单晶塑性中梯度强化与钝化起始之间的内在联系

Habib Pouriayevali

研究人员，德国，

本研究部分是在达姆施塔特工业大学开展的，期间参与了由 DFG 资助的项目 PO-2242/3-1。

关键词：

Gr梯度晶体塑性、有限变形、耗散微应力 .

摘要

本文在以Gurtin的功共轭公式为基础的热力学一致框架内，建立了一个有限变形梯度晶体塑性框架。该模型引入了一种流动法则，明确考虑能量微应力和耗散微应力的贡献。通过数值模拟，研究了单晶在钝化型边界约束下的响应。结果表明，能够再现塑性流动起始时尺寸依赖强化的本构定律，在施加钝化约束时也会产生显著的近弹性响应。这些发现揭示了梯度诱导屈服强化与边界驱动的力学响应提升之间的基本联系，凸显了耗散梯度效应的关键影响。

1 引言

经典晶体塑性理论本身无法解释晶体材料中实验观察到的尺寸效应。因此，纳入长度尺度敏感性的需求推动了应变梯度塑性和梯度晶体塑性公式的发展。Aifantis（1984年）最早对此作出了贡献，此后该领域经历了重大的理论进展（Fleck和Hutchinson，1993年；Huang等人，2000年；Forest，2008年；Kuroda和Tvergaard，2008年；Reddy等人，2008年；Gurtin和Anand，2009年）。为捕捉尺度相关现象，人们提出了多种框架，并投入大量研究以阐明梯度项的力学作用。在这些方法中，热力学一致的公式尤其受到关注。Voyiadjis和Song（2019年）对现代梯度塑性理论作了全面综述。

在梯度理论中，与几何必需位错（GNDs）相关的微应力会产生两种不同的力学效应：梯度强化和梯度硬化。前者表现为弹性阶段的表观延长，或塑性流动开始时刚度显著增加；后者则对应于持续变形过程中，随着几何必需位错不断累积而驱动的流动抗力逐步演化。

另一个持续受到关注的议题，是单晶在钝化型边界条件下的响应。以 Evans 和 Hutchinson（2009年）的总结为代表，先前的数值研究表明，钝化表层的存在会显著改变初始屈服行为。具体而言，梯度诱导屈服强化被解释为弹性响应的有效延长，而高阶边界力在这一行为的控制中发挥着关键作用。

本研究考察塑性变形开始时观察到的尺度相关强化，是否与加载过程中施加钝化时出现的增强响应存在内在联系。具体而言，我们探讨这样一个问题：能够再现初始屈服时梯度强化的本构表述，是否必然会预测与钝化激活相关的刚度骤增。

本文其余部分安排如下。第 2 节概述参考构型下的有限变形梯度晶体塑性公式。第 3 节展示数值结果，第 4 节总结主要发现与结论。

2 公式

本文采用的公式遵循 Gurtin（2006年、2008年、2010年）提出的有限变形梯度晶体塑性框架。此处以参考构型的形式阐述该理论。尽管该理论是在有限变形情形下建立的，但在适当条件下，该模型可化简为小变形情形。

2.1 单晶中的运动学

作为起点，

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^{e}\mathbf{F}^{p},\ \det \mathbf{F}^{p} = 1,\ \mathbf{C}^{e} = \mathbf{F}^{e^{T}}\mathbf{F}^{e},\ \mathbf{E}^{e} = \frac{1}{2}(\mathbf{C}^{e} - \mathbf{I})$$

$$\text{以及 } \mathbf{L} = \mathbf{L}^{e} + \mathbf{F}^{e}\mathbf{L}^{p}\mathbf{F}^{e^{-1}} \tag{1}$$

定义如下，其中 $\mathbf{F}$ 表示变形梯度张量，$\mathbf{F}^{e}$ 和$\mathbf{F}^{p}$ 分别表示弹性畸变和非弹性畸变。det 表示张量的行列式。 $\mathbf{C}^{e}$ 为右Cauchy-Green弹性张量， $\mathbf{E}^{e}$ 为Green-Lagrange弹性应变张量，$\mathbf{I}$ 为单位张量。$\mathbf{L}$ 为速度梯度，$\mathbf{L}^{e}$ 和$\mathbf{L}^{p}$ 分别表示弹性和塑性畸变率张量，其定义为

$$\mathbf{L}^{\mathrm{e}} = \dot{\mathbf{F}}^{\mathrm{e}}\mathbf{F}^{\mathrm{e}-1}, \mathbf{L}^{\mathrm{p}} = \sum_{\alpha} v^{\alpha}\, \mathbb{S}^{\alpha}. \tag{2}$$

这里，v^{α} 为流动速率，$\mathbb{S}^{\alpha}$ 为施密特张量，其定义为

$$\mathbb{S}^{\alpha} = \mathbf{s}^{\alpha} \otimes \mathbf{m}^{\alpha}, \text{trace}\, \mathbb{S}^{\alpha} = 0 \text{ and } \mathbf{l}^{\alpha} = \mathbf{m}^{\alpha} \times \mathbf{s}^{\alpha}, \tag{3}$$

其中，α 为滑移系编号，$\mathbf{m}^{\alpha}$、$\mathbf{s}^{\alpha}$ 和$\mathbf{l}^{\alpha}$ 为单位向量，分别表示滑移面的法向量以及刃型位错和螺型位错的滑移方向。这些向量在中间空间中为常量（Gurtin 和 Reddy，2016年），在参考构型和变形构形中则会变化（Gurtin，2006年）。在本研究中，r 表示参考构型，因此$\mathbf{s}_r^{\alpha}$、$\mathbf{m}_r^{\alpha}$ 和$\mathbf{l}_r^{\alpha}$ 定义为

$$\mathbf{s}_r^{\alpha} = \mathbf{F}^{\mathrm{p}-1}\mathbf{s}^{\alpha}, \mathbf{m}_r^{\alpha} = \mathbf{F}^{\mathrm{p}\mathrm{T}}\mathbf{m}^{\alpha} \text{ and } \mathbf{l}_r^{\alpha} = \mathbf{F}^{\mathrm{p}-1}\,\mathbf{l}^{\alpha}. \tag{4}$$

2.2 内功率与外功率及力平衡

根据虚功率原理（Gurtin，2008年、2010年），可分别推导出宏观和微观力平衡，以及宏观和微观牵引条件：

$$\mathrm{Div}\,\mathbf{P} + \mathbf{b} = \mathbf{0},\ \tau^{\alpha} - \pi^{\alpha} + \mathrm{Div}\,\boldsymbol{\xi}^{\alpha} = 0, \tag{5}$$

$$\mathbf{p}(\mathbf{n}_r) = \mathbf{P}\mathbf{n}_r \text{ and } \xi(\mathbf{n}_r)^{\alpha} = \boldsymbol{\xi}^{\alpha} \cdot \mathbf{n}_r. \tag{6}$$

此处，$\mathbf{P}$ 表示第一类 Piola-Kirchhoff 应力，$\tau^{\alpha} = \mathbf{C}^{\mathrm{e}}\mathbf{S}^{\mathrm{e}} : \mathbb{S}^{\alpha}$ 表示分解剪应力，其中$\mathbf{S}^{\mathrm{e}}$ 表示第二类 Piola 弹性应力。

2.3 位错密度的测量

在有限变形晶体塑性描述中，通过考虑$\nabla^{\sharp} v^{\alpha} = \mathbf{F}^{\mathrm{p}-\mathrm{T}}\nabla v^{\alpha}$，其中$\nabla^{\sharp}$ 表示中间（晶格）空间中的梯度运算

$$\dot{\rho}_{\vdash}^{\alpha} = -\mathbf{s}_r^{\alpha} \cdot \nabla v^{\alpha} = -\mathbf{s}^{\alpha} \cdot \nabla^{\sharp} v^{\alpha},$$

$$\dot{\rho}_{\odot}^{\alpha} = \mathbf{l}_r^{\alpha} \cdot \nabla v^{\alpha} = \mathbf{l}^{\alpha} \cdot \nabla^{\sharp} v^{\alpha} \tag{7}$$

是滑移速率沿滑移方向 $-\mathbf{s}^{\alpha}$ 和 $\mathbf{l}^{\alpha}$的方向导数。

2.4 自由能失衡

根据热力学第二定律和功率平衡（Gurtin，2008年，2010年），局部耗散不等式可改写为

$$\dot{\Psi} - \mathbf{S}^{e} : \dot{\mathbf{E}}^{e} - \sum_{\alpha} (\pi^{\alpha} v^{\alpha} + \boldsymbol{\xi}^{\alpha} \cdot \nabla v^{\alpha}) \leq 0, \tag{8}$$

其中，Ψ 表示单位参考体积的储存自由能，并可分解为

$$\Psi = \Psi^{e} + \Psi^{\rho}, \tag{9}$$

其中 Ψ^{e} 是与晶格拉伸相关的弹性能，Ψ^{ρ}是缺陷自由能。Ψ^{ρ} 仅表示由几何必需位错贡献的缺陷能。

2.4.1 弹性能 Ψ^{e}

Ψ^{e} 可表示为

$$\Psi^{e} = \frac{\mu}{2}(I_1 - 3 - \ln I_3) + \frac{\lambda}{2}\left(\ln I_3^{1/2}\right)^2,$$

$$\dot{\Psi}^{e} = \frac{\partial \Psi^{e}}{\partial \mathbf{E}^{e}} : \dot{\mathbf{E}}^{e} \tag{10}$$

其中，I_1 和I_3 分别是$\mathbf{C}^{e}$的第一和第三不变量，μ 是剪切模量，λ是拉梅参数（Bonet 和 Wood，2008年）。

2.5 本构模型

考虑前几节中引入的自由能变化率，

$$\dot{\Psi} = \frac{\partial \Psi^{e}}{\partial \mathbf{E}^{e}} : \dot{\mathbf{E}}^{e} + \sum_{\alpha} \left(f_{\vdash}^{\alpha} \dot{\rho}_{\vdash}^{\alpha} + f_{\odot}^{\alpha} \dot{\rho}_{\odot}^{\alpha} \right), \tag{11}$$

将公式 8 中的局部耗散不等式改写为

$$\dot{\Psi} - \mathbf{S}^{e} : \dot{\mathbf{E}}^{e} - \sum_{\alpha} (\pi^{\alpha} v^{\alpha} + \boldsymbol{\xi}^{\alpha} \cdot \nabla v^{\alpha})$$

$$= \left(\frac{\partial \Psi^{e}}{\partial \mathbf{E}^{e}} - \mathbf{S}^{e} \right) : \dot{\mathbf{E}}^{e} + \sum_{\alpha} \left(-f_{\vdash}^{\alpha} \mathbf{s}_{r}^{\alpha} + f_{\odot}^{\alpha} \mathbf{l}_{r}^{\alpha} \right) \cdot \nabla v^{\alpha} \tag{12}$$

$-\sum_{\alpha}(\pi^{\alpha}v^{\alpha}+\boldsymbol{\xi}^{\alpha}\cdot\nabla v^{\alpha})\leq 0.$

这里，将可恢复能量微应力、不可恢复能量微应力以及耗散微应力分别定义为

$$\boldsymbol{\xi}^{\alpha}=\boldsymbol{\xi}^{\alpha}_{engR}+\boldsymbol{\xi}^{\alpha}_{dis}. \tag{13}$$

将式13代入式12，得到与式10相关的下列表达式,

$$\frac{\partial\Psi^{\mathrm{e}}}{\partial\mathbf{E}^{\mathrm{e}}}=\mathbf{S}^{\mathrm{e}},$$

$$\boldsymbol{\xi}^{\alpha}_{engR}\cdot\nabla v^{\alpha}=\left(-f^{\alpha}_{\vdash}\mathbf{s}^{\alpha}_{r}+f^{\alpha}_{\odot}\mathbf{l}^{\alpha}_{r}\right)\cdot\nabla v^{\alpha} \tag{14}$$

不等式的一种约化形式亦由下式给出

$$\sum_{\alpha}(\pi^{\alpha}v^{\alpha}+\boldsymbol{\xi}^{\alpha}_{dis}\cdot\nabla v^{\alpha})\geq 0. \tag{15}$$

式14表明，能量微应力 $\boldsymbol{\xi}^{\alpha}_{engR}$ 为滑移面内向量。因此，假定$\boldsymbol{\xi}^{\alpha}_{dis}$ 与滑移面Π^{α} 相切，且式14和式15中的功率项被重新定义于

$$\boldsymbol{\xi}^{\alpha}_{engR}\cdot\nabla v^{\alpha}=\boldsymbol{\xi}^{\alpha}_{engR}\cdot\nabla^{\alpha}v^{\alpha},$$

$$\sum_{\alpha}(\pi^{\alpha}v^{\alpha}+\boldsymbol{\xi}^{\alpha}_{dis}\cdot\nabla^{\alpha}v^{\alpha})\geq 0, \tag{16}$$

其中$\nabla^{\alpha}v^{\alpha}=\nabla v^{\alpha}-(\bar{\mathbf{m}}^{\alpha}_{r}\cdot\nabla v^{\alpha})\bar{\mathbf{m}}^{\alpha}_{r}$，且$\bar{\mathbf{m}}^{\alpha}_{r}=\frac{\mathbf{m}^{\alpha}_{r}}{|\mathbf{m}^{\alpha}_{r}|}$。

式16中约化不等式的强形式亦由下式加以考虑

$$\pi^{\alpha}v^{\alpha}\geq 0,$$

$$\boldsymbol{\xi}^{\alpha}_{dis}\cdot\nabla^{\alpha}v^{\alpha}\geq 0。 \tag{17}$$

众所周知，传统的率相关塑性理论伴有一个耗散标量微力 π^{α}，它与流动速率 v^{α} 功率共轭。该微力通常通过幂律项定义，并表示为

非增量形式，见式 18。同样，耗散性高阶应力 $\boldsymbol{\xi}_{dis}^{\alpha}$ 也以类速率形式表示，见式 20。因此

$$\pi^{\alpha} = S^{\alpha}\left(\frac{|v^{\alpha}|}{v_0}\right)^{m}\frac{v^{\alpha}}{|v^{\alpha}|},\ \pi^{\alpha}v^{\alpha} = S^{\alpha}\left(\frac{|v^{\alpha}|}{v_0}\right)^{m}|v^{\alpha}| \geq 0, \tag{18}$$

$$S^{\alpha}(0) = S_y, \tag{19}$$

$$\boldsymbol{\xi}_{dis}^{\alpha} = L_2 S_d\left(\frac{L_2|\nabla^{\alpha}v^{\alpha}|}{d_0}\right)^{q}\frac{\nabla^{\alpha}v^{\alpha}}{|\nabla^{\alpha}v^{\alpha}|}, \tag{20}$$

其中，m 和 q 为率敏感参数，v_0 和 d_0 为恒定的正值参考量，L_2 为耗散长度尺度参数。S^{α} 为正值滑移阻力，S_y 是S^{α}的初始值，S_d 为正值参数。

2.5.1 流动法则

考虑式 13，式 (5) 中给出的微观力平衡$_2$ 具有以下形式:

$$\tau^{\alpha} + \mathrm{Div}\boldsymbol{\xi}_{engR}^{\alpha} = \pi^{\alpha} - \mathrm{Div}\boldsymbol{\xi}_{dis}^{\alpha}\,. \tag{21}$$

式 14、18 和 20 中定义的微应力和微力如下:

$$\begin{aligned}
&\pi^{\alpha} = S^{\alpha}\left(\frac{|v^{\alpha}|}{v_0}\right)^{m}\frac{v^{\alpha}}{|v^{\alpha}|},\\
&\boldsymbol{\xi}_{dis}^{\alpha} = S_d L_2^{q+1}\left(\frac{|\nabla^{\alpha}v^{\alpha}|}{d_0}\right)^{q}\frac{\nabla^{\alpha}v^{\alpha}}{|\nabla^{\alpha}v^{\alpha}|} = S_d L_2^{q+1}\left(\frac{|\nabla^{\alpha}v^{\alpha}|}{d_0}\right)^{q}\frac{1}{|\nabla^{\alpha}v^{\alpha}|}\left(\frac{-\dot{\rho}_{\vdash}^{\alpha}\mathbf{s}_r^{\alpha}}{|\mathbf{s}_r^{\alpha}|^2} + \frac{\dot{\rho}_{\odot}^{\alpha}\mathbf{l}_{\mathrm{r}}^{\alpha}}{|\mathbf{l}_{\mathrm{r}}^{\alpha}|^2}\right),\\
&\boldsymbol{\xi}_{engR}^{\alpha} = S_0 L_1^2\left(-\rho_{\vdash}^{\alpha}\mathbf{s}_r^{\alpha} + \rho_{\odot}^{\alpha}\mathbf{l}_r^{\alpha}\right).
\end{aligned} \tag{22}$$

将公式 22 代入公式 21 可得

$$\begin{aligned}
&\tau^{\alpha} + \underbrace{S_0 L_1^2\mathrm{Div}\left(\left(-\rho_{\vdash}^{\alpha}\mathbf{s}_r^{\alpha} + \rho_{\odot}^{\alpha}\mathbf{l}_r^{\alpha}\right)\right)}_{\text{(I)}}\\
&\qquad = \underbrace{S^{\alpha}\left(\frac{|v^{\alpha}|}{v_0}\right)^{m}\frac{v^{\alpha}}{|v^{\alpha}|}}_{\text{(II)}} - \underbrace{S_d L_2^{q+1}\mathrm{Div}\left(\left(\frac{|\nabla^{\alpha}v^{\alpha}|}{d_0}\right)^{q}\frac{\nabla^{\alpha}v^{\alpha}}{|\nabla^{\alpha}v^{\alpha}|}\right)}_{\text{(III)}}
\end{aligned} \tag{23}$$

2.6 实现方法

本研究旨在实现该框架的二维版本，其中 ∇v^{α} 和 $\mathbf{l}^{\alpha}$ 分别为面内向量和面外向量。因此$\dot{\rho}_{\odot}^{\alpha} = \mathbf{l}_{r}^{\alpha} \cdot \nabla v^{\alpha} = \mathbf{l}^{\alpha} \cdot \nabla^{\sharp} v^{\alpha} = 0$。

该模型通过在 ABAQUS 中开发的自定义用户单元（UEL）实现。在这种方法中，刃型位错密度的演化速率 $\dot{\rho}_{\perp}^{\alpha} = -\mathbf{s}_{r}^{\alpha} \cdot \nabla v^{\alpha}$ 被视为有限元离散中的独立节点变量。

3 结果

本节展示了包含表1所列三个滑移系的单晶数值模拟结果。以恒定应变率2×10^{-4}施加剪切。

计算域采用平面应变二次单元（八节点单元，含九个积分点）进行离散，如图1a所示。所选网格在保持计算效率的同时，对单元尺寸变化表现出良好的不敏感性。为施加微观硬边界条件，引入一层厚度为晶体尺寸 1% 的外围区域，从而在边界处强制塑性滑移为零。

在整个分析过程中，忽略与滑移阻力演化相关的传统各向同性硬化，即式（18）中的 $\dot{S}^{\alpha} = 0$ 。模拟所采用的材料参数和模型参数汇总于表2。在第3.1节中考察了在指定应变水平下引入钝化层的影响，代表性结果见图2。

3.1 在特定应变下施加钝化层

所提出的流动法则包含两种梯度贡献：可恢复能量微观应力和耗散微应力。为考察钝化的影响，首先使晶体在没有边界层且不对塑性滑移施加约束的条件下发生简单剪切变形（图1b）。达到指定应变水平后，引入周围的微硬边界层，并继续加载。将所得响应与从变形开始时即施加微硬边界层所得到的响应进行比较。

图2a给出了标记为A至D的四组代表性参数组的力学响应。图2b和图2c分别给出了突出塑性屈服起始和钝化激活的放大视图。数据集A和B对应于整个变形过程中均存在钝化的情形。相比之下，数据集C和D表示仅在2.5%剪切应变之后才施加钝化的情形。

对于参数选择$L_1 \neq 0$ 和$L_2 = 0$ （数据集B和D），模型表现出梯度硬化而无梯度强化。正如预期，这些情形中未观察到初始弹性阶段的延长。当两个长度尺度参数均起作用时（$L_1 = L_2 \neq 0$，数据集A和C），该公式还会产生梯度强化。

一个关键观察是，初始屈服时的强化（数据集 A 中约 0.5% 的剪切应变）与钝化启动瞬间观察到的响应升高（数据集 C 中 2.5% 的剪切应变）在定量上相吻合。这些结果清晰地体现了对内部长度尺度的依赖。此外，在应变超过 2.5% 后，数据集 C 和 D 的应力–应变曲线与数据集 A 和 B 在应变超过 0.5% 后的行为高度吻合，表明钝化会使有效响应发生偏移。

通过考察图2中标出的数据点 G、J、K 和 L（汇总于表3），可以获得进一步的洞见。尽管 K 对应的累积塑性变形更大，但数据点 G 和 K 的几何必需位错密度分布和大小几乎相同。数据点 J 和 L 之间也存在类似的对应关系，尽管 L 经历了更大程度的塑性流动。值得注意的是，数据点 K 和 L（应变为 4% ）包含了在未钝化条件下从 0% 到 2.5% 应变期间发生的变形；在此期间，没有发生边界诱导的几何必需位错累积。

这些结果表明，能够再现塑性流动起始时尺度相关强化的本构模型，在钝化激活时会自然产生一种明显的准弹性响应。相反，在初始屈服时无法预测梯度强化的公式，也无法捕捉与钝化相关的增强边界诱导响应。

4 总结与结论

本研究基于 Gurtin 提出的理论框架，构建了适用于单晶的有限变形梯度晶体塑性框架。该模型用于研究晶体在钝化型边界约束下的力学响应。分析表明，能够再现塑性流动起始时尺度相关强化的本构公式，自然会预测在变形过程中启用钝化时刚度显著增加。这揭示了梯度诱导屈服强化与边界约束导致的力学响应提升之间的直接联系。尽管本文的观察结果表明存在一种普遍的潜在机制，但仍有必要在其他梯度晶体塑性模型中进一步评估。系统性的基准测试

比较有助于确定所提出解释的更广泛适用性。

致谢

本研究部分获得德国研究基金会（DFG）资助，项目编号为 PO-2242/3-1。

表1. 预定义的滑移系，$\boldsymbol{s}^{\alpha}$ 和$\boldsymbol{m}^{\alpha}$。表2. 一组常用的材料系数和建模参数。表3。图2中标出的数据点G、J、K和L的详细信息（在线彩色图）。图1。图2。

参考文献

- Aifantis, E. C.（1984年）。论某些非弹性模型的微观结构起源。《工程材料与技术杂志》，106，326–330。
- Bonet, J., & Wood, R. D.（2008年）。《有限元分析的非线性连续介质力学》（第2版）。剑桥大学出版社。
- Evans, A. G., & Hutchinson, J. W.（2009年）。应变梯度塑性理论的批判性评估。《材料学报》，57，1675–1688。
- Fleck, N. A., & Hutchinson, J. W.（1993年）。塑性中的应变梯度效应现象学理论。《固体力学与物理学杂志》，41，1825–1857。
- Forest, S.（2008年）。Cosserat、应变梯度晶体塑性与位错统计理论之间的若干联系。《哲学杂志》，88，3549–3563。
- Gurtin, M. E.（2006年）。有限变形单晶塑性中伯格斯矢量以及螺型与刃型位错的运动。《固体力学与物理学杂志》，54，1882–1898。
- Gurtin, M. E.（2008年）。一种单晶塑性的有限变形梯度理论，其自由能取决于几何必需位错的密度。《国际塑性学报》，24，702–725。
- Gurtin, M. E.（2010年）。一种单晶塑性的有限变形梯度理论，其自由能取决于几何必需位错的累积。《国际塑性学报》，26，1073–1096。
- Gurtin, M. E.， & Anand, L.（2009年）。热力学在涉及累积塑性应变的梯度理论中的应用：Aifantis、Fleck和Hutchinson的理论及其推广。《固体力学与物理学杂志》，57，405–421。
- Gurtin, M. E.， & Reddy, B. D.（2016年）。单晶塑性中与中间空间相关的一些问题。《固体力学与物理学杂志》，95，230–238。
- Huang, Y., Gao, H., Nix, W. D., & Hutchinson, J. W. (2000年). 基于机制的应变梯度塑性—II. 分析. 《固体力学与物理学杂志》, 48, 99– 128.
- Kuroda, M., & Tvergaard, V.（2008年）。高阶梯度晶体塑性的有限变形理论。《固体力学与物理学杂志》，56，2573–2584。

- Reddy, B. D., Ebobisse, F., & McBride, A.（2008年）。塑性无旋材料应变梯度塑性模型的适定性。《国际塑性学报》，24，55–73。

- Voyiadjis, G. Z., & Song, Y.（2019年）。应变梯度连续介质塑性理论：理论、数值与实验研究。《国际塑性学报》，121，21–59。

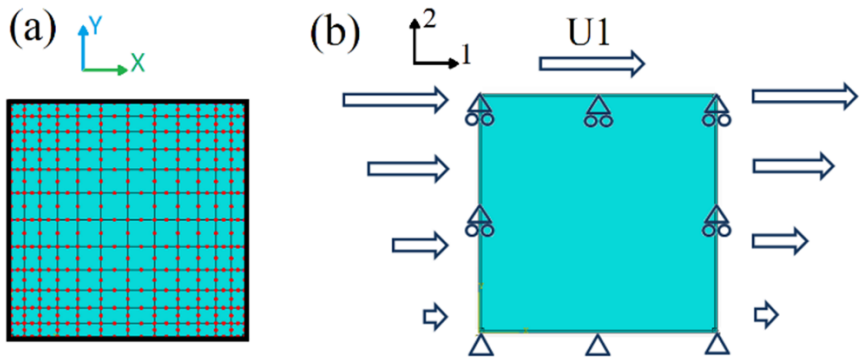


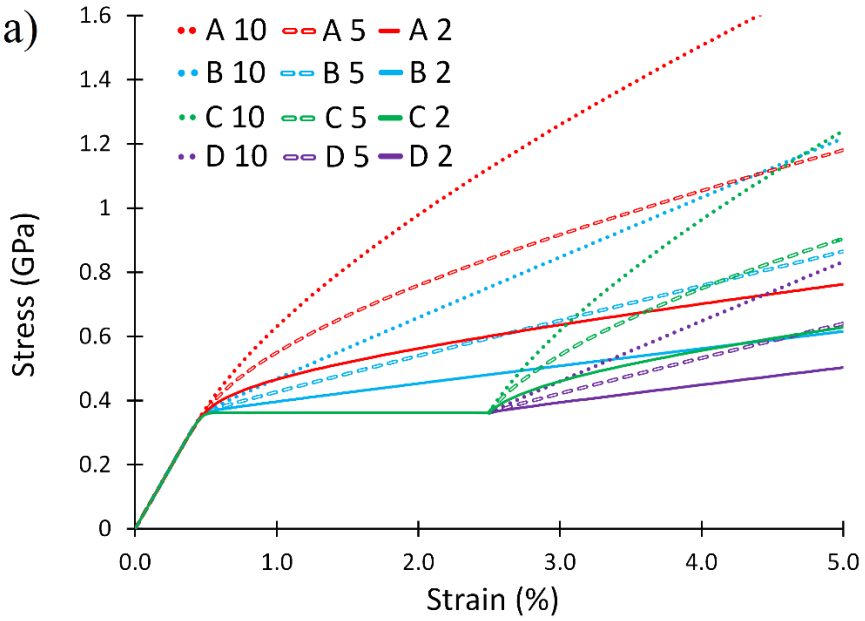
图1. (a) 被微硬边界层（黑色轮廓）包围的单晶有限元模型。红点表示节点。每个二次单元包含九个积分点。(b) 所施加的简单剪切变形模式示意图。

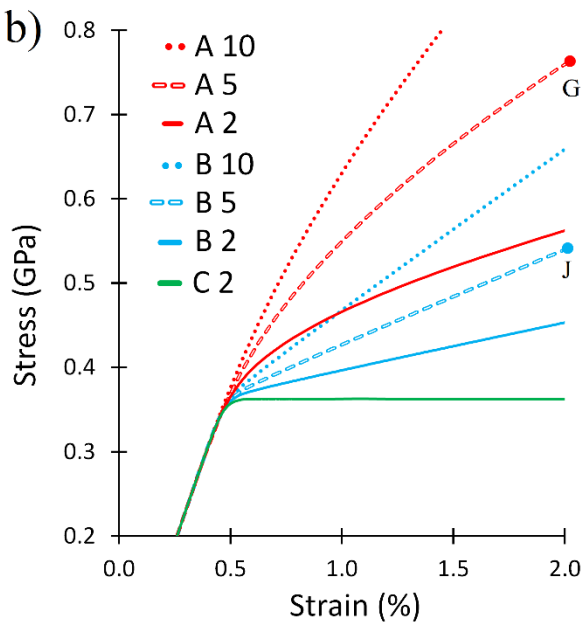
表1. 预定义的滑移系，$\mathbf{s}^{\alpha}$ 和$\mathbf{m}^{\alpha}$。

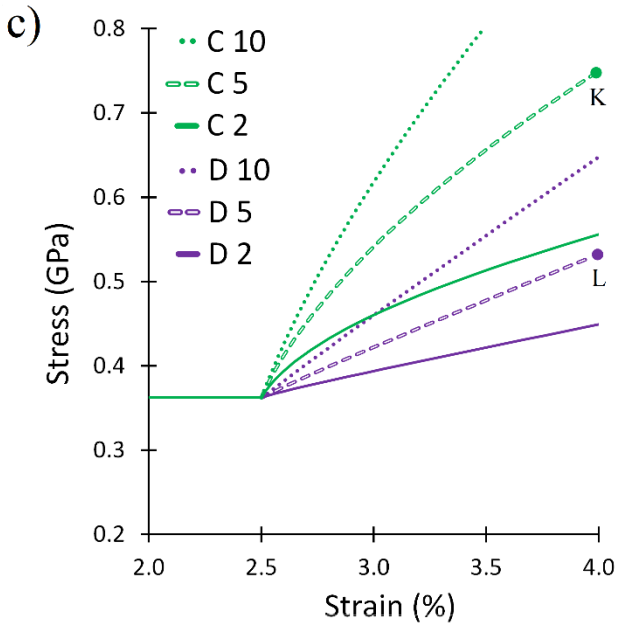
滑移系编号 α	滑移矢量 $\mathbf{s}^{\alpha}$	滑移面法向矢量 $\mathbf{m}^{\alpha}$
1	$(\sqrt{3}/2, 1/2)$	$(-1/2, \sqrt{3}/2)$
2	$(1/2, \sqrt{3}/2)$	$(\sqrt{3}/2, -1/2)$
3	$(-1/2, \sqrt{3}/2)$	$(\sqrt{3}/2, 1/2)$

表2. 一组常用的材料系数和建模参数。

μ	λ	S_0	S^{α}, S_y	$\dot{S}^{\alpha}$	S_d	$\mathbb{M}$	m	q, n	v_0	d_0
76.9 GPa	115.3 GPa	0.9 MPa	200 兆帕	0 兆帕/秒	0.2 MPa	0.2 MPa	0.05 -	1.0 -	1e-3 s^{-1}	5e-4 s^{-1}



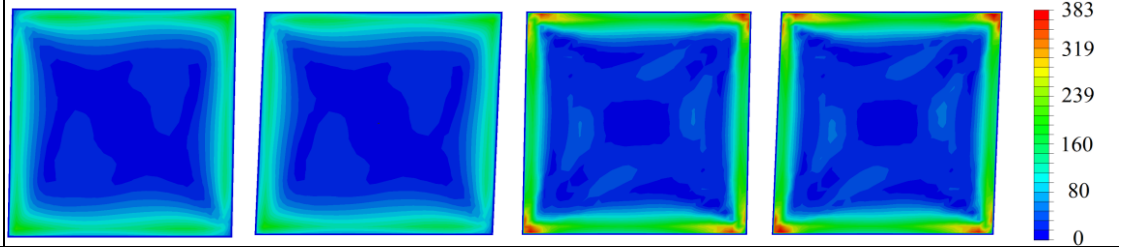




从变形开始时钝化			剪切应变达到 2.5% 时钝化		
数据集	L_1 (μm)	L_2 (μm)	数据集	L_1 (μm)	L_2 (μm)
A10	10	10	C10	10	10
A 5	5	5	C 5	5	5
A 2	2	2	C 2	2	2
B10	10	0	D10	10	0
B 5	5	0	D 5	5	0
B 2	2	0	D 2	2	0

图2. 图1b所示简单剪切变形下单晶的应力–应变响应。考察了四组参数（A–D）。(a) 展示完整响应，(b) 和 (c) 分别放大显示塑性屈服的起始和钝化的激活过程。数据集 A 和 B 对应于从变形开始就施加钝化边界条件的情况。数据集 C 和 D 则对应于剪切应变达到 2.5% 后引入钝化的情况。当 $L_2 \neq 0$ （数据集 A 和 C）时，存在梯度强化。对于 $L_2 = 0$ （数据集 B 和 D），则仅观察到梯度硬化。数据集 C 和 D 在应变超过 2.5% 后的钝化响应，与数据集 A 和 B 在应变超过 0.5% 后的行为高度一致。图中标出了数据点 G、J、K 和 L，其数值详见表3（在线彩色版）。

表3。 图2中标示的数据点 G、J、K 和 L 的详细信息（在线彩色图）。

数据点	G	K	J	L
数据集	A 5	C 5	B 5	D 5
应变 %	2	4	2	4
累积 GND 密度 (mm^{-1})				
定向塑性流动，滑移系表1中的1	