第 23 卷 第 3 期
2009 年 6 月

高 压 物 理 学 报
CHINESE JOURNAL OF HIGH PRESSURE PHYSICS

Vol. 23, No. 3
June, 2009

文章编号:1000-5773(2009)03-0196-07

基于多尺度分析的 FCC 金属应变率敏感性研究*

秦 焜[1,2],杨黎明[2],胡时胜[1]

(1. 中国科学技术大学近代力学系,安徽合肥 230027;
2. 宁波大学力学与材料科学研究中心,浙江宁波 315211)

摘要:采用位错理论和分子动力学模拟研究了金属原子性质对其宏观应变率敏感性的影响。依据位错运动的 Orowan 关系,认为金属中位错速度对应力的依赖关系是此研究的关键,并分析提出研究金属原子性质与应变率敏感性关系的分析方法。构建了一个中等规模的二维分子动力学模型,应用此模型对单个位错在 FCC 金属中的运动进行模拟。综合位错理论分析和分子动力学模拟结果得出结论:影响金属应变率敏感性的原子性质是其原子量而不是其原子势。依据此结论分析得到的 FCC 金属应变率敏感性排序与试验结果相符。

关键词:应变率敏感性;位错理论;位错速度;分子动力学模拟
中图分类号:O344.1;O347.3 **文献标识码**:A

1 引 言

金属应变率效应通常是指其屈服(或流动)应力随应变率的增加而增加。几乎所有金属都有应变率效应,但不同金属的应变率敏感性存在很大差异。到目前为止,导致这种差异的原因尚不清楚。由于应变率效应主要表现在材料的塑性响应阶段,在细观尺度描述金属塑性机理的位错理论应有助于研究这一问题。

自从 Orowan、Polanyi 和 Taylor 提出用位错理论解释金属的塑性变形,金属塑性变形依赖于其中位错密度和位错速度的观点已被广泛接受[1-2]。为了揭示位错与金属塑性变形的联系,需要首先明确单个位错的性质。而位错速度与应力之间关系是单个位错的一项重要性质,也是金属动态塑性行为研究的关键内容[3-4]。

基于这一认识,已经建立发展了许多研究此项位错性质的研究方法。Johnston 和 Gilman 用蚀坑法完成了测量 LiF 中位错速度与应力关系的经典性实验[5]。其后,许多研究者把这一方法用于多种金属中位错性质研究。大量试验结果表明,位错速度与应力遵循幂函数关系[6]。近几十年来,基于位错理论已经发展出了一些数值方法来研究位错性质。Hiratani 依据位错理论建立了一个包含多种位错运动机理的数值模型[7]。基于半经验的分子间作用势的分子动力学模拟,近 20 年来也成为研究位错运动的可行方法。在这类研究中,位错是通过一定原子排列来构成的,其性质表现为排列原子之间的相互作用,而不仅仅是位错线自身的行为。已经有一些研究尝试通过分子动力学模拟获得位错速度对应力的依赖关系。Chang 等用三维模型研究 BCC 金属中的位错运动[8]。Gumbsch 和 Gao 通过模拟金属钨中刃型位错的运动,研究 BCC 金属中位错的快速运动[9]。Bailey 等用二维 Lennard-Jones(L-J)模型模拟

* **收稿日期**:2008-05-12;**修回日期**:2008-10-13
基金项目:宁波大学科研基金(XK200507,XK0609015)
作者简介:秦 焜(1969—),男,博士研究生,主要从事材料冲击响应、材料力学性能多尺度研究. E-mail:qinkun@nbu.edu.cn

分析应力小于临界值(热激活能控制的位错低速运动)时刃型位错运动[10]。Robles 等人编写了一个二维 L-J 程序,并用它研究 FCC 金属中的位错速度与应力的关系[11-12]。近期这一领域研究论文不断地增多,表明分子动力学模拟已成为研究位错性质的可行方法。

要通过位错动力学模拟获得金属性质仍然需要很多研究工作,如金属中位错结构分布和缺陷分布的确定以及完善模拟大规模位错之间相互作用的分析方法等。到目前为止,还不能完全由位错动力学模拟或分子动力学模拟来获得金属的宏观性质,但通过已取得的研究进展已经可以建立某些金属宏观性质与其微观性质的联系。在本研究中,首先依据位错运动的 Orowan 关系,建立金属宏观性质(应变率敏感性)与其细观性质(位错运动)之间的联系。然后通过分子动力学模拟来获得位错速度对应力的依赖关系,即建立金属细观性质(位错运动)与其原子性质(原子势、原子量等)之间的联系。进而建立金属宏观性质与其原子性质之间的联系,在此基础上分析原子性质对金属应变率敏感性的影响。

2　金属原子性质与其应变率敏感性之间关系的分析

2.1　金属宏观、细观及微观性质之间的联系

虽然分子动力学模拟在 1950 年代就发展起来,但其应用还存在一定的限制。这些限制主要源于微观到宏观之间存在的巨大空间跨度($10^{-10}\sim10^{-3}$ m)和时间跨度($10^{-12}\sim10^{-3}$ s)。即使在可预见的未来,要实现跨如此大尺度的现象的数值模拟也是一个巨大挑战。而且,建立微观现象数值模拟结果与材料宏观性质之间的联系也需要更多的研究工作。

位错动力学是在细观尺度上研究位错与各种缺陷之间以及大量位错之间的相互作用对金属宏观性质的影响,从而预测金属宏观性质的理论体系。位错动力学研究对象的空间和时间尺度远大于分子动力学的研究尺度,它依据金属细观性质参数建立分析模型,而不是直接基于金属的原子性质。金属细观参数理论上可以通过原子尺度现象分析得到,这就需要建立细观与微观之间的联系。建立这样的联系和获得金属细观参数是进行位错动力学模拟的基础。因此,要分析金属宏观性质与其原子性质之间的联系,应首先建立其细观性质与其原子性质之间联系。由其原子性质得到细观性质后,再通过位错动力学模拟分析得到金属的宏观性质。在目前,这种研究途径比直接通过大规模分子动力学模拟直接由原子性质计算金属宏观性质的研究途径更现实和有效。因此,金属细观性质是联系原子性质与宏观性质的桥梁,位错动力学分析是跨尺度金属性质研究中不应忽略的。

2.2　应变率、位错速度和原子性质之间的联系

位错理论中的 Orowan 关系给出了金属宏观塑性应变率与可动位错密度和位错速度所遵循的运动学关系,即塑性应变率在细观尺度对应于这两个细观物理量。它们都有明确的物理含义,所以在细观尺度分析中位错密度和位错速度比分析塑性应变率更直接。而对位错速度的分析就可以通过分子动力学模拟方法实现,即用原子性质来描述位错的运动特征。这样就可以建立原子性质、位错速度与宏观塑性应变率之间的联系。

金属(晶体材料)塑性应变是由位错运动引起的,可以用位错运动参数来描述。Orowan 关系给出了塑性应变率与可动位错密度和位错速度的关系

$$\dot{\gamma}^{\mathrm{p}}=ab\rho v \tag{1}$$

式中:$\dot{\gamma}_{\mathrm{p}}$ 是塑性应变率,a 是方位因子,b 是 Burgers 矢量的值,ρ 是可动位错密度,v 是可动位错平均速度。

应变率敏感性是指一定应变率增加所导致材料屈服(或流动)应力增加的程度。依据 Orowan 关系,宏观应变率是由位错密度和位错速度决定的,同时这两个细观量又是相互影响的。为满足给定的塑性应变率,如果金属中位错密度小则需要更大位错速度;如果位错密度大则只需要较小位错速度。公式(1)表明,如果知道位错密度的变化,则塑性应变率与位错速度之间关系是确定的;而确定金属中位错密度的变化是很困难的,所以塑性应变率与位错速度之间的关系也难以得到。但是,如果位错密度一定,则塑性应变率与位错速度之间的关系是可以分析的,也就是可以研究相同位错密度下不同金属的塑性应变率与位错速度之间关系。当位错速度依赖于施加应力的关系明确之后,就可以建立塑性应变率变化

与应力变化之间的联系，即在位错密度一定的假设下研究金属的应变率敏感性。

如上所述，分析金属应变率敏感性时涉及到位错速度与应力关系。在位错动力学中，对这一关系的描述通常是经验性的。近几年来，Roble 等已经开展了通过分子动力学模拟得到这一关系的研究[11]。他们模拟了不同应力下单个位错在 FCC 晶体的二维模型中的运动，得到了位错速度与应力之间的幂函数关系，即可以通过分子动力学模拟来研究位错速度与应力的关系。

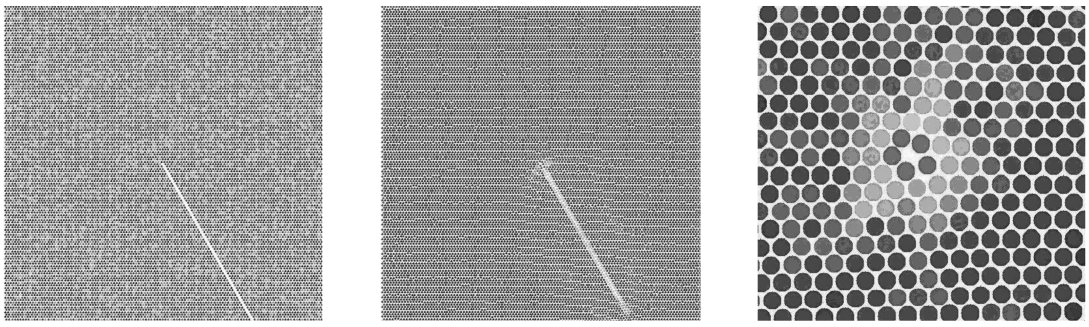
依据位错运动的 Orowan 关系，在位错密度一定的假设下宏观塑性应变率与位错速度（细观性质）之间的关系可以确定。另外，通过分子动力学模拟，可以研究金属原子性质（原子势、原子量等）对位错速度对应力依赖关系的影响。结合这两方面研究，就可以建立金属应变率敏感性与其原子性质的联系。

3 位错速度对应力依赖关系的分子动力学模拟分析

3.1 原子性质对位错速度对应力依赖关系的影响

本研究的分子动力学模拟计算参照了 Roble 等人的研究工作[11]，应用分子动力学程序 Boundary2d 模拟分析单个位错在二维模型中的运动。Boundary2d 是芬兰赫尔辛基大学加速器实验室（Accelerator Laboratory at University of Helsinki）发布的、基于 L-J 势函数和经典分子动力学理论的二维程序[12]。

模拟系统的初始构型是由 335 行原子组成，每行有 291 个原子，原子总数为 97 485。相邻行原子错开排列，形成局部正三角形晶格构型，参见图 1(c)。然后通过 3 个步骤在此构型中构建一个位错结构：(1) 删除自中心－60°射线上的原子，构成一条从中心到底边的“裂缝”，如图 1(a)所示。(2) 删除这些原子后，破坏了原来晶格结构的平衡，原子为形成新平衡而自发运动，导致“裂缝”坍塌，如图 1(b)所示。经过充分松弛后，在构型中心形成一个可滑移的位错，如图 1(c)所示。(3) 在系统松弛过程中，部分原子获得了一定速度，使得整个系统的原子速度分布不再均匀。为消除原子速度的不均匀，依据温度为 30 K 的 Maxwell-Boltzmann 分布对构型中所有原子的速度进行初始化，即随机化系统中所有原子的速度，使其满足给定的系统温度[11]。



(a) (b) (c)

图 1 模拟初始系统的构建及位错放大视图

Fig. 1 The construction of a dislocation in a 2-D lattice and the enlarged view of the dislocation

为了消除模型尺寸对模拟结果的影响，对不同大小构型进行了模拟试算分析，选择尺寸足够大的构型以忽略边界效应对位错运动的影响。通过对不同结构构型的模拟试算来选取适当构型，以确保位于中心的位错在模拟时间段内系统没有被加载时不会离开其初始位置。至此，完成了模拟系统几何原型的构建，它将被用于模拟不同应力载荷下系统中位错的运动。在模拟不同应力下位错运动时，此系统在上下边界承受压应力而两侧为自由边界。位错在模拟过程中沿－120°射线滑移，直至与底边界融合。

在本研究的分子动力学模拟中，分子势用截断半径 $r = r_c$ 的 L-J 势函数描述，即

$$U(r) = \varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right] - \varphi_{LJ}(r_c) \tag{2}$$

式中：ε 和 σ 是 L-J 势常数，$\varphi_{LJ}(r_c)$ 是截断半径 $r_c = 3.1a_0$ 的截断函数（试算结果表明增大截断半径对位

错运动模拟结果没有明显影响),a_0 是金属晶格常数[13]。

由于所选用的 L-J 势函数只包含 2 个参数,于是研究原子势对位错运动的影响就简化为研究这两个参数对位错运动的影响。σ 表示原子间的平衡距离,它依赖于金属晶格常数,对于已构建的初始系统是不变的。ε 表示原子间相互作用的强度,其大小可能会影响模拟系统中的位错运动。势函数只给出了对作用力的描述,要研究位错运动(排列原子的运动)还需要考虑原子量的影响。下面将通过模拟计算来分析 L-J 势常数 ε 和原子量对位错运动的影响。

为了研究这两个参数对位错运动的影响,首先模拟由铜原子构成的初始系统在给定应力下的演化,然后在相同给定应力条件下分别对 ε 或原子量分别加倍系统的演化进行了模拟。图 2(a)、图 2(b)给出了应力分别为 1.168 GPa 和 2.336 GPa 作用下这 3 个系统中位错位移(以晶格常数为单位)随时间(以计算时间步长 2 fs 为单位)的演化。

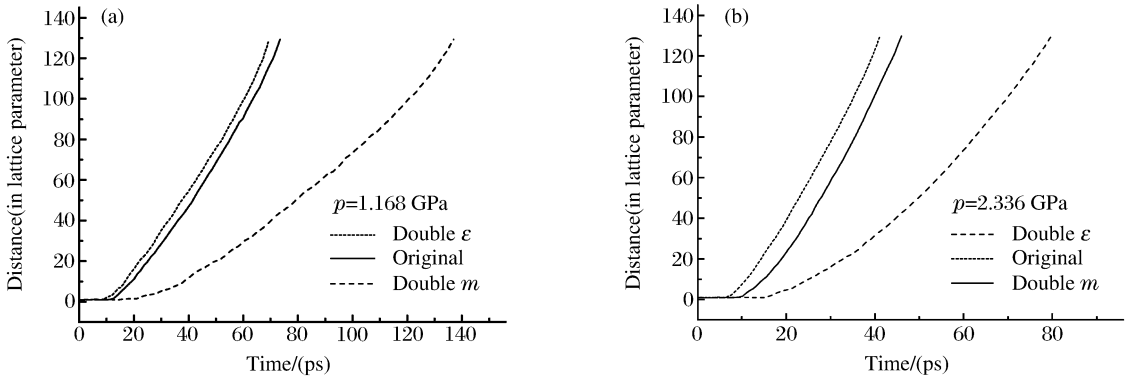


图 2　不同给定应力下不同系统中位错位移随时间的演化

Fig. 2　Dislocation displacement versus time in different systems under given stresses

在图 2 中可以看到,在位错启动阶段和接近边界阶段,曲线明显弯曲,表明位错速度变化明显;而曲线中段接近于直线,表明位错速度趋于稳定。通过对试算结果的分析认为:曲线起始端的弯曲与加载应力的传播速度有关;曲线末端的弯曲与系统模型的大小有关,即与边界效应有关。在数据处理中,只对曲线中段进行线性拟合得到其斜率,进而计算得到相应的位错速度。计算得到的不同应力下各系统中的位错速度列在表 1 中。

表 1　给定应力下不同系统中的位错速度

Table 1　Dislocation velocities in different systems

System	Dislocation velocity/(m/s)	
	p = 1.168 GPa	p=2.336 GPa
Original	796	1 449
Double ε	774	1 427
Double m	424	861

比较图 2(a)和图 2(b)中相同模拟系统所对应曲线的斜率,可以发现在高应力下得到曲线的斜率明显大于低应力下的斜率,表明位错在高应力下的运动速度比低应力下大。在图 2 中可以看到,初始系统和原子势幅值 ε 加倍系统的位错位移与时间曲线几乎平行,这表明相同原子量系统的原子势幅值 ε 的改变对位移时间曲线斜率的影响不明显,即这两个系统中的位错速度基本相同。与此相对照,图 2 中表示原子量加倍系统中位错速度的宽虚线斜率明显小于初始系统中的斜率,表明在此系统中位错的运动速度小于初始系统,这说明原子量对位错运动速度有显著影响,在原子量大的金属中位错移动速度小。表 1 中数据也清楚地反映了上述现象,即原子势幅值 ε 对位错速度影响小,而原子量对位错速度影响大。也就是说,位错运动更取决于金属原子量,即金属原子的惯性,而不是其原子势幅值 ε。

3.2 FCC 金属中位错速度对应力的依赖关系

为了研究不同 FCC 金属中的位错运动性质，接下来对铝、银、铜、镍和铅 5 种金属中的位错运动进行了模拟分析，表 2 列出了所研究金属的原子性质参数[14]。

表 2 FCC 金属原子参数和 L-J 势参数

Table 2 L-J parameters of FCC metals

Metal	m	a_0/(nm)	ε/(eV)	σ/(nm)
Al	26.98	0.405 0	1.081	0.286 4
Ag	107.87	0.409 0	1.329	0.289 2
Cu	63.54	0.361 0	1.372	0.255 3
Ni	58.71	0.352 0	1.682	0.248 9
Pb	207.19	0.495 0	0.939	0.350 4

Note: m is atom mass number, a_0 is lattice parameter.

根据表 2 中各金属原子性质参数，首先通过前述方法得到其模拟初始系统，然后对初始系统在一系列应力作用下的演化进行模拟，得到各应力下位错位移随时间的演化曲线。图 3(a)、图 3(b)分别给出了不同应力(0.3～6.0 GPa)下铜和铅中位错位移随时间演化的两组典型曲线。对其它 3 种金属的模拟也得到类似曲线。通过前述的数据处理方法，可以得到这 5 种金属在不同应力下的位错速度，图 4 给出了各金属中位错速度与应力的对应关系曲线。

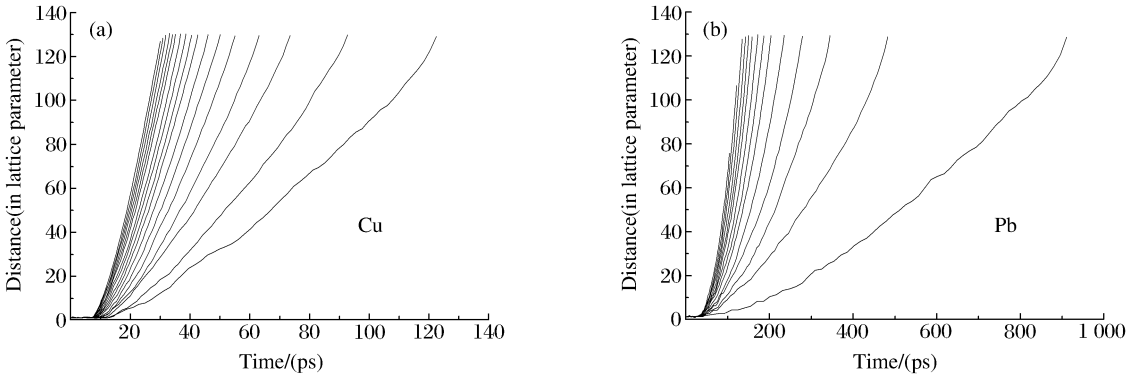


图 3 不同应力下位错位移随时间的演化(各曲线对应的应力从右到左依次等量增大)

Fig. 3 Dislocation displacement versus time under different stresses

(The stress of each curve increases by an equal difference from the right to the left)

3.3 模拟结果分析

图 3 中相邻曲线的应力差值是相同的，但相邻曲线斜率的变化量却不相同。在图 3 中可以看到，随着应力增加，位错位移时间曲线更加密集，而其斜率变化减小，即曲线斜率与应力不是正比关系。而曲线斜率对应于位错速度，则图 3 中曲线表明随着应力增加位错速度增量却减小，即位错速度与应力也不是正比关系。这一点在图 4 中更容易看到，位错速度与应力的函数关系为上凸递增的，即同一应力增量在低应力时导致较大位错速度增量，而在高应力时导致较小位错速度增量。这一分析结果与现有的试验结果和理论分析结果相符[5,7]。

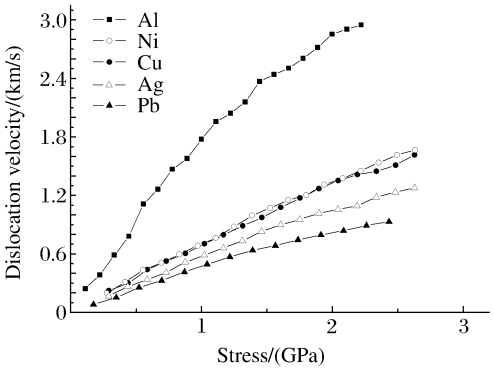


图 4 FCC 金属中的位错速度与应力的关系

Fig. 4 Stress dependence on dislocation velocity of FCC metals

在图 4 中可以看到,对应于相同应力,原子量最小的铝中位错速度最大而原子量最大的铅中位错速度最小,其它 3 种金属中位错速度也与金属原子量排序相反。结合前面分析可知,为达到相同塑性应变率,铅中位错密度应大于铝中位错密度(忽略 Burgers 矢量的差别)。要通过试验来验证这一点,就需要在试验中明确试件中的位错结构,而这也是很难实现的,还没有相关试验研究的论文。

根据图 4 中各曲线的斜率,可以得到位错速度增量与应力增量之间的关系。相同位错速度增量,在铅中对应较大的应力增量,而在铝中对应较小应力增量。依据 Orowan 关系并假设位错分布相同,则位错速度增量就对应于塑性应变率增量。从图 4 中曲线可得到,如果应变率增量或位错速度增量相同,需要对铅施加较大的应力增量而对铝施加较小应力增量,即铅的应变率敏感性要大于铝。依此类推,铜比铝敏感而铅比铜敏感。如果要通过试验来验证这一推论,就需要控制试件中位错密度,这在目前很难实现。但是,这一推论与通过试验得到的这三种金属应变率敏感性排序恰好一致。

依据图 4 中曲线和相同位错分布假设,就可以推断这 5 种金属的应变率敏感性顺序,即从大到小依次为铅、银、铜、镍和铝。如果金属试件没有经过特殊热处理,这一排序也与现有试验结果吻合。

在图 4 中可以看到,由于镍和铜的原子量相近,导致它们的位错速度与应力曲线差别很小。这也符合位错速度或应变率敏感性在原子尺度上更依赖于金属原子量的推论。

4　结　论

本研究着重研究了金属原子性质对其应变率敏感性的影响。首先依据位错运动的 Orowan 关系和位错速度对应力的依赖关系,分析提出研究金属原子性质对其应变率敏感性影响的分析方法;然后开展分子动力学模拟来研究位错速度对应力的依赖关系,并依据模拟结果分析原子性质(原子势、原子量)对金属应变率敏感性的影响。

基于这一分析方法,在研究中构建了中等规模(约 10^5 个原子)的分子动力学二维模型,用于数值模拟分析 FCC 金属中位错速度对应力的依赖关系。根据分子动力学模拟结果,分析了金属原子势和原子量对其位错速度对应力依赖关系的影响以及金属应变率敏感性的影响。分析表明:FCC 金属中位错速度对应力依赖关系及其应变率敏感性主要取决于金属原子量,而不是其原子势。也就是说,FCC 金属应变率敏感性主要依赖其原子的惯性。

对 5 种 FCC 金属(铅、银、铜、镍和铝)中位错速度对应力的依赖关系进行了分子动力学模拟。对模拟结果的分析进一步表明:FCC 金属原子量越大,其应变率敏感性也越高。基于这一结论得出上述 5 种 FCC 金属的应变率敏感性排序与现有的试验结果相符。

References:

[1] Hirth J P, Lothe J. Theory of Dislocations [M]. New York: Wiley, 1982: 9-13.

[2] Hull D, Bacon D J. Introduction to Dislocations [M]. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2001: 14-15.

[3] Lepinoux J, Kubin L P. The Dynamic Organization of Dislocation Structures: A Simulation [J]. Scripta Met, 1987, 21: 833-838.

[4] Rhee M, Zbib H M, Hirth J P, et al. Models for Long-/Short-Range Interactions and Cross Slip in 3D Simulation of bcc Single Crystals [J]. Model Simul Mater Sci Eng, 1998, 6: 467-492.

[5] Johnston W G, Gilman J J. Dislocation Velocities, Dislocation Densities and Plastic Flow in Litheium Fluoride Crystals [J]. J App Phys, 1959, 30: 129-144.

[6] Meyers M A. Dynamic Behavior of Materials [M]. New York: John Wiley & Sons, 1994: 330-337.

[7] Hiratani M, Nadgorny E M. Combined Model of Dislocation Motion with Thermally Activated and Drag-Dependent Stages [J]. Acta Mater, 2001, 49: 4338-4346.

[8] Chang J, Bulatov V V, Yip S. Molecular Dynamics Study of Edge Dislocation Motion in a bcc Metal [J]. J Comput-Aided Mater Design, 1999, 6: 165-173.

[9] Gumbsch P, Gao H. Driving Force and Nucleation of Supersonic Dislocations [J]. J Comput-Aided Mater Design, 1999, 6: 137-144.

[10] Bailey N P, Sethna J P, Myers C R. Dislocation Mobility in Two-Dimensional Lennard-Jones Material [J]. Mater Sci Eng, 2001, A309-310: 152-155.

[11] Robles M, Perondi L F, Ksaki K. Dynamics of a Dislocation Set in Motion by an External Stress [J]. Int J Modern Phys C, 2002, 13: 97-105.

[12] Merimaa J, Perondi L F, Kaski K. An Interactive Simulation Program for Visualizing Complex Phenomena in Solids [J]. Comput Phys Commun, 2000, 124: 60-75.

[13] Lennard-Jones J E. Cohesion [J]. Proc Phys Soc, 1931, 43: 461-482.

[14] Girifalco L A, Weizer V G. Application of the Morse Potential Function to Cubic Metals [J]. Phys Rev B, 1959, 114: 687-690.

Study on Strain Rate Sensitivities of FCC Metals Based on Multi-Scale Analysis

QIN Kun[1,2], YANG Li-Ming[2], HU Shi-Sheng[1]

(1. *CAS Key Laboratory of Mechanical Behavior and Design of Materials, University of Science and Technology of China, Hefei* 230027, *China*;
2. *Mechanics and Materials Science Research Centre, Faculty of Engineering Ningbo University, Ningbo* 315211, *China*)

Abstract: Dislocation theory and molecular dynamics simulation were used to investigate the effect of atom properties on the strain-rate sensitivity of FCC metals. A method to analyze such effect is proposed. The stress dependence on dislocation velocity is identified as the key of such study and is obtained via 2-D MD simulations on the motion of an individual dislocation in FCC metals. Combining the simulation results with Orowan's relationship, it is concluded that strain rate sensitivities of FCC metals are mainly dependent on their atomic mass rather than the interatomic potential. The order of strain rate sensitivities of five FCC metals obtained by multi-scale analysis is consistent with the experimental results available.

Key words: strain-rate sensitivity; dislocation theory; dislocation velocity; molecular dynamics simulation