

不同加载条件下位错和溶质原子交互作用的数值模拟*

何艳生 符师桦[†] 张青川[‡]

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

(2014年4月14日收到; 2014年7月7日收到修改稿)

动态应变时效, 即位错和溶质原子的动态交互作用, 对合金材料的力学性质产生重要影响. 本文基于蒙特卡罗方法, 建立了“多位错-溶质原子”二维动力学模型, 分别模拟了单位错-恒定应力率、多位错-无应力、多位错-恒定应力和多位错-恒定应力率四种条件下位错和溶质原子的演化过程. 单位错-恒定应力率情况下, 低应力率时位错被溶质原子钉扎而无法脱钉, 高应力率时位错未被钉扎而一直运动, 只有在适当应力率范围内, 位错才呈现出反复的钉扎和脱钉; 多位错-无应力时, 溶质原子向正/负位错的下/上方偏聚; 多位错-恒定应力时, 位错运动受溶质原子钉扎的影响随应力增大而减小; 多位错-恒定应力率时, 集群化的钉扎和脱钉过程导致了位错总位移呈现阶梯状的演化. 模拟结果表明: “位错-溶质原子”尺度上呈现了动态应变时效微观过程, 与其理论描述相一致.

关键词: 动态应变时效, 动力学模型, 位错运动

PACS: 81.05.Bx, 02.70.uu

DOI: 10.7498/aps.63.228102

1 引言

在一定的应变率和温度等条件下, 许多合金在变形过程中会发生特殊的塑性失稳现象, 表现为时域上的锯齿形应力流动和空域上的应变局域化, 也称为Portevin-LeChatelier (PLC) 效应^[1-5]. 目前普遍认为PLC效应的微观机理是动态应变时效(dynamic strain aging, DSA)^[6-9], 即溶质原子和可动位错之间的相互作用. 在可动位错的运动过程中, 溶质原子向其扩散并产生额外的钉扎, 引起应力上升; 可动位错克服溶质原子的钉扎从而实现脱钉, 引起应力下跌. 这种反复的“钉扎-脱钉”过程形成了锯齿形应力曲线.

对于PLC效应的研究, 实验上主要集中在应力曲线的分析^[10,11]和空间PLC带的观察^[12,13]

以及结合DSA对实验现象进行定性或定量的解释^[14-16]. 在模拟研究方面大致可归纳为: 1) 位错转化模型^[17-18], 考虑不同类型位错之间的转化引起的应力变化; 2) 溶质浓度模型^[19,20], 考虑位错线上溶质原子浓度变化对应力的影响; 3) 综合模型^[21-23], 综合考虑以上两种机制对应力的影响. 这些模型均能再现锯齿形的应力曲线, 有些还再现了空间PLC带的传播. 然而, 这些模型都是宏观的唯象本构模型, 模拟结果也都是宏观现象, 并未涉及微观过程. 即便有些模型包含微观元素, 但也是通过宏观参数如位错密度和溶质原子浓度等来体现统计的结果, 并未对具体微观过程进行模拟. 由于实验条件的限制, DSA的微观过程, 即位错和溶质原子间的“钉扎-脱钉”, 还未能被直接观察. 若能模拟得到其微观过程的图像, 将极大地加深对PLC效应和DSA的理解和认识.

* 国家自然科学基金(批准号: 11332010, 51271174)、国家重点基础研究发展计划(批准号: 2011CB302105)和中央高校基本科研业务费专项资金(批准号: WK2090050029)资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: fushihua@ustc.edu.cn

[‡] 通讯作者. E-mail: zhangqc@ustc.edu.cn

为此, 文献[24]采用蒙特卡罗方法模拟了单个正刃形位错与一定浓度的溶质原子之间的交互作用. 观察到在无外加应力时, 溶质原子逐渐偏聚到位错下方; 在不同的恒定剪应力下, 位错运动的特征也不相同. 在低剪应力下, 位错周围出现溶质原子气团, 在高剪应力下则不会形成溶质原子气团. 其研究结果在一定程度上展现了DSA发生与否的微观图像差异. 然而, 该文献仅模拟了单位错和恒定剪应力条件下的情况, 缺乏对多位错和变化剪应力条件下的模拟.

因此, 本文在其基础上模拟了单位错在应力以恒定速率逐渐增大(即恒定应力率)条件下的运动情况, 并将其模型扩展为多位错模型, 分别模拟无应力、恒定应力以及恒定应力率三种条件下多位错的运动情况, 试图为PLC效应宏观行为与DSA微观过程的衔接奠定模拟研究基础.

2 模拟方法

本文中, 模拟单元简化为二维模型, 如图1所示, 其高和宽分别用 H 和 W 表示, 单位长度为位错Burgers矢量幅值 b , 单元受到的剪应力为 τ . 单元内位错和溶质原子的数目分别记为 N_d 和 N_s , 相应浓度为 $\rho_d = N_d/(WH)$ 和 $C_s = N_s/(WH)$. 模型中, 溶质原子为置换型, 位错均为刃型, 长度为 L , 且滑移方向沿 X 轴, 则位错Burgers矢量可表示为 $s\mathbf{b}$ ($s = \pm 1$ 为位错符号). 系统总能量 E 可以分为剪应力对位错做功 E_1 、位错与溶质原子之间的作用能 E_2 以及位错与位错之间的作用能 E_3 , 即 $E = E_1 + E_2 + E_3$.

当一根位错运动距离为 Δx 时, 剪应力 τ 将对位错做功, 引起系统能量变化, 可表示为 $\Delta E_1 = -\tau s\mathbf{b}L\Delta x$.

一根位错与一个溶质原子之间的作用能为 $E_2 = P\Delta V$, P 是由位错引起的应力场的静水压力, ΔV 是溶质原子所形成的体积膨胀, 具体表达式分别为

$$P = \frac{\mu s\mathbf{b}(1+\nu)}{3\pi(1-\nu)} \frac{y}{x^2 + y^2}, \quad (1)$$

$$\Delta V = 4\pi(R_s^3 - R_b^3)/3, \quad (2)$$

μ 为剪切模量, ν 为泊松比, x 和 y 为溶质原子相对于位错的坐标, R_s 和 R_b 分别为溶质原子和基体原子的半径.

当一根位错运动距离为 Δx 时, 它与另一根参考位错的作用能变化量为 $\Delta E_3 = F_x L\Delta x$, F_x 为二

者在滑移方向上单位长度的交互作用力, 表示为

$$F_x = \frac{s_1 s_2 \mu b^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{x^2 + y^2}, \quad (3)$$

其中, s_1 和 s_2 分别是两根位错的符号, x 和 y 是参考位错相对于运动位错的坐标.

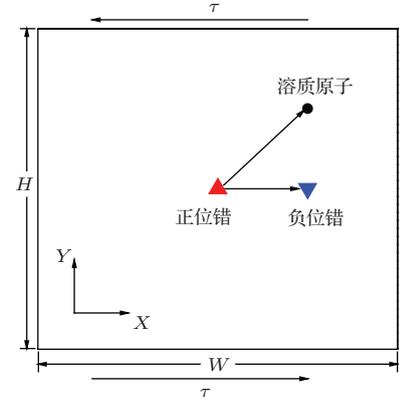


图1 模拟单元图 W 和 H 分别是单元的长和宽, τ 是单元受到的剪切应力, 圆点表示溶质原子, 正三角形表示正刃型位错, 倒三角形表示负刃型位错

对单元内一个元素(位错或溶质原子)预设运动, 将引起系统总能量发生变化, $\Delta E = \Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E_3$. 若 $\Delta E \leq 0$, 则预设运动被接受; 若 $\Delta E > 0$, 则预设运动不接受, 元素位置不变.

模拟中采用了周期性边界条件和一些其他的假设条件. 不考虑位错的增殖、湮灭和攀移, 并忽略溶质原子间的交互作用和偏析; 每个网格点同时只能存在一个溶质原子或一个位错; 溶质原子穿过边界后, 重新随机分布在单元内; 单位错模拟中, 位错穿过边界后, 以右边界为例, 将其移到新单元中央, 新单元左半部溶质原子分布与原单元右半部中一致, 新单元右半部溶质原子数目与原单元左半部一致, 但其位置随机分布; 多位错模拟中, 当位错穿过边界, 将从单元另一侧边界重新进入. 实际情况下, 位错和溶质原子的运动是同时的, 但其速率是不同的. 而在一个蒙特卡罗模拟步长中, 只能选取一个元素预设单位长度的移动. 所以, 我们引入参数 M , 表示相同时间内一根位错运动距离和一个溶质原子运动距离的比值. 在模拟中, 位错和溶质原子的总运动率比值应为 $M_t = N_d M / N_s$.

根据铝镁合金性质本文采用以下模拟参数: $\mu = 25$ GPa, $b = 0.285$ nm, $R_b = 0.134$ nm, $R_s = 0.160$ nm, $L = 100b$, $\nu = 0.33$, $M = 100$, $C_s = 0.5\%$. 模拟时间用蒙特卡罗步MCS表示, 也记为 Γ^{-1} .

3 模拟结果与讨论

3.1 单位错-恒定应力率

模拟中, 应力率 $\dot{\epsilon}$ 为恒定值, 参数设定为: $W = 1000b$, $H = 100b$, $N_s = 500$, 相应地 $C_s = 0.5\%$, 近似于室温下镁原子在铝基中的饱和溶解度. 由于模拟中不考虑位错的攀移, 即位错只会沿着 X 轴运动, 故将模拟单元的高度缩小以减少计算量. 不同应力率下位错的运动情况如图 2 所示. 同样的模拟步长内, 当应力率较小时 (图 2(a)), 位错运动距离很短, 仅 $6b$, 且绝大部分时间内位错是静止的; 当应力率较大时 (图 2(b)), 位错运动是连续的, 速度达到饱和 ($1b\Gamma$). 即便是在相同的应力下, 二者位错运动也是不同的. 如图 2(c) 所示, 应力相同时, 低应力率时位错是静止的, 高应力率时位错是运动的. 这表明两种情况下启动位错所需的应力是不同的. 在本模拟中, 位错受到的阻力仅来自溶质原子, 也就是说, 两种情况下位错受到溶质原子的钉扎强度是不同的. 在低应力率时, 达到相同应力所需的时间较长, 使更多溶质原子向位错扩散, 使得位错被溶质原子钉扎而不能运动; 在高应力率时, 达到相同应力所需的时间也较短, 扩散至位错周围的溶质原子较少, 不足以对位错形成钉扎, 位错连续运动. 当应力率处于中间水平时, 位错运

动呈现出阶梯形的演化特征, 其表现与 DSA 中反复的“钉扎-脱钉”相一致. 要说明的一点是, 尽管图 2(a) 中位错运动也是阶梯形的, 但位错运动一次只移动了一个网格, 其特点更接近蠕变而非 DSA 中的“钉扎-脱钉”. 模拟结果可概括为: 低应力率时位错被溶质原子钉扎而无法脱钉, 高应力率时位错未被钉扎而一直运动, 只有在适当应力率范围内, 位错运动才呈现出“钉扎-脱钉”的特点. 这一点也反映了 DSA 只发生在一定条件下, 与宏观改变应变率实验中相似.

3.2 多位错-无应力

为了更逼近实际材料或一个晶格, 本文还模拟了多位错与溶质原子的相互作用. 参照文献 [24], 首先模拟无外加应力下溶质原子的偏聚情况, 模拟参数为: $W = 1000b$, $H = 1000b$, $N_s = 5000$, $N_d = 50$, 相应地 $C_s = 0.5\%$ 与上节保持一致, $\rho_d = 6 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ 近似铝镁合金在塑性变形中段的位错密度 [25]. 溶质原子的偏聚过程如图 3 所示. 溶质原子在初始时刻随机分布, 随着时间的延长开始向正/负位错的下/上方偏聚, $2 \times 10^5 \text{ MCS}$ 后溶质原子分布区域稳定. 模拟结果反映了材料在静态下的时效过程.

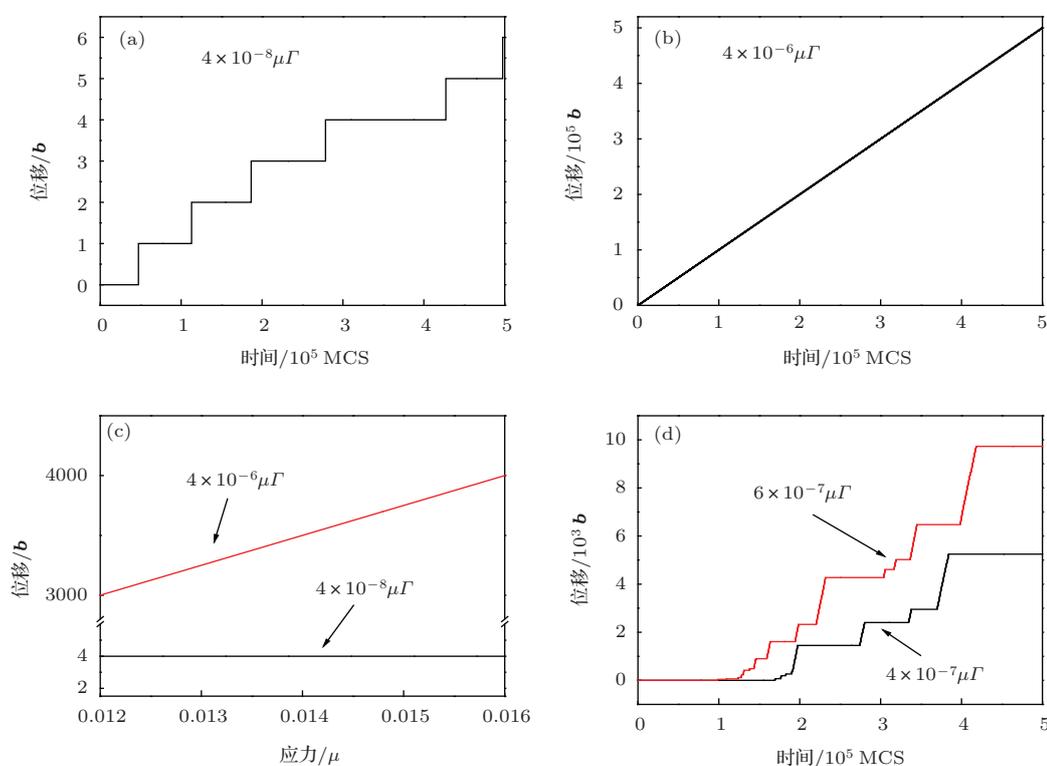


图 2 单位错在恒定应力率下的运动情况 (a) 应力率为 $4 \times 10^{-8} \mu\Gamma$; (b) 应力率为 $4 \times 10^{-6} \mu\Gamma$; (c) 应力相同时位错运动的对比; (d) 应力率为 $4 \times 10^{-7} \mu\Gamma$ 和 $6 \times 10^{-7} \mu\Gamma$

3.3 多位错-恒定应力

无应力状态下, 位错是静止的, 接下来模拟在恒定应力下位错的运动情况. 模拟参数保持一致, 结果如图 4 所示. 在低应力下(图 4(a)), 位错运动总距离较短, 随着应力增大, 位错运动总距离亦增大; 在高应力下(图 4(b)), 位错一直运动. 在较低的两个外加应力下, 位错运动总距离最后趋于稳定值, 即所有位错都静止, 这可看成位错从滑移到被溶质原子钉扎的过程. 而在高外加应力下, 位错一直

运动, 这是由于外加应力过高, 一方面需要更多的溶质原子才能对位错形成钉扎, 另一方面位错一直运动, 其速度大于溶质原子的扩散速度, 溶质原子无法聚集在位错周围, 位错未被钉扎. 当位错由运动变为静止后, 表明外加应力小于位错开动应力, 由于应力是恒定值, 而溶质原子的偏聚会引起位错开动应力升高, 静止的位错不会再次被开动. 因此, 这种情况下, 只会出现位错被钉扎的现象, 脱钉过程将不会发生.

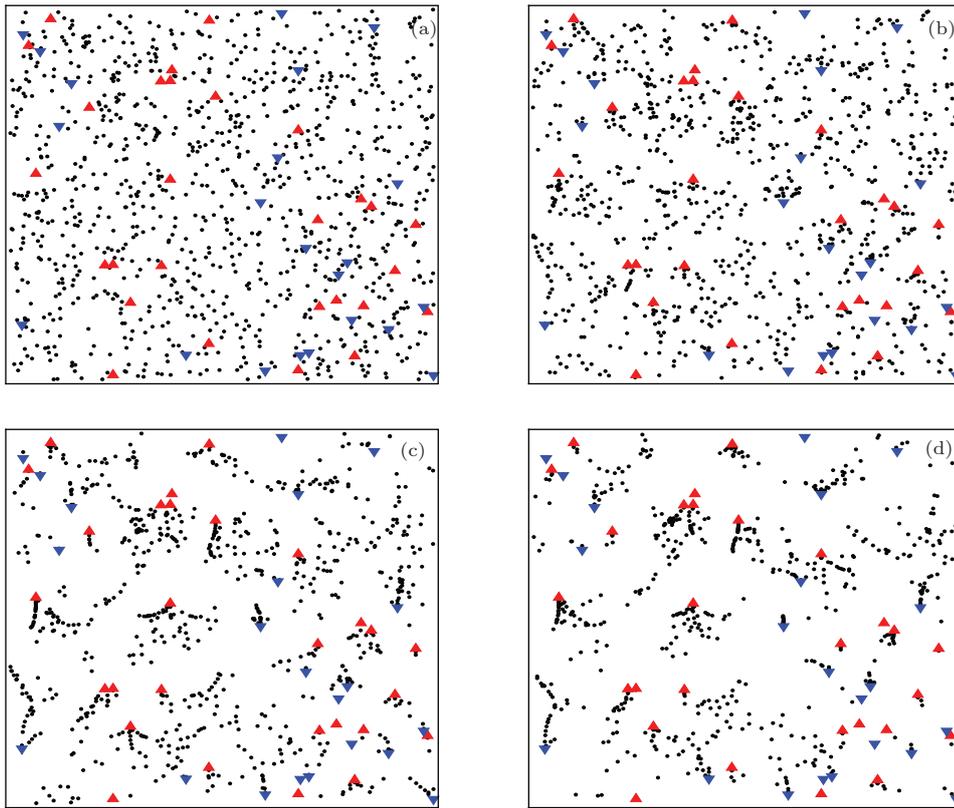


图 3 (网刊彩色) 溶质原子分布 (a) 初始时刻; (b) 10^5 MCS 时刻; (c) 2×10^5 MCS 时刻; (d) 3×10^5 MCS 时刻

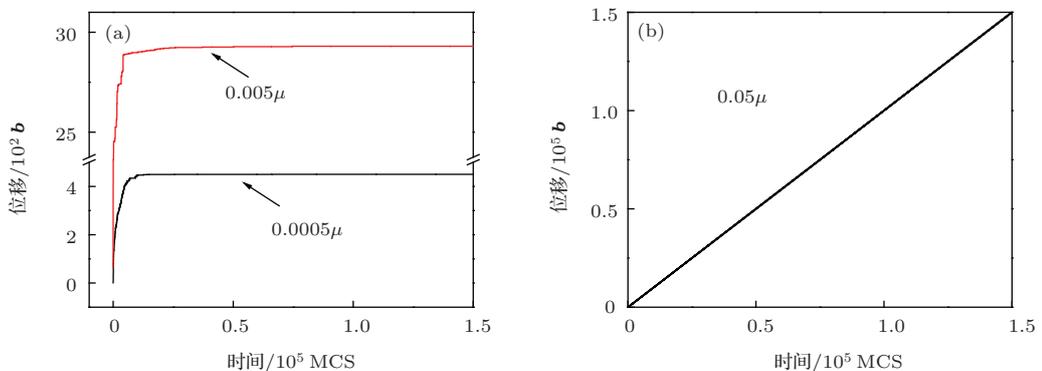


图 4 多位错在恒定应力下的运动情况 (a) 应力为 0.0005μ 和 0.005μ ; (b) 应力为 0.05μ

3.4 多位错-恒定应力率

模拟中设定恒定应力率为 $4 \times 10^{-8} \mu\Gamma$, 其结果如图 5 所示. 位错总位移在模拟初期随时间快速近似线性增长, 随后增长趋势变得缓和且较无规则,

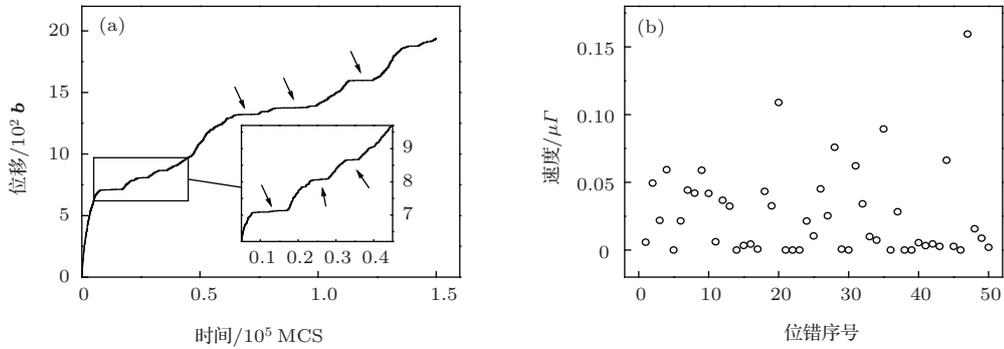


图5 多位错在恒定应力率下的运动情况 (a) 位错总位移-时间曲线, 插图为矩形区域的放大视图, 箭头标出位移平台段; (b) 每根位错的平均速度

从中选取四根位错的位移-时间曲线以详细地分析其运动情况. 如图 6 所示, 位错运动均呈现阶梯状, 与图 2 (d) 中类似. 阶梯平台对应着位错被钉扎的状态, 阶梯上升沿对应着位错的脱钉过程. 这表明在位错在运动中发生了一次或多次的“钉扎-脱钉”过程. 模拟初期, 位错和溶质原子随机分布 (如图 3 (a)), 大部分位错没有被溶质原子钉扎, 较低应力就足以开动位错; 但也存在个别位错周围分布一定数量的溶质原子, 需要较高应力才能开动位错. 当周围聚集的溶质原子足够多时, 运动的位错会再次被钉扎而静止, 直至下一次脱钉. 在模拟中, 这种钉扎或脱钉往往是集群化的, 导致了位错总位移呈现阶梯状的演化, 模拟结果与 DSA 的理论描述是一致的.

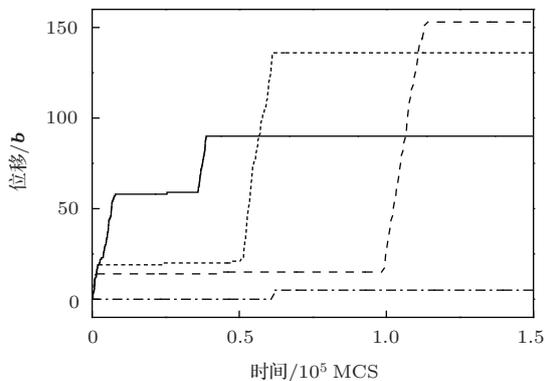


图6 四根位错的位移-时间曲线

但依然呈现出略微明显的阶梯状演化, 如图中箭头标出的位移平台. 在总模拟时间内, 各位错的平均运动速度分布也较为离散, 这表明每根位错在运动中受到溶质原子的作用是不同的. 这里位错平均速度为位错总位移与位错被选中总步数的比值.

4 结 论

本文建立了基于蒙特卡罗方法的“多位错-溶质原子”二维动力学模型, 模拟了不同加载条件下单位错和多位错与溶质原子相互作用下的运动情况. 在单位错-恒定应力率模拟中, 低应力率时位错被溶质原子钉扎而无法脱钉, 高应力率时位错未被钉扎而一直运动, 只有在适当应力率范围内, 位错运动才呈现出“钉扎-脱钉”的特点. 在多位错模拟中, 无应力下溶质原子向正位错上方和负位错下方偏聚, 与时效理论相一致; 恒定应力下, 位错运动总位移随应力增大而增大, 表明位错运动受溶质原子钉扎的影响随应力增大而减小; 恒定应力率下, 每根位错的位移-时间曲线均呈阶梯状发展, 且位错的钉扎和脱钉往往是集群化的, 导致了位错总位移呈现阶梯状的演化. 模拟结果表明“位错-溶质原子”尺度上呈现了 DSA 中“钉扎-脱钉”的微观过程, 在多个方面都与 DSA 的理论描述相一致, 表明该模型的有效性, 为进一步了解其机理提供了依据.

参考文献

[1] 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]
 [2] Peng K P, Chen W Z, Qian K W 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 3569 (in Chinese) [彭开萍, 陈文哲, 钱匡武 2006 物理学报 **55** 3569]

- [3] Yuan F P, Jiang P, Wu X L 2011 *Theor. Appl. Mech. Lett.* **1** 021002
- [4] Cui C Y, Gu Y F, Yuan Y, Harada H 2011 *Scripta Mater.* **64** 502
- [5] Deschamps A, Decreus B, De Geuser F, Dorin T, Weyland M 2013 *Acta Mater.* **61** 4010
- [6] Mulford R A, Kocks U F 1979 *Acta Metall.* **27** 1125
- [7] McCormick P G 1988 *Acta Metall.* **36** 3061
- [8] Picu R C 2004 *Acta Mater.* **52** 3447
- [9] Curtin W A, Olmsted D L, Hector L G 2006 *Nat. Mater.* **5** 875
- [10] Hrutkay K, Kaoumi D 2014 *Mater. Sci. Eng. A* **599** 196
- [11] Sun L, Zhang Q C, Cao P T 2009 *Chin. Phys. B* **18** 3500
- [12] Cao P T, Zhang Q C, Xiao R, Xiong S M 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 5591 (in Chinese) [曹鹏涛, 张青川, 肖锐, 熊少敏 2009 物理学报 **58** 5591]
- [13] Gao Y, Fu S H, Cai Y L, Cheng T, Zhang Q C 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 066201 (in Chinese) [高越, 符师桦, 蔡玉龙, 程腾, 张青川 2014 物理学报 **63** 066201]
- [14] Han G M, Cui C Y, Gu Y F, Hu Z Q, Sun X F 2013 *Acta Metall. Sin.* **49** 1243 (in Chinese) [韩国明, 崔传勇, 谷月峰, 胡壮麒, 孙晓峰 2013 金属学报 **49** 1243]
- [15] Fu S H, Cheng T, Zhang Q C, Hu Q, Cao P T 2012 *Acta Mater.* **60** 6650
- [16] Hu Q, Zhang Q C, Fu S H, Cao P T, Gong M 2011 *Theor. Appl. Mech. Lett.* **1** 011007
- [17] Ananthakrishna G, Sahoo D 1982 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **14** 2081
- [18] Kubin L P, Spiesser P, Estrin Y 1982 *Acta Metall.* **33** 397
- [19] Hahner P, Rizzi E 2003 *Acta Mater.* **51** 3385
- [20] Jiang H F, Zhang Q C, Chen X D, Chen Z J, Jiang Z Y, Wu X P, Fan J H 2007 *Acta Mater.* **55** 2219
- [21] Hu Q, Zhang Q C, Cao P T, Fu S H 2012 *Acta Mater.* **60** 1647
- [22] Zhu L L, Chen A Y, Lu J 2012 *Theor. Appl. Mech. Lett.* **2** 021001
- [23] Lebyodkin M, Dunin-Barkovskii L, Bréchet Y, Estrin Y, Kubin L P 2000 *Acta Mater.* **48** 2529
- [24] Wang Y, Srolovitz D J, Richman J M 2000 *Acta Mater.* **48** 2163
- [25] Kubin L P, Estrin Y 1990 *Acta Metall.* **38** 697

Simulations of the interactions between dislocations and solute atoms in different loading conditions*

He Yan-Sheng Fu Shi-Hua[†] Zhang Qing-Chuan[‡]

(CAS Key Laboratory of Mechanical Behavior and Design of Material, Department of Modern Mechanics, University of Science and Technology of China, Hefei 230027, China)

(Received 14 April 2014; revised manuscript received 7 July 2014)

Abstract

Dynamic strain aging, i.e. the interaction between dislocations and solute atoms, affects the mechanical properties of alloys. In this paper, a 2D-kinetic Monte Carlo model relating to the interaction between dislocations and solute atoms is developed to simulate the motions of edge dislocations in four different conditions. In “single dislocation with constant stress rate” condition, single dislocation is pinned under low stress rate, moves continuously under high stress rate, and moves intermittently under middle stress rates. In “multi-dislocation with zero stress” condition, the solute atoms gather below positive dislocations and above negative dislocations. In “multi-dislocation with constant stress” condition, the influence of solute atoms on dislocation motion becomes stronger with stress decreasing. In “multi-dislocation with constant stress rate” condition, the collective pinning and unpinning result in the stepped curve of total displacement. The simulated results present the process of dynamic strain aging in a microscopic scale and are consistent with theoretical results.

Keywords: dynamic strain aging, kinetic model, dislocation motion

PACS: 81.05.Bx, 02.70.uu

DOI: [10.7498/aps.63.228102](https://doi.org/10.7498/aps.63.228102)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11332010, 51271174), the National Basic Research Program of China (Grant No. 2011CB302105) and the Fundamental Research Funds for the Central Universities (Grant No. WK2090050029).

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

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