

# 退火铝合金中 Portevin-Le Chatelier 效应的 数值模拟研究\*

江慧丰 张青川<sup>†</sup> 陈忠家 伍小平

(中国科学技术大学,中国科学院材料力学行为和 Design 重点实验室,合肥 230027)

(2005 年 11 月 17 日收到 2005 年 12 月 8 日收到修改稿)

通过综合考虑沉淀动力学和动态应变时效机理,建立了一套具有明确物理内涵的唯象本构模型.并在对不同加载应变率下的单轴拉伸实验的数值模拟中,得到了 3 种类型的 Portevin-Le Chatelier 效应应力曲线.计算结果与实验数据的较好吻合,验证了该模型的有效性.

关键词: Portevin-Le Chatelier 效应, 动态应变时效, 数值模拟

PACC: 6220F, 7210F, 6120J

## 1. 引言

合金材料中的 Portevin-Le Chatelier (PLC) 效应, 通常表现为时域上反复发生的锯齿形屈服 (serrated yielding) 和空域上的应变局域化 (strain localization) 现象<sup>[1-3]</sup>. 作为动态应变时效<sup>[4]</sup> (dynamic strain aging, DSA) 的宏观表现形式, PLC 效应因其所包含的独特的时空非线性特质, 被越来越多的理论和实验学者重新关注<sup>[5-8]</sup>. 自 1921 年法国学者 Portevin 和 Le Chatelier<sup>[9, 40]</sup> 在实验上首次系统研究该效应以来, 很多学者开展了大量的数值模拟工作来研究其微观机理<sup>[11]</sup>. 其中, 对 PLC 效应时域行为, 亦即锯齿形应力-应变 (时间) 曲线的模拟, 长期以来都是众学者关注的课题. 由于 DSA 考虑的是可动位错和溶质原子之间的动态相互作用, 对 PLC 效应时域行为的模拟也可相应的归纳成两类, 即考虑变形过程中不同类型位错密度相互演化的位错动力学模型和基于 Cottrell-Bilby 动力学<sup>[12]</sup> 的考虑位错线周围溶质原子浓度变化的位错-溶质模型. 早在 1986 年, Kubin 和 Estrin 根据可动位错和林位错密度的动态演化规律, 建立了一组启发式的本构方程<sup>[13]</sup>. 与之类似, Ananthakrishna 受到 Oregonator 模型的启发, 提出了一个关于 3 种类型位错相互转化的位错动力学模型<sup>[14]</sup>. 但由于上述位错动力学模型在定量模拟上的

困难, 目前被广泛接受的仍是考虑位错周围溶质原子浓度动态变化的位错-溶质模型<sup>[15-18]</sup>. 近年来, Hahnner 等人以此为基础, 通过引入中间内变量, 即由于溶质原子对可动位错钉扎所引起的额外激活焓, 对位错-溶质模型进行了发展和完善<sup>[19]</sup>. 尽管上述模型在模拟某一特定实验条件下的 PLC 时域行为时能得到比较满意的结果, 但不能通过调节其本构中的参数而得到 3 种类型<sup>[20, 21]</sup> 的 PLC 锯齿形应力-时间曲线. 且没有考虑由于沉淀引起的溶质原子浓度的变化, 仅能局限于溶质原子浓度较稀的合金中 (即溶质原子含量低于该原子在基体金属中极限溶解度的合金). 而大量的研究证明, 在浓的金属固溶体中 (尤其在淬火处理的条件下), 沉淀相的析出和溶解等动力学过程对合金材料塑性行为的影响不容忽视<sup>[22-26]</sup>. 为此, 本文将通过综合考虑沉淀动力学和与 DSA 相关的溶质原子浓度变化, 以位错线周围溶质原子的浓度为内变量, 提出一个更为合理和完善的模型, 并利用该模型对 PLC 效应的时域行为进行系统的研究, 得到了与实验数据比较吻合的数值模拟结果.

## 2. 理论模型

通常, 塑性变形被认为是源于位错的热激活运动. 相应地, 其引起的塑性应变率可用 Arrhenius 型

\* 国家自然科学基金重点项目 (批准号: 10232030) 和面上基金项目 (批准号: 10372098) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: zhangqc@ustc.edu.cn

方程表示为<sup>[27]</sup>

$$\dot{\epsilon} = \nu \Omega \exp(-H/kT), \quad (1)$$

其中,  $\nu$  为位错热激活的尝试频率,  $\nu \Omega$  为所有可动位错完成一次热激活所引起的元应变,  $k$  为 Boltzmann 常数,  $T$  为绝对温度.  $H$  为驱使位错线移动的激活能, 将其视为所有作用在位错上的应力的线性函数<sup>[15]</sup>, 可有  $H = \sigma^* V$ , 其中  $V$  为激活体积. 引入常数  $S_0 = kT/V$ , 将上式整理可得

$$\sigma^* = -\frac{kT}{V} \ln\left(\frac{\dot{\epsilon}}{\nu \Omega}\right) = -S_0 \ln\left(\frac{\dot{\epsilon}}{\nu \Omega}\right). \quad (1^*)$$

而实际作用在位错线上的力应包括: 外加载荷  $\sigma$ , 材料内部的初始内应力  $\sigma_0$ , 长程位错间的相互作用  $h\epsilon^m$  [17] (其中,  $h, m$  为常数, 且  $m < 1$ ), 位错与其周围的溶质原子间的相互作用  $\beta C_s$  ( $\beta$  是常数, 为溶质原子对位错线钉扎的强度因子,  $C_s$  为聚集在位错线周围的溶质原子浓度). 微观上, 还需考虑位错与两种类型沉淀<sup>[28]</sup>的相互作用, 即发生在位错线上较粗大的非均匀沉淀以及发生在材料体中较小的可被位错线切割溶解的沉淀. 在退火材料中, 从固溶体中析出的溶质原子通常以第一种粗大沉淀的形式析出, 其体积分数用  $\Phi_1$  表示, 而可被位错线切割并溶解的第二种沉淀相所起作用甚微, 在本文中忽略其影响. 因此, 位错在热激活运动过程中所受到的应力可表示成如下形式:

$$\sigma^* = \sigma - \sigma_0 - h\epsilon^m - \beta C_s - \gamma_1 \Phi_1, \quad (2)$$

其中,  $\gamma_1$  为常数, 是表示位错与沉淀  $\Phi_1$  相互作用的强度因子. 将方程(1<sup>\*</sup>)代入(2)式中, 整理可得外加应力的表达式:

$$\sigma = \sigma_0 + h\epsilon^m + S_0 \ln\left(\frac{\dot{\epsilon}}{\nu \Omega}\right) + \beta C_s + \gamma_1 \Phi_1. \quad (3)$$

根据改善的 Cottrell-Bilby 型动力学<sup>[12]</sup> (考虑了饱和效应<sup>[29]</sup>), 位错线周围的理想溶质原子浓度应为

$$C_s = C_0 \exp\left[\frac{W}{kT} [1 - \exp(-p_1 t_a^n)]\right], \quad (4)$$

上式中  $C_0$  为固溶体中的名义溶质原子浓度,  $W$  是位错和溶质原子的结合能,  $t_a$  是溶质原子向位错扩散的时效时间, 常数  $n$  是与其扩散方式相关的物理参数.  $p_1 = \exp(-W/kT)t_0^{-n}$  是与溶质原子扩散能力相关的常数<sup>[15]</sup>, 其中  $t_0$  是常数, 表征某一特定应变率下  $t_a$  的最大值. 在 Al-Cu 合金中, Cu 原子与位错的结合能  $W \approx 5.3kT$ <sup>[30]</sup>, 从而易知  $p_1 t_a^n \ll 1$ . 假定溶质原子在沉淀中的组分为常数  $C_p$ , 那么由于第一种类型沉淀的析出, 位错线周围实际的溶质原子浓度

$C_s^*$  必然减小为

$$C_s^* = C_s - \Phi_1 C_p = C_0 \exp\left(\frac{W}{kT}\right) \times [1 - \exp(-p_1 t_a^n)] - \Phi_1 C_p, \quad (5)$$

但正如上文所述, 退火材料中形成的沉淀较粗大且不能被位错切割分解, 因而在试件变形过程中可将  $\Phi_1$  视为常数. 则将方程(5)代入(3)式中, 简化合并为(其中  $\sigma_0^* = \sigma_0 - \beta \Phi_1 C_p + \gamma_1 \Phi_1$  为新的常数)

$$\sigma = \sigma_0^* + h\epsilon^m + S_0 \ln\left(\frac{\dot{\epsilon}}{\nu \Omega}\right) + \beta C_s. \quad (3^*)$$

对于稳态条件, 时效时间  $t_a$  应等于可动位错在障碍前的等待时间  $t_w$ , 根据 Orowan 方程可有

$$t_w = \Omega / \dot{\epsilon}, \quad (6)$$

而对应变率瞬变所引起的过渡行为的测量显示时效时间  $t_a$  并非是塑性应变率  $\dot{\epsilon}$  的瞬态函数, 而应满足一阶弛豫动力学<sup>[15]</sup>

$$\dot{t}_a = 1 - t_a / t_w. \quad (7)$$

对(4)式两边求时间微分, 将(7)式代入, 略去高阶项 (因为  $p_1 t_a^n \ll 1$  为小量, 故  $C_s$  可以近似展开为  $C_m p_1 t_a^n$ ) 整理后可得

$$\dot{C}_s = -n \frac{C_m - C_s}{C_m} \frac{\dot{\epsilon}}{\Omega} C_s + \alpha (C_m - C_s) \left(\frac{C_s}{C_m}\right)^{(n-1)n}, \quad (8)$$

上式中的  $C_m = C_0 \exp(W/kT)$ , 是位错线周围溶质原子的饱和值,  $\alpha$  为常数.

考虑到 PLC 效应发生时的应变率空间非均匀性, 在模拟中可将试件沿长度方向离散成等间隔的  $N$  块 (本文中  $N = 50$ ), 各块之间通过试件内部拉伸载荷处处相等进行耦合. 那么, 方程(3<sup>\*</sup>)和(8)构成的非线性系统还需如下机器方程成立

$$\frac{v}{L} = \frac{\dot{\sigma}}{M} + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \dot{\epsilon}_i, \quad (9)$$

这里的  $v$  是夹头的定拉伸速率,  $L$  是试件的长度,  $M$  为机器和试件的联合弹性模量,  $\dot{\epsilon}_i$  是试件第  $i$  段的应变率. 若在  $t = t_n$  时刻, 已知各段的  $\epsilon_n, \dot{\epsilon}_n, C_{s_n}$ , 那么, 对于下一时刻  $t = t_{n+1}$ , 可以由  $\dot{\epsilon}_n$  先求得  $\epsilon_{n+1}$ , 再通过方程(8)(9)求得  $C_{s_{n+1}}$  和  $\sigma_{n+1}$ , 最后, 通过方程(3<sup>\*</sup>)可以求出  $\dot{\epsilon}_{n+1}$ . 这样, 方程(3<sup>\*</sup>)(8)和(9)就形成了一个闭合的解空间, 在给定初始条件下, 能通过对时间的迭代积分求解.

### 3. 实验及数值模拟结果

本文对不同加载应变率下的单轴拉伸实验进行

了数值模拟,并将与 Al-4% Cu 材料的拉伸实验结果进行对比.实验试件的几何尺寸为 50mm × 20mm × 3mm,在拉伸前对所有试件均进行了退火处理,具体细节可参考文献 [31—33].材料初始状态的微观非均匀性,则通过在各块上叠加不超过初始内应力  $\sigma_0^*$  幅值 5% 的随机应力扰动来实现.计算中采用的各

模型参数取值如下:  $\sigma_0^* = 35\text{MPa}$ ,  $h = 380\text{MPa}$ ,  $m = 0.285$ ,  $S_0 = 1\text{MPa}$ ,  $\nu = 10^{11}\text{Hz}$ ,  $\Omega = 3 \times 10^{-4}$ ,  $\beta = 100\text{MPa}$ ,  $n = 1/\chi$  (代表溶质原子以管扩散的方式向位错线偏聚<sup>[16,19]</sup>)  $C_m = 0.18$ ,  $\alpha = 0.12\text{Hz}$ ,  $M = 3 \times 10^4\text{MPa}$ ,  $L = 50\text{mm}$ .

由上图可以看出,随着加载应变率的减小,锯齿

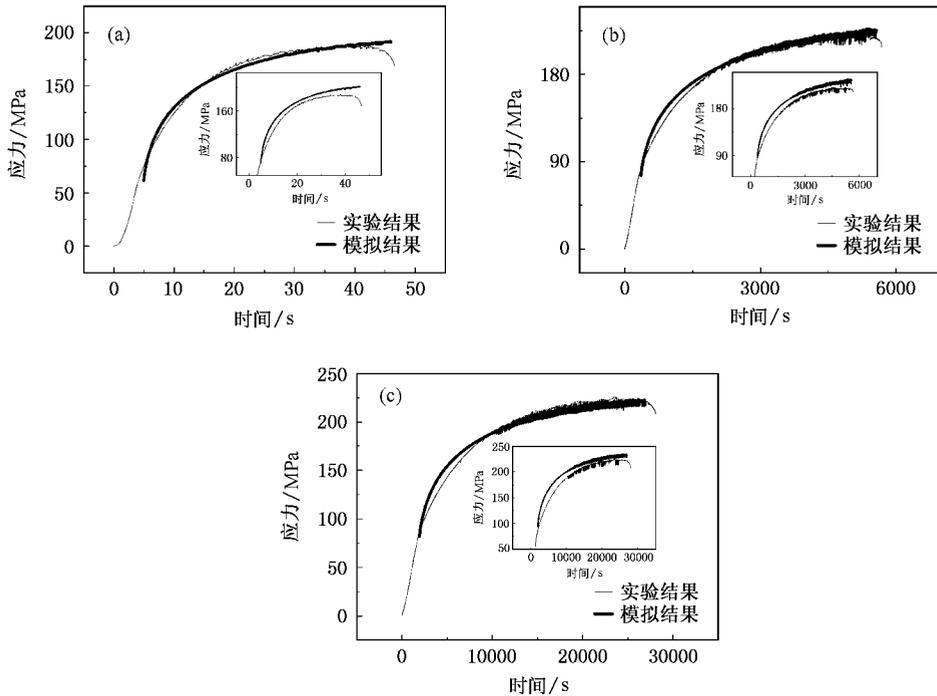


图 1 不同的加载速率下,数值模拟和实验测量所得的 3 类 PLC 效应应力-时间曲线 (a)  $6 \times 10^{-3}\text{s}^{-1}$ , (b)  $5 \times 10^{-5}\text{s}^{-1}$  (c)  $10^{-5}\text{s}^{-1}$  (为更好的对比应力锯齿,插图中的模拟曲线均向上平移 10MPa)

形应力幅值增大 (a)(b)(c)三图中分别给出了 3 种类型的锯齿形应力流动.由于长程位错间的相互作用是须考虑诸多因素相互作用的复杂问题,本文中采用  $h\epsilon^m$  近似,因此根据理论模型计算所得的模拟结果在局部细节上与实验曲线略有差异,但整体的走势以及出现 PLC 效应的临界时间均与实验曲线有较好的吻合.

## 4. 结 论

本文基于塑性变形过程中材料内部微结构的演

化及其相互作用的分析,建立了可用于求解合金材料中 PLC 效应(锯齿形屈服问题)的唯象本构模型.该模型以可动位错周围溶质原子的浓度为内变量,综合考虑了位错与溶质原子间的复杂相互作用以及沉淀动力学所引起的材料内部溶质原子浓度的影响.依据于该模型的数值模拟结果能较好地拟合实验结果,表明所建立的理论是有效的.

[1] Bell J F 1973 *Encyclopedia of Physics, Mechanics of Solids I* (Berlin: Springer-Verlag) p41, 649  
[2] Munz D, Macherath E 1966 *Z. Metallkd* **57** 552

[3] Mulford R A, Kocks U F 1979 *Acta Metall.* **27** 1125  
[4] Cottrell A H 1953 *Dislocations and plastic flow in crystals* (London: Oxford University Press)

- [ 5 ] Ananthakrishna G , Noronha S J , Fressengeas C *et al* 1999 *Phys. Rev. E* **60** 5455
- [ 6 ] D 'Anna G , Nori F 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 4096
- [ 7 ] Bharathi M S , Lebyodkin M , Ananthakrishna G *et al* 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 165508
- [ 8 ] Chihab K , Fressengeas C 2003 *Mater. Sci. Eng. A* **356** 102
- [ 9 ] Le Chatelier M A 1909 *Revue de Metallurgie* **6** 914
- [ 10 ] Portevin A , Le Chatelier F 1923 *Comp. Rend Acad Sci. Paris.* **176** 507
- [ 11 ] Rizzi E , Hahner P 2004 *Int. J. Plasticity* **20** 121
- [ 12 ] Cottrell A H , Bilby B A 1949 *Proc. R. Soc. Lond.* **B 62** 229
- [ 13 ] Estrin Y , Kubin L P 1986 *Acta Metall.* **34** 2455
- [ 14 ] Ananthakrishna G , Sahoo D 1981 *J. Phys. D : Appl. Phys.* **14** 2081
- [ 15 ] McCormick P G 1988 *Acta Metall.* **36** 3061
- [ 16 ] Lebyodkin M , Brechet Y , Estrin Y *et al* 1996 *Acta Mater.* **44** 4531
- [ 17 ] Chen Z J , Zhang Q C , Jiang Z Y *et al* 2004 *J. Mater. Sci. Technol.* **20** 535
- [ 18 ] Chen Z J , Zhang Q C , Wu X P 2005 *Europhys. Lett.* **71** 235
- [ 19 ] Hahner P , Zigenbein A , Rizzi E *et al* 2002 *Phys. Rev. B* **65** 134109
- [ 20 ] Chihab K , Estrin Y , Kubin L P 1987 *Scripta Metall.* **21** 203
- [ 21 ] Jiang H F , Zhang Q C , Jiang Z Y *et al* 2005 *Chin. Phys. Lett.* **22** 99
- [ 22 ] Pink E , Grinberg A 1982 *Acta Metall.* **30** 2153
- [ 23 ] Hayes R W , Hayes W C 1984 *Acta Metall.* **32** 259
- [ 24 ] Jiang H F , Zhang Q C , Xu Y H *et al* 2006 *Acta Phy. Sin.* **55** in press ( in Chinese )[ 江慧丰、张青川、徐毅豪等 2006 物理学报 **55** 已接受发表 ]
- [ 25 ] Zhao H , Du Z W , Zhou T T *et al* 2004 *Acta Phy. Sin.* **53** 1251 ( in Chinese )[ 赵 辉、杜志伟、周铁涛等 2004 物理学报 **53** 1251 ]
- [ 26 ] Du Z W , Zhou T T , Zhao H *et al* 2004 *Acta Phy. Sin.* **53** 3601 ( in Chinese )[ 杜志伟、周铁涛、赵 辉等 2004 物理学报 **53** 3601 ]
- [ 27 ] Kocks U F , Argon A S , Ashby M F 1975 *Progr. Mater. Sci.* **19** 1
- [ 28 ] Brechet Y , Estrin Y 1995 *Acta Metall.* **43** 955
- [ 29 ] Louat N 1981 *Scripta Metall.* **15** 1167
- [ 30 ] Fleisher R L 1963 *Acta Metall.* **11** 203
- [ 31 ] Zhang Q C , Jiang Z Y , Jiang H F *et al* 2005 *Int. J. Plasticity* **21** 2150
- [ 32 ] Jiang H F , Zhang Q C , Sun L *et al* 2006 *Chin. Phys.* ( accepted )
- [ 33 ] Lu J Y , Jiang Z Y , Zhang Q C *et al* 2006 *Acta Phy. Sin.* ( accepted )( in Chinese )[ 卢俊勇、蒋震宇、张青川等 2006 物理学报 已接受 ]

## Numerical simulation of the Portevin-Le Chatelier effect in annealed aluminum alloys <sup>\*</sup>

Jiang Hui-Feng Zhang Qing-Chuan<sup>†</sup> Chen Zhong-Jia Wu Xiao-Ping

( CAS Key Laboratory of Mechanical Behavior and Design of Materials ,University of Science and Technology of China , Hefei 230027 ,China )

( Received 17 November 2005 ; revised manuscript received 8 December 2005 )

### Abstract

By taking into account of the precipitate kinetics and the dynamic strain aging mechanism , a phenomenological model with clear physical origin is established in this paper . Three types of serrated flow in the Portevin-Le Chatelier effect is reproduced by the numerical simulations of the uniaxial tensile tests with different applied strain rates . The computational results are found in good agreement with the experimental curves , which testifies the validity of the present model .

**Keywords :** Portevin-Le Chatelier effect , dynamic strain aging , numerical simulation

**PACC :** 6220F , 7210F , 6120J

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant Nos. 10232030 and 10372098 ).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail zhangqc@ustc.edu.cn