

Al 晶界的第一性原理拉伸试验^{*}

张 颖[†] 吕广宏 邓胜华 王天民

(北京航空航天大学理学院, 北京 100083)

(2005 年 9 月 14 日收到 2005 年 11 月 7 日收到修改稿)

基于密度泛函理论和局域密度近似的第一性原理方法,进行了 Al 晶界的第一性原理拉伸试验.得到 Al 晶界的理论拉伸强度为 9.5 GPa,对应的应变为 16%.根据价电荷密度、键长和原子构型随应变的变化,我们证实断裂发生在晶界面,其特征是所有界面键的断裂.同时还发现在周围原子键的数目减少的情况下,界面重构的 Al-Al 原子键具有共价键的性质.因此 Al 晶界依然保持着较高的界面强度.

关键词: Al 晶界, 第一性原理拉伸试验, 理论拉伸强度

PACC: 7115A, 7115H, 7115M, 7340

1. 引 言

随着现代计算机计算能力的高速发展和先进算法和技术的不断开发,基于密度泛函理论(DFT)的第一性原理计算方法已经成为物理、化学、材料科学甚至生物学等领域中极其重要的不可缺少的理论计算方法.因为没有任何经验参数引入而只需要原子序数作为输入,第一性原理计算方法可以精确计算材料的原子结构和电子结构,由此确定物质基态的结构和性质.目前第一性原理计算方法已经被广泛应用于材料的原子、电子结构和物理性质的研究^[1,2],特别是利用超晶胞(supercell)近似可以很好地处理材料晶界,界面和表面的相关问题^[3-11].

第一性原理拉伸或剪切试验是通过第一性原理方法,应用 Nielsen-Martin 应力计算理论^[12]计算作用在系统上的平均应力.由此可以用第一性原理计算的方法得到理论的应力-应变关系曲线,确定晶体的理论(拉伸或剪切)强度.晶体的理论强度是材料固有的性质,是由价电子和离子的行为决定的.当对一个无限大的完整晶体施加一个不断增加的应力时,在弹性失稳处(屈服或断裂)的最大应力确定了晶体的理论强度.它是实际晶体强度的上限值.类似地,在不引入位错或裂纹的情况下,对一个只包含一种缺陷(如点缺陷、界面、晶界等)的理想缺陷系统不断

加载,当它达到弹性失稳处时所需要的最大应力决定了这个理想缺陷系统的理论强度.这个值是实际材料中缺陷区域的内在局域强度.通过第一性原理拉伸试验,研究完整和缺陷系统的理论强度对于了解材料的力学性能是非常必要的,在科学和工程上都具有重要的意义.同时由不同应变状态下的电子结构和原子结构,可分析其原子间结合键的变化,得到其微观断裂的过程及规律.

第一性原理拉伸或剪切试验已成功用于大多数晶体,例如 Al^[13-16], SiC^[17], Cu^[13,16], W^[18], 金刚石, Si, 和 Ge^[19], Mo 和 Nb^[20]等.一些计算结果可以直接与实验进行比较^[21].随着计算能力的迅速发展,第一性原理拉伸或剪切试验也能成功用于复杂的晶界.例如 SiC 晶界^[22,23], α -Al₂O₃ 晶界^[24]和 Ni 晶界^[25].

近来,我们使用与日本学者合作开发的基于模守恒赝势的第一性原理计算程序,成功地对 Al 晶界进行了第一性原理拉伸试验,得到了 Al 晶界的理论拉伸强度为 9.5 GPa.相关结果已经发表^[26].但是以前的拉伸试验在发现第一个应力最大值后停止,没有达到断裂点.在本文中,使用 VASP 程序^[27,28]和超软赝势^[29,30],并且使用了更为苛刻的原子力弛豫条件,全部完成了 Al 晶界的第一性原理拉伸试验,即一直进行到晶界断裂为止.因此得到了更多的富有意义的结果.

^{*} 国家自然科学基金(批准号 50201002)和北京大学工程研究院(批准号 204031)资助的课题.

[†] E-mail: zhangy0001@sohu.com

2. 计算模型和方法

计算所用的超晶胞如图 1 所示,其中 x , y , z 轴分别沿着 $[2\bar{2}1]$, $[1\bar{1}\bar{4}]$ 和 $[110]$ 方向. 超晶胞由 84 个 Al 原子组成, A, B, C 和 D 代表 4 个 (110) 原子层. 超晶胞三边长度分别为 $28.685\text{\AA}$, $8.443\text{\AA}$ 和 $5.629\text{\AA}$. 用重合位置点阵模型 (CSL) 构造的 $\text{Al}\Sigma 9(2\bar{2}1)/[110]$ 倾侧晶界, 是通过让两个晶体中的一个绕 $[110]$ 轴旋转 38.94° , 然后拼接而成的, $(2\bar{2}1)$ 面被设定为晶界平面. 在晶界面上的重位点阵单胞方向和大小分别为 $[1\bar{1}\bar{4}]$, $(3\sqrt{2}/2)a_0$ 和 $[110]$, $(\sqrt{2}/2)a_0$, 其中 a_0 是计算得到的 Al 的晶格常数, 为 $3.98\text{\AA}$. 超晶胞 $[110]$ 方向的长度是 $\sqrt{2}a_0$. 为了满足周期性边界条件, 超晶胞中包含有 2 个对称的 $\Sigma 9(2\bar{2}1)/[110]$ 晶界.

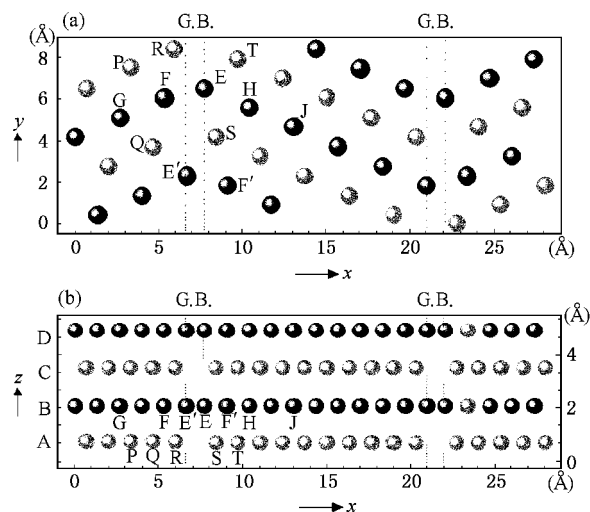


图 1 Al 晶界超晶胞模型的俯视图 (a) 和侧视图 (b)

应用基于密度泛函理论 (DFT) 和局域密度近似 (LDA) 的第一性原理方法进行 Al 晶界的第一性原理拉伸试验. 采用的计算软件是 VASP. 离子核和电子之间的相互作用采用超软赝势近似. 晶体波函数用平面波基展开, 平面波动能的截止能为 204eV . 选取 $(1 \times 4 \times 8)$ 均匀网格的 Monkhorst-Pack 类型的 k 点进行布里渊区的积分^[31].

在第一性原理拉伸试验中, 根据 Nielsen-Martin 方法^[12], 作用在整个晶胞上的平均应力为

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{\Omega} \frac{\partial E_{\text{total}}}{\partial \epsilon_{\alpha\beta}}, \quad (1)$$

即总能量 E_{total} 对应变张量 $\epsilon_{\alpha\beta}$ 的偏微分, 再除以晶胞的体积 Ω . 在拉伸试验中, 在垂直晶界的方向, 即

$[2\bar{2}1]$ 方向, 引入一个单轴拉伸应变

$$\epsilon = (l_{\epsilon} - l_0)/l_0, \quad (2)$$

其中, l_{ϵ} 为应变 ϵ 时晶胞在 $[2\bar{2}1]$ 方向的长度, l_0 为初始晶胞在 $[2\bar{2}1]$ 方向的长度. 为了节省计算时间, 晶胞在 $[1\bar{1}\bar{4}]$ 和 $[110]$ 方向的长度是固定的, 即没有考虑泊松效应. 这与以前的报告^[26] 中的条件相同. 同时, 在拉伸试验中的每一步, 我们采用相比以前的报告更为苛刻的弛豫条件, 即能量弛豫重复进行直到作用在所有原子上的力都小于 $10^{-3} \text{ eV/\AA}$. 从 VASP 输出结果中, 可以直接得到弛豫后的原子位置、总能量、应力和电子密度. 拉伸试验一直进行到晶界断裂为止.

3. 结果和讨论

3.1. 理论韧性, Griffith 断裂能和理论拉伸强度

理论韧性, Griffith 断裂能和理论拉伸强度是表征材料力学性能的物理量. 通过 Al 晶界的第一性原理拉伸试验, 可得到 Al 晶界的理论韧性, Griffith 断裂能和理论拉伸强度. 其中理论韧性和 Griffith 断裂能与系统的总能量密切相关.

系统在基态的总能量是系统稳定程度的标志. 图 2 是 Al 晶界的总能量随应变变化的曲线. 从能量-应变曲线可以看到, 随着拉伸应变的增加, 系统能量逐渐增加, 显示系统逐渐趋向不稳定. 在应变 25% 时, 能量达到最大值, 之后系统总能量突然下降. 应变继续增加, 系统总能量基本保持不变, 显示整个晶界系统趋于稳定. 由于材料在断裂之前系统能量随应变增加不断升高, 断裂发生之后系统能量应显著降低. 因此我们可以推断断裂发生在应变 25% 之后.

材料的理论韧性定义为断裂时的应变能密度, 即拉断系统所需要的能量除以其体积. 对我们现在的晶胞, 拉断系统所需要的能量是 14.5 eV , 因此理论韧性是 $8.5 \times 10^{-3} \text{ eV/\AA}^3$ (1.36 GPa). Griffith 断裂能, 定义为产生单位断裂表面所需要的能量, 其值直接与断裂后的总能量有关. 图 2 显示断裂后的能量约为 9.85eV , 因此 Griffith 断裂能为 $52 \text{ meV/\AA}^2$ (0.83 J/m^2). 需要说明的是, 这里使用未优化的晶胞作为能量零点. 计算表明, 如对晶胞进行优化, 系统总能量仅降低 0.032eV , 对理论韧性和 Griffith 断裂能造成的误差非常小, 可以忽略不计.

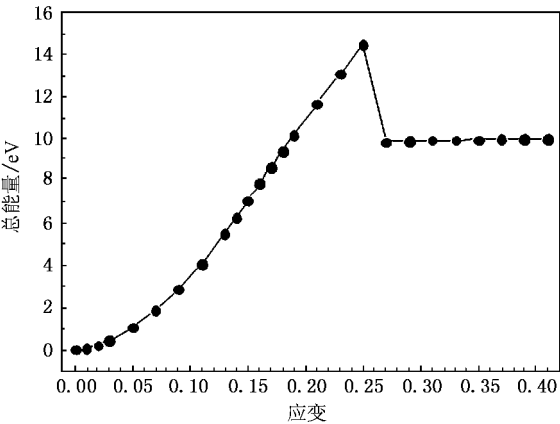


图 2 Al 晶界的总能量随应变的变化 系统最小能量选为能量的零点

图 3 给出了由第一性原理拉伸试验得到的 Al 晶界的应力-应变曲线. 在拉伸试验中晶胞的对称性能够自然地保持, 所以应力张量的所有剪切分量都为零. 在拉伸时, 晶胞沿 $[2\bar{2}1]$ 方向产生伸长变形的同时, 在 $[1\bar{1}\bar{4}]$ 和 $[110]$ 方向会产生缩短变形, 即泊松效应. 类似于以前的 SiC 晶界^[22,23] 和 Al 单晶^[15] 的第一性原理拉伸试验, 我们固定了晶胞在 $[1\bar{1}\bar{4}]$ 和 $[110]$ 方向的长度, 这相当于沿这两个方向进行了拉伸, 所以产生了平行晶界面的 $[1\bar{1}\bar{4}]$ 和 $[110]$ 方向的应力.

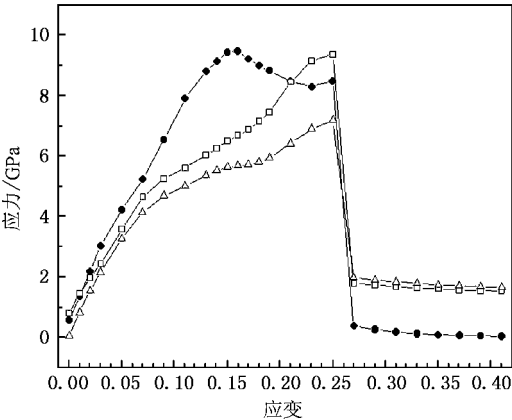


图 3 第一性原理拉伸试验得到的 Al 晶界应力-应变关系 实心圆点、正方形和三角形分别代表在 $[2\bar{2}1]$, $[1\bar{1}\bar{4}]$ 和 $[110]$ 方向的应力

在垂直晶界面的 $[2\bar{2}1]$ 方向, 即拉伸方向的应力揭示了晶界的理论拉伸强度. 从图 3 中看到, 应变达到 16% 时, 拉伸方向的应力达到最大值, 为 9.5 GPa. 之后应力开始逐渐下降. 在应变 23% 时, 应力降低到 8.29 GPa. 虽然应力降低, 但系统的总能量仍然在增加, 显示系统仍然趋向不稳定的状态. 因此断

裂还没有发生. 在应变 25% 时, 出现应力的第二个最大值 8.49 GPa. 随后应力快速地下降到 0.38 GPa, 之后逐渐降为零. $[1\bar{1}\bar{4}]$ 和 $[110]$ 方向的应力在应变 25% 之后也急剧下降. 因此, Al 晶界的理论拉伸强度为 9.5 GPa, 对应的应变为 16%. 断裂则发生在应变 25% 之后. 这与系统的总能量在应变 25% 之后突然降低, 显示系统发生断裂的结论一致. 这里需要说明的是: 计算中使用未优化的晶胞, 不会对理论拉伸强度的结果产生任何影响.

我们计算得出的 Al₉ 晶界的理论拉伸强度 9.5 GPa, 比完整 Al 晶体在 $[001]$ 和 $[111]$ 方向的理论拉伸强度 11—12 GPa^[14,17] 稍低一点. 这说明 Al₉ 晶界依然保持着较高的强度. 与实验值 (长 10.0 μm 厚 0.66 μm 的铝纤维) 2.25 GPa^[32] 相比, 则高出很多. 这主要是因为我们在拉伸过程中我们没有考虑位错等除晶界以外的缺陷的存在. 而这些缺陷特别是位错, 将会造成强度的大幅下降. 同时, 没有考虑泊松比也是理论强度较高的一个原因.

3.2. 价电荷密度

价电荷密度的分布揭示了局域原子键的特征. 我们分析了包含界面原子 E 和 F 的 B 层的价电荷密度. 图 4 表示随应变的增加 B 层左半部分的价电荷密度的变化情况. 图中 EF 和其对称等价的 E'F' 键是界面重构键. 无应变时, EF 键的电荷密度大于 0.036 e/a.u.³, FG, EH 和 HJ 键的电荷密度介于 0.032 e/a.u.³ 和 0.036 e/a.u.³ 之间. 可见, EF 键的电荷密度是最高的. 在应变 3%, EF 键的电荷密度仍然是最高的. 可以看到, 在 EF 键中心, 增加的键电荷具有共价键的特征. 电荷密度部分地定域在 E 和 F 原子中间, 具有很强的方向性. 这显示重构的 EF 和 E'F' 键是相当强的. 然而, 在界面上 EF 和 E'F' 键之间也存在一个低密度区域. 在这个区域, 电荷密度无应变时低于 0.012 e/a.u.³. 这主要是由于在界面形成时, 原子 E 和 F 周围最近邻的原子数目减少, 导致界面的原子键的数目减少造成的. 随着应变的增加, EF 键的电荷密度减少. 但一直到应变 11%, EF 键的电荷密度仍然比 FG, EH 和 HJ 键的电荷密度要高, 如图 4(b) — (d) 所示. 此时 EF 键的电荷密度比 0.028 e/a.u.³ 高, FG, EH 和 HJ 键的电荷密度比 0.028 e/a.u.³ 低. 在应变 14% [图 4(e)] 时, 上面提到的邻近 EF 键的低密度区域扩展到 EF 之间. EF 键的电荷密度与 FG, EH 和 HJ 键的电荷密度相差不

多.这 4 个键的电荷密度值在 0.020 e/a.u.^3 与 0.028 e/a.u.^3 之间. EF 键电荷密度的这些特征表明,一直到应变 14%,重构的 EF 键仍然维持着拉伸应力.然而,超过应变 14%,如图 4(f) — (i) 所示,这个低密度区域进一步扩展到 EF 之间,EF 键的电荷密度与 FG,EH 和 HJ 键的电荷密度相比迅速减小.在应变 21%时,达到 0.008 e/a.u.^3 .在应变 25%时,

达到 0.004 e/a.u.^3 .而 FG,EH 和 HJ 键的电荷密度则逐渐减少.在应变 27%时,在这个低密度区域晶界完全断裂,表现为零电荷密度,如图 4(j) 所示.值得注意的是,在应变 16%时,EF 键的电荷密度开始迅速减小,而此时拉伸方向的应力达到其最大值.这表明晶界的最大强度主要来源于 EF 键.从电荷密度的分布,可以清楚地看到,断裂是从晶界处开

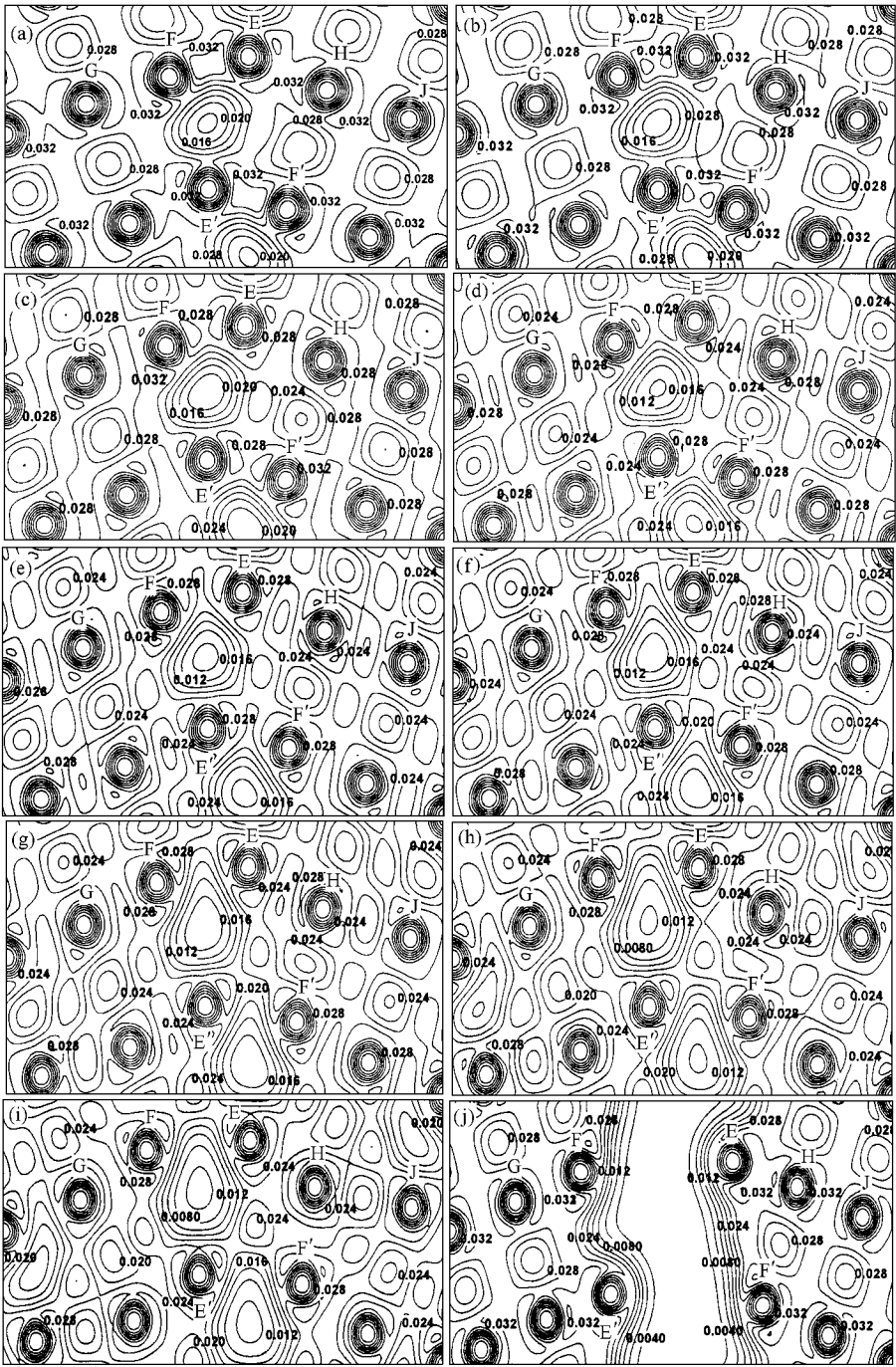


图 4 超晶胞中 B 层左半部分的价电荷密度 应变分别为 (a) 0%, (b) 0%, (c) 7%, (d) 11%, (e) 14%, (f) 16%, (g) 18%, (h) 21%, (i) 25%, (j) 27%.等高线的间隔为 0.004 e/a.u.^3

始的.

3.3. 键长和原子构型

从图3看到,拉伸方向的应力出现了两个最大值,第一个最大值比第二个要高.为了从原子尺度了解晶界是如何断裂的并解释上述现象,我们研究了晶界附近原子E和F(见图1)与其周围最近邻原子之间原子键的键长随应变的变化,如图5所示.EF和ER为晶界面重构的原子键.纵坐标为相对键长,即 $[(L - L_{Al})/L_{Al}] \times 100$,其中 L_{Al} 为面心立方Al的原子键键长(2.814Å).

在拉伸过程中,键长的变化与键长在无应变时在拉伸方向的投影长度密切相关.从表1中看到,界面键EF、非界面键EH和FG的投影长度分别为2.541Å,2.540Å和2.661Å.另一个界面键ER的投影长度为1.648Å.在应变为15%之前,具有较大投影长度的界面键EF、非界面键EH和FG的键长几乎是线性增加的,而具有较小投影长度的另一个界面键ER的键长几乎没有变化.从15%开始,界面键EF的键长偏离了线性变化,以更快的速度增加,非界面键EH的键长则变短.其他的界面键ER、非界面键ET和ES的键长没有大的变化.这显示界面重构键EF开始断裂,对应于第一个应力最大值.应变继续增加至应变25%时,ER键长突然大幅度增加.其他所有的非界面键的键长开始变小.这显示ER键发生断裂,对应于第二个应力最大值.应变27%

之后,EF和ER键长线性增加,所有的非界面键的键长保持不变,意味着晶界的最后断裂.因此晶界的断裂是由界面键决定的.虽然ER的键密度是EF的两倍,但是EF在拉伸方向的投影键长远大于ER(表1),因此主要由EF键贡献的第一应力最大值要高于主要由ER键贡献的第二应力最大值.

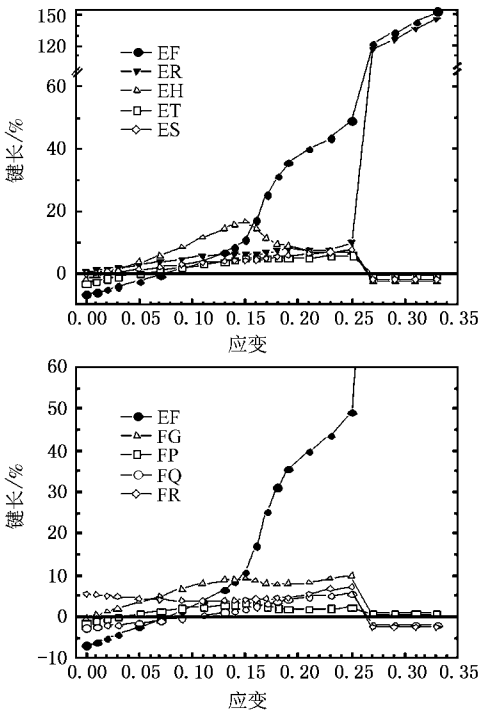


图5 晶界上的原子E和F与其最近邻原子间所形成原子键的键长随应变的变化

表1 无应变时界面键EF和ER及其相关的非界面键在拉伸方向的投影键长

键	EF	ER	EH	ET	ES	FG	FP	FQ	FR
投影/Å	2.541	1.648	2.540	1.927	0.375	2.661	1.890	0.659	0.893

为了更清楚地看到断裂是由界面键控制且发生在晶界面,我们给出了在拉伸过程中原子构型随应变的变化情况,如图6所示.选择了几个具有代表性的应变值.即断裂前0%,3%,7%,11%,14%,16%,18%,21%,25%和断裂后27%.由于原子E,F和R分别与E',F'和S对称,所以EF和ER键分别与E'F'和E'S键对称等价.在拉伸过程中,最初EF和E'F'键长随应变增加线性增大[图6(b)–(e)],对应于EF键的电荷密度的逐渐减少[图4(b)–(e)].随后EF和E'F'键长开始以较快的速度增长[图6(f)–(i)],EF键的电荷密度迅速减少[图4(f)–(i)].可见,在断裂前,拉伸过程的特征主要体现在界面重构键EF和E'F'的伸长,并没有显著的晶界结构的变

化.断裂后,所有界面键(EF,ER,E'F'和E'S)完全断裂,所有其他键恢复到应变0%时的状态[图6(j)和图4(j)].因此断裂发生在晶界面.所有界面键的断裂意味着晶界的最后断裂.这与价电荷密度的结果完全一致.

在文献[26]中,拉伸试验在发现最大应力后停止,没有达到断裂点.现在我们全部完成了Al晶界的第一性原理拉伸试验,一直进行到晶界完全断裂为止.现在的计算结果在第一应力极大值前与我们以前的报告^[26]基本一致.比如计算得到的Al晶界的理论拉伸强度都为9.5 GPa.但也存在着一些差异,主要是由于现在的计算采用了更严格的收敛条件.即能量弛豫重复进行直到作用在所有原子上的

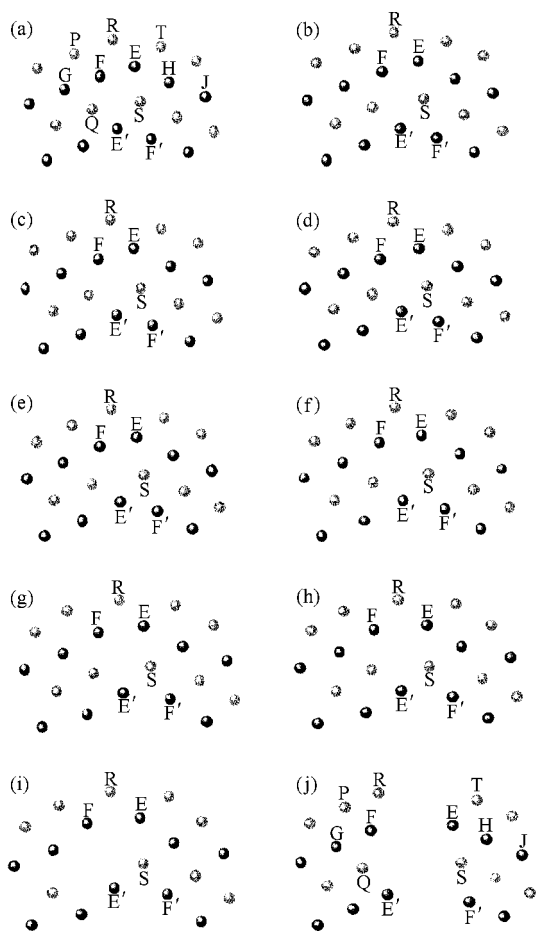


图6 拉伸过程中原子构型随应变的变化 应变分别为(a)0%, (b)3%, (c)7%, (d)11%, (e)14%, (f)16%, (g)18%, (h)21%, (i)25%, (j)27%

力都小于 $10^{-3} \text{ eV/\AA}$. 而以前的报告^[26]中则为 $0.05 \text{ eV/\AA}$. 所以本文的计算结果更为精确. 另一方面, 由于现在的拉伸试验一直进行到晶界完全断裂, 因此得到了文献^[26]中没有的结果. 比如 Griffith 断裂能和理论韧性. 同时, 从现在的计算可以更加清楚地看到 Al 晶界的断裂是发生在晶界面. 即晶界面处是体系中最薄弱的地方.

3.4. Al 界面键的类共价键特征

值得注意的是虽然 Al 晶界界面的原子键的数

目减少, 但 EF 键长变化在达到最大应力之前与体内的原子键如 EH 和 FG 的键长变化率相同. 进一步的分析发现, 和另一个界面键 ER 不同, 初始 EF 键的键长为 $2.62 \text{ \AA}$, 比面心立方 Al 中 Al-Al 的键长短 6.9%. 这说明 EF 键是一个很强的键. 与价电荷密度的结果结合起来分析, 我们认为: 虽然 Al 为典型的金属, 但 Al 晶界的原子间的结合实际上更接近于共价键的特征, 这是 Al 晶界依然保持着较高强度的原因. 在晶界面这种类共价的 Al-Al 键的形成源于由于缺陷如表面、界面等的存在或变形时, 缺陷处的 Al 原子周围成键的数目减少. 这与一些关于 Al 中的空位^[33,34]、Al 表面^[35]或剪切实验^[16]的最新研究成果一致. 例如, 近来的第一性原理计算表明, Al 中双空位的结合能是负的^[33], 这不同于其他的简单金属例如 Mg^[34]. Al 中双空位的这种特殊性质是由于在 Al 中单空位周围的第一壳层形成了具有某些共价特征的较强的 Al-Al 键^[33]. 在 Al 表面^[35]或 Al 的剪切畸变^[16]中也可以观察到这种具有共价特征的局域强键. 我们的研究表明, Al 晶界界面重构的 Al-Al 原子键也具有这种类共价键的性质.

4. 结 论

应用基于密度泛函理论和局域密度近似的第一性原理方法, 本文进行了 Al 晶界的第一性原理拉伸试验. 得到应变为 16% 时, 拉伸方向的应力达到最大值, 为 9.5 GPa, 即 Al 晶界的理论拉伸强度为 9.5 GPa. 这对应着实际 Al 晶界强度的上限值. 同时, 得到 Griffith 断裂能为 $52 \text{ meV/\AA}^2$ (0.83 J/m^2), 理论韧性是 $8.5 \times 10^{-3} \text{ eV/\AA}^3$ (1.36 GPa). 根据价电荷密度、键长和原子构型随应变的变化, 证实了断裂发生在晶界面, 其特征是所有界面键的断裂, 即界面重构键决定着晶界的断裂. 更为重要的是, 我们发现在周围原子键的数目减少的情况下, 其晶界面的原子键具有共价键的性质. 因此 Al 晶界依然保持着较高的界面强度.

[1] Xu X G, Wang C Z, Liu W, Meng X, Sun Y, Chen G 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 313 (in Chinese) 徐晓光、王春忠、刘伟、孟醒、孙源、陈岗 2005 物理学报 **54** 313

[2] Chen Q, Cao H H 2004 *Chin. Phys.* **13** 2121

[3] Lu G H, Suzuki A, Ito A, Kohyama M, Yamamoto R 2000 *Modeling Simul. Mater. Sci. Eng.* **8** 727

[4] Lu G H, Suzuki A, Ito A, Kohyama M, Yamamoto R 2001 *Philos. Mag. Lett.* **81** 757

[5] Lu G H, Kohyama M, Yamamoto R 2001 *Mater. Trans.* **42** 2238

[6] Lu G H, Suzuki A, Ito A, Kohyama M, Yamamoto R 2003 *Mater. Trans.* **44** 337

[7] Lu G H, Kohyama M, Yamamoto R 2003 *Philos. Mag. Lett.* **83** 159

[8] Lu G H, Liu F 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 176103

[9] Lu G H, Huang M H, Cuma M, Liu F 2005 *Surf. Sci.* **588** 61

[10] Lu G H, Cuma M, Liu F 2005 *Phys. Rev. B* **72** 125415

[11] Li Y H, Xu P S, Pan H B, Xu F Q, Xie C K 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 317(in Chinese) [李拥华、徐彭寿、潘海滨、徐法强、谢长坤 2005 物理学报 **54** 317]

[12] Nielsen O H, Martin R M 1985 *Phys. Rev. B* **32** 3780

[13] Roundy D, Krenn C R, Cohen M L, Morris, Jr J W 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 2713

[14] Li W X, Wang T C 1998 *J. Phys.: Condens. Matter* **10** 9889

[15] Deyirmenjian V B, Heine V, Payne M C, Milman V, Lynden-Bell R M, Finnis M W 1995 *Phys. Rev. B* **52** 15191

[16] Ogata S, Li J, Yip S 2002 *Science* **298** 807

[17] Li W X, Wang T C 1999 *Phys. Rev. B* **59** 3993

[18] Roundy D, Krenn C R, Cohen M L, Morris, Jr J W 2001 *Philos. Mag. A* **81** 1725

[19] Roundy D, Cohen M L 2001 *Phys. Rev. B* **64** 212103

[20] Luo W, Roundy D, Cohen M L, Morris, Jr J W 2002 *Phys. Rev. B* **66** 094110

[21] Krenn C R, Roundy D, Cohen M L, Chrzan D C, Morris, Jr J W 2002 *Phys. Rev. B* **65** 134111

[22] Kohyama M 1999 *Philos. Mag. Lett.* **79** 659

[23] Kohyama M 2002 *Phys. Rev. B* **65** 184107

[24] Chen J, Xu Y N, Rulis P, Ouyang L, Ching W Y 2005 *Acta Mater.* **53** 403

[25] Yamaguchi M, Shiga M, Kaburaki H 2005 *Science* **307** 393

[26] Lu G H, Deng S H, Wang T M, Kohyama M, Yamamoto R 2004 *Phys. Rev. B* **69** 134106

[27] Kresse G, Hafner J 1993 *Phys. Rev. B* **47** 558

[28] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169

[29] Vanderbilt D 1990 *Phys. Rev. B* **41** 7892

[30] Kresse G, Hafner J 1994 *J. Phys.: Condens. Matter* **6** 8245

[31] Monkhorst M J, Pack J D 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188

[32] Gane N 1970 *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **317** 367

[33] Carling K, Wahnström G, Mattsson T R, Mattsson A E, Sandberg N, Grimvall G 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 3862

[34] Uesugi T, Kohyama M, Higashi K 2003 *Phys. Rev. B* **68** 184103

[35] Feibelman P J 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 729

First-principles computational tensile test on an Al grain boundary^{*}

Zhang Ying[†] Lü Guang-Hong Deng Sheng-Hua Wang Tian-Min
(School of Science, Beijing University of Aeronautics and Astronautics, Beijing 100083, China)
(Received 14 September 2005 ; revised manuscript received 7 November 2005)

Abstract

Using a first-principles total energy method based on density functional theory within local density approximation, we have performed a first-principles computational tensile test (FPCTT) on an Al grain boundary. The theoretical tensile strength of the Al grain boundary is calculated to be 9.5 GPa at the strain of 16%. Based on the valence charge density, bond length and atomic configuration evolution with increasing strain, we demonstrate that the fracture occurs at the grain boundary interface, characterized by breaking of the grain boundary interfacial-reconstructed bonds. We further found that, because of the reduced number of the nearest neighbor of Al atoms in the grain boundary, these interfacial-reconstructed bonds have similar features to covalent bonds, which results in rather high grain boundary strength in comparison with the Al bulk.

Keywords : Al grain boundary, first-principles computational tensile test, theoretical tensile strength

PACC : 7115A, 7115H, 7115M, 7340

^{*}Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50201002) and by the Engineering Research Institute, Peking University(Grant No.204031).
[†] E-mail : zhangy0001@sohu.com