高压物理学报

高应变率加载下FCC金属晶体取向对孔洞增长的影响

米星宇 钟政 蒋招绣 王永刚

Effect of FCC Metal Crystal Orientation on Void Growth under High Strain Rate Loading

MI Xingyu, ZHONG Zheng, JIANG Zhaoxiu, WANG Yonggang

引用本文:
米星宇, 钟政, 蒋招绣, 等. 高应变率加载下FCC金属晶体取向对孔洞增长的影响[J]. 高压物理学报, 2023, 37(2):024204. DOI: 10.11858/gywlxb.20220711
MI Xingyu, ZHONG Zheng, JIANG Zhaoxiu, et al. Effect of FCC Metal Crystal Orientation on Void Growth under High Strain Rate Loading[J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2023, 37(2):024204. DOI: 10.11858/gywlxb.20220711

在线阅读 View online: https://doi.org/10.11858/gywlxb.20220711

DOI: 10.11858/gywlxb.20220711

高应变率加载下 FCC 金属晶体取向对孔洞增长的影响

米星宇, 钟 政, 蒋招绣, 王永刚

(宁波大学冲击与安全工程教育部重点实验室, 浙江 宁波 315211)

摘要: 采用率相关的晶体塑性本构模型研究了冲击荷载作用下晶体取向对面心立方金属内部孔洞增长的影响。利用 VUMAT 子程序, 将率相关晶体塑性本构模型嵌入 ABAQUS 有限元软件中, 分析了单晶晶内孔洞、双晶晶界孔洞和三角晶界孔洞的增长行为, 结果显示: 孔洞的变形模式与晶体取向、晶界位置(冲击加载方向与晶界的相对方位)、加载方向相关, 晶体的滑移线模型与晶界位置之间的关系可以反映孔洞增长方向。对于晶内孔洞, 加载方向越接近 [011], 孔洞开始增长变形时间越晚, 但孔洞的总体增长变形越大; 加载方向越接近 [111], 孔洞开始增长变形时间越早, 但孔洞的总体增长变形越小。对于晶界处孔洞, 晶界位置影响孔洞的部分变形, 但不会影响总体变形。晶体受冲击之后, 若孔洞增长方向沿晶内, 则晶界会促进孔洞沿晶内增长; 若增长方向沿晶界, 则晶界会促进孔洞沿晶界方向增长, 抑制其向晶内增长。

关键词: 晶体塑性; 晶体取向; 晶内孔洞; 晶界孔洞

中图分类号: O521.2; O347.3 **文献标识码:** A

孔洞增长机制是材料强度领域的重点课题。冲击载荷作用下, 基体材料内部两列相向而行的稀疏波相遇形成拉伸应力, 当拉伸应力足够高时, 材料内部发生微损伤的成核、增长、贯通, 直至材料断裂破坏[1−2]。微孔洞的增长受哪些因素影响一直是学者们积极探索的问题。从细微观尺度研究影响孔洞增长变形的因素对于理解金属材料的动态变形断裂以及如何增强材料强度具有重要的指导意义。

近年来, 一些学者通过平板撞击实验、理论和数值模拟, 对延性金属材料的动态损伤演化进行了一系列研究[3−5]。林茜等[3] 将晶粒度引入加载条件, 探讨了晶粒度和加载应力对微孔洞聚集和应力松弛行为的影响。张凤国等[4] 针对一维拉伸破坏问题, 探讨了孔洞增长(void growth, VG)模型参数的确定方法, 扩展了其适用范围。随着计算机计算能力的提高, 细观有限元模拟是实现与实验结果等比例对比分析的有效方式。Jiang 等[5] 通过孔洞随机撒点的方式建立了一维平板撞击有限元模型, 实现了层裂过程中的损伤演化分析。然而, 上述研究并没有考虑晶体取向对孔洞增长等层裂损伤演化行为的影响。

在分子动力学领域, 学者们经常考虑材料的取向对孔洞增长机制的影响, 并采用分子动力学方法在微、纳米尺度研究孔洞演化的内在机理。早期邓小良等[6] 基于晶体的某些典型取向信息, 对纳米孔洞的增长机制进行了初步探索, 并总结了冲击方向和孔洞半径对纳米孔洞前期动力学行为的影响。Sun 等[7] 研究了纳米尺度的开放多孔面心立方(face centered cubic, FCC)Au 的拉伸变形(孔洞的体积分数为 0.64～0.76), 发现在拉伸变形过程中部分骨架结构发生颈缩和断裂, 导致材料失效。Ruestes 等[8−9] 和 Rodriguez-Nieva 等[10] 分别研究了沿 [001] 晶向的单轴高应变率(10^9 s^{-1})压缩下, 低孔洞率(低于 5%)的多孔体心立方(body-centered cubic, BCC)Ta 和 Au 单晶的力学行为以及塑性变形过程中的位错演化,

* **收稿日期:** 2022-12-25; **修回日期:** 2023-03-07

基金项目: 国家自然科学基金(11972202); 宁波市重大科技任务攻关项目(2022Z188); 宁波市自然科学基金(202002N3133)

作者简介: 米星宇(1996—), 男, 硕士研究生, 主要从事金属层裂损伤演化研究. E-mail: dazz12345@sina.com

通信作者: 王永刚(1976—), 男, 博士, 教授, 主要从事冲击动力学研究. E-mail: wangyonggang@nbu.edu.cn

结果显示, 孔洞的分布不仅改变了局部应力状态, 也为生成的位错环之间的相互作用和交叉提供了条件, 形成位错林, 并导致应变硬化。Tang 等[11] 研究了镁单晶中孔洞生长和多孔洞合并过程, 模拟结果显示, 模型尺寸、加载速率和温度对位错或孪晶的模式、孔洞形状演变及应力-应变响应都有明显的影响, 但对弹性模量的影响十分微弱。Zhang 等[12] 利用分子动力学方法模拟了三角晶界中孔洞的增长过程, 分析了孔洞在拉伸作用下对取向的依赖性。在新材料研究中, Xiang 等[13−14] 和 Shao 等[15] 利用分子动力学软件 LAMMPS 模拟了单晶和纳米多晶 Pb 的层裂现象, 分析了冲击波和晶界对孔洞增长的影响。Wang 等[16] 利用非平衡态分子动力学方法研究了单晶 Sn 的层裂强度和微结构演化, 认为孔洞的最大数量随冲击压力的升高而增加, 并总结了孔洞平均半径和体积分数的演化过程。然而, 这些研究并没有突破分子动力学在时间和空间上的尺度限制, 只能在极小的范围内对孔洞损伤演化机制进行探讨, 而且在含晶界的多晶孔洞问题中, 受限于分子动力学软件的分析效率, 并不能有效地反映多晶模型孔洞的动态变形。

晶体塑性模型是研究晶粒取向对材料在加载过程中动力学行为影响的一种有效方式。与分子动力学不同, 晶体塑性有限元将分子间的位错和堆垛转化为特定取向的滑移系进行滑移变形, 用材料的本构关系代替分子间作用力关系, 拓展了晶体变形的研究尺度。然而, 在当前的研究中, 未见利用动态晶体塑性有限元探讨孔洞增长机制的研究。因此, 本研究基于含应变率的晶体塑性理论模型, 利用 VUMAT 子程序, 建立不同晶粒取向的有限元模型, 研究单晶孔洞、双晶晶界孔洞和三角晶界孔洞增长的动力学行为, 探讨加载方向与晶粒取向对孔洞增长行为的影响。

1　模型建立

1.1　几何模型构建

在平板撞击实验中, 通常通过软回收样品分析孔洞的成核、增长等损伤演化动力学行为, 图 1[17] 为高纯度铝材料微层裂回收样品的金相图, 可以看出: 成核孔洞近似呈菱形增长, 不同取向晶粒的晶内孔洞增长方向不同, 晶界孔洞在晶体内部的增长方向也各自不同。因此, 为分析晶粒取向对孔洞增长行为的影响, 选取 3 种不同取向的晶粒作为初始条件进行有限元模拟。取 3 种不同初始取向的晶粒(A、B 和 C), 其在 *xy* 平面的投影与 [010] 方向之间存在不同的角度, 表 1 列出了 3 种晶体的米勒指数、晶体取向(将主加载轴方向的晶面指数定义为晶体取向)、晶体取向在 *xy* 平面的投影以及投影与 [010] 之间的夹角。建立单晶晶内、双晶晶界和三角晶界的孔洞模型, 施加沿 [010] 方向的冲击载荷, 结合晶体塑性理论, 模拟分析冲击作用下 3 种模型的孔洞增长情况。

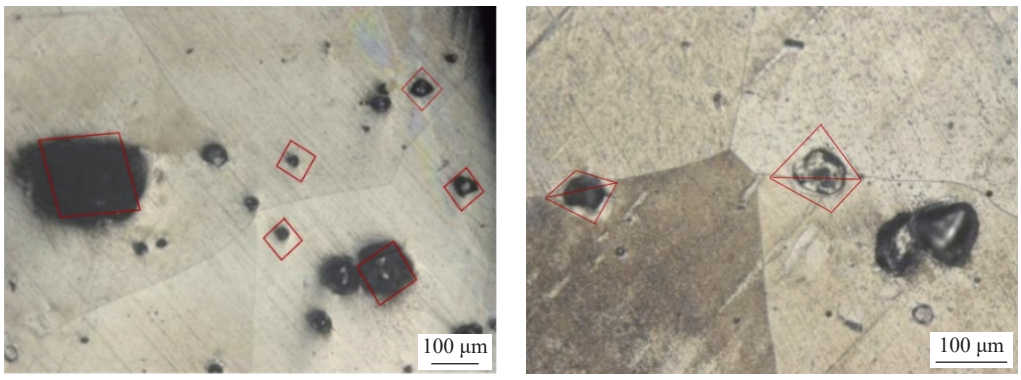


图 1　软回收靶板的金相图像[17]

Fig. 1　Metallography of soft recovery target plate[17]

1.1.1　单晶晶内模型

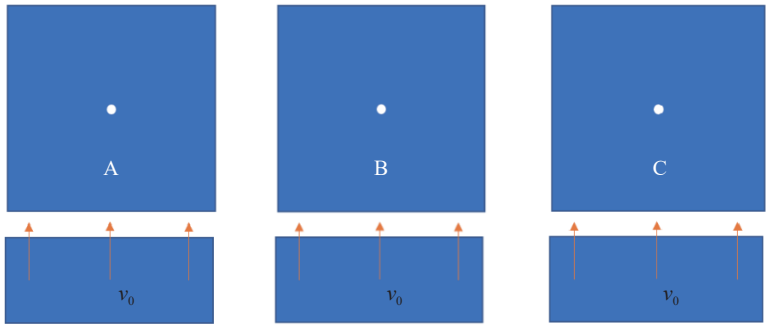
为研究晶体取向对单晶晶内孔洞扩展的影响, 利用 ABAQUS 建立 3 个单晶加载模型(晶体 A、B、C, 尺寸均为 1 mm×1 mm), 在单晶中间预置 1 个初始孔洞(半径 r=0.01 mm), 对 3 个不同取向的单晶模型施加沿 [010] 方向的冲击载荷(冲击速度 v_0=240 m/s), 如图 2 所示, 其中: 晶体 A 在 *xy* 平面上的取向

为 (010), 与加载方向相同; 晶体 B 在 *xy* 面上的取向为 (130), 与加载方向之间的夹角为 18.4°; 晶体 C 在 *xy* 平面上的取向为 (110), 与加载方向之间的夹角为 45.0°。

表 1　晶体取向

Table 1　Grain orientation

Grain	Miller-Bravais indices (*y*-*x*)	Orientation of crystal (Main loading direction)	Orientation of crystal (*xy* plane)	Angle/(°)
A	(011)[100]	(011)	(010)	0
B	(131)[3$\bar{1}$0]	(131)	(130)	18.4
C	(111)[$\bar{1}$10]	(111)	(110)	45.0



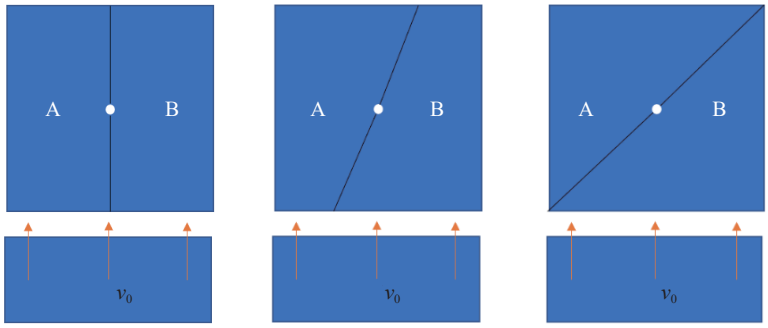
(a) Case 1　(b) Case 2　(c) Case 3

图 2　单晶加载工况

Fig. 2　Single crystal loading conditions

1.1.2　双晶晶界模型

为研究晶界位置(晶界与加载方向的夹角)对孔洞增长的影响, 在单晶孔洞模型中添加不同方向的晶界, 晶界两侧选取晶体取向相同的晶粒模型 A 和 B, 见图 3。工况 4、工况 5 和工况 6 中, 晶界与加载方向 [010] 的夹角θ分别为 0°、25°和 45°, 加载方式与单晶模型相同, 模拟双晶晶界处的孔洞增长情况。



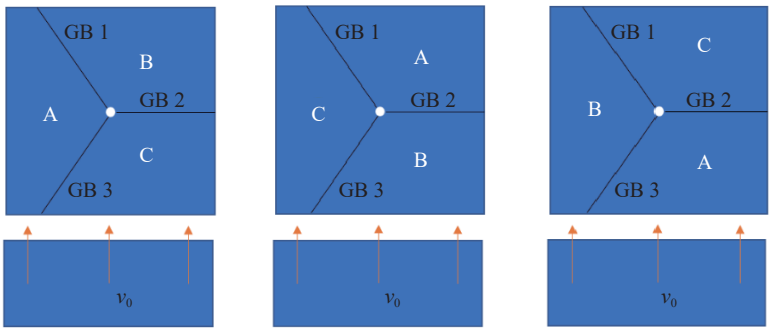
(a) Case 4　(b) Case 5　(c) Case 6

图 3　双晶晶界加载工况

Fig. 3　Bicrystal grain loading conditions

1.1.3　三角晶界模型

模拟三角晶界孔洞变形时需要考虑晶界位置和取向的相互作用对孔洞增长的影响。晶粒大小和冲击方向与单晶晶内孔洞一致。设置 3 个不同的晶界位置(晶界 1、晶界 2 和晶界 3)作为参照, 三角晶界处孔洞周围设置 3 个不同初始取向的晶体 A、B 和 C, 按照顺时针旋转晶体位置形成 3 种不同类型的工况, 如图 4 所示(GB1、GB2、GB3 分别代表晶界 1、晶界 2 和晶界 3), 沿 [010] 方向冲击加载, 模拟三角晶界孔洞的增长情况。



(a) Case 7　　(b) Case 8　　(c) Case 9

图 4　三角晶界加载工况

Fig. 4　Triangular grain loading conditions

1.2　率相关的晶体塑性本构模型

采用晶体塑性有限元计算 3 种模型的本构。根据晶体塑性变形运动学理论, 晶体的受力变形可分为两部分: 一部分是晶格的拉伸和旋转变形, 为晶体变形的弹性部分; 另一部分是晶体的位错滑移, 为晶体变形的塑性部分。利用 Lee 分解, 可将变形梯度 $\boldsymbol{F}$ 分解为

$$\boldsymbol{F}=\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}} \tag{1}$$

式中: $\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}$ 为晶格的弹性变形和刚体旋转所致的变形梯度, $\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}}$ 为晶体沿滑移系位错所致的变形梯度。

当前状态的速度梯度张量 $\boldsymbol{L}$ 可分解为

$$\boldsymbol{L}=\dot{\boldsymbol{F}}\boldsymbol{F}^{-1}=\boldsymbol{L}^{\mathrm{e}}+\boldsymbol{L}^{\mathrm{p}} \tag{2}$$

式中: $\boldsymbol{L}^{\mathrm{e}}$ 和 $\boldsymbol{L}^{\mathrm{p}}$ 分别为弹性和塑性变形的速度梯度张量, $\dot{\boldsymbol{F}}$为变形梯度对时间的一阶导数。$\boldsymbol{L}^{\mathrm{e}}$ 可表示为

$$\boldsymbol{L}^{\mathrm{e}}=\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}-1} \tag{3}$$

对于 $\boldsymbol{L}^{\mathrm{p}}$, 引入 Hill 等[18] 构建的剪切滑移率$\dot{\boldsymbol{\gamma}}^{\alpha}$与塑性变形速度梯度之间的关系

$$\boldsymbol{L}^{\mathrm{p}}=\sum_{\alpha=1}^{N}\dot{\boldsymbol{\gamma}}^{\alpha}\boldsymbol{s}^{\alpha}\otimes\boldsymbol{m}^{\alpha} \tag{4}$$

式中: $\boldsymbol{s}^{\alpha}$和$\boldsymbol{m}^{\alpha}$分别为第α滑移系上的单位滑移向量和法向量。

在晶体塑性理论中, 为使材料的本构响应不受刚体旋转的影响, 即材料的力学响应不随参考系的变化而变化, 采用柯西应力张量$\boldsymbol{\sigma}$的客观导数形式

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\sigma}}=\dot{\boldsymbol{\sigma}}-\boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\Omega} \tag{5}$$

式中: $\overset{\nabla}{\boldsymbol{\sigma}}$为初始构型状态的尧曼客观导数; $\boldsymbol{\Omega}$为旋转张量, 是速度梯度张量的反对称部分; $\dot{\boldsymbol{\sigma}}$为柯西应力率。根据 Hill 等[18] 提出的弹性本构关系, 描述晶体客观应力-滑移剪切应变的本构关系为

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\sigma}}=\boldsymbol{l}:\boldsymbol{D}-\sum_{\alpha=1}^{N}(\boldsymbol{l}:\boldsymbol{P}^{\alpha}+\boldsymbol{W}^{\alpha}\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{W}^{\alpha})\dot{\boldsymbol{\gamma}}^{\alpha} \tag{6}$$

式中: $\boldsymbol{l}$ 为弹性模量张量, $\boldsymbol{D}$ 为当前构型下的变形率张量, $\boldsymbol{P}^{\alpha}$和$\boldsymbol{W}^{\alpha}$分别为 Schmid 因子张量的对称部分和反对称部分。

根据晶体滑移系的率相关滑移情况, α滑移系满足滑移应变率和剪切应力关系的流变准则

$$\dot{\boldsymbol{\gamma}}^{\alpha}=\dot{a}\left|\frac{\boldsymbol{\tau}^{\alpha}}{\boldsymbol{g}^{\alpha}}\right|^{n}\operatorname{sign}(\boldsymbol{\tau}^{\alpha}) \tag{7}$$

式中: $\boldsymbol{\tau}^{\alpha}$为施加在第$\alpha$滑移系上的分解剪切应力, $\boldsymbol{g}^{\alpha}$为α滑移系上的硬化应力, n为滑移系应变率敏感系数, $\dot{a}$为参考剪切应变率。

第α滑移系上的剪切应力张量的本构表达式和硬化应力表达式为

$$\dot{\boldsymbol{\tau}}^{\alpha}=\dot{\boldsymbol{P}}^{\alpha}:\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{P}^{\alpha}:\dot{\boldsymbol{\sigma}}=(\boldsymbol{l}:\boldsymbol{P}^{\alpha}+\boldsymbol{W}^{\alpha}\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{W}^{\alpha})\left(\boldsymbol{D}-\sum_{\beta=1}^{N}\boldsymbol{P}^{\beta}\dot{\boldsymbol{\gamma}}^{\beta}\right) \tag{8}$$

$$\dot{\boldsymbol{g}}^{\alpha}=\sum_{\beta=1}^{N}\boldsymbol{h}_{\alpha\beta}\left|\dot{\boldsymbol{\gamma}}^{\beta}\right| \tag{9}$$

式中: $\boldsymbol{h}_{\alpha\beta}$为硬化模量矩阵, 为$\boldsymbol{\gamma}$的函数。硬化模量矩阵的表达式为

$$\boldsymbol{h}_{\alpha\beta}=q\boldsymbol{h}(\boldsymbol{\gamma}) \tag{10}$$

$$\boldsymbol{h}(\boldsymbol{\gamma})=h^{0}\mathrm{sech}^{2}\left|\frac{h^{0}\boldsymbol{\gamma}}{\tau^{s}-\tau^{0}}\right| \tag{11}$$

式中: q为硬化比率, h^0为初始硬化率, τ^0为屈服切应力, τ^s为流动应力饱和值。

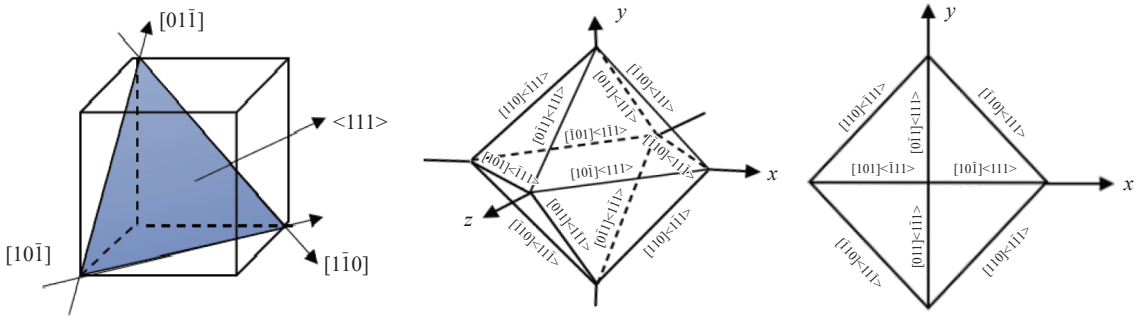
基于式 (7), 构造以滑移率$\dot{\boldsymbol{\gamma}}^{\alpha}$为主的显式控制方程[19]

$$\sum_{\beta=1}^{N}\boldsymbol{N}_{\alpha\beta}\Delta\boldsymbol{\gamma}^{\beta}=(\dot{\boldsymbol{\gamma}}_{\mathrm{t}}^{\alpha}+\boldsymbol{Q}^{\alpha}:\boldsymbol{D})\Delta t \tag{12}$$

式中: $\boldsymbol{N}_{\alpha\beta}$为增量步状态相关的系数矩阵, $\Delta\boldsymbol{\gamma}^{\beta}$为滑移系剪切应变增量, $\dot{\boldsymbol{\gamma}}_{\mathrm{t}}^{\alpha}$为增量步开始时的剪切应变率, $\boldsymbol{Q}^{\alpha}$为增量步开始时的相关状态变量。

1.3　金属铝晶体的塑性有限元参数

晶体铝为 FCC 晶体, 每个晶粒有 4 个不同取向的{111}滑移面, 每个面上有 3 个<110>密排方向, 即滑移方向。图 5 给出了 FCC 晶胞的滑移面和滑移系, 其中: 图 5(a) 显示了 FCC 一个滑移面上的 3 个滑移系, 图 5(b) 给出了 FCC 晶胞滑移线模型的空间分布[20], 图 5(c) 显示了 FCC 晶胞在 xy 平面的滑移系分布。将金属铝晶体赋予初始取向{111}<110>, 表 2 列出了金属铝晶体的 12 条滑移线的晶面指数($\boldsymbol{n}^{\alpha}$)和晶向指数($\boldsymbol{m}^{\alpha}$)。表 3 给出了金属铝基于晶体塑性有限元分析的本构参数[21], 其中: ρ 为密度, C_{11}、C_{12}、C_{44} 为弹性模量分量。根据晶体塑性理论和显式动力学编写 VUMAT 子程序, 将本构参数和晶体的初始取向输入子程序, 利用 ABAQUS 模拟 3 种类型孔洞在冲击加载条件下的增长变形动力学行为。



(a) A quarter cell　　(b) Three-dimensional slip systems　　(c) Slip systems in xy plane

图 5　FCC 晶胞的滑移面和滑移线分布

Fig. 5　Slip surface and slip line distribution of FCC cells

表 2　金属铝的 12 条滑移系晶面指数和晶向指数

Table 2　Initial orientations of 12 slip systems of aluminum metal

α	$\boldsymbol{n}^{\alpha}$	$\boldsymbol{m}^{\alpha}$	α	$\boldsymbol{n}^{\alpha}$	$\boldsymbol{m}^{\alpha}$	α	$\boldsymbol{n}^{\alpha}$	$\boldsymbol{m}^{\alpha}$	α	$\boldsymbol{n}^{\alpha}$	$\boldsymbol{m}^{\alpha}$
1	(111)	$[\bar{1}01]$	4	(1$\bar{1}$1)	$[\bar{1}01]$	7	($\bar{1}$11)	$[0\bar{1}1]$	10	(11$\bar{1}$)	$[\bar{1}10]$
2	(111)	$[0\bar{1}1]$	5	(1$\bar{1}$1)	[011]	8	($\bar{1}$11)	[101]	11	(11$\bar{1}$)	[101]
3	(111)	$[\bar{1}10]$	6	(1$\bar{1}$1)	[110]	9	($\bar{1}$11)	[110]	12	(11$\bar{1}$)	[011]

表 3　金属铝的晶体塑性有限元本构参数

Table 3　Plastic finite element constitutive parameters of aluminum metal crystals

ρ/(kg·m^{-3})	C_{11}/GPa	C_{12}/GPa	C_{44}/GPa	τ^0/MPa	τ^s/MPa	h^0/MPa	q	$\dot{a}$/s^{-1}
2 700	108	62	28.3	21	61	60	1.4	0.001

2　结果分析

2.1　单晶晶内的孔洞增长

2.1.1　孔洞增长形状分析

滑移系剪切变形是晶体塑性理论中的主要作用机制, 因此滑移系累积的剪切应变在一定程度上可以反映孔洞的增长情况。图 6 给出了单晶 A、B 和 C 的平面滑移线模型以及单晶晶内孔洞剪切应变分布。

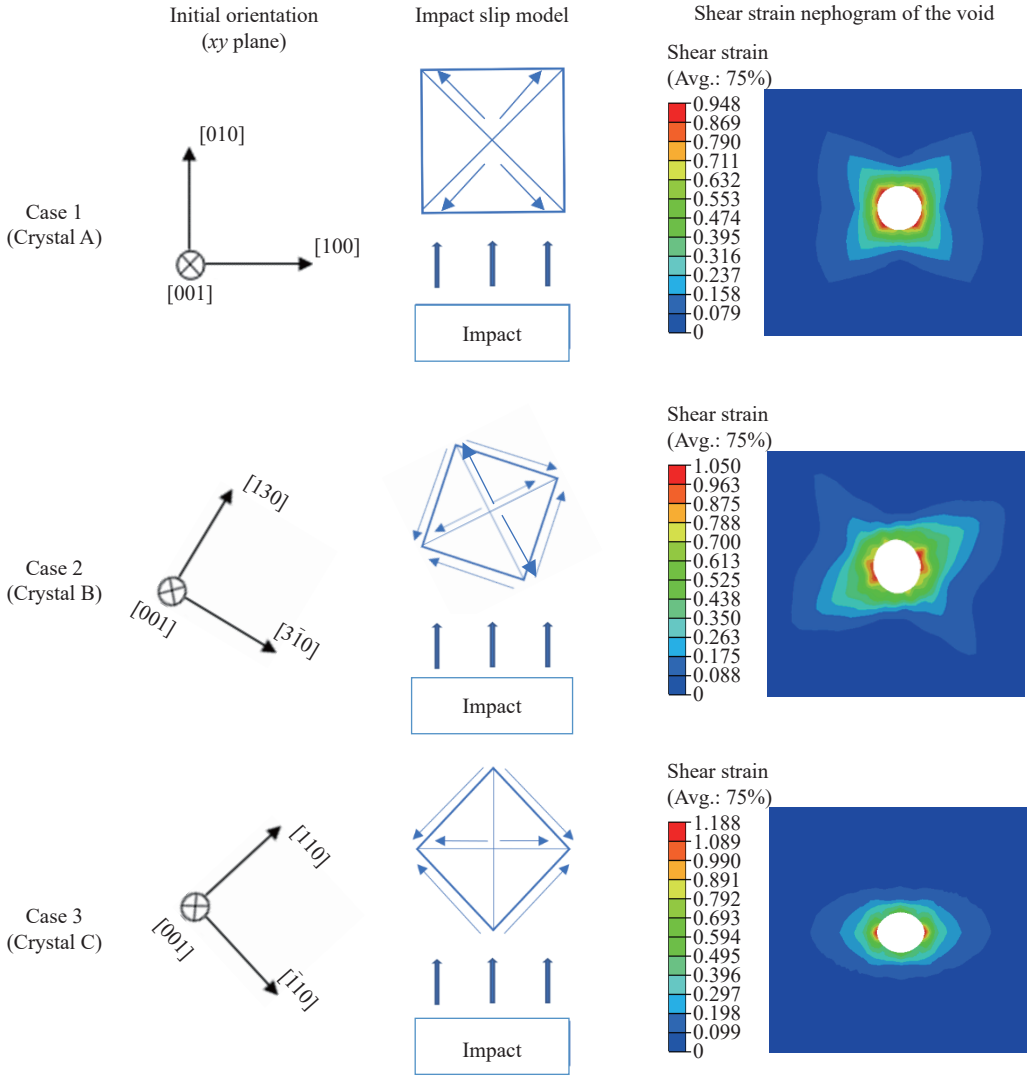


图 6　初始滑移系和孔洞的剪切应变

Fig. 6　Initial slip systems and shear strain nephograms of the voids

沿着 [010] 方向冲击时, 受应力波的影响, 滑移线模型产生拉伸应力, 最容易发生滑移的方向也在图 6 中给出。ABAQUS 模拟的 3 种晶体的剪切应变呈现一定的方向性: 工况 1 的孔洞在与 x、y 轴成 45°的

4 个方向上的变形最大; 工况 2 的孔洞塑性变形与 x、y 轴成一定角度, 最大变形方向靠近 x 轴; 工况 3 的孔洞沿 x 轴的增长最大。根据晶体塑性理论, 晶体的剪切变形是晶体在外载荷作用下的位错滑移导致的。将 3 种工况的累积剪切应变云图和滑移线模型进行对比, 发现变形方向和滑移方向具有一致性, 滑移线模型中最容易发生滑移的方向接近剪切应变云图中最大变形方向, 说明单晶的孔洞模拟结果符合晶体塑性有限元理论分析结果。

2.1.2　孔洞增长变形量分析

图 7 给出了单晶晶内孔洞面积演化曲线, 飞片冲击加载作用时间设置为 1 μs 。由图 7 可知: 3 种单晶的孔洞面积在 0.65～0.80 μs 快速增长; 工况 1 的孔洞面积最大, 工况 3 的孔洞面积最小。在 0.65～0.76 μs 区间, 3 种工况的孔洞面积相差不大, 工况 3 的孔洞面积稍大于工况 1 和工况 2; 在 0.76～0.80 μs 区间, 工况 1 和工况 2 的孔洞面积快速增长, 0.80 μs 时工况 1 和工况 2 的孔洞面积明显大于工况 3 的孔洞面积。该增长趋势可以通过滑移线模型解释: 孔洞增长初期, 工况 3 最容易发生滑移, 孔洞面积优先增长; 3 种工况的晶面都开始发生滑移变形后, 工况 1 和工况 2 产生的滑移方向多于工况 3, 因而在孔洞增长后期, 工况 1 和工况 2 的孔洞面积大于工况 3 的孔洞面积。

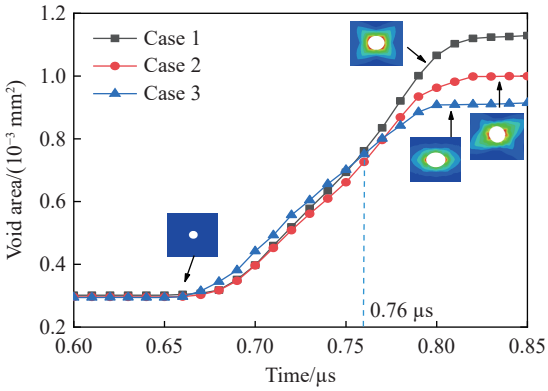
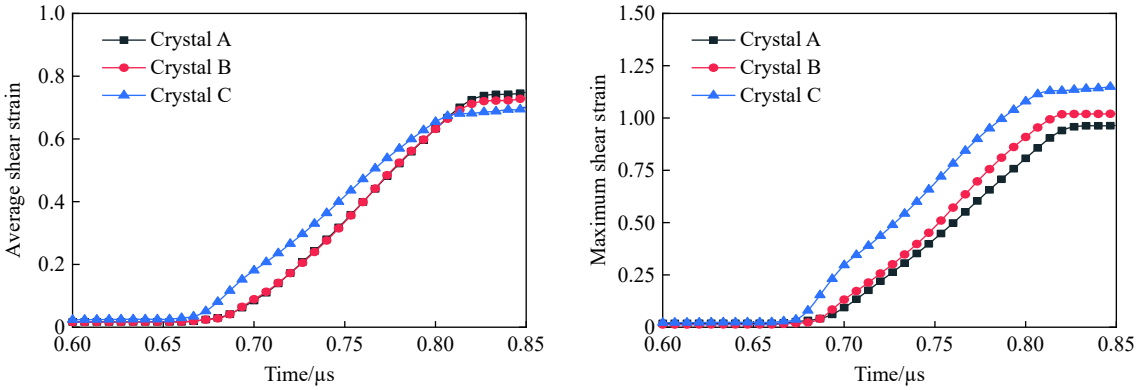


图 7　晶内孔洞面积变化曲线

Fig. 7　Area-time curves of voids in single crystal

图 8 给出了孔洞周围的剪切应变变化曲线。如图 8(a) 所示, 孔洞周围单元的平均剪切应变曲线显示: 0.65 μs 之前, 孔洞未开始增长变形; 0.65～0.85 μs 区间, 晶体 C 中孔洞的平均剪切应变先高于后低于晶体 A 和晶体 B 中孔洞的平均剪切应变。该曲线的变化趋势与孔洞面积增长曲线一致, 说明孔洞周围单元的平均剪切应变可以反映孔洞面积增长。图 8(b) 给出了孔洞周围单元的最大剪切应变随时间变化曲线, 可以描述单晶孔洞增长方向的变形量与时间的关系。结合晶体滑移线模型可知: 在孔洞增长阶段, 晶体 C 优先发生塑性滑移, 然后是晶体 B, 最后是晶体 A。孔洞增长变形后期, 晶体 B 和晶体 C 的最大变形明显高于晶体 A 的最大变形。



(a) Average shear strain of the void　　(b) Maximum shear strain of the void

图 8　孔洞区域滑移剪切应变-时间曲线

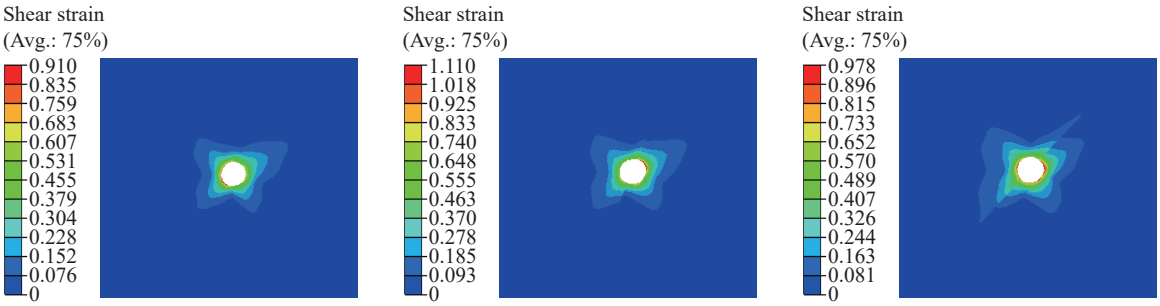
Fig. 8　Shear strain-time curves of the voids

晶体的滑移线模型与加载方向之间的位置关系可以反映晶内孔洞的变形方向。对于 FCC 单晶晶内孔洞, 加载方向越接近 [010] 方向, 晶内孔洞越不易发生变形, 但变形后晶内孔洞增长面积越大; 加载方向越接近 [111] 方向, 晶内孔洞越容易发生变形, 但孔洞增长面积反而越小。

2.2　双晶晶界的孔洞增长

2.2.1　孔洞增长形状分析

图 9 给出了 3 种不同晶界位置下孔洞的滑移系累积剪切应变云图。由图 9 可知: 3 种晶界位置所产生的最大剪切应变不同; θ =25°时最大剪切应变最大, 为 1.110; θ =0°时最大剪切应变最小, 为 0.910。θ =0°和θ =25°晶界模型的孔洞增长情况类似, 均沿着孔洞的 4 个方位角增长扩展, 而θ =45°时孔洞沿晶界方向有明显的增长扩展趋势。

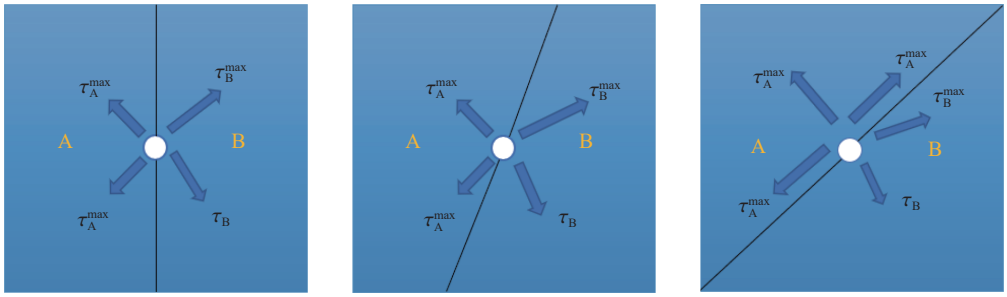


(a) θ=0°　　(b) θ=25°　　(c) θ=45°

图 9　双晶晶界孔洞累积剪切应变云图

Fig. 9　Shear strain nephograms of grain boundary voids of bicrystals

参照晶体 A 和晶体 B 的滑移线模型, 图 10 给出了 3 种晶界位置对应的剪切应力分布, 其中: τ_{A}、$\tau_{\mathrm{A}}^{\max}$、τ_{B}、$\tau_{\mathrm{B}}^{\max}$分别为晶体 A 和晶体 B 的剪切应力和最大剪切应力。剪切应力是晶体塑性滑移变形的主要作用力, 最大剪切应力方向是孔洞增长变形的主要方向。图 9 中剪切应变的扩展方向与图 10 中的剪切应力分布一一对应, 说明滑移线模型的最大剪切应力方向可以反映晶界孔洞的增长方向。由图 10 所示的剪切应力分布可知, θ =0°和θ =25°时晶体剪切应力沿晶界的分量较小, θ =45°时晶体沿晶界有明显的剪切应力分量, 促进了孔洞沿晶界方向增长。



(a) θ=0°　　(b) θ=25°　　(c) θ=45°

图 10　双晶晶界剪切应力分布

Fig. 10　Shear stress distributions of bicrystals grain boundaries

2.2.2　孔洞增长变形分析

3 种双晶晶界计算模型得到的孔洞增长面积变化曲线如图 11 所示。在 0.70～0.80 μs, 孔洞发生增长变形。3 种工况对应的孔洞增长曲线变化趋势几乎相同, 说明晶界位置对孔洞总体增长变形的影响较小, 即晶界位置对材料损伤演化过程中总体损伤度的影响不大。

为进一步探究晶界位置对各部分孔洞变形的影响, 在 ABAQUS 中提取晶界孔洞两侧单元的剪切应变, 图 12 给出了不同晶体取向下孔洞的剪切应变曲线。当θ =0°和θ =25°时, 晶界孔洞沿晶体 A 的剪切应变高于沿晶体 B 的剪切应变; 当θ =45°时, 孔洞沿晶体 B 的剪切应变大于沿晶体 A 的剪切应变。对比 3 种晶界位置处晶体 A 和晶体 B 的剪切应变, 从 0°到 45°, 晶界孔洞沿着晶体 A 的剪切应变减小, 而沿晶体 B 的剪切应变增大, 即晶界促进孔洞朝晶体 B 增长, 抑制孔洞朝晶体 A 增长。

滑移系模型与晶界的位置关系可以反映双晶晶界孔洞的变形趋势。冲击加载下，晶界位置对晶界孔洞总体变形的影响较小，但会影响孔洞沿晶界两侧的变形情况。晶界位置变化会促进或抑制晶界孔洞沿两侧晶体的生长，促进或抑制作用取决于两侧晶体的晶体取向。

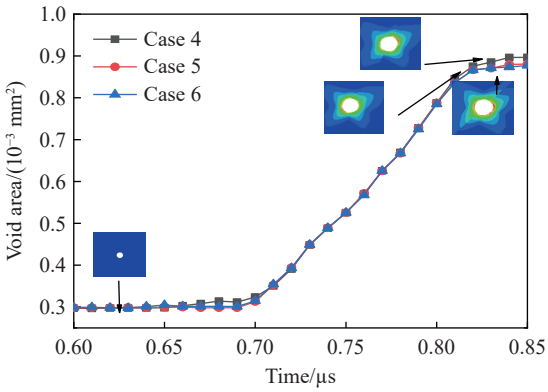


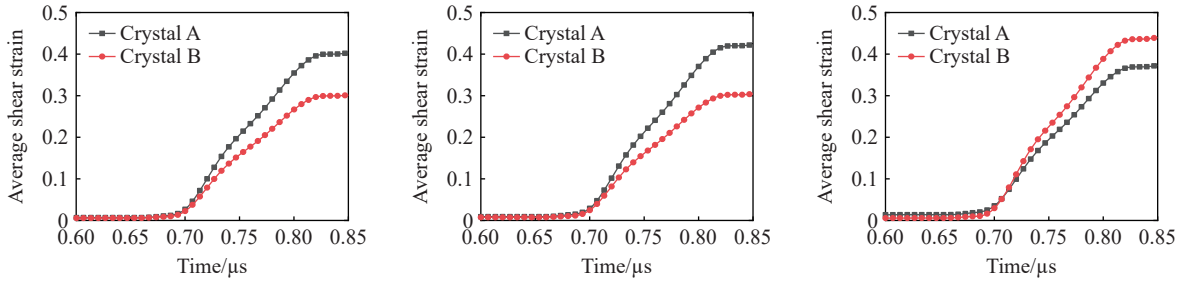
图 11　双晶晶界处的孔洞面积-时间曲线

Fig. 11　Void area-time curves at the grain boundary of bicrystals

2.3　三角晶界的孔洞增长

2.3.1　孔洞增长形状分析

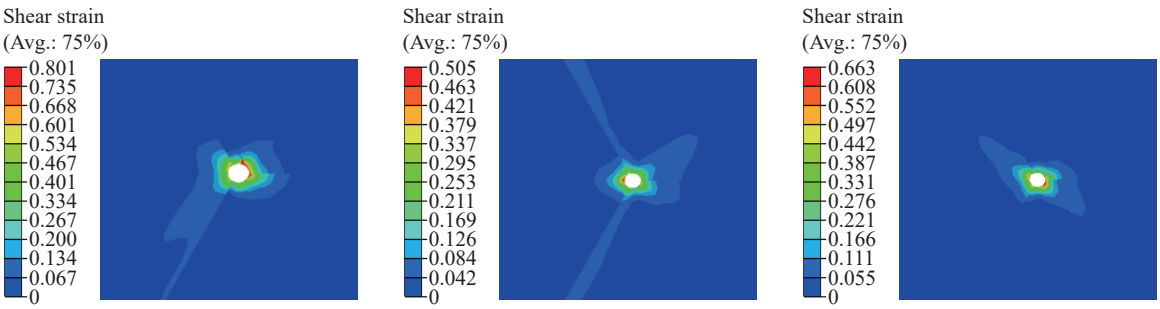
图 13 给出了 3 种工况下三角晶界孔洞的滑移系剪切应变云图。冲击载荷作用下，孔洞朝着 3 个晶界方向发生不同的增长变形。工况 7 中，孔洞变形朝着晶界 3 方向增长；工况 8 中，孔洞朝晶界 1 和晶界 3 两个方向增长，沿晶体 A 也有增长；工况 9 中，孔洞朝着晶界 1 和晶体 A 方向增长。



(a) θ=0°　(b) θ=25°　(c) θ=45°

图 12　晶界位置不同时孔洞的剪切应变

Fig. 12　Shear strain of voids at different grain boundary locations



(a) Case 7　(b) Case 8　(c) Case 9

图 13　三角晶界孔洞剪切应变云图

Fig. 13　Shear strain nephograms of triangular grain boundary voids

为探究三角晶界处孔洞沿晶界增长变形的机理，结合晶体取向信息绘制 3 种工况的孔洞加载模型。图 14 给出了 3 种工况下三角晶界处晶体 A、晶体 B 和晶体 C 的滑移线模型，由此可以确定 3 条晶界线与 3 种晶体滑移系之间的位置关系。在图 14 的基础上，结合加载方向，绘制三角晶界剪切应力分布图。图 15 显示了 3 种工况下三角晶界孔洞周围的剪切应力分布，从晶内孔洞扩展规律可知，晶体 C 的最大剪切应力最大，晶体 B 次之，晶体 A 最小，即$\tau_{\mathrm{C}}^{\max} > \tau_{\mathrm{B}}^{\max} > \tau_{\mathrm{A}}^{\max}$。图 15(a) 中沿晶界 3 两侧的剪切应力分量大于沿晶界 1 和晶界 2，孔洞沿晶界 3 的变形大于沿晶界 1 和晶界 2，符合工况 7 剪切应变云图中的孔洞变形特点。同理，工况 8 和工况 9 的剪切应力分布也符合剪切应变云图中孔洞的变形特点。

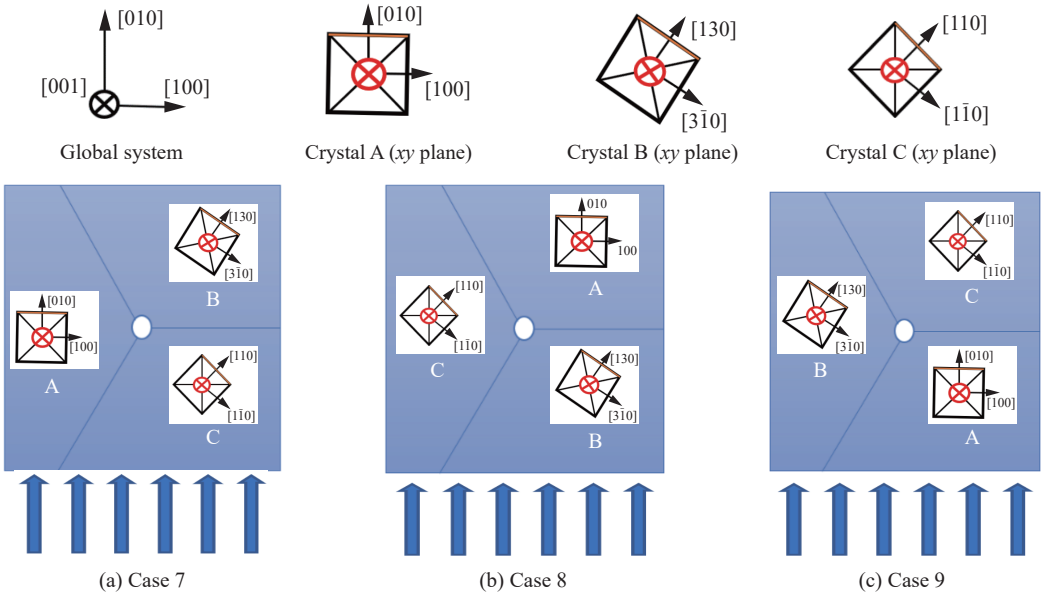


图 14　三角晶界加载模型

Fig. 14　Triangular grain boundary loading models

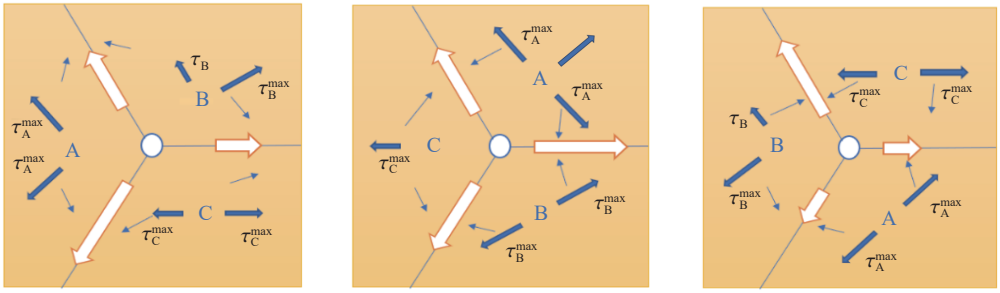


图 15　三角晶界孔洞的剪切应力分布

Fig. 15　Shear stress distributions of triangular grain boundary voids

2.3.2　孔洞增长变形分析

图 16 给出了 3 种工况下三角晶界处的孔洞面积演化曲线。结果显示: t=0.70 μs 之前, 孔洞面积约为 3×10^{-4} mm^2, 应力波未在孔洞处叠加形成拉应力, 孔洞未发生变形增长; 0.70～0.85 μs, 应力波形成的拉应力促使三角晶界孔洞发生增长变形, 工况 7 中孔洞面积的增长速率最高, 工况 9 次之, 工况 8 最低; t=0.85 μs 时, 3 种工况的孔洞面积达到最大, 分别为 1.0×10^{-3}、6.2×10^{-4} 和 8.1×10^{-4} mm^2, 工况 7 的孔洞面积最大, 工况 8 的孔洞面积最小。与双晶晶界不同, 三角晶界模型的 3 条晶界两侧晶体的取向各不相同, 只改变晶界位置, 不影响总体孔洞变形量, 但晶界两侧的晶体取向变化会影响孔洞的增长变形。

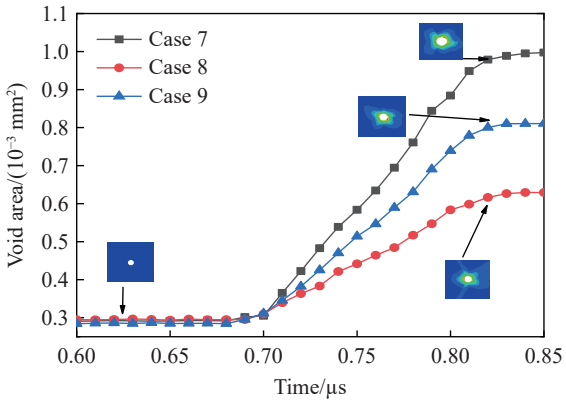
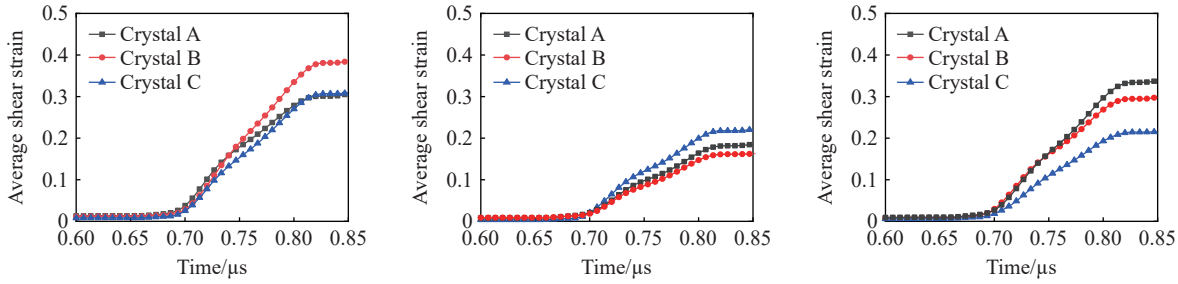


图 16　三角晶界处的孔洞面积-时间曲线

Fig. 16　Void area-time curves at the triangular grain boundaries

图 17 给出了 3 种工况下晶内平均剪切应变变化曲线, 该曲线反映了三角晶界孔洞沿各晶体的增长情况。t=0.70 μs 之前, 孔洞未发生增长变形; 0.70～0.80 μs, 孔洞快速增长, 工况 7 中孔洞沿晶体 B 的

增长速度最高, 工况 8 中孔洞沿晶体 C 的增长速度最高, 而工况 9 中孔洞沿晶体 A 的增长速度最高; 0.80～0.85 μs, 孔洞增长达到最大, 工况 7 中晶体 B 的平均剪切应变最大, 工况 8 中晶体 C 的平均剪切应变最大, 而工况 9 中晶体 A 的平均剪切应变最大。对比 3 种工况的平均剪切应变, 发现工况 7 的平均剪切应变最大, 工况 9 次之, 工况 8 最小, 3 种工况的平均剪切应变变化趋势与孔洞面积变化趋势相符。结合三角晶界剪切应力分布可知, 工况 7 中晶体 A 的剪切应力沿晶内方向, 因此, 沿晶体 A 的剪切应变高于晶体 B 和晶体 C。同理, 工况 8 和工况 9 也可以得出相同的结论。

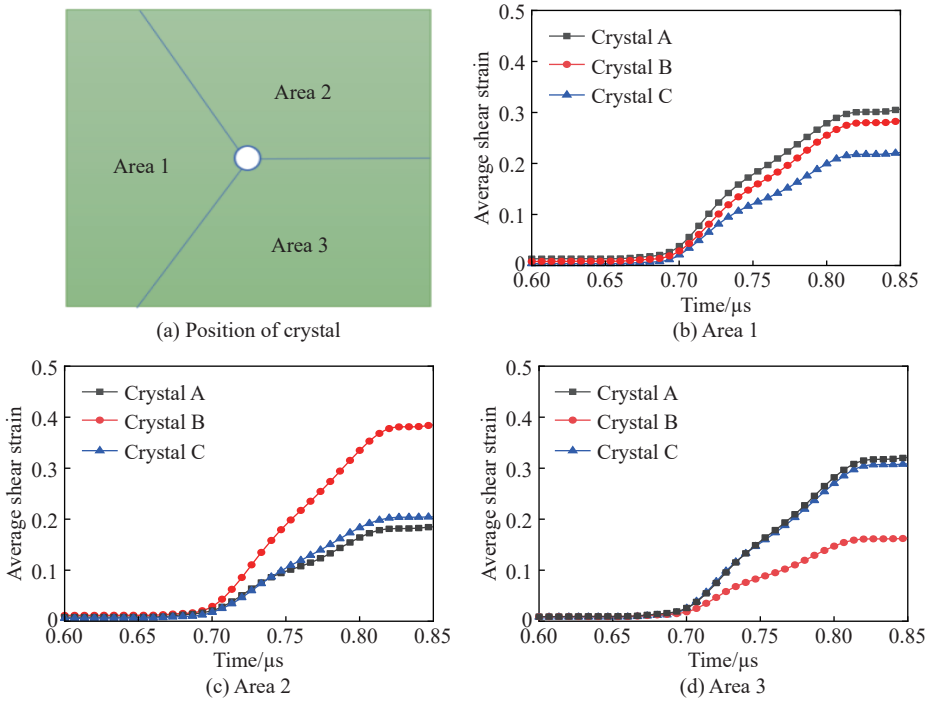


(a) Case 7　(b) Case 8　(c) Case 9

图 17　3 种工况中沿晶内的剪切应变

Fig. 17　Intragranular shear strain under three conditions

取三角晶界中的 3 个区域, 图 18 给出了同一区域处 3 种晶体的剪切应变变化曲线。可以看出: 在区域 1 处, 剪切应变增长在晶体 A 处最大, 在晶体 C 处最小; 在区域 2 处, 晶体 B 的剪切应变增长最大, 且明显高于晶体 A 和晶体 C; 在区域 3 处, 晶体 A 和晶体 C 的剪切应变增长明显高于晶体 B。对比 3 个区域可知: 晶体 A 在区域 1 和区域 3 处的剪切应变明显高于区域 2 处; 晶体 B 在区域 2 处的剪切应变最大, 在区域 3 处的剪切应变最小; 晶体 C 在区域 3 处的剪切应变最大, 在区域 2 处的剪切应变最小。3 个区域的不同之处在于晶体两侧的晶界位置不同, 分析结果可知: 区域 1 处的晶界促进了晶体 A 的孔洞增长变形, 区域 2 处的晶界促进了晶体 B 的孔洞增长变形, 区域 3 处的晶界促进了晶体 C 的孔洞增长变形。



(a) Position of crystal　(b) Area 1

(c) Area 2　(d) Area 3

图 18　晶体区域以及不同区域处的剪切应变

Fig. 18　Crystal areas and shear strain in different areas

三角晶界孔洞增长受晶体取向和晶界位置的影响，晶体取向与加载方向之间的相对位置关系决定了孔洞沿晶内的增长方向。若孔洞增长方向处于两晶界之间，晶界促进孔洞沿晶内增长；若增长方向沿晶界方向，晶界抑制孔洞沿晶内方向增长。

3　结　论

基于晶体塑性理论，研究了冲击载荷作用下晶体取向对 FCC Al 材料内部孔洞增长的影响，对单晶晶内孔洞、双晶晶界孔洞和三角晶界孔洞进行了理论分析和有限元模拟，得出如下认识。

(1) 根据 3 种孔洞的变形模型，结合晶体取向的滑移线模型、晶界位置以及加载方向，可以对晶体孔洞的增长方向和形状进行初步判断。

(2) 晶内孔洞变形受晶体取向和加载方向两方面的影响。在冲击加载下，加载方向越接近 FCC 材料的 [011] 方向，孔洞越不易增长，但孔洞增长后的变形会越大；加载方向越接近 [111] 方向，孔洞越容易增长，但孔洞增长变形越小。

(3) 晶界孔洞变形受晶体取向、晶界位置和加载方向 3 个因素的影响。当晶体取向不变，只改变晶界位置时，对孔洞总体增长的影响较小，对晶界两侧区域孔洞增长的影响较大。改变晶体取向时，孔洞增长方向会改变，如果增长方向沿晶内，晶界会促进孔洞沿晶内增长，如果增长方向沿晶界，则晶界会抑制孔洞沿晶内增长。

参考文献:

[1] ANTOUN T, CURRAN D R, RAZORENOV S V, et al. Spall fracture [M]. New York: Springer, 2003.

[2] KANEL G I. Spall fracture: methodological aspects, mechanisms and governing factors [J]. International Journal of Fracture, 2010, 163(1/2): 173–191.

[3] 林茜, 谢普初, 胡建波, 等. 不同晶粒度高纯铜层裂损伤演化的有限元模拟 [J]. 物理学报, 2021, 70(20): 204601.
LIN Q, XIE P C, HU J B, et al. Numerical simulation on dynamic damage evolution of high pure copper with different grain sizes [J]. Acta Physica Sinica, 2021, 70(20): 204601.

[4] 张凤国, 刘军, 何安民, 等. 层裂损伤孔洞增长模型参数的确定方法及其应用 [J]. 物理学报, 2020, 69(20): 204601.
ZHANG F G, LIU J, HE A M, et al. Method of determining parameters of void growth damage model and its application to simulation of spall test [J]. Acta Physica Sinica, 2020, 69(20): 204601.

[5] JIANG Z X, ZHONG Z, XIE P C, et al. Characteristics of the damage evolution and the free surface velocity profile with dynamic tensile spallation [J]. Journal of Applied Physics, 2022, 131(12): 125104.

[6] 邓小良, 祝文军, 贺红亮, 等. 沿<111>晶向冲击加载下铜中纳米孔洞增长的塑性机制研究 [J]. 高压物理学报, 2007, 21(1): 59–65.
DENG X L, ZHU W J, HE H L, et al. Plasticity mechanism associated with nano-void growth under impact loading along <111> direction in copper [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2007, 21(1): 59–65.

[7] SUN X Y, XU G K, LI X Y, et al. Mechanical properties and scaling laws of nanoporous gold [J]. Journal of Applied Physics, 2013, 113(2): 023505.

[8] RUESTES C J, BRINGA E M, STUKOWSKI A, et al. Plastic deformation of a porous bcc metal containing nanometer sized voids [J]. Computational Materials Science, 2014, 88: 92–102.

[9] RUESTES C J, BRINGA E M, STUKOWSKI A, et al. Atomistic simulation of the mechanical response of a nanoporous body-centered cubic metal [J]. Scripta Materialia, 2013, 68(10): 817–820.

[10] RODRIGUEZ-NIEVA J F, RUESTES C J, TANG Y, et al. Atomistic simulation of the mechanical properties of nanoporous gold [J]. Acta Materialia, 2014, 80: 67–76.

[11] TANG T, KIM S, HORSTEMEYER M F. Molecular dynamics simulations of void growth and coalescence in single crystal magnesium [J]. Acta Materialia, 2010, 58(14): 4742–4759.

[12] ZHANG Y Q, JIANG S Y, ZHU X M, et al. Orientation dependence of void growth at triple junction of grain boundaries in nanoscale tricrystal nickel film subjected to uniaxial tensile loading [J]. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 2016, 98: 220–232.

[13] XIANG M Z, HU H B, CHEN J, et al. Molecular dynamics simulations of micro-spallation of single crystal lead [J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2013, 21(5): 055005.
[14] XIANG M Z, HU H B, CHEN J. Spalling and melting in nanocrystalline Pb under shock loading: molecular dynamics studies [J]. Journal of Applied Physics, 2013, 113(14): 144312.
[15] SHAO J L, WANG C, WANG P, et al. Atomistic simulations and modeling analysis on the spall damage in lead induced by decaying shock [J]. Mechanics of Materials, 2019, 131: 78–83.
[16] WANG K, ZHANG F G, HE A M, et al. An atomic view on spall responses of release melted lead induced by decaying shock loading [J]. Journal of Applied Physics, 2019, 125(15): 155107.
[17] 陈伟. 晶粒尺寸对高纯铝动态力学行为与层裂特性的影响 [D]. 宁波: 宁波大学, 2020.
CHEN W. Effect of grain size on dynamic fracture behavior and spallation characteristics of high-purity aluminum [D]. Ningbo: Ningbo University, 2020.
[18] HILL R, RICE J R. Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain [J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1972, 20(6): 401–413.
[19] 李宏伟, 杨合, 孙志超. 率相关晶体塑性在有限元应用中的关键技术 [J]. 塑性工程学报, 2008, 15(1): 7–13.
LI H W, YANG H, SUN Z C. Key problems for rate-dependent crystal plasticity applied in finite element simulation [J]. Journal of Plasticity Engineering, 2008, 15(1): 7–13.
[20] 刘周攀. FCC 金属滑移变形和损伤劣化的晶体塑性有限元分析 [D]. 南宁: 广西大学, 2019.
LIU Z P. The analysis on slip deformation and damage behavior of FCC metals based on crystal plasticity finite element model [D]. Nanning: Guangxi University, 2019.
[21] 王琦, 黄庆学, 马立东. 纯铝弯曲的单晶体塑性有限元模拟 [J]. 太原科技大学学报, 2014, 35(2): 119–122.
WANG Q, HUANG Q X, MA L D. Aluminum bending of crystal plasticity finite element simmulation [J]. Journal of Taiyuan University of Science and Technology, 2014, 35(2): 119–122.

Effect of FCC Metal Crystal Orientation on Void Growth under High Strain Rate Loading

MI Xingyu, ZHONG Zheng, JIANG Zhaoxiu, WANG Yonggang

(*Key Laboratory of Shock and Safety Engineering*, *Ministry of Education*, *Ningbo University*, *Ningbo* 315211, *Zhejiang*, *China*)

Abstract: The effect of crystal orientation on the void growth in face centered cubic (FCC) metal under impact loading was studied by adopting rate-dependent crystal plastic constitutive model. VUMAT subroutine was used to embed the rate-dependent crystal plastic constitutive model into the ABAQUS finite element software, and the growth behavior of a single crystal inner void, a bicrystal boundary void and a triangular boundary void was analyzed. The results showed that the void deformation pattern is related to three factors: crystal orientation, grain boundary position (relative orientation of impact loading direction and grain boundary) and loading direction. The relation between the crystal slip line model and grain boundary position can reflect the void growth direction. For intracrystalline voids, the closer the loading direction is to [011], the later the beginning of void deformation is, the greater the overall void deformation is. The closer the loading direction is to [111], the earlier the void starts to deform, the smaller the overall void deformation. For voids at grain boundaries, the location of grain boundaries affect part of the deformation of voids, but not the overall deformation. When the deformation direction of the crystal after the impact is intracrystalline, the grain boundary promotes the growth of voids along the intracrystalline. When the deformation direction is along the grain boundary, the grain boundary promotes the growth of voids along the grain boundary, and inhibits their growth into the crystal.

Keywords: crystal plasticity; crystal orientation; intragranular pore; grain boundary pore