

DOI: 10.11830/ISSN.1000-5013.202001008



面心和体心立方晶体中映像规则 判断始滑移系的原理

杨晓冬¹, 杨静²

(1. 华侨大学 材料科学与工程学院, 福建 厦门 361021;
2. 厦门大学 化学化工学院, 福建 厦门 361005)

摘要: 提出一种易于理解且严谨的论述,从原理上解释面心和体心立方晶体中快速判断始滑移系的映像规则. 首先,将 Schmid 因子转化成关于夹角 $\varphi+\lambda$ 和 $\varphi-\lambda$ 的余弦函数. 该余弦函数在标准投影图上可描述为“力轴靠近滑移系平面”的程度和“夹角 φ 和 λ 接近”的程度,以此为判据可快速地比较 Schmid 因子的相对大小. 然后,以数学运算证明映像规则的科学性.

关键词: 映像规则; Diehl 规则; 滑移系; Schmid 定律; 立方晶体

中图分类号: TG 111.7 **文献标志码:** A **文章编号:** 1000-5013(2020)04-0478-06

Mechanism of Mirror Image Method in Determinating Initial Glide Systems of Face-Centered and Body-Centered Cubic Crystals

YANG Xiaodong¹, YANG Jing²

(1. College of Materials Science and Engineering, Huaqiao University, Xiamen 361021, China;
2. College of Chemistry and Chemical Engineering, Xiamen University, Xiamen 361005, China)

Abstract: An easy to grasp as well as rigorous discussion is presented to describe the mechanism of the method of mirror image, which is applied to determine the initial glide systems of face-centered and body-centered cubic crystal. Firstly, Schmid factors is transformed into formula of the cosine function of angle $\varphi+\lambda$ and $\varphi-\lambda$. This function can be on standard stereographic projection; the closeness of stress to glide-system plane, and the closeness of angle φ and λ . Based on this criterion, the comparison of Schmid factors is easily made. Furthermore, a mathematical demonstration is presented to prove the mirror image method.

Keywords: mirror image method; Diehl's rule; glide system; Schmid law; cubic crystal

单晶体系是研究材料塑性变形的最简单体系,诸多塑性变形理论均是在单晶体系中提出并发展的. Schmid 等^[1-2]对金属晶体的塑性变形进行总结,并提出著名的 Schmid 定律. Schmid 定律可以表述为对同种材料但取向不同的单晶试样棒进行拉伸,滑移总发生在特定的平面和方向上,且在滑移启动时,分解到滑移发生的平面和方向上的临界分切应力为定值. 滑移面和滑移方向的空间组合称为滑移系,最先

收稿日期: 2020-01-07

通信作者: 杨晓冬(1985-),男,讲师,博士,主要从事电催化及燃料电池的研究. E-mail: xdyang@hqu.edu.cn.

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(21703184); 华侨大学中青年教师科研提升资助计划(ZQN-PY506); 华侨大学科研基金资助项目(17BS405); 西安交通大学金属材料强度国家重点实验室开放研究项目(2019 2101)

开动滑移的系统称为始滑移系。显然, 在所有的滑移系中, 始滑移系的分切应力最大。在晶体上施加任意载荷时, 始滑移系的判断方法通常有两种: 一是按照 Schmid 定律计算载荷在所有滑移系的分切应力, 比较并确定数值最大的滑移系为始滑移系^[3-6]; 二是通过映像规则进行判断^[3,7], 映像规则也称为 Diehl 规则^[8-11], 应用于常见的面心立方晶体和体心立方晶体中。

映像规则是基于 Schmid 定律判断始滑移系的方法总结而来的规律^[3]。在现有的资料中, 仅有范群成等^[12]根据“始滑移系的 φ 和 λ 同时接近中等值”定性地论述映像规则的原理, Kelly 等^[10]通过计算面心立方晶体和体心立方晶体的 12 组滑移系的 Schmid 因子, 证明了映像规则的科学性。基于此, 本文提出一种简单、直接、易于理解且严谨的证明方法, 利用标准投影图中力轴与滑移系的几何关系解释映像规则, 并结合标准投影图从数学角度证明映像规则。

1 映像规则

映像规则是根据力轴在标准投影图上的位置, 取“映像”点判断始滑移系。以立方晶体(001)标准投影图为例介绍映像规则, 如图 1 所示, (001)标准投影图中包含 24 个取向三角形, 每个取向三角形的 3 个顶点分别属于 001 型、011 型和 111 型指数。为了方便描述, 假定力轴 F 位于取向三角形 101-111-001 之内, 且此晶体为面心立方结构(FCC)。FCC 的滑移系为 $\{111\} \langle 011 \rangle$, 则初始滑移面是属于 $\{111\}$ 晶面族的(111)的“像”(111), 即以 $[001] \times [101]$ 为镜面; 初始滑移方向是属于 $\langle 011 \rangle$ 晶向族的 $[101]$ 的“像” $[011]$, 即以 $[001] \times [111]$ 为镜面, 故始滑移系为 $(111)[011]$ 。若晶体为体心立方结构(BCC), 则 BCC 的滑移系为 $\{011\} \langle 111 \rangle$ ^[13-14], 分别以 011 型和 111 型指数判断初始滑移面和初始滑移方向。

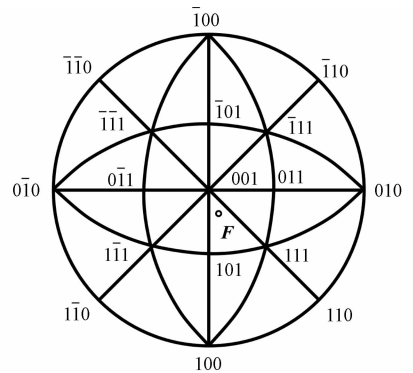


图 1 立方晶体(001)的标准投影图
Fig. 1 (001) standard stereographic projection of cubic crystal

2 图解映像规则

为了更直观地在标准投影图上展示力轴与滑移系的关系, 在单晶试样棒的单向拉伸立体图上分解力轴与滑移系。图 2 示意了力轴(F)、滑移面(法线 N)和滑移方向 T 在单晶试样棒上的几何关系。通过简单的运算, F 分解到 T 方向上的分切应力 τ ^[3-4,15] 为

$$\tau = \frac{F}{A_0} \cdot \cos \varphi \cdot \cos \lambda. \quad (1)$$

式(1)中: A_0 为试样棒的截面面积; φ 为力轴 F 与滑移面法线 N 的夹角; λ 为 F 与滑移方向 T 的夹角; $\cos \varphi \cdot \cos \lambda$ 为 Schmid 因子, 用 m 表示, 其数值越大, 则分切应力越大。

由于 $N \perp T$, 所以 $\varphi + \lambda \geq \frac{\pi}{2}$ 。当 F 位于平面 $N \times T$, 即 $\varphi + \lambda = \frac{\pi}{2}$, 且当 $\varphi = \lambda = \frac{\pi}{4}$ 时, Schmid 因子具有极大值 $m = \frac{1}{2}$ 。

为了便于理解, 下文将统一称平面 $N \times T$ 为滑移系平面。

由图 2 可知以下边界条件, 即

$$\frac{\pi}{2} \leq \varphi + \lambda \leq \pi, \quad (2)$$

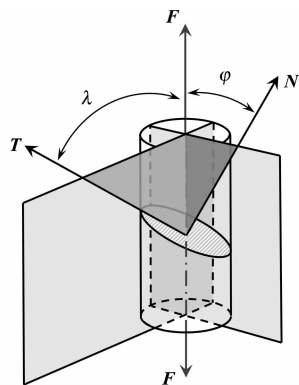


图 2 单晶棒的单向拉伸示意图
Fig. 2 Schematic of uniaxial tension of single crystal rod

$$0\leqslant\varphi\leqslant\frac{\pi}{2},$$

(3)

$$0\leqslant\lambda\leqslant\frac{\pi}{2}.$$

(4)

Schmid 因子可通过三角函数变换为

$$\cos\varphi\cdot\cos\lambda=\frac{1}{2}\cos(\varphi+\lambda)+\frac{1}{2}\cos(\varphi-\lambda).$$

(5)

结合边界条件可知:式(5)第一项($\frac{1}{2}\cos(\varphi+\lambda)$)随 $\varphi+\lambda$ 在 $[\frac{\pi}{2},\pi]$ 范围内单调递减,即 $\varphi+\lambda$ 越接近 $\frac{\pi}{2}$ (力轴越靠近滑移系平面),第一项越大;式(5)第二项($\frac{1}{2}\cos(\varphi-\lambda)$)随 $|\varphi-\lambda|$ 在 $[0,\frac{\pi}{2}]$ 单调递减,即夹角 φ,λ 越接近,第二项越大.换言之,“力轴靠近滑移系平面”和“夹角 φ,λ 接近”可以定性地比较 Schmid 因子的相对大小.以此为据,进一步结合标准投影图筛选始滑移系.

图 3 在(001)标准投影图上标记了面心立方晶体中 12 个等价的滑移系.图 3 中:虚线为滑移方向 T 和滑移面 N 组成的滑移系平面,即每条虚线代表一组滑移系;力轴 F 位于 101-111-001 取向三角形(阴影区).与力轴 F 最接近的滑移系平面为切过此取向三角形的虚线,即平面 $[111]\times[011],[\bar{1}11]\times[011]$ 和 $[\bar{1}11]\times[101]$.可以确定的是,这 3 个滑移系平面的 φ,λ 均小于其他平面,且其 Schmid 因子位居前三强.

在这 3 个滑移系平面中,力轴 F 与 $[\bar{1}11]\times[011]$ 的两个夹角 φ,λ 最接近,故始滑移系为 $(\bar{1}11)[011]$,与映像规则判断一致.

事实上,取向三角形中的部分区域并不能直观地比较这 3 个滑移系平面的 Schmid 因子相对大小,究其原因主要有以下 2 点.

1) 在标准投影图中,不能便捷、精确地测量夹角,只能通过曲线的长度定性地估算夹角^[16],但这是不准确的.例如, $[111]$ 与 $[001],[010]$ 的夹角相同,但显然两条线长度并不相同.

2) 在 Schmid 因子前三强中,式(5)中的两项没有同时大于或小于其他两个 Schmid 因子.当力轴位于点阴影区域(图 3)时,力轴与平面 $[\bar{1}11]\times[011]$ 最接近,与 φ,λ 也最接近,此时,式(5)中两项均最大,故确认始滑移系为 $(\bar{1}11)[011]$.然而,当力轴位于线阴影区域(图 3)时,力轴与平面 $[\bar{1}11]\times[011]$ 或 $[\bar{1}11]\times[101]$ 较为接近,式(5)第一项较小,而力轴与滑移系 $(\bar{1}11)[011]$ 形成的两个夹角最接近,式(5)第二项最小,无法直观地比较三者的 Schmid 因子.

由此可知,通过“力轴靠近滑移系平面”和“夹角 φ,λ 接近”在标准投影图上定性解释映像规则有所局限,使用时需考虑其适用性.然而,此方法可直观地呈现出映像规则的本质是结合标准投影图中的夹角 φ,λ 判断 Schmid 因子大小,便于初学者快速理解映像规则.因此,需进一步通过数学计算求出 Schmid 因子前三强中的最大者,从而确定始滑移系,以证明映像规则.

需要说明的是, $[001]$ 周围的 8 个取向三角形均示意出 3 组滑移系(图 3),但在外围的 16 个取向三角形中,仅示意出一组或两组滑移系,即只有一条或两条虚线切过.事实上,根据立方晶体的周期性和对称性,外围 16 个取向三角形中均有 3 个滑移系平面切过.图 4 补充了外围取向三角形的滑移系平面.为了简洁示意,以 100-111-101,100-110-111 取向三角形为例,对外围取向三角形的滑移系平面进行补充.由图 4 可知:当力轴位于外围取向三角形时,仍可根据“力轴靠近滑移系平面”和“夹角 φ,λ 接近”快速筛选出 3 个最有可能的滑移系.

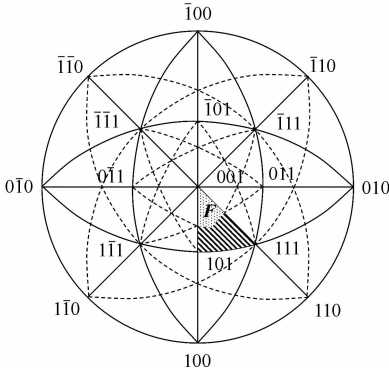


图 3 (001)标准投影图中面心立方的等价滑移系
Fig. 3 Physically distinct glide systems of face-centered cubic crystal in (001) stereographic projection

$$m_{(\bar{1}11)[011]}=m_{(\bar{1}11)[101]}=\frac{uw+w^2}{\sqrt{6}(2u^2+w^2)}.$$

显然,式(11)>式(10),始滑移系为 $(\bar{1}11)[011]$ 和 $(\bar{1}11)[101]$.此时,符合将力轴视为位于相邻三角形 101-111-001 和 011-111-001 中,且根据映像规则判断出两个等价的滑移系.

同理,当 \boldsymbol{F} 位于 001-101 边时, $v=0,0<u<w$,有

$$m_{(111)[0\bar{1}1]}=m_{(\bar{1}11)[011]}=\frac{uw+w^2}{\sqrt{6}(u^2+w^2)},$$

$$m_{(\bar{1}11)[101]}=m_{(\bar{1}\bar{1}1)[101]}=\frac{-u^2+w^2}{\sqrt{6}(u^2+w^2)}.$$

显然,式(12)>式(13),始滑移系为 $(111)[0\bar{1}1]$ 和 $(\bar{1}11)[011]$,符合映像规则.

当 \boldsymbol{F} 位于 101-111 边时, $v<u=w$,有

$$m_{(111)[0\bar{1}1]}=m_{(111)[1\bar{1}0]}=\frac{-uv-v^2+2u^2}{\sqrt{6}(2u^2+v^2)},$$

$$m_{(\bar{1}11)[011]}=m_{(\bar{1}11)[110]}=\frac{uv-v^2+2u^2}{\sqrt{6}(2u^2+v^2)},$$

$$m_{(\bar{1}11)[101]}=m_{(111)[101]}=\frac{2uv}{\sqrt{6}(2u^2+v^2)}.$$

比较式(15)与式(14),(16)可知,式(15)最大.因此,始滑移系为 $(\bar{1}11)[011]$ 和 $(\bar{1}11)[110]$,符合映像规则.

当力轴处于顶点处时,需考虑共顶点的所有三角形的滑移系.因为此时力轴相对于这些共顶点的三角形是等同的.例如,当力轴位于 $[001]$ 时,需同时考虑共 001 顶点的 8 个取向三角形.如上文所述,每个取向三角形均有 3 个可能的滑移系.根据标准投影图可以定性地筛选出切过每个共顶点三角形的 3 个滑移系.力轴位于顶点时的始滑移系,如图 6 所示.

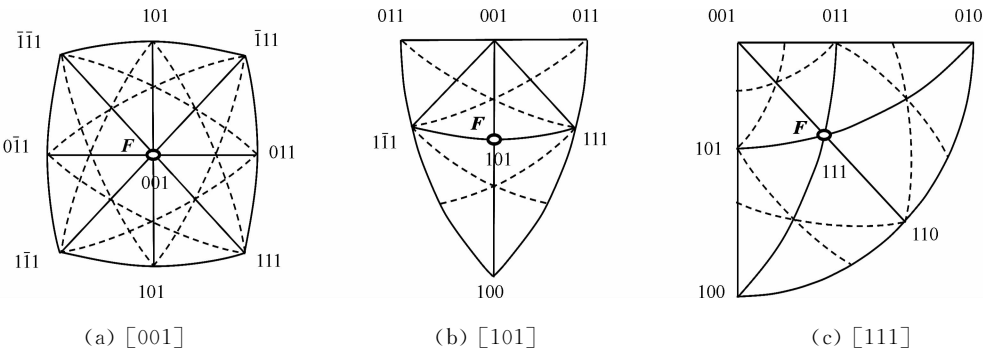


图 6 力轴位于顶点时的始滑移系

Fig. 6 Initial glide systems when tension force located at junctions

当力轴位于 $[001]$ 时,由图 6(a)可知:筛选出的 8 个滑移系均关于力轴 $[001]$ 对称;8 个滑移系的 Schmid 因子相等且最大,都是始滑移系.不难验证,这 8 个始滑移系与根据映像规则判断出的始滑移系相同.

当力轴位于 $[101]$ 时,由图 6(b)可知:当力轴位于 $[101]$ 时,需考虑共 101 顶点的 4 个取向三角形,但无需考察经过 $[101]$ 的滑移系.以 101-111-001 三角形为例, $(\bar{1}11)[101]$ 滑移系与力轴 $[101]$ 的夹角 j, l 分别为 $\pi/2, 0$ (图 3),Schmid 因子为 0,无需考虑.可定性地筛选出的滑移系有 4 个,且关于 $[101]$ 对称(图 5,图 6(b)),Schmid 因子相等且最大,均为始滑移系.因此,符合将力轴视为位于共顶点三角形,且根据映像规则判断出的始滑移系.

同理,当力轴位于 $[111]$ 时,无需考察经过 $[111]$ 的滑移系.由图 6(c)可知:定性筛选出的滑移系有 4 个,且关于 $[111]$ 对称,均为始滑移系,仍然符合映像规则.

综上所述,在取向三角形 101-111-001 的任何位置均符合映像规则.由于立方晶体的高度对称性和

周期性,当力轴位于其他取向三角形,即立方晶体标准投影图的所有位置,均可以运用映像规则判断始滑移系。

4 结束语

将 Schmid 因子变换为关于 $\varphi + \lambda$ 和 $\varphi - \lambda$ 的余弦函数(式 5),并结合标准投影图的力轴位置可知,当“力轴靠近滑移系平面”和“夹角 φ, λ 接近”时, Schmid 因子最大,可以此确定始滑移系。此论述对映像规则进行形象的解释,易于理解,十分适合初学者,也可供讲授者参考。在此基础上,进一步结合矢量运算,从数学角度证明力轴取向与始滑移系的关系符合映像规则。

参考文献:

- [1] SCHMID E. Neuere untersuchungen an metallkristallen[C]//Proceedings of the International Congress on Applied Mechanics. Delft; Technische Boekhandel en Drukkerij J Waltman Jr, 1925; 342-353.
- [2] SCHMID E, BOAS W. Kristallplastizität mit besonderer berücksichtigung der metalle[M]. Berlin; Springer, 1935.
- [3] 潘金生, 仝健民, 田民波. 材料科学基础(修订版)[M]. 北京: 清华大学出版社, 2011.
- [4] 余永宁. 材料科学基础[M]. 2 版. 北京: 高等教育出版社, 2012.
- [5] 陶杰, 姚正军, 薛烽. 材料科学基础[M]. 北京: 化学工业出版社, 2006.
- [6] 胡赓祥, 蔡珣, 戎咏华. 材料科学基础[M]. 2 版. 上海: 上海交通大学出版社, 2006.
- [7] 范群成, 田民波. 材料科学基础学习辅导[M]. 北京: 机械工业出版社, 2016.
- [8] SEEGER A. Crystal plasticity theory during the 1950s and 1960s[J]. Philosophical Magazine, 2013, 93(28/29/30): 3772-3794. DOI:10. 1080/14786435. 2013. 822998.
- [9] DIEHL J, KRAUSE M, OFFENHAUSER W, *et al.* Graphische darstellungen der schubspannungsverhaeltnisse in kubisch flaechenzentrierten kristallen[J]. Zeitschrift Fur Metallkunde, 1954, 45(8): 489-492.
- [10] KELLY A, KNOWLES K M. Crystallography and crystal defects[M]. 2nd ed. West Sussex: John Wiley & Sons Ltd, 2012.
- [11] HUTCHINGS I M. Quick non-graphical method for deducing slip systems in cubic close packed metals in tension or compression[J]. Materials Science and Technology, 1993, 9(10): 929-932. DOI:10. 1179/mst. 1993. 9. 10. 929.
- [12] 范群成, 康嘉晨. 镜面映像法确定 FCC 和 BCC 晶体始滑移系的原理及技巧[J]. 材料科学, 2018, 8(5): 503-508. DOI:10. 12677/MS. 2018. 85057.
- [13] WATANABE R. Possible slip systems in body centered cubic iron[J]. Material Transactions, 2006, 47(8): 1886-1889. DOI:10. 2320/matertrans. 47. 1886.
- [14] YALCINKAYA T, BREKELMANS W A M, GEERS M G D. BCC single crystal plasticity modeling and its experimental identification[J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2008, 16(8): 085007. DOI: 10. 1088/0965-0393/16/8/085007.
- [15] 石德珂. 材料科学基础[M]. 2 版. 北京: 机械工业出版社, 2003.
- [16] WHITTAKER E J W. The stereographic projection[M]. Cardiff: University College Cardiff Press, 1984.

(责任编辑: 钱筠 英文审校: 刘源岗)