

AZ31 镁合金晶体塑性行为与细观非均匀变形的数值模拟

蓝永庭^{1,2}, 陆大敏¹, 刘贵龙¹, 苏莹¹, 张克实¹

(1. 广西大学 工程防灾与结构安全教育部重点实验室, 南宁 530004;

2. 广西科技大学 职业技术教育学院, 柳州 545006)

摘 要: 同时考虑滑移与孪生变形机制, 在晶体塑性理论上建立镁合金晶体本构关系, 分别提出滑移与孪生变形的硬化函数, 并考虑滑移与孪生变形间的交互作用; 结合 Voronoi 多晶集合体代表性体积单元(RVE), 对 AZ31 镁合金材料在单轴加载情形下进行数值模拟实验及细观分析。比较模拟结果与实验数据表明: 采用晶体塑性本构关系及硬化函数能够合理预测镁合金宏观屈服行为、硬化演化与多晶织构演化, 并可合理估计多晶体内的晶粒取向不均匀转动及晶粒内产生孪晶的体积分数分布。结果表明: 镁合金宏观塑性行为取决于各滑移系与孪生系竞争启动的结果; 拉伸孪生变形是引起多晶体形成强基面织构的主要原因; 孪生变形导致晶粒取向转动与孪晶体积分数在多晶体内的分布极不均匀。

关键词: AZ31 镁合金; 孪生变形; 非均匀变形; 多晶织构; 取向偏转

中图分类号: O34; TG14

文献标志码: A

Numerical simulation of plastic behavior and meso inhomogeneous deformation in AZ31 Mg alloy

LAN Yong-ting^{1,2}, LU Da-min¹, LIU Gui-long¹, SU Ying¹, ZHANG Ke-shi¹

(1. Key Laboratory of Disaster Prevent and Structural Safety, Guangxi University, Nanning 530004, China;

2. School of Vocational and Technical Education, Guangxi University of Science and Technology,
Liuzhou 545006, China)

Abstract: The constitutive relation of Mg alloy was established with the crystal plasticity theory based on the mechanisms of slip and twinning deformations. The hardening functions of slip and twinning deformations were proposed in consideration of the interaction between the slip and twinning deformation. The numerical simulation and meso analysis for AZ31 Mg alloy under the uniaxial loading were carried out using the above constitutive relation and the hardening functions associated with a representative volume element (RVE) consisting of Voronoi polycrystalline aggregation. By comparing the simulation results and the experimental data, the present method is verified feasible to predict reasonably the macroscopic yield behavior, the hardening evolution and the polycrystalline texture evolution. The reasonable estimations for inhomogeneous rotation of grain orientation and the twin volume fraction in the polycrystalline can be attained. The results show that, the macroscopic plastic behavior of Mg alloy depends on the competitive result of activation slip and twinning systems; the tension twin deformation is the primary reason to the formation of typical (0001) basal texture in the polycrystalline; and the twin deformation leads to extremely inhomogeneous distribution for the orientation deflection and the twin volume fraction in the polycrystalline.

Key words: AZ31 Mg alloy; twinning deformation; heterogeneous deformation; polycrystalline texture; orientation deflection

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(1072064, 11272094); 广西理工科学实验中心重点项目(LGZX201101); 广西科技大学科学研究基金资助项目(院科项 1074023)

收稿日期: 2014-03-21; **修订日期:** 2014-10-11

通信作者: 张克实, 教授, 博士; 电话: 0771-3235443; E-mail: zhangks@gxu.edu.cn

在常温下,由于镁的 HCP 晶体结构具有弱对称性以及活动滑移系数不足从而造成强烈的塑性各向异性及非对称性^[1]。根据 Von Mises 准则,为了满足多晶材料的任意均匀应变,必须具备 5 个独立的滑移系。理论上镁晶体可提供 5 个独立的滑移系,分别是基面滑移系(0001)〈11 $\bar{2}$ 0〉、柱面滑移系(1 $\bar{1}$ 00)〈11 $\bar{2}$ 0〉、锥面〈 a 〉型滑移系(1 $\bar{1}$ 01)〈11 $\bar{2}$ 0〉和锥面〈 $a+c$ 〉型滑移系(2 $\bar{1}$ $\bar{1}$ 2)〈2 $\bar{1}$ 13〉,但只有锥面〈 $a+c$ 〉型滑移系能够协调沿晶体 c 轴方向的应变。然而,由于室温下锥面〈 $a+c$ 〉型滑移系具有较高的临界分解剪切力(CRSS)而难以启动^[2-3],因此,常温下镁合金晶体缺乏足够的活动滑移系数。同时,机械孪生可提供额外的独立变形模式以满足塑性变形的要求,因此,孪生变形是镁及其合金塑性变形的重要变形机制^[4-5]。常见的孪生系主要有拉伸孪生系(1 $\bar{1}$ 02)〈1 $\bar{1}$ 01〉与压缩孪生系(1 $\bar{1}$ 01)〈1 $\bar{1}$ 0 $\bar{2}$ 〉。ROBERS^[6]发现拉伸孪生与压缩孪生变形导致晶体基面取向转动角度分别为 86.3°及 56.15°。刘俊伟等^[7]研究了不同加工工艺对镁合金织构形成的机理及孪晶与晶粒细化的关系;SONG 等^[8]开展了温度对孪生变形及织构演化的原位观察试验研究,结果表明随温度提高孪生体积分数减小,轧制织构变化特征消失,源于拉伸孪生在织构变化过程中发挥重要作用。上述研究表明:镁合金宏观塑性变形行为的细观变形机制主要有滑移变形与孪生变形,可以推测各滑移系与孪生系的竞争启动和组合会决定宏观塑性变形行为和多晶织构演化。

目前,滑移与孪生变形模式基本采用均匀变形假设及简单的潜硬化函数,且针对滑移与孪生变形之间交互作用的描述假设滑移位错无法穿越孪晶界,并采用 Hall-Petch 方法来考虑孪晶的硬化效应,如 WANG 等^[9]基于滑移与孪生变形机制发展了大应变弹粘塑性自洽模型,采用潜硬化函数研究了镁合金在单调加载和循环变形中的织构和孪晶演化。然而,SARKER 和 CHEN^[10]观察发现滑移位错能够侵入孪晶界而发生位错离解反应,如(10 $\bar{1}$ 2)孪生是由 c 型位错进行非平面离解产生的。YOO^[11]研究指出,当滑移线平行于孪晶面与滑移面的交线时,柱面(基面)螺旋位错有可能交叉滑移到拉伸孪晶(10 $\bar{1}$ 2)界面。且当(刃型)柱面位错与(10 $\bar{1}$ 2)孪晶界发生交互作用时,可发生带状孪生位错的增殖。在这种情况下,Hall-Petch 效应将被弱化。如果忽视这些因素的影响,将难以对多晶材料微结构演化做出准确估计。滑移与孪生变形交互作用的机制是非常复杂的,任何简单的数学描述都难以准确反映

其内在机制,因此有必要尽可能地考虑各种因素并加以描述,以尽可能地捕捉到这种交互关系的主要特征。

金属材料通常由单相或多相的众多晶粒聚合而成,其所包含的晶粒大小、形状和取向分布非常不均匀。因为以往常用的 Sachs 或 Taylor 多晶模型及自洽多晶模型在描述多晶微结构不均匀性方面存在不足,本文作者拟采用 Voronoi 方法建立多晶聚合体模型以描述多晶微结构的不均匀特性。Voronoi 多晶模型可以较为真实地反映晶粒形状和大小的随机分布,且无需假设晶粒宏观均匀变形等约束。本文作者还将考虑滑移与孪生变形的相互作用因素,提出孪生变形硬化函数,并在滑移硬化函数中引入孪晶体积分数变量,以研究孪晶扁豆状结构对滑移硬化的影响。然后,结合包含孪生变形机制的单晶本构关系,利用 Voronoi 模型,通过数值模拟探讨多晶材料变形过程中的非均匀性及宏观响应。

1 镁合金单晶的本构关系

采用由 ASARO 和 RICE^[12]提出的变形梯度乘法分解的概念,并将此概念推广到包含孪生变形的变形梯度中,即

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \cdot \mathbf{F}^p \quad (1)$$

式中: $\mathbf{F}$ 为总的变形梯度; $\mathbf{F}^e$ 为包含弹性伸长与晶格转动部分的变形梯度; $\mathbf{F}^p$ 为塑性变形梯度。

在当前构形下,假设速度梯度 $\mathbf{L}$ 由弹性速度梯度 $\mathbf{L}^e$ 和塑性速度梯度 $\mathbf{L}^p$ 所组成,即

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}^e + \mathbf{L}^p \quad (2)$$

弹性速度梯度 $\mathbf{L}^e$ 可定义为

$$\mathbf{L}^e = \dot{\mathbf{F}}^e \cdot \mathbf{F}^{e^{-1}} \quad (3)$$

式中:上标“ $\cdot$ ”表示对时间的物质导数;上标“ -1 ”表示求逆。因此,结合公式

$$\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{F}^{-1} \quad (4)$$

塑性速度梯度 $\mathbf{L}^p$ 可表示为

$$\mathbf{L}^p = \mathbf{F}^e \cdot \dot{\mathbf{F}}^p \cdot \mathbf{F}^{p^{-1}} \cdot \mathbf{F}^{e^{-1}} \quad (5)$$

考虑到滑移与孪生塑性变形机制,根据文献[13],有

$$\mathbf{L}^p = \left(1 - \sum_{\beta=1}^{N^T} f^{(\beta)} \right) \sum_{\alpha=1}^{N^S} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{S}_S^{(\alpha)} + \sum_{\beta=1}^{N^T} \dot{\gamma}^{(\beta)} \mathbf{S}_T^{(\beta)} +$$

$$\sum_{\beta=1}^{N^T} \left(f^{(\beta)} \sum_{\alpha=1}^{N^{ST}} \dot{\gamma}^{(\alpha)*} S_{ST}^{(\alpha)} \right) \quad (6)$$

式中: $\dot{\gamma}_S^{(\alpha)}$ 和 $\dot{\gamma}_{ST}^{(\alpha)}$ 分别为晶粒母体滑移系滑移剪切率与孪晶区滑移系滑移剪切率; $\dot{\gamma}_T^{(\beta)}$ 为孪生剪切应变率; f^β 为孪生系 β 的孪晶体积分数; N_S 、 N_T 及 N_{ST} 分别表示晶粒母体启动滑移系数量、启动孪生系数量及孪晶区启动滑移系数量; $S_S^{(\alpha)}$ 为晶粒母体滑移系张量; $S_T^{(\beta)}$ 为孪晶区孪生系张量; $S_{ST}^{(\alpha)}$ 为孪晶区滑移系张量, 其中

$$S_S = m_S^* n_S^* \quad (7)$$

$$S_T = m_T^* n_T^* \quad (8)$$

$$S_{ST} = m_{ST}^* n_{ST}^* \quad (9)$$

且

$$m_S^* = F^e \cdot m_{0_S} \quad (10)$$

$$n_S^* = F^{e^{-T}} \cdot n_{0_S} \quad (11)$$

$$m_T^* = F^e \cdot m_{0_T} \quad (12)$$

$$n_T^* = F^{e^{-T}} \cdot n_{0_T} \quad (13)$$

$$m_{ST}^* = R^{TW} \cdot (F^e \cdot m_{0_S}) \quad (14)$$

$$n_{ST}^* = R^{TW} \cdot (F^{e^{-T}} \cdot n_{0_S}) \quad (15)$$

式中: 上标“T”为矩阵转置。每个滑移系或孪生系都可以由滑移面或孪生面法向向量 n_0 以及滑移方向或孪生方向 m_0 来确定, 并假设在参考构形中滑移系或孪生系的(n_0 , m_0)都是已知的。

因为孪生与滑移都是在特定的晶面沿特定方向发生的剪切变形, 数学上采用相似形式描述两种变形机制是可行的。将孪生系中的孪生面法方向与剪切方向向量分别视为相应的滑移面法方向与滑移方向向量, 就可将两种变形模式结合到晶体塑性模型中。以 α 和 β 分别表示滑移模式及孪生模式, 这里采用幂指数函数描述滑移系与孪生系的变形剪切率, 如下式所示:

$$\dot{\gamma}_S^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0 \operatorname{sgn}(\tau_S^{(\alpha)}) \left| \frac{\tau_S^{(\alpha)}}{g_S^{(\alpha)}} \right|^k \quad (16)$$

$$\dot{\gamma}_T^{(\beta)} = \begin{cases} \dot{\gamma}_0 \operatorname{sgn}(\tau_T^{(\beta)}) \left(\frac{\tau_T^{(\beta)}}{g_T^{(\beta)}} \right)^k, & \tau_T^{(\beta)} > 0 \\ 0, & \tau_T^{(\beta)} \leq 0 \end{cases} \quad (17)$$

式中: $\dot{\gamma}_0$ 为均匀宏观应变率; $\tau_S^{(\alpha)}$ 、 $\tau_T^{(\beta)}$ 分别为滑移系分解剪切应力与孪生系分解剪切应力; 流动法则中

引入与局部微结构相关的临界强度或滑移阻力 $g_S^{(\alpha)}$ 和 $g_T^{(\beta)}$ 表示孪生系启动的阈值; K 为率敏感参数。

在每个晶粒中孪生系 β 孪晶体积分数 $f^{(\beta)}$ 定义为

$$f^{(\beta)} = \gamma_T^{(\beta)} / \gamma_{\text{twin}} \quad (18)$$

式中: $\gamma_T^{(\beta)}$ 为孪生系 β 累积剪切应变, 且 $\gamma_T^{(\beta)} = \left| \int \dot{\gamma}_T^{(\beta)} dt \right|$; γ_{twin} 为孪生系的理论剪切应变。

2 描述滑移与孪生硬化的函数

根据滑移系与孪生系变形特点, 其硬化率 $\dot{g}^{(\alpha)}$ 演化规律均采取公式^[14]如下所示:

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta=1}^n h_{\alpha\beta} \left| \dot{\gamma}^{(\beta)} \right| \quad (19)$$

式中: $h_{\alpha\beta}$ 为滑移或孪生硬化模量并建议采用公式

$$h_{\alpha\beta}(\gamma) = h(\gamma) [q + (1-q)\delta_{\alpha\beta}] \quad (20)$$

式中: q 是常数, 且 q 的值一般要通过多晶材料的实验数据进行拟合确定。

MARKO 等^[15]发现沿 TD 压缩加载与沿 TD 拉伸加载时由滑移变形主导的宏观变形硬化率存在明显差异, 因此, 晶粒内发生孪生变形后出现的孪晶界在一定程度上阻碍滑移位错的运动, 滑移变形硬化与孪晶界或孪晶体积分数有着密切的联系。但是滑移位错可侵入孪晶界而发生位错离解反应, 使孪晶造成的 Hall-Petch 尺寸效应被弱化。因此, 考虑孪晶因素的影响, 对滑移系的硬化模量 $h_S(\gamma)$ 可采取公式如下:

$$h_S(\gamma_S) = h_0 \operatorname{sech}^2 \left(\frac{h_0 \gamma_S}{(\tau_s - \tau_0) e^{rf}} \right) \quad (21)$$

式中: γ_S 为所有滑移系的剪切应变之总和,

$\gamma_S = \int \sum_{\alpha=1}^n \left| d\gamma_S^{(\alpha)} \right|$; h_0 为初始硬化模量; τ_0 和 τ_s 分别为初始屈服剪切应力与饱和剪切应力, 计算时 τ_0 将作为 $g^{(\alpha)}$ 的初始值; e^{rf} 为孪晶体积分数对滑移硬化演变的影响因子; e 为自然数; f 为总的孪晶体积分数, 且 $f = \sum f^{(\beta)}$; r 为耦合参数, 由实验数据拟合确定。

LOU 等^[16]发现: 在主要以滑移方式产生预变形的板中, 当前的滑移位错并没有阻碍孪生变形的产生, 且孪生变形开始阶段的硬化率随应变的增加而保持为零甚至可能出现小范围软化现象; 直到应变达到约 3% 时硬化率才开始增长, 并随应变的增加而迅速增加;

当应变到达约 6.5% 时硬化率已很大以致孪生变形无法继续, 即通常认为的孪生耗尽现象。因此, 本文作者建议孪生变形硬化模量 $h_T(\gamma)$ 采取公式如下:

$$h_T(\gamma_T) = h_0 \left(\cosh^2 \left(\frac{h_0 \gamma_T}{\tau_s - \tau_0} \right) - 1 \right) \quad (22)$$

式中: γ_T 为所有孪生系的剪切应变之总和,

$$\gamma_T = \int \sum_{\beta=1}^n |\mathrm{d}\gamma_T^{(\beta)}|。$$

3 计算案例

本文第一作者编制了上述本构模型计算的 ABAQUS 软件用户材料子程序, 用于本计算中。

为探讨镁合金宏观屈服及硬化行为与细观变形机制的关系, 采用 Voronoi 多晶集合体作为镁合金材料的代表性单元, 以考虑多晶体内晶粒尺寸、形状和取向的材料结构特征。图 1 所示为三维立方体多晶有限元模型。将模型立方体在每个方向上用八节点等参缩减积分块单元等分为 20 等份, 共计 8000 个单元; 采用 Voronoi 方法将所有单元划分为 210 个单元组, 每组代表一个晶粒, 共包含 210 个晶粒。每个晶粒均被随机赋予一个初始晶体取向, 各晶粒的取向是不同的; 用颜色加以区分, 可用以下图形表示。

考虑基面滑移系(0001) $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 、柱面 $\langle a \rangle$ 型滑移系

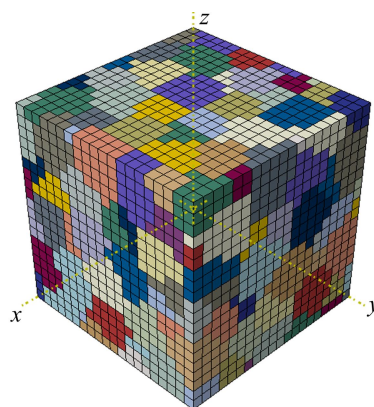


图 1 Voronoi 多晶有限元模型

Fig. 1 Voronoi polycrystal model

($1\bar{1}00$) $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 、锥面 $\langle a+c \rangle$ 型滑移系($2\bar{1}\bar{1}2$) $\langle \bar{2}113 \rangle$ 以及孪生系($1\bar{1}02$) $\langle \bar{1}101 \rangle$ 与($1\bar{1}01$) $\langle 1\bar{1}02 \rangle$ (见图 2, 表 1~2), 结合 AZ31 镁合金板材单调拉伸与压缩加载时的应力应变试验数据^[17-18], 通过数值模拟可拟合出一组材料本构模型参数, 如表 3 所列。

3.1 轧制板镁合金的拉伸与压缩模拟计算的材料初始取向与边界条件

由于轧制镁合金板通常具有强基面织构^[17-18], 即大多数晶体 c 轴平行于 ND 方向, 因此, 可给定模型中(0001)面与($10\bar{1}0$)面的初始取向, 如图 3 所示。在计算过程中, 图 1 中 x 轴、 y 轴和 z 轴分别被定义为轧

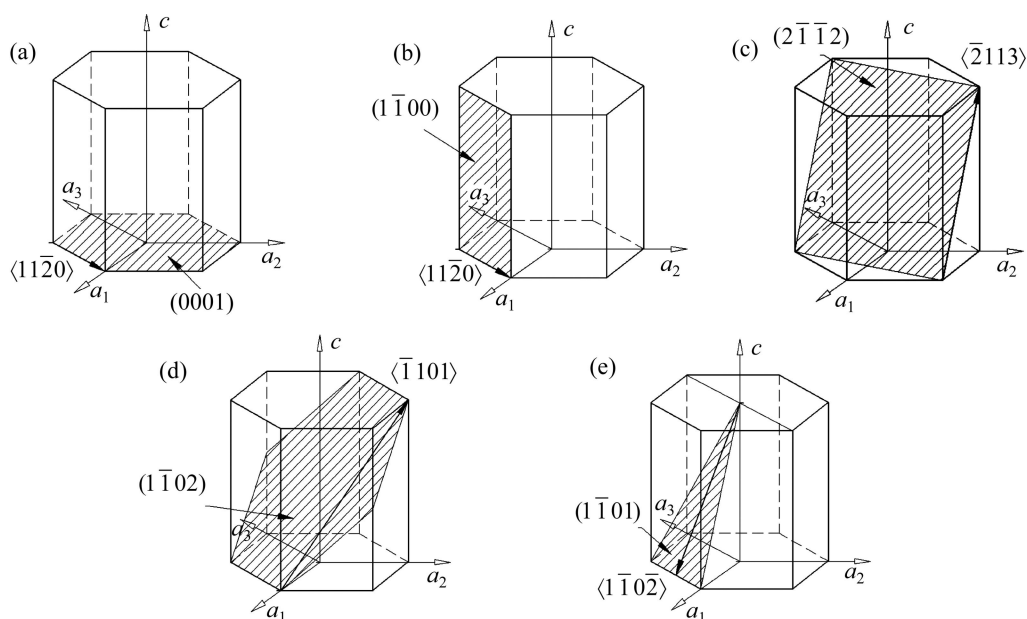


图 2 不同滑移系和孪生系示意图

Fig. 2 Schematic diagrams of different slips and twins: (a) Basal- $\langle a \rangle$ slip, (0001) $\langle 11\bar{2}0 \rangle$, 3; (b) Prismatic- $\langle a \rangle$ slip, ($1\bar{1}00$) $\langle 11\bar{2}0 \rangle$, 3; (c) Pyramidal- $\langle a+c \rangle$ slip; ($2\bar{1}\bar{1}2$) $\langle \bar{2}113 \rangle$, 6; (d) Tension twin, ($1\bar{1}02$) $\langle \bar{1}101 \rangle$, 6; (e) Compression twin, ($1\bar{1}01$) $\langle 1\bar{1}02 \rangle$, 6

表 1 AZ31 单晶各滑移系滑移面与滑移方向

Table 1 Direction and plane of slip systems for AZ31 single crystal

Slip	Coordinate	1	2	3	4	5	6
n_0	a	(0001)	(0001)	(0001)	(1 $\bar{1}$ 00)	($\bar{1}$ 010)	(0 $\bar{1}$ 10)
	b	(001)	(001)	(001)	(0.866, -0.5, 0)	(-0.866, -0.5, 0)	(0, 1, 0)
m_0	a	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	$\langle 1\bar{2}10 \rangle$	$\langle \bar{2}110 \rangle$	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	$\langle 1\bar{2}10 \rangle$	$\langle \bar{2}110 \rangle$
	b	$\langle 0.5, 0.866, 0 \rangle$	$\langle 0.5, -0.866, 0 \rangle$	$\langle -1, 0, 0 \rangle$	$\langle 0.5, 0.866, 0 \rangle$	$\langle 0.5, -0.866, 0 \rangle$	$\langle -1, 0, 0 \rangle$
Slip	Coordinate	7	8	9	10	11	12
n_0	a	(2 $\bar{1}$ $\bar{1}$ 2)	($\bar{1}$ $\bar{1}$ 22)	($\bar{1}$ 2 $\bar{1}$ 2)	($\bar{2}$ 112)	(11 $\bar{2}$ 2)	(1 $\bar{2}$ 12)
	b	(0.852, 0, 0.524)	(-0.426, -0.737, 0.524)	(-0.426, 0.737, 0.524)	(-0.852, 0, 0.524)	(0.426, 0.737, 0.524)	(0.426, -0.737, 0.524)
m_0	a	$\langle \bar{2}113 \rangle$	$\langle 11\bar{2}3 \rangle$	$\langle 1\bar{2}13 \rangle$	$\langle 2\bar{1}\bar{1}3 \rangle$	$\langle \bar{1}\bar{1}23 \rangle$	$\langle 1\bar{2}13 \rangle$
	b	$\langle -0.524, 0, 0.852 \rangle$	$\langle 0.262, 0.454, 0.852 \rangle$	$\langle 0.262, -0.454, 0.852 \rangle$	$\langle 0.524, 0, 0.852 \rangle$	$\langle -0.262, 0.454, 0.852 \rangle$	$\langle -0.262, 0.454, 0.852 \rangle$

表 2 AZ31 单晶各孪生系孪生面与孪生方向

Table 2 Direction and plane of twin systems for AZ31 single crystal

Twin	Coordinate	1	2	3	4	5	6
n_0	a	(1 $\bar{1}$ 02)	($\bar{1}$ 012)	(01 $\bar{1}$ 2)	($\bar{1}$ 102)	(10 $\bar{1}$ 2)	(0 $\bar{1}$ 12)
	b	(0.592, -0.342, 0.729)	(-0.592, -0.342, 0.729)	(0, 0.684, 0.729)	(-0.592, 0.342, 0.729)	(0.592, 0.342, 0.729)	(0, -0.684, 0.729)
m_0	a	$\langle \bar{1}101 \rangle$	$\langle 10\bar{1}1 \rangle$	$\langle 0\bar{1}11 \rangle$	$\langle 1\bar{1}01 \rangle$	$\langle \bar{1}011 \rangle$	$\langle 0\bar{1}11 \rangle$
	b	$\langle -0.632, 0.365, 0.684 \rangle$	$\langle 0.632, 0.365, 0.684 \rangle$	$\langle 0, -0.729, 0.684 \rangle$	$\langle 0.632, -0.365, 0.684 \rangle$	$\langle -0.632, -0.365, 0.684 \rangle$	$\langle 0, 0.729, 0.684 \rangle$
Twin	Coordinate	7	8	9	10	11	12
n_0	a	(1 $\bar{1}$ 01)	($\bar{1}$ 011)	(01 $\bar{1}$ 1)	($\bar{1}$ 101)	(10 $\bar{1}$ 1)	(0 $\bar{1}$ 11)
	b	(0.764, -0.441, 0.471)	(-0.764, -0.441, 0.471)	(0, 0.882, 0.471)	(-0.764, 0.441, 0.471)	(0.764, 0.441, 0.471)	(0, -0.882, 0.471)
m_0	a	(1 $\bar{1}$ 0 $\bar{2}$)	($\bar{1}$ 01 $\bar{2}$)	(01 $\bar{1}$ 2)	($\bar{1}$ 10 $\bar{2}$)	(10 $\bar{1}$ 2)	(0 $\bar{1}$ 12)
	b	$\langle -0.408, -0.235, -0.882 \rangle$	$\langle -0.408, -0.235, -0.882 \rangle$	$\langle 0, 0.471, -0.882 \rangle$	$\langle -0.408, 0.235, -0.882 \rangle$	$\langle 0.408, 0.235, -0.882 \rangle$	$\langle 0, -0.471, -0.882 \rangle$

a. Four axis coordinate in Miller-Bravais systems; b. Cartesian coordinate in $\{\mathbf{x}_M, M=1,2,3\}$.

表 3 AZ31 单晶本构模型参数

Table 3 Constitutive model parameters of AZ31 single crystal

Deformation mode	τ_0 /MPa	τ_s /MPa	h_0 /MPa	γ_0 /s ⁻¹	q	r	K
Basal- $\langle a \rangle$	10	20	100	0.001	1.4	2.2	200
Pri- $\langle a \rangle$	75	105	250	0.001	1.4	2.2	200
Pyr- $\langle a+c \rangle$	90	110	250	0.001	1.4	2.2	200
Ten-Twin	50	145	500	0.001	1.4	-	200
Com-Twin	100	155	500	0.001	1.4	-	200

制板的 RD 方向、TD 方向及 ND 方向,使大多数 c 轴方向都趋向与 z 轴(ND)方向对齐。模型的边界条件:设 $x=0$ 、 $y=0$ 及 $z=0$ 这 3 个平面的法向位移为零;在单调拉伸情况下,在平面 $x=1$ 施加一个 x 方向的均匀拉伸位移,拉伸至终了时该方向名义应变达 20%;在单调压缩情况下,在平面 $x=1$ 施加一个 x 方向的均匀压

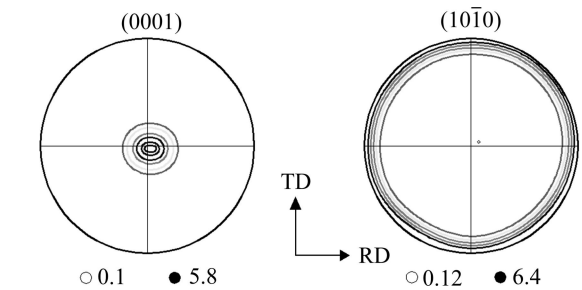


图 3 镁合金轧制板初始织构

Fig. 3 Initial textures of AZ31 Mg alloy sheet

缩位移,终了时该方向名义应变也是 20%。在上述条件下进行计算,可分析单调拉伸与压缩的应力应变响应及屈服强度的不对称性。

3.2 挤压棒与轧制板成形模拟的材料初始取向与边界条件

挤压棒与轧制板是常见的变形镁合金材料。对挤

压棒的成形过程,可采用等双轴压缩近似模拟挤压棒中心轴附近的变形行为。而轧制板的成形,则接近平面应变压缩的变形过程。在模拟成形过程之前,先赋予多晶体随机初始取向织构,如图 4 所示。在等双轴压缩模型中,图 1 中的 x 轴、 y 轴及 z 轴分别被定义为挤出棒的 RD 方向、TD 方向及 ED 方向。不同模型的边界条件介绍如下。对于挤压棒挤出过程,可设 $x=0$ 、 $y=0$ 及 $z=0$ 这 3 个平面的法向位移为零;在平面 $x=1$ 与 $y=1$ 上分别施加 x 方向与 y 方向的均匀压缩应变,压缩终了时挤出方向名义应变为 20%。用上述边界条件可模拟分析挤压棒挤出过程中的织构演化趋势及应力应变响应。而对平面压缩应变过程,则定义 x 轴、 y 轴及 z 轴分别为轧制板的 RD 方向、TD 方向及 ND 方向,设 $x=0$ 与 $x=1$ 、 $y=0$ 、 $z=0$ 这 3 个平面的法向位移为零;在平面 $z=1$ 上施加 z 方向的均匀压缩应变,终

了时该方向名义应变为 20%。

4 结果与讨论

4.1 织构演化分析

上述加载情形终了时加载方向上应变分布云图如图 5 所示。从总体来看,每种情形应变的空间分布都非常不均匀,如挤压棒成形中的应变最大值达到 37%,而最小值只有 3.5%(见图 5(c)),应变的变化范围很大,其他情形也类似。

图 6 和 7 所示为轧制板在 RD 方向拉伸和压缩加载后形成的多晶织构。尽管初始织构一样,但拉伸与压缩变形后的织构演化都有不同的特征。在拉伸情形,有少量(0001)织构由取向极图中心发生了明显地上下偏转约 56.15° ,这主要是由压缩孪生变形引起少部分物质点发生取向突变的结果,如图 6(a)所示。(10 $\bar{1}$ 0)织构也形成了具有明显特征的织构,对比 AKHTAR 等^[18]通过板材拉伸试验得到的织构演化,结果是类似的(见图 6(b))。在压缩情形,如图 7(a)所示,(0001)织构已全部由中心位置向左右两侧偏转约 86.3° ,而(10 $\bar{1}$ 0)织构则形成类似“双肾”型的织构。这一变化则由拉伸孪生变形引起的,与文献^[18]实验结果相吻合(见图 7(b))。图 8 和 9 所示分别为挤压棒与轧制板成形后的多晶织构,从织构图上看,两种变形情形的多晶织构看似存在较大差别。在挤压情形,(0001)基

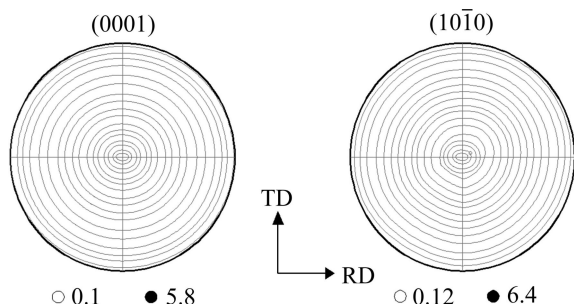


图 4 镁合金材料随机初始织构

Fig. 4 Random initial textures of AZ31 Mg alloy

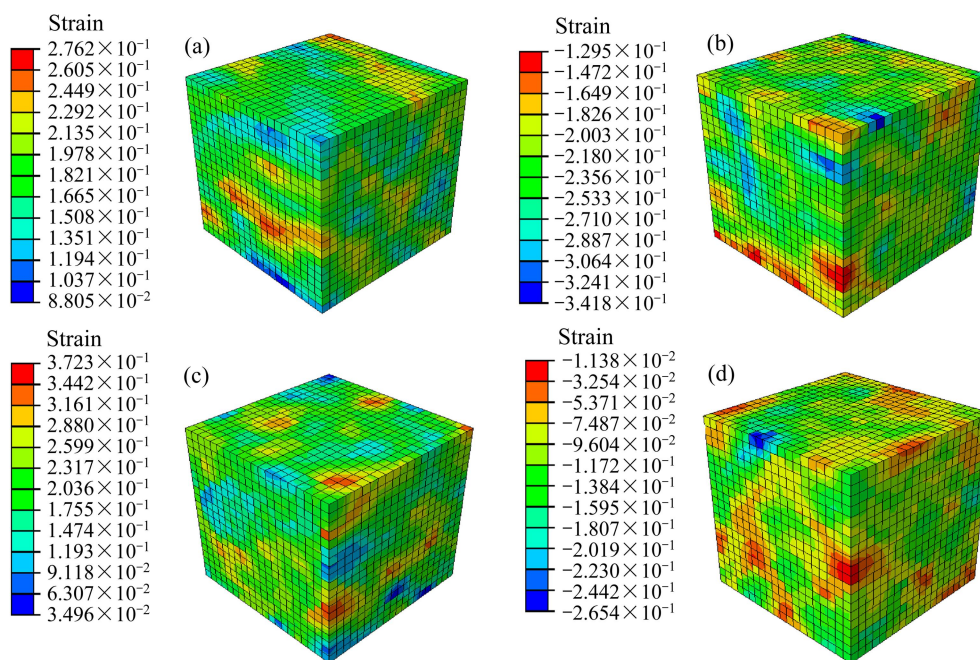


图 5 各种加载情形终了时加载方向的应变云图

Fig. 5 Contours of loading direction strain at end of different loading statuses: (a) Sheet tension; (b) Sheet compression; (c) Extrusion; (d) Rolling

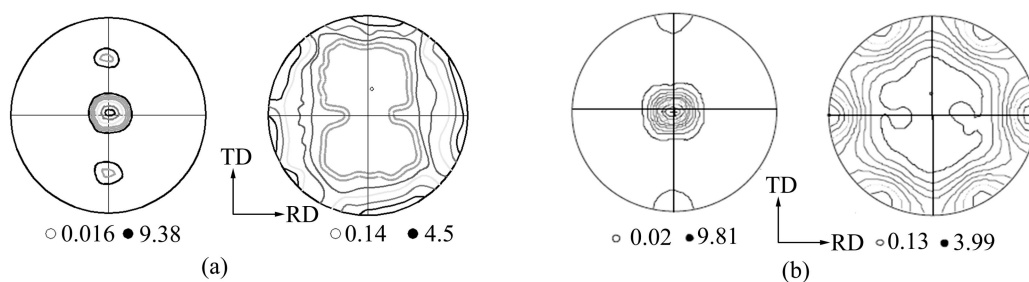
图 6 拉伸名义应变达 20%后的(0001)与 $(10\bar{1}0)$ 极图^[18]

Fig. 6 (0001) (left) and $(10\bar{1}0)$ (right) pole figures for tension after nominal strain of 20%: (a) Predicted texture; (b) Measured texture^[18]

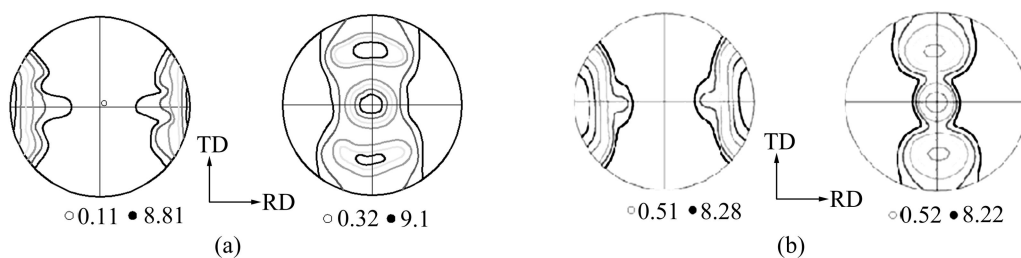
图 7 压缩名义应变达 20%后的(0001)与 $(10\bar{1}0)$ 极图^[18]

Fig. 7 (0001) (left) and $(10\bar{1}0)$ (right) pole figures for compression after nominal strain of 20%: (a) Predicted texture; (b) Measured texture^[18]

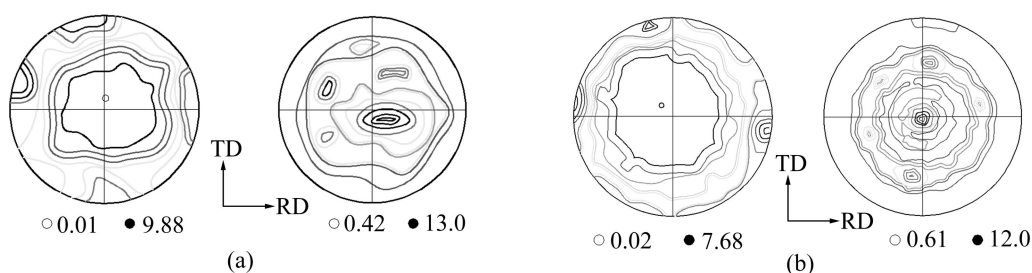
图 8 挤压名义应变达 20%后的(0001)与 $(10\bar{1}0)$ 极图^[19]

Fig. 8 (0001) (left) and $(10\bar{1}0)$ (right) pole figures for extrusion after nominal strain of 20%: (a) Predicted texture; (b) Measured texture^[19]

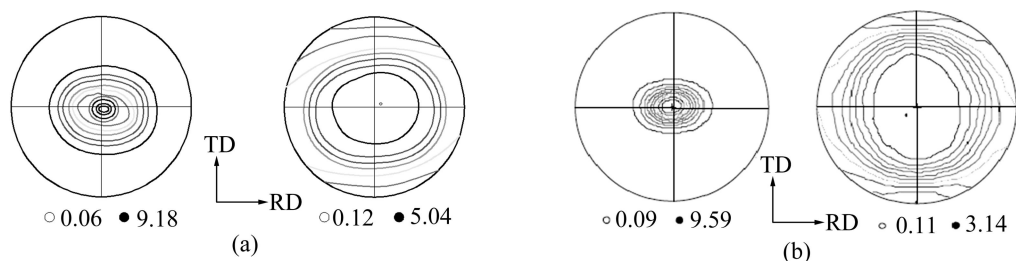
图 9 轧制(平面压缩)名义应变达 20%后的(0001)与 $(10\bar{1}0)$ 极图^[18]

Fig. 9 (0001) (left) and $(10\bar{1}0)$ (right) pole figures for rolling (plane compression) after nominal strain of 20%: (a) Predicted texture; (b) Measured texture^[18]

面随应变倾向于平行 ED, 也就是说, (0001)基面法向随应变倾向于向平行 TD 或 RD 偏转^[19](见图 8(b)). 在轧制情形, (0001)基面法向随应变倾向于向平行 ND

偏转^[18], 如图 9(b)所示。分析发现: (0001)基面法向偏转的共同特点是向加载方向偏转, 最终使(0001)法向趋于平行加载方向。这一结果主要是由拉伸孪生促

使晶向偏转 86.3°和大量基面滑移引起弹性偏转交互作用的结果。

综合以上分析,表明孪生变形的启动会造成晶体织构发生取向突变,突变角度取决于孪生类型,即拉伸孪生为 86.3°,压缩孪生为 56.15°。值得指出的是孪生变形造成晶体织构发生取向突变是变形镁合金形成强基面织构的主要因素,而滑移变形引起的织构变化则是连续和缓慢的。

4.2 轧制板拉伸与压缩宏观行为及差异的细观原因

图 10 所示为镁合金轧制板材的拉伸与压缩宏观应力-应变曲线,以及各滑移系与孪生系相对活动强度关于应变的演化情况。关于各变形系的相对活动强度演化由下式来定义:

$$Ra^{\gamma,G} = \frac{\int_0^t \dot{\gamma}^{\gamma,G} dt}{\int_0^t \left(\sum_{\gamma} \dot{\gamma}^{\gamma,G} \right) dt} \quad (23)$$

式中: $Ra^{\gamma,G}$ 为某组滑移系或孪生系的相对活动强度; $\dot{\gamma}^{\gamma,G}$ 为某组滑移系或孪生系平均变形剪切率。

对比两种加载情形,首先两者宏观塑性行为存在较大的差异,拉伸情形的屈服应力可达到约 160 MPa,而压缩情形的屈服应力仅约为 110 MPa。屈服后的塑性硬化行为也有所区别。拉伸情形的塑性硬化在开始屈服阶段迅速上升,当宏观应力达到约 180 MPa 时硬化率快速减小,随后应力缓慢增加,直至饱和状态。而压缩情形的塑性硬化率在开始屈服阶段几乎为零,曲线出现一段接近水平的线段,随后随应变的增加硬

化率缓慢提高,提高到一定程度后又缓慢下降,直到应力饱和。KNEZEVIC 等^[17]给出了镁合金轧制板拉伸试样和压缩试样的实验结果,结果呈现出与上述宏观塑性行为相似的特征,为本文模型和计算的合理性提供了一个验证。以上宏观行为的差异,可以通过细观变形机制的竞争启动分析找到其中原因。在拉伸情形的变形过程中,宏观行为主要由柱面滑移系 $\text{prismatic}\langle a \rangle$ 所控制,并伴随少量基面滑移系与压缩孪生系的启动,因此,主要表现为滑移硬化行为。而在压缩情形的变形过程中,宏观行为主要由拉伸孪生系、柱面滑移系 $\text{prismatic}\langle a \rangle$ 及基面滑移系所组合控制,表现为近似无硬化行为,随应变的增加及孪生耗尽;随后的硬化行为由柱面滑移系 $\text{prismatic}\langle a \rangle$ 控制,但由于柱面滑移系 $\text{prismatic}\langle a \rangle$ 启动受到孪晶结构严重影响,其硬化行为变得与拉伸情形不同。

4.3 轧制板拉伸与压缩晶向转动及孪晶体分数非均匀性

图 11 所示为多晶内部(0001)基面偏转角的统计分布,图 12 所示为孪生变形体积分数的统计分布。由图 11(a)可见,拉伸情形下超过 90%晶粒基面偏转角处在 10°以下,只有少量晶粒(小于 10%)偏转角约为 58°,表明多数晶粒主要经历了滑移变形,只有少数晶粒同时经历(压缩)孪生变形,使取向发生 56.15°的突然偏转。由图 12(a)可见,多晶体中少数晶粒发生了压缩孪生,而拉伸孪生没有发生。从图 7 所示的织构可见,少数晶粒取向发生了突变,与图 12(a)所示少量晶体发

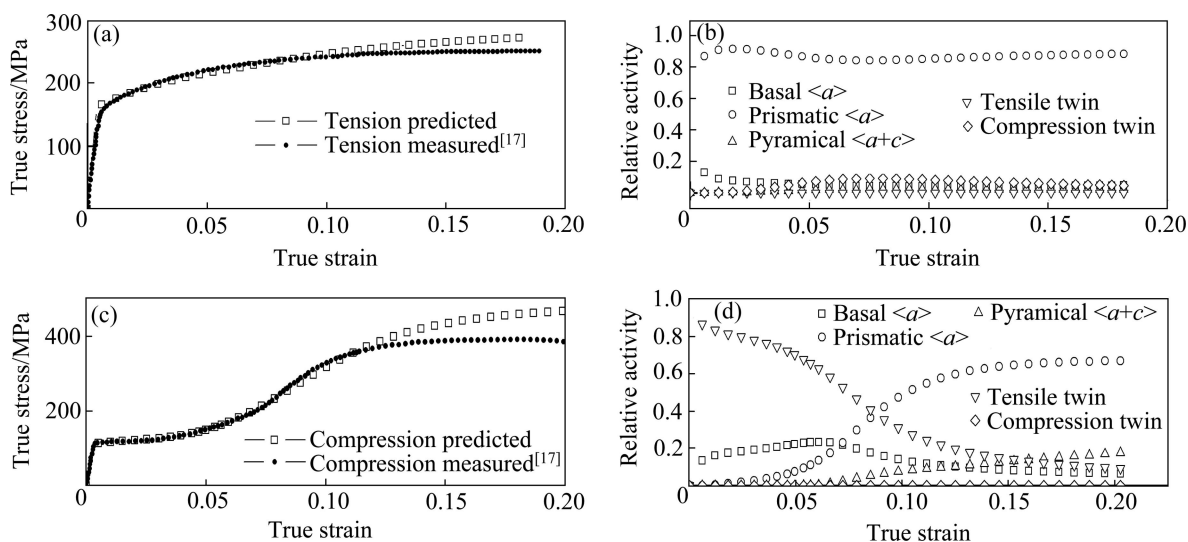


图 10 拉伸与压缩宏观应力-应变曲线以及各变形模式的相对活动强度

Fig. 10 Numerically simulated stress-strain curves and relative activity of deformation modes: (a), (b) Monotonic tension; (c), (d) Monotonic compression

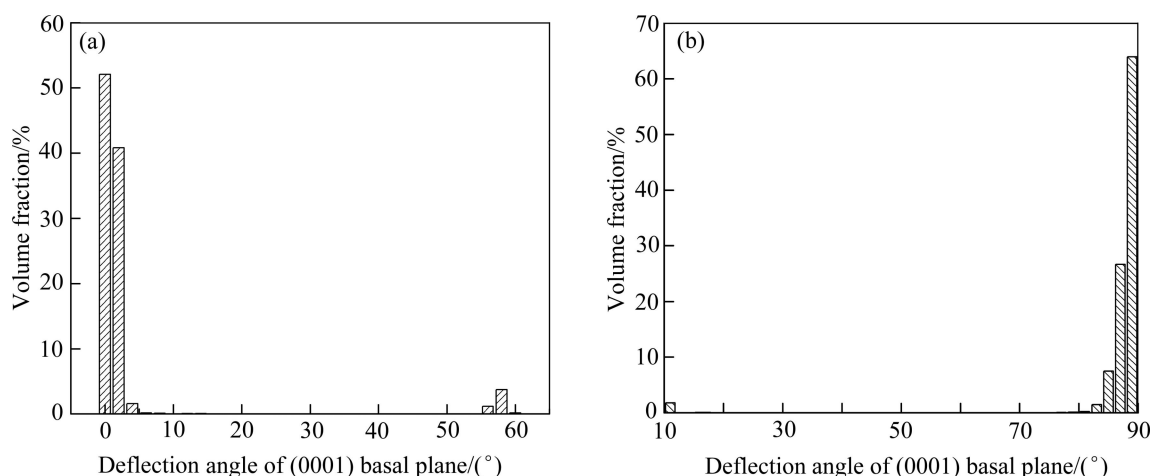


图 11 当名义应变达 20%后代表性单元内(0001)取向偏转角度的统计分布

Fig. 11 Statistical column diagrams for deflection angle of (0001) orientation in RVE after nominal strain of 20%: (a) Monotonic tension; (b) Monotonic compression

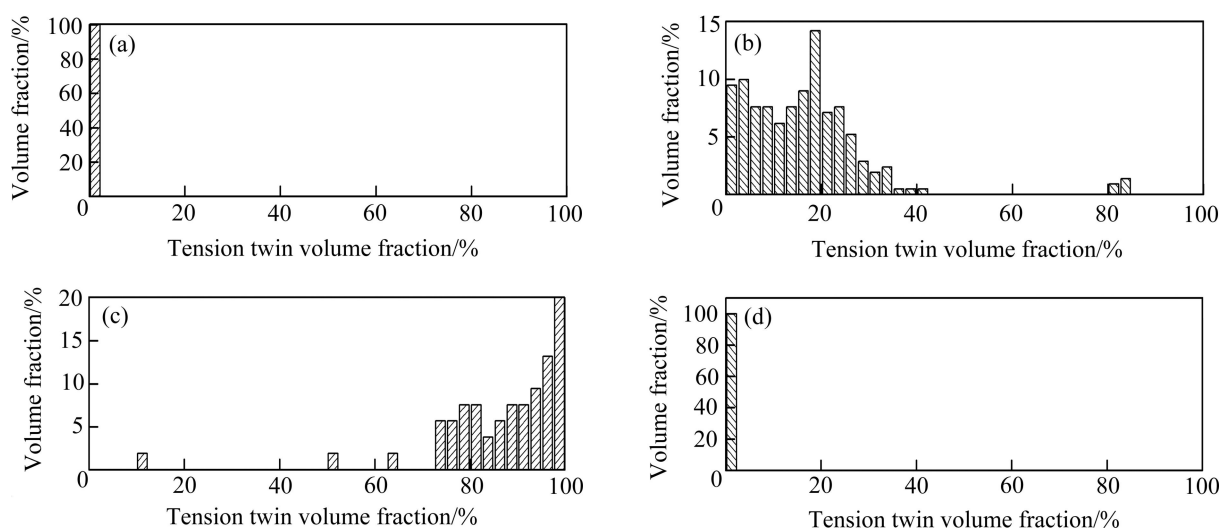


图 12 当名义应变达 20%后代表性单元内拉伸孪晶与压缩孪晶的统计直方图

Fig. 12 Statistical column diagram for tension twin and compression twin in RVE after nominal strain 20%: (a), (b) Monotonic tension; (c), (d) Monotonic compression

生压缩孪生的情况相吻合。

由图 11(b)可见, 压缩情形下大部分晶粒基面偏转角在 $81^{\circ}\sim 90^{\circ}$ 间发生不均匀转动, 表明大部分晶粒经历了滑移与(拉伸)孪生变形, 使晶体取向发生大幅度偏转, 从而形成一种强基面织构。图 12(b)所示为拉伸与压缩孪生体积分数的统计分布情况, 表明多数晶粒的拉伸孪晶体积分数都达到了 80% 以上, 而压缩孪生的体积分数接近为零。

综上所述, 多晶材料宏观塑性行为受到晶体织构演化的重要影响, 而织构演化的趋势则取决于细观变形机制竞争的结果, 且由于滑移系与孪生系启动组合

不同造成微观结构(晶体取向偏转和孪晶体积分数)非均匀演化结果有较大的差别。值得指出的是, 各晶粒内由于孪晶的存在使晶粒取向由单一织构变成复合织构, 从而进一步促使多晶体微观结构非均匀化加剧发展, 导致镁合金多晶材料表现出强烈的各向异性。

5 结论

1) 同时考虑滑移与孪生硬化的晶体塑性本构模型, 结合多晶集合体代表性单元对 AZ31 多晶材料塑

性变形进行数值模拟。模拟结果重现了晶体宏观屈服及硬化演化与多晶织构演化的实验现象。并能够合理预测多晶体晶粒取向不均匀转动及晶粒内产生孪晶的体积分数分布,揭示了宏观行为与细观变形机制的内在联系。

2) 对镁合金宏观屈服及硬化演化与滑移及孪生变形的关系分析表明:宏观塑性行为取决于各滑移系与孪生系竞争启动的结果,合理描述滑移变形与孪生变形机制是准确估计晶体宏观塑性行为的基础。

3) 多晶织构模拟实验表明:孪生变形是引起变形镁合金多晶体发生强基面织构的主要原因,经历孪生变形的晶粒基面取向通常倾向于转动到与加载方向平行的状态。

4) 随机织构的镁合金多晶体经历变形后会形成强烈的基面织构,由于晶粒取向呈占优分布及孪生变形的极性性质,造成多晶体塑性各向异性及不对称性显著,因此,变形镁合金通常都表现出明显的各向异性性质及拉压不对称特征。

REFERENCES

- [1] JIANG J, GODFREY A, LIU W, LIU Q. Microtexture evolution via deformation twinning and slip during compression of magnesium alloy AZ31[J]. *Mater Sci Eng A*, 2008, 483/484: 576–579.
- [2] AGNEW S R, YOO M H, TOME C N. Application of texture simulation to understanding mechanical behavior of Mg and solid solution alloys containing Li or Y[J]. *Acta Materialia*, 2001, 49: 4277–4289.
- [3] 胡水平, 王 哲. 织构和晶粒尺寸对 AZ31 镁合金薄板成形性能的影响[J]. *中国有色金属学报*, 2012, 22(9): 2424–2429.
HU Shui-ping, WANG Zhe. Effects of texture and grain size on press formability of AZ31 magnesium alloy sheets[J]. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*, 2012, 22(9): 2424–2429.
- [4] LIN X Z, CHEN D L. Strain controlled cyclic deformation behavior of an extruded magnesium alloy[J]. *Mater Sci Eng A*, 2008, 496: 106–113.
- [5] WU L, AGNEW S R, REN Y, BROWN D W, CLAUSEN B, STOICA G M, WENK H R, LIAW P K. The effects of texture and extension twinning on the low-cycle fatigue behavior of a rolled magnesium alloy, AZ31B[J]. *Mater Sci Eng A*, 2010, 527: 7057–7067.
- [6] ROBERTS C S. *Magnesium and its alloys*[M]. New York: John Wiley & Sons, 1960.
- [7] 刘俊伟, 陈振华, 陈 鼎, 李贵发. 孪生对热轧 AZ31 镁合金中低温变形行为的影响[J]. *航空材料学报*, 2011, 32(1): 10–14.
LIU Jun-wei, CHEN Zhen-hua, CHEN Ding, LI Gui-fa. Effect of twinning on moderate-temperature deformation behavior of hot-rolled Mg alloy[J]. *Journal of Aeronautical Materials*, 2011, 32(1): 10–14.
- [8] SONG G S, ZHANG S H, ZHANG L, RUAN L Q. Twinning, grain orientation and texture variation of AZ31 Mg alloy during compression by EBSD tracing[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2011, 509: 6481–6488.
- [9] WANG H, WU P D, WANG J. Modeling inelastic behavior of magnesium alloys during cyclic loading-unloading[J]. *International Journal of Plasticity*, 2013, 47: 49–64.
- [10] SARKER D, CHEN D L. Detwinning and strain hardening of an extruded magnesium alloy during compression[J]. *Scripta Materialia*, 2012, 67: 165–168.
- [11] YOO M H. Interaction of slip dislocations with twins in hcp metals[J]. *Trans Metal Soc AIME*, 1969, 245: 2051–2060.
- [12] ASARO R J, RICE J R. Strain localization in ductile single crystals[J]. *J Mech Phys Solids*, 1977, 25: 309–338.
- [13] KALIDINDI S R. Incorporation of deformation twinning in crystal plasticity models[J]. *J Mech Phys Solids*, 1998, 46(2): 267–290.
- [14] PAN J, RICE J R. Rate sensitivity of plastic flow and implications for yield surface vertices[J]. *Int J Solids Struct*, 1983, 19: 973–987.
- [15] KNEZEVIC M, LEVINSON A, HARRIS R, MISHRA R K, DOHERTY R D, KALIDINDI S R. Deformation twinning in AZ31: Influence on strain hardening[J]. *Acta Materialia*, 2010, 58: 6230–6242.
- [16] LOU X Y, LI M, BOGER R K, AGNEW S R, WAGONER R H. Hardening evolution of AZ31B Mg sheet[J]. *International Journal of Plasticity*, 2007, 23 (1): 44–87.
- [17] KNEZEVIC M, LEVINSON A, HARRIS R, MISHRA R K, DOHERTY R D, KALIDINDI S R. Deformation twinning in AZ31: Influence on strain hardening and texture evolution[J]. *Acta Materialia*, 2010, 58: 6230–6242.
- [18] AKHTAR S K, AMIT PANDEY, THOMAS G H, MISHRA R K. Mechanical response and texture evolution of AZ31 alloy at large strains for different strain rates and temperatures[J]. *International Journal of Plasticity*, 2011, 27: 688–706.
- [19] MAYAMA T, NODA M, CHIBA R, KURODA M. Crystal plasticity analysis of texture development in magnesium alloy during extrusion[J]. *International Journal of Plasticity*, 2011, 27: 1916–1935.

(编辑 王 超)