

液体金属吸附促进位错发射的分子动力学研究¹⁾

周国辉 周富信* 万发荣 褚武扬

(北京科技大学材料物理系, 北京 100083)

*(中国科学院力学研究所非线性连续介质力学开放研究实验室, 北京 100080)

摘要 用第一原理算出 Rose 方程中的参量后, 利用陈氏反演原理可以求出 Al-Ga 和 Cu-Ga 的对势; 从而可研究 Al 和 Cu 裂纹表面吸附液体金属 Ga 之后对裂尖发射位错的影响. 结果表明, Al 吸附 Ga 后可使发射位错的临界应力强度因子从 $K_{Ic} = 0.5 \text{ MPam}^{1/2}$ 降为 $K_{Ic}(L) = 0.4 \text{ MPam}^{1/2}$; 对 Cu 则从 $K_{Ic} = 0.55 \text{ MPam}^{1/2}$ 降为 $K_{Ic}(L) = 0.45 \text{ MPam}^{1/2}$, 即 Ga 吸附后能促进位错的发射. 另外, 吸附 Ga 之后裂尖前方容易产生空位团及 Frank 位错.

关键词 液体金属, 分子动力学模拟, Ga, Al

前 言

液体金属 (如 Hg, Ga) 吸附在金属表面能导致脆断, 称为液体金属脆^[1~5]. 一般均认为液体金属脆断不涉及局部塑性变形, 从而可用 Griffith 方程来求 $K_{IC}^2 = 2\gamma E/(1-\nu^2)$ 和断裂应力 σ_c . 由于吸附使 γ 降为 $\gamma(L)$, 故使 K_{IC} 降为 $K_{IC}(L)$. 但实际情况并非如此. 我们的实验表明, 7075 铝合金吸附 Ga 后 K_{IC} 由 $43.2 \text{ MPam}^{1/2}$ 降为 $K_{IC}(L) = 1.7 \text{ MPam}^{1/2}$ ^[5]. 即使如此, 代入 Griffith 方程后所算出的 $\gamma^*(L) = 18.5 \text{ J/m}^2$ 比材料的真实表面能 $\gamma = 1.15 \text{ J/m}^2$ 要大一个数量级^[5]. 由此可知, 即使液体金属脆也存在局部塑性变形, 应当用 Orowan 公式计算, 即 $K_{IC}^2(L) = [2\gamma(L) + \gamma_p]E/(1-\nu^2)$. 7075 铝合金吸附 Ga 后, 塑性变形功 $\gamma_p(L) = 30\gamma$ ^[5]. 对其它液体金属脆, 可求出 $\gamma_p(L) = (10 - 1000)\gamma$ ^[1~3]. 但由此无法判定局部塑性变形是脆性裂纹扩展的伴生现象, 还是先决条件.

早期 Lynch 通过对断口形貌的对比研究, 认为局部塑性变形是液体金属脆断的先决条件^[4]. 我们在透射电镜中原位观察表明, Al, Al 合金以及 Ti 吸附 Hg 后能促进位错发射、增殖和运动; 当吸附促进的局部塑性变形发展到临界条件就导致脆性裂纹形核和扩展^[6]. 随后用激光云纹干涉法测量 Hg 吸附前后加载缺口前端的位移场变化, 结果发现, Ti 和黄铜吸附 Hg 后能使加载缺口前端塑性区及其中的塑性变形加大.

用分子动力学方法模拟位错发射已取得了很大成功^[9~11]. 我们的模拟证明, 固溶氢能促进位错的发射^[12]. 在本文, 我们将用分子动力学方法来模拟液体金属 Ga 吸附在 Al 和 Cu 的 I 型裂纹表面后对位错发射的影响.

1 Al-Ga 和 Cu-Ga 的相互作用势

对 Al 和 Cu, 一般选用 Finnis-Sinclair 势^[13]. 当用分子动力学模拟研究液体金属吸附对位错发射影响时, 首先要知道基体金属 (如 Al 和 Cu) 和液体金属 (如 Ga) 的相互作用势. 由

1998-05-19 收到第一稿, 1999-03-27 收到修改稿.

1) 国家重点基础研究专项经费 (G19900065) 及国家自然科学基金资助项目 (19891180).

于从文献上查不到这类势函数，故必须首先构造相互作用势。我们采用陈难先三维晶格反演方法^[14]来构造 Al-Cu, Ga-Ga 及 Cu-Ga 间的相互作用势。

按 Möbius 定理：若 $f(n)$ 是任意的一个数论函数，并且它与另一个数论函数 $F(n)$ 有如下关系^[14]

$$F(n) = \sum_{d|n} f(n) \quad (1)$$

则有

$$f(n) = \sum_{d|n} \mu(n) F(n/d) \quad (2)$$

其中 $d|n$ 表示包括 1 和 n 在内的所有因子， $\mu(n)$ 称为 Möbius 函数，它按照下式简单地等于 -1, 0, 1, 即

$$\mu(n) = \begin{cases} 1, & n = 1 \\ (-1)^r, & n \text{ 是 } r \text{ 个不同素数的乘积} \\ 0, & \text{其它} \end{cases} \quad (3)$$

这条定理的连续变量的形式可写为

$$F(x) = \sum_{n=1}^{\infty} f(x/n) \Leftrightarrow f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \mu(n) F(x/n) \quad (4)$$

$$F(x) = \sum_{n=1}^{\infty} f(nx) \Leftrightarrow f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \mu(n) F(nx) \quad (5)$$

我们知道，金属和合金的结合能 $E(x)$ 可用 Rose 方程来表达^[15],

$$\left. \begin{aligned} E(x) &= -E_0(1 + a^*) \exp(-a^*) \\ a^* &= (9B\Omega/E_0)^{1/2}(x/a_0 - 1) \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

其中 x 为变形晶格的点阵常数， a_0 为平衡条件下的晶格常数， Ω 为平衡原子体积， B 为体弹性模量。方程中的参量 B, E_0, a_0 可用第一原理线性化缀加平面波方法^[16]算出。对面心立方体 (fcc) 的 Al, Cu 和 Ga (固体) 以及 Al, Cu 和 Ga 的各种化合物，我们的计算结果如表 1。

表 1 由第一原理算出的 Al-Ga 和 Cu-Ga 体系的 B, E_0 和 a_0
Table 1 B, E_0 and a_0 in Al-Ga and Cu-Ga calculated from the first principle

	B (10^{11}N/m^2)	E_0 ($1.60 \times 10^{-19} \text{J}$)	a_0 (10^{-10}m)
Al	0.990	3.340	4.030
Ga	0.805	3.220	4.169
Al ₃ Ga	0.782	3.364	3.997
AlGa ₃	0.660	2.968	4.072
AlGa	0.686	3.149	3.235
Cu	2.008	3.540	3.566
Cu ₃ Ga	1.656	2.809	3.606
CuGa ₃	0.929	2.792	3.903
CuGa	1.373	2.750	2.950

原子的结合能 $E(x)$ 可以表达成原子间相互作用势 $\Phi(x)$ 之和, 即^[14]

$$E(x) = \frac{1}{2} \sum_{R \neq 0} \Phi(R) = \frac{1}{2} \sum_n r_n \Phi(\alpha_n x) \tag{7}$$

其中 r_n 为配位数, α_n 等于第 n 壳层的距离除以 x , 类似于 (1) 至 (5) 式的变换, 利用陈氏三维反演公式^[12], 从方程 (7) 可反演出原子互作用对势 $\Phi(x)$, 即^[14]

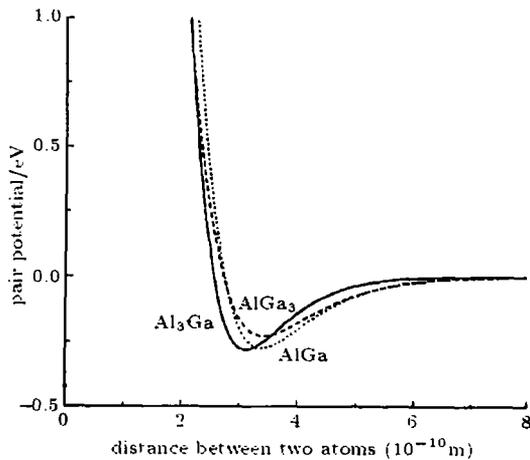
$$\Phi(x) = \sum_n \mu(\alpha_n) E(\alpha_n x) \tag{8}$$

其中 $\mu(\alpha_n)$ 为反演系数. 求出 E_{Ga} 和 E_{Al} 后利用上式就可求出 Al 和 Ga 的对势 $\Phi_{Al}(x)$ 和 $\Phi_{Ga}(x)$. 下面来求 AlGa 化合物中 Al 原子和 Ga 原子的相互作用对势 $\Phi_{Al-Ga}(x)$. 我们可以把 AlGa 化合物的结合能看成是 E_{Ga}^* , E_{Al}^* 以及 Al-Ga 互作用能 E_{Al-Ga} 之代数和, 即

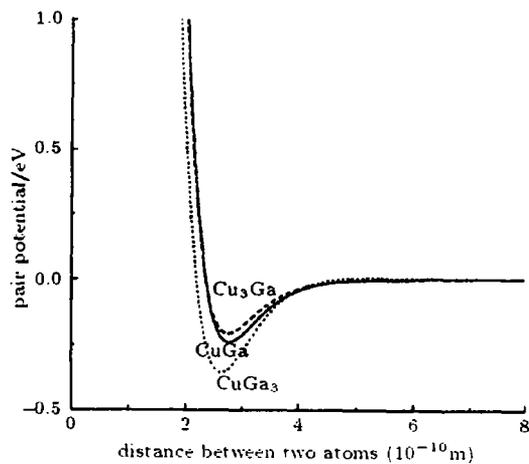
$$E_{AlGa} = E_{Al}^* + E_{Ga}^* + E_{Al-Ga} \tag{9}$$

金属 Al 是 fcc 结构, Ga 是正交结构, 而 AlGa 化合物是 Al 和 Ga 两个简单立方叠加的 B_2 结构. 表 1 的数据是在这三种特定结构下算出的. 在方程 (9) 中 E_{Ga}^* 和 E_{Al}^* 是指两个简单立方结构的结合能, 故不能直接用表 1 的数据来表示 E_{Ga}^* 和 E_{Al}^* . 如果假定原子相互作用势在各种同素异构体之间可以互相传递, 则在已知 $\Phi_{Al}(x)$ 和 $\Phi_{Ga}(x)$ 的条件下利用 (7) 式反过来求出 $E_{Al}^* = \frac{1}{2} Y_{Al} \sum_{R_{Al} \neq 0} \Phi_{Al}(R)$ 和 $E_{Ga}^* = \frac{1}{2} Y_{Ga} \sum_{R_{Ga} \neq 0} \Phi_{Ga}(R)$, 其中 Y_{Al} 和 Y_{Ga} 是 Al 和 Ga 在 AlGa 化合物中所占的原子百分比. 代入 (9) 式可得

$$E_{Al-Ga}(x) = E_{AlGa} - \frac{1}{2} Y_{Al} \sum_{R_{Al} \neq 0} \Phi_{Al}(R) - \frac{1}{2} Y_{Ga} \sum_{R_{Ga} \neq 0} \Phi_{Ga}(R) \tag{10}$$



(a) AlGa, Al₃Ga 和 AlGa₃ 的有效对势
(a) Effective pair potentials of AlGa, Al₃Ga and AlGa₃



(b) CuGa, Cu₃Ga 和 CuGa₃ 的有效对势
(b) Effective pair potentials of CuGa, Cu₃Ga and CuGa₃

图 1
Fig.1

把表 1 中的 AlGa 的数据代入方程 (6) 就可获得上式右边第一项 E_{AlGa} , 由方程 (8) 获得的 $\Phi_{\text{Al}}(x)$ 和 $\Phi_{\text{Ga}}(x)$ 可求出上式右边第二、三项, 从而可以求出 $E_{\text{Al-Ga}}$. 再把它代入 (8) 式则可以反演出 Al 和 Ga 原子间相互作用对势 $\Phi_{\text{Al-Ga}}(x)$, 如图 1(a). 类似地可求出 AlGa₃ 的 Al₃Ga 的对势, 如图 1(b).

2 分子动力学计算过程

对于 fcc 晶体, 位错在 {111} 面, 沿 <110> 方向运动. 裂纹面延长线 x 方向选取 70 个周期, 即晶体长为 $70\sqrt{2}/4a_0$, 裂纹面法线为 y 方向, 选取 20 个周期, 即晶体宽为 $20/\sqrt{3}a_0$, 裂纹面和 (111) 滑移面的夹角为 70° , z 方向沿 [112], 选取 1 个周期, 原子总数约为 6300. 加载方向沿 y 轴, 故为 I 型裂纹.

对 Al 单晶, 加载速率 $dK_I/dt = 0.01 \text{ MPa}\sqrt{m}/\text{ps}$, 时间步长 $\Delta t = 0.005 \text{ ps}$. 对 Cu 单晶, 加载速率 $dK_I/dt = 0.02 \text{ MPa}\sqrt{m}/\text{ps}$, 时间步长 $\Delta t = 0.01 \text{ ps}$. 用 I 型各向异性位移场来描述 x 方向和 y 方向边界各原子的位移. 而 z 方向则采用周期性边界条件 (应变为 0). 晶体内部各原子的运动遵循牛顿第二定律, 即 $F_i = -\partial\Phi/\partial r_i = m_i a_i$, 其中 Φ 为势函数, 对 Al 和 Cu, 采用 Finnis-Sinclair 势^[13], 对 Al-Ga, Cu-Ga 和 Ga-Ga 则用图 1 的对势. 用蛙跳法^[9~12]来计算原子的速度和位移.

晶体初始温度选为 100 K, 初始速度按 Maxwell-Boltzmann 分布. Ga 原子分布在裂纹内部. 在加载之前先弛豫, 使 Ga 原子分布达到平衡组态. 然后用 I 型加载, 记录不同时刻的原子组态和应力强度因子, 分析 Ga 对位错发射和裂纹扩展的影响.

3 计算结果及讨论

在没有 Ga 原子时, 当外加应力强度因子 $K_I = 0.5 \text{ MPa}\sqrt{m}$ 时, Al 晶体裂尖发射第一个偏位错, 即发射位错的临界应力强度因子 $K_{Ie} = 0.5 \text{ MPa}\sqrt{m}$, 如图 2(a). 当裂纹表面吸附一定数量的 Ga 原子后, 当外加应力强度因子达到 $0.4 \text{ MPa}\sqrt{m}$ 时, 就发射第一个偏位错, 即 $K_{Ie} = 0.4 \text{ MPa}\sqrt{m}$, 如图 2(b). 由此可知, Ga 吸附在 Al 裂尖表面后使裂尖发射位错的临界应力强度因子 K_{Ie} 从 $0.5 \text{ MPa}\sqrt{m}$ 降为 $0.4 \text{ MPa}\sqrt{m}$, 即液体金属 Ga 吸附促进了 Al 的位错发射.

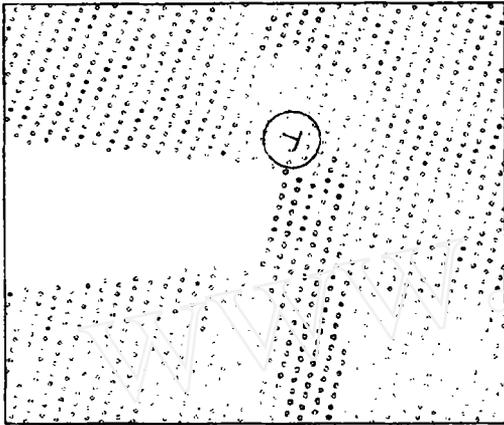
计算表明, 纯 Cu 单晶发射位错的临界应力强度因子 $K_{Ie} = 0.55 \text{ MPa}\sqrt{m}$, 当 $K_I = 0.6 \text{ MPa}\sqrt{m}$ 时, 位错运动离开裂尖, 如图 3(a). 在裂纹表面吸附 Ga 原子后, 发射位错的临界应力强度因子降为 $K_{Ie}(\text{Ga}) = 0.45 \text{ MPa}\sqrt{m}$, $K_I = 0.5 \text{ MPa}\sqrt{m}$ 时位错已运动离开裂尖, 如图 3(b). Ga 吸附也使 Cu 发射位错的临界应力强度因子下降, 从而促进了位错发射.

对纯 Al, 发射位错后继续加载, 偏位错从裂纹前沿不断发出, 与此同时, 在裂纹前沿出现 abcdef 台阶, 如图 4(a). 如吸附 Ga, 则在相同 K_I 下裂尖前方的原子组态明显不同, 如图 4(b). 裂纹前沿不存在台阶, 随 K_I 增加, Ga 原子向裂纹前沿富集, 而裂纹侧边只存在单原子吸附层 (图 4b); 另外, 吸附 Ga 原子之后, 当 K_I 较高时会在裂纹前方产生空位团 (如图 4(b) 上 A 所示), 以及 Frank 偏位错 (如图 4(b) 上 B 所示).

液体金属吸附后使发射位错的临界应力强度因子下降从而促进了位错发射的原因显然与吸附降低表面能有关. I 型裂纹发射位错的临界应力强度因子 K_{Ie} 为^[17]

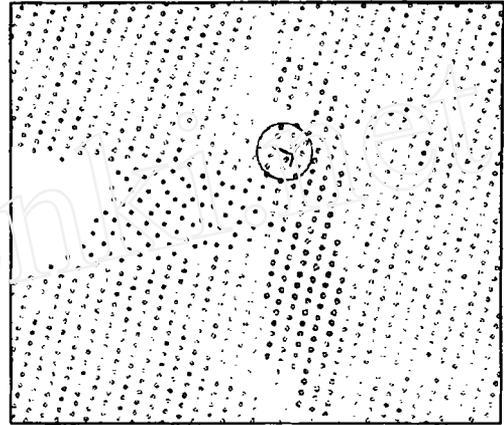
$$K_{Ie} = \frac{2}{\sin\phi \cos(0.5\phi)} \left\{ \frac{\mu b}{(1-\nu)(8\pi r_c)^{1/2}} + (2\pi r_c)^{1/2} \left[\sigma_f + \frac{4\gamma e^{3/2} \sin\phi}{\pi r_c(4+e^3)} \right] \right\} \quad (11)$$

对纯 Al, $b = a_0/\sqrt{6} = 1.65 \times 10^{-10}\text{m}$ 为偏位错 Burgers 矢量, $\mu = 26.3\text{GPa}$ 为切变模量, $\gamma = 1.15\text{J/m}^2$ 为表面能 (Ohr 采用 $\gamma = 0.84\text{J/m}^2$ 明显偏低), $\nu = 0.34$ 为 Poisson 比, σ_f 为位错运动阻力. 对发射第一个偏位错的完整晶体, σ_f 就是 P-N 力, 对 fcc 晶体, $\sigma_f = 10^{-5}\mu$, 可忽略. Ohr 认为 $\sigma_f = 20\text{MPa}$ ^[17] 为单晶体屈服强度, 显然偏高. $r_c = d/e$ 为位错核芯半径, $\phi = 70^\circ$ 为裂纹面与位错滑移面夹角. 由此可算出 $K_{Ie} = 0.38\text{MPam}^{1/2}$ (Ohr 算出 $K_{Ie} = 0.29\text{MPam}^{1/2}$,



(a) 纯 Al, $K_I = 0.5\text{MPam}^{1/2}$ 时
发射第一个位错

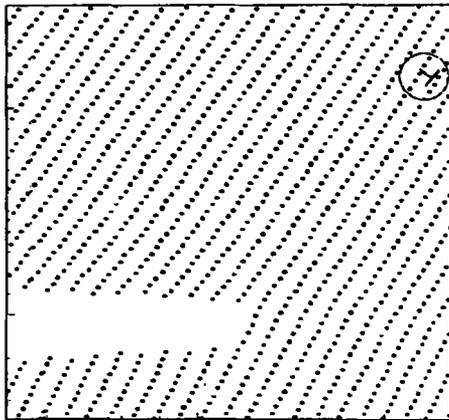
(a) The first dislocation emitted in Al
for $K_I = 0.5\text{MPam}^{1/2}$



(b) Al 吸附 Ga 原子后, $K_I = 0.4\text{MPam}^{1/2}$ 时
发射第一个位错

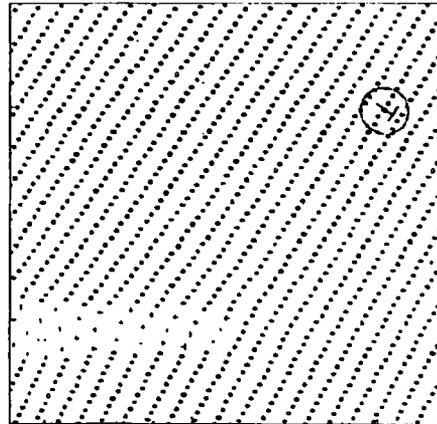
(b) The first dislocation emitted in Al adsorbed Ga
for $K_I = 0.4\text{MPam}^{1/2}$

图 2
Fig.2



(a) 纯 Cu, $K_I = 0.6\text{MPam}^{1/2}$, 发出的位错
已离开裂尖

(a) The emitted dislocation has left
from the crack tip in Cu
for $K_I = 0.6\text{MPam}^{1/2}$



(b) Cu 吸附 Ga, $K_I = 0.5\text{MPam}^{1/2}$, 发出的位错
已离开裂尖, x 为 Ga 原子

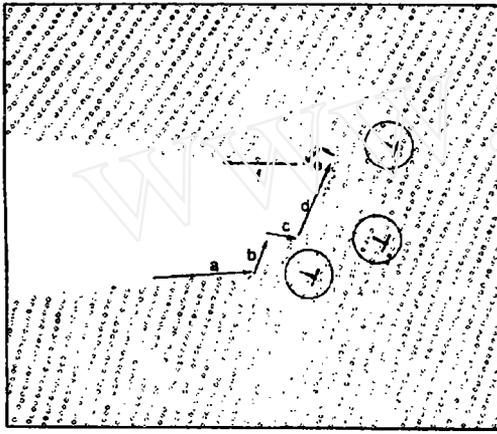
(b) The emitted dislocation has left
from the crack tip in Cu absorbed Ga (with
cross symbol) for $K_I = 0.5\text{MPam}^{1/2}$

图 3
Fig.3

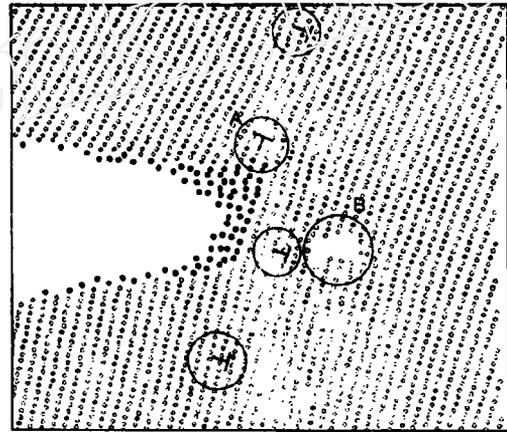
因为所用的 $\mu = 25.1 \text{ GPa}$ 偏低, 它比分子动力学算出的 $K_{Ie} = 0.5 \text{ MPam}^{1/2}$ 要低, 原因在于 (11) 式中没有考虑层错能, 因为偏位错后面跟着一片层错. 因为 μ 与 γ 有关^[18], 即

$$\gamma = \frac{Ea^2}{\pi^2 d} = \frac{2\mu(1+\nu)a^2}{\pi^2 d} \quad (12)$$

其中 a 为原子间距. 液体金属 Ga 吸附后使 Al 的表面能由 $\gamma = 1.15 \text{ J/m}^2$ 降低为 $\gamma = 0.35 \text{ J/m}^2$ ^[3]. 由 (12) 式可知, 吸附降低 γ 使切变模量从 μ 降低为 $\mu(L) = \mu, \gamma(L)/\gamma = 0.304, \mu = 8.0 \text{ GPa}$, 代入 (11) 式可算出 $K_{Ie}(\text{Hg}) = 0.114 \text{ MPam}^{1/2}$. 由于没有固体 Hg 的参数, 无法获得 Al-Hg 的对势, 故无法用分子动力学计算 $K_{Ie}(\text{Hg})$. 另一方面, 由于没有 Ga 吸附后表面能的数据, 故无法和分子动力学的计算结果 $K_{Ie}(\text{Ga}) = 0.4 \text{ MPam}^{1/2}$ 相比较.



(a) 当 $K_I = 1.1 \text{ MPam}^{1/2}$ 时,
Al 的原子构形图
(a) The atomic structure of Al
for $K_I = 1.1 \text{ MPam}^{1/2}$



(b) 当 $K_I = 1.1 \text{ MPam}^{1/2}$ 时, Al 吸附
Ga 之后的原子构形图
(b) The atomic structure of Al adsorbed
Ga for $K_I = 1.1 \text{ MPam}^{1/2}$

图 4
Fig.4

吸附促进局部塑性变形 (位错发射、增殖和运动)^[6~8] 和液体金属脆并不矛盾, 因为吸附液体金属后在更低的外应力 (或 K_I) 下位错就开始发射和运动, 当它们发展到临界条件时就导致脆性裂纹形核^[6]. 这就表明, 吸附后裂纹形核从而脆断的临界应力强度因子会下降. 另一方面, 吸附促进局部塑性变形的同时也使变形高度局部化, 当应变集中处的应变等于临界值 (它相当空拉时的断裂应变 ϵ_f) 时, 脆性裂纹就形核、扩展导致脆断, 但这时整个试样的平均应变 $\epsilon_f(L)$ 仍极低, 即 $\epsilon_f(L) < \epsilon_f$. 吸附降低表面能 γ 的同时也使塑性变形功 $\gamma_p(L)$ 下降, 从而使得 $K_{IC}(L) < K_{IC}$ ^[5].

4 总 结

利用反演方法可获得液体金属 Ga 和 Al (或 Cu) 的相互作用对势. 分子动力学模拟表明, Ga 吸附后能使 Al 和 Cu 发射位错的临界应力强度因子 K_{Ie} 下降约 20%; 另外 Ga 吸附后裂尖前方容易出现空位团和 Frank 位错.

参 考 文 献

- 1 Nicholas MG, Old CF. Liquid metal embrittlement. *J Mater Sci*, 1979, 14: 1
- 2 Kelley MJ, Stollf NS. Analysis of liquid metal embrittlement from a bond energy viewpoint. *Metall Trans A*, 1975, 6: 159
- 3 Kargol A, Albrighy DL. The effect of crystal orientation on the liquid metal fracture of Al bicrystals. *Metall Trans A*, 1977, 8: 27
- 4 Lyoch SP. Overview of evidence for an adsorption-induced localized slip process. *Acta Metall*, 1988, 36: 2639
- 5 刘晓敏, 乔利杰, 褚武扬. 铝合金在液体金属 Ga 中的脆断行为. 金属学报, 1998, 36: 615 (Liu Xiaomin, Qiao Lijie, Chu Wuyang. Embrittlement behavior of 7075 Aluminum alloy in liquid metal Ga. *Acta Metall Sinica*, 1998, 36: 615 (in Chinese))
- 6 宿彦京, 王燕斌, 褚武扬. 吸附促进位错发射、运动导致脆性裂纹形核. 中国科学, E 辑, 1997, 27: 397 (Su Yanjing, Wang Yanbin, Chu Wuyang. Chemisorption-facilitated dislocation emission and induced nucleation of brittle nanocrack. *Science in China E*, 1997, 40(6): 661~669
- 7 刘晓敏, 宿彦京, 褚武扬. 铝合金液体金属脆断的 TEM 原位观察. 金属学报, 1998, 36: 1021 (Liu Xiaomin, Su Yanjing, Chu Wuyang. In situ TEM observation of embrittlement of Aluminum alloy by liquid metal. *Acta Metall Sinica*, 1998, 36: 1021 (in Chinese))
- 8 宿彦京, 王燕斌, 褚武扬. Ti 吸附 Hg 后位错发射及裂纹形核的 TEM 原位研究. 金属学报, 1998, 36: 337 (Su Yanjing, Wang Yanbin, Chu Wuyang. In situ TEM study on dislocation emission and induced nucleation of nanocrack of Ti absorbed Hg. *Acta Metall Sinica*, 1998, 36: 337 (in Chinese))
- 9 Hoagland RG, Daw MS, Foiles SM, Baskes MI. An atomic model of crack tip deformation in Al using an embedded atom potential. *J Mater Res*, 1990, 5: 313
- 10 Mullins M. Computer simulation of fracture using long pair potentials, *Acta Metall*, 1984, 32: 318
- 11 Zhang Y W, Wang T C, Tang Q H. The effect of thermal activation of crack processes associated with dislocation nucleated at crack tip. *Appl Phys*, 1995
- 12 周国辉, 周富信, 陈难先, 万发荣, 褚武扬. 氢促进位错发射的分子动力学模拟. 中国科学, E 辑, 1998, 28(1): 1~5 (Zhou Guohui, Zhou Fuxin, Chen Nanxian, Wan Farong, Chu Wuyang. Molecular dynamics simulation of hydrogen enhancing dislocation emission. *Science in China (E)*, 1998, 41(2): 176~181)
- 13 Finnis M W, Sinclair J E. A simple N-body potential for transition metals. *Phil Mag*, 1984, 50: 45
- 14 Chen N X, Li M, Liu S J. Phonon dispersions and elastic constants of Ni₃Al and Mobius inversion. *Phys Lett*, 1994, A195: 135
- 15 Guinea F, Rose J H, Smith J R, Ferrante J. Scaling relations in the equation of state, thermal expansions and melting of metals. *J Appl Phys Lett*, 1984, 44: 53
- 16 Heermann D W. Computer Simulation in Theoretic Physics, 2nd ed. Berlin: Springer-Verlag, 1990
- 17 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
- 18 Cherepanov G P. Mechanics of Brittle Fracture. New York: McGraw-Hill Inc, 1979. 29

MOLECULAR DYNAMICS STUDY OF THE INFLUENCE OF LIQUID METAL ABSORPTION ON DISLOCATION EMISSION¹⁾

Zhou Guohui Zhou Fuxin* Wan Farong Chu Wuyang

(Department of Material Physics, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China)

* (Laboratory for Nonlinear Mechanics of Continuous Media, Institute of Mechanics,
Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

Abstract The pair potential of Al-Ga and Cu-Ga have been calculated by Chen's reverse method with the parameters in Rose's equation and the first principle theory. The effect on dislocation emission from crack tip is studied when liquid metal Ga is adsorbed on the crack plane of metal Al or Cu. The results show that for Al the critical stress intensity for dislocation emission would decrease from $K_{Ie} = 0.5 \text{ MPam}^{1/2}$ to $K_{Ie}(L) = 0.4 \text{ MPam}^{1/2}$ due to the adsorption of Ga, and for Cu from $K_{Ie} = 0.55 \text{ MPam}^{1/2}$ to $K_{Ie}(L) = 0.45 \text{ MPam}^{1/2}$. It means that the adsorption of liquid metal would facilitate the dislocation emission. On the other hand, vacancy cluster and Frank dislocation would form easily ahead of the crack tip due to the adsorption of liquid Ga.

Key words embrittlement of liquid metal, molecular dynamics simulation, Ga, Al

Received 19 May 1998, revised 27 March 1999.

1) The project supported by the State Key Basic Research Special Grant (19900065) and the National Natural Science Foundation of China (19891180).