

## 一种预测材料蠕变速率的新模型\*

李菁田<sup>1)</sup> 王建录<sup>2)</sup> 张邦强<sup>2)</sup> 荣曦明<sup>3)</sup> 宁西京<sup>1)†</sup>

1)(复旦大学现代物理研究所, 上海 200433)

2)(东方汽轮机有限公司, 德阳 618000)

3)(复旦大学光科学与工程系, 上海 200433)

(2013年6月17日收到; 2013年10月12日收到修改稿)

长期以来, 由于对材料蠕变过程缺乏清晰的微观物理描述, 人们均使用经验公式预测稳态蠕变速率, 这导致预测结果的不可靠. 将单原子统计模型拓展到该领域, 在原子扩散水平上建立了一个预测材料稳态蠕变速率的模型. 为了检验该模型的可靠性, 实验测量了 42CrMoA, 2Cr12Ni, 1Cr12Mo 三种材料的稳态蠕变速率. 所获得的实验结果以及其他文献的实验测试结果均与新模型的计算结果相符合.

关键词: 蠕变速率, 统计物理, 单原子模型

PACS: 81.05.Bx, 34.20.Cf, 62.20.Hg

DOI: 10.7498/aps.63.028101

## 1 引言

对于一般金属材料, 当对其施加一个低于屈服强度的应力时, 材料会发生弹性形变, 而当该应力撤去后材料会恢复原状. 然而, 如果在高温条件下长时间施加应力, 即使该应力小于屈服强度, 金属材料也会发生缓慢的塑性形变, 即所谓的蠕变. 以镍基高温合金为例, 它广泛应用于制造燃气轮机叶片(如飞机发动机叶片), 其服役温度通常为 1000 K 左右. 由于运转过程中的离心应力作用, 该材料会发生蠕变而使得叶片的微观组织结构发生变化, 最终导致断裂. 显然, 预测金属材料的蠕变速率(服役寿命)具有重要的实际应用价值. 近百年来, 人们在这一方面做了大量的实验工作<sup>[1-4]</sup>. 但是到目前为止, 准确预测一种材料的服役寿命仍面临很多困难, 这是因为温度和应力对蠕变速率都有显著影响. 当材料的服役温度或应力固定不变时, 从实验上获取一条蠕变寿命-应力( $L-\sigma$ )曲线(或蠕变寿命-温度( $L-T$ )曲线)便可预测材料的服役寿命, 然而这样的测试大多需要耗费数万小时. 而事实上, 同一种材料可能用作不同的工件, 其服役温度

和应力都不固定, 那么其寿命预测便需要从实验上确定很多条  $L-\sigma$  曲线和  $L-T$  曲线. 这不仅造成工程上的巨大困难, 而且严重拖延新材料的研发周期. 显然, 如果能够找到蠕变速率关于温度和应力的普适函数, 则只需在几个温度点和应力点进行测试便可普遍预测给定材料的蠕变速率, 进而推知其服役寿命.

长期以来, 由于对蠕变过程没有一个清晰的微观物理描述, 人们均使用从实验中总结的经验公式预测稳态蠕变速率<sup>[5-8]</sup>. 这些公式形式各异, 导致了速率预测结果的不可靠. 如果能够从微观物理模型出发建立统一的理论方法, 那将从根本上解决这一问题. 最近提出的单原子统计模型已成功地应用于预测材料的稳定性及原子扩散速率等<sup>[9-13]</sup>. 本文将其拓展到预测材料蠕变速率, 建立了一个从微观物理机制上解释和预测材料稳态蠕变速率的新模型. 为了检验该模型的可靠性, 我们测试了 42CrMoA, 2Cr12Ni, 1Cr12Mo 三种材料的稳态蠕变速率关于应力和温度的变化曲线, 此实验结果与新模型的计算结果相一致. 此外, 我们还从相关文献上获得了材料 IN738LC, K435 的稳态蠕变速率关于应力和温度的变化曲线, 这些曲线明显违背传

\* 国家自然科学基金(批准号: 51071048)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: xjning@fudan.edu.cn

统的经验公式, 但与本文建立的模型的计算结果相符合.

## 2 模型与计算方法

### 2.1 蠕变速率的传统表达

材料的蠕变过程一般经历减速蠕变、稳态蠕变和加速蠕变三个过程, 其中稳态蠕变时间最长, 它决定了材料的服役寿命. 稳态蠕变速率的大小除取决于材料的化学组分、组织结构等固有特性外, 还与温度和应力这两个外部变量有关. 实验测试表明, 在高温和低应力条件下大多数材料的稳态蠕变速率  $\dot{\epsilon}$  与应力  $\sigma$  有如下关系<sup>[14]</sup>:

$$\dot{\epsilon} = A_1 \sigma^n, \quad (1)$$

式中,  $A_1$  为与材料特性和温度有关的系数,  $n$  为正实数, 称为应力指数. 符合(1)式的蠕变称为幂律蠕变. 而在低温或高应力条件下, 该幂律关系失效, 稳态蠕变速率与应力的关系表示为<sup>[7]</sup>

$$\dot{\epsilon} = A_2 \exp(B\sigma), \quad (2)$$

式中  $A_2$  和  $B$  是与应力无关的系数. 显然, (1) 和 (2) 式可以归纳为<sup>[15]</sup>

$$\dot{\epsilon} = A_3 (\sinh(\alpha\sigma)), \quad (3)$$

式中  $A_3$  和  $\alpha$  是与应力无关的系数, 但与温度有关. 后来人们从实验中发现了  $\dot{\epsilon}$  与温度的具体函数关系, 即<sup>[16]</sup>

$$\dot{\epsilon} = A_4 \exp\left(-\frac{Q_c}{RT}\right), \quad (4)$$

式中,  $A_4$  是与材料特性和应力有关的系数,  $R$  和  $T$  分别是气体常数和绝对温度,  $Q_c$  为蠕变表观激活能. 综合(1), (4) 式就可得到蠕变速率与应力、温度的关系<sup>[17]</sup>

$$\dot{\epsilon} = A_5 (\sinh(\alpha\sigma))^n \exp\left(-\frac{Q_c}{RT}\right), \quad (5)$$

在高温和低应力条件下, (5) 式可简化为

$$\dot{\epsilon} = A_6 \sigma^n \exp\left(-\frac{Q_c}{RT}\right), \quad (6)$$

(6) 式就是通常所指的蠕变本构方程<sup>[18]</sup>.

对于给定的材料, (5), (6) 式中的应力指数  $n$ , 激活能  $Q_c$  都是与应力和温度无关的常数, 因此只需在几个温度点上测量  $L-\sigma$  曲线便可确定  $n$ ,  $Q_c$  和  $A_5$  (或  $A_6$ ), 从而得到该材料的稳态蠕变速率, 进而预测其服役寿命. 然而, 人们发现  $n$  和  $Q_c$  都可能是力和温度的函数. 图 1 给出了 In738LC 合金和

K435 合金的稳态蠕变速率的实验测试曲线<sup>[19]</sup>. 从图 1 可以看出, 对于 K435 合金, 随着应力的增大  $n$  从 3.8 增大为 11.0; 对于 IN738LC 合金,  $Q_c$  随着温度的改变从 420 kJ/mol 增大到 730 kJ/mol. 这说明 (5), (6) 式的适用范围是有限的.

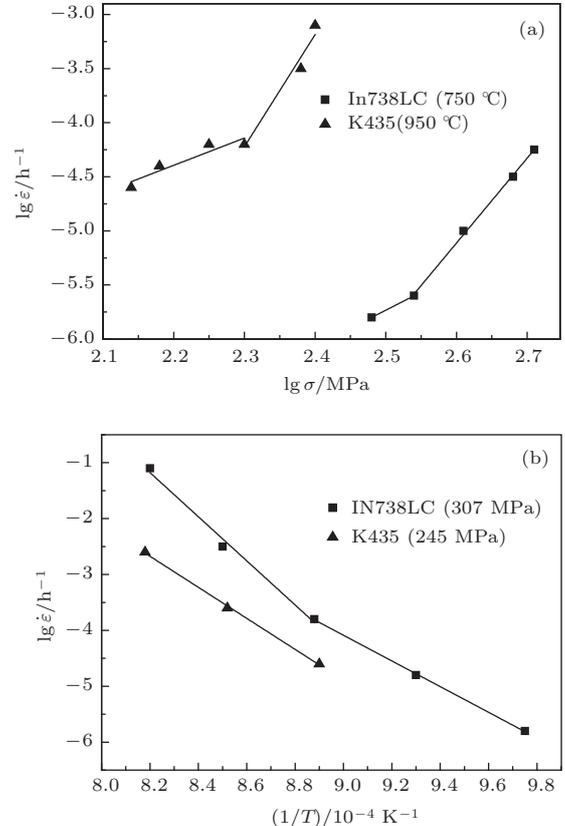


图 1 合金 In738LC 和 K435 的稳态蠕变速率的实验测试曲线 (a)  $L-\sigma$  曲线; (b)  $L-T$  曲线

### 2.2 单原子统计模型

从物理学角度出发, 本文在原子水平上建立了清晰的关于稳态蠕变速率的机制. 在原子水平上, 无论是扩散蠕变还是位错蠕变, 都必须经历这样的原子迁移, 即在应力的作用下一些原子从一个势谷跨过一个势垒  $E_0$  跃迁到另外一个势谷 (见图 2), 这是因为如果原子运动不跨越势垒便不会产生塑性形变. 事实上, 即使没有施加应力, 热运动也可能导致原子跨越势垒, 只不过跨越的方向在空间各向同性, 而施加应力后导致沿应力方向的跨越概率增大. 下面先讨论无应力时单个原子跨越势垒  $E_0$  的速率, 然后再考虑应力作用后的迁移速率.

前期工作<sup>[9]</sup> 已经表明, 当温度在室温以上时固体中各种原子的动能分布仍然是  $E^{1/2} \exp\left(\frac{-E}{k_B T}\right)$ , 相应的速度分布是麦克斯韦分布. 以此为据, 在单

位时间内给定原子跨越势垒  $E_0$  的总时间为

$$t = \frac{1}{Z} \int_{E_0}^{\infty} E^{1/2} \exp\left(\frac{-E}{k_B T}\right) dE, \quad (7)$$

式中,  $E$  为原子动能,  $Z$  是相应的配分函数,  $Z = \frac{\sqrt{\pi}}{2} (k_B T)^{3/2}$ . 由于原子的平均位置在势谷最低部, 因此可以认为迁移原子的起始位置在势谷最低部, 并假定其质量为  $m$ , 具有最大动能  $E_0$ . 根据经典力学, 该原子跨过势垒的时间

$$\delta t = \sqrt{m} \int_{x_0}^{x_1} dx / \sqrt{2(E - V(x))}, \quad (8)$$

式中  $V(x)$  是迁移原子所感受到的势能函数. 对各种动能做统计平均可得到单原子跨越势垒的平均时间

$$\bar{\delta t} = \frac{\int_{E_0}^{\infty} (\delta t) E^{1/2} \exp\left(\frac{-E}{k_B T}\right) dE}{\int_{E_0}^{\infty} E^{1/2} \exp\left(\frac{-E}{k_B T}\right) dE}, \quad (9)$$

由此可得到给定原子跨越一个势垒的频次为

$$\Gamma = \frac{t}{\bar{\delta t}} = \frac{\int_{E_0}^{\infty} E^{1/2} \exp\left(\frac{-E}{k_B T}\right) dE}{\int_{E_0}^{\infty} (\delta t) E^{1/2} \exp\left(\frac{-E}{k_B T}\right) dE} \times \int_{E_0}^{\infty} E^{1/2} \exp\left(\frac{-E}{k_B T}\right) dE. \quad (10)$$

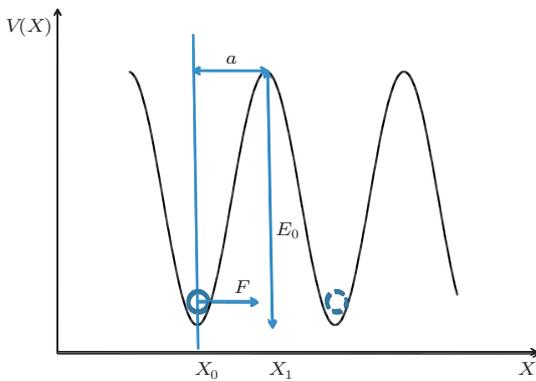


图2 单原子迁移示意图

在蠕变过程中, 原子受到一个恒定力的作用. 如图2所示, 在原子从  $x_0$  迁移到  $x_1$  的过程中, 假定应力施加给每个原子的力为  $F$ , 则力  $F$  所做的功为  $Fa$ . 假定原子在  $x_0$  位置的总能量为  $E$ , 则当它迁移到  $x_1$  位置时总能量增加为  $E + Fa$ , 因此只要  $E > E_0 - Fa$ , 该原子便可越过势垒  $E_0$ . 根据上述分析, 在单位时间内原子越过势垒  $E_0$  的总时间为

$$t = \frac{1}{Z} \int_{E_0 - Fa}^{\infty} E^{1/2} \exp\left(\frac{-E}{k_B T}\right) dE. \quad (11)$$

相应地, 总能量为  $E$  的原子从势谷最底部 ( $x_0$  位置) 越过势垒的时间也由 (8) 式变为

$$\delta t = \sqrt{m} \int_{x_0}^{x_1} dx / \sqrt{2(E - V(x) + Fa)}. \quad (12)$$

对所有的动能求平均得到平均跳跃时间:

$$\bar{\delta t} = \frac{\int_{E_0 - Fa}^{\infty} (\delta t) \varepsilon^{1/2} \exp(-\varepsilon/k_B T) d\varepsilon}{\int_{E_0 - Fa}^{\infty} \varepsilon^{1/2} \exp(-\varepsilon/k_B T) d\varepsilon}. \quad (13)$$

由此得到原子跨越势垒  $E_0$  的频次:

$$\Gamma = \frac{t}{\bar{\delta t}} = \frac{\int_{E_0 - Fa}^{\infty} E^{1/2} \exp\left(\frac{-E}{k_B T}\right) dE}{\int_{E_0 - Fa}^{\infty} (\delta t) E^{1/2} \exp\left(\frac{-E}{k_B T}\right) dE} \times \int_{E_0 - Fa}^{\infty} E^{1/2} \exp\left(\frac{-E}{k_B T}\right) dE. \quad (14)$$

因此, 原子沿  $x$  方向的平均迁移速度为

$$R = a\Gamma, \quad (15)$$

式中  $a$  是给定原子越过的势垒半宽. 由此便可得到稳态蠕变速率

$$\dot{\varepsilon} = kR, \quad (16)$$

式中  $k$  是一个与材料特性相关的常数. 在蠕变过程中, (16) 式所描述的原子运动既可能发生于晶粒中, 也可能发生于位错、晶界等缺陷处. 因此, 常数  $k$  与材料的缺陷密度密切相关. 原则上, 只要能够预先确定各种缺陷的密度及组织结构并从理论上确定有关原子的扩散势函数  $V(x)$ , 便可应用 (16) 式确定稳态蠕变速率. 然而, 对于一般的宏观体材料, 很难获得这些信息. 因此, 具体应用本文建立的模型时, 可将原子的扩散势函数  $V(x)$  等效为余弦函数  $\frac{E_0}{2} \left(1 + \cos \frac{\pi}{a} x\right)$ , 其中势垒  $E_0$  及半宽  $a$  由实验测量确定, 即首先在几组温度应力点上测量材料的稳态蠕变速率, 然后通过 (16) 式拟合确定  $E_0$ ,  $a$  以及常数  $k$ , 这样就可将 (16) 式应用于任何温度和应力条件下的稳态蠕变寿命预测. 显然, 该模型的可靠性完全取决于在任何条件下  $E_0$ ,  $a$  以及  $k$  是否保持为与温度和应力无关的常数. 通过下面与实验结果的可知, 它们确为常数.

### 3 与实验结果的比较

为了检验本文建立的模型是否具有可信的预测能力, 需要大量可靠的关于  $L-\sigma$  曲线和  $L-T$  曲线的实验数据. 为此, 我们测量了 42CrMoA,

2Cr12Ni, 1Cr12Mo 合金材料的实验数据 (见表 1—表 3). 此外, 还从文献 [19] 中获得了 IN738LC 合金和 K435 合金的实验数据 (如图 1 所示), 它们与传统的经验表达式都不符合. 为了与本文建立的模型进行比较, 利用 (16) 式拟合了这些实验数据, 检验对于给定材料的理论模型中的参量  $E_0$ ,  $a$  以及  $k$  是否保持为常数, 结果如图 3 和图 4 所示. 进

表 1 在不同应力和温度条件下 42CrMoA 合金的稳态蠕变速率

$\sigma = 69 \text{ MPa}$		$T = 427 \text{ }^\circ\text{C}$	
实验温度/ $(^\circ\text{C})$	稳态蠕变速率/ $\text{h}^{-1}$	载荷/ $\text{MPa}$	稳态蠕变速率/ $\text{h}^{-1}$
427	$2.7 \times 10^{-9}$	69	$2.7 \times 10^{-9}$
454	$2.7 \times 10^{-8}$	138	$5.2 \times 10^{-8}$
482	$2.5 \times 10^{-7}$	207	$2.8 \times 10^{-7}$

表 2 在不同应力和温度条件下 2Cr12Ni 合金的稳态蠕变速率

$\sigma = 276 \text{ MPa}$		$T = 538 \text{ }^\circ\text{C}$	
实验温度/ $(^\circ\text{C})$	稳态蠕变速率/ $\text{h}^{-1}$	载荷/ $\text{MPa}$	稳态蠕变速率/ $\text{h}^{-1}$
538	$8.0 \times 10^{-7}$	276	$8.0 \times 10^{-7}$
566	$8.1 \times 10^{-6}$	345	$6.2 \times 10^{-6}$
593	$6.9 \times 10^{-5}$	414	$4.3 \times 10^{-5}$

表 3 在不同应力和温度条件下 1Cr12Mo 合金的稳态蠕变速率

$\sigma = 276 \text{ MPa}$		$T = 427 \text{ }^\circ\text{C}$	
实验温度/ $(^\circ\text{C})$	稳态蠕变速率/ $\text{h}^{-1}$	载荷/ $\text{MPa}$	稳态蠕变速率/ $\text{h}^{-1}$
427	$5.3 \times 10^{-8}$	276	$5.3 \times 10^{-8}$
482	$6.9 \times 10^{-6}$	345	$3.3 \times 10^{-7}$
538	$2.9 \times 10^{-4}$	414	$1.8 \times 10^{-6}$
		483	$8.0 \times 10^{-6}$

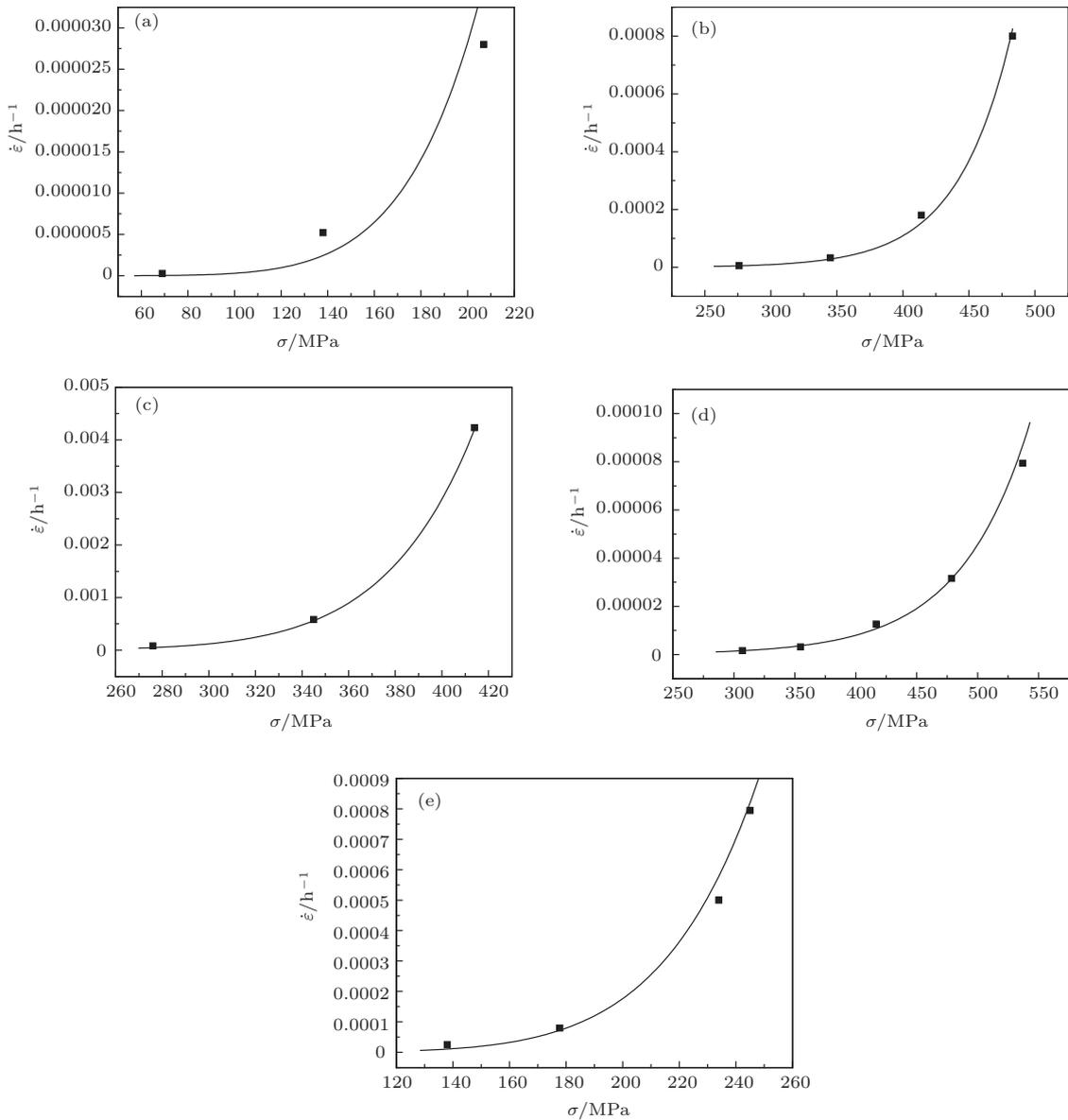


图 3 在特定温度下, 不同材料的稳态蠕变速率随应力的变化曲线 (a)  $T = 700 \text{ K}$ , 42CrMoA; (b)  $T = 700 \text{ K}$ , 1Cr12Mo; (c)  $T = 811 \text{ K}$ , 2Cr12Ni; (d)  $T = 1023 \text{ K}$ , In738LC; (e)  $T = 1223 \text{ K}$ , K435

行拟合时,材料中单个原子的平均力 $F$ 按照垂直于所施加应力的横截面上全部原子的平均值计算.对于给定材料,将 $E_0$ , $a$ 以及 $k$ 设置为与应力和温度无关的常数.图3和图4中的方块代表实验数据,实线是本文建立的模型计算所得到的曲线.显然,对于给定的材料, $E_0$ , $a$ 以及 $k$ 保持为常数,并且本文建立的模型能够再现实验数据.值得注意的是,图3(d),(e)和图4(d),(e)中的实验数据是违背传统经验公式的,因为经验公式中的 $n$ 和 $Q_c$ 都是力和温度的函数而不是常数.但是,对于In738LC合金和K435合金,在整个温度和力的范围内单原子统计模型中的 $E_0$ , $a$ 以及 $k$ 参量均不随力和温度的变化而发生改变.

应用(16)式拟合上述实验数据所得到的相应势垒列于表4.人们应用传统表达式(5)拟合已有的稳态蠕变速率所得到的蠕变激活能大约为 $10^5$  J/mol量级<sup>[19]</sup>,即若干个电子伏特.如果按照一般理论解释,该激活能接近于静态势垒,因此本文所得到的静态势垒是合理的.在本文的拟合中,原子静态势垒半宽约为数十埃(见表4),表明蠕变主要发生于线径数百埃的缺陷.曾经有人发现材料中存在一些圆盘状的缺陷,这些缺陷的线径在150 Å左右,原子在这个范围内可以快速扩散<sup>[20,21]</sup>.由此可见,新模型所给出的蠕变机制大致与实验观测相符合.

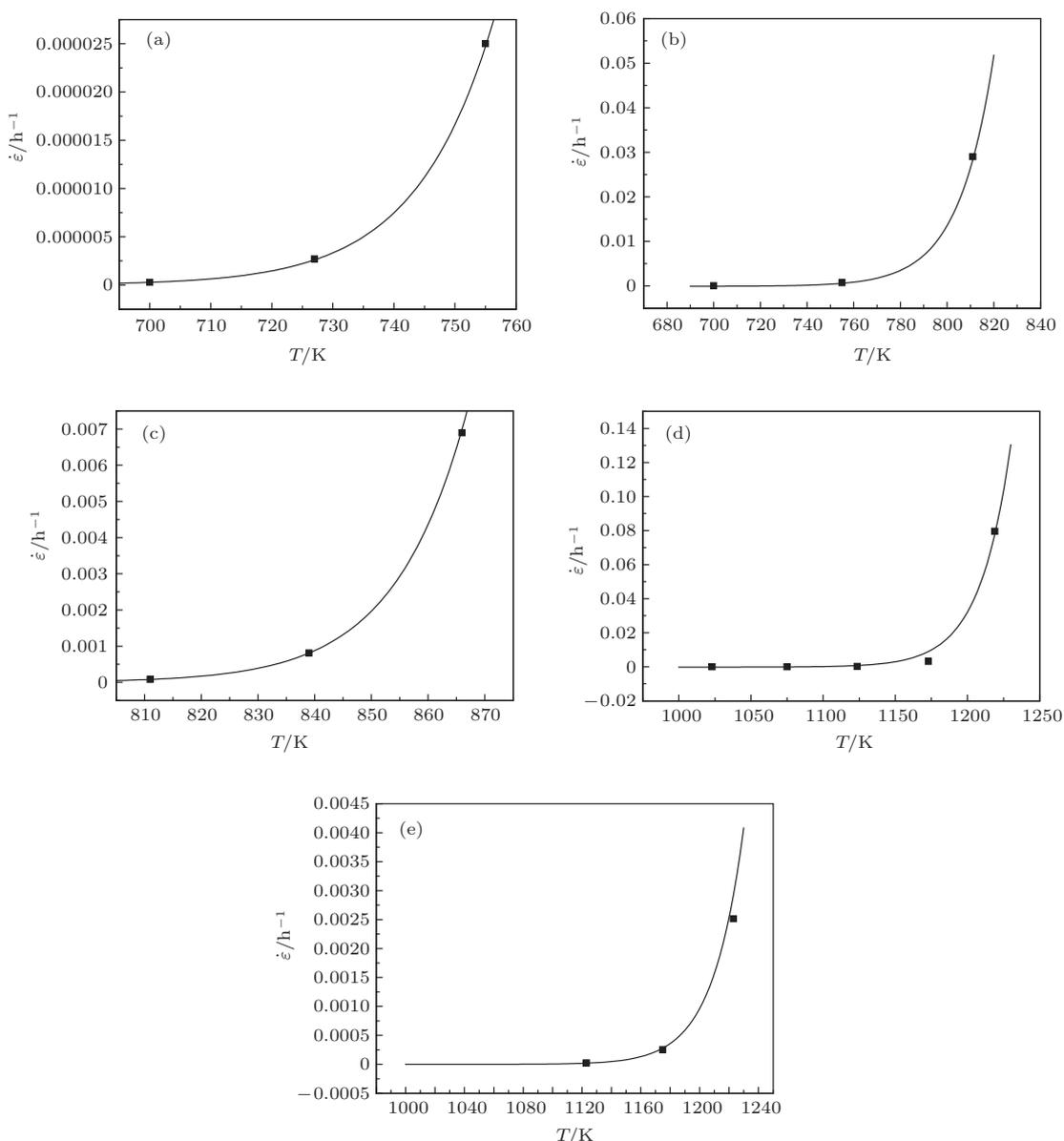


图4 在特定应力下,不同材料的稳态蠕变速率随温度的变化曲线 (a)  $\sigma = 69$  MPa, 42CrMoA; (b)  $\sigma = 276$  MPa, 1Cr12Mo; (c)  $\sigma = 276$  MPa, 2Cr12Ni; (d)  $\sigma = 307$  MPa, In738LC; (e)  $\sigma = 245$  MPa, K435

表4 各种合金的平均势垒及势垒半宽

合金	势垒 $E_0$ /eV	势垒半宽 $a/\text{Å}$
42CrMoA	4.00	25.0
1Cr12Mo	4.23	21.5
2Cr12Ni	5.50	29.3
IN738LC	6.45	22.4
K435	6.50	50.0

## 4 结 论

基于单原子统计模型, 本文提出了预测材料稳态蠕变速率的新方法. 所得到的稳态蠕变速率表达式只涉及三个常数, 它们与温度和应力无关, 并且可由少数几组实验测量值确定. 目前可搜集到比较详细的实验数据与该模型的计算结果均符合. 因此, 该模型有望广泛应用于预测材料的蠕变寿命.

## 参考文献

- [1] Bressers J 1981 *Creep and Fatigue in High Temperature Alloys* (London: Applied Science Publishers Ltd.) pp 1–5
- [2] Lin Y C, Xia Y C, Chen M S, Jiang Y Q, Li L T 2013 *Comput. Mater. Sci.* **67** 243
- [3] Marahleh G, Kheder A R I, Hamad H F 2006 *Mater. Sci. Eng. A* **433** 305
- [4] Ji F, Song A J, Zhang W G, Hao Q H, Bai B W, Liu R P, Ma M Z 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 2114 (in Chinese)[嵇峰, 宋爱君, 张卫国, 郝秋红, 白邦伟, 刘日平, 马明臻 2010 物理学报 **59** 2114]
- [5] Odqvist F K G, Hult J 1962 *Kriechfestigkeit Metallischer Werkstoffe* (Berlin: Springer) pp 6–30
- [6] Penny R K, Marriott D L 1995 *Design for Creep* (2nd Ed.) (London: Chapman & Hall) pp 8–41
- [7] Rabotnov Y N 1979 *Mechanics of the Deformable Solid* (in Russian) (Moscow: Nauka) pp 1–14
- [8] Skrzypek J J 1993 *Plasticity and Creep* (Boca Raton: CRC Press) pp 14–35
- [9] Lin Z Z, Yu W F, Wang Y, Ning X J 2011 *Europhys. Lett.* **94** 40002
- [10] Lin Z Z, Zhuang J, Ning X J 2012 *Europhys. Lett.* **97** 27006
- [11] Ming C, Lin Z Z, Cao R G, Yu W F, Ning X J 2012 *Carbon* **50** 2651
- [12] Han X J, Wang Y, Lin Z Z, Zhang W X, Zhuang J, Ning X J 2010 *J. Chem. Phys.* **132** 064103
- [13] Li W Y, Lin Z Z, Xu J J, Ning X J 2012 *Chin. Phys. Lett.* **29** 080504
- [14] Norton F H 1929 *The Creep of Steel at High Temperature* (New York: McGraw-Hill) pp 36–52
- [15] Garofalo F 1965 *Fundamentals of Creep and Creep-Rupture in Metals* (New York: Macmillan) pp 46–65
- [16] Tobolová Z, Čadek J 1979 *Philos. Mag.* **26** 1419
- [17] Nabarro F R N, de Villiers H L 1995 *The Physics of Creep and Creep-Resistant Alloys* (1st Ed.) (London: Taylor & Francis) pp 25–33
- [18] Mukherjee A K, Bird J E, Dorn J E 1969 *Trans. ASM* **62** 62
- [19] Guo J T 2008 *Materials Science and Engineering for Superalloys* (Vol. 1) (Beijing: Science Press) p 400 (in Chinese) [郭建亭 2008 高温合金材料学(上册) (北京: 科学出版社) 第400页]
- [20] Dash W C 1958 *J. Appl. Phys.* **29** 705
- [21] Seitz F 1950 *Phys. Rev.* **79** 890

# A statistical model to predict the steady-state creep rate\*

Li Jing-Tian<sup>1)</sup> Wang Jian-Lu<sup>2)</sup> Zhang Bang-Qiang<sup>2)</sup> Rong Xi-Ming<sup>3)</sup> Ning Xi-Jing<sup>1)†</sup>

1) (*Institute of Modern Physics, Fudan University, Shanghai 200433, China*)

2) (*Dongfang Turbine Co. Ltd., Deyang 618000, China*)

3) (*Department of Optical Science and Engineer, Fudan University, Shanghai 200433, China*)

( Received 17 June 2013; revised manuscript received 12 October 2013 )

## Abstract

For a long time, empirical formulars have been used to predict the steady-state creep rate due to lack of clear microscopic description of the mechanism, which frequently leads to unreliable predictions. In this work, a statistical model of single atom developed recently is used to predict the steady-state creep rate at an atomic diffusion level. To test the model, we measure the creep rates of three kinds of materials, i.e., 42CrMoA, 2Cr12Ni, and 1Cr12Mo, and collect the experimental data of other materials, such as IN738LC and K435. The results show that our theoretical predicts are in good agreement with the experimental results.

**Keywords:** creep rate, statistical physics, single atom model

**PACS:** 81.05.Bx, 34.20.Cf, 62.20.Hg

**DOI:** [10.7498/aps.63.028101](https://doi.org/10.7498/aps.63.028101)

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51071048).

† Corresponding author. E-mail: [xjning@fudan.edu.cn](mailto:xjning@fudan.edu.cn)