

# 体心立方 Ta 的广义面错能及在 II 型裂纹尖端 初始塑性研究中的应用\*

梅继法 黎军顽 倪玉山<sup>†</sup> 王华滔

(复旦大学力学与工程科学系, 上海 200433)

(2010 年 1 月 26 日收到; 2010 年 8 月 17 日收到修改稿)

基于嵌入原子势考察体心立方 (bcc) 金属 Ta 的广义层错能和广义孪晶能并获得广义层错能和广义孪晶能曲线. 研究表明, bcc Ta 的广义层错能曲线与面心立方金属的广义层错能曲线有明显差异, Ta 的广义层错能曲线不存在明显的能量极小值, 位错主要以全位错的形式发射. 不同原子厚度的广义孪晶能曲线表明 4 个原子层的孪晶能曲线开始出现亚稳定的能量极小值, 5 个原子层的孪晶能曲线出现稳定的能量极小值. 为进一步验证广义层错能和广义孪晶能曲线揭示的塑性变形机理, 采用准连续介质力学多尺度方法研究 II 型裂纹尖端的初始塑性变形过程. 结果表明, 变形孪晶和全位错发射同为 II 型裂纹尖端两种重要的塑性变形机理.

**关键词:** 广义层错能, 广义孪晶能, 体心立方金属钽, II 型裂纹

**PACS:** 61. 72. Nn, 46. 50. + a, 31. 15. - p, 61. 72. Mm

## 1. 引言

金属材料的物理、力学和化学性能与其面错能, 如堆垛层错能 (stacking fault energy) 和孪晶能 (twinning fault energy) 有密切关系. 研究金属材料的堆垛层错能有助于揭示位错的滑移、相变以至蠕变等物理化学过程<sup>[1-4]</sup>. 通常所指的堆垛层错能实际上仅为稳定的堆垛层错能, 相关学者已经采用实验<sup>[5, 6]</sup>和理论计算<sup>[7, 8]</sup>等多种方法考察了不同金属和合金的堆垛层错能. 然而近年来关于纳米晶体的研究表明, 单一的稳定堆垛层错能不足以解释位错产生和滑移的机理, 材料变形机理的全面揭示还需不稳定堆垛层错能 (unstable stacking fault energy) 和不稳定孪晶能 (unstable twinning fault energy) 等材料参数. 例如 Rice<sup>[9]</sup> 通过研究裂纹尖端位错成核发现, 材料韧性断裂的应力强度因子是不稳定堆垛层错能的函数; Tadmor 等<sup>[10]</sup> 指出, 材料内部变形孪晶的产生与不稳定孪晶能和不稳定堆垛层错能的比值有关; Van Swygenhoven 等<sup>[11, 12]</sup> 综合分析面心立方 (fcc) 金属的不稳定堆垛层错能、稳定层错能和

不稳定孪晶能三者对全位错、不全位错和变形孪晶等变形机理的影响, 并在广义层错能 (generalized stacking fault) 曲线的基础上用广义面错能 (generalized planar fault) 曲线全面表征这 3 个能量参数. 近来, 已有学者利用不同方法获得了多种 fcc 金属的广义层错能和广义面错能曲线<sup>[13-18]</sup>.

目前广义面错能的研究, 即包括广义层错能和广义孪晶能 (generalized twinning fault) 的研究主要集中于 fcc 金属, 对体心立方 (bcc) 金属面错能的研究大多集中于 Fe 及其合金<sup>[19-21]</sup>, 少有开展金属 Ta 的面错能研究. 实际上, 由于稀有金属 Ta 出色的力学、物理和化学性能 (高硬度、富于延展性、耐高温及耐腐蚀), 已被广泛用于高档电子材料、精密仪器以及特种合金钢等产业中<sup>[22, 23]</sup>, 因而研究 Ta 的广义面错能具有较大的工程意义. 此外, 实验和原子模拟发现变形孪晶是金属 Ta 一种极为重要的变形机理和塑性能储存方式<sup>[24-26]</sup>, 研究 Ta 的广义孪晶能可以从能量角度深化对变形孪晶这一重要微观变形机理的认识. 本文以单晶 Ta 为研究对象, 首先基于嵌入原子势 (embedded atom method, 简记为 EAM) 考察相邻 {112} 面原子沿 <111> 方向发生相对滑移时的广义层错能曲线, 其次研究多个 {112} 面

\* 国家自然科学基金 (批准号: 10576010) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: niyushan@fudan.edu.cn

原子层沿  $\langle 111 \rangle$  方向产生均匀剪切形成孪晶时的广义孪晶能曲线,最后为了进一步验证广义层错能和广义孪晶能曲线所揭示的塑性变形机理,采用多尺度准连续介质力学方法(quasicontinuum method)研究金属 Ta 的 II 型裂纹尖端初始塑性变形过程.

## 2. 广义堆垛层错能和广义孪晶能计算

### 2.1. bcc 金属 $\{112\}$ 面堆垛层错和孪晶理论模型

bcc 晶体的滑移主要沿  $\langle 111 \rangle$  密排方向,3 个可能的滑移面分别为  $\{110\}$ ,  $\{112\}$  和  $\{123\}$  面族,其中  $\{112\}$  面是最常见的滑移面,大多数研究者<sup>[27, 28]</sup>观察到的孪晶也位于这一面族,因而也被称为孪晶面(twinning plane). 本文以  $(\bar{1}\bar{1}2)$  面原子沿  $[\bar{1}11]$  方向的滑移为例,考察  $\{112\}$  面族的广义层错能和广义孪晶能曲线. 为便于观察 bcc 晶

体在  $(\bar{1}\bar{1}2)$  面上的堆垛顺序,可将  $(\bar{1}\bar{1}2)$  面的原子投影到  $(110)$  面,如图 1(a) 所示(圆形代表位于纸面上的原子,矩形代表纸面外的原子,不同堆垛位置的原子采用大写字母加以区分). 从图 1(a) 可知,  $(\bar{1}\bar{1}2)$  面原子的堆垛方式是  $\dots ABCDEFABCD \dots$ . 图 1(b) 为滑移形成堆垛层错和变形孪晶的示意图. 如果图 1(b) 正常堆垛次序中的 A 层及其右侧所有原子在  $[\bar{1}11]$  晶向上平移  $a/6$  ( $a$  为 bcc 单晶的晶格常数),那么 A 层原子滑移至 E 层, B 层原子滑移至 F 层,这样就形成  $\dots ABCDEFEFAB \dots$  形式的堆垛层错(其中箭头代表镜面(mirror plane)位置),也可称为具有一个原子厚度的孪晶. 若将 F 层(初始正常堆垛中的 B 层)及其右侧所有原子再次在  $[\bar{1}11]$  晶向平移  $a/6$ ,堆垛顺序则变为  $\dots ABCDEFEFDE \dots$ ,如此两次的相继滑移则形成 2 个原子层的孪晶. 同样的滑移方式可以形成多个原子层厚的孪晶.

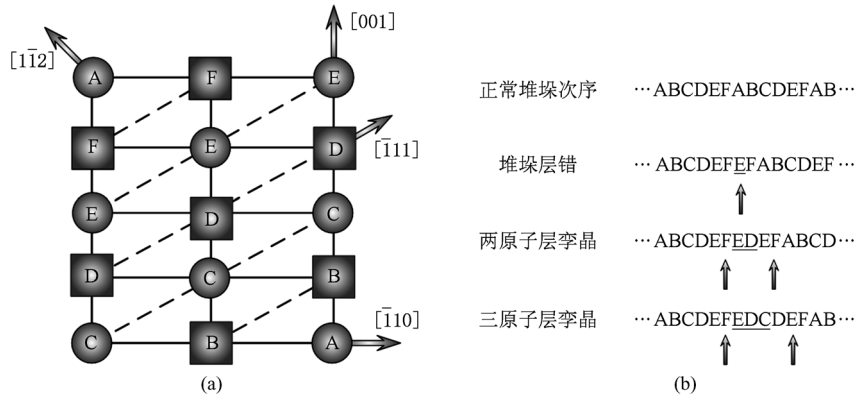


图 1 bcc 金属的堆垛及孪晶形成 (a) bcc 金属沿  $(\bar{1}\bar{1}2)$  面的堆垛顺序, (b)  $(\bar{1}\bar{1}2)$  面堆垛层错和孪晶形成示意图

### 2.2. 基于嵌入势的广义层错能和广义孪晶能

Daw 和 Baskes<sup>[29]</sup> 基于密度泛函理论建立的 EAM 势认为,原子系统的总能量  $E^a$  是每个原子能量的叠加,即

$$E^a = \sum_i E_i(u), \quad (1)$$

其中  $E_i(u)$  是第  $i$  个原子的能量,  $u$  是第  $i$  个原子的位移. 单个原子的能量表示为

$$E_i = F_i \left( \sum_{j \neq i} \rho_j(\mathbf{r}_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} V_{ij}(\mathbf{r}_{ij}). \quad (2)$$

这里  $F_i$  是依赖于电子密度的嵌入能量,  $\rho_i$  是原子  $i$  的电子密度,  $V_{ij}$  是在原子  $i$  和相邻原子  $j$  之间的对

势,  $\mathbf{r}_{ij}$  是从原子  $i$  到相邻原子  $j$  的位置矢量. 由于 EAM 势能较精确地刻画 fcc 和 bcc 金属原子的相互作用而被广泛用于金属原子系统的计算机模拟. 本文采用 EAM 势<sup>[30]</sup>得到的单晶 Ta 的弹性常数分别为  $C_{11} = 248.5$  GPa,  $C_{12} = 144.6$  GPa 和  $C_{44} = 86.5$  GPa,与实验获得的弹性模量值符合<sup>[31]</sup>.

图 2 为广义层错能和广义孪晶能的计算示意图,其中图 2(a) 为初始能量为  $E_0$  的原子系统. 计算广义层错能时,使原子系统的上半部分相对下半部分沿  $(\bar{1}\bar{1}2)$  面的  $[\bar{1}11]$  方向产生剪切位移  $\Delta x$  (如图 2(b) 所示),此时系统能量为剪切位移的函数  $E(\Delta x)$ . 该滑移过程中原子系统单位面积增加的能量  $\{E(\Delta x) - E_0\}/A$  (其中  $A$  为剪切面的面积) 随剪

切位移  $\Delta x$  的变化曲线即为广义层错能曲线. 计算 2 个原子层孪晶的广义孪晶能曲线时, 2 个相邻原子层产生步调一致的滑移, 即在第一层原子滑移  $\Delta x$  的同时第二层原子及以上所有原子层相对第一层滑移原子也产生位移为  $\Delta x$  的滑移(这是由于孪晶变形时原子结构发生均匀切变), 如图 2(c) 所示. 此过程中原子系统单位滑移面积增加的能量随滑移位移  $\Delta x$  的变化曲线则为广义孪晶能曲线. 依据同样

的方法, 本文考察多达 7 个原子层厚孪晶的广义孪晶能曲线. 在计算广义层错能和广义孪晶能过程中, 原子模型沿  $z$  方向取周期性边界条件, 并通过调整模型沿  $x$  方向和  $y$  方向的尺寸研究模型大小对层错能的影响. 结果表明, 当整个原子系统在  $xy$  面的尺寸大于  $10 \text{ nm} \times 10 \text{ nm}$  时, 模型尺寸对广义层错能和孪晶能的计算结果几乎无影响, 因此原子模型在  $xy$  面内的尺寸取为  $10 \text{ nm} \times 10 \text{ nm}$ .

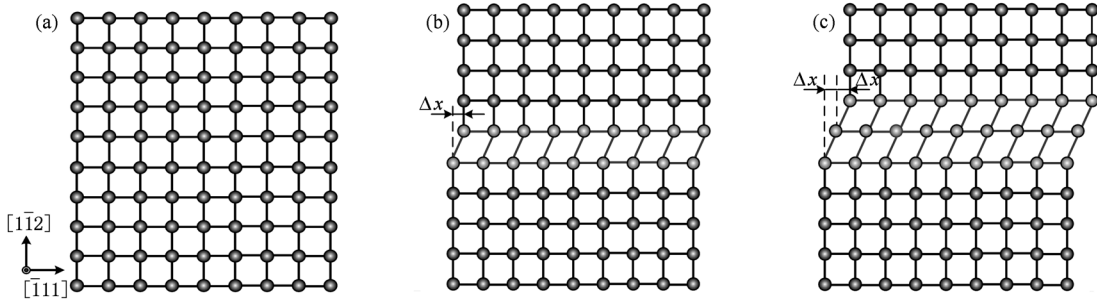


图 2 广义层错能和广义孪晶能计算示意图 (a) 初始原子系统, (b) 广义层错能计算, (c) 2 个原子层的广义孪晶能计算

### 3. 计算结果

#### 3.1. Ta 的广义层错能曲线

图 3(a) 为金属 Ta 的  $(\bar{1}\bar{1}2)$  原子面沿  $[\bar{1}\bar{1}1]$  方向滑移一个周期的广义层错能曲线, 其中  $x$  轴以全位错  $[\bar{1}\bar{1}1]$  晶向的  $a/2$  模为单位 ( $a$  为 Ta 的晶格常数). 广义层错能先逐渐增大并在滑移位移约为  $[\bar{1}\bar{1}1]$  晶向  $a/6$  时能量势垒达到最大值  $\gamma_{\max}$  ( $\gamma_{\max} \approx 1.1 \text{ J} \cdot \text{m}^{-2}$ ). 此后的层错能随滑移位移几乎保持不变. Ta 的整个层错曲线能并不存在明显的能量极小值, 这表明  $(\bar{1}\bar{1}2)$  面原子沿  $[\bar{1}\bar{1}1]$  方向滑移时难以

形成单原子层稳定的堆垛层错, 只要滑移原子克服最大的能量势垒,  $(\bar{1}\bar{1}2)$  原子层极易滑移一个全位错矢量 ( $[\bar{1}\bar{1}1]$  晶向为  $a/2$ ) 而在单晶 Ta 内部形成全位错. 全位错沿  $[\bar{1}\bar{1}1]$  方向滑过后的  $(\bar{1}\bar{1}2)$  面仍然为正常的堆垛次序而不存在层错结构.

为了进一步讨论 bcc 金属的广义层错能, 我们和 fcc 单晶 Cu 的广义堆垛层错能进行比较. 依据同样方法获得到 Cu(111) 面原子沿  $[112]$  方向滑移的广义层错能曲线(图 3(b)). 可以看出, Cu 的(111) 面滑移原子在越过广义层错能曲线一个较小的峰值 (即不稳定堆垛层错能  $\gamma_{\text{ust}}$ ) 后在  $[112]$  晶向滑移位移约为  $b/6$  ( $b$  为 Cu 的晶格常数) 时达到一个稳定的平衡位置 (对应的能量即为稳定堆垛层错能  $\gamma_{\text{st}}$ ). 原子

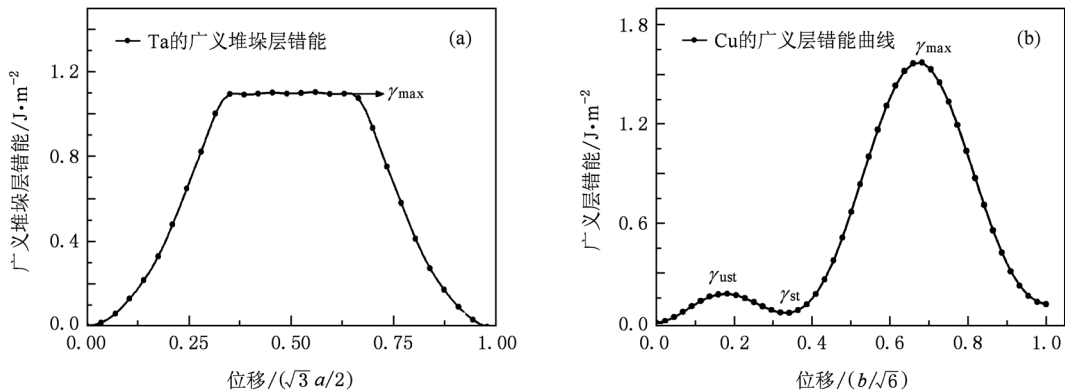


图 3 层错能曲线 (a) bcc 金属 Ta 的广义层错能曲线, (b) fcc 金属 Cu 的广义层错能曲线

层滑移到此位置时, (111) 面原子由...ABCABC...的形式堆垛次序变为...ABCBCA...而产生堆垛层错, 已滑移原子和未滑移原子交接处的线缺陷即为 fcc 金属中常见的 Shockley 不全位错. 从两种不同晶体结构的广义层错能曲线可以看出, bcc 金属和 fcc 金属的广义层错能曲线有着明显的差异. bcc 金属难以沿(112)面发射单独的全位错而形成堆垛层错, 位错主要以全位错的形式发射; fcc 原子仅需越过较小的不稳定堆垛层错能即可发射 Shockley 不全位错而形成稳定的堆垛层错, 但 fcc 金属难以直接发射全位错. 从图 3(b) Cu 广义层错能曲线的最大峰值可以看出, 单晶 Cu 发射全位错需克服的能垒  $\gamma_{\max}$  远大于发射 Shockley 不全位错需克服的能垒  $\gamma_{\text{nst}}$ .

### 3.2. Ta 的广义孪晶能曲线

实验和原子模拟表明, 变形孪晶是金属 Ta 一种重要的塑性变形机理<sup>[24,25]</sup>. 从能量角度考察, 这表明多个原子层厚的孪晶对应的广义孪晶能曲线存在稳定的能量极小值. 为此进一步考察形成具有 2—7 个原子层厚度孪晶的广义孪晶能曲线.

图 4 为 Ta 的 2—7 个原子层厚度的广义孪晶能曲线. 正三角形标记的曲线为 2 个原子层厚的孪晶能随滑移位移的变化曲线, 其滑移组态的示意图如图 2(c) 所示. 与图 3(a) 中的广义层错能曲线相比, 2 个原子厚度的孪晶能曲线并不存在如图 3(a) 所示的“能垒平台”, 孪晶能随滑移位移先是单调增长并逐渐达到一个极大值. 由此可以推断单晶 Ta 中不能形成 2 个原子层的稳定孪晶. 3 个原子层的孪晶能曲线(图 4 倒三角标记的曲线)在  $[\bar{1}11]$  晶向滑移位移为  $a/6$  时比 2 个原子层的孪晶能曲线明显趋于平缓, 但同样没有出现明显的能量极小值, 因此单晶 Ta 仍然难以形成 3 个原子层的孪晶. 4 个原子层的孪晶能曲线在  $[\bar{1}11]$  晶向  $a/6$  处存在着一个亚稳定的能量低谷, 这表明 4 个相邻(112)面上的原子沿  $[\bar{1}11]$  方向同时发生相继滑动且在  $[\bar{1}11]$  晶向相对滑移量为  $a/6$  时能够形成亚稳定的孪晶结构.

图 4 中圆形符号标记的曲线为 5 原子层孪晶的广义孪晶能曲线. 此时孪晶能曲线已形成一个明显的能量极大值点 A (类似于图 3(b) 中的不稳定堆垛层错能) 和极小值点 B, 这个能量极小点对应  $[\bar{1}11]$  晶向的滑移量仍然为  $a/6$ . 从位错发射的角度看, 5 个原子层厚孪晶的产生是由 5 个相邻(112)

面上的不全位错沿同一方向相继发射导致原来晶体产生均匀切变, 这些不全位错就是 bcc 晶体位错分解理论预测的位于  $\{112\}$  面上的不全位错. 值得注意的是, 这些不全位错仅仅在多个相邻的(112)面上相继发射时才能稳定地存在于 bcc 晶体内部, 单独的(112)面上的不全位错并不易产生于晶体内部. 比较图 4 不同原子厚度的孪晶能曲线可以看出, 孪晶随着孪晶厚度的增大而越来越趋稳定, 6 层和 7 层的孪晶比 5 层的孪晶更加稳定. 有趣的是, 5—7 层的孪晶能曲线变化趋势与 fcc 金属的堆垛层错能变化曲线(如图 3(b) 中 Cu 的广义层错能曲线)相似, 这是因为多个原子层的变形孪晶可看作是多个不全位错在相邻的原子面相继滑移所致, fcc 金属中发射单独的 Shockley 不全位错和 bcc 中发射多个不全位错在能量曲线中都表现为能量极小的一个凹点.

通过讨论 2—7 层孪晶能曲线发现: 单晶 Ta 的 4 层原子的孪晶是亚稳定的, 最低厚度的稳定孪晶为 5 层原子, 随着加载的继续, 5 原子层的孪晶易于扩展为更多原子层的孪晶. 广义孪晶能曲线中稳定的极小值点对应的孪晶能约为  $1.1 \text{ J}\cdot\text{m}^{-2}$ , 远大于 fcc 金属中的稳定堆垛层错能(如 Cu 的堆垛层错能为  $0.05 \text{ J}\cdot\text{m}^{-2}$  左右), 这表明变形孪晶是 bcc 金属一种重要的塑性能吸收方式.

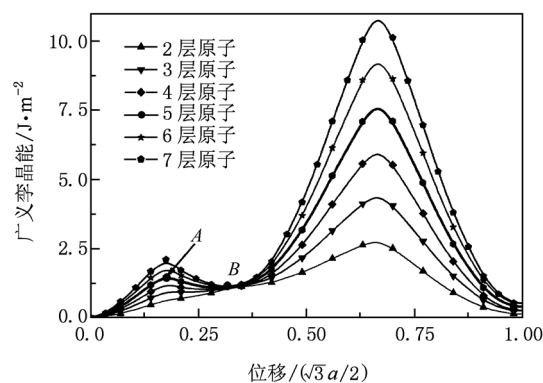


图 4 单晶 Ta 不同厚度孪晶的广义孪晶能曲线

### 4. 单晶 Ta 的 II 型裂纹尖端的初始塑性变形

为进一步验证通过广义层错能曲线和广义孪晶能曲线所揭示的全位错和变形孪晶的产生, 我们以单晶 Ta 的 II 型断裂为例, 通过考察裂纹尖端的初始塑性变形揭示广义层错能曲线和广义孪晶能曲

线在 bcc 金属塑性变形机理研究中的应用.

#### 4.1. QC 方法和模型描述

研究者已利用分子动力学 (molecular dynamics, 简称为 MD) 研究了 bcc 金属  $\alpha$ -Fe 的 I 型裂纹的初始塑性变形和扩展过程<sup>[27,28,32,33]</sup>, 而 II 型裂纹的原子模拟则相对较少. 此外, 裂纹扩展作为一种典型的跨尺度耦合问题, 采用有效的多尺度方法考察裂纹尖端的塑性变形比采用单一尺度的 MD 方法更有意义. 为此, 我们采用 Tadmor 等<sup>[34]</sup> 提出的准连续介质这一重要的多尺度方法模拟大规模 Ta 原子系统 II 型裂纹尖端的塑性变形过程. 该方法在剧烈变形区域采用完全原子模拟和在均匀或小变形区域通过疏密不同的代表原子进行粗化描述, 并通过自适应准则调整原子数目而极大地提高计算的规模和效率, 能够避免因 MD

中因模型尺寸过小带来的边界效应. 该方法已在纳米压痕、纳米接触、断裂、晶界变形等领域得到广泛应用<sup>[35-38]</sup>. 更多相关准连续介质方法的介绍可参见文献<sup>[39]</sup>.

图 5(a) 为具有微小裂纹单晶 Ta 的 II 型加载示意图. 模型沿  $x$  方向和  $y$  方向的尺寸分别为 200 和 100 nm,  $z$  方向取周期性边界条件, 整个原子系统尺寸比一般 MD 的模型尺寸大一个数量级. 为方便观察孪晶的产生过程, 模型的晶向选择为  $x[10\bar{1}]$ ,  $y[010]$  和  $z[101]$ . 图 5(b) 为裂纹尖端放大后的代表性原子选择图. 模型加载方式为位移加载, 每加载一次原子系统首先产生 0.002 均匀的剪切应变, 随后通过求解原子系统能量极小值得到每个原子的平衡位置. 在加载过程中整个原子系统采用与上述计算 Ta 的广义孪晶能曲线相同的 EAM 势.

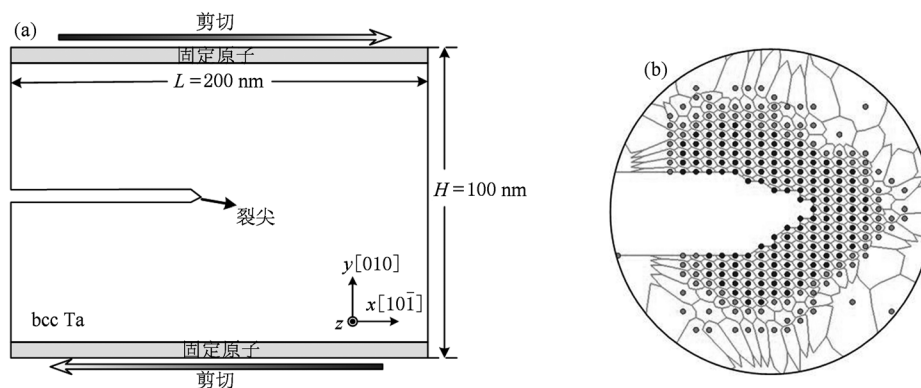


图 5 加载模型 (a) 金属 Ta 的 II 型加载示意图, (b) 裂纹尖端代表原子的选择

#### 4.2. II 型裂纹尖端的初始塑性变形

图 6(a) 为初始塑性变形发生前的原子组态 (剪切应变  $\gamma = 0.036$ ), 其中深色原子为代表性原子, 浅色原子为非代表性原子. 从图 6 可以发现, 楔型裂纹尖端的晶体结构发生了明显的弹性变形, 但并没有发生晶格畸变. 这表明此时的原子系统并没有产生塑性变形. 图 6(b) 为剪切应变变为 0.038 时裂纹尖端发生初次塑性变形时的原子组态, 此时 4 个原子层厚度的孪晶带自裂纹尖端沿  $[\bar{1}11]$  晶向向裂纹的前上方发射. 当原子系统继续产生  $\gamma = 0.002$  的剪切应变时, 4 原子层的孪晶迅速扩展 5 层且深入晶体的前上方并消失在晶体内部, 如图 6(c) 所示. 4 原子层孪晶的产生并迅速扩展为 5 层的孪晶, 较好地验证了图 4 广义孪晶能曲线所得出的结论, 即

4 原子层的孪晶是亚稳定的, 趋于扩展为更加稳定的 5 层的孪晶. 孪晶能曲线和 II 型裂纹尖端观察到的孪晶都表明, 变形孪晶是裂纹尖端初始塑性变形的重要载体. 孪晶的产生释放了裂纹尖端的弹性变形能, 释放的能量以孪晶能的形式储存在孪晶面附近. 从图 4 中 5 层的广义孪晶能曲线的能量极小点可推断孪晶吸收的孪晶能在  $1.1 \text{ J}\cdot\text{m}^{-2}$  左右. 因此图 4 的孪晶能曲线能够揭示孪晶的形成和孪晶能的大小, 加深对 bcc 裂纹尖端塑性变形的产生和弹性能转变为塑性能的认识. 这对于了解裂纹的扩展和裂纹尖端微观塑性变形具有重要意义.

随着加载的继续, 5 原子层厚度的孪晶进一步扩展. 图 6(d) 是剪切应变  $\gamma$  为 0.050 时裂纹尖端的原子组态, 此时最厚处的孪晶共有 8 个原子层. 随着孪晶的深入, 孪晶逐渐变细并消失在晶体内

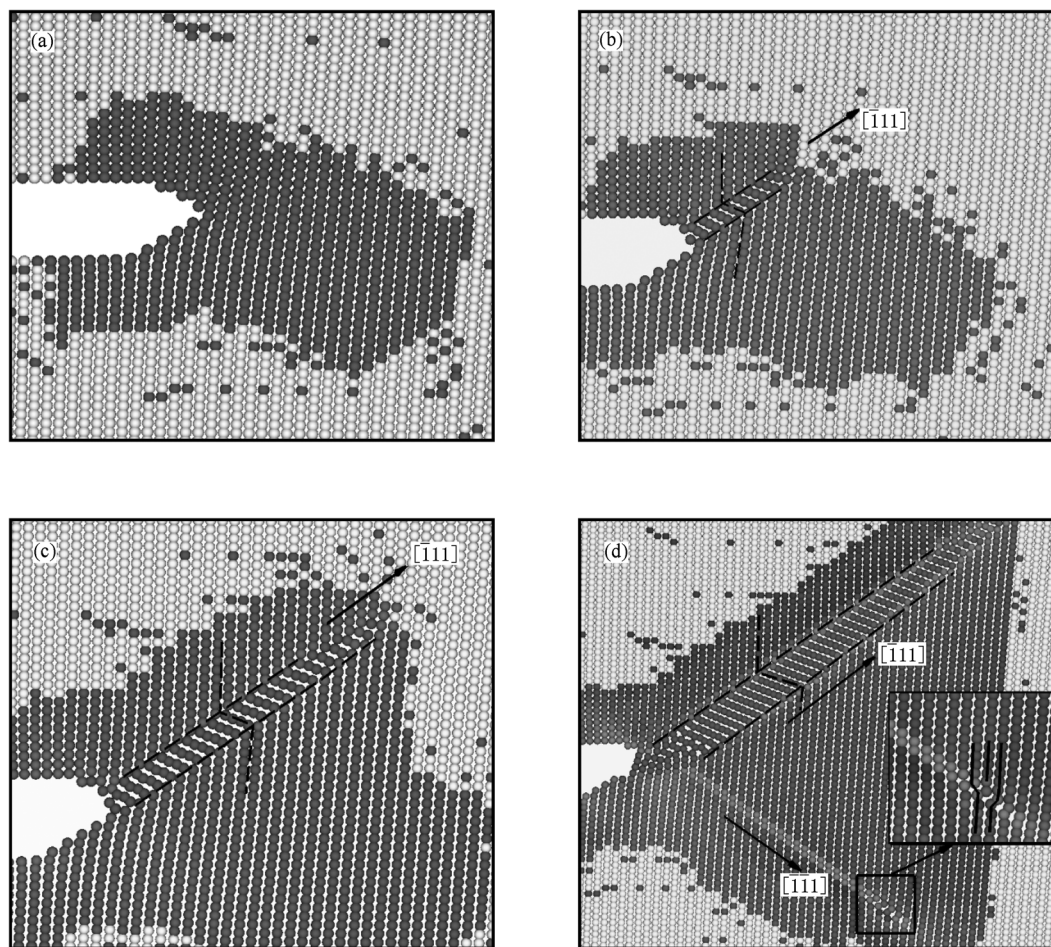


图6 不同剪应变  $\gamma$  下单晶 Ta 裂纹尖端原子组态变化 (a)  $\gamma=0.036$ , (b)  $\gamma=0.038$ , (c)  $\gamma=0.040$ , (d)  $\gamma=0.050$

部, 孪晶带长度由初始时的 6 nm 延长至 13 nm. 这进一步表明变形孪晶继续吸收外力所做的功. 尤其值得注意的是, 在孪晶扩展的同时, 裂纹尖端沿  $[\bar{1}11]$  晶向向右下方发射一个  $a/2$  全位错并停留在晶体内部, 图 6(d) 中右下方浅黑色原子表示全位错发射的轨迹. 全位错运动过后的晶体结构并没有发生错排, 发生错排的原子仅仅位于已滑移和未滑移原子层的交界处, 也就是全位错停留的位置, 如 6(d) 中局部放大图所示. 全位错的产生与发射原因已在图 3(a) 中的广义层能曲线得到了较好的揭示, 即单晶 Ta 的广义层错能曲线并没有出现明显的层错能极小值, 相邻的原子层不可能相对滑动不完全的晶格周期而形成稳定的堆垛层错和不全位错, 只能滑移一个完整的晶格周期而形成全位错. 比较裂纹尖端的变形孪晶和全位错两种塑性机理可以发现, 孪晶变形主导了裂纹尖端的塑性变形, 是裂纹尖端最主要的塑性变形载体.

单晶 Ta 的 II 型裂纹的模拟研究证实, 广义孪晶

能曲线能够较好揭示多个原子层厚度孪晶的产生, 5 层和更高层的孪晶带更趋于稳定. 初次裂纹尖端塑性变形产生的孪晶为 4 个原子层厚度, 4 个原子层迅速地扩展为 5 个原子层. 孪晶产生的同时还伴随全位错的发射, 全位错的发射也被广义层错能曲线得到了准确验证. 孪晶和全位错是单晶 Ta 裂纹尖端的两种塑性变形机理.

## 5. 结 论

研究了单晶 Ta 的  $(\bar{1}12)$  面原子沿  $[\bar{1}11]$  方向滑移的广义层错能和广义孪晶能曲线以及 II 型裂纹尖端的初始塑性变形过程. 研究表明: 单晶 Ta  $\{112\}$  面族沿  $\langle 111 \rangle$  方向滑移时, 广义层错能曲线不存在能量极小值, 整条曲线呈梯形状. 这表明 Ta 内部不会形成单层的层错结构, 位错只能以全位错形式发射. 由不同原子层厚度的广义孪晶能曲线可知, 随着孪晶厚度的增大, 变形孪晶逐渐趋于稳定.

2 个原子层和 3 个原子层的孪晶能曲线不存在能量极小值点,难以形成稳定孪晶;4 个原子层的孪晶是亚稳定的;5 个原子层的孪晶是单晶 Ta 稳定孪晶;6 层和 7 层的孪晶更加稳定. 采用准连续介质方法研究单晶 Ta 的 II 型裂纹尖端初始塑性变形发现,变形孪晶的产生和全位错的发射是裂纹尖端同时共存

的两种塑性变形机理. 裂纹尖端的初次塑性变形产生 4 个原子层厚的孪晶,随后迅速扩展为 5 层以至更厚的孪晶. 全位错沿  $[\bar{1}\bar{1}1]$  晶向向裂纹尖端的前方发射. 单原子层的广义层错能曲线和多个原子层的广义孪晶能曲线较好地揭示了全位错和多原子层孪晶的产生.

- [1] Komura S, Horita Z, Nemoto M, Langdon T G 1999 *J. Mater. Res.* **14** 4044
- [2] Hoshino T, Kumamoto K, Kokubun K, Ishimaru T 1995 *Phys. Rev. B* **51** 14594
- [3] Thornton P R, Hirsch P B 1958 *Phil. Mag.* **3** 738
- [4] Rohatgi A, Vecchio K S, Gray G T 2001 *Metall. Mater. Trans. A* **32** 135
- [5] Howie A, Swann P R 1961 *Phil. Mag.* **6** 1215
- [6] Cockayne D J H, Jenkins M L, Ray I L F 1971 *Phil. Mag.* **192** 1383
- [7] Schweizer S, Elsässer C, Hummler K, Fähnle M 1992 *Phys. Rev. B* **46** 14270
- [8] Ferreira P J, Müllner P 1998 *Acta Mater.* **46** 4479
- [9] Rice J R 1992 *J. Mech. Phys. Solids* **40** 239
- [10] Tadmor E B, Hai S 2003 *J. Mech. Phys. Solids* **51** 765
- [11] Van Swygenhoven H, Derlet P M, Frøseth A G 2004 *Nat. Mater.* **3** 399
- [12] Frøseth A G, Derlet P M, Van Swygenhoven H 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 5863
- [13] Zimmerman J A, Gao H, Abraham F F 2000 *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **8** 103
- [14] Datta A, Waghmare U V, Ramamurty U 2009 *Scripta Mater.* **60** 124
- [15] Wei X M, Zhang J M, Xu K W 2008 *Mater. Sci. Eng. A* **486** 540
- [16] He G, Rong Y H, Xu Z Y 2000 *Sci. Chin. E* **30** 1 (in Chinese) [何刚,戎咏华,徐祖耀 2000 中国科学 **E 30** 1]
- [17] Zhang J M, Wu X J, Huang Y H, Xu K W 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 393 (in Chinese) [张建民,吴喜军,黄育红,徐可为 2006 物理学报 **55** 393]
- [18] Xie H Y, Wang C Y, Yu T, Du J P 2009 *Chin. Phys. B* **18** 251
- [19] Yun Y, Kwon S C, Kim W W 2007 *Comput. Phys. Commun.* **177** 49
- [20] Machová A, Beltz G E, Chang M 1999 *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **7** 949
- [21] Yan J A, Wang C Y, Wang S Y 2004 *Phys. Rev. B* **70** 174105
- [22] Cardonne S M, Kumar P, Michaluk C A, Schwartz H D 1995 *Int. J. Refract. Met. Hard Mater.* **13** 187
- [23] Buckman R W 2000 *J. Mater.* **52** 40
- [24] Wang Y M, Hodge A M, Biener J, Hamza A V 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 101915
- [25] Pan Z, Li Y, Wei Q 2008 *Acta Mater.* **56** 3470
- [26] Murr L E, Meyers M A, Niou C S, Chen Y J, Pappu S, Kennedy C 1997 *Acta Mater.* **45** 157
- [27] Guo Y F, Wang C Y, Wang Y S 2004 *Phil. Mag. Lett.* **84** 763
- [28] Farkas D 2005 *Phil. Mag. Lett.* **85** 387
- [29] Daw M S, Baskes M I 1984 *Phys. Rev. B* **29** 6443
- [30] Li Y H, Siegel D J, Adams J B, Liu X Y 2003 *Phys. Rev. B* **67** 125101
- [31] Featherston F H, Neighbours J R 1963 *Phys. Rev.* **130** 1324
- [32] Guo Y F, Wang C Y, Zhao D L 2003 *Mater. Sci. Eng. A* **349** 29
- [33] Cao L X, Wang C Y 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 413 (in Chinese) [曹莉霞,王崇愚 2007 物理学报 **56** 413]
- [34] Tadmor E B, Ortiz M, Phillips R 1996 *Phil. Mag. A* **73** 1529
- [35] Tadmor E B, Miller R, Phillips R, Ortiz M 1999 *J. Mater. Res.* **14** 2233
- [36] Miller R, Tadmor E B, Phillips R, Ortiz M 1998 *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **6** 607
- [37] Shenoy V B, Miller R, Tadmor E B, Phillips R, Ortiz M 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 742
- [38] Wang H T, Qin Z D, Ni Y S, Zhang W 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1057 (in Chinese) [王华滔,秦昭栋,倪玉山,张文 2009 物理学报 **58** 1057]
- [39] Shenoy V B, Miller R, Tadmor E B, Rodney D, Phillips R, Ortiz M 1999 *J. Mech. Phys. Solids* **47** 611

# Generalized planar fault energy of body-centered cubic Ta and its application to plastic deformation of mode II crack tip\*

Mei Ji-Fa Li Jun-Wan Ni Yu-Shan<sup>†</sup> Wang Hua-Tao

(Department of Mechanics and Engineering Science, Fudan University, Shanghai 200433, China)

(Received 26 January 2010; revised manuscript received 17 August 2010)

## Abstract

The generalized planar fault energy, including the generalized stacking fault (GSF) and the generalized twinning fault energy (GTF) of body-centered cubic metal Ta are investigated based on the embedded atom potential. The GSF of Ta, much different from that of fcc metal, reveals that no evident energy minimum is observed in the energy curve. This implies that only full dislocations are possibly emitted in the  $\{112\}$  slip plane. From the GTF it is predicted that the minimum thickness of a metastable twin is as large as four layers and the five-layer twin is more stable. The incipient twin Ta tends to grow thicker once it is created. To confirm the significance of the GSF and GTF in revealing incipient plasticity, quasicontinuum method is used to simulate the mode II crack of single Ta crystal. The results show that deformation twin and full dislocation along  $\langle 111 \rangle$  direction in  $\{112\}$  plane are two co-existing mechanisms of crack tip plastic deformation. The initial four-layer twin quickly extends into five-layer and more-layer twins with further loading. A full dislocation is emitted into the front of the crack tip in  $\{112\}$  plane. These two plastic deformation mechanisms are well explained by the GTF and the GSF respectively.

**Keywords:** generalized stacking fault, generalized twinning fault, body-centered cubic Ta, II-type crack tip

**PACS:** 61.72.Nn, 46.50.+a, 31.15.-p, 61.72.Mm

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 10576010).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: niyushan@fudan.edu.cn