

# 温度和加载速率对位错发射影响的原子级模拟\*

周国辉<sup>1)</sup> 王东雷<sup>1)</sup> 黄一中<sup>1)</sup> 褚武扬<sup>1)</sup> 周富信<sup>2)</sup>

1)北京科技大学应用科学学院, 北京 100083 2)中科院力学研究所, 北京 100080

**摘要** 以 Al 作为研究对象, 采用 EAM 势实施分子动力学模拟. 在 I 型和 II 型加载条件下, 研究了温度和取向对位错发射、裂纹脆性及韧性扩展的影响. 模拟结果表明, 升高温度, 发射位错的临界应力强度因子按指数规律降低. 加载速率在一定范围内将影响临界应力强度因子. 临界应力强度因子随着加载速率的增大而增大.

**关键词** 位错发射, 分子动力学, 原子级模拟, Al

**中图分类号** O772, TG111.2

在裂尖发射位错的研究中, 用弹性力学或者原子级模拟方法都可以研究裂纹的形核和位错发射. 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. Gilman<sup>[1]</sup>和 Hirsh<sup>[2]</sup>等人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<sup>[3]</sup>用分子动力学模拟了脆性断裂扩展, 并认为晶体在高温下, 裂尖发射位错, 从而导致裂纹钝化. 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 EAM 和 MEAM 势模拟的结果相比. Kitagawa 和 Nakatani<sup>[4]</sup>用分子动力学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, 临界应力强度因子  $K_{\text{crit}}$  与温度  $T^{1/2}$  成正比. 张永伟<sup>[5]</sup>研究了热激活对 Cu 单晶发射位错的影响. 他假定  $K_{\text{IIc}}$  与  $T$  的关系符合 Li<sup>[6]</sup>提出的指数关系, 用分子动力学计算得到的结果很好地符合 Li 的表达式. 在他的文章中, 分子动力学得到的临界应力强度因子  $K_{\text{IIc}} = 0.2376 \text{ MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$ , 要比 Ohr<sup>[7]</sup>计算值  $0.14 \text{ MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$  要大一些.

加载速率对材料断裂也有影响. 张永伟在文章中认为加载速率对 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.

## 1 计算方法

### 1.1 原子间相互作用势

根据镶嵌原子法 (EAM)<sup>[9]</sup>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:

1997-09-12 收稿 第一作者 男 26岁 博士生

\* 国家自然科学基金资助项目

$$U = - \sum_i \rho_i^{1/2} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j(i \neq j)} V_{ij} \tag{1}$$

其中,  $\rho_i = \sum_{j(i \neq j)} \Phi_{ij}$ ,  $\Phi_{ij}$  和  $V_{ij}$  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<sup>[10]</sup>.

### 1.2 计算模型

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<sup>[3]</sup> (见图 1). 为研究温度和加载速率的影响, 采用 II 型加载. 计算胞的尺度约为在  $x$  方向  $30a_0$  ( $a_0$  为点阵常数),  $y$  方向  $35a_0$ , 裂纹开在中央. 裂纹上下表面的距离大于截断距离  $1.22a_0$ , 原子总数约为 6 200.

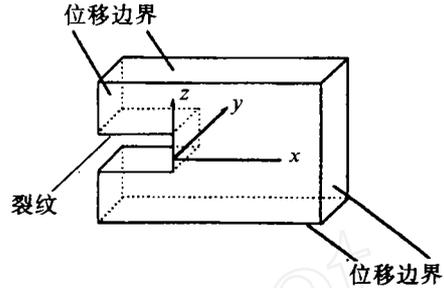


图 1 裂纹和晶体取向图  
x[110] y[112] z[111]

### 1.3 边界条件

用 I 和 II 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<sup>[11]</sup>. 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.

## 2 结果及讨论

### 2.1 温度因子效应

采用 II 型加载, 时间步长为  $5 \times 10^{-15}$  s, 加载速率为  $5 \times 10^{-3}$  MPa · m<sup>1/2</sup> / ps. 在 0, 40, 100, 200, 300 和 400 K 下作原子级模拟, 记录临界应力强度因子  $K_{IIc}$ .

临界应力强度因子  $K_{IIc}$  与热力学温度的关系见图 2. 由图可见, 温度的升高引起临界应力强度因子的降低. 一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<sup>[6]</sup> 指出, 在 0 K 下, 裂尖发射位错势能的最大值为:

$$\Delta G = Ab^2 \left( \ln \frac{Ab}{K_{II}^0} \sqrt{2\pi / r_0} - 1 \right)$$

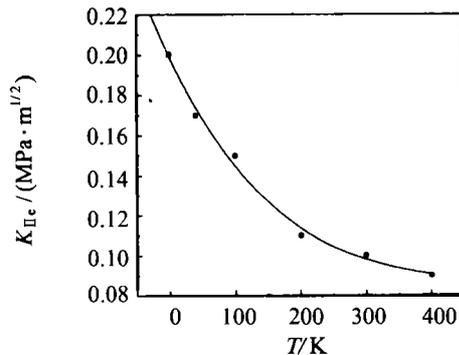


图 2 临界应力强度因子  $K_{IIc}$  与热力学温度  $T$  的关系

因此,在 0 K 下发射位错的临界应力强度因子为:

$$K_{II}^0 = \frac{Ab}{e} \sqrt{2\pi / r_0}$$

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

实验和计算表明,位错发射是一个热激活过程. Kitagawa<sup>[4]</sup> 指出,激活能是温度的线性函数.不妨假定

$$\Delta G_T = \frac{2ak_b T}{b}$$

式中,  $\Delta G_T$  为位错单位长度激活能,  $k_b$  为 Boltzmann 常数. 当  $\Delta G_T = \Delta G$  时,裂尖发射第 1

个位错,即

$$\frac{2ak_b T}{b} - AB^2 \left( \ln \frac{Ab}{K_{II}^0} \sqrt{2\pi / r_0} - 1 \right) = 0$$

由此可得在温度  $T$  下临界应力强度因子  $K_{IIc}$  为:

$$K_{IIc} = K_{IIc}^0 \exp\left(-\frac{2ak_b T}{Ab}\right)$$

取  $\alpha = 2.5$ , 通过拟合得到临界应力强度因子  $K_{IIc}$  与  $T$  的关系为:

$$K_{IIc}(T) = 0.1986 - 6.6575 \times 10^{-4} T + 1.3957 \times 10^{-6} T^2 - 1.2104 \times 10^{-9} T^3$$

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

$$\sigma_{xy} = \frac{K_{II}}{\sqrt{2\pi x}} + \sum_i \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} \sqrt{\frac{x_i}{x}} \cdot \frac{b}{x-x_i}$$

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相为:

$$[\mu b / 2\pi(1-\nu)][x / (x^2 - \xi^2)].$$

图 3 是从裂纹尖端发射的 2 个位置图. 在图 3 中,离裂尖  $1.2a_0$  的 A 处和  $4.5a_0$  的 B 处有 2 个位错. 图 4(a) 和 4(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.

## 2.2 加载速率效应

采用 II 型加载,时间步长为  $1 \times 10^{-14}$  s, 初始温度为 40 K, 加载速率从 0.005, 0.02, 0.08, 0.16 到  $0.24 \text{ MPa} \cdot \text{m}^{1/2}/\text{ps}$ , 研究临界应力强度因子与加载速率的关系见表 1.

加载速率在一定的范围内对  $K_{IIc}$  的影响不大,但是当  $K_{IIc}$  大于一个特定值时,  $K_{IIc}$  将显著升高(见图 5).

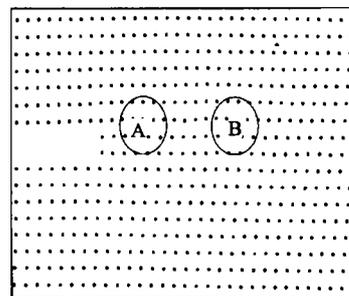


图 3 从裂纹尖端发射的 2 个位错  
A: 离裂纹尖端  $1.2a_0$ ; B:  $4.5a_0$   
 $a_0$  为  $A_1$  的点阵常数

表 1 加载速率对临界应力强度的影响

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

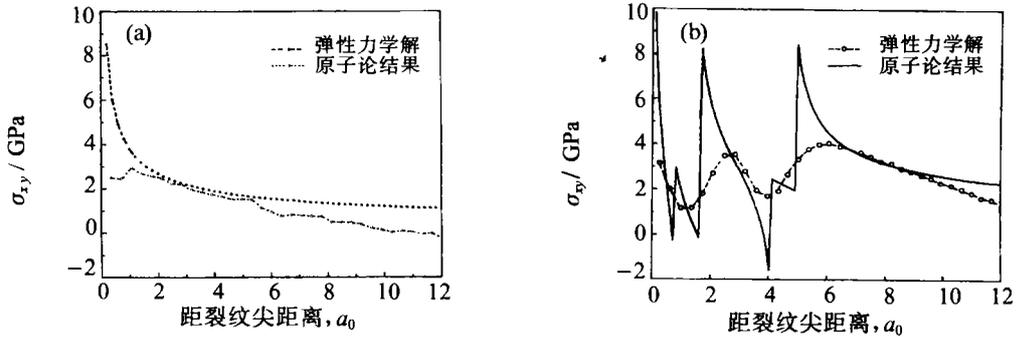


图4 原子论结果与弹性力学解比较(加载速率为 $0.16 \times 10^{-3} \text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$ )  
 (a)裂尖发射位错前,  $K_{IIc} = 0.192 \text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$   
 (b)发射位错后,  $K_{IIc} = 0.352 \text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$

### 3 结论

热激活影响临界应力强度因子. 温度升高, 发射位错的激活能降低, 使得位错发射变得容易, 并拟合出Al发射位错的  $K_{IIc}(T)$  函数关系式. 当加载速率小于  $0.08 \text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2} / \times 10^{-3} \text{s}$  时, 对  $K_{IIc}$  的影响不大; 当加载速率大于  $0.16 \text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2} / \times 10^{-3} \text{s}$  时,  $K_{IIc}$  显著升高.

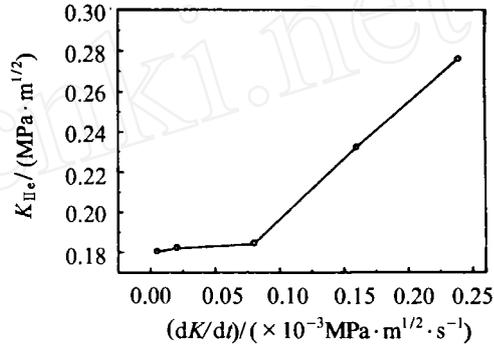


图5  $K_{IIc}$ 与加载速率的关系

### 参考文献

- 1 Gilman J J. Direct Measurements of the Surface Energies of Crystals. *J Appl Phys*, 1960, 31: 2208
- 2 Roberts S G, Hirsh P B, Samuels J. Brittle-to-ductile Transition in Silicon. In: *Proceedings of the 3th International Conference on the Science of Hard Materials, Part I. Nassau: Bahamas, 1987. 39*
- 3 Mullins M. Computer Simulation of Fracture Using Long Range Pair Potentials. *Acta Metall*, 1984, 32: 381
- 4 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
- 5 Zhang Y W, Wang T C, Tang Q H. The Effect of the Thermal Activation of Crack Processes at An Atomistic Crack Tip. *J Appl Phys*, 1995, 28: 748
- 6 Li J C M. Computer Simulation of Dislocations Emitted from a Crack. *Scr Metall*, 1986, 20: 1477
- 7 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
- 8 Zhang Yongwei, Wang Tzuchiang, Tang Qiheng. Molecular Dynamics Simulation of Crack-tip Processes in Copper. *Acta Mechanica Sinica*, 1995, 11: 76
- 9 Finnis M W, Sinclair J E. A Simple N-body Potential for Transition Metals. *Phil Mag*, 1984, 50: 45
- 10 Ackland G J, Tichy G, Vitek V, et al. Simple N-body Potentials for the Noble Metals and Nickel.

Phil Mag, 1987, A56: 735

11 Heermann D.W. Computer Simulation Methods in Theoretic Physics, (2nd). Barlin:Springer-Verlag, 1990

## Atomistic Simulation of the Influence of Temperature and Loading Rate on Dislocation Emission

Zhou Guohui<sup>1)</sup> Wang Donglei<sup>1)</sup> Huang Yizhong<sup>1)</sup> Chu Wuyang<sup>1)</sup> Zhou Fuxin<sup>2)</sup>

1) Applied Science School, UST Beijing, Beijing 100083, China

2) Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, 100080

**ABSTRACT** Utilizing EAM potential, Al single crystal with molecular dynamics simulation method was studied. Under mode I and II loading, the influence of temperature and loading rate on dislocation emission and the critical stress intensity factor was analyzed. The simulated results show that the critical stress intensity factor for dislocation emission decreases exponentially as the temperature increases. Loading rate will influence the critical stress intensity factor to some degree. The critical stress intensity factor will increase as loading rate increases.

**KEY WORDS** dislocation emission, molecular dynamics, atomistic simulation, Al

\*\*\*\*\*

(上接 584 页)

## Strain-induced Microstructural Changes and Effects of Alloying Elements for Fe<sub>3</sub>Al-based Alloys (II)

Chen Guoliang Huang Yuanding Zhang Lichun Sun Zuqing Yang Wangyue

State Key Laboratory for Advanced Metals and Materials, UST Beijing, Beijing 100083, China

**ABSTRACT** Effects of Cr and Mo on mechanical properties and micro-structure of Fe<sub>3</sub>Al based alloys were investigated from the point of the strain-induced microstructural changes in Fe<sub>3</sub>Al-based alloys during room temperature deformation and high temperature creep. It is found that both Cr and Mo soluted into the matrix of Fe<sub>3</sub>Al-based alloys. The Addition of Cr can accelerate strain-induced disordering resulting in an effect of solution softening. The addition of Mo is beneficial to creep-induced reordering and to increase the recrystallization temperature, resulting in solution strengthening.

**KEY WORDS** intermetallics, iron aluminides, creep, ordering, strain induced disordering and ordering