

University of Groningen

Discrete dislocation and nonlocal crystal plasticity modelling

Yefimov, Serge

IMPORTANT NOTE: You are advised to consult the publisher's version (publisher's PDF) if you wish to cite from it. Please check the document version below.

Document Version

Publisher's PDF, also known as Version of record

Publication date:

2004

[Link to publication in University of Groningen/UMCG research database](#)

Citation for published version (APA):

Yefimov, S. (2004). *Discrete dislocation and nonlocal crystal plasticity modelling*. s.n.

Copyright

Other than for strictly personal use, it is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), unless the work is under an open content license (like Creative Commons).

The publication may also be distributed here under the terms of Article 25fa of the Dutch Copyright Act, indicated by the "Taverne" license. More information can be found on the University of Groningen website: <https://www.rug.nl/library/open-access/self-archiving-pure/taverne-amendment>.

Take-down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

Downloaded from the University of Groningen/UMCG research database (Pure): <http://www.rug.nl/research/portal>. For technical reasons the number of authors shown on this cover page is limited to 10 maximum.

Samenvatting

De toenemende miniaturisatie van mechanische apparaten drijft de groeiende interesse in het modelleren van plastische misvorming op micrometer schaal en nog kleiner. Een algemene conclusie van diverse experimentele waarnemingen is, dat wanneer de afmetingen van kristalijne materialen kleiner zijn dan tientallen micrometers, ze harder worden: kleiner is harder. Dit wil zeggen dat de spanningen toenemen bij dezelfde vervorming en dit kan belangrijke implicaties hebben voor de mechanische betrouwbaarheid van de apparaten (breuk, slijtage, e.d.).

Het startpunt voor veel theoretisch werk is dat de klassieke continuïmplasticiteitsmodellen er niet in slagen om de schaal- afhankelijkheid van mechanisch gedrag te voorspellen omdat ze geen materiële lengteschaal bevatten. Er zijn echter twee alternatieve benaderingen voor één-kristallen die dit kunnen oplossen: (i) discrete-dislocatieplasticiteit (DDP) en (ii) rekgradiënt (of niet-lokale) continuïmplasticiteitsmodellen. Zij zijn fysisch relevant op deze schalen en kunnen schaalafhankelijk gedrag wel beschrijven. Het grote voordeel van DDP is dat het inherent niet-lokaal is, maar daar tegenover staat dat het veel computertijd kost om de berekeningen uit te voeren vanwege het grote aantal dislocaties die moeten worden gesimuleerd. De zogenaamde niet-lokale of rekgradiënt continuïmplasticiteitsmodellen pogen de materiële lengteschaalafhankelijkheid te introduceren door klassieke (lokale) continuïmbeschrijvingen uit te breiden met niet-lokale of rekgradiënt argumenten die op fenomenologische gronden berusten. Ongeacht de precieze formulering, introduceren dergelijke theorieën een materiële lengteschaal als nieuwe materiaalconstante. De waarde daarvan voor een bepaald materiaal moet gefit worden aan experimentele resultaten of aan die van numerieke DDP simulaties.

Als alternatief voor deze fenomenologische niet-lokale modellen wordt in dit proefschrift een nieuwe tweedimensionale niet-lokale continuïmplasticiteitstheorie voorgesteld, die een sterke dislocatiegrondslag heeft. De theorie bestaat uit een continuïmbeschrijving van dislocatiedynamica en de klassieke continuïmkinematica (voor kleine vormingen). De dislocatiedynamica wordt afgeleid van de statistisch gemiddelde bewegingsvergelijkingen van een ensemble van interacterende randdislocaties. In tegenstelling tot fenomenologische rekgradiënt theorieën is de lengteschaal in de voorgestelde theorie inherent niet-constant maar bepaald door de evoluerende dislocatiedichtheid.

Na een korte inleiding over plasticiteitsmodellen in metalen bij verschillende lengteschalen in hoofdstuk 1, wordt in hoofdstuk 2 een overzicht gegeven van een paar recente fenomenologische niet-lokale modellen. Verschillende methodologieën voor de implementatie van de lengteschaal in de theorieën wordt besproken. Met nadruk wordt daarbij aandacht besteed aan de extra (hogere-orde) randvoorwaarden die sommige theorieën vereisen, en de fysieke

interpretatie daarvan.

Hoofdstuk 3 presenteert een stap-voor-stap afleiding van het nieuwe plasticiteitsmodel voor enkelvoudige slip, d.w.z. dislocatiebeweging over parallele glijvlakken. Het model blijkt duidelijk verschillend van bestaande fenomenologische theorieën in zoverre dat het twee gekoppelde diffusie-convectie vergelijkingen met zich meebrengt voor twee dislocatiedichtheidsvelden. Eén van deze velden vertegenwoordigt de dichtheid van geometrisch noodzakelijke dislocaties, een grootheid die algemeen gezien wordt als de belangrijkste oorzaak voor schaalafhankelijke plasticiteit. Verder bevatten deze transportvergelijkingen een bronterm voor dislocatiegeneratie en -annihilatie. Dit zijn reeds lang gevestigde fysieke mechanismen, maar die zijn in al de huidige bestaande continuümplasticiteitsmodellen afwezig, welke, in plaats daarvan, veronderstellen dat de dislocaties beschikbaar zijn wanneer en waar zij voor plastische vervorming nodig zijn.

Vervolgens wordt de theorie aan zijn eerste toets onderworpen, namelijk de analyse van een composietmateriaal dat wordt onderworpen aan zgn. simpele afschuiving. De resultaten worden vergeleken met de DDP simulaties van hetzelfde probleem om de niet-lokale benadering te bevestigen. De numerieke oplossing wordt verkregen door een eindige-elementenmethode. De vrije parameters in de niet-lokale theorie worden gefit aan de overeenkomstige DDP resultaten. Daarna blijkt dat de continuümtheorie in staat is om onderscheid te maken tussen de respons van twee verschillende composieten die slechts verschillen in de vorm van de deeltjes: één waarbij er kanalen van niet-versterkt materiaal zijn en één waarbij plastische deformatie slechts mogelijk is dankzij geometrisch noodzakelijke dislocaties. Tevens voorspelt de niet-lokale theorie een uitgesproken Bauschinger effect dat wordt ondersteund door de DDP resultaten. De vergelijking met de voorspellingen van andere rek gradiënt theorieën benadrukt dat zij bron-beperkte plasticiteit in kleinschalige structuren niet kunnen behandelen.

Een noodzakelijke voorwaarde voor een constitutief model is dat het een voorspellende waarde heeft, d.w.z. dat wanneer de materiaalparameters gefit zijn voor een bepaald probleem, het model voorspellingen kan doen voor andere randwaardeproblemen voor hetzelfde materiaal. In hoofdstuk 4 wordt de theorie daarom toegepast op een probleem met totaal andere randvoorwaarden en vervormingscondities, namelijk het buigen van een één-kristallijne strip waarbij de randen tractievrij zijn in plaats van ondoordringbaar voor dislocaties. De gebruikte parameterwaarden zijn identiek aan die verkregen in hoofdstuk 3. Het buigend moment als functie van buigingshoek alsmede de evolutie van de dislocatiestructuur worden berekend voor verschillende oriëntaties en voor diverse afmetingen. Vergelijking van de resultaten met die van de DDP simulaties toont aan, dat zonder enige extra aanpassing van de parameters, de continuümtheorie zowel het schaalgrootte-effect als de afhankelijkheid van de kristaloriëntatie kan beschrijven.

In hoofdstuk 5 wordt de uitbreiding van de theorie voor enkelvoudige slip tot meervoudige slip aangepakt. Een continuümdislocatiedynamica voor meervoudige slip wordt voorgesteld op grond van die voor enkelvoudige slip, en wederom gekoppeld aan het kinematisch raamwerk van de klassieke kristalplasticiteitstheorie. De sleutel in meervoudige slip is de niet-lokale

interactie tussen de dislocaties op verschillende glijsystemen. Vooruitlopend op een strenge afleiding hiervan, worden diverse interactiewetten besproken op fenomenologische gronden.

Om de mogelijkheden van de theorie in meervoudige slip te onderzoeken, wordt het toegepast op twee randwaardeproblemen. Eén daarvan is de eenvoudige afschuiving van één-kristallijne strip tussen twee stijve en ondoordringbare muren. De essentie van dit probleem is de vorming van grenslagen en de bijbehorende schaalafhankelijkheid voor kristallen die georiënteerd zijn voor symmetrische dubbele slip. Het andere probleem dat wordt bestudeerd is de buiging van één-kristallijne strip met twee glijsystemen (in tegenstelling tot enkelvoudige slip in hoofdstuk 4). Opnieuw worden de overall respons en de evolutie van de dislocatiestructuur geanalyseerd voor verschillende kristaloriëntaties en specimen groottes. Na identificatie van de meest juiste interactiewet, blijken de voorspellingen voor beide problemen in een kwalitatieve en kwantitatieve overeenstemming te zijn met die van de DDP simulaties.

Hoofdstuk 6, tenslotte, behandelt de niet-lokale plasticiteitsberekeningen van spanningsrelaxatie in één-kristallijne dunne lagen op substraten. Spanning bouwt op in deze lagen als gevolg van het verschil in thermische uitzettingscoëfficiënt tussen dunne laag (bijvoorbeeld aluminium of koper) en substraat (typisch silicium), maar wordt gedeeltelijk gerelaxeerd door plasticiteit in de film. Net als in het vorige hoofdstuk worden symmetrische dubbele glijsystemen worden beschouwd. De spanning versus temperatuur en de evolutie van de dislocatiestructuur worden geanalyseerd voor verschillende oriëntaties en filmdikten. Het effect van filmgrootte is gerelateerd aan de vorming van een grenslaag van opgestapelde dislocaties bij de film-substraat interface, waarvan de dikte niet schaalt met de dikte van de film. De dikte van de grenslaag zelf, echter, is afhankelijk van de kristaloriëntatie.