

加载速率对位错发射、层错宽度及位错速度影响

周国辉¹⁾ 焦治杰¹⁾ 武骏²⁾ 周富信³⁾ 褚武扬¹⁾

1) 北京科技大学应用科学学院, 100083, 北京 2) 北京科技大学冶金学院, 100083, 北京 3) 中科院力学所, 100080, 北京

摘要 应用分子动力学方法研究了 Cu 和 Al 单晶在 II 型加载条件下, 加载速率对位错发射、层错宽度 W 及位错速度 V_d 的影响. 结果表明, 加载速率对 W 和 V_d 有显著影响. 随着加载速率的增大, 层错宽度减小, 位错速度增大. 当加载速率达到某一临界值时, 能量不仅以发射位错的形式释放, 而且形成孪晶, 以降低体系的能量.

关键词 分子动力学; 偏位错, 位错分解; Cu; Al
分类号 O 772; TG 111.2

材料的断裂本质上讲是原子键的断裂. 分子动力学模拟作为对原子运动的确定性描述, 是一种研究材料断裂、微观结构和许多热力学性质的有力手段. 张永伟^[1]借此方法研究了 Cu 单晶应力强度因子与裂纹和滑移面夹角的关系. M. I. Baskes^[2]等人研究了 Ni 晶体中的点阵缺陷对 H 的捕获. R. G. Hoagland^[3]等人研究了裂尖附近应力和应变场. 最近 S. J. Zhou 等人成功地实施真正的三维分子动力学模拟, 原子数达到几千万个, 得到了与以前仅用少量原子模拟所不能得到的结论, 并修正了一些错误的结论. 其结果更进一步地与实验相符, 显示出诱人的应用前景.

本文以 Cu 和 Al 为研究对象, 研究加载速率与位错发射、位错速度及层错分解宽度的关系.

1 计算模型

Cu 和 Al 都是 fcc 结构的晶体, 取应用较为广泛的 Finnis-Sinclair 势函数. 位错择优在密排面产生, 并沿密排方向运动. 因为密排面的 Nabarro-Pierrel's 力最小. 对于 fcc 晶体, 位错在 $\{111\}$ 面沿 $\langle 110 \rangle$ 方向运动. 在该模型中, $\langle 110 \rangle$ 为位错运动方向. 采用 II 型加载. Y 方向选取 20 个周期, X 方向选取 70 个周期, Z 向选取 1 个周期, 原子总数约为 6 300 个. 用 II 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 $\vec{F}_i = -\partial\Phi / \partial\vec{r}_i =$

$m_i \vec{a}_i$. 用蛙跳法^[4]来计算原子的速度和位移. 时间步长 $\Delta t = 0.02 \text{ ps}$ ($1 \text{ ps} = 10^{-12} \text{ s}$). 晶体初始温度为 40 K, 初始速度服从 Maxwell-Boltzmann 分布.

2 计算结果及讨论

2.1 Burgers 矢量的确定

面心立方位错的 Burgers 基矢为 $(a_0 / 2) \langle 110 \rangle$, 因而可以计算出该模型中发射的位错 Burgers 矢量的大小和方向. 在图 1 中, 三轴方向分别为 $X[110]$, $Y[\bar{1}11]$ 和 $Z[\bar{1}12]$. 发射的位错沿 $[110]$ 方向运动, 纸面为 $[\bar{1}12]$ 的投影. X 方向相邻原子间距为 $(\sqrt{2} / 4) a_0$, Y 方向相邻原子间距为 $(\sqrt{3} / 3) a_0$, Z 方向相邻原子间距为 $(\sqrt{6} / 12) a_0$. 用右手定则作柏氏回路, 即用右手的拇指指向位错线的方向, 其余四指的方向作为柏氏回路的方向, 在图 1 中表示为顺时针方向. 可以发现, 围

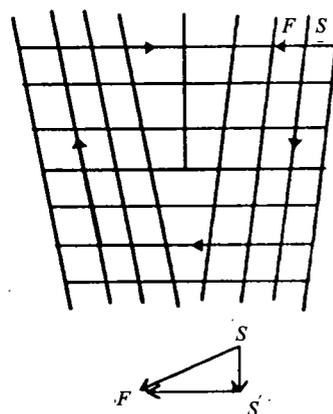


图1 柏氏矢量回路图

1998-01-04 收稿 周国辉 男, 27岁, 博士生

*国家自然科学基金资助课题 (No.59771051, 59871010)

绕位错所作的柏氏回路不封闭(若在完整晶体中作此柏氏回路则是封闭的),也就是回路的起点 S 与终点 F 在回路中不重合,连接 S 与 F ,使回路成为封闭.将回路封闭的矢量 \overrightarrow{FS} 或 \overrightarrow{SF} 二者之中规定一个矢量,此矢量即为柏氏矢量^[6].

由于 S 与 F 不在同一平面上,沿 Z 方向相距 $(\sqrt{6}/12)a_0$.由矢量运算得到:

$$\overrightarrow{SF} = \overrightarrow{SS'} + \overrightarrow{S'F} = \frac{a_0}{12} [112] + \frac{a_0}{4} [\bar{1}10] = \frac{a_0}{6} [2\bar{1}1].$$

\overrightarrow{SF} 即为 fcc 晶体全位错分解得到的一个偏位错,并存在下面的分解关系:

$$\frac{a_0}{2} [\bar{1}10] = \frac{a_0}{6} [2\bar{1}1] + \frac{a_0}{6} [\bar{1}\bar{2}1].$$

因为位错应变能正比与柏氏矢量的平方,则反应前后的能量关系为:

$$\frac{a_0^2}{2} > \frac{a_0^2}{6} + \frac{a_0^2}{6}.$$

因此全位错分解有利与降低位错能量.

2.2 加载速率对位错发射及位错运动的影响

在 II 型加载条件下, Cu 和 Al 不断发射偏位错.在 2 个偏位错之间夹着一片层错.在没有应力及其他作用力的情况下,层错能决定层错宽度.层错能越高,分解宽度越小. Al 晶体中位错的分解宽度小于 Cu 晶体中位错的分解宽度.从图 2 和图 3 可以看出,位错成对发射.当第 1 个偏位错发射之后运动离开裂尖时,它的后面拖着 1 片层错.层错的产生将导致体系的能量升高,因此发射第 2 个偏位错以终止体系能量的升高.以图 2 为例,第 2 个偏位错要比第 1 个偏位错滞后 $0.08 \text{ MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$,而后 1 个全位错要比上 1 个全位错滞后 $0.16 \text{ MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$.因此层错能有利于第 2 个偏位错的发射(外加应力是主要的原因).

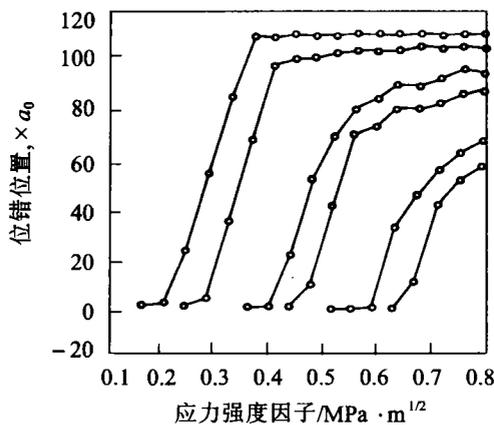


图2 Cu晶体在加载速率为 $0.005 \text{ MPa} \cdot \text{m}^{1/2} \text{ ps}^{-1}$ 时的位错发射

由于记录数据的时间间隔较大,只在图 3 中较明显的观察到位错的孕育期.第 3 个偏位错从产生到离开裂尖经历了 12 ps 的孕育期.这表明在裂尖产生的位错必然要克服一定的能垒才能发射而离开裂尖,能量由外载提供.

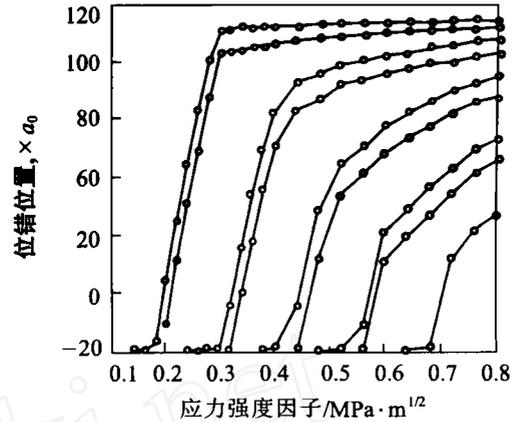


图3 Al晶体在加载速率为 $0.005 \text{ MPa} \cdot \text{m}^{1/2} \text{ ps}^{-1}$ 时的位错发射

当位错离开裂尖但未到达边界时,位错基本上以恒定速度向前运动.增大加载速率,位错速度基本上线性增大,层错宽度减小(见图 4,图 5).晶体中的层错宽度由层错能和应力状态决定.层错能越大,位错的分解宽度越小. Al 的层错能为

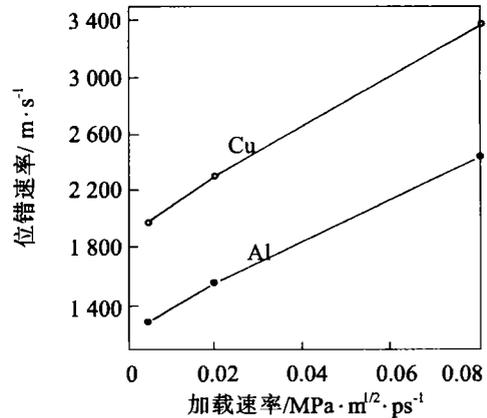


图4 加载速率与位错速率关系

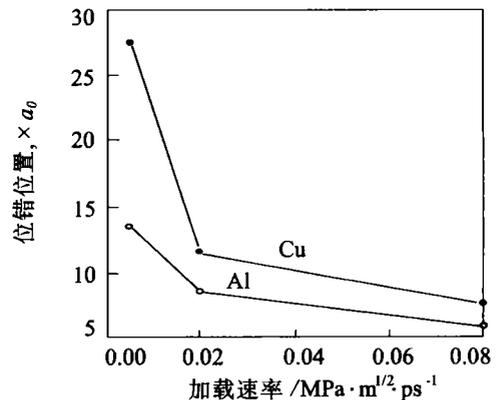


图5 加载速度与层错宽度的关系

0.2 J/m², Cu 的层错能为 0.04 J/m², Al 的位错分解宽度比 Cu 的位错分解宽度要小. 表 1 列出了加载速率与位错速度和分解宽度的关系.

表1 加载速率与位错速度和层错宽度关系

	Cu			Al		
加载速率/ MPa·m ^{1/2} ·ps ⁻¹	0.005	0.02	0.08	0.005	0.02	0.08
位错速度/ m·s ⁻¹	1 268.91	554.5	2 436.5	1 972.0	2 301.1	3 370.0
层错宽度 × a ₀	27.5	11.5	7.6	13.6	8.6	5.8

在高速加载情况下又会出现孪晶的产生. 晶体不仅通过发射位错以降低能量, 而且形成孪晶降低体系的能量. 在图 6 中的 S 处产生孪晶.

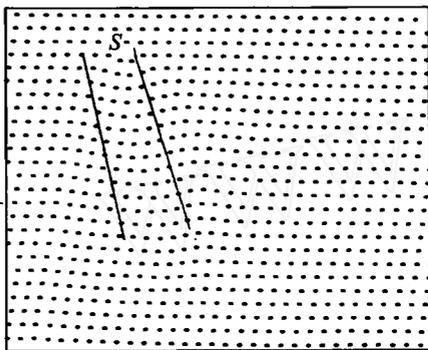


图6 Cu晶体的原子构形图, 高速加载时产生孪晶, 加载速率为0.1 MPa·m^{1/2}·ps⁻¹, T=40 K, Δt=0.01 ps 在S处产生孪晶

3 结论

(1) 在 II 型加载条件下, Al 和 Cu 晶体成对地发射偏位错, 柏氏矢量为 1/6<112>.

(2) 随加载速率增大, 层错宽度减小, 位错速度增大.

(3) 在高速加载条件下, 能量不仅以发射位错的形式释放, 而且形成孪晶, 以降低体系的能量.

参考文献

- 1 Zhang Y W, Wang T C, Tang Q H. Brittle and Ductile Fracture at the Atomic Crack Tip. *Scri Metall Mater*, 1995, 33:267
- 2 James E Angelo, Moody N R, Baskes M I. Trapping of Hydrogen to Lattice Defects in Nickel. *Modelling Simul. Mater Sci Eng.* 1995(3):287
- 3 Hoadland R G, Daw M S, Hirth J P. Some Aspects of Forces and Fields in Atomic Models of Crack Tips. *J Mater Res*, 1991, 6(12):2565
- 4 Heermann D W. *Computer Simulation Methods in Theoretic Physics*(2nd Edition). Berlin: Springer-Verlag, 1990
- 5 汪复兴. 金属物理. 北京: 机械工业出版社, 1981.8

Influence of Loading Rate on Dislocation Emission, Width of Stacking Fault and Dislocation Velocity

Zhou Guohui¹⁾, Jiao Zhijie¹⁾, Wu Jun²⁾, Zhou Fuxin³⁾, Chu Wuyang¹⁾

1)Applied Science School, UST Beijing, Beijing 100083, China 2)Metallurgical School, UST Beijing

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

ABSTRACT Cu and Al single crystals with molecular dynamics simulation method was studied. Under mode II loading, the influence of loading rate on dislocation emission, width of stacking fault and dislocation velocity was analyzed. The simulated results show that width of stacking fault decreases as loading rate increases, while dislocation velocity increase dramatically. If loading rate is very high, system energy will be released by dislocation emission, the twinning is formed as well.

KEY WORDS molecular dynamics; partial dislocation; dislocation dissociation; Cu; Al