

金属 Mo 中刃位错运动特性的分子动力学研究

万 强¹⁾ 田晓耕 沈亚鹏

(西安交通大学航空航天学院机械结构强度与振动重点实验室, 西安 710049)

摘要 通过分子动力学方法 (MDM), 采用镶嵌原子势法 (EAM), 沿 [111] 方向插入两层 (211) 半原子面形成位错, 模拟了低温不同冲击载荷下和相同载荷不同温度下金属 Mo 中刃位错的动力学特性. 结果表明: 在低温冲击载荷下, Mo 中的刃位错可以由静止加速到超过波速. 随着载荷的增加, 在位错运动的 [111] 方向将会出现 3 个波速; 在相同载荷不同温度下, 位错的速度随着温度的升高而减小, 即影响位错速度的拖动系数 $B(T)$ 随温度升高而增大. 随着冲击载荷的增大, 拖动系数随温度的变化趋势减缓, 即外加载荷对 $B(T)$ 也有影响.

关键词 分子动力学, 位错, 拖动系数, 波速, 镶嵌原子法

中图分类号: O343.5 **文献标识码:** A **文章编号:** 0459-1879(2005)05-0658-04

引 言

众所周知, 晶体塑性变形是位错运动的结果, 为了从微观尺度理解晶体的塑性行为, 从原子尺度研究位错动力学特性是必要的^[1~3].

低应力情况下, 位错运动的能量损失 (由黏性拖动系数 $B(T)$ 反映) 是由声子或者电子散射造成. 近來有研究指出应将辐射损失考虑到位错运动的能量损失中^[4]. 为了更好地理解黏性拖动系数的机理, Chang 等^[5] 采用分子动力学方法研究了低应力下 Mo 中位错的黏性拖动系数和温度的关系, 模拟得出黏性拖动系数随温度的升高而增加, 这与实验结果一致. 然而在高应力下, 黏性拖动系数和温度的关系却未被注意到.

线弹性动力学理论中, 位错速度不能超过音速 C_T , 因为在到达音速时, 驱动位错运动所需要的能量为无穷大^[6]. 近来的分子动力学研究^[1,4,7~13] 表明, 位错速度可以达到甚至超过音速. Gao 等^[7,11] 用分子动力学模拟发现在各向同性的金属钨中, 如果以较高的初速度, 且在常速率载荷的作用下位错速度可以超过音速. Shi^[9] 和 Wang^[10] 研究了多位错在高速下的相互作用, 他们指出亚音速的位错可以使接近音速的位错减速到亚音速. Rosakis 等^[14] 通过实验, Gao 等^[15,16] 采用分子动力学方法研究了裂纹在冲击载荷下可以超过音速. 静止位错在冲击载荷下能否达到并超过音速还没有人研究过.

本文采用分子动力学方法模拟了在冲击载荷下金属 Mo 中静止刃位错的运动特性以及不同冲击载荷下黏性拖动系数和温度的关系.

1 模拟方法

在分子动力学模拟中, 原子运动遵循牛顿定律

$$m_i \ddot{r}_i = F_i = -\frac{\partial U_{\text{tot}}}{\partial r_i} \quad (1)$$

其中原子间的作用势 U_{tot} 采用 Finnis-Sinclair 势^[17,18].

$$U_{\text{tot}} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j V(r_{ij}) - \sum_i \rho_i^{1/2} \quad (2)$$

V 是中心对称势求和, ρ_i 是原子的电子云密度. 其中

$$\left. \begin{aligned} V(r) &= \sum_{k=1}^6 a_k (r_k - r)^3 H(r_k - r) \\ \rho_i &= \sum_{j \neq i} \Phi(r_{ij}) \\ \Phi(r) &= \sum_{k=1}^2 A_k (R_k - r)^3 H(R_k - r) \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

$H(x)$ 为 Heaviside 函数, 参数 a_k, r_k, A_k, R_k 取自于文献^[17]. 我们采用 Verlet leapfrog 算法积分运动方程 (1).

2004-11-01 收到第 1 稿, 2005-04-14 收到修改稿.

1) E-mail: wanqiang@mailst.xjtu.edu.cn

$$\left. \begin{aligned} v_i\left(t+\frac{\Delta t}{2}\right) &= v_i\left(t-\frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{F_i}{m_i} \Delta t \\ r_i(t+\Delta t) &= r_i(t) + v_i\left(t+\frac{\Delta t}{2}\right) \Delta t \\ v_i(t) &= \frac{1}{2}\left[v_i\left(t+\frac{\Delta t}{2}\right) + v_i\left(t-\frac{\Delta t}{2}\right)\right] \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

其中 m_i , $v_i(t)$ 和 $r_i(t)$ 分别表示第 i 个原子的质量, 速度和位置. 积分的时间步为 1 fs. 图 1 为原子模型示意图. 在 $[\bar{2}11]$ 方向采用固定边界条件, $[111]$ 和 $[0\bar{1}1]$ 方向采用周期性边界条件. 通过在不同温度下 (50 K, 100 K, 200 K, 300 K, 400 K) 沿 $[111]$ 方向插入两层 (211) 半原子面松弛 23 000 步形成位错. 图 2 为 50 K 下松弛 23 000 步后位错附近区域的平衡状态情况, 可以看到位错附近, 原子分布有明显的扭曲. 为了研究载荷对黏性拖动系数 $B(T)$ 的影响, 在各个温度下对松弛后的平衡状态施加 $0.16\%\mu$, $4\%\mu$ 的冲击剪应力 ($\mu = 126$ GPa). 为了研究位错的运动特性, 对 50 K 下含静止位错的平衡态施加从 $0.16\%\mu \sim 6\%\mu$ 的冲击剪应力, 当冲击载荷增大到 $7\%\mu$ 时, 晶体模型变得不稳定, 其中会产生很多新的位错, 因此本文中的最大载荷为 $6\%\mu$. 实际模拟时, 是通过施加冲击剪应变来实现冲击剪应力 (如图 1).

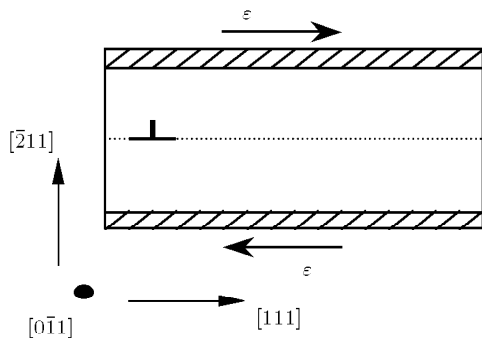


图 1 晶体 Mo 的原子模型

Fig.1 The atomic model of crystal Mo

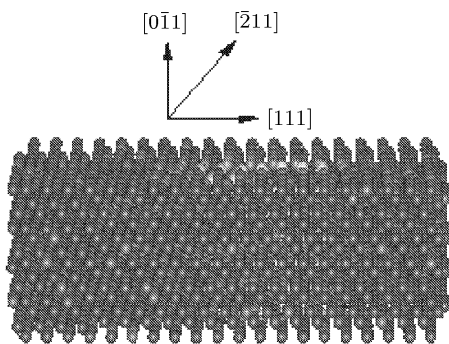


图 2 温度为 50 K 时的松弛结果

Fig.2 Relaxing result with an edge dislocation in the center of the block at 50 K

2 模拟结果与讨论

图 3 显示了低温下 (50 K) 刃位错速度和冲击剪应力的关系. 在 $[111]$, $[\bar{2}11]$, $[0\bar{1}1]$ 坐标系中, Mo 的弹性常数为 $C_{11} = 407.3$ GPa, $C_{66} = 130.6$ GPa, 在此坐标系中 Mo 的横波波速为 $C_T = \sqrt{C_{66}/\rho} = 3.56$ km/s, 纵波波速为 $C_L = \sqrt{C_{11}/\rho} = 6.37$ km/s. 从图 3 中可以看出, 在外加载荷低于 $4\%\mu$ 时, 位错的速度随冲击载荷的增大而增大; 并且在某一载荷下一直以恒定的速度运动出模拟单元. 当载荷超过 $4\%\mu$ 而低于 $4.3\%\mu$ 时, 位错速度先超过横波波速 (在 $4\%\mu$, $4.2\%\mu$, $4.3\%\mu$ 下分别为 $1.04C_T$, $1.1C_T$, $1.33C_T$) 并且保持这个速度运动一段时间, 然后降到横波波速以下 (在 $4\%\mu$, $4.2\%\mu$, $4.3\%\mu$ 下分别为 $0.73C_T$, $0.74C_T$, $0.76C_T$), 最后以这个速度运动出模拟单元. 当载荷超过 $4.3\%\mu$ 时, 位错速度有一个跳跃, 然后随着载荷的增加而接近纵波波速 C_L . 图 3 显示在载荷为 $4.3\%\mu$ 时, 位错速度和载荷关系有一个间断, 如果将间断处的速度定义为 C_I , 那么在 Mo 中存在 3 个波速 $C_T < C_I < C_L$. 这与文献 [20] 的理论分析一致, 文献 [20] 指出在各向异性晶体中, 沿位错运动的方向有 3 个波速 $C_3 < C_2 < C_1$. 图 4 显示了位错在 $4.3\%\mu$ 冲击剪应力作用下运动位错核心周围应变场的变化过程. 图 4(a) 显示了位错速度低于横波速度时, 应变场紧随位错核心一起运动. 图 4(b) 显示了当位错速度超过横波波速时, 位错核心和应变场分离. 位错核心变宽, 似乎位错分裂成两个偏位错. 图 4(c) 显示了当位错速度低于横

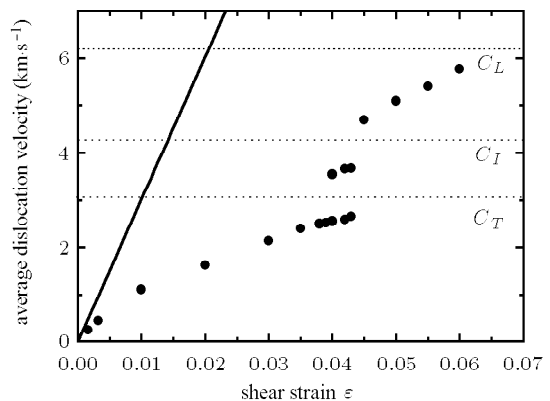
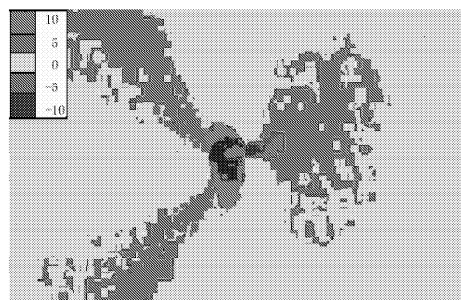


图 3 在低温 (50 K) 下, 位错稳定运动速度和冲击载荷的关系, 斜线为关系式 $Bv_d = Fa$ ($B \approx 10^{-4}$ Pa·s)

Fig.3 Dislocation velocity of the steady motion as a function of the abrupt shear strain at 50 K. The relation of $Bv_d = Fa$ with $B \approx 10^{-4}$ Pa·s is shown by the oblique solid line



(a) 亚音速

(a) Subsonic velocity



(b) 超音速

(b) Above shear wave velocity



(c) 亚音速

(c) Subsonic velocity

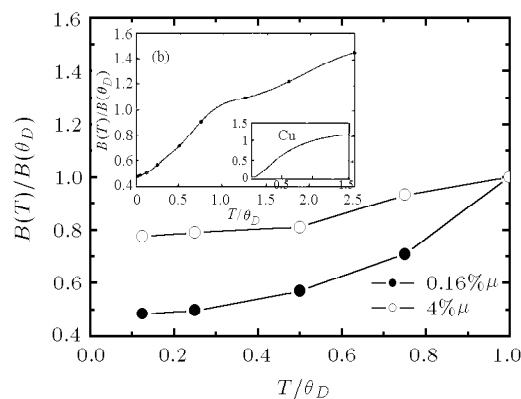
图 4 在 $4.3\%\mu$ 载荷下, 3 个不同速度下运动位错核心周围应变场的分布.

Fig.4 Distribution of strain field around the dislocation core at three velocities under 4.3% load

波波速时, 被应变场追上. 位错核心变窄, 似乎又合成一个完整的位错.

图 5 显示了在 $0.16\%\mu$, $4\%\mu$ 载荷下拖曳系数 $B(T)$ 和温度的关系, 其中插图是文献 [5] 的模拟结果和铜的实验数据的比较. 可以看出本文的模拟结果和文献 [5] 的模拟结果及铜的实验结果在低于德拜温度时的趋势都是一致的, 证明本文模拟结果的正确性. 仅考虑电子和声子散射影响的拖曳系数关

系为 $Bv_d = Fa$, 其中 a 是伯格矢量, F 是载荷, v_d 是位错速度. 图 3 中的斜线为关系式 $Bv_d = Fa$ (在 50K 时 $B \approx 10^{-4} \text{Pa}\cdot\text{s}$). 明显地, 仅考虑电子和声子影响的关系式 $Bv_d = Fa$ 只能反映低应力作用下位错速度和拖曳系数的关系, 高应力作用下应该合理地考虑辐射的影响. 图 5 同时显示在低应力 ($0.16\%\mu$) 作用下, $B(T)$ 的变化快于高应力 ($4\%\mu$) 作用下的变化, 这表明载荷水平对拖曳系数也有影响.

图 5 不同载荷下黏性拖曳系数和温度的关系. 坐标采取归一化, θ_D 为 Mo 的德拜温度 (400 K). 插图是文献 [5] 中 Mo 的模拟结果和铜的实验数据的比较Fig.5 Temperature dependence of drag coefficient for edge dislocation at the abrupt shear strain $0.16\%\mu$ and $4\%\mu$.

Normalized drag coefficient is plotted against normalized temperature. θ_D is Debye temperature (400 K). The inset plot is from Ref.[5] which compares simulation results of Mo with experimental results of Cu

3 结 论

(1) 本文采用沿 $[111]$ 方向插入两层 (211) 半原子面的方法形成 $[111]$ 位错, 得到和文献 [5] 沿 $[111]$ 抽去一层 (111) 半原子面形成 $\frac{1}{2}[111]$ 位错的方法相一致的模拟结果.

(2) 在低温 (50 K) 冲击载荷下, 位错速度可以超过横波波速, 并接近纵波波速. 在横波和纵波速度之间, 位错速度和外加载荷的关系会出现一个不连续的间断, 在 $4\%\mu$ 到 $4.3\%\mu$ 之间, 位错速度出现涨落. 如将间断处速度定义为一个波速, 得到和文献 [20] 理论分析一致的结果: 在各向异性晶体中, 在位错运动的方向出现 3 个波速.

(3) 不止电子和声子散射对 $B(T)$ 有影响, 辐射损失对 $B(T)$ 的影响也应该考虑. 载荷水平对 $B(T)$ 有明显的影

参 考 文 献

- 1 Woo CH. Dynamics of fast dislocations. *Mater Sci Eng A*, 2003, 350(1-2): 223~232
- 2 吴恒安, 王秀喜, 倪向贵. 分子动力学模拟金属纳米杆受压稳定性. *力学学报*, 2003, 35(2): 153~157 (Wu Hengan, Wang Xiuxi, Ni Xianggui. Molecular dynamics on the stability of metal nanorod under axial force. *Acta Mechanica Sinica*, 2003, 35(2): 153~157 (in Chinese))
- 3 梁海弋, 王秀喜, 吴恒安等. 纳米铜丝尺寸效应的分子动力学模拟. *力学学报*, 2002, 34(2): 208~215 (Liang Haiyi, Wang Xiuxi, Wu Hengan, et al. Molecular dynamics simulation of length scale effects on tension nano crystal line copper wire. *Acta Mechanica Sinica*, 2002, 34(2): 208~215 (in Chinese))
- 4 Koizumi H, Kirchner HOK, Suzuki T. Lattice wave emission from a moving dislocation. *Phys Rev B*, 2002, 65(21): 214104~214112
- 5 Chang JP, Cai W, Bulatov VV. Dislocation motion in BCC metals by molecular dynamics. *Mater Sci Eng A*, 2001, 309-310: 160~163
- 6 Hirth JP, Lothe J. Theory of Dislocations. New York: Wiley, 1982
- 7 Gumbsch P, Gao H. Dislocations faster than the speed of sound. *Science*, 1999, 283(5404): 965~967
- 8 Gilman JJ. The limiting speeds of dislocations. *Metall Mater Trans A*, 2000, 31(3A): 811~814
- 9 Shi SQ, Huang H, Woo CH. Interaction of a transonic dislocation with subsonic dislocation and point defect clusters. *Comp Mater Sci*, 2002, 23(1-4): 95~104
- 10 Wang J, Woo CH, Huang HC. Destabilization of dislocation dipole at high velocity. *Appl Phys Lett*, 2001, 79(22): 3621~3623
- 11 Li QK, Shi SQ. Dislocation jumping over the sound barrier in tungsten. *Appl Phys Lett*, 2002, 80(17): 3069~3071
- 12 Rosakis P. Supersonic dislocation kinetics from an augmented Peierls model. *Phys Rev Lett*, 2001, 86(1): 95~98
- 13 Gumbsch P, Gao H. Driving force and nucleation of supersonic dislocations. *J Comput Aided Mater Design*, 1999, 6(2,3): 137~145
- 14 Rosakis J, Samudrala O, Coker D. Cracks faster than the shear wave speed. *Science*, 1999, 284(5418): 1337~1340
- 15 Abraham FF. The atomic dynamics of fracture. *J Mech Phys Solids*, 2001, 49(9): 2095~2111
- 16 Gao H, Huang YG, Abraham FF. Continuum and atomistic studies of intersonic crack propagation. *J Mech Phys Solids*, 2001, 49(9): 2113~2132
- 17 Finnis MW, Sinclair JE. N-body Potential for the noble metals. *Philos Mag A*, 1984, 50(1): 45~57
- 18 Ackland GJ, Thetford R. Simple N-body Potential for the noble metals and nickel. *Philos Mag A*, 1987, 56(6): 735~747
- 19 Ninomiya T. The drag force of dislocation. *J Phys Soc Jpn*, 1974, 36(6): 399~406
- 20 Gao H, Huang YG, Gumbsch P, et al. On radiation-free transonic motion of cracks and dislocations. *J Mech Phys Solids*, 1999, 47(9): 1941~1961

DYNAMICS CHARACTERISTICS OF EDGE DISLOCATION IN METAL Mo BY MOLECULAR DYNAMICS

Wan Qiang¹⁾ Tian Xiaogeng Shen Yapeng

(The Key Laboratory of Mechanical Structural Strength & Vibration, School of Aeronautics & Aerospace,
Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract The dynamics characteristics of edge dislocation in Mo metals are simulated by molecular dynamics (MD) method through inserting two (211) hemi-atom planes along the [111]-orientation. By the embedded atom method (EAM), the edge dislocation velocity is simulated at low temperature under different abrupt shear stress and at the same shear stress under different temperature. Results show that at low temperature, there are three wave velocities in Mo. A stationary dislocation can surmount the transverse wave velocity; the dislocation can surmount the transverse wave velocity and then drop below the transverse wave velocity until running out of the simulation unit under higher abrupt shear stress ($4.3\%\mu$); the dislocation velocity has a discontinuity between the transverse wave velocity and longitudinal wave velocity with the increasing loading. Under the same loading with different temperature, the dislocation velocity decreases with the enhancing temperature, namely the drag coefficient $B(T)$ increases with the enhancing temperature. The $B(T)$ changes to flat with the increasing shear stress.

Key words molecular dynamics, dislocation, drag coefficient, wave velocity, embedded atom method (EAM)

Received 1 November 2004, revised 14 April 2005.

1) E-mail: wanqiang@mailst.xjtu.edu.cn