DOI: 10.11883/bzycj-2018-0084

基于晶体塑性理论研究铝材料高压高应变率下的强度特性*

潘 昊,王升涛,吴子辉,胡晓棉
(北京应用物理与计算数学研究所,北京 100094)

摘要: 为了了解金属材料在极端加载下复杂动态响应过程中的多种机制和效应,重点针对 Al 材料在高压、高应变率加载下的塑性变形机制,在经典晶体塑性模型的基础上,对其中的非线性弹性、位错动力学和硬化形式进行改进,建立适用于高压、高应变率加载下的热弹-黏塑性晶体塑性模型。该模型可以较好地描述单晶铝和多晶铝材料屈服强度随压力的变化过程,相比宏观模型,用该模型还获得了多晶 Al 材料在冲击加载下的织构演化规律,揭示了织构择优取向行为和压力的关系。

关键词: 晶体塑性理论;高应变率;欧拉弹性方程;织构演化
中图分类号: O346.3 **国标学科代码:** 1301520 **文献标志码:** A

金属材料在军事、航空航天、汽车等领域有广泛的应用,它在冲击加载条件下的弹塑性变形行为一直被关注。冲击加载条件下,材料往往受到强烈的载荷作用,处于高压、高应变率状态,动态力学特性与静态存在显著差别[1-2]。随着检测技术的发展,发现金属材料在高速加载下具有复杂的动力学响应特征,如:单晶 Al 材料在极端加载条件下可能会发生孪晶[3],多晶 Al 材料的强度在高应变率 $10^4\ s^{-1}$ 以上的加载下会大幅增加[4]。另外,也发现在动态加载下金属材料的织构也会随着加载方向及载荷水平发生变化[5]。

为了从理论上描述金属材料在动态加载条件下的力学行为,早期研究基于对实验数据的数学归纳建立了多种宏观本构模型,如 MTS 模型、JC 模型、SG 模型等[6-8],但这些模型中基本没有考虑材料的微结构及其演化,没有从材料塑性变形的物理本质上描述材料的动力学行为,很难普适地描述材料在不同加载条件下的动力学行为。为此,越来越多的本构模型尝试从材料塑性变形的微观机理出发,对位错运动、孪晶演化和硬化机制进行描述,并通过体积平均、自洽场平均等平均化方法得到宏观应力和应变、应变率、温度等参数的关系[9-11]。晶体塑性理论就是其中的代表,且已成为研究材料准静态力学行为的重要方法[12]。该方法从描述晶体的滑移系运动过程出发,将材料的宏观塑性变形和微观的位错运动相联系。但该方法对材料在高速变形下弹性变形过程及位错运动描述不够准确,主要原因包括:(1)大多只考虑应力张量与应变张量的线性关系,这种处理方法适用于体积应变比较小、压力小于 1 GPa、温度为常温的情况。在冲击加载下,晶体绝热压缩且有熵增,温升较高,并且体应变相对较大,此时线弹性假设就不再适用,需要考虑温度对弹性变形的影响。(2)位错动力学模型较为简单,指数型经验形式的位错动力学方程只适用于准静态或低应变率加载的情况,对于高压、高应变率加载并不适用。(3)硬化形式考虑不充分,以前的模型大多只考虑了应变硬化,未考虑压力的硬化和温度的软化过程。

针对这些不足,已经开展了一定研究,包括:Clayton[13] 基于欧氏应变,通过对三阶弹性常数进行变换,实现了更高压力下的晶体弹性变形过程的描述;Austin 等[14] 和 Mayer 等[15] 分别提出了适用于冲击加载下位错运动和增值过程的演化方程;Lloyd 等[16] 采用一维差分方法,对单晶和多晶 Al 材料的冲击

* **收稿日期:** 2018-03-16; **修回日期:** 2018-05-24
基金项目: 科学挑战专题(TZ2018001);国家自然科学基金(11702031)
第一作者: 潘 昊(1979—),男,博士,副研究员,pan_hao@iapcm.ac.cn;
通信作者: 胡晓棉(1963—),女,博士,研究员,博士生导师,hu_xiaomian@iapcm.ac.cn。

波传播过程进行了模拟。这些研究为基于晶体塑性理论描述材料冲击加载下的力学性能变化提供了有益的帮助，但也存在如位错动力学部分描述过于复杂、只有基于一维加载过程的建模、缺乏对更高压力加载下材料强度及织构演化过程的描述等缺点。

本文中，基于经典晶体塑性理论，针对金属材料在高压、高应变率下的塑性变形特点，采用高阶的欧拉弹性方程和更合理的位错动力学模型和硬化模型，建立充分考虑材料微结构演化的热弹-黏塑性理论模型。和传统的晶体塑性模型相比，本文中的模型不仅能更准确地描述材料在高压下的动态力学行为，也更适用于更大的应变率范围。采用该模型也研究了单晶、多晶 Al 材料在高压、高应变率加载下强度变化特征和织构演化规律。

1　热弹-黏塑性晶体塑性模型

晶体塑性理论已经有了多种研究框架[17-19]，本文中在 Kalidindi 等[20]的晶体塑性模型基础上，针对高压、高应变率的加载情况，采用高阶欧拉弹性方程，同时考虑热激活和声子拖曳的位错运动模型，并考虑加工硬化，压力硬化和温度软化，建立了单晶体的热弹-黏塑性晶体塑性模型。

晶体的变形梯度张量可以分解为弹性变形和塑性变形两部分[20]：

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

式中：$\boldsymbol{F}_{\mathrm{e}}$ 和 $\boldsymbol{F}_{\mathrm{p}}$ 分别表示弹性和塑性部分的变形梯度张量。塑性变形梯度的演化可以表示为：

$$\dot{\boldsymbol{F}}_{\mathrm{p}}=\boldsymbol{L}_{\mathrm{p}}\boldsymbol{F}_{\mathrm{p}} \tag{2}$$

式中：$\boldsymbol{L}_{\mathrm{p}}$ 为塑性速度梯度张量。只考虑位错滑移对塑性变形的贡献，则：

$$\boldsymbol{L}_{\mathrm{p}}=\sum_{\alpha}\dot{\gamma}^{\alpha}\boldsymbol{S}_{0}^{\alpha} \tag{3}$$

式中：$\boldsymbol{S}_{0}^{\alpha}=\boldsymbol{m}_{0}^{\alpha}\otimes\boldsymbol{n}_{0}^{\alpha}$，$\boldsymbol{m}_{0}^{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{n}_{0}^{\alpha}$ 表示α-滑移系的滑移方向和滑移面法向，⊗表示外积，对于 Al 材料，其滑移系为{111}＜110＞，共 12 个。

1.1　弹性变形方程

欧氏应变的定义为：

$$\boldsymbol{D}^{\mathrm{E}}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{F}_{\mathrm{E}}^{-1}\boldsymbol{F}_{\mathrm{E}}^{-\mathrm{T}}) \tag{4}$$

基于欧氏应变，同时考虑熵增 $\Delta\eta$ 对应力的影响，第二 Piola-Kirchhoff 应力张量为[13]：

$$\boldsymbol{\Sigma}=\left(\bar{\boldsymbol{C}}_{2}+\frac{1}{2}\boldsymbol{D}^{\mathrm{E}}:\bar{\boldsymbol{C}}_{3}\right):\boldsymbol{D}^{\mathrm{E}}-T_{0}\Delta\eta(\bar{\boldsymbol{\Gamma}}+\bar{\boldsymbol{\Gamma}}_{2}:\boldsymbol{D}^{\mathrm{E}}) \tag{5}$$

式中：$\bar{\boldsymbol{C}}_{2}$、$\bar{\boldsymbol{C}}_{3}$ 是欧氏应变下的二阶和三阶弹性常数，T_{0} 是参考温度，$\bar{\boldsymbol{\Gamma}}$ 和 $\bar{\boldsymbol{\Gamma}}_{2}$ 分别是一阶和二阶 Grüneisen 常数。相应的 Cauchy 应力可以表示为：

$$\boldsymbol{\sigma}=\frac{1}{\|\boldsymbol{F}_{\mathrm{E}}\|}(\boldsymbol{F}_{\mathrm{E}})^{-\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}(\boldsymbol{F}_{\mathrm{E}})^{-1} \tag{6}$$

采用的 Al 材料欧氏应变下的二、三阶弹性参数分别为[13]：$\bar{C}_{11}=108.2$ GPa，$\bar{C}_{12}=61.3$ GPa，$\bar{C}_{44}=28.5$ GPa，$\bar{C}_{111}=205$ GPa，$\bar{C}_{112}=-73$ GPa，$\bar{C}_{123}=36$ GPa，$\bar{C}_{144}=98$ GPa，$\bar{C}_{166}=-59$ GPa，$\bar{C}_{456}=55$ GPa；一、二阶 Grüneisen 常数分别为[21]：$\bar{\Gamma}_{1}=2.3$，$\bar{\Gamma}_{11}=2.3$，$\bar{\Gamma}_{12}=11.5$，$\bar{\Gamma}_{44}=0$。

1.2　位错动力学

1.2.1　位错运动

位错运动及演化过程是晶体滑移变形的核心过程，位错滑移运动的控制机制包括短程作用和长程作用。所谓短程作用是指克服由位错交互作用所形成的障碍，晶格的热振动过程有助于克服该障碍，此时的位错运动受热激活过程控制。长程作用是指位错、析出相质点和晶界等引起的长程内应力，此时的位错运动主要受声子的拖曳作用[22]。同时考虑热激活机制和声子拖曳机制时，位错滑移的平均速率可以表示为：

$$\bar{v}=\frac{\lambda}{t_{\mathrm{TA}}+t_{\mathrm{D}}} \tag{7}$$

式中：λ 是材料内部长程作用的长度，为 0.1～10 μm；t_{TA} 是热激活过程特征时间，t_{D} 是声子拖曳的特征时间。根据 Arrhenius 方程：

$$t_{\mathrm{TA}}=v_{\mathrm{e}}^{-1}\exp(\Delta G/(kT)) \tag{8}$$

式中：v_{e} 是有效的越过障碍的频率，k 是玻尔兹曼常数，ΔG 是活化自由能。ΔG 可以表示为：

$$\Delta G=G(p,T)b^3g_0\left[1-\left(\frac{\tau}{\hat{\tau}}\right)^p\right]^q \tag{9}$$

式中：$G(p,T)$ 是剪切模量，b 是伯格斯矢量的大小，g_0 为正则化的总自由能系数，τ 表示剪应力，$\hat{\tau}$ 表示剪应力阈值，该方程需要 $\tau\leqslant\hat{\tau}$，p、q 控制着障碍的形状，$p=q=1$，$p=1/2$、$q=3/2$ 都是常用的障碍形状。

在声子拖曳机制下，位错平均滑移速度 $\bar{v}_{\mathrm{D}}$ 的控制方程为[23]：

$$m_0\frac{\mathrm{d}\bar{v}_{\mathrm{D}}}{\mathrm{d}t}=b(\tau-\bar{\tau})\left[1-\left(\frac{\bar{v}_{\mathrm{D}}}{c_{\mathrm{t}}}\right)^2\right]^{3/2}-B\bar{v}_{\mathrm{D}} \tag{10}$$

式(10)等号右边第一项表示引起位错拖曳的力，第二项表示摩擦，其中 m_0 是单位长度位错的剩余质量，$c_{\mathrm{t}}=\sqrt{G/\rho}$ 是横波声速，$\bar{\tau}$ 是材料长程非热部分对强度的贡献，B 是声子的摩擦系数。B 有多种形式，这里采用[14]：

$$B=\frac{4k\theta_{\mathrm{D}}^2T}{h^2c_{\mathrm{b}}^3} \tag{11}$$

式中：θ_{D} 是德拜温度，h 是普朗克常数，c_{b} 是体波声速。通常情况下，m/B 约为 10^{11} s^{-1}，$\bar{v}_{\mathrm{D}}$ 的平衡时间为纳秒量级，所研究的时间尺度为微秒量级，此种条件下，可近似认为 $\bar{v}_{\mathrm{D}}$ 达到平衡，即式(10)等号左边为零，则声子拖曳引起的平均位错滑移速度为：

$$\left(\frac{\bar{v}_{\mathrm{D}}}{c_{\mathrm{t}}}\right)^2=1-\frac{(2/3)^{1/3}\zeta}{\varphi}+\frac{\varphi}{18^{1/3}} \tag{12}$$

$$\varphi=\left(-9\zeta+\sqrt{81\zeta^2+12\zeta^3}\right)^{1/3},\qquad \zeta=\left[\frac{Bc_{\mathrm{t}}}{(\tau-\bar{\tau})b}\right]^2 \tag{13}$$

式(7)可以改写为：

$$\bar{v}=\frac{\bar{v}_{\mathrm{D}}}{v_{\mathrm{D}}/v_{\mathrm{TA}}+1} \tag{14}$$

式中：$\bar{v}_{\mathrm{TA}}=v'\exp(-\Delta G/(kT))$，$v'=\lambda v_{\mathrm{e}}$。

1.2.2　位错演化

冲击加载下，材料会产生更多的位错，根据位错理论，并非所有的位错都对滑移系的剪切应变有影响，位错可分为可动和非可动位错两部分。各部分的增值及湮灭过程如下[15,24]：

$$\frac{\mathrm{d}\rho_{\mathrm{D}}^{\alpha}}{\mathrm{d}t}=Q_{\mathrm{D}}^{\alpha}-Q_{\mathrm{I}}^{\alpha}-Q_{\mathrm{Da}}^{\alpha} \tag{15}$$

$$\frac{\mathrm{d}\rho_{\mathrm{I}}^{\alpha}}{\mathrm{d}t}=Q_{\mathrm{I}}^{\alpha}-Q_{\mathrm{Ia}}^{\alpha} \tag{16}$$

$$Q_{\mathrm{D}}^{\alpha}=\frac{\eta}{\varepsilon_{\mathrm{D}}}\rho_{\mathrm{D}}^{\alpha}\tau^{\alpha}v^{\alpha}b \tag{17}$$

$$Q_{\mathrm{I}}^{\alpha}=v_{\mathrm{I}}(\rho_{\mathrm{D}}^{\alpha}-\rho_0)\sqrt{\rho_{\mathrm{I}}^{\alpha}} \tag{18}$$

$$Q_{\mathrm{Da}}^{\alpha}=k_{\mathrm{a}}b|v^{\alpha}|\rho_{\mathrm{D}}^{\alpha}(\rho_{\mathrm{D}}^{\alpha}+\rho_{\mathrm{I}}^{\alpha}/4)+\rho_{\mathrm{D}}^{\alpha}|v^{\alpha}|/d \tag{19}$$

$$Q_{\mathrm{Ia}}^{\alpha}=k_{\mathrm{a}}b|v^{\alpha}|\rho_{\mathrm{D}}^{\alpha}\rho_{\mathrm{I}}^{\alpha}/4 \tag{20}$$

式中：ρ_{I} 是非可动位错密度，ρ_{D} 是可动位错密度，η 为经验系数，一般取 $\eta=0.1$，$\varepsilon_{\mathrm{D}}=8$ eV/b，v_{I} 是位错合并时的特征速度，d 表示材料的平均晶粒尺寸，k_{a} 是位错湮灭因子。

1.2.3　硬化

根据 Taylor 关系[25]，材料的剪切力与位错满足：

$$\hat{\tau}=\tau_\beta+\beta Gb\sqrt{\rho_{\mathrm{I}}},\qquad \rho_{\mathrm{I}}=\sum_\beta\rho_{\mathrm{I}}^\beta \tag{21}$$

式中：τ_β 是初始状态下应力值，与晶格的阻碍和材料的夹杂相关，β 表征位错纠缠的长程相互作用系数，G 为剪切模量。根据 SG 本构模型，有：

$$G=G_0[1+dpV^{1/3}-h(T-300)] \tag{22}$$

以上模型所采用的参数分别为：$\lambda=0.1\sim10\ \mu\mathrm{m}$[22]，$k=1.38\times10^{-23}$ J/K，$v_{\mathrm{e}}=10^{10}\sim10^{11}\ \mathrm{s}^{-1}$[22]，$b=2.86\times10^{-7}$ mm[14]，$g_0=0.65$[14]，$\rho=2.7\ \mathrm{g/cm^3}$，$\theta_0=427$ K，$h=6.626\times10^{-34}$ J·s，$c_{\mathrm{b}}=5\ 150$ m/s，$\eta=0.1$，$\varepsilon_{\mathrm{D}}=8\ \mathrm{eV}/b$[16,24]，$v_{\mathrm{I}}=5\ \mathrm{m/s}$[24]，$\rho_0=10^{-7}\ \mathrm{cm^{-1}}$[24]，$k_{\mathrm{a}}=10$[24]，$d=10\ \mu\mathrm{m}$[24]，$\beta=1.638$[14]，$G_0=25.2$ GPa，$\tau_\beta=27.627$ GPa[14]。

1.3　多晶本构模型

由晶体塑性模型可以给出各个晶粒的物理性质(应力应变结果)，将各晶粒的应力应变关系扩展至多晶，则需要满足多晶材料取向分布特征的同时，还要满足晶粒与晶粒之间变形协调条件和晶界处的应力平衡条件。本文中所用求解方法包括 Taylor 模型和晶体塑性有限元模型，两种模型的具体实现过程如下。

1.3.1　Taylor 模型[26]

令所有的晶粒在加载过程中拥有同样的变形梯度，根据样品初始的织构分布函数，给出每个晶粒的初始取向(ϕ_0，θ_0，ω_0)及旋转矩阵 $\boldsymbol{Q}_0$，通过旋转变化计算各个晶体的初始弹性常数和 Grüneisen 系数等，再由单晶体的晶体塑性方程，求解每个晶粒在当前变形梯度下的应力及新的取向(ϕ，θ，ω)，令总的应力为多个晶粒的平均，就可以得到多晶材料的应力应变关系：

$$\bar{\sigma}=\frac{1}{V}\sum_{k=1}^{N}V_k\sigma_k \tag{23}$$

式中：N 为需要统计的晶粒数，V 为各晶粒的体积。该模型比较适合于简单加载条件，满足变形协调条件，但并不满足应力平衡条件。相关研究[27-28]表明，对于 FCC、HCP 多晶材料的简单拉伸及压缩变形问题，在不考虑晶粒间的滑移作用下，Taylor 模型中所作的假设仍近似成立，获得的应力应变关系和织构演化与其他模型的结果基本一致。

1.3.2　晶体塑性有限元模型(crystal plasticity finite element method，CPFEM)[20]

将晶体塑性模型作为有限元程序的一个材料模块，1 个晶粒可以由 1 个或多个单元构成，通过有限元计算，获得多晶体材料在边界载荷的作用下，整体和局部的变形以及与其他介质的相互作用。在计算过程中，可通过改变界面之间的滑移线(面)类型，模拟晶粒之间的相互作用如滑移、摩擦等。为简单起见，本文中假设晶粒与晶粒是束缚滑移，暂不考虑晶粒之间的滑移作用。有限元方法保证了计算单元之间是满足变形协调和应力平衡的，因此该模型中各晶粒之间也满足变形协调和应力平衡条件。CPFEM 能够灵活地施加边界条件，较为适用于多晶材料的复杂冲击-卸载问题。

2　结果与讨论

2.1　位错速度与剪应力的关系

采用上述同时考虑热激活效应和声子拖曳效应的模型计算了 Al 材料的位错滑移速度和剪应力之间的关系，并将结果和实验结果以及只考虑热激活效应、只考虑声子拖曳效应的模型的计算结果进行了对比，如图 1 所示。

本文模型的计算得到的位错滑移速度在 100～400 MPa 的压力下都能和实验结果较好吻合，而只考虑热激活效应或声子拖曳效应，所得位错滑移速度将不能很好吻合实验结果。若只考虑热激活效应，在剪应力较低时，计算得到的位错速度与实验结果较为接近；但当剪应力较大时，模型计算得到的位错速度偏高，和实验结果之间的差距随着剪应力的增加而逐渐变大，甚至可以超过剪切波速，与物理规律不符。若只考虑拖曳效应，在剪应力较低时，模型计算得到的位错速度较实验结果明显偏高。

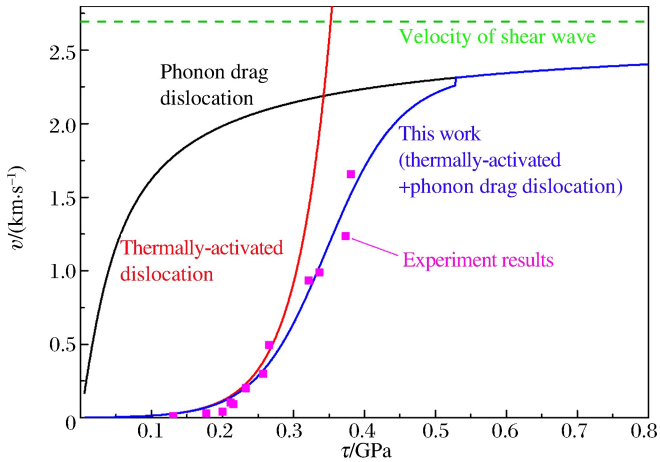


图 1　不同模型的 Al 材料位错滑移速度和剪应力及与实验结果比较

Fig. 1　Dislocation glide speed-shear stress curves of Al materials by different theoretical models compared with experimental results

2.2　Al 材料剪切强度

采用上述模型，模拟了单晶铝材料在<100>、<110>和<111>加载方向上的剪切强度随压力变化的情况，加载应变率为 10^5 s^{-1}。计算得到的剪切强度随加载压力的关系如图 2 所示，图中散点为文献[29]的实验数据，可见本文中计算的不同压力下单晶 Al 材料的剪应力与实验结果符合较好。另外，当 Al 材料发生塑性变形后，不同加载方向的剪切强度都随压力的增加而单调增加。但在相同加载压力下，不同加载方向的剪切强度大小不同，其中<100>加载方向上剪切强度最低，<110>方向上剪切强度最高，<111>方向上的剪切强度介于两者之间。可见，即使对于对称性较高的 FCC 晶体，其单晶材料也具有明显的各向异性。

进一步，在获得单晶材料力学特性的基础上，采用 Taylor 假设，模拟了 500 个晶粒(随机取向)的多晶 Al 材料剪切强度随加载压力的变化，如图 3 所示。加载条件为一维应变加载，$D(2,2)=10^5$ s^{-1}，即只在 y 方向受压，而其余方向为固支约束。由图 3 可见，本文中模拟的剪切强度-压力的关系与实验结果[30-31]符合较好。另外，图 3 中还给出了 Austin 等[32]的计算结果，图中点划线和虚线分别表示其模型预测的 Al 材料剪切强度的上下界。和该模型相比，本文模型采用了高阶欧拉应变描述材料的弹性变形，能更准确地描述高压下的剪切强度。综合来看，本文发展的热弹-黏塑性晶体塑性模型能比较准确地预测 Al 材料在高压、高应变率加载条件下的力学行为。

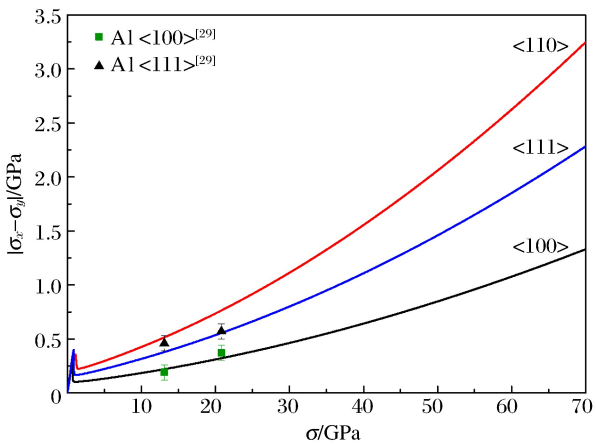


图 2　单晶 Al 材料剪切强度随加载压力的变化

Fig. 2　Effect of loading pressure on shear strength of single-crystal Al materials

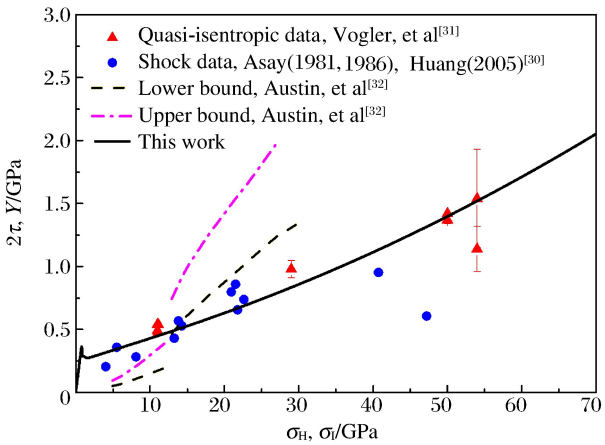


图 3　多晶 Al 材料剪切强度随加载压力的变化

Fig. 3　Effect of loading pressure on shear strength of polycrystalline Al materials

2.3　织构演化规律

采用上述晶体塑性模型，对一维应变冲击加载下 Al 材料织构的变化情况进行了研究，加载条件仍为 $D(2,2)=10^5\ \mathrm{s}^{-1}$。图 4 是 500 个晶粒{101}方向上织构（初始为随机织构）随加载压力的变化情况，可见随着加载压力的增加，织构发生了一定程度的变化，特别是当加载压力大于 20 GPa 后，织构的变化更为明显。这表明，即使只有一个方向能够变形，在冲击加载下，Al 材料的晶体同样会发生旋转，出现晶体择优取向的现象。更深层次上，导致晶体旋转的主要原因是剪切变形，在一维应变冲击加载下，有效塑性变形应约占总变形的 2/3，当压力较高、相应的剪切变形较大时，晶体的择优取向效应更明显。

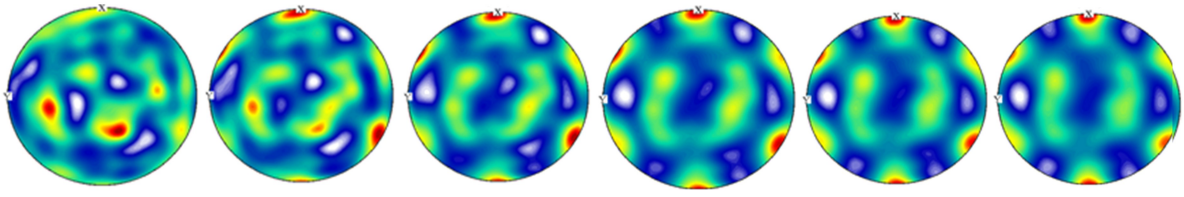


图 4　多晶 Al 材料不同加载压力下的织构演化结果

Fig. 4　Texture evolution of polycrystalline Al materials under different loading pressures

3　结　论

针对典型金属材料在高温、高压加载条件下的力学响应，基于晶体塑性理论建立了热弹-黏塑性晶体塑性模型。该模型同时考虑了热激活效应和声子拖曳效应，并采用了适用于中高应变率加载的位错运动及硬化方程，能更加准确地描述金属材料在不同加载压力下的弹塑性变形过程。采用该模型研究了加载方向对单晶铝材料剪切强度的影响，结果表明单晶铝材料具有明显的各向异性。最后，研究了多晶 Al 材料在冲击加载条件下织构的演化过程，发现即使在较低的压力下，织构也会发生择优取向，在更高的压力下，织构的择优取向更加明显。本文中所做的研究主要针对以位错滑移为主要变形机制的 Al 材料，尚未考虑孪晶等其他塑性变形机制，将在后续研究中予以考虑。

参考文献：

[1]　JOHNSON W. Impact strength of materials[M]. London: Edward Arnold, 1972.

[2]　MEYERS M A. Dynamic behavior of materials[M]. New York: John Wiley & Sons, 1994.

[3]　ZHAO F, WANG L, FAN D, et al. Macro-deformation twins in single-crystal aluminum[J]. Physical Review Letters, 2016,116(7):075501. DOI:10.1103/PhysRevLett.116.075501.

[4]　VOGLER T J. On measuring the strength of metals at ultrahigh strain rates[J]. Journal of Applied Physics, 2009, 106(5):053530. DOI:10.1063/1.3204777.

[5]　ZHAO Z, MAO W, ROTERS F, et al. A texture optimization study for minimum earing in aluminium by use of a texture component crystal plasticity finite element method[J]. Acta Materialia, 2004,52(4):1003-1012. DOI:10.1016/j.actamat.2003.03.001.

[6]　SALVADO F C, TEIXEIRA-DIAS F, WALLEY S M, et al. A review on the strain rate dependency of the dynamic viscoplastic response of FCC metals[J]. Progress in Materials Science, 2017,88:186-231. DOI:10.1016/j.pmatsci.2017.04.004.

[7]　刘旭红，黄西成，陈裕泽，等. 强动载荷下金属材料塑性变形本构模型评述[J]. 力学进展，2007,37(3):361-374.
LIU Xuhong, HUANG Xicheng, CHEN Yuze, et al. A review on constitutive models for plastic deformation of metal materials under dynamic loading[J]. Advances in Mechanics, 2007,37(3):361-374.

[8]　朱建士，胡晓棉，王裴，等. 爆炸与冲击动力学若干问题研究进展[J]. 力学进展，2010,40(4):400-423.
ZHU Jianshi, HU Xiaomian, WANG Pei, et al. A review on research progress in explosion mechanics and impact dynamics[J]. Advances in Mechanics, 2010,40(4):400-423.

[9] 杨卫.细观力学和细观损伤力学[J].力学进展，1992，22(1)：1-9.
YANG Wei. Meso-mechanics and meso-damage mechanics[J]. Advances in Mechanics, 1992,22(1):1-9.

[10] 白以龙，汪海英，夏蒙棼，等.固体的统计细观力学-连接多个耦合的时空尺度[J].力学进展，2006，36(2)：286-305.
BAI Yilong, WANG Haiying, XIA Mengfen, et al. Statistical mesomechanics of solid, linking coupled multiple space and time scales[J]. Advances in Mechanics, 2006,32(2):286-305.

[11] ZERILLI F J, ARMSTRONG R W. Dislocation-mechanics-based constitutive relations for material dynamics calculations[J]. Journal of Applied Physics, 1987,61(5):1816-1825. DOI:10.1063/1.338024.

[12] ASARO R J. Crystal plasticity[J]. Journal of Applied Mechanics, 1983,50(4b):921-934.

[13] CLAYTON J D. Nonlinear Eulerian thermoelasticity for anisotropic crystals[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2013,61(10):1983-2014. DOI:10.1016/j.jmps.2013.05.009.

[14] AUSTIN R A, MCDOWELL D L. A dislocation-based constitutive model for viscoplastic deformation of FCC metals at very high strain rates[J]. International Journal of Plasticity, 2011,27(1):1-24. DOI:10.1016/j.ijplas.2010.03.002.

[15] MAYER A E, KHISHCHENKO K V, LEVASHOV P R, et al. Modeling of plasticity and fracture of metals at shock loading[J]. Journal of Applied Physics, 2013,113(19):193508. DOI:10.1063/1.4805713.

[16] LLOYD J T, CLAYTON J D, BECKER R, et al. Simulation of shock wave propagation in single crystal and polycrystalline aluminum[J]. International Journal of Plasticity, 2014,60:118-144. DOI:10.1016/j.ijplas.2014.04.012.

[17] MA A, ROTERS F, RAABE D. A dislocation density based constitutive model for crystal plasticity FEM including geometrically necessary dislocations[J]. Acta Materialia, 2006,54(8):2169-2179. DOI:10.1016/j.actamat.2006.01.005.

[18] ROTERS F, EISENLOHR P, HANTCHERLI L, et al. Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications[J]. Acta Materialia, 2010,58(4):1152-1211. DOI:10.1016/j.actamat.2009.10.058.

[19] MARIN E B, DAWSON P R. On modelling the elasto-viscoplastic response of metals using polycrystal plasticity [J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 1998,165(1):1-21. DOI:10.1016/S0045-7825(98)00034-6.

[20] KALIDINDI S R, BRONKHORST C A, ANAND L. Crystallographic texture evolution in bulk deformation processing of FCC metals[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1992,40(3):537-569. DOI:10.1016/0022-5096(92)80003-9.

[21] THOMAS J F. Third-order elastic constants of aluminum[J]. Physical Review, 1968,175:955-962. DOI:10.1103/PhysRev.175.955.

[22] FOLLANSBEE P S, KOCKS U F. A constitutive description of the deformation of copper based on the use of the mechanical threshold stress as an internal state variable[J]. Acta Metallurgica, 1988,36(1):81-93. DOI:10.1016/0001-6160(88)90030-2.

[23] KRASNIKOV V S, MAYER A E, YALOVETS A P. Dislocation based high-rate plasticity model and its application to plate-impact and ultra-short electron irradiation simulations[J]. International Journal of Plasticity, 2011,27(8):1294-1308. DOI:10.1016/j.ijplas.2011.02.008.

[24] BORODIN E N, MAYER A E. Structural model of mechanical twinning and its application for modeling of the severe plastic deformation of copper rods in Taylor impact tests[J]. International Journal of Plasticity, 2015,74:141-157. DOI:10.1016/j.ijplas.2015.06.006.

[25] TAYLOR G I. The mechanism of plastic deformation of crystals: Part I. Theoretical[J]. Proceedings of the Royal Society of London: Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character, 1934,145(855):362-387. DOI:10.1098/rspa.1934.0106.

[26] TAYLOR G I. Plastic strain rate in metals[Z]. Twenty-eight May Lecture to the Institute of Metals, 1938.

[27] KALIDINDI S R, BRONKHORST C A, ANAND L. On the accuracy of the Taylor assumption in polycrystalline plasticity[M]// Anisotropy and localization of plastic deformation. Springer Netherlands, 1991:139-142.

[28] HARTLEY C S, DAWSON P R, BOYCE D E, et al. A comparison of deformation textures and mechanical properties predicted by different crystal plasticity codes[R]. Air Force Research Laboratory, Materials and Manufacturing Directorate, 2008.

[29] HUANG H, ASAY J R. Reshock and release response of aluminum single crystal[J]. Journal of Applied Physics, 2007,101(6):063550. DOI:10.1063/1.2655571.

[30] MAYER A E, KHISHCHENKO K V, LEVASHOV P R, et al. Modeling of plasticity and fracture of metals at shock loading[J]. Journal of Applied Physics, 2013,113(19):193508. DOI:10.1063/1.4805713.

[31] VOGLER T J, AO T, ASAY J R. High-pressure strength of aluminum under quasi-isentropic loading[J]. International Journal of Plasticity, 2009,25(4):671-694. DOI:10.1016/j.ijplas.2008.12.003.

[32] AUSTIN R A, MCDOWELL D L. Parameterization of a rate-dependent model of shock-induced plasticity for copper, nickel, and aluminum[J]. International Journal of Plasticity, 2012,32:134-154. DOI:10.1016/j.ijplas.2011.11.002.

On strength of aluminum under high pressure and high strain rate based on crystal plasticity theory

PAN Hao, WANG Shengtao, WU Zihui, HU Xiaomian

(*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing* 100094, *China*)

Abstract: Dynamic behaviors of metal materials are very complex under extreme loading conditions such as high pressure and high strain rate loading. Actually, many mechanisms and effects are contained in the dynamic response of metal materials. In this paper, a thermoelastic-viscoplastic crystal plasticity model is developed to study the plastic deformation of aluminum (Al) materials under high pressure and high strain rate loading. In the model for single crystal, both the thermally-activated mechanism and the phonon drag mechanism are considered for dislocation glide which make the model applicable for a much wide deformation rate range. In addition, the density of the mobile and immobile dislocation is formulated according to the annihilation and multiplication mechanism. A general harden model is utilized to take strain harden, pressure harden and temperature soften into consideration. Moreover, a high-order Euler elastic equation is adopted to describe the non-linear elastic deformation of the materials in large elastic deformation. Furthermore, based on the model developed for single crystal plastic deformation, a polycrystalline model is developed according to the Taylor model and the crystal plasticity finite element method, respectively. The dislocation glide speed in Al materials is predicted by the model and the results agree quite well with the experimental results in a wide shear stress range because both thermally-activated mechanism and phonon drag mechanism are considered for dislocation glide. With the model, the shear strengths of both single crystal and polycrystalline are predicted, and it is found out that the shear strength of Al materials increases with increasing of the load pressure. Besides, significant anisotropy of the shear strength is revealed for single crystal Al materials although it is a typical FCC crystal with high symmetry. Finally, texture evolution of polycrystalline Al materials is studied with the model and the preferred orientation effect of the crystal is found for different loading pressures. Moreover, the preferred orientation effect is more significant for high loading pressure.

Keywords: crystal plasticity theory; high strain rate; Euler elastic equation; texture evolution

(责任编辑　丁　峰)