

具有体膨胀和剪切效应的结构陶瓷相变 塑性细观本构模型: I. 非比例加载历史¹⁾

黄克智 孙庆平 余寿文
(清华大学工程力学系, 北京, 100084)

摘要 本文在对结构陶瓷的四方至单斜 ($t \rightarrow m$) 马氏体相变进行细观力学、热力学和微观机制分析的基础上, 导出了在非比例加载条件下考虑材料的体膨胀和剪切效应的相变塑性细观本构模型。作者首次采用 Mori-Tanaka 方法以自洽的方式导出了材料构元的 Helmholtz 自由能及余能函数的解析表达式, 它是外加宏观应力(或应变)、温度、相变夹杂体积分数以及夹杂内平均相变应变的函数, 其中夹杂体积分数和平均相变应变为描述材料构元微结构变化的内变量。最后按 Hill-Rice 本构理论框架导出相变塑性屈服面方程及增量本构关系。

关键词 剪切效应, 内变量, 本构构元

一、引言

结构陶瓷相变本构行为的研究对于相变增韧现象的解释以及实际陶瓷结构的应力计算均具有十分重大的意义。自 McMeeking-Evans^[1], Budiansky-Hutchinson-Lambropoulos^[2] 的奠基性工作以来, 大多数研究工作主要集中于如何在构模型中更好描述材料在相变时的剪切效应。Lambropoulos^[3] 采用水珠假定考虑了相变颗粒内部孪晶的剪切效应, 所导出的本构关系尽管缺乏直接的实验验证, 仍使得理论计算的增韧值比纯体膨胀假定^[2,3]能更好地与实测值吻合。但是, 文献[3]所采用的水珠假定过低地估计了相变塑性剪切效应, 理论计算远小于实测值^[4], 另外, 分析中忽略了相变夹杂(颗粒)间非常重要的交互作用。因此, 现有的理论研究需要进一步改进。

近来, I. W. Chen^[4,5], Reyes-Morel^[6] 以及孙庆平等^[7]用直接实验量测的方法对含 ZrO₂ 的结构陶瓷的相变本构行为进行了研究, 他们的结果表明相变剪切塑性与体膨胀塑性具有相同的量级并且外加宏观应力与微观晶格相变应变间的耦合协助了正向相变的发生, 这也使得相变应力具有压力敏感的特征。他们的结果还表明结构陶瓷中的马氏体相变本质上是热弹性并且在实验中证实了热弹性马氏体相变所特有的伪弹性和形状记忆行为。上述发现使我们对结构陶瓷中马氏体相变的物理本质有了进一步深入的认识, 也同时使我们能以宏细观相结合的方法重新研究相变时材料本构行为的描述。

在文献[8]中, 作者用细观力学和热力学的方法对纯体积膨胀相变建立了材料的宏观

1) 国家自然科学基金资助课题。
本文于1990年1月17日收到。

本构。本文用同样的方法进一步在本构关系中考虑相变剪切效应以及非比例加载历史对材料宏观行为的影响,首先在 II 中对所采用的材料本构构元以及显微结构作一简要的描述并推导出构元宏观量和微观量之间的关系,然后通过引入一些基本假定在 III 中导出构元 Helmholtz 自由能和余能的解析表达式,在 IV 中按 Hill-Rice 内变量本构理论的框架导出材料的宏观本构关系并在 V 中对结果加以讨论。

二、构元的微结构以及宏微观量之间的关系

在建立本构关系的细观力学方法中通常是选取材料构元作为研究对象,而宏观的连续介质诸如裂纹尖端附近的相变区则认为是由大量的这些材料构元连续堆积而成的^[8]。对于本文所研究的结构陶瓷 PSZ (部分稳定氧化锆)和 TZP (氧化锆四方相多晶体)来说,本构构元是由大量的未相变 $t\text{-ZrO}_2$ 晶粒式不相变的 $c\text{-ZrO}_2$ 晶粒(作为弹性基体)以及已相变的 $m\text{-ZrO}_2$ 晶粒(作为第二相夹杂)所组成,设夹杂的体积分数为 f ,温度 θ 在构元内均匀分布,构元的边界作用有外加宏观应力 $\bar{\Sigma}$ 或宏观应变 \mathbf{E} ,在由于相变而产生的宏观塑性变形过程中,材料构元也经历了一个显微结构的变化:相变晶粒体积分数逐渐增加;各相变晶粒均经受了一化学自由能和表面能的变化以及无应力相变应变(stress free transformation strain)^[9]。若以 $\bar{\sigma}$, $\bar{\varepsilon}$ 表示构元内的微观应力和微观应变;以 V , V_m 和 V_l 分别表示构元、基体和相变夹杂的体积,则我们可以很容易地证明宏微观量之间有如下关系:

$$\bar{\Sigma} = \langle \bar{\sigma} \rangle_V = \frac{1}{V} \int_V \bar{\sigma} dV = f \langle \bar{\sigma} \rangle_{V_l} + (1-f) \langle \bar{\sigma} \rangle_{V_m} \quad (1)$$

其中 $\langle \quad \rangle$ 表示体平均,宏观和微观应变均假定为小应变,因此可直接分解为弹性和塑性部分:

$$\bar{\varepsilon} = \bar{\varepsilon}^e + \bar{\varepsilon}^p \quad (2)$$

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^e + \mathbf{E}^p \quad (3)$$

其中为简化起见略去了热应力和热应变。对于所研究的 PSZ 和 TZP 材料,可忽略相变晶粒局部弹性各向异性的影响,并假定夹杂的柔度 \mathbf{m} 与基体柔度相等因而等于构元的宏观柔度 \mathbf{M} ,另外还可以假定一旦晶粒相变完成,其内部的相变应变 ε^p 便不再发生变化(冻结 $\bar{\varepsilon}^p$)^[10]。因此,可进一步证明:

$$\mathbf{E}^e = \mathbf{M} : \bar{\Sigma} = \mathbf{M} : \langle \bar{\sigma} \rangle_V = \langle \mathbf{M} : \bar{\sigma} \rangle_V = \langle \bar{\varepsilon}^e \rangle_V \quad (4)$$

$$\mathbf{E}^p = \langle \bar{\varepsilon}^p \rangle_V = f \langle \bar{\varepsilon}^p \rangle_{V_l} \quad (5)$$

以及增量关系:

$$d\mathbf{E} = d\mathbf{E}^e + d\mathbf{E}^p = \mathbf{M} : d\bar{\Sigma} + \langle \bar{\varepsilon}^p \rangle_{dV_l} df \quad (6)$$

若进一步将 $\bar{\varepsilon}^p$ 和 \mathbf{E}^p 分解为体应变和偏应变两部分 ($\bar{\varepsilon}^{p^d}$, $\bar{\varepsilon}^{p^s}$, \mathbf{E}^{p^d} , \mathbf{E}^{p^s}), 则式(5)、(6)成为:

$$\mathbf{E}^p = \mathbf{E}^{p^d} + \mathbf{E}^{p^s} = f \langle \bar{\varepsilon}^{p^d} \rangle_{V_l} + f \langle \bar{\varepsilon}^{p^s} \rangle_{V_l} \quad (7)$$

$$d\mathbf{E} = d\mathbf{E}^e + d\mathbf{E}^p = \mathbf{M} : d\bar{\Sigma} + \langle \bar{\varepsilon}^{p^d} \rangle_{dV_l} df + \langle \bar{\varepsilon}^{p^s} \rangle_{dV_l} df \quad (8)$$

其中 ε^d 为正向相变时的晶格体膨胀:

$$\langle \varepsilon_{ij}^{e^d} \rangle_{dV_l} = \langle \varepsilon_{ij}^{e^d} \rangle_{V_l} = \frac{1}{3} \varepsilon_{kk}^T \delta_{ij} = \varepsilon^d \delta_{ij} \quad (9)$$

室温下 ε^d 约为 1.5%, 而 $\langle \varepsilon_{ij}^{e^d} \rangle_{V_l}$, 则由于外加弹性基体的约束在晶粒内部所形成二孪晶的作用, 远小于相变时晶格的剪切 ($\approx 16\%$)。研究^[5,6]表明相变晶粒内的长程相变偏应变具有强烈的应力倾向特征, 因此我们假定 $\varepsilon_{ij}^{e^d}$ 按下式依赖于基体总偏应力 S_{ij}^M :

$$\varepsilon_{ij}^{e^d} = A \frac{s_{ij}^M}{\sigma_e^M} \quad (10a)$$

其中 $\sigma_e^M = \left(\frac{3}{2} s_{ij}^M s_{ij}^M \right)^{1/2}$, A 为反映基体约束强弱的材料常数, 可由实验定出。由此可以进一步写出:

$$\langle \varepsilon_{ij}^{e^d} \rangle_{dV_l} = A \frac{s_{ij}^M}{\sigma_e^M} \quad (10b)$$

由于在单个晶粒内部的孪晶是沿着一定的晶面和晶向发生的, 因此式 (10a) 对于单个晶粒并不是严格正确的; 但是为了决定 $\langle \varepsilon_{ij}^{e^d} \rangle_{dV_l}$, 考虑到 dV_l 中许多晶粒的不同取向, 可以认为式 (10b) 的近似在平均意义上讲是可以接受的。 s_{ij}^M 的具体计算将在下节给出。

三、本构构元的自由能

本节我们首先导出构元的弹性应变能, 然后分别导出相变过程中构元化学自由能和表面能的变化以及能量耗散, 最后列出构元 Helmholtz 自由能和余能的表达式, 为简明起见, 我们假定相变颗粒为等直径圆球。

1. 构元的弹性应变能

设在外加应力 Σ 和温度 θ 作用下, 构元相应的相变夹杂体积分数为 f , 要决定此时贮存在构元内的弹性能则必须考虑如下两个问题: (1) 构元的尺寸是有限的, 因此无限大弹性基体中一夹杂的 Eshelby 解^[9]不能直接应用; (2) 对于 PSZ 和 TZP 多晶体陶瓷来说, 夹杂的密度随 f 的增大而增大, 必须考虑变形过程中夹杂应力场的相互作用, Eshelby 解只适用于 f 趋于零的情况。下面我们采用自洽的 Mori-Tanaka 方法^[11]来解决上述问题。

记 σ_{ij}^{∞} 为由于相变在构元内引起的内应力 (或特征应力^[12]); σ_{ij}^{∞} 为球形夹杂的 Eshelby 解, 我们有:

$$\sigma_{ij}^{\infty} = L_{ijkl} (\Lambda_{klmn} - I_{klmn}) \varepsilon_{mn}^e \quad (11)$$

$$s_{ij}^{\infty} = \frac{2\mu(5\nu-7)}{15(1-\nu)} \varepsilon_{ij}^{e^d} = B_1 \varepsilon_{ij}^{e^d} \quad (12)$$

$$\sigma_m^{\infty} = \frac{K(4\nu-2)}{1-\nu} \varepsilon^d = B_2 \varepsilon^d \quad (13)$$

其中 \mathbf{L} 是夹杂和基体的弹性刚度张量, $\mathbf{\Lambda}$ 为 Eshelby 张量, \mathbf{I} 为单位张量, μ, κ, ν 分别

为剪切模量、体积模量和泊松比, $s_{ij}^0 = \sigma_{ij}^0 - \sigma_m^0 \delta_{ij}$, $\sigma_m^0 = \frac{1}{3} \sigma_{ii}^0$, Mori-Tanaka 证明^[11]:

$$\langle \bar{\sigma}_{ij} \rangle_{V_M} = -f \langle \sigma_{ij}^0 \rangle_{V_I} \quad (14)$$

$$\langle \bar{\sigma}_{ii} \rangle_{V_I} = (1-f) \langle \sigma_{ii}^0 \rangle_{V_I} \quad (15)$$

若将 $\bar{\sigma}_{ij}$ 分解为 \bar{s}_{ij} 和 $\bar{\sigma}_m$ ($\bar{\sigma}_{ij} = \bar{s}_{ij} + \bar{\sigma}_m \delta_{ij}$), 则将式(12)、(13)代入式(14)、(15), 我们有:

$$\langle \bar{s}_{ij} \rangle_{V_M} - f B_1 \langle \epsilon_{ij}^{e^0} \rangle_{V_I} \quad (16)$$

$$\langle \bar{\sigma}_m \rangle_{V_M} = -f B_2 \langle \epsilon^{e^0} \rangle_{V_I} \quad (17)$$

$$\langle \bar{s}_{ii} \rangle_{V_I} = (1-f) B_1 \langle \epsilon_{ii}^{e^0} \rangle_{V_I} \quad (18)$$

$$\langle \bar{\sigma}_m \rangle_{V_I} = (1-f) B_2 \langle \epsilon^{e^0} \rangle_{V_I} \quad (19)$$

现在基体中随机地放入一新的夹杂, 则此夹杂内的内应力可近似地表示为

$$\bar{\sigma}_{ij} = \sigma_{ij}^0 + \langle \bar{\sigma}_{ij} \rangle_{V_M} \quad (20)$$

上式也即构元中任一夹杂内应力的表达式。当有外加宏观应力

$$\Sigma_{ij} \left(\Sigma_{ij} = S_{ij} + \Sigma_m \delta_{ij}, \quad \Sigma_m = \frac{1}{3} \Sigma_{ii} \right)$$

作用时, 构元基体中的平均偏斜应力 s_{ij}^M 为:

$$s_{ij}^M = S_{ij} + \langle \bar{s}_{ij} \rangle_{V_M} = S_{ij} - f \langle \sigma_{ij}^0 \rangle_{V_I} = S_{ij} - f B_1 \langle \epsilon_{ij}^{e^0} \rangle_{V_I} \quad (21)$$

显然, $f=0$ 时, $s_{ij}^M = S_{ij}$, 并且对于比例加载 ($\Sigma = \lambda \Sigma^0$) 我们可以证明

$$\frac{s_{ij}^M}{\sigma_e^M} = \frac{S_{ij}^0}{\Sigma_e^0} = \frac{S_{ij}}{\Sigma_e} \quad (22)$$

其中 $\Sigma_e = \left(\frac{3}{2} S_{ij} S_{ij} \right)^{1/2}$, $\sigma_e^M = \left(\frac{3}{2} s_{ij}^M s_{ij}^M \right)^{1/2}$.

单位体积构元的弹性应变能 W 可直接按下式计算^[12]:

$$W = \frac{1}{2} \bar{\Sigma} : \mathbf{M} : \bar{\Sigma} - \frac{1}{2} \frac{1}{V} \int_{V_I} \bar{\sigma}_{ij} \epsilon_{ij}^e dV \quad (23)$$

$$= \frac{1}{2} \mathbf{E}^c : \mathbf{L} : \mathbf{E}^c - \frac{1}{2} \frac{1}{V} \int_{V_I} \bar{\sigma}_{ij} \epsilon_{ij}^e dV \quad (24)$$

将式(20)、(12)、(13)、(10)、(16)、(17)代入式(23)、(24), 我们得到:

$$\begin{aligned} W &= \frac{1}{2} \bar{\Sigma} : \mathbf{M} : \bar{\Sigma} - \frac{1}{2} \frac{1}{V} \int_{V_I} (\sigma_{ij}^0 + \langle \bar{\sigma}_{ij} \rangle_{V_M}) \epsilon_{ij}^e dV \\ &= \frac{1}{2} \bar{\Sigma} : \mathbf{M} : \bar{\Sigma} - f \left[\frac{1}{3} B_1 A^2 + \frac{3}{2} B_2 (\epsilon^{e^0})^2 \right] \\ &\quad + \frac{1}{2} f^2 [B_1 \langle \epsilon_{ij}^{e^0} \rangle_{V_I} \langle \epsilon_{ij}^{e^0} \rangle_{V_I} + 3 B_2 (\epsilon^{e^0})^2] \\ &= \frac{1}{2} \mathbf{E}^c : \mathbf{L} : \mathbf{E}^c - f \left[\frac{1}{3} B_1 A^2 + \frac{3}{2} B_2 (\epsilon^{e^0})^2 \right] \\ &\quad + \frac{1}{2} f^2 [B_1 \langle \epsilon_{ij}^{e^0} \rangle_{V_I} \langle \epsilon_{ij}^{e^0} \rangle_{V_I} + 3 B_2 (\epsilon^{e^0})^2] \\ &= \frac{1}{2} (\mathbf{E} - f \langle \bar{\epsilon}^e \rangle_{V_I}) : \mathbf{L} : (\mathbf{E} - f \langle \bar{\epsilon}^e \rangle_{V_I}) \end{aligned} \quad (25)$$

$$-f \left[\frac{1}{3} B_1 A^2 + \frac{3}{2} B_2 (\varepsilon^p)^2 \right] \\ + \frac{1}{2} f^2 [B_1 \langle \varepsilon_{ij}^p \rangle_{V_l} \langle \varepsilon_{ij}^p \rangle_{V_l} + 3B_2 (\varepsilon^p)^2]$$

单位体积构元的总势能则为

$$\Pi = -\bar{\Sigma} : \mathbf{E} + W \\ = -\frac{1}{2} \bar{\Sigma} : \mathbf{M} : \bar{\Sigma} - f \bar{\Sigma} : \langle \varepsilon^p \rangle_{V_l} - f \left[\frac{1}{3} B_1 A^2 + \frac{3}{2} B_2 (\varepsilon^p)^2 \right] \\ + \frac{1}{2} f^2 [B_1 \langle \varepsilon_{ij}^p \rangle_{V_l} \langle \varepsilon_{ij}^p \rangle_{V_l} + 3B_2 (\varepsilon^p)^2] \quad (26)$$

2. 化学自由能和表面能

伴随着 $t \rightarrow m$ 相变的发生, 单位体积构元总的化学自由能的变化可表示为

$$\Delta G_{t \rightarrow m}(\theta) = (G_m(\theta) - G_t(\theta))f = \Delta G_{t \rightarrow m}(\theta)f \quad (27)$$

其中 $G_m(\theta)$, $G_t(\theta)$ 分别为单斜 (m) 和四方 (t) 相的化学自由能, 两者均为温度 θ 的函数。

对等直径圆球相变晶粒来说, 总的表面能的变化为:

$$A_{t \rightarrow m} = A_0 f = 6\gamma_p f/a_0 \quad (28)$$

其中 a_0 为晶粒直径, γ_p 为晶粒在 $t \rightarrow m$ 相变过程中表面能的变化 ($\gamma_p = \gamma_m - \gamma_t$)。

3. 相变过程中的能量耗散

如 I. W. Chen 等^[6]所指出, PSZ 和 TZP 陶瓷中的马氏体相变本质上是热弹性的, 其正向和反向相变是通过 $t-m$ 界面的正、反向运动来完成的。这种界面运动通常要遇到晶格摩擦阻力, 需要一有限大的驱动力来加以克服, 因此会形成能量耗散。在应力诱发或应力协助相变的情况下, 上述微观上的能量耗散将导致宏观上正、反向相变间的应力迟滞。通过对有限的实验数据的分析以及为便于数学处理, 我们假定在整个变形历史过程中, 能量耗散 W^d 正比于累积相变体积分数

$$f_{cu} \left(f_{cu} = \int |df| \right), \text{ 即} \\ W^d = D_0 f_{cu} \quad (29)$$

其中 D_0 为取决于微结构的材料常数, 可通过实验直接测定。

4. 本构构元的 Helmholtz 自由能和余能

若以 Φ 和 Ψ 分别表示单位体积构元的 Helmholtz 自由能和余能, 则由本节 1—3 所导出的结果我们可以直接写出 Φ 和 Ψ 的解析表达式:

$$\Phi(\mathbf{E}, \theta, f, \langle \varepsilon_{ij}^p \rangle_{V_l}) = W + A_{t \rightarrow m} + \Delta G_{chem} \quad (30) \\ = \frac{1}{2} (\mathbf{E} - f \langle \bar{\varepsilon}^p \rangle_{V_l}) : \mathbf{L} : (\mathbf{E} - f \langle \bar{\varepsilon}^p \rangle_{V_l}) \\ - f \left[\frac{1}{3} B_1 A^2 + \frac{3}{2} B_2 (\varepsilon^p)^2 \right] \\ + \frac{1}{2} f^2 [B_1 \langle \varepsilon_{ij}^p \rangle_{V_l} \langle \varepsilon_{ij}^p \rangle_{V_l} + 3B_2 (\varepsilon^p)^2] + A_0 f + \Delta G_{t \rightarrow m}(\theta) f$$

$$\begin{aligned} \Psi(\bar{\Sigma}, \theta, f, \langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1}) &= -(W + A_{i, vr} + \Delta G_{chem} - \bar{\Sigma} : \mathbf{E}) \quad (31) \\ &= \frac{1}{2} \bar{\Sigma} : \mathbf{M} : \bar{\Sigma} + f \bar{\Sigma} : \langle \varepsilon^p \rangle_{V_1} + f \left[\frac{1}{3} B_1 A^2 + \frac{3}{2} B_2 (\varepsilon^{p'd})^2 \right] \\ &\quad - \frac{1}{2} f^2 [B_1 \langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1} \langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1} + 3 B_2 (\varepsilon^{p'd})^2] - A_0 f - \Delta G_{t \rightarrow m}(\theta) f \end{aligned}$$

因此,由热力学内变量本构理论^[13,14]可知,此时构元的热力学状态由一组变量($\bar{\Sigma}$ (或 \mathbf{E}), $\theta, f, \langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1}$)所完全决定,其中 f 和 $\langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1}$ 显然是描述构元在相变过程中材料显微结构变化的内变量,即材料响应对加载历史的泛函依赖关系就转变为对状态变量 $\bar{\Sigma}, \theta, f, \langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1}$ 的函数依赖关系,当内变量不变(固定)时,材料的响应是弹性的。

四、非比例加载历史下材料的细观本构

非比例加载条件下材料的本构行为研究对实际结构的分析计算是十分重要的,比如在扩展裂纹问题中,裂纹前方的材料将经受严重的非比例加载和卸载,要对裂纹前方和尾区内的复杂应力场进行具体数值计算就必须采用非比例加载条件下的本构关系。本节在Hill-Rice内变量理论的框架内导出非比例加载条件下正向相变的本构关系。

分别记与内变量 $f, \langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1}$ 功共轭的热力学作用力为 $F^f, F_{ij}^{p'}$,则由式(31)余能表达式,我们有:

$$\begin{aligned} F^f &= \frac{\partial \Psi}{\partial f} = \bar{\Sigma} : \langle \tilde{\varepsilon}^p \rangle_{V_1} - (A_0 + \Delta G_{t \rightarrow m}(\theta) + q_1) - f [B_1 \langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1} \langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1} \\ &\quad + 3 B_2 (\varepsilon^{p'd})^2] = (S_{ij} - f B_1 \langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1}) \langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1} \\ &\quad + 3 (\Sigma_m - f B_2 \varepsilon^{p'd}) \varepsilon^{p'd} - (A_0 + \Delta G_{t \rightarrow m}(\theta) + q_1) \quad (32) \end{aligned}$$

$$F_{ij}^{p'} = \frac{\partial \Psi}{\partial \langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1}} = f (S_{ij} - f B_1 \langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1}) \quad (33)$$

其中

$$q_1 = -\frac{1}{3} B_1 A^2 - \frac{3}{2} B_2 (\varepsilon^{p'd})^2.$$

若将广义时间导数 $d(\quad)/dt$ 记为 $\dot{(\quad)}$,则当相变进行时($f \neq 0$),热力学第二定律要求

$$\dot{\Psi}^p = F^f \dot{f} + F_{ij}^{p'} \overline{\langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1}} \geq 0 \quad (34)$$

其中

$$\overline{\langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1}} = d \langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1} / dt,$$

上式中不等式对应不可逆过程。

另一方面,由界面磨擦而造成的能量耗散率为(由式(29)):

$$\dot{W}^d = D_{0f} \dot{f} = \begin{cases} D_{0f} \dot{f} & (\text{forward transformation, } \dot{f} > 0) \\ -D_{0f} \dot{f} & (\text{reverse transformation, } \dot{f} < 0) \end{cases} \quad (35)$$

由于 $\dot{\Psi}^p$ 必须等于 \dot{W}^d ,比较式(34)与式(35),我们有

$$F^f \dot{f} + F_{ij}^{p'} \overline{\langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1}} = D_{0f} \dot{f} \quad (\text{forward transformation}) \quad (36)$$

从式(7)、(8)、(10b)、(21),我们有:

$$\begin{aligned}\dot{\varepsilon}_{ij}^{p'} &= f \langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1} + f \overline{\langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1}} = \langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{AV_1} \dot{f} = A f \frac{S_{ij}^M}{\sigma_c^M} \\ &= A \dot{f} (S_{ij} - f B_1 \langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1}) / J (S_{ij} - f B_1 \langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1})\end{aligned}\quad (37)$$

其中

$$J(S_{ij} - f B_1 \langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1}) = \left[\frac{3}{2} (S_{ij} - f B_1 \langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1}) (S_{ij} - f B_1 \langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1}) \right]^{1/2} = \sigma_c^M.$$

将式(32)、(33)代入式(36)并由式(37)消去式(36)中的 f , 我们得到应力空间正向相变屈服函数:

$$\begin{aligned}F_f(\Sigma, f, \theta, \langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1}) &= \frac{2}{3} A J (S_{ij} - f B_1 \langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1}) + 3 \varepsilon^{p'd} (\Sigma_m - f B_2 \varepsilon^{p'd}) \\ &\quad - C_0(\theta) = 0\end{aligned}\quad (38)$$

其中 $C_0(\theta) = D_0 + A_0 + \Delta G_{i \rightarrow m}(\theta) + q_1$. 上式也可由基体总应力 σ_{ij}^M 表示为:

$$\frac{2}{3} A \sigma_c^M + 3 \sigma_m^M \varepsilon^{p'd} - C_0(\theta) = 0\quad (39)$$

由式(38)知, 初始屈服条件为 ($f = 0, \langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1} = 0$):

$$F_f(\tilde{\Sigma}, \theta, 0, 0) = \frac{2}{3} A \Sigma_c + 3 \Sigma_m \varepsilon^{p'd} - C_0(\theta) = 0\quad (40)$$

很显然, 相变屈服条件是压力敏感的. 正向相变时的增量本构关系可直接按内变量本构论理^[13,14]得到:

$$\begin{aligned}\dot{E}_{ij} &= \dot{E}_{ij}^c + \dot{E}_{ij}^p \\ &= M_{ijkl} \dot{\Sigma}_{kl} + \frac{\partial F_f}{\partial \Sigma_{ij}} \dot{f} + \frac{\partial F_f}{\partial \Sigma_{ij}} \frac{\partial F_f}{\partial \langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1}} \dot{\langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1}} \\ &= M_{ijkl} \dot{\Sigma}_{kl} + \langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1} \dot{f} + f \overline{\langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1}} \\ &= M_{ijkl} \dot{\Sigma}_{kl} + \dot{f} (\varepsilon^{p'd} \delta_{ij} + A \frac{S_{ij}^M}{\sigma_c^M}),\end{aligned}\quad (41)$$

其中 \dot{f} 可按一致性条件

$$\dot{F}_f = \frac{\partial F_f}{\partial \Sigma_{ij}} \dot{\Sigma}_{ij} + \frac{\partial F_f}{\partial f} \dot{f} + \frac{\partial F_f}{\partial \langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1}} \frac{\partial F_f}{\partial \langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1}} \dot{\langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1}} = 0,\quad (42)$$

解出:

$$\begin{aligned}\dot{f} &= \frac{\partial F_f}{\partial \Sigma_{ij}} \dot{\Sigma}_{ij} / \left(\frac{2}{3} B_1 A^2 + 3 B_2 (\varepsilon^{p'd})^2 \right) \\ &= \left(A \frac{S_{ij}^M}{\sigma_c^M} \dot{\Sigma}_{ij} + 3 \varepsilon^{p'd} \dot{\Sigma}_m \right) / \left(\frac{2}{3} B_1 A^2 + 3 B_2 (\varepsilon^{p'd})^2 \right)\end{aligned}\quad (43)$$

从式(41)和(43), 我们可以看出:

$$\dot{E}_{ij}^p = \dot{f} \left(\varepsilon^{p'd} \delta_{ij} + A \frac{S_{ij}^M}{\sigma_c^M} \right) = \frac{\partial F_f}{\partial \Sigma_{ij}} \dot{f},\quad (44)$$

即塑性应变率正交于应力空间屈服面, 正交性自然满足, 无需象经典的唯象处理中事先假定正交法则. 如式(38)所示, 屈服面的中心随着基体平均内应力 $\langle \bar{\sigma}_{ij} \rangle_{V_M}$

$$\langle \bar{\sigma}_{ij} \rangle_{V_M} = -f B_1 \langle \varepsilon_{ij}^{p'} \rangle_{V_1} - f B_2 \varepsilon^{p'd} \delta_{ij}\quad (45)$$

而移动,屈服面本身并不改变其形状和大小,因此可将 $-\langle \bar{\sigma}_{ij} \rangle_{V_M}$ 称为背应力 σ_{ij}^b , 由式(45)可直接求出背应力 σ_{ij}^b 的演化率为

$$\dot{\sigma}_{ij}^b = -\langle \dot{\bar{\sigma}}_{ij} \rangle_{V_M} = B_1 \dot{\epsilon}_{ij}'' + B_2 \dot{\epsilon}^p \delta_{ij} \quad (46)$$

而无需象经典塑性理论那样作 Prager 假定或 Ziegler 假定。当忽略相变体积应变时,式(38)的屈服面退化为传统的线性机硬化形式。

五、讨论与结论

通过细观力学和热力学内变量的方法,基于伴随相变的构元能量变化分析,本文导出了材料的宏观本构关系,研究了材料显微结构变化以及温度等对材料宏观行为的影响。对非比例加载,材料行为对加载历史的依赖转化为对内变量 f 和 $\langle \epsilon_{ij}'' \rangle_{V_i}$ 即时值的函数依赖关系。本文的另一个重要特征是,不同于传统的唯象处理,材料函数或材料常数以及内变量均具有明确的物理意义。本构关系自然满足正交性条件,屈服面的运动由基体平均应力(背应力)所唯一确定,背应力可直接按细观力学进行计算。

由于同时考虑了相变时的体积膨胀和剪切效应,使得所导出的屈服条件具有压力敏感的特征,这也是地质材料以及含孔洞金属材料所共同具有的特征。当忽略剪切效应时,本构关系退化为 Budiansky 等^[2]所定义的临界相变的情况,但是必须指出这里是用完全不同的方法得到的^[6]。马氏体相变可由应力的作用或温度的变化而引发,这种应力(或应变)和温度作为状态变量对相变作用的互换关系在本文的本构模型中得到了清楚的反映:相变屈服应力(式(50))通过对化学自由能的变化 $\Delta G_{t \rightarrow m}(\theta)$ (材料函数)的依赖而依赖于温度 θ 。由 $\Delta G_{t \rightarrow m}(\theta)$ 的性质可知,上述依赖于温度的特征使得正向相变应力随温升高而增大,并且,对于给定的 D_0 值,材料相变时的应力应变关系在低温时呈经典塑性而在高温时则呈伪弹性^[4-6]。因此,本文的模型可用以描述热弹性马氏体所特有的伪弹性和形状记忆行为。

最后,我们建议进一步的工作在于实验验证本文模型的有效性。由于在非比例加载条件下对陶瓷试件进行试验是非常困难的,因此实验验证将是非常重要然而也是非常艰巨的工作。现有的实验结果均是在比例加载条件得到的,比例加载条件下的本构关系可作为本文的特例得到,其理论与实验的分析比较将在另文讨论。

致谢 作者感谢清华大学材料系黄勇教授对论文工作的支持以及多次有益的讨论,同时感谢国家自然科学基金会对论文工作的资助。

参 考 文 献

- [1] McMeeking, R. and Evens, A. G., Mechanisms, of Transformation Toughening in Brittle Materials, *J. Am. Ceram. Soc.*, 65, 5(1982), 242—45.
- [2] Budiansky, B., Hutchinson, J. W. and Lambropoulos, J. C., Continuum Theory of Dilatant Transformation Toughening in Ceramics, *Int. J. Solids Struct.*, 19, 4(1983), 337—55.
- [3] Lambropoulos, J. C. Shear, Shape and Orientation Effects in Transformation Toughening, *Int. J. Solids Struct.*, 22, 10(1986), 1083—1106.
- [4] Chen, I. W., and Reyes Morel, P. E., Implications of Transformation Plasticity in ZrO₂-Containing Ceramics: I, Shear and Dilatation Effect, *J. Am. Ceram. Soc.*, 69, 3(1986), 181—189.

- [5] Chen, I. W. and Reyes Morel, P. E., Transformation Plasticity and Transformation Toughening in Mg-PSZ and Ce-TZP, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, 78, (1987).
- [6] Reyes Morel, P. E., Cherng, J. S. and Chen, I. W., Transformation Plasticity of Ce-TZP—The Shape Memory Effect, Presented at the 89th Annual Meeting of the American Ceramic Society (1987).
- [7] Sun, O. P., Yu, S. W. and Hwang, K. C., Experimental and Numerical Research on Transformation Plasticity and Transformation Toughening of Ce-TZP Ceramics, Presented at the 92th Annual Meeting of the American Ceramic Society held in Texas, U. S. A., Apr. (1990).
- [8] Sun, Q. P., Yu, S. W. and Hwang, K. C., A Micromechanics Constitutive Model for Pure Dilatant Martensitic Transformation of ZrO_2 -Containing Ceramics, *Acta Mechanica Sinica*, 6, 2(1990).
- [9] Eshelby, J. D., The Determination of the Elastic Field of An Ellipsoidal Inclusions, and the Related Problems. *Proc. R. Soc. Lond.*, A241, (1957), 376.
- [10] 孙庆平, 相变塑性细观本构理论与增韧分析, 清华大学工学博士学位论文, 1989年5月.
- [11] Mori, T. and Tanaka, K., Average Stress in Matrix and Average Elastic Energy of Materials with Misfitting Inclusions, *Acta Metall.*, 21, 5(1973), 571—574.
- [12] Mura, T., *Micromechanics of Defects in Solids*, Martinus Nijhoff, The Hague, The Netherlands (1987).
- [13] Rice, J. R. Continuum Mechanics and Thermodynamics of Plasticity in Relation to Microscale Deformation Mechanism. In "Constitutive Relation of Plasticity" (Edited by Ali S. Argon), pp 23—79. MIT Press, Cambridge, MA (1975).
- [14] Rice, J. R., Inelastic Constitutive Relations for Solids: An Internal-Variable Theory and its Application to Metal Plasticity. *J. M. P. S.*, 19, (1971), 433—455.

A MICROMECHANICS CONSTITUTIVE MODEL FOR FORWARD TRANSFORMATION PLASTICITY WITH SHEAR AND DILATATION EFFECT: I, GENERALIZED NONPROPORTIONAL LOADING HISTORY

Hwang Kehchih Sun Qingping Yu Shouwen
(Dept. of Engineering Mechanics, Tsinghua University, Beijing, China)

Abstract Based on micromechanics, thermodynamics and microscale $t \rightarrow m$ transformation mechanism considerations, a micromechanics constitutive model which takes into account both the dilatation and shear effects of the transformation is proposed to describe the macroscopic plastic behavior of structure ceramics during forward transformation under different temperatures. Under some basic assumptions, the analytic expressions of the Helmholtz and complementary free energy of the constitutive element is derived in a self-consistent manner by using the Mori-Tanaka's method which takes into account the interaction between the transformed inclusions. The derived free energy is a function of externally applied macroscopic stress (or strain), temperature, volume fraction of transformed phase and the averaged stress-free transformation strain (eigen strain) of all the transformed inclusions in the constitutive element, the latter two quantities being considered to be the internal variables describing the microstructural rearrangement in the constitutive element. In the framework of Hill-Rice's internal variable constitutive theory, the forward transformation yield function and incremental stress strain relations, in analogy to the theory of metal plasticity, for generalised non-proportional loading histories are obtained.

Key words shear effect, internal variables, constitutive element