

基于点缺陷扩散理论与离散位错动力学耦合的位错攀移模型研究*

高原 柳占立 赵雪川 张朝晖 庄 苗[†] 由小川

(清华大学航天航空学院, 教育部应用力学实验室, 北京 100084)

(2010年1月25日收到; 2010年12月20日收到修改稿)

位错的攀移运动对高温下晶体材料的塑性行为有重要影响, 为了能够有效揭示攀移的物理本质及其对塑性行为的作用, 本文基于点缺陷扩散理论, 通过将体扩散和管扩散机理的共同作用与三维离散位错动力学耦合, 建立了适用条件更广的位错攀移模型. 利用此模型我们模拟了单个及多个棱柱型位错环的收缩变形过程, 发现影响位错攀移速率的决定因素不是传统理论认为的机械攀移力, 而是位错周围(体扩散)及位错段上(管扩散)的空位浓度梯度. 该模型也能够完全重现棱柱型位错环群的粗化过程中不同位错环半径及晶体内平均空位浓度随时间变化的三个阶段.

关键词: 位错攀移, 点缺陷扩散理论, 位错动力学, 棱柱位错环

PACS: 61.72.Lk, 62.20.fq, 61.72.jd

1. 引言

基于点缺陷扩散机理的位错攀移过程对高温下晶体材料的塑性行为有着重要的影响^[1-4]. 许多学者曾经利用唯象方法将位错攀移机理引入材料的本构理论^[5-7], 但是唯象方法无法揭示攀移过程的物理本质. 离散位错动力学(DDD)作为一种研究位错运动的计算方法, 能够有效揭示位错微结构对晶体塑性变形的影响. 但是到目前为止, 绝大多数利用DDD研究高温下位错运动的方法都是将攀移过程视为保守运动. 只有极少数学者能够将扩散理论与DDD耦合, 建立在高温条件下更加物理的位错运动模型^[8].

Amodeo等^[9]基于唯象理论建立了位错攀移速度关于外载和温度的函数关系, 研究了滑移带和位错胞等问题; Roters等^[10]则假设了位错攀移阻尼系数, 利用二维DDD研究了温度为300 K时Al的应力应变关系. 但这两种方法的研究对象其实都是位错滑移占主导的问题. Argaman等^[11]仿照位错滑移速度建立了位错攀移的运动模型, Bakó等^[12]利用

该模型, 同样通过二维DDD研究了位错攀移对位错构型的影响, 但其中位错攀移和位错滑移采取了同样的近似形式, 只是采用了不同的材料参数. Ghoniem等^[13]建立了三维参数化位错动力学(PDD), 考虑了点缺陷的扩散, 将由扩散产生的化学势能加入系统Gibbs自由能, 但在研究位错攀移运动时仍然仿照位错滑移运动.

由于上述模拟方法没有抓住位错攀移的内在本质, 其结果并不具有普适性, 因此不能用以研究晶体在高温在位错运动对材料力学性能的影响^[14]. 一般来说, 攀移过程实际是热激活过程, 是温度相关的. 另外攀移过程涉及点缺陷的扩散, 而晶体几何形状(块体、薄膜等)和热处理历程(退火、淬火、辐照等)都会对点缺陷浓度造成影响, 因此位错攀移模型也应该是几何和热处理历程相关的. 这些相关性在仿照位错滑移建立的攀移模型中是无法体现的, 因此需要建立一种基于点缺陷扩散的DDD方法来模拟位错攀移过程.

Mordehai等^[8]通过将空位体扩散机理引入基于刃型-螺型位错离散化的DDD计算中获得了位错攀移速率, 模拟了Bardeen-Herring位错源的激活与位错环的收缩. 他们的模型假设了沿位错线上的每个

* 国家自然科学基金(批准号: 10772096)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: zhuangz@tsinghua.edu.cn

DDD 离散点均为空位源或汇,也就是说空位沿位错线的扩散(即管扩散)并没有考虑. 这种假设仅仅当位错线上存在很多交割时才成立. 但是对于低层错能的 fcc 晶体来说,在很大温度范围里形成高的交割密度是比较困难的. 另一方面,普遍认为管扩散激活能比体扩散激活能小,并且管扩散速率比体扩散速率大^[15,16]. 因此在较高温度下,管扩散同样对位错运动行为产生重要影响.

本文考虑了体扩散和管扩散机理的共同作用,并将其与 DDD 耦合,建立了更物理、适用条件更广的位错攀移模型,利用该模型研究了较高温度下单个棱柱型位错环受温度及应力条件变化下的收缩过程及位错环群的粗化现象.

2. 基本方法

2.1. 空位扩散理论

退火、淬火和辐照等基本的材料处理方法会在晶体内部产生大量处于非平衡状态的点缺陷. 空位是一种重要的点缺陷形式,它会在浓度梯度的影响下扩散. 基于位错的空位扩散方式有两种:向位错周围的扩散(体扩散)和沿位错线的扩散(管扩散,也称位错芯扩散)^[17],在下文中分别用标识符“b”和“p”表示. 根据点缺陷扩散速度的 Einstein 方程^[4],体扩散和管扩散的扩散量分别为

$$J_d^{(b)} = -4\pi \frac{D_v^{(b)}}{\Omega} r^2 \frac{\partial c_v}{\partial r}, \quad (1)$$

$$J_d^{(p)} = 2 \frac{D_v^{(p)} a^2}{\Omega} \frac{\partial c_v}{\partial x}, \quad (2)$$

其中, c_v 为原子空位浓度, r 为体扩散阵面(球面)的半径, x 为沿位错线的长度坐标, Ω 为原子体积, a 为晶格常数. $D_v^{(b)}$ 和 $D_v^{(p)}$ 分别为体扩散系数和管扩散系数. 根据稳态条件,即 $\partial J_d^{(b)}/\partial r = 0$ 和 $\partial J_d^{(p)}/\partial x = 0$, 可得

$$c_v^{(b)}(r) \approx c_v^{(\infty, b)} + \frac{a(c_v^{(s, b)} - c_v^{(\infty, b)})}{r}, \quad (3)$$

$$\partial^2 c_v^{(p)}/\partial x^2 = 0, \quad (4)$$

在(3)式中假设 $r = a$ 时, $c_v^{(b)} = c_v^{(s, b)}$; 当 r 足够大时, $c_v^{(b)} \approx c_v^{(\infty, b)}$. 根据(4)式可以看出, $c_v^{(p)}(x)$ 在沿位错线方向是关于距离的线性函数.

对于体扩散,将(3)式代入(1)式,可得

$$J_d^{(b)} = 4\pi \frac{D_v^{(sd, b)} a}{\Omega} \left(\frac{c_v^{(s, b)}}{c_v^{(\infty, b)}} - 1 \right), \quad (5)$$

其中, $D_v^{(sd, b)}$ 为体扩散的自扩散系数,满足 $D_v^{(sd, b)} = c_v^{(eq)} D_v^{(b)}$, $c_v^{(eq)}$ 表示晶体内空位的平衡浓度.

对于管扩散,当某空位从空位源发射后,在发生体扩散前沿位错线扩散的平均距离 x_0 称为该空位扩散的平均自由程,进而(2)式中右侧梯度项可近似表达为

$$J_d^{(p)} = 2 \frac{D_v^{(p)} a^2}{\Omega} \frac{c_v^{(s, p)} - c_v^{(\infty, p)}}{x_0}, \quad (6)$$

其中, $c_v^{(\infty, p)}$ 为晶体内的平均空位浓度. (5)和(6)式是我们进行扩散理论与位错动力学方法耦合的基础,耦合方法将在 2.3 节中详细介绍.

空位从位错空位源中的发射量 J_e 为^[4]

$$J_e = n \frac{D_v^{(sd)}}{a^2} \left(\exp\left(\frac{\sigma\Omega}{kT}\right) - \frac{c_v^{(s)}}{c_v^{(eq)}} \right), \quad (7)$$

其中, n 为晶格中距离空位源最近的原子个数, σ 为晶体内部应力场, k 为玻尔兹曼常数, T 为系统温度. 对于 fcc 晶体,体扩散 $n = 12$,管扩散 $n = 2$. 需要说明的是,本文不考虑过饱和浓度的情况,除非特别注明,假设 $c_v^{(\infty, b)} = c_v^{(\infty, p)} = c_v^{(eq)}$ 和 $c_v^{(s, b)} = c_v^{(s, p)} = c_v^{(s)}$ 始终成立,也就是说体扩散和管扩散的共同作用只发生在空位源处,对于位错线上的非空位源处,只有管扩散发生作用,并且认为晶体内存在足够的空位源和汇. 进而,采用空位数目守恒的方法^[18],令

$$J_d^{(b)} + J_d^{(p)} = J_e^{(b)} + J_e^{(p)} \quad (8)$$

利用(5), (6)和(7)式,并考虑到 $\Omega \approx a^3$ 及 $x_0 \gg a$, 我们可以得到空位源处的空位浓度 $c_v^{(s)}$ 为

$$c_v^{(s)} = c_v^{(eq)} \frac{4\pi + (2\xi + 12) \exp\left(\frac{\sigma\Omega}{kT}\right)}{4\pi + 2\xi + 12}, \quad (9)$$

其中 $\xi = D_v^{(p)}/D_v^{(b)}$.

最后,将计算基于空位扩散理论的位错攀移速率,包括体扩散和管扩散共同作用及管扩散单独作用两种情况. 对于第一种情况,每发射一个空位,位错将会扫过 Ω/b 的面积. 因此单位时间内体扩散和管扩散作用下位错扫过的面积分别为 $J_d^{(b)}\Omega/b$ 和 $J_d^{(p)}\Omega/b$, 进而位错攀移的速率为

$$v_{\text{disl}}^{(b, p)} = \frac{\Omega}{bx_s} (J_d^{(b)} + J_d^{(p)}), \quad (10)$$

其中, x_s 为空位源的间隔距离. 分别将(2)和(5)式代入(10)式可得

$$v_{\text{disl}}^{(b, p)} = \frac{2D_v^{(b)} a}{bx_s} \left(2\pi \left(\frac{c_v^{(s)}}{c_v^{(eq)}} - 1 \right) + \frac{\partial c_v}{\partial x} a \xi \right). \quad (11)$$

对于第二种情况,同理可得管扩散下位错攀移率为

$$v_{\text{disl}}^{(p)} = \frac{2D_v^{(b)} a^2 \xi}{bx_s} \frac{\partial c_v}{\partial x}. \quad (12)$$

2.2. 离散位错动力学

在我们的位错动力学程序中^[19,20], 弯曲的位错线被离散为若干混合型直位错段, 节点分布于位错段两端. 位错段 i 的动力学方程可以通过如下标准的有限元格式求解:

$$M\dot{\mathbf{v}}_i + B\mathbf{v}_i = \mathbf{f}_i \quad (13)$$

其中, \mathbf{v}_i 和 \mathbf{f}_i 分别为位错段 i 上的节点速度和节点力. 节点力 \mathbf{f}_i 满足 $\mathbf{f}_i = \int_l \mathbf{N}^T \mathbf{f} dl$, 其中, \mathbf{N} 为形函数, \mathbf{f} 为单位长度位错线所受外力, 并有如下表达式:

$$\mathbf{f} = (\boldsymbol{\sigma}_i \cdot \mathbf{b}_i) \times \boldsymbol{\xi}_i + \mathbf{f}^{\text{self}} + \mathbf{f}^{\text{image}}. \quad (14)$$

在(14)式右端第一项为 Peach-Koehler 力, 其中 \mathbf{b}_i 为位错段 i 的 Burgers 矢量, $\boldsymbol{\xi}_i$ 为位错段单位方向矢量, $\boldsymbol{\sigma}_i$ 是由于内部位错线和外加边界条件叠加形成的应力场. 第二项 \mathbf{f}^{self} 为线张力, 由位错间相互作用形成. 第三项 $\mathbf{f}^{\text{image}}$ 为自由表面引起的镜像力(在本文中忽略). \mathbf{M} 及 \mathbf{B} 分别为相应的单元有效质量阵和阻尼系数矩阵. 我们可以认为位错运动处在过阻尼区域, 因此在我们的模拟中, 忽略了位错的有效质量阵 \mathbf{M} .

在下一小节, 我们将利用离散化方法将空位扩散机理与位错动力学耦合, 从而实现模拟位错的攀移过程.

2.3. 空位扩散理论与离散位错动力学耦合

在 DDD 中位错线被离散为若干直位错段, 这种离散化过程需要满足三个条件以保证管扩散理论的有效性: 1) 位错线上存在若干初始空位源并且位错间隔 x_s 小于平均自由程 x_0 以保证管扩散的发生; 2) 各位错段长度小于平均自由程 x_0 以保证计算精度; 3) 在位错演化过程中, 如果两个初始空位源的距离大于某临界尺寸, 两源之间会引入新的空位源.

不失一般性, 我们任意选取编号为“ l ”的位错段进行研究, 并假设系统只有一个空位源存在. 该位错段两端节点编号分别为“ i ”和“ $i+1$ ”. 则(11)式和(12)式中的梯度项可以表示为

$$\left(\frac{\partial c_v}{\partial x}\right)^{(l)} = \frac{c_v^{(i)} - c_v^{(i+1)}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i+1}|}. \quad (15)$$

下面简要说明如何计算节点上的空位浓度. 我们假设如果某节点与空位源的距离大于平均自由程 x_0 , 那么该点处空位浓度为 $c_v^{(\text{eq})}$. 另外, 根据(4)

式, 沿位错线方向空位浓度梯度是恒量. 所以不得而知, 只要获知空位源处的空位浓度 $c_v^{(m,s)}$ ($m = 1, \dots, N^{(s)}$)、平衡空位浓度 $c_v^{(\text{eq})}$ 、平均自由程 x_0 以及各节点 \mathbf{r}_k ($k = 1, \dots, N$)、各空位源坐标 $\mathbf{r}_m^{(s)}$ ($m = 1, \dots, N^{(s)}$), 位错线上的任一点处的空位浓度均可通过线性插值得到

$$c_v^{(k)} = c_v^{(k)}(c_v^{(m,s)}, c_v^{(\text{eq})}, x_0, \mathbf{r}_k, \mathbf{r}_m^{(s)}), \quad (16)$$

其中, N 为所有节点数目, $N^{(s)}$ 为所有空位源数目. 目前, $c_v^{(m,s)}$ 为(16)式中唯一的未知数. 根据 PK 公式, 位错在受到垂直于攀移平面的应力作用 σ 时, 产生的单位长度攀移力为

$$F_{\text{climb}} = \sigma b. \quad (17)$$

另一方面, 某 DDD 节点受到的攀移力等于该点的节点力在攀移平面上的分力, 即

$$F_{\text{climb},m} = \mathbf{f}_m \cdot \mathbf{n}_m, \quad (18)$$

其中 $m = 1, \dots, N^{(s)}$ (不求和, 下同). 因此, 根据(9)式, 各空位源处的空位浓度可以表示为

$$c_v^{(m,s)} = c_v^{(\text{eq})} \frac{4\pi + (2\xi + 12) \exp\left(\frac{(\mathbf{f}_m \cdot \mathbf{n}_m)\Omega}{kT}\right)}{4\pi + 2\xi + 12}. \quad (19)$$

最后, 在通过插值得到各 DDD 节点的空位浓度 $c_v^{(k)}$ 后, 利用(11), (12) 和(15) 式, 并考虑到 $\Omega \approx a^3$, $a \approx b$, 位错攀移速度为

当节点 i 为空位源时,

$$\mathbf{v}_{\text{climb},i} = \frac{2D_v^{(b)} a}{bx_s} \left(2\pi(c_v^{(i)} - c_v^{(\text{eq})}) + \frac{c_v^{(i)} - c_v^{(i+1)}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i+1}|} a\xi \right) \mathbf{n}_i. \quad (20)$$

当节点 i 不为空位源时,

$$\mathbf{v}_{\text{climb},i} = \left(\frac{2D_v^{(b)} a^2 \xi}{bx_s} \frac{c_v^{(i)} - c_v^{(i+1)}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i+1}|} \right) \mathbf{n}_i, \quad (21)$$

其中, \mathbf{n}_i 为位错攀移单位方向矢量, x_s 为各空位源的间隔距离. 在 DDD 中, \mathbf{n}_i 可以通过 \mathbf{b}_i , $\boldsymbol{\xi}_i$ 和 \mathbf{n}_i 组成的右手坐标系得到

$$\mathbf{n}_i = \frac{\mathbf{b}_i \times \boldsymbol{\xi}_i}{|\mathbf{b}_i \times \boldsymbol{\xi}_i|}. \quad (22)$$

实际上, 扩散控制方程对空位和间隙原子均适用, 唯一的区别在于二者扩散方向相反, 这种反方向会对点缺陷浓度产生影响. 限于篇幅, 本文只针对空位进行研究.

3. 计算模型和结果

棱柱型位错环是晶体材料内部常见的缺陷结

构. 晶体材料在高温情况下退火或淬火会造成内部点缺陷浓度的不平衡, 这种不平衡性是形成位错环的主要原因. 位错环的存在会对材料性能(如屈服强度、延展性等)产生较大影响.

棱柱型位错环由封闭的刃型位错组成, 刃型位错的 Burgers 矢量垂直于位错环面, 其滑移面是柱面. 因此棱柱型位错环只能通过位错攀移才能引起其形状发生改变, 许多学者在这一领域中通过实验和计算手段进行了大量的研究.

卢果等^[21]采用分子动力学方法模拟了位错环在 0—350 K 温度范围内的自收缩过程和较高温度的脱体现象, 提出了新的位错增殖机理(热激发机理). Silcox 等^[22]发现 Al 中棱柱型位错环的环面积随时间线性降低, 并且位错环的湮没时间随温度呈指数降低. Mordehai 等^[8]则通过基于体扩散的 DDD 模拟印证了上述实验结果. 然而最近 Sun 等^[23]在通过 TEM 研究外延 BaTiO₃ 薄膜中刃型半位错环在高温退火时的结构演化过程时发现, 半环之间会通过攀移相互融合以降低错配应变. 在攀移过程中, 质量输运及点缺陷扩散主要以管扩散为主.

本节中我们通过在第 2 节中建立的基于体扩散和管扩散共同作用的攀移模型研究棱柱型位错环在高温环境下的演化规律.

3.1. 单棱柱位错环收缩和湮没的温度影响

我们将一个完整的圆形 fcc 棱柱型位错环(半径为 80 nm)离散为 24 个位错段作为 DDD 初始构型. 施加外载 $\sigma_{33} = 5$ MPa, 采用固定时间步长 0.2 s, 环境温度从 580—650 K 范围内变化. 如前所述, 我们只考虑空位扩散机理, 在位错环上只引入一个空位源, 并置于位错环的任意位置. 位错环的湮没时间 t_{ann} 定义为位错环在完全湮没前的演化时间.

通过计算发现, 在体扩散和管扩散的共同作用时, 各温度条件下位错环的半径都将不断减小直至湮没. 如图 1 所示, 位错环面面积随时间线性减小, 并且当温度升高时, 湮没时间随之减小, 这均与前人理论分析^[24]、实验观察^[22]和计算模拟^[8]的结果一致. 对于考虑体扩散及管扩散共同作用与只考虑管扩散单独作用两种情况, 我们都发现湮没时间随温度呈指数减小, 符合 Arrhenius 律(图 2), 并且第一种情况下湮没速率明显高于第二种情况.

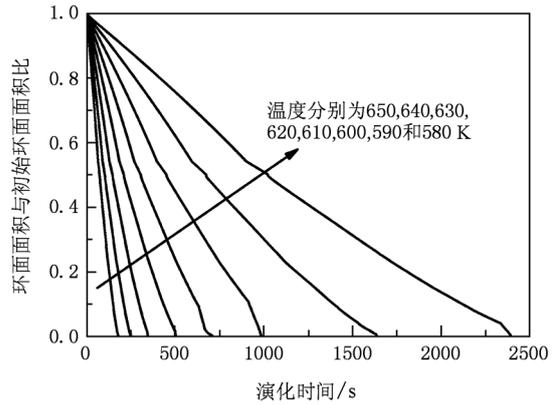


图 1 不同温度条件下棱柱型位错环单位化环面面积与演化时间的关系

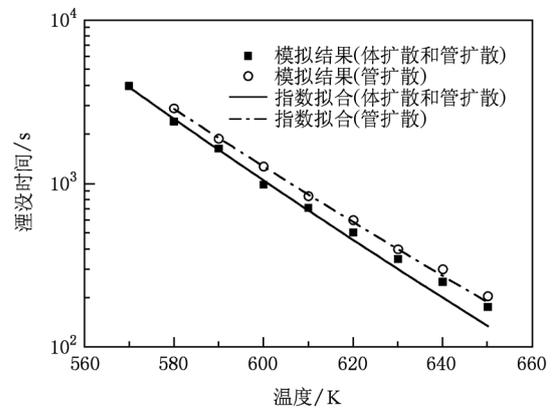


图 2 位错环湮没时间随温度的变化规律, 实心线表示指数拟合函数

3.2. 单棱柱位错环收缩和湮没的应力影响

采用同 3.1 节的 DDD 初始构型, 在固定环境温度为 600 K 的情况下, 外加应力 σ_{33} 在 0—300 MPa 内变化. 我们发现, 当应力水平较高时 ($\sigma_{33} > 10$ MPa), 环面面积随时间线性减小(图 3), 位错环湮没时间 t_{ann} 也随应力 σ_{33} 的增加而减小, 但不再呈指数关系(图 4); 而当应力水平较低时 ($\sigma_{33} \leq 10$ MPa), 环面面积随时间的减小不再呈线性关系, 湮没时间与应力水平也不再呈单调变化关系(见图 4 中的插图). 出现这种现象的原因在于我们的模型中攀移力不再是影响位错攀移速率的唯一因素, 实际上根据 (20), (21) 式可以推断, 位错周围(体扩散)及位错段上(管扩散)的空位浓度梯度才是决定因素, 这是与只考虑体扩散机制攀移模型的最本质区别.

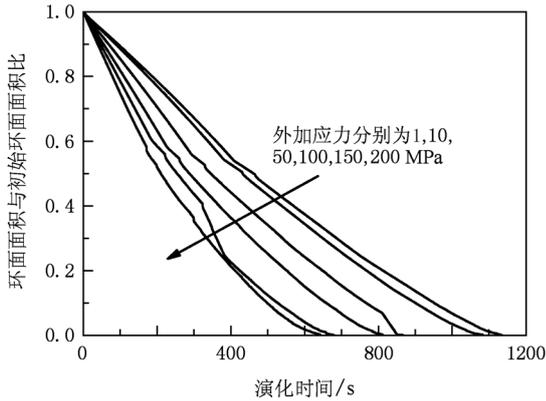


图3 不同应力水平下棱柱型位错环单位化环面面积与演化时间的关系

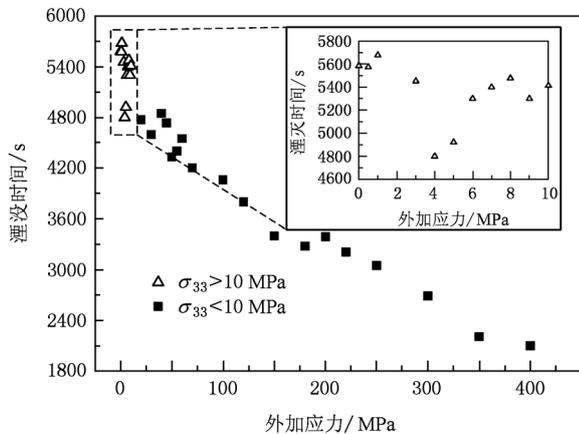


图4 位错环湮没时间与应力的关系

3.3. 棱柱位错环群的粗化过程

在之前的计算中本文假设了晶体内部平均空位浓度为恒定值,事实上这需要计算域内存在不同的空位源和空位汇以保证晶体内部空位浓度的平衡. 在实际晶体中,晶体表面、晶界及外部条件等可以充当这种源和汇,因此对于薄膜等大尺度比材料以及受持续辐照的体状材料,上述假设是成立的. 然而对于攀移位错远离表面和晶界的体状材料,这种源和汇只能是位错本身,也就是说体内自由空位的个数是守恒的,因而晶体内部平均空位浓度实际上是变化的. 这种守恒性会造成一个有趣的现象,即退火或淬火前后晶体内部的位错环数目有明显减少,同时没有湮没掉的位错环的尺寸有明显增大^[24]. 这种位错环粗化现象是由于不同环之间有空位扩散量的相互传递,大环的扩张以小环的收缩为代价. 本节将考虑空位浓度守恒条件,利用攀移模型模拟棱柱位错环群的粗化现象.

空位浓度守恒条件可以通过空位扩散量的平衡来表达,即

$$2\pi RL_i D_v \left(\frac{dc}{dR} \right)_i = \frac{L_i}{b^2} \left(\frac{dr}{dt} \right)_i, \quad (23)$$

其中,指标“ i ”表示第 i 个位错段编号, L_i 表示第 i 个位错段的长度. 对(23)式积分可得位错环半径的变化率为

$$\left(\frac{dr}{dt} \right)_i = -2\pi D_v b^2 (c_v^{(i,seg)} - c_{aver}), \quad (24)$$

其中, $c_v^{(i,seg)}$ 表示位错段 i 的空位浓度,它取为该位错段两端点浓度的平均值, c_{aver} 为晶体内部远离位错处的平均浓度. 在位错环粗化过程中空位守恒要求满足以下平衡方程:

$$\sum_{i=1}^n \frac{L_i}{b^2} \left(\frac{dr}{dt} \right)_i = \sum_{i=1}^n -2\pi L_i D_v (c_v^{(i,seg)} - c_{aver}) = 0, \quad (25)$$

其中, n 为所有位错段的总数. 对(25)式进行简化可得

$$\sum_{i=1}^n L_i (c_v^{(i,seg)} - c_{aver}) = 0. \quad (26)$$

因此,只要通过(16)式获知各DDD节点的空位浓度,进而得到各位错段的浓度,就可以利用(26)式得到远场的平衡空位浓度 c_{aver} . 下面将利用上述方法模拟位错环群的粗化过程.

初始构型如下:分别在空间放置4个半径为80 nm和4个半径为40 nm的圆形棱柱型位错环(如图5所示),它们分别处于某假想立方体的8个端点. 该立方体的边长足够长,以保证任意两相邻环的中点处的空位浓度为平衡浓度. 外加荷载 σ_{33} 为200 MPa,环境温度为600 K,同样不考虑空位浓度过饱和的情况.

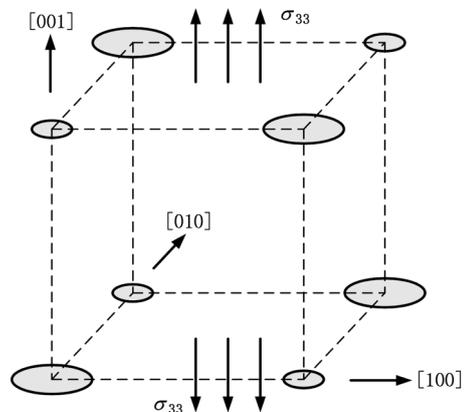


图5 棱柱型位错环群的几何构型

从图 6 和图 7 中可以看出,棱柱型位错环群的粗化过程明显分为三个阶段:第一阶段中,大环半径增大,小环半径减小,此时晶体内的自由空位浓度迅速增加,直至其与位错环附近的空位浓度相近,主要原因是在这个阶段中,晶体平均空位浓度较低,位错线上及位错线周围的空位浓度梯度较高,从而位错攀移速率也比较大;第二阶段,大环继续增大,小环继续减小,但变化率明显降低,此时晶体内部的自由空位数目区域稳定并达到最大值,小环缩小所发射的空位大部分被大环吸收,导致大环增大;当小环完全湮没时,变化进入第三阶段,大环由于没有来自小环发射的空位补充而只能吸收晶体内的自由空位,从而使晶体内部平均空位浓度降低,当平均浓度与大环附近的空位浓度平衡时,系统达到相对稳定的状态,大环半径不再变化. 这样

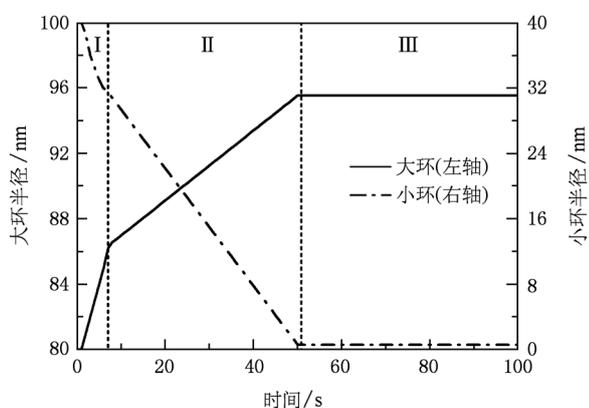


图 6 两种不同位错环的半径与演化时间的关系

的模拟结果说明了我们的攀移模型完全重现了位错环的粗化过程,具有较高精度.

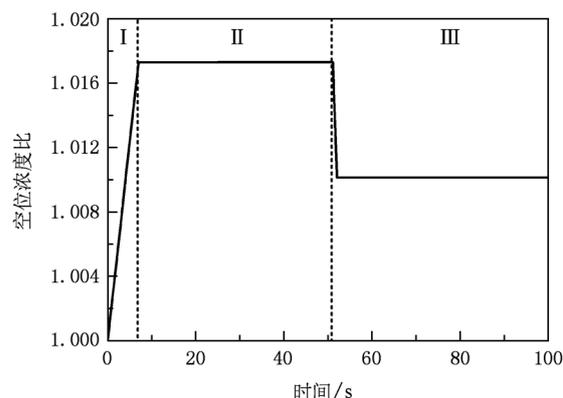


图 7 晶体内部平均空位浓度与演化时间的关系

4. 结 论

我们首次通过将空位的体扩散和管扩散理论与三维离散位错动力学耦合,建立了具有高精度的位错攀移模型,并利用该模型研究了棱柱型位错环的尺寸演化规律. 模拟发现决定影响位错攀移速率的因素不是传统理论认为的机械攀移力,而是位错周围(体扩散)及位错段上(管扩散)的空位浓度梯度. 同时,我们的模型完全重现了棱柱型位错环群的粗化过程中不同位错环半径及晶体内部平均空位浓度随时间变化的三个阶段.

- [1] Hirth J P, Lothe J 1982 *Theory of Dislocations* (New York: Wiley Interscience)
- [2] Li Y, Kong Q P 1989 *Acta Phys. Sin.* **38** 91 (in Chinese) [李勇、孔庆平 1989 物理学报 **38** 91]
- [3] Allnatt A, Lidiard A 1993 *Atomic transport in solids* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [4] Caillard D, Martin J 2003 *Thermally activated mechanisms in crystal plasticity* (Amsterdam: Pergamon Press)
- [5] Fedelich B 2002 *Int. J. Plast.* **18** 1
- [6] Hiratani M, Zbib H 2002 *J. Eng. Mater. Technol.* **124** 335
- [7] Li H, Lin J, Dean T A, Wen S W, Bannister A C 2009 *Int. J. Plast.* **25** 1049
- [8] Mordehai D, Clouet E, Fivel M, Verdier M 2008 *Philos. Mag.* **88** 899
- [9] Amodeo R, Ghoniem N 1990 *Phys. Rev. B* **41** 6958
- [10] Roters F, Raabe D, Gottstein G 1996 *Comput. Mater. Sci.* **7** 56
- [11] Argaman N, Levy O, Makov G 2001 *Mater. Sci. Eng. A* **309** 386
- [12] Bakó B, Groma I, Györgyi G, Zimányi G 2006 *Comput. Mater. Sci.* **38** 22
- [13] Ghoniem N, Tong S, Sun L 2000 *Phys. Rev. B* **61** 913
- [14] Cleveringa H H M, Van der Giessen E, Needleman A 1999 *Int. J. Plast.* **15** 837
- [15] Tang X, Lagerlöf K, Heuer A 2003 *J. Am. Ceram. Soc.* **86** 560
- [16] Legros M, Dehm G, Arzt E, Balk T 2008 *Science* **319** 1646
- [17] Ge T S 1996 *Acta Phys. Sin.* **45** 1016 (in Chinese) [葛庭燧 1996 物理学报 **45** 1016]
- [18] Edelin G 1971 *Philos. Mag.* **23** 1547
- [19] Liu Z L, Liu X M, Zhuang Z, You X C 2009 *Scripta Mater.* **60** 594
- [20] Liu Z L, Liu X M, Zhuang Z, You X C 2009 *Int. J. Plast.* **25** 1436
- [21] Lu G, Fang B Q, Zhang G C, Xu A G 2009 *Acta Phys. Sin.* **58**

- 7934 (in Chinese) [卢 果、方步青、张广财、许爱国 2009 物
理学报 58 7934] [23] Sun H, Pan X, Haeni J, Schlom D 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85**
1967
[22] Silcox J, Whelan M 1960 *Philos. Mag.* **5** 1 [24] Burton B, Speight M 1986 *Philos. Mag. A* **53** 385

Dislocation climb model based on coupling the diffusion theory of point defects with discrete dislocation dynamics^{*}

Gao Yuan Liu Zhan-Li Zhao Xue-Chuan Zhang Zhao-Hui Zhuang Zhuo[†] You Xiao-Chuan

(Applied Mechanics Laboratory, School of Aerospace, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

(Received 25 January 2010; revised manuscript received 20 December 2010)

Abstract

Dislocation climb plays a vital role in the plastic behavior of crystals at high temperatures. In order to reveal the intrinsic mechanism of climb and its effect on plasticity, a new dislocation climb model is first developed based on the combination of the diffusion theory with both bulk diffusion and pipe diffusion in a three-dimensional discrete dislocation dynamics (DDD) simulation, which is considered to be more physical and widely applicable. Using our model the shrinkage processes of a single prismatic loop group and prismatic loop group are simulated. It is concluded that the climb rate is not directly determined by mechanical climb force as believed in classical theories, but by the gradient of the vacancy concentration around (bulk diffusion) and along (pipe diffusion) the dislocation line. Loop coarsening process is also simulated, and the three pronounced evolving stages of the loop radii and the average vacancy concentrations in crystal are reproduced.

Keywords: dislocation climb, diffusion theory of point defects, dislocation dynamics, prismatic dislocation loop

PACS: 61.72.Lk, 62.20.fq, 61.72.jq

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10772096).

[†] Corresponding author. E-mail: zhuangz@tsinghua.edu.cn