**DOI:** 10.11858/gywlxb.20240765

# 〈111〉方向单轴应变下金刚石和硅的广义层错能

黄丽丽[1], 彭 丽[1], 陈 实[1], 张红平[2], 李 牧[1]

(1. 深圳技术大学工程物理学院, 超强激光应用技术研究中心,
深圳市超强激光与先进材料重点实验室, 广东 深圳 518118;
2. 深圳技术大学大数据与互联网学院, 广东 深圳 518118)

**摘要:** 晶体中原子层面剪切所带来的能量称为广义层错能, 它是描述晶体中纳米尺度塑性变形的关键参数, 如位错分解、成核和孪晶。在冲击加载过程中, 弹塑性转变发生在一维弹性应变之后, 因此, 单轴应变下的广义层错能对于理解塑性流动的发生具有重要意义。应用基于密度泛函理论的第一性原理, 计算了在[111]方向单轴应变下硅和金刚石的 glide (111) 面的广义层错能面。基于广义层错能面的平移对称性, 通过傅里叶级数展开, 拟合得到了广义层错能面的表达式, 并给出了 $[\bar{1}10]$ (111) 和 $[11\bar{2}]$ (111) 方向的广义层错能曲线。结果表明, 随着应变的增加, 本征层错能和不稳定层错能出现明显的变化, 且不稳定层错能与本征层错能之比减小, 说明在〈111〉方向的单轴应变下晶体中的位错不容易发生分解。该结果解释了在四代光源上开展的位错演化动态实验结果, 即沿〈111〉方向加载的层错信号出现的速度和强度均远不如沿〈110〉方向和〈100〉方向加载的结果。

**关键词:** 广义层错能; 第一性原理计算; 冲击加载; 位错

**中图分类号:** O521.2; O344.1 **文献标志码:** A

外部应力驱动的材料内部位错运动在很大程度上决定了材料的变形机制和力学性能[1−2]。当延展性材料受到压力作用时, 材料内部的位错会移动以适应局部应力, 从而产生塑性变形[3]。冲击加载是典型的单轴应变加载[4−5], 应变率极高, 当加载应力超过材料的雨贡纽弹性极限时, 材料会发生塑性变形、孪晶、相变等现象。若驱动压力足够高, 原有位错的增殖传播以及位错的均匀成核均在塑性变形中发挥重要作用。通常而言, 像硅和金刚石这样的脆性材料不具备金属常见的延展性, 然而, 在冲击高应变率加载下, 它们也会表现出延展性[6−7]。虽然在较低的应变率下位错主导的塑性变形与应变率基本无关[8], 但是研究人员却观察到高应变率下的高度应变率相关性[9]。当应变率达到 $10^7\ \mathrm{s}^{-1}$ 以上时, 位错在变形过程中以接近材料声速的速度传播。位错理论预测, 当位错在给定晶体中以接近极限速度(或临界速度)移动时, 位错的自能和应力会发散[10−13], 意味着位错在这些极限速度下是禁止传播的。Katagiri 等[14] 利用飞秒 X 射线成像技术跟踪冲击压缩下单晶金刚石中的部分位错传播过程, 通过观察层错边缘的扩展速度, 发现其比金刚石的体声波速度还要快, 由此认为金刚石中的部分位错以跨声速移动。在他们的实验中, 层错特征出现的延迟时间、层错角度、层错信号强度都表现出了明显的晶向依赖性, 即沿〈110〉晶向进行冲击加载时层错发展得更容易, 而沿〈111〉晶向加载时位错滑移变得更加困难。这种方向依赖性仍然缺乏可靠的理论解释, 因为冲击弹塑性转变过程是一个非常复杂的多尺度过程[4−5]。在计算方面, 通过大尺度经典分子动力学计算了形成位错运动的基本参数, 将其引入位错动力学模型

* **收稿日期:** 2024-03-28; **修回日期:** 2024-04-16

**基金项目:** 国家自然科学基金(12204317, 11974321, 11972330)

**作者简介:** 黄丽丽(1989—), 女, 博士, 助理教授, 主要从事位错结构的第一性原理计算研究. E-mail: huanglili@sztu.edu.cn

**通信作者:** 李 牧(1979—), 男, 博士, 教授, 主要从事动高压物理研究. E-mail: limu@sztu.edu.cn

中，在有限元框架下开展动态转变过程研究，这些进展对于理解塑性流动发挥了重要作用，但是对于理解弹塑性转变仍存在局限。另外，硅和金刚石单晶是半导体领域最受关注的材料，深入理解其位错等缺陷行为有助于更好地掌握其电学特性。与此同时，零位错的高纯度单晶硅和金刚石更易于制备，是实验、理论和模拟研究的理想材料。

位错行为在很大程度上由晶体的晶格结构决定。金刚石结构包含 2 套面心立方（face-centered cubic, fcc）晶格，并沿着对角线方向有(1/4)⟨111⟩的相对位移。金刚石结构的滑移系统与 fcc 金属一样，也就是(1/2)⟨110⟩{111}方向。因为金刚石有 2 套 fcc 晶格，所以金刚石结构有 2 种{111}面，层间距小的{111}面称为 glide 面，层间距大的{111}面称为 shuffle 面，哪个{111}面中的位错对材料的脆塑性起主要作用，目前仍然没有定论。根据金刚石结构的特点，本征层错只在 glide{111}面存在。在中等温度和应变条件下，被实验观察到的位错通常呈六边形环状[15]，在这些环中，位错沿着⟨110⟩方向排列，说明其运动需要克服很高的 Peierls 势垒。Rabier 等[16]、Cai 等[17] 在室温和高压下观察了未分解的位错，它们大部分沿 [110] 和 [123] 方向，并且 [123] 方向的位错在之前的传统实验中并未观察到，说明在高压下可能产生新的位错芯结构。

1968 年，Vitek[18−19] 提出了广义层错能（generalized stacking fault energy, GSFE）面的概念。随后，GSFE 面在晶体的脆韧性转变和力学性能模型中发挥了重要作用[20−21]。GSFE 也是准确描述位错芯结构的关键。对于晶体中给定的滑移平面和滑移方向，GSFE 是在 2 个未进行剪切的晶体块之间施加的与剪切位移$\Delta s$相关的能量。GSFE 也被认为是描述纳米尺度塑性特性的关键材料属性，特别是位错核分解过程[22]。虽然在实验中不易确定 GSFE，但是通过电子密度泛函理论（density functional theory, DFT）可以计算出 GSFE，该理论已在各种物理性质预测方面得到了广泛的应用，并被证明是可靠的。

本研究将利用 VASP 代码进行从头计算，以获得单轴应变下硅和金刚石的 glide (111) 面的 GSFE 面，再利用 GSFE 面的平移对称性和傅里叶级数，拟合出 GSFE 面的表达式，根据金刚石结构中 glide {111}滑移面上 GSFE 面的特点，讨论应变对位错类型的影响。

## 1　计算方法

### 1.1　超胞层数测试

当晶体被切成 2 个半无限大晶体并重新合并时，2 个接触面会产生非线性相互作用，该非线性相互作用能通常被称为 GSFE，可用$\gamma$表示。GSFE 可以由基于 DFT 的第一性原理计算得到。本研究采用的基于 DFT 的第一性原理计算是研究半导体材料及其他材料常用的模拟计算方法，其中：电子交换关联能泛函选择广义梯度近似（generalized gradient approximation, GGA）的 PBE[23−24] 形式，价电子与芯电子的相互作用则采用基于投影缀加平面波（projector augmented wave, PAW）[25−26] 方法的平面波基组描述，并用第一性原理软件包 VASP[27−28] 完成相关计算。计算中，硅和金刚石的晶格常数 $a_0$ 分别取 5.470 和 3.573 Å。

为了防止计算过程中边界对 GSFE 面产生影响，所选的超胞应该足够大，且表面层尽可能稳定，以获得收敛的 DFT 结果，因此，需要对所选层数进行收敛性测试。金刚石结构晶体的 glide {111}层相对于 shuffle {111}层更稳定，且在{111}方向上以 3 个 glide 层为周期，即 6 个{111}层。分别对没有施加应变的 6、10、14、18、22 个{111}层超胞进行能量收敛性测试，每个超胞选择 10 Å真空层，截断能统一取为 600 eV，$K$ 点统一取为 12×12×1。如图 1 所示，分别计算每个超胞上半部分中由 $O$ 点（理想位置）滑移到 $C$ 点（本征层错）和 $D$ 点（不稳定层错）的能量变化，所得结果如表 1 所示，其中：$\gamma_{\mathrm{I}}$ 为本征层错能，$\gamma_{\mathrm{us}}$ 为不稳定层错能。可以看出，18 个{111}层原子的超胞已足够大，可以避免相邻广义层错之间的相互影响，从而获得足够精确的结果。

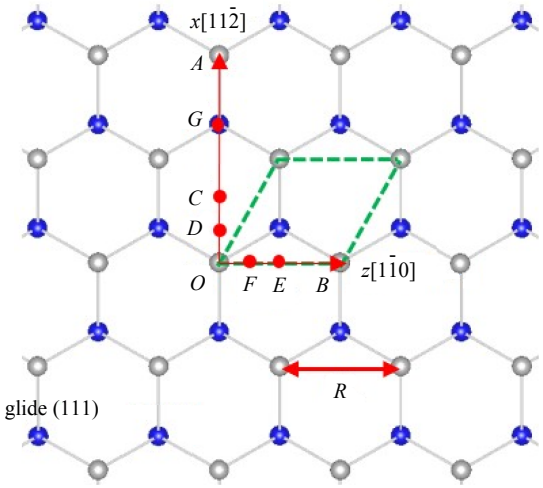



图 1　glide (111) 面示意图(蓝色原子为下半无限大晶体的最上层原子，灰色原子为上半无限大晶体的最下层原子，*R* 为 *OB* 的距离，*C* 点为本征层错位置，*D* 点为不稳定层错位置)

Fig. 1　Schematic diagram of glide (111) surface (Blue atoms are the topmost layer of atoms in the lower half of the infinity crystal, and gray atoms are the bottom layer of atoms in the upper half of the infinity crystal; *R* is the distance of *OB*, the point *C* is the location of intrinsic stacking fault, and the point *D* is the location of unstable stacking fault.)

**表 1　不同超胞的硅的本征层错能和不稳定层错能**

**Table 1　Intrinsic stacking faults energies and unstable stacking faults energies for silicon with different supercells**

| Layers | $\gamma_I$/(eV·Å$^{-2}$) | $\gamma_{us}$/(eV·Å$^{-2}$) | Layers | $\gamma_I$/(eV·Å$^{-2}$) | $\gamma_{us}$/(eV·Å$^{-2}$) |
|---|---|---|---|---|---|
| 6 | 0.002 | 0.085 | 18 | 0.003 | 0.106 |
| 10 | 0.004 | 0.098 | 22 | 0.003 | 0.107 |
| 14 | 0.004 | 0.104 | | | |

## 1.2　不同应变下 (111) 面的层错能

选定超胞层数后，首先对超胞结构进行优化，截断能统一取 600 eV，*K* 点统一取 15×15×2；然后，沿着[111]方向对优化后的超胞均匀施加应变 $\varepsilon=(c-c_0)/c_0$，其中 $c_0$ 和 $c$ 分别为施加应变前、后超胞[111]方向的大小，应变范围为 0～0.2，其他方向保持不变，得到不同应变下的超胞模型，如图 2 所示；接着，在[111]方向上对每一个施加应变后的超胞增加 10 Å厚的真空层，其他 2 个方向使用周期性结构，此时的 *K* 点统一取 18×18×1；当超胞的上半部分相对下半部分分别沿着 [$\bar{1}$10](111) 和[11$\bar{2}$](111) 方向均匀滑移 1 个周期时，得到不同应变下的层错能，且每一处层错能 $\gamma(\boldsymbol{u})$ 为

$$\gamma(\boldsymbol{u})=\frac{E(\boldsymbol{u})-E(0)}{S} \tag{1}$$

式中：$\boldsymbol{u}$ 为晶体滑移方向的位移，*S* 为超胞模型的滑移面面积，$E(\boldsymbol{u})$ 和 $E(0)$ 分别为上半无限大晶体相对于下半无限大晶体滑移位移为 $\boldsymbol{u}$ 时对应的层错能和完整晶体的能量。

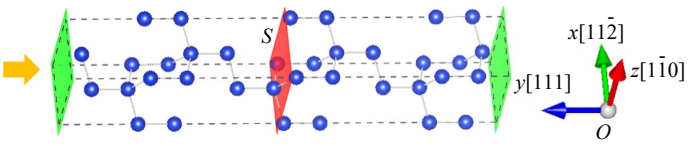



图 2　基于 DFT 的第一性原理计算理想超胞模型

Fig. 2　Ideal supercell model for the first principle computations based on DFT

## 2　金刚石和硅的 GSFE

### 2.1　不同应变下的 GSFE 面

当理想晶体沿着滑移面被切成两半，上半部分相对于下半部分滑移时会产生失配能，该失配能被定义为 GSFE，对应的滑移量为失配矢量 $\boldsymbol{u}$。在滑移面内，$\boldsymbol{u}$ 为二维矢量，可以表示为 $(u_x, u_z)$。根据晶格对称性，滑移面内的 GSFE 面具有周期性，可描述为

$$\gamma(\boldsymbol{R}+\boldsymbol{u})=\gamma(\boldsymbol{u}) \tag{2}$$

式中：$\boldsymbol{R}$ 为{111}面内的二维晶格矢量。由于 GSFE 具有周期性，因此，可以通过二维傅里叶变换从倒空间描述，即

$$\gamma(\boldsymbol{u})=\sum\gamma_G \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{u}} \tag{3}$$

式中：$\boldsymbol{G}$ 为{111}滑移面上的倒格矢，$\gamma_G$为倒格子空间中的展开系数。由截断近似可以得到含有 12 个拟合参数（第四近邻近似）的 GSFE 面的表达式[29]

$$\begin{aligned}
\gamma(u_x,u_z)=&c_0+c_1\left[\cos\left(\frac{2\pi u_x}{\sqrt{3}R}-\frac{2\pi u_z}{R}\right)+\cos\left(\frac{2\pi u_x}{\sqrt{3}R}+\frac{2\pi u_z}{R}\right)+\cos\left(\frac{4\pi u_x}{\sqrt{3}R}\right)\right]+\\
&c_2\left[\cos\left(\frac{2\sqrt{3}\pi u_x}{R}-\frac{2\pi u_z}{R}\right)+\cos\left(\frac{2\sqrt{3}\pi u_x}{R}+\frac{2\pi u_z}{R}\right)+\cos\left(\frac{4\pi u_z}{R}\right)\right]+\\
&c_3\left[\cos\left(\frac{4\pi u_x}{\sqrt{3}R}-\frac{4\pi u_z}{R}\right)+\cos\left(\frac{4\pi u_x}{\sqrt{3}R}+\frac{4\pi u_z}{R}\right)+\cos\left(\frac{8\pi u_x}{\sqrt{3}R}\right)\right]+\\
&c_4\left[\cos\left(\frac{2\pi u_x}{\sqrt{3}R}-\frac{6\pi u_z}{R}\right)+\cos\left(\frac{8\pi u_x}{\sqrt{3}R}-\frac{4\pi u_z}{R}\right)+\cos\left(\frac{10\pi u_x}{\sqrt{3}R}-\frac{2\pi u_z}{R}\right)+\right.\\
&\left.\cos\left(\frac{10\pi u_x}{\sqrt{3}R}+\frac{2\pi u_z}{R}\right)+\cos\left(\frac{8\pi u_x}{\sqrt{3}R}+\frac{4\pi u_z}{R}\right)+\cos\left(\frac{2\pi u_x}{\sqrt{3}R}+\frac{6\pi u_z}{R}\right)\right]+\\
&c_5\left[\cos\left(\frac{2\sqrt{3}\pi u_x}{R}-\frac{6\pi u_z}{R}\right)+\cos\left(\frac{2\sqrt{3}\pi u_x}{R}+\frac{6\pi u_z}{R}\right)+\cos\left(\frac{4\sqrt{3}\pi u_x}{R}\right)\right]+\\
&c_6\left[\cos\left(\frac{4\sqrt{3}\pi u_x}{R}-\frac{4\pi u_z}{R}\right)+\cos\left(\frac{4\sqrt{3}\pi u_x}{R}+\frac{4\pi u_z}{R}\right)+\cos\left(\frac{8\pi u_z}{R}\right)\right]+\\
&s_1\left[\sin\left(\frac{4\pi u_x}{\sqrt{3}R}\right)-\sin\left(\frac{2\pi u_x}{\sqrt{3}R}-\frac{2\pi u_z}{R}\right)-\sin\left(\frac{2\pi u_x}{\sqrt{3}R}+\frac{2\pi u_z}{R}\right)\right]+\\
&s_2\left[\sin\left(\frac{8\pi u_x}{\sqrt{3}R}\right)-\sin\left(\frac{4\pi u_x}{\sqrt{3}R}-\frac{4\pi u_z}{R}\right)-\sin\left(\frac{4\pi u_x}{\sqrt{3}R}+\frac{4\pi u_z}{R}\right)\right]+\\
&s_3\left[\sin\left(\frac{10\pi u_x}{\sqrt{3}R}-\frac{2\pi u_z}{R}\right)+\sin\left(\frac{10\pi u_x}{\sqrt{3}R}+\frac{2\pi u_z}{R}\right)-\sin\left(\frac{2\pi u_x}{\sqrt{3}R}-\frac{6\pi u_z}{R}\right)-\right.\\
&\left.\sin\left(\frac{8\pi u_x}{\sqrt{3}R}-\frac{4\pi u_z}{R}\right)-\sin\left(\frac{8\pi u_x}{\sqrt{3}R}+\frac{4\pi u_z}{R}\right)-\sin\left(\frac{2\pi u_x}{\sqrt{3}R}+\frac{6\pi u_z}{R}\right)\right]+\\
&s_4\left[\sin\left(\frac{4\sqrt{3}\pi u_x}{R}\right)-\sin\left(\frac{2\sqrt{3}\pi u_x}{R}-\frac{6\pi u_z}{R}\right)-\sin\left(\frac{2\sqrt{3}\pi u_x}{R}+\frac{6\pi u_z}{R}\right)\right]+\\
&s_5\left[\sin\left(\frac{16\pi u_x}{\sqrt{3}R}\right)-\sin\left(\frac{8\pi u_x}{\sqrt{3}R}-\frac{8\pi u_z}{R}\right)-\sin\left(\frac{8\pi u_x}{\sqrt{3}R}+\frac{8\pi u_z}{R}\right)\right]
\end{aligned} \tag{4}$$

式中：$R$ 为图 1 中 $OB$ 的距离；$u_x$ 和 $u_z$ 分别为上半平面相对于下半平面在滑移面内沿着 $[11\bar{2}]$ (111) 方向和$[\bar{1}10]$(111) 方向的相对位移；$c_0$～$c_6$和$s_1$～$s_5$为待拟合参数，结果列于表 2。

图 3 和图 4 显示了不同应变情况下由式 (4) 拟合的 glide (111) 面的 GSFE 面。GSFE 面在包含不稳定层错能$\gamma_{\mathrm{us}}$和本征层错能$\gamma_{\mathrm{I}}$方向（$[11\bar{2}]$ 方向）上的投影如图 5 所示，沿 $[\bar{1}10]$ 方向的投影如图 6 所示。可见，拟合结果与计算结果符合得很好。由$[11\bar{2}]$滑移方向的 1/3 个周期可以看到，随着应变的增加，不

稳定层错能和本征层错能增大，且金刚石的本征层错能受应变的影响比硅的本征层错能受应变的影响大。$[\bar{1}10]$ 方向上的层错能是对称的，且随着应变的增大而增大。

**表 2　不同应变下由式 (4) 描述的 GSFE 面的拟合参数**

**Table 2　Fitting parameters of the GSFE surface described by Eq. (4) for different strains**

| Material | $\varepsilon$ | Fitting parameters/(J·m$^{-2}$) | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | $c_0$ | $c_1$ | $c_2$ | $c_3$ | $c_4$ | $c_5$ |
| Silicon | 0 | 24.085 | −12.658 | 7.490 | −2.221 | −0.471 | 0.257 |
| | 0.03 | 25.623 | −13.568 | 8.163 | −2.439 | −0.521 | 0.295 |
| | 0.06 | 27.235 | −14.531 | 8.882 | −2.674 | −0.573 | 0.337 |
| | 0.09 | 28.911 | −15.538 | 9.646 | −2.924 | −0.631 | 0.383 |
| | 0.12 | 30.631 | −16.577 | 10.446 | −3.183 | −0.696 | 0.432 |
| | 0.15 | 32.372 | −17.634 | 11.265 | −3.445 | −0.764 | 0.482 |
| | 0.18 | 34.143 | −18.720 | 12.112 | −3.720 | −0.834 | 0.537 |

| Material | $\varepsilon$ | Fitting parameters/(J·m$^{-2}$) | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | $c_6$ | $s_1$ | $s_2$ | $s_3$ | $s_4$ | $s_5$ |
| Silicon | 0 | 0.046 | 21.901 | −3.797 | 0.849 | −0.020 | −0.013 |
| | 0.03 | 0.050 | 23.465 | −4.160 | 0.944 | −0.026 | −0.016 |
| | 0.06 | 0.054 | 25.114 | −4.548 | 1.046 | −0.033 | −0.020 |
| | 0.09 | 0.059 | 26.835 | −4.960 | 1.157 | −0.041 | −0.023 |
| | 0.12 | 0.064 | 28.604 | −5.391 | 1.275 | −0.046 | −0.025 |
| | 0.15 | 0.069 | 30.395 | −5.833 | 1.397 | −0.048 | −0.027 |
| | 0.18 | 0.077 | 32.225 | −6.289 | 1.527 | −0.054 | −0.032 |

| Material | $\varepsilon$ | Fitting parameters/(J·m$^{-2}$) | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | $c_0$ | $c_1$ | $c_2$ | $c_3$ | $c_4$ | $c_5$ |
| Diamond | 0 | 55.327 | −29.945 | 20.276 | −6.548 | −1.668 | 0.852 |
| | 0.03 | 62.026 | −34.033 | 23.583 | −7.701 | −1.944 | 1.084 |
| | 0.06 | 69.519 | −38.668 | 27.417 | −9.054 | −2.268 | 1.371 |
| | 0.09 | 77.951 | −43.959 | 31.877 | −10.654 | −2.641 | 1.717 |
| | 0.12 | 87.438 | −50.002 | 37.078 | −12.544 | −3.070 | 2.129 |
| | 0.15 | 97.852 | −56.793 | 43.166 | −14.733 | −3.638 | 2.648 |
| | 0.18 | 109.070 | −64.368 | 50.293 | −17.270 | −4.382 | 3.312 |

| Material | $\varepsilon$ | Fitting parameters/(J·m$^{-2}$) | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | $c_6$ | $s_1$ | $s_2$ | $s_3$ | $s_4$ | $s_5$ |
| Diamond | 0 | 0.260 | 51.709 | −11.059 | 3.080 | −0.125 | −0.059 |
| | 0.03 | 0.278 | 58.586 | −12.938 | 3.634 | −0.175 | −0.079 |
| | 0.06 | 0.297 | 66.292 | −15.122 | 4.294 | −0.238 | −0.102 |
| | 0.09 | 0.318 | 74.966 | −17.651 | 5.078 | −0.325 | −0.133 |
| | 0.12 | 0.335 | 84.742 | −20.561 | 5.996 | −0.439 | −0.167 |
| | 0.15 | 0.369 | 95.601 | −23.980 | 7.099 | −0.515 | −0.208 |
| | 0.18 | 0.441 | 107.721 | −28.001 | 8.429 | −0.528 | −0.264 |

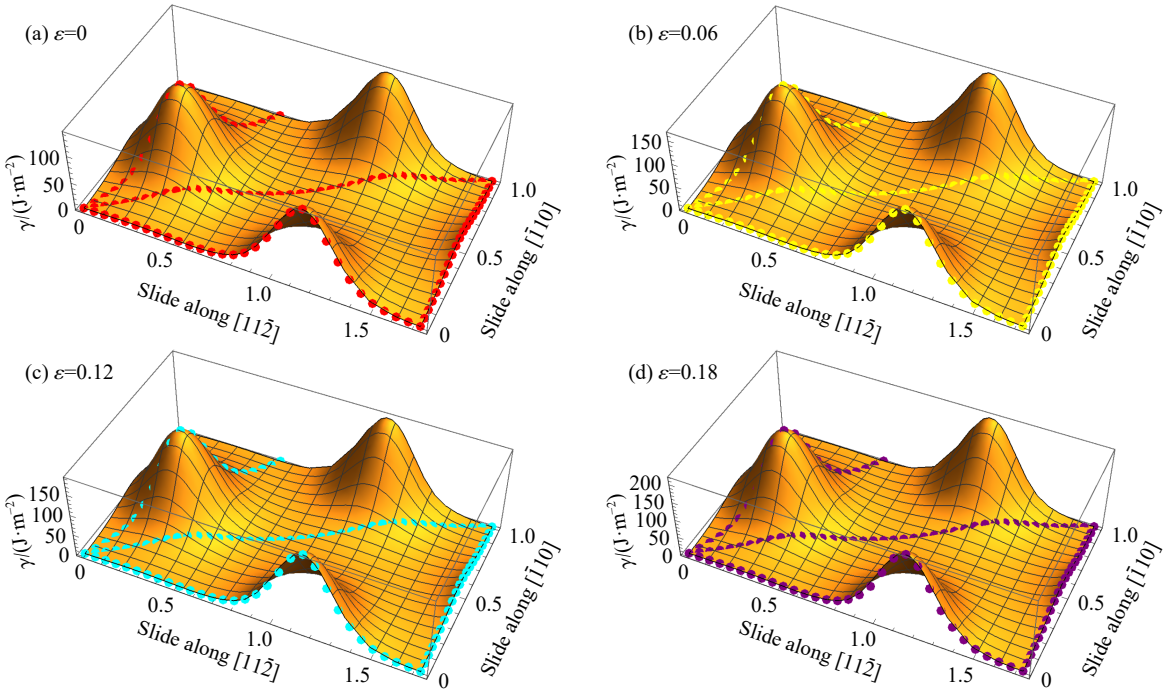



图 3　不同应变下由式 (4) 拟合得到的硅的 glide (111) 面的 GSFE 面(图中的点为第一性原理计算结果, [11$\bar{2}$] 方向上的第 1 个能量峰值为不稳定层错能, 第 1 个能量最小值为本征层错能, GSFE 面沿 [$\bar{1}$10] 方向的投影是对称的)

Fig. 3　GSFE surface of the glide (111) surface of silicon fitted by Eq. (4) for different strains (The points in the figures are the results of first principles calculations, the first energy peak in the [11$\bar{2}$] direction is the unstable stacking fault energy, the first energy minimum is the intrinsic stacking fault energy, and the GSFE surface is symmetric along the projection in the [$\bar{1}$10] direction.)

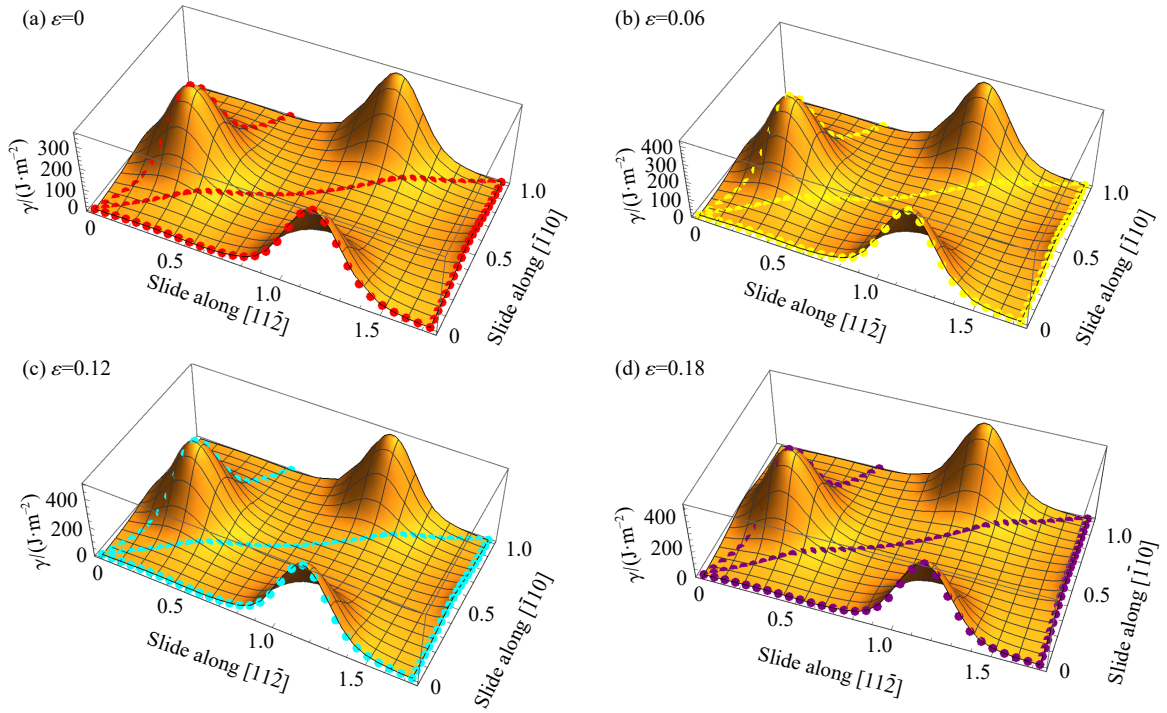
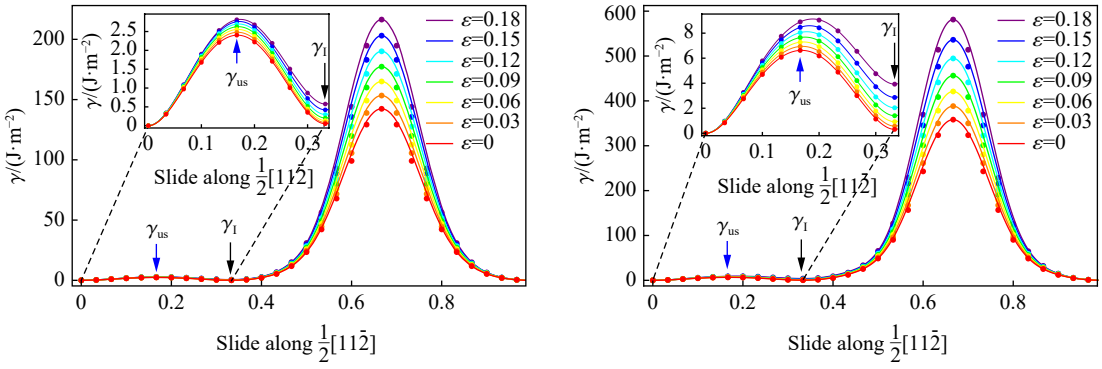



图 4　不同应变下由式 (4) 拟合得到的金刚石的 glide (111) 面的 GSFE 面(图中的点为第一性原理计算结果, [11$\bar{2}$] 方向上的第 1 个能量峰值为不稳定层错能, 第 1 个能量最小值为本征层错能, GSFE 面沿 [$\bar{1}$10] 方向的投影是对称的)

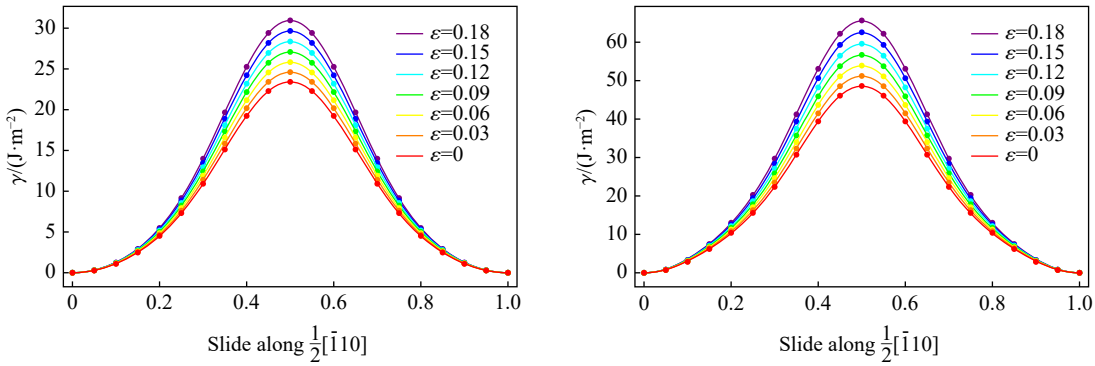
Fig. 4　GSFE surface of the glide (111) surface of diamond fitted by Eq. (4) for different strains (The points in the figures are the results of first principles calculations, the first energy peak in the [11$\bar{2}$] direction is the unstable stacking fault energy, the first energy minimum is the intrinsic stacking fault energy, and the GSFE surface is symmetric along the projection in the [$\bar{1}$10] direction.)




(a) Silicon　　(b) Diamond

图 5　不同应变下 glide (111) 面的 GSFE 面在[11$\bar{2}$]滑移方向上的投影

Fig. 5　Projections of the GSFE surface on the [11$\bar{2}$] slip direction for different strains on the glide (111) surface




(a) Silicon　　(b) Diamond

图 6　不同应变下 glide (111) 面的 GSFE 面在 [$\bar{1}$10] 滑移方向上的投影

Fig. 6　Projections of the GSFE surface on the [$\bar{1}$10] slip direction for different strains on the glide (111) surface

[11$\bar{2}$] 方向上的第 1 个能量峰值在(1/12)[11$\bar{2}$] 处，如图 5 所示，为不稳定层错能，代表位错成核的最低能垒。第 1 个能量最小值在(1/6)[11$\bar{2}$] 处，为本征层错能。在 fcc 晶体中，最初的滑移系统为[11$\bar{2}$](111)，根据 Frank 法则[30]，伯格斯矢量为(1/2)⟨110⟩的位错可由本征层错分解成一对 Shockley 部分位错，且中间由层错（stacking fault, SF）分开，即

$$\frac{1}{2}[1\bar{1}0] \rightarrow \frac{1}{6}[1\bar{2}1]+\mathrm{SF}+\frac{1}{6}[2\bar{1}\bar{1}] \tag{5}$$

众所周知，纳米晶体中的变形机制不能仅用本征层错能的绝对值解释，整个行为必须通过不稳定层错能与本征层错能的比值（$\gamma_{us}/\gamma_I$）来理解[31]。硅和金刚石的$\gamma_{us}/\gamma_I$随应变的变化如图 7 和图 8 所示。虽然不稳定层错能$\gamma_{us}$随着应变的增大而增大，但本征层错能$\gamma_I$也不断增大，且本征层错能$\gamma_I$的增大速

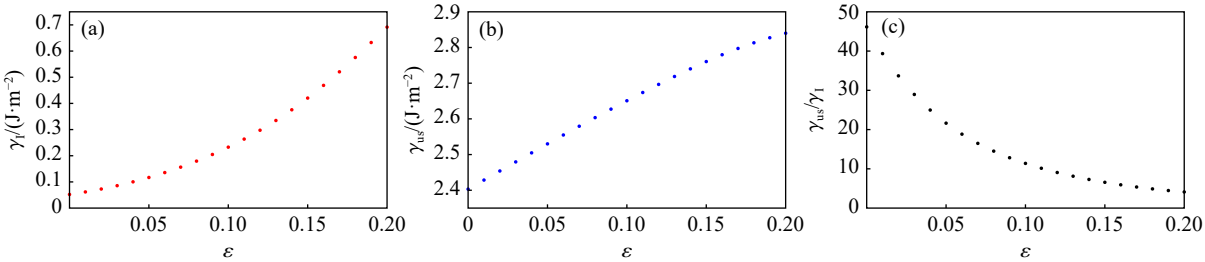



图 7　不同应变下硅的 glide (111) 面的本征层错能（$\gamma_I$）、不稳定层错能（$\gamma_{us}$）以及两者的比值

Fig. 7　Intrinsic stacking fault energy ($\gamma_I$) and unstable stacking fault energy ($\gamma_{us}$) and the ratio of them for the glide (111) surface of silicon at different strains

率比不稳定层错能$\gamma_{us}$的增大速率高，即$\gamma_{us}/\gamma_I$有明显的减小趋势。因此，随着应变的增大，金刚石和硅中的位错将越来越难分解。

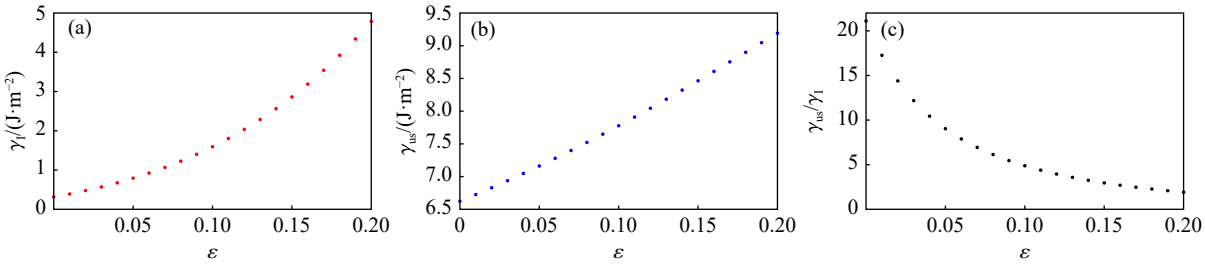



图 8　不同应变下金刚石的 glide (111) 面的本征层错能($\gamma_I$)、不稳定层错能($\gamma_{us}$)以及两者的比值

Fig. 8　Intrinsic stacking fault energy ($\gamma_I$) and unstable stacking fault energy ($\gamma_{us}$) and the ratio of them for the glide (111) surface of dimond at different strains

## 2.2　指定方向的 GSFE

一般情况下，fcc 晶体的滑移面为{111}面，而金刚石结构中有 2 种不同的{111}面，即 glide {111} 面和 shuffle {111}面，本征层错只存在于 glide {111}面，且使 glide {111}面的全位错分解为 Shockley 部分位错，因此，我们更关心在该滑移面上的某些特定滑移方向的 GSFE，且该 GSFE 可用下式拟合

$$\gamma_b = \frac{\mu_\gamma b}{2\pi^2 d(\varepsilon)}\sin^2\frac{\pi u_b}{b}\left(1+\Delta_1\cos^2\frac{\pi u_b}{b}+\Delta_2\cos^4\frac{\pi u_b}{b}\right) \tag{6}$$

式中：$u_b$为上半平面相对于下半平面在滑移面内沿着伯格斯矢量方向滑移的位移，$b$ 为位错的伯格斯矢量，$d(\varepsilon)$ 为滑移面的层间距，$\Delta_1$、$\Delta_2$为待拟合参数，$\mu_\gamma$为该方向的剪切模量。[$\bar{1}$10] (111) 方向的 GSFE 拟合结果如表 3 所示。

**表 3　在不同应变下式 (6) 描述的[$\bar{1}$10] (111) 方向的 GSFE 面的拟合参数**

**Table 3　Fitting parameters of the GSFE surface for [$\bar{1}$10] (111) slip direction described by Eq. (6) at different strains**

| Material | $\varepsilon$ | $\mu_\gamma$/(GJ·m$^{-3}$) | $\Delta_1$ | $\Delta_2$ | Material | $\varepsilon$ | $\mu_\gamma$/(GJ·m$^{-3}$) | $\Delta_1$ | $\Delta_2$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | 0 | 16.297 | −1.002 | 0.495 | | 0 | 121.297 | −1.149 | 0.850 |
| | 0.03 | 16.612 | −1.013 | 0.496 | | 0.03 | 125.646 | −1.150 | 0.825 |
| | 0.06 | 16.898 | −1.025 | 0.496 | | 0.06 | 129.464 | −1.150 | 0.797 |
| Silicon | 0.09 | 17.151 | −1.035 | 0.495 | Dimond | 0.09 | 132.670 | −1.148 | 0.768 |
| | 0.12 | 17.369 | −1.045 | 0.492 | | 0.12 | 135.093 | −1.145 | 0.735 |
| | 0.15 | 17.545 | −1.053 | 0.489 | | 0.15 | 136.433 | −1.141 | 0.694 |
| | 0.18 | 17.665 | −1.060 | 0.481 | | 0.18 | 136.151 | −1.129 | 0.629 |

考虑到〈110〉(111) 滑移方向的对称性，随着应变的增加，式 (6) 依然适用。在没有施加应变的情况下，硅和金刚石的本征层错能分别为 0.052 和 0.314 J/m$^2$，比其不稳定层错能（2.403 和 6.623 J/m$^2$）小，可忽略不计，因此，[11$\bar{2}$] (111) 方向的 GSFE 在没有应变作用的情况下也可以用式 (6) 拟合。从图 7 和图 8 可以看出，随着应变的增大，本征层错能增大，$\gamma_{us}/\gamma_I$减小，因此，式 (6) 不再适用，需要对其进行适当的修正，或者用式 (4) 在该方向上的投影曲线。

# 3　结　论

应用基于 DFT 的第一性原理计算了在[111]方向施加不同应变作用时硅和金刚石的 glide (111) 面的 GSFE 面，基于晶格平移对称的傅里叶级数，拟合得到了 glide (111) 面的 GSFE 面以及指定滑移方向的 GSFE 面的表达式。计算结果表明，与具有延展性的金属材料不同，硅和金刚石的 GSFE，特别是本征层错能和不稳定层错能表现为很强的正应力依赖性，这类脆性材料的层错能在高应变作用下呈现增

大趋势，并且不稳定层错能的位置有所变化，比没有应变作用下的半个伯格斯矢量位置要大。虽然本征层错能是描述位错是否容易分解的一个主要指标，且金刚石结构晶体因拥有较低的本征层错能而在常温常压条件下容易发生分解，但是对于纳米晶体，其变形机制不能仅用本征层错能的绝对值解释，其整体行为必须通过$\gamma_{us}/\gamma_{I}$理解[31]。随着应变的增大，$\gamma_{us}/\gamma_{I}$呈降低趋势。因此，在[111]高应变作用下，硅和金刚石中的位错并不容易发生分解，应该能够观察到更多的全位错，与之前实验观察到的结果[16]相吻合，即在应变作用下，位错更多地以螺位错和 60°位错的形式出现。在之前的研究中，在硅中观察到的波状滑移轨迹表明，频繁出现的交叉滑移位错很可能是非分离的全位错。螺位错通常具有多叶结构，即呈现立体结构形式，这种结构为硅中的 glide 和 shuffle 位错的相互转化提供了可能性，而这 2 种位错的相互转化是讨论硅的脆性向塑性转化的关键因素。上述计算结果同时验证了在金刚石冲击实验中⟨111⟩方向加载很难获得线型层错图像的主要原因：在⟨111⟩单轴应变下，$\gamma_{us}/\gamma_{I}$下降，位错分解难度增大，导致塑性波后层错出现的时间滞后，并且层错特征不明显。进一步澄清位错速度与位错分解方向的依赖性还需要对其他晶向加载下的 GSFE 进行计算和分析。

## 参考文献：


[1] JOHNSTON W G, GILMAN J J. Dislocation multiplication in lithium fluoride crystals [J]. Journal of Applied Physics, 1960, 31(4): 632–643.

[2] HIRTH J P, KUBIN L. Preface [J]. Dislocations in Solids, 2009.

[3] MADEC R, DEVINCRE B, KUBIN L, et al. The role of collinear interaction in dislocation-induced hardening [J]. Science, 2003, 301(5641): 1879–1882.

[4] SHEHADEH M A, BRINGA E M, ZBIB H M, et al. Simulation of shock-induced plasticity including homogeneous and heterogeneous dislocation nucleations [J]. Applied Physics Letters, 2006, 89(17): 171918.

[5] GERMANN T C, HOLIAN B L, LOMDAHL P S, et al. Dislocation structure behind a shock front in fcc perfect crystals: atomistic simulation results [J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 2004, 35(9): 2609–2615.

[6] KANEL G I, FORTOV V E, RAZORENOV S V. Shock-wave phenomena and the properties of condensed matter [M]. New York: Springer, 2004.

[7] MACDONALD M J, MCBRIDE E E, GALTIER E, et al. Using simultaneous X-ray diffraction and velocity interferometry to determine material strength in shock-compressed diamond [J]. Applied Physics Letters, 2020, 116(23): 234104.

[8] ZEPEDA-RUIZ L A, STUKOWSKI A, OPPELSTRUP T, et al. Probing the limits of metal plasticity with molecular dynamics simulations [J]. Nature, 2017, 550(7677): 492–495.

[9] FAN H D, WANG Q Y, EL-AWADY J A, et al. Strain rate dependency of dislocation plasticity [J]. Nature Communications, 2021, 12(1): 1845.

[10] GUMBSCH P, GAO H J. Dislocations faster than the speed of sound [J]. Science, 1999, 283(5404): 965–968.

[11] TEUTONICO L J. Dynamical behavior of dislocations in anisotropic media [J]. Physical Review, 1961, 124(4): 1039–1045.

[12] TEUTONICO L J. Uniformly moving dislocations of arbitrary orientation in anisotropic media [J]. Physical Review, 1962, 127(2): 413–418.

[13] BLASCHKE D N, CHEN J, FENSIN S, et al. Clarifying the definition of ‘transonic’ screw dislocations [J]. Philosophical Magazine, 2021, 101(8): 997–1018.

[14] KATAGIRI K, PIKUZ T, FANG L C, et al. Transonic dislocation propagation in diamond [J]. Science, 2023, 382(6666): 69–72.

[15] WESSEL K, ALEXANDER H. On the mobility of partial dislocations in silicon [J]. Philosophical Magazine, 1977, 35(6): 1523–1536.

[16] RABIER J, DEMENET J L. Low temperature, high stress plastic deformation of semiconductors: the silicon case [J]. Physica Status Solidi B, 2000, 222(1): 63–74.

[17] CAI W, BULATOV V V, CHANG J P, et al. Dislocation core effects on mobility [M]//NABARRO F R N, HIRTH J P. Dislocations in Solids, Amsterdam: Elsevier, 2004: 1–80.

[18] VITEK V. Intrinsic stacking faults in body-centred cubic crystals [J]. Philosophical Magazine, 1968, 18(154): 773–786.

[19] VITEK V. Theory of the core structures of dislocations in body-centered-cubic metals [J]. Cryst Lattice Defects, 1974, 5: 1–34.

［20］ THOMSON R. Intrinsic ductility criterion for interfaces in solids [J]. Physical Review B, 1995, 52(10): 7124–7134.
［21］ SUN Y M, KAXIRAS E. Slip energy barriers in aluminium and implications for ductile-brittle behaviour [J]. Philosophical Magazine A, 1997, 75(4): 1117–1127.
［22］ ANDRIC P, YIN B L, CURTIN W A. Stress-dependence of generalized stacking fault energies [J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2019, 122: 262–279.
［23］ PERDEW J P, BURKE K, ERNZERHOF M. Generalized gradient approximation made simple [J]. Physical Review Letters, 1996, 77(18): 3865–3868.
［24］ PERDEW J P, BURKE K, ERNZERHOF M. Generalized gradient approximation made simple [Phys. Rev. Lett. 77, 3865 (1996)] [J]. Physical Review Letters, 1997, 78(7): 1396.
［25］ BLÖCHL P E. Projector augmented-wave method [J]. Physical Review B, 1994, 50(24): 17953–17979.
［26］ KRESSE G, JOUBERT D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method [J]. Physical Review B, 1999, 59(3): 1758–1775.
［27］ KRESSE G, HAFNER J. *Ab initio* molecular dynamics for liquid metals [J]. Physical Review B, 1993, 47(1): 558–561.
［28］ KRESSE G, FURTHMÜLLER J. Efficient iterative schemes for *ab initio* total-energy calculations using a plane-wave basis set [J]. Physical Review B, 1996, 54(16): 11169–11186.
［29］ HU X S, HUANG M S, LI Z H, et al. Study on lattice discreteness effect on superdislocation core properties of $Ni_3Al$ by improved semi-discrete variational peierls-Nabarro model [J]. Intermetallics, 2022, 151: 107695.
［30］ ANDERSON P M, HIRTH J P, LOTHE J. Theory of dislocations [M]. 3rd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2017.
［31］ VAN SWYGENHOVEN H, DERLET P M, FRØSETH A G. Stacking fault energies and slip in nanocrystalline metals [J]. Nature Materials, 2004, 3(6): 399–403.

# Generalized Stacking Fault Energies of Diamond and Silicon under ⟨111⟩ Uniaxial Loading

HUANG Lili[1], PENG Li[1], CHEN Shi[1], ZHANG Hongping[2], LI Mu[1]

（1. *College of Engineering Physics*, *Center for Intense Laser Application Technology*, *Shenzhen Key Laboratory of Ultraintense Laser and Advanced Material Technology*, *Shenzhen Technology University*, *Shenzhen* 518118, *Guangdong*, *China*;
2. *College of Big Data and Internet*, *Shenzhen Technology University*, *Shenzhen* 518118, *Guangdong*, *China*）

**Abstract:** The energy caused by atomic level shear in a crystal is called generalized fault energy (GSFE), This is an important material property for describing nanoscale plastic phenomena in crystalline materials, such as dislocation decomposition, nucleation, and twinning. During the shock loading process, the elastoplastic transition occurs after one-dimensional elastic strain, so the generalized stacking fault energy is of great significance in understanding the occurrence of plastic flow. Here, we calculate the generalized GSFE surface of glide (111) surface of silicon and diamond under uniaxial strain in [111] direction by using the first principles of density functional theory. Based on the translation symmetry of GSFE surface, we fit the GSFE surface expression obtained by Fourier series expansion and the generalized stacking fault energy curves for the $[\bar{1}10]$ (111) and $[11\bar{2}]$ (111) directions are given. With the increase of strain, the intrinsic fault energy ($\gamma_I$) and the unstable fault energy ($\gamma_{us}$) have obvious changes, and the ratio of the unstable stacking fault energy to the intrinsic stacking fault energy ($\gamma_{us}/\gamma_I$) decreases indicating that dislocations in crystals are not easily decomposed under uniaxial strain in the ⟨111⟩ direction. This result explains the results of dynamic experiments of dislocation evolution at four generations of light sources that the speed and strength of fault signals loaded along ⟨111⟩ direction are much lower than those loaded along ⟨110⟩ direction and ⟨100⟩ direction.
**Keywords:** generalized stacking fault energy; first principle calculations; shock loading; dislocation