

蠕变空洞形核研究^①

刘昌隆 张 平 潘 勇 马石城

(湘潭大学科研处, 湘潭 411105)

摘 要 基于空位扩散和凝聚的物理学背景, 应用修正逾渗模型从微观层次上描述空洞形核过程, 推导出空洞形核时间表达式。讨论了空洞形核的地点和方式。对二维点阵空洞形核过程进行了计算机模拟。

关键词 蠕变断裂 空洞形核 逾渗理论

空洞的形成和生长过程及其规律是蠕变断裂理论的一个重要研究课题。Greenwood^[1]首先提出空洞形核理论, 认为空洞是由于空位在晶界上凝聚造成的。Raj 和 Ashby^[2]定量地处理了空洞形核, 考虑形核过程中界面能变化以及应力作用在界面上所作之功推导出形核速率表达式。Hull 和 Rimmer^[3]提出了扩散控制空洞长大理论, Hancock^[4]提出了幂律蠕变控制的空洞长大模型, 随后一些改进模型和复合机制模型相继被引入。然而, 对于空洞形核这样一个发生在微观层次上的微观缺陷运动和相互作用的演化过程, 仍缺少建立在微观层次上的适合模型。

本文根据空位凝聚过程与点渗流过程的相似性, 运用修正逾渗模型从微观层次上描述空洞形核过程, 把对空位凝聚导致空洞形核问题的研究转化为对一个强无序和具有随机几何结构系统长程联结性问题的研究, 由此确定了空洞形核临界判据并推导出形核时间表达式。在计算机上用 Monte-Carlo 方法模拟了微观系统空位凝聚过程。

1 局域微系统与修正逾渗模型

将系统划分为如下两个子系统:

(a) 微观体积 ΔV 的全体构成的子系统 V_1

$= \{\Delta V\};$

(b) 系统的其余部分: $V_2 = V - V_1$

微观体积是这样选取的, 包含于空位凝聚区内, 尺寸与空洞核大小相当。 ΔV 的分布没有特殊限定, 由凝聚区在空间中的分布决定。在微观体积 ΔV 内可以经受各类涨落, 而对系统其余部分进行平均, 即采用所谓的涨落的约化描述^[5]。

仅考虑物质输运, 在高、中温度蠕变问题中, 可认为恒定温度分布, ΔV 和 $V - \Delta V$ 之间的耦合用输运项描述。根据 Prigogine 等人研究的结论^[6], 当 $\Delta V/V$ 充分小和相关是充分短程条件下, ΔV 和 $V - \Delta V$ 是统计独立的。依上面定义的两个子系统显然满足此条件, 故可认为在子系统 V_2 中(1)~(3)式成立。 V_2 类似于一个空位贮库源源不断地向 ΔV 输运空位。

$$n_1 = N \exp\left(-\frac{\mu_1}{KT}\right) \quad (1)$$

式中 N —晶体点阵格点总数; n_1 —空位数。

$$J_0 = 2an_0\nu_0 \exp\left[-\frac{E_1}{KT}\right] \sinh\left[\frac{Fa}{KT}\right] \quad (2)$$

在弱场条件下, $Fa \ll KT$, 上式简化为:

$$J_0 = \frac{1}{KT} a^2 n_0 \nu_0 \exp\left(-\frac{E_1}{KT}\right) \quad (3)$$

选取 ΔV 的代表单元作晶格点阵离散处理, 点阵格点可能有两种状态: 为空位占有或为原子占有。称空位占有为占有态或空态, 原

① 收稿日期: 1994-08-29; 修回日期: 1994-10-08

子占有为本态。

在微单元内部，高深度空位影响使力场非常复杂，远场对滞留空位的影响可忽略不计，并认为空位在微单元中随机分布。这样，从规则的、周期的点阵出发，对每个格点无规地指定反映统计特征的非几何性的两态性质，将规则的几何结构转化为随机几何结构。因此我们的研究对象——微单元成为一个强无序和具有随机几何结构的系统。空位在微单元内的凝聚过程相当于随单元内空位占有率增加，空位和空位集团相互作用的演化过程。这一现象类似于点逾渗过程^[6]。但是，注意到点逾渗过程中形成的占有集团内部通常含有未占据格点，而空位凝聚过程中形成的空位集团内部全部为占据格点。在几何特征上表现为渗流集团是飘渺、单薄和内部多孔的，而空位集团是充实和内部无孔的。故对逾渗模型予以适当修正，规定占有集团内部不含本态格点，以此保持与空位凝聚过程相一致。

2 空位凝聚与空洞形核过程的计算机模型

考虑一个二维正方点阵，令点阵格点空位占有几率为 p ，则本态几率为 $q = 1 - p$ 。相互联结的 S 个空位形成一个集团，称为 S -集团。在计算机上用 Monte-Carlo 方法模拟，结果表明，在空位凝聚过程初期，空位几率很小，几乎所有的集团都是孤立的。随着过程继续，一些集团逐渐长大，出现若干较大集团，见图1。图中黑点代表空位。当 p 继续增大，一些集团合并成二、三个大集团，图2给出 $p = 0.4256$ 的结果。从图3($p = 0.5329$)以及图4($p = 0.5831$)可看到大集团进一步合并生成更大集团的情形。在图4中，最大集团 $S_{\max} = 2710$ ，次大集团 $S = 275$ ，两集团之和已超过单元全部空位的半数。在空位凝聚过程最后阶段，某个大集团吞并其他集团逐渐扩张到整个单元，形成联结单元上、下两端(或左、右两端)的跨

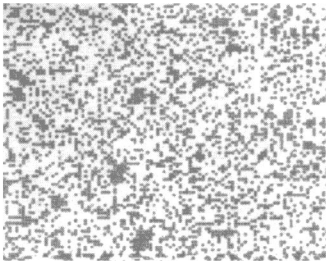


图1 $p = 0.3219$ 时，计算机模拟结果

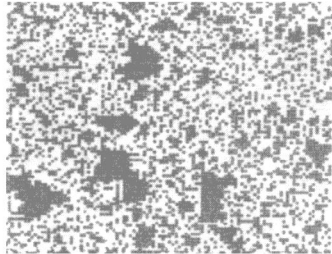


图2 $p = 0.4256$ 时，计算机模拟结果

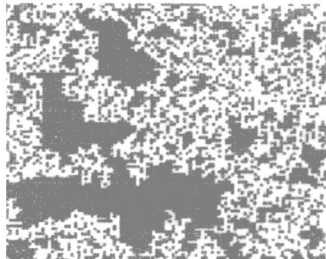


图3 $p = 0.5329$ 时，计算机模拟结果

越集团。图5是 $p = 0.7178$ 的模拟结果，从中可看到刚形成跨越集团的情形。此时最大集团 $S_{\max} = 5317$ 占单元空位总数的74%。

当单元中形成跨越集团时，此集团的跨越长度达到空洞核尺寸，故称此时单元处于形核状态。引入形核几率 p_∞ ，它的定义是任一指定格点属于跨越集团的几率。

存在一个临界几率 p_c ，当 $p < p_c$ 时，微单元内无跨越集团出现，形核几率为零，微系统处于非形核状态；当 $p > p_c$ 时，单元中出现跨越集团，形核几率 p_∞ ，微系统处于形核状态。形核几率标志着在 p_c 点单元长程联接性从无到有的本质变化，对系统状态而言，标志着微系统从非形核状态到形核状态转变的突发性

行为。 p_∞ 和 p 的一般关系类似于逾渗过程， p_∞ 对 p 的曲线是连续的，但一阶导数在 p_c 处不连续，因此，把微系统从非形核状态到形核状态的转变看作相变的话，这种相变是连续性相变，这里起温度作用的量是空位占有几率 p ，序参量是形核几率 p_∞ 。同时， p_∞ 还代表整个微系统中被跨越集团所占据的百分比，在 p_c 以上，当 p 增加时，它也是对跨越集团“体积”增加的主要量度。

3 空洞形核时间

实际流经畸变区的空位流 J 可表示为：

$$J = J_0 + J_1(p) \quad (4)$$

式中 p 表示畸变区内空位浓度。

根据微单元形成跨越集团对应于空洞形核的关系，将空洞形核的临界判据定义为：

$$p = p_c \quad (5)$$

设 ΔV 的边界曲面为 Σ ，在时间间隔 Δt 内空位增加数为 Δn ，则有：

$$\Delta n = B \int_{\Sigma} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} \, d\Sigma \Delta t \quad (6)$$

将(4)式代入上式，并设微单元总格点数为 N_1 ，可得到：

$$\dot{p} = \frac{B}{N_1} \left(\int_{\Sigma} \mathbf{J}_0 \cdot \mathbf{n} \, d\Sigma + \int_{\Sigma} \mathbf{J}_1(p) \cdot \mathbf{n} \, d\Sigma \right) \quad (7)$$

式中 $\mathbf{J}_0$ 由(2)或(3)式得到，它由系统状态确定，与 ΔV 的状态无关，在恒定温度和外力场条件， $\mathbf{J}_0$ 是定常量。设：

$$H = \int_{\Sigma} \mathbf{J}_0 \cdot \mathbf{n} \, d\Sigma \quad (8)$$

$$\text{和 } g(p) = \int_{\Sigma} \mathbf{J}_1(p) \cdot \mathbf{n} \, d\Sigma \quad (9)$$

将(8)和(9)式代入(7)式并考虑到 $p_0 \approx 0$ 和(5)式条件，容易得到空洞形核时间 t_0 如下形式：

$$t_0 = N_1 \int_0^{p_c} \frac{dp}{B(H + g(p))} \quad (10)$$

函数 $g(p)$ 根据形核地点的具体情况确定， p_c 根据修正逾渗模型由计算机模拟确定。表1是我们对维正方点阵模拟计算的结果。

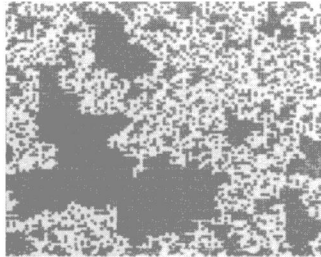


图4 $p = 0.5831$ 时，计算机模拟结果

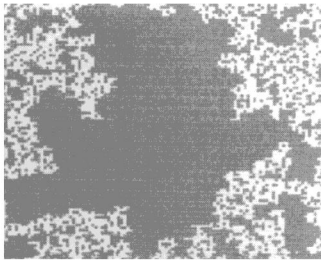


图5 $p = 0.7178$ 时，计算机模拟结果

表1 临界几率 p_c

单元数	50×50	80×80	100×100
临界几率	0.537	0.606	0.712

4 空洞形核计算实例

设空洞核在晶界形成,则附加空位流 $J_1(p)$ 由晶界输运空位所控制,与微单元内空位浓度关联性质可用线性函数描述,即

$$J_1(p) = A_0 + A_1 p \quad (11)$$

式中 A_0 由晶界输运性质确定, A_1 是关联系数。作漂移运动进入晶界的空位经由晶界输入微单元,设有输运长度为 L ,仅考虑单个空洞核时,它等于晶界长度 l ,或拉力方向与晶界成 α 角度,可得到:

$$A_0 = \beta J_0 l \sin \alpha \quad (12)$$

式中 β 为晶界输运系数。

由(9)~(12)式可得形核时间表达式如下:

$$t_0 = \frac{N_1}{A_1 \delta} \ln \left(1 + \frac{\delta A_1 p_0}{H + \beta \delta L J_0 \sin \alpha} \right) \quad (13)$$

式中 δ 为晶界宽度。在实际应用时,可进一步简化为:

$$t_0 = \frac{N_1 p_c}{H + \beta L \delta J_0 \sin \alpha} \quad (14)$$

由(13)和(14)式可知,当 $\alpha = \pi/2$ 时, t_0 有极小值。因此,我们可以获得一个简单而颇有意义的推断,在与拉应力近乎垂直的晶界上最先出现空洞核,因而是断裂的起源处。这一结论与大量实验事实相吻合。

当形核地点在其他位置时,只需对附加空位流给与适当修改,类似地可求出形核时间。

5 结语

讨论了力学和材料结构等因素对空洞形核的影响。结果表明,空位凝聚过程与点渗流过程具有相似性,因而可将空位凝聚导致空洞形核问题的研究转化为对一个强无序和具有随机几何结构系统长程联结性问题的研究。空洞核从无到有的突发性转变对应于微系统从非形核状态到形核状态的突发性转变,据此严格定义了空洞核形成的临界判据,从而推导出空洞形核时间表达式。并在计算机上模拟了空位凝聚和空洞形核过程。将这些工作与空洞生长模型适当结合,可构成较完整的蠕变断裂模型。

分析讨论了空洞形核的有利地点以及方式。晶界滑移和受阻以及晶内滑移带与晶界或杂质交割是确定空位凝聚区即形核地点的重要因素,作为应用实例讨论了空洞在晶界形核的情形,并得到结论,在与拉应力近乎垂直的晶界上最先形成空洞核。

参考文献

- 1 Greenwood J N. Acta Metall, 1954, 2: 250.
- 2 Raj R, Ashby M F. Acta Metall, 1975, 23: 653-666.
- 3 Hull D, Rimmer D E. Phil Mag, 1959, 4: 673.
- 4 Hancock J W. Met Sci, 1976, 9: 319-325.
- 5 Nicolis G, Prigogine I. Self-Organization In Nonequilibrium Systems. John Wiley & Sons, 1977.
- 6 Zallen R. The Physics of Amorphous Solids. John Wiley & Sons, 1983.