

金属塑性变形中位错组态演化模型及其应用

高维林 白光润 周志敏

(东北大学金属加工系, 沈阳 110006)

摘 要

将位错理论与耗散结构、协同学等非线性科学相结合,建立了金属塑性变形中位错组态演化模型. 利用该模型,分析和模拟了金属塑性变形、静态回复和蠕变过程中,微观位错组态演化过程及与之相对应的宏观力学行为. 结果表明:在一个统一的理论模型基础之上,分析和研究金属塑性变形中出现的各种现象和问题是可行的.

关键词 塑性变形、位错组态、耗散结构、协同学

金属塑性变形过程中,最典型的微观结构特征是位错的分布具有空间周期性,即位错墙、位错胞及亚晶结构. 金属的力学行为,包括具有不同阶段性的应力-应变曲线和蠕变曲线、包辛格效应等,以及再结晶现象归根结底都是由位错组态的变化决定的. 传统的位错理论只能处理单个位错和简单排列的位错群,不能从根本上解决位错组态的演化问题. 因而,目前金属塑性变形微观机制的研究缺乏完整而统一的理论基础,对于不同的变形方式及各种变形方式中不同的变形阶段,存在着不同假设条件下的位错模型. 因此,如何理解和处理金属塑性变形过程中大量位错相互作用产生的丰富多采的位错花样就构成了位错理论所面临的最严峻、又是最基本的挑战.

耗散结构、协同学和混沌等近年来兴起的非线性学科,为人们认识自然界中普遍存在的非线性现象提供了理论基础. 金属塑性变形过程属于远离平衡的不可逆过程,是比较典型的非线性过程. 因此,近年来非线性方法在金属塑性变形中应用的重要性和必然性得到了人们高度重视. 一些学者开始利用非线性方法研究位错组态的变化^[1-3],所做的工作主要集中在位错均匀态的稳定性分析和对位错组态演化过程的定性理解上,而能与具体的实验结果进行定量比较的研究工作,目前尚未见报道.

本文将基于传统的位错理论,利用耗散结构和协同学原理,建立一个位错组态演化动力学模型. 分析和模拟恒速变形和静态回复过程中位错组态演化过程及相应的应力-应变曲线和

静态回复曲线,并建立一个发生再结晶的临界判据.同时也简介了模型在蠕变中的应用情况.

1 位错组态演化模型

1.1 建立模型的前提

在多晶体塑性变形过程中,一般情况下几个滑移系交替或同时开动.取一组平行的滑移面为参考面,由于螺型位错很容易通过交滑移而消失,位错组态基本上是由刃型位错束决定的.因此,可以暂时只考虑参考面上刃型位错密度的分布和变化,而认为其他滑移面上的位错密度有相似的变化.相对于参考面来说,其他滑移面的位错就是林位错.

设单元 $[x, x+dx]$ 内位错网络长度是随机分布的,总的位错密度为 ρ ;几何必需位错密度,也就是正负号位错密度之差为 ρ_g ;单元体所受的等效应力 τ_e 为外加应力 τ 与长程内应力 τ_l 之和.在单元体内,一部分位错是可以定向运动的,称为可动位错,其密度为 ρ_m ;而另一部分位错不能定向运动,但在位错间的短程相互作用力和随机热起伏的作用下,发生类似扩散过程的随机运动.如果用 s 表示等效应力 τ_e 与位错力学门槛应力 $\tau_t(=\mu b\sqrt{\rho})$ 之比,其中 μ 和 b 分别是剪切模量和柏氏矢量,则根据统计力学,可动位错密度与总的位错密度之比是 s 的函数,即 $\rho_m/\rho=f(s)$.对于一维问题 $f(s)=(1+1/s+1/2s^2)\exp(-1/s)$.由于可动位错切割林位错是热激活过程,因此根据热激活理论,可动位错运动速度为 $v=v_0\exp(ks)$,其中 v_0 和 k 与温度有关.

位错受到的短程内应力主要来自相同滑移系中其他位错的作用.根据位错理论,位于坐标 (x, y) 处的位错所受到的短程内应力(x 方向)为

$$F_x = \iint g(x'-x, y'-y)\rho(x', y')dx'dy' = \iint g(u, v)\rho(x+u, y+v)dudv, \quad (1)$$

式中, u 和 v 是变换后的坐标,对于刃型位错 $g(u, v) = \frac{\mu b^2}{2\pi(1-\gamma)} \frac{u(u^2-v^2)}{(u^2+v^2)^2}$.在实际金属塑性变形过程中,位错是处于低能组态的,即多以正负位错相间的位错偶形式存在.由于正负位错的作用力在相对其间距较远的地方相互抵消, F_x 是短程力,因此在对 $\rho(x+u, y+v)$ 进行Taylor展开时,可以忽略高于三阶的项.同时考虑一维情况,即认为位错密度 ρ 与 y 轴无关,则有

$$F_x = \iint g(u, v) \left\{ \rho(x) + \frac{\partial \rho(x)}{\partial x} u + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 \rho(x)}{\partial x^2} u^2 + \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 \rho(x)}{\partial x^3} u^3 \right\} dudv. \quad (2)$$

由于 $g(u, v)$ 对 u 是反对称的,因此上式积分后只剩两项.设位错间的作用距离 $\gamma_c \propto \frac{1}{\sqrt{\rho}}$,取积分限为 $(-r_c, r_c)$,则上式积分结果为

$$F_x = Ar_c^2 \frac{\partial \rho}{\partial x} + Br_c^4 \frac{\partial^3 \rho}{\partial x^3}, \quad (3)$$

式中, $A = \frac{3\mu b^2}{8(1-\gamma)}$, $B = 2.5A$, 其中的 γ 是Poisson比.

1.2 位错组态演化模型

根据耗散结构理论,位错密度随时间的变化服从类似于“反应-扩散方程”的位错密度平

衡方程, 即: 位错密度变化率 = 对流项 + 扩散项 + 反应项. 空间某处的正负位错在相同应力的作用下运动速率相同但运动方向相反, 因此有必要把总的位错密度 ρ 分成正位错密度 ρ_+ 和负位错密度 ρ_- 两部分. 得到两种位错密度变化率分别为

$$\frac{\partial \rho_+}{\partial x} = -\frac{\partial(\rho_+ v)}{\partial x} + (\text{扩散项})_+ + (\text{反应项})_+, \quad (4)$$

$$\frac{\partial \rho_-}{\partial x} = -\frac{\partial(\rho_- v)}{\partial x} + (\text{扩散项})_- + (\text{反应项})_-. \quad (5)$$

假设位错以位错环的形式产生和扩展, 等量的正负位错通过交滑移和攀移而消失, 可以认为正负位错的反应项是相同的. 同时, 产生扩散项的本质是等量的正负位错聚集成位错偶以及较松散的位错偶聚集成紧密的位错偶, 因此可以认为正负位错的扩散项也是相同的. 将 (4) 和 (5) 式分别相加和相减得到

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial(\rho_{\text{总}} v)}{\partial x} + \text{扩散项} + \text{反应项}, \quad (6)$$

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial x} = -\frac{\partial(\rho_m v)}{\partial x} = -\frac{1}{b} \frac{\partial \dot{\gamma}_p}{\partial x}. \quad (7)$$

(7) 式表明几何必需位错密度 ρ_g 与塑性变形 $\dot{\gamma}_p$ 的空间梯度成比例, 这正是几何必需位错定义的由来, 说明上述的两点假设是合理的.

位错的扩散通量 $J = \rho m F_x$, 其中 m 是位错可动性系数, 则由 (3) 式可得到扩散项表达式为

$$\text{扩散项} = -\frac{\partial J}{\partial x} = -Am \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} - \frac{Bm}{\rho} \frac{\partial^4 \rho}{\partial x^4}.$$

位错的反应项包括位错的产生、增殖和消失. 根据 Aifantis 的分析^[9], 其表达到可取为: $C - D\rho^2 - E\rho^3$, 其中由回复而消失项中的二次和三次项是分别考虑了位错偶极子和三极子的消失. 多极子的消失也是可能发生的, 但其中的位错个数越多, 实际存在消失的可能性越小.

综合上面的分析, 最后得到位错密度变化率为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial(\rho_{\text{总}} v)}{\partial x} - Am \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} - \frac{Bm}{\rho} \frac{\partial^4 \rho}{\partial x^4} + C - D\rho^2 - E\rho^3, \quad (8)$$

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} = -\frac{\partial(\rho_m v)}{\partial x}. \quad (9)$$

根据变形协调条件, 空间各处总的变形速率相同 (即与 x 无关), 且等于弹性变形速率和塑性变形速率之和, 即

$$\dot{\gamma} = \frac{\dot{\tau}_e}{\mu} + b\rho_m v. \quad (10)$$

由方程 (8) — (10), 再加上附加条件 $\tau = \frac{1}{L} \int_0^L \tau_e dx$, 其中 L 是系统长度, 就构成了一个完整的位错组态演化模型.

2 在恒速变形中的应用

当总的变形速率 $\dot{\gamma}$ 保持恒定时, 根据对方程 (10) 的协同学分析可知, τ_e 是快变参量, 而 s

是序参量. 由协同学中的支配原理 (slaving principle), 令 $\dot{\tau}_c/\mu=0$ 得到

$$\dot{\gamma} = b\rho f(s)v_0 \exp(ks). \quad (11)$$

从(11)式可以看出, 随着 ρ 的增大, s 减小, 但是这种关系是非常弱的. 例如 ρ 增加 100 倍时, 计算结果表明 s 只从 0.5 变为 0.4. 因此可以把 s 近似地看成常数. 这样, 方程 (8)–(10) 简化为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -F \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\rho^{3/2}} \frac{\partial \rho}{\partial x} \right] - Am \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} - \frac{Bm}{\rho} \frac{\partial^4 \rho}{\partial x^4} + C - D\rho^2 - E\rho^3, \quad (12)$$

同时有

$$\tau_c = s\mu b \sqrt{\rho} \quad \text{和} \quad \rho_g = \frac{1}{\mu b} \frac{\partial \tau_c}{\partial x}.$$

2.1 位错组态演化的协同学分析

方程 (12) 是非线性偏微分方程, 精确地求解是比较困难的. 利用协同学原理可以得到方程解的基本和主要的性质. 由于所研究的系统是对称的, 方程 (12) 的解可以假设为如下形式:

$$\rho = \rho_0 + \sum C_i \cos(i\pi x/L), \quad (13)$$

式中, ρ_0 是平均位错密度; $i=1-\infty$; C_i 是波的振幅. 将形式解代入方程 (12) 中, 并利用数学关系

$$\int_{-x}^x \cos(px)\cos(qx)dx = \begin{cases} 0, & p \neq q, \\ \pi, & p = q. \end{cases} \quad (14)$$

可以把偏微分方程化为一组常微分方程:

$$\dot{C}_n = \omega_n C_n + M \sum_i \sum_j C_i C_j \delta(|i \pm j| - n) - N \sum_i \sum_j \sum_k C_i C_j C_k \delta(|i \pm j| \pm k - n), \quad (15)$$

式中, $\omega_n = H(n\pi/L)^2 - Bm(n\pi/L)^4/\rho_0 - 2D\rho_0 - 3E\rho_0^2$, δ 是 Dirac 函数, H , M 和 N 与方程 (12) 中的系数相联系.

首先, 利用线性稳定性分析讨论位错均匀态的稳定性. 在变形刚开始时, 位错是均匀分布的. 随着变形中 ρ_0 的增大, 当至少有一个 ω_n 变为正值时, 均匀态失稳. 由于 ω_n 以指数形式存在于形式解中, 令 $\omega_m = \max(\omega_n)$, 则在均匀态失稳初期, 可以忽略除其增长指数为 ω_m 以外的所有波. 因此, 具有 ω_m 的波决定了变形初期位错组态的形态和位错胞尺寸. 令 $\partial \omega_n / \partial n = 0$, 得到均匀态失稳的临界条件及相应的位错胞尺寸 λ_c 分别为

$$\rho_0 \geq \rho_{0c} = 2D/(H/4Bm - 3E), \\ \lambda_c = 4\pi Bm/H\sqrt{\rho_{0c}}.$$

位错均匀态失稳后, 具有最大增长指数 ω_m 的波 (其振幅为 C_m) 占统治地位, 即 $C_m \gg C_i$. 随着变形的进行, 位错组态发生进一步的变化. 考察除 C_m 之外其他波的振幅变化情况, 对于 $i \neq 2m$ 和 $i = 2m$ 两种情况, 由方程 (15) 可得

$$\dot{C}_i = \omega_i C_i - 0.75N[C_i^3 + 2C_i C_m^2], \quad (16)$$

$$\dot{C}_{2m} = \omega_{2m} C_{2m} + M C_m^2 - 0.75N[C_{2m}^3 + 2C_{2m} C_m^2]. \quad (17)$$

从式 (16) 和 (17) 中可以看出, C_i 由于 $-C_i C_m^2$ 项的作用而不能长大, 而 C_{2m} 由于 C_m^2 项的作用是可以长大的. 因此在变形过程中, 经过各个波之间的“竞争”, 只有振幅 $C_m, C_{2m}, C_{4m} \dots$ 的波存在. 就是说位错胞尺寸在变形过程中是一半一半地减小, 而不是通常认为的连续减小. 这与

大量实验中观察到的具有分级特征的位错胞结构^[9]是一致的。

2.2 位错组态演化的动态模拟

在上节中分析了位错组态演化的基本特征。为了进一步研究其细节,以纯铝为例,通过对方程(12)数值求解来模拟位错组态的演化过程。取外加的总变形速率 $\dot{\gamma}$ 为 1s^{-1} ,系统长度 L 为 $16\mu\text{m}$,时间和空间步长分别为 10^{-8}s 和 $0.1\mu\text{m}$ 。初始位错密度取为 $2 \times 10^{12}\text{m}^{-2}$,外加其 5% 的随机起伏。 D 和 E 的值是参照文献[6]中给出的范围选取的。其他相关的物理参数取自参考文献[7]。

综合参考文献[8—10]中的结论,可以假定位错增殖率 C 有如下形式:

$$C = a_1 s^m + a_2 \rho_m v, \quad (18)$$

其中,等式右边第一项和第二项分别是位错产生率和运动过程中的增殖率, a_1 和 a_2 是正的系数,这里的 m 约为 100。从中可以看出,位错产生速率对应力 s 极其敏感。这样,尽管 s 在空间坐标 x 上差别不大,但位错增殖率的差别是相当大的。在位错密度高的地方,位错产生速率很小;在位错密度低的地方,位错产生速率则比较大。这与前人的多数结论是一致的,同时也保证了在数值计算过程中位错密度不会出现负值的情况。位错组态轮廓线演化过程的动态模拟结果总结中图 1 中。可见,模拟结果与上节中的理论分析结果及实验结果是一致的。

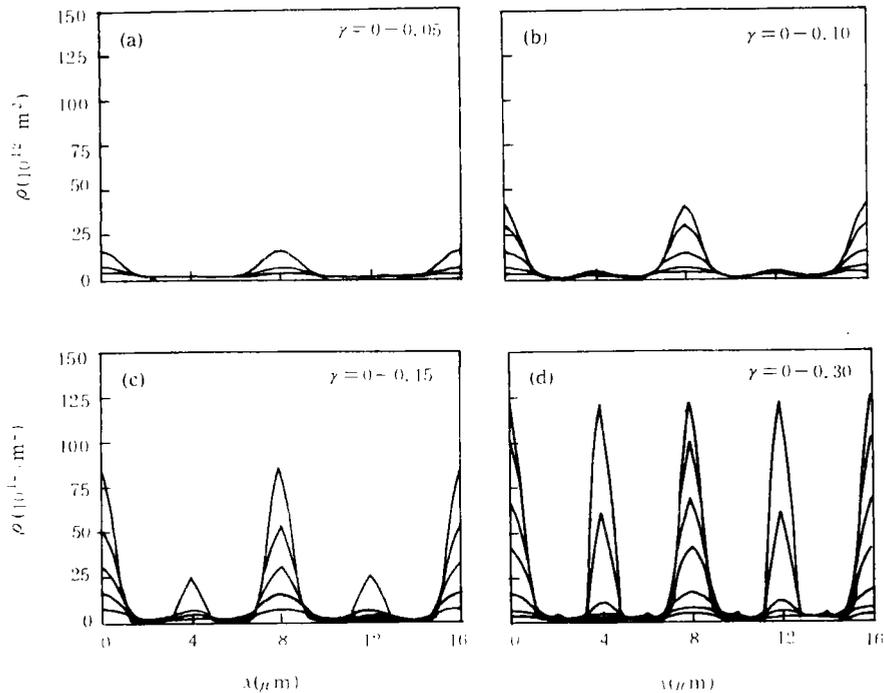


图 1 纯铝位错组态轮廓线的演化过程

2.3 应力-应变曲线

在前面的位错组态模拟中,考虑了刃型位错密度的变化。当计算外加应力时,还应该考虑螺型位错密度的变化。在本文的一维模型中,螺型位错密度与坐标 x 无关,利用 Kocks 的

分析^[1], 螺型位错密度的变化率为, $\dot{\rho}_s = C - L_r \dot{\rho}_s / b$, 其中 L_r 是位错交滑移回复时位错消失长度. 根据力学平衡条件, 外加应力为

$$\tau = \frac{1}{2} \int_0^2 \tau_c dx = \frac{1}{L} \int_0^L s \mu b \sqrt{\rho + \rho_s} dx. \quad (19)$$

与上节中的位错组态演化过程相对应的、纯铝的剪应力 - 应变曲线如图 2 所示. 从中可以看出, 应力 - 应变曲线具有明显的 4 个硬化阶段. 第一阶段对应于位错均匀态向不均匀态转化过程; 第二阶段是线性硬化阶段, 对应于位错胞尺寸不断变小的过程; 第四阶段也是线性硬化阶段, 但其硬化率比第二阶段小得多, 在第四阶段中, 位错胞尺寸不变, 但胞壁上的位错密度不断增大. 第三阶段是第二和第四阶段之间的过渡阶段.

2.4 动态再结晶的临界判据

动态再结晶在金属热加工中是非常重要的问题, 然而目前对其发生的临界判据还没有很好地理解. 在金属塑性变形中, 最典型的位错组态是具有位错不均匀分布的位错胞和亚晶结构. 这样, 尽管空间各处总的变形是相同的, 但塑性变形是不同的. 塑性变形的梯度需要几何必需位错来弥补. 正是这些几何必需位错造成了各部分之间的取向差, 而取向差是发生再结晶的必要条件.

除几何必需位错以外的位错趋于形成位错偶, 主要由位错偶组成的位错墙是不可动的, 阻碍了再结晶的发生. 回复是位错偶消失的过程, 随着位错偶密度的减少, 几何必需位错在位错墙中逐渐显露出来, 即由位错胞向亚晶转化. 亚晶界是可动的, 通过吸收周围的几何必需位错, 亚晶界逐渐转变为大角度晶界, 即发生了再结晶.

根据上面的分析, 我们认为动态再结晶发生的临界条件是: 决定位错胞取向差的平均几何必需位错密度 $\bar{\rho}_g$ 与位错墙中的位错密度 ρ_w 之比大于某一临界值. 即

$$\varphi = \bar{\rho}_g / \rho_w \geq \varphi_c. \quad (20)$$

利用人们熟知的关系式 $\bar{\rho}_g = \frac{1}{b} \frac{\partial \gamma}{\partial x} \approx \frac{2\gamma}{b\lambda}$, $\rho_w \propto \rho_0$ 和 $\tau = \alpha \mu b \sqrt{\rho_0}$ (这些关系式更详细的推

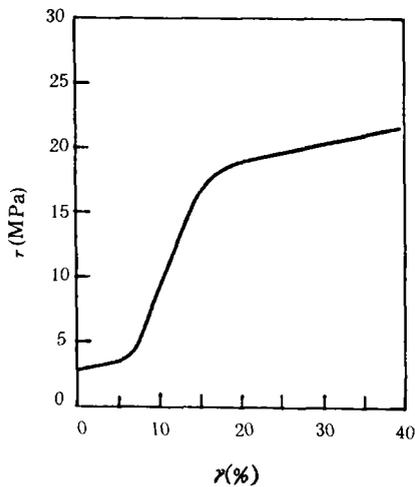


图 2 计算的纯铝剪应力 - 剪应变曲线

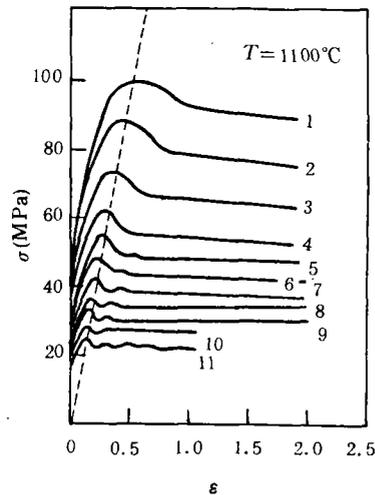


图 3 0.25% 碳钢在不同变形速率下的应力 - 应变曲线^[13]

导过程可参见参考文献[12]), 得到动态再结晶发生的临界条件为

$$\gamma_c \geq K\tau_c, \quad (21)$$

式中 K 是与变形温度有关的常数. 也就是说在变形温度一定时, 与开始发生动态再结晶相对应的点成直线关系. 相关的实验结果见图 3.

3 在静态回复和蠕变中的应用

3.1 静态回复中的应用

冷变形金属的静态回复一直得到许多研究者的关注, 这不仅是因为它在实际生产中的重要性, 更主要的原因是它能比较清楚地反映出在内应力的作用下位错运动的微观机制, 进而为金属塑性变形过程、静态再结晶以及包辛格效应的理论研究奠定基础. 大量的实验研究表明: 在静态回复过程中, 位错密度减小, 位错要重新排列, 同时变形金属在内应力的作用下要产生微小的(回复)变形, 变形的方向(指拉伸或压缩)先与预应变的方向相反, 后相同.

对方程(8)–(10)及其附加条件进行数值模拟. 取 2.2 节中模拟得到的变形量为 $\gamma=0.15$ 时的位错密度分布和等效应力分布为初始条件, 并令外加应力为零. 模拟得到的回复变形如图 4 所示, 假设其中的正方向与预应变方向相同. 这说明变形金属是有极性的(方向性), 即在静态回复过程中产生微小的、方向不同的变形, 变形的方向先与预应变的方向相反, 后相同. Hasegawa 等人从实验中得到的、经过不同预应变的纯铝试样在静态回复中回复应变与回复时间的关系如图 5 所示.

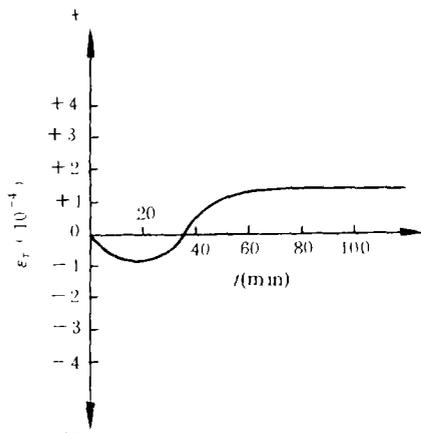


图 4 计算的回复变形和回复时间的关系

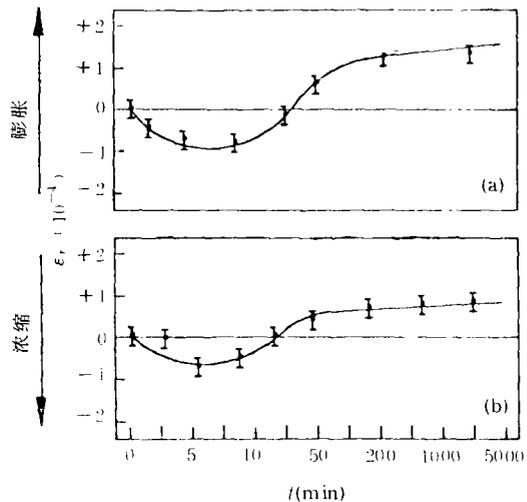


图 5 纯铝的回复应变和回复时间的实验关系^[14]

3.2 蠕变中的应用

虽然几十年来人们对蠕变的研究取得了很大的进展, 但仍存在许多基本问题没有解决, 例如亚晶尺寸的变化、长程内应力的作用、应力指数的变化等. 对非稳态蠕变研究得比较少. 出现这些问题的根本原因是现有的蠕变理论不能从根本上解决位错组态演化问题. 在蠕变条件下(外加应力为常数), 对方程(8)–(10)及其附加条件进行数值计算. 计算结果表明^[15]:

模拟得到的蠕变曲线明显地出现蠕变的几个阶段特性;计算得到的稳态蠕变速率与外加应力成幂函数关系,其中应力指数为 3.434,与一般材料在高温低应力条件下应力指数 3—5 相符合。

在模型中包含的长程内应力的值可以为正,也可以为负,但在整个系统的积分为零,这解决了以往的位错蠕变模型中长程内应力在整个系统中不变号的问题,使对蠕变行为的模拟满足了力学平衡条件,因而更加符合实际变形情况。

4 结 语

本文中的位错组态演化模型建立在非平衡不可逆过程热力学基础上,与传统的位错模型有本质上的差别,因而能定量地分析和模拟位错组态的演化过程及与之相对应的宏观力学行为。利用该模型对位错组态演化、加工硬化、静态回复、动态再结晶临界条件以及蠕变等问题的分析和模拟与绝大多数已知的实验结果是定性一致的。因此,在一个统一的理论模型基础之上,分析和研究金属塑变形中出现的多种现象和问题是可以实现的。

参 考 文 献

- [1] Kubin, L. P., *Materials Science and Technology*, Vol. 6, Weinheim, 1993, 137—190.
- [2] Kratochvil, J., *Rev. Phys. Appl.*, 1988, 23: 419—429.
- [3] Kubin, L. P., *Scripta Metall. Mater.*, 1992, 27: 957—963.
- [4] Aifantis, E. C., *Non-Linear Phenomena in Materials Science*. Aussyos, France, 1987, 397—406.
- [5] Hansen, N., Kuhlmann-Wilsdorf, D., *Mater. Sci. Engng.*, 1986, A81: 141—161.
- [6] Franek, A., Kratochvil, J., *Mater. Sci. Eng.*, 1991, A137: 119—126.
- [7] Frost, H., Ashby, M. F., *Deformation Mechanism Maps.*, Oxford, Pergamon, 1982.
- [8] Feltner, C. E., *Acta Metall.*, 1963, 11: 817—827.
- [9] Bammann, D. J., Aifantis, E. C., *Acta Mech.*, 1982, 45: 91—156.
- [10] Quesnel, D. J., Tsou, J. S., *Scripta Metall.*, 1980, 14: 935—940.
- [11] Kocks, U. F., *J. Engng. Mater. Tech.*, ASME, 1976, 98: 76—86.
- [12] 高维林等, 东北工学院学报, 1993, 14: 49—53.
- [13] Rossard, C., Blain, P., *Mem. Scient. Revue Metall.*, 1959, 56: 285—295.
- [14] Hasegawa, T., Yakou, T., *Acta Metall.*, 1982, 30: 235—247.
- [15] Gao, W. L. et al., *Scripta Metall. Mater.*, 1994, 31: 9.