

温度和加载速率影响位错发射的 分子动力学模拟*

周国辉 褚武扬 周富信

(北京科技大学材料物理系,北京,100083) (中国科学院力学研究所,北京,100080)

摘要 以 Al 作为研究对象,采用 EAM 势进行分子动力学模拟.在 I 型和 II 型加载条件下,研究了温度和取向对发射位错的临界应力强度因子的影响.模拟结果表明,裂尖发射位错的临界应力强度因子随温度升高按指数规律降低,但却随加载速率的增大而升高.

关键词 位错发射,分子动力学模拟,温度

1 引言

用弹性力学或者分子动力学(原子级)模拟方法可以研究位错发射或裂纹扩展.热激活效应在一些情况下不能忽略,特别是在较高温度下,热激活效应显得尤为明显. Khantha 等^[1]在研究温度对晶体断裂行为时指出,存在一个转变温度,低于该温度,晶体的断裂是脆性的;高于该温度,断裂是韧性的. Mullins^[2]用分子动力学模拟了裂纹的脆性扩展,他认为晶体在高温下,裂尖发射位错,从而裂纹钝化.由于他使用的是 Morse 势,韧脆转变不明显,结果与实验有一些偏差,很难与用多体势模拟的结果相比. Kitagawa 和 Nakatani^[3]用分子动力学方法研究了位错形核与温度的关系,他们认为热激活能是温度的线性函数,发射位错的临界应力强度因子 K_{IC} 与温度 T 的平方根成正比.张永伟等^[4]研究了热激活对 Cu 单晶发射位错的影响.结果表明, I 型裂纹发射位错的临界应力强度因子 K_{IC} 随温度升高按指数规律下降.这和 Li^[5]的计算结果相符.但是用分子动力学方法算出的 $K_{IC} = 0.2376 \text{ MPam}^{1/2}$,比 Ohr^[6]的计算值 $0.14 \text{ MPam}^{1/2}$ 要大.

加载速率对材料断裂也有影响.张永伟等^[7]认为,加载速率对 Cu 发射位错的临界应力强度因子没有明显影响,但高速加载导致材料断裂.

在本文中,从温度和加载速率来研究它们对位错发射和裂纹扩展的影响.

2 计算方法

2.1 原子间相互作用势

根据镶嵌原子法(EAM)^[8]提出的多体势来进行分子动力学模拟.选用的多体势函数为

$$U = - \sum_i \frac{1}{2} \left(\sum_{j(i)} V_{ij} \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_{i(i,j)} V_{ij}^2$$

其中 $i = \sum_{j(i)} ij$, V_{ij} 和 V_{ij}^2 仅是 i 原子与 j 原子间距离 r_{ij} 的函数.表达式中的参数由 Ackland 实验拟合得出^[9].

2.2 计算模型

* 1997-07-15 收到第 1 稿,1999-04-20 收到修改稿.

对面心立方的 Al, 位错在 {111} 面沿 110 方向运动, 故把 (111) 面选作裂纹面, 裂纹前沿沿着 [112], 位错沿着 [110] 方向运动^[4] (见图 1). 为研究温度和加载速率的影响, 采用 型加载. 计算的晶体沿 x 方向为 30a₀ (a₀ 为点阵常数), z 方向为 35a₀, 单边裂纹开在中央. 裂纹上下表面的距离大于截断距离 1. 22a₀, 原子总数约为 6200.

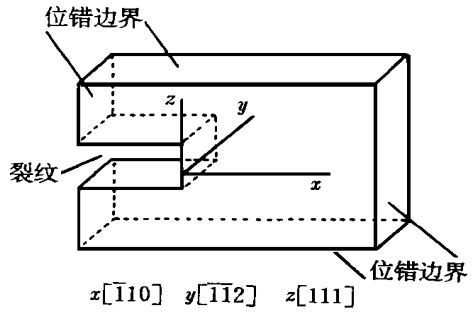


图 1 带有裂纹的面心立方晶体

2.3 边界条件

用 型和 型各向异性位移场来描述 x 方向和 z 方向边界各原子的位移情况, y 方向采用周期性边界条件 (应变为 0). 晶体内部各原子的运动规律遵循牛顿第二定律, 用蛙跳法来计算原子的位置和速度^[10]. 在定温模拟中, 初始时晶体原子具有给定温度下的 Maxwell-Boltzmann 分布. 在计算过程中当晶体温度偏离给定温度时, 要对晶体原子的运动速度重新标定, 使其回到给定的温度.

3 结果及讨论

3.1 温度的影响

采用 型加载, 时间步长为 5×10^{-15} s (0.5ps), 加载速率为 5×10^{-3} MPa \sqrt{m} / ps. 在 0 K, 40 K, 100 K, 200 K, 300 K 和 400 K 下作原子级模拟, 获得发射位错的临界应力强度因子 K_{Ic} , 如表 1.

表 1 温度对临界应力强度因子的影响

T/ K	0	40	100	200	300	400
$K_{Ic} / \text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$	0.20	0.17	0.15	0.11	0.10	0.093

温度的升高引起临界应力强度因子的降低, 如图 2. 对表 1 的 K_{Ic} 取对数, 对 T 线性回归, 则可得一直线 (相关系数为 0.966), 即

$$\ln K_{Ic} = - 1.69 - 0.00196 T \quad (1)$$

由此可知, K_{Ic} 随温度升高按指数规律下降. 某些材料在低温下较难发射位错, 发射位错的能垒较高; 而在高温下, 由于热激活的影响, 发射位错的能垒降低, 使得发射位错变得容易. 裂尖发射位错依赖于应力和温度, Li^[5] 指出, 在 0 K 下, 裂尖发射位错势能的最大值为

$$G = Ab^2 \left(\ln \frac{Ab}{K^0} \sqrt{2 / r_0} - 1 \right) \quad (2)$$

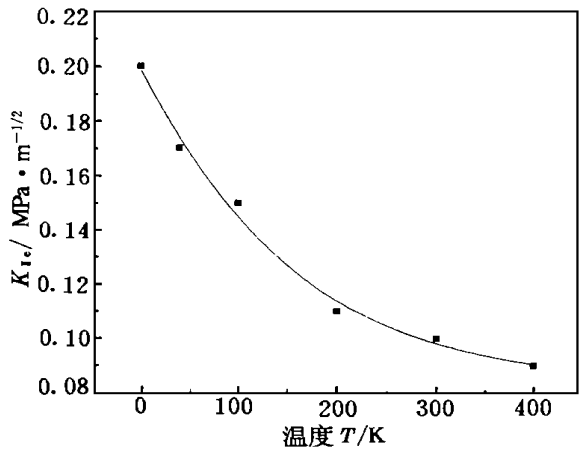


图 2 发射位错的临界应力强度因子 K_{Ic} 随温度的变化

因此在 0 K 下发射位错的临界应力强度因子为

$$K^0 = \frac{Ab}{e} \sqrt{2/r_0} \tag{3}$$

其中 b 为位错的 Burger 矢量, $A = \mu/2 (1 - \nu)$, μ 为切变模量, ν 为 Poisson 比, r_0 为位错核心半径, e 为自然对数之底.

实验和计算表明,位错发射是一个热激活过程. Kitagawa 等^[3]指出,激活能是温度的线性函数,他们假定

$$G_T = \frac{2 k_B T}{b} \tag{4}$$

G_T 为位错单位长度激活能, k_B 为 Boltzmann 常数, $\gamma = 2.5$. 当 $G_T = G$ 时,裂尖发射第一个位错,即

$$\frac{2 k_B T}{b} - Ab^2 \left[\ln \frac{Ab}{K^0} \sqrt{2/r_0} - 1 \right] = 0 \tag{5}$$

由此可得在温度 T 下发射位错的临界应力强度因子 K_e 为

$$K_e = K^0 e^{\exp \left[- \frac{2 k_B T}{Ab^3} \right]} \tag{6}$$

这和方程(1)的实验结果相一致,其中 $2 k_B / Ab^3 = 0.00196$.

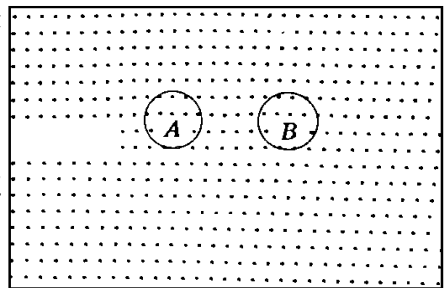
当一系列位错从裂尖发出,分布在裂尖前方,裂尖奇异场与位错场共同作用,则沿 x 方向切应力为

$$\sigma_{xy} = \frac{K}{\sqrt{2} x} + \frac{\mu}{2(1-\nu)} \sqrt{\frac{x_i}{x}} \frac{b}{x - x_i} \tag{7}$$

当 x 趋近 x_i 时,即在 Peierls 位错的附近,应力场需要附加一修正项

$$\frac{\mu b}{2(1-\nu)} \frac{x}{x^2 + a^2} \tag{8}$$

在图 3 中,离裂尖 $1.2a_0$ 的 A 处和 $4.5a_0$ 的 B 处有两个位错.图 4(a)和(b)分别是裂尖发射位错前后裂尖前方切应力分布.从图 4(b)中可以看出,应力在 A 处和 B 处有突变,这表明在 A 处和 B 处存在位错.靠近位错核心时,应力场已经不能用弹性场描述,位错核心导致应力突变.



3.2 加载速率的影响

采用 型加载,时间步长为 1×10^{-14} s,初始温度为 40 K,加载速率从 0.005、0.02、0.08、0.16 到 0.24 MPa \sqrt{m}/ps ,研究发射位错的临界应力强度因子与加载速率的关系,结果如表 2.

表 2 加载速率对临界应力强度因子的影响

dK/dt	0.005	0.02	0.08	0.16	0.24
$K_e / \text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$	0.170	0.172	0.174	0.232	0.276

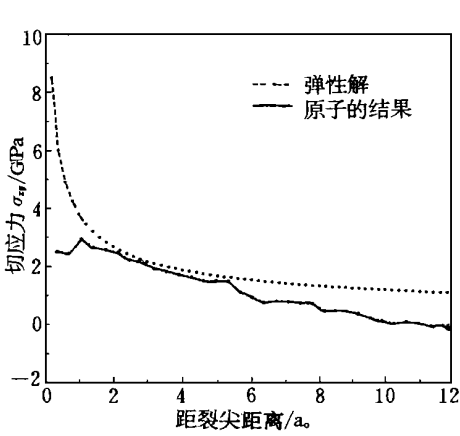


图 4(a) 在位错发射前裂尖前方的应力分布, $K_e = 0.192 \text{ MPam}^{1/2}$

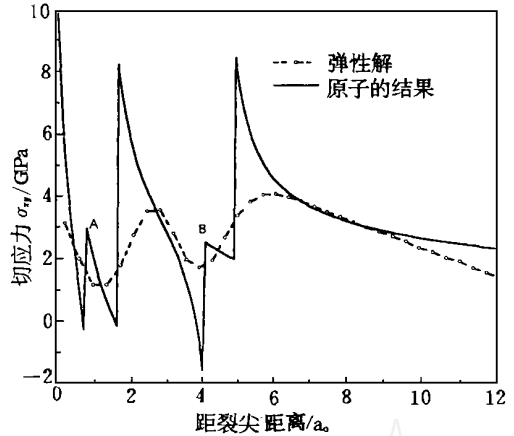


图 4(b) 发射两个不全位错 A 和 B 之后裂纹前方的应力分布, $K_e = 0.352 \text{ MPam}^{1/2}$

加载速率在一定的范围内对 K_e 的影响不大,但是当 K_e 大于一个特定值时, K_e 将显著升高,如图 5.

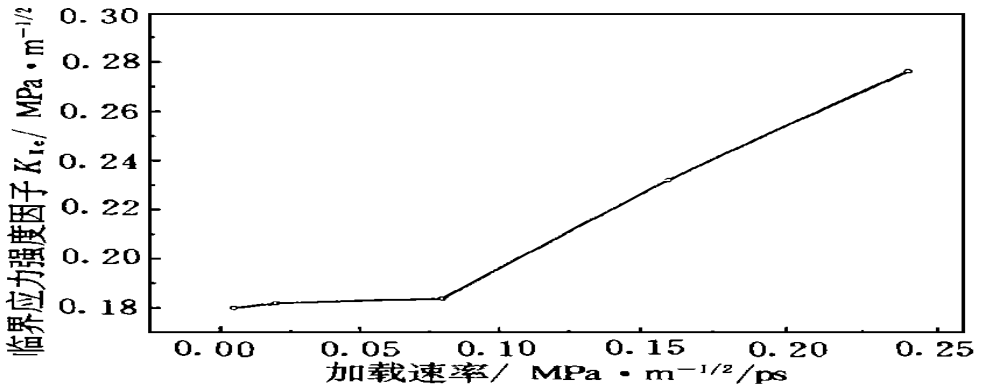


图 5 发射位错的临界应力强度因子 K_{Ic} 随加载速率的变化

4 结论

随温度升高,发射位错的激活能降低,使得发射位错的临界应力强度因子按指数规律下降.当加载速率小于 $0.08 \text{ MPa} \sqrt{\text{m}} / \text{ps}$ 时,对 K_e 的影响不大;当加载速率大于 $0.16 \text{ MPa} \sqrt{\text{m}} / \text{ps}$ 时, K_e 显著升高.

参 考 文 献

1 Khantha M, Pope D P, Vitek V. Mechanism of yielding dislocationfree crystals at finite temperature. Acta Mater, 1997, 45, 4687

- 2 Mullins M. Computer simulation of fracture using long range pair potentials. *Acta Metall* , 1984 , 32 :381
- 3 Kitagawa H , Nakatani A , Shibutani Y. Molecular dynamics study of crack processes associated with dislocation nucleated at the tip. *Mater Sci Eng* , 1994 , A176 :263
- 4 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 :748
- 5 Li J C M. Computer simulation of dislocation emitted from a crack. *Scripta Metall* , 1986 , 20 :1477
- 6 Ohr S M. An electron microscope study of crack tip deformation and its impact on the dislocation theory of fracture. *Mater Sci Eng* , 1985 , 72 :1
- 7 Zhang Y W , Wang T C , Tang Q H. Molecular dynamics simulation of cracktip processes in copper. *Acta Mech Sinica* , 1995 , 11 :76
- 8 Finnis M W , Sinclair J E. A simple N-body potential for transition metals. *Phil Mag* , A , 1984 , 50 :45
- 9 Ackland G J , Tichy G , Vitek V. Simple N-body potentials for the noble metals and nickel. *Phil Mag* , A 1987 , 56 :735
- 10 Heermann D W. Computer simulation methods in theoretic physics , 2nd Edition , Springer-Verlag . Barlin , 1990

MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF INFLUENCE OF TEMPERATURE AND LOADING RATE ON DISLOCATION EMISSION

Zhou Guohui Chu Wuyang

(*Department of Materials Physics , University of Science and Technology Beijing , Beijing , 100083*)

Zhou Fuxin

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

Abstract The influence of temperature and loading rate under mode I and II on dislocation emission of Al was studied by using molecular dynamics simulation method. The simulated results show that the critical stress intensity factor for dislocation emission decreases exponentially with increase in temperature and increases with increase in loading rate.

Key words dislocation emission , molecular dynamics simulation , temperature