

bcc Fe 中刃型位错的结构及能量学研究*

陈丽群^{1)†} 王崇愚^{1)‡,B)} 于 涛¹⁾

1) 钢铁研究总院功能材料研究所, 北京 100081)

2) 清华大学物理系, 北京 100084)

3) 中国科学院国际材料物理中心, 沈阳 110016)

(2006 年 2 月 20 日收到, 2006 年 4 月 25 日收到修改稿)

基于位错理论, 利用分子动力学方法建立了 $100\{010\}$, $100\{011\}$, $1/2\ 111\{011\}$ 和 $1/2\ 111\{112\}$ 刃型位错的芯结构, 并计算了这四种刃型位错的形成能、位错芯能量和芯半径. 计算结果表明: $100\{010\}$ 和 $100\{011\}$ 刃型位错的形成能比 $1/2\ 111\{011\}$ 和 $1/2\ 111\{112\}$ 刃型位错的要高, 这表明 100 刃型位错比 $1/2\ 111$ 刃型位错更难形成. 而 $100\{010\}$ 和 $100\{011\}$ 刃型位错的芯半径比 $1/2\ 111\{011\}$ 和 $1/2\ 111\{112\}$ 刃型位错的小, 这说明在 $1/2\ 111$ 刃型位错中位于奇异区的原子数多于 100 刃型位错, 而这些原子要比完整晶体中的原子具有更大的活性. 可见, $1/2\ 111$ 刃型位错比 100 刃型位错更易运动, 且 100 刃型位错在 bcc Fe 中难以形成.

关键词: bcc Fe, 刃型位错, 分子动力学模拟

PACC: 6155F, 6170G, 6185

1. 引 言

材料性质并非是一成不变地依赖于材料的化学组分, 在很大程度上还取决于材料的微结构. 例如, 材料的力学性质、电磁学性质等, 从定量上弄清楚材料的宏观性能与其微观结构之间的关系, 一直是材料科学的一个主要目标. 要实现这一目标, 必须确定和描述对材料宏观性质有重要作用的晶格缺陷, 以及晶格缺陷的静态和动态特性.

位错是材料中普遍存在而又重要的一种结构缺陷. 它与材料的力学性能(强度、脆性、断裂等), 化学行为(偏聚、氧化、腐蚀及掺杂效应)以及光电特性(运输、电导及吸波效应等)密切相关. 十多年来, 研究发现位错明显与材料的塑性有关^[1,2], 因此越来越多的研究集中在它的结构上. 2000 年 Hirth^[3]报道了目前研究位错理论的热点问题, 其中就有位错芯结构, 这说明了位错芯结构的研究正是目前材料科学研究的重要主题之一.

1960 年, Hirsch^[4,5]提出了 bcc 金属中螺位错的芯结构, 这一芯结构不仅合理地解释了由于大的 Peierls 应力而造成流变应力对温度有很强的依赖性

的原因, 而且解释了当考虑位错芯的本征不对称性后, 滑移几何结构和复杂取向的依赖性问题. 这一芯模型的成功提出, 为螺位错原子结构的研究提供了可靠的基础.

1967 年, Bullough 和 Perrin^[6]采用第二类 Johnson^[7]势及固定边界条件, 研究了 bcc Fe 中 $a\ 100$ 刃型位错. 经充分弛豫后得到了(010)平面的刃型位错原子结构. 模拟结果发现: 位错非常窄, 弛豫主要发生在滑移面下的张应力区, 在靠近位错的下方存在微裂缝. Gehlen, Rosenfield 和 Hahn^[8]用同样的势进行了与 Bullough 和 Perrin 相似的计算, 详细地探讨了固定边界条件及不同势的选择对位错芯结构计算的影响, 给出了位错芯的特征尺度, 即 bcc Fe 中 $a\ 100$ 刃型位错芯的半径在 $1.25\text{--}1.65$ Burgers 矢量之间, 有效孔半径为 1.8\AA , 每个原子平面的芯能在 $0.47\text{--}0.65\text{eV}$ 范围内. 另外, 他们指出, 在 bcc Fe 中, 势及边界条件的选择和模型的大小对位错芯的位移和宽度的计算影响不大, 而对芯能量的计算影响则较大. Chang 和 Graham^[9]用非简谐势研究了 bcc Fe 中 $\{110\}$ 滑移面上的 $1/2\ 111$ 刃型位错, 得到位错芯半径大约为 5\AA , 沿位错线上每个相等距离(大约 6 个原子平面)上的芯能为 2.7eV . 1980 年, Masuda 等

* 国家重点基础研究发展规划项目(批准号 2006CB605102)和国家自然科学基金(批准号 90306016 和 901041044)资助的课题.

† E-mail: clqun123@sohu.com

人^[10]用紧束缚电子理论研究了 bcc Fe 中 $1/2\ 111\ \{110\}$ 和 $1/2\ 111\ \{112\}$ 刃型位错的芯结构和芯能量. 结果表明, 电子效应在位错芯的研究中是很重要的, 远不能被忽略. Yan 等人^[11, 12]对 bcc Fe 中 $100\ \{010\}$ 刃型位错的电子结构及掺杂效应进行了研究.

对位错的研究一般是针对某一种位错类型的结构及性质进行的, 而对于材料中可能存在的各种位错类型进行全面系统的研究, 在文献中很少有报道. 本文利用分子动力学(MD)方法对 bcc Fe 中 $100\ \{010\}$, $100\ \{011\}$, $1/2\ 111\ \{011\}$ 和 $1/2\ 111\ \{112\}$ 四种刃型位错的芯结构和芯能量进行了全面系统的研究, 并比较了不同类型位错形成的难易程度和滑移特性.

2. 模拟方法

MD 方法^[13]被广泛应用于材料科学中的微观尺度的计算机模拟. 随着计算技术的发展, MD 方法及技术也随之发展, 并在材料的静态和动态模拟中得到了广泛应用^[14-16]. 本文分子动力学模拟过程采用 Gear 预测-修正算法^[17], 这种方法可分为三步: 根据 Taylor 展开式, 预测新的位置, 速度和加速度; 根据新的位置计算得到的力, 进而计算加速度 $a(t + \delta t)$; 这加速度再与由 Taylor 级数展开式预测的加速度 $a^0(t + \delta t)$ 进行比较. 这种算法对于较小的或一般的时间步长而言具有相当高的精度. 在我们的模

拟中, 时间步长取 5×10^{-15} s, 温度 $T = 0$ K. 原子间相互作用势采用 Finnis-Sinclair(F-S)势^[18, 19], 它是为过渡金属建立的半经验多体势, 能有效地模拟过渡金属中缺陷体系的结构, 如位错、晶界及裂纹等^[11, 20, 21].

在 F-S 势的作用下, 用 MD 方法弛豫位错初始结构, 当体系总能达到最小值时, 就认为体系的平衡构型已获得.

3. 结果与讨论

3.1. 位错芯结构

利用弹性应力场理论^[22], 分别建立了 $100\ \{010\}$, $100\ \{011\}$, $1/2\ 111\ \{011\}$ 和 $1/2\ 111\ \{112\}$ 刃型位错的初始结构. 基于位错应力场的长程效应及弛豫过程中边界条件的影响, 应选取合适的初始模型尺寸. 早期的研究表明^[23], 在垂直位错线方向, 晶体大小至少取 30×30 个原子, 位错芯的一些性质如结构、Peierls 应力等不会受到固定边界条件的影响. 按照这个标准, 我们选取的模型包含 290000—510000 个原子, 且在 Burgers 矢量方向取 50 个重复单元(X 轴), 在滑移面的法线方向取 30 个重复单元(Y 轴), 位错线方向取 51 个重复单元(Z 轴). 相关的结构信息列于表 1.

使用 MD 方法弛豫上述四种位错类型的初始构

表 1 结构信息

位错体系	$100\ \{010\}$	$100\ \{011\}$	$1/2\ 111\ \{011\}$	$1/2\ 111\ \{112\}$
原子数	291660	304950	501792	452150
Burgers 矢量的大小	a_0	a_0	$\frac{\sqrt{3}}{2}a_0$	$\frac{\sqrt{3}}{2}a_0$
沿位错线方向的重复距离	a_0	$\sqrt{2}a_0$	$\sqrt{6}a_0$	$\sqrt{2}a_0$

型. 在弛豫过程中, 固定边界条件加在与位错线垂直的两个方向上, 位错线方向应用周期性边界条件. 弛豫后得到这四种位错类型的平衡结构, $100\ \{010\}$ 和 $100\ \{011\}$ 刃型位错都具有 C_{2v} 的对称性, $1/2\ 111\ \{011\}$ 刃型位错有 C_2 的对称性, 而 $1/2\ 111\ \{112\}$ 刃型位错无对称性. 在垂直位错轴方向上, $100\ \{010\}$ 刃型位错有两个不等价的(001)原子面(分别称作 A 和 B), 同样, $100\ \{011\}$ 和 $1/2\ 111\ \{112\}$ 刃型位错也有两个不等价的(011)原子面(分别称作 A 和 B), 而 $1/2\ 111\ \{011\}$ 刃型位错有六个不等价的(112)原子面(分别称作 A, B, C, D, E 和

F), 即 $100\ \{010\}$, $100\ \{011\}$, $1/2\ 111\ \{011\}$ 和 $1/2\ 111\ \{112\}$ 刃型位错, 沿位错线方向的堆垛顺序分别是 $AB, AB, ABCDEF$ 和 AB . 这四种刃型位错的原子构型如图 1 所示, 图 1 为 X - Y 平面图, 且沿位错线方向仅画出一个堆垛结构单元.

从图 1 可以看出, 滑移面(虚线所示)上半部分比下半部分多出了一列原子, 这正是刃型位错的特征. 很明显, 位错芯区的原子构型不同于完整晶体, 位错的引入使其结构发生改变, 很可能导致材料的性质发生较大的变化. 我们模拟得到的 $100\ \{010\}$ 刃型位错的结构与早期的研究结果^[6-8]相一

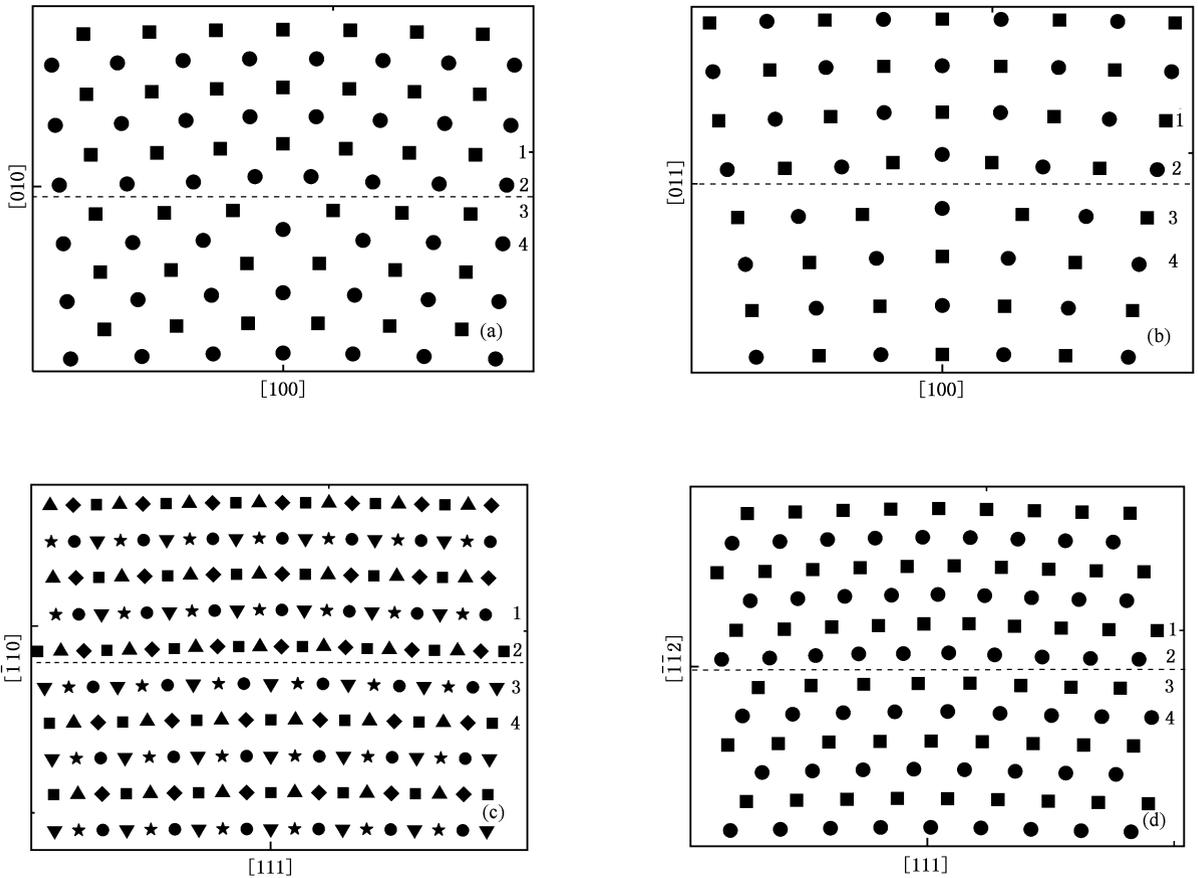


图1 位错体系弛豫后在 X - Y 平面上的原子构型(正方形、圆形、正三角形、倒三角形、菱形及五角星符号分别表示堆垛原子面 A, B, C, D, E, F 上的原子,虚线表示滑移面)(a) $100 \{010\}$ 刃型位错 (b) $100 \{011\}$ 刃型位错 (c) $1/2 111 \{011\}$ 刃型位错 (d) $1/2 111 \{112\}$ 刃型位错(图中 1 2 3 4 表示滑移面上、下原子层标号)

致,这表明 F-S 势对模拟 bcc Fe 体系的位错结构是有效的.

3.2. 芯能量和芯半径

能量分析对理解原子的键合特征和材料的力学性质是很重要的. 缺陷的形成能在确定缺陷的存在概率及相对稳定性方面是一个很重要的参数. 对于

包含位错的体系,其位错形成能定义为该体系的结合能与相应完整晶体体系的结合能之差. 位错长度为 a_0 (晶格常数)的这四种刃型位错形成能计算结果列于表 2. 从表 2 可以看到, $1/2 111 \{011\}$ 刃型位错的形成能最小,说明这种位错最容易形成,其次是 $1/2 111 \{112\}$ 刃型位错,而 $100 \{010\}$ 和 $100 \{011\}$ 这二种刃型位错相对来说较难形成.

表 2 位错芯能量、芯半径及相关参数计算结果

	$100 \{010\}$	$100 \{011\}$	$1/2 111 \{011\}$	$1/2 111 \{112\}$
位错芯能量/eV	0.71	1.17	0.47	0.70
	$0.47-0.65^{81}$		$0.45^{91} 0.75^{101}$	0.75^{101}
位错形成能/eV	1.65	1.81	1.42	1.45
位错芯半径/ b	1.67	1.71	2.64	2.85
	$1.25-1.67^{81}$		$2.0^{91} 5.0^{101}$	5.0^{101}
$r_0/\text{Å}$	1.58	1.47	1.31	1.32
k/eV	1.30	1.34	0.87	0.89

我们还计算了这四种刃型位错的芯能量和芯半径. 对于沿位错线每重复单元, 刃型位错的能量可写为^[8]

$$W = k \ln\left(\frac{R}{r_c}\right) + E_{\text{core}}, \quad (1)$$

其中 r_c 为芯半径, R 是以位错线为轴的圆柱体的外半径, k 是仅依赖于位错构型和材料弹性性质的一个常量, E_{core} 为芯能量. 在各向异性弹性体中, k 定义为

$$k = \frac{b^3}{4\pi} (c_{11} + c_{12}) \frac{c_{44}(c_{11} - c_{12})}{c_{11}(c_{11} + c_{12} + 2c_{44})^2}. \quad (2)$$

按照方程(2), 基于 bcc Fe 弹性常数^[18] $C_{11} = 2.431 \times$

10^{11} Pa, $C_{12} = 1.3811 \times 10^{11}$ Pa, $C_{44} = 1.2191 \times 10^{11}$ Pa, 计算出 bcc Fe 中, 100 和 1/2 111 刃型位错的 k 值分别为 1.29eV 和 0.84eV. 如果

$$E_{\text{core}} = k \ln\left(\frac{r_c}{r_0}\right), \quad (3)$$

那么(8)式可重写为

$$W = k \ln\left(\frac{R}{r_0}\right), \quad (4)$$

r_0 为有效孔半径.

通过做 $W-R$ 图, 可计算出 r_c, k, r_0 . 再利用(3)式可计算出芯能量. $W-R$ 关系曲线如图 2 所示. 从图 2 计算的芯半径 r_c, k, r_0 及通过(3)式计算

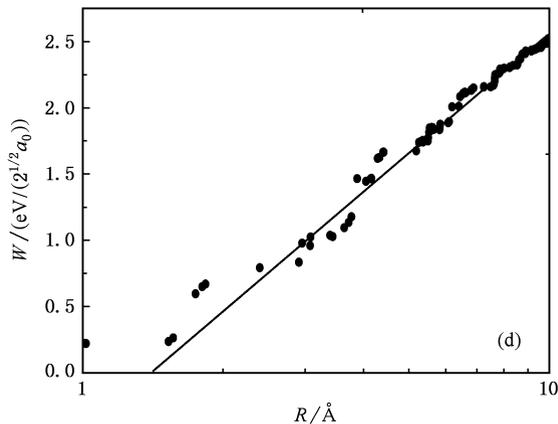
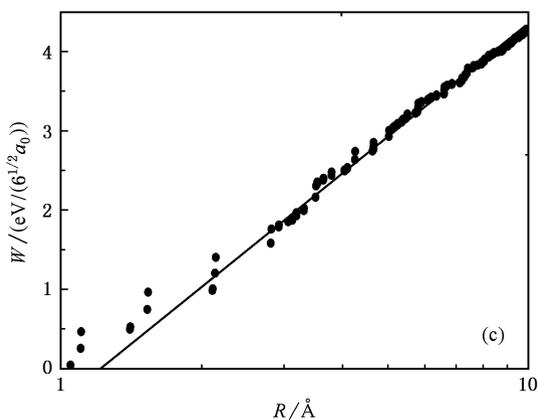
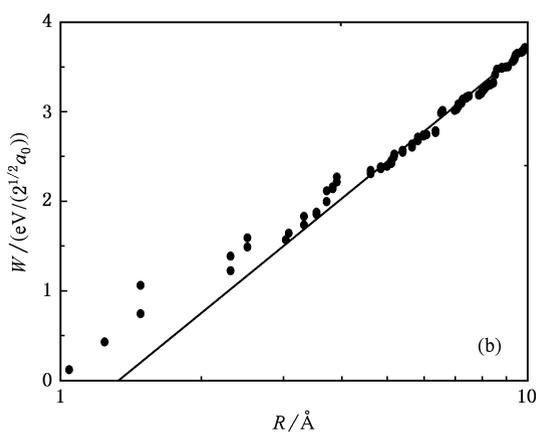
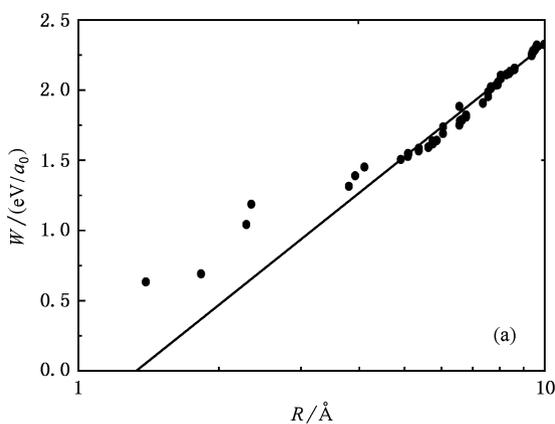


图 2 位错能量 W 与离位错线的径向距离 R 的关系曲线 (a) 100 {010} 刃型位错 (b) 100 {011} 刃型位错 (c) 1/2 111 {011} 刃型位错; (d) 1/2 111 {112} 刃型位错

出每原子平面的芯能量列于表 2. 为了比较, 其他作者的研究结果也列于同一表中. k 值与利用方程(2)计算的理論值非常一致. 因 k 对弛豫过程中使用的势函数很敏感, 这也说明 F-S 势能够有效地模拟 bcc

Fe 中的位错结构. 从表 2 可以看到, 100 {010} 和 100 {011} 刃型位错的芯半径比 1/2 111 {011} 和 1/2 111 {112} 刃型位错的芯半径小. 根据 Peierls 应力^[24]表达式

$$\tau_p = \frac{2\mu}{(1-\nu)} \exp(-2\pi\xi/b), \quad (5)$$

其中 τ_p 是 Peierls 应力, ν 为泊松比, μ 为弹性模量, ξ 为位错半宽度, 表明 Peierls 应力随位错宽度的增加而指数减小, 由此可见 $1/2 \ 111 \ \{011\}$ 和 $1/2 \ 111 \ \{112\}$ 刃型位错比 $100 \ \{010\}$ 和 $100 \ \{011\}$ 刃型位错更容易运动. 这与电子显微镜下观察的结果相一致^[24].

Masuda 等人^[10]用紧束缚方法得到的 $1/2 \ 111 \ \{011\}$ 和 $1/2 \ 111 \ \{112\}$ 刃型位错的芯半径达到 $5b$, 比我们及其他作者的研究结果大许多. 这可能与位错的电子效应有关, 我们也正在研究这个问题——位错的电子结构.

通过 MD 模拟计算, 可以获得每个原子的格位能 E_s . 将图 1 中标出的滑移面上下 1 2 3 4 行原子的格位能与沿 Burgers 矢量方向原子的 X 坐标之间

的关系示于图 3. 如果允许有 0.04eV 的能量变化 (在文献[8]中, 确定位错芯半径时, 能量变化为 0.2eV), 从图 3 中计算的位错芯半径与表 2 中的结果相一致. 可见, 刃型位错应力场对 Burgers 矢量方向原子的影响要大于滑移面的法线方向. 从图 3 看出, 滑移面上被压缩原子的能量要高于滑移面下膨胀部分原子的能量. 这是合理的, 因被压缩原子之间的相互作用要大于膨胀部分的原子. 此外, 除 $100 \ \{011\}$ 和 $1/2 \ 111 \ \{112\}$ 刃型位错芯中极少数原子的格位能低于完整晶体外, 其余原子及 $100 \ \{010\}$ 和 $1/2 \ 111 \ \{011\}$ 刃型位错芯中所有原子的格位能都高于完整晶体. 这证实了芯区原子是位于能量较高的奇异区, 如果有外场 (如外应力场, 温度场等) 影响时, 芯区原子就会优先运动, 即位错的运动. 同时, 图 3(a)(b)(c) 具有对称性, 而 (d) 没有对称性, 这与位错芯结构的对称性是一致的.

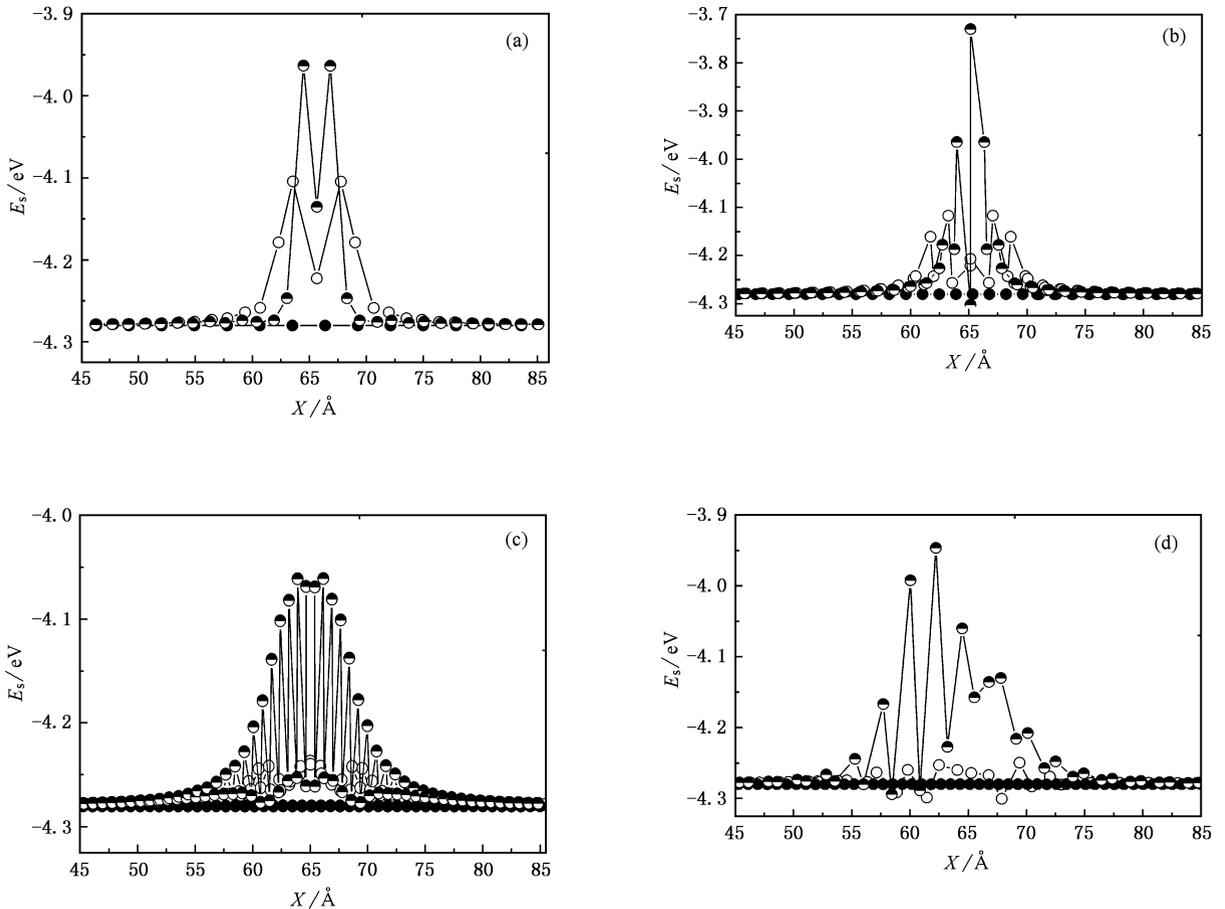


图 3 原子格位能 E_s 与沿 Burgers 矢量方向原子的 X 坐标之间的关系曲线 (实心圆表示完整晶体中的原子, 半实心圆和空心圆分别表示图 1 所示的滑移面以上 1 2 和滑移面以下 3 4 行原子) (a) $100 \ \{010\}$ 刃型位错 (b) $100 \ \{011\}$ 刃型位错 (c) $1/2 \ 111 \ \{011\}$ 刃型位错 (d) $1/2 \ 111 \ \{112\}$ 刃型位错

4. 结 论

本文利用 MD 方法模拟计算出了 $100\{010\}$, $100\{011\}$, $1/2\ 111\{011\}$ 和 $1/2\ 111\{112\}$ 刃型位错的结构、形成能、位错芯能量和芯半径. $100\{010\}$ 和 $100\{011\}$ 位错芯结构有 C_{2v} 的对称性, 沿位错线方向分别有两个不等价的 (001) 和 (011) 原子面; $1/2\ 111\{011\}$ 刃型位错的芯结构有 C_2 的对称性, 沿位错线方向有六个不等价的 (112) 原子面; $1/2\ 111\{112\}$ 刃型位错的芯结构没有对称性, 沿位错线方向有两个不等价的 (011) 原子面. 位错芯结构、

芯能量及芯半径与早期作者的研究结果相一致, 这说明我们的模拟是可靠有效的. $100\{010\}$ 和 $100\{011\}$ 刃型位错的形成能比 $1/2\ 111\{011\}$ 和 $1/2\ 111\{112\}$ 刃型位错的要高, 这说明前二者比后二者更难形成. 而 $100\{010\}$ 和 $100\{011\}$ 刃型位错的芯半径比 $1/2\ 111\{011\}$ 和 $1/2\ 111\{112\}$ 刃型位错的小, 这说明在 $1/2\ 111$ 刃型位错中位于奇异区的原子数多于 100 刃型位错, 而这些原子要比完整晶体中的原子具有更大的活性. 可见, $1/2\ 111$ 刃型位错比 100 刃型位错更易运动, 且 100 刃型位错在 bcc Fe 中难以形成.

-
- [1] Duesbery M S, Vitek V 1998 *Acta Mater* **46** 1481
- [2] Vitek V 1975 *Crystal Lattice Defects* **5** 1
- [3] Hirth J P 2000 *Acta Mater* **48** 93
- [4] Hirsch P C 1960 *Fifth Int. Conf. Crystallography* (Cambridge) p139
- [5] Mitchell T E, Foxall R A, Hirsch P B 1963 *Phil. Mag.* **8** 1895
- [6] Bullough R, Perrin R C 1967 *Rept. Theoret. Phys. Div.* (AERR Harwell, Didcot Berks) p175
- [7] Johnson R A 1964 *Phys. Rev. A* **134** 1329
- [8] Gehlen P C, Rosenfield A R, Hahn G T 1968 *J. Apply. Phys.* **39** 5246
- [9] Chang R, Graham L T 1966 *Phys. Status Solid* **18** 99
- [10] Masuda K, Obayashi K K, Sato A, Mori T 1981 *Phil. Mag. B* **43** 19
- [11] Niu Y, Wang S Y, Zhao D L, Wang C Y 2001 *J. Phys. : Condens. Matter* **13** 4267
- [12] Yan J A, Wang C Y, Duan W H, Wang S Y 2004 *Phys. Rev. B* **69** 214110
- [13] Allen M P, Tildesley D J 1987 *Computer Simulation of Liquids* (New York : Oxford University Press) p83
- [14] Geng C Y, Wang C Y, Yu T 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 1323 (in Chinese) [耿翠玉、王崇愚、于 涛 2005 物理学报 **54** 1323]
- [15] Zheng L B, Wang C Y 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 5274 (in Chinese) [郑立宝、王崇愚 2005 物理学报 **54** 5274]
- [16] Zhang H, Wu H Y, Chen Y Y, Cheng X L 2006 *Chinese Phys.* **15** 428
- [17] Gear C W 1971 *Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equation* (New Jersey : Prentice-Hall) p1—54
- [18] Finnis M W, Sinclair J E 1984 *Phil. Mag. A* **50** 45
- [19] Finnis M W, Sinclair J E 1986 *Phil. Mag. A* **53** 161
- [20] Shang J X, Wang C Y 2002 *Phys. Rev. B* **66** 184105
- [21] Guo Y F, Wang C Y, Wang Y S 2004 *Phil. Mag. Lett.* **84** 763
- [22] Hirth J P, Lothe J 1968 *Theory of Dislocations* (New York : McGraw-Hill) p186
- [23] Basinski Z S, Duesbury M S 1981 *Dislocation Modelling of Physical Systems* (Oxford) p273
- [24] Yu Z S, Tian Z Z 1996 *Metal Physics* (Metallurgical Industry Press) p119—142 (in Chinese) [余宗森、田中卓 1996 金属物理 (冶金工业出版社) p119—142]

Investigation of structure and energy of edge dislocation in bcc iron^{*}

Chen Li-Qun^{1)†} Wang Chong-Yu¹⁾²⁾³⁾ Yu Tao¹⁾

1) *Institute of Functional Materials, Central Iron and Steel Research Institute, Beijing 100081, China*

2) *Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China*

3) *International Center for Materials Physics, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016, China*

(Received 20 February 2006; revised manuscript received 25 April 2006)

Abstract

Based on the theory of dislocations, we have constructed the four models of the $100\{010\}$, $100\{011\}$, $1/2\ 111\{011\}$ and $1/2\ 111\{112\}$ edge dislocations in bcc Fe using the molecular dynamics method, and the formation energy, core energy and core radius of the dislocations have been calculated respectively. The calculated results indicated that the formation energies of $100\{010\}$ and $100\{011\}$ edge dislocations are higher than those of $1/2\ 111\{011\}$ and $1/2\ 111\{112\}$ edge dislocations. This shows that the formation of $1/2\ 111$ edge dislocation is easier than that of 100 edge dislocation. However, the core radii of $100\{010\}$ and $100\{011\}$ edge dislocations are smaller than those of $1/2\ 111\{011\}$ and $1/2\ 111\{112\}$ edge dislocations. This shows that the atomic numbers locating at the singular region in the $1/2\ 111$ edge dislocation are greater than those in 100 edge dislocation. Therefore, the motion of $1/2\ 111$ edge dislocation is easier than that of 100 edge dislocation.

Keywords : bcc Fe, edge dislocation, molecular dynamics simulation

PACC : 6155F, 6170G, 6185

^{*} Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 2006CB605102), and the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 90306016 and 901041044).

[†] Corresponding author. E-mail : clqun123 @sohu.com