

YAG 晶体的高温拉伸及缺陷演变*

张瑞¹⁾²⁾ 张庆礼^{1)2)†} 马荣国¹⁾²⁾ 孙贵华¹⁾²⁾窦仁勤¹⁾²⁾ 王小飞¹⁾²⁾ 刘文鹏¹⁾²⁾

1) (中国科学院合肥物质科学研究院, 安徽光学精密机械研究所, 安徽省光子器件与材料重点实验室, 合肥 230031)

2) (中国科学技术大学, 合肥 230026)

(2026 年 1 月 31 日收到; 2026 年 2 月 17 日收到修改稿)

YAG 晶体是重要的激光基质材料, 研究原子尺度下 YAG 的应力、应变及缺陷产生机理对高质量大尺寸晶体生长具有重要意义. 运用分子动力学方法模拟了 [111], [110], [100] 晶向在不同温度下的拉伸力学性质和缺陷结构演变. 发现 YAG 呈典型的脆性材料特征, 随应变增加, 在 1300 K 温度以下, YAG 先经历弹性形变, 随即断裂, 在 1800 K 后, 先经历弹性形变, 呈现一非常狭窄的塑性形变区域, 然后断裂, 在 2200 K 时, 晶体塑性增强, 经历弹性和塑性形变, 不易断裂. 常温下 [110] 弹性模量最大, [100] 弹性模量最小, 随着温度的升高弹性模量显著下降, 力学各向异性减弱或消失. 根据应变应力曲线, 给出了 YAG 断裂应变、极限应力值和断裂能随温度变化的经验公式. 在拉伸形变下, YAG 晶体会形成微孔、微裂纹等缺陷, 升高温度后更容易发生晶格滑移, 形成位错与层错缺陷.

关键词: 钇铝石榴石晶体, 分子动力学, 应力-应变, 缺陷, 位错**DOI:** 10.7498/aps.75.20260179**CSTR:** 32037.14.aps.75.20260179

1 引言

钇铝石榴石 (YAG) 晶体具有机械强度高、导热性能好、光学质量高、化学性质稳定等优点, 是重要的激光基质, 已得到广泛应用^[1]. 其中 Nd:YAG^[2] 1964 年由贝尔实验室的 Geusic 等首次研制成功, 是最常用的激光晶体, 以其作为工作物质的固体激光器广泛应用于医疗、工业、军工等领域; Yb:YAG^[3] 是重要的高功率大能量固体激光工作物质; Ce:YAG^[4] 可作为荧光粉使用, 是工业化生产的白光 LED 重要原料. 纯 YAG^[5] 晶体在 0.25—5 μm 范围内具有较高的透过率, 在 2—3 μm 范围内没有吸收, 因此, 纯 YAG 晶体也用作红外光学基片和窗口材料.

从高温熔体中生长的 YAG 晶体会经历降温冷却过程, 导致晶格收缩, 产生局部内应力, 当应力超过一定值时, 会产生缺陷甚至开裂; 晶体生长中因温度不均匀也会产生应力, 导致微孔、开裂缺陷, 使得晶体不可用. 因此, 研究 YAG 的应力与缺陷具有重要意义.

基于连续介质理论的有限元法, 在分析微观结构晶体材料的弹塑性演化特征方面无法体现晶体中原子排列的各向异性, 而实验研究通常受到仪器设备和操作复杂度的限制, 进行原子级尺度缺陷观察较为困难, 也难以观测详细的原子运动轨迹. 如纳米压痕实验^[6], 其压入尺度一般在 100—1200 nm 范围, 实际已经接近微米尺度, 且无法观察到原子结构演变过程, 在整个压入过程中难

* 国家重点研发计划 (批准号: 23YFB3507403, 2023YFB3507401)、国家自然科学基金 (批准号: 52272011) 和中国科学院青年创新促进会 (批准号: 2023463) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zql@aiofm.ac.cn

以精确判断缺陷产生点, 正应力与切应力比例仅由压头形状决定. 这种近微米尺度的力学实验难以准确地描述材料塑性变形阶段, 尤其是与塑性变形有关的内部位错运动只能在原子尺度下观察到. 借助分子动力学 (MD) 手段可研究原子尺度下材料微观结构以及位错对于其力学性能影响机制, 可在原子尺度上建模, 控制模拟温度、压力等条件使结果复现; MD 拉伸模拟可以研究材料的力学性能与缺陷演变, 如弹性模量、屈服强度和断裂过程等. 分子动力学模拟的参数可调, 能够灵活改变模型以探索不同场景, 克服实验方法和有限元方法不足, 是分析晶体材料微观结构演化的有力工具^[7].

近年来, 许多人用 MD 方法对晶体、合金等材料的拉伸力学性能进行了模拟研究, 如张靖晨等^[8]模拟了 FeNiCu 合金在单轴应力加载下微裂纹扩展行为; 徐洲等^[9]模拟了单晶铜薄膜在单向拉伸载荷下的塑性变形过程; 巩晓雨等^[10]模拟了金属玻璃板在拉伸过程中剪切带形成和演化过程; 卢敏等^[11]模拟了钨纳米线在不同晶向上的拉伸过程中的微观破坏机理; 赵健伟等^[12]模拟了四种不同初始结构的银纳米线沿 [111] 晶向的拉伸行为; 胡远啸等^[13]模拟了 CrMnFeCoNi 高熵合金纳米晶在不同温度下的拉伸行为, 揭示了温度对其力学行为的影响和强韧机制; 梁华和李茂生^[14]模拟了含孔洞单晶铝在单轴拉伸过程中的行为以及晶向、孔洞体积分数和空位体积分数对孔洞生长的影响; 马彬等^[15]通过分析钨纳米线拉伸应力-应变曲线及其微观变形结构, 揭示了单晶钨纳米线的拉伸变形特征和微观破坏机理; 张诗雨等^[16]模拟了不同晶向、不同温度与尺寸的铁纳米线的变形机制; 叶天舟等^[17]模拟了 FeCrAl 合金在拉伸过程中的力学性能, 特别关注了温度和应变速率对 FeCrAl 合金单晶体力学性能的影响; 李健等^[18]模拟了 AlCrFeCuNi 高熵合金在轴向载荷下的力学性能; 寇佩佩等^[19]模拟了孔洞尺寸、数量及位置对含 Nb 单晶 γ -TiAl 合金的力学性能的影响, 分析了材料内部微观缺陷演化与力学性能间的关系; 黄丹等^[20]模拟了单晶纳米铝丝在受到单向拉伸时的变形破坏过程, 分析了其力学性能和微缺陷形成与演化过程; 韩志萍等^[21]模拟了单晶铜在纳米尺度下的拉伸变形过程, 旨在研究其拉伸变形机理, 并探讨不同温度和应变速率对其拉伸变形行为的影响; 王继亮和沈海军^[22]对单晶 ZnO 和 TiO 在不同加载速度和温度下的拉

伸破坏过程进行了模拟; 韩同伟等^[23]模拟了具有不同截面形状的 β -SiC 纳米丝在 [001] 向的拉伸变形性能; 路文江等^[24]对金属 Cu、半导体化合物 CuInSe 和陶瓷化合物 MgO 纳米线进行了拉伸模拟; 尹宗军等^[25]模拟了 FeNiCrCoCu 合金的拉伸力学特性, 并深入地讨论了拉伸过程中的应力-应变关系、抗拉强度、相变演化、位错类型以及长度等重要表征参数, 探究了该高熵合金的力学性能和塑性变形机制; 鲁红权等^[26]模拟了不同晶向铜在常温下的弹塑性力学性能; 陈丽等^[27]模拟了沿着 [001] 晶向单向拉伸的圆柱形纳米银杆的力学特性; 陶伟明等^[28]模拟了无热激活状态下金属镍单晶纳米丝的轴向拉伸变形过程, 研究了纳米尺度下单晶镍丝的应力-应变关系、能量和原子构型的变化, 以及损伤初始化和扩展过程.

综上, MD 拉伸模拟可以模拟和预测原子尺度的动力学行为, 模拟应力应变关系、杨氏模量、屈服强度等, 模拟材料在拉伸过程中的原子和分子排列、应变聚集以及断裂面的形成等过程, 这有助于深入地理解材料的断裂行为和失效机制, 并通过改变材料结构和组成等因素来改进材料的韧性和强度; 还可研究拉伸过程中晶体中的晶格变形、缺陷特性 (如位错、空位) 以及晶界的稳定性等; 通过模拟拉伸过程中晶体结构的变化和缺陷的运动, 可以揭示缺陷对材料强度、塑性和断裂行为的影响, 帮助揭示材料的力学性质、断裂机制, 为材料设计和优化提供指导. 因此拉伸分子动力学模拟在研究单晶力学性能及材料缺陷演变方面具有重要意义和价值. 但目前为止, 尚未有用 MD 模拟研究拉伸 YAG 晶体过程中的力学特性、缺陷产生及演化等的报道. 进行 YAG 晶体分子动力学拉伸模拟研究, 可以更全面地揭示 YAG 晶体的力学性质和缺陷产生机理, 为在晶体生长过程中避免和减少缺陷产生提供工艺设计依据.

2 YAG 晶体建模与模拟方法

2.1 YAG 晶体结构简介

YAG 晶体属 $Ia\bar{3}d$ 空间群, 图 1 为 YAG 晶体惯用胞模型 ($a = 12.0241 \text{ \AA}$, ICSD:074607^[29]). YAG 晶胞模型共有 160 个原子, 其中四配位铝离子 24 个, 六配位铝离子 16 个, 八配位钇离子 24 个, 96 个氧作为配位原子分布在金属原子之间. 由于

铝离子的配位环境不同, 四配位铝和六配位铝具有不同核外电子排布和铝氧键长度, 四配位结构化学键相对较短. 考虑到铝离子具有两种不同的配位环境, 因此在建模时将铝离子分成了两类原子 (如图 1 和图 2 所示), YAG 晶体由四面体、八面体、十二面体三种基本结构单元组成.

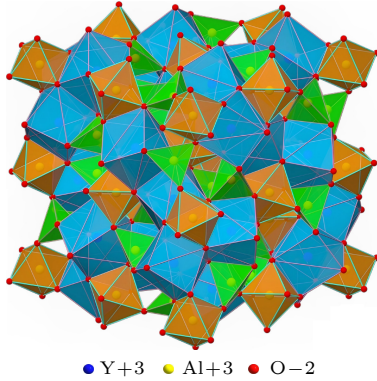


图 1 YAG 晶体结构
Fig. 1. YAG crystal structure.

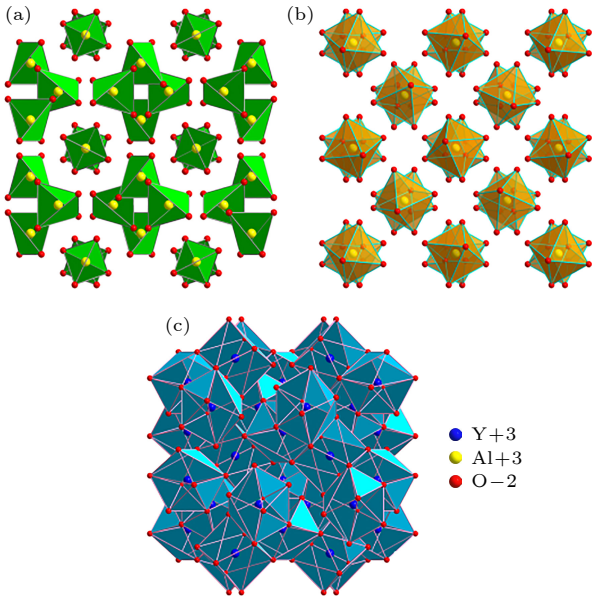


图 2 组成 YAG 晶体的三种基本结构单元 (a) Al-O 四面体; (b) Al-O 八面体; (c) Y-O 不规则十二面体
Fig. 2. Three basic structural units forming the YAG crystals: (a) Al-O tetrahedra; (b) Al-O octahedron; (c) Y-O irregular dodecahedron.

2.2 模型建立

考虑到 YAG 晶体的各向异性, 建立 [111], [110], [100] 三种不同晶向的 YAG 超胞纳米条模型 (以下简称模型 a, b, c), 建立的 YAG 单晶模型均为条状长方体 (如图 3 所示), 截面长与宽为接

近 50 Å 的方形, 侧面高度均接近 380 Å, 图中两种类型的 Al 原子未作颜色区分, 为了保证模型的晶格周期性, 模型尺寸只是接近相同, 具体的模型参数如表 1 所列.

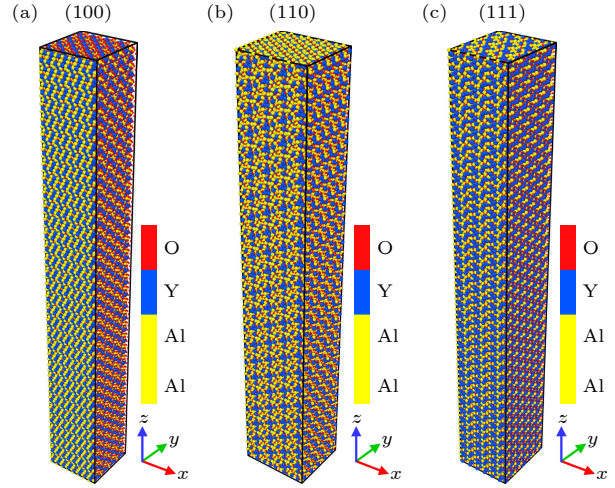


图 3 YAG 拉伸模型 (a) [100]; (b) [110]; (c) [111]
Fig. 3. YAG stretch model: (a) [100]; (b) [110]; (c) [111].

表 1 YAG 拉伸模型基本参数

Table 1. Basic parameters of YAG tensile models.

Plane type		[100]	[110]	[111]
Lattice size/Å	<i>a</i>	48.1	58.91	51.01
	<i>b</i>	48.1	52.07	58.91
	<i>c</i>	383.74	374.1	388.76
Atoms number		84480	105600	107520

2.3 分子动力学模拟原理及方法

MD 模拟基于牛顿运动定律的原子运动规律, 借鉴了部分量子力学思想. 在量子力学中求解复杂体系薛定谔方程是一个十分消耗时间和算力的过程, 如忽略电子密度求解, 仅关注原子核运动规律, 可大大减少计算量, MD 正是基于这一简化的思想开发出来的. 基于密度泛函的第一性原理计算方法最大只能计算数百原子的体系^[30], 而 MD 方法可计算数千万原子组成的模型. 在 MD 模拟中, 主要计算原子核的受力与运动, 记录原子核的坐标信息, 根据模型里每一个原子核坐标与时间的数据, 在开放性可视化工具 OVITO^[31] 软件内实现原子级的动态演化观察. 在 MD 模拟中原子被抽象成了质点, 只关注各个质点的坐标、质量、速度、受力等信息, 电子行为及其相互作用被简化为势函数, 势函数驱动质点运动, 再通过统计热力学方法计算

模拟体系的热力学信息.

采用大规模原子分子并行模拟器 (LAMMPS)^[32] 程序完成全部模拟过程. 模拟体系共涉及四种类型的原子, 分别为 O, Y, Al₁, Al₂, Al₁ 和 Al₂ 分别代表六配位和四配位的铝. 原子间相互作用力由短程 Born-Mayer^[33] 类型作用力、库仑力和范德瓦耳斯力三部分组成, 原子 i 与原子 j 之间的势能 v_{ij} 计算为

$$v_{ij} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_i Z_j}{r_{ij}} + a \exp\left(\frac{-br_{ij}}{R_i + R_j}\right) - \frac{c}{r_{ij}^6}, \quad (1)$$

其中 r_{ij} 代表原子 i 与原子 j 之间距离; e 和 ϵ_0 为常数, 分别代表单电子电荷量和真空介电常数; R_i 和 Z_i 为原子 i 的有效半径和有效电荷量, 这两个量仅和原子类型有关, 具体数值如表 2 所列. 其中认为 a , b 是常数, $a = 1822$ eV, $b = 12.364$; 范德瓦耳斯力仅作用于氧原子之间, $c = 100$ eV·Å⁶; 经过测试短程 born-coul-long 类型势截断半径在 2.96 Å 时模拟结果较为准确, Goel 等^[34] 已经证明了该参数的可靠性和准确性.

表 2 原子有效电荷量和有效半径

Table 2. Atomic effective charge quantity and the effective radius.

	O	Y	Al ₁	Al ₂
Z	-1.5475	2.5	1.7	2.556
$R/\text{Å}$	1.89	2	1.3	1.05

3 模拟结果分析

3.1 熔点模拟

本文模拟了 YAG 晶体在 NPT 系综下的升温. 在晶体材料升温过程中, 随着温度的升高, 体系势能不断增加, 在固态阶段, 体系温度势能曲线呈线性关系 (如图 4 所示), 所采用的模型是 $2 \times 2 \times 2$ 的超胞模型, 采用的模拟步长为 4 fs/step. 在晶体材料升温速率较快时, 体系会出现过热态, 导致模拟熔点偏高, 为了降低模拟误差同时节约计算成本, 本文采用了分段升温的方法, 体系温度在 2000 K 以下时快速升温, 2000 K 之后降低升温速率, 给体系足够的模拟时间, 以便得到更为准确的熔点. 晶体材料从固态转变为熔体时, 体系的排列结构发生了突变, 这时体系的势能相比固态时会急剧增加, 如图 4 所示, 体系的势能曲线刚开始发生突变时,

即为所求的熔点, 模拟结果为图中蓝色点, 熔点为 2225.38 K, 即 1952.23 °C, 与实验结果基本一致. 熔点测试结果表明, 该力场参数用于高温下的 YAG 晶体模拟较为准确.

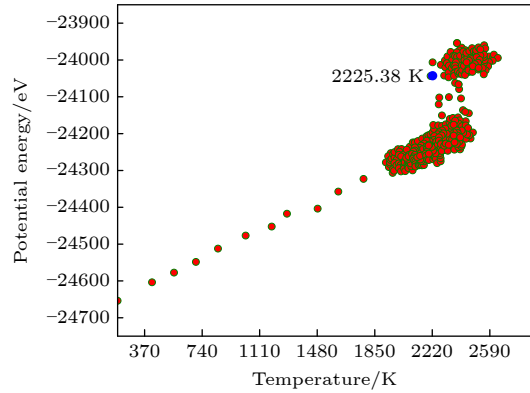


图 4 YAG 晶体的温度势能曲线

Fig. 4. Temperature potential energy curve of the YAG crystal.

3.2 YAG 单晶的应力-应变曲线

3.2.1 模拟方法与应力应变计算

借助 LAMMPS 程序对三种模型进行拉伸模拟. 采用 0.002 ps 的时间步长, 周期性边界条件, 初始温度为 300 K. 首先在 NPT 系综下让系统弛豫 10000 步, 达到指定温度的平衡状态后, 在 NVT 系综中以每 1000 步应变 0.002 的速度施加均匀载荷, 较长步数有助于消除拉伸过程的激波效应^[35], 对所有模型均拉伸了 40000 步. 在模拟过程中, 每 200 步记录一次原子的平均应力、总能量、势能、动能、温度、系统构型及原子坐标位置. 针对 YAG 单晶材料拉伸的应力-应变曲线, 有三个参数需要特别关注, 一是刚开始拉伸时直线阶段材料的斜率, 斜率的值即为弹性模量; 二是刚开始产生缺陷时的点, 此处为材料不产生缺陷的极限应力应变, 超出此范围 YAG 便会出现缺陷; 三是 YAG 单晶材料的断裂位置, 此时的应力对应 YAG 断裂应力, 超出此应力极限, 单晶纳米线产生断裂, 断裂处形成了一个微缝, 在晶体中的宏观表现即为开裂现象.

材料中应力一般用 3×3 矩阵表示, 有六个独立的分量 σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} , σ_{xy} , σ_{xz} 和 σ_{yz} . 本工作主要计算拉伸方向的应力, 即若拉伸方向为 X 方向, 则计算 σ_{xx} . 在分子动力学模拟中, 一般使用维里 (Virial) 定理来计算体系的宏观应力, 而宏观应

力由原子的局部应力得出, 对于体积为 Ω 的局域体系的维里应力^[36]表示为

$$\sigma_i^{\alpha\beta} = \frac{1}{\Omega} \left(\frac{1}{2} m_i v_i^\alpha v_i^\beta - \frac{1}{2} \sum_j \frac{\partial U}{\partial r_{ij}} \frac{r_{ij}^\alpha r_{ij}^\beta}{|r_{ij}|} \right), \quad (2)$$

其中 α 和 β 可以为 x, y, z 方向中任意两个; 求和对于 i 原子附近所有 j 原子都要进行; m, v, U, r 分别为质量、速度、势能、距离. 材料应变即材料的形变量与材料原本长度比值, 以 x 方向拉伸为例, 计算为

$$\varepsilon_{xx} = (L_x - L_{x0})/L_{x0}, \quad (3)$$

式中, L_{x0} 为材料初始长度, L_x 为材料现有长度.

3.2.2 不同温度下的纵向拉伸对比

应力-应变曲线是分析材料力学性质的重要数据, 它能够反映材料在不同应力下的应变响应, 可以详细地展示出材料的弹性、塑性甚至断裂的行为特性. 通过对应力-应变曲线可得知材料弹性模量、屈服强度、断裂强度等关键参数. 曲线的初始线性部分代表弹性阶段, 斜率即为弹性模量, 这一值越大, 材料的刚度就越高. 当应力超过某一阈值, 材料将进入塑性阶段, 在受到一定应力后, 材料会发生永久性的形变, 曲线将变得非线性. 这一阶段的开始点被称为屈服点, 它标志着材料从弹性形变转变为塑性形变的点, 对应的应力值就是屈服强度, 决定了材料能承受的最大应力而不发生永久性形

变. 最后, 当应力达到最大值后, 材料将发生断裂, 这一点对应的应力值即为断裂强度反映了材料的抗断裂能力, 对于评估材料的耐用性和安全性具有重要意义.

图 5 展示了 YAG 晶体在不同温度下纵向拉伸的各向异性, 模型已经进行了足够时间的弛豫. 从应力-应变曲线可以看到, YAG 是典型的脆硬材料, 在 300, 800, 1300 K, 几乎不存在塑性阶段, 应变在 10%—12% (各向异性较明显), YAG 便会断裂, 即便到了 1800 K, 仍然应变在达到 10% 左右即开裂, 只有在 2200 K 发现存在明显的塑性形变阶段, 此时超过 5% 应变即进入塑性形变阶段; 其次, YAG 断裂极限由小到大分别为 [100], [111], [110] 方向, 随着温度升高, [110] 和 [111] 向的断裂应变趋近一致. [111] 为 YAG 晶体的实际生长方向, 其顶部籽晶处在提拉生长时承担最高的拉伸应力, 该方向 1300 K 断裂极限应力基本与 [110] 一致, 具有较高的抗拉强度; 同时由于表面能高于 [110] 具有更高的生长速率, 综合考虑生长速率与抗拉强度, [111] 为最佳的生长方向.

为验证 YAG 晶体力学性质模拟结果的可靠性, 采用纳米压痕方法测量了 YAG 晶体不同晶向的载荷-位移曲线. 根据 Oliver-Pharr^[37] 方法, 通过分析载荷-位移曲线的卸载相位, 可以得到待测样品的弹性模量. 实验中使用的 YAG 晶体是由中国

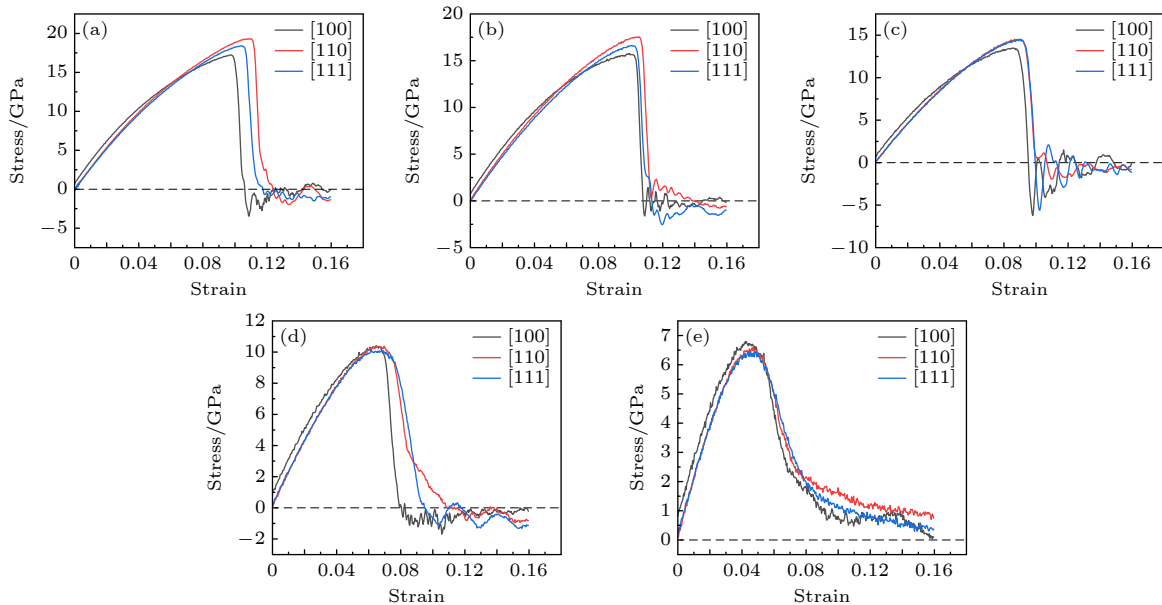


图 5 YAG 晶体纵向拉伸的应力-应变曲线 (a) 300 K; (b) 800 K; (c) 1300 K; (d) 1800 K; (e) 2200 K

Fig. 5. Stress-strain curves of YAG crystal longitudinal tensile: (a) 300 K; (b) 800 K; (c) 1300 K; (d) 1800 K; (e) 2200 K.

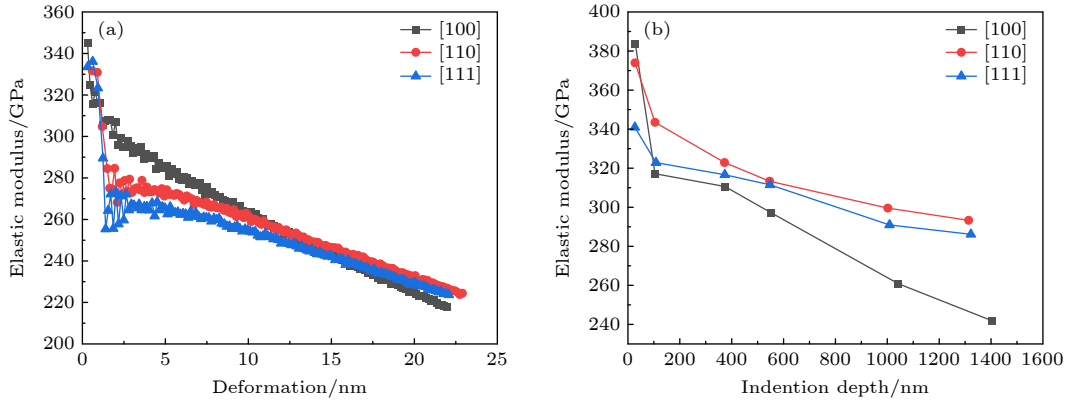


图 6 YAG 晶体的弹性模量 (a) 根据 300 K 下分子动力学拉伸模拟中应力-应变曲线所计算的弹性模量; (b) 根据纳米压痕实验中载荷-位移曲线所计算的弹性模量

Fig. 6. Elastic modulus of the YAG crystal: (a) The elastic modulus calculated from the stress-strain curve in the molecular dynamics stretching simulation at 300 K; (b) the elastic modulus calculated from the load-displacement curve in the nanoindentation experiments.

科学院安徽光学与精密机械研究所采用提拉法生长的, 不同晶向的晶体表面均进行了研磨与抛光处理. 实验采用 G200 纳米压头进行, 每个样品分别在 0.5, 5, 50, 100, 300 和 500 mN 的六种载荷条件下进行纳米压痕试验, 六种载荷对应的压入深度如图 6(b) 所示. 图 6(a) 为 YAG 晶体在 300 K 下不同应变下的弹性模量, 其数据是图 5(a) 求导得到的. 采用两种不同的方法所计算得到的弹性模量在数值上与变化趋势上均相符: 在 MD 模拟结果中, YAG 晶体的应力-应变曲线并不完全遵守胡克定律, 其应力-应变曲线为图 5 所示的非线性模型, YAG 晶体的弹性模量随着应变增大呈线性下降, 在应变小于 0.02 时, 不同晶向的弹性模量从大到小排序为 [100], [110], [111], 而在应变大于 0.05 时, [100] 晶向的弹性模量降低更为明显, 不同晶向的弹性模量从大到小排序为 [110], [111], [100]; 在纳压痕的实验数据中, 同样观察到了类似的现象, 如图 6(b) 所示, 在压入深度由 27 nm 增至 104 nm 后, 也同样出现了 [100] 晶向弹性模量下降更为明

显的现象. 因此可以认为, 在刚开始发生弹性形变时, [100] 晶向的强度是最高的, 但随着应变量的增加, [100] 晶向的强度下降更为明显, 材料强度最高的晶向转变为 [110], 综合模拟与实验数据, 可以认为在弹性阶段的中后期、塑性与脆性阶段, 强度最高的晶向为 [110], 强度最低的晶向为 [100].

除了关注应力-应变曲线的斜率外, 其导数等于 0 的拐点对应的应力-应变也包含着重要的力学信息, 此点代表了晶体局部开裂或者屈服时的最大应力. 图 7 反映了图 5 中的 15 个拐点的应力-应变信息统计. 分析拐点信息可以发现, 随着温度的升高, 晶体断裂时的应力-应变都有大幅度的降低, 力学各向异性逐渐减弱, 在 1300 K 以下最容易断裂的晶向是 [100], 1800 K 以上晶体力学各向异性消失, 所需断裂应力随着温度的升高明显下降. 根据图 7 中数据, 为了方便获得任一温度 $T(K)$ 下的断裂应变 $\varepsilon_{\max}$ 与对应的极限应力值 $\sigma_{\max}(GPa)$, 采用三次函数较好地拟合了图中曲线, 拟合计算公式如下:

$$\begin{cases} \varepsilon_{\max[100]} = 0.08802 + 4.95414T/10^5 - 4.56703T^2/10^8 + 6.59799T^3/10^{12}, \\ \varepsilon_{\max[110]} = 0.10643 + 2.41633T/10^5 - 3.45746T^2/10^8 + 5.29866T^3/10^{12}, \\ \varepsilon_{\max[111]} = 0.10086 + 2.31693T/10^5 - 2.68760T^2/10^8 + 2.33207T^3/10^{12}, \\ \sigma_{\max[100]} = 17.81507 - 2.350T/10^3 - 4.19181T^2/10^7 - 3.71693T^3/10^{10}, \\ \sigma_{\max[110]} = 19.35679 + 5.16178T/10^4 - 4.02427T^2/10^6 + 5.12712T^3/10^{10}, \\ \sigma_{\max[111]} = 18.56885 - 5.17726T/10^4 - 2.17597T^2/10^6 - 5.52419T^3/10^{11}. \end{cases} \quad (4)$$

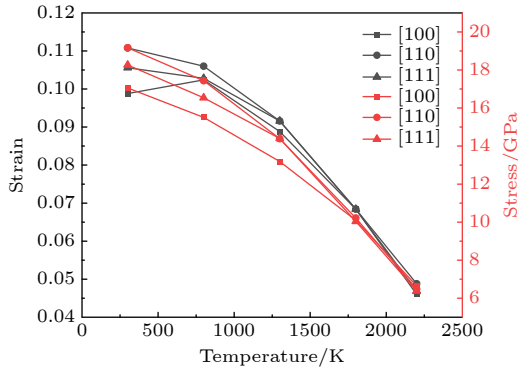


图 7 拐点处的应力-应变值

Fig. 7. Stress-strain values at the inflection point.

如图 8 所示, 为了更直观地对比温度对 YAG 力学性能的影响, 把应力-应变曲线按照不同晶向分类, 对比了每一种晶向下温度对力学性质的影响. 温度对 YAG 晶体的力学性质影响显著, 在 300—1800 K 范围内, 随着温度的升高, 除 [100] 方向的 800 K 相对 300 K 断裂时应变略有增加, 其余的都是随着温度升高, 晶体的弹性形变应变范围减小, 晶体极限应力随着温度增高而降低; 但在 2200 K 下 YAG 晶体并没有被拉断, 在应力增加约到 6 GPa 时材料发生屈服, 随后在塑性拉伸过程中不断延长. 因此拉伸过程中升高温度会降低晶体的拉伸强度, 在 2200 K 接近熔点时才有明显的塑性变形能力, 在 1800 K 下有轻微的塑性变形能力, 在更低温度下无明显塑性变形能力, 是典型的脆硬材料.

3.2.3 不同温度下的横向拉伸对比

拉伸模型如图 3 所示, 除对 Z 轴拉伸以外, 同样可以对模型的 X, Y 轴晶向进行拉伸. 模型 a 中, 由于立方晶系的对称性, 其 X, Y, Z 轴均等效于 [100] 晶向; 模型 b 中 Z 轴晶向为 [110], X 轴晶向为 $[\bar{1}12]$, Y 轴晶向为 $[1\bar{1}1]$; 模型 c 中, Z 轴晶向为 [111], X 轴晶向为 $[0\bar{1}1]$, Y 轴晶向为 $[\bar{2}11]$. 三个模型的横向拉伸的应力-应变曲线如图 9 所示, 鉴于立方晶系的对称性, 图 9(b) $[\bar{1}12]$ 与图 9(e) $[\bar{2}11]$ 的晶向是等效的, 模型 b 与模型 c 在尺度上差异并不大, 因此观察到图 9(b) 与图 9(e) 的应力-应变曲线一致. 在纵向拉伸过程中已经分析了不同晶向的力学性能差异, 此处增加了 [112] 晶向, 两者最大的差异在于拉伸截面的尺度不一致. 在应力-应变曲线上横向拉伸过程中其应力一直大于零, 并没有宏观上的断裂现象, 主要通过局部裂纹与微孔释放了部分应力, 大尺度的拉伸截面更有助于我们理解晶体内部宏观的开裂特征.

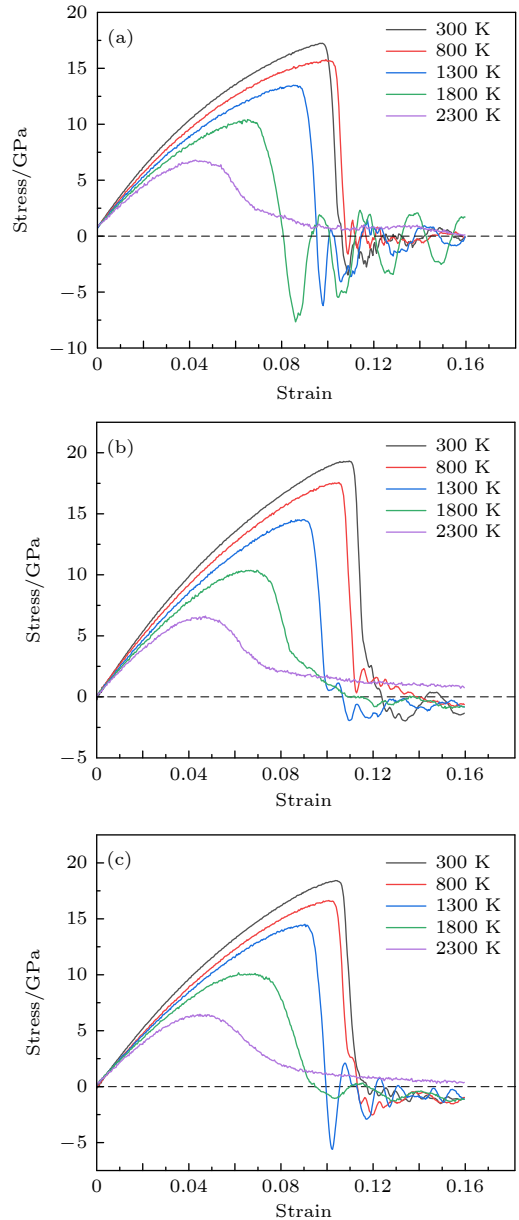


图 8 同晶向不同温度下的应力-应变曲线 (a) [100]; (b) [110]; (c) [111]

Fig. 8. Stress-strain curves of the same crystal orientation at different temperatures: (a) [100]; (b) [110]; (c) [111].

为进一步对比横向拉伸过程中不同晶向的各向异性, 将同一温度下四种不同晶向的应力-应变曲线进行了对比. 如图 10 和图 11 所示, 在横向拉伸过程中虽然没有将模型彻底拉断, 体系内还存在内应力, 但其力学特性与纵向拉伸相同. 如图 10 中 300 K 下 [100] 晶向的弹性模量随着尺度增加逐渐减小, 这与图 6 中 [100] 晶向弹性模量的转变一致; 300 K 下 [112] 晶向的开裂应力约 19.24 GPa, 这与 [100] 晶向 19.13 GPa 十分接近, 但其开裂所需应变更小, 因此在常温下 [112] 晶向更容易开裂.

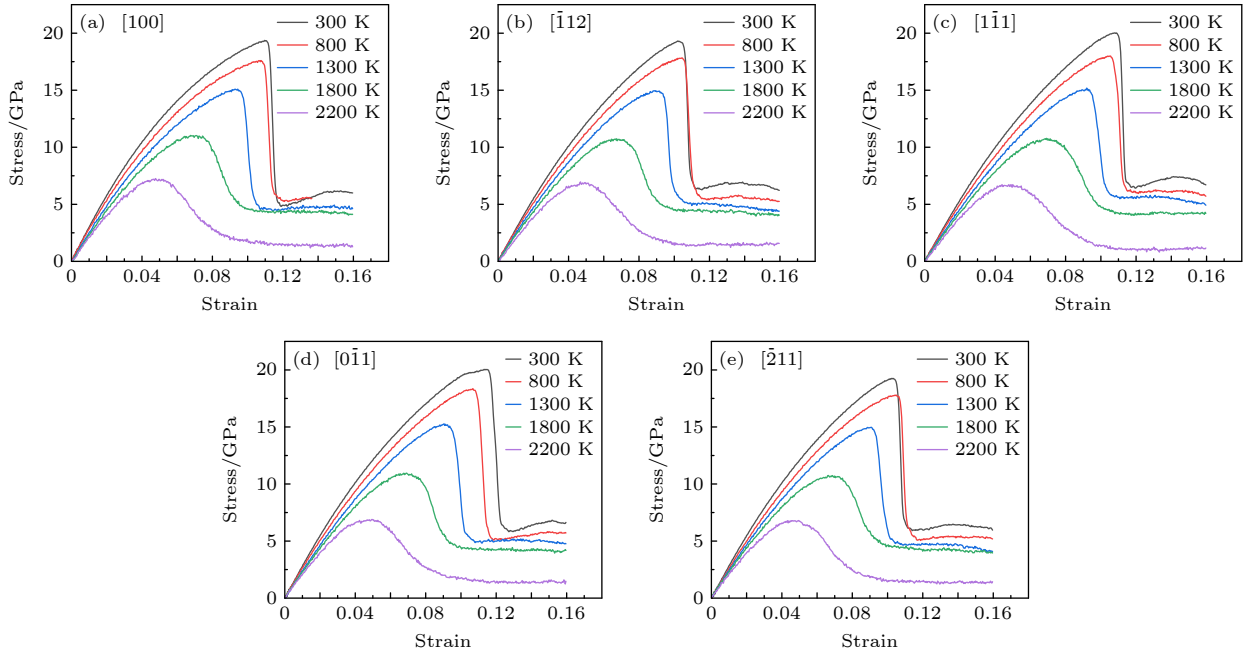


图9 YAG晶体横向拉伸下的应力-应变曲线

Fig. 9. Stress-strain curves under the lateral tensile force of the YAG crystals.

在 2200 K 下, [100] 晶向所需的屈服强度最高, [111] 晶向最容易发生屈服, 这也与纵向拉伸所模拟的力学特性一致. 同样地, 升温至 1300 K 后不

同晶向的应力-应变曲线重合度增加, 力学各向异性逐渐消失; 升温至 1800 K 后, 不同晶向弹性阶段的斜率重合度增加, 弹性模量的各向异性消失, 但屈服应力开始出现差异, 这一差异在 2200 K 时更为明显. 对于横向、纵向两种不同尺度的拉伸, 拉伸过程中不同晶向的力学特性变化均一致. 在横向拉伸的模拟中截面较大, 拉伸过程中产生裂纹释放应力, 并不会整体断裂.

3.3 能量演化过程分析

3.3.1 断裂能分析

下面研究晶体断裂或开裂过程的能量变化特征. 在晶体拉伸断裂过程中, 通过拉伸应力-应变曲线, 可计算该晶向的断裂能. 断裂能^[38]由拉伸应力-应变曲线所包围的面积来获得, 计算公式为

$$E_f = \int_0^{\epsilon} \sigma d\epsilon, \quad (5)$$

其中 σ 为应力; ϵ 为应变, 意为单位面积材料断裂时吸收的能量, 亦称断裂能密度, 其描述材料在断裂前所吸收的能量, 反映材料承载能力和韧性. 由于晶体微观结构中各个晶向的键合力的不同, 各个晶向下的断裂能是不同的, 造成材料的各向异性. 在某些特定的晶向下, 原子间键合力更强, 使得在应用外部加载时应变能的积累更高, 即断裂能更大.

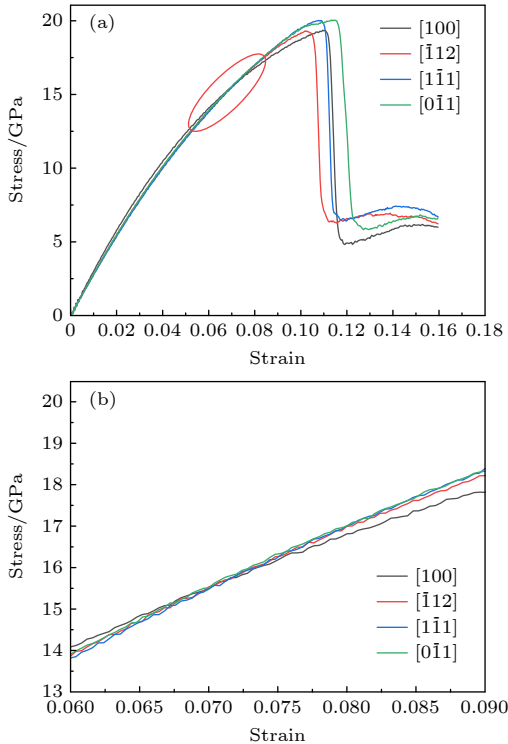


图10 (a) YAG晶体 300 K 横向拉伸的应力-应变曲线; (b) 子图 (a) 的局部放大图

Fig. 10. (a) Stress-strain curves of 300 K transverse stretch; (b) enlarged partial view of panel (a).

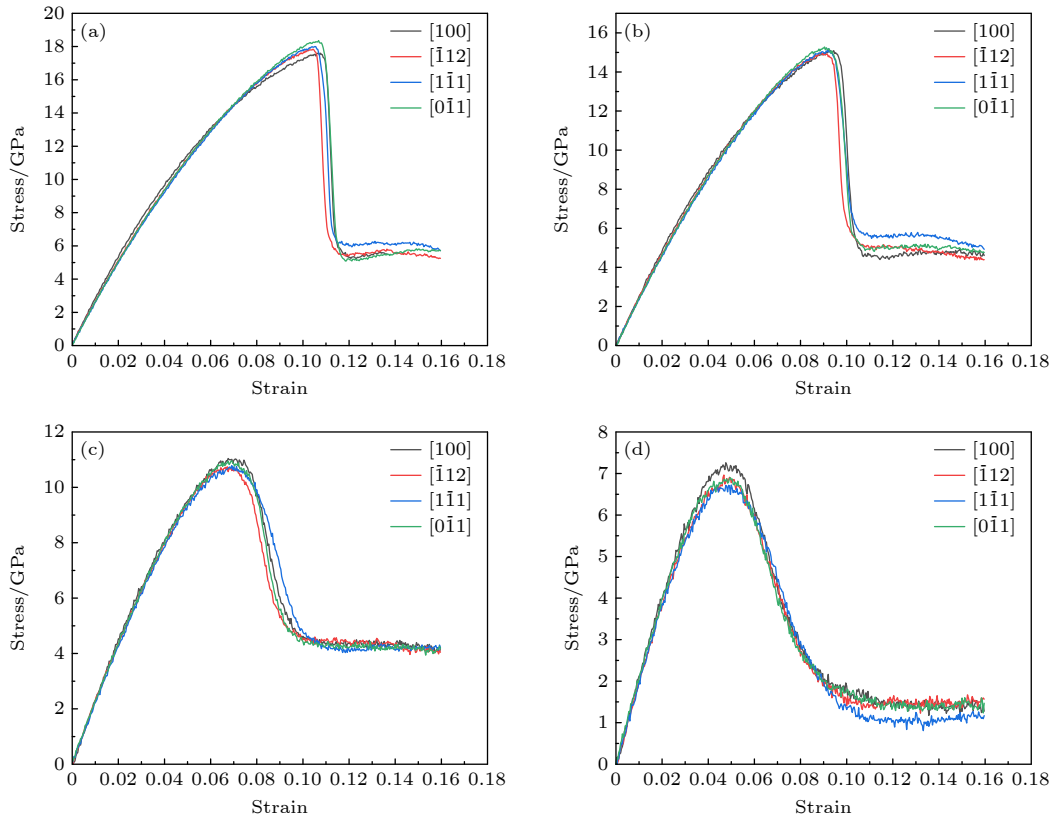


图 11 相同温度不同晶向横向拉伸的 YAG 晶体应力-应变曲线 (a) 800 K; (b) 1300 K; (c) 1800 K; (d) 2200 K

Fig. 11. Stress-strain curves of YAG crystals stretched at the same temperature with different crystal directions: (a) 800 K; (b) 1300 K; (c) 1800 K; (d) 2200 K.

YAG 晶体在不同温度下的断裂能与拉伸强度 (断裂时所承受的最大拉伸应力) 如图 12 所示, 在 300—1300 K 范围内, 断裂能最高的晶向均为 [110], 这意味着 [110] 晶向能在断裂前能吸收更多的应力能量. 因此, 该晶向具有较高的韧性, 能够抵抗冲击和突发应力, 不易破裂, 晶体在破裂前可以发生较大的塑性变形, 可抵抗重复或循环加载造成的疲劳破坏. 对于已存在裂纹或缺陷的晶体, 高的断裂能

有助于阻止或延缓裂纹的扩展, 从而增加材料的使用寿命. [100] 晶向在 300 K 具有最低的断裂能, 意味着该晶向在常温下最容易加工, 易研磨、抛光、腐蚀, 与纳米压痕实验的测试结果^[39]一致. 常温下 [100], [110], [111] 向的断裂能分别为 1.09, 1.31, 1.18 J/m², 据断裂能推测 YAG 晶体各晶向的稳定性从弱到强排序为 [100], [111], [110], 与实验结果^[40]一致, 也与 YAG 的 [100], [110], [111] 方向表面能 0.270, 0.248, 0.260 eV/Å²^[40] 的排序一致.

断裂能同样受温度影响显著, 温度升高会增加晶体内部原子的热振动, 热振动会破坏原子间的稳定键合, 降低键合力, 导致断裂能降低. 如图 12 所示, 随着温度的升高, 断裂能与拉伸强度都有明显下降, 但下降速率有所不同. 因此在高温环境下, YAG 晶体的力学各向异性有所转变, 在 300 K 下断裂能最低的 [100] 晶向升温至 1800 K 逐渐转变为断裂能最高的晶向, 同样其拉伸强度随温度升高的下降速率也最低. 对比 [110] 与 [111] 晶向, 随着温度的升高, 其力学各向异性基本消失, 断裂能在高温下基本一致. 以 [110] 晶向为例, 在从 300 K 升温至 1800 K 的过程中, YAG 晶体的断裂能从

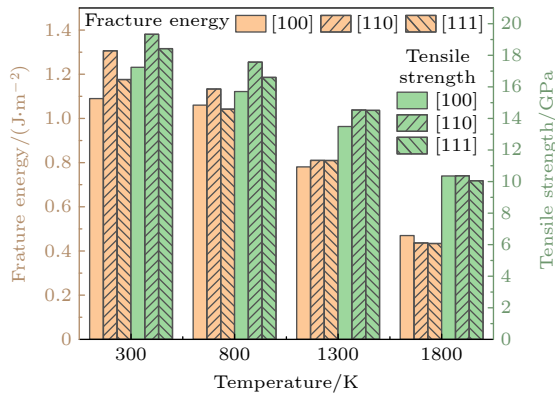


图 12 YAG 晶体在不同温度下的断裂能与拉伸强度

Fig. 12. Fracture energy and tensile strength of the YAG crystals at different temperatures.

1.31 J/m² 下降至 0.43 J/m², 因此 1800 K 下 YAG 晶体的断裂能约为常温下的 1/3. 将断裂能 E_F 随温度 T 变化的数据采用线性拟合可得到

$$\begin{cases} E_{F[100]} = 1.300 - \frac{4.281}{10^4}T, \\ E_{F[110]} = 1.537 - \frac{5.865}{10^4}T, \\ E_{F[111]} = 1.382 - \frac{4.918}{10^4}T. \end{cases} \quad (6)$$

(6) 式反映了 YAG 晶体不同晶向在温度逐渐升高时, 不同温度下的断裂能差异.

3.3.2 拉伸过程中的势能、动能变化

势能反映的是一个物体由于其位置或状态在特定力场中所具有的能量, 原子之间的相互作用势能决定了晶体结构的稳定性. 动能与物体的质量和运动速度的平方成正比, 反映了物体运动状态的能量特性, 对于一个原子数确定的模型而言, 其动能主要靠温度决定. 图 13 为模拟过程中的势能-应变曲线, 图 14 为模拟过程中的动能-应变曲线. 不同晶向的主要差异为断裂时的应变不同, 在断裂瞬间

势能与动能曲线发生振荡. 在不同晶向的拉伸过程中势能与动能的变化趋势是一致的. 模型的势能与动能均受温度影响显著, 在更高的温度下模型拥有更高的势能与动能, 这是因为高温下的原子热振动更加剧烈, 距晶格平衡位置的偏移更大.

在断裂前的拉伸过程中, 势能逐渐增大, 此时晶格发生变形, 在断裂瞬间势能开始急剧下降. 在 1800 K 时势能下降的斜率明显低于 1300 K 之前, 这是因为 1800 K 下的晶体拉伸断裂前所储存的势能更小, 拉伸状态的晶体收缩更慢. 晶体断裂后, 势能逐渐下降平稳, 此时晶体内部结构已经产生损伤, 且产生了缺陷表面, 因此断裂稳定后的势能略大于拉伸前. 在 2200 K 下的拉伸过程中, 晶体未发生断裂, 在屈服处有一个变动较小的峰, 在整个拉伸过程中体系的势能一直在增加.

在晶体断裂前后体系的动能均保持稳定, 仅在断裂瞬间有一个较小的波动. 这表明拉伸过程中体系动能主要由体系所处温度决定, 拉伸状态下的晶格变形并不会对体系动能造成直接影响, 在断裂时所增加的动能是因为晶体的瞬间收缩赋予了原子

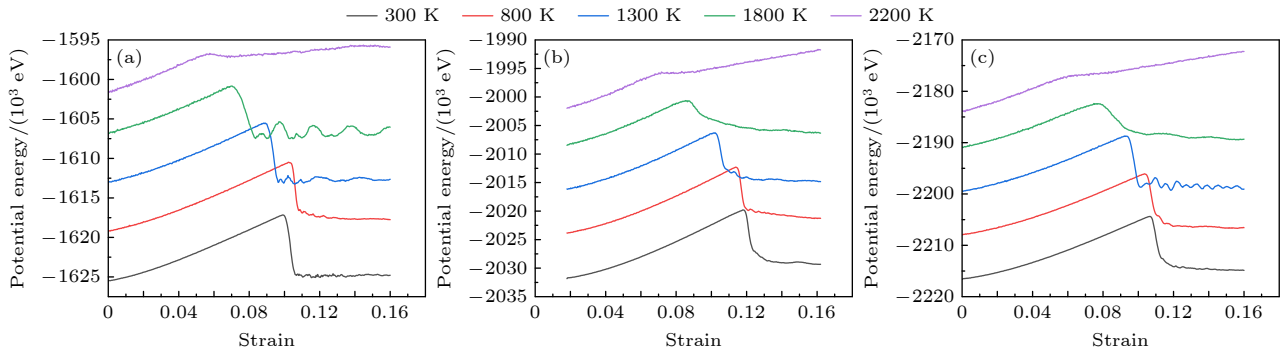


图 13 YAG 晶体在不同晶向的势能应变曲线 (a) [100]; (b) [110]; (c) [111]

Fig. 13. Potential energy strain curves of YAG crystals in different crystal directions: (a) [100]; (b) [110]; (c) [111].

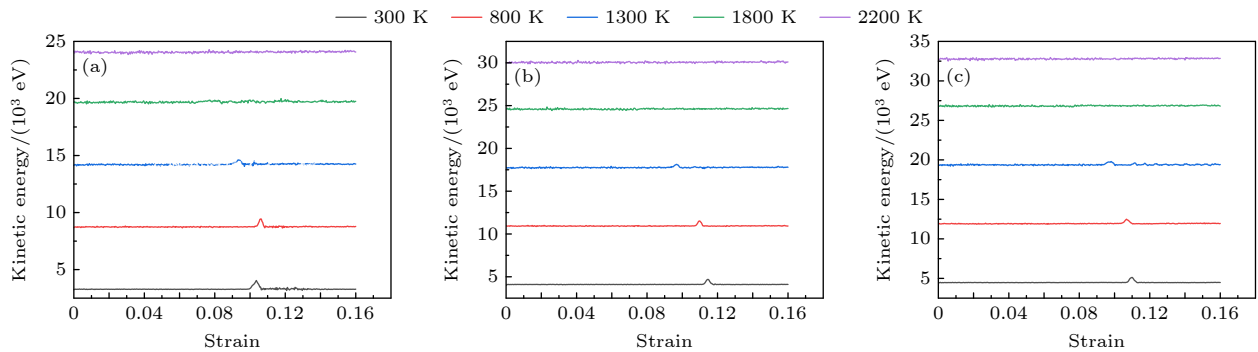


图 14 YAG 晶体在不同晶向的动能应变曲线 (a) [100]; (b) [110]; (c) [111]

Fig. 14. Kinetic energy strain curves of YAG crystals in different crystal directions: (a) [100]; (b) [110]; (c) [111].

更高的运动速度,完成收缩后动能又回归断裂前的水平.我们发现在 1800 K 以上的断裂过程中,动能并没有发生明显的波动,因此可以认为高温下所储存的势能更小,断裂瞬间对体系的原子运动速度影响较小,体系的动能主要由该温度下固有的原子热振动决定.

3.4 YAG 晶体缺陷结构演变分析

LAMMPS 已计算了拉伸过程中原子运动轨迹,对运动轨迹文件使用 OVITO 软件进行原子构型的可视化,借助了共同近邻分析^[41](common neighbor analysis, CNA)来识别原子周围局部晶体结构,如 FCC, BCC, HCP 以及晶体缺陷.采用该软件提供的位错提取算法^[42](dislocation extraction algorithm, DXA)可识别不同类型的位错.YAG 晶体结构较金属复杂,其中氧原子起配位作用,占位无明显晶格规律,六配位铝原子形成了体心立方结构,借助占位有规律的六配位 Al 原子,可以识别晶体内部的缺陷结构,若六配位 Al 原子这种有序的排列规律发生改变,则被识别为产生了缺陷.本工作共做了 15 组纵向拉伸模拟,25 组横向拉伸模拟,由于篇幅限制仅挑选了部分代表性模拟结果进行缺陷结构分析.

3.4.1 纵向拉伸过程中的缺陷结构演变

图 15 为 YAG 晶体 300 K 下的纵向拉伸演变过程,图中记录了不同应变对应时刻的结构模型.其中刚开始产生缺陷时的应变为 0.0984,这与应力-应变曲线的拐点数值基本一致,说明体系内缺陷结构的产生释放了内应力,在应变为 0.1016 时晶体已经基本断裂,仅有少量位置连接.从开始产生缺陷到基本断裂的应变十分接近,这表明 YAG 晶体在常温下的脆性极强,拉伸过程中以直接断裂为主,未发现明显的晶面滑移现象,在拉伸过程中经历了极短的塑性阶段就发生了断裂.在拉伸过程中除了断裂位置外,其他少量区域也产生了畸变,在断裂前这些区域仅有少量原子脱离平衡位置,但在断裂后内应力得到释放,原本被拉伸的晶格开始收缩,畸变区域的缺陷进一步拓展,形成了材料损伤.因此 YAG 晶体的损伤是从少量原子脱离平衡位置开始的,从微小的空位、间隙等点缺陷团开始很快拓展成大范围的裂纹与损伤.

图 16 为 [100] 晶向 2200 K 下纵向拉伸结构演

变过程.与常温下的拉伸过程相比,2200 K 下的整个拉伸过程中未发生断裂现象,晶体的塑性变形能力得到提升,可以观察到拉伸过程中畸变的区域越来越多,最后仅有少量区域还保留周期性排列的晶格结构.此温度下的拉伸过程破坏了晶体结构,大部分区域转向为无序的玻璃态.除此之外,在拉伸过程中还出现了一个纳米微孔,该微孔逐渐拓展增大,由于微孔的存在大大地降低了此处能承受的应力极限,因此微孔在拉伸过程中进一步拓展增大,可以推测进一步拉伸下去晶体也会在此处断裂.这一现象对于我们理解纳米的微孔的形成机制,了解微观尺度下的裂纹拓展机理有所帮助.若考虑氧空位缺陷,在空位缺陷处力学强度更低,更容易发生断裂或者拓展裂纹.

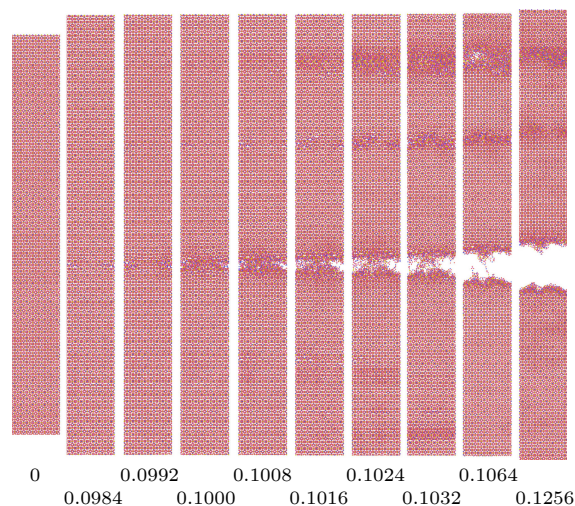


图 15 [100] 晶向 300 K 下纵向拉伸结构演变
Fig. 15. Structure evolution of [100] crystal at 300 K.

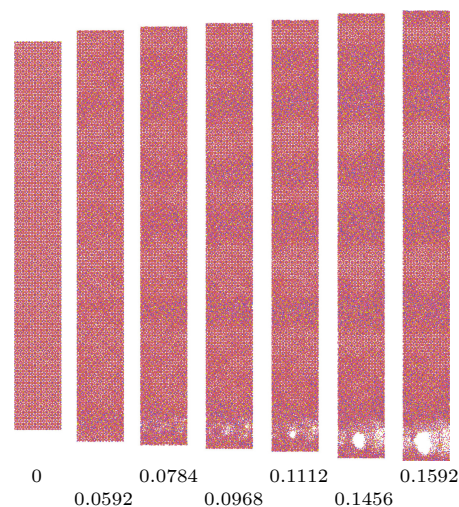


图 16 [100] 晶向 2200 K 下纵向拉伸结构演变
Fig. 16. Structure evolution of [100] crystal at 2200 K.

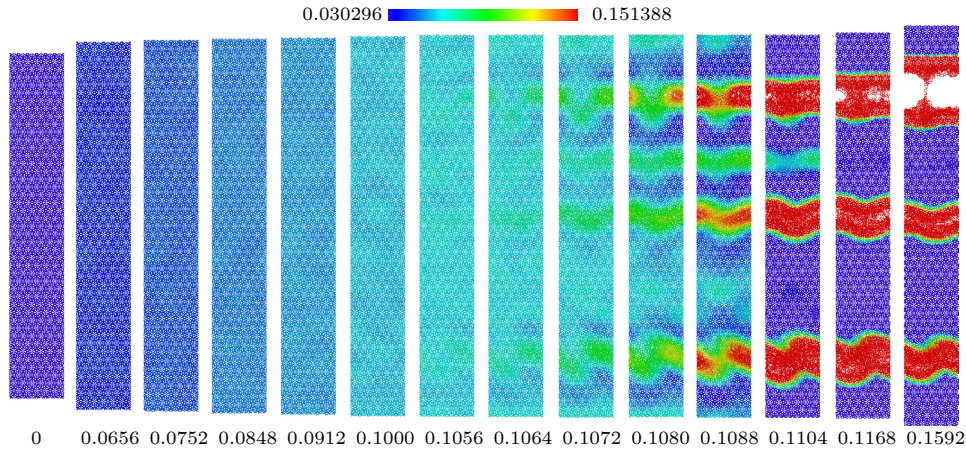


图 17 [110] 晶向 800 K 下纵向拉伸结构演变 (应变云图)

Fig. 17. Structure evolution of [110] crystal at 800 K (Strain cloud diagram).

图 17 为 [110] 晶向 800 K 下纵向拉伸的应变云图, 应变高的区域对应着较高的应力, 因此红色代表应力最高的区域, 紫色代表应力最低的区域. 组图展示了整个拉伸断裂过程中的应力演化特征, 逐步拉伸的过程中体系内应力逐渐增加. 在应变低于 0.1 时, 内部的颜色基本一致代表应力分布均匀; 在应变从 0.1 增加至 0.108 的过程中, 出现了局部的应力集中, 进一步的拉伸过程中, 应力集中区域的应力继续逐步增大, 其他非应力集中区域的应力开始逐渐下降至拉伸前的水平, 说明这些区域的晶格从拉伸状态回归到正常的稳定状态. 拉伸至最后仅保留了三处应力集中区域, 一处发生了断裂, 另外两处为损伤区域.

图 18 为 [110] 晶向 2200 K 下纵向拉伸的应变云图. 同图 16 一致, [110] 晶向在近熔点附近的拉

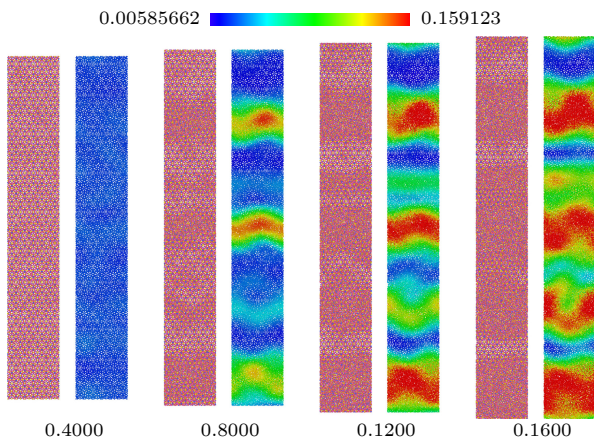


图 18 [110] 晶向 2200 K 下纵向拉伸结构演变 (左: 原始结构, 右: 应变云图)

Fig. 18. Structure evolution of [110] crystal at 2200 K (Left: original structure, right: strain cloud diagram).

伸过程中也逐渐破坏了大范围的晶格结构, 拉伸后仅有少量区域保留了晶体结构, 可以看出晶体结构处的内应力明显小于无序结构. 在晶体的弹性与塑性变形过程中, 也出现了局部内应力集中并逐渐拓展区域的现象. 相比低温下的拉伸过程, 高温下的应力分布更为均匀, [110] 晶向的拉伸过程中未出现微孔结构, 因此高温下 [110] 晶向的韧性强于 [100] 晶向.

图 19 与图 20 为 [111] 晶向在 300 和 2200 K 两种温度下的拉伸过程, 仍旧用 CNA 方法识别体心立方结构的六配位铝原子. CNA 分析算法又将六配位铝原子分成了两类, 一类是处于正常晶格处的体心立方铝原子, 另一类是未识别的无序原子, 借用这种分析方法可以清晰辨别缺陷处与正常晶格处, 便于我们分析晶格缺陷. 在图 19 中的拉伸过程中, 当应变为 0.1064 时, 已观察到一处明显的晶格缺陷; 当应变为 0.1104 时, 可以观察到六处明显的晶格缺陷, 包含畸变的间隙原子团, 微裂纹等, 在畸变原子团的两侧还有晶格错排现象, 发生了少量晶格滑移; 当应变为 0.1352 时, 断裂后晶格收缩应力得以释放, 除断裂处仅有两处明显的损伤没有恢复, 还有两处仅有少量间隙和空位原子组成了点缺陷, 一处的缺陷彻底修复. 此次拉伸过程中, 随着应力的释放晶体局部的缺陷也得以部分修复, 体现了 YAG 晶体有一定的自范性. 图 20 中的近熔点拉伸过程中, 产生缺陷的方式与常温下有所不同 (常温下以垂直于拉伸方向的条状缺陷为主, 贯穿整个截面, 未产生缺陷的区域晶格排列规范), 高温下部分原子受热激活, 在晶面之间形成了一些间隙

原子, 这些间隙原子拉伸过程中不断扩展成间隙原子团, 逐渐偏离正常的晶格结构, 许多个这样的间隙原子团不断扩展组合形成了大范围的晶格缺陷.

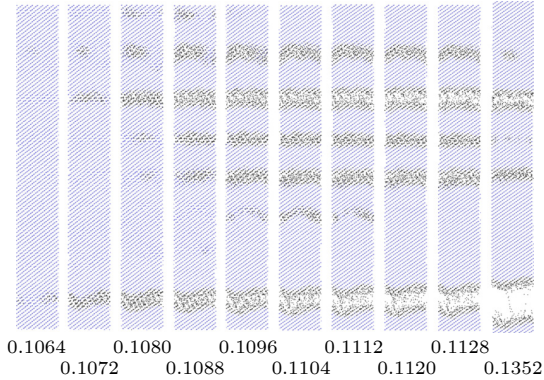


图 19 [111] 晶向 300 K 下纵向拉伸结构演变 (CNA 分析法)
Fig. 19. Structure evolution of [111] crystal at 300 K (CNA analytical method).

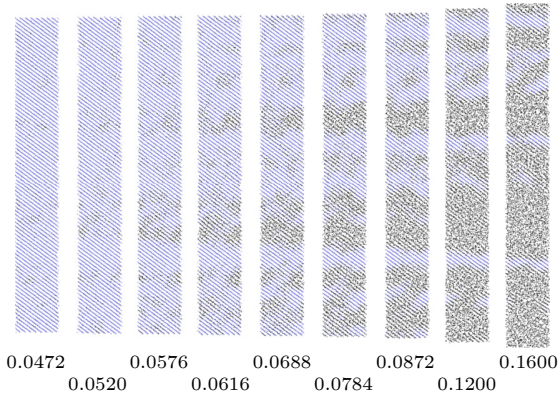


图 20 [111] 晶向 2200 K 下纵向拉伸结构演变 (CNA 分析法)
Fig. 20. Structure evolution of [111] crystal at 2200 K (CNA analytical method).

3.4.2 横向拉伸过程中的缺陷结构演变

为了模拟更大尺度的 YAG 晶体缺陷形貌, 对上述模型进行了横向拉伸, 横向拉伸的力学特性与纵向拉伸一致, 这也验证了纵向拉伸过程中不同晶向力学性质模拟的可靠性. 图 21—图 23 分别展示了不同模型横向拉伸后的缺陷特征. 图 21 为 [100] 晶向 1300 K 下的拉伸形貌, 使用缺陷面分析法识别了拉伸过程中的微孔结构, 如图中绿色面所示. 在整个拉伸过程中未发生断裂, 在应变为 0.1056 时产生了少量微孔, 在此时已经形成了一条连贯的畸变线区域, 随着拉伸的进行, 在这条不规则的畸变线上出现了更多、更大尺寸的微孔, 模型拉伸至应变为 0.16 时并没有产生大范围的开裂现象, 在

这条畸变线上出现了诸多微孔结构, 这些微孔部分相互连接形成了微裂纹, 这对于了解 [100] 晶向高温下的裂纹产生机制有所帮助. 图 22 采用 CNA 分析与应力分析两种方法研究 [110] 晶向 2200 K 下的横向拉伸特征. 从 CNA 的分析结果可以观察到在整个横向拉伸过程中, 由于热激活和拉伸应力作用间隙原子逐渐增多, 畸变区域随着拉伸的进行进一步拓展, 仅有少量区域保留了完整的晶格结构. 在应变云图中体现了拉伸过程中的应变差异, 其中应变越大的区域对应的应力也越大. 通过应力的分布特征也可以推测不同区域的晶格畸变程度, 可以发现晶体的缺陷是在原有缺陷的基础上不断扩展的, 在 2200 K 下未产生微孔与裂纹, 晶体结构

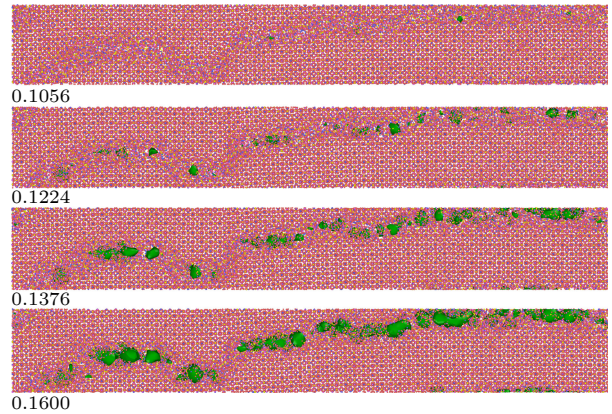


图 21 [100] 晶向 1300 K 下横向拉伸结构演变 (缺陷面分析法)
Fig. 21. Structure evolution of [100] crystal at 1300 K (Defective surface analytical method).

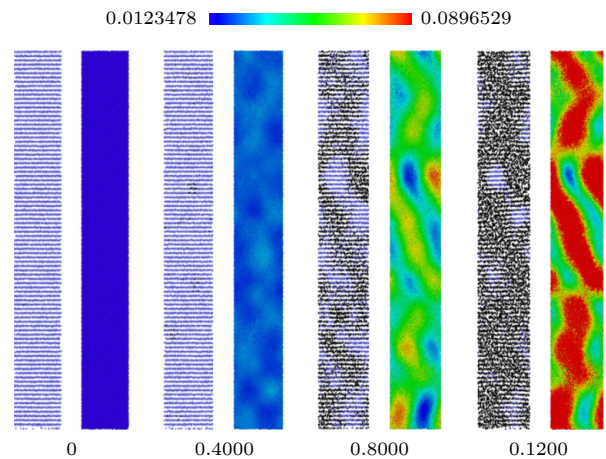


图 22 [110] 晶向 2200 K 下横向拉伸结构演变 (左: CNA 分析, 右: 应变云图)
Fig. 22. Structure evolution of [110] crystal at 2200 K (Left: CNA analysis, right: strain cloud diagram).

被破坏的区域形成了应力集中. 图 23 展示了 [111] 晶向 300 K 横向拉伸应变 0.1591 时的缺陷形貌. 可发现拉伸后出现了数条微裂纹, 这些裂纹处的应力值略高, 裂纹周边的晶体结构还保持完整, 这与高温下大范围的破坏晶格结构有所不同, 低温下仅在裂纹周边的小范围区域出现了无序结构. 图 23 的 CNA 分析中圈出了裂纹边界处形成的小角晶界, 裂纹周边的晶体取向不完全一致. 此外, 在裂纹的两边部分晶格发生了局部错排, 这表明裂纹两侧的晶体结构发生了相对滑移.

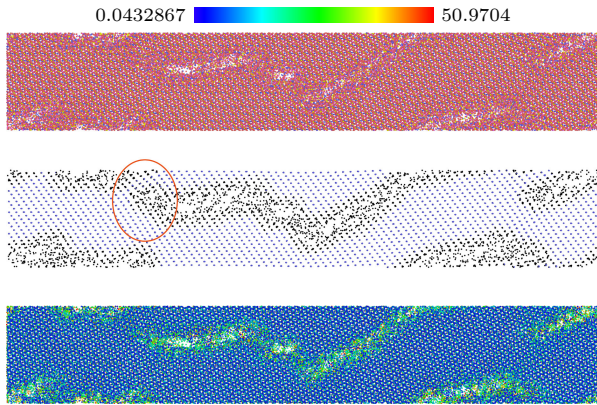


图 23 [111] 晶向 300 K 下横向拉伸结构 (上: 原始结构, 中: CNA 分析, 下: 应变云图)

Fig. 23. Structure evolution of [111] crystal at 300 K (Top: original structure, middle: CNA analysis, bottom: strain cloud diagram).

3.4.3 位错与层错缺陷结构特征分析

YAG 晶体中的位错会降低晶体的光学均匀性, 增大损耗、缩短使用寿命等, 因此生长出无位错或低位错 YAG 晶体对发展高效率固体激光器具有重要意义^[43]. 位错又称差排、错排, 即一种错排的晶格结构, 位错的产生与晶面滑移相关, 图 24 展示了 YAG 晶体中的部分位错结构特征. 位错提取算法 (DXA) 对于金属材料中的位错识别效果良好, 本次的模拟结果也尝试过采用 DXA 算法识别位错结构, 但由于 YAG 的晶体结构更复杂, 位错中心区域呈无序状态, 滑移面的无序原子干扰了位错识别, 因此 DXA 算法在 YAG 晶体中的位错结构识别上效果不好. 这也体现了 YAG 晶体较金属材料变形机制的差异, 在金属材料中发生滑移变形相对容易, 位错中心区域也不会有无序的滑移面, 因此 YAG 晶体的可塑性远差于金属材料. 图 24 展示的位错结构中, 其中心区域均有一个小尺度的无序区域, 正是这个无序区域的两边晶体产生了相对的滑移, 才形成了位错结构. 从位错产生的条件来看, 高温下的晶体力学强度更低, 因此更容易产生滑移, 更容易产生位错.

图 25 展示了 YAG 晶体拉伸过程中产生的层错结构, 此类层错为插入型层错. 如图 25(a) 所示, 原本四层原子面的间距在畸变区域处明显变宽到

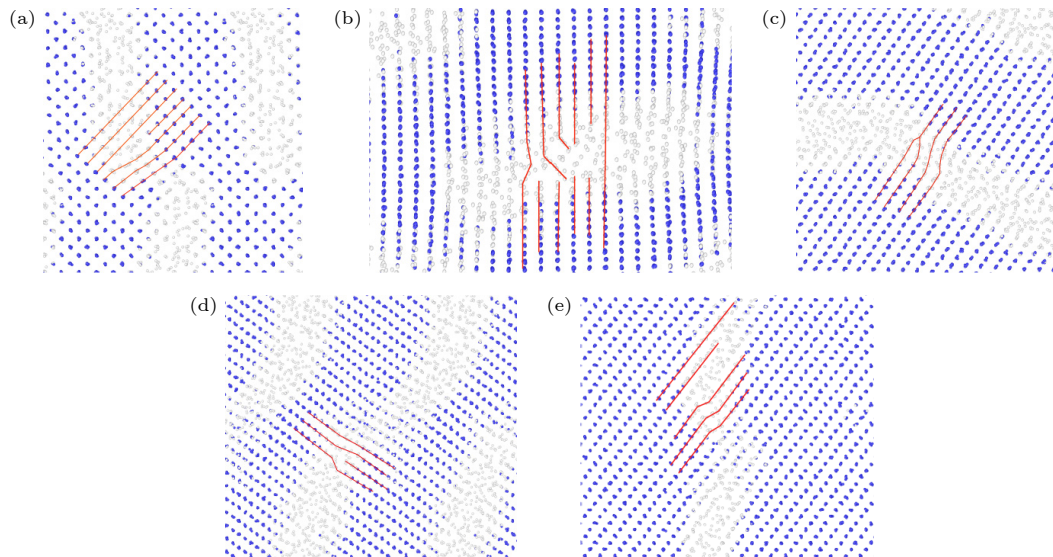


图 24 YAG 晶体中的位错结构 (a) 取自模型 a 横向拉伸 1300 K; (b) 取自模型 b 横向拉伸 800 K; (c) 取自模型 c 横向拉伸 1300 K; (d) 取自模型 c 横向拉伸 1800 K; (e) 取自模型 c 纵向拉伸 1300 K

Fig. 24. Dislocation structure in the YAG crystal: (a) Taken from model a lateral stretch 1300 K; (b) taken from model b lateral stretch 800 K; (c) taken from model c lateral stretch 1300 K; (d) taken from model c lateral stretch 1800 K; (e) taken from model c longitudinal stretch 1300 K.

约五层原子面, 似在中心处又插入了一层原子面, 图 25(b) 中原本五层原子面的距离也发生变形, 其左端相距约六层原子面的间距. 在层错结构中原子层间距发生了明显的改变, 在本次模拟的 YAG 晶体中, 层错产生的原因并非插入了一层原子面, 而是其中的内层原子面某个片段形成了无序结构, 占据了相比有序结构略大一层原子面的间距. 如图 25(a) 所示, 内层的两层原子面局部变形后占据了三层原子面的宽度, 外层的原子面并未被破坏, 但在层错结构附近, 原子层的排列走向为曲线并非直线结构.

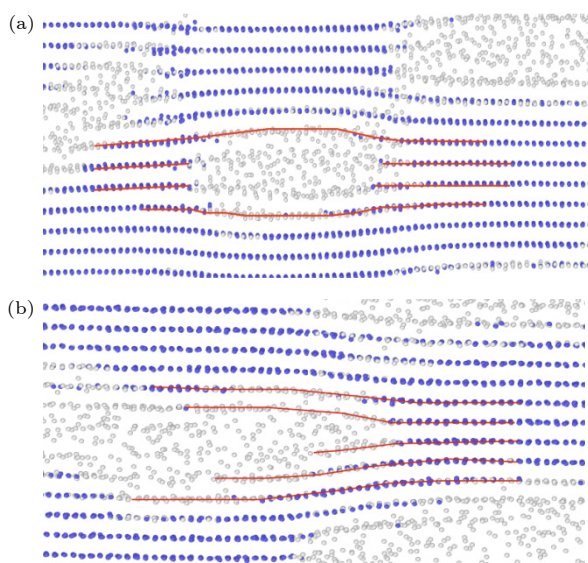


图 25 YAG 晶体中的层错结构 (a) 取自模型 c 横向拉伸 300 K; (b) 取自模型 c 横向拉伸 1300 K

Fig. 25. Stacking fault structure in the YAG crystal: (a) Taken from model c lateral stretch 300 K; (b) taken from model c lateral stretch 1300 K.

4 总 结

研究了 YAG 晶体拉伸过程中应力、弹性模量与能量变化, 从原子层面上展示了拉伸过程中缺陷结构的演变过程, 发现: 1) YAG 晶体的弹性模量存在尺度效应, 随着应变增大呈线性减小. 当应变小于 0.02 时, 不同晶向的弹性模量大小排序为 [100], [110], [111]; 当应变超过 0.05 后, [100] 向的弹性模量降幅最大, 此时不同晶向的弹性模量大小排序为 [110], [111], [100]. 这种现象在纳米压痕实验中也得以证实, 在弹性阶段后期及塑性与脆性阶段中, [110] 晶向的强度最高, 而 [100] 向的强度最低. 2) 温度对 YAG 的力学性质影响明显, 在 1300 K

以下表现为脆性材料, 1800 K 后表现有明显塑性形变区域, 随着温度升高弹性模量显著降低, 力学各向异性逐渐减弱, 更容易被拉断. 在 2200 K 时未被拉断, 在应力增加到 6 GPa 时发生屈服, 随后在塑性拉伸过程中不断延长. 3) YAG 晶体的缺陷是由间隙、空位等点缺陷原子团逐步拓展形成的, 在低温下主要形成微孔、微裂纹等缺陷, 晶体缺陷以脆性演变为主, 缺陷处存在应力集中现象, 大部分区域依旧是非缺陷区域. 在高温下晶体更容易发生相对的晶格滑移, 产生位错与层错缺陷, 位错与层错中心区域均存在小范围畸变的无序结构. 在 2200 K 下晶体塑性变形能力提高, 大范围的晶体结构被破坏, 不易产生微孔与微裂纹缺陷, 不易断裂.

参考文献

- [1] Ma R G, Zhang Q L, Gao J Y, Sun G H, Dou R Q, Han S, Zhang R, Chen Z, Wang X F, Zhang D M, Sun Y, Liu W P 2023 *J. Chin. Ceram. Soc.* **51** 767 (in Chinese) [马荣国, 张庆礼, 高进云, 孙贵花, 窦仁勤, 韩松, 张瑞, 陈照, 王小飞, 张德明, 孙戡, 刘文鹏 2023 *硅酸盐学报* **51** 767]
- [2] Geusic J E, Marcos H M, Van Uitert L G 1964 *Appl. Phys. Lett.* **4** 182
- [3] Shi X T, Zhang Q L, Sun G H, Luo J Q, Dou R Q, Wang X F, Gao J Y, Zhang D M, Liu J D, Ye B J 2023 *J. Inorg. Mater.* **38** 316 (in Chinese) [石小兔, 张庆礼, 孙贵花, 罗建乔, 窦仁勤, 王小飞, 高进云, 张德明, 刘建党, 叶邦角 2023 *无机材料学报* **38** 316]
- [4] ZHOU T 2022 *Ph. D. Dissertation* (Changchun: Changchun University of Science and Technology) (in Chinese) [周陶 2022 博士学位论文 (长春: 长春理工大学)]
- [5] Li C Q 2008 *Ph. D. Dissertation* (Harbin: Harbin Institute of Technology) (in Chinese) [李长青 2008 博士学位论文 (哈尔滨: 哈尔滨工业大学)]
- [6] Voort G V, Yaghoubi M R 2017 *Crystals* **7** 321
- [7] Sun J 2021 *Ph. D. Dissertation* (Dalian: Dalian University of Technology) (in Chinese) [孙佳 2021 博士学位论文 (大连: 大连理工大学)]
- [8] Zhang J C, Yang F, Chang Y X, Du G Y, Jiang W Q 2022 *J. Plast. Eng.* **29** 175 (in Chinese) [张靖晨, 杨帆, 常筠袖, 杜广煜, 姜文全 2022 *塑性工程学报* **29** 175]
- [9] Xu Z, Wang X X, Liang H Y, Wu H A 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 3637 (in Chinese) [徐洲, 王秀喜, 梁海弋, 吴恒安 2004 *物理学报* **53** 3637]
- [10] Gong X Y, Chen B, Wu W P 2020 *Chin. J. Solid Mech.* **41** 231 (in Chinese) [巩晓雨, 陈斌, 吴文平 2020 *固体力学学报* **41** 231]
- [11] Lu M, Yu D H, Liu C J 2017 *J. Sichuan Univ. Nat. Sci. Ed.* **54** 147 (in Chinese) [卢敏, 余冬海, 刘长菊 2017 *四川大学学报自然科学版* **54** 147]
- [12] Zhao J W, Li R, Cheng N, Hou J 2018 *Sci. Sin. Technol.* **48** 143 (in Chinese) [赵健伟, 李韧, 程娜, 侯进 2018 *中国科学: 技术科学* **48** 143]
- [13] Hu Y X, Shuang S Y, Wang B, Zhang X, Zhang X 2020

- Chin. J. Solid Mech.* **41** 109 (in Chinese) [胡远啸, 双思垚, 王冰, 张燮, 张旭 2020 固体力学学报 **41** 109]
- [14] Liang H, Li M S 2019 *Chin. J. Comput. Phys.* **36** 211 (in Chinese) [梁华, 李茂生 2019 计算物理 **36** 211]
- [15] Ma B, Rao Q H, He Y H, Wang S L 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 176103 (in Chinese) [马彬, 饶秋华, 贺跃辉, 王世良 2013 物理学报 **62** 176103]
- [16] Zhang S Y, Jiang G P, MUKHTAR A, Wu K M 2024 *J. At. Mol. Phys.* **41** 026006 (in Chinese) [张诗雨, 蒋更平, AIMAN Mukhtar, 吴开明 2024 原子与分子物理学报 **41** 026006]
- [17] Ye T Z, Yao H, Wu Y W, Zhang J, Wang M J, Chen P, Tian W X, Qiu S Z, Su G H 2023 *Rare Met. Mater. Eng.* **52** 777 (in Chinese) [叶天舟, 姚欢, 巫英伟, 章静, 王明军, 陈平, 田文喜, 秋穗正, 苏光辉 2023 稀有金属材料与工程 **52** 777]
- [18] Li J, Guo X X, Ma S G, Li Z Q, Xin H 2021 *Chin. J. High Press. Phys.* **34** 011301 (in Chinese) [李健, 郭晓璇, 马胜国, 李志强, 辛浩 2021 高压物理学报 **34** 011301]
- [19] Kou P P, Feng R C, Li H Y, Li L L, Wang M M, Qi Y N 2021 *Mater. Rep.* **35** 10114 (in Chinese) [寇佩佩, 冯瑞成, 李海燕, 李龙龙, 王茂茂, 祁永年 2021 材料导报 **35** 10114]
- [20] Huang D, Zhang Q, Zhuo J S 2006 *Chin. J. Solid Mech.* **27** 187 (in Chinese) [黄丹, 章青, 卓家寿 2006 固体力学学报 **27** 187]
- [21] Han Z P, Yuan L, Shan D B, Guo B 2006 *J. Harbin Inst. Technol.* **38** 1677 (in Chinese) [韩志萍, 袁林, 单德彬, 郭斌 2006 哈尔滨工业大学学报 **38** 1677]
- [22] Wang J L, Shen H J 2010 *J. At. Mol. Phys.* **27** 1157 (in Chinese) [王继亮, 沈海军 2010 原子与分子物理学报 **27** 1157]
- [23] Han T W, He P F, Wang J, Zheng B L 2009 *J. Mater. Res.* **23** 337 (in Chinese) [韩同伟, 贺鹏飞, 王健, 郑百林 2009 材料研究学报 **23** 337]
- [24] Lu W J, Bao H W, Tang F L, Cai H M, Rui Z Y, Zhu L 2015 *J. Lanzhou Univ. Technol.* **41** 15 (in Chinese) [路文江, 包宏伟, 汤富领, 蔡后敏, 芮执元, 朱亮 2015 兰州理工大学学报 **41** 15]
- [25] Yin Z J, Su R, Fang C Z, Li M, Hu H C 2023 *J. Nanyang Norm. Univ.* **22** 29 (in Chinese) [尹宗军, 苏蓉, 方传智, 李梦, 胡汉春 2023 南阳师范学院学报 **22** 29]
- [26] Lu H Q, Zhang J Q, Fan J H 2011 *Chin. J. Solid Mech.* **32** 433 (in Chinese) [鲁红权, 张俊乾, 范镜泓 2011 固体力学学报 **32** 433]
- [27] Chen L, Liu H, Yu L 2006 *J. Xi'an Jiaotong Univ.* **40** 101 (in Chinese) [陈丽, 刘恒, 虞烈 2006 西安交通大学学报 **40** 101]
- [28] Tao W M, Huang D, Guo Y M, Lou T J 2005 *J. Zhejiang Univ. Eng. Sci.* **39** 1265 (in Chinese) [陶伟明, 黄丹, 郭乙木, 楼铁炯 2005 浙江大学学报工学版 **39** 1265]
- [29] Carda J, Tena M A, Monros G, Esteve V, Reventos M M, Amigo J M 1994 *Cryst. Res. Technol.* **29** 387
- [30] Yuan Q M 2022 *M. S. Thesis* (Ganzhou: Jiangxi University of Science and Technology) (in Chinese) [袁秋明 2022 硕士学位论文 (赣州: 江西理工大学)]
- [31] Stukowski A 2009 *Model Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 015012
- [32] Plimpton S 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [33] Lu J, Yang S, Rong Z, Pan G, Ding J, Liu S, Wang W 2021 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **228** 111130
- [34] Goel P, Mittal R, Choudhury N 2010 *J. Phys. Condens. Matter.* **22** 065401
- [35] Cheng Q 2010 *Ph. D. Dissertation* (Hefei: University of Science and Technology of China) (in Chinese) [成琴 2010 博士学位论文 (合肥: 中国科学技术大学)]
- [36] Weng S B, Chen J J, Zhou J Q, Lin X L 2021 *Surf. Technol.* **50** 216 (in Chinese) [翁盛彬, 陈晶晶, 周建强, 林晓亮 2021 表面技术 **50** 216]
- [37] Oliver W C, Pharr G M 1992 *J. Mater. Res.* **7** 1564
- [38] Gorev B V E, Lyubashevskaya I V, Panamarev V A, Iyavoyne S V 2014 *J. Appl. Mech. Tech. Phys.* **55** 1020
- [39] Ma R, Zhang Q, Zhang R, Gao J, Sun G, Dou R, Liu W 2023 *Cryst. Res. Technol.* **58** 2300091
- [40] Zhang R, Mei D J, Shi X T, Zhang Q L, Ma R G, Zhang J R, Dou R Q, Sun G H, Wang X F, Zhang D M, Gao J Y 2023 *J. Chin. Ceram. Soc.* **51** 1396 (in Chinese) [张瑞, 梅大江, 石小兔, 张庆礼, 马荣国, 张俊蕊, 窦仁勤, 孙贵花, 王小飞, 张德明, 高进云 2023 硅酸盐学报 **51** 1396]
- [41] Stukowski A 2012 *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **20** 045021
- [42] Stukowski A, Bulatov V V, Arsenlis A 2012 *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **20** 085007
- [43] Zhang R, Mei D J, Shi X T, Ma R G, Zhang Q L, Dou R Q, Liu W P 2022 *Chin. J. Quantum Electron.* **39** 687 (in Chinese) [张瑞, 梅大江, 石小兔, 马荣国, 张庆礼, 窦仁勤, 刘文鹏 2022 量子电子学报 **39** 687]

Various-temperature tensile and defect evolution of YAG crystal*

ZHANG Rui¹⁾²⁾ ZHANG Qingli^{1)2)†} MA Rongguo¹⁾²⁾ SUN Guihua¹⁾²⁾
DOU Renqin¹⁾²⁾ WANG Xiaofei¹⁾²⁾ LIU Wenpeng¹⁾²⁾

¹⁾ (Key Laboratory of Photonic Devices and Materials, Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics,

Hefei Institutes of Physical Science, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China)

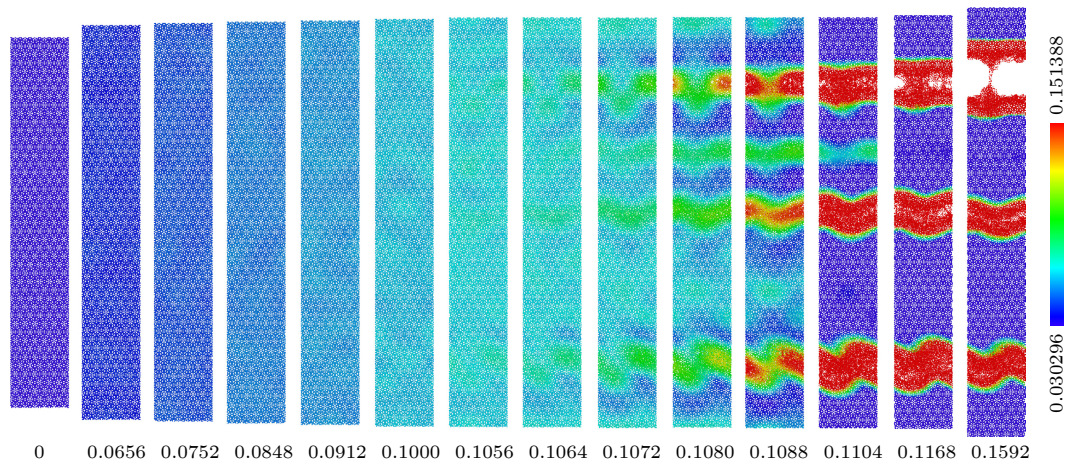
²⁾ (University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

(Received 31 January 2026; revised manuscript received 17 February 2026)

Abstract

Yttrium aluminum garnet (YAG) crystal is an important laser host material. Its atomic-scale mechanical characteristics and defect generation mechanism are of great significance for the growth of high-quality large-size crystals. In this study, the tensile mechanical properties, energy characteristics and the evolution

mechanism of defect structure of [111], [110] and [100] crystal orientations from 300 to 2200 K are revealed by molecular dynamics simulation. It is found that YAG exhibits typical brittle material characteristics at room temperature. The mechanical properties of YAG crystal are anisotropic. The simulation confirms that the elastic modulus of YAG has a significant strain-dependent effect. When the strain is less than 0.02, the order of elastic modulus is $[100] > [110] > [111]$. When the strain exceeds 0.05, [100] orientation has the largest decrease in elastic modulus, and the order changes to $[110] > [111] > [100]$. This phenomenon is verified by nanoindentation experiments, which also indicates that the [110] crystal orientation has the highest tensile strength. The simulation results further show that the mechanical properties of YAG are significantly affected by temperature. It shows typical brittle fracture characteristics below 1300 K, and a very narrow plastic deformation zone appears at 1800 K. At 2200 K, YAG exhibits continuous plastic deformation after reaching a yield stress of 6 GPa. With increasing temperature, the elastic modulus decreases, and the mechanical anisotropy weakens or disappears. Based on the stress-strain curves, the empirical formulas describing the variation of fracture strain, ultimate stress, and fracture energy of YAG with temperature are provided. The defect evolution characteristics of YAG vary with temperatures. Under tensile deformation, YAG crystals form defects such as micropores and microcracks. At elevated temperatures, lattice slip becomes more pronounced, leading to the formation of dislocations and stacking faults. Near the melting point, plastic deformation is likely to produce extensive disordered glassy structure. This study provides an atomic-scale theoretical basis for optimizing the YAG crystal growth process. It has guiding significance for large-size, high-quality YAG crystal optical elements.



Keywords: yttrium aluminum garnet crystal, molecular dynamics, stress-strain, defect, dislocation

DOI: [10.7498/aps.75.20260179](https://doi.org/10.7498/aps.75.20260179)

CSTR: [32037.14.aps.75.20260179](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20260179)

* Project supported by the National Key R&D program of China (Grant Nos. 23YFB3507403, 2023YFB3507401), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 52272011), and the Youth Innovation Promotion Association of CAS (Grant No. 2023463).

† Corresponding author. E-mail: zql@aiofm.ac.cn



YAG晶体的高温拉伸及缺陷演变

张瑞 张庆礼 马荣国 孙贵华 窦仁勤 王小飞 刘文鹏

Various-temperature tensile and defect evolution of YAG crystal

ZHANG Rui ZHANG Qingli MA Rongguo SUN Guihua DOU Renqin WANG Xiaofei LIU Wenpeng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 120302 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20260179

CSTR: 32037.14.aps.75.20260179

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20260179>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

镁中位错和非晶作用机制的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of mechanism of interaction between dislocation and amorphism in magnesium

物理学报. 2022, 71(14): 143101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212318>

GaAs晶体在不同应变下生长过程的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulations of GaAs crystal growth under different strains

物理学报. 2023, 72(13): 136801 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221860>

缺陷对铁单质薄膜磁致伸缩与磁矩演化的影响

Effect of defects on magnetostriction and magnetic moment evolution of iron thin films

物理学报. 2022, 71(1): 017502 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211177>

低活化马氏体钢中位错对氦辐照缺陷的影响

Effect of dislocation on helium irradiation defects in low-activation martensitic steel

物理学报. 2023, 72(18): 187801 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230694>

碳化硅中点缺陷对热传导性能影响的分子动力学研究

Molecular dynamics study of effects of point defects on thermal conductivity in cubic silicon carbide

物理学报. 2022, 71(3): 036501 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211434>

三模晶体相场法研究应变诱导石墨烯晶界位错演化

Strain induced dislocation evolution at graphene grain boundary by three-mode phase-field crystal method

物理学报. 2024, 73(24): 248101 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20241368>