

温度对金属材料钼位错发射的影响*

汤奇恒 王自强

(中国科学院力学研究所, 北京, 100080)

摘 要 应用关联参照模型、随位错位置变化的柔性位移边界条件和三维分子动力学方法研究了体心立方(BCC)金属晶体钼在不同温度下裂尖发射位错的力学行为。随着温度的提高,不但发射位错的临界应力强度因子下降而且在同一应力强度因子条件下,发射位错的数量也增加。位错速度和不全位错之间的扩展距离对温度不敏感。在位错发射过程中,发现了稳定的和不稳定的两个变形状态。在稳定的变形状态,位错发射后,塞积在远离裂纹尖端处;必须增加外载,裂尖才可能继续发射位错。在不稳定变形状态,在同样的外载下,裂尖可以发射大量的位错。

关键词 关联参照模型, 柔性位移边界, 分子动力学, 位错发射, 温度

1 引言

在研究裂尖位错发射和形核过程中,温度的影响是一个重要的因素。

多年来材料学和力学工作者从各个不同的角度和层次,从理论上和实验上,研究温度对材料力学行为的影响。Samuel 和 Roberts^[1], Chiao 和 Clark^[2]等人对晶体的断裂行为与温度关系进行了实验工作,结果表明存在一个转变温度,低于此温度材料呈脆性断裂,高于此温度,材料呈韧性断裂。Brede 和 Haasen^[3]认为温度对材料力学行为的影响主要体现在裂尖位错形核、发射和裂纹断裂的过程中。Brede^[4]研究了温度对材料韧脆转变的影响,发现韧脆转变温度随着加载率升高而升高。

Rice 和 Beltz^[5]在 Peierls 框架下,对 Cu, Fe, Si 进行了分析,采用热激活温度的概念研究了温度对位错发射和滑移的影响,指出温度降低了发射位错所需的外载荷。Cheung 等人^[6]研究半矩形位错环的形核时也得出了同样的结论。

Mullins^[7]采用 Morse 对势,进行了分子动力学方法的研究,在低温下裂纹扩展是脆性的,高温下由于发射位错,裂纹钝化导致韧性扩展。Kitagawa 和 Nakatani^[8]的分子动力学研究发现热激活能和温度是线性关系。Li^[9]在 Rice 和 Thomson^[10]框架下,直接将热激活能作为外载荷能量释放率的函数,讨论了裂尖位错发射所需的激活能。张永伟等人^[11]利用多体势研究了温度的变化对裂尖位错发射的影响,温度的提高将会降低位错发射的临界应力强度因子。

本文应用钼多体势^[12],关联参照模型^[13],用分子动力学方法在不同的温度条件下,讨论了裂尖位错的力学行为。文[13]提出了关联参照模型,基于关联参照模型,自然地引进了随位错位置变化的柔性位移边界条件;并且柔性位移边界条件能使位错顺利地穿越边界,避免了边界对位错发射的影响,便于在各种不同的温度条件下研究位错与裂纹、位错与位错之间

* 1997-11-03 收到第 1 稿, 1998-05-21 收到修改稿

的相互作用 这里选取的温度分别为 50 K, 120 K, 200 K 和 300 K 等 4 种不同的温度值 结果表明温度升高不但能降低位错发射所需要的外载荷, 而且在同样的应力水平上发射的位错数目也有增加的趋势

2 关联参照模型

图 1(a) 和图 1(b) 是关联参照模型的两个示意图 图 1(a) 示意一个具有单边裂纹的分子动力学模拟块体, 区 1 为分子动力学模拟的主要区域, 区 2 是分子动力学的边界区 S_R 表示从裂尖发射的位错

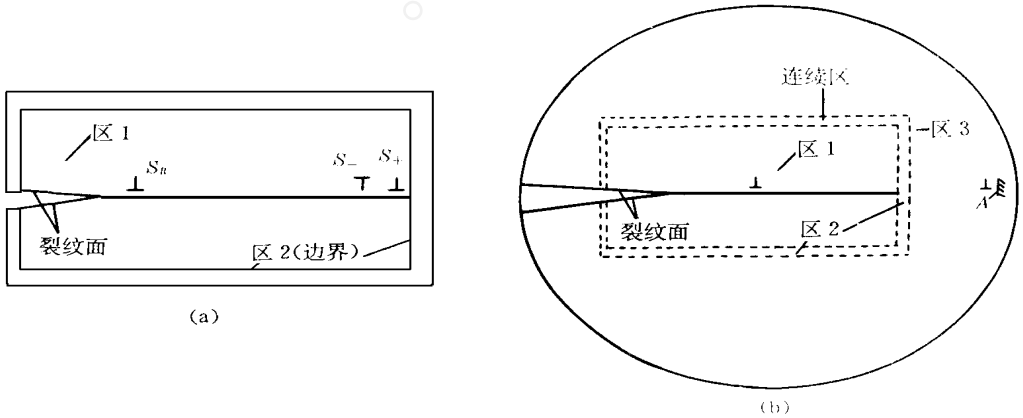


图 1(a) 分子动力学模拟块体位错发射示意图

图 1(b) 含单边裂纹无限大连续体示意图

设想一个含单边裂纹的无限大连续体, 如图 1(b). 连续介质的弹性常数 E, G, ν 同单晶体铝一样 图中虚线框尺寸与图 1(a) 分子动力学模拟块体尺寸也一样 真实的分子动力学模拟块体(图 1(a))与设想的连续介质(图 1(b))有关联 关联参照模型有两个要求:

(1) 图 1(a) 的分子动力学模拟块体的边界区 2 的原子位移由其关联的图 1(b) 连续介质区 2 给出;

(2) 假定有 $N_T = N_1 + N_3$ 个位错从裂尖发射 图 1(b) 区 1 的 N_1 个位错, 其位置由图 1(a) 分子动力学模拟块体的原子构形图确定 图 1(b) 区 3 中的 N_3 个已发射位错, 其位置由细观力学位错塞积理论确定

在分子动力学模拟过程中, 上述两个要求是关联参照模型始终要求和保证的 大量的材料实验^[2,3]和计算结果表明, 一旦 K_{II} 大于 K_{IIc} 时, 位错从裂尖被发射出来, 而且在不需要继续加载或加载很小时, 位错会继续不断地从裂尖发射 为了用分子动力学来模拟这一物理现象, 在下面的计算模拟中, 采用特定的加载方式 当 K_{II} 大于 K_{IIc} 时, 位错已在裂尖形核, 停止分子动力学继续加载, 维持载荷不变进行分子动力学弛豫 因为位错一旦形成, 它是一个不稳定结构, 难以停留在裂纹裂尖, 必然会滑移出裂端区域 应用文[13]提出的在柔性位移边界条件下位错穿越边界的技术 位错穿越边界后假定塞积距裂尖 5000 a_0 处 如果分子动力学模拟区 1 仍有位错, 则继续弛豫; 如果没有, 则进行纯剪加载, 加载速率和前面一致

按照关联参照模型要求 2, 位错从裂纹尖端发射, 沿着滑移面迅速向晶体内部运动 见图 1(b), 从整个无限大系统来看, 位错的出现和位错的运动改变了连续介质的应力场和位

移场 自然地, 区 2 的应力场和位移场也将随着变化 按照关联参照模型要求 1, 真实的分子动力学模拟块体边界区 2 的位移场随着位错不断运动而改变 因此在分子动力学模拟过程中, 边界区 2 原子的位置随着位错的运动需要相应地作调整 因此边界条件实际上是柔性位移边界条件 含单边裂纹无限大介质的位移场由下式给出

$$u_l = u_l^A + \sum_{i=1}^{N_T} u_l^D(x, y; x_i), \quad K_{II} = K_{IIe}, \quad l = 1, 2 \quad (1)$$

其中 x_i 为离散位错的位置, u_l^A 外载荷所对应的位移场, $u_l^D(x, y; x_i)$ 是第 i 个位错所对应的位移, l 表示坐标分量 式(1)中的 u_l 是外载荷和位错位置的函数, 表达了区 2 的位移场 关联参照模型的详细描述和有关的表达式参见文[13]

3 计算方法

3.1 几何条件

坐标轴 x, y, z 分别取为 $[111], [1\bar{1}0], [11\bar{2}]$ 沿 x 方向长度为 $500 \times (\sqrt{3}/6) a_0$; 沿 y 方向长度为 $40 \times (\sqrt{2}/2) a_0$, 沿 z 方向为 $6 \times (\sqrt{6}/6) a_0$ 沿 x 方向, 每三层原子构成一个周期, 周期为 $\sqrt{3} a_0/2$; 沿 y 方向, 二层为一个周期, 周期为 $\sqrt{2} a_0$; 沿 z 方向, 六层为一个周期, 周期为 $\sqrt{6} a_0$ 将模拟块体沿 $-x$ 方向去掉二层原子形成单边裂纹, 长度为 $120 \times (\sqrt{3}/6) a_0$, 共有 20000 个原子. 见图 2(a)、(b).

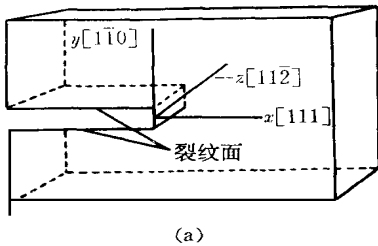


图 2(a) 分子动力学模拟块体示意图

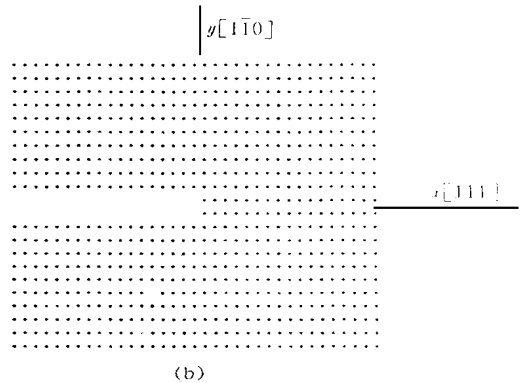


图 2(b) 裂纹尖端原子构型示意图

3.2 边界条件和加载方式

采用文[13]提出的柔性位移边界条件, 边界原子的位置由式(1)确定; 纯剪加载, 应力强度因子 K_{II} 为加载时控制参量, 加载速率 \dot{K}_{II} 为 $0.0706 \text{ MPa m}^{1/2}/\text{ps}$

3.3 势函数

应用文[12]构造的金属钨多体势

3.4 计算方法

采用跳蛙法^[14].

3.5 温度条件

假想被模拟的分子动力学样品与一个很大的热源联在一起^[14,15]。在初始时刻,对被模拟样品的所有原子实施在给定温度下的 Maxwell 速度分布,在模拟过程中,被模拟样品的任何位置都具有同样的温度,就是说加载和位错发射等可能引起的温度的变化都忽略不计。这里的温度分别为 $T = 50\text{ K}$, $T = 120\text{ K}$, $T = 200\text{ K}$, $T = 300\text{ K}$ 。

4 结果和讨论

从图 3 可以看出,当时间 $t = 9.5\text{ ps}$ 时,第一个全位错的三个不全位错完全形成,此时应力强度因子值为 $0.668\text{ MPam}^{1/2}$ 。特点是体心立方晶体发射位错是以不全位错形式出现的;一个全位错分解为三个不全位错,而且不全位错的扩展距离很小,约为 4 个晶格常数。在小于 $5a_0$ 范围内,位错处于加速运动状态;当位错位置与裂尖距离超过 5 个晶格常数,位错滑移速度约为 $1800\text{ m/s} \sim 1950\text{ m/s}$ 。

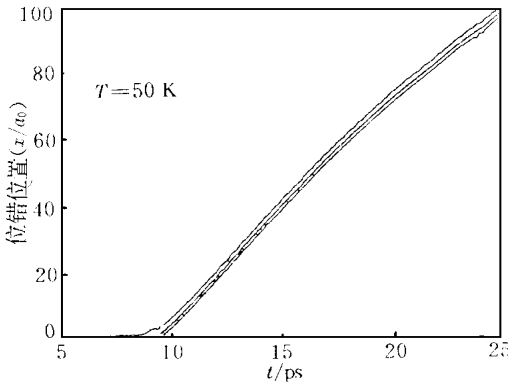


图 3 位错位置与时间的关系, $T = 50\text{ K}$

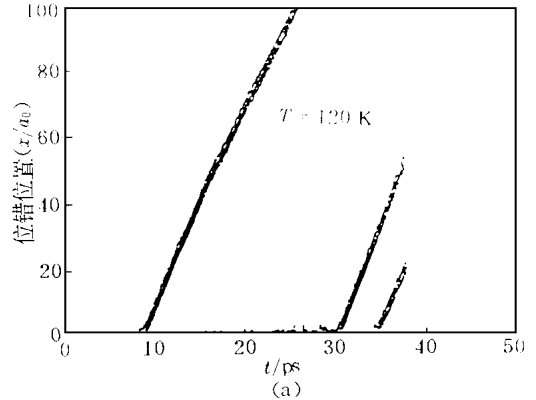


图 4(a) 位错位置与时间的关系, $T = 120\text{ K}$

图 4(a)、(b)、(c) 是温度 $T = 120\text{ K}$ 的模拟结果。图 4(a) 是位错位置 x/a_0 关于时间 t 的关系图,可以看出已有三个全位错(共 9 个不全位错)被发射,三个全位错发射的时间间隔分别为 21 ps 和 4 ps ,说明发射位错的时间间隔在以皮秒(ps)为单位的微观时间尺度上是不均匀的,但在宏观实验上是感觉不到的。图 4(b) 是位错位置 x/a_0 关于外力场应力强度因子 K_{II} 的关系。结合图 4(a)、(b),可得知第一个全位错发射的临界强度因子约为 $0.64\text{ MPam}^{1/2}$,较 $T = 50\text{ K}$ 时下降了约 4.2%。第一个全位错穿越边界并且假定被塞积在距裂尖 $5000 a_0$ 位置处。第一个全位错和裂纹的相互作用导致裂尖附近区域的应力下降,裂尖处于一个稳定的变形状态。在此状态下,除非再加载,否则裂尖不会继续发射位错。

当应力强度因子约为 $0.73\text{ MPam}^{1/2}$ 时,模拟系统处于一个不稳定的变形状态,这与稳定的变形状态是不相同的。在此状态下,维持载荷不变,大量的位错从裂尖被发射。从图 4(a)、(b) 可以观察到,对应于同一个应力水平,第二组和第三组不全位错被发射。这个例子告诉我们,模拟系统经历了稳定的和不稳定的两个变形状态;当外载荷达到一定的应力水平,离散原子系统处于不稳定的变形状态。

对于 $T = 200\text{ K}$ 的例子,当 $K_{II} = 0.57\text{ MPam}^{1/2}$ 时,第一个全位错(3 个不全位错)从裂

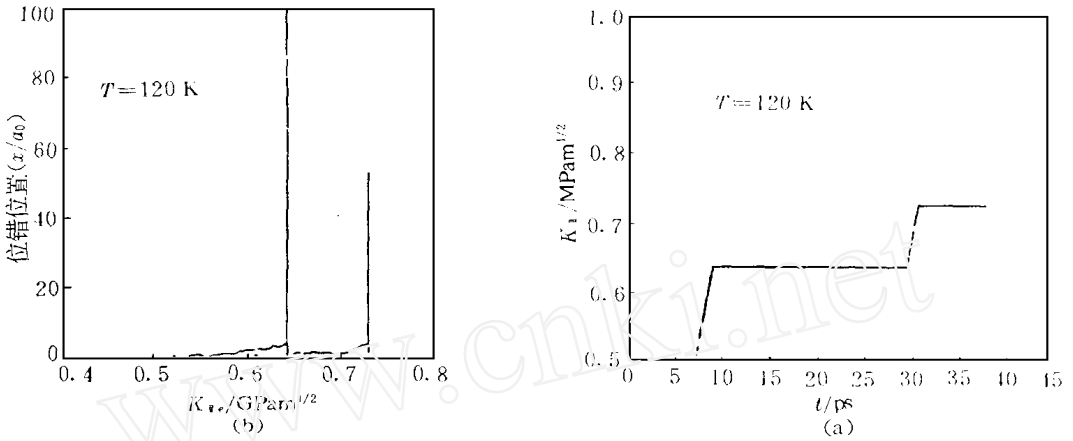


图 4(b) 位错位置与应力强度因子的关系, $T = 120 \text{ K}$ 图 4(c) 应力强度因子与时间的关系, $T = 120 \text{ K}$

尖发射 和 $T = 120 \text{ K}$ 的例子比较, 应力强度因子下降了。从图 5 观察到, 当 $t = 4 \text{ ps}$ 时, 第一个不全位错已经形核, 没有滑移远离裂尖, 而是徘徊在裂尖附近 当 $t = 8 \text{ ps}$ 时, 第一个全位错的三个不全位错已经形成并且迅速地滑移远离裂尖区域 按照特定的加载方式, 我们暂时停止加载, 维持载荷不变, 对模拟系统进行弛豫 当 $t = 10 \text{ ps}, 15 \text{ ps}$ 时, 第二个和第三个全位错分别从裂尖被发射 第一个和第二个全位错的空间间距约为 $15a_0 \sim 20a_0$ 距裂尖 $20a_0$ 范围内, 第二个全位错和第三个全位错的速度和第一个全位错的速度基本上一致; 但距离超过 $25a_0$, 第二个全位错和第三个全位错的速度下降了。原因是当发射的位错远离裂尖时, 位错与裂纹的相互作用减弱了, 但相邻的二个位错之间的相互作用没有变化, 所以后者显得重要 第二个全位错受到第一个全位错的作用, 第三个全位错又受到第二个全位错的作用

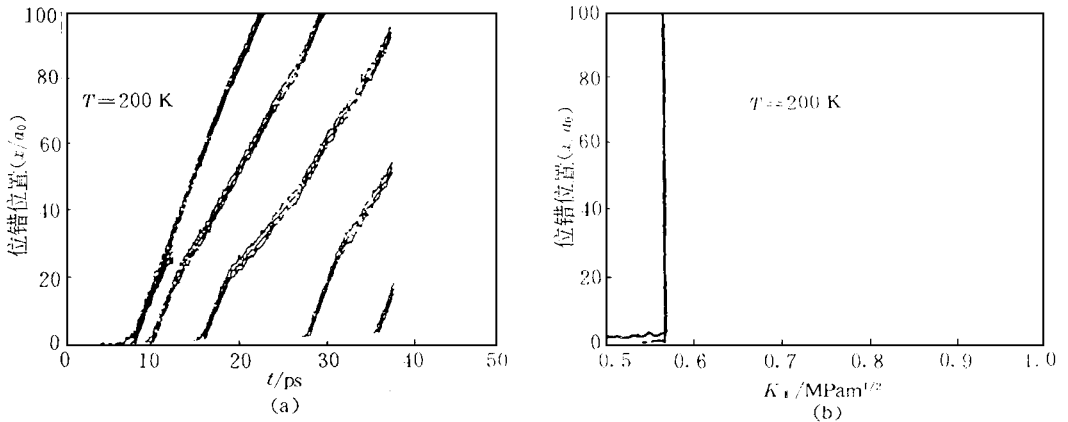


图 5(a) 位错位置与时间的关系, $T = 200 \text{ K}$ 图 5(b) 位错位置与应力强度因子的关系, $T = 200 \text{ K}$

结合图 5(a)、(b), 可观察到共有 5 个全位错 (共 15 个不全位错) 从裂尖被发射, 而且这 5 组位错都对应于同一个应力水平, 此时 $K_{II} = 0.57 \text{ MPam}^{1/2}$ 这个例子表明离散原子系统没有经历稳定的变形状态, 而是直接达到了不稳定的变形状态, 表明温度的影响是很大的

对于温度为 $T = 300 \text{ K}$ 的情况, 从图 6(a)、(b) 也可以直接观察到离散原子系统直接达

到变形的不稳定状态 发射第一个全位错(三个不全位错)时的应力强度因子继续在下降, 约为 $0.45 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ 和 $T = 200 \text{ K}$ 模拟结果比较, 发射位错的应力水平下降约为 20%. 在此应力水平上, 已有 4 组(共 12 个不全位错)从裂尖被发射 在 $T = 300 \text{ K}$ 时, 位错与位错之间的相互作用较 $T = 200 \text{ K}$ 时的模拟结果显得更强烈, 当位错远离裂尖 $20a_0$ 时, 第一个和第二个全位错之间的相互作用很强烈, 同样的分析也适用于第三个全位错

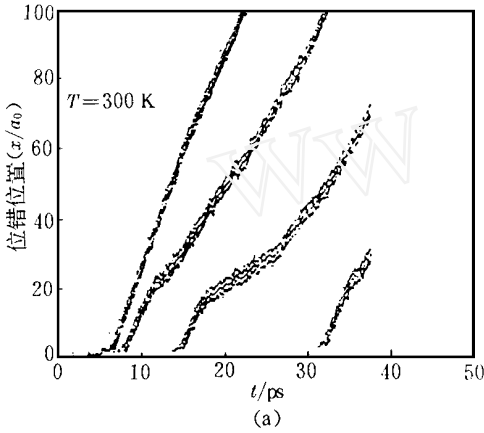


图 6(a) 位错位置与时间的关系, $T = 300 \text{ K}$

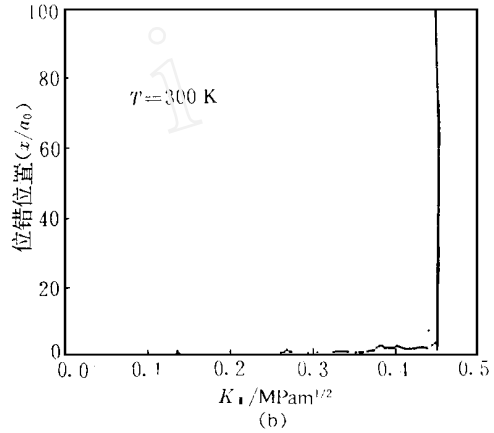


图 6(b) 位错位置与应力强度因子的关系, $T = 300 \text{ K}$

根据目前的分子动力学模拟结果, 我们得到如下结果: 随着温度的升高, 发射第一个全位错的应力强度因子下降了, 并且增加了发射位错数目. 位错速度对温度不敏感, 但位错之间的相互作用对位错速度影响很大. 因此温度可能会影响位错群的平均速度.

图 7 是应力沿裂纹延长线的分布图. 分子动力学计算的结果和弹性解符合得很好. 分子动力学计算得到的应力分布曲线有点波动, 这是由于温度引起原子的热振动.

Li 在文[9]讨论了位错发射所需的激活能, 给出了位错发射需要克服势垒的表达式

$$\Delta G = 2A b^2 \left[\ln \frac{2A b}{K_{II}} \sqrt{\frac{2\pi}{r_0}} - 1 \right] \quad (2)$$

位错发射的应力强度因子的临界值为

$$K_{IIc}^0 = \frac{2A b}{e} \sqrt{\frac{2\pi}{r_0}} \quad (3)$$

e 为自然对数的基底, r_0 为位错芯半径, 对刃型位错 $A = \frac{G}{\pi(1-\nu)}$, ν 是泊松比, b 为伯格矢量. K_{IIc}^0 是温度为 0 K 时的发射第一个全位错的临界应力强度因子. 根据 Khantha 等人^[16]和 Kitagawa^[18]分子动力学模拟得到的经验关系式, 单位长度位错线的激活能为

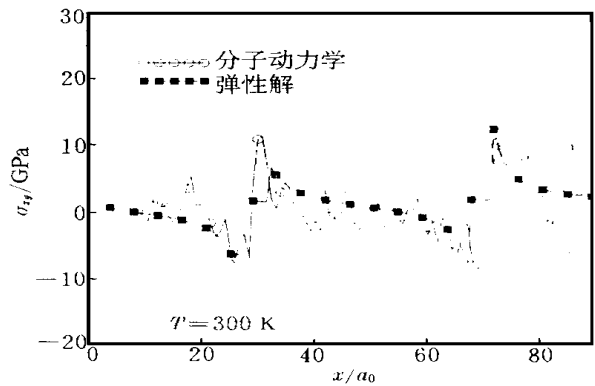


图 7 应力沿裂纹延长线分布, $T = 300 \text{ K}, K_{II} = 0.45 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$

$$\Delta G_T = \frac{2\alpha K_B T}{b} \tag{4}$$

α 与材料和加载速率有关, K_B 是 Boltzmann 常数

由于温度 T 的作用, 使得发射位错的激活能垒下降了 ΔG_T , 由此得到在温度 T 时, 位错发射的临界应力强度因子为

$$K_{IIc}^T = K_{IIc}^0 \exp\left(-\frac{\alpha K_B T}{A b^3}\right) \tag{5}$$

其中 K_{IIc}^T 为温度 T 时的发射位错临界应力强度因子. 若选取 $T = 50 \text{ K}$ 时的分子动力学模拟的 K_{IIc} 为基准, 则可从表达式 (5) 求出任何温度下的临界应力强度因子.

图 8 示意了发射位错的临界应力强度因子 K_{IIc} 与温度 T 之间的关系, 可以看出从分子动力学方法和表达式 (5) 得到的结果符合得很好. 这里选取 α 为 99

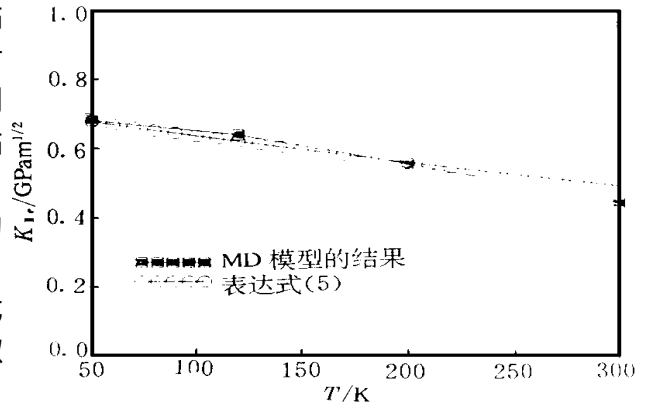


图 8 发射位错的临界应力强度因子与温度的关系

5 小结

(1) 随着温度的升高, 裂尖发射位错的临界应力强度因子下降, 热激活能伴随着材料变形起着重要的作用, 而且发射位错的数目也趋于增加

(2) 温度的升高位错之间的相互作用也趋于强烈, 发射位错之间的空间间距减小, 时间间距也缩小. 发射位错的时间间隔和位错位置之间的空间间距都是不均匀的

(3) 不全位错扩展距离和位错速度对温度并不敏感. 随着温度的变化, 不全位错的扩展距离和位错速度变化不大, 但位错之间的强烈相互作用明显地影响着位错的速度

(4) BCC 钼晶体的分子动力学模拟结果表明, 温度诱导的激活能 ΔG_T 与温度 T 之间基本上是线性关系, 与 Kitagawa 和 Zhang 等人对 FCC 铜晶体模拟得到的结论一致

参 考 文 献

- 1 Samuels J, Roberts S G. The brittle-ductile transition in Silicon. I Experiments Proc R Soc, 1989, A 421: 1~ 23
- 2 Chiao Y H, Clarke D R. Direct observation of dislocation emission from crack tips in Silicon at high temperature. Acta Metall, 1989, 37: 203~ 219
- 3 Brede M, Haasen P. The brittle-to-ductile transition in doped silicon as a model substance. Acta Metall Mater, 1989, 36: 2003~ 2018
- 4 Brede M. The brittle-to-ductile transition in Silicon. Acta Metall Mater, 1993, 41(1): 211
- 5 Rice J R, Beltz G E. J Mech Phys Solids, 1994, 42: 333
- 6 Cheung K S, Argon A S, Yip S. Activation analysis of dislocation nucleation from crack tip in α -Fe. J Appl Phys, 1991, 69: 2088

- 7 Mullins M. Simulation of the (001) plane crack in α -iron employing a new boundary scheme. *Phil Mag*, 1982, A, 46(5): 771
- 8 Kitagawa H, Nakatani A, Shibutani Y. Molecular dynamics study of crack initiation, In Tokuda M, Xu B, Senoo M. *Proceedings of MMM '93, Inter Seminar Microstructures and Mechanical Properties of New Engineering Materials*, edited Mie Univ, Japan, Mie Academia Press, 1993, 19
- 9 Li J C M. Computer simulation of dislocation emission from a crack. *Scripta Metall*, 1986, 20: 1477
- 10 Rice J R, Thomson R. Ductile versus brittle behaviour of crystals. *Phil Mag*, 1974, 29: 73
- 11 Zhang Y W, Wang T C, Tang Q H. The effect of thermal activation on dislocation processes at an atomistic crack tip. *J Phys D: Appl Phys*, 1995, 28: 267
- 12 Tang Q H, Wang T C, Zhang Y W. A new n-body potential and its application. *Acta Mech Sinica*, 1996, 12(4): 358
- 13 汤奇恒, 王自强. 关联参照模型和位错发射过程的分子动力学模拟. *力学学报*, 1998, 30(4): 404
- 14 Heermann D W. *Computer simulation methods in theoretic physics*, 2nd Edition, Springer-Verlag, Berlin, 1990
- 15 Nose S. In: Mayer M, Pontius V eds. *Computer simulation in materials science*, 1991, 21
- 16 Khantha M, Pope D P, Vitek V. Dislocation screening and the brittle-to-ductile transition: A kosterlitz-thouless type instability. *Phys Rev Lett*, 1994, 73: 684

THE EFFECT OF TEMPERATURE ON DISLOCATION EMISSION FOR THE METAL MATERIAL Mo

Tang Qiheng Wang Tzuchiang

(Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100080)

Abstract For the metal material Mo, the effect of thermally activated energy on the dislocation emission from a crack tip is simulated. The simulation is based on the correlative reference model on which the flexible displacement boundary scheme is introduced naturally. The simulation shows that as temperature increases the critical stress intensity factor for the first dislocation emission will decrease and the total number of emitted dislocations increase for the same external loading condition. The dislocation velocity and the extensive distance among the emitted partial dislocations are not sensitive to the temperature. In the process of dislocation emission, two different deformation states are observed. They are the stable and unstable deformation states respectively. In the stable deformation state, the nucleated dislocation will emit from the crack tip and piles up at a distance far away the crack tip, after that the new dislocation can not be nucleated unless the external loading increases. In the unstable deformation state, a number of dislocations can be emitted from the crack tip continuously under the same external load.

Key words correlative reference model, flexible displacement boundary, molecular dynamics, dislocation emission, temperature