

表面机械研磨处理对纯铜棘轮行为的影响： 宏微观试验与本构模拟

杨康¹, 赵建锋², 何风¹, 阚前华^{3a}, 赵君文^{3b}, 张旭^{3a}

(1. 中国核动力研究设计院 核反应堆系统设计技术重点实验室, 成都 610213;
2. 中国工程物理研究院 总体工程研究所, 四川 绵阳 621999; 3. 西南交通大学 a. 力学与
航空航天学院 应用力学与结构安全四川省重点实验室 b. 材料科学与工程学院, 成都 610031)

摘要: **目的** 通过金属表面纳米化试验机制备出梯度结构纯铜, 提升纯铜材料的疲劳寿命, 并揭示其背后的机理。**方法** 通过系统的宏观力学性能测试、微观组织表征以及本构模拟探究了表面机械研磨处理 (Surface Mechanical Attrition Treatment, SMAT) 对 T2 纯铜棘轮行为的影响。**结果** 循环变形试验结果表明 SMAT 纯铜样品的循环失效圈数明显多于未处理纯铜样品的循环圈数, 且 SMAT 纯铜样品在循环过程中的累积塑性变形明显小于未处理纯铜样品的累积塑性变形, 即棘轮应变明显小于未处理纯铜样品的棘轮应变。电子背散射衍射 (Electron Back Scattered Diffraction, EBSD) 和 X 射线衍射分析 (X-Ray Diffraction, XRD) 表征发现: 经过 SMAT 后, 材料的晶粒尺寸均呈现由处理表面到材料芯部逐渐减小的梯度分布。且 SMAT 时间越长, 样品的总位错密度越大。此外, 基于应变梯度塑性理论模型对 SMAT 前后纯铜的单拉及循环变形响应进行了有限元模拟, 模拟结果显示累积塑性应变沿深度方向 (SMAT 冲击方向) 呈梯度分布, 最大几何必需位错密度以及最大等效应力均出现在模型的次表层。同时, 当模拟的循环圈数相同时, 代表 SMAT 样品的梯度结构模型的棘轮应变明显低于代表未处理样品的均匀模型的棘轮应变。**结论** 循环变形试验结果表明 SMAT 对于 T2 纯铜的棘轮应变有抑制作用, 有限元模拟进一步揭示了 SMAT 对于棘轮应变的抑制效应以及背后的机理。

关键词: 表面机械研磨处理; 循环变形; 棘轮应变; 微观表征; 应变梯度塑性理论; 有限元模拟

中图分类号: TG356.28 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-3660(2022)11-0058-12

DOI: 10.16490/j.cnki.issn.1001-3660.2022.11.006

Effect of the Surface Mechanical Attrition Treatment on the Ratcheting of Pure Copper: Macro/Micro-tests and Constitutive Modeling

YANG Kang¹, ZHAO Jian-feng², HE Feng¹, KAN Qian-hua^{3a}, ZHAO Jun-wen^{3b}, ZHANG Xu^{3a}

(1. Science and Technology on Reactor System Design Technology Laboratory, Nuclear Power Institute of China,

收稿日期: 2022-07-15; 修订日期: 2022-10-26

Received: 2022-07-15; Revised: 2022-10-26

基金项目: 国家自然科学基金面上项目 (11872321、11672251)

Fund: National Natural Science Foundation of China (General Program) (11872321, 11672251)

作者简介: 杨康 (1996—), 男, 助理工程师, 主要研究方向为反应堆结构力学。

Biography: YANG Kang (1996-), Male, Assistant engineer, Research focus: reactor structural mechanics.

通讯作者: 张旭 (1985—), 男, 博士, 教授, 主要研究方向为多尺度材料力学。

Corresponding author: ZHANG Xu (1985-), Male, Doctor, Professor, Research focus: multiscale mechanics of materials.

引文格式: 杨康, 赵建锋, 何风, 等. 表面机械研磨处理对纯铜棘轮行为的影响: 宏微观试验与本构模拟[J]. 表面技术, 2022, 51(11): 58-69.

YANG Kang, ZHAO Jian-feng, HE Feng, et al. Effect of the Surface Mechanical Attrition Treatment on the Ratcheting of Pure Copper: Macro/Micro-tests and Constitutive Modeling[J]. Surface Technology, 2022, 51(11): 58-69.

Chengdu 610213, China; 2. Institute of Systems Engineering, China Academy of Engineering Physics (CAEP), Sichuan Mianyang 621999, China; 3. a. Applied Mechanics and Structure Safety Key Laboratory of Sichuan Province, School of Mechanics and Aerospace Engineering, b. School of Materials Science and Engineering, Southwest Jiaotong University, Chengdu 610031, China)

ABSTRACT: Most of the damage of metal materials originates from the surface, so surface treatment plays a vital role in improving the service life of metal materials. The traditional materials with uniform microstructure show a tradeoff in strength and ductility. Coarse-grained materials usually maintain considerable ductility, but the strength is relatively low; while the strength of ultra-fine-grained is elevated, the ductility is dramatically decreased. Materials with gradient nano-grained (GNG) structure, where grain size changes gradually from the treated surface to the core, are promising for overcoming the strength-ductility contradiction. Moreover, the GNG materials also possess other outstanding mechanical properties, such as enhanced wear resistance, improved fatigue life and fracture resistance. In this paper, the GNG copper was prepared using the SMAT technique, and uniaxial tensile tests were performed on both GNG and coarse-grained copper. The test results showed that the SMAT greatly improves the yield strength, without compromising too much ductility. Furthermore, Cyclic deformation tests show that the number of cycles of SMAT samples to failure is significantly higher than that of as-received samples, and the ratcheting strain of SMAT samples is significantly lower than that of as-received ones. In other words, the SMAT effectively inhibits the ratcheting strain of pure copper and enhances its fatigue life. Microscopic characterization was carried out, including electron backscatter diffraction (EBSD) analysis and X-ray diffraction (XRD) analysis. It is found that the average grain size of the material after SMAT decreases, while the average dislocation density increases. In addition, the grain size and total dislocation density show a spatial gradient from the surface to the core. In the end, based on a modified version of the conventional theory of mechanism-based strain gradient plasticity (MSG), the mechanical responses of pure copper before and after SMAT are simulated and compared with the results of the tension-compression cyclic test. The study found that the constitutive model can well describe the uniaxial tensile response of the material after SMAT, and can qualitatively capture the inhibition effect of the SMAT technique on the ratcheting strain evolution.

KEY WORDS: SMAT; cyclic deformation; ratcheting strain; microscopic characterization; strain gradient plasticity; finite element simulation

飞机、船舶、汽车等装备中的主要承力构件往往是在循环载荷作用下服役, 疲劳是其主要失效形式。系列研究表明^[1-3], 疲劳裂纹往往萌生于材料表面, 其由表及里的扩展最终会引起材料/结构的失效, 因此改善材料的表面性能对于提高其服役寿命有着至关重要的作用。近年来, 梯度纳米晶粒结构 (Gradient Nanograined, GNG) 材料由于其优异强韧性匹配、抗疲劳性能等受到材料和力学工作者日益广泛的关注。GNG 结构是一种表面为纳米晶粒, 越靠近芯部晶粒尺寸越大的结构。正是这种晶粒尺寸呈梯度分布的特殊结构消除了界面的结合和剥离问题, 使得不同尺度晶粒的力学性能优势得以协同发挥。研究表明, 通过表面机械研磨处理 (Surface Mechanical Attrition Treatment, SMAT) 工艺可以大幅度提升纯铜材料的强度, 并且韧性也没有明显的损失, 同时还能提升材料的耐磨性能、抗腐蚀性能以及疲劳性能等^[4-6], 对保障材料和结构的安全服役具有重要意义。

早在 2009 年, Li 等^[7]就对 SMAT 后碳钢的疲劳行为进行了研究。结果表明: 相比于未处理样品, SMAT 时间为 15 min 的样品的高周疲劳强度提升了 13.1%。Sun 等^[8]研究发现, 在低应变幅值下, 残余压

应力的作用对于疲劳寿命的贡献占主导地位, 而在高应变幅值下, 表面裂纹和表面粗糙度是主要的影响因素。Chen 等^[9]研究了应变率对于 SMAT 后 AZ31b 镁合金的低周疲劳寿命的影响。研究表明: 在相同的应变率下, SMAT 后样品的低周疲劳寿命显著提高。Gao 等^[10]研究了 SMAT 对于 7075-T6 铝合金的高周疲劳与超高周疲劳性能的影响。结果表明, SMAT 可以提升铝合金的高周疲劳寿命, 但是会劣化其超高周疲劳性能。同时指出, 在高周疲劳载荷作用下, 低的 SMAT 强度有利于保护表面免受微裂纹的损害, 高的 SMAT 强度会引起过多钢球撞击样品表面, 进而增加表面的微裂纹且产生较高的拉伸残余应力, 对材料的超高周疲劳性能十分不利。

综上所述, 大量实验研究结果表明, SMAT 得到的梯度结构材料与均匀结构材料有着截然不同的循环响应, 对于高低周疲劳及超高周疲劳性能有很大的影响。在实际服役过程中, 材料往往遭受非对称应力作用下的循环载荷, 出现棘轮失效。然而, 关于 SMAT 纯铜的棘轮疲劳试验研究此外以及循环模拟研究鲜有报道。SMAT 对于纯铜材料的棘轮演化的影响机制, 以及与其棘轮疲劳寿命的定量关联还需进一步地

研究与探索, 相关研究对于全面理解梯度结构材料在复杂加载形式下的变形响应具有重要意义。

1 力学性能测试

本研究中对纯铜样品进行 SMAT 的设备是 SNC-1 金属表面纳米化试验机。实验的参数设置如下: 试验温度保持在室温, 频率为 50 Hz, 研磨球相对于样品的最大速度为 12.56 m/s^[11]。提供振动源的电机采用正转和反转两种转动方向结合的方式, 以保证更加均匀的处理效果。另外, 研磨球的材质是 GCr15 轴承钢 (GCr15 轴承钢具有高而均匀的硬度、良好的耐磨性及高的接触疲劳性能, 而且价格低廉, 很适合作为 SMAT 的研磨球), 尺寸为 $\phi 8$ mm。

通过不同的处理时间制备出了不同梯度晶粒分布的梯度纳米结构纯铜, 分别为 SMAT-0.25 min 样品 (为方便描述, 以 SMAT-0.25 min 表示 SMAT 0.25 分钟样品, 其他样品也采用相同方法表示)、SMAT-0.5 min 样品、SMAT-0.75 min 样品、SMAT-1 min 样品、SMAT-5 min 样品、SMAT-15 min 样品以及 SMAT-30 min 样品。

1.1 单轴拉伸试验

为获取 SMAT 样品的基本力学性能参数, 首先对其开展单轴拉伸力学性能测试。单轴拉伸试样的尺寸如图 1 所示, 试样厚度为 2 mm。试验的应变率设置为 0.001 s⁻¹, 对于每一个样品均开展了 3 组重复试验, 并将其平均值作为最终结果。此外, 设置一组未进行 SMAT 的试样作为对照组。图 2 给出了不同 SMAT 时间下的试样的应力应变曲线。

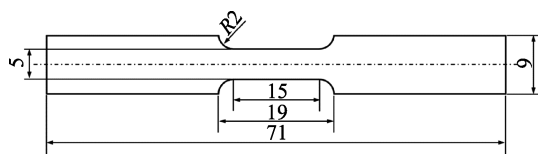


图 1 单拉试样示意图

Fig.1 Geometry of the uniaxial tensile specimen

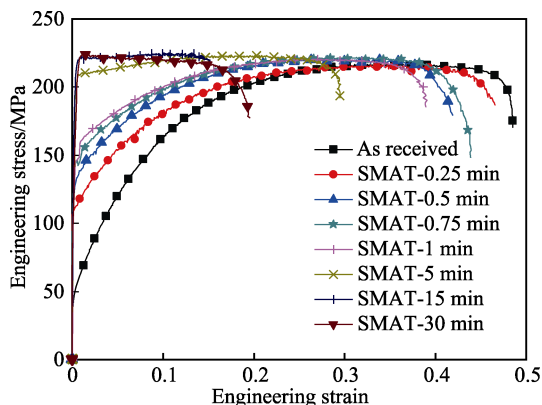


图 2 单轴拉伸工程应力-工程应变曲线

Fig.2 Uniaxial tensile engineering stress-engineering strain curves

1.2 循环试验

为探究 SMAT 对材料棘轮行为的影响, 首先对 SMAT-1 min 的试样 (梯度晶粒结构材料, GNG) 以及未处理试样 (均匀粗晶材料, CG) 开展了循环变形试验研究。循环试验工况如表 1 所示。其中, 工况 1~3 保持平均应力恒定, 均为 80 MPa, 研究应力幅值的变化对于材料棘轮行为的影响。工况 3~5 保持应力幅值恒定, 均为 110 MPa, 研究平均应力的变化对于材料棘轮行为的影响。

表 1 非对称应力控制的循环试验工况

Tab.1 Cyclic tests under asymmetric stress control loading

Test condition	Peak stress σ_{\max}/MPa	Valley stress σ_{\min}/MPa	Mean stress σ_m/MPa	Stress amplitude σ_a/MPa
1	180	-20	80	100
2	200	-40	80	120
3	190	-30	80	110
4	200	-20	90	110
5	210	-10	100	110

图 3 给出了均匀粗晶材料 (黑色曲线) 以及 SMAT 试样 (红色曲线) 的循环应力-应变曲线。利用棘轮应变的计算公式 (1), 可以得到棘轮应变随循环圈数的演化规律。

$$\varepsilon_r = \frac{\varepsilon_{\max} + \varepsilon_{\min}}{2} \quad (1)$$

式中: ε_r 为棘轮应变; ε_{\max} 为循环每一圈中的最大应变; ε_{\min} 为循环每一圈中的最小应变。图 4 给出了 SMAT 前后试样的棘轮应变随循环圈数的变化曲线。从图中可以发现 SMAT 显著抑制了棘轮应变的发展, 具体表现为: SMAT 试样的棘轮应变初始值与棘轮应变最终值均明显小于未处理试样。

图 5 给出了 SMAT 对循环失效圈数的影响。在同种工况下, SMAT 试样的循环失效圈数明显大于未 SMAT 试样的循环失效圈数, 说明 SMAT 显著提升了材料的疲劳寿命。此外, 由图 5a 可知, 当平均应力相等时, 应力幅值越大, 循环失效圈数越少。由图 5b 可知, 当应力幅值相等时, 平均应力越大, 循环失效圈数越少。

2 EBSD 及 XRD 表征

微观表征手段常被用于揭示材料的微观变形机制^[12-16], 在表征材料的晶粒尺寸、位错密度、晶粒取向等信息方面极具优势。由于梯度纳米晶粒材料中的晶粒尺寸可以跨越 3 个数量级, 因此放大倍数有限的金相显微镜难以获取表面细小晶粒的尺寸的分布情况; 而高精度的透射显微镜只能对极小的局部区域进行表征, 难以表征整个试样的晶粒尺寸分布。因此本文选用 EBSD 来表征梯度纳米晶粒铜样品的晶粒尺

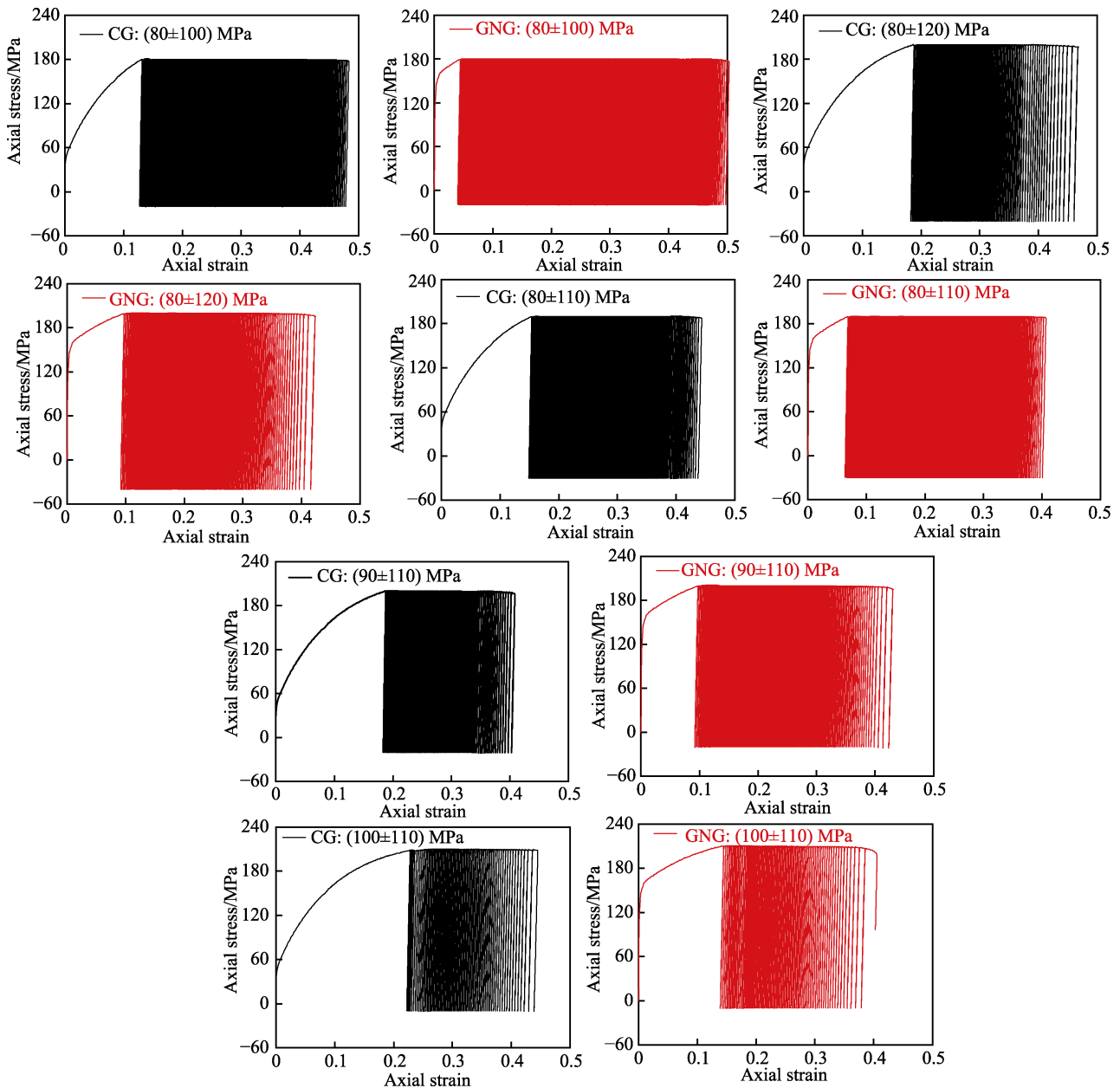
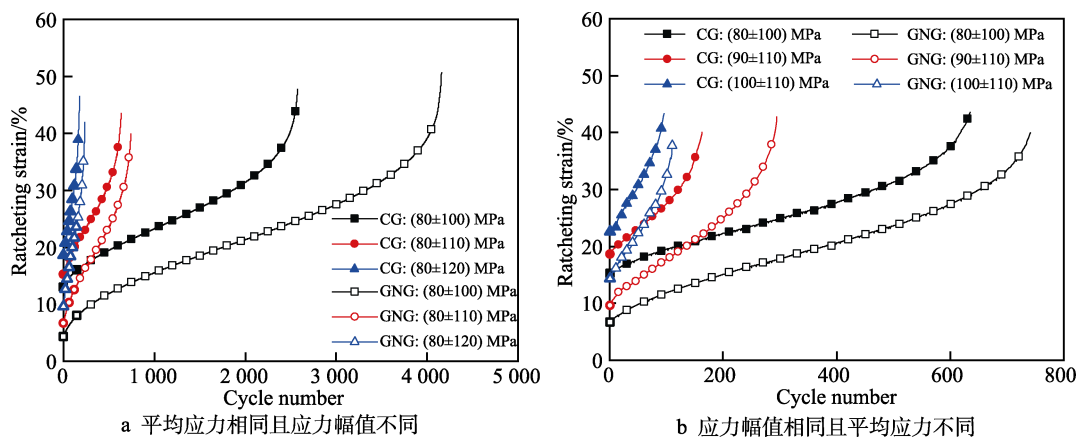


图 3 不同循环工况的应力-应变曲线

Fig.3 Stress-strain curves under different cycle conditions



a 平均应力相同且应力幅值不同

b 应力幅值相同且平均应力不同

图 4 不同加载工况下 SMAT 前后试样的棘轮应变-循环圈数曲线

Fig.4 Ratcheting strain versus cycle number for samples before and after SMAT under different loading conditions: a) with same mean stress but different stress amplitude; b) with same stress amplitude but different mean stress

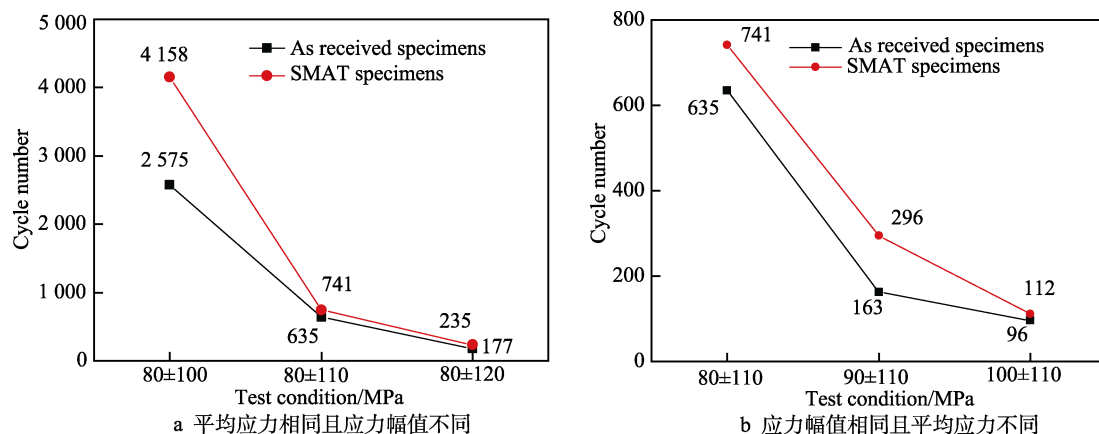


图5 不同工况下 SMAT 前后试样的循环失效圈数

Fig.5 Number of cyclic failure cycles for samples before and after SMAT under different loading conditions: a) with same mean stress but different stress amplitude; b) with same stress amplitude but different mean stress

寸。XRD 是通过对材料进行 X 射线衍射, 分析衍射图谱, 获得材料的成分、材料内部原子或分子的结构或形态等信息的研究手段。通常用于测定粉末、高聚物块体材料或者多晶体金属的物相、点阵常数、残余应力、晶粒尺寸、点阵畸变以及织构和单晶的取向等。本文利用 XRD 分析结果计算材料的平均位错密度, 为有限元模拟提供参数设置依据。

2.1 EBSD 表征

通过分析计算 EBSD 结果可以获得样品的晶粒尺寸。本文对 SMAT-1 min、SMAT-15 min 以及 SMAT-30 min 样品进行了 EBSD 表征, 如图 6 所示, 从图中可以发现, 随 SMAT 时间的增加, 样品表面的晶粒得到了不断的细化。

基于 EBSD 表征结果, 可以得到图 7 所示的不同 SMAT 时间下样品的晶粒尺寸分布图。从图 7 中可以看出, SMAT-0 min、SMAT-1 min、SMAT-15 min 以及 SMAT-30 min 等 4 种样品的平均晶粒尺寸分别为 20.02、19.05、13.66、11.63 μm 。这表明 SMAT 细化了纯铜材料中的晶粒, 且 SMAT 时间越长, 样品的平均晶粒尺寸越小, 晶粒的细化程度越明显。

2.2 XRD 分析

通过 XRD 分析可以获得样品在一定深度范围内的平均晶粒尺寸、孪晶密度以及位错密度等。在本研究中, 主要利用 XRD 分析来获取样品的平均位错密度, 一方面获取 SMAT 对材料位错密度的影响, 另一方面为后续的有限元模拟提供初始位错密度的设置依据。图 8 给出了 SMAT 前后纯铜样品的 XRD 图谱。其中, 图 8a 对应未处理的样品, 图 8b 对应经过 SMAT 的样品。对于 XRD 的图谱进行标定后, 可以明显地看出 SMAT 处理前后都是单相, 且所有衍射峰都与 PDF 卡片中的衍射线一一对应, 均出现了面心立方结构所具有的晶面: (111)、(200)、(220)、(311)、(222)、(400)。

分析得到每个样品在不同取向上的晶格常数以及半高宽, 利用公式 (2) 求出柏氏矢量。

$$b = \frac{\sqrt{2}}{2} a \quad (2)$$

式中: a 为晶格常数; b 为柏氏矢量大小。

根据 Dunn 等^[17]的研究成果, 位错密度和衍射峰半高宽之间的关系可用公式 (3) 来描述, 计算出的

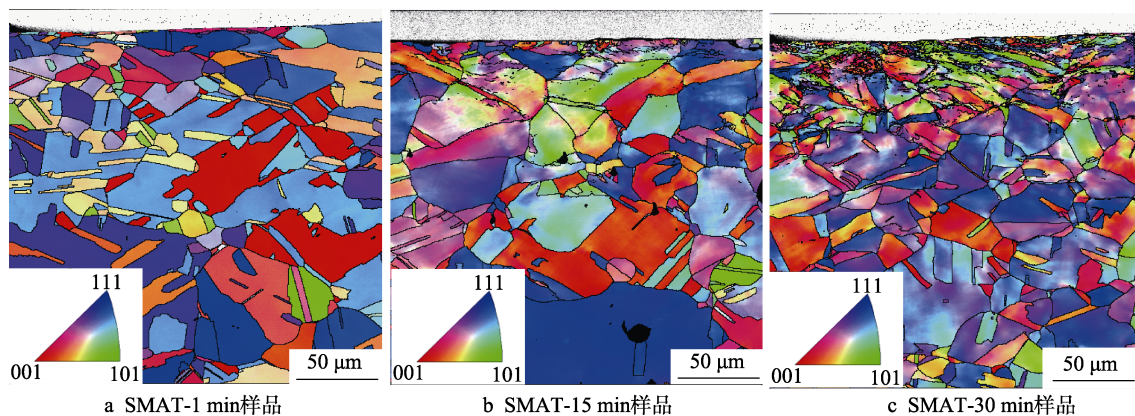


图6 EBSD 表征结果

Fig.6 EBSD: a) SMAT-1 min sample; b) SMAT-15 min sample; c) SMAT-30 min sample

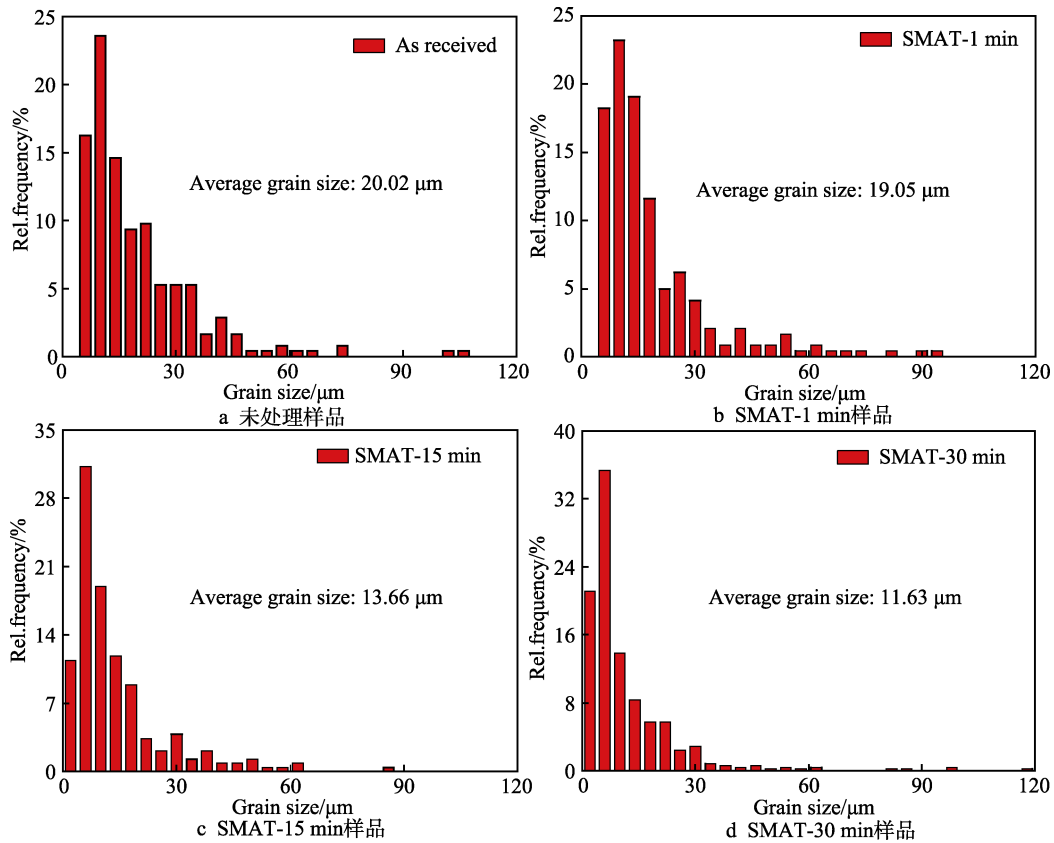


图 7 不同 SMAT 工况下的晶粒尺寸分布

Fig.7 Grain size distribution under different SMAT conditions: a) as-received sample; b) SMAT-1 min sample; c) SMAT-15 min sample; d) SMAT-30 min sample

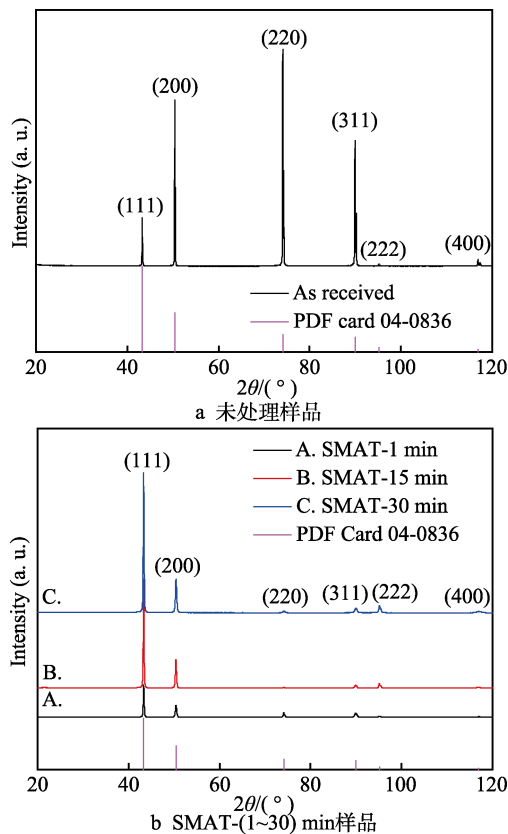


图 8 不同 SMAT 工况下的 XRD 图谱

Fig.8 XRD pattern for samples under different SMAT conditions: a) as-received sample; b) SMAT-(1~30) min samples

位错密度如图 9 所示。

$$\rho = \frac{\beta^2}{4.35b^2} \quad (3)$$

式中: ρ 为位错密度; β 为衍射峰半高宽。

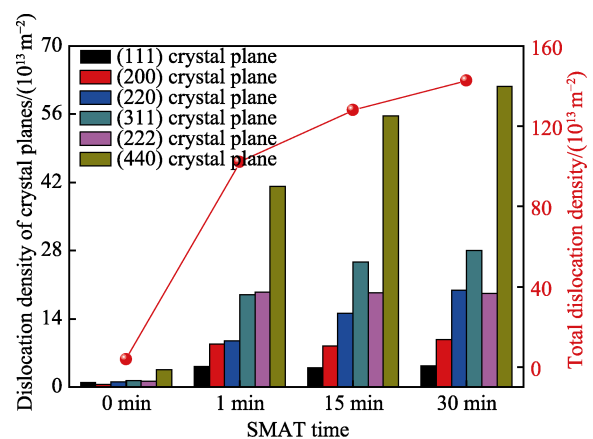


图 9 不同 SMAT 时间下的位错密度

Fig.9 Dislocation density under different SMAT conditions

从图 9 中可以看出, 未处理样品的各个晶面的位错密度均小于 SMAT 样品对应晶面的位错密度。另外还可以发现, SMAT 时间越长, 样品的总位错密度越大, 大部分晶面的位错密度呈现同样的趋势。

3 有限元模拟

为进一步深入探究梯度晶粒结构对材料棘轮行为的影响机制,本节进一步使用基于位错密度的应变梯度塑性本构模型对梯度晶粒结构材料和均匀多晶材料的单拉和循环变形行为进行模拟。

3.1 本构模型简介

CMSG 本构理论基于 Taylor 硬化模型与 J_2 塑性流动准则,通过将总位错密度分为几何必需位错 (Geometrically Necessary Dislocation, GND) 密度和统计储存位错 (Statistical Storage Dislocation, SSD) 密度两部分来描述应变梯度效应。另外,该模型可以基于材料的变形机制,在模型中引入不同的位错密度演化率,以更加物理的方式来描述材料的变形。传统的 CMSG 模型通常用于描述微尺度下均匀晶粒结构材料的非均匀变形响应,很少能用来描述宏观变形均匀的非均质材料的微结构引起的内部非均匀变形。本文基于 Zhao 等^[18-19]依托传统 CMSG 模型所发展的考虑梯度晶粒结构材料内部非均匀变形效应的本构模型,对 SMAT 前后纯铜材料的单拉及循环响应进行模拟。

该本构模型基于位错塞积构型,考虑了晶粒尺度的非均匀变形产生的 GND 及背应力,并且将 GND 引起的各向同性硬化与随动硬化均考虑在内。采用 Li 等^[20]发展的修正 Kocks-Mecking-Erstin (KME) 模型来描述 SSD 密度的演化。同时,该模型未采用传统的 Hall-Petch 关系式来描述初始屈服,而是基于位错塞积模型导出了包含晶粒尺寸效应的背应力模型。模型的参数使用均匀晶粒材料的单拉变形响应来标定,其中需要拟合的参数只有五个,其他参数均可以在文献中获得。值得注意的是,该模型中基于位错塞积理论推导的背应力表达式与经典 A-F 模型^[21]的表达形式一致,因此在用于棘轮行为模拟时,棘轮的演化率始终是一个常数,无法模拟棘轮加速的状态,这与试验中的棘轮演化方式有差别。因此,本文对于第 1 节中试验结果进行了定性的模拟,旨在通过模拟来描述试验中所得到的棘轮应变的演化趋势。以下是对该本构模型的一些关键方程以及所要拟合的本构参数的简要介绍^[18] (参数的含义见表 2)。

首先,该模型对于流动应力的描述是基于位错机制,将总位错密度考虑为几何必需位错密度和统计储存位错密度两部分,如公式 (4) 所示:

$$\sigma_f = \sigma_0 + M \alpha G b \sqrt{\rho_{\text{GND}} + \rho_{\text{SSD}}} \quad (4)$$

从变形机制的角度出发,位错的塞积作用对背应力的贡献最大,而纯铜材料中的位错塞积主要是由于晶界处的滑移不连续而导致的。在该模型中,只考虑了位错塞积对于 GND 的贡献。塞积的位错产生了背应力,导致了应力-应变曲线在循环加载时出现包辛

格效应,产生随动硬化。该模型将背应力与晶粒尺寸和塞积位错个数联系在了一起,如公式 (5) 所示。以张量形式给出塞积位错个数的演化,如公式 (6) 所示。这里 N_Δ 表示 N 的初始演化率,如公式 (7) 所示。 N^* 表示饱和的塞积位错个数,如公式 (8) 所示。

$$\sigma^b = \frac{M G b}{\pi(1-\nu)d} N \quad (5)$$

$$\dot{N} = N_\Delta \left(\frac{2}{3} \dot{\epsilon}^p - \frac{N}{N^*} \dot{p} \right) \quad (6)$$

$$N_\Delta = \frac{4 M \lambda}{3 b} \quad (7)$$

$$N^* = \frac{\pi(1-\nu)k_{\text{HP}}}{M G b} d^{\frac{1}{2}} \quad (8)$$

联合式 (5) — (8) 可得背应力的演化率:

$$\dot{\sigma}^b = \frac{4 M^2 G \lambda}{3 \pi(1-\nu)d} \left(\frac{2}{3} \dot{\epsilon}^p - \frac{M G b N}{\pi(1-\nu)k_{\text{HP}} \sqrt{d}} \dot{p} \right) = \frac{8 M^2 G \lambda}{9 \pi(1-\nu)d} \dot{\epsilon}^p - \frac{4 M^2 G \lambda}{3 \pi(1-\nu)k_{\text{HP}} \sqrt{d}} \sigma^b \dot{p} \quad (9)$$

不难发现,上式和经典的 A-F 模型^[21]的形式一致,如公式 (10) 所示。

$$\dot{\sigma}^b = \frac{2}{3} C \dot{\epsilon}^p - \gamma \sigma^b \dot{p} \quad (10)$$

式中的参数 C 和 γ 被赋予物理意义:

$$C = \frac{4 M^2 G \lambda}{3 \pi(1-\nu)d} \quad (11)$$

$$\gamma = \frac{4 M^2 G \lambda}{3 \pi(1-\nu)k_{\text{HP}} \sqrt{d}} \quad (12)$$

在一个位错塞积中几何必需位错的个数为 $n = \sqrt{N} : \bar{N}$, 位错塞积序列的个数为 d / λ , 则 ρ_{GND} 可通过公式 (13) 给出。

$$\rho_{\text{GND}} = \bar{r} \frac{\eta^p}{b} + \frac{n}{\lambda d} \quad (13)$$

式中: \bar{r} 为 Nye 因子; η^p 为等效塑性应变梯度。本模型的 SSD 密度的演化考虑了晶粒尺寸对位错增殖以及位错湮灭的贡献^[18], 如公式 (14) 所示。

$$\frac{\partial \rho_{\text{SSD}}}{\partial \rho} = M \left[\frac{k_{\text{mfp}}^g}{b d} + \frac{k_{\text{mfp}}^{\text{dis}}}{b} \sqrt{\rho_{\text{GND}} + \rho_{\text{SSD}}} - k_{\text{ann}} \left(\frac{\dot{p}}{\dot{\epsilon}_{\text{ref}}} \right)^{\frac{1}{n_0}} \rho_{\text{SSD}} - \left(\frac{d_{\text{ref}}}{d} \right)^2 \rho_{\text{SSD}} \right] \quad (14)$$

其中, d_{ref} 为参考晶粒尺寸,其意义是当晶粒尺寸小于此值时,位错的湮灭变强。上式括号中的第二项和第三项为原 KME 模型^[22-24]给出的位错密度的增殖以及湮灭,第一项和第四项分别为考虑晶粒尺寸对位错平均自由程的影响引起的位错增殖以及晶界对位错的吸收引起的位错湮灭。

3.2 有限元模型

3.2.1 几何模型

本文的模拟工作基于大型有限元仿真分析软件 ABAQUS 完成。在模拟均匀晶粒结构纯铜的单拉变形响应时, 只模拟其颈缩前的部分, 变形可视为均匀变形。假设每个积分点代表足够多晶粒的整体响应, 则其代表性体积单元可以取一个单元, 如图 10a 所示。而在模拟梯度结构铜的单拉及循环响应时, 所采用的几何模型是从试样工作段中截取的一部分, 模型的尺寸为 $1\,000\,\mu\text{m} \times 100\,\mu\text{m} \times 50\,\mu\text{m}$, 如图 10b 所示。

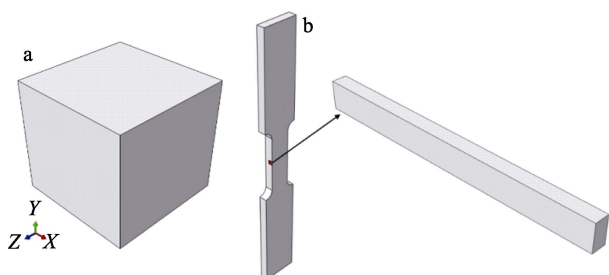


图 10 均匀晶粒结构有限元模型 (a) 和梯度晶粒结构有限元模型 (b)

Fig.10 Finite element model of homogeneous grain structure (a) and finite element model of gradient grain structure (b)

图 11a 给出了梯度晶粒材料的有限元模型网格划分情况, 其中, 沿 X 轴的网格尺寸为 $10\,\mu\text{m}$, 沿 Y 轴与 Z 轴的网格尺寸为 $25\,\mu\text{m}$, 单元类型为 C3D8, 单元数量为 800 个。图 11b 给出了模型的荷载与约束方式, 分别约束了负 Y - Z 、负 X - Z 以及负 X - Y 面的法向位移, 在 X - Z 面施加位移载荷 (单拉模拟) 或者均布压力 (循环模拟), 单拉模拟的应变率与试验保持一致, 即 $1 \times 10^{-3}\,\text{s}^{-1}$ 。

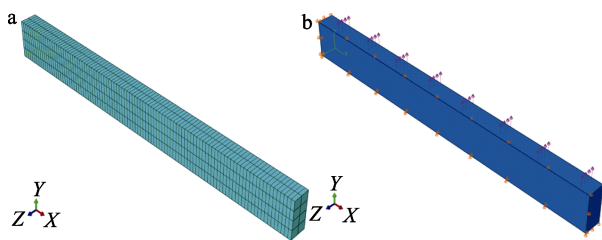


图 11 有限元网格 (a) 和荷载及约束 (b)

Fig.11 Finite element model (a) and loading condition (b)

根据 Zhao 等^[25]的研究结果, SMAT 后纯铜的初始位错密度的分布状况可以用公式 (15) 进行描述。

$$\rho = A \times \exp(B \times h) \quad (15)$$

式中: A 、 B 为常数; h 为深度。

根据 XRD 的测试结果, 在本模拟中, A 取 $3 \times 10^{15}\,\text{m}^{-2}$, B 取 -0.01 , 这意味着表层的位错密度为 $3 \times 10^{15}\,\text{m}^{-2}$, 芯部的位错密度为 $5 \times 10^{12}\,\text{m}^{-2}$, 具体的分布方式以及梯度纳米结构层的构筑方式如图 12 所示。需要指出

的是, EBSD 表征结果显示, SMAT-1 min 样品表层没有明显的晶粒细化 (可能的原因有二: 第一, SMAT 时间太短, 没有达到晶粒细化的程度; 第二, 样品表层的晶粒细化程度不均匀, 表征的区域未明显细化)。根据微观表征结果, 在模型的表层仅设置厚度为 $25\,\mu\text{m}$ 的梯度纳米结构层。梯度纳米结构层及粗晶层的晶粒尺寸如图 12 中的表格所示, 晶粒尺寸是沿着 X 轴方向连续变化。

3.2.2 本构模型的材料参数标定

模型的材料参数如表 2 所示, 大多参数都可以从文献中直接获得, 只有 5 个参数未知, 可以通过拟合不同晶粒尺寸的均匀晶粒结构铜的单拉曲线得到。通过公式 (9) 可以发现, 背应力与 Hall-Petch 常数 k_{HP} 、晶粒尺寸 d 以及位错塞积间距 λ 相关, 背应力的大小由 k_{HP} 和 d 控制, 屈服阶段应力-应变曲线的演化率由 λ 控制。因此, 在 k_{HP} 和 d 已知的情况下, λ 可通过拟合晶粒尺寸为 $0.5\,\mu\text{m}$ 的铜的应力-应变曲线^[26]确定, 本文中 λ 取 $400\,\text{nm}$ 。

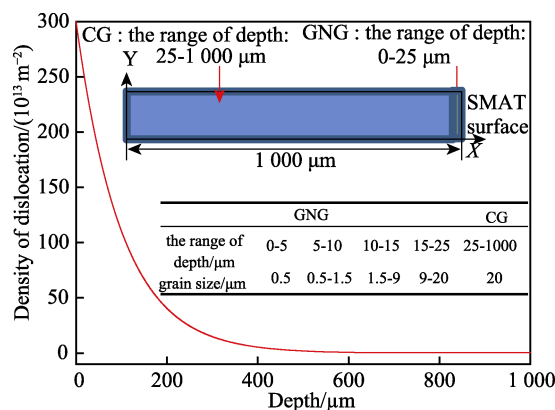


图 12 位错密度分布方式及梯度纳米结构层构筑方式

Fig.12 Distribution of dislocation density and construction of gradient nanostructure layer

通过公式 (14) 可以发现, 当晶粒尺寸较大时, 公式中的第一项与第四项的贡献可以忽略不计, 这时 $k_{\text{mfp}}^{\text{dis}}$ 与 $k_{\text{ann}}^{\text{g}}$ 便可以确定下来, 本文是通过拟合晶粒尺寸为 $20\,\mu\text{m}$ (粗晶铜的晶粒尺寸) 铜的单拉应力-应变曲线来获得的。当晶粒尺寸较小时, 公式中的第二项与第三项的贡献可以忽略, 这时 $k_{\text{mfp}}^{\text{g}}$ 和 d_{ref} 便可以确定下来, 本文通过拟合晶粒尺寸为 $0.5\,\mu\text{m}$ 的铜的应力-应变曲线获得这两个参数值。

3.2.3 单拉变形行为的模拟

图 13a 和图 13b 分别给出了晶粒尺寸为 $0.5\,\mu\text{m}$ 和 $20\,\mu\text{m}$ 的均匀粗晶纯铜的单拉试验应力-应变曲线与模拟的应力-应变曲线。通过以上两条单拉应力-应变曲线的拟合确定了一套完整的本构模型的材料参数, 利用这套材料参数对于 SMAT-1 min 样品的单拉响应进行模拟, 得到如图 13c 所示的应力-应变曲线。可以发现, 模拟效果较好。

表 2 本构模型参数
Tab.2 Parameters of constitutive model

Parameter	Symbol	Value	Unit	Source
Lattice friction stress	σ_0	25.5	MPa	Literature[14]
Rate sensitively exponent	M	20	—	Literature[14]
Shear modulus	G	42.1	GPa	Literature[14]
Poisson's ratio	ν	0.36	—	Literature[14]
Geometric factor	$k_{\text{mfp}}^{\text{g}}$	0.7	—	Simulation
Proportionality factor	$k_{\text{mfp}}^{\text{dis}}$	0.019	—	Simulation
Dynamic recovery constant 1	k_{ann}	1.7	—	Simulation
Reference grain size	d_{ref}	1.6	μm	Simulation
Dynamic recovery constant 2	n_0	21.25	—	Literature[14]
Reference strain rate	ε_{ref}	1.0	s^{-1}	Literature[14]
Hall-Petch constant	k_{HP}	110	$\text{MPa} \cdot \mu\text{m}^{1/2}$	Literature[14]
Nye-factor	γ	1.9	—	Literature[27]
Distance between slip lines	λ	400	nm	Simulation

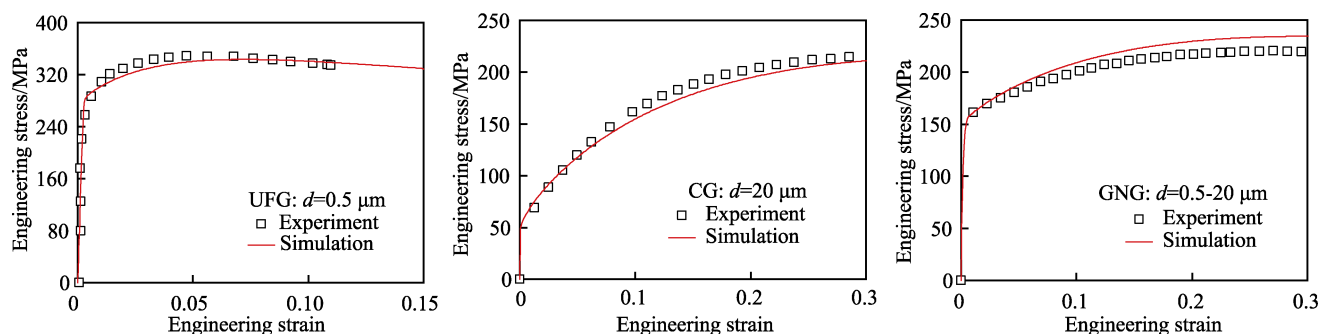


图 13 0.5 μm 均匀超细晶铜的单拉试验与模拟应力-应变曲线 (a), 20 μm 均匀粗晶纯铜的单拉试验与模拟应力-应变曲线 (b), 梯度结构纯铜的单拉试验与模拟应力-应变曲线 (c)

Fig.13 Comparison between the uniaxial tensile test result with simulated one of ultrafine grain copper (a), comparison between the uniaxial tensile test result with the simulated one for coarse-grained pure copper (b), comparison between the uniaxial tensile test result and simulated one for gradient nanograin structure pure copper (c)

3.2.4 循环变形行为的模拟

利用表 2 中所获取的本构参数进行了均匀粗晶纯铜与梯度结构纯铜的循环变形模拟, 图 14 给出了均匀粗晶纯铜 (黑色曲线) 与梯度结构纯铜 (红色曲线) 在非对称应力控制下的循环变形响应曲线, 循环圈数均为 60 圈。根据模拟结果获取的棘轮应变随循环圈数的变化曲线如图 15 所示。从图中可以看出, 同一加载条件下, 梯度结构纯铜的棘轮应变均要低于均匀粗晶结构纯铜的棘轮应变, 这与试验所得到的趋势是一致的, 如图 16 所示。同时也说明该本构模型能够很好地描述 SMAT 工艺对于纯铜材料棘轮应变的抑制效应。

图 17 进一步给出了梯度结构纯铜循环第 60 圈时

的累积塑性应变云图。从图中可以看出, 在非对称应力控制的循环变形下, 纯铜材料出现明显的非均匀变形。具体表现为: 材料表面塑性变形较小, 越靠近芯部, 塑性变形越大, 累积塑性应变呈现出由表及里的梯度变化趋势。这是因为晶粒尺寸的差异导致不同区域的屈服强度不同, 芯部率先发生塑性变形, 且在循环变形过程中逐渐累积。

图 18 与图 19 分别给出了梯度结构纯铜循环第 60 圈时的 GND 密度云图以及等效应力云图。从图 18 中可以看出, GND 密度的最大值出现在次表层, 其它位置的 GND 密度较小。从图 19 中可以看出, 最大等效应力同样出现在次表层。这使得次表层成为裂纹萌生的有利位置, 与实验中所反映出的规律一致^[28]。

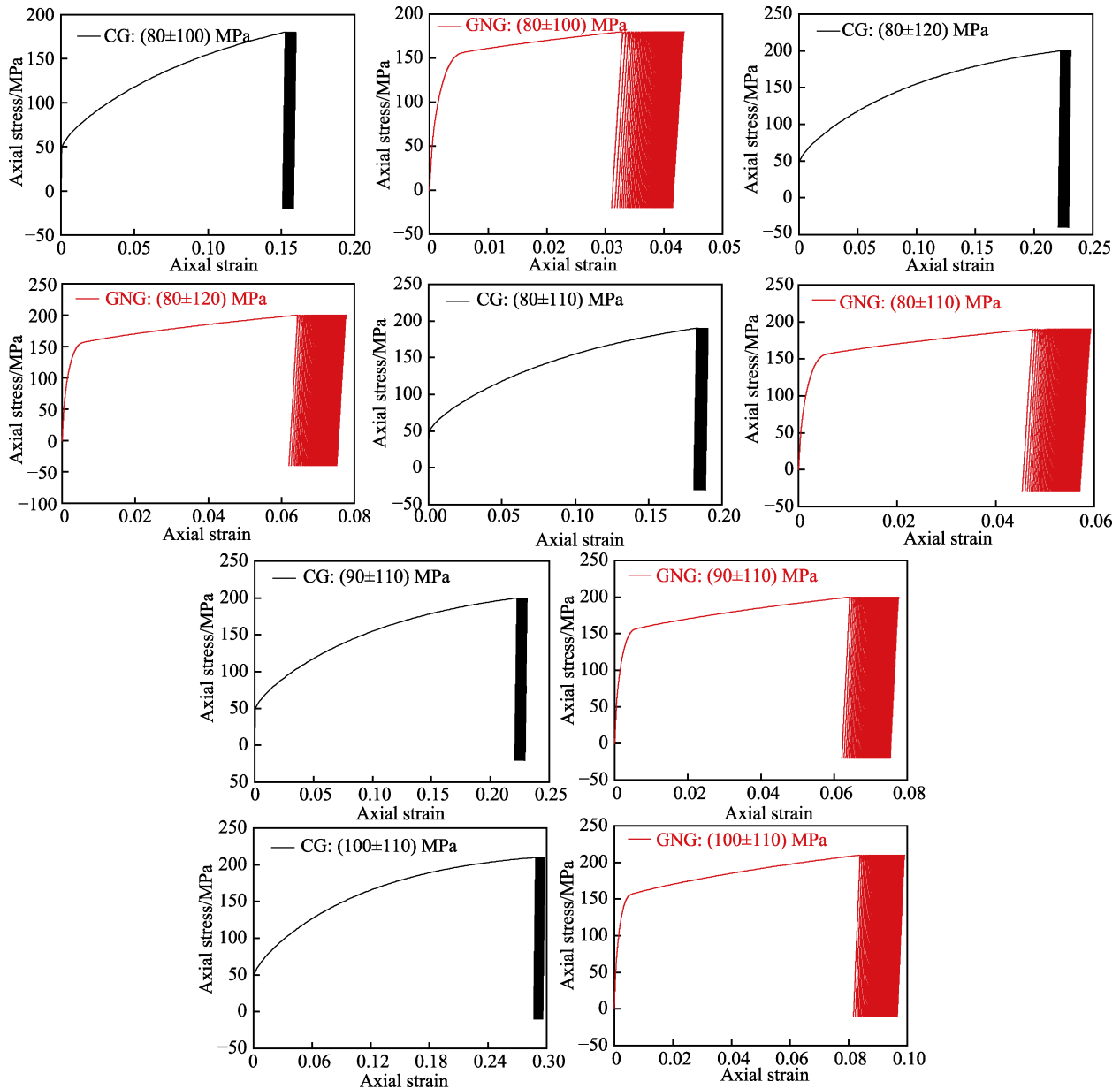
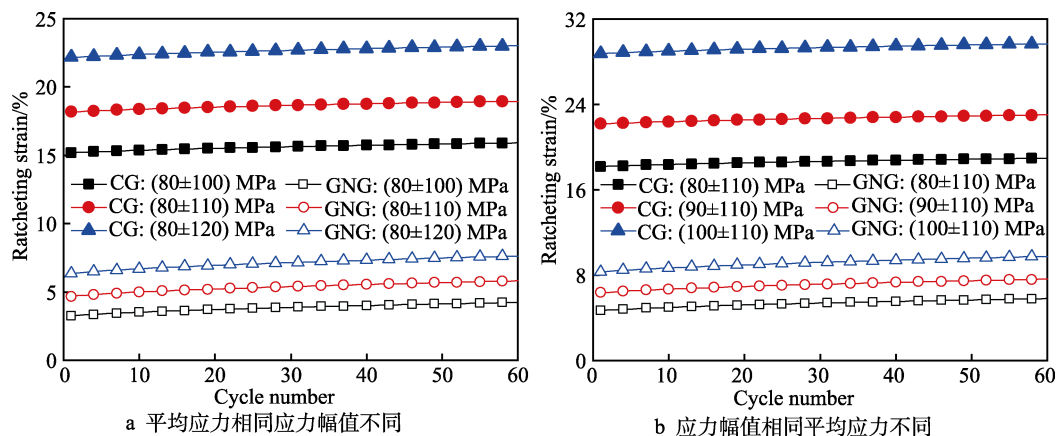


图 14 均匀结构粗晶纯铜与梯度纳米结构纯铜在单轴非对称应力控制下的循环应力-应变曲线

Fig.14 Cyclic stress-strain curves of coarse-grained copper and gradient nano-grained copper under uniaxial asymmetric stress control loading



a 平均应力相同应力幅值不同

b 应力幅值相同平均应力不同

图 15 不同工况下棘轮应变随循环圈数的变化曲线

Fig.15 Evolution of ratcheting strain with the number of cycles under different loading conditions: a) with same mean stress but different stress amplitude; b) with same stress amplitude but different mean stress

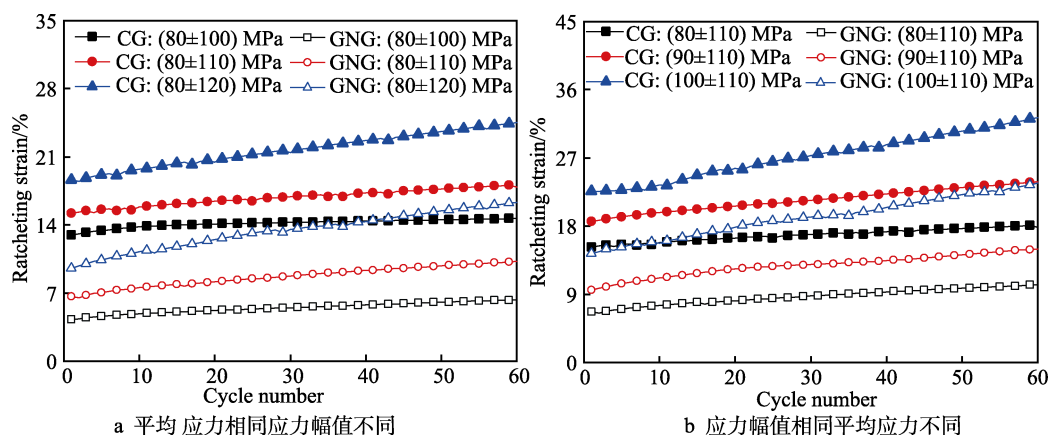


图 16 循环试验前 60 圈的棘轮应变随循环圈数的变化曲线

Fig.16 Evolution of the ratcheting strain with the number of cycles under different loading conditions: a) with same mean stress but different stress amplitude; b) with same stress amplitude but different mean stress

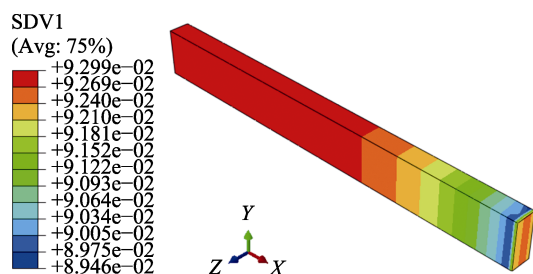


图 17 累积塑性应变云图 (100±110) MPa

Fig.17 Contour of accumulated plastic strain (100±110) MPa

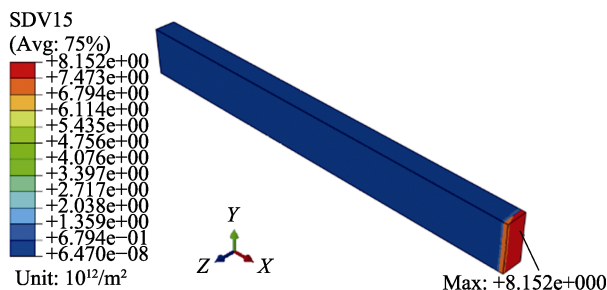


图 18 GND 密度云图(100±110) MPa

Fig.18 Contour of GND density (100±110) MPa

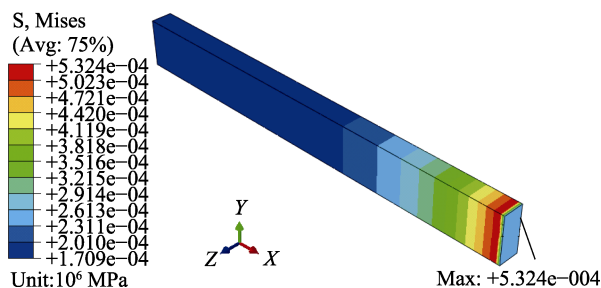


图 19 等效应力云图(100±110) MPa

Fig.19 Contour of equivalent stress (100±110) MPa

4 结论

1) SMAT 对循环变形过程中棘轮应变的演化有一定的抑制作用。在相同加载工况下, SMAT 试样的

循环失效圈数均要大于未处理试样的循环失效圈数, 说明 SMAT 对于试样的低周疲劳寿命有一定的改善。

2) 基于变形机制的应变梯度本构模拟结果与试验结果定性一致, 进一步揭示了 SMAT 对于棘轮应变的抑制效应。

3) 模拟结果显示累积塑性应变沿深度方向 (SMAT 冲击方向) 呈梯度分布, 最大 GND 密度以及最大等效应力均出现在次表层, 揭示了实验中观察到的梯度纳米晶粒结构材料的裂纹在次表层萌生的原因。

参考文献:

- [1] 李斌, 董丽虹, 王海斗, 等. 航空航天铝合金腐蚀疲劳研究进展[J]. 表面技术, 2021, 50(7): 106-118.
LI Bin, DONG Li-hong, WANG Hai-dou, et al. Research Progress on Corrosion Fatigue of Aerospace Aluminum Alloy[J]. Surface Technology, 2021, 50(7): 106-118.
- [2] 王成, 李开发, 胡兴远, 等. 喷丸强化残余应力对 AISI 304 不锈钢疲劳裂纹扩展行为的影响[J]. 表面技术, 2021, 50(9): 81-90, 151.
WANG Cheng, LI Kai-fa, HU Xing-yuan, et al. Effects of Shot Peening-Induced Residual Stresses on Fatigue Crack Propagation Behavior of AISI 304 Stainless Steel[J]. Surface Technology, 2021, 50(9): 81-90, 151.
- [3] 李卫, 严世榕, 张乐. 表面喷丸强化处理对 TC11 钛合金疲劳性能的影响[J]. 表面技术, 2017, 46(3): 172-176.
LI Wei, YAN Shi-rong, ZHANG Le. Effects of Surface Shot Peening Strengthening on Fatigue Property of TC11 Titanium Alloy[J]. Surface Technology, 2017, 46(3): 172-176.
- [4] XIAO G H, TAO N R, LU K. Strength-Ductility Combination of Nanostructured Cu-Zn Alloy with Nanotwin Bundles[J]. Scripta Materialia, 2011, 65(2): 119-122.
- [5] YAN F K, LIU G Z, TAO N R, et al. Strength and Ductility of 316L Austenitic Stainless Steel Strengthened by Nano-Scale Twin Bundles[J]. Acta Materialia, 2012,

- 60(3): 1059-1071.
- [6] LU K. Nanomaterials. Making Strong Nanomaterials Ductile with Gradients[J]. *Science*, 2014, 345(6203): 1455-1456.
 - [7] LI D, CHEN H N, XU H. The Effect of Nanostructured Surface Layer on the Fatigue Behaviors of a Carbon Steel [J]. *Applied Surface Science*, 2009, 255(6): 3811-3816.
 - [8] SUN Z, CHEMKHI M, KANOUTE P, et al. Fatigue Properties of a Biomedical 316L Steel Processed by Surface Mechanical Attrition[J]. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 2014, 63: 012021.
 - [9] CHEN Gang, GAO Jian-wen, CUI Yun, et al. Effects of Strain Rate on the Low Cycle Fatigue Behavior of AZ31B Magnesium Alloy Processed by SMAT[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2018, 735: 536-546.
 - [10] GAO Tao, SUN Zhi-dan, XUE Hong-qian, et al. Effect of Surface Mechanical Attrition Treatment on High Cycle and very High Cycle Fatigue of a 7075-T6 Aluminium Alloy[J]. *International Journal of Fatigue*, 2020, 139: 105798.
 - [11] 卫英慧, 马靳河, 张亨金, 等. 低碳钢表面机械研磨处理过程的有限元分析[J]. *太原理工大学学报*, 2008, 39(1): 6-9.
WEI Ying-hui, MA Jin-he, ZHANG Heng-jin, et al. Finite Element Method of Surface Mechanical Attrition Treatment Processes of Low Carbon Steel[J]. *Journal of Taiyuan University of Technology*, 2008, 39(1): 6-9.
 - [12] WANG K, TAO N R, LIU G, et al. Plastic Strain-Induced Grain Refinement at the Nanometer Scale in Copper[J]. *Acta Materialia*, 2006, 54(19): 5281-5291.
 - [13] 刘学兵, 张新房. 核反应堆用不锈钢老化性能再生研究[J]. *核动力工程*, 2020, 41(S1): 96-100.
LIU Xue-bing, ZHANG Xin-fang. Toward Regeneration of Aged Reactor Stainless Steels[J]. *Nuclear Power Engineering*, 2020, 41(S1): 96-100.
 - [14] ZHANG Yue-ling, YANG Chao, ZHOU Deng-shan, et al. Effect of Stacking Fault Energy on Microstructural Feature and back Stress Hardening in Cu-Al Alloys Subjected to Surface Mechanical Attrition Treatment[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2019, 740-741: 235-242.
 - [15] KARGAR F, LALEH M, SHAHRABI T, et al. Effect of Treatment Time on Characterization and Properties of Nanocrystalline Surface Layer in Copper Induced by Surface Mechanical Attrition Treatment[J]. *Bulletin of Materials Science*, 2014, 37(5): 1087-1094.
 - [16] NING Jiang-li, XU Bo, SUN Ming-shuai, et al. Strain Hardening and Tensile Behaviors of Gradient Structure Mg Alloys with Different Orientation Relationships[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2018, 735: 275-287.
 - [17] 王晓强, 崔凤奎, 燕根鹏, 等. 40Cr 冷滚打成形中位错密度变化研究[J]. *中国机械工程*, 2013, 24(16): 2248-2252, 2256.
WANG Xiao-qiang, CUI Feng-kui, YAN Gen-peng, et al. Study on Dislocation Density Change during Cold Roll-Beating of 40Cr[J]. *China Mechanical Engineering*, 2013, 24(16): 2248-2252, 2256.
 - [18] ZHAO Jian-feng, LU Xiao-chong, LIU Jin-ling, et al. The Tension-Compression Behavior of Gradient Structured Materials: A Deformation-Mechanism-Based Strain Gradient Plasticity Model[J]. *Mechanics of Materials*, 2021, 159: 103912.
 - [19] ZHAO Jian-feng, ZAISER M, LU Xiao-chong, et al. Size-Dependent Plasticity of Hetero-Structured Laminates: A Constitutive Model Considering Deformation Heterogeneities[J]. *International Journal of Plasticity*, 2021, 145: 103063.
 - [20] LI Jian-jun, SOH A K. Modeling of the Plastic Deformation of Nanostructured Materials with Grain Size Gradient[J]. *International Journal of Plasticity*, 2012, 39: 88-102.
 - [21] FREDERICK C O, ARMSTRONG P J. A Mathematical Representation of the Multiaxial Bauschinger Effect[J]. *Materials at High Temperatures*, 2007, 24(1): 1-26.
 - [22] KOCKS U F. Laws for Work-Hardening and Low-Temperature Creep[J]. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 1976, 98(1): 76-85.
 - [23] MECKING H, KOCKS U F. Kinetics of Flow and Strain-Hardening[J]. *Acta Metallurgica*, 1981, 29(11): 1865-1875.
 - [24] ESTRIN Y. Dislocation Theory Based Constitutive Modelling: Foundations and Applications[J]. *Journal of Materials Processing Technology*, 1998, 80-81: 33-39.
 - [25] 赵建锋. 基于变形机理的梯度晶粒结构材料的本构模型研究[D]. 成都: 西南交通大学, 2020.
ZHAO Jian-feng. Deformation Mechanism Based Constitutive Modeling of Gradient Structured Materials[D]. Chengdu: Southwest Jiaotong University, 2020.
 - [26] LU L, CHEN X, HUANG X, et al. Revealing the Maximum Strength in Nanotwinned Copper[J]. *Science*, 2009, 323(5914): 607-610.
 - [27] HUANG Y, QU S, HWANG K C, et al. A Conventional Theory of Mechanism-Based Strain Gradient Plasticity[J]. *International Journal of Plasticity*, 2004, 20(4-5): 753-782.
 - [28] HUANG H W, WANG Z B, LU J, et al. Fatigue Behaviors of AISI 316L Stainless Steel with a Gradient Nanostructured Surface Layer[J]. *Acta Materialia*, 2015, 87: 150-160.