

# Cu刃型扩展位错附近局部应变场的原子模拟研究\*

邵宇飞<sup>1)†</sup> 杨鑫<sup>1)</sup> 李久会<sup>2)</sup> 赵星<sup>2)</sup>

1) (辽宁工程技术大学, 应用物理与技术研究所, 葫芦岛 125105)

2) (辽宁工业大学, 理学院, 锦州 121001)

(2013年9月27日收到; 2013年12月24日收到修改稿)

通过结合 virial 应变分析技术的准连续介质多尺度模拟方法研究了金属 Cu 刃型扩展位错的局部应变场. 结果表明在距离位错核心几十纳米的区域内晶体处于小变形状态, virial 应变计算结果与弹性理论预测结果符合得相当好, 当距离位错核心仅几纳米时, 晶格畸变加剧, virial 应变极大值出现在扩展位错两端的 Shockley 分位错芯部. 进一步分析表明 Shockley 分位错芯部严重畸变区大致呈长轴  $7b_1$ 、短轴  $3b_1$  的椭圆形, 其中  $b_1$  为分位错柏氏矢量的长度.

**关键词:** 位错, 应变分析, 原子模拟, 多尺度

**PACS:** 61.72.Lk, 81.40.Jj, 07.05.Tp

**DOI:** 10.7498/aps.63.076103

## 1 引言

金属材料的力学行为在很大程度上取决于材料的各种微观缺陷. 在这些缺陷中, 位错是一种普遍存在而又十分重要的线状缺陷. 它往往与金属材料的强度、韧性等力学性能, 以及偏聚、腐蚀等化学行为密切相关<sup>[1,2]</sup>. 特别地, 随着金属晶粒的特征尺寸进入纳米量级, 位错与晶界等缺陷的相互作用过程日益引起人们的关注<sup>[3-10]</sup>. 因此, 如何在原子尺度上研究位错是一个十分必要的问题.

一般地, 人们通过高分辨电子显微镜等实验工具研究位错核心的结构和性质<sup>[11,12]</sup>. Zhao 等通过结合几何相位分析 (geometric phase analysis) 的电镜观察手段研究了 Au, Al 中刃型位错的位移场和应变场<sup>[13,14]</sup>, 并和 Peierls-Nabarro 模型等理论预测结果进行了比较, 从而在实验上检验了几种位错模型的准确性. 尽管如此, 由于位错核心原子处于严重畸变状态, 准确预测位错的核心结构

仍需第一原理计算、分子动力学模拟等其他研究手段的帮助<sup>[15,16]</sup>. 例如, Woodard 等通过第一原理计算澄清了金属 Al 中  $\langle 110 \rangle / 2$  扩展位错的两个 Shockley 分位错之间的距离<sup>[17]</sup>; 王崇愚等通过分子动力学模拟研究了 bcc Fe 中刃型位错的结构和能量<sup>[18]</sup>.

近年来, 人们对金属 Cu 中的位错做了大量实验和模拟研究工作<sup>[19]</sup>. Jin 等根据分子动力学模拟系统地分析了扩展位错与共格孪晶界之间的相互作用过程, 他们发现在扩展位错与孪晶界的相遇处会遗留下 Shockley 分位错, 而这些位错-孪晶界相互作用过程与 Shockley 分位错形核所需克服的能垒密切相关<sup>[20]</sup>. Wang 等通过原位高分辨电子显微镜发现在孪晶界的影响下扩展位错的宽度会发生变化, 并且在穿过孪晶界后扩展位错中的领头 Shockley 分位错与拖曳 Shockley 分位错会发生位置互换<sup>[21]</sup>. 以上研究结果表明金属 Cu 中的扩展位错具有重要研究意义, 启发我们继续对其进行深入研究. 在本文工作中, 我们通过一种多尺度耦合的

\* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2011CB606403) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: yfshao@alum.imr.ac.cn

原子模拟方法 (the quasicontinuum method, QC) 构建了一个 Cu 刃型扩展位错模型, 根据 virial 应变分析方法研究了该位错附近的局部应变场, 定量地给出了该扩展位错芯部严重畸变区域范围。

## 2 模型与方法

### 2.1 QC方法

QC 是一种连续介质方法与晶格静力学方法相结合的多尺度模拟方法. 该方法将系统中的次要部分作粗粒化处理, 即仅通过少数代表性原子近似计算其余众多原子的位移和能量, 对于位错核心、晶界和裂纹尖端等重要区域, 该方法严格按照晶格静力学方法分析原子运动的细节. 整个系统按照一定算法进行能量弛豫, 得到稳定结构. 关于 QC 基本原理的详细论述, 可见文献 [22]. 一般地, QC 方法采用原子间相互作用势函数来统一描述系统的力学性质和行为. 本文模拟中所用到的势函数是 Mishin 等发展的 Cu 嵌入原子势 [23]. 通过该势函数得到的 Cu 晶格常数  $a_0$ , 弹性常数  $C_{11}$ 、 $C_{12}$  和  $C_{44}$ , 以及层错能  $\gamma$  列于表 1, 该结果与实验结果符合得很好.

表 1 Cu 晶格常数、弹性常数和层错能

$a_0 / \text{nm}$	$C_{11} / \text{GPa}$	$C_{12} / \text{GPa}$	$C_{44} / \text{GPa}$	$\gamma / \text{mJ}\cdot\text{m}^{-2}$
0.3615 <sup>a)</sup>	169.9 <sup>a)</sup>	122.6 <sup>a)</sup>	76.2 <sup>a)</sup>	44.3 <sup>a)</sup>
0.3615 <sup>b)</sup>	170.0 <sup>c)</sup>	122.5 <sup>c)</sup>	75.8 <sup>c)</sup>	45 <sup>d)</sup>

a), b), c) 和 d) 分别表示当前模拟结果、文献 [24]、[25] 和 [26].

### 2.2 位错模型

在本文的工作中, 我们通过 QC 方法建立了一个多尺度位错模型, 如图 1 所示, 其沿  $x$ ,  $y$  方向长度分别约为 204 nm, 233 nm. 模型在  $xy$  平面内采用非周期性边界条件, 沿垂直纸面方向则采用周期性边界条件, 因此模型在  $[11\bar{2}]$  晶向上只取一个重复单元的长度, 对于所使用的 Mishin 势函数, 其值为 0.443 nm. 一条位错存在于模型中心附近. 在靠近位错及其滑移面的区域内按照晶格静力学方法逐个填充原子, 对远离位错及其滑移面的广大区域则作近似处理, 位错及其滑移面附近原子级填充区域的尺寸分别约为 30 nm×30 nm 和 204 nm×2 nm. 经过这样处理, 我们既可以在原子尺度上准确分析位错的力学性质, 又能够避免有限模型尺寸

对位错核心结构的影响, 同时还可以有效节省计算资源. 例如, 整个模型系统大约包含二百万个原子, 这里需要处理的原子仅约五万个, 相当于全部计算量的 1/40.

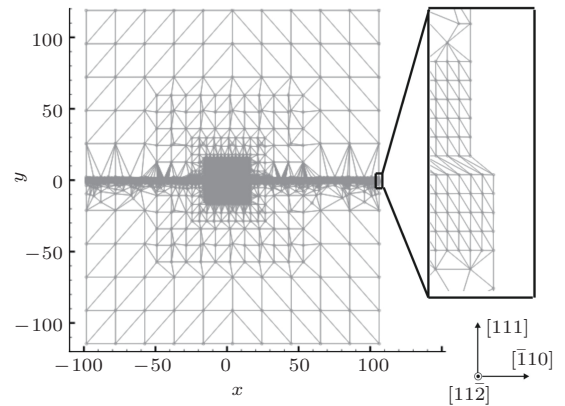


图 1 位错的 QC 模型

位错按如下方法获得:

1) 根据刃位错的沃尔特拉 (Volterra) 模型 [1], 有位错公式

$$u_x = \frac{b}{2\pi(1-\nu)} \left[ (1-\nu)\theta + \frac{\sin 2\theta}{4} \right], \quad (1a)$$

$$u_y = -\frac{b}{2\pi(1-\nu)} \left[ \frac{(1-2\nu)}{2} \ln r + \frac{\cos 2\theta}{4} \right], \quad (1b)$$

其中,  $b$  表示位错柏氏矢量的大小,  $\nu$  为泊松比,  $r$  为原子到坐标原点的距离,  $\theta$  为原子相对于  $x$  轴正向的旋转角, 逆时针绕行方向为正. 这里, 位错柏氏矢量为  $\mathbf{b} = [\bar{1}10]a_0/2$ ,  $a_0$  即为表 1 中的晶格常数, 柏氏矢量大小为  $b = 0.25558 \text{ nm}$ ,  $\nu = 0.32$ ,  $\theta \in [0, 2\pi]$ . 从坐标原点出发, 按照 (1a), (1b) 式逐步移动模型中的所有原子, 直到滑移面两侧边界原子沿  $x$  方向相距  $b$ , 如图 1 中黑色线框所示.

2) 保持边界原子在当前位置固定不动, 允许模型内部原子自由运动, 由共轭梯度算法进行能量弛豫, 一旦系统所受的总失稳力小于  $1.602 \times 10^{-6} \text{ nN}$ , 就认为系统达到平衡状态. 这样获得的位错线沿  $[11\bar{2}]$  方向, 滑移面为 (111) 晶面. 但由于 Cu 层错能较低, 能量弛豫之后位错将按照  $\mathbf{b} \rightarrow \mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2$  方式分解为扩展位错, 其中  $\mathbf{b}$  为位错分解前柏氏矢量, 如上所述为  $[\bar{1}10]a_0/2$ ,  $\mathbf{b}_1$  和  $\mathbf{b}_2$  则分别为扩展位错两端 Shockley 分位错的柏氏矢量,  $\mathbf{b}_1 = [\bar{1}2\bar{1}]a_0/6$ ,  $\mathbf{b}_2 = [\bar{2}11]a_0/6$ . 扩展位错的核心结构将在后面予以阐明.

### 2.3 应变分析方法

在本文的工作中, 主要使用三种应变计算方法, 它们分别源自位错弹性理论<sup>[1]</sup>和 virial 应变概念<sup>[27]</sup>. 具体如下:

基于各向同性介质的位错弹性理论

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx}^e = \frac{b}{2\pi} & \left[ -\frac{(y-y_0)}{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2} \right. \\ & + [(y-y_0)^3 - (x-x_0)^2(y-y_0)] \\ & \times [2(1-\nu)((x-x_0)^2 \\ & \left. + (y-y_0)^2)^{-1}] \right], \end{aligned} \quad (2a)$$

其中,  $\varepsilon_{xx}^e$  表示应变张量的  $xx$  分量,  $b$  和  $\nu$  的意义与前者相同,  $x, y$  表示模型中某原子坐标,  $x_0, y_0$  表示位错中心的坐标.

无限小变形条件下基于 virial 应变概念的计算方法

$$\varepsilon_{xx}^s = \frac{1}{2} (b_{xx} - 1). \quad (2b)$$

有限变形条件下基于 virial 应变概念的计算方法

$$\varepsilon_{xx}^f = \frac{1}{2} (1 - b_{xx}^{-1}), \quad (2c)$$

其中,  $b_{xx} = \frac{1}{\lambda} \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{(l_x^{\alpha\beta})^2}{(l_0)^2}$ , 称为 virial 应变,  $b_{xx}^{-1}$  表示 virial 应变逆矩阵中的对应元素,  $l_0$  表示未变形时某原子  $\alpha$  与其最近邻原子  $\beta$  之间的距离,  $l_x^{\alpha\beta}$  表示当前变形状态下  $\alpha\beta$  之间距离沿  $x$  轴的分量,  $N$  代表最近邻原子数,  $\lambda$  为常数. 对于面心立方金属 Cu,  $N = 12, \lambda = 4$ . 关于 (2b) 和 (2c) 式的详细推导过程可见于我们前面的工作.

## 3 结 果

### 3.1 位错核心结构

图 2(a) 给出了弛豫之后的位错结构, 其中灰色圆点代表 Cu 原子,  $S_1$  和  $S_2$  表示扩展位错两端的 Shockley 分位错, 黑竖线标示出其原子结构, 点虚线表示两分位错之间的层错. 全位错分解为扩展位错的过程可以通过图 2(b) 来阐明. 圆圈构成原子密排的 (111) 晶面, 由 A 指向 B 的箭头表示  $\mathbf{b} = [\bar{1}10]a_0/2$  矢量, 箭头 A $\delta$  和  $\delta$ B 分别表示  $\mathbf{b}_1 = [\bar{1}2\bar{1}]a_0/6$  矢量和  $\mathbf{b}_2 = [\bar{2}11]a_0/6$  矢量. 需要

指出的是,  $\mathbf{b}_1$  和  $\mathbf{b}_2$  即为  $S_1$  和  $S_2$  的柏氏矢量. 这意味着灰色原子保持不动而白色原子要从位置 A 运动到 B, 可以先通过路径 A $\delta$  运动到位置  $\delta$ , 再经过  $\delta$ B 运动到 B. 在这样的移动过程中, 原子都是从密排面的缝隙滑过, 比直接通过路径 AB 滑动容易. 当完成 A $\delta$  步时, 形成层错, 层错的右端出现分位错  $S_1$ , 当完成  $\delta$ B 步时, 层错由左端的分位错  $S_2$  截断. 对于一个稳定的扩展位错, 两分位错之间的排斥力与因层错试图变窄而产生的“吸引力”相平衡. 在本文的模拟中, 扩展位错的平衡宽度约为 3.6 nm, 根据位错理论得到的 Cu 扩展位错宽度为 3.63 nm<sup>[1,2]</sup>, 两者符合得很好, 从而证明模拟得到的位错结构是合理的.

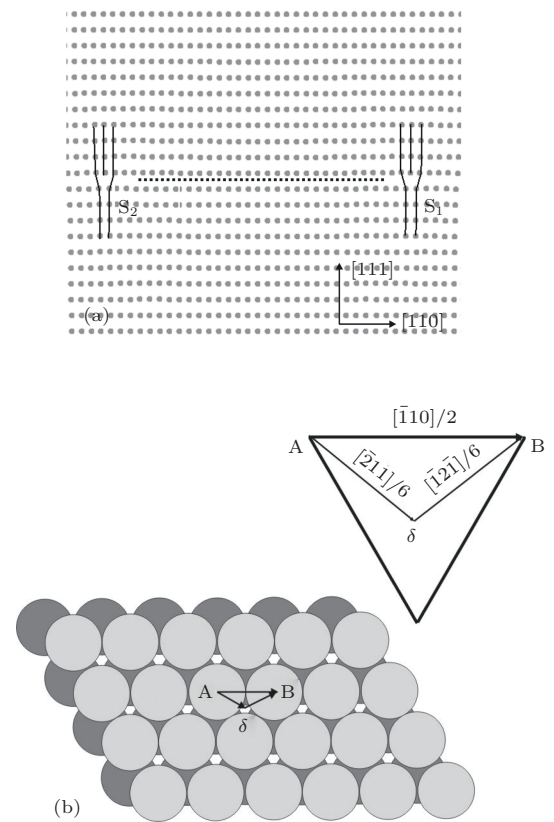


图 2 扩展位错 (a) 原子结构; (b) 形成示意图

### 3.2 位移场和应变场

图 3 和图 4 分别显示了能量弛豫后的位移场和根据 (2a)—(2c) 式计算出的应变场. 值得注意的是, 尽管我们对远离位错核心的区域进行了粗粒化近似处理, 但是位移场和根据弹性理论 (2a) 式得到的应变场在整个模型内都保持了很好的连续性, 包括两区域的交界处. 图 4(a) 中的应变场延伸得很远, 虽然我们没有检验模型尺寸对 Cu 位错结构到

底有何影响,但是由此可以看出建立一个较大的位错模型是有意义的.从图4(b)—(d)可以看出,在位错核心附近区域内,根据virial应变计算(2b)和(2c)式得出的结果与弹性理论计算结果有较大差异.这是因为本文所使用的弹性理论预测公式并没有考虑位错宽度的影响.3.1节的结果说明位错是由一定宽度的层错和两分位错组成的扩展位错.可以推断扩展位错两端的分位错核心处应变最强烈,virial应变计算结果很好地反映了位错的这一结构特征.在稍远区域,两virial应变场显示出与弹性理论相似的“蝴蝶结”图样.

图5定量地显示了virial应变和弹性理论结果

的角向对比情况,即 $x, y$ 轴的取向并不改变,但是以扩展位错的中心为新坐标原点,如果Cu晶体中的原子相对于 $x$ 轴正方向的旋转角度等于某个特定角度,则将该原子位置处的局部应变结果挑选出来,这些挑选出来的应变根据其所在位置到位错中心的距离排序并绘制成曲线.如图5(a)—(d)所示,当远离位错核心时,三种应变计算结果十分接近,从而证明virial应变计算方法的准确性,在位错核心附近区域,virial应变与弹性理论结果有较大差异.这是由扩展位错的结构造成的,本文所使用的弹性理论(2a)式无法准确描述扩展位错核心附近的应变场.

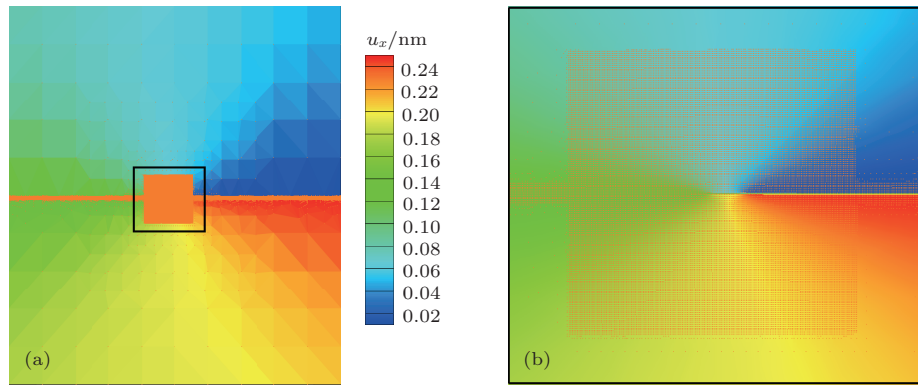


图3 (网刊彩色) Cu 晶体内的位移场 ( $u_x$  表示质点沿  $x$  轴的位移) (a) 整个模型; (b) 位错核心附近区域

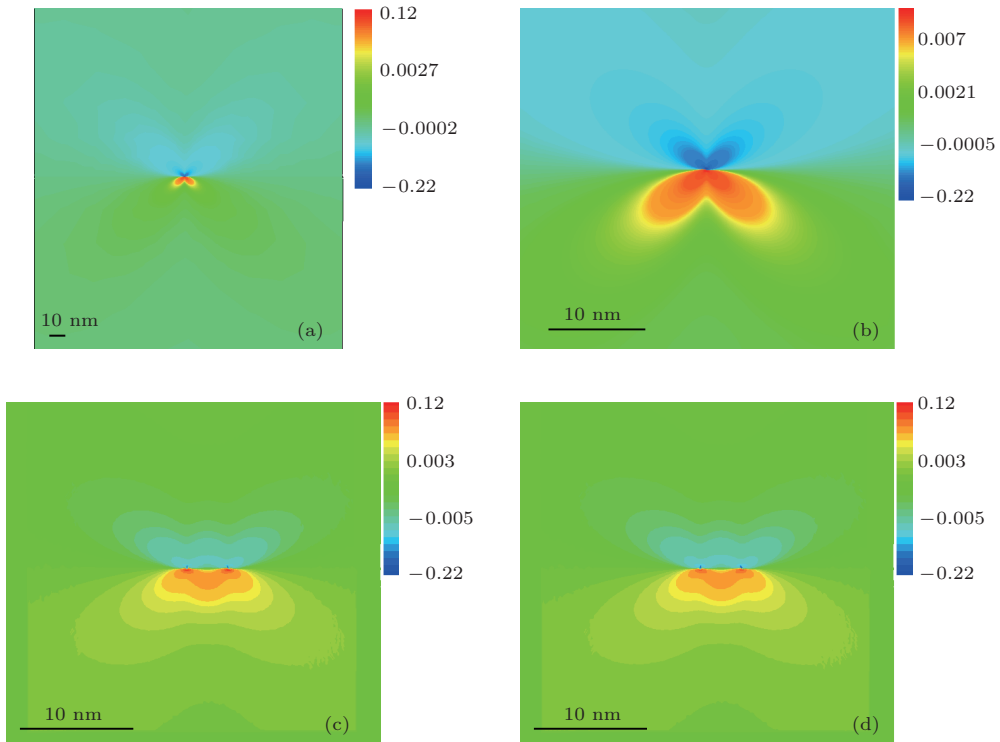


图4 (网刊彩色) Cu 晶体内的应变场  $\epsilon_{xx}$  (a)  $\epsilon_{xx}^e$ , 整个晶体; (b)  $\epsilon_{xx}^e$ , 位错核心附近区域; (c)  $\epsilon_{xx}^s$ , 位错核心附近区域; (d)  $\epsilon_{xx}^f$ , 位错核心附近区域

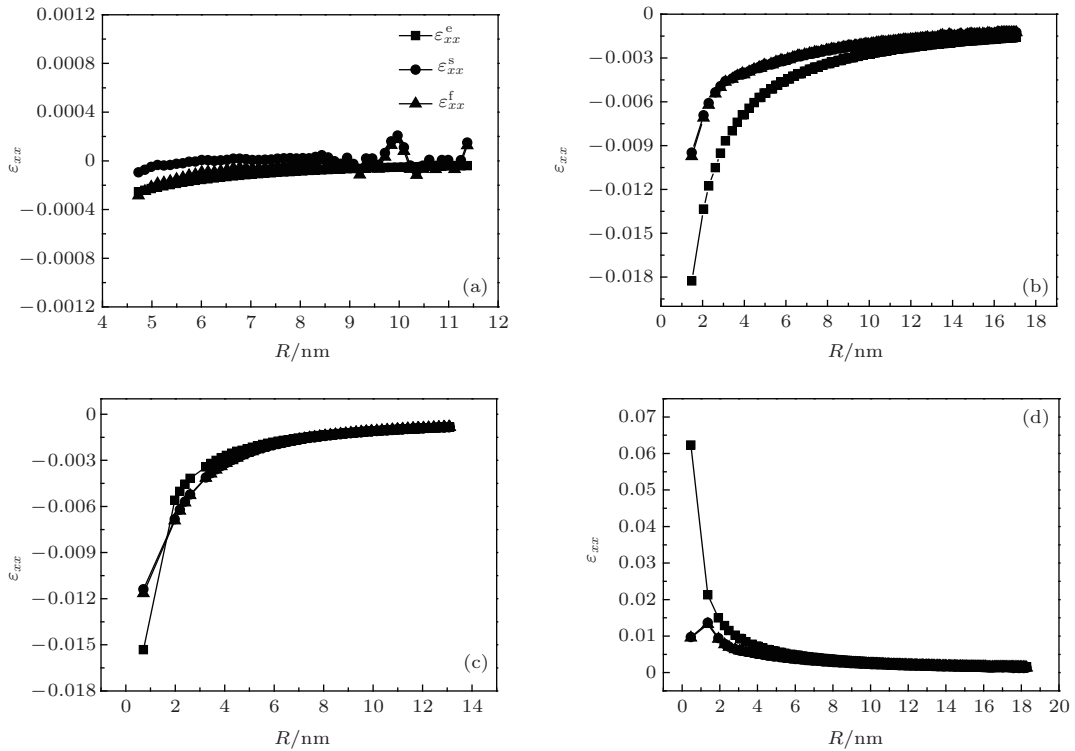


图5 应变场角向对比曲线 (实心方框、圆圈和三角数据分别表示  $\varepsilon_{xx}^e$ ,  $\varepsilon_{xx}^s$  和  $\varepsilon_{xx}^f$ ) (a)  $\theta = \pm 1^\circ$ ; (b)  $\theta = (50 \pm 1)^\circ$ ; (c)  $\theta = (95 \pm 1)^\circ$ ; (d)  $\theta = (225 \pm 1)^\circ$

### 4 讨论

通过图4和图5, 可以看到virial应变能够很好地反映Cu扩展位错核心附近区域的应变状态。但是, (2b)和(2c)式的计算结果仍略有差异, 如图6所示。  $\Delta\varepsilon$ 为无限小virial应变减去有限virial应变的差值,  $\Delta\varepsilon/\varepsilon_{xx}^f \times 100\%$ 表示virial应变的相对误差。图6(a)显示出在扩展位错两端的分位错核心附近两种virial应变之间的差异明显变大。这是由于(2b)式的适用条件是小变形状态, 越靠近分位错核心, 变形越强烈, 因此根据(2b)式计算

出的  $\varepsilon_{xx}^s$  会渐渐偏离有限virial应变  $\varepsilon_{xx}^f$ 。为了定性地说明这个问题, 不妨假设某原子  $\alpha$  附近经历均匀拉伸应变  $\varepsilon_{xx}$ , 在我们之前的工作中已经得出  $b_{xx} = (1 + 2\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{xx}^2)$ , 所以

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx}^s - \varepsilon_{xx} &= \frac{1}{2}(b_{xx} - 1) - \varepsilon_{xx} \\ &= \frac{1}{2}(1 + 2\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{xx}^2 - 1) - \varepsilon_{xx} \\ &= \frac{\varepsilon_{xx}^2}{2}. \end{aligned} \tag{3}$$

可见, 变形越严重,  $\varepsilon_{xx}$  越大, 应变差值  $\varepsilon_{xx}^2/2$  越明显。

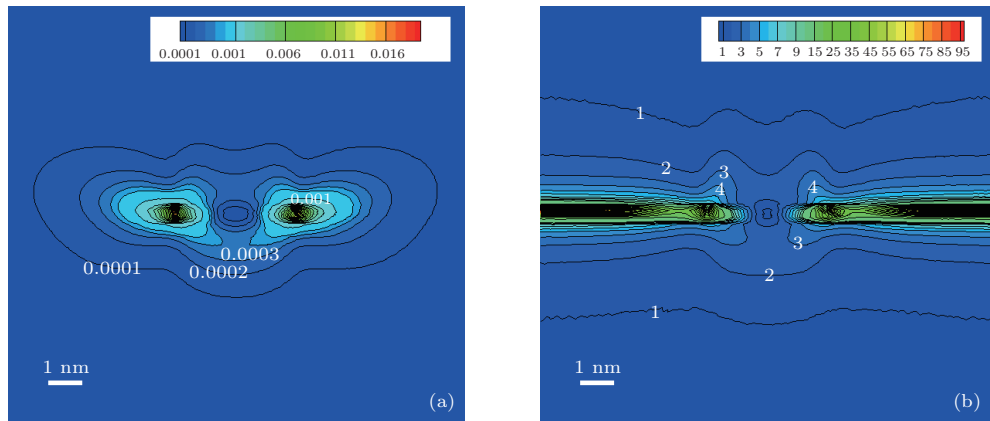


图6 (网刊彩色) 两种virial应变场的差异 (a)  $\Delta\varepsilon = \varepsilon_{xx}^s - \varepsilon_{xx}^f$ ; (b)  $\Delta\varepsilon/\varepsilon_{xx}^f \times 100\%$

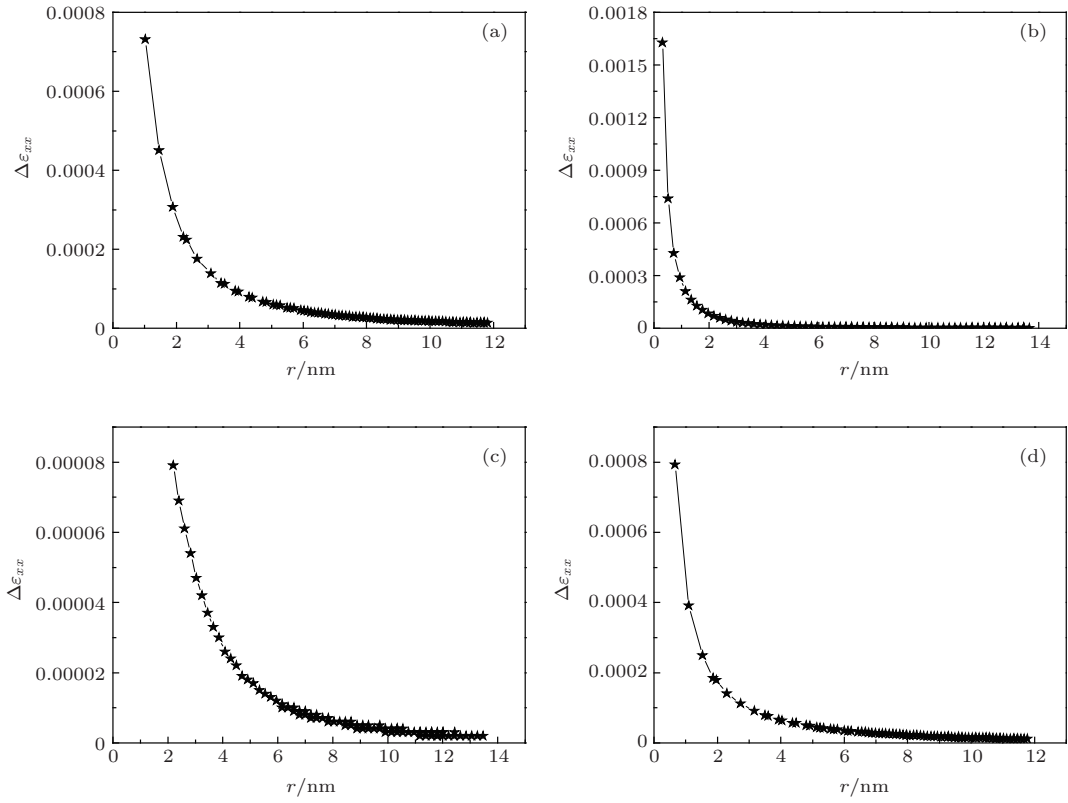


图7  $\Delta\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{xx}^s - \varepsilon_{xx}^f$  的角向曲线 (a)  $\theta = (30 \pm 1)^\circ$ ; (b)  $\theta = (90 \pm 1)^\circ$ ; (c)  $\theta = (270 \pm 1)^\circ$ ; (d)  $\theta = (330 \pm 1)^\circ$

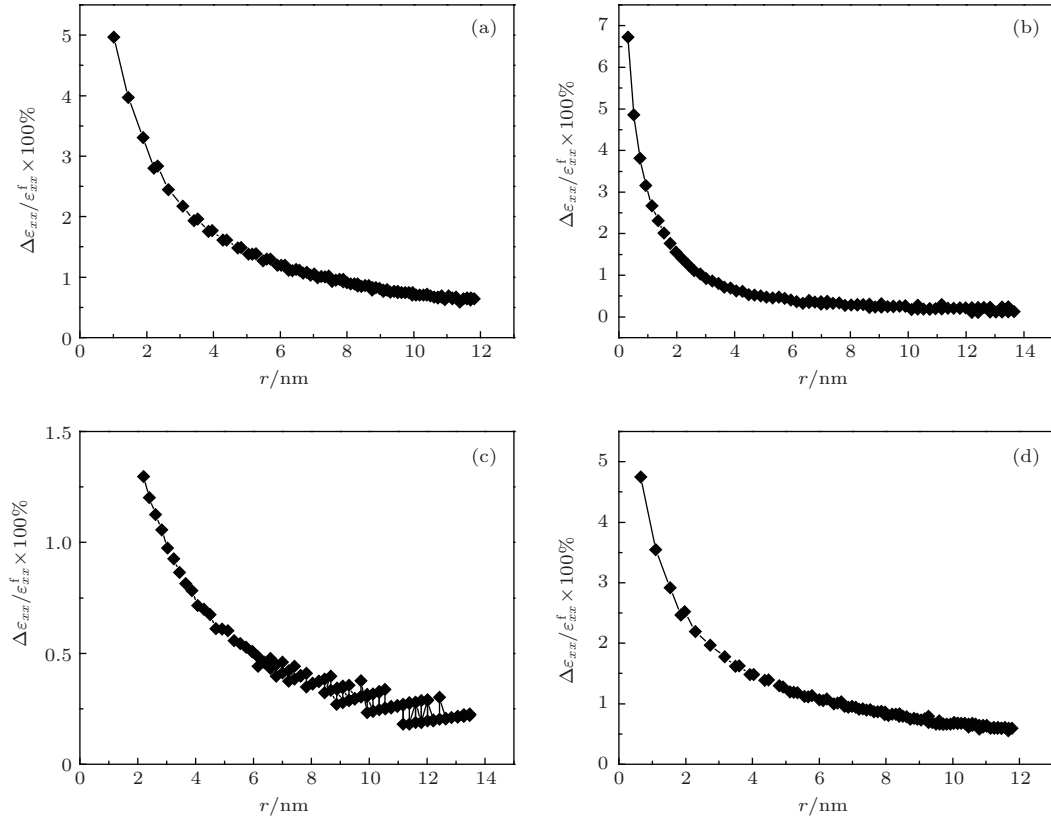


图8  $\Delta\varepsilon_{xx}/\varepsilon_{xx}^f \times 100\%$  的角向曲线 (a)  $\theta = (30 \pm 1)^\circ$ ; (b)  $\theta = (90 \pm 1)^\circ$ ; (c)  $\theta = (270 \pm 1)^\circ$ ; (d)  $\theta = (330 \pm 1)^\circ$

为了进一步仔细分析分位错核心附近应变状态的变化,我们以扩展位错右端分位错 $S_1$ 的中心为原点,按照某些特定角度选取图6中的数据,并绘制成曲线于图7.可以清楚地看出,从 $90^\circ$ 方向靠近分位错 $S_1$ ,当距离缩短至约2 nm时,差值显著增加,如图7(b)所示.实际上,对应于不同的角度,存在不同的临界尺寸 $r_c$ ,当距离 $r$ 小于 $r_c$ 时,差值 $\Delta\varepsilon_{xx}$ 迅速上升.

根据图8中相对误差的角向分布曲线,当从右侧以 $30^\circ$ 角度靠近分位错 $S_1$ 时,一旦距离 $r$ 小于7.4 nm,相对误差会超过1%,如果距离 $r$ 小于1.0 nm,相对误差会超过5%.类似地,可以计算出其他方向上的特征距离.总之,对于本文工作中的Cu扩展位错,当距离扩展位错中心几纳米时,变形开始变得强烈,无限小变形假设开始出现偏差,Shockley分位错的核心畸变区域大致为一个椭圆形区域,其长轴1.0 nm、短轴0.5 nm,分别相当于 $7b_1$ 、 $3b_1$ ,这里 $b_1$ 与 $b_2$ 相等,都是Shockley分位错柏氏矢量大小.

## 5 结 论

本文采用QC方法构建了一个Cu扩展位错的多尺度模型,并通过两种基于离散原子坐标的virial局部应变计算方法分析了扩展位错周围的应变场,主要得出以下结论:

1) 位错周围的应变场延伸很远,在距离位错几十纳米的区域,两种virial应变计算结果与位错弹性理论一致,证明了两种局部应变计算方法的准确性.同时,模拟结果表明晶体远离位错的部分变形程度较小,无限小变形条件完全适用.

2) 在位错附近区域,两种virial应变计算方法都能够较好地描述应变分布的特征,但当距离扩展位错中心仅几纳米时,变形逐渐变得强烈,无限小变形假设开始出现明显偏差,进一步分析表明扩展位错两端的Shockley分位错严重变形区域大致呈长轴 $7b_1$ 、短轴 $3b_1$ 的椭圆形, $b_1$ 为分位错柏氏矢量的长度.

值得注意的是,实际晶体中的位错周围可能存在其他位错、杂质原子和晶界等缺陷,在本文的工作中,并没有考虑这些位错与这些缺陷复杂的相互作用情况,同时我们也忽略了温度的影响.尽管如此,本文的模拟结果仍定量地显示了Cu刃型扩展位错芯部区域原子级应变分布,给出了Shockley分位错核心畸变区域的形貌,为分析位错的精细结构

提供了有益参考.在后面的工作中,我们将进一步分析复杂晶体缺陷周围的原子级应变分布.

## 参考文献

- [1] Hirth J P, Lothe J 1982 *Theory of dislocation* (New York: Wiley) p3
- [2] Pan J S, Tong J M, Tian M B 1998 *Fundamentals of Materials Science*(Beijing: Tsinghua University Press) p219 (in Chinese) [潘金生, 全健民, 田民波 1998 材料科学基础(北京: 清华大学出版社)第219页]
- [3] Swygenhoven H V, Derlet P M, Hasnaoui A 2002 *Phys. Rev. B* **66** 024101
- [4] Wu X L, Ma E 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 231911
- [5] Zhou N G, Zhou L, Du D X 2006 *Acta Physica Sinica* **55** 372 (in Chinese)[周耐根, 周浪, 杜丹旭 2006 物理学报 **55** 372]
- [6] Shimokawa T, Kinari T, Shintaku S 2007 *Phys. Rev. B* **75** 144108
- [7] Sansoz F, Stevenson K D 2011 *Phys. Rev. B* **83** 224101
- [8] Shao Y F, Yang X, Zhao X, Wang S Q 2012 *Chin. Phys. B* **21** 083101
- [9] Zhang B, Xia X M, Li Q 2012 *Rare Metals* **31** 517
- [10] Yu X X, Wang C Y 2013 *Chin. Phys. B* **22** 027101
- [11] Shan Z W, Wiezorek J M K, Stach E A, Follstaedt D M, Knapp J A, Mao S X 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 095502
- [12] Wang L H, Han X D, Liu P, Yue Y H, Zhang Z, Ma E 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 135501
- [13] Zhao C W, Xing Y M, Zhou C E, Bai P C 2008 *Acta Mater.* **56** 2570
- [14] Zhao C W, Xing Y M, Bai P C 2009 *Chin. Phys. B* **18** 2464
- [15] Woodward C 2005 *Mater. Sci. Eng. A* **400-401** 59
- [16] Chen L Q, Wang C Y, Yu T 2008 *Chin. Phys. B* **17** 662
- [17] Woodward C, Trinkle D R, Hector Jr L G, Olmsted D L 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 045507
- [18] Chen L Q, Wang C Y, Yu T 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 5980 (in Chinese)[陈丽群, 王崇愚, 于涛 2006 物理学报 **55** 5980]
- [19] Dao M, Lu L, Asaro R J, De Hosson J T M, Ma E 2007 *Acta Mater.* **55** 4041
- [20] Jin Z H, Gumbsch P G, Albe K, Ma E, Lu K, Gleiter H, Hahn H 2008 *Acta Mater.* **56** 1126
- [21] Wang Y B, Sui M L 2009 *Appl. Phys. Lett.* **94** 021909
- [22] Miller R E, Tadmor E B 2002 *J. Computer-Aided Mater. Design* **9** 203
- [23] Mishin Y, Mehl M J, Papaconstantopoulos D A, Voter A F, Kress J D 2001 *Phys. Rev. B* **63** 224106
- [24] Kittel C 1986 *Introduction to Solid State Physics* (New York: Wiley-Interscience)
- [25] Simons G, Wang H 1977 *Single Crystal Elastic Constants and Calculated Aggregate Properties* (Cambridge, MA: MIT Press)
- [26] Carter C B, Ray I L F 1977 *Philos. Mag* **35** 189
- [27] Zimmermann J 1999 *Ph. D. Dissertation* (Stanford: Stanford University)

# Atomistic simulation study on the local strain fields around an extended edge dislocation in copper\*

Shao Yu-Fei<sup>1)†</sup> Yang Xin<sup>1)</sup> Li Jiu-Hui<sup>2)</sup> Zhao Xing<sup>2)</sup>

1) (*Institute of Applied Physics and Technology, Liaoning Technical University, Huludao 125105, China*)

2) (*College of Sciences, Liaoning University of Technology, Jinzhou 121001, China*)

( Received 27 September 2013; revised manuscript received 24 December 2013 )

## Abstract

The local strain fields around an extended edge dislocation in copper are studied via the quasicontinuum multiscale simulation method combined with the virial strain calculation techniques. Results show that in the regions, tens of nanometers away from the dislocation, atoms are experiencing infinitesimal strain; virial strain calculation results are consistent with the predictions from elastic theory very well. In the regions near the dislocation, the virial strain fields can outline the core areas of Shockley partial dislocations precisely, which are in the shape of ellipse with a longer axis  $7b_1$  and a shorter axis  $3b_1$ , where  $b_1$  is the length of burgers vector of the partial dislocation.

**Keywords:** dislocation, strain analysis, atomistic simulation, multiscale

**PACS:** 61.72.Lk, 81.40.Jj, 07.05.Tp

**DOI:** 10.7498/aps.63.076103

---

\* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2011CB606403).

† Corresponding author. E-mail: [yfshao@alum.imr.ac.cn](mailto:yfshao@alum.imr.ac.cn)