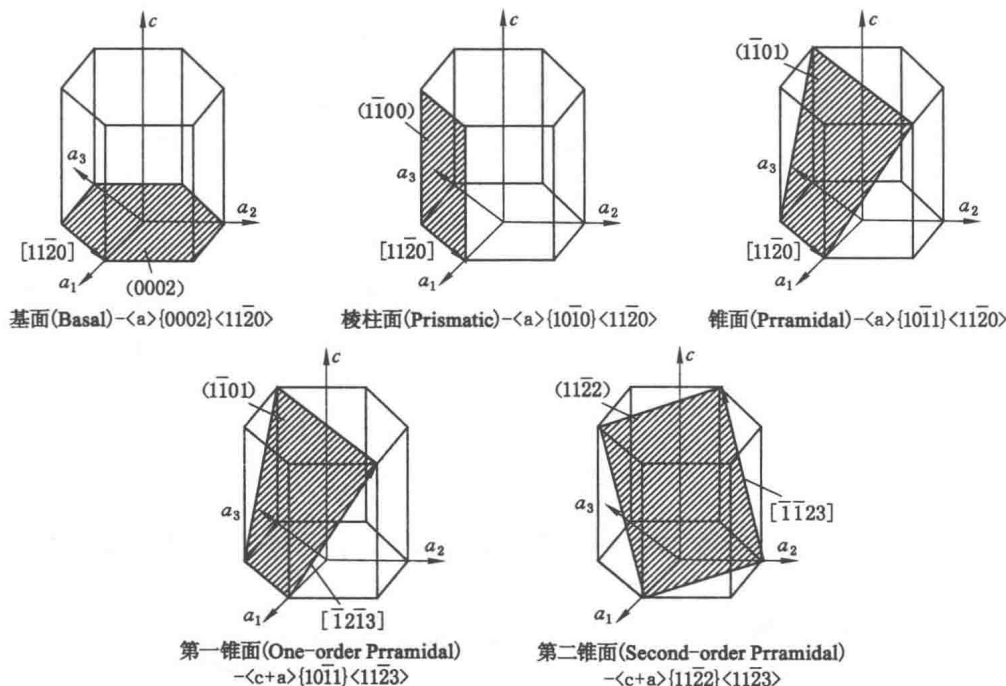


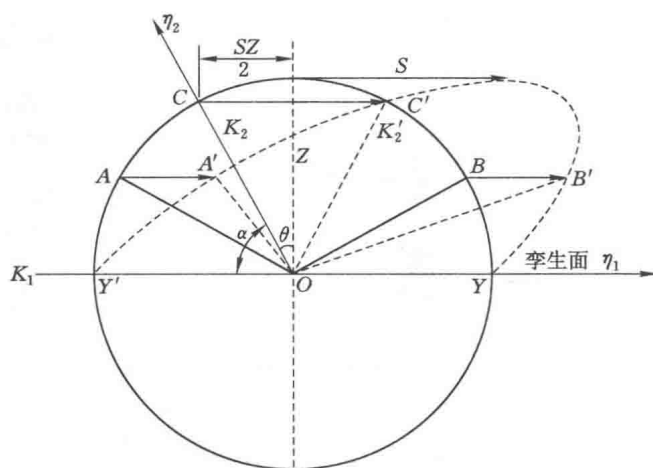
图 1-1 HCP 结构材料的滑移机制^[4]

关于多晶体镁合金塑性变形时滑移系的 CRSS 取值,许多学者分别从实验角度和模拟角度进行了研究,发现模拟时用到的非基面滑移的 CRSS 与基面滑移的比值均远远小于单晶镁拉伸实验中的测试值。有研究表明,在镁合金 AZ31 板材的单轴压缩变形中,非基面滑移与基面滑移的 CRSS 的比值约为 5~6^[12];在镁合金平面应变压缩变形中,该值则为 3~17^[13];而在镁合金 AZ31 冷轧过程中,该比值约为 3^[14]。对于多晶镁合金材料来说,很难从实验中直接测量得到确定的 CRSS 值,只能通过数值模拟间接得到,由于不同研究者所采用的计算模型和模拟参数不同,因此得到的结果常常也存在较大差异。

1.2.2 晶体塑性变形的孪晶机制

孪晶是塑性变形的另一种重要机制,是在切应力作用下晶体的一部分相对于另一部分沿着某一晶面(称孪晶面)和晶向(孪晶方向)发生均匀切变的现象。常用一个半径为单位长度的晶球来说明孪晶几何,如图 1-2 所示。在孪晶过程中,赤道平面既不改变形状又不改变位置,该平面就是孪晶面,又称为第一不畸变面,以 K_1 表示,孪晶的切动方向以 η_1 表示。孪晶切动后,只有一个垂直于切平面的面切前后不发生形状和尺寸的变化(图 1-2 中的 OC 面),这个面称为第二不畸变面,以 K_2 表示。 K_2 和切平面的交线以 η_2 表示。 K_1 、 K_2 、 η_1 和 η_2 是表述孪晶几何的重要参数,称为孪晶元素。

表 1-2 列出了 3 种典型金属晶体结构的孪晶元素、孪晶切应变 S 以及孪晶所产生的

图 1-2 说明孪晶几何的单位球^[15]

最大相对伸长。不同结构的孪晶元素不同。在 HCP 结构中,因 c/a 轴比不同,其孪晶元素也不同。层错能比较低的面心立方(FCC)结构晶体会出现形变孪晶,层错能高的金属和合金则只在深低温和高应变率才会出现孪晶。FCC 金属材料由于对称性高、滑移系多而易于滑移,且其孪晶切应变很大($S=0.707$),所以孪晶很难发生,常见的是退火孪晶,只有在极低温度($4\sim 78\text{ K}$)、应变速率极高或在变形后期位错堆积使滑移受阻时,才会发生变形孪晶。

表 1-2

一些金属的孪晶元素^[15-16]

金属	晶体结构	c/a	K_1	K_2	η_1	η_2	S	$(l'/l)_{\max}$
Al, Cu, Au, Ni, Ag, γ -Fe	FCC		{111}	{11 $\bar{1}$ }	$\langle 11\bar{2} \rangle$	$\langle 112 \rangle$	0.707	41.4%
α -Fe	BCC		{112}	{ $\bar{1}\bar{1}2$ }	$\langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$	$\langle 111 \rangle$	0.707	41.4%
Cd	HCP	1.886	{10 $\bar{1}2$ }	{ $\bar{1}012$ }	$\langle 10\bar{1}\bar{1} \rangle$	$\langle 10\bar{1}1 \rangle$	0.17	8.9%
Zn	HCP	1.856	{10 $\bar{1}2$ }	{ $\bar{1}012$ }	$\langle 10\bar{1}\bar{1} \rangle$	$\langle 10\bar{1}1 \rangle$	0.138	7.2%
Mg	HCP	1.624	{10 $\bar{1}2$ }	{ $\bar{1}012$ }	$\langle 10\bar{1}\bar{1} \rangle$	$\langle 10\bar{1}1 \rangle$	0.129	6.8%
			{10 $\bar{1}1$ }	{10 $\bar{1}\bar{3}$ }	$\langle 10\bar{1}\bar{2} \rangle$	$\langle 30\bar{3}2 \rangle$	0.138	37.0%
Zr	HCP	1.589	{10 $\bar{1}2$ }	{ $\bar{1}012$ }	$\langle 10\bar{1}\bar{1} \rangle$	$\langle 10\bar{1}1 \rangle$	0.173	8.70%
			{11 $\bar{2}1$ }	{0001}	$\langle 11\bar{2}\bar{6} \rangle$	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	0.63	36.3%
			{11 $\bar{2}2$ }	{11 $\bar{2}\bar{4}$ }	$\langle 11\bar{2}\bar{3} \rangle$	$\langle 2\bar{2}\bar{4}3 \rangle$	0.22	11.9%
Ti	HCP	1.587	{10 $\bar{1}2$ }	{ $\bar{1}012$ }	$\langle 10\bar{1}\bar{1} \rangle$	$\langle 10\bar{1}1 \rangle$	0.175	8.7%
			{11 $\bar{2}1$ }	{0001}	$\langle 11\bar{2}\bar{6} \rangle$	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	0.63	36.9%
			{11 $\bar{2}2$ }	{11 $\bar{2}\bar{4}$ }	$\langle 11\bar{2}\bar{3} \rangle$	$\langle 2\bar{2}\bar{4}3 \rangle$	0.218	11.9%
Be	HCP	1.568	{10 $\bar{1}2$ }	{ $\bar{1}012$ }	$\langle 10\bar{1}\bar{1} \rangle$	$\langle 10\bar{1}1 \rangle$	0.199	10.4%

FCC 金属材料的孪晶面为 $\{111\}$,孪晶方向为 $\langle 112 \rangle$ 。对具有体心立方(BCC)晶体结构的金属,当形变温度较低、形变速度极快或者由于其他原因的限制使滑移过程难以进行时,也会通过孪晶的方式进行塑形变形。体心立方金属的孪晶面为 $\{112\}$,孪晶方向为 $\langle 111 \rangle$ 。最早用来研究体心立方结构中出现孪晶现象的材料是铁,随后发现钢在高应变率或低温形变实验中较容易形成孪晶。

在三种典型金属结构中,对称性低、滑移系少的密排六方(HCP)金属如镉(Cd)、锌(Zn)、镁(Mg)等往往容易出现孪晶变形^[17]。在滑移困难时,六方晶系的滑移系很少,而且其孪晶切应变比较低,所以容易出现孪晶。HCP 材料中,常见的孪晶模式有 4 种类型,分别是 $\{10\bar{1}2\} \langle 10\bar{1}\bar{1} \rangle$ 、 $\{10\bar{1}1\} \langle 10\bar{1}2 \rangle$ 、 $\{11\bar{2}2\} \langle 11\bar{2}\bar{3} \rangle$ 和 $\{11\bar{2}1\} \langle 11\bar{2}\bar{6} \rangle$ ^[16]。每种孪晶模式下孪晶应变的数值大小与 c/a 轴比相关^[18]。HCP 金属材料中,最常见的孪晶模式是 $\{10\bar{1}2\} \langle 10\bar{1}\bar{1} \rangle$,其孪晶元素如图 1-3 所示。孪晶剪切应变的计算公式为:

$$\gamma = \frac{3 - (c/a)^2}{\sqrt{3}c/a} \quad (1-1)$$

从上式可以得到当 $c/a = \sqrt{3}$ 时,孪晶切应变为 0。当 $c/a < \sqrt{3}$ 时,如镁、锆和钛,孪晶激活的条件是晶粒 c 轴受拉伸应力,因此称作“拉伸”孪晶。相反,如果 $c/a > \sqrt{3}$,如镉和锌,“压缩”孪晶在晶粒 c 轴受压缩时开启。HCP 结构中, $\{10\bar{1}2\} \langle 10\bar{1}\bar{1} \rangle$ 孪晶模式的孪晶剪切应变都比较小(见表 1-2)。对于镁合金而言, $\{10\bar{1}2\} \langle 10\bar{1}\bar{1} \rangle$ 孪晶模式的孪晶剪切应变为 0.129,带动的晶格转动约为 86.3° 。镁合金中拉伸孪晶开启的临界剪切应力远小于压缩孪晶,如 $\{10\bar{1}2\}$ 拉伸孪晶所需的 CRSS 约为 2~2.8 MPa,而 $\{10\bar{1}1\}$ 压缩孪晶所需的 CRSS 约为 76~153 MPa。

1.2.3 影响塑性变形机制的因素

金属塑性变形的方式主要是滑移、孪晶和晶界滑移等,这几种机制之间互为竞争关系。孪晶机制所形成的孪晶改变了晶体取向,可以使原来处于不利取向的滑移系转动到有利位置并重新开启,从而使滑移变形继续进行。当外力施加的方向一定时,何种机制开启并成为主要变形机制与各自的临界剪切应力 CRSS 有直接的关系,所以影响 CRSS 变化的因素决定着主要变形机制。这些因素主要包括材料内部因素的织构取向、晶粒尺寸、堆垛层错能和外部作用的温度、应变率、预变形等。

由于 FCC 和 BCC 结构的对称性比较高,有较多独立的滑移系,所以常温和低应变率下孪晶较难发生,但在 FCC 金属及其合金中仍有孪晶出现^[19-21]。自从 Blewitt et al.^[21]

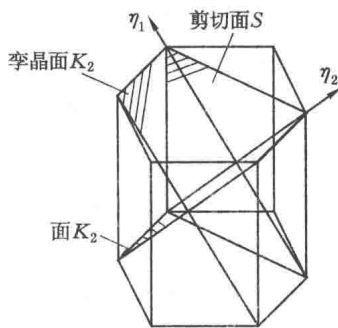


图 1-3 $\{10\bar{1}2\} \langle 10\bar{1}\bar{1} \rangle$ 孪晶模式的孪晶元素示意图^[7]

在非常低的温度下对单晶铜进行拉伸实验发现孪晶以来,学者们进行了大量的研究来深入了解不同 FCC 金属材料中的孪晶机制。众所周知,堆垛层错能(SFE)对 FCC 晶体的孪晶行为有着重要的影响^[22-26]。变形孪晶在 SFE 值比较低的 FCC 晶体中较容易发生,但是在 SFE 值稍大些或较高的 FCC 晶体中就变得很难开启。通常,FCC 晶体在常规的变形条件下,如常温下或低应变率下的拉伸、压缩或者扭转,不会发生孪晶。但在低温^[21,27]和高应变速率条件下^[28-33],变形孪晶出现。学者们近些年发现,在纳米晶体铝和铜中变形孪晶很容易发生^[34-38]。大量实验结果表明,许多外部和内部的因素,如结晶学的取向、应变率、温度、变形模式、SFE 和晶粒尺寸,对 FCC 晶体中变形孪晶的发生都有着重要影响。SFE 和晶粒尺寸对 FCC 晶体变形孪晶是两个重要的内部因素,但这两个因素对变形孪晶的作用仍存在相互矛盾的结论。由于 SFE 对变形孪晶行为有重要的影响^[22-26],且 SFE 越低变形孪晶越容易发生,能观测到大量的孪晶。但在低 SFE 的 Cu-Al 合金拉伸实验中,只有一些晶粒中发现了孪晶,其他晶粒尺寸比较小的晶粒中并没有发现孪晶^[23]。Meyers et al.^[28]发现冲击压缩实验中晶粒尺寸为 117 μm 和 315 μm 的铜试样里有大量的孪晶出现,而在 9.5 μm 晶粒尺寸的试样中只有很少的孪晶。Sanchez et al.^[29]通过透射电子显微法观测不同晶粒尺寸铜试样中的孪晶,结果表明随着晶粒尺寸和变形的增加,观测到的变形孪晶密度越大。同样的在 MP35N 合金中,晶粒尺寸小于 1 μm 的试样中没有发现孪晶^[26]。这些实验表明在 FCC 材料中,随着晶粒尺寸减小到一定程度,变形孪晶很难发生。另一方面,分子动态模拟^[34-35]和实验结果已证明孪晶在纯铝和铜晶体中容易成核,尽管它们的晶粒尺寸是亚微米级^[36-38]。显然,这些结果不足以说明小的晶粒尺寸是促进塑性变形中孪晶成核的一个因素。FCC 晶体中,结晶学织构对变形孪晶行为的影响研究比较少^[21]。低温条件下,对单晶铜沿着 $\langle 123 \rangle$ 取向进行拉伸实验,变形孪晶没有开启直至轴转动到发生共面二阶滑移的方向上^[21]。然而,对单晶铜在常温下进行拉伸时并没有发现变形孪晶。Meyers et al.^[24]提出了一种本构方法来预测孪晶的临界应力,考虑了外部因素(如温度、加载速率)和内部因素(晶粒尺寸、堆垛层错能)作用,并将该模型用于具有不同晶体结构的材料中,如铜、铁和钛。Han et al.^[39]综合考虑了以上因素对 FCC 晶体材料中变形孪晶的影响,对单晶铝选择有利于孪晶发生的取向,但仍没有发现孪晶成核,这说明 SFE 对孪晶的发生有重要的作用。对单晶铜,在常温和低应变率下进行一次挤压,发现了大量的孪晶,说明取向是一个主要的控制因素。以上的实验说明,SFE、晶粒尺寸和结晶学取向因素对 FCC 晶体材料中变形孪晶的开启有着重要作用,要综合考虑内外部因素对孪晶的影响。各个因素之间是否有相互影响仍需要进一步的研究。

HCP 材料的结构低对称性使得孪晶成为常温下不可缺少的塑性变形机制。HCP 材料中滑移系种类较多,还有孪晶机制,何种变形机制起主要作用与众多因素有关,如晶粒尺寸的减小使晶界滑移容易产生而释放局部应力集中,从而不易产生孪晶变形;温度的升高引起棱柱面和锥面滑移的 CRSS 急剧降低而变得容易开启。晶粒取向的不同导致

取向因子的不同而决定产生何种变形机制,当外应力施加方向接近于垂直或平行基面作用时,基面和棱柱面滑移的取向因子很小,不易开动,而锥面和孪晶的取向因子增大而变得容易开启,因此锥面滑移和孪晶成为相互竞争的变形机制。因此,影响孪晶的因素有很多,包括晶粒取向、温度、应变率、晶粒尺寸、预变形、合金成分及第二相等,它们或单独或相互作用地影响着孪晶的生成。

(1) 晶粒尺寸

晶粒尺寸对孪晶的成核和生长有着重要的影响。晶界的应力集中对孪晶成核有着重要作用,实验发现孪晶常出现在晶界处^[40-42]。所以,晶粒尺寸对孪晶成核的密度有重要影响。同时,孪晶的生长受晶粒尺寸的制约,越小的晶粒产生的孪晶越小^[43]。孪晶主要发生在尺寸较大的晶粒内部^[44],晶粒中的平均孪晶个数随着晶粒尺寸的增加而增加,如 MgAZ31^[43,45-46]、Si-Fe 合金^[47] 和 Ti^[43]。对于孪晶体积分数,Ecob et al.^[48]、Jain et al.^[49] 和 Ghader et al.^[43] 分别发现在锌合金、退火的镁合金 AZ31 板材和钛中,随着晶粒尺寸变大,孪晶体积分数增加。但 Ghader et al.^[43] 对挤压镁合金 AZ31 棒材的研究发现在应变约为 1.5% 左右时,孪晶体积分数随着晶粒尺寸的增加基本保持不变。挤压镁合金 ZM20 中,Muransky et al.^[50] 也发现不管晶粒尺寸的大小,发生孪晶的体积分数基本是相同的。这归因于在变形过程中必须有足够量的孪晶发生来提供塑性变形,与晶粒尺寸的大小无关。关于晶粒尺寸对孪晶厚度的影响,不同学者之间也存在着分歧。Hull^[51] 指出在 3%Si-Fe 合金中测量得到的孪晶厚度随着晶粒尺寸增加而增加。然而,Beyerlein 和其合作者^[40,52] 的研究结果却表明在镁和锆中,真正的孪晶厚度变化与晶粒尺寸无关。Ghader et al.^[43] 发现在镁合金 AZ31 中孪晶的平均厚度在晶粒尺寸小于 15 μm 时基本保持常数,但超过该尺寸后,孪晶厚度增加。而在金属钛中,孪晶平均厚度随着晶粒尺寸的增加而增加。对孪晶长度的影响^[43]:在不同应变值下,孪晶的长度基本都是常数,可以解释为成核后的孪晶繁衍以很快的速度达到了其最终的长度^[20]。

不同晶粒尺寸下,挤压镁合金 AZ31 棒材沿挤压方向的压缩曲线如图 1-4 所示。从图中可以看出不同尺寸的晶粒,随着应变的增加,从屈服到最大应力值中间的硬化有着明显的差别。在较小尺寸的晶粒中,屈服过后,有一段低加工硬化的区域,随后,加工硬化率增加,这种现象被 Barnett et al. 称为“屈服延伸”^[46],与孪晶引起的应力松弛有关。

(2) 初始取向

孪晶与滑移的一个重要差别在于孪晶是一个单向切变的过程,即只能沿着孪晶方向进行,反向不能发生孪晶切变。对于 HCP 材料,平行于 c 轴的压缩或垂直于 c 轴的拉伸产生的孪晶称为压缩孪晶,平行于 c 轴的拉伸或垂直于 c 轴的压缩产生的孪晶称作拉伸孪晶。所以,孪晶的发生不仅与外加载荷的方向有关,还与加载类型相关。根据 c/a 轴比的不同,同类孪晶在不同的金属材料中可能是拉伸孪晶,也可能是压缩孪晶。对于镁合金而言,常见的拉伸孪晶为 $\{10\bar{1}2\} \langle 10\bar{1}1 \rangle$,压缩孪晶则为 $\{10\bar{1}1\} \langle 10\bar{1}2 \rangle$ 。轧制或挤压的镁合金有较强的晶体学织构,大多数晶粒的 c 轴沿垂直于轧制方向或挤压方向分

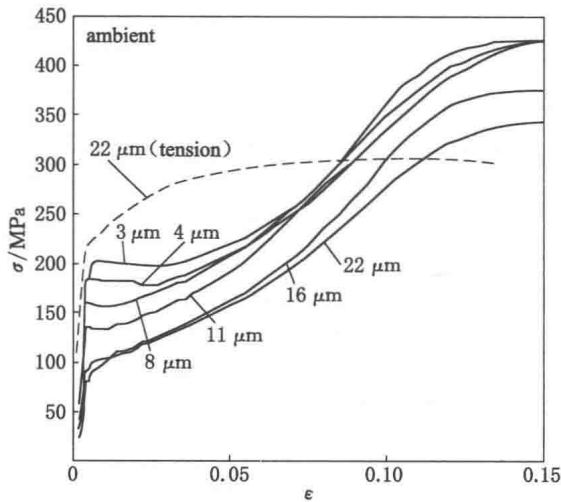


图 1-4 不同晶粒尺寸挤压镁合金 AZ31 常温下沿着挤压方向的拉伸和压缩曲线^[53]

布。这导致了沿同一方向进行不同类型加载时产生的拉—压屈服不对称性^[53-55]和同种加载类型不同加载方向时的各向异性^[53-54,56-61]。同样是产生拉伸孪晶,垂直于 c 轴压缩和平行于 c 轴拉伸两种情况下的开启变体却有着明显的差别^[62-68]。对同一方向的不同加载类型:单轴拉伸和压缩,就轧制织构而言,沿着面内 RD 或 TD 方向拉伸时,此时大部分晶粒的 c 轴受到压缩作用,拉伸孪晶很难发生,起主要作用的变形机制是滑移,其屈服应力比较高。而沿着 RD 或 TD 方向进行压缩时, c 轴受到拉伸作用,拉伸孪晶起主要作用,由于开启孪晶的 CRSS 比较低,从而导致较低的屈服应力。对于同一加载类型沿着不同方向加载的情况,室温下镁合金的力学性能表现出强烈的各向异性,加工硬化行为也呈现出不同特征^[60]。针对轧制织构而言,由于 HCP 晶格对称性,加载轴与 a 轴的夹角 θ 的变化范围为 $0\sim30^\circ$,当加载方向垂直于 c 轴时,只有两对孪晶变体的 Schmid 因子最高,在 $0.374\sim0.499$ 之间,它们的 c 轴分布在距离加载方向 $\pm30^\circ$ 的位置^[63-64]。而对平行于 c 轴的加载,不管 a 轴与加载轴的夹角是多少,所有 6 个变体的 Schmid 因子高达 0.4999 ,接近于最大值 (0.5),发生孪晶区域中晶粒的 c 轴在 RD-TD 面内随机分布。由此可见,加载轴与 c 轴的关系以及加载类型对变形机制的选择有着重要影响。

(3) 温度的影响

Wonsiewicz et al.^[61]早在 1967 年就研究了 $20\sim307^\circ\text{C}$ 温度范围内单晶镁在平面应变压缩作用下的塑性变形机制。当沿着晶粒的 c 轴进行压缩时,限制 $[10\bar{1}0]$ 或 $[\bar{1}210]$ 方向的变形,如图 1-5 所示,施加应力迅速增加,断裂发生在应力为 $324\sim365\text{ MPa}$ 内,对应的应变约为 6% 。应力的急速增加归因于基面滑移的开启,基面的 Schmid 因子很低但非零,且 CRSS 很低。随着温度升高到 300°C ,最大应力降低了约 75% 。Qiao et al.^[69]研究了轧制温度对纯镁板材的微观结构、力学性能、织构和动态重结晶演化的影响。热压板材的晶粒沿 RD 方向伸长,且热压纯镁表现出明显的各向异性。对于纯镁轧制 40% 的情况