

镁中位错和非晶作用机制的分子动力学模拟

张博佳 安敏荣 胡腾 韩腊

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

Zhang Bo-Jia An Min-Rong Hu Teng Han La

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 143101 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20212318

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212318>

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

基于分子动力学模拟的石墨烯镁基复合材料力学行为

Mechanical behavior of graphene magnesium matrix composites based on molecular dynamics simulation

物理学报. 2022, 71(8): 086201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211753>

分子动力学模拟冷却速率对非晶合金结构与变形行为的影响

Molecular dynamics simulation of effect of cooling rate on the microstructures and deformation behaviors in metallic glasses

物理学报. 2020, 69(11): 116101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191781>

石墨烯/铝基复合材料在纳米压痕过程中位错与石墨烯相互作用机制的模拟研究

Simulation of interaction behavior between dislocation and graphene during nanoindentation of graphene/aluminum matrix nanocomposites

物理学报. 2021, 70(6): 066201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201591>

体心立方Fe中位错环对微裂纹扩展影响的分子动力学研究

Effect of interstitial dislocation loop on expansion of micro-crack in body centered cubic iron investigated by molecular dynamics method

物理学报. 2020, 69(11): 116102 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200317>

温度对小角度对称倾斜晶界位错运动影响的晶体相场模拟

Phase field crystal simulation of the effect of temperature on low-angle symmetric tilt grain boundary dislocation motion

物理学报. 2019, 68(17): 170504 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190051>

取向角对小角度非对称倾斜晶界位错运动影响的晶体相场模拟

Phase field crystal simulation of effect of misorientation angle on low-angle asymmetric tilt grain boundary dislocation motion

物理学报. 2020, 69(14): 140504 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200133>

镁中位错和非晶作用机制的分子动力学模拟*

张博佳 安敏荣† 胡腾 韩腊

(西安石油大学材料科学与工程学院, 西安 710065)

(2021年12月15日收到; 2022年3月27日收到修改稿)

镁合金作为最轻的金属结构材料, 被誉为21世纪的“绿色工程材料”, 具有广阔的应用前景. 晶体-非晶双相纳米镁材料更是表现了优异力学性能, 但是晶体中位错与非晶相的相互作用机制尚不明确. 本文采用分子动力学模拟方法研究了剪切载荷作用下纳米晶镁中刃位错与非晶相的相互作用机制. 研究表明, 纳米晶镁中非晶相与位错的相互作用机制表现出一定的尺寸依赖性. 相较于非晶相尺寸较小的样品, 较大的非晶相尺寸会导致较大的二次应力强化现象. 非晶相和位错的作用机制主要归结为非晶相对位错的钉扎作用. 对于非晶相尺寸较小的样品, 非晶相对位错的钉扎作用有限, 钉扎时间较短, 其相互作用主要是位错绕过非晶相的机制; 而对于非晶相尺寸较大的样品, 非晶相对位错的钉扎作用较大, 钉扎时间较长, 其相互作用主要是非晶相引发的位错的交滑移机制. 本文的研究结果对于设计和制备高性能的镁及其合金材料具有一定的参考价值 and 指导意义.

关键词: 晶体-非晶双相纳米镁, 位错, 变形机制, 分子动力学模拟

PACS: 31.15.xv, 62.25.-g, 61.82.Rx

DOI: 10.7498/aps.71.20212318

1 引言

镁合金作为实际应用中质量最小的金属结构材料, 具有高比强度和比弹性模量、良好的阻尼减震特性、优异的抗冲击性等特点, 在航空航天、汽车、化工和电子等领域都有着重要应用^[1-3]. 尤其是航空航天飞行器对于其结构材料更是“克克计较”, 作为在飞行器结构材料应用较为广泛的镁合金, 人们尝试各种方法来增强镁合金的力学性能, 第二相粒子强化也被应用来改善镁合金的力学性能. 例如, Wu等^[4]通过磁控溅射法将直径约6 nm的MgCu₂晶粒均匀地嵌入约2 nm厚的富含镁的无定形壳(非晶)中, 生产获得具有非晶-纳米晶双相结构的镁基超纳尺寸双相复合材料. 研究表明该双相材料的强度是3.3 GPa, 接近于其理论强度. 作

者所在课题组利用分子动力学(molecular dynamics, MD)方法研究了一系列晶体-非晶双相镁合金的力学性能^[5-9], 研究表明, 通过合理的调控晶体相和非晶相的比例和厚度, 可以有效地改善镁合金的力学性能. 而这些优越的力学性能是和晶体中位错与非晶相的相互作用密不可分的.

第二相强化和固溶强化是金属材料重要的强化机制, 其增强金属材料的根本在于第二相粒子或溶质原子对晶体材料中位错运动的阻碍^[10-13]. 因此, 明确晶体中位错与溶质原子和第二相粒子的相互作用对于研究金属材料的强化机制非常有必要. 许多学者对位错与第二相展开了进一步研究^[14-20]. Li等^[14]研究了剪切载荷作用下碳化硅颗粒对铜基纳米复合材料中位错的阻碍作用引发的强化机制. 研究表明, 碳化硅粒子的增强机制主要是Orowan环的位错绕过机制. 碳化硅颗粒尺寸较大, 由热激

* 国家自然科学基金(批准号: 11572259)、陕西省自然科学基金(批准号: 2021JZ-53)和西安石油大学研究生创新与实践能力的培养资助项目(批准号: YCS20211049)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: anminrong@xsyu.edu.cn

活和尺寸效应导致的脱钉应力和脱钉应变越高, 碳化硅颗粒增强的铜基复合材料的强化效果越强. Bryukhanov^[15]研究了不同 Ni 含量的 Cu-Ni 固溶体合金中刃位错的运动机制. 研究表明, 在中应力区, Ni 原子阻碍了刃位错的运动, 因此位错速度随 Ni 含量的增加而降低, 这是因为阈值应力随着镍浓度的增加而增加. 在高应力区, 镍原子则具有相反的效果, 位错速度随镍含量的增加而增加. Cepeda-Jimenez 等^[16]研究了镁合金中基体位错与析出相的相互作用, 研究表明高温时二相粒子硬化的原因主要是析出相被基面位错剪切; 高温时位错与析出相的作用机制则依赖于加载模式: 在拉伸载荷下, 基面滑移局部化增强导致了粗滑移痕迹与二相粒子界面处出现了较大的应力集中, 最终导致析出物断裂; 在压缩载荷下, 基底滑移分布更加均匀, 二相粒子剪切占主导地位. Alizadeh 和 LLorca^[17]研究了 Mg-Zn(质量分数为 4%) 合金中位错与析出相的相互作用, 研究表明, 变形初期主要是 Orowan 模型, 也就是位错在析出物周围的弯曲; 随后的变形主要是析出相的剪切占主导地位, 棒状析出物转变为球状颗粒, 从而导致滑移带的形成. Huang 等^[18]研究 Mg-Nd 合金中析出物时发现, 在合金中的约束区域基体中的位错会塞积在析出相的周围. 只有当位错塞积强度足够大时, 位错才会以 β_1 析出相的形式滑移出去. Esteban-Manzanares 等^[19]采用 MD 模拟方法研究了镁合金中基面位错与 MgZn₂ 析出相的相互作用. 他们的研究结果指出, 位错最初是通过形成穿透析出相的 Orowan 环来克服沉淀物的. 在几个 Orowan 环堆积之后, 析出相被剪切. 随着析出物横截面的减小和温度的升高, 剪切析出相所需的 Orowan 环数减少, 并且与析出相间距无关. 析出物剪切并没有沿着明确的晶体学平面发生, 而是由析出物中的弹性能累积触发的. 综上所述, 位错与第二相的作用机制主要集中在位错在二相粒子周围形成的 Orowan 环、二相粒子被位错剪切和位错在二相粒子周围的塞积机制等. 近年来, 高性能晶体-非晶双相纳米合金材料的成功制备, 引起了国内外学者的高度关注. 然而, 双相合金在变形过程中, 位错与非晶相之间的相互作用机制是否和上述机制一致, 尚不清楚, 急需进一步揭示.

在过去几十年的研究中, 人们一直尝试利用实验的手段观察和研究位错的运动, 以及位错和晶体

中缺陷的相互作用, 并取得了丰硕的成果^[21-23]. 然而, 受到现代电子和光学显微等技术的限制, 人们往往很难从实验上直接观测到变形过程中材料微观结构演化的细节与规律. 而近年来 MD 模拟方法的发展则为这些问题的研究开辟了一条新途径, 该方法可以从微观角度上重现位错与晶体中缺陷的相互作用. MD 模拟方法以经典力学、量子力学、统计力学为基础, 利用计算机数值求解分子体系经典力学运动方程的方法得到体系的相轨迹, 并统计体系的结构特征与性质, 已成为连接实验和理论的桥梁, 在生物学、物理学、化学、热力学等领域得到了广泛应用^[24-27]. 鉴于此, 本文主要采用分子动力学模拟方法, 研究镁晶体中刃位错和非晶相的相互作用机制. 研究表明, 非晶相的引入增加了纳米晶镁的剪切强度. 纳米晶镁中的位错和非晶相的相互作用机制受到非晶相尺寸的极大影响. 本文的研究结果对于设计高性能的镁合金和推动其应用有一定的指导作用.

2 模拟方法和模拟过程

本文在镁合金中引入刃位错及柱状非晶相, 并利用分子动力学模拟方法对位错与非晶相作用机制进行研究. 首先构建 $16.5 \text{ nm} \times 31.3 \text{ nm} \times 14.8 \text{ nm}$ 的纳米单晶镁模型, 其三维方向分别是 X - $[10\bar{1}0]$, Y - $[1\bar{2}10]$, Z - $[0001]$. 随后, 通过在 Z 方向中点位置的 $\{0001\}$ 面上去掉半原子面的方式引入刃位错, 其中层错的宽度为 2.8 nm . 最后, 在距离该位错 14 nm 的位置引入非晶相柱体, 如图 1 所示. 其中, 非晶柱体选用 $\text{Mg}_{20}\text{Al}_{80}$ 非晶合金. 非晶相柱体的制作过程包含以下步骤: 1) 构建包含 6400 个镁原子和 25600 个铝原子 $\text{Mg}_{20}\text{Al}_{80}$ 晶体模型, 并将该模型在 1200 K 下加热 60 ps , 形成液态非晶; 2) 随后以 $2 \times 10^8 \text{ K/s}$ 的冷却速率迅速将液体骤冷至 50 K ; 3) 在 50 K 的温度弛豫 60 ps 以消除系统热波动, 最终制备出非晶相. 这一过程中在 X , Y , Z 方向上均施加周期性边界条件. 通过对其径向分布函数 (radial distribution functions, RDFs) 进行观察发现, RDF 第二峰出现分裂, 这表明其结构为短程有序, 是典型的非晶体形态^[28]. 在研究过程中改变非晶柱体的直径分别为 1.6 , 2.0 , 4.0 和 6.0 nm .

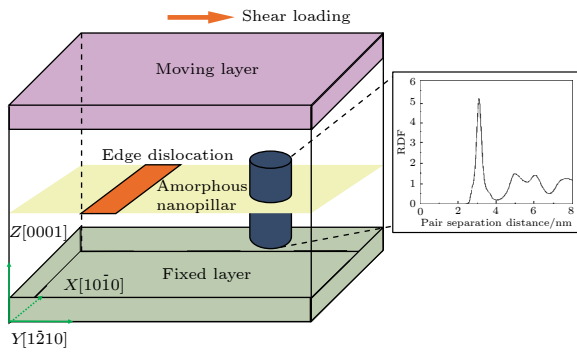


图 1 剪切变形过程中位错与非晶柱体相互作用示意图
Fig. 1. Schematic of interaction between dislocation and amorphous nanopillar under shear deformation.

构建好上述模型后, 在 NPT 系综下弛豫 40 ps 以消除界面效应, 使其达到平衡状态. 剪切过程中下三层原子保持固定, 与此同时向上三层原子施加剪切应变, 只计算中间部分牛顿原子的受力, 从而实现 $1/3 [11\bar{2}0]$ 在 $\{0001\}$ 面上的滑移. 在此过程中, 沿 X, Y 方向施加周期性边界条件, 沿 Z 方向施加自由边界条件. 模拟过程中应用 NVT 系综, 时间步长设为 2 fs. 为了消除原子的热运动效应, 模拟温度选取 10 K, 并使用 Nose-Hoover 恒温器^[28] 控制温度. 在分子动力学模拟中势函数的准确与否, 将直接影响计算结果的精确度. 本文采用 Liu 等^[29] 开发的嵌入原子势来描述 Al-Al, Mg-Al 和 Mg-Mg 之间的相互作用. 选取的应变率为 $5 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$. 本文使用 LAMMPS^[30] 软件进行模拟并通过 OVITO^[31] 对结果进行可视化和分析. 利用公共近邻分析法 (common neighbor analysis, CNA)^[32] 分析晶体中晶体结构和缺陷类型, 采用位错提取法 (dislocation extraction algorithm, DXA)^[33] 识别位错的类型. 在使用 CNA 分析晶体结构时, 用绿色代表 FCC 结构原子, 红色代表 HCP 结构原子, 白色代表无序结构原子.

3 结果与讨论

图 2 所示为含有不同非晶相尺寸和不含非晶相的纳米晶镁的剪切应力-应变曲线. 从图 2 可以看出, 对于含有和不含非晶相的纳米晶镁, 应力都随着应变的增大呈现线性增加的趋势. 当应变达到 0.17% 附近时, 应力呈波动状的缓慢增大直至首个应力峰值, 而这是由于派纳力引发的. 当镁合金中的位错在其基体中移动时, 会由一个对称位置

移动到另一个对称位置. 在这些位置上, 位错处在平衡状态, 能量较低. 而在对称位置之间移动时, 能量会增高, 造成位错移动的阻力. 因此, 在此过程中会有力的周期波动. 对于不含有非晶相的纳米晶镁而言, 当应变达到 0.9% 时应力达到了首次峰值, 随着应变的进一步增大, 应力在 0.05 GPa 附近周期性的波动. 当非晶相尺寸较小时, 例如 1.6 nm 和 2.0 nm 的样品, 当应变达到 0.9% 时应力到达峰值, 随着应变的进一步增大, 应力开始逐渐跌落, 而后应力开始增大至峰值 (1.6 nm 样品在 0.1 GPa 附近, 2.0 nm 样品在 0.08 GPa 附近), 呈现出一定的二次强化现象. 当应变大于 2% 时, 应力又开始跌落. 随着剪切加载继续, 应力应变曲线呈现不断的涨落. 当非晶相尺寸较大时, 例如 4.0 nm 和 6.0 nm 的样品, 当应变达到 0.9% 时应力到达峰值, 随着应变的进一步增大, 应力出现短暂的下落. 随后应力呈现线性增加直至较大的峰值应力 (4.0 nm 样品在 0.2 GPa 附近, 6.0 nm 样品在 0.23 GPa 附近) 后呈现应力跌落. 这与非晶相尺寸较小的样品不同, 较大的非晶相尺寸的样品应力表现出更大的二次强化现象. 此外, 相较于不含非晶相的样品, 非晶相的引入引发了应力的二次强化现象, 并且纳米晶镁中非晶相与位错的相互作用表现出一定的尺寸依赖性. 为了解释剪切应力应变曲线出现的这种有趣的现象, 下文将从尺寸效应的角度阐明纳米晶镁中非晶相与位错的相互作用机制.

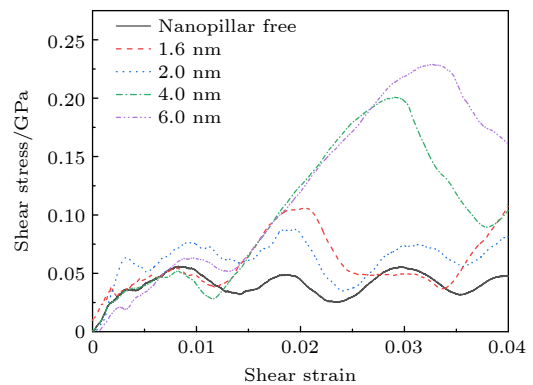


图 2 含有不同非晶相尺寸和不含非晶相的纳米晶镁的剪切应力-应变曲线
Fig. 2. Shear stress-strain curves of the nanocrystalline Mg with different amorphous nanopillar sizes and without amorphous nanopillar.

为了研究非晶相尺寸对于纳米晶镁中非晶相与位错的相互作用机制的影响, 图 3 给出了不含有

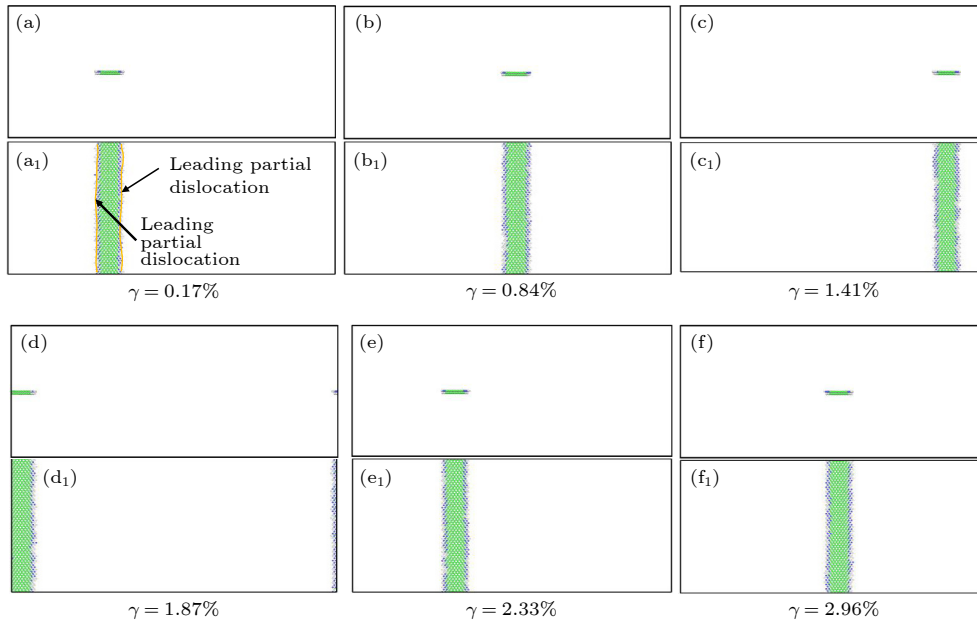


图 3 不含非晶相的样品在不同剪切应变下的变化过程 (a)–(f) 不同剪切应变时 YZ 面视图; (a₁)–(f₁) 不同剪切应变时 XY 面视图

Fig. 3. The evolution process of the sample without amorphous nanopillar at different shear strains: (a)–(f) View of YZ plane; (a₁)–(f₁) view of XY plane.

非晶相时纳米晶镁中刃位错的运动机制作为对照实验 (为了方便观测, 图中去掉了密排六方结构原子). 从图 3 可以看出, 在剪切载荷加载的伊始, 纳米晶镁经历了弹性变形, 当应变达到 0.17% 时, 位错开始运动, 这就意味着该刃位错从此刻开始开启, 其开启的剪切应力为 0.024 GPa. 随后, 在剪切载荷的作用下, 扩展位错在纳米晶镁中不断运动, 如图 3(b)–(f) 所示. 而晶格的周期性则引发了应力的周期性小幅度涨落, 如图 2 所示.

为了研究非晶相尺寸较小时位错与其作用机制, 图 4 选取了非晶相尺寸为 1.6 nm 的样品在不同剪切应变时的变化过程作为代表 (为了方便观测, 图中去掉了密排六方结构原子). 在剪切载荷加载的伊始, 含有非晶相的纳米晶镁经历了弹性变形, 当应变达到 0.2% 附近时, 刃位错开始向前滑移. 当应变达到 0.81% 时, 应力应变曲线达到应力峰值, 非晶相对刃位错表现出显著的吸引力, 如图 4(a) 所示. 随着应变不断增大, 非晶相不断吸引刃位错向前运动. 当应变达到 1.06% 时, 前位错到达非晶相界面, 而应力应变曲线则达到波谷. 当应变达到 1.17% 时, 后位错也到达非晶相界面, 而前位错则开始以 Orowan 环的形式弓出, 如图 4(c), (d) 所示. 在此过程中, 非晶相将刃位错钉扎住. 当应变为 1.73% 时, 前位错已离开非晶相, 弓出的 Orowan 位

错环也恢复成前位错, 而后位错也是以位错环的形式不断弓出. 这与文献 [19, 34–36] 的结论是一致的. 当应变增大到 2.05% 时, 后位错也开始离开非晶相表面, 此时图 2 所示应力应变曲线中应力也开始跌落, 如图 4(d), (e) 所示. 这就意味着, 正是由于非晶相对刃位错的钉扎作用引发了图 2 中应力应变曲线中的应力不断上升. 随着应变增大至 2.11%, 后位错已完全离开非晶相, 弓出的 Orowan 环也恢复成后位错, 如图 4(e), (f) 所示.

图 5 给出了非晶相尺寸为 4.0 nm 的样品在不同剪切应变时的变化过程 (为了方便观测, 图中去掉了密排六方结构原子). 从图 5 可以看出, 在剪切载荷加载的伊始, 含有非晶相的纳米晶镁经历了弹性变形, 当应变达到 0.30% 时, 刃位错开始向前滑移. 当应变达到 0.81% 时, 非晶相对刃位错呈现出一定吸引作用, 如图 5(a) 所示, 这对应了应力应变曲线的峰值. 随着应变不断继续, 非晶相不断吸引刃位错向前运动, 前位错和后位错先后到达非晶相界面, 而应力应变曲线则达到波谷, 如图 5(b), (c) 所示. 在剪切载荷作用下, 刃位错被非晶相钉扎住, 前位错和后位错以 Orowan 环的形式弓出. 当应变达到 2.94% 时, 前后位错都已离开非晶相, 但在非晶相表面仍残留部分位错的拖尾, 如图 5(d) 所示. 当刃位错穿过非晶相后, 非晶相被刃位错切断,

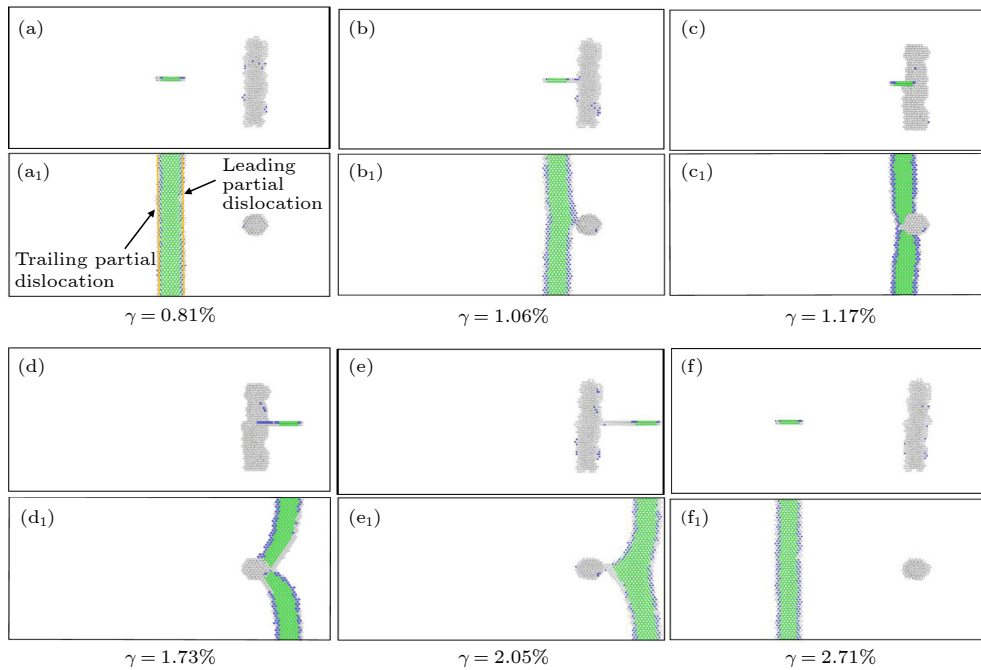


图 4 非晶相尺寸为 1.6 nm 的样品在不同剪切应变下的变化过程 (a)–(f) 不同剪切应变时 YZ 面视图; (a₁)–(f₁) 不同剪切应变时 XY 面视图

Fig. 4. The evolution process of the sample with amorphous nanopillar size of 1.6 nm at different shear strains: (a)–(f) View of YZ plane; (a₁)–(f₁) view of XY plane.

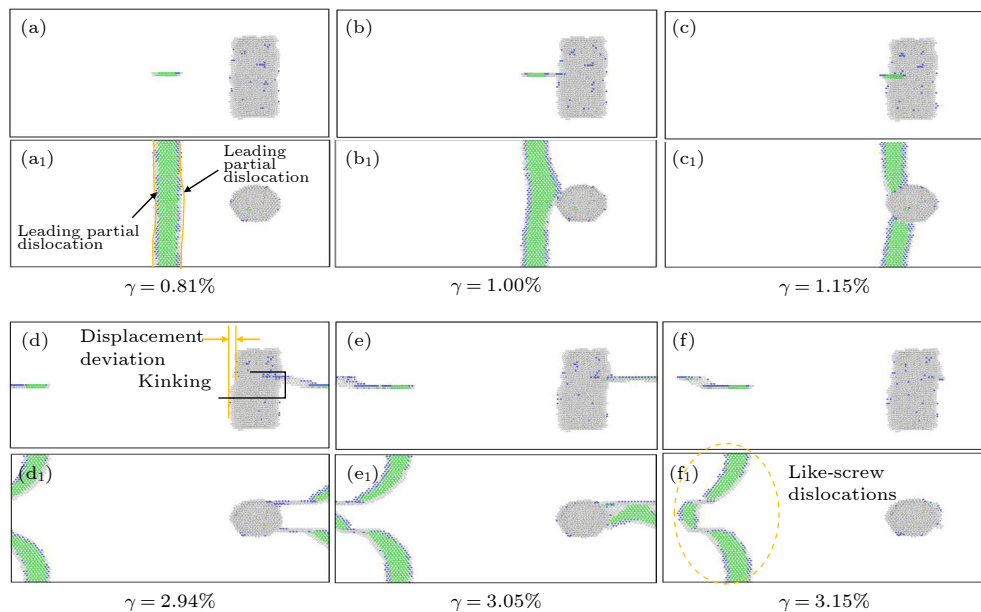


图 5 非晶相尺寸为 4.0 nm 的样品在不同剪切应变下的变化过程 (a)–(f) 不同剪切应变时 YZ 面视图; (a₁)–(f₁) 不同剪切应变时 XY 面视图

Fig. 5. The evolution process of the sample with amorphous nanopillar size of 4 nm at different shear strains: (a)–(f) View of YZ plane; (a₁)–(f₁) view of XY plane.

且被刃位错切断的上半部分和下半部分产生了一定的位移偏差, 非晶相产生一定的扭转. 而上述位错的拖尾在剪切作用下逐渐长大, 并和先前弓出的前后位错汇合形成了类螺位错^[14], 如图 5(e), (f) 所示.

为了说明图 5(f₁) 中类螺位错的形成机制, 图 6

给出了其具体形貌和形成过程. 实际上, 刃位错的交滑移是不可能发生的. 在剪切力作用下, 初始的扩展位错 (刃位错) 沿着基面滑移, 当遇到非晶相时, 扩展位错运动受阻, 其前位错和后位错两个偏位错束集成一个全位错—— $1/3 [11\bar{2}0]$, 该位错是

一个全螺位错. 随后, 该螺位错发生如下分解反应:

$$\frac{1}{3} [11\bar{2}0] \rightarrow \frac{1}{3} [10\bar{1}0] + \frac{1}{3} [01\bar{1}0], \quad (1)$$

即在基面上全位错可分解成两个肖克莱不全位错, 其中两肖克莱不全位错的柏氏矢量同全位错的柏氏矢量之间呈 $\pm 30^\circ$ 角. 随着这两个肖克莱不全位错离开, 非晶相表面又生成了全位错—— $1/3 [11\bar{2}0]$, 该位错沿着 $\{\bar{1}10\}$ 锥面滑移, 交滑移到新的(0001)上后又发生(1)式中的位错分解, 即分解为两个 $1/3 [1\bar{1}00]$ 不全位错和层错, 层错宽度分别为 2.5 nm 和 2.6 nm, 这两个不全位错形成的扩展位错在(0001)面上继续滑移. 这也意味着初始扩展位错的宽度和交滑移后层错宽度是类似的. 图 6(b) 展示了位错提取算法分析出的位错结构图, 图 6(c) 展示了扩展位错在初始和交滑移后 $\{0001\}$ 面上的扩展位错细节示意图, 以及 $1/3 [11\bar{2}0]$ 位错的细节图. 由图 6(c) 可知, 初始由 $1/3 [10\bar{1}0]$ 和 $1/3 [01\bar{1}0]$ 形成的扩展位错在遇到非晶相障碍物后, 通过束集成 $1/3 [11\bar{2}0]$ 位错后沿着 $\{\bar{1}10\}$ 锥面交滑移到新的(0001)面上, 随后又分解成新的扩展位错, 从而实现位错和非晶相的相互作用. 上述交滑移过程和 Li 等^[14]的研究结果类似.

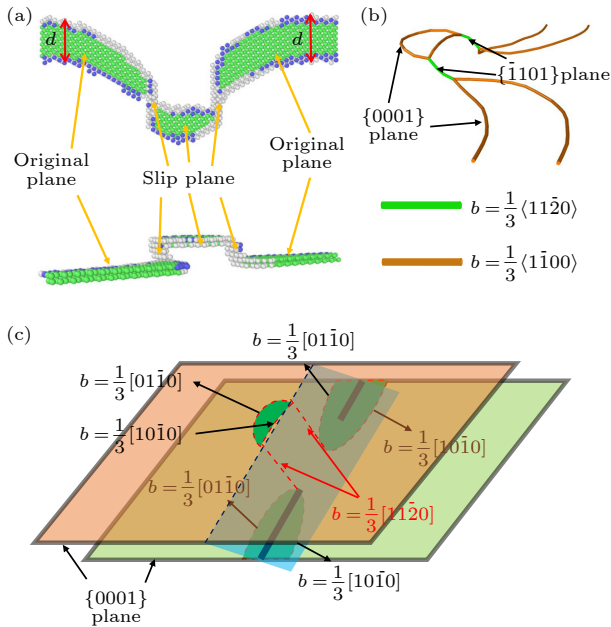


图 6 图 5(f₁) 中类螺位错的细节图 (a) 图 5(f₁) 中类螺位错的具体形貌图, d 代表层错宽度; (b) DXA 分析出的位错结构图; (c) 扩展位错交滑移的细节图

Fig. 6. The details of the like-screw dislocation shown in Fig. 5(f₁): (a) The specific morphologies of like-screw dislocation; (b) dislocation structure analyzed by DXA method; (c) the cross-slip details of the extended dislocation.

图 2 表明在应变为 1.2% 附近, 含有非晶相的纳米晶镁出现了应力波谷, 其后随着应变的增大, 应力也逐渐增大, 即出现了二次强化现象. 但是对于非晶相尺寸较小的样品, 应力增大的幅度较小 (1.6 nm 样品在 0.1 GPa 附近, 2.0 nm 样品在 0.08 GPa 附近), 但是对于非晶相尺寸较大样品, 应力增加的幅度较大 (4.0 nm 样品在 0.2 GPa 附近, 6.0 nm 样品在 0.23 GPa 附近). 为了解释这种现象, 统计了不同非晶相尺寸的样品中, 非晶相对位错的钉扎时间, 即从前位错开始接触非晶界面到后位错离开非晶相的时间, 如图 7 所示. 从图 7 中看出, 随着非晶相尺寸的增大, 非晶相对位错的钉扎时间也在逐渐延长. 当非晶相尺寸为 1.6 nm 时, 其对位错的钉扎时间为 18 ps, 而当非晶相尺寸增大到 6.0 nm 时, 其对位错的钉扎时间高达 48 ps. 当位错的运动被非晶相所阻碍, 其周围的能量开始升高, 这就表现为应力应变曲线中的应力上升现象. 对于非晶相尺寸较小的样品, 位错遇到非晶相后, 前位错首先弓出而后位错弓出. 前位错离开非晶相恢复成初始的不全位错, 随后后位错也离开非晶相恢复成初始的不全位错. 该过程可以称为位错绕过非晶相的机制, 如图 8(a) 所示. 此过程中, 非晶相对位错的钉扎作用有限, 所以其钉扎时间也较短, 就导致了图 2 中应力上升的幅度较小. 对于非晶相尺寸较大的样品, 位错遇到非晶相后开始束集成一个螺位错并发生了位错的交滑移. 前后位错滑移出初始的滑移面后, 通过 $1/3 [11\bar{2}0]$ 位错沿着 $\{\bar{1}10\}$ 锥面交滑移到新的(0001)面上. 随后不同的位错在各自的滑移面上继续运动. 该过程可以称为非晶相引发的扩展位错的交滑移机制^[14], 如图 8(b)

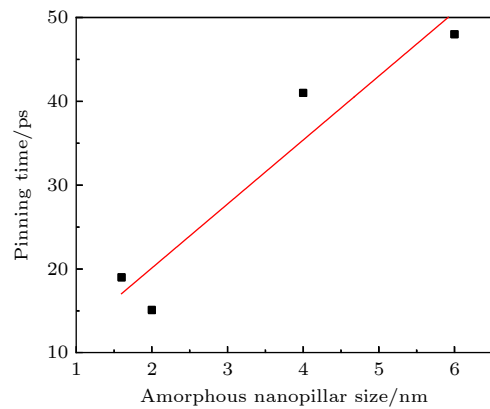


图 7 不同非晶相尺寸的样品中, 非晶相对位错的钉扎时间
Fig. 7. The variation of pinning time versus amorphous nanopillar size.

所示. 此过程中, 非晶相对位错的钉扎作用较大, 所以其钉扎时间也较长, 就导致了图 2 中应力上升的幅度较大. 此外, 图 2 也表明在应变为 0.02 时, 2.0 nm 直径的非晶相的位错剪切应力比 1.6 nm 的小. 这是由于当应变达到 0.02 附近时, 对于 1.6 nm 的模型, 第二位错正在与非晶相相互作用, 非晶相被破坏, 位错被钉扎在非晶相周围, 非晶相对位错的拖拽作用较大. 而对于 2.0 nm 的模型, 此时位错已克服非晶相的阻碍作用并以 Orowan 环的形式弓出, 此时位错已经不再被非晶相钉扎. 因此为了克服非晶相则需要更大的力来对抗非晶相对位错的阻碍, 故在此应变附近, 1.6 nm 的剪切应力稍高于 2.0 nm.

为了更进一步探讨双相镁合金中位错与非晶相互作用时位错机制转变的临界尺寸, 在 2.0—4.0 nm 范围内, 又计算了非晶相尺寸分别为 2.8, 3.0, 3.3, 3.6 nm 的模型来确定位错从绕过机制转换为交滑移机制的临界尺寸. 研究表明, 在 2.8 nm, 3.0 nm (图 9) 及 3.3 nm (图 10) 的模型中位错与非晶相的作用机制为绕过机制, 而在 3.6 nm 的模型中, 位错与非晶相的作用机制为非晶相引发的扩展位错的交滑移机制 (图 11). 因此推断, 位错与非晶相之间的作用机制从绕过机制转换为交滑移机制的临界尺寸在 3.3—3.6 nm 之间.

总而言之, 非晶相和位错的作用机制主要归结

为非晶相对位错的钉扎作用. 对于非晶相尺寸较小的样品, 非晶相对位错的钉扎作用有限, 钉扎时间较短, 其相互作用主要是位错绕过非晶相的机制; 而对于非晶相尺寸较大的样品, 非晶相对位错的钉扎作用较大, 钉扎时间较长, 其相互作用主要是非晶相引发的扩展位错的交滑移机制. 此外, 位错从绕过机制转换为交滑移机制的临界尺寸介于 3.3—3.6 nm 间.

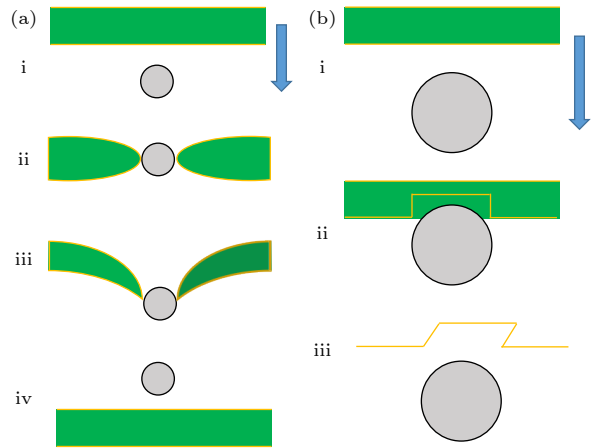


图 8 位错与非晶相的作用机制 (a) 非晶相尺寸较小时的位错绕过机制; (b) 非晶相尺寸较大时的扩展位错交滑移机制

Fig. 8. The interaction mechanism of the dislocation and the amorphous phase: (a) The dislocation bypass mechanism for the sample with small amorphous nanopillar size; (b) the cross-slip mechanism of extended dislocation for the sample with larger amorphous nanopillar size.

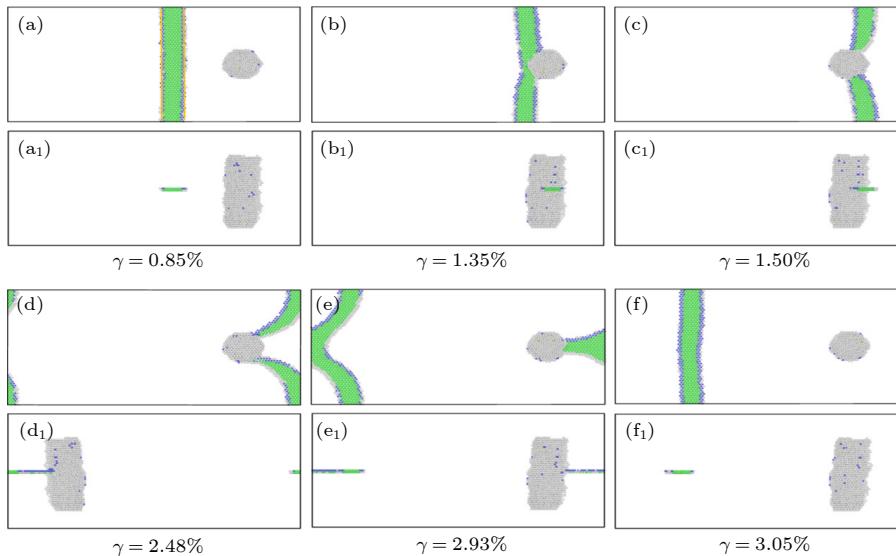


图 9 非晶相尺寸为 3.0 nm 的样品与位错的相互作用的过程 (a)—(f) 不同剪切应变时 XY 面视图; (a₁)—(f₁) 不同剪切应变时 YZ 面视图

Fig. 9. The evolution process of the sample with amorphous nanopillar size of 3.0 nm at different shear strains: (a)—(f) View of XY plane; (a₁)—(f₁) view of YZ plane.

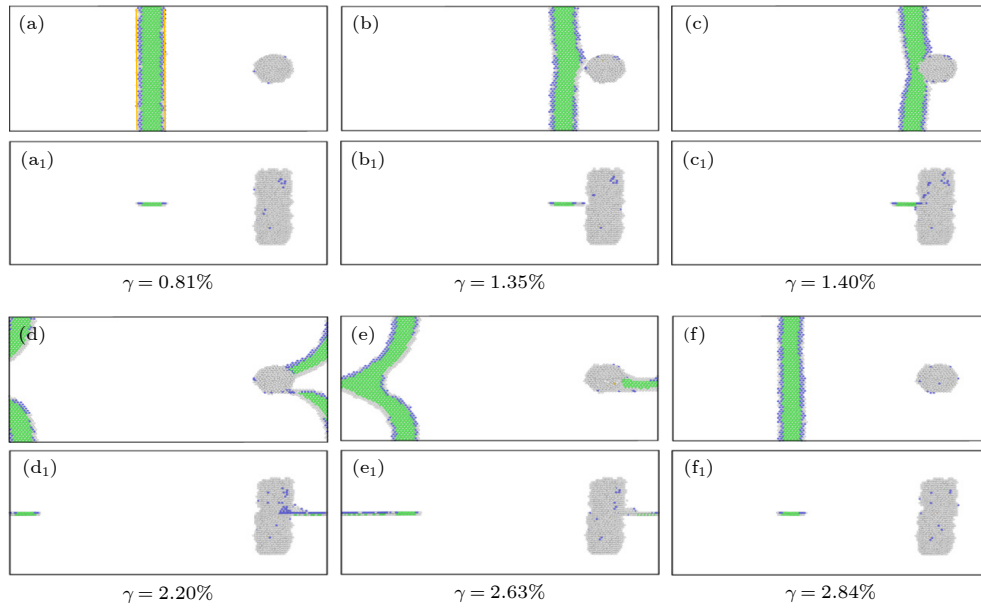


图 10 非晶相尺寸为 3.3 nm 的样品与位错的相互作用 (a)–(f) 不同剪切应变时 XY 面视图; (a₁)–(f₁) 不同剪切应变时 YZ 面视图

Fig. 10. The evolution process of the sample with amorphous nanopillar size of 3.3 nm at different shear strains: (a)–(f) View of XY plane; (a₁)–(f₁) view of YZ plane.

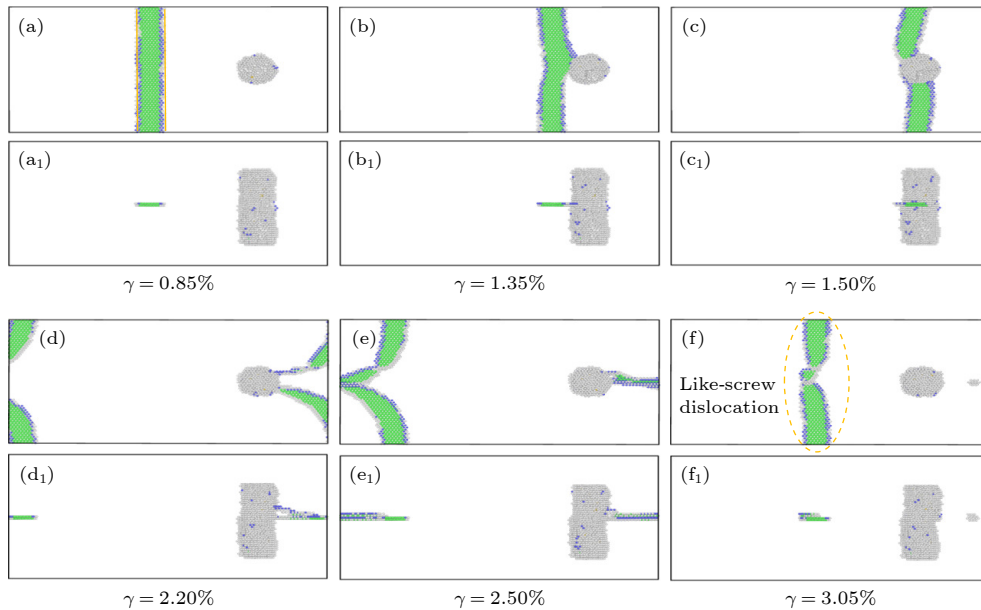


图 11 非晶相尺寸为 3.6 nm 的样品与位错的相互作用的过程 (a)–(f) 不同剪切应变时 XY 面视图; (a₁)–(f₁) 不同剪切应变时 YZ 面视图

Fig. 11. The evolution process of the sample with amorphous nanopillar size of 3.6 nm at different shear strains: (a)–(f) View of XY plane; (a₁)–(f₁) view of YZ plane.

4 结 论

本文采用分子动力学模拟方法研究了剪切作用下不同非晶相尺寸与位错的相互作用机制. 研究表明, 非晶相的引入增加了纳米晶镁的剪切强度,

并且不同非晶相尺寸与位错作用的机制不同. 当非晶相尺寸较小时 (1.6, 2.0, 2.8, 3.0, 3.3 nm), 位错被非晶相所阻碍以 Orowan 环的形式弓出并离开非晶相表面, 最终恢复成刃位错; 当非晶相尺寸较大时 (3.6, 4.0 和 6.0 nm), 位错遇到非晶相后开始束集成一个螺位错并发生了位错的交滑移. 前后位

错滑移出初始的滑移面后, 通过 $1/3[11\bar{2}0]$ 位错沿着 $\{1101\}$ 锥面交滑移到新的 (0001) 面上并在各自的滑移面上继续运动. 非晶相与位错相互作用机制的转变临界尺寸在 3.3—3.6 nm 间. 此外, 相较于较小的非晶相尺寸, 非晶相尺寸较大的样品表现出更大的二次强化现象, 这主要归因于尺寸较大的非晶相对于位错的钉扎时间更长. 本文的研究结果对于设计高性能的镁合金和推动其应用有一定的指导作用.

参考文献

- [1] Pollock T M 2010 *Science* **328** 986
- [2] Wu Z, Ahmad R, Yin B, Sandlöbes S, Curtin W A 2018 *Science* **359** 447
- [3] Liu B Y, Liu F, Yang N, Zhai X B, Zhang L, Yang Y, Li B, Li J, Ma E, Nie J F, Shan Z W 2019 *Science* **365** 73
- [4] Wu G, Chan K C, Zhu L, Sun L, Lu J 2017 *Nature* **545** 80
- [5] Dai J L, Song H Y, An M R, Wang J Y, Deng Q, Li Y L 2020 *J. Appl. Phys.* **127** 135105
- [6] Wang J Y, Song H Y, An M R, Deng Q, Li Y L 2020 *Chin. Phys. B* **29** 066201
- [7] Song H Y, Zuo X D, Yin P, An M R, Li Y L 2018 *J. Non-Cryst. Solids* **494** 1
- [8] Song H Y, Li Y L 2015 *Phys. Lett. A* **379** 2087
- [9] Song H Y, Zuo X D, An M R, Xiao M X, Li Y L 2019 *Comput. Mater. Sci.* **160** 295
- [10] Ardell A J 1985 *Metall. Trans. A* **16** 2131
- [11] Nie J F 2012 *Metall. Mater. Trans. A* **43** 3891
- [12] Gao S, Fivel M, Ma A, Hartmaier A 2015 *J. Mech. Phys. Solids* **76** 276
- [13] Santos-Güemes R, Esteban-Manzanares G, Papadimitriou I, Segurado J, Capolungo L, LLorca J 2018 *J. Mech. Phys. Solids* **118** 228
- [14] Li J, Liu B, Fang Q H, Huang Z, Liu Y 2017 *Ceram. Int.* **43** 3839
- [15] Bryukhanov I A 2020 *Int. J. Plast.* **135** 102834
- [16] Cepeda-Jimenez C M, Castillo-Rodríguez M, Perez-Prado M T 2019 *Acta Mater.* **165** 164
- [17] Alizadeh R, LLorca R 2020 *Acta Mater.* **186** 475
- [18] Huang Z, Yang C, Qi L, Allison J E, Misra A 2019 *Mater. Sci. Eng. A* **742** 278
- [19] Esteban-Manzanares G, Alizadeh R, Papadimitriou I, Dickel D, Barrett C D, Lorca J L 2020 *Mater. Sci. Eng. A* **788** 139555
- [20] Ye T, Xu Y, Ren J 2019 *Mater. Sci. Eng. A* **753** 146
- [21] Habiyaemye F, Guittou A, Schäfer F, Scholz F, Schneider M, Frenzel J, Laplanche G, Maloufi N 2021 *Mater. Sci. Eng. A* **817** 141364
- [22] Li H, Gao S, Tomota Y, Li S, Tsuji N, Ohmura T 2021 *Acta Mater.* **206** 116621
- [23] Li Y, Ran G, Guo Y, Sun Z, Liu X, Li Y, Qiu X, Xin Y 2021 *Acta Mater.* **201** 462
- [24] Yang Q, Ma L, Geng S C, Lin Y N, Chen T, Sun L N 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 106101 (in Chinese) [杨权, 马立, 耿松超, 林旖旎, 陈涛, 孙立宁 2021 物理学报 **70** 106101]
- [25] Pan L, Zhang H, Lin G B 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 134704 (in Chinese) [潘伶, 张昊, 林国斌 2021 物理学报 **70** 134704]
- [26] Shen T Z, Song H Y, An M R 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 186201 (in Chinese) [申天展, 宋海洋, 安敏荣 2021 物理学报 **70** 186201]
- [27] Liu D J, Wang S M, Yang P 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 187302 (in Chinese) [刘东静, 王韶铭, 杨平 2021 物理学报 **70** 187302]
- [28] Su M J, Deng Q, An M R, Liu L T, Chen L Y 2021 *J. Alloys Compd.* **868** 159282
- [29] Liu X Y, Ohotnicky P P, Adams J B, Lane Rohrer C, Hyland R W 1997 *Surf. Sci.* **373** 357
- [30] Plimpton S 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [31] Stukowski A 2010 *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 015012
- [32] Faken D, Jónsson H 1994 *Comp. Mater. Sci.* **2** 279
- [33] Stukowski A, Bulatov V V, Arsenlis A 2012 *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **20** 08500
- [34] Esteban-Manzanares G, Bellón B, Martínez E, Papadimitriou I, LLorca J 2019 *J. Mech. Phys. Solids* **132** 103675
- [35] Simar A, Voigt H J L, Wirth B D 2011 *Comput. Mater. Sci.* **50** 1811
- [36] Jian W R, Zhang M, Xu S, Beyerlein I J 2020 *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **28** 045004

Molecular dynamics simulation of mechanism of interaction between dislocation and amorphism in magnesium^{*}

Zhang Bo-Jia An Min-Rong[†] Hu Teng Han La

(College of Materials Science and Engineering, Xi'an Shiyou University, Xi'an 710065, China)

(Received 15 December 2021; revised manuscript received 27 March 2022)

Abstract

As the lightest metal structural material, magnesium alloy is known as the “green engineering material” of the 21st century. Especially, crystalline-amorphous dual-phase nanostructure magnesium materials exhibit excellent mechanical properties, though the mechanism of interaction between the dislocation in crystal and amorphous phase is still under the investigation. In the present work, the interaction between the edge dislocation and amorphous phase in nanocrystalline magnesium under shear load is studied by using molecular dynamics simulation. The result indicates that the interaction mechanism between amorphous phase and dislocation shows the size dependence. Compared with the sample with smaller amorphous size, larger amorphous size will lead to a large second strengthening effect. And the mechanism of the interaction between amorphous phase and dislocation is mainly attributed to the pinning effect of amorphous on the dislocation. For the samples with small amorphous size, the pinning effect of amorphous on the dislocation is limited and the pinning time is shorter. The interaction mechanism is contributed mainly by the dislocation bypassing amorphous phase. While for the samples with larger amorphous size, the pinning effect of amorphous on the dislocation is larger and the pinning time is longer. The interaction is due mainly to the cross slip mechanism of dislocation caused by amorphous phase. The results from this work have a certain reference value and guiding significance for designing and preparing the high-performance magnesium and its alloys.

Keywords: crystalline-amorphous dual-phase nanostructure magnesium, dislocation, deformation mechanism, molecular dynamics simulation

PACS: 31.15.xv, 62.25.-g, 61.82.Rx

DOI: [10.7498/aps.71.20212318](https://doi.org/10.7498/aps.71.20212318)

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11572259), the Natural Science Foundation of Shaanxi Province, China (Grant No. 2021JZ-53), and the Program for Graduate Innovation Fund of Xi'an Shiyou University, China (Grant No. YCS20211049).

[†] Corresponding author. E-mail: aminrong@xsyu.edu.cn