

关联参照模型和位错发射过程的 分子动力学模拟

汤奇恒 王自强

(中国科学院力学研究所, 北京 100080)

摘要 提出关联参照模型和随位错位置变化的柔性位移边界条件. 提供了一个在固定位移边界条件下位错穿越边界的方法. 应用三维分子动力学方法研究了体心立方(BCC)金属晶体钨裂尖发射位错的力学行为.

关键词 关联参照模型, 分子动力学, 位错发射, 柔性边界条件

引 言

人们对位错在裂尖形核、发射进行了一系列的研究^[1~4], 目的是为了研究材料的韧脆性质. 从实验上、力学模型和分子动力学方法都进行了大量的和有益的工作, 取得了实质性的进展.

发展微观力学, 微观实验技术是必不可少的研究手段, 通过微观实验, 可以得到材料微观层次的各种力学现象以及重要材料参数. 这对于建立正确的数学力学模型是至关重要的, 在实验基础上进行理论分析有了可靠的立足点, 得到的结果有价值.

实验上, 首先是 Ohr 及其合作者^[2,5]通过大量的薄膜试样透射电镜的在位观察, 证实已发射的位错和裂纹尖端之间存在一个无位错区. 90 年代以来, 微观实验技术有了新的突破^[6,7], 已实现了原子分辨率的观察与测量. 美国布朗大学 Choi 和 Kim 的微观力学实验显示了位错芯的尺寸远大于弹性理论所预计的. 不但实验工作已取得很大进展, 细观理论工作也取得了突破. Rice^[4]提出了新的材料参数不稳定堆垛能 w_s . 这一成果是近十年来材料研究的重大进展, 标志着材料韧脆力学性质的研究进入了一个新的阶段.

实验技术在原子尺度上的突破、理论研究在细观层次上取得的重要结果促进细观力学工作的深入开展. 这些重要成果都说明在原子尺度这一微观层次上, 直接考虑原子之间的相互作用是非常必要的. 应用分子动力学方法模拟材料裂尖位错发射和位错发射对材料韧脆力学行为的影响, 人们已取得了很多成果.

Cotterill 和 Doyama^[8,9]首先进行了分子动力学的模拟, 使用了 Born-Mayer 和 Morse 势对位错芯的晶格构形及位错扩展进行了分析和模拟. 利用镶嵌原子法, Baskes^[10]等人研究了 Ni 中的位错可动性. 张永伟等人^[11,12]利用 Finnis-Sinclair 提出的多体势, 对铜单晶体, 采用了三维的原子真实构形模拟了裂尖原子的位错发射和位错在裂尖附近的力学行为, 得到了一系列有趣的结果. 但模拟时采用了位移边界条件, 其缺点是限制了后续位错的连续发射, 影响了对裂尖位错的力学行为的深入分析.

应用分子动力学方法研究位错发射和运动时, 加载方式一般有二种, 位移加载和力加载.

Cheung 等人^[13]曾经对分子动力学模拟样品原子数目的有效性和边界加载方式进行了研究. 建议力加载边界条件, 此边界条件能使位错穿越边界, 但力边界条件不稳定, 裂尖附近区域的响应比真实情况柔性大. 尤其在考虑环境温度的影响时, 离散粒子系统的不稳定性更是显得突出^[14]. 但是指定位移边界条件的缺点是它阻碍了位错穿越边界, 给模拟结果带来了很大的影响, 妨碍了分子动力学在这一方面的继续深入研究.

我们知道分子动力学模拟方法的一个严重的缺点是: 样品的原子数目是很有限的, 一般在几千、几万甚至几百万个原子, 但尺寸仍是很小的.

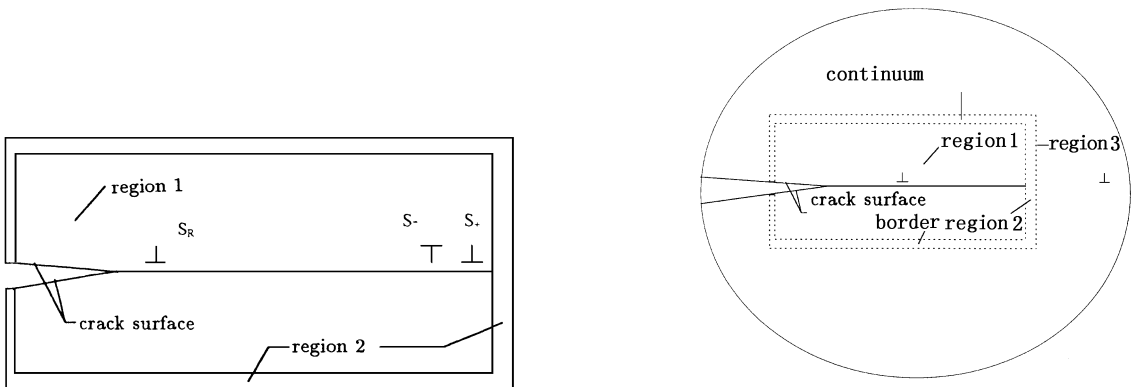
针对上述的一些缺点, 我们指出关联参照模型和柔性位移边界条件. 通过对分子动力学模拟块体施加柔性位移边界条件, 解决位错穿越边界的问题. 并应用细观力学的位错塞积理论将位错塞积对分子动力学的影响通过柔性位移边界加以考虑, 克服分子动力学模拟块体尺寸小的缺点.

1 力学模型

图 1(a) 和图 1(b) 是关联参照模型的二个示意图. 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的区域, 区 2 是分子动力学的边界区. S_R 表示从裂尖发射的位错.

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 同单晶体钼一样. 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. 关联参照模型有二个要求:

- 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.



(a) 分子动力学模拟块体位错发射示意图
(a) Schematic diagram for the simulated sample

(b) 含单边裂纹无限大连续体示意图
(b) Schematic diagram for the infinite continuum with a single edge crack

图 1 关联参照模型示意图

Fig. 1 Schematic diagram for the correlative reference model

在分子动力学模拟过程中,上述二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^[2,5]和计算结果表明,一旦 K 大于 K_e 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,在我们下面的计算模拟中,采用特定的加载方式.当 K 大于 K_e 时,暂停分子动力学继续加载,维持载荷不变进行分子动力学弛豫,位错沿滑移面高速运动远离裂尖尖端.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.

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

$$u_l = u_l^A + \sum_{i=1}^{N_r} u_l^D(x, y; x_i), \quad K > K_e, \quad l = 1, 2 \quad (1)$$

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,表达了总的位移场.

当位错运动到右边界时,假想有正负相反的二个位错 S_+ 和 S_- ,裂尖发射的真实位错 S_R 和假想位错 S_- 湮灭,仅存在 S_+ .通过调整边界,使位错 S_+ 穿越右边界,进入区 3 的连续介质区域.

材料实验还告诉我们,位错一般塞积在距裂尖几个微米处.因此设想在该处或许存在二相粒子、或许存在界面或其它障碍物.进入连续介质区域的位错塞积在几个微米处的障碍物前面.离散位错群的塞积位置可根据细观力学的位错塞积理论,由位错所受的应力平衡方程来确定.

2 基本公式

2.1 位移表达式

在下面的计算中,采用纯型加载和位移边界条件的方式.在位错发射前,位移场仅是 K 场;但位错发射后,位移场应由(1)表示.

由线弹性理论可以直接写出在外载荷作用下位移场的表达式.利用 Lo^[15]位移公式,在有单边裂纹条件下,在 $z = z_0$ (这里 z_0 是实数)处有单个离散位错,相应的位移表达式为

$$2G(u_x + i u_y) = \phi(z) - \overline{\phi(\bar{z})} - (z - \bar{z}) \overline{\phi'(z)} \quad (2)$$

$$\phi(z) = \phi_0(z) + \phi_R(z) = \frac{B}{z - z_0} \sqrt{\frac{z_0}{z}} \quad (3)$$

$\phi(z)$, $\phi_0(z)$ 是在具有单边裂纹的无限大介质中,单个位错产生的应力所对应复变势函数.

$$\phi(z) = \phi_0(z) = \int (z) dz = B \ln \frac{\sqrt{z} - \sqrt{z_0}}{\sqrt{z} + \sqrt{z_0}} \quad (4)$$

$B = \frac{bA}{i}$, b 位错伯格矢量的大小, $A = \frac{G}{(\mu + 1)}$.

由位错产生的位移场 $[u_x + i u_y]$ 是位错所在位置 z_0 的函数,在计算过程中,主要应用于位

错从裂尖被发射后, 停止外载荷的继续加载, 边界区 2 的原子位置随着位错的滑移而作相应地变化, 直至位错塞积在微米处.

2.2 离散位错的位置

前面已假设有 N_T ($N_T = N_1 + N_3$) 个位错从裂尖发射. N_1 表示位错已从裂尖发射, 还没有穿越边界区 2, 其位置可以从原子构形观察到; 进入区 3 的 N_3 个离散位错位置由下面的平衡方程 (5) 确定. 对纯 I 型加载, 而且滑移面与裂纹面平行时, 所有已发射的位错都在 x 轴上, 位错沿 x 轴塞积或排列的编号从右向左. 在区 3 中, 位错位置为 x_i ($i = 1, 2, \dots, N_3$), 在区 1 中, 位错位置为 x_i ($i = N_3 + 1, \dots, N_T$).

$$\left. \begin{aligned} x_1 &= x_{Ob} \\ i &= f, i = 2, 3 \text{ 界条 } N_3 \end{aligned} \right\}$$

www.cnki.net

大量的实验和计算结果表明,一旦 K 大于 K_c 时,位错从裂尖被发射出来,而且在不需继续加载或加载很小时,位错会继续不断地从裂尖被发射. 为了用分子动力学来模拟这一物理现象,在我们下面的计算模拟中,采用特定的加载方式,当 K 大于 K_c 时,停止继续加载,而且维持已加的外载荷不变,仅采用弛豫的方式,达到位错高速运动穿越边界,进入区 3 的目的.

4 结果与讨论

在目前的模拟中,选定的模拟样品具有下面几个特点:裂纹面与滑移面平行;沿 z 方向具有六层原子,原子可以沿 z 方向运动,并且沿 z 方向实施了周期性边界条件;纯剪切加载. 这几点基本上保证了从裂尖发射的是刃型位错. 根据刃型位错的半原子面的几何构型的特点,可以很准确地判断刃型位错的位置.

图 2 显示了 8 组位错的位置随时间 t 的变化. 每一组位错由 3 个不全位错构成,共有 24 个不全位错全部滑移出了模拟区 1 和边界区 2. 没有一个不全位错停留在晶体内部造成塞积现象.

当 K 为 $0.668 \text{ MPam}^{1/2}$ 时,第一组的 3 个不全位错全部形成. 暂停加载,此时这 3 个不全位错处于不稳定状态,可以看出位错在晶体内继续滑移. 从裂尖发射出来的位错,约在 $5a_0$ 内, (a_0 为晶格常数),处于加速运动状态,但很快达到比较稳定的速度. 由于采用了柔性的边界条件和位错穿越边界的方法,从裂尖发射出来的第一组的 3 个不全位错顺利地穿越了边界进入了区 3. 我们设想位错在距裂尖 $5000a_0$ 处遇到了障碍物,并且塞积在那里.

在 $5a_0 \sim 100a_0$ 范围内,8 组全位错在晶体内的滑移速度几乎都一样,约为 $1800 \text{ m/s} \sim 1950 \text{ m/s}$. 此速度小于钼晶体的剪切应力波的速度 (3500 m/s).

发射位错的时间间隔,从微观时间长度上看并不完全一致,由于是 ps 为单位,最长的时间间隔为 20 ps (第一组和第二组位错);最短的时间间隔为 6 ps (第三组和第四组),从宏观的时间尺度看,几乎在连续发射位错,这和实验中观察到位错连续发射的现象是一致的.

从图 2 还可以看出,位错之间的相互作用是很强的,而且这种相互作用随着位错远离裂尖越显得明显. 这是因为裂纹和位错的相互作用减弱,而位错之间的作用变化不大,相对地来说显得重要. 第三组位错和第四组位错之间的间距变化是由窄变宽,位错之间的间距逐渐均匀.

图 2 的结果说明了本文提出的关联参照模型、柔性位移边界条件和位错穿越边界的方法是

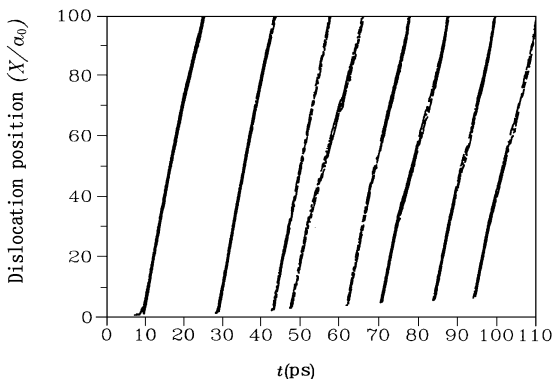


图 2 位错位置与时间的关系

Fig. 2 Emitted dislocation position versus time

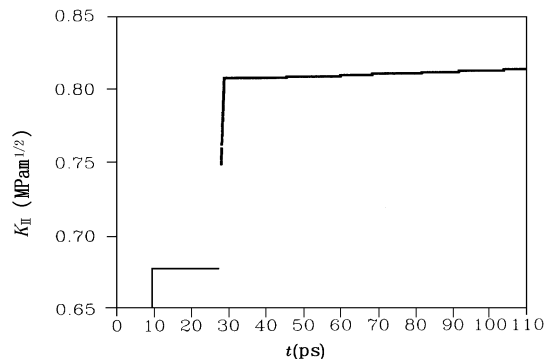


图 3 应力强度因子与时间的关系

Fig. 3 Applied stress intensity factor versus time

成功的. 此方法的优点是它消除了固定位移边界对位错运动的限制, 比较真实地反映裂纹与位错、位错与位错之间的相互作用. 有助于我们更好地了解和分析位错在裂尖的力学行为.

图 3 示意了外力场应力强度因子与时间 t 的关系. 结合此图和图 2 看出, 当 $K = 0.668 \text{ MPam}^{1/2}$, 第一组的 3 个不全位错已形成, 暂停加载, 外载荷保持为 $0.668 \text{ MPam}^{1/2}$ 不变, 直至 $t = 29 \text{ ps}$ 时, 第一组的三个不全位错滑移出了模拟区, 并且塞积在 $5000 a_0$ 处. 这时模拟区内没有任何位错, 继续按照 k 的速率加载. 当 K 为 $0.801 \text{ MPam}^{1/2}$ 时, 第二组位错也是以三个不全位错的形式从裂尖被发射, 相比较外载荷约增加了 15%. 从第三组位错到第八组位错, 载荷增加的很小, 不足 1%.

图 4 示意了位错距裂尖的位置 X/a_0 与外力场应力强度因子 K 的关系. 当 3 个不全位错全部形成后, 外载荷保持不变, 约为 $K = 0.668 \text{ MPam}^{1/2}$ 时, 位错滑移出了模拟区; 当 K 约为 $0.802 \text{ MPam}^{1/2}$ 时, 所有的 8 组位错 (24 个不全位错) 滑移出了模拟区, 此时外载荷增加得很少.

图 5 是裂尖原子构形图, 从构形图上可以观察到有 3 个不全位错. 沿着滑移面从左向右

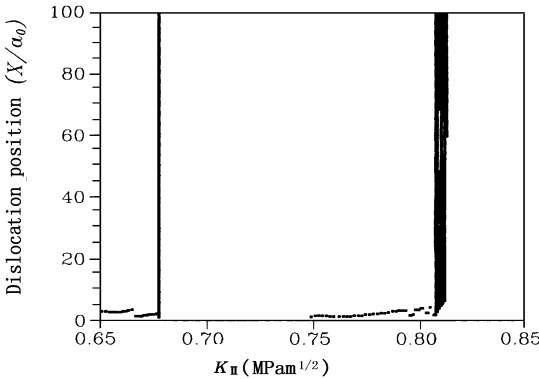


图 4 位错位置与应力强度因子的关系

Fig. 4 Emitted dislocation position against stress intensity factor

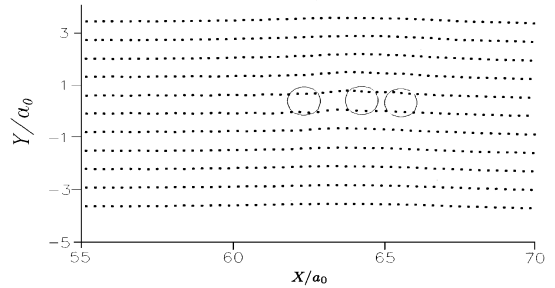


图 5 裂尖原子构形图, $K = 0.801 \text{ MPam}^{1/2}$

Fig. 5 The atomic configuration near the crack tip, $K = 0.801 \text{ MPam}^{1/2}$

滑移. 体心立方晶体钼的三个不全位错的扩展距离很小, 不足 4 个晶格常数. 对于体心立方晶体的全位错是否能分解^[19], 人们一直有争论. 因为实验上一直没有观察到, 一部分人认为能分解, 另一部分人则认为不能, 各具理由. 根据我们的模拟结果, 尽管体心立方晶体的全位错能分解为 3 个不全位错, 由于扩展的距离很小, 仅是面心立方晶体铜的 $1/5 \sim 1/10$, 实验上不容易观察到^[11]. 此时应力强度因子 K 为 $0.801 \text{ MPam}^{1/2}$, 对应于第四组被发射的位错.

图 6 是应力沿裂纹延长线的分布图. 由表达式 (6), 分子动力学计算得到的结果与修正后弹性解符合得很好. 分子动力学计算的应力曲线没有弹性解曲线光滑. 结合图 6 和图 7, 位错位于 $60 a_0 \sim 65 a_0$ 之间. 弹性解剪应力采用 K 应力场, 位错芯位置的应力用 Peierls 公式 (7) 修正, 消除应力奇异性, 从应力分布图上看, 应力在位错芯附近波动得很厉害, 说明晶体内的位错对应力分布影响很大, 这是由于位错芯附近的原子发生了很大的畸变.

$$\delta_{kl} = \frac{1}{0} \sum_{i,j,i'} \left[\frac{1}{2} \phi \left(\frac{r_{ij}}{r_{1e}} + F_{ij} \right) \frac{r_{ij}^k r_{ij}^l}{r_{ij}^3} \right] \quad (6)$$

$$\sigma_{xy} = \frac{Gb}{2(1-\nu)} \frac{x}{x^2 + a_0^2} \quad (7)$$

k, l 是坐标分量, r_{1e} 是原子的第一近邻, ρ_e 是平衡位置电子密度, i, j 为原子编号. a_0 为位错芯半径. b 伯格矢量. G 和 ν 为剪切模量和泊松比.

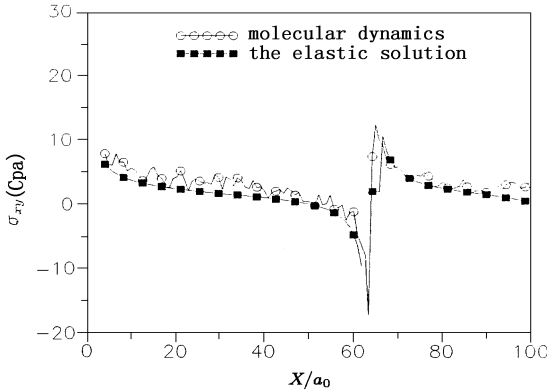


图 6 应力沿裂纹延长线的分布, $K = 0.802 \text{ (MPam}^{1/2}/\text{ps)}$

Fig. 6 Shear stress distribution along the prolongation of the crack, $K = 0.802 \text{ (MPam}^{1/2}/\text{ps)}$

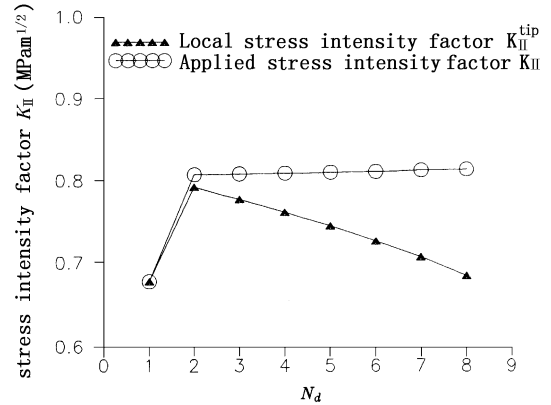


图 7 外力场应力强度因子与局部应力强度因子的比较

Fig. 7 The stress intensity factors versus the total number of the emitted dislocations

图 7 展示了随着发射的位错数目 N_d ($N_d = N_3$) 的增加, 外载荷对应的应力强度因子和局部应力强度因子的变化. 按照 Rice^[1], 位错从裂尖发射后, 位错和裂纹产生相互作用, 导致裂尖附近区域应力场降低, 可用局部应力强度因子 K^{tip}

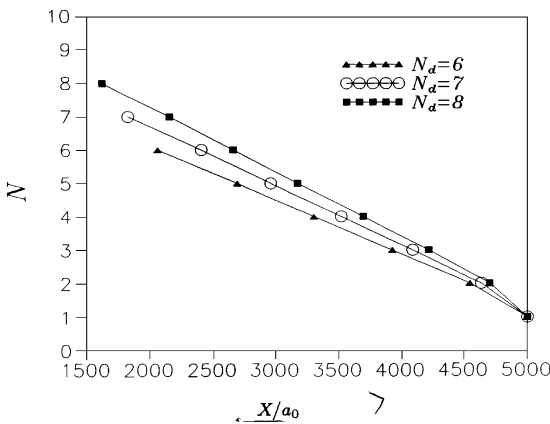


图 8 穿越边界的位错群 N_i 在连续介质区 3 的塞积位置, $f/A = 0.02, A = G/(\nu + 1)$

Fig. 8 The positions of the emitted dislocations in the continuum 3, $f/A = 0.02, A = G/(\nu + 1)$

表征裂尖区域的应力大小. 局部应力强度因子由(8)式给出. 当 $K = 0.668 \text{ MPam}^{1/2}$ 时, 第一组的 3 个不全位错从裂尖被发射, 从第二组位错直至第八组位错的发射, 外载荷的应力强度因子增加得很小, 但裂尖的局部应力强度因子一直在下降, 不同于静力学得到的结果, K^{tip} 保持为一常数, 才能裂尖继续发射位错. 因此在动态的位错发射过程中, 不能简单地将局部应力强度因子 K^{tip} 作为一个控制参数加以应用.

$$K^{tip} = K - 2 \sqrt{2} Ab \sum_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{x_i}} \quad (8)$$

图 8 是进入连续介质区的第 N_i 个位错平衡位置图. 选取参数 $f/A = 0.02, A = G/(\nu + 1)$, G 是剪切模量. 用 Newton-Paphson 方法, 求

解平衡方程(5),得到位错的平衡位置.此图示意了进入区3位错数目 $N_d(N_d = N_3)$ 分别为6,7,8时的位错塞积位置,位错平衡位置 x/a_0 随着位错数目 N_d 在变化.

图9主要是为了显示模拟块体的右边界的原子构形图,该图告诉我们共有24个不全位错从这里滑移进入了连续介质区3,塞积在几个微米处.从该图也可以想象到,位错在晶体内部遇到了二相粒子,界面等其它杂质时,会塞积在障碍物前面;也可以滑移出晶体,停留在晶体表面.因此从实验中,在裂纹表面或金属表面可观察到台阶和坎之类的形貌.

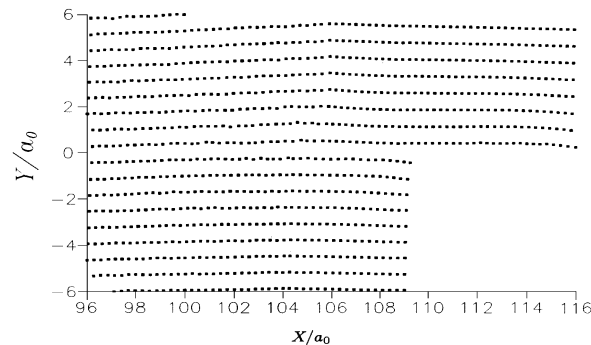


图9 分子动力学模拟块体右边界原子构形图

Fig. 9 The atomic configuration of the right boundary of simulated sample

5 结 论

1) 本文提出了关联参照力学模型.在柔性位移边界条件下,提供了位错穿越边界的方法.而且在不太多的原子数目模拟块体中,允许裂尖发射位错数目大大地增加,比较真实地反映了裂尖的位错发射现象.

2) 位错从裂尖发射出来,约在距裂尖 $5a_0$ 内,位错处于加速运动状态,并且很快达到稳定的速度.在 $5a_0 \sim 100a_0$ 范围内,位错速度约为 $1800 \text{ m/s} \sim 1950 \text{ m/s}$,小于晶体的剪切波速.在此范围内位错速度基本上是常数.和文章[20]理论预计结果一致.

参 考 文 献

- 1 Rice J R, Thomson R. Ductile versus brittle behaviour of crystals. *Phil Mag*, 1974, 29:73
- 2 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
- 3 Schoeck G. Dislocation emission from crack tip. *Phil Mag*, A, 1991, 63(1):111
- 4 Rice J R. Dislocation nucleation from a crack tip: an analysis based on the Peierls concept. *J Mech Phys Chem Solids*, 1992, 40: 239
- 5 Ohr S M. Dislocation-crack interaction. *J Phys Chem Solids*, 1987, 48(11):1007
- 6 Berndt R, Schneider W D. Atomic resolution in photon emission induced by scanning tunneling microscope. *Phys Rev Lett*, 1995, 74(1):102
- 7 Cosandey F, Chan S W, Stadelmann P. Atomic structure and energy of $\Sigma 5$ tilt boundaries in Gold. *Metall Trans*, 1990, A, 21:2299

- 8 Cotterill R M J , Doyama M. Energy and atomic configuration of complete and dissociated dislocations. *Phys Rev* , 1966 , 145 :465
- 9 Cotterill R M J , Doyama M. Lattice Defects in Quenched Metals. edited by Cotterill R M J , Doyama M , Jackson J J , Meshii M . , Academic Press Inc . , New York :1965
- 10 Baskes M I , Daw M S , Foiles S M. The embeded atom method: Theory and application. *Mater Res Soc Symp Proc* , 1989 , 141 : 31
- 11 Zhang Y W , Wnag T C , Tang Q H. Molecular dynamics simulation of crack tip processes in copper. *Acta Mechanica Sinica* , 1995 ,10 :150
- 12 Zhang Y W , Wang T C , Tang Q H. Simulation of nucleation and emission of dislocations by molecular dynamics method. *J Appl Phys* , 1995 , 77 : 2393
- 13 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
- 14 Kitagawa H , Nakatani A , Shibutani Y. Molecular dynamics study of crack initiation , In :Tokuda M , Xu B , Senoo M , Proceedings of IMMM '93 , Inter. Seminar Microstructures and Mechanical Properties of New Negineering Materials , edited Mie Univ . , Japan , Mie Academic Press , 1993 : 19
- 15 Lo K K. Analysis of branched cracks. *J Appl Mech* , 1978 , 45 : 797
- 16 Tang Q H , Wang T C , Zhang Y W. A new n -body potential and its application. *Acta Mech Sinica* , 1996 , 12(4) : 358
- 17 Heermann D W. Computer simulation methods in theoretic physics , 2nd Edition , Springer-Verlag , Berlin : 1990
- 18 Nose S. In: Meyer M , Pontikis V eds Computer Simulation in Materials Science. 1991 : 21
- 19 Zhao J S. The basis of dislocation theory , Defence industry publisher , 1989
- 20 Gilman J J. Micromechanics of flow in solids McGraw-Hill , New York : 1969 :169

THE CORRELATIVE REFERENCE MODEL AND THE MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF THE DISLOCATION EMISSION

Tang Qiheng Wang Tzuchiang

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

Abstract A correlative reference model for the computer simulation of the molecular dynamics is proposed in this paper. Supposing that there is an infinite elastic continuum with a single edge crack , its elastic constants , such as E , G , ν , are the same as those of the simulated crystal. There is a correlation between the realistic sample and the reference model. Two requirements must be satisfied in the simulation , see Figs. 1a and 1b.

(1) The atomic displacement in the region 2 in Fig. 1a is determined by that of the corresponding region in Fig. 1b.

(2) Supposing that there are N_T dislocations emitted from the crack tip , here $N_T = N_1 + N_3$. The positions of the N_1 emitted dislocations in region 1 on Fig. 1b are determined by the observation of atomic configuration in Fig. 1a. Other N_3 positions of the N_3 dislocations in the continuum region

3 are determined by the dislocation pileup theory of micromechanics.

Based on the correlative reference model, the flexible displacement boundary scheme is introduced naturally. By applying the flexible displacement boundary technique, the method of describing the dislocation penetrating through the border is provided. The effect of the dislocation pileup described by the micromechanics theory can be demonstrated. It overcomes the defect of the small size of simulated sample.

Along z direction, the periodicity boundary scheme is applied. Because six layers of atoms are arranged along z direction, the atoms in z direction can move. The emitted dislocation from the crack tip is always in the form of particle dislocation.

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

www.cnki.net