

西安交通大学

硕士学位论文

基于共线微滑移带模型对材料屈服强度尺寸效应的研究

学位申请人：邱一可

指导教师：马利锋教授

学科名称：力学

2018年05月

**Study on Size-Effect of Yield Strength of Metal Materials Based
on the Collinear Micro-Shear-Bands Model**

A thesis submitted to
Xi'an Jiaotong University
in partial fulfillment of the requirements
for the degree of
Master of Engineering

By
Yike Qiu
Supervisor: Prof. Lifeng Ma
(Mechanics)
May 2018

论文题目：基于共线微滑移带模型对材料屈服强度尺寸效应的研究

学科名称：力学

学位申请人：邱一可

指导教师：马利锋 教授

摘 要

许多实验结果表明，多晶材料的屈服强度随晶粒尺寸的变化而变化。同样地， γ' 相强化镍基合金的屈服强度也受 γ' 相尺寸影响。因此，如何描述这两种尺寸效应对材料屈服强度的影响是我们所面临的一大挑战。基于观察所得的实验现象，我们建立了一个共线微滑移带模型来研究这两种尺寸效应对材料屈服强度的影响。利用 Gauss-Jacobi 插分格式和位错分布法，对剪应力作用下的多共线微滑移带模型进行求解，在此基础上求解了材料屈服强度尺寸效应的新关系式，具体归纳如下：

首先应用 Gauss-Jacobi 求积公式对第二类奇异积分方程进行了彻底的求解，并给出了其数值解的通式。并在其基础上给出了第一类奇异积分方程数值解的通式及其常用的特殊情况。

然后应用 Gauss-Jacobi 插分格式系统地求解了单边微滑移带在恒定或变晶格摩擦力作用下的位错密度数值解，探究了材料屈服强度与微滑移带长度的关系，并讨论了边界效应以及晶格摩擦力对材料屈服强度的影响。

其次，应用 Gauss-Jacobi 插分格式求解了有限多共线微滑移带模型，探究了材料屈服强度与微滑移带长度、间距、数量的关系，以及基体内部的应力分布，并讨论了微滑移带之间的相互干涉对材料屈服强度的影响。

最后，推导了无限多共线微滑移带模型的解析解，进而得到了一个材料屈服强度尺寸效应的新关系式，该关系式表明屈服强度是平均晶粒尺寸或 γ' 相颗粒尺寸的函数。应用无限多共线微滑移带的通用理论模型，对纯金属材料屈服强度的晶粒尺寸效应和镍基合金金属材料屈服强度的 γ' 相颗粒尺寸效应进行了研究。相关验证实例表明，相较于传统 Hall-Petch 关系式，新材料屈服强度尺寸效应关系式能更好地描述某些材料的晶粒尺寸效应对其屈服强度的影响，且能从理论角度出发，解释镍基合金屈服强度与 γ' 相尺寸的 Hall-Petch 关系。

关键词：Hall-Petch 关系；晶粒尺寸效应； γ' 相尺寸效应；共线微滑移带模型；屈服强度

论文类型：理论研究

Title: Study on Size-Effect of Yield Strength of Metal Materials Based on the Collinear Micro-Shear-Bands Model

Discipline: Mechanics

Applicant: Yike Qiu

Supervisor: Prof. Lifeng Ma

ABSTRACT

Numerous experimental evidences show that the grain size may significantly alter the yield strength of metals. Similarly, in γ' -strengthened nickel-based superalloys, the precipitate size also influences their yield strength. Then, how to describe such two kinds of size effects on the yield strength is a very practical challenge. According to experimental observations, a collinear micro-shear-bands model is proposed to explore these size effects on metal materials' yield strength. Based on the Gauss-Jacobi quadrature and distributed dislocation technique, both the numerical and analytical solutions for the simple model are derived, and a new expression for the size effect of yield strength is derived. The main research contents and results of this thesis can be summarized as follows:

First, an efficient numerical method based on the Gauss-Jacobi quadrature to solve the singular integral equation of the second kind is proposed. Based on this numerical method, the general solution of the singular integral equation and some special useful cases are derived.

Second, the single-ended micro-shear-band model under pure remote shear load is solved. The numerical solution for the dislocation distribution density function on the single-ended micro-shear-band model under the constant or variant internal friction is given by using the Gauss-Jacobi quadrature. The relationship between the yield strength of metal materials and the length of micro-shear-band is explored. And the impact of free boundary and the internal friction on the yield strength was discussed.

Moreover, the multiple micro-shear-bands model is studied by using the Gauss-Jacobi quadrature. The relationship among the yield strength of metal materials, the length of micro-shear-bands, the number of micro-shear-bands and the distance between micro-shear-bands is explored. And the impact of interaction between the matrix and micro-shear-bands on the yield strength was discussed.

Finally, the analytic solution for the infinite collinear micro-shear-bands is derived. Nevertheless, a new expression for the size-effect of yield strength is obtained. It reveals that the yield strength is a function of average grain-size or precipitate-size, which is able to reasonably explain size effects on yield strength. The typical example validation shows that the new relationship is not only able to precisely describe the grain-size effect in some cases,

but also able to theoretically address the unexplained Hall-Petch relationship between the γ' precipitate size and the yield strength of nickel-based superalloys.

KEY WORDS: Hall-Petch Relationship; Grain-size-effect; γ' precipitate-size-effect; Collinear micro-shear-bands model; Yield strength

TYPE OF THESIS: Theoretical Research

目 录

1 绪论	1
1.1 选题背景和意义	1
1.2 材料屈服强度尺寸效应的研究现状及发展趋势	2
1.2.1 材料屈服强度尺寸效应的相关实验研究	2
1.2.2 材料尺寸效应的理论模型	3
1.2.3 材料屈服强度尺寸效应的修正指数公式	5
1.3 本文的主要工作	6
2 基于 Gauss-Jacobi 求积公式的第二类奇异积分方程数值解法	7
2.1 引言	7
2.2 微滑移带模型的奇异积分方程数值解的函数形式以及相关性质	7
2.3 积分插值公式	9
2.4 Gauss-Jacobi 插分格式的退化情况	11
3 剪应力作用下的单边微滑移带	15
3.1 引言	15
3.2 位错分布法	15
3.3 恒定晶格摩擦力作用下的单边微滑移带	17
3.4 变晶格摩擦力作用下的单边微滑移带	21
3.5 本章小结	24
4 剪应力作用下的多共线微滑移带	26
4.1 引言	26
4.2 有限多共线微滑移带模型的数值通解	27
4.3 无限多共线微滑移带模型的数值通解	29
4.4 算例及拟合结果	31
4.4.1 剪应力作用下的 5 条共线微滑移带	31
4.4.2 材料屈服强度与微滑移带长度、间距的关系	32
4.4.3 材料屈服强度与微滑移带数量的关系	34
4.5 本章小结	35
5 剪应力作用下的无限多条共线微滑移带	37
5.1 引言	37
5.2 无限多共线微滑移带模型的解析解	37
5.2.1 微滑移带上的位错分布密度函数解析解	38
5.2.2 屈服强度尺寸效应的新表达式	40
5.3 讨论	40

5.3.1 模型的两种退化形式	41
5.3.2 典型纯金属材料屈服强度的晶粒尺寸效应	41
5.3.3 镍基合金的屈服应力	43
5.4 本章小结	44
6 结论与展望	46
6.1 结论	46
6.2 展望	46
致 谢	48
参考文献	49
攻读学位期间取得的研究成果	53
声明	

CONTENTS

1 Prefaces	1
1.1 Background and Significances of the Topic	1
1.2 Brief Overview of Current Research.....	2
1.2.1 Related experimental results	2
1.2.2 Theretical Models of Hall-Petch Relationship.....	3
1.2.3 The Power-Law Formulae of the Size-Effects	5
1.3 The Main Contents of the Thesis	6
2 Numerical Method for the Solution of Singular Integral Equations of the Second Kind	7
2.1 Introduction	7
2.1 Functional Form for the Solution of Singular Integral Equations for Micro-Shear-Bands Model and Some Related Identities	7
2.2 Interpolative Quadrature Formulae	9
2.3 Special Cases of the Gauss-Jacobi Quadrature	11
3 Single-Ended Micro-Shear-Bands under Shear Loads.....	15
3.1 Introduction	15
3.2 Distributed Dislocation Method	15
3.3 Single-Ended Micro-Shear-Bands under Constant Internal Friction	17
3.4 Single-Ended Micro-Shear-Bands under Variant Internal Friction.....	21
3.5 Brief Summaries.....	24
4 Multiple Collinear Micro-Shear-Bands under Shear Loads.....	26
4.1 Introduction	26
4.2 The General Numerical Solution for Multiple Collinear Micro-Shear-Bands Model ..	27
4.3 The General Numerical Solution for Infinite Collinear Micro-Shear-Bands Model ...	29
4.4 Some Examples	31
4.4.1 5 Collinear Micro-Shear-Bands under Pure Shear Load.....	31
4.4.2 The Relationship among the Yield Strength, the Length of Micro-Shear-Bands and the Distance between Micro-Shear-Bands.....	32
4.4.3 The Relationship between the Yield Strength and the Number of Micro-Shear-Bands	34
4.5 Brief Summaries.....	35
5 Infinite Collinear Micro-Shear-Bands under Shear Loads.....	37
5.1 Introduction	37
5.2 The Analytical Solution for the Infinite Collinear Micro-Shear-Bands Model.....	37
5.2.1 The Analytical Solution for the Dislocation Density Function	38
5.2.2 The New Expression of Size-Effect of Yield Strength.....	40
5.3 Discussions.....	40
5.3.1 Two Degenerate Cases	41

5.3.2 Typical Grain-Size Effect on Yield Strength of Metals.....	41
5.3.3 The Yield Strength of Nickel-Based Superalloys.....	43
5.4 Brief Summary	44
6 Conclusions and Suggestions	46
6.1 Conclusions	46
6.2 Suggestions.....	46
Acknowledgements	48
References	49
Achievements	53
Declarations	

1 绪论

1.1 选题背景和意义

上世纪 50 年代, Hall^[1]和 Petch^[2]分别对室温下铁的屈服应力和低温条件下钢的解理断裂破坏应力与晶粒尺寸之间的关系进行了大量研究, 提出了著名的 Hall-Petch 经验关系式:

$$\sigma_y = \sigma_0 + kd^{-1/2} \quad (1-1)$$

其中: σ_y 是室温下铁的屈服应力或低温条件下钢的解理断裂破坏应力; d 是晶粒的平均直径; k 是相邻晶粒位向差对位错运动的影响系数, 对应晶界处塑性流移动所需的局部应力 (k_y) 或者低温时发生解理断裂所需的局部应力 (k_c); σ_0 是阻止位错滑移的摩擦力, 分别对应常温条件下屈服发生时的晶格摩擦力 σ_{0y} 或低温条件下解理断裂发生时的晶格摩擦力 σ_{0c} 。Hall-Petch 效应表明, 材料的屈服强度随晶粒尺寸的减小而增加^[3]。

Hall-Petch 效应广泛存在于所有金属多晶材料中, 研究者们也将 Hall-Petch 关系应用于除钢以外其他材料的相关力学性能的研究, 包括材料韧性与脆性之间的转换行为, 相关的 bcc, hcp 和 fcc 材料的应力-应变关系以及疲劳, 断裂, 剪切带和应变率敏感性等力学行为^[3, 4]。因此对 Hall-Petch 效应的研究有利于理解材料的强度、硬度、疲劳和破坏等力学性能, 对航天、船舶、车辆、动力、纳米等多个领域的尖端材料的发展有着重要作用。

工业上将通过细化晶粒以提高材料强度的方法称为细晶强化, 这是一种非常典型的 Hall-Petch 效应在实际生产当中的应用。工业中常用细晶强化的方法包括提高冷却速度、变质处理、机械振动、超声振动和电磁搅拌等。比如在铸锭过程中如果施加不同频率和相位的交变磁场, 可以改变液态金属的流动状态及凝固条件, 以达到细化晶粒的目的, 从而使材料的强度、耐磨性、韧性等机械性能得到显著提升^[5]。此外, 通过向金属中加入微量其他元素, 可以使晶界上的原子发生偏转, 进而提高 k 值, 从而提升材料的强度。例如向奥氏体中投入少量的硼或者氮, 对 Hall-Petch 关系中的摩擦应力 σ_0 影响不大, 但却能显著提升 k 值, 从而达到改善 304 不锈钢性能的目的^[6]。

另一方面, Hall-Petch 效应也被运用到纳米材料机械性能的研究和预测中, 包括晶粒尺寸和纳米孪晶强化现象的关系, 以及当纳米金属材料的晶粒尺寸达到一定临界值后, 有些材料会出现反 Hall-Petch 效应^[7], 即随着晶粒尺寸减小, 材料的屈服强度也随之减小。

因而对 Hall-Petch 效应的研究, 有利于理解材料的屈服强度、疲劳和破坏等力学性能, 对提高材料的性能有重要的指导意义。

1.2 材料屈服强度尺寸效应的研究现状及发展趋势

1.2.1 材料屈服强度尺寸效应的相关实验研究

自 1951 年 Hall^[1]和 1953 年 Petch^[2]基于对室温下铁的屈服应力和低温条件下钢的解理断裂应力的晶粒尺寸效应之间的关系的大量研究,首次提出了低碳钢的初始屈服点 σ_y 与晶粒尺寸 d 之间的经验公式之后,国内外学者们进一步在材料的不同种实验中发现了相似的现象,如单晶材料的压缩试验^[8],金属丝的扭转试验^[9],金属弯曲薄片的拉伸试验^[10]以及微柱压缩试验^[11-13]等等。

由于材料强度一直是材料界的热点,对不同类型的金属材料,相关实验结果也非常多:

1) bcc 材料的晶粒尺寸效应

Armstrong 和 Petch^[14]通过实验研究了 Hall-Petch 效应在低碳钢的完全应力应变行为和屈服后的变形行为中的应用,为低碳钢的 Hall-Petch 关系式中摩擦应力 σ_{oc} 和局部应力 k_c 提供了较为合理的解释; Dingley 和 McLean^[15], Jang 和 Koch^[16]先后研究了铁材料在传统尺度下和纳米尺度下的尺寸效应; Vashi 等^[17]研究了钨的 Hall-Petch 效应; Lindley 和 Smallman^[18]研究了低温下传统尺度下钒的 Hall-Petch 效应, Jankowski 等研究了钒和钼超细晶的尺寸效应^[19]。

2) hcp 材料的晶粒尺寸效应

Hauser 等^[20]及 Caceres 和 Blake^[21]先后研究了镁材料的 Hall-Petch 效应, Yang 和 Ghosh^[22], Del Valls 和 Ruano^[23]研究了 AZ31 等 hcp 型合金材料的 Hall-Petch 效应; Jones 和 Conrad^[24], Wang 等^[25]先后研究了钛材料在传统尺度下和纳米尺度下的尺寸效应; Chmelik 等^[26]研究了室温下纯锌的尺寸效应, Zhang 等研究了纳米锌材料的尺寸效应; Mannan 和 Rodriguez^[27]研究了镉的晶粒尺寸效应。

3) fcc 型材料的晶粒尺寸效应

Hansen^[28], Al-Haidary 等^[29]研究了传统尺度下纯铝的完整应力应变关系, Lu 和 Chen^[30]等研究了纯铜的超细晶材料,结合 1982 年 Hansen 和 Ralph^[31]的研究结果,发现铜的局部应力系数 k_c 是恒定的; Keller 和 Hug^[32]研究了传统尺度下的纯镍材料的 Hall-Petch 效应, Tsuji^[33]研究了纯镍的超细晶材料,结合前人的研究结果,发现镍的 k 值是不连续的, Narutani 和 Takamura^[34]研究了镍材料的 Hall-Petch 效应,并发现其局部应力 k_c 与材料的应变率有关,应变率越大,镍材料的局部应力 k_c 越大。

4) γ' 相强化镍基合金的析出相尺寸效应

除晶粒尺寸效应外,实验观察发现合金材料析出相的尺寸也与材料的屈服强度直接相关,其中被研究地相对较多的一种合金为 γ' 相强化镍基合金。实验表明,对析出相强化镍基合金, γ' 相的体积分数,尺寸及其分布与镍基合金屈服强度直接相关^[35-37]。Oh 和 Han^[38]在对镍基合金进行热处理后发现其临界剪切应力 (CRSS) 与 γ' 相尺寸的平方根成反比。Zhang^[39,40]等在研究 γ' 析出相尺寸对定向固化的镍基合金屈服强度的影响时

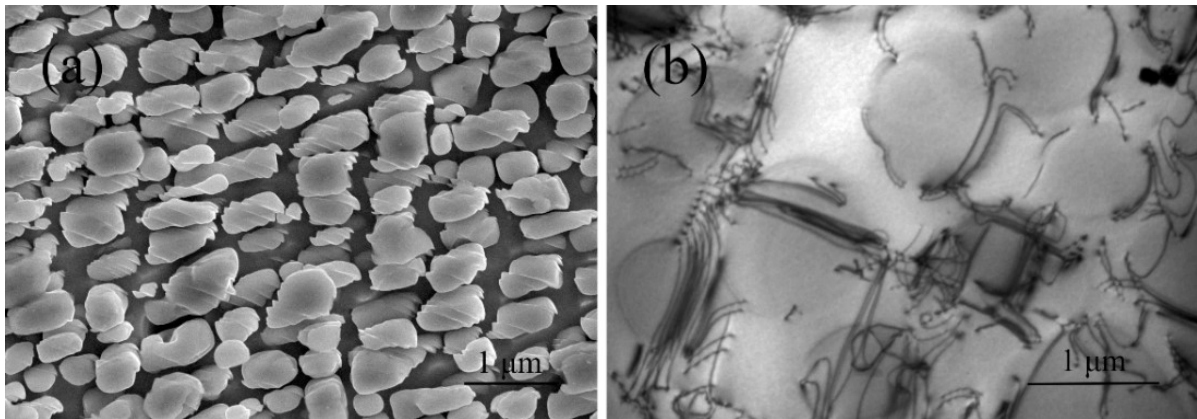
(a) 微滑移带上的 γ' 析出相颗粒;(b) 成对的 $a/2 \langle 110 \rangle$ 位错^[30]

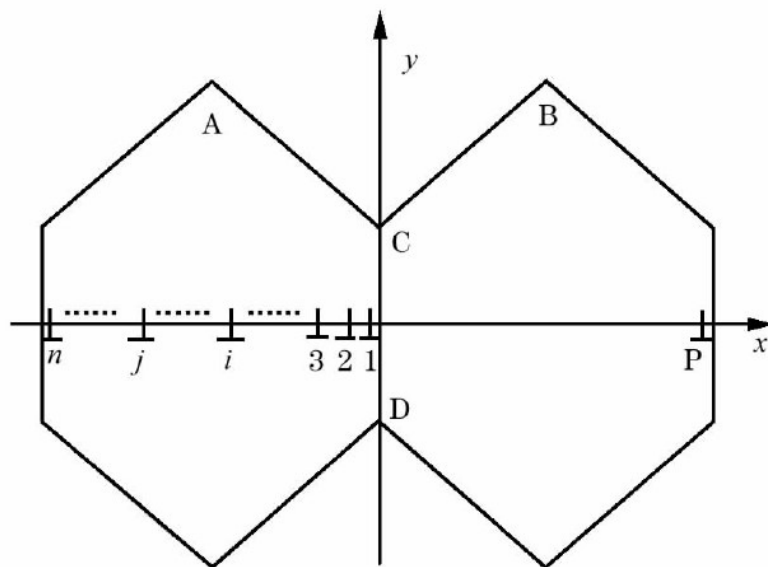
图 1-1 M4706 合金在 650°C 下拉伸试验后微结构的变形机理

发现，当镍基合金 γ' 相尺寸约为 $1 \mu\text{m}$ 时，镍基合金达到塑性阶段时，成对的 $\langle 110 \rangle$ 向 $a/2$ 位错直穿过 γ' 相，而非绕过 γ' 析出相颗粒，并且当温度在 650°C 时，镍基合金的屈服强度与 γ' 析出相尺寸平方根成反比。这些实验结论证明在 γ' 相强化镍基合金中， γ' 相尺寸与镍基合金材料屈服强度也满足 Hall-Petch 关系。

1.2.2 材料尺寸效应的理论模型

除通过实验测定材料强度与晶粒尺寸的关系，如何使用理论模型来解释金属材料的尺寸效应也一直是材料界和力学界的兴趣所在。但大部分的模型还是将 Hall-Petch 关系式中晶格摩擦力 σ_0 和局部应力 k 两项分开考虑，其中一般认为 k 与晶粒细化强化现象有关，而 σ_0 则用于解释其余所有与晶粒细化强化现象无关的材料强化效应。常见的金属材料屈服强度尺寸效应的理论模型可以分为以下几类：

1) 位错塞积模型

图 1-2 位错塞积模型^[36]

1951年, Hall^[1]首次提出可以采用 Eshelby 的位错塞积模型^[41]对 Hall-Petch 现象进行解释, 如图 1-2 所示, 假设晶粒内部嵌有一条微滑移带, 其长度与晶粒直径 d 基本相等, 上面分布有 n 个离散位错, 当该列位错端部在晶界处塞积并且当超过某一临界应力时, 该晶粒晶界处位错发射进入相邻的晶粒, 此时可认为材料发生屈服。由于晶界阻碍了位错活动, 位错塞积模型的长度由晶粒尺寸限制, 进一步限制了位错塞积端部的应力值, 由此解释了材料的 Hall-Petch 效应。1958年, Cottrell^[42]研究认为在一个晶粒内部中由于位错塞积产生的应力会激活相邻晶粒内部的 Frank-Read 位错源。1962年, Armstrong 等^[14]表示相邻晶粒内的位错源可能在另一个滑移系中而非位错塞积所在滑移系, 并运用 Taylor 系数 m 解释了晶体结构对 k 的影响。1970年, Li 和 Chou^[43]研究并总结了不同位错塞积模型并给出了晶粒细化强化模型的一般公式。1996年, Nazarov^[44]研究认为当位错塞积模型端部的剪应力值达到了临界值后, 材料达到屈服, 此时晶界膜层对位错运动的阻碍被破坏, 位错在晶界处积累并对晶界膜层的强度产生巨大的影响。2012年, 邹章雄等^[45]讨论了位错塞积模型适用的范围。虽然位错塞积模型解释了很多立方结构金属材料的 Hall-Petch 效应, 但是该模型仍存在一些缺陷, 如缺少位错塞积模型长度与晶粒大小有关的直接证据, 也不能解释 Floreen 和 Westbrook^[46]在镍硫合金实验中参数 k 对一般晶界结构和化学性质的敏感性等现象。

2) 加工硬化理论模型

针对位错塞积模型的缺陷, 研究者们提出了新的加工硬化理论模型。其中一种是晶界源模型, 该模型假设晶界本身可直接作为位错源, 影响了位错密度 ρ , 进而影响流变应力值。1963年, Li^[47]率先提出了用晶界源理论来解释 Hall-Petch 效应的方法, 由于屈服时晶界处产生的位错会使材料得到强化, 通过引入 Taylor 硬化理论可推出 Hall-Petch 公式, 并且由于位错一般在晶界上的台阶或坎处产生, 所以位错密度与晶界面积成正比。2004年, Bata 和 Pereloma^[48]研究认为晶粒细化强化现象是由于晶界处位错发射需要做功而非由于 Taylor 硬化公式。但同位错塞积模型一样, 这种模型也同样存在没有晶界台阶或坎密度与位错密度之间的直接证据。

另一种加工硬化模型是 1971年 Ashby^[49]提出的几何必需位错理论 (Geometrically necessary dislocations, 记作 GNDs), 与晶界源理论不同的是, Ashby 尝试通过调和两组实验观察结果而非使用任意一种猜测的力学模型, 多晶材料中的晶粒的运动可以分解为两步: (1) 受拉伸时材料内部晶粒沿滑移面在最大分解切应力作用下产生无约束位移, 位错在晶粒中积累, 密度为 ρ_{SS} , 晶粒间产生大量孔洞和重叠; (2) 通过晶界附近引入位错阵列晶粒间孔洞和重叠消失, 该位错即为几何必需位错, 密度为 ρ_{GN} , 通过引入 Taylor 硬化公式, 可推出几何必需位错对材料的强度的影响, 当 $\rho_{GN} \gg \rho_{SS}$ 时, 即可用于预测小塑性应变下材料的屈服应力。这个模型可以用于解释大多金属 k 值与塑性应变 ε 的关系, 但是仍有部分研究发现包括 hcp 型金属钛^[47]和锆^[50], fcc 型金属铜^[51], 和 bcc 型金属铁的 k 值与塑性应变 ε 不满足该模型。

3) 平均位错滑移距离模型

1963 年 Conrad^[52]首次提出了平均位错滑移距离模型, 该模型所推出的结果与 Ashby 的几何必需位错理论相似但假设不同, 它假设平均位错滑移距离与晶粒尺寸的平方根成正比且位错不会成对湮灭, 则通过 Taylor 硬化公式可给出其对材料的强度的影响。1967 年, Conrad^[53]指出平均位错滑移距离与晶粒尺寸成正比而非与晶粒尺寸的平方根成正比。1974 年, Meakin 和 Petch^[54]通过将位错塞积模型和 Conrad 的滑移距离模型结合, 给出了 Hall-Petch 模型的新理论模型。

1.2.3 材料屈服强度尺寸效应的修正指数公式

虽然大部分的实验结果和理论模型都预测材料的强度与其晶粒直径的平方根成正比, 但也有文献表明, Hall-Petch 关系对金属材料不总是完全适用^[55]。基于 Hall-Petch 关系式, 人们用一个指数形式的修正公式来表示晶粒的尺寸效应:

$$\sigma_y = \sigma_0 + kd^{-\alpha}, \quad (1-2)$$

其中, α 是晶粒尺寸指数的拟合参数, 对应不同金属材料, 其范围在 0.2-1 之间波动: Chrisman^[56]发现对 fcc 金属材料, α 应当为 1/3, 而对 bcc 金属材料, α 则在 0.5-0.9 之间波动。Korte 和 Clegg^[57]认为, 在强度较大的材料中, 其晶粒尺寸效应对屈服强度的影响越小, 而对 fcc 金属材料, 其晶粒尺寸指数 α 约为 0.5 或更小, bcc 材料的晶粒尺寸指数 α 范围为 0.6 到 1, 对于陶瓷材料, 其晶粒尺寸指数则是 0.2 甚至更小。在理论方面, 科学家们也对金属材料的晶粒尺寸进行了深入的探讨: 1942 年, Bragg^[58]最初先推导出 $\alpha=1$; 1958 年, Baldwin^[59]则试图用单晶模型证明 $\alpha=1/3$; Conrad^[52]利用平均滑移距离模型, 假设平均位错滑移距离与晶粒尺寸的平方根成正比且位错不会成对湮灭, 则通过 Taylor 硬化公式可推出 $\alpha=1/4$; 在建立了高阶晶体塑性模型后, 分析表明晶粒的尺寸效应对材料屈服强度的影响可能会更强: Evers^[60]等利用晶体塑性模型计算出晶粒尺寸指数 α 应当为 1.19, Courts^[61]等利用非局部晶体塑性模型推导得 α 值等于 1.31。虽然已有的理论模型有很多, 但是它们都无法说明晶粒指数 α 为何会在 0.2-1 之间波动, 也无法给出其一个较为明确的物理意义的解释。

回顾上述研究结果后, 我们可以得到以下两个结论: (i) 虽然 Hall-Petch 效应应用非常广泛, 但是对于部分材料, 它存在一定局限性; (ii) 修正过后的指数型尺寸效应的表达式虽然对所有材料都基本使用, 但是晶粒尺寸指数拟合参数 α 的取值范围太过分散, 使得公式的物理含义不够明确。因此, 对于普通金属材料晶粒尺寸和镍基合金的 γ' 相尺寸, 仍然缺乏一个有效的公式来表述它们与材料屈服强度之间的关系。

基于此, 本文着眼于多晶材料屈服强度的金属晶粒尺寸效应和镍基合金的 γ' 相尺寸效应, 从传统位错塞积理论入手, 构建一个共线微滑移带模型, 利用位错分布法和叠加原理, 求解该模型的解析解并进而推得材料塑性强度表达式。该表达式不仅能合理表述尺寸效应对材料屈服强度的影响, 并且具有清晰的物理意义。

1.3 本文的主要工作

结合上节的研究现状及所存在的问题，本文拟建立一个共线微滑移带模型来研究这晶粒尺寸效应和 γ' 析出相尺寸效应对材料屈服强度的影响。本文之后的内容由以下几部分组成：

首先，第二章将通过第二类广义奇异积分方程进行离散化，从而得到该类奇异积分方程的通用 Gauss 型插分格式；其次将推导第一类广义奇异积分方程的退化形式的 Gauss 型插分格式，并证明该数值方法的正确性。接下来在第三章中，将介绍如何用 Gauss-Jacobi 插分格式系统地求解单边微滑移带在恒定或变晶格摩擦力作用下的位错密度数值解，并探究材料屈服强度与微滑移带长度的关系，最后给出边界效应以及晶格摩擦力与材料屈服强度的内在联系。第四章中，在应用 Gauss-Jacobi 插分格式求解有限多共线微滑移带模型后，继续探究材料屈服强度与微滑移带长度、间距、数量的关系，以及基体内部的应力分布，并讨论了微滑移带之间的相互干涉对材料屈服强度的影响。然后在第五章中，首先推导无限多共线微滑移带模型的解析解，进而得到一个关于材料屈服强度尺寸效应的新关系式，然后应用无限多共线微滑移带的通用理论模型，对纯金属材料屈服强度的晶粒尺寸效应和镍基合金金属材料屈服强度的 γ' 相颗粒尺寸效应进行分析，并应用相关实例检验模型的可行性。最后，第六章将总结本文主要结果，并对进一步研究内容进行展望。

2 基于 Gauss-Jacobi 求积公式的第二类奇异积分方程数值解法

2.1 引言

本文主要研究基于传统位错塞积理论的共线微滑移带模型，并将该模型应用于对晶粒和 γ 相尺寸效应对材料屈服强度影响的研究。在数学上，该类模型可以被归结为对奇异积分方程的求解^[62,63]。从上世纪 50 年代起，一些学者对奇异积分方程已展开了一定的研究：1953 年，Muskhelishvili^[64]首先对奇异积分方程的解析解进行了系统地研究，但是对于大多奇异积分方程，直接求解其解析解存在一定困难，因此，前人对如何用数值方法求解奇异积分方程也做出了大量努力：1973 年，Erdogan 和 Gupta^[62,65]系统研究了如何用 Gauss-Chebyshev 和 Gauss-Jacobi 多项式求解带 Cauchy 核的奇异积分方程；1975 年，Krenk^[66,67]研究了 Gauss-Jacobi 求积公式用于第二类奇异积分方程的求解；其后，Ma^[68]讨论了如何利用 Gauss-Jacobi 求积公式的归一化形式求解仅含 Cauchy 核的第一型和第二项奇异积分方程，并将之应用于接触问题的求解。

求解奇异方程数值解的传统方法一般是将未知函数表示为一个用 Jacobi 或 Chebyshev 多项式级数展开的有界连续函数与特定形式权函数的积，再利用 Gauss 积分方程将奇异积分方程转化为不含积分的线性方程组进行求解，但在级数展开的过程中，函数值在奇异点处变动很大。Ma 利用 Jacobi 多项式的归一化形式，将未知函数用拉格朗日插值形式展开，改进了所求解函数在奇异点处值的精度，但相关工作局限于仅含 Cauchy 核的奇异积分方程。

本章在前人的工作基础上，对 Gauss-Jacobi 求积公式对广义第二类奇异积分方程进行了彻底的求解。本章第二节首先介绍固体力学中奇异积分方程数值解的函数形式以及相关性质，随后在第三节中给出基于 Gauss-Jacobi 求积公式的对广义第二类奇异积分方程的数值求解方法及其数值通解；最后，在第四节中，将给出特殊的第一类奇异积分方程退化情况的数值通解，并与前人研究结果对比。

2.2 微滑移带模型的奇异积分方程数值解的函数形式以及相关性质

考虑受剪切力的无限大二维弹性基体中的微滑移带模型，该模型可以用一个广义的带 Cauchy 算子的第二型 Fredholm 奇异积分方程表示^[63]：

$$a\phi(x) + \frac{b}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{\phi(t)}{t-x} dt + \int_{-1}^1 k(x,t)\phi(t) dt = f(x), \quad |x| < 1 \quad (2-1)$$

其中 $f(x)$ 是一个与外加载荷有关的已知连续函数； a 和 b 是材料常数； $k(x,t)$ 是区间 $[-1,1]$ 上的一个满足 Hölder 连续条件的已知连续函数； $\phi(x)$ 是区间 $[-1,1]$ 上的一个未知 H-连续函数，在断裂力学中，该参量与位错分布密度或断裂面相对位移有关，由此对基

于传统位移塞积理论的微滑移带模型的研究可以归结于对奇异积分方程的求解。因此首先需要给出求解过程中涉及的奇异积分方程的求解方法。

Muskhelishvili^[64]和 Erdogan 等^[62]已经证明式(2-1)的解可以写作权函数 $w(x)$ 和一个未知有界连续函数 $g(x)$ 的积, 即有:

$$\phi(x) = \omega(x)g(x) \quad (2-2)$$

其中:

$$\begin{aligned} \omega(x) &= (1-x)^\alpha (1+x)^\beta \\ \alpha &= \frac{1}{2\pi i} \ln \left(\frac{a-ib}{a+ib} \right) + N \\ \beta &= -\frac{1}{2\pi i} \ln \left(\frac{a-ib}{a+ib} \right) + M \\ &(-1 < \alpha, \beta < 1, -1 < x < 1) \end{aligned} \quad (2-3)$$

且有 $\kappa = -(\alpha + \beta) = N + M$, N 和 M 为整数, $i = \sqrt{-1}$ 。实际问题中, 指标 κ 是一个整数, 其值由问题的物理性质决定, 一般可假设为 -1, 0, 和 1。

未知有界函数 $g(x)$ 可以用一系列 Jacobi 多项式的归一化形式 $p_n^{(\alpha, \beta)}(x)$ 来表示^[69], 其中 Jacobi 多项式的归一化形式 $p_n^{(\alpha, \beta)}(x)$ 可用标准形式 Jacobi 多项式 $P_n^{(\alpha, \beta)}(x)$ 表示:

$$p_n^{(\alpha, \beta)}(t) = k_n^{-1} P_n^{(\alpha, \beta)}(t) \quad (2-4)$$

其中:

$$\begin{aligned} k_n &= \frac{\Gamma(\alpha + \beta + 2n + 1)}{2^n n! \Gamma(\alpha + \beta + n + 1)} \\ P_n^{(\alpha, \beta)}(x) &= \frac{(-1)^n}{2^n n!} (1-x)^{-\alpha} (1+x)^{-\beta} \frac{d^n}{dx^n} \left[(1-x)^{\alpha+n} (1+x)^{\beta+n} \right] \end{aligned} \quad (2-5)$$

且 Jacobi 多项式的归一化形式 $p_n^{(\alpha, \beta)}(x)$ 有两个重要性质如下:

性质 1: 对 $p_n^{(\alpha, \beta)}(x)$ 有该循环等式恒成立:

$$p_n^{(\alpha, \beta)}(x) = (x - b_n) p_{n-1}^{(\alpha, \beta)}(x) - c_n p_{n-2}^{(\alpha, \beta)}(x) \quad (n \geq 2) \quad (2-6)$$

其中:

$$b_n = \frac{(\alpha + \beta)(\beta - \alpha)}{(\alpha + \beta + 2n)(\alpha + \beta + 2n - 2)} \quad (2-7)$$

$$c_n = \frac{4(n-1)(\alpha + n - 1)(\beta + n - 1)(\alpha + \beta + n - 1)}{(\alpha + \beta + 2n - 1)(\alpha + \beta + 2n - 2)^2(\alpha + \beta + 2n - 3)}$$

并有:

$$p_0^{(\alpha, \beta)}(x) = 1, \quad p_1^{(\alpha, \beta)}(x) = x + \frac{\alpha - \beta}{(\alpha + \beta + 2)} \quad (2-8)$$

性质 2: 对 $p_n^{(\alpha, \beta)}(x)$ 的导数有两个重要的循环关系如下:

$$(1-x^2)p_n^{(\alpha, \beta)}(x) = \left[\frac{\alpha - \beta}{\alpha + \beta + 2n} - x \right] np_n^{(\alpha, \beta)}(x) + \frac{4n(\alpha + n)(\beta + n)(\alpha + \beta + n)}{(\alpha + \beta + 2n)^2(\alpha + \beta + 2n - 1)} p_{n-1}^{(\alpha, \beta)}(x)$$

$$\frac{d}{dx} p_n^{(\alpha, \beta)}(x) = np_{n-1}^{(\alpha+1, \beta+1)}(x) \quad (2-9)$$

性质 3: 有一个关于 Jacobi 多项式的归一化形式成立的等式如下:

$$\int_{-1}^1 \frac{p_n^{(\alpha, \beta)}(t) \omega(t)}{t-x} dt = \pi \left[-\frac{a}{b} w(x) p_n^{(\alpha, \beta)}(x) - \frac{1}{\sin \pi \alpha} p_{n-k}^{(-\alpha, -\beta)}(x) \right] \quad (2-10)$$

2.3 积分插值公式

假设离散的阶数为 n , 且将 $p_n^{(\alpha, \beta)}(x)$ 的根用 $\xi_i (i=1, 2, \dots, n)$ 表示, 即:

$$p_n^{(\alpha, \beta)}(\xi_i) = 0 \quad (2-11)$$

基于结点 $\xi_i (i=1, 2, \dots, n)$ 处的值, 我们将未知函数 $g(t)$ 用拉格朗日插值公式的形式表示如下:

$$g(t) \approx \sum_{i=1}^n \frac{p_n^{(\alpha, \beta)}(t)}{(t - \xi_i) p_n^{(\alpha, \beta)}(\xi_i)} g(\xi_i) \quad (2-12)$$

首先研究式 (2-1) 中等式左边的第二项, 将式 (2-12) 代入有:

$$\begin{aligned}
 \int_{-1}^1 \frac{\phi(t)}{t-x} dt &= \int_{-1}^1 \frac{\omega(t)g(t)}{t-x} dt \\
 &= \int_{-1}^1 \frac{\omega(t)}{t-x} \left[\sum_{i=1}^n \frac{p_n^{(\alpha,\beta)}(t)}{(t-\xi_i) p_n^{(\alpha,\beta)}(\xi_i)} g(\xi_i) \right] dt \\
 &= \sum_{i=1}^n \frac{g(\xi_i)}{p_n^{(\alpha,\beta)}(\xi_i)(x-\xi_i)} \left\{ \int_{-1}^1 \omega(t) \frac{p_n^{(\alpha,\beta)}(t)}{t-x} dt - \int_{-1}^1 \omega(t) \frac{p_n^{(\alpha,\beta)}(t)}{t-\xi_i} dt \right\}
 \end{aligned} \tag{2-13}$$

利用式 (2-10) 和 (2-11), 式 (2-13) 可以简化为如下形式:

$$\int_{-1}^1 \frac{\omega(t)g(t)}{t-x} dt = \sum_{i=1}^n \frac{g(\xi_i)}{p_n^{(\alpha,\beta)}(\xi_i)(x-\xi_i)} \left[\begin{array}{l} -\frac{a}{b} \omega(x) p_n^{(\alpha,\beta)}(x) \\ -\frac{1}{\sin \pi \alpha} p_{n-\kappa}^{(-\alpha,-\beta)}(x) + \frac{1}{\sin \pi \alpha} p_{n-\kappa}^{(-\alpha,-\beta)}(\xi_i) \end{array} \right] \tag{2-14}$$

利用式 (2-12), 式 (2-14) 可以改写为如下形式:

$$\begin{aligned}
 \int_{-1}^1 \frac{\omega(t)g(t)}{t-x} dt &= -\frac{\pi a}{b} \omega(x) g(x) \\
 &+ \sum_{i=1}^n \frac{g(\xi_i)}{p_n^{(\alpha,\beta)}(\xi_i)(x-\xi_i)} \left[-\frac{1}{\sin \pi \alpha} p_{n-\kappa}^{(-\alpha,-\beta)}(x) + \frac{1}{\sin \pi \alpha} p_{n-\kappa}^{(-\alpha,-\beta)}(\xi_i) \right]
 \end{aligned} \tag{2-15}$$

其次, 研究式 (2-1) 等式左边第三项, 利用式 (2-10), (2-11) 和 (2-12), 有:

$$\begin{aligned}
 \int_{-1}^1 k(x,t) \phi(t) dt &= \int_{-1}^1 k(x,t) \omega(t) g(t) dt \\
 &= \int_{-1}^1 k(x,t) \omega(t) \left[\sum_{i=1}^n \frac{p_n^{(\alpha,\beta)}(t)}{(t-\xi_i) p_n^{(\alpha,\beta)}(\xi_i)} g(\xi_i) \right] dt \\
 &= -\frac{\pi}{\sin \pi \alpha} \sum_{i=1}^n \frac{p_{n-\kappa}^{(-\alpha,-\beta)}(t)}{p_n^{(\alpha,\beta)}(\xi_i)} k(x, \xi_i) g(\xi_i)
 \end{aligned} \tag{2-16}$$

将式 (2-15) 和 (2-16) 代入式 (2-1), 利用式 (2-2), 则式 (2-1) 的插值形式可以写成如下形式:

$$\begin{aligned}
 &\sum_{i=1}^n \frac{g(\xi_i)}{p_n^{(\alpha,\beta)}(\xi_i)(x-\xi_i)} \left[-\frac{1}{\sin \pi \alpha} p_{n-\kappa}^{(-\alpha,-\beta)}(x) + \frac{1}{\sin \pi \alpha} p_{n-\kappa}^{(-\alpha,-\beta)}(\xi_i) \right] \\
 &- \frac{\pi}{\sin \pi \alpha} \sum_{i=1}^n \frac{p_{n-\kappa}^{(-\alpha,-\beta)}(\xi_i)}{p_n^{(\alpha,\beta)}(\xi_i)} k(x, \xi_i) g(\xi_i) = f(x)
 \end{aligned} \tag{2-17}$$

由此, 式 (2-1) 中未知函数 $\phi(x)$ 可以用一个仅含有 $g(x)$ 和 n 个固定插值点 $\xi_i (i=1, 2, \dots, n)$ 的多项式替换。

为了进一步化简求解 $g(\xi_i)$ 值的过程, 通过合理地选择插值点, 使值在仅有限个插值点 $x = x_j$ 处有等式成立, 以求得有效解。在式 (14) 中, 通过选择 $x = x_j$, 其中 x_j 为:

$$p_{n-\kappa}^{(-\alpha, -\beta)}(x_j) = 0 \quad (j=1, 2, \dots, n-\kappa) \quad (2-18)$$

因此, 式 (2-1) 可以简化为如下线性方程组:

$$\sum_{i=1}^n \frac{W(\xi_i)}{\sin \pi \alpha} \left[\frac{b}{x_j - \xi_i} - \pi k(x_j, \xi_i) \right] g(\xi_i) = f(x_j) \quad (2-19)$$

其中:

$$W(\xi_i) = \frac{p_{n-\kappa}^{(-\alpha, -\beta)}(\xi_i)}{p_n^{(\alpha, \beta)}(\xi_i)} \quad (2-20)$$

这里 n 个结点 $\xi_i (i=1, 2, \dots, n)$ 满足 $p_n^{(\alpha, \beta)}(\xi_i) = 0$, 而另外其余 $(n-\kappa)$ 个结点 x_j 满足 $p_{n-\kappa}^{(-\alpha, -\beta)}(x_j) = 0 (j=1, 2, 3, \dots, n-\kappa)$ 。

式 (2-19) 即为可应用于剪切微滑移带模型的第二型奇异积分方程的 Gauss-Jacobi 插分格式通式。它包括了未知函数在积分区域的两端点上 (i) 均为有界值; (ii) 均有奇异性; (iii) 一端为有界值一端有奇异性三种情况, 可以按 κ 值区分不同情况:

1) $\kappa = 1$

在该情况下式 (2-19) 的近似方程是非闭合的, 因为方程的数量相较于未知数的数量要少一个。因此需要平衡条件做为该附加条件, 对于无限大基体内的长度为 $2d$ 的剪切微滑移带, 位错分布密度函数 $\rho(x)$ 在整条微滑移带上的积分为 0。

$$\int_{-d}^d \rho(\xi) d\xi = 0 \quad (2-21)$$

利用式 (2-12), 并代入式 (2-11), (2-10), 由此式 (2-1) 可被转化为以下形式:

$$\sum_{i=1}^n W(\xi_i) g(\xi_i) = 0 \quad (2-22)$$

2) $\kappa = 0$

此时未知数的个数与式 (19) 中的方程相等, 因此该系统是闭合的, 此问题已被 Erdogan 等^[62]研究过了。

3) $\kappa = -1$

此时, 式 (2-19) 可满足 $n+1$ 个 x_j 处的值, 由于此处式 (19) 中仅有 n 个未知量 $g(\xi_i)$, 方程组 (2-19) 中一个与 x_j 有关的方程必须被忽略。该加载条件下, 微滑移带中心是未知的, 设 $f(x) = f_1(x-e)$, 其中 e 代表微滑移带的偏心距, 所以方程解必须满足以下一致性条件:

$$\int_{-1}^1 \frac{f_1(x-e)}{\omega(x)} dx = 0 \quad (2-23)$$

2.4 Gauss-Jacobi 插分格式的退化情况

在 2.3 节中我们得到了第二型奇异积分方程的 Gauss-Jacobi 插分格式, 基于此, 我们可以推导出一些奇异积分方程常用的退化情况。令式 (2-1) 中 $a=0, b=1$, 即可得到第一型奇异积分方程的标准形式。对不同类型的微滑移带模型, 利用式 (2-3) 即可求解得到相应的 α, β 和 κ 值。

1) 当 $\alpha = \beta = -1/2, \kappa = -(\alpha + \beta) = 1$ 时

此时式 (2-19) 中 Gauss 型插分格式权函数可退化为:

$$W(\xi_i) = \frac{p_{n-\kappa}^{(-\alpha, -\beta)}(\xi_i)}{p_n^{(\alpha, \beta)}(\xi_i)} = \frac{p_{n-\kappa}^{(-\alpha, -\beta)}(\xi_i)}{np_{n-1}^{(1+\alpha, 1+\beta)}(\xi_i)} = \frac{p_{n-1}^{(1/2, 1/2)}(\xi_i)}{np_{n-1}^{(1/2, 1/2)}(\xi_i)} = \frac{1}{n} \quad (2-24)$$

其中对 Jacobi 多项式的归一化形式:

$$p_n^{(1/2, 1/2)}(x) = \frac{2^{n+1} n! \Gamma\left(n + \frac{3}{2}\right)}{\Gamma(2n+2) \sqrt{\pi}} U_n(x) \quad (2-25)$$

即简化为第二类 Chebyshev 多项式的归一化形式, 将其代入式 (2-19) 和式 (2-21) 即有:

$$\sum_{i=1}^n \frac{1}{n} \left[\frac{1}{\xi_i - x_j} + \pi k(x_j, \xi_i) \right] g(\xi_i) = f(x_j) \quad (2-26)$$

$$\sum_{i=1}^n \frac{\pi}{n} g(\xi_i) = A \quad (2-27)$$

其中:

$$T_n(\xi_i) = 0, \quad \xi_i = \cos\left(\frac{2i-1}{2n}\pi\right) \quad (i=1, 2, \dots, n) \quad (2-28)$$

$$U_{n-1}(x_j) = 0, \quad x_j = \cos\frac{\pi j}{n} \quad (j=1, 2, \dots, n-1)$$

且有:

$$p_n^{(-1/2, -1/2)}(x) = \frac{2^n \Gamma(n) \Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma(2n) \sqrt{\pi}} T_n(x) \quad (2-29)$$

即第一类 Chebyshev 多项式的归一化形式。

2) 当 $\alpha = 1/2, \beta = -1/2, \kappa = -(\alpha + \beta) = 0$ 时

代入式 (2-25) 和式 (2-29), 则有:

$$\frac{d}{dx} p_n^{(1/2,1/2)}(\xi) = \frac{2^{n+1} n! \Gamma\left(n + \frac{3}{2}\right)}{\Gamma(2n+2) \sqrt{\pi}} U'_n(\xi) = \frac{2^{n+1} n! \Gamma\left(n + \frac{3}{2}\right)}{\Gamma(2n+2) \sqrt{\pi}} \left[\frac{\xi U_n(\xi) - (n+1) T_{n+1}(\xi)}{1 - \xi^2} \right] \quad (2-30)$$

相似地, 可以推得

$$p_n^{(1/2,1/2)}(\xi_i) = \frac{2^{n+1} n! \Gamma\left(n + \frac{3}{2}\right)}{\Gamma(2n+2) \sqrt{\pi}} U_n(\xi_i) = 0 \quad (2-31)$$

将式 (2-30), (2-31) 代入式 (2-20), 则 Gauss 型插分格式权函数可退化为:

$$W(\xi_i) = \frac{p_{n-\kappa}^{(-\alpha, -\beta)}(\xi_i)}{p_n^{(\alpha, \beta)}(\xi_i)} = \frac{p_{n+1}^{(-1/2, -1/2)}(\xi_i)}{p_n^{(1/2, 1/2)}(\xi_i)} = \frac{\xi_i^2 - 1}{n+1} \quad (2-32)$$

因此式 (2-19) 可以简化为如下形式:

$$\sum_{i=1}^n \frac{1 - \xi_i^2}{n+1} \left[\frac{1}{\xi_i - x_j} + \pi k(x_j, \xi_i) \right] g(\xi_i) = f(x_j) \quad (2-33)$$

其中:

$$\begin{aligned} U_n(\xi_i) &= 0, \quad \xi_i = \cos \frac{\pi i}{n} \quad (i=1, 2, \dots, n) \\ T_{n+1}(x_j) &= 0, \quad x_j = \cos \left(\frac{2j-1}{2n+2} \pi \right) \quad (j=1, 2, \dots, n+1) \end{aligned} \quad (2-34)$$

3) 当 $\alpha=1/2, \beta=-1/2, \kappa=-(\alpha+\beta)=0$ 时

此时对 Jacobi 多项式的归一化形式有:

$$\begin{aligned} p_n^{(1/2, -1/2)}(x) &= \frac{2^n n! \Gamma(n+1)}{\Gamma(2n+1)} \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2n-1)}{2 \cdot 4 \cdot 6 \cdots (2n)} \frac{\sin\left(\frac{2n+1}{2} \theta\right)}{\sin\left(\frac{1}{2} \theta\right)}, \quad x = \cos \theta \\ p_n^{(-1/2, 1/2)}(x) &= \frac{2^n n! \Gamma(n+1)}{\Gamma(2n+1)} \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2n-1)}{2 \cdot 4 \cdot 6 \cdots (2n)} \frac{\cos\left(\frac{2n+1}{2} \theta\right)}{\cos\left(\frac{1}{2} \theta\right)}, \quad x = \cos \theta \end{aligned} \quad (2-35)$$

代入式 (2-9), (2-11) 和 (2-35), 则 Gauss 型插分格式的权函数为:

$$W(\xi_i) = \frac{p_{n-\kappa}^{(-\alpha, -\beta)}(\xi_i)}{p_n^{(\alpha, \beta)}(\xi_i)} = \frac{p_n^{(-1/2, 1/2)}(\xi_i)}{p_n^{(1/2, -1/2)}(\xi_i)} = \frac{p_n^{(-1/2, 1/2)}(\xi_i)}{\frac{(2n+1)}{4(1-\xi_i^2)} p_{n-1}^{(1/2, -1/2)}(\xi_i)} = -\frac{2(1-\xi_i)}{(2n+1)} \quad (2-36)$$

因此，式 (2-19) 可以变形为如下形式：

$$\sum_{i=1}^n \frac{2(1-\xi_i)}{2n+1} \left[\frac{1}{\xi_i - x_j} + \pi k(x_j, \xi_i) \right] g(\xi_i) = f(x_j) \quad (2-37)$$

其中：

$$\begin{aligned} p_n^{(1/2, -1/2)}(\xi_i) &= 0, \quad \xi_i = \cos\left(\frac{2i}{2n+1}\pi\right), \quad i = 1, 2, \dots, n \\ p_n^{(-1/2, 1/2)}(x_j) &= 0, \quad x_j = \cos\left(\frac{2j-1}{2n+1}\pi\right), \quad j = 1, 2, \dots, n \end{aligned} \quad (2-38)$$

4) 当 $\alpha = -1/2, \beta = 1/2, \kappa = -(\alpha + \beta) = 0$ 时

代入式 (2-9), (2-11) 和 (2-35), 则 Gauss 型插分格式的权函数为：

$$W(\xi_i) = \frac{p_n^{(-\alpha, -\beta)}(\xi_i)}{p_n^{(\alpha, \beta)}(\xi_i)} = \frac{p_n^{(1/2, -1/2)}(\xi_i)}{p_n^{(-1/2, 1/2)}(\xi_i)} = -\frac{2(1+\xi_i)}{2n+1} \quad (2-39)$$

由此，式 (2-19) 可以转化为如下形式：

$$\sum_{i=1}^n \frac{2(1+\xi_i)}{2n+1} \left[\frac{1}{\xi_i - x_j} + \pi k(x_j, \xi_i) \right] g(\xi_i) = f(x_j) \quad (2-40)$$

其中：

$$\begin{aligned} p_n^{(-1/2, 1/2)}(\xi_i) &= 0, \quad \xi_i = \cos\left(\frac{2i-1}{2n+1}\pi\right), \quad i = 1, 2, \dots, n \\ p_n^{(1/2, -1/2)}(x_j) &= 0, \quad x_j = \cos\left(\frac{2j}{2n+1}\pi\right), \quad j = 1, 2, \dots, n \end{aligned} \quad (2-41)$$

可以发现上述退化情况中的插值线性方程组与 Erdogan^[62]推得的第一型奇异积分方程的 Gauss-Jacobi 求积公式的退化情况结果相同，该结果有条件地证明了本数值解法的正确性。

3 剪应力作用下的单边微滑移带

3.1 引言

上一章给出了如何用 Gauss-Jacobi 求积公式求解无限大平面内含微滑移剪切带问题涉及的奇异积分方程的数值方法，基于该方法，本章将就剪应力作用下的单边微滑移带模型进行求解。

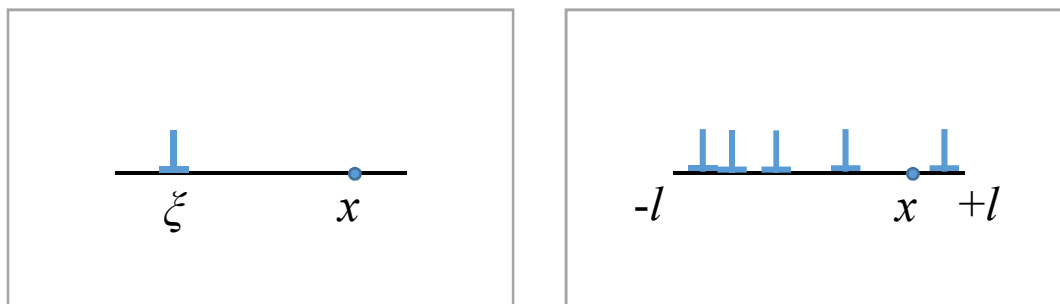
从上个世纪开始，关于单条微滑移带已有一些学者展开了一定的研究：Hall 等^[1]重点研究了单条单端点滑移带上的离散型的位错塞积模型，并用此模型证明了 Hall-Petch 关系式的合理性；Chou 等^[70]则推导了当单条单端点滑移带上分布的位错的柏氏向量长度不等的情况下的位错塞积模型；Li 和 Chou^[43]进一步总结了单条单端点滑移带上的连续分布的位错塞积模型；邹章雄等^[45]对单条单端点滑移带上的离散型的位错塞积模型进行了进一步研究，并给出了该模型的适用范围。但是在实际的工程应用中，对于材料试件，往往其基体的大小并不是理想的无穷大，因此，有必要考虑边界效应对微滑移带端点处位错塞积造成的应力集中的影响。

同时，由于对 Hall-Petch 效应的理论研究，一般都局限于将材料晶格摩擦力 σ_0 和局部应力 k 两项分开考虑，很少有模型讨论了当晶格阻力 σ_0 的大小是一个变值时，材料的屈服强度 σ_y 与晶粒尺寸 d 的关系。基于此，本章将分别对剪应力作用下考虑自由边界条件以及材料变晶格摩擦力的单边微滑移带模型进行求解，并讨论自由边界条件和变晶格摩擦力对材料屈服强度 σ_y 的影响。

本章第二节首先介绍位错分布法，以及如何利用该理论方法列出剪切力作用下的微滑移带的位错分布平衡方程；随后在第 3 节讨论在恒定远场力和晶格摩擦力作用下的单边微滑移带模型，并用 Gauss-Jacobi 插分格式的归一化形式对其进行求解，之后用一个具体算例来验证自由边界条件对材料屈服强度尺寸效应的影响；第 4 节求解在恒定远场力和变晶格摩擦力作用下的单边微滑移带模型的数值解，给出相关算例并就变晶格摩擦力对材料屈服强度尺寸效应的影响进行讨论；最后在第 5 节得出结论。

3.2 位错分布法

在 Hills 的书^[63]中，详细地介绍了关于如何运用位错分布法求解一个无限大平面中长为 $2l$ 的水平滑移带的解析解。如图 3-1 (a) 所示，由于滑移带上任意一点 ξ 处的单个柏氏向量为 δb_x 的位错的存在，滑移带上另一点 x 处的作用力为：



(a) 滑移带上任意一点 ξ 处上的位错 (b) 长度为 $2l$ 的滑移带上连续分布的位错

图 3-1 位错分布法示意图

$$\delta\tau_{xy}(x) = \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} \frac{\delta b_x}{\xi-x} = \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} \frac{\rho(\xi)}{\xi-x} \delta\xi \quad (3-1)$$

其中 μ 是剪切模量, ν 为泊松比。式 (3-1) 可作为使用 Green 函数法求解如图 3-1 (b) 所示滑移带上连续分布的位错对任意一点 x 处的作用力的影响函数, 假设滑移带长度为 $2l$, 通过对其积分, 即可得到滑移带上任意一点 x 处所受作用力为:

$$\tau_{xy}(x) = \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} \int_{-l}^l \frac{\rho(\xi)}{\xi-x} d\xi \quad (3-2)$$

其中位错分布密度函数 $\rho(x)$ 为

$$\rho(\xi) = \frac{db_x(\xi)}{d\xi} \quad (3-3)$$

接下来, 考虑无限大平面内多条任意长度水平共线的滑移带的情况。假设滑移带的条数为 m , 应用叠加原理, 则 m 条滑移带上连续分布的位错对滑移带上任意一点 x 处的作用力为:

$$\tau_{xy}(x) = \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} \sum_{J=1}^m \int_{a_J}^{b_J} \frac{\rho_J(\xi)}{x-\xi} d\xi \quad (3-4)$$

其中, a_J 和 b_J 分别代表第 J 条滑移带的左右端点坐标, $\rho_J(\xi)$ 代表第 J 条滑移带上的位错分布密度函数。

在求解出每条滑移带上的位错分布密度函数 $\rho_J(x)$ 的大小后, 即可进一步利用 Green 函数法求出基体中应力场的通解:

$$\sigma_{ij}(x, y) = \sum_{J=1}^m \left[\int_{a_J}^{b_J} \rho_x(\xi) k_{xij}(x, y, \xi) d\xi + \int_{a_J}^{b_J} \rho_y(\xi) k_{yij}(x, y, \xi) d\xi \right] \quad (i, j = 1, 2) \quad (3-5)$$

其中 k_{xij} 和 k_{yij} 是影响函数, ρ_x 和 ρ_y 分别指水平方向和垂直方向的位错分布密度函数。

对除去边界外基体内的所有点，影响函数 k_{xij} 和 k_{yij} 的形式都相同：

$$\begin{aligned} k_{x11}(x, y, \xi) &= \frac{2}{\pi} \frac{(x-\xi)^3}{[(x-\xi)^2 + y^2]^2}, & k_{y11}(x, y, \xi) &= \frac{2}{\pi} \frac{(x-\xi)^2 y}{[(x-\xi)^2 + y^2]^2} \\ k_{x22}(x, y, \xi) &= \frac{2}{\pi} \frac{(x-\xi)y^2}{[(x-\xi)^2 + y^2]^2}, & k_{y22}(x, y, \xi) &= \frac{2}{\pi} \frac{y^3}{[(x-\xi)^2 + y^2]^2} \\ k_{x12}(x, y, \xi) &= \frac{2}{\pi} \frac{(x-\xi)^2 y}{[(x-\xi)^2 + y^2]^2}, & k_{y12}(x, y, \xi) &= \frac{2}{\pi} \frac{(x-\xi)y^2}{[(x-\xi)^2 + y^2]^2} \end{aligned} \quad (3-6)$$

由于此处仅考虑剪应力作用下的微滑移带，因此有 $\rho_x(x) = \rho_J(x)$ ， $\rho_y(x) = 0$ 。将式 (2-2)，式 (2-12) 代入式 (3-5)，并且应用式 (2-10) (2-11) 的性质，可以得到基体中的应力大小：

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}(x, y) &= \sum_{J=1}^m \int_{a_J}^{b_J} \rho_J(\xi) k_{xij}(x, y, \xi) d\xi \\ &= -\frac{\pi}{\sin \pi\alpha} \sum_{J=1}^m \sum_{k=1}^n \frac{P_{n-k}^{(-\alpha, -\beta)}(\xi_k)}{P_n^{(\alpha, \beta)}(\xi_k)} k_{xij}(x, y, \xi_k) g_J(\xi_k) \\ &= -\frac{\pi}{\sin \pi\alpha} \sum_{J=1}^m \sum_{k=1}^n W(\xi_k) k_{xij}(x, y, \xi_k) g_J(\xi_k) \end{aligned} \quad (3-7)$$

3.3 恒定晶格摩擦力作用下的单边微滑移带

如图 3-2 所示，宽度为 d 的单边微滑移带受无限远处的剪切力 τ_∞ 和滑移面上阻力 τ_f 作用，位错在滑移带上连续分布，假设所有位错的柏氏向量为 δb_x ，由位错分布法，

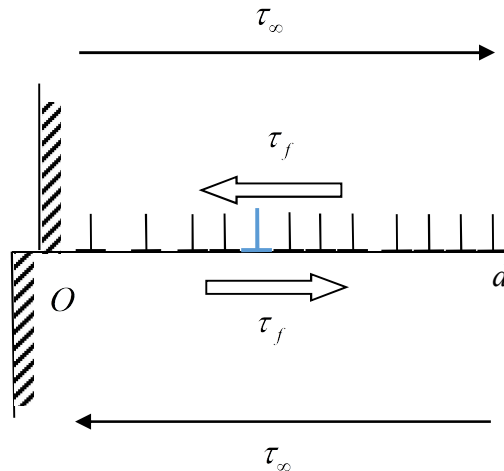


图 3-2 受剪应力作用的单边微滑移带

单个在 ξ 处的位错 δb_x 对另一个在 x 处的位错的作用力为：

$$\begin{aligned}\delta\tau_{xy}(x) &= \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} \frac{\delta b_x}{\xi-x} + \frac{\mu\delta b_x}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x^2-4\xi x-\xi^2)}{(\xi+x)^3} \\ &= \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} \frac{\rho(\xi)}{\xi-x} \delta\xi + \frac{\mu\rho(\xi)}{2\pi(1-\nu)} \frac{(x^2-4\xi x-\xi^2)}{(\xi+x)^3} \delta\xi\end{aligned}\quad (3-8)$$

其中， $\rho(x)$ 为位错分布密度。式 (3-8) 右侧第二项代表 $x=0$ 处自由平面边界对位错的影响。

考虑位错密度函数，若假设远场剪切力 τ_∞ 和晶格摩擦力 τ_f 均匀分布，则有位错分布平衡方程如下所示：

$$\frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} \int_0^d \left[\frac{1}{\xi-x} + \frac{x^2+4x\xi-\xi^2}{(x+\xi)^3} \right] \rho(\xi) d\xi = \tau_\infty - \tau_f \quad (3-9)$$

由 Erdogan^[62]， $\rho(x)$ 的解有一个非常著名的形式，即

$$\rho(x) = x^{1/2} (d-x)^{1/2} g(x) \quad (3-10)$$

其中 $g(x)$ 是有界的，其值不随外界载荷大小改变，仅由式 (3-9) 该第一类奇异积分方程决定。

若令 $\xi = d(1+T)/2$ ， $x = d(1+X)/2$ ， $\rho[d(1+T)/2] = \phi(T)$ ，我们可以将式 (3-9) 进一步简化：

$$\frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \left[\frac{\phi(T)}{T-X} + \frac{(1+X)^2 + 4(1+X)(1+T) - (1+T)^2}{(2+X+T)^3} \right] \phi(T) dT = \frac{2(1-\nu)(\tau_\infty - \tau_f)}{\mu} \quad (3-11)$$

此式即满足第二章中提到的第一类奇异积分方程退化的第三种形式。未知位错分布密度函数可以用一下权函数和未知有界连续函数的积表示：

$$\phi(X) = \omega(X) g(X) \quad (3-12)$$

其中：

$$\omega(X) = (1-X)^{-\frac{1}{2}} (1+X)^{\frac{1}{2}} \quad (3-13)$$

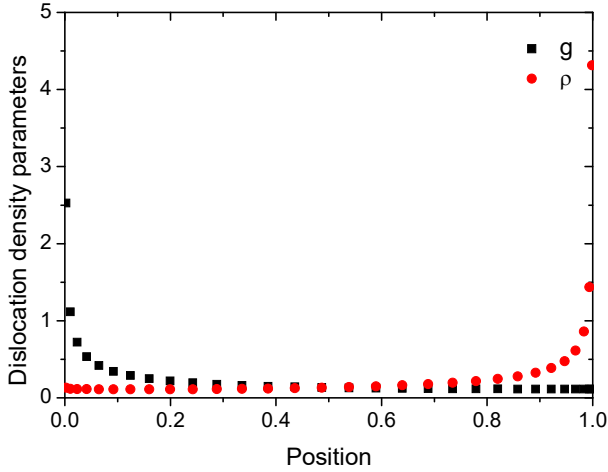
将式 (2-33) 代入则有：

$$\sum_{i=1}^n \frac{1-T_i}{2n+1} \left[\frac{1}{T_i-X_j} + \frac{(1+X_j)^2 + 4(1+X_j)(1+T_i) - (1+T_i)^2}{(2+X_j+T_i)^3} \right] g(T_i) = \frac{(1-\nu)(\tau_\infty - \tau_f)}{\mu} \quad (3-14)$$

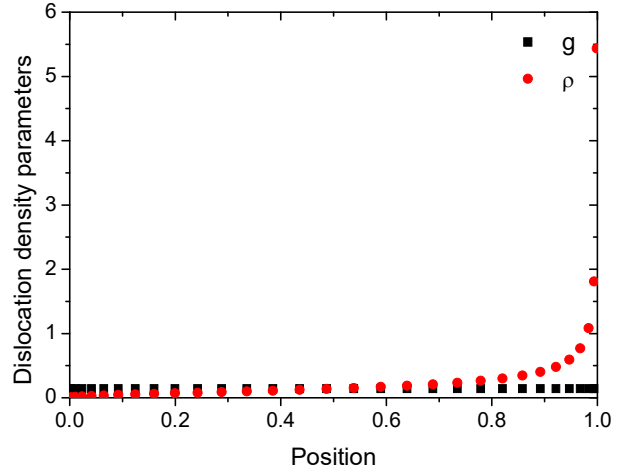
其中插值点为：

$$p_n^{(1/2,-1/2)}(T_i) = 0, \quad T_i = \cos\left(\frac{2i}{2n+1}\pi\right), \quad i=1,2,\dots,n$$

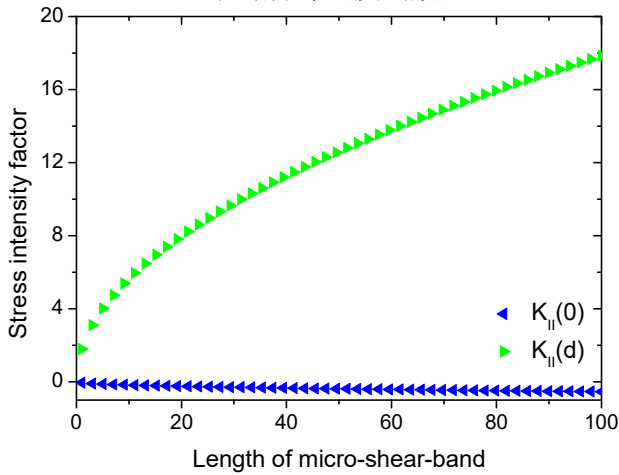
$$p_n^{(-1/2,1/2)}(X_j) = 0, \quad X_j = \cos\left(\frac{2j-1}{2n+1}\pi\right), \quad j=1,2,\dots,n$$
(3-15)



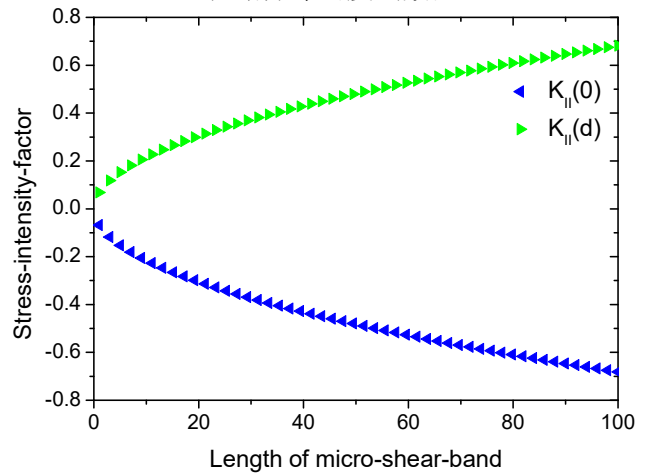
(a) 考虑自由边界条件的有界连续函数和位错分布密度函数；



(b) 忽略自由边界条件影响的有界连续函数和位错分布密度函数；



(c) 考虑自由边界条件的应力强度因子与微滑移带长度的关系；



(d) 忽略自由边界条件的应力强度因子与微滑移带长度的关系

图 3-3 不考虑晶格摩擦力影响下有界连续函数、位错分布密度函数、应力强度因子与微滑移带长度的关系

为了方便计算，此处我们假设 $\tau_\infty = 0.1\mu$ ， $\nu = 0.3$ ， $d=1$ ， $K_{IC} = 1$ ， $\tau_f = 0$ ，使所有值单位化。代入计算所得有界连续函数和位错分布密度函数大小如图 3-3 (a) (b) 所示。由 Hills^[63]，在函数 $g(T)$ 的在离散点 T_j 处的值由式 (3-15) 可直接解得。并且，在滑移带端点 $T = \pm 1$ 处，与应力强度因子直接相关的 $g(T)$ 可以用 Krenk 插值公式直接得到：

$$\begin{aligned}
 g(+1) &= M_E(+1) \sum_{j=1}^n \Phi_E(+1) g(T_j) \\
 g(-1) &= M_E(-1) \sum_{j=1}^n \Phi_E(-1) g(T_{n+1-j})
 \end{aligned} \tag{3-16}$$

其中函数 $M_E(\pm 1)$ 和函数 $\Phi_E(\pm 1)$ 表达式如下：

$$\begin{aligned}
 M_E(+1) &= \frac{2}{2n+1}, M_E(-1) = 1 \\
 \Phi_E(+1) &= \cot \left[\frac{2i-1}{2n+1} \frac{\pi}{2} \right] \sin \left[\frac{2i-1}{2n+1} n\pi \right], \\
 \Phi_E(-1) &= \frac{\sin \left[j\pi(2n-1)/2n+1 \right]}{\sin \left[j\pi/(2n+1) \right]}
 \end{aligned} \tag{3-17}$$

对剪切微滑移带，其两端应力强度因子 K_{II} 与 $g(\pm 1)$ 直接相关：

$$K_{II}(\pm 1) = \pm \sqrt{\pi d} \frac{\mu}{2(1+\nu)} g(\pm 1) \tag{3-18}$$

进而计算出微滑移带的应力强度因子与微滑移带尺寸的关系，如图 3-3 (c) (d) 所示。根据断裂力学理论，当应力强度因子 K_{II} 等于临界应力强度因子 K_{IIC} 时，材料达到塑性屈服阶段，则有：

$$\frac{\tau_p - \tau_f}{\tau_\infty - \tau_f} = \frac{K_{IIC}}{K_{II}} \tag{3-19}$$

变形可得：

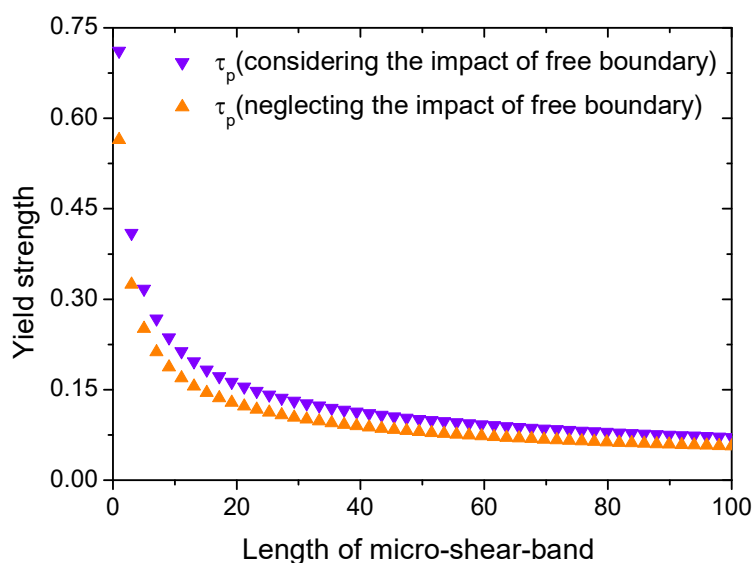


图 3-4 不考虑晶格摩擦力作用下单边微滑移带的尺寸效应

$$\tau_p = \tau_f + \frac{K_{HC}}{K_H} (\tau_\infty - \tau_f) \quad (3-20)$$

所得结果如图 3-4 所示。此处将计算出的初始屈服应力与微滑移带长度用 Power 函数拟合，表达为式 (1-2) 形式，考虑自由边界影响下：

$$\tau_p = \tau_f + 0.7115 / \sqrt{d} \quad (3-21)$$

若忽略自由边界对微滑移带的影响，则有：

$$\tau_p = \tau_f + 0.5642 / \sqrt{d} \quad (3-22)$$

由图 3-3 和 3-4，可以发现，在不计入晶格摩擦力影响或认为晶格摩擦力大小在整条滑移带上恒定分布时，自由边界仅影响 Hall-Petch 关系式中的 k 值，对式 (1-2) 中的晶粒尺寸指数 α 值没有影响。当认为晶格摩擦力大小是定值时，不考虑自由边界效应时，滑移带可认为是无限大基体中任意一条水平滑移带，其左右端点处应力强度因子关于中点对称；若考虑自由边界效应，相同大小远场剪切力作用下的单边微滑移带非自由端的应力强度因子相对不考虑自由边界效应的单边微滑移带非自由端的应力强度因子更小，相应尺寸效应关系式中 k 值更大。

3.4 变晶格摩擦力作用下的单边微滑移带

如图 3-2 所示，考虑位错密度函数，若假设远场晶格摩擦力 τ_f 来自于微滑移带上位错对其余位错运动的阻力，则一般认为内部晶格摩擦力 τ_f 与区域单位面积内位错密度的平方根成正比^[71]，假设滑移带上有一个 $L \times L$ 大小的方形区域，其上分布有 $n \times n$ 个位错，则单位面积内位错密度即为 n^2 / L^2 ，对单个微滑移带，其等效位错线密度即为 n/L 。因此我们可以假设晶格摩擦阻力 τ_f 与位错线密度成正比，则有位错分布平衡方程如下所示：

$$\frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} \int_0^d \left[\frac{1}{\xi-x} + \frac{x^2 + 4x\xi - \xi^2}{(x+\xi)^3} \right] \rho(\xi) d\xi = \tau_\infty(x) - \tau_f(x) \quad (3-24)$$

其中：

$$\tau_f = \eta\mu\rho \quad (3-25)$$

此处 η 是材料的摩擦因数，对 fcc 材料，可以取 $\eta = 0.35 \pm 0.15$ 。因此位错平衡方程可以变形为如下形式：

$$\eta\mu\rho(x) + \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} \int_0^d \left[\frac{1}{\xi-x} + \frac{x^2 + 4x\xi - \xi^2}{(x+\xi)^3} \right] \rho(\xi) d\xi = \tau_\infty(x), \quad 0 < x < d \quad (3-26)$$

由 Erdogan^[62], $\rho(x)$ 的解的形式不随外界载荷变化而, 即仍遵守如下形式:

$$\rho(x) = x^{1/2} (d-x)^{1/2} g(x) \quad (3-27)$$

其中 $g(x)$ 是有界的, 其值不随外界载荷大小改变, 仅由式 (3-26) 决定。

若令 $\xi = d \frac{1+T}{2}, x = d \frac{1+X}{2}, \rho\left(d \frac{1+T}{2}\right) = \phi(T)$, 我们可以将式 (3-26) 进一步简化:

$$\eta\phi(X) + \frac{1}{2\pi(1-\nu)} \int_{-1}^1 \left[\frac{\phi(T)}{T-X} + \frac{(1+X)^2 + 4(1+X)(1+T) - (1+T)^2}{(2+X+T)^3} \right] \phi(T) dT = \frac{\tau_\infty (d \frac{1+X}{2})}{\mu} \quad (3-28)$$

此式即满足第二章中提到的第二类奇异积分方程的第二种类型 $\kappa = 0$, 此时对微观滑移带, 其左端点处自由无应力集中, 右端点处有位错塞积造成的应力集中。因此, 未知位错分布密度函数可以用以下权函数 $\omega(X)$ 和未知有界连续函数 $g(X)$ 的积表示:

$$\phi(X) = \omega(X) g(X) \quad (3-29)$$

其中:

$$\omega(X) = (1-X)^{B-1} (1+X)^{1-B}, B = \frac{\theta}{\pi}, 0 < B < 1, \tan \theta = \frac{1}{2\eta(1-\nu)} \quad (3-30)$$

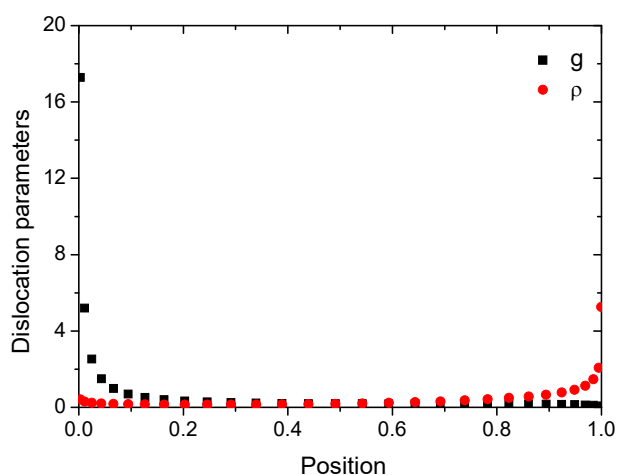
将式 (2-19) 代入,

$$\sum_{i=1}^n \frac{W(\xi_i)}{\sin \pi\alpha} \left[\frac{1}{X_j - T_i} - \frac{(1+X_j)^2 + 4(1+X_j)(1+T_i) - (1+T_i)^2}{(2+X_j+T_i)^3} \right] g(T_i) = \frac{(1-\nu)\tau_\infty}{\mu b_x} \quad (3-31)$$

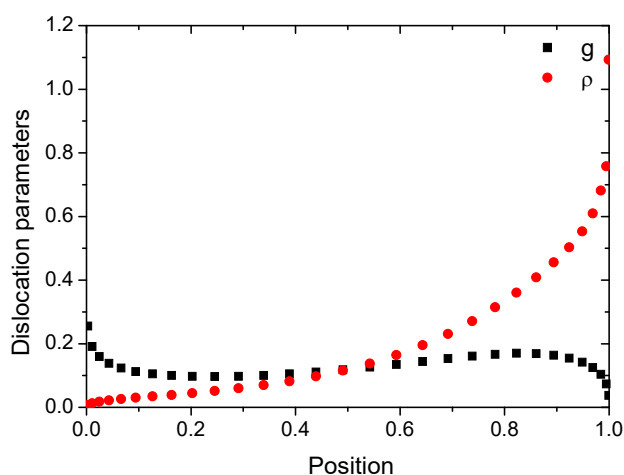
其中, $W(\xi_i) = \frac{p_n^{(B-1,1-B)}(\xi_i)}{p_n^{(B-1,1-B)}(\xi_i)}$ 。插值点则需满足如下条件:

$$\begin{aligned} p_n^{(B-1,1-B)}(T_i) &= 0, \quad i = 1, 2, \dots, n \\ p_n^{(1-B,B-1)}(X_j) &= 0, \quad j = 1, 2, \dots, n \end{aligned} \quad (3-32)$$

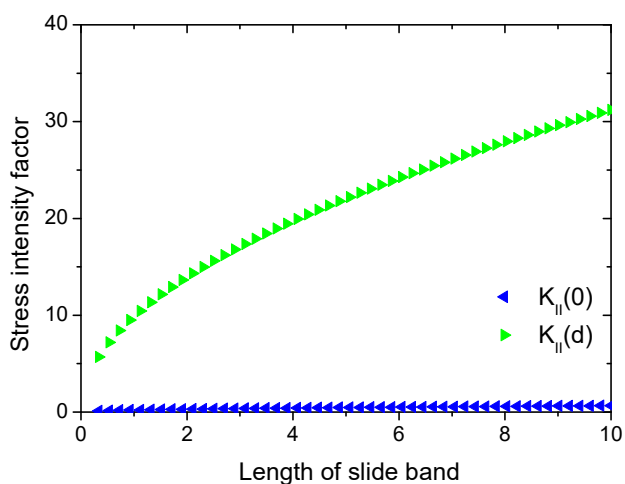
为了求解式 (3-28) 中的位错滑移密度函数 $\phi(X)$, 我们有必要先对有界连续函数 $g(X)$ 的大小进行求解。这里我们用第二章中推导的数值算法来研究晶格内摩擦力和自用边界条件是如何影响微滑移带上的位错密度函数的。为了直观地进行比较, 和上一小节一样, 此处我们假设 $\tau_\infty = 0.1\mu$, $\nu = 0.3$, $d=1$, $K_{IC} = 1$, 使所有值单位化。假设 $d=1$, 代入计算所得有界连续函数和位错分布密度函数大小如图 3-5 (a) (b) 所示。在滑移带端点 $T = \pm 1$ 处, 应力强度因子直接相关的 $g(T)$ 可以式 (3-16) 直接求解, 进一步即可



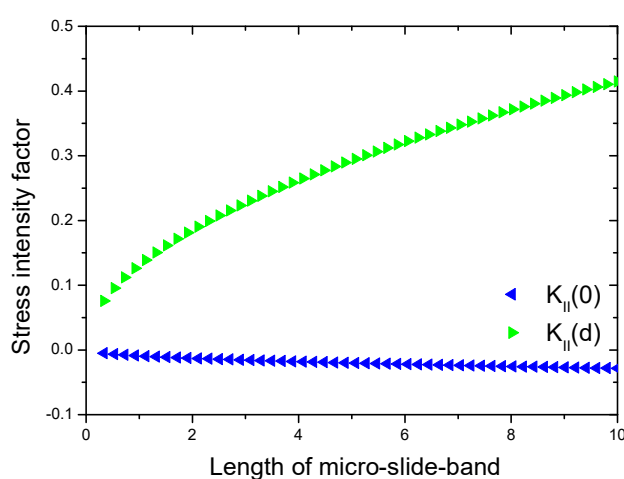
(a) 考虑自由边界条件的有界连续函数和位错分布密度函数;



(b) 忽略自由边界条件影响的有界连续函数和位错分布密度函数;



(c) 考虑自由边界条件的应力强度因子与微滑移带长度的关系;



(d) 忽略自由边界条件的应力强度因子与微滑移带长度的关系

图 3-5 考虑晶格摩擦力影响下有界连续函数、位错分布密度函数、应力强度因子与微滑移带长度的关系

求解得考虑变晶格摩擦力作用下的单边微滑移带左右端点处的应力强度因子与微滑移带长度的关系如图 3-5 (c) (d) 所示。

根据断裂力学理论，当应力强度因子 K_{II} 等于临界应力强度因子 K_{IIC} 时，材料达到塑性屈服阶段，则有：

$$\frac{\tau_p - \eta\mu\rho_p}{\tau_\infty - \eta\mu\rho} = \frac{K_{IIC}}{K_{II}} \quad (3-33)$$

且有 $\rho_p / \rho = \tau_p / \tau_\infty$ ，代入式 (13) 变形可得：

$$\tau_p = \frac{K_{IIC}}{K_{II}} \tau_\infty \quad (3-34)$$

所得结果如图 3-6 所示:

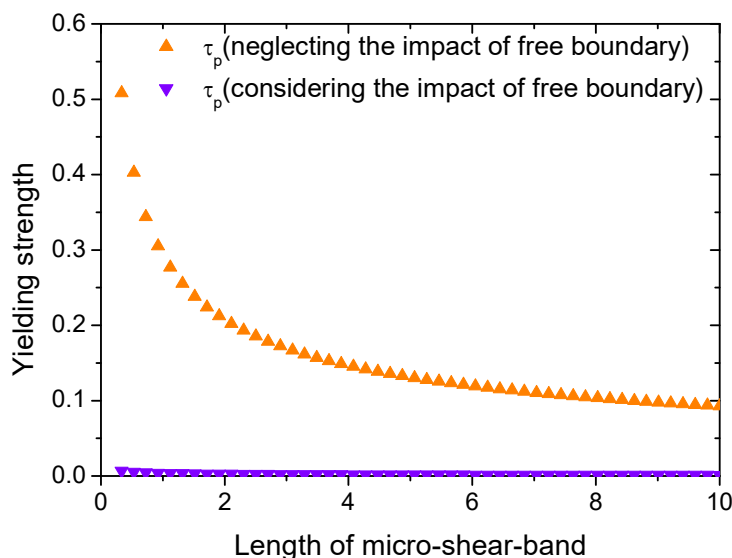


图 3-6 考虑晶格摩擦力作用下单边微滑移带的尺寸效应

此处将计算出的初始屈服应力与微滑移带长度用 Power 函数拟合, 表达为式 (1-2) 形式, 若考虑自由边界对微滑移带的影响

$$\tau_p = \frac{0.003899}{\sqrt{d}} \quad (3-35)$$

若忽略自由边界对微滑移带的影响, 则有:

$$\tau_p = \frac{0.2934}{\sqrt{d}} \quad (3-36)$$

研究图 3-5 和图 3-6, 并与上节结果对比可以发现, 晶格摩擦力恒定与否, 仅影响 Hall-Petch 关系式中的 k 值, 对式 (1-2) 中的晶粒尺寸指数 α 值没有影响。当认为晶格摩擦力大小与位错分布密度函数成正比时, 滑移带端点处的应力集中现象相较认为晶格摩擦力大小恒定时更加明显, 材料屈服强度相较认为晶格摩擦力大小恒定时材料屈服强度要小很多, 相应 k 值也更小; 当不考虑自由边界效应时, 微滑移带左右端点处应力强度因子不再关于中点对称, 若考虑自由边界效应, 相同大小远场剪切力作用下的单边微滑移带非自由端的应力强度因子相对不考虑自由边界效应的单边微滑移带非自由端的应力强度因子更大, 相应尺寸效应关系式中 k 值更小。

3.5 本章小结

本章在第二章的基础上, 利用基于 Gauss-Jacobi 插分格式的第二类 Fredholm 奇异积分方程的数值解法和位错分布法, 对剪应力作用下的单边微滑移带模型进行了研究。首先应用位错分布法列出其位错平衡方程, 并对单边微滑移带上的位错分布密度函数进行了求解, 探究了材料屈服强度与微滑移带长度的关系, 并讨论了边界效应以及晶

格摩擦力对材料屈服强度的影响。发现对单边微滑移带，不管是否计入自由边界和变晶格摩擦力的影响，其材料屈服强度与微滑移带长度的大小满足 Hall-Petch 效应，对式 (1-2) 中的晶粒尺寸指数 α 值没有影响。但当材料的晶粒尺寸 d 、临界应力强度因子大小 K_{IC} 相等时，是否计入边界效应或晶格摩擦力会影响材料局部应力拟合参数 k 值的大小。

4 剪应力作用下的多共线微滑移带

4.1 引言

上一章介绍了受边界效应和变晶格摩擦力作用下的单边微滑移带模型，并探究了这两个因素对材料屈服强度尺寸效应的影响，但在实际的材料及工程应用中，多晶材料内部的晶粒与晶粒、晶粒与晶界之间都存在相互干涉的情况，对镍基合金材料，其基体相与 γ' 析出相颗粒之间也存在相互干涉的现象，且由于基体相与析出相颗粒之间的相互干涉作用，导致位错不再绕过析出相颗粒划过基体而是直接穿过 γ' 颗粒导致材料剪切破坏从而达到塑性状态。因此，在我们试图用微滑移带模型对金属材料晶粒的尺寸效应和镍基合金的 γ' 相尺寸效应进行研究时，很有必要将晶粒与晶界、 γ' 相与基体之间的相互干涉对材料的屈服强度的影响考虑在内。基于此，在位错塞积理论的基础上，继单边微滑移带模型，我们引入了如图 4-1 所示的多共线微滑移带模型，以研究微滑移带间的干涉作用对材料屈服强度的影响。

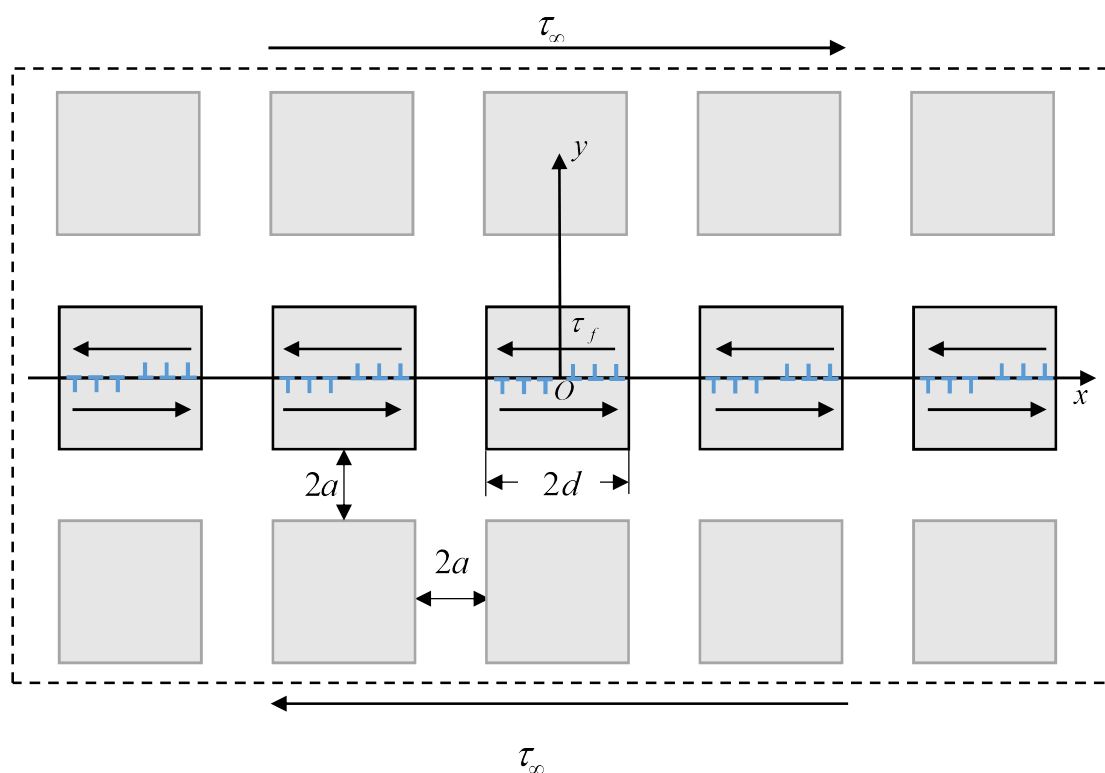


图 4-1 在远场剪切力和内部摩擦阻力作用下的一系列有限多条共线等长微滑移带：当 a 与 d 相比非

在上世纪，一些学者对多微滑移带模型也进行了数值研究，但是一般局限于多层分布的平行滑移带模型^[43]或呈环形分布的微滑移带模型^[72]，对于多共线微滑移带模型

微滑移带则较少涉及。但实际上,当材料由于位错穿过晶粒或 γ' 相达到屈服时,应用多共线微滑移带才能更直观的反应晶粒与晶界、 γ' 相与基体之间的相互干涉对材料的屈服强度的影响。且这个问题和单边微滑移带模型一样,均可以用位错分布法和 Gauss-Jacobi 插分格式求出其数值解。

本章第二节首先给出无限大平面中含有有限多条共线微滑移带的位错平衡方程及其数值通解,随后在第三节给出无限大平面中含有无限多条共线微滑移带的位错平衡方程及其数值通解,在第四节中通过相关具体算例演示第二节中解的应用,最后在第五节中得出相关结论。

4.2 有限多共线微滑移带模型的数值通解

如图 4-1 所示,在一个无限大平面中含有 m 条长为 $2d$ 的微滑移带,且其分布关于原点对称,间距为 $2a$,受远场力 τ_∞ 和晶格摩擦阻力 τ_f 作用,则由式 (3-4) 可得:

$$\tau_{xy}(x) = \sum_{J=1}^m \int_{-d+(2J-m+1)(a+d)}^{d+(2J-m+1)(a+d)} \frac{\rho(\xi)}{\xi-x} d\xi \quad (4-1)$$

若假定远场力 τ_∞ 和晶格摩擦阻力 τ_f 为恒定值, x 点在第 I 条微滑移带上,我们可以列出相应位错分布平衡方程:

$$\frac{2\pi(1-\nu)}{\mu}(\tau_\infty - \tau_f) = \sum_{J=1}^m \int_{-d}^d \frac{\rho(\xi)}{\xi-x+2(J-I)(d+a)} d\xi \quad (4-2)$$

令 $X=(x-d)/d$, $T=(\xi-d)/d$, $\rho[dT+2J(a+d)] = \phi^J(T)$ 为第 J 条微滑移带上的位错分布密度函数,式 (4-2) 可以进一步简化为如下标准第一型奇异积分方程形式:

$$\frac{2(1-\nu)}{\mu}(\tau_\infty - \tau_f) = \frac{1}{\pi} \sum_{J=1}^m \int_{-1}^{+1} \frac{\phi(T)}{T-X+2(J-I)(1+a/d)} dT \quad (4-3)$$

由于对所有滑移带,其端点处均有应力集中的情况存在,因此第 J 条微滑移带上位错密度分布函数 $\phi^J(T)$ 可以改写为以下形式:

$$\phi^J(T) = \omega(T)g^J(T) \quad (4-4)$$

其中 $g^J(X)$ 是一个未知有界连续函数, $\omega(X)$ 是对应的权函数,并有:

$$\omega(T) = (1+T)^{-1/2} (1-T)^{-1/2} \quad (4-5)$$

运用 2.3 节中 Gauss-Jacobi 插分格式的第一种特殊情况,式 (4-3) 可以直接转化为以下线性方程组:

$$\frac{2(1-\nu)}{\mu}(\tau_\infty - \tau_f) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{J=1}^m \frac{g^J(T_j)}{T_j - X_i + 2(J-I)(1+a/d)} \quad (4-6)$$

其中插值点 T_j 和 X_i 为:

$$\begin{aligned} T_j &= \cos\left(\frac{2j-1}{2n+1}\pi\right) \quad (j=1,2,\dots,n) \\ X_i &= \cos\left(\frac{2i}{2n}\pi\right) \quad (i=1,2,\dots,n-1) \end{aligned} \quad (4-7)$$

由于方程组式 (4-6) 仅有 $m(n-1)$ 个方程, 而未知数有 n 项, 因此整个系统并不闭合, 还需要补充一个附加条件式 (2-22), 对其进行插值, 即对每条微滑移带有:

$$\frac{\pi}{N} \sum_{j=1}^n g^J(T_j) = 0 \quad (4-8)$$

函数 $g^J(T)$ 的在离散点 T_j 处的值由式 (4-6) (4-8) 可直接解得。并且, 在第 J 条滑移带端点 $T = \pm 1$ 处, 与应力强度因子直接相关的 $g(T)$ 可以用 Krenk 插值公式直接得到:

$$\begin{aligned} g^J(+1) &= M_E(+1) \sum_{j=1}^n \Phi_E(+1) g^J(T_{n+j}) \\ g^J(-1) &= M_E(-1) \sum_{j=1}^n \Phi_E(-1) g^J(T_{n+1-j}) \end{aligned} \quad (4-9)$$

其中函数 $M_E(\pm 1)$ 和函数 $\Phi_E(\pm 1)$ 表达式如下:

$$\begin{aligned} M_E(\pm 1) &= \frac{1}{n} \\ \Phi_E(\pm 1) &= \frac{\sin[(2n-1)(2j-1)\pi/4n]}{\sin[(2j-1)\pi/4n]} \end{aligned} \quad (4-10)$$

由于任意一条滑移带端点处应力强度因子 K_{II} 的值与 $g(\pm 1)$ 成正比, 则由 Hills^[63], 在第 J 条微滑移带端点处, 其应力强度因子表达式为:

$$K_{II}^J = \pm \sqrt{\pi a_J} \frac{2\mu}{\kappa+1} g^J(\pm 1) \quad (4-11)$$

对材料而言, 当应力强度因子 K_{II}^J 等于临界应力强度因子 K_{IIC} , 我们认为材料达到屈服状态:

$$\tau_p = \tau_0 + \frac{K_{IIC}}{K_{II}} (\tau_\infty - \tau_0) \quad (4-12)$$

特别需指出的是, 对于单条滑移带, 由断裂力学理论, 直接有 $K_{II} = (\tau_\infty - \tau_f) \sqrt{\pi d}$, 代入式 (4-12) 可得:

$$m=1, \tau_p = \tau_f + \frac{K_{IIc}}{\sqrt{\pi d}} \quad (4-13)$$

此式表明，对单条微滑移带模型，其屈服强度与微滑移带长度自动满足 Hall-Petch 关系。

4.3 无限多共线微滑移带模型的数值通解

如图 4-2 所示，在一个无限大平面中含有无穷多条长为 $2d$ 的微滑移带，间距为 $2a$ ，受远场力 τ_∞ 和晶格摩擦阻力 τ_f 作用，假设对任意一条裂纹，其中点与原点重合则由式 (4-1) 可得：

$$\tau_{xy}(x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-d+2m(a+d)}^{d+2m(a+d)} \frac{\rho(\xi)}{\xi-x} d\xi \quad (4-14)$$

若假定远场力 τ_∞ 和晶格摩擦阻力 τ_f 为恒定值，则位错分布密度函数是一个周期循环函数，我们可以列出该裂纹相应位错分布平衡方程：

$$\frac{2\pi(1-\nu)}{\mu}(\tau_\infty - \tau_f) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int_{-d}^{+d} \frac{\rho(\xi)}{\xi-x+2m(d+a)} d\xi \quad (4-15)$$

代入级数展开公式 $\frac{\pi}{\alpha} \cot\left(\frac{\pi t}{\alpha}\right) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{t-n\alpha}$ ，则有

$$\begin{aligned} \frac{2(1-\nu)}{\mu}(\tau_\infty - \tau_f) &= \frac{1}{2(d+a)} \int_{-d}^d \rho(\xi) \cot\left[\frac{\pi(\xi-x)}{2(d+a)}\right] d\xi \\ &= \frac{1}{2(d+a)} \int_{-d}^d \frac{\rho(\xi)}{\xi-x} + \rho(\xi) \left\{ \cot\left[\frac{\pi(\xi-x)}{2(d+a)}\right] - \frac{1}{\xi-x} \right\} d\xi \end{aligned} \quad (4-16)$$

令 $X = x/d$, $T = \xi/d$, $\rho(dT) = \phi(T)$ ，式 (4-16) 可以进一步简化为如下标准第一型奇异积分方程形式：

$$\frac{2(1-\nu)}{\mu}(\tau_\infty - \tau_f) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{2(d+a)} \int_{-1}^1 \frac{\phi(T)}{T-X} + \phi(T) \left\{ \cot\left[\frac{\pi(T-X)}{2(1+a/d)}\right] - \frac{1}{T-X} \right\} dT \quad (4-17)$$

由于对所有滑移带，其端点处均有应力集中的情况存在，因此位错密度分布函数可以改写为式 (4-4) 形式且其权函数仍满足式 (4-5)。运用 2.3 节中 Gauss-Jacobi 求积公式插值法的特殊情况，式 (4-3) 可以直接转化为以下线性方程组：

$$\frac{4(d+a)(1-\nu)}{\mu}(\tau_{\infty} - \tau_f) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \left\{ \frac{1}{T_i - X_j} + \left\{ \cot \left[\frac{\pi(T_i - X_j)}{2(1+a/d)} \right] - \frac{1}{T_i - X_j} \right\} \right\} g(T_i) \quad (4-18)$$

其中插值点 T_j 和 X_i 为:

$$\begin{aligned} T_j &= \cos\left(\frac{2j-1}{2n+1}\pi\right) \quad (j=1,2,\dots,n) \\ X_i &= \cos\left(\frac{2i}{2n}\pi\right) \quad (i=1,2,\dots,n-1) \end{aligned} \quad (4-19)$$

由于方程组式 (4-18) 仅有 $(n-1)$ 个方程, 而未知数有 n 项, 因此整个系统并不闭合, 还需要补充一个附加条件式 (2-22), 对其进行插值, 即对任意一条微滑移带有:

$$\frac{\pi}{N} \sum_{j=1}^n g(T_j) = 0 \quad (4-20)$$

函数 $g(T)$ 的在离散点 T_j 处的值由式 (4-18) (4-19) 可直接解得。并且, 在任意一条滑移带端点 $T = \pm 1$ 处, 与应力强度因子直接相关的 $g(T)$ 可以用 Krenk 插值公式直接得到:

$$\begin{aligned} g(+1) &= M_E(+1) \sum_{j=1}^n \Phi_E(+1) g(T_j) \\ g(-1) &= M_E(-1) \sum_{j=1}^n \Phi_E(-1) g(T_{n+1-j}) \end{aligned} \quad (4-21)$$

其中函数 $M_E(\pm 1)$ 和函数 $\Phi_E(\pm 1)$ 表达式如下:

$$\begin{aligned} M_E(\pm 1) &= 1/n \\ \Phi_E(\pm 1) &= \frac{\sin[(2j-1)(2n-1)\pi/4n]}{\sin[(2j-1)\pi/4n]} \end{aligned} \quad (4-22)$$

由于任意一条滑移带端点处应力强度因子 K_{II} 的值与 $g(\pm 1)$ 成正比, 则由 Hills^[63], 在第 J 条微滑移带端点处, 其应力强度因子表达式为:

$$K_{II}(\pm 1) = \pm \sqrt{\pi d} \frac{\mu}{2(1+\nu)} g(\pm 1) \quad (4-23)$$

对材料而言, 当应力强度因子 K_{II}^J 等于临界应力强度因子 K_{IIC} , 我们认为材料达到屈服状态, 代入式 (1-1) 可得:

$$\tau_p = \tau_0 + \frac{K_{IIC}}{K_{II}} (\tau_{\infty} - \tau_0) \quad (4-24)$$

4.4 算例及拟合结果

4.4.1 剪应力作用下的 5 条共线微滑移带

此时当滑移带间距恒定，为了使所有值归一化，令 $\tau_\infty = 0.1\mu$ ， $\tau_f = 0$ ， $\nu = 0.3$ ， $K_{IIIC} = 1$ 。一般认为，晶界的厚度在 $1-2nm$ 之间，而 Hall-Petch 效应仅对晶粒的直径为 $1\mu m$ 到 $100\mu m$ 的金属材料成立。如假定 $d = 10, d/a = 2 \times 10^4$ ，若每条微滑移带上取插值点数 $n=50$ ，则当 $m=5$ 时，可以给出正中间的滑移带上位错分布密度函数和屈服强度与滑移带长度 d 的关系如图 4-2 所示：

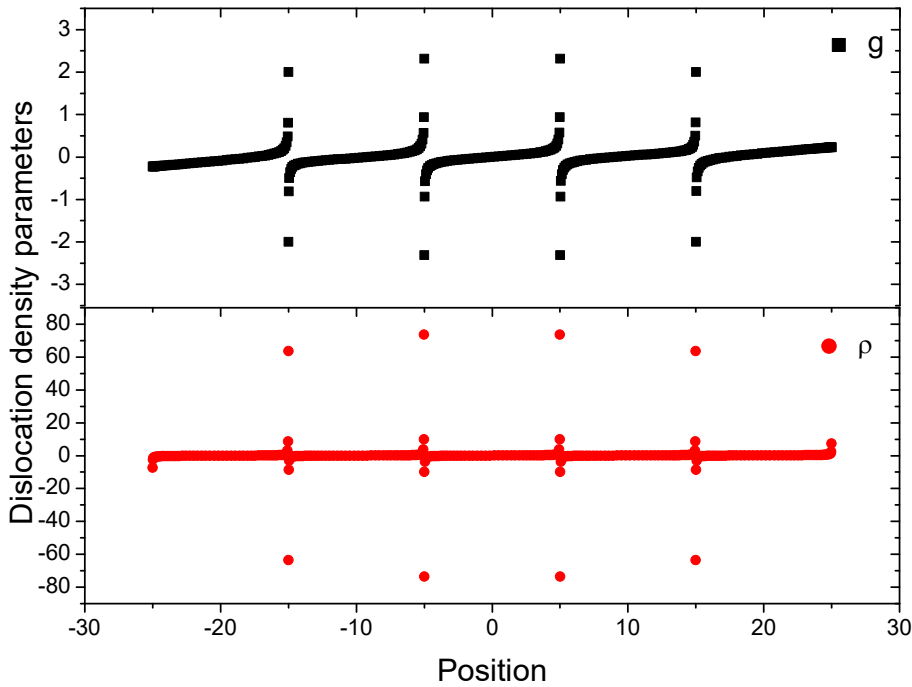
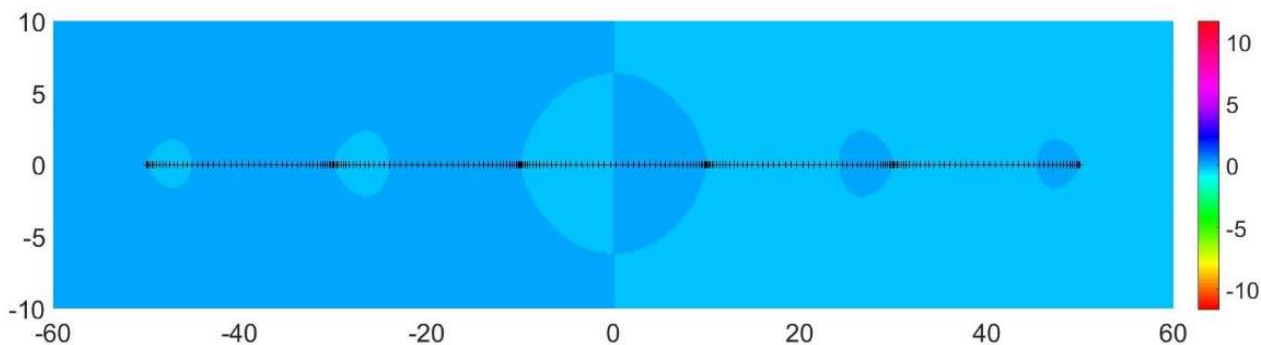


图 4-2 $m=5$ 时微滑移带上的有界连续函数和位错分布密度函数

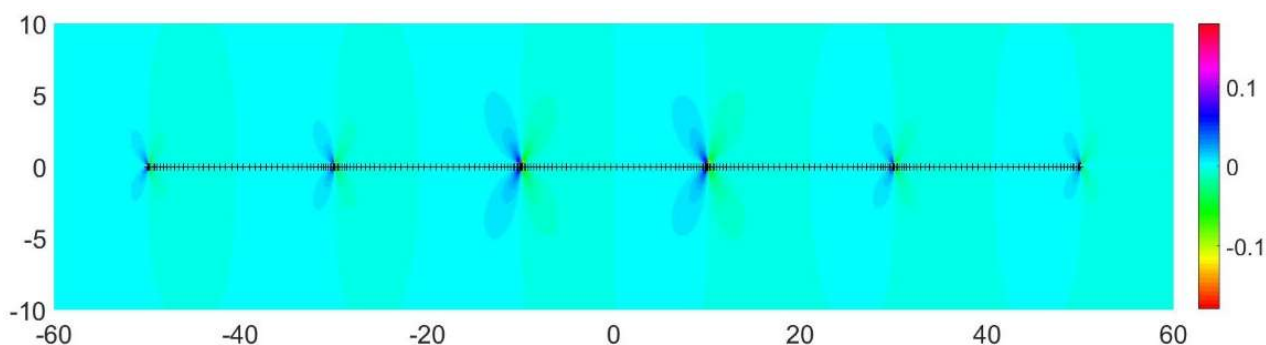
由式 (3-6)，对无限大基体内的多共线微滑移带模型，在求得其微滑移带上的有界连续函数和位错分布密度函数值后，其基体内的剪切应力大小可以用以下式子表示：

$$\begin{aligned}\sigma_{xx}(x, y) &= -\frac{2}{\sin \pi\alpha} \sum_{J=1}^m \sum_{k=1}^n W(\xi_k) \frac{(x - \xi_k)^3}{[(x - \xi_k)^2 + y^2]^2} g^J(\xi_k) \\ \sigma_{yy}(x, y) &= -\frac{2}{\sin \pi\alpha} \sum_{J=1}^m \sum_{k=1}^n W(\xi_k) \frac{(x - \xi_k)y^2}{[(x - \xi_k)^2 + y^2]^2} g^J(\xi_k) \\ \sigma_{xy}(x, y) &= -\frac{2}{\sin \pi\alpha} \sum_{J=1}^m \sum_{k=1}^n W(\xi_k) \frac{(x - \xi_k)^2 y}{[(x - \xi_k)^2 + y^2]^2} g^J(\xi_k)\end{aligned}\quad (4-25)$$

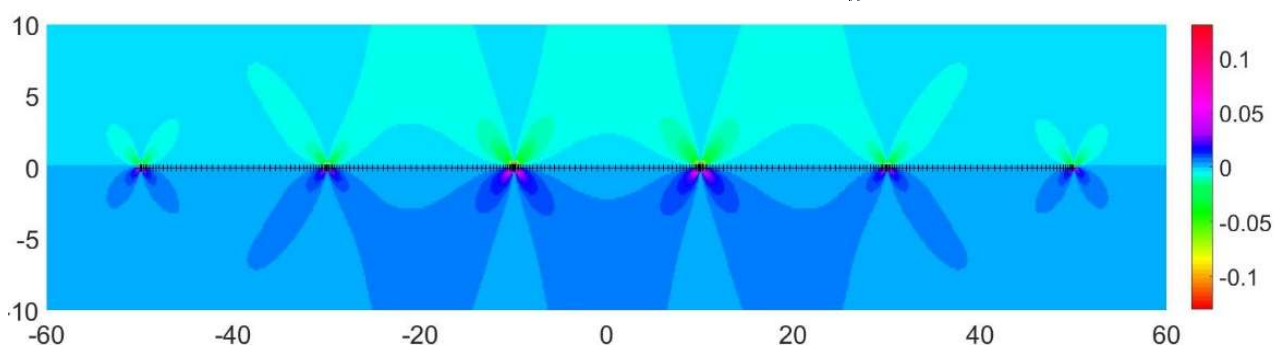
将计算所得有界连续函数值代入式 (4-25)，即可得到基体内应力分布，如图 4-3 所示，其中黑色“+”号部分代表滑移带。



(a) 无限大基体内含 5 条共线微滑移带 σ_{xx} 应力云图



(b) 无限大基体内含 5 条共线微滑移带 σ_{yy} 应力云图

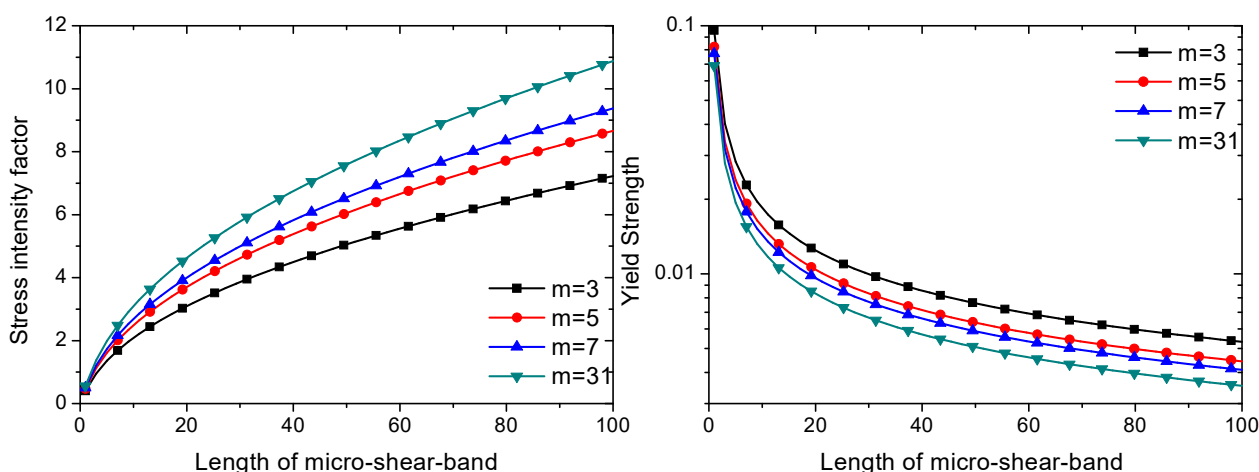


(c) 无限大基体内含 5 条共线微滑移带 σ_{xy} 应力云图

图 4-3 无限大基体内含 5 条共线微滑移带应力云图

4.4.2 材料屈服强度与微滑移带长度、间距的关系

当滑移带间距恒定, 为了使所有值归一化, 令 $\tau_{\infty} = 0.1\mu$, $\tau_f = 0$, $\nu = 0.3$, $K_{IC} = 1$ 。一般认为, 晶界的厚度在 $1-2nm$ 之间, 而 Hall-Petch 效应仅对晶粒的直径为 $1\mu m$ 到 $100\mu m$ 的金属材料成立。取 $a = 5 \times 10^4$, $d/a = 10^3 \sim 10^4$, 将计算得到的有界连续函数值代入式 (4-11) (4-12), 可以计算得不同微滑移带条数 m 时, 中央微滑移带的应力强度因子 K_{II} , 屈服强度 τ_p 与滑移带长度 $2d$ 之间关系如图 4-4 所示。可以发现, 材料的屈服强度与滑移带长度 $2d$ 的关系满足指数关系, 即式 (1-2) 形式, 但是可能未必满足 Hall-Petch 效应。

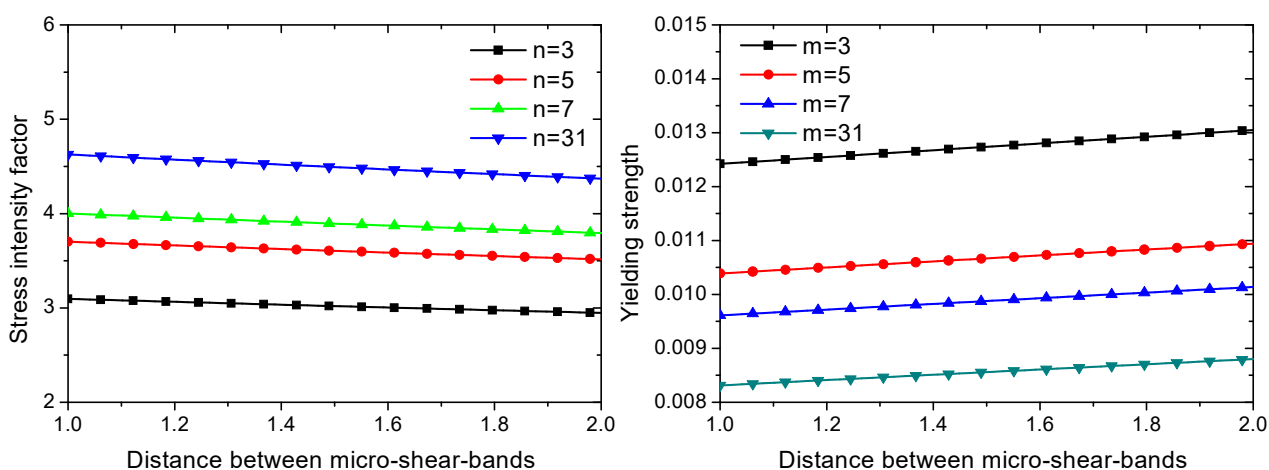


(a) 不同微滑移带条数下应力强度因子 K_{II} 与滑移带长度 $2d$ 的关系;

(b) 不同微滑移带条数下屈服强度 τ_p 与滑移带长度 $2d$ 的关系;

图 4-4 不同微滑移带条数下应力强度因子、屈服强度与滑移带长度 $2d$ 的关系

当滑移带长度恒定，考察滑移带间距对微滑移带之间干涉强度的影响令 $\tau_\infty = 0.1\mu$, $\tau_f = 0$, $\nu = 0.3$, $K_{IIc} = 1$ 。取 $d = 10$, $d/a = 10^4 \sim 2 \times 10^4$ ，将计算得到的有界连续函数数值代入式 (4-11) (4-12)，可以计算得不同微滑移带条数 m 时，中央微滑移带的应力强度因子 K_{II} ，屈服强度 τ_p 与滑移带间距 $2a$ 的关系。可以发现，当滑移带间距 $2a$ 增大，微滑移带间的干涉效应增强，微滑移带端部的应力强度因子 K_{II} 增大，材料的屈服强度 τ_p 减小。



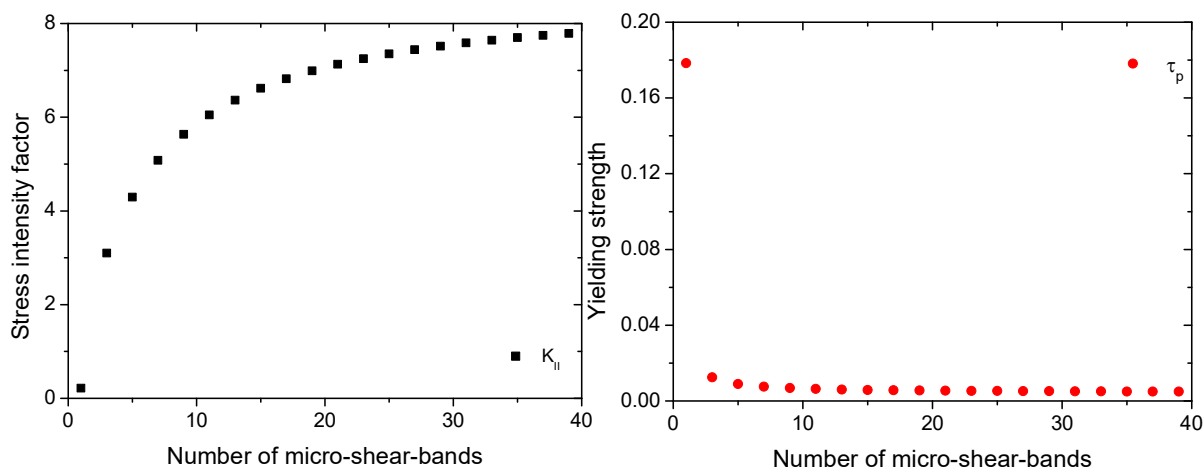
(a) 不同微滑移带条数下应力强度因子 K_{II} 与滑移带间距 $2a$ 的关系;

(b) 不同微滑移带条数下屈服强度 τ_p 与滑移带间距 $2a$ 的关系

图 4-5 不同微滑移带条数下应力强度因子、屈服强度与滑移带间距 $2a$ 的关系

4.4.3 材料屈服强度与微滑移带数量的关系

此时当滑移带间距恒定，并且有 $\tau_{\infty}=0.1\mu$ ， $\tau_f=0$ ， $\nu=0.3$ ， $K_{IC}=1$ 。一般认为，晶界的厚度在 $1-2nm$ 之间，而 Hall-Petch 效应仅对晶粒的直径为 $1\mu m$ 到 $100\mu m$ 的金属材料成立。如假定 $d=10$ ， $d/a=2\times 10^4$ ，若每条微滑移带上取插值点数 $n=50$ ，将所求得的有界连续函数值代入式 (4-9) (4-11) 及 (4-12)，则可以计算微滑移带端点处应力强度因子 K_{II} ，屈服强度 τ_p 微滑移带条数 m 的关系如图 4-6 所示。



(a) 微滑移带端部应力强度因子 K_{II} 与微滑移带数量 m 的关系； (b) 材料屈服强度 τ_p 与微滑移带数量 m 的关系

图 4-6 应力强度因子、材料屈服强度与微滑移带数量的关系

相似地，若取 $a=5\times 10^{-4}$ ， $d/a=10^3\sim 10^4$ 部分的数据点按式 (1-2) 形式进行拟合，则有拟合参数如表 4-1 所示。

表 4-1 不同晶粒数量 m 下晶粒尺寸效应修正指数公式的拟合参数

晶粒数量 m	局部应力参数 k	晶粒尺寸指数 α
1	0.5642	0.5
2	0.06581	0.7765
3	0.05322	0.7884
4	0.04343	0.8006
5	0.0394	0.8079
...
∞	0.0198	0.9997

一般认为，对 γ' 相增韧镍基合金，其 γ' 颗粒间距在 $0.2\mu m$ 到 $0.6\mu m$ 之间， γ' 颗粒尺寸在 $0.2\mu m$ 到 $1.2\mu m$ 之间，若取 $a=0.1$ ， $d/a=1\sim 5$ 部分的数据点按式 (1-2) 形式进

行拟合，则有拟合参数如表 4-2 所示：

表 4-2 不同 γ' 颗粒数量 m 下 γ' 颗粒尺寸效应修正指数公式的拟合参数

γ' 颗粒数量 m	局部应力参数 k	晶粒尺寸指数 α
1	0.5642	0.5
2	0.5866	0.5188
3	0.5131	0.5594
4	0.4919	0.5760
5	0.4731	0.5889
...
∞	0.416	0.6349

由表格中拟合所得参数，可以得出以下几点结论：

(1) 由于晶界厚度相对于晶粒的尺寸非常小的缘故，即滑移带间距相对于微滑移带的长度也非常小，因此，当计入基体与滑移带之间的干涉时，滑移带间距对屈服应力也产生了较大影响，相对屈服应力会很小，导致当滑移带的数量从 1 变为 2 时， k 的剧烈变化；

(2) 由于 γ 基体厚度与 γ' 颗粒的尺寸数量级相近的缘故，即滑移带间距相对于微滑移带的长度大小相似，因此，当计入基体与滑移带之间的干涉时，滑移带间距对屈服应力也产生了一定影响，导致当滑移带的数量 m 增大时，晶粒尺寸指数 α 随之缓慢增大不会出现拟合晶粒尺寸效应时变化较快的情况；

(3) 随微滑移带数 m 的增多，微滑移带间干涉增强， α 逐渐增大，但 α 最大值小于 1，该现象可能是由于位错塞积模型本身性质导致的。

(4) 晶粒尺寸指数 α 的大小除了与微滑移带数量有关，还与微滑移带长度与间距之比 d/a 有关，当这个值非常大时， α 的值也趋近 1，当 d/a 相对较小趋近 1 时， α 的值则趋近 0.5。

4.5 本章小结

本章分别对无限大平面中含有有限多条共线微滑移带和无限多条共线微滑移带两种模型进行了研究并推导出了其数值通解，通过相关具体算例，首先研究了当晶界与晶粒材料相同时，基体内应力的分布；其次，研究了材料屈服强度 τ_p 与微滑移带长度 $2d$ 、间距 $2a$ 的关系；最后研究了材料屈服强度 τ_p 与微滑移带条数 m 之间的关系。研究发现，材料屈服强度 τ_p 与微滑移带长度 $2d$ 满足指数关系，且该指数大小与微滑移带长度与间距之比 d/a 和微滑移带条数 m 有关，当微滑移带长度与间距之比 d/a 较小或

微滑移带条数 m 较小时，微滑移带间相互干涉作用较弱， m 趋近于 $1/2$ ，当微滑移带长度与间距之比 d/a 或微滑移带条数 m 逐渐增大时，微滑移带间相互干涉作用增强， α 随之增大直至趋近于 1。

综上所述，晶粒指数参数 α 应该是一个反应了微滑移带间相互干涉作用的参数，它的大小介于 0.5 到 1 之间，随长度与间距之比 d/a 或微滑移带条数 m 增大，微滑移带间相互干涉作用增强而逐渐增大。

5 剪应力作用下的无限多条共线微滑移带

5.1 引言

上一章，介绍了无限大平面中含有有限多条共线微滑移带和无限多条共线微滑移带两种模型及其数值通解，并通过相关具体算例，研究了材料屈服强度与微滑移带长度、间距的关系、微滑移带条数之间的关系。研究发现微滑移带条数或微滑移带长度与间距之比均会影响微滑移带间干涉作用的大小，并改变材料屈服强度尺寸效应修正指数公式中的晶粒尺寸指数。但是晶粒尺寸指数 α 的物理意义还不是非常明确，纯金属材料的晶粒尺寸效应和镍基合金的 γ' 相尺寸效应之间的联系也不十分明了。因此我们将在这一章继续对剪应力作用下的无限多条共线微滑移带模型进行研究，试图由此用一个简洁的式子来表示材料屈服强度与微滑移带长度、间距之间的关系。

在以往的文献中，对共线裂纹间的干涉的研究已有很透彻的研究，如 Irwin^[73] 利用 Westergaard 应力函数法求解了受远场载荷的二维无限大弹性基体中无限多共线裂纹问题的解析解，Koiter^[74] 利用 Muskhelishvili 复变函数法得到了和 Irwin 相同的结果，Yokobori 等^[75] 用位错分布法对无限多条 I、II 型共线裂纹进行了求解。类似的，无限大平面中含无限多条共线微滑移带模型在受远场剪切力和晶格摩擦力作用下时，该问题应有解析解。

本章第 2 节首先给出剪应力作用下无限大二维基体内的无限多条共线微滑移带的解析解，并在此基础上推出屈服强度尺寸效应的新表达式；在第 3 节中，我们将对该表达式进行讨论，给出对应某些特殊材料其相应的退化形式，并用实验数据进行拟合，对比，以证明该表达式的正确性和有效性；最后在第四节中给出相关结论。

5.2 无限多共线微滑移带模型的解析解

虽然纯金属材料的晶粒尺寸效应和镍基合金的 γ' 相尺寸效应表面上形式不同，但实际上，它们的物理意义是一致的，因此这两个问题均可以用位错塞积原理解决。按照实验中观察到的现象，我们建立如下理论模型来解决上述两个问题：

如图 5-1 所示，在一受远场剪切力 τ_∞ 无限大的二维弹性基体中，有许多相同大小的方形单元均匀分布，这些方形单元可以认为代表晶粒或者 γ' 析出相颗粒，在方形单元中，存在长度均为 $2d$ 的一列无限多共线微滑移带，沿微滑移带分布有连续位错，方形单元边界的厚度为 $2a$ 。

在 4.4 节中，我们已经利用位错分布法给出了无限多共线微滑移带模型的位错分布平衡方程，假设外载荷 τ_∞ 和内摩擦力 τ_f 均匀分布，则位错分布密度函数是一个周期循

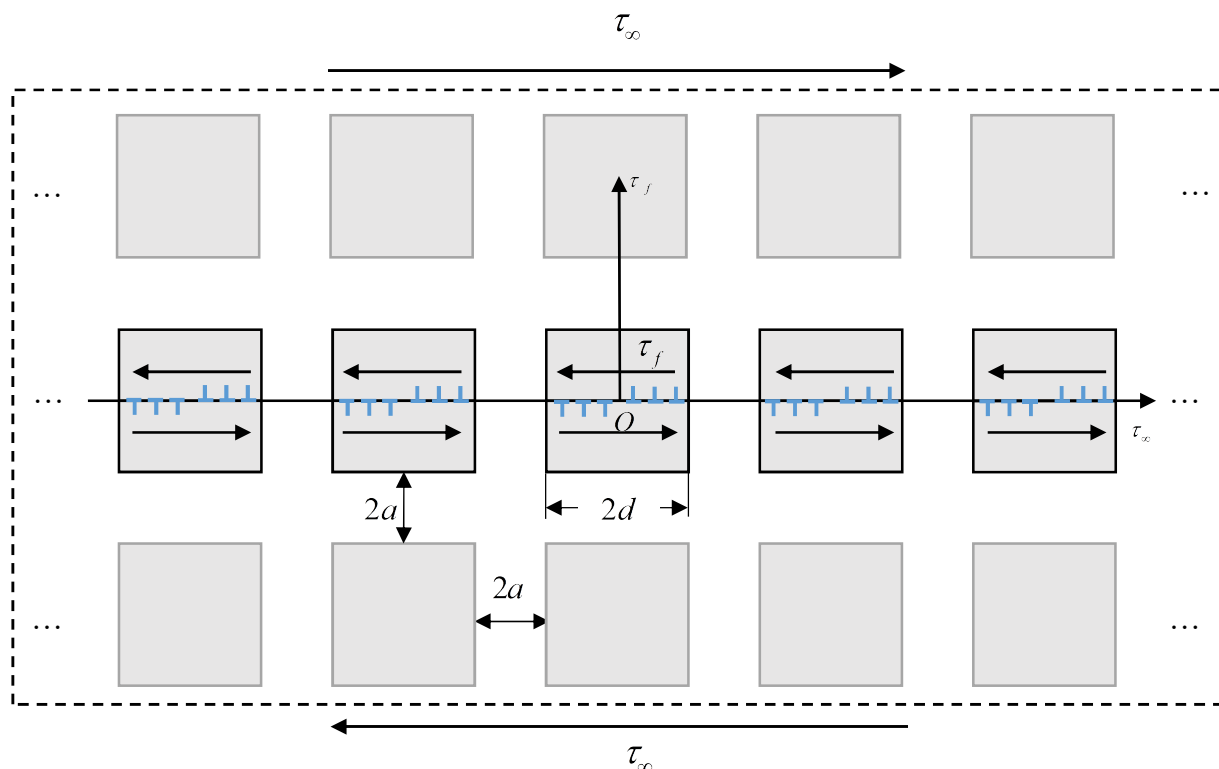


图 5-1 在远场剪切力和内部摩擦阻力作用下的一系列无限多条共线等长微滑移带：当 a 与 d 相比非常小时，这个模型可用于计算紧密排布的晶粒的尺寸效应，当 a 和 d 数量级相似时，这个模型可用于计算镍基合金 γ' 相的尺寸效应

环函数，由式 (4-15)：

$$\tau_{\infty} - \tau_f = \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-d}^d \frac{\rho(\xi)}{\xi - x + 2n(d+a)} d\xi \quad (5-1)$$

式 (5-1) 即为无限多共线微滑移带的位错分布平衡方程。需要指出的是，式 (5-1) 中外剪切载荷 τ_{∞} 实际上对应材料的剪切屈服强度。

5.2.1 微滑移带上的位错分布密度函数解析解

位错分布密度函数在微滑移带左右端点处的奇异性由式 (5-3) 决定，且与外加载荷无关。使用 Leibfreid^[76] 推导的奇异方程解法，可以求得该函数的解析解，首先，将式 (5-1) 改写成如下形式：

$$\frac{2(1-\nu)}{\mu} (\tau_{\infty} - \tau_f) = \frac{1}{\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\int_{-d}^0 \frac{\rho(\xi)}{\xi - x + 2n(d+a)} d\xi + \int_0^d \frac{\rho(\xi)}{\xi - x + 2n(d+a)} d\xi \right] \quad (5-2)$$

代入级数展开公式 $\frac{\pi}{\alpha} \cot\left(\frac{\pi t}{\alpha}\right) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{t - n\alpha}$ ，则有

$$\frac{2(1-\nu)}{\mu}(\tau_{\infty} - \tau_f) = \frac{1}{2(d+a)} \left\{ \int_{-d}^0 \rho(\xi) \cot \left[\frac{\pi(\xi-x)}{2(d+a)} \right] d\xi + \int_0^d \rho(\xi) \cot \left[\frac{\pi(\xi-x)}{2(d+a)} \right] d\xi \right\} \quad (5-3)$$

由于位错分布密度函数 $\rho(x)$ 是一个奇函数, 即 $\rho(x) = -\rho(-x)$, 因此式 (5-3) 可以进一步简化为:

$$\frac{2(1-\nu)}{\mu}(\tau_{\infty} - \tau_f) = \frac{1}{2(d+a)} \int_0^d \rho(\xi) \left\{ \cot \left[\frac{\pi(\xi+x)}{2(d+a)} \right] + \cot \left[\frac{\pi(\xi-x)}{2(d+a)} \right] \right\} d\xi \quad (5-4)$$

接下来, 引入以下三角变换公式:

$$\cot(\alpha + \beta) + \cot(\alpha - \beta) = \frac{2 \sin 2\alpha}{\cos 2\beta - \cos 2\alpha} \quad (5-5)$$

式 (5-4) 即可改写为以下形式:

$$\frac{2(1-\nu)}{\mu}(\tau_{\infty} - \tau_f) = \frac{1}{d+a} \int_0^d \rho(\xi) \frac{\sin \frac{\pi\xi}{d+a}}{\cos \frac{\pi\xi}{d+a} - \cos \frac{\pi x}{d+a}} d\xi \quad (5-6)$$

为了简化表达式, 令 $\eta = \cos \frac{\pi\xi}{d+a}$, $F(\eta) = \rho(\xi)$, 则有:

$$\frac{2(1-\nu)}{\pi\mu}(\tau_{\infty} - \tau_f) = \int_{\cos \frac{\pi d}{d+a}}^1 \frac{F(\eta)}{\eta - \cos \frac{\pi x}{d+a}} d\eta \quad (5-7)$$

式 (5-7) 的解在文献 [64, 76] 中已给出:

$$F(\eta) = \frac{C + 2(1-\nu)(\tau_{\infty} - \tau_f)\eta / \mu}{\left[(1-\eta) \left(\eta - \cos \frac{\pi a}{d+a} \right) \right]^{\frac{1}{2}}} \quad (5-8)$$

其中 C 是一个待定常数, 由于位错分布密度函数是奇函数, 则有 $\rho(0) = 0$, 代入式 (5-8) 可得:

$$C = -\frac{2(1-\nu)(\tau_{\infty} - \tau_f)}{\mu} \quad (5-9)$$

代入式 (5-8), 位错分布密度函数的解析解 $\rho(x)$ 的最终形式如下:

$$\rho(x) = \frac{2(1-\nu)(\tau_{\infty} - \tau_f)}{\mu} \left[\left(1 - \cos \frac{\pi x}{d+a} \right) / \left(\cos \frac{\pi x}{d+a} - \cos \frac{\pi d}{d+a} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (5-10)$$

5.2.2 屈服强度尺寸效应的新表达式

由 Hills 等^[63], 微滑移带端部应力强度因子 K_{II} 与滑移带上位错密度分布函数 $\rho(r)$ 的关系如下:

$$K_{II} = \frac{\mu}{2(1-\nu)} \lim_{r \rightarrow 0} \sqrt{2\pi r} \rho(r) = (\tau_{\infty} - \tau_f) \sqrt{2(d+a) \tan \frac{\pi d}{2(d+a)}} \quad (5-11)$$

其中, 在任意微滑移带右端处 r 的长度应沿 x 轴的负方向进行测量, 在滑移带左端处, 则应沿 x 轴正方向进行测量。

式 (5-13) 的形式与 Irwin^[73] 和 Koiter^[74] 分别利用 Westergaard 应力函数法和 Muskhelishvili 复变函数法求解的受远场剪切载荷的二维无限大弹性基体中无限多共线裂纹问题的解析解十分相似, 唯一的区别在于此处式 (5-11) 计入了晶格摩擦阻力 τ_f 的影响。由此有条件地证明了该模型解析解的正确性。

当 K_{II} 与临界应力强度因子 K_{IIC} 相等时, 材料可认为达到塑性状态, 因此由式 (5-11), 材料的屈服强度表达式为:

$$\tau_{\infty} = \tau_f + \frac{K_{IIC}}{\sqrt{d} \sqrt{2(1+a/d) \tan \frac{\pi}{2(1+a/d)}}} \quad (5-12)$$

由塑性力学理论, 式 (5-12) 可以表述为和式 (1-1) Hall-Petch 关系的相同形式, 则材料等效屈服应力与晶粒尺寸的关系如下:

$$\sigma_y = \sigma_0 + \frac{1}{\sqrt{d}} \frac{\sqrt{3}K_{IIC}}{\sqrt{2(1+a/d) \tan \frac{\pi}{2(1+a/d)}}} = \sigma_0 + \frac{k}{\sqrt{d}} \frac{1}{\sqrt{\frac{2}{\pi}(1+a/d) \tan \frac{\pi}{2(1+a/d)}}} \quad (5-13)$$

其中: $\sigma_y = \sqrt{3}\tau_{\infty}$, $\sigma_0 = \sqrt{3}\tau_f$, $k = \sqrt{3/\pi}K_{IIC}$ 。与式 (1-1) 相比, 式 (5-13) 等式右边的第二项代表了由于多共线微滑移带的存在及图 5-1 中各方形单元与方形单元边界之间的干涉对材料屈服强度的影响。这样, 利用几何参数 a 和 d , 即可计算出纯金属材料中晶粒尺寸或镍基合金材料中 γ 析出相尺寸对材料屈服强度的影响。

需要强调的是, 式 (5-13) 表明材料的屈服强度与方形单元尺寸的平方根并不一定成反比, 式中的材料常数 k 可等效为临界应力强度因子 K_{II} 。式 (5-13) 是本研究的主要结果之一。

5.3 讨论

在该节中, 我们将讨论共线微滑移带模型的几种退化形式, 并将模型的解析解应用于几种材料屈服强度的预测。

5.3.1 模型的两种退化形式

1) 低碳钢等金属材料的屈服强度

对于低温条件下的低碳钢材料，其晶界上镶嵌有许多坚硬的渗碳体，因此晶粒与晶粒之间的干涉作用无法穿过晶界，从而被大大削弱，甚至微滑移带间的干涉可以直接忽略。相似的，向奥氏体中投入少量的硼或者氮时，对 Hall-Petch 关系中的摩擦应力 σ_0 影响不大，但却能显著提升 k 值，从而改善 304 不锈钢的力学性能^[6]。此时由于硼和氮的作用，晶界处有大量原子偏聚，因此晶粒间的干涉作用大大被削弱。上述两种情况可以用一个无限大二维弹性体中单独存在的一条微滑移带进行模拟，此时令式 (5-13) 中 $a \rightarrow \infty$ ，即可求得低碳钢材料的屈服强度为：

$$\sigma_y = \sigma_0 + \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{k}{\sqrt{d}} \frac{1}{\sqrt{\frac{2}{\pi}(1+a/d) \tan \frac{\pi}{2(1+a/d)}}} = \sigma_0 + \frac{k}{\sqrt{d}} \quad (5-14)$$

从式 (5-14) 我们可以发现，对低碳钢材料屈服强度的晶粒尺寸效应的新关系式，其晶粒尺寸的指数可自动退化为 1/2，即经典的 Hall-Petch 关系。该退化形式表明，对有坚硬晶界或晶界上嵌有大量偏聚夹杂颗粒的材料，其屈服强度可以大致用经典 Hall-Petch 表示。通过投入硼或者氮等元素，材料的临界断裂强度因子 K_{IC} 大小不变，晶粒尺寸不变，但晶界变硬，同样也会导致 Hall-Petch 关系式中的材料系数 k 增大。

2) 具有大尺寸晶粒的金属材料屈服强度

如图 5-1 所示，与晶界厚度 $2a$ 相比，当晶粒尺寸 $2d$ 足够大时，即 $d/a \rightarrow \infty$ 时，则式 (5-13) 可以退化为同种材料单晶体的屈服强度 σ_0 ：

$$\sigma_y = \sigma_0 + \lim_{d/a \rightarrow \infty} \frac{k}{\sqrt{d}} \frac{1}{\sqrt{\frac{2}{\pi}(1+a/d) \tan \frac{\pi}{2(1+a/d)}}} = \sigma_0 \quad (5-15)$$

该退化形式表明，当晶粒尺寸相对较大时，材料的屈服强度主要来自于材料内部对位错移动的晶格阻力。这两种退化形式一定程度上证明了式 (5-15) 的正确性和可信度。

5.3.2 典型纯金属材料屈服强度的晶粒尺寸效应

接下来，我们将应用当前式 (5-13) 的结果对纯铝和纯铜的晶粒尺寸效应进行模拟。在绪论中已经介绍过，Hall-Petch 关系式是一个基于金属材料实验数据拟合所得的经验公式，但其中每一项都应该具有清晰的物理意义，例如式 (1-1) 中 σ_0 代表着材料内部的晶格摩擦阻力^[3]。但是当式 (1-1) 被用于拟合某些材料的实验数据时，Hall-Petch 关系中的 σ_0 的拟合参数却有可能为负，该现象与其物理含义内部晶格摩擦阻力必须大于 0 发生矛盾。这种类型的材料的典型案例即为纯铝^[33, 77]，表 5-1 中给出了用 Hall-Petch 关系式 (1-1) 模拟文献^[33, 77]中的数据所得的拟合参数 σ_0 和 k 值。与之对应，我们用新关系式 (5-13) 对材料的拟合参数 σ_0 和 k 值进行计算，新的关系式中考虑了晶界厚度对材料屈服强度的影响，一般材料界认为晶界的厚度约为 1~2nm，因此

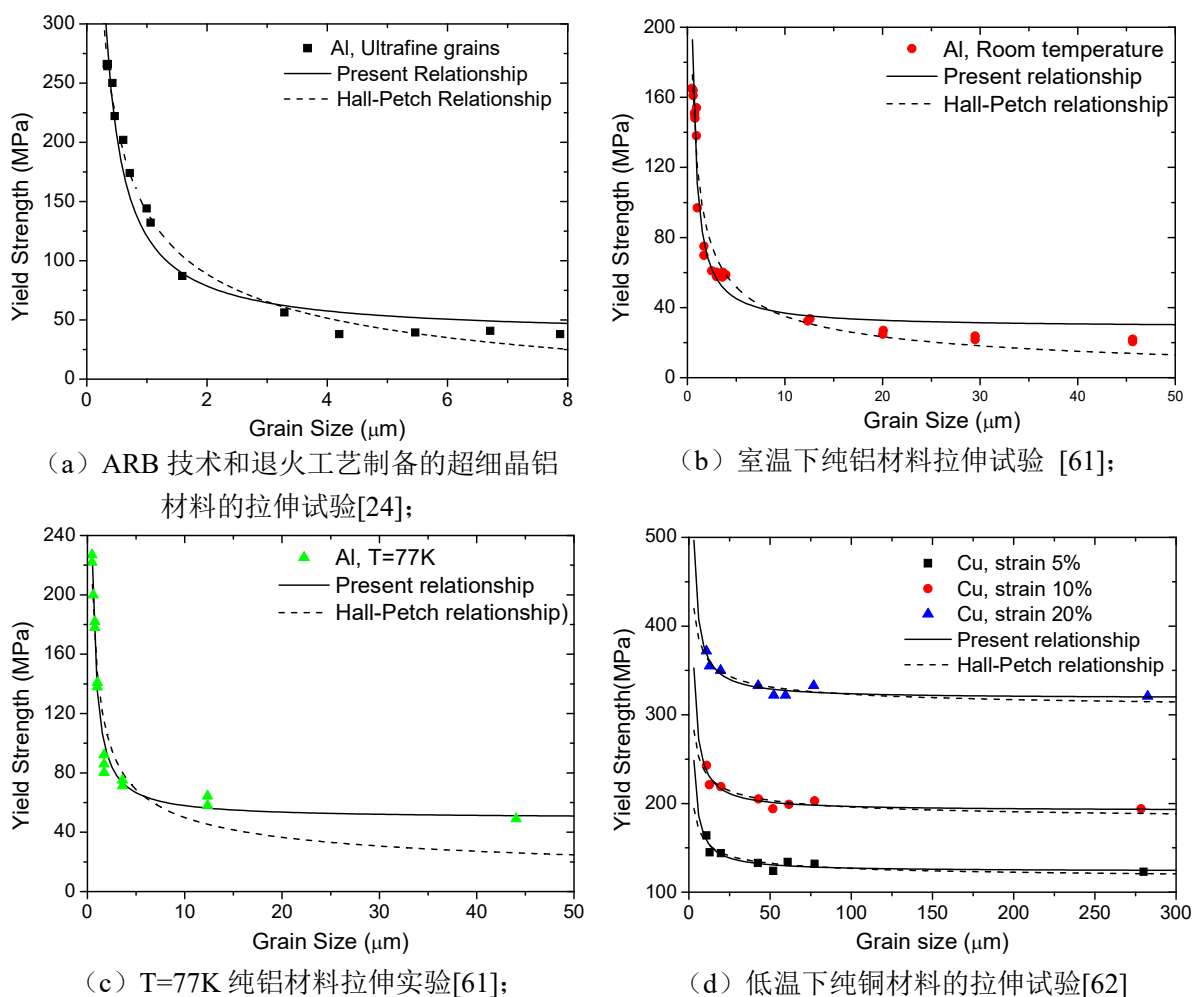


图 5-2 纯铝和纯铜的拟合曲线:

表 5-1 纯铝材料材料常数拟合结果

	Hall-Petch 关系式拟合参数			当前关系式拟合参数		
	σ_0 (MPa)	k_{HP} (MPa· $\mu\text{m}^{1/2}$)	R^2	σ_0 (MPa)	k_{HP} (MPa· $\mu\text{m}^{1/2}$)	R^2
超细晶纯铝材料 拉伸试验	-38.08	179.2	0.9913	36.59	33.51	0.9655
室温下纯铝材料 拉伸试验	-4.855	126.3	0.9530	28.61	33.09	0.9323
T=77K 纯铝材 料拉伸试验	4.392	144	0.9233	49.18	34.89	0.9680

此处取 $a=0.5\text{nm}$ 。图 5-2 (a-c) 中给出了实验的原始数据和相应的拟合曲线, 表 5-1 则给出了其对应的拟合参数 σ_0 和 k 值以及相关系数 R^2 。相比之下, 虽然 Hall-Petch 关系

式的拟合曲线的与原始数据相关度非常高，但是其拟合参数 σ_0 不符合其物理意义。相比之下式 (5-13) 的拟合参数 σ_0 满足了内部晶格摩擦阻力为正的物理条件，更加合理，且其材料参数 k 值也相对来说比较稳定。该拟合结果表明，式 (5-13) 可以较为精确地表示材料屈服强度与其晶粒尺寸的关系，并且虽然是金属材料尺寸效应的拟合结果，其拟合参数具有清晰的物理意义。

表 5-2 纯铜材料材料常数拟合结果

	Hall-Petch 关系式拟合参数			当前关系式拟合参数		
	σ_0 (MPa)	k_{HP} (MPa· $\mu\text{m}^{1/2}$)	R^2	σ_0 (MPa)	k_{HP} (MPa· $\mu\text{m}^{1/2}$)	R^2
99.99%铜, 应变率 5%	112.4	143.0	0.8263	123.4	151.2	0.8564
99.99%铜, 应变率 10%	177.8	182.6	0.8498	191.7	194.5	0.8930
99.99%铜, 应变率 20%	302.7	204.0	0.8784	318.3	215.8	0.9177

为了进一步证明式 (5-13) 的正确性，分别用 Hall-Petch 关系式 (1-1) 和当前关系式 (5-13) 对低温下纯铜材料的拉伸试验数据^[78]进行拟合，此处仍令 $a=0.5\text{nm}$ 。图 5-2 (d) 中给出了不同应变率下铜的试验原始数据和相应的拟合曲线，表 5-2 则给出了其对应的拟合参数 σ_0 和 k 值以及相关系数 R^2 。与 Hall-Petch 关系式拟合曲线相比，当前关系式 (5-13) 的拟合曲线与实际更相符。

这两种典型材料的拟合参数表明，当前研究的共线微滑移带模型可以用于表述金属材料屈服强度的尺寸效应。并且需要强调的是，对每个拟合参数，它具有明确的物理意义。

5.3.3 镍基合金的屈服应力

如图 5-1 所示，若方形单元代表镍基合金中嵌在 γ 相基体中的 γ' 析出相颗粒，则 γ' 析出相颗粒的体积分数 f 可以直接表示为 $d^3 / (a+d)^3$ ^[79]。对镍基合金，其 γ' 析出相颗粒的体积分数 f 仅与退火温度有关，因此随 γ' 析出相颗粒的尺寸变化其体积分数 f 保持不变，代入式 (5-15)，即有：

$$\sigma_y = \sigma_0 + \frac{k}{\sqrt{d}} \frac{1}{\sqrt{(1+a/d) \tan \frac{\pi}{2(1+a/d)}}} = \sigma_0 + \frac{k}{\sqrt{d}} \frac{1}{\sqrt{\frac{2}{\pi} f^{-1/3} \tan \left(\frac{\pi}{2} f^{1/3} \right)}} = \sigma_0 + \frac{k_f}{\sqrt{d}} \quad (5-16)$$

其中, $k_f = k / \sqrt{2f^{-1/3} \tan(\pi f^{1/3} / 2) / \pi}$ 是一个与 γ' 析出相体积分数 f 大小有关的材料常数。式 (5-16) 表明, 对于镍基合金材料, 其屈服强度与 γ' 析出相颗粒尺寸的关系满足 Hall-Petch 效应, 这与 Oh 和 Han^[38]以及 Zhang^[40]实验观察结果相吻合。这是本研究的另一重要结论。对其他的颗粒增韧材料, 若其塑性变形是由于在外界载荷作用下, 位错穿过基体中夹杂的颗粒而非绕过这些颗粒造成剪切破坏, 则可直接用式 (5-16) 预测其屈服强度; 若其塑性变形是由于在外界载荷作用下, 位错绕过这些颗粒而非穿过基体中夹杂的颗粒, 这个模型仍然可用, 仅需将式 (5-16) 中 a 和 d 的位置交换即可, 该类材料的屈服强度随其颗粒体积分数的减小而减小。对其他的复合材料如氧化物弥散强化合金, 该模型同样适用。

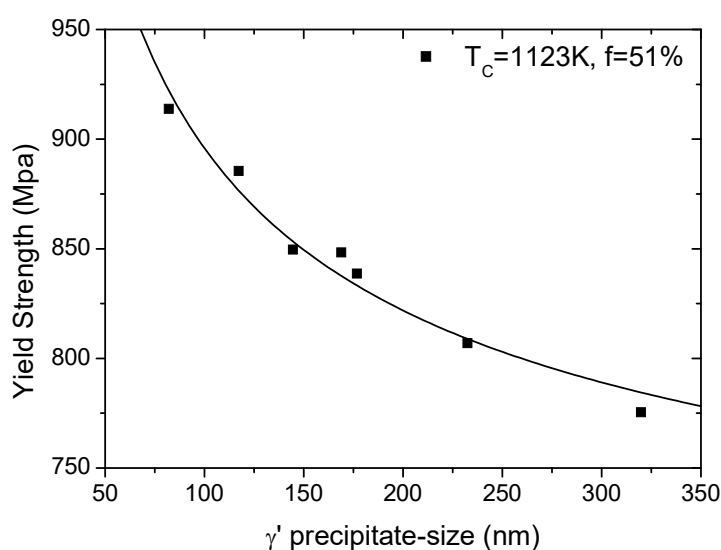


图 5-3 高 γ' 体积分数的镍基合金的屈服强度与 γ' 析出相尺寸的拟合曲线[64]

表 5-3 高 γ' 相体积分数的镍基合金的拟合参数

	当前关系式拟合参数		
	σ_0 (MPa)	k_f (MPa· $\mu\text{m}^{1/2}$)	R^2
$T_c=1273\text{K}$, $f=51\%$ 的镍基合金材料的拉伸试验	643.1	2528	0.9591

为了验证式 (5-16) 的正确性, 表 5-3 和图 5-3 分别给出了用该式对高 γ' 体积分数的镍基合金室温下拉伸试验结果的拟合曲线和相关拟合参数 σ_0 , k 值以及相关系数 R^2 。该拟合结果表明, 镍基合金材料屈服强度的 γ' 析出相尺寸效应, 同样满足 Hall-Petch 关系式 (1-1)。

5.4 本章小结

本章在位错分布法的理论基础上, 建立了无穷多共线微滑移带的通用理论模型,

并求得了该模型的解析解，并在基础上，对纯金属材料屈服强度的晶粒尺寸效应和镍基合金金属材料屈服强度的 γ' 相颗粒尺寸效应进行了研究，进而得到了一个关于材料屈服强度尺寸效应的新关系式。该模型也可以给出两种尺寸效应和相关拟合参数物理意义的合理解释。通过对典型材料试验数据的拟合结果进行分析，我们发现新的表达式不仅能精确地描述两种尺寸效应，且能给出镍基合金屈服强度与 γ' 相颗粒尺寸满足 Hall-Petch 效应的合理解释。

6 结论与展望

6.1 结论

本文利用 Gauss-Jacobi 插分格式和位错分布法, 分别研究了剪应力作用下的单边微滑移带模型、有限多共线微滑移带模型和无限多共线微滑移带模型, 在此基础上求解了材料屈服强度尺寸效应的新关系式, 所得结论归纳如下:

(1) 应用 Gauss-Jacobi 求积公式对第二类奇异积分方程进行了系统的求解, 并给出了其数值解的通式。并在其基础上给出了第一类奇异积分方程数值解的通式及其常用的特殊情况, 且上述特殊情况中的线性插值方程组与前人结果一致, 从而有条件地证明了该数值解法的正确性。

(2) 建立了单边微滑移带的通用理论模型, 应用 Gauss-Jacobi 插分格式系统地求解了单边微滑移带在恒定或变晶格摩擦力作用下的位错密度数值解, 探究了材料屈服强度与微滑移带长度的关系, 并讨论了边界效应以及晶格摩擦力对材料屈服强度的影响。

(3) 应用 Gauss-Jacobi 插分格式系统地求解了有限多共线微滑移带模型, 探究了相应的材料屈服强度与微滑移带长度、间距、数量的关系, 以及基体内部的应力分布, 结果表明微滑移带条数增多, 微滑移带之间的相互干涉作用增强, 对应用材料屈服强度的指数修正公式拟合所得的晶粒尺寸指数增大。

(4) 推导了无限多共线微滑移带模型的解析解, 该解析解与 Irwin 和 Koiter 分别利用 Westergaard 应力函数法和 Muskhelishvili 复变函数法求解的受远场剪切载荷的二维无限大弹性基体中无限多共线裂纹问题的解析解十分相似, 进而得到了一个关于材料屈服强度尺寸效应的新关系式, 并为该关系式中拟合参数的物理意义提供了合理的解释。该关系式表明, 屈服强度与晶粒或析出相尺寸的平方根并不成正比。

(5) 应用多共线微滑移带的通用理论模型, 对纯金属材料屈服强度的晶粒尺寸效应和镍基合金金属材料屈服强度的 γ' 相颗粒尺寸效应进行了研究, 通过对典型材料实验结果的拟合表明, 该模型可以给出两种尺寸效应和新材料屈服强度尺寸效应关系式中拟合参数物理意义的合理解释, 且对低碳钢和镍基合金, 其屈服尺寸效应关系式会退化为 Hall-Petch 关系式。

6.2 展望

在以上研究的基础上, 结合本文的结果, 进一步研究工作可从以下几个方面展开:

(1) 压缩微柱实验表明, 材料的屈服强度与试样的直径成反比, 该现象可能与材料的表面能有关, 可以进一步将晶粒的尺寸效应与之结合在一起, 探究金属材料的屈服强度的尺寸效应。

(2) 当晶粒尺寸达到纳米级时, 此时实验证明晶粒内部无位错塞积, 材料的屈服强度呈反 Hall-Petch 现象, 可以结合本文中的结果, 构建一个更合理的模型, 同时解释不同尺寸下的两种不同的尺寸效应。

(3) 当前研究中, 我们仍假定晶界与晶粒或基体与析出相的材料相同, 在此基础上直接绘出的基体内的应力云图, 可以进一步对有相似破坏机理的颗粒增韧复合材料进行研究。

致 谢

本论文是在我的导师马利锋教授的悉心指导下完成的，在我的学业和论文研究中无不倾注着导师辛勤的心血和汗水，在此，谨向导师致以衷心感谢！感谢导师在选题和研究中给予的学术指导、精神上的鼓励和物质上的帮助。我从导师渊博的学识、深邃的学术思想、严谨的治学态度和勤奋求实的科学精神中受益匪浅，为我日后研究生的研究工作打下了良好的理论基础。

同时感谢张鹏老师、王标师兄、徐强等同学在我论文写作过程中给予我的指导与帮助；感谢硕 6053 班的同学对我的关心和支持；感谢我的朋友们所给予我的温暖！

特别感谢父母以及家人所为我这段时间的理解与鼓励。

最后，谨向百忙之中抽出宝贵时间评审本论文和参加答辩的各位老师致以诚挚的谢意！

参考文献

- [1] Hall EO. The deformation and ageing of mild steel: III discussion of results [J]. Proceedings of the Physical Society Section B, 1951, 64(9): 747-753.
- [2] Petch NJ. The cleavage strength of polycrystals [J]. Journal of the Iron and Steel Institute, 1953, 174(1): 25-28.
- [3] Armstrong RW. 60 years of Hall-Petch: past to present nano-scale connections [J]. Materials Transactions, 2014, 55(1): 2-12.
- [4] Cordero ZC, Knight BE, Schuh C A. Six decades of the Hall-Petch effect – a survey of grain-size strengthening studies on pure metals [J]. International Materials Reviews, 2016, 61(8): 495-512.
- [5] 于朝清. 金属材料细晶强化工艺综述 [J]. 电工材料, 2006, (3): 34-39,54.
- [6] 王立军, 王凯, 任海鹏, et al. 微量元素对 304L 不锈钢 Hall-Petch 关系式的影响 [J]. 东北大学学报(自然科学版), 2006, 27(11): 1236-1239.
- [7] Meyers M A, Andrade UR, Chokshi AH. The effect of grain-size on the high-strain, high-strain-rate behavior of copper [J]. Metallurgical and Materials Transactions a-Physical Metallurgy and Materials Science, 1995, 26(11): 2881-2893.
- [8] Stelmashenko NA, Walls MG, Brown LM, et al. Microindentations on W and Mo oriented single-crystals : an STM study [J]. Acta Metallurgica Et Materialia, 1993, 41(10): 2855-2865.
- [9] Fleck NA, Muller GM, Ashby MF, et al. Strain gradient plasticity - theory and experiment [J]. Acta Metallurgica Et Materialia, 1994, 42(2): 475-487.
- [10] Stolken JS, Evans AG. A microbend test method for measuring the plasticity length scale [J]. Acta Materialia, 1998, 46(14): 5109-5115.
- [11] Uchic MD, Dimiduk DM, Florando JN, et al. Sample dimensions influence strength and crystal plasticity [J]. Science, 2004, 305(5686): 986-989.
- [12] Greer JR, Oliver WC, Nix WD. Size dependence of mechanical properties of gold at the micron scale in the absence of strain gradients [J]. Acta Materialia, 2005, 53(6): 1821-1830.
- [13] Ng KS, Ngan AHW. Stochastic nature of plasticity of aluminum micro-pillars [J]. Acta Materialia, 2008, 56(8): 1712-1720.
- [14] Armstrong R, Douthwaite RM, Codd I, et al. Plastic deformation of polycrystalline aggregates [J]. Philosophical Magazine, 1962, 7(73): 45-58.
- [15] Dingley DJ, Mclean D. Components of the flow stress of iron [J]. Acta Metallurgica, 1967, 15(5): 885-901.
- [16] Jang D, Atzmon M. Grain-size dependence of plastic deformation in nanocrystalline Fe [J]. Journal of Applied Physics, 2003, 93(11): 9282-9286.
- [17] Vashi UK, Armstrong RW, Zima GE. Hardness and grain size of consolidated fine tungsten powder [J]. Metallurgical Transactions, 1970, 1(6): 1769-1771.
- [18] Lindley TC, Smallman RE. Plastic deformation of polycrystalline vanadium at low temperatures [J]. Acta Metallurgica, 1963, 11(4): 361-371.
- [19] Jankowski AF, Go J, Hayes JP. Thermal stability and mechanical behavior of ultra-fine bcc Ta and V coatings [J]. Surface & Coatings Technology, 2007, 202(4-7): 957-961.
- [20] Hauser FE, Landon PR, Dorn JE. Fracture of magnesium alloys at low temperature [J]. Transactions of the American Institute of Mining and Metallurgical Engineers, 1956, 206(5): 589-593.
- [21] Caceres CH, Blake AH. On the strain hardening behaviour of magnesium at room temperature [J]. Materials Science and Engineering a-Structural Materials Properties Microstructure and Processing,

- 2007, 462(1-2): 193-196.
- [22] Yang Q, Ghosh AK. Deformation behavior of ultrafine-grain (UFG) AZ31B Mg alloy at room temperature [J]. *Acta Materialia*, 2006, 54(19): 5159-5170.
- [23] Del Valle JA, Ruano OA. Influence of the grain size on the strain rate sensitivity in an Mg-Al-Zn alloy at moderate temperatures [J]. *Scripta Materialia*, 2006, 55(9): 775-778.
- [24] Jones RL, Conrad H. Effect of grain size on strength of alpha-titanium at room temperature [J]. *Transactions of the Metallurgical Society of Aime*, 1969, 245(4): 779-789.
- [25] Wang KY, Shen TD, Quan MX, et al. Hall-petch relationship in nanocrystalline titanium produced by ball-milling [J]. *Journal of Materials Science Letters*, 1993, 12(23): 1818-1820.
- [26] Chmelik F, Trojanova Z, Lukac P, et al. Acoustic-emission from zinc deformed at room-temperature .2. The influence of grain-size on deformation-behavior and acoustic-emission of pure zinc [J]. *Journal of Materials Science Letters*, 1993, 12(15): 1166-1168.
- [27] Mannan SL, Rodriguez P. Grain-size dependence of deformation behavior of cadmium [J]. *Acta Metallurgica*, 1975, 23(2): 221-228.
- [28] Hansen N. Effect of grain-size and strain on tensile flow-stress of aluminum at room-temperature [J]. *Acta Metallurgica*, 1977, 25(8): 863-869.
- [29] Alhaidary J T, Petch N J, Delosrios E R. The plastic-deformation of polycrystals .I. aluminum between room-temperature and 400 °C [J]. *Philosophical Magazine a-Physics of Condensed Matter Structure Defects and Mechanical Properties*, 1983, 47(6): 869-890.
- [30] Lu L, Chen X, Huang X, et al. Revealing the Maximum Strength in Nanotwinned Copper [J]. *Science*, 2009, 323(5914): 607-610.
- [31] Hansen N, Ralph B. The strain and grain-size dependence of the flow-stress of copper [J]. *Acta Metallurgica*, 1982, 30(2): 411-417.
- [32] Keller C, Hug E. Hall-Petch Behaviour of Ni Polycrystals with a few grains per thickness [J]. *Materials Letters*, 2008, 62(10-11): 1718-1720.
- [33] Tsuji N, Ito Y, Saito Y, et al. Strength and ductility of ultrafine grained aluminum and iron produced by ARB and annealing [J]. *Scripta Materialia*, 2002, 47(12): 893-899.
- [34] Narutani T, Takamura J. Grain-size strengthening in terms of dislocation density measured by resistivity [J]. *Acta Metallurgica Et Materialia*, 1991, 39(8): 2037-2049.
- [35] Lapin J. Effect of ageing on the microstructure and mechanical behaviour of a directionally solidified Ni3Al-based alloy [J]. *Intermetallics*, 1997, 5(8): 615-624.
- [36] Xia PC, Yu JJ, Sun XF, et al. Influence of thermal exposure on γ' precipitation and tensile properties of DZ951 alloy [J]. *Materials Characterization*, 2007, 58(7): 645-651.
- [37] Wang YM, Ott RT, Van Buuren T, et al. Controlling factors in tensile deformation of nanocrystalline cobalt and nickel [J]. *Physical Review B*, 2012, 85(1): 014101.
- [38] Oh CS, Han CS. Microstructure and strengthening mechanism of Ni3Al intermetallic compound [J]. *Metals & Materials International*, 2013, 19(5): 941-948.
- [39] Zhang P, Ma L, Yang G, et al. Extraordinary plastic behaviour of the γ' precipitate in a directionally solidified nickel-based superalloy [J]. *Philosophical Magazine Letters*, 2016, 96(1): 19-26.
- [40] Zhang P, Yuan Y, Li B, et al. Tensile deformation behavior of a new Ni-base superalloy at room temperature [J]. *Materials Science & Engineering A*, 2016, 655:152-159.
- [41] Eshelby JD, Frank FC, Nabarro FRN. The equilibrium of linear arrays of dislocations [J]. *Philosophical Magazine*, 1951, 42(327): 351-364.
- [42] Cottrell AH. Theory of brittle fracture in steel and similar metals [J]. *Transactions of the American Institute of Mining and Metallurgical Engineers*, 1958, 212:192-203.
- [43] Li JCM, Chou YT. The role of dislocations in the flow stress grain size relationships [J]. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 1970, 1(5): 1145-1159.

- [44] Nazarov AA. On the pile-up model of the grain size-yield stress relation for nanocrystals [J]. Scripta Materialia, 1996, 34(5): 697-701.
- [45] 邹章雄, 项金钟, 许思勇. Hall-Petch 关系的理论推导及其适用范围讨论 [J]. 物理测试, 2012, 30(6): 13-17.
- [46] Floreen S, Westbrook JH. Grain boundary segregation and grain size dependence of strength of nickel-sulfur alloys [J]. Acta Metallurgica, 1969, 17(9): 1175-1181.
- [47] Li JCM. Petch relation and grain boundary sources [J]. Transactions of the Metallurgical Society of Aime, 1963, 227(1): 239-247.
- [48] Bata V, Pereloma EV. An alternative physical explanation of the Hall-Petch relation [J]. Acta Materialia, 2004, 52(3): 657-665.
- [49] Ashby MF. Deformation of plastically non-homogeneous materials [J]. Philosophical Magazine, 1970, 21(170): 399-424.
- [50] Coleman CE, Hardie D. Grain-size-dependence in flow and fracture of α -zirconium [J]. Journal of the Institute of Metals, 1966, 94(11): 387-391.
- [51] Ono N, Karashima S. Grain-size dependence of flow-stress in copper polycrystals [J]. Scripta Metallurgica, 1982, 16(4): 381-384.
- [52] Conrad H. Effect of grain size on the lower yield and flow stress of iron and steel [J]. Acta Metallurgica, 1963, 11(1): 75-77.
- [53] Conrad H, Feuerstein S, Rice L. Effects of grain size on the dislocation density and flow stress of niobium [J]. Materials Science & Engineering, 1967, 2(3): 157-168.
- [54] Meakin JD, Petch NJ. Strain-hardening of polycrystals - alpha-brasses [J]. Philosophical Magazine, 1974, 29(5): 1149-1156.
- [55] Dunstan DJ, Bushby AJ. Grain size dependence of the strength of metals: the Hall-Petch effect does not scale as the inverse square root of grain size [J]. International Journal of Plasticity, 2014, 53(2): 56-65.
- [56] Christman T. Grain-boundary strengthening exponent in conventional and ultrafine microstructures [J]. Scripta Metallurgica Et Materialia, 1993, 28(12): 1495-1500.
- [57] Korte S, Clegg WJ. Discussion of the dependence of the effect of size on the yield stress in hard materials studied by microcompression of MgO [J]. Philosophical Magazine, 2011, 91(7-9): 1150-1162.
- [58] Bragg L. A theory of the strength of metals [J]. Nature, 1942, 149(3784): 511-513.
- [59] Baldwin WM. Yield strength of metals as a function of grain size [J]. Acta Metallurgica, 1958, 6(2): 139-141.
- [60] Evers LP, Brekelmans WM, Geers MGD. Scale dependent crystal plasticity framework with dislocation density and grain boundary effects [J]. International Journal of Solids and Structures, 2004, 41(18-19): 5209-5230.
- [61] Counts WA, Braginsky MV, Battaile C C, et al. Predicting the Hall-Petch effect in fcc metals using non-local crystal plasticity [J]. International Journal of Plasticity, 2008, 24(7): 1243-1263.
- [62] Erdogan F, Gupta GD. On the numerical solution of singular integral equations. in Methods of analysis and solutions of crack problems [M]. Groningen: Noordhoff, 1973: 368-425.
- [63] Hills DA, Kelly PA, Dai DN, et al. Solution of crack problems [M]. Springer Netherlands, 1996.
- [64] Muskhelishvili NI. Some basic problems of the mathematical theory of elasticity [M]. P.Noordhoff Ltd, 1953.
- [65] Erdogan F, Gupta GD, Cook TS. Numerical solution of singular integral equations [M]. Springer Netherlands, 1973.
- [66] Krenk S. On quadrature formulas for singular integral equations of the first and the second kind [J]. Quarterly of Applied Mathematics, 1975, 33(3): 225-232.
- [67] Krenk S. On the use of the interpolation polynomial for solutions of singular integral equations [J].

- Quarterly of Applied Mathematics, 1975, 32(1): 1-12.
- [68] Ma L, Korsunsky AM. An efficient numerical method for the solution of sliding contact problems [J]. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2005, 64(9): 1236-1255.
- [69] Stroud AH, Secrest D. Gaussian quadrature formulas [M]. New York: Macmillan, 1966.
- [70] Chou YT. Dislocation pile-ups against a locked dislocation of a different burgers vector [J]. Journal of Applied Physics, 1967, 38(5): 2080-2085.
- [71] Groma I, Csikor FF, Zaiser M. Spatial correlations and higher-order gradient terms in a continuum description of dislocation dynamics [J]. Acta Materialia, 2003, 51(5): 1271-1281.
- [72] Li JCM, Liu GCT. Circular dislocation pile-ups [J]. Philosophical Magazine, 1967, 15(137): 1059-1063.
- [73] Irwin GR. Analysis of stresses and strains near end of a crack traversing a plate [J]. Journal of Applied Mechanics, 1957, 24:361-364.
- [74] Koiter WT. An infinite row of collinear cracks in an infinite elastic sheet [J]. Ingenieur-Archiv, 1959, 28(1): 168-172.
- [75] Yokobori T, Ichikawa M. Elastic Solid with an Infinite Row of Collinear Cracks and the Fracture Criterion [J]. Journal of the Physical Society of Japan, 1964, 19(4): 2341-2342.
- [76] Leibfried G. Verteilung von versetzungen im statischen gleichgewicht [J]. Zeitschrift für Physik, 1951, 130(2): 214-226.
- [77] Yu CY, Kao PW, Chang CP. Transition of tensile deformation behaviors in ultrafine-grained aluminum [J]. Acta Materialia, 2005, 53(15): 4019-4028.
- [78] Hansen N, Ralph B. The strain and grain size dependence of the flow stress of copper [J]. Acta Metallurgica, 1982, 30(2): 411-417.
- [79] Vattré A, Devincere B, Roos A. Dislocation dynamics simulations of precipitation hardening in Ni-based superalloys with high γ' volume fraction [J]. Intermetallics, 2009, 17(12): 988-994.

攻读学位期间取得的研究成果

- [1] **Yike Qiu**, Peng Zhang, Lifeng Ma*, Collinear micro-shear-bands model for grain-size and precipitate-size effects on the yield strength[J]. Theoretical and Applied Mechanics Letter, 2018 (Accept)
- [2] **邱一可**, 文毅, 马利锋*, 利用 Gauss-Jacobi 求积公式对固体力学中第二类奇异积分方程的数值研究[J]. 应用力学学报, 2018 (已接收)

