

位错与溶质原子间动态相互作用的数值模拟研究^{*}

江慧丰¹⁾²⁾ 张青川^{2)†} 陈学东¹⁾ 范志超¹⁾ 陈忠家²⁾ 伍小平²⁾

1) (合肥通用机械研究院, 国家压力容器与管道安全工程技术研究中心, 合肥 230031)

2) (中国科技大学, 中科院材料力学行为和设计重点实验室, 合肥 230027)

(2006 年 9 月 22 日收到, 2006 年 11 月 4 日收到修改稿)

通过 Cottrell-Bilby 型溶质动力学模型, 对位错线周围的溶质原子浓度随应变率的变化进行了研究, 并得到了三种不同的位错-溶质相互作用方式: 在低应变率时, 位错被溶质原子气团充分钉扎, 它上面的溶质浓度近似达到饱和; 在高应变率时, 脱钉作用占主导地位, 位错运动几乎不受溶质影响; 而在中间应变率时, 位错反复经历着钉扎和脱钉过程, 动态应变时效发生. 此外, 通过对模型方程的推导, 还自然地得到了平衡状态下率相关流动应力与应变率之间的 N 形关系曲线.

关键词: 位错, 溶质原子, 动态应变时效, 数值模拟

PACC: 6170G, 6170E, 6220F, 6120J

1. 引言

研究证明, 溶质原子对合金材料的宏观力学行为影响颇大. 比如, (在纯金属中加入溶质元素而得到的)合金材料的强度通常都比其基体纯金属的强度高出很多^[1-3]. 而微观上位错和溶质原子间的相互作用也影响着合金材料的变形方式. 例如, 在室温下低碳钢的单向拉伸试验中, 拉伸应力将经历一个从上屈服点跌落到下屈服点的不连续转折, 并在下屈服点后伴随着一个应力平台的塑性失稳过程; 在微观上, 这种屈服现象通常对应着位错突然挣脱溶质原子气团的束缚并且大量增殖的过程. 由于在室温时低碳钢中的溶质原子扩散能力较弱, 一旦位错挣脱溶质气团束缚, 在后续的变形过程中, 溶质原子将无法赶上可动位错并对其实施有效钉扎. 因此, 在经过应力平台区域后, 塑性变形将以宏观均匀稳定的方式进行. 此时, 加工硬化效应将起主要作用. 而当低碳钢在高温下进行拉伸时, 由于溶质原子的扩散能力(随温度升高)得到了增强, 在塑性变形过程中, 溶质原子能赶上脱钉的可动位错并对其实施钉扎; 与之相应, 在宏观应力-应变曲线上也将出现反复的锯齿形屈服现象, 亦即发生了 Portevin-Le

Chatelier (PLC) 效应^[4-9]. 这种变形过程中位错与溶质原子间的强烈的相互作用, 也被称之为动态应变时效^[10] (dynamic strain aging, DSA) 现象. 上述这些表现迥异的宏观力学行为与微观上(不同形式的)位错和溶质原子间相互作用的密切对应, 意味着开展微观上这两种缺陷(位错和溶质原子)间相互作用的研究将具有一定的理论意义.

本文将基于 Cottrell-Bilby 型^[11]溶质动力学模型, 对位错线周围的溶质原子浓度随加载应变率的变化进行了研究, 进而分析了加载应变率对位错-溶质相互作用的影响. 此外, 还通过该模型得到了平衡状态下率相关流动应力和应变率之间的 N 形关系曲线, 并探讨了发生塑性失稳(即 PLC 效应)的条件.

2. 理论模型

合金材料中由于溶质原子的存在, 导致理想晶格的扭曲、错配, 进而在溶质原子周围产生应力场. 该应力场与位错引起的应力场互相作用, 使得溶质原子向位错核附近扩散, 并在位错线附近形成所谓的 Cottrell 溶质原子气团以降低系统的总能量. 如果位错线能无限容纳溶质原子, 那么上述的扩散动力

^{*} 国家自然科学基金重点项目(批准号: 10232030)和国家自然科学基金(批准号: 10372098)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: zhangqc@ustc.edu.cn

学将满足 $t_a^{2/3}$ 的时间依赖性^[10] ,其中 t_a 为溶质原子向位错扩散的时效时间.而更为合理的情况是位错线上仅能容纳有限的溶质原子,即须考虑溶质原子的饱和效应^[12] ,则位错线附近的溶质原子浓度满足改进的 Cottrell-Bilby 型动力学:

$$C_s = C_m[1 - \exp(-p_1 t_a^n)], \quad (1)$$

其中 C_m 是溶质原子浓度 C_s 的饱和值, t_a 是溶质原子向位错扩散的时效时间, $p_1 = \exp(-W/kT)t_0^{-n}$ 是与溶质原子扩散能力相关的常数^[13] ;其中 t_0 是常数,表征某一特定应变率下 t_a 的最大值; W 是位错和溶质原子的结合能.由于作者所在实验室对 Al-4% Cu 合金中的塑性失稳现象开展了系统的实验和理论研究工作^[6,7,14-16] ,积累了大量该合金材料的相关数据,故本文将以 Al-Cu 合金为样本,确定模型中所需的一切参数.但如此处理并不影响该模型的普适性,也就是说,只需调整相应参数,其他合金材料也可以通过该模型来进行研究.在 Al-Cu 合金中, Cu 原子与位错的结合能 $W \approx 5.3 kT$ ^[17] ,从易知 $p_1 t_a^n \ll 1$. 常数 $n = 1/3 - 2/3$ 是与溶质原子扩散方式相关的物理参数,不同的 n 对应着不同的扩散过程,对于体扩散 $n = 2/3$,而管扩散 $n = 1/3$.本文所研究的材料为面心立方的 Al-Cu 合金,室温变形时主要是管扩散起作用^[18] ,故取 $n = 1/3$.

从微观上看,位错的运动是不连续的^[19] ,它常常会被林位错等障碍所阻拦.因此,位错线上的溶质原子浓度必然依赖于溶质原子向位错扩散的时效时间 t_a ,进而也依赖于位错在障碍前的等待时间 t_w .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

$$t_w = \Omega / \dot{\epsilon}^p, \quad (2)$$

其中 Ω 为所有可动位错完成一次热激活所引起的元应变, $\dot{\epsilon}^p$ 为塑性应变率.也就是说,对于某个特定的塑性应变率,时效时间 t_a 的平衡值为上式所得的 t_w 值.但实际发生塑性变形时,变形材料常会处于失稳状态.对于塑性应变率的突然变化(实际上,在 PLC 效应中这种失稳很常见),溶质原子扩散的时效时间不能做出瞬态响应,而只能以渐变的形式趋近于此时刻塑性应变率所对应的稳态值.亦即时效时间 t_a 不是塑性应变率 $\dot{\epsilon}^p$ 的瞬态函数,而应满足一阶弛豫动力学^[13] :

$$\dot{t}_a = 1 - t_a/t_w. \quad (3)$$

将方程(1)式两边对时间求微分,并把(3)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

$$\dot{C}_s = -\alpha \frac{\dot{\epsilon}^p}{\Omega} C_s + \beta (C_m - C_s) \left(\frac{C_s}{C_m} \right)^{(n-1)/n}, \quad (4)$$

其中 $\alpha = n \frac{C_m - C_s}{C_m}$, β 为特征常数且具有频率的量纲.本文中,为模拟计算的方便,令 α 和 β 均为常数(经验证,这一简化处理对模拟结果影响甚微).很显然,上述表征位错线周围溶质原子浓度的动力学方程(4)的右边包含两个互相竞争的项:第一项,脱钉项,表示位错通过热激活的方式克服障碍并摆脱溶质原子气团的束缚继续运动,因此, C_s 以正比于塑性应变率 $\dot{\epsilon}^p$ 的频率归零;第二项,时效项,表示位错被障碍阻拦时,溶质通过扩散的方式对其进行时效,且考虑到位错线上溶质的饱和效应,时效的频率应该与位错线上已有的溶质原子浓度 C_s 成反比[因为这里 n 取 $1/3$,故方程右边第二项中的指数 $(n-1)/n = -2$].

那么,当塑性应变率为常数时,上述两个竞争项将逐渐趋于平衡,位错线周围的溶质原子浓度也将达到一个稳态值.也就是说,对于某一个固定的塑性应变率,可根据方程(4),令 $\dot{C}_s = 0$,求出该应变率下所对应的溶质原子浓度的稳态值.相应地,与该塑性应变率相关的流动应力分量^[20] $\sigma_{nl} = S_0 \ln \frac{\dot{\epsilon}^p}{\omega \Omega} + \gamma C_s$ 的稳态值也可随之求出(其中, S_0 是流动应力对应应变率变化的瞬时响应系数, ν 为位错热激活的尝试频率, γ 为溶质原子对位错的钉扎系数).

那么,当塑性应变率为常数时,上述两个竞争项将逐渐趋于平衡,位错线周围的溶质原子浓度也将达到一个稳态值.也就是说,对于某一个固定的塑性应变率,可根据方程(4),令 $\dot{C}_s = 0$,求出该应变率下所对应的溶质原子浓度的稳态值.相应地,与该塑性应变率相关的流动应力分量^[20] $\sigma_{nl} = S_0 \ln \frac{\dot{\epsilon}^p}{\omega \Omega} + \gamma C_s$ 的稳态值也可随之求出(其中, S_0 是流动应力对应应变率变化的瞬时响应系数, ν 为位错热激活的尝试频率, γ 为溶质原子对位错的钉扎系数).

3. 模拟结果及讨论

图 1 给出了平衡状态下溶质原子浓度、率相关流动应力与应变率的关系,并比较了参数 α 和 β 的不同取值对它们的影响,计算中所采用的各模型参数取值如下: $S_0 = 1 \text{ MPa}$, $\nu = 10^{11} \text{ Hz}$, $\Omega = 3 \times 10^{-4}$, $n = 1/3$, $C_m = 0.18$, $\gamma = 80 \text{ MPa}$.

由图 1(a)和(b)的整体趋势可以看出,平衡状态(位错运动和溶质扩散处于动态平衡)时位错线周围的溶质原子浓度随应变率的增大而减小,具体又可分为三种不同的形式:两个缓变的分枝和一个迅速下降的分枝.当应变率较低时,位错运动缓慢,溶质原子有足够的时间对其进行时效,故位错线附近的溶质原子浓度近似处于溶质原子的饱和值 $C_m =$

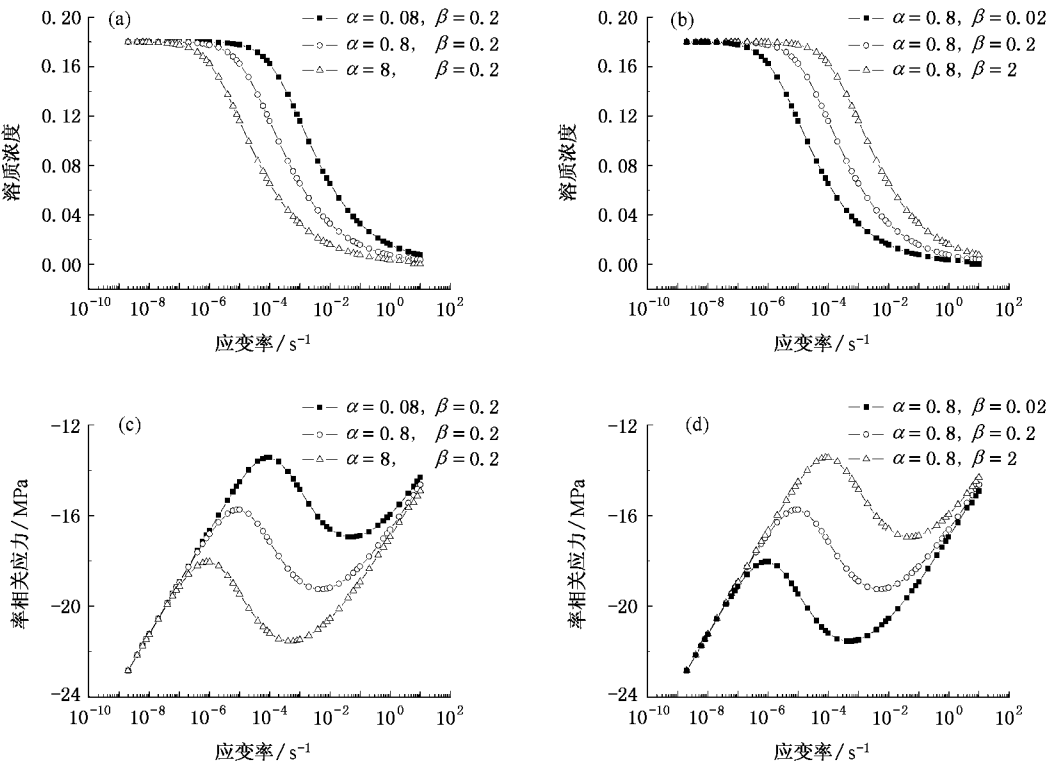


图 1 平衡状态下溶质原子浓度 率相关流动应力与应变率的关系

0.18 此时 ,溶质对位错的钉扎作用最强 .在该区域内 ,随着加载应变率的提高 ,溶质原子浓度仅作略微的下降 ,位错与溶质原子间的相互作用始终表现为溶质对位错的有效钉扎 .同样缓变的情况发生在应变率较高时 ,此时位错运动速度极快 ,溶质原子无法跟上位错的运动 ,因而位错周围的溶质原子浓度近似为固溶体内的溶质溶解度 ,对于室温下的 Al-Cu 合金而言 ,约为 2×10^{-4} ;此时 ,溶质对位错的运动几乎没有影响 ,位错与溶质原子间的作用最弱 .这两种缓变的过程对应于系统的稳定状态 ,若加载应变率处于这两个区间内则变形稳定 .但若变形发生在适中的应变率范围内 ,溶质原子浓度随应变率的增加迅速下降 ,此时 ,位错和溶质原子间的相互作用处于一种动态的反复状态 ,位错反复经历着被溶质原子钉扎和摆脱溶质气团束缚的脱钉这两个过程 ,变形处于失稳状态 .

图 1(c)和(d)则给出了平衡状态下率相关流动应力 σ_{nl} 与应变率之间的关系 ,可以看出所得到的曲线呈 N 形 :在应变率较低或较高时 ,率相关流动应力随应变率的增加而增加 ,即其应变率敏感(strain rate sensitivity , SRS)系数为正 ,变形稳定 ;而在中间应变率时 ,应力的 SRS 为负 ,变形失稳 .值得一提的

是 ,Penning 曾通过纯粹的数学推导提出类似的 N 形曲线假设^[21] ,较好地解释了 PLC 效应出现的条件 ,即流动应力的 SRS 为负 .在此基础上 ,Kubin 和 Estrin^[22-23]以及 Lebyodkin 等人^[24-26]也在各自的本构模型中强制引入该 N 形关系 ,对 PLC 效应独特的时域和空域特性进行了模拟 ,并得到了较满意的结果 .然而 ,从动力学观点看 ,强制执行这样的假设还有待商榷^[27] .与之相比 ,本文基于溶质动力学模型 ,经一系列推导后得到的 N 形关系曲线应该更为合理和自然 .

此外 ,上图中还给出了脱钉系数 α 和时效率 β 对上述两个参量(C_s 和 σ_{nl})与应变率之间关系的影响 .由图 1 所示 ,随着 α 的减小或 β 的增大 ,出现负的 SRS 的应变率区间将向应变率较大方向平移 .脱钉系数 α 表征了位错和溶质原子间结合作用的强弱 ,这种结合作用越强 ,则位错克服障碍所引起的脱钉效应越显著 ,而时效率 β 则表征了溶质原子的扩散速度 ,其值与变形温度相关 ,变形温度越高则溶质扩散性越强 .这就解释了在位错和溶质原子间相互作用较强的体心立方合金如低碳钢中 ,PLC 效应通常发生在较高的温度范围内 ;而对于位错和溶质作用较弱的面心立方合金如 Al 合金中 ,该效应在室温

下就很显著。

4. 结 论

本文基于 Cottrell-Bilby 型溶质动力学模型 ,对位错线周围的溶质原子浓度随加载应变率的变化进行了研究 ,并得到了三种不同的位错-溶质相互作用

方式 :低应变率时 ,位错被溶质充分钉扎 ;高应变率时 ,位错运动几乎不受溶质影响 ;中间应变率时 ,DSA 发生 ,位错反复经历被溶质钉扎和摆脱溶质束缚的脱钉过程 .此外 ,通过对模型方程的推导 ,还自然地得到了平衡状态下率相关流动应力和应变率之间的 N 形关系曲线 .

[1] Mott N F , Nabarro F R 1940 *Proc . R . Soc .* **52** 86

[2] Dieter G E 1986 *Mechanical Metallurgy* (New York : McGraw-Hill) p203

[3] Nabarro F R 1977 *Phil . Mag .* **35** 613

[4] Le Chatelier M A 1909 *Revue de Metallurgie* **6** 914

[5] Portevin A , Le Chatelier F 1923 *Comp . Rend Acad Sci . Paris* **176** 507

[6] Jiang H F , Zhang Q C , Xu Y H , Wu X P 2006 *Acta Phys . Sin .* **55** 409 (in Chinese)[江慧丰、张青川、徐毅豪、伍小平 2006 物理学报 **55** 409]

[7] Lu J Y , Jiang Z Y , Zhang Q C , Jiang H F , Liu H W 2006 *Acta Phys . Sin .* **55** 3558 (in Chinese)[卢俊勇、蒋震宇、张青川、江慧丰、刘颢文 2006 物理学报 **55** 3558]

[8] Jiang H F , Zhang Q C , Sun L , Wu X P 2006 *Chin . Phys .* **15** 1051

[9] Xiang G F , Zhang Q C , Liu H W , Jiang H F , Wu X P 2006 *Chin . Phys .* **15** 2378

[10] Cottrell A H 1953 *Dislocations and Plastic Flow in Crystals* (London : Oxford University Press)

[11] Cottrell A H , Bilby B A 1949 *Proc . R . Soc . Lond . B* **62** 229

[12] Louat N 1981 *Script . Metall .* **15** 1167

[13] McCormick P G 1988 *Acta Metall .* **36** 3061

[14] Zhang Q C , Jiang Z Y , Jiang H F , Chen Z J , Wu X P 2005 *Int . J . Plasticity* **21** 2150

[15] Chen Z J , Zhang Q C , Wu X P 2005 *Europhy . Lett .* **71** 235

[16] Jiang Z Y , Zhang Q C , Jiang H F , Chen Z J , Wu X P 2005 *Mater . Sci . Eng . A* **403** 154

[17] Fleisher R L 1963 *Acta Metall .* **11** 203

[18] Nortmann A , Schiwink C 1997 *Acta Mater .* **45** 2043

[19] Miguel M C , Vespignani A , Zapperi S , Weiss J , Grasso J R 2001 *Nature* **410** 667

[20] Jiang H F , Zhang Q C , Chen Z J , Wu X P 2006 *Acta Phys . Sin .* **55** 2856 (in Chinese)[江慧丰、张青川、陈忠家、伍小平 2006 物理学报 **55** 2856]

[21] Penning P 1972 *Acta Metall .* **20** 1169

[22] Kubin L P , Estrin Y 1985 *Acta Metall .* **33** 397

[23] Kubin L P , Estrin Y 1990 *Acta Metall . Mater .* **38** 697

[24] Lebyodkin M , Brechet Y , Estrin Y , Kubin L P 1995 *Phys . Rev . Lett .* **74** 4758

[25] Lebyodkin M , Brechet Y , Estrin Y , Kubin L P 1996 *Acta Mater .* **44** 4531

[26] Lebyodkin M , Dunin-Barkowskii L , Brechet Y , Estrin Y , Kubin L P 2000 *Acta Mater .* **48** 2529

[27] Fressengeas C , Beaudoin A J , Lebyodkin M , Kubin L P , Estrin Y 2005 *Mater . Sci . Eng . A* **400** 226

Numerical simulation of the dynamic interactions between dislocation and solute atoms^{*}

Jiang Hui-Feng¹⁾²⁾ Zhang Qing-Chuan^{2)†} Chen Xue-Dong¹⁾ Fan Zhi-Chao¹⁾ Chen Zhong-Jia²⁾ Wu Xiao-Ping²⁾

1) (*National Technology Research Center on Pressure Vessel and Pipeline Safety Engineering ,
Hefei General Machinery Research Institute , Hefei 230031 , China*)

2) (*Chinese Academy of Science Key Laboratory of Mechanical Behavior and Design of Materials ,
University of Science and Technology of China , Hefei 230027 , China*)

(Received 22 September 2006 ; revised manuscript received 4 November 2006)

Abstract

Using the Cottrell-Bilby kinetics model for solute atoms , evolution of the solute concentration around dislocation line has been investigated with respect to the strain rate . Three types of interactions between dislocation and solutes were obtained : At low strain rates , the dislocation is effectively pinned by its condensed solute cloud and the solute concentration remains almost at its saturation value . At high strain rates , the npinning effect predominates and dislocation moves at high velocity with little solute disturbance . While at the intermediate strain rates , the aging and unpinning effects take place alternately and dynamic strain ageing operates . Moreover , the N-shaped relationship between the rate-dependent flow stress and strain rate has also been naturally deduced from the model equations without additional assumptions .

Keywords : dislocation , solute atoms , dynamic strain aging , numerical simulation

PACC : 6170G , 6170E , 6220F , 6120J

^{*} Project supported by the State Key Program of National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10232030) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10372098).

[†] Corresponding author . E-mail : zhangqc@ustc.edu.cn