

# 铜晶体中层错四面体的结构及其演化\*

方步青<sup>1)</sup> 卢 果<sup>2)</sup> 张广财<sup>2)†</sup> 许爱国<sup>2)</sup> 李英骏<sup>1)</sup>

1) 中国矿业大学(北京), 北京 100083)

2) 北京应用物理与计算数学研究所计算物理实验室, 北京 100088)

(2008 年 9 月 24 日收到, 2008 年 11 月 27 日收到修改稿)

运用分子动力学方法, 研究了金属铜单晶中不同形状的 Frank 位错环演化形成的各种类层错四面体稳定构型. 对其形成过程的细致分析表明, 这些稳定构型都可以用统一的位错分解和位错反应过程来解释. 模拟结果表明, 在零温下各种 Frank 位错环存在各自的临界尺寸, 小于临界尺寸的 Frank 位错环不能长成类层错四面体结构. 对梯形、六边形等 Frank 位错环演化过程的模拟表明, 在形成稳定类层错四面体的过程中, 存在位错生长和回缩的振荡现象. 振荡现象是由于位错间的排斥和吸引相互作用不同步或弹性波传播的延迟效应引起的.

关键词: 层错四面体, 位错, 分子动力学

PACC: 6710P, 7210F, 8715H

## 1. 引 言

在辐照环境中, 高能粒子的级联碰撞散射在金属内部会产生各种形状和尺寸的微结构, 如缺陷团簇、微空洞和位错. 在金属加工淬火等过程中, 也会产生类似结构的金属缺陷. 在塑性变形过程中, 这些缺陷结构阻碍了位错滑移并形成位错积累导致金属发生塑性硬化及延性降低.

在面心立方晶体(fcc 晶体)中自间隙原子形成的缺陷团簇常常以位错环形式存在, 而空穴型的缺陷团簇总是以完整和不完整的位错环、层错四面体(SFT)和微空洞等形式存在. 一些工作已经研究了辐照过程中形成的空位团簇的演化过程, 发现在大多数 fcc 晶体中稳定的结构以 SFT 为主<sup>[1, 2]</sup>. 对于理想 SFT 的形成有多种解释, 其中一种是 Silcox-Hirsch 机理<sup>[3, 4]</sup>, 认为理想 SFT 是从正三角形空位 Frank 位错环上演化形成的. 在实际情况下, 辐照后金属中形成的高密度 SFT 中近 50% 也不是理想的 SFT<sup>[5]</sup>, 而是各种类 SFT. 对辐照损伤恢复过程的模拟表明 SFT 可以直接在级联碰撞过程中产生<sup>[6]</sup>, 在有限温度下立体结构的空位团簇也可以借助热涨落克服势垒演化为 SFT<sup>[7]</sup>. Kadoyoshi 等人模拟得到了六边形 Frank 位错环演化形成类 SFT 的稳定结构和生长中的一些

规律<sup>[8]</sup>. Saintoyant 等人模拟了梯形和菱形 Frank 位错环演化形成的类 SFT 与滑移位错相交时位错反应的情况<sup>[9]</sup>. 尽管对 SFT 已经做了大量的工作, 但仅局限于简单构型, 还没有对 Frank 位错环演化过程形成统一的认识, 并且是在有限温度下模拟的, 其中温度效应和局部应力效应在演化过程中共同起作用, 对 Frank 位错环形成 SFT 的尺寸阈值还没有清晰的认识, 对演化过程中的一些动态特征也缺乏细致分析.

本文采用分子动力学模拟, 研究了多种形状(三角形、菱形、梯形、圆形和六边形、长条形)的 Frank 位错环演化形成类 SFT 的过程, 给出了各种类 SFT 的稳定构型, 并对其形成过程给出了统一解释. 通过不同尺寸的 Frank 位错环演化过程的模拟确定了 Frank 位错环稳定的最大临界尺寸. 对梯形、六边形等多边形的 Frank 位错环演化过程的模拟发现在其形成类 SFT 的过程中, 存在不完全位错生长和回缩的振荡现象. 借助于位错线的三维拟合, 计算了位错运动的速度和位错受力, 结合应力分布分析了振荡产生的原因.

## 2. 模 型

金属铜在工程结构材料中有很多的应用, 是典型的 fcc 晶体, 由于其层错能低, 在加工、淬火和辐照后

\* 国家自然科学基金(批准号: 10702010, 10775018), 国家重点基础研究发展计划(973)项目(批准号: 2006CB202200), 中国工程物理研究院发展基金和实验室基金资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: zhang\_guangcai@iapcm.ac.cn

可以观察到高密度的 SFT 和类 SFT 的缺陷结构. 我们的模拟系统取尺寸为  $12.781 \text{ nm} \times 22.137 \text{ nm} \times 31.307 \text{ nm}$  的长方体铜单晶,  $x$ ,  $y$  和  $z$  三个坐标轴分别沿  $[\bar{1}10]$   $2[\bar{1}12]$   $2$  和  $[111]$  晶向 ( $Z$  平面取作晶体的密堆积面), 系统中的原子按照 fcc 晶格结构排布, 晶格常数为  $0.3615 \text{ nm}$ , 包含了大约 750000 个原子. 初始的 Frank 位错环是通过在晶粒中的一个密堆积面上去除一些原子构造而成的, 包括正三角形、菱形、梯形、正六边形、圆形、长条形等形状.

原子间相互作用势函数采用能很好描述金属原子相互作用的嵌入原子势 (EAM 势)<sup>[10]</sup>,

$$U = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \sum_i \varphi_{ij}(\mathbf{r}_{ij}) + \sum_i F_i(\rho_i), \quad (1)$$

其中  $\frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \sum_i \varphi_{ij}(\mathbf{r}_{ij})$  是对势,  $\sum_i F_i(\rho_i)$  是镶嵌能,  $\rho_i = \sum_{j \neq i} \sum_i \rho_j(\mathbf{r}_{ij})$  为第  $i$  个原子处的电子密度,  $\mathbf{r}_{ij}$  是第  $i$  个原子和第  $j$  个原子间的相对位移.

势函数曲线如图 1 和图 2 所示<sup>[11]</sup>, 根据此势函数计算得到的平衡晶格常数  $a = 0.3615 \text{ nm}$ , 弹性常数数值  $C_{11} = 1.672 \times 10^{11} \text{ Pa}$ ,  $C_{12} = 1.210 \times 10^{11} \text{ Pa}$ ,  $C_{44} = 0.764 \times 10^{11} \text{ Pa}$ , 堆垛层错能值为  $E_{\text{fault}} = 5.45 \times 10^{-2} \text{ J/m}^2$ , 相应的实验值  $a = 0.3615 \text{ nm}$ ,  $C_{11} = 1.684 \times 10^{11} \text{ Pa}$ ,  $C_{12} = 1.214 \times 10^{11} \text{ Pa}$ ,  $C_{44} = 0.754 \times 10^{11} \text{ Pa}$ ,  $E_{\text{fault}} = 4.5 \times 10^{-2} \text{ J/m}^2$ . 计算值与实验值很接近, 势函数能很好地反映完整晶体和含缺陷晶体中原子间相互作用.

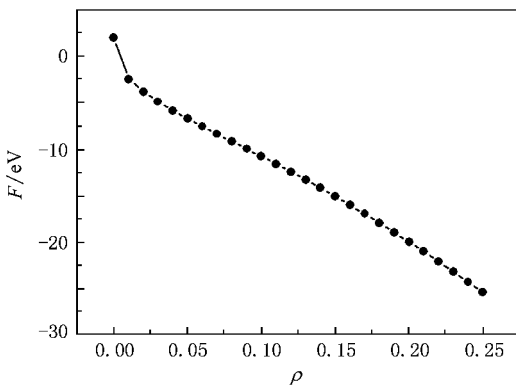


图 1 镶嵌能和电子云密度关系图

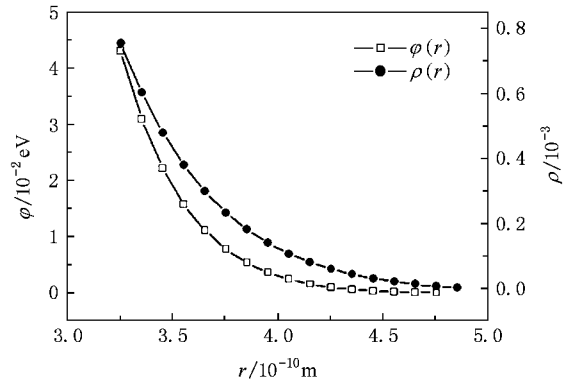


图 2 对势及电子云密度和原子间距关系图

其中  $\Delta V$  是计算区域的体积,  $r_l^i$  和  $r_l^j$  分别表示第  $l$  个原子的位移  $r_l$  的  $i$  和  $j$  分量,  $r_m^i$  和  $r_m^j$  分别表示第  $m$  个原子的位移  $r_m$  的  $i$  和  $j$  分量,  $l$  和  $m$  是此区域中的原子标号.

模拟采用微正则系统 (NVE), 模拟系统的初始温度和压力均为零. 为了模拟材料的体性质, 在  $x$ ,  $y$  和  $z$  三个方向均采用周期性边界条件. 模拟时间步长选为  $1 \text{ fs}$ , 每隔  $0.1 \text{ ps}$  输出原子位置、速度和力, 通过后处理程序根据原子的配位数和连接结构<sup>[12]</sup> 区分 fcc 晶体中的规则原子和缺陷原子.

## 3. 结 果

### 3.1. 类 SFT 的结构

各种不同的 Frank 位错环按照 NVE 系统演化. 开始时, Frank 环包围的层错面上的两层原子在局部应力作用下相互靠近, 回复到稳定尺寸, 经过弛豫, Frank 位错环边界上的原子开始沿着各自相应的密排面发展出类 SFT 的层错面. 不同类型的 Frank 位错环形成不同的 SFT.

图 3 给出各种类 SFT 的稳定构型及形成过程, 图中展示的仅是缺陷原子, 没有画出正常 fcc 结构的原子. 理想 SFT 具有正四面体结构, 由六条压杆位错和四个层错面构成. 菱形 Frank 位错环演化形成的稳定结构类似于两个理想 SFT 的组合, 一个正立, 一个倒立, 不同的是它不是闭合的. 梯形 Frank 位错环演化形成斗状的稳定结构, 结构不闭合, 有一长方形的开口; 正六边形 Frank 位错环六个边上都各自长出相应的层错面, 这六个层错面交替向两侧生长, 同侧的层错面不能闭合, 层错面的边界呈弧形结构;

局部应力采用维里定理计算, 对上述 EAM 势有

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{\Delta V} \sum_{l,m} \frac{(r_l^i - r_m^i)(r_l^j - r_m^j)}{|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m|^2} \left\{ \frac{1}{2} \varphi'(|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m|) \times |\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m| + F'_i(\rho_l) \rho'(|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m|) \times |\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m| \right\}, \quad (2)$$

圆形 Frank 位错环的情况与正六边形 Frank 位错环相似,但在二个层错面之间有钉扎位错;长条形

Frank 位错环的情况类似于菱形 Frank 位错环,只不过相应的边被拉长了.

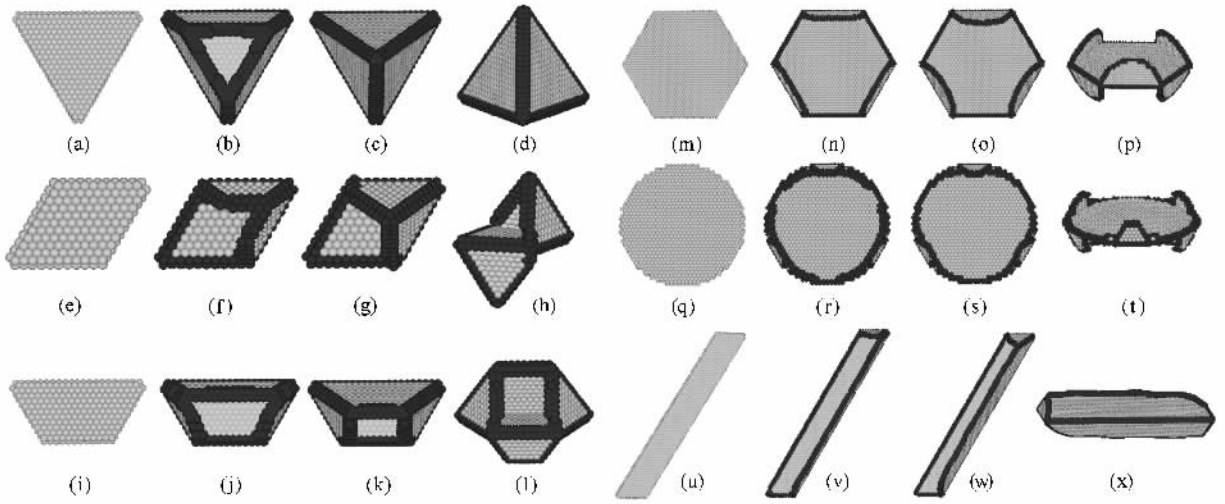


图 3 各种形状的 Frank 位错环演化形成的类 SFT 的稳定结构.其中深色原子代表位错,浅色原子代表层错 (a)(e)(i)(m)(q)(u)是未演化前的 Frank 位错环 (b)(f)(j)(n)(r)(v)是演化过程中的情形 (c)(g)(k)(o)(s)(w)是演化结束后类 SFT 的稳定结构 (d),(h)(l)(p)(t)(x)是从另一角度看类 SFT 的稳定结构

图 4 给出了嵌套 Frank 位错环时形成的类 SFT 的稳定结构.当三角形负 Frank 位错环中嵌套一个三角形正 Frank 位错环时,演化形成的缺陷结构不闭合,形状类似一个截顶的 SFT,与截顶相对应的面上存在一个三角形的缺口.当三角形负 Frank 位错环中嵌套

一个正六边形正 Frank 位错环时,演化形成的缺陷结构是三个理想 SFT 相连的结构,三个理想 SFT 按丁字形排列,两两之间由钉扎位错连接.当三角形负 Frank 位错环中随机的分布一些原子时,类 SFT 部分向上长,部分向下长的,这种情况与实际更接近.

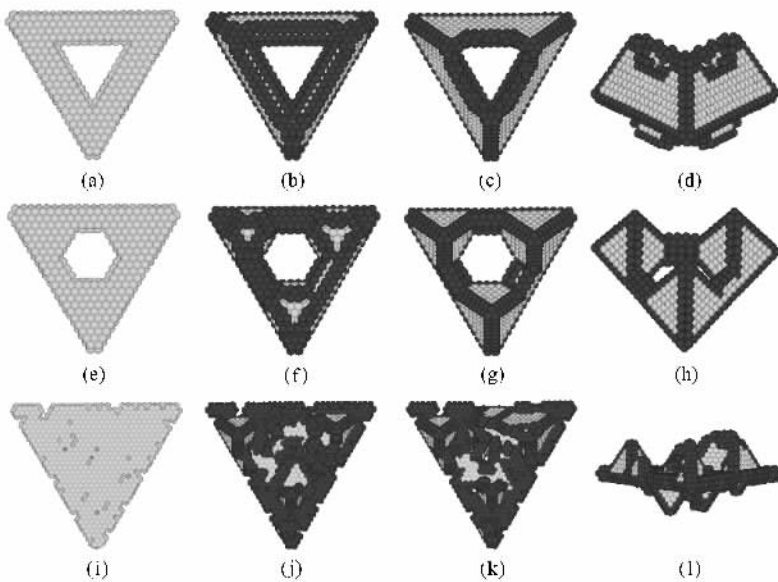


图 4 两个 Frank 位错环嵌套和原子随机分布时形成的类 SFT 的稳定结构.其中(a)(e),(i)是未演化前的 Frank 位错环 (b)(f)(j)是演化过程中的情形 (c)(g)(k)是演化结束后类 SFT 的稳定结构 (d)(h)(l)是相应类 SFT 的侧面图.

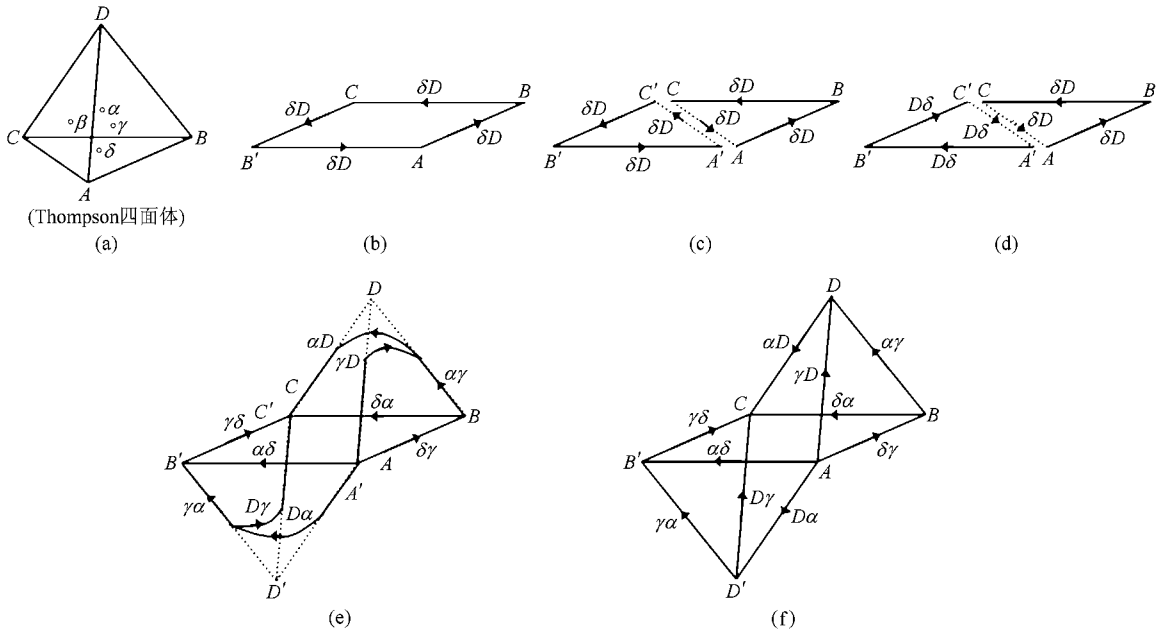


图 5 菱形 Frank 位错环演化时的位错反应示意图

尽管不同形状的 Frank 位错环形成的类 SFT 结构和形状各异,但是我们可采用统一的位错层错生长和反应机理解释这些稳定结构。

下面将详细分析菱形 Frank 位错环的演化过程中的位错分解与反应.分析以 Thompson 四面体为参照系<sup>[13]</sup>,如图 5(a).菱形 Frank 位错环的四条边是位错线  $AB$ ,  $BC$ ,  $CB'$  和  $B'A$ , 箭头表示位错线的方向, Burgers 矢量均为  $\delta D$ , 如图 5(b). 为了便于分析,以三角形 Frank 位错环作为基元,将菱形 Frank 位错环分解成两个三角形 Frank 位错环,一个是倒三角形 Frank 位错环  $ABC$ , 一个正三角形 Frank 位错环  $A'B'C'$ . 用虚线表示多出的两条位错线  $AC$  与  $A'C'$ , 位错线的方向与 Burgers 矢量如图 5(c) 所示. 不同的是, Frank 位错环  $ABC$  向上生长, Frank 位错环  $A'B'C'$  向下生长, 这是由于 Frank 位错环分解出的 Shockley 分位错的滑移面是密堆积面. 根据 Thompson 四面体可以确定 Frank 分位错  $ABC$  分解出的 Shockley 分位错的滑移面是密排面  $ABD$ ,  $BCD$ ,  $CAD$ , Frank 分位错  $A'B'C'$  分解出的 Shockley 分位错的滑移面必然是  $A'B'D'$ ,  $B'C'D'$ ,  $C'A'D'$ . 为了统一位错线的方向,将 Frank 位错环  $A'B'C'$  的位错线方向反向, 相应的 Burgers 矢量的方向也反向, 如图 5(d). 这时位错线  $AC$  与  $C'A'$  反应后湮没, 位错线  $AB$ ,  $BC$  的分解为

$\delta D(\gamma) \rightarrow \delta\gamma + \gamma D$ ,  $\delta D(\alpha) \rightarrow \delta\alpha + \alpha D$ . (3)  
位错线  $A'B'$ ,  $B'C'$  的分解就变为

$$D\delta(\gamma) \rightarrow \gamma\delta + D\gamma, D\delta(\alpha) \rightarrow \alpha\delta + D\alpha. \quad (4)$$

这就得到了 Burgers 矢量分别为  $\delta\gamma$ ,  $\delta\alpha$  和  $\gamma\delta$ ,  $\alpha\delta$  的 4 条压杆位错  $AB$ ,  $BC$  和  $B'C'$ ,  $A'B'$  以及 Burgers 矢量分别为  $\gamma D$ ,  $\alpha D$  和  $D\gamma$ ,  $D\alpha$  的 4 条 Shockley 分位错  $AB$ ,  $BC$  和  $B'C'$ ,  $A'B'$ . Shockley 分位错扫过的区域是层错区. Shockley 分位错在它们的滑移面交线  $BD$  和  $B'D'$  上两两相遇, 并发生以下位错反应:

$$\alpha D + D\gamma = \alpha\gamma = CA/3, \\ D\alpha + \gamma D = \gamma\alpha = AC/3, \quad (5)$$

如图 5(e). 可见, 通过 Shockley 分位错反应形成的  $BD$  和  $B'D'$  位错都是压杆位错.  $DACD'$  面上没有 Shockley 分位错扫过, 所以不形成层错, 这样就能理解为什么  $DACD'$  上不形成压杆位错  $AC$  与层错. 最终得到了如图 5(f) 所示的结构, 由 6 条压杆位错 ( $AB$ ,  $AB'$ ,  $BC$ ,  $BD$ ,  $B'C$  和  $B'D'$ ) 4 条 Shockley 分位错 ( $AD$ ,  $AD'$ ,  $CD$  与  $CD'$ ) 及 5 个层错面构成.

对于其他类 SFT 的形成, 我们均能以三角形 Frank 位错环作为基元, 把各种 Frank 位错环分解为若干个三角形 Frank 位错环, 进行位错分解与反应的分析. 位错分解和反应可以归结为  $\langle 111 \rangle / 3$  型位错分解为  $\langle 110 \rangle / 6$  与  $\langle 112 \rangle / 6$  型位错以及两个  $\langle 112 \rangle / 6$  型位错反应合并成一个  $\langle 110 \rangle / 6$  型位错两个过程. 梯形 Frank 位错环演化形成的稳定结构, 由 6 条压杆位错 ( $AB$ ,  $AD$ ,  $BC$ ,  $BE$ ,  $CD$  和  $CF$ ) 4 条 Shockley 分位错 ( $AGD$ ,  $AE$ ,  $DF$  和  $EF$ ) 及 5 个层错面

构成 如图 6(a). 当位于梯形上底的位错  $AD$  长度较小时, 会形成类似截顶的理想 SFT 的结构, 因为位错  $AD$  长度较小时不发生分解, 位错  $AB, BC$  和  $CD$  分解出的 Shockley 分位错两两相互反应, 形成三条压杆位错 ( $BE, CE$  和  $EF$ ), 如图 6(b). 正六边形 Frank 位错环演化形成的稳定结构由 6 条压杆位错, 6 条 Shockley 分位错及 7 个层错面构成, 如图 3(p). 近邻的 Shockley 分位错生长方向不同以及相对的 Shockley 分位错生长方向相反是由于 Shockley 分位错的滑移面必须是密堆积面. 圆形 Frank 位错环演

化形成的稳定结构与正六边形 Frank 位错环的情况非常相似. 当尺寸较小时, 其形状与正六边形 Frank 位错环相同, 形成的类 SFT 结构也相同. 当圆形 Frank 位错环的尺寸较大时, Frank 分位错只有部分在密堆积面上, 所以只有在密堆积面上的 Frank 分位错段分解, 其余部分并不分解, 形成钉扎位错, 如图 3(t); 长条形 Frank 位错环演化形成的稳定结构由 6 条压杆位错 ( $AB, AD, BC, BE, CD$  和  $DF$ ) 4 条 Shockley 分位错 ( $AE, AF, CE$  和  $CF$ ) 及 5 个层错面构成, 如图 3(c).

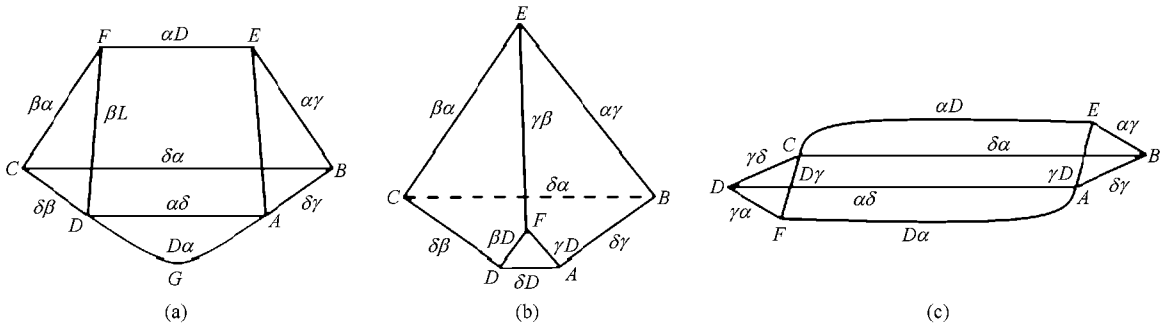


图 6 几种类 SFT 形成过程的示意图

位错间反应需要满足能量条件, 即反应总是向着能量降低的方向进行. 我们检验了所讨论的位错分解与反应的合理性. 刃型位错弹性能的计算公式<sup>[13]</sup>是

$$E_{el} = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \ln\left(\frac{R}{r_0}\right), \quad (6)$$

其中  $\mu$  是剪切模量,  $\nu$  是泊松比,  $b$  是 Burgers 矢量长度,  $R$  是位错核的外径,  $r_0$  是连续介质描述位错应力奇异的等效截断半径. 我们取  $R = 3r_0$  时, 得  $E_{el}^{Frank} = 0.2896 \times 10^{10}$  eV/m,  $E_{el}^{Stair-rod} = 0.0483 \times 10^{10}$  eV/m,  $E_{el}^{Shockley} = 0.1448 \times 10^{10}$  eV/m, 满足  $E_{el}^{Frank} > E_{el}^{Stair-rod} + E_{el}^{Shockley}$ ,  $E_{el}^{Shockley} + E_{el}^{Shockley} > E_{el}^{Stair-rod}$ . 可见 Frank 位错环分解成一个压杆位错与一个 Shockley 分位错, 以及两个 Shockley 分位错合成一个压杆位错是能量降低的耗散过程.

我们以三角形 Frank 位错环的演化为例, 分析 Shockley 位错线生长速度的变化规律. 通过跟踪不同时刻位错的空间位置计算位错的运动速度. Frank 位错环发生分解前, 有大约 0.8 ps 的弛豫时间, 在这段时间中原子通过局部应力释放调整位置, 我们从 0.9 ps 开始对位错线的生长速度进行计算. 图 7 是边长  $n = 12, n = 15$  和  $n = 20$  时 Shockley 分位错的生

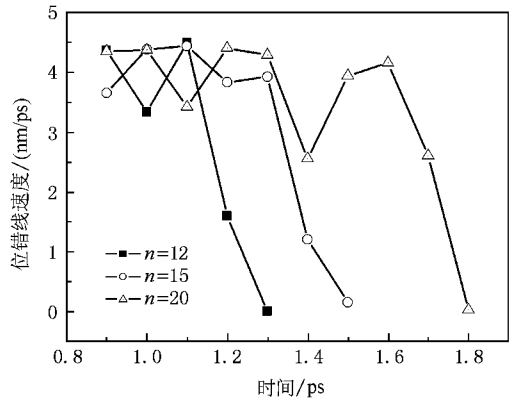


图 7 边长  $n$  为 12, 15 和 20 的 Frank 位错环演化形成理想 SFT 过程中位错线各时刻的生长速度曲线

长速度随时间的分布曲线, 本文中  $n$  表示 Frank 位错环的边长, 单位是原子个数. 对于不同大小的三角形 Frank 位错环, 其演化过程中位错线的生长速度基本相同, 在 4.0 nm/ps 左右. 生长过程中速度出现振荡, 这是因为 Shockley 分位错合成压杆位错时的局部作用. 生长接近结束时, 位错线的速度急剧下降, 这是由位错线生长饱和引起的. 我们进一步分析了不同大小的三角形 Frank 位错环演化时 Shockley 分位错的平均生长速度, 如图 8 所示. 可以看出随着

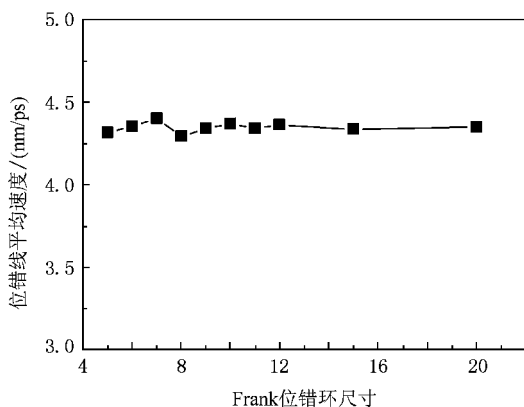


图8 位错线生长的平均速度与 Frank 位错环尺寸的关系曲线

Frank 位错环尺寸的增大,位错线的平均生长速度基本保持在 4.3 nm/ps.说明在理想 SFT 形成过程中位错线的生长速度基本上是平稳的,只有在生长快结束时,速度才会急剧下降.其他类 SFT 形成过程中位错线的生长速度与理想 SFT 的情况有明显不同,甚至会出现速度反向的情况,详细讨论见 3.3 节.

### 3.2. 临界条件

我们对不同大小(从 2 个原子尺寸到 20 个原子尺寸)的 Frank 位错环(三角形、菱形、梯形、正六边形和长条形)在零温 NVE 系统下进行了模拟,模拟时间为 15 ps.在 0.8 ps 内 Frank 位错环对应层错面的面间距逐渐减小,达到稳定间距是 0.386 nm,对于小于临界尺寸的 Frank 位错环,弛豫后不再演化,达到稳定的 Frank 位错环结构,如图 9,而对于尺寸较大的 Frank 位错环最终演化成各种类 SFT 结构,如图 10.

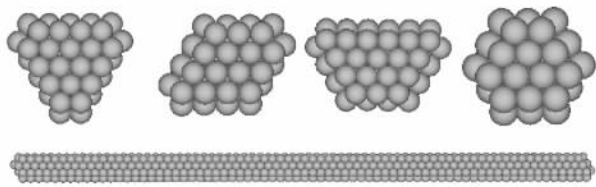


图9 稳定的 Frank 位错环缺陷

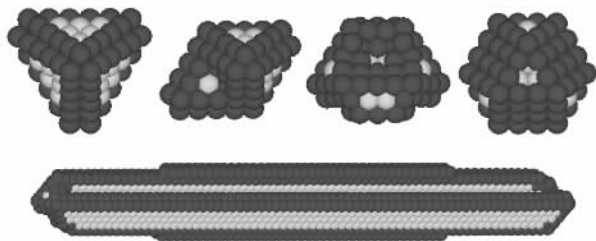


图10 最小临界尺寸时形成的类 SFT 结构

表1 各种形状 Frank 位错环的最小临界尺寸

形状					
尺寸 $n$ (原子个数)	边长 5	边长 4	下底 6; 上底 3	边长 3	长度 70; 高度 3

表 1 列出了 5 种形状的 Frank 位错环能够演化形成类 SFT 的最小临界尺寸.随着 Frank 位错环边数的增加,临界尺寸降低.

以理想 SFT 的形成为例,分析临界尺寸形成的原因.我们计算不同大小的三角形 Frank 位错环演化形成 SFT 时单个原子的平均层错能与位错能的变化.随着 Frank 位错环尺寸的增加,单原子的平均位错能增加,而单原子的平均层错能则减少,特别是在  $n = 5$  时减少幅度很大.从图 11 中看出 Frank 位错环的尺寸越小,越易形成位错,越难形成层错.当  $n < 5$  时,不能形成 SFT,因为形成 Frank 位错环时系统具有更低的能量,更加稳定.

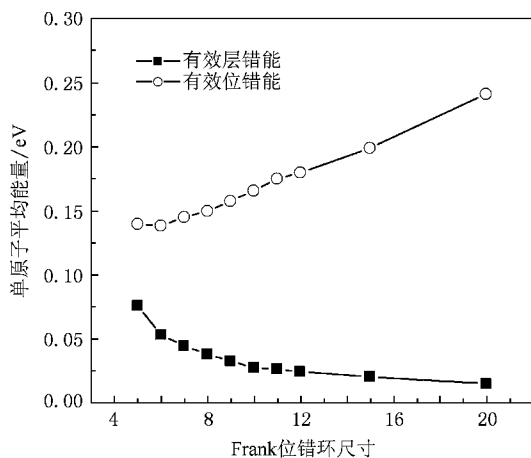


图11 单原子能量与 Frank 位错环尺寸的关系曲线

### 3.3. 振荡现象

对边长是 20 和 40 个原子的六边形 Frank 位错环的演化过程进行模拟.初始的 Frank 位错环经过一段时间的弛豫后,在相应的六条边界线上, Frank 位错环发生分解,并沿着相应的密堆积面生长(长出六个层错面,三个对应面向上生长,另三个对应面向下生长),当生长到一定长度后,对应的层错面会反向收缩,收缩到一定长度后又会反向生长,经过几个周期后,达到稳定结构.

图 12 是边长  $n = 20$  个原子的 Frank 位错环演化过程示意图.在 0.9 ps 时, Frank 分位错开始分解,

形成 6 个压杆位错和 6 个 Shockley 分位错,如图 12 (b).在 2.1 ps 时,Shockley 分位错的振幅达到极大,为 3.4316 nm (如图 12(d)).这时 Shockley 分位错在顶部会出现缩肩,然后位错线开始回缩.在 4.2 ps 时,

振幅第一次达到极小,为 1.4378 nm (如图 12(f)).在 6.5 ps 时,振幅达到第二次极大,为 2.6987 nm (如图 12(h)).在 9.4 ps 时,振荡基本结束,此时振幅为 2.2036 nm (如图 12(i)).

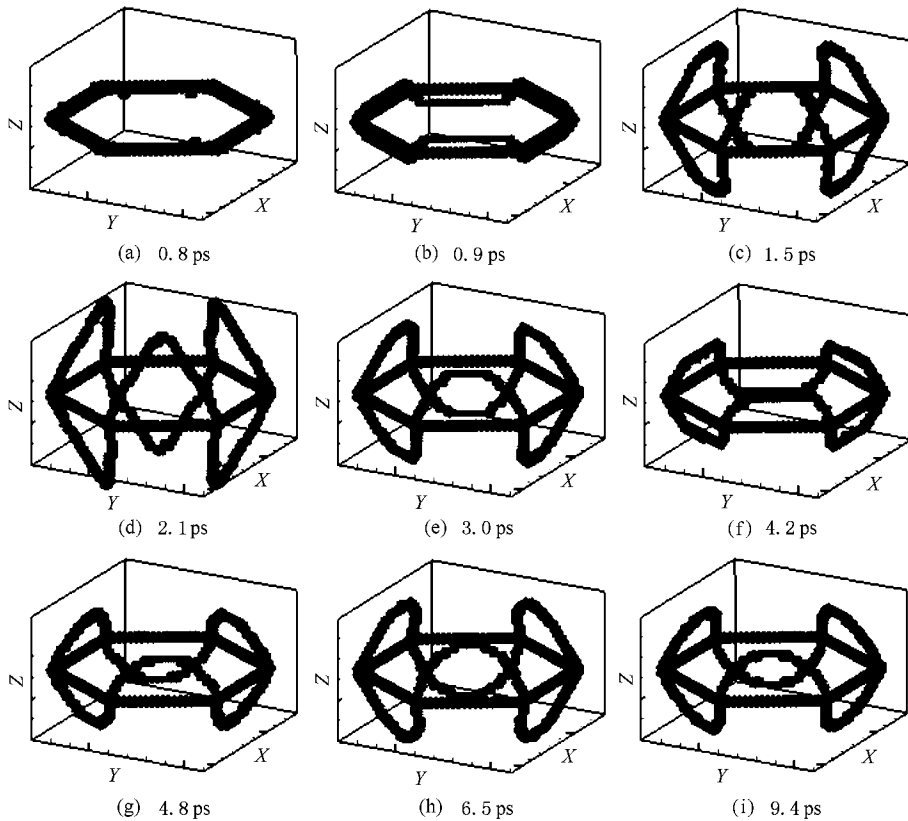


图 12 弛豫过程中的振荡现象示意图

图 13 是边长  $n = 20$  和  $n = 40$  时振荡过程中位错线生长速度的变化曲线.可以看出速度是振荡的,对于  $n = 20$  和  $n = 40$  两种情况 Shockley 分位错都是在 0.9 ps 时开始生长,起始速度为 3.83 nm/ps.可以看出不管位错是生长还是收缩过程,都伴随着一段时间的匀速运动.  $n = 20$  的振荡结束时间为 9.4 ps,  $n = 40$  的振荡结束时间为 10.0 ps.设振幅第一次达到极小所需时间为  $\Delta t$ ,  $n = 20$  时  $\Delta t_{n=20} = 3.3$  ps,而  $n = 40$  时  $\Delta t_{n=40} = 6.2$  ps,  $\Delta t_{n=40} \approx 2\Delta t_{n=20}$ .振荡周期基本上正比于结构的尺寸,而位错线的生长速度却与结构尺寸关系不大.说明位错线生长和回缩的物理机理与微结构的尺寸相关.

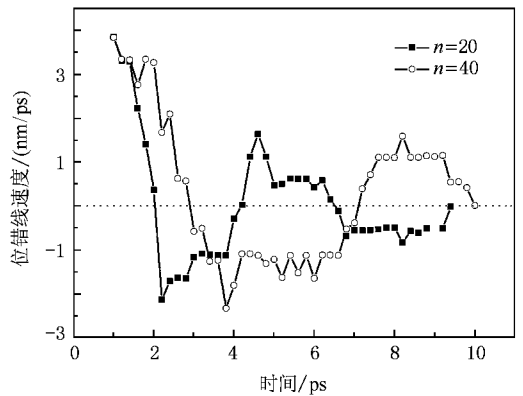


图 13 振荡过程中位错线速度随时间变化曲线

为了寻找位错振荡的原因,分析了位错线之间的作用力.在各向同性弹性固体中位错线段(如图 14 所示)之间的 Peach-Koehler 力计算公式<sup>[14]</sup>为

$$f_{34}^{l2} = \int_0^L \frac{l}{L} \left\{ \left[ \sigma^{l2} \left( \left( 1 - \frac{1}{L} \right) x_3 + \frac{l}{L} x_4 \right) \cdot b \right] \times t \right\} dl, \quad (7)$$

$$\begin{aligned}
 \sigma^{12}(\mathbf{x}) = & -\frac{\mu}{8\pi} \int_{x_1}^{x_2} \left( \frac{2}{R_a^3} + \frac{3a^2}{R_a^5} \right) [(\mathbf{R} \times \mathbf{b}') \otimes d\mathbf{x}' + d\mathbf{x}' \otimes (\mathbf{R} \times \mathbf{b}')] \\
 & + \frac{\mu}{4\pi(1-\nu)} \int_{x_1}^{x_2} \left( \frac{1}{R_a^3} + \frac{3a^2}{R_a^5} \right) [(\mathbf{R} \times \mathbf{b}') \cdot d\mathbf{x}' \mathbf{I}] \\
 & - \frac{\mu}{4\pi(1-\nu)} \int_{x_1}^{x_2} \frac{1}{R_a^3} ((\mathbf{b}' \times d\mathbf{x}') \otimes \mathbf{R} + \mathbf{R} \otimes (\mathbf{b}' \times d\mathbf{x}')) \\
 & + \frac{\mu}{4\pi(1-\nu)} \int_{x_1}^{x_2} \frac{3}{R_a^5} [(\mathbf{R} \times \mathbf{b}') \cdot d\mathbf{x}' \mathbf{R} \otimes \mathbf{R}], \tag{8}
 \end{aligned}$$

$$\mathbf{R} = \mathbf{x} - \mathbf{x}', R_a = \sqrt{R^2 + a^2}, L = \|\mathbf{x}_4 - \mathbf{x}_3\|, \mathbf{t} = \frac{\mathbf{x}_4 - \mathbf{x}_3}{L}$$

其中  $f_{34}^{12}$  是位错线段 12 作用在 34 上的力,  $\sigma$  是位错线段 12 产生的应力,  $\mathbf{I}$  是二阶单位张量,  $\mu$  和  $\nu$  是切变模量与泊松比,  $x_1$  和  $x_2$  分别是位错线段 12 的起点和终点,  $x_3$  和  $x_4$  分别是位错线段 34 的起点和终点,  $\mathbf{x}$  的取值范围是从  $x_3$  到  $x_4$ ,  $\mathbf{x}'$  的取值范围是从  $x_1$  到  $x_2$ .

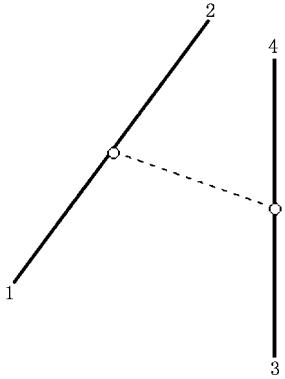


图 14 位错线 12 与位错线 34 的示意图

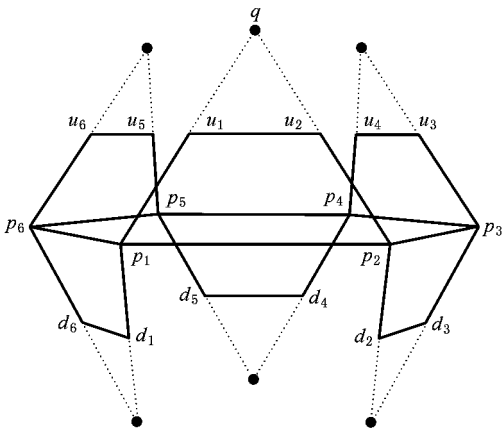


图 15 位错线受力分析示意图

我们选择连接折线近似六边形类 SFT 结构, 如

图 15 所示. 计算了位错线段  $u_1 u_2$  受到其他 23 段位错线的作用力, 得到了作用在  $u_1 u_2$  的力随着  $\lambda$  ( $\lambda = p_1 u_1 / p_1 q$ ) 的变化关系, 这里我们选取了 6 条典型的曲线, 描述位错线  $u_1 u_2$  的受力沿滑移方向的分量, 如图 16 所示. 发现总的合力是沿位错线生长的方向. 但是每段位错线对  $u_1 u_2$  的作用力不同, 特别是在不同构型时, 总有一些力会反向. 由于这些 Peach-Koehler 力是通过晶格的弹性应力传递的, 在某一时刻的构型形成的弹性应力场经过一段时间的延迟后才会传递到  $u_1 u_2$  的位置. 这种延迟使得吸引力与排斥力在作用时间上不一致, 导致位错段在一时刻受正力, 另一时刻受负力, 产生振荡. 另外, 受力不均匀也导致位错段的缩肩现象. 应力脉冲传递时间正比于距离, 因此  $n = 40$  与  $n = 20$  的振荡周期相差近一倍.

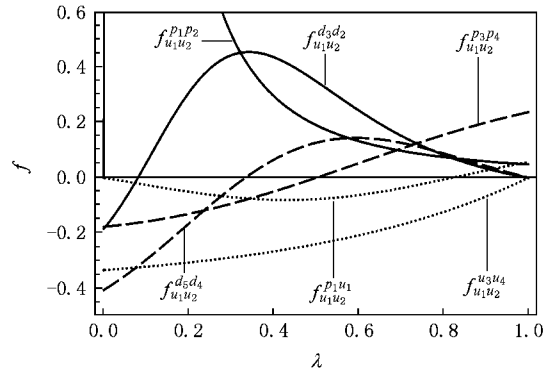


图 16 位错线段  $u_1 u_2$  受到其他 6 段位错线的作用力随着  $\lambda$  的变化曲线. 不同的  $\lambda$  对应 SFT 生长过程中缺陷结构的不同构型

我们画出了  $Z$  平面上应力分量  $S_{zz}$  的分布情况, 如图 17 所示. 应力分布与模型相符, 呈现为六边形. 六个顶点上的应力特别大, 这是因为六个顶点是位错节点, 这些地方的晶格畸变尤其厉害. 从图 17

中的 6 幅图可以看出弹性应力波的传播现象, 1.6 ps 时弹性应力波向六边形中心传播, 如图 17(a)(b) 所示; 在 1.9 ps 时六边形中心出现应力集中, 如图 17(c)(d) 所示; 随后弹性应力波开始扩散, 向四周传播, 如图 17(e)(f) 所示. 正是弹性应力波在晶体

中的传播导致了 Shockley 分位错在生长过程中出现振荡现象. 我们估计了弹性应力波在六边形的两个对边之间的传播时间, 是与  $\Delta t$  在同一量级. 从另一方面说明了弹性应力波是引起位错振荡的原因.

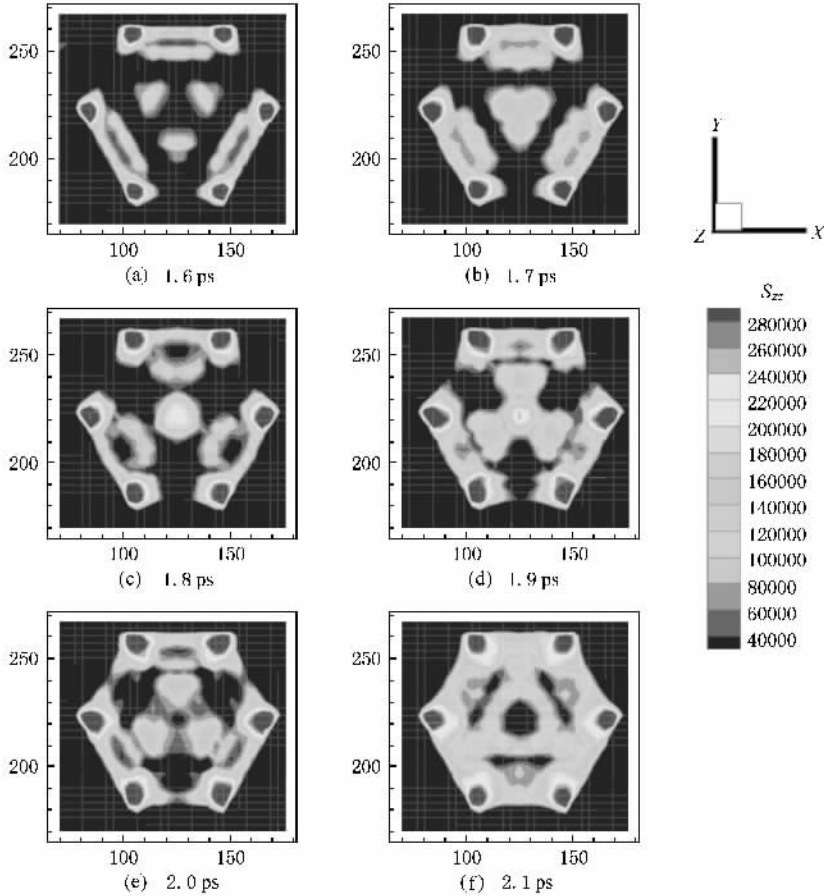


图 17 振荡过程中应力  $S_{zz}$  的分布 ( $x$  和  $z$  轴的长度单位是  $10^{-1}$  nm, 应力  $S_{zz}$  的单位是 Pa)

## 4. 结 论

本文通过分子动力学方法, 借助键对分析技术, 对金属铜中不同形状的 Frank 位错环形成各种类 SFT 的演化过程作了详细描述, 给出了各种类 SFT 的稳定构型. 通过对形成过程中位错反应的细致分析表明, 这些构型符合同一套生成规则. 在零温下, 不同形状的 Frank 位错环存在不同的临界尺寸. 小于此尺

寸的 Frank 位错环只能作微小弛豫调整, 不能形成类 SFT. 六边形、梯形等 Frank 位错环演化过程中观察到振荡现象. 从位错运动的速度和位错受力等方面对振荡现象的分析, 发现振荡现象是由于位错间的弹性相互作用及弹性波传播的延迟效应引起的.

在文章撰写期间, 感谢杨其利、甘延标、王立锋和孟立民等同学积极参与讨论, 提出了许多启发性的建议, 在此表示感谢.

- [ 1 ] Kiritani M , Mater 1997 *Chem. Phys.* **50** 133
- [ 2 ] Zinkle S J , Seizman L E , Wolfer W G 1987 *Philos. Mag.* A **55** 111
- [ 3 ] Silcox J , Hirsch P B 1959 *Philos Mag* **4** 72
- [ 4 ] Amelinckx S 1979 *Dislocations in solids 2* Oxford : North-Holland Publ Co
- [ 5 ] Schautblin R , Yao Z , Baluc N , Victoria M 2005 *Philos. Mag.* **85** 769
- [ 6 ] Osetsky Y N , Bacon D J 2001 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res.* , B **180** 85
- [ 7 ] Uberuaga B P , Hoagland R G , Voter A F , Valone S M 2007 *PRL* **99** 135501
- [ 8 ] Kadoyoshi T , Kaburaki H , Shimizu F , Kimizuka H 2007 *Acta Materialia* **55** 3073
- [ 9 ] Saintoyant L , Lee H J , Wirth B D 2007 *Journal of Nuclear Materials* **361** 206
- [ 10 ] Daw M S , Baskes M I 1984 *Phys. Rev. B* **29** 6443
- [ 11 ] Yang Q L , Zhang G C , Xu A G , Zhao Y H , Li Y J 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 940 [ in Chinese ] 杨其利、张广财、许爱国、赵艳红、李英骏 2008 物理学报 **57** 940 ]
- [ 12 ] Honeycutt D J , Anderson H C 1987 *J. Phys. Chem.* **91** 4950
- [ 13 ] Yang S H 1988 *Crystal Dislocation Theory* ( Beijing : Science Press ) p73 [ in Chinese ] 杨顺华 1988 晶体位错理论基础 ( 北京 : 科学出版社 ) 第 73 页 ]
- [ 14 ] Arsenlis A , Cai W , Tang M , Rhee M , Opperstrup T , Hommes G , Pierce T G , Bulatov V V 2007 *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **15** 553

## Evolution of stacking-fault-tetrahedron-like structures in copper crystal<sup>\*</sup>

Fang Bu-Qing<sup>1)</sup> Lu Guo<sup>2)</sup> Zhang Guang-Cai<sup>2)†</sup> Xu Ai-Guo<sup>2)</sup> Li Ying-Jun<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup> *China University of Mining and Technology ( Beijing ) , Beijing 100083 , China*

<sup>2)</sup> *Institute of Applied Physics and Computational Mathematics , Beijing 100088 , China*

( Received 24 September 2008 ; revised manuscript received 27 November 2008 )

### Abstract

Transformation of various intrinsic Frank loops into stacking-fault-tetrahedron ( SFT )-like structures in single crystal copper is investigated using the molecular dynamic ( MD ) method . We got stable SFT structures and explained their formation via a unified theory . Simulation results show that there is a critical size for the Frank loops at zero temperature . When being smaller than this critical size , Frank loops can not transform into SFT . Hexagonal and trapezoidal Frank loops exhibit oscillations in the relaxation processes , which is due to the elastic interactions between dislocations as well as the delay effects in the propagation of elastic waves .

**Keywords :** stacking fault tetrahedron , dislocation , molecular dynamics

**PACC :** 6710P , 7210F , 8715H

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant Nos . 10702010 , 10775018 ) , the National Basic Research Program of China ( Grant No . 2006CB202200 ) and the Science Foundation of China Academy of Engineering Physics and Laboratory .

<sup>†</sup> Corresponding author . E-mail : zhang\_guangcai@iapcm.ac.cn