

有限温度下位错环的脱体现象*

卢 果¹⁾ 方步青²⁾ 张广财^{1)†} 许爱国³⁾

1) 中国工程物理研究院研究生部, 北京 100088)

2) 中国矿业大学, 北京 100083)

3) 北京应用物理与计算数学研究所实验室, 北京 100088)

(2009 年 3 月 11 日收到, 2009 年 3 月 17 日收到修改稿)

在 FCC 单晶铜中构造了滑移面为(111), 伯格矢量为 $b = [\bar{1}12]b/6$ 的圆形不完全位错环. 采用分子动力学方法模拟了该位错环在 0—350 K 温度区间内的自收缩过程. 模拟结果发现: 零温度下, 位错不能跨越 Peierls-Nabarro 势垒运动, 迁移速度为 0; 50 K 温度下, 螺型和刃型位错具有基本相同的迁移速度, 随温度增加, 刃型位错具有较大迁移速度; 温度较高时, 位错核宽度进一步增加; 小位错环周围的局部应力, 引起 4 个脱体位错环; 脱体位错环在原位错的应力作用下逐渐生长, 原位错消失后, 在自相互作用下收缩消失. 这是与 Frank-Read, L 型、双交滑位错源(冷的, 应力引起的)不同的新位错源机理(热激发机理); 温度进一步提高时, 新位错产生区域的局部应力梯度更大, 脱体位错更早出现.

关键词: 单晶铜, 位错环, 分子动力学, 位错源

PACC: 7340S, 7210F, 8715H

1. 引言

金属塑性变形的载体是位错. 在理论研究和实验观察中发现, 位错的产生、演化及位错之间的相互作用决定金属材料的塑性性质. 金属弹塑性本构关系的建立依赖于对位错运动演化微观本构的认识. 在一些特殊情况下, 比如对材料断裂损伤、晶体界面的滑移、纳米尺度材料塑性变形的研究中, 必须考虑位错的产生、迁移与温度、压力等物理环境的关系. 在塑性变形的介观描述——位错动力学模拟中也需要建立位错的微观本构关系.

分子动力学可以在原子层次上模拟金属微观力学过程, 建立合适的金属原子间作用势之后可以真实地模拟金属塑性变形过程中位错的产生、迁移过程. 分子动力学模拟不仅为位错动力学提供了所需的位错迁移应力阈值、位错迁移速度、位错反应条件、位错与沉积物相互作用等微观本构及参数, 而且成功揭示了位错许多新的动力学性质, 如刃型位错对空位团簇的吸收等^[1].

Jaime Marian 等人模拟研究了在循环剪切应力

加载和释放条件下铝中纳米空洞的变形过程, 发现应力加载条件下, 空洞发生塌缩并伴随位错的增殖与湮没; 应力释放条件下, 空洞体积通过吸收周围位错环等方式逐渐长大, 但释放过程最终将在空洞周围形成残余位错结构^[2]. 杨其利等人研究了冲击条件下金属铜中纳米空洞的塌缩过程, 发现空洞的塌缩机理与空洞的大小有关, 但形成位错源的位置与空洞的大小无关^[3]. Xu 等人用物质点方法研究了冲击加载条件下空洞的性质^[4,5]以及多空材料在冲击加载下的拓扑特征^[6]. Kiran Solanki 等人研究了 fcc 金属铜和镍中空洞塌缩时伴随的局域化非弹性流以及裂纹产生过程^[7]. Jae-Hyeok Shim 等人研究了 bcc 铁中 He 原子和自间隙原子位错环之间的相互作用, 发现了 He 原子对位错环迁移和位错环之间结合过程的阻碍^[8]. 方步青等人研究了不同大小和形状的 Frank 位错环生长成各种类层错四面体的过程^[9]. Peter Szelestey 等人研究了 fcc 镍单晶中螺型位错和 SFIC(层错四面体)的相互作用^[10].

以上的工作主要研究直线型位错、空洞、沉淀相、Frank 位错环和层错四面体等晶体缺陷结构及其之间的相互作用. 鲜有涉及位错的自相互作用和迁

* 国家自然科学基金(批准号: 10702010 和 10775018), 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

移性质及其与温度的关系。

位错在自相互作用下的力学行为以及位错迁移与温度的关系是错动力学建模的基础.自然产生的位错结构复杂,往往是许多位错环交织在一起不利于研究位错环的单纯性质.位错自相互作用力在直线型位错中没有明显表现.温度对位错的迁移速度有明显的影响,在一般研究中温度的加入会影响位错的识别,相关研究比较少。

我们用分子动力学的方法研究了有限温度下孤立位错环在自相互作用下的收缩过程.采用位错的连续介质理论构造了圆形位错环,通过准静态弛豫过程产生稳定的位错原子分布.利用键对分析技术识别位错和层错的原子结构.发现了位错环迁移速度随温度变化的规律,同时观察到小位错环周围的热激发位错源现象。

2. 模拟方法和相互作用势

分子动力学研究材料的性质优势在于可以在原子层次追踪材料性质演化过程的细节.分子动力学方法模拟金属材料的性质主要在于选择合适的原子间相互作用势,我们的模拟过程中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)^[11],

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

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^[3],根据此势函数计算得到金属铜的平衡晶体常数 $a = 0.3615 \text{ nm}$, 弹性常数 $C_{11} = 1.672 \times 10^{11} \text{ Pa}$, $C_{12} = 1.210 \times 10^{11} \text{ Pa}$, $C_{44} = 0.764 \times 10^{11} \text{ Pa}$, 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,势函数能很好的反映完整晶体和含缺陷晶体中原子间相互作用。

局部应力采用维里定理计算,对上述 EAM 势有

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

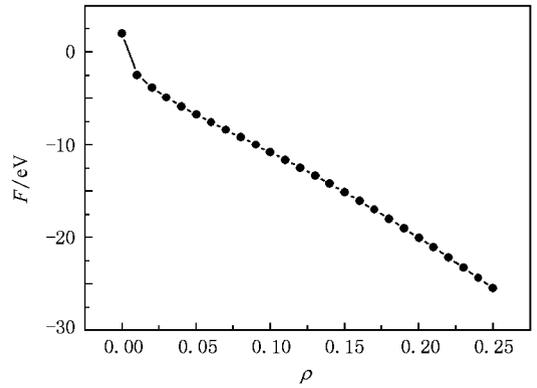


图 1 镶嵌能和电子云密度关系图

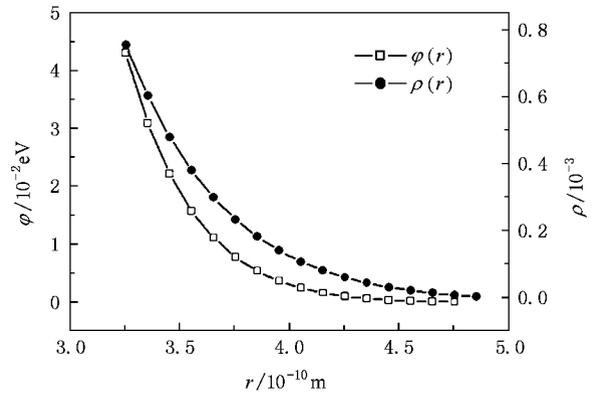


图 2 对势及电子云密度和原子间距关系图

$$+ F'_l(\rho_l) \rho'(|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m|) |\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_m| \}, \quad (2)$$

其中 ΔV 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 \mathbf{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 \mathbf{r}_m 的 i 和 j 分量, l 和 m 是此区域中的原子标号。

3. 模型构造

分子动力学方法研究位错和各种缺陷结构的相互作用,关键在于合理构造出包含位错和其他缺陷结构的原子空间分布模型,同时在模拟过程中准确识别这些缺陷结构.由于位错周围原子排布的复杂性,目前构造的位错主要限于直线型位错和 Frank 位错环. Rodney 等人通过删除晶体内部以 $[110]_2$ 为法向的某半原子面的方法构造出刃型全位错^[12-14], 随后他们选取晶体中部的某密堆面(法向为 $[111]$) 为位错滑移面,通过平移被该滑移面分成上下两部分的晶体构造了螺形全位错^[15,16]. 方步青等人通过

挖去某密堆积面上的特定原子集团构造了各种不同大小和形状的空位型 Frank 位错环(本征 Frank 位错环),研究了零温下 Frank 位错环演化成类层错四面体的过程^[9].

位错不仅有直线型和 Frank 位错环两种类型,普遍的位错可以具有任意形状和任意 Burgers 矢量(对于实际晶体而言,位错环形状和 Burgers 矢量受晶格结构限制).对于稍微复杂的位错结构,例如可滑移的 Burgers 矢量为 $b = [\bar{1}12]/6$ 的不完全位错环结构,仅仅通过删添原子或整体平移的方法构造是难以实现的.曲线位错的性质对于认识位错动力学性质有关键作用,比如 Frank-Read 位错源产生的位错曲线形状就反映位错自相互作用的强度,通过受阻碍的位错线的临界形状可以计算位错挣脱阻碍的

临界应力.

基于连续介质位错理论,利用 Burgers 公式^[17],我们提出了一种比较通用的构造位错原子空间分布的方法,应用该方法可以方便的构造出各种位错结构,包括直线型刃位错、直线型螺位错和可滑移位错环等.本文基于该方法,在单晶铜中构造出可滑移的 Burgers 矢量为 $b = [\bar{1}12]/6$ 的不完全位错环结构,运用分子动力学方法研究了有限温度下不全位错环的自收缩,发现了不同类型位错的迁移速度和温度的关系,以及温度高于 150 K 时原位错环自收缩过程中新脱体位错的产生现象,分析并解释了脱体位错产生的原因.

选择晶格常数 $a = 3.615$ 的 fcc 单晶铜为模拟介质.完整 fcc 单晶铜计算模型的 x, y 和 z 坐标轴分

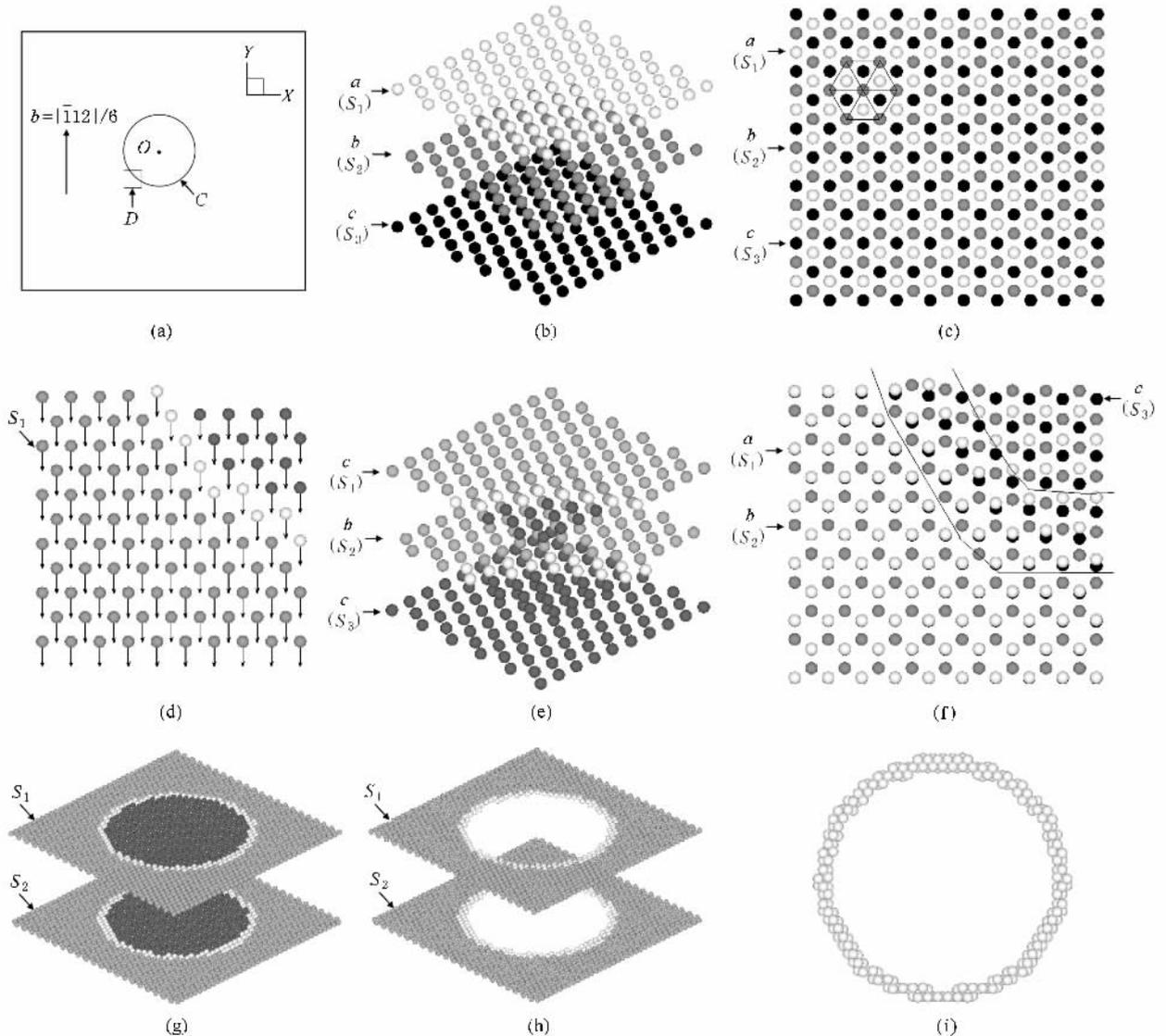


图3 位错环构造图

别沿 $[\bar{1}10]$ $[\bar{1}12]$ 和 $[111]$ 晶向,对应的各方向尺寸为 204.495 \AA 221.373 \AA 187.841 \AA ,共 720000 个原子.应用基于连续介质位错理论的位错原子分布构造方法在 fcc 单晶铜中构造 Burgers 矢量为 $b = [\bar{1}12]/6$ 的圆环形不完全位错.

首先构造完整的 fcc 晶格结构,然后取位错滑移面为平面 $z = 94.965 \text{ \AA}$ (位于密排面 $z = 93.921 \text{ \AA}$ 和 $z = 96.008 \text{ \AA}$ 中间),位错环中心点取 $O(102.247, 110.686, 94.965) \text{ \AA}$,位错环半径为 30.674 \AA (以正 32 边形代替圆形),Burgers 矢量为 $b = [\bar{1}12]/6$,最后计算每个原子的塑性位移并加上原子的原始坐标得出新原子坐标,这些新的原子空间分布就是具有圆环状不全位错的晶体构型,如图 3(i)所示.图 3(a)中示意了位错环在滑移面的位置,图中的大矩形为滑移面,小矩形 D 为图 3(b) 3(c), 3(d), 3(e) 和 3(f) 在图 3(a)中的对应部分;图 3(b)是完整 fcc 晶体中包含位错环滑移面的连续三层密堆积面 S_1 , S_2 和 S_3 ,分别记为 fcc 晶体的 a , b 和 c 面,其中滑移面位于 S_1 和 S_2 面中间;图 3(c)是沿 z 轴负方向俯视图 3(b),其中白色原子为 a 面,灰色原子为 b 面,黑色原子为 c 面,图中容易看出三层原子呈 fcc 堆积分布;图 3(d)中给出了 S_1 面原子对应的塑性位移(向下黑色箭头所示);结合图 3(e)和图 3(f)可以看出,各层原子做相应的塑性位移后就形成了包含 Burgers 矢量为 $b = [\bar{1}12]/6$ 的不完全位错环结构,图 3(f)中两条曲线中间部分为位错原子,左下部分为 hcp 堆积结构,右上部分为 fcc 堆积结构;图 3(g) 图 3(h)和图 3(i)分别给出了含 S_1 和 S_2 面所有原子的原子空间分布、含层错和位错结构的原子空间分布和位错原子空间分布.

按照分子动力学后处理方法检测出的缺陷原子分布,可以判读分析出滑移面上位错线周围是层错排布,具有典型的六方密堆积结构,配位数与 fcc 完整晶体的配位数相同,而位错线附近的原子则随位错线切线方向不同而有差别,原因是不同线段的位错线性质不同,平行 Burgers 矢量的位错段对应螺型位错段,而垂直 Burgers 矢量的位错段对应刃型位错段,其余部分则是混合型,其原子空间分布是不同的.

按照这种方式构造的原子分布在位错环曲线内部(此处考虑的位错环在同一平面内部)的上下两层原子的位移是连续的,在位错环外部的上下两层原子的位移则有一定的跃变.

采用该方式构造的初始位错构型不包含各原子

的弹性位移部分,同时位错核部分的塑性位移也并不准确.考虑在位错线附近的原子空间分布主要取决于原子间的相互作用势,由于对应不匹配的原子空间分布,原子间作用较强,具有较大的回复力,可以通过弛豫过程很快地回复.弹性位移部分是相对小量,分子动力学模拟中可以通过低温弛豫,使初始处于弹性不平衡状态下的原子通过原子间相互作用回复到弹性平衡位置.文中所有模型的初始构型都进行了 10 ps 的准静态弛豫.

我们选用 LAMMPS 程序,分别模拟了位错环在温度为 $0, 50, 100, 150, 200, 250, 300$ 和 350 K 时的自收缩过程.为模拟材料的体性质,在 x, y 和 z 三个方向均采用周期性边界条件.模拟过程分两步:1)零温下初始构型弛豫过程,采用 NVE 系统,时间步长 0.0001 ps ,运行 100000 步,共弛豫 10 ps ;2)目标温度下弛豫后构型的自收缩过程,采用 NVT 系统(0 温下除外,仍然采用 NVE 系统),时间步长调整为 0.001 ps ,运行 3000 步,每隔 0.02 ps 输出原子位置、能量和应力,通过后处理程序根据原子的配位数和连接结构区分 fcc 晶体中的规则原子和缺陷原子,比较不同时刻位错线的位置根据惠更斯原理可以计算得到位错线段的速度大小和方向.

4. 模拟结果分析

4.1. 零温下的结果

零温下,Burgers 矢量为 $b = [\bar{1}12]/6$ 不全位错环,经过时间步长为 0.0001 ps 共 10 ps 的弛豫,各原子通过微小的位移调整回复局部平衡位置.对弛豫后的构型,时间步长变为 0.001 ps ,模拟运行 10 ps ,如图 4 结果显示位错环原子保持弛豫后的整体空间分布不发生自收缩.金属铜的冷能为 -3.54 eV ,由于位错核区域的原子能量高于其他原子,我们将 2 ps 时原子能量大于 -3.52 eV 的原子视为位错核区域原子,可以得出位错核原子排布,在图 5(a)中可以看出白色部分的原子能量最高(约为 -3.463 eV),黑色部分的原子能量最低(约为 -3.519 eV).图 5(a)和图 5(b)中的原子都位于与滑移面相邻的两层密堆积面 S_1 和 S_2 上(见图 3(b)),其中图 5(a)中上半部分的原子在 S_1 面上,下半部分原子在 S_2 面上;图 5(b)是图 5(i)标识上能量的俯视图,结合图 5(a)和图 5(b)可以看出,位错核区域的能量高于

晶体冷能,且在刃型位错部分滑移面相邻两密堆积面上原子的能量有较大的梯度,螺型部分能量梯度较小.能量识别方式识别的位错结构具有较大的位

错核半径,键对识别方式识别的位错结构则更接近几何圆形,零温下位错环保持圆形不收缩是因为零温下原子的热涨落不足以克服 Peierls-Nabarro 势垒.

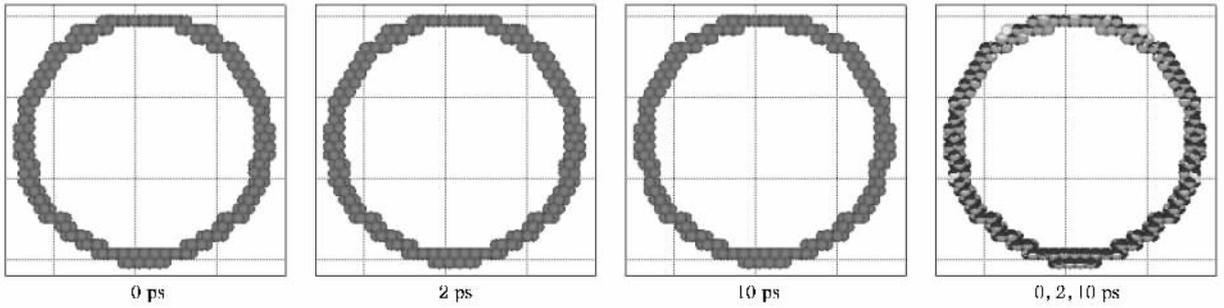


图 4 0 K 时位错环的演化图((d) 中黑、灰、白分别代表 0 ps、2 ps、10 ps 时刻的位错环原子)

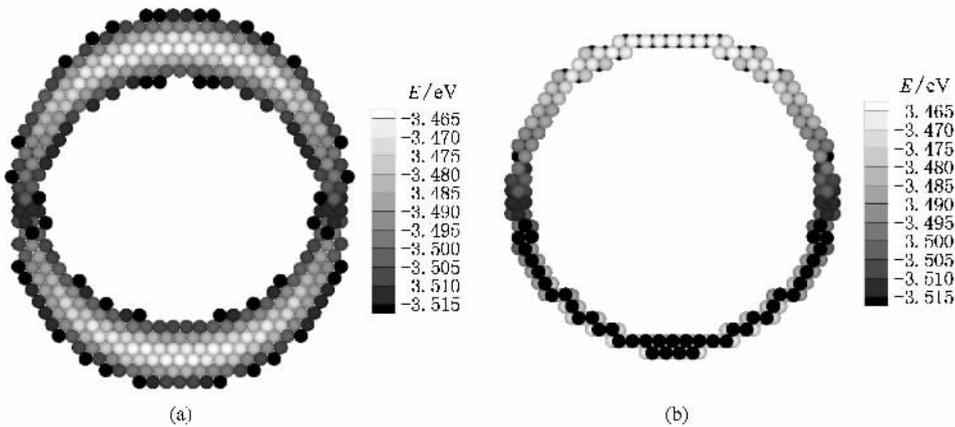


图 5 2 ps 时(a)能量识别方法和(b)键对识别方法识别的位错环结构

4.2. 位错迁移速度和温度的关系

分析对比 0 K、50 K、100 K 下不全位错的收缩过程.图 6 和图 8 中(a)(d)的位错线段属于螺型位错段,上下的位错线段属于刃型位错段.0 K 时位错环各部分不发生迁移,所有各类型的位错线段迁移速度都为 0,50 K 时位错环收缩过程如图 6,分别给出

了 0 ps、0.2 ps 和 0.46 ps 时刻位错原子空间分布,位错环刃型部分和螺型部分迁移速度随时间的变化如图 7,刃型位错部分和螺型部分的平均迁移速度分别约为 3.12 nm/ps 和 3.28 nm/ps(平均迁移速度不包括迁移速度急剧上升部分),迁移速度基本相等,使得位错环保持圆环状收缩;100 K 时位错环收缩过程如图 8,分别给出了 0 ps、0.24 ps 和 0.46 ps 时

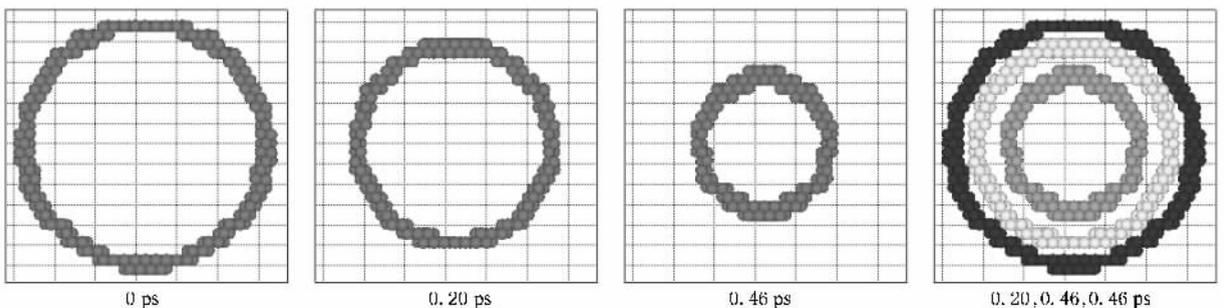


图 6 50 K 时位错环的演化图((d) 中的黑、白、灰原子分别代表 0 ps、0.20 ps、0.46 ps 时刻的位错环)

刻位错原子空间分布,位错环刃型部分和螺型部分迁移速度随时间的变化如图 9,刃型位错部分和螺型部分的平均迁移速度分别约为 5.04 nm/ps 和 4.03 nm/ps,螺型位错部分迁移速度小于刃型部分使得在演化过程中位错环形状脱离圆形经扁椭圆形逐渐收缩消失.低温下(50 K)刃型位错和螺型位错的迁移速度随温度变化不显著,具有几乎相等的迁移速度,当温度升高时(100 K),刃型部分的迁移速度大于螺型的主要是因为温度对刃型位错的迁移速度具有更大影响——假设位错迁移速度的增加和温度成正比,比例系数为 k ,那么刃型位错 $k = 0.038$ (nm/ps·K),螺型位错为 $k = 0.015$ (nm/ps·K).

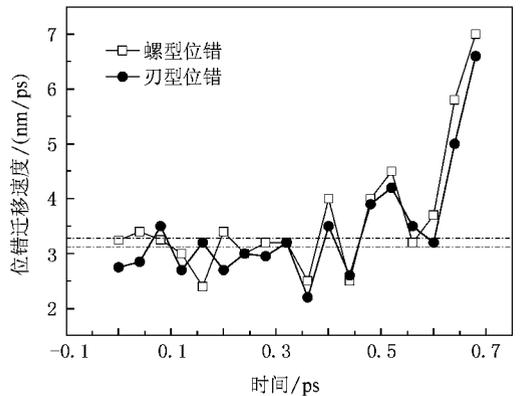


图 7 50 K 时位错环刃型部分和螺型部分迁移速度随时间演化图

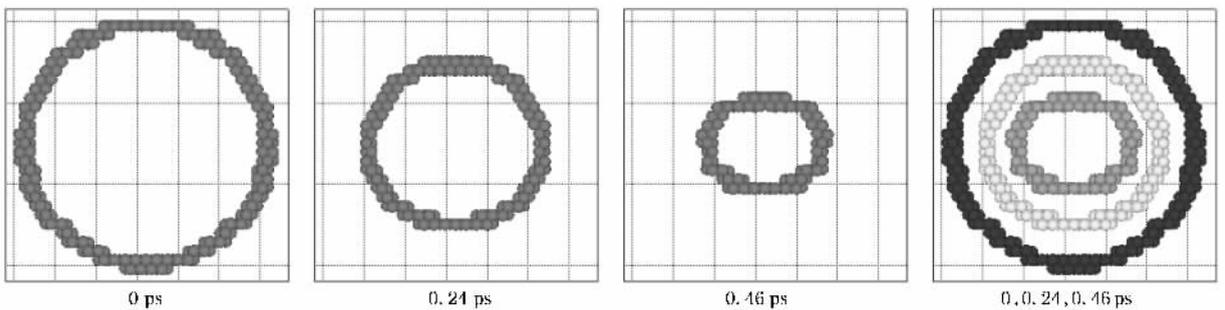


图 8 100 K 时位错环的演化图((d)中的黑、白、灰原子分别代表 0 ps、0.24 ps、0.46 ps 时刻的位错环)

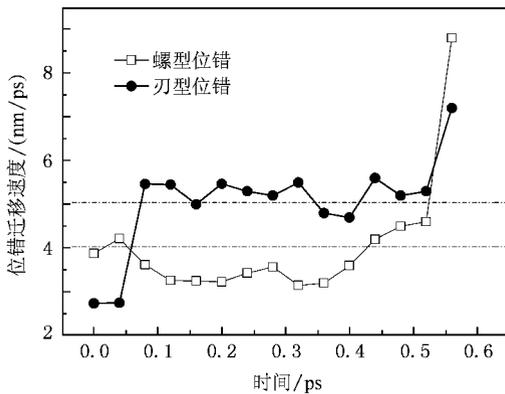


图 9 100 K 时位错环刃型部分和螺型部分迁移速度随时间演化图

环形位错的每一位错线段在其他位错线段形成的应力场作用下(表现为与各自对位的位错线段间相互吸引)及线段自相互作用(表现为线张力)下逐步收缩.由于位错线曲率逐渐增大,自相互作用逐渐增强,位错环表现为加速收缩的趋势,见图 8 和图 9.

4.3. 脱体位错的产生和原因

4.3.1. 脱体位错的产生与演化过程

模拟温度在 150 K 到 350 K 时位错环的自收缩

过程伴随脱体位错的产生和自收缩.图 10 是 150 K 温度下位错环的收缩过程.开始阶段刃型位错收缩速度较大,位错环由圆形演变为椭圆.原位错环收缩到 0.48 ps 时,在环外混合型位错线段部分附近的层错面上分别同时出现四个对称分布的不全位错段(脱体位错),Burgers 矢量为 $b = [\bar{1}12]b/6$,脱体位错随时间推移逐渐增大随后收缩消失,温度进一步升高时,脱体产生的四个位错段逐渐生长成不全位错环并随时间长大最后自收缩消失.图 11 和图 12 是 250 K 和 350 K 时位错环的收缩过程演化图.

在脱体位错长大过程中,靠近原位错的脱体位错段具有较大的生长率,另一侧的位错段基本不生长.这是因为新产生的靠近原位错的位错段和原位错段 Burgers 矢量相反(见图 13(c)),距离很近,具有很强的吸引力,随着原位错环的收缩脱体位错环逐渐长大.在原位错环消失之后,原位错段的吸引作用随之消失,脱体位错在自相互作用下逐渐收缩消失.温度较大的情况下,脱体位错环的形状偏离圆形较大是因为每段位错受力不均衡.脱体位错除受原位错作用之外,当彼此距离接近时相互之间也有较强的吸引力,如图 12 中脱体位错环在 0.64 ps 时变成

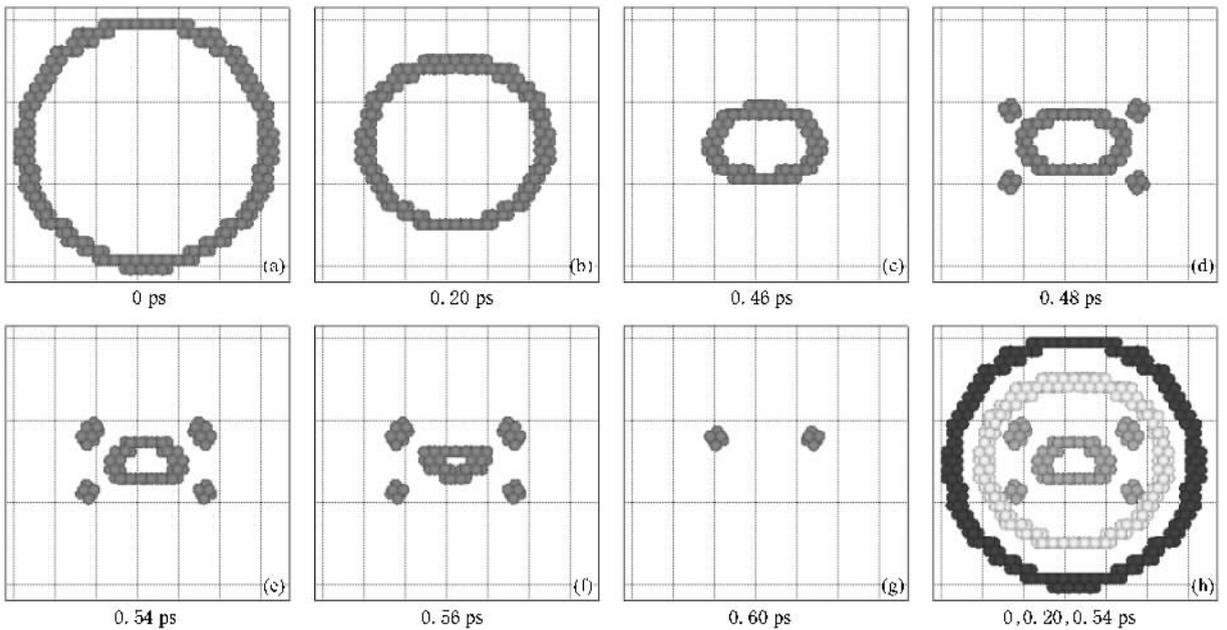


图 10 150 K 时位错环的演化图((h) 中的黑、白、灰原子分别代表 0 ps、0.20 ps、0.54 ps 时刻的位错环)

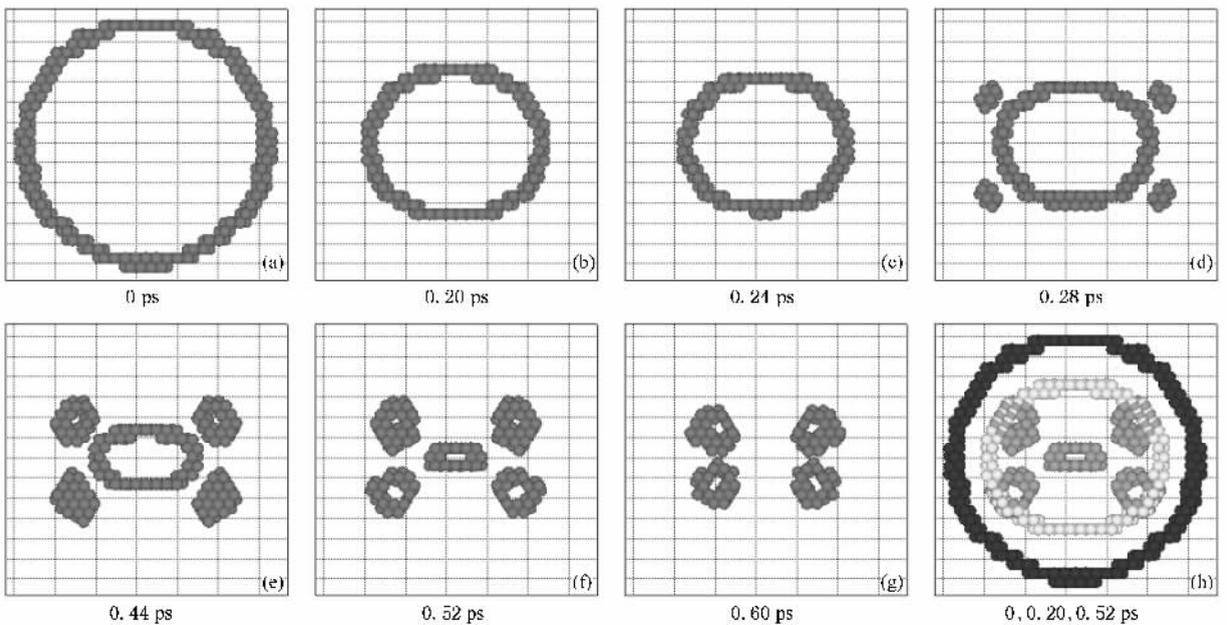


图 11 250 K 时位错环的演化图((h) 中的黑、白、灰原子分别代表 0 ps、0.20 ps、0.52 ps 时刻的位错环)

蝴蝶形。

由于单晶铜是 fcc 结构, 受其晶格结构限制, 不全位错环收缩到较小的时候接近六边形。对比 150—350 K 时位错环的收缩和脱体位错产生的过程, 可以分解成图 13 所示的原位错环收缩、双脱体不全位错段产生、脱体位错环的生长以及脱体位错环的淹没四个阶段。其中 (a) (b) 为原位错环收缩

阶段, 位错环在自应力作用下逐渐收缩, 不产生脱体位错。(b) (c) 为脱体位错产生阶段, 位错环进一步收缩并接近扁长六边形并在每段混合型位错部分外同时产生两条平行反向混合型位错, Burgers 矢量均为 $b = [\bar{1}12]_6$ (为保证 Burgers 矢量守恒)。

4.3.2 脱体位错的产生与温度的关系

低温下 (0—100 K) 时, 位错环收缩不产生脱体

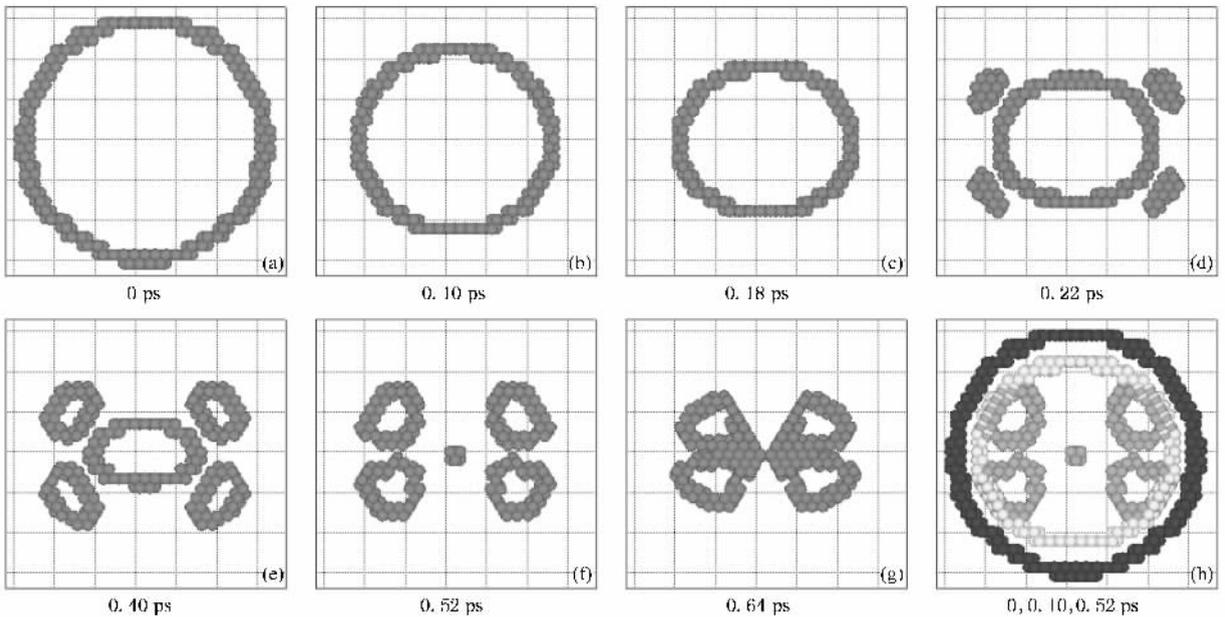


图 12 350 K 时位错环的演化图((h) 中的黑、白、灰原子分别代表 0 ps、0.10 ps、0.52 ps 时刻的位错环)

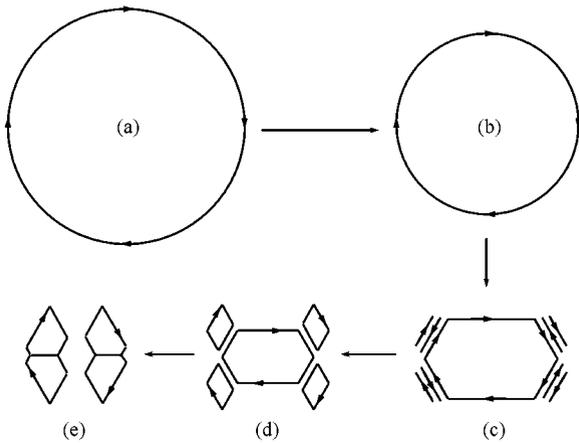


图 13 脱体位错产生过程示意图, 其中(a)为原位错环

位错, 当温度较高时位错环收缩过程伴随着脱体位错的产生和脱体位错环的演化. 可以看出温度是脱体位错产生的重要因素, 作用主要表现在两个方面: 1) 影响位错的迁移速度, 导致位错环各部分收缩不同步, 位错环逐渐接近扁长六边形, 混合型位错段趋于 $\{111\}$ 晶向; 2) 使位错核展宽. 图 14 中给出的 0—350 K 时位错环演化开始时位错核的原子空间分布(将能量大于 -3.51 eV 的原子视为位错核原子). 位错环的宽度随温度逐步增加, 350 K 时位错螺型部分和刃型部分的宽度分别为 0 K 时的 3 倍和 2.1 倍(见图 15).

比较分析 150 K(350 K)位错环的演化过程图 10

和相应的原子能量分布图 16(图 12 和图 17), 发现随着位错环的收缩位错核宽度逐渐增加, 在 0.48 ps (0.40 ps) 时刻, 小位错环开始产生, 混合型位错线段的位错核宽度最大, 大约为其他部分的 2 到 3 倍. 实质上, 在 0.48 ps (0.40 ps) 时刻混合型位错已经分解成三段混合型位错(见图 13(c)). 具体分解过程可以表示为

$$b = b_0 - b_1 + b_2, \quad (3)$$

其中 b 是分解前位错段的 Burgers 矢量, 分解后位错段的 Burgers 矢量由内而外分别是 b_0 、 b_1 和 b_2 , 它们的 Burgers 矢量均为 $[\bar{1}12]_6$.

4.3.3 脱体位错的产生与局部应力的关系

温度增加导致位错核宽度增加, 使得脱体位错产生成为可能. 脱体位错生成(图 13(c)) 并与原位错环分离(图 13(d)) 以及脱体位错环的逐渐生长最后收缩消失(见图 13(e)) 的过程中局部剪切应力 σ_{xz} 起着十分关键的作用. 图 18(图 19) 给出了 150 K (350 K) 时沿 x 轴负向得到的位错环演化过程(图中为突出滑移面两侧相邻密堆积面的原子运动过程, 拉大了两原子面间的距离), 可以看出位错环的收缩是位错核不断跨越 Peierls-Nabarro 势垒的过程. 对比图 11、图 18 和图 20(图 12, 图 19 和图 21) 可知 0.48 ps (0.22 ps) 时刻脱体产生, 混合型位错内外侧有较大的 z 向位移差, 且此时对应最大的剪切应力 σ_{xz} 梯度, 两者共同作用使得脱体位错与原位错段分离、

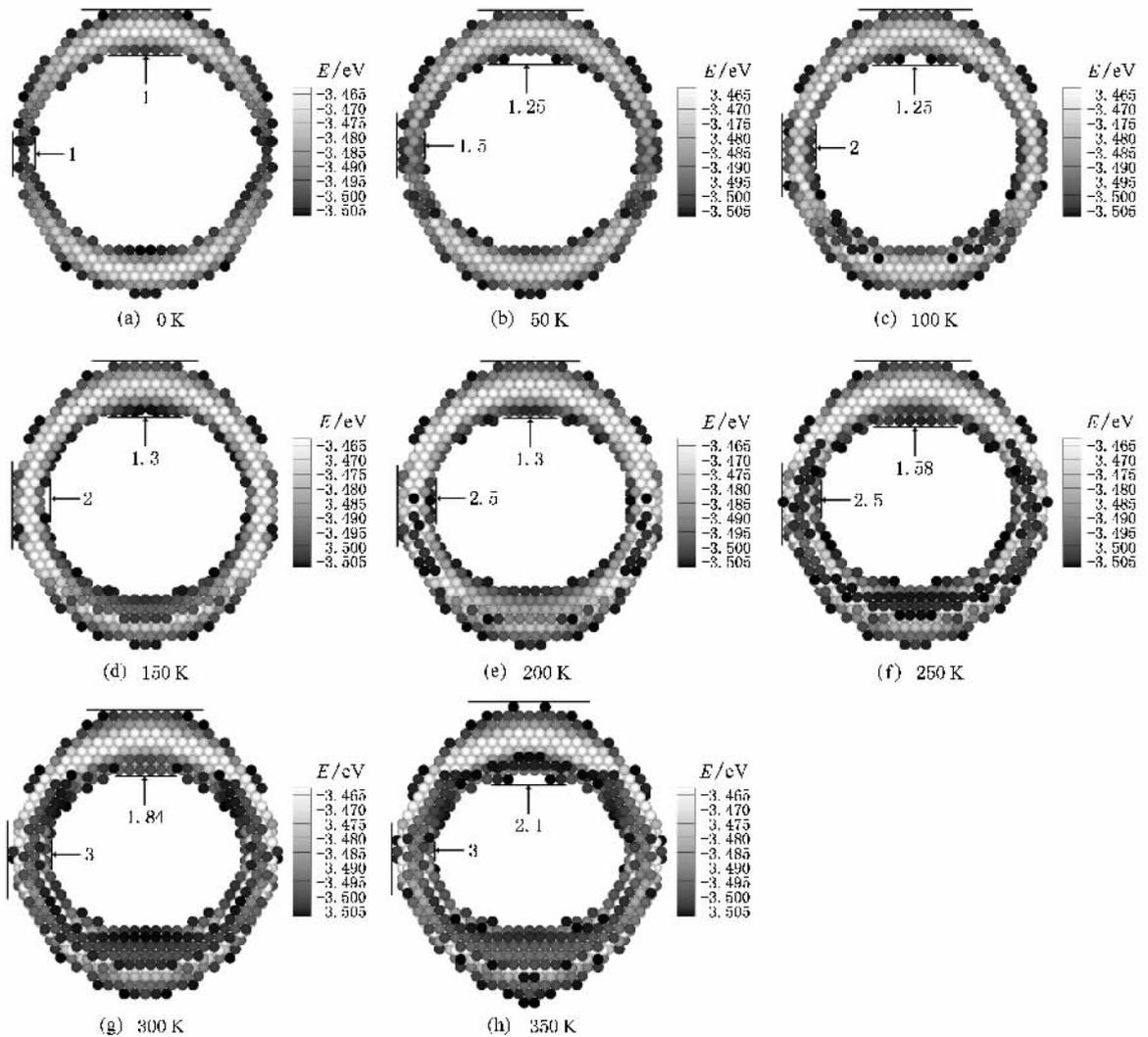


图 14 0—350 K 位错核宽度比较图((a) —(h)中螺型和刃型位错部分所标的数值均以图(a)中螺型和刃型部分的位错核宽度为单位)

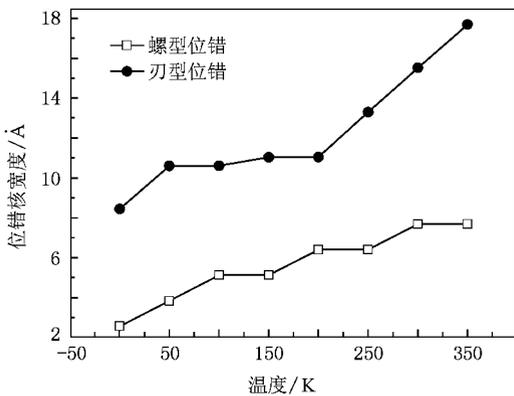


图 15 位错宽度随温度变化图

布辨别出的脱体位错和原位错结构,图中清晰展现了脱体位错环的中心和环上原子有很大的应力差值,正是这样的应力梯度促使位错产生.

图 23 统计了不同温度下脱体位错产生和各位错消失时刻,可以发现:随着温度的升高,脱体位错产生更早;位错环(所有位错)收缩消失的时刻,随温度的升高呈现先降后升的变化趋势,温度等于 150 K 为变化转折点,因为温度高于 150 K 时,新的脱体位错在局部剪切应力 σ_{xz} 作用下逐渐产生并增长(在自应力作用下收缩)以及脱体位错和原位错环的相互作用使得位错环的消失过程时间延长;原位错环的消失时刻,则随温度是逐渐减小的,主要是因为温度升高和位错曲率增大使得位错迁移速度增加从而更快收缩消失.

生长,并在位错环自应力作用下逐渐收缩消失.图 22 中是根据原子空间排布和空间原子的 σ_{xz} 应力分

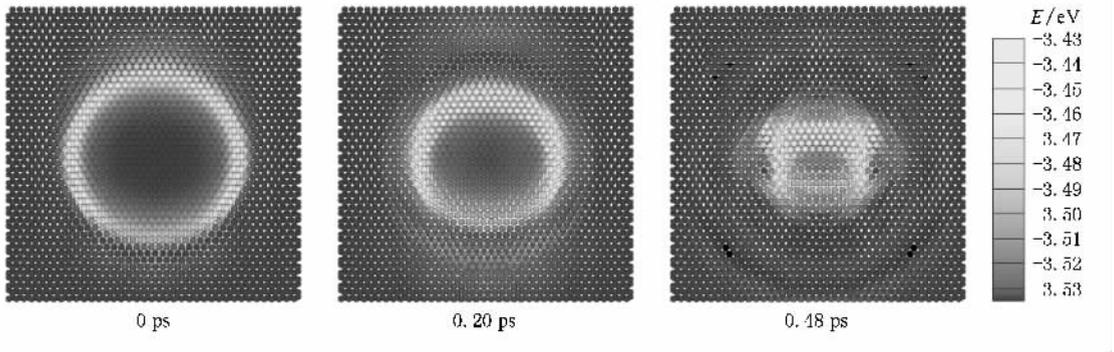


图 16 150 K 时位错环所处滑移面附近原子的能量分布

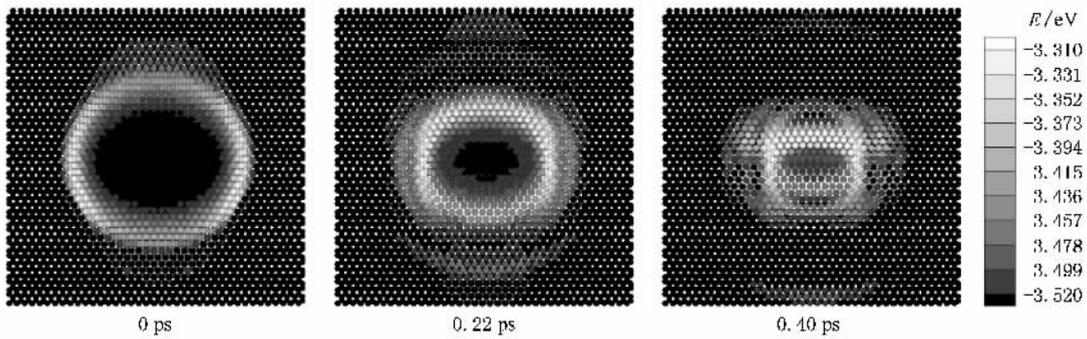
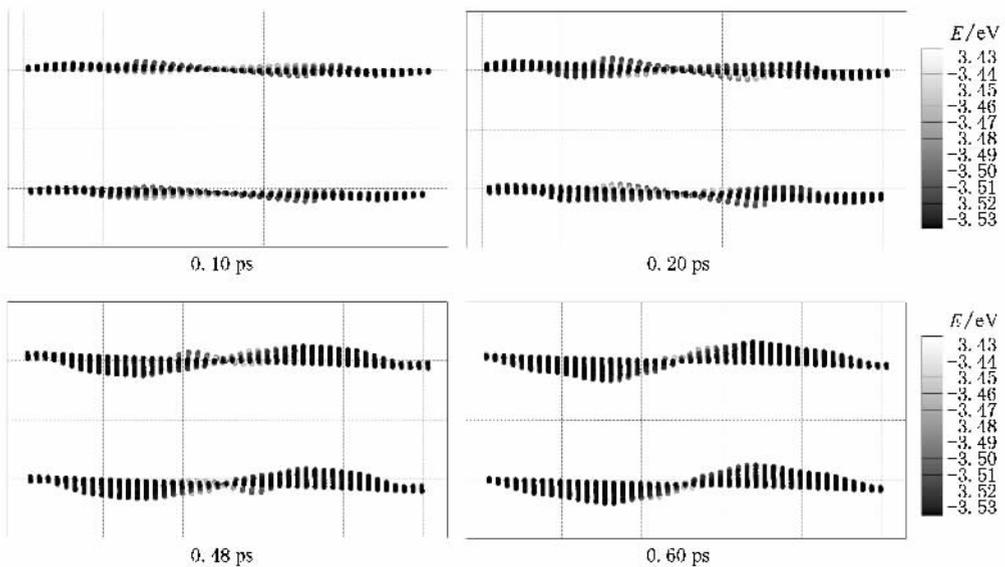


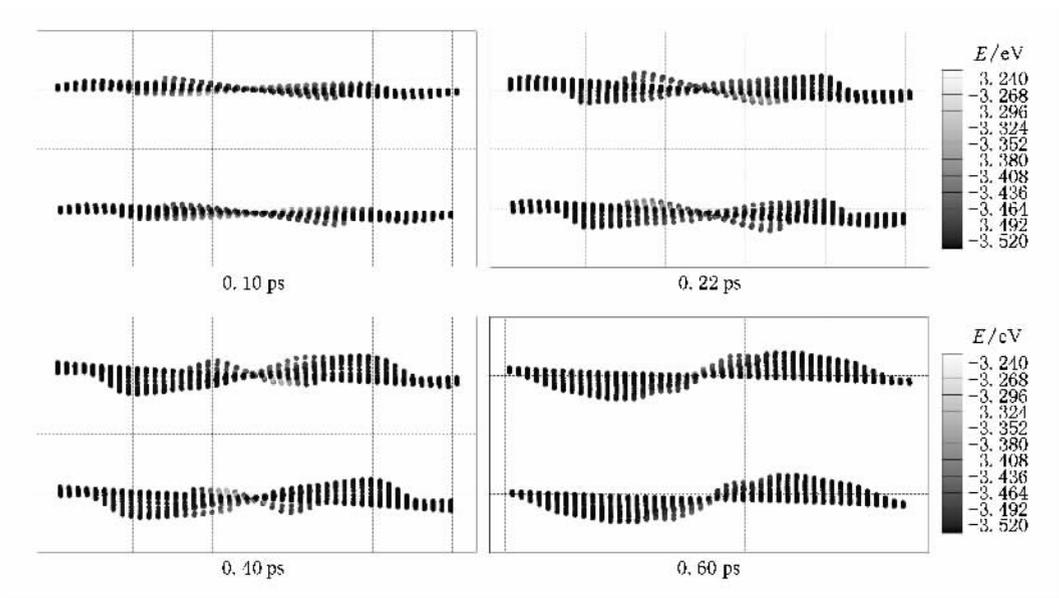
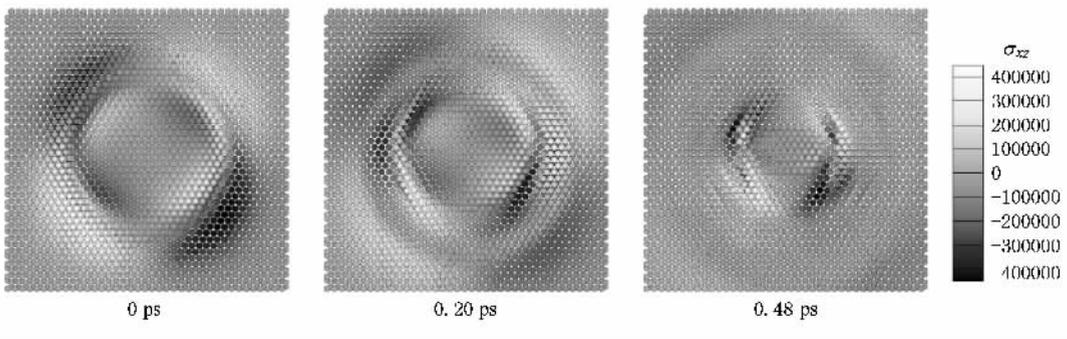
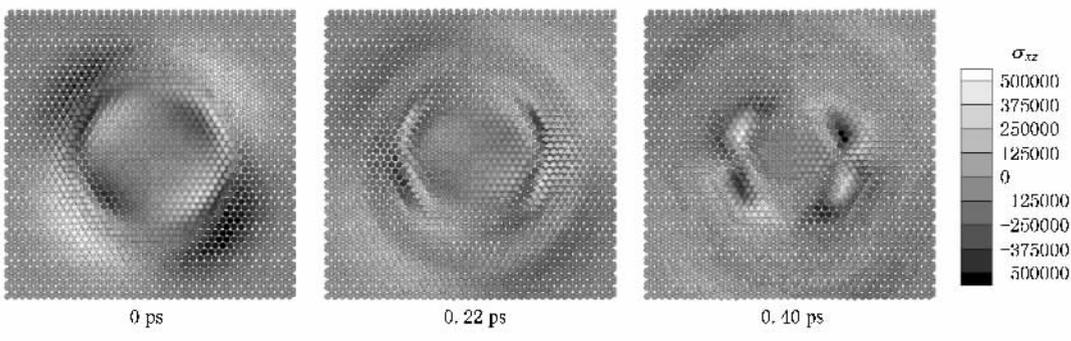
图 17 350 K 时位错环所处滑移面附近原子的能量分布

图 18 150 K 时位错环收缩过程 yz 平面视图

5. 结 论

运用分子动力学方法,采用 NVT 系统研究有限温度下金属铜单晶中 Burgers 矢量为 $b = [\bar{1}12]6$ 圆

环形不完全位错环的自收缩过程.模拟结果表明:1)位错环的收缩需要跨越 Peierls-Nabarro 势垒,零温下由于原子的热涨落比较小不足以克服 Peierls-Nabarro 势垒,位错环不发生迁移,原子仅在平衡位置附近做微小的振动;2)有限温度下,温度对不同性

图 19 350 K 时位错环收缩过程 yz 平面视图图 20 150 K 时位错环滑移面两侧相邻滑移面上的 σ_{xz} 应力分布图 21 350 K 时位错环滑移面两侧相邻滑移面上的 σ_{xz} 应力分布

质位错线段部分迁移速度的影响不一致,低温下刃型位错和螺型位错迁移速度基本一致,位错环保持近圆环形逐渐收缩消失.当温度升高时,刃型位错部分的迁移速度大于螺型部分,位错环收缩偏离圆环

形经扁椭圆形并逐渐收缩消失.3)温度进一步升高,位错核区域展宽,随着时间演化不同部分展宽差距增大,展宽最大的混合型位错段区域,在局部应力 σ_{xz} 作用下产生脱体位错线段.四个对称分布 Burgers

矢量为 $b = [\bar{1}12] \frac{a}{6}$ 不全位错环) ;4) 脱体位错在原位错应力作用下逐渐生长, 原位错消失以后在自身

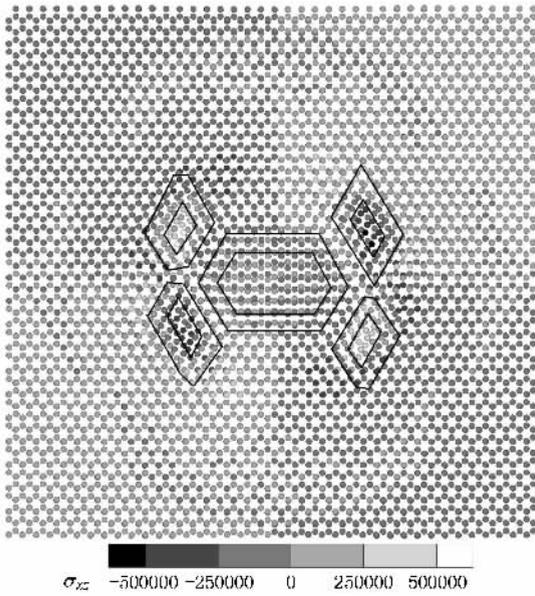


图 22 根据原子拓扑结构和应力分布得到温度为 350 K 时 0.40 ps 时刻的位错环结构

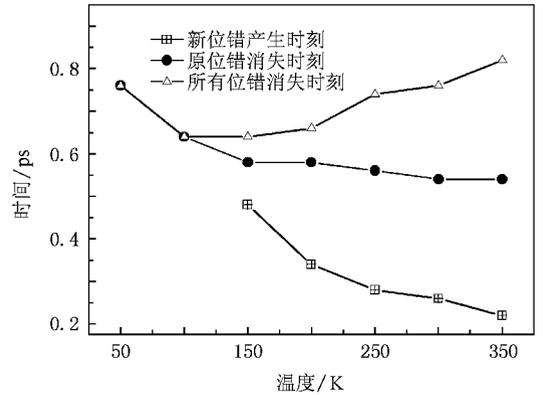


图 23 不同温度下脱体位错产生和各位错消失时刻

应力作用下收缩消失. 在温度和局部应力作用下的脱体位错产生过程, 不同于 Frank-Read 位错源机理, 揭示了一种新的热激发位错源机理, 使我们可以更全面认识位错的增殖过程.

在文章撰写过程中, 傅立斌老师和李英骏老师提出了许多宝贵的建议, 在此表示由衷感谢.

- [1] Wirth B D, Bulatov V V, Diaz T 2002 *J. Eng. Mater. Technol.* **124** 329
- [2] Jaime Marian, Jaroslaw Knap, Michael Ortiz 2005 *Acta Materialia* **53** 2893
- [3] Yang Q L, Zhang Q C, Xu A G, Zhao Y H, Li Y J 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 0940 (in Chinese) [杨其利、张广财、许爱国、赵艳红、李英骏 2008 物理学报 **57** 940]
- [4] Xu A G, Pan X F, Zhang G C, Zhu J S 2007 *J. Phys. : Condens. Matter* **19** 326212
- [5] Pan X F, Xu A G, Zhang G C, Zhu J S 2008 *J. Phys. D : Appl. Phys.* **41** 015401
- [6] Xu A G, Zhang G C, Pan X F, Zhang P, Zhu J S 2009 *J. Phys. D : Appl. Phys.* **42** 075409
- [7] Kiran Solanki, Horstemeyer M F, Baskes M I, Fang H 2005 *Mechanics of Materials* **37** 317
- [8] Jae-Hyeok Shim, Sang Chul Kwon, Whung Whoe Kim, Wirth B D

2007 *Journal of Nuclear Materials* **367-370** 292

- [9] Fang B Q, Lu G, Zhang G C, Xu A G, Li Y J 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 4862 (in Chinese) [方步青、卢 果、张广财、许爱国、李英骏 2009 物理学报 **58** 4862]
- [10] Peter Szelestey, Marco Patriarca, Kimmo Kaski 2005 *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **13** 541
- [11] Daw M S, Baskes M I 1984 *Phys. Rev. B* **29** 6443
- [12] Rodney D, Martin G 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 3272
- [13] Rodney D, Martin G 2000 *Phys. Rev. B* **61** 8714
- [14] Rodney D, Martin G, Bréchet T Y 2001 *Mater. Sci. Eng. A* **309-310** 198
- [15] Rodney D 2004 *Acta Mater.* **52** 607
- [16] Takahiro Hatano, Tetsuya Kaneko, Yousuke Abe, Hideki Matsui T 2008 *Phys. Rev. B* **77** 064108
- [17] Yang S H 1988 *Crystal Dislocation Theory* (Beijing : Science Press) (in Chinese) [杨顺华 1988 晶体位错理论基础 (北京 : 科学出版社)]

Separating of dislocation ring at finite temperature^{*}

Lu Guo¹⁾ Fang Bu-Qing²⁾ Zhang Guang-Cai^{1)†} Xu Ai-Guo³⁾

¹⁾ *Graduate School, Chinese Academy of Engineering Physics, Beijing 100088, China*

²⁾ *China University of Mining and Technology (Beijing), Beijing 100083, China*

³⁾ *Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China*

(Received 11 March 2009 ; revised manuscript received 17 March 2009)

Abstract

We constructed a partial dislocation ring with Burgers vector $\mathbf{b} = [\bar{1}12]b/6$ in the glide plane (111) of copper crystal, and studied its self-contraction process in the temperature range, from 0 to 350 K by using molecular dynamics simulations. The results reveal that, at zero temperature the dislocation ring cannot pass the Peierls-Nabarro potential barrier, so its migrating velocity is zero; below 50 K, the screw part and the edge part of the dislocation have nearly the same migrating velocity. With the increasing of temperature, the edge dislocation migrates more quickly than the screw dislocation. At a higher temperature, the dislocation core becomes wider, consequently, it may contain more complex internal structures and becomes easier for separating. At the same time, local stress gradient within the mixed dislocation zone becomes steeper and results in the generation of four partial dislocation rings. The four new dislocation rings first grow with time under the influence of original dislocation ring. When the original ring finally disappears, the newly created rings begin to shrink and finally disappear. This is a new dislocation source, different from the Frank-Read, L or double cross-slip type.

Keywords: FCC-Cu, dislocation loop, molecular dynamics, dislocation source

PACC: 7340S, 7210F, 8715H

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10702010, 10775018) and the Science Foundation of LCP and CAEP.

[†] Corresponding author. E-mail : zhang_guangcai@iapcm.ac.cn