

剪切应力下扩展位错穿越孔洞和夹杂相的相场模拟

郭文慧,倪勇

(中国科学技术大学工程科学学院近代力学系,安徽合肥 230027)

摘要: 利用结合了相场微弹性理论和位错派纳模型的相场方法,数值模拟研究了面心立方晶体铝和铜中剪切应力下扩展位错穿越孔洞和夹杂相的过程.相场微弹性理论用来计算位错和孔洞/夹杂相之间的长程弹性相互作用,派纳模型中采用一维晶体能函数描述扩展位错结构,Ginzburg-Landau 动力学方程描述位错滑移的过程.模拟结果显示位错接近孔洞时,位错先被吸引到孔洞边缘而后被钉扎最后脱离孔洞;而当位错接近夹杂相时,位错先被夹杂相弯曲而后绕过夹杂相并产生位错环.研究发现层错能比较小的情况下扩展位错接近孔洞/夹杂相时会发生层错收窄,而绕过孔洞/夹杂相时会出现领先不全位错先穿越、滞后不全位错后穿越并伴随局部层错展宽的现象.该模拟结果不仅与前人原子层次模拟结果一致,而且进一步在更长的时间尺度下揭示了应力幅值、层错能参数对扩展位错穿越孔洞/夹杂相动力学过程的影响.

关键词: 弹性作用;刃型扩展位错;孔洞;夹杂相;相场模型

中图分类号: O343.7;O77⁺2 **文献标识码:** A doi: 10.3969/j.issn.0253-2778.2020.04.017

引用格式: 郭文慧,倪勇. 剪切应力下扩展位错穿越孔洞和夹杂相的相场模拟[J]. 中国科学技术大学学报, 2020,50(4):542-550.

GUO Wenhui, NI Yong. Phase field simulation of an extended dislocation passing through void and inclusion under shear stress[J]. Journal of University of Science and Technology of China, 2020,50(4):542-550.

Phase field simulation of an extended dislocation passing through void and inclusion under shear stress

GUO Wenhui, NI Yong

(Department of Modern Mechanics, School of Engineering Science, University of Science and Technology of China, Hefei 230027, China)

Abstract: The dynamics of the extended dislocation passing through the void and inclusion in the face-centered cubic (FCC) crystals of aluminum (Al) and copper (Cu) under shear stress were simulated by phase-field method combined with the phase-field microelasticity (PFM) theory and the Peierls-Nabarro (PN) model, respectively. The PFM theory was employed to calculate the long-range elastic interaction between the dislocation and the void (or the inclusion phase), the PN model was used to describe the structure of the extended dislocation based on the one-dimensional crystal energy function, and the Ginzburg-Landau dynamic equation was used to describe the movement of the dislocation. The simulated results showed that when the dislocation slips to the void, the dislocation is attracted to the edge of the void first and then pinned and finally depinned. When the dislocation slips to the inclusion phase, the

收稿日期: 2019-05-20; 修回日期: 2019-05-30

基金项目: 国家自然科学基金(11672285)资助.

作者简介: 郭文慧,女,1994年生,硕士.研究方向:相场动力学. E-mail: guowh17@mail.ustc.edu.cn

通讯作者: 倪勇,博士/教授. E-mail: yni@ustc.edu.cn

dislocation is first bent by the inclusion and then passes through the inclusion with a dislocation loop left. Moreover, in the case that the stacking fault (SF) energy is relatively low, it was found that the SF narrows when the extended dislocation approaches the void (or the inclusion phase). While an extended dislocation passes through the void (or the inclusion phase), the leading partial dislocation passes through the void first, and then the trailing partial dislocation passes through the void, which is also accompanied by the phenomenon of SF broadening. Our simulation results are not only consistent with the previous atomic simulated results, but also further reveal the effects of stress amplitude and SF energy parameters on the dynamics of the extended dislocation passing through the void (or the inclusion) at a longer time scale.

Key words: elastic interaction; edge extended dislocation; void; inclusion; phase field model

0 引言

核能反应过程不可避免会产生高速粒子,在高速粒子冲击下辐照材料内部发生大量的原子移位,进而出现空位、孔洞、位错、夹杂相等缺陷,不同缺陷之间的相互作用使结构材料的力学性能在辐照条件下发生显著的变化,严重威胁反应堆的寿命和安全性,这是热核聚变实验堆系统结构材料力学领域亟待解决的科学问题^[1].研究核相关金属晶体中孔洞等夹杂相与位错的复杂相互作用以及其对位错运动过程的影响,有助于从微介观尺度理解辐照下金属材料的缺陷演化过程和变形机制,进而理解辐照下宏观材料力学性能的系列变化规律,加速研发优异的抗辐照材料^[2].

影响位错运动难易程度的一个关键因素就是作用在位错上的驱动力.早期理论研究表明位错和孔洞/夹杂相之间的长程弹性相互作用可以显著提升位错运动的阻力^[3-6].当夹杂相尺寸在纳米尺度时,解析结果表明弹性相互作用由于表/界面弹性效应而呈现显著的尺寸效应^[7],另外有研究表明夹杂相界面的滑移与扩散等原子结构松弛过程也会极大改变位错和孔洞/夹杂相之间的长程弹性相互作用^[8].由于复杂位错构型和多孔洞/夹杂相之间的弹性相互作用难于解析求解^[9],近年来的研究开始采用原子层次模拟^[10-19]和位错动力学模型^[20-21]更多关注孔洞和夹杂相对位错运动过程的影响.分子动力学模拟表明位错可穿越夹杂相,也可绕过夹杂相形成Orowan位错环^[10];当夹杂相为不可穿越类型时,夹杂相的分布和密度对位错绕过夹杂相的过程有重要影响^[11].原子模拟结果显示后续位错接近初始位错绕过夹杂相形成的位错环时,会发生交滑移进而形成棱柱状位错环^[12].前人用分子动力学对面心立方晶体中界面刃型位错与球形孔洞之间的作用机制做

了比较细致的研究^[13-19]. Dutta 等发现孔洞会诱发位错攀移^[13]. Asari 等^[14]发现层错能大小对位错穿越过程有明显影响,当层错能比较低时,层错宽度比较大,领先不全位错首先穿过孔洞,经过一段时间,滞后不全位错才穿过去;而当层错能比较高的时候,层错宽度比较小,领先不全位错和滞后不全位错几乎同时穿过孔洞.随后 Okita 等^[15]发现位错穿越所需的临界剪切应力与孔洞的尺寸和球心的位置有关,位错与孔洞的相互作用关于球心不对称,当球心位于滑移面下方也就是位错应力场的拉应力区域时,临界剪切应力比较小,而球心位于滑移面和滑移面上方时,临界剪切应力越来越大,主要是因为孔洞能够释放压应力区的应力,因此孔洞越靠近压应力区体系能量越低从而导致位错穿越孔洞所需的剪切应力越大.在此基础上,Doihar 等^[16]还研究了温度和层错能共同调控下扩展位错与孔洞的相互作用机制,通过改变孔洞半径发现了四种不同类型的作用机制.除此之外,原子模拟结果表明孔洞的形状和分布对位错穿越过程也有重要的影响^[17-19].

分子动力学能够获得位错与孔洞/夹杂相等缺陷的微观作用过程和作用机制,然而这些原子尺度的模拟时间和空间尺度较小,分子动力学模拟一般只能模拟高应变率而难以描述低应变率下位错与孔洞/夹杂相的相互作用行为.位错动力学模型则在更大时空描述复杂位错动力学过程有巨大优势,但位错线的假设使得其在描述扩展位错结构变化时,需要提前输入原子层次模拟决定的位错反应规则^[20-21].近年来提出的位错相场模型^[22-31]利用相场微弹性理论^[32]计算位错之间的长程弹性相互作用,结合晶体能函数描述位错芯结构处的晶格内聚力相互作用^[24-28],利用 Ginzburg-Landau 动力学方程描述位错动力学过程^[22-23].该模型可以在较大的时间尺度下同时描述含位错芯结构变化的位错反

应^[23-28],位错与界面相互作用的速率依赖性^[29-30]、位错与夹杂相等非均质结构的复杂相互作用过程^[31].本文应用位错相场方法,模拟研究扩展位错穿越孔洞和夹杂相的动力学过程,揭示孔洞和夹杂相对位错穿越过程影响的差异,探讨面心立方晶体的层错能和外加剪切应力对位错与孔洞/夹杂相相互作用机制的影响规律.通过对比位错与不同夹杂非均质缺陷的相互作用机制,有望深入理解辐照材料中微结构缺陷依赖的力学行为.

1 模型描述

我们建立的扩展位错穿越球形孔洞/夹杂相的相场模型计算示意图如图 1 所示.采用周期性边界条件,计算区域为 $200l \times 64l \times 200l$,将位错滑移面即面心立方晶体的(111)面放置在 $X-O-Z$ 面上,滑移面法向为 $\mathbf{n} = [010]$,位错的伯格斯矢量为 $\mathbf{b} = b[001]$,半径为 r 的球形孔洞球心或夹杂相位于滑移面上,初始扩展位错由领先不全位错、层错和滞后不全位错组成.在外加剪切应力 τ_{yz} 作用下,扩展位错会沿 Z 轴滑移.

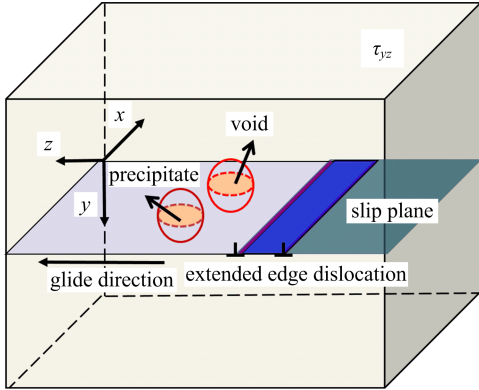


图 1 面心立方晶体中位错穿越孔洞/夹杂的计算模型示意图

Fig. 1 Sketch of an extended edge dislocation passing through a void or inclusion in FCC crystals

在相场模型中我们用静态序参量 $\varphi_v(\mathbf{r}) = 1$ 和 $\varphi_p(\mathbf{r}) = 1$ 分别描述孔洞和夹杂相的分布,在其余区域设置 $\varphi_v(\mathbf{r}) = \varphi_p(\mathbf{r}) = 0$.我们在滑移面($X-O-Z$)上用序参量 $\eta(\mathbf{r}, t)$ 表示扩展位错结构, $\eta(\mathbf{r}, t) = 1$ 表示已滑移区域, $\eta(\mathbf{r}, t) = 0.5$ 表示层错的分布, $\eta(\mathbf{r}, t) = 0$ 为未滑移区域.滑移面上序参量 $\eta(\mathbf{r}, t)$ 的演化服从 Ginzburg-Landau 动力学方程^[22]:

$$\frac{\partial \eta(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -L \frac{\partial E^{\text{tot}}}{\partial \eta(\mathbf{r}, t)} \quad (1)$$

式中, t 表示演化时间, L 是描述位错运动迁移率相关的动力学参数, $\partial E^{\text{tot}} / \partial \eta$ 是位错运动的驱动力,

此项为零时说明位错处于热力学平衡态.在位错相场模型中,系统总的自由能包含位错畸变引起短程的晶格错配能,系统的弹性应变能和外载势能三个部分,可以表示为

$$E^{\text{tot}} = E^{\text{cry}} + E^{\text{ela}} + E^{\text{ext}} \quad (2)$$

晶格错配能分布在滑移面上,是滑移面两侧的局部相对滑移引起的层间势能变化.我们采用 Hunter 所用的简化的一维层间势描述扩展位错的晶格错配能^[25]:

$$E^{\text{cry}} = \int [\gamma_{\text{sf}} \sin^2(\pi\eta) + (\gamma_{\text{usf}} - \gamma_{\text{sf}}/2) \sin^2(2\pi\eta)] \cdot \delta(y) dx dy dz \quad (3)$$

式中, γ_{sf} 为稳定层错能, γ_{usf} 为不稳定层错能,在孔洞内设置 $\gamma_{\text{sf}}^{\text{v}} = 0$, $\gamma_{\text{usf}}^{\text{v}} = 0$,在夹杂相内设置 $\gamma_{\text{sf}}^{\text{p}} = 10\gamma_{\text{sf}}$, $\gamma_{\text{usf}}^{\text{p}} = 10\gamma_{\text{usf}}$.

系统的弹性能 E^{ela} 则采用了特征应变理论求解.位错的特征应变 $\epsilon_{ij}^{\text{dis}}$ 可以表示成伯格斯矢量 \mathbf{b} 和滑移面法向 \mathbf{n} 的并矢形式,即

$$\epsilon_{ij}^{\text{dis}} = \frac{b_i n_j}{d} \eta(\mathbf{r}, t) \quad (4)$$

式中, d 表示位错滑移面的面间距.利用 Eshelby 等效夹杂原理,孔洞/夹杂相引起的弹性不均匀性可以用弹性均匀系统中的等效本征应变 $\epsilon_{kl}^{\text{virt}}(\mathbf{r}, t)$ 来表示^[32]:

$$C_{ijkl}^0 [\epsilon_{kl}(\mathbf{r}) - \epsilon_{kl}^0(\mathbf{r}, t)] = C_{ijkl}(\mathbf{r}) [\epsilon_{kl}(\mathbf{r}) - \epsilon_{kl}^{\text{dis}}(\mathbf{r}, t)] \quad (5)$$

C_{ijkl}^0 为晶体的弹性模量, $C_{ijkl}(\mathbf{r}) = C_{ijkl}^0 (1 - \varphi_v) + \varphi_p C_{ijkl}^{\text{p}}$, 其中 C_{ijkl}^{p} 为夹杂相的弹性模量.在孔洞/夹杂相外 $\epsilon_{kl}^0(\mathbf{r}, t) = \epsilon_{kl}^{\text{dis}}(\mathbf{r}, t)$, 在孔洞/夹杂相内 $\epsilon_{kl}^0(\mathbf{r}, t) \neq \epsilon_{kl}^{\text{dis}}(\mathbf{r}, t)$.Khachaturyan-Shatalov(KS)理论给出了基于特征应变的弹性能表达式^[32]:

$$E^{\text{ela}} = \frac{1}{2} \int_{|\mathbf{k}| \neq 0} [C_{ijkl}^0 \tilde{\epsilon}_{ij}^0(\mathbf{k}) \tilde{\epsilon}_{kl}^0(\mathbf{k})^* - e_i \tilde{\sigma}_{ij}^0(\mathbf{k}) \Omega_{jk}(\mathbf{e}) \tilde{\sigma}_{kl}^0(\mathbf{k})^* e_l] \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \quad (6)$$

式中, \mathbf{k} 是傅里叶空间的方向向量, $\int_{|\mathbf{k}| \neq 0}$ 表示傅里叶空间除 $|\mathbf{k}| = 0$ 的积分, $\mathbf{e} = \mathbf{k}/k$ 是倒易空间的单位向量; $\tilde{\epsilon}_{ij}^0(\mathbf{k}) = \int \epsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) d^3 r$ 是 $\epsilon_{ij}^0(\mathbf{r})$ 的傅里叶变换, 而 $\tilde{\sigma}_{ij}^0(\mathbf{k}) = C_{ijkl}^0 \tilde{\epsilon}_{kl}^0(\mathbf{k})$; $\Omega_{jk}^{-1}(\mathbf{e}) = C_{ijkl}^0 e_i e_j$ 是格林函数, 符号 * 表示共轭复数.

系统的外载势能为

$$E^{\text{ext}} = -\sigma_{ij}^{\text{appl}} \int \epsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) dx dy dz - \frac{V}{2} (C_{ijkl}^0)^{-1} \sigma_{ij}^{\text{appl}} \sigma_{kl}^{\text{appl}} \quad (7)$$

式中, V 是体系的体积.

孔洞/夹杂相内的等效本征应变也可以用 Ginzburg-Landau 动力学方程求解:

$$\frac{\partial \epsilon_{ij}^0(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -L_{ijkl} \frac{\delta E^{\text{equiv}}}{\delta \epsilon_{kl}^0(\mathbf{r}, t)} \quad (8)$$

式中,

$$\begin{aligned} E^{\text{equiv}} = & -\frac{1}{2} \int_V C_{ijkl}^0 [\epsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) - \epsilon_{ij}^{\text{dis}}(\mathbf{r})] \cdot \\ & [\epsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) - \epsilon_{kl}^{\text{dis}}(\mathbf{r})] d^3 r + \\ & \frac{1}{2} \int_V C_{ijkl}^0 \epsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \epsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) d^3 r - \\ & \bar{\epsilon}_{ij} \int_V C_{ijkl}^0 \epsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) d^3 r + \frac{V}{2} C_{ijkl}^0 \bar{\epsilon}_{ij} \bar{\epsilon}_{kl} - \\ & \frac{1}{2} \int_{|\mathbf{k}| \neq 0} n_i \tilde{\sigma}_{ij}^0(\mathbf{k}) \Omega_{jk}(\mathbf{n}) \tilde{\sigma}_{kl}^0(\mathbf{k})^* n_l \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \quad (9) \end{aligned}$$

利用此方法, 可以通过求解方程(1)和(8)来模拟位错穿越孔洞或夹杂相的动力学过程. 在求解方程(1)的每一个时间步, 我们都先让方程(8)演化到

表 1 模拟中采用的面心立方晶体材料参数^[25]

Tab. 1 FCC crystal material parameters used in the simulations^[25]

	C_{44}^0/GPa	b/nm	$\gamma_{sl}/(\text{mJ} \cdot \text{m}^{-2})$	$\gamma_{usf}/(\text{mJ} \cdot \text{m}^{-2})$	$\gamma_{sl}/(C_{44}^0 b)$	$\gamma_{usf}/(C_{44}^0 b)$
Al	26.5	0.286	141.8	172.3	0.020	0.025
Cu	54.5	0.257	38.5	163.7	0.003	0.012

2 模拟结果分析与讨论

基于上一节建立的相场模型, 我们分别模拟了高层错能面心立方晶体铝和低层错能面心立方晶体铜中扩展位错穿越球形孔洞和夹杂相的动力学过程, 并分析了晶体层错能对位错与孔洞/夹杂相相互作用机制的影响规律, 对比讨论了位错与不同类型夹杂相的相互作用机制.

2.1 层错能对刃型位错穿越孔洞过程的影响

首先我们模拟了高层错能面心立方晶体铝中的界面刃型位错穿越球形孔洞的过程. 选取孔洞半径为 $r = 15l$, 剪切应力 $\tau_{yz} = 0.030\mu$. 运动过程中表征位错的序参量 η 在滑移面上的分布如图 2 所示, 红色表示滑移区, 蓝色表示未滑移区, 绿色表示层错. 由于铝的层错能较高, 位错分解得到的层错宽度很小, 两个不全位错之间距离很近. 我们选取的演化步长分别为 $t^* = 1\ 000, 3\ 000, 5\ 000, 7\ 000, 9\ 000, 11\ 000$. 从演化过程可以看出, 位错穿越孔洞过程存在几个典型的阶段: 首先是位错在剪切应力的作用下逐渐向孔洞滑移(图 2(a)); 当滑移到孔洞时, 靠近孔洞的位错段受到吸引发生弯曲, 而远离孔洞的位错段不受孔洞的影响(图 2(b)); 随着演化时间继

续增加, 位错逐渐绕过孔洞向前滑移(图 2(c)); 当位错即将穿越孔洞时, 孔洞会拖拽靠近孔洞的位错段(图 2(d)); 当位错离开孔洞一段距离时, 位错受孔洞周围应力场的影响仍然保持弯曲状态(图 2(e)); 最后, 当位错继续向前滑移时, 孔洞应力场对位错的影响逐渐变小(图 2(f)). 以上模拟的位错整个穿越过程与前人分子动力学模拟基本一致^[14], 证明了我们建立的相场模型的合理性.

$$\left. \begin{aligned} t^* = LC_{44}^0 t, C_{ijkl}^* &= \frac{C_{ijkl}^0}{C_{44}^0}, \\ \nabla^* &= \nabla l, \sigma_{ij}^* = \frac{\sigma_{ij}}{C_{44}^0} \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

分别用单个网格计算长度 l 和剪切模量 C_{44}^0 进行归一化处理, 特征时间 $t_0 = 1/LC_{44}^0$, 将方程(10)代入方程(1)中得

$$\frac{\partial \eta}{\partial t^*} = -L^* \left(\frac{\partial(f)^*}{\partial \eta} - \sigma_{ij}^* \frac{\partial \epsilon_{ij}^0}{\partial \eta} \right) \quad (11)$$

我们采用半隐式谱方法^[33]求解方程(11), 时间步长设置为 0.05, 涉及的无量纲参数取值分别为 $L^* = 1, C_{44}^* = 1, C_{11}^* = 3.5, C_{12}^* = 1.5$, 采用的一些材料参数如表 1 所示. 通过迭代即得到位错与夹杂相互作用的动力学过程.

进一步, 我们改变层错能参数模拟了低层错能面心立方晶体铜中界面刃型位错穿越球形孔洞的过程. 选取孔洞半径为 $r = 15l$, 剪切应力 $\tau_{yz} = 0.020\mu$. 图 3 展示了位错穿越孔洞过程中表征位错的序参量 η 在滑移面上的分布. 由于铜的层错能较低, 位错分解得到的层错宽度较大, 两个不全位错之间距离较远. 我们选取的演化步长分别为 $t^* = 500, 1\ 000, 2\ 000, 3\ 000, 4\ 000, 5\ 000$. 从演化过程可以看出, 位错穿越孔洞过程与高层错能晶体存在差异: 首先, 界面刃型位错在剪切应力作用下发生分解, 产生领先不全位错和滞后不全位错以及两个不全位错之间的层错(图 3(a)); 然后, 领先不全位错和滞后不全位错同时向孔洞滑移, 靠近孔洞的领先不全位错受到吸引, 远离孔洞的滞后不全位错基本不发生变

化,孔洞处层错变宽(图 3(b));随着演化时间的增加,扩展位错逐渐绕过孔洞向前滑移(图 3(c));当两个不全位错穿过孔洞的球心继续向前滑移时,靠近孔洞的层错收缩变窄(图 3(d));随后,领先不全

位错和滞后不全位错开始远离孔洞,滞后不全位错受到吸引,孔洞附近层错变宽(图 3(e));最后,层错宽度逐渐恢复,两个不全位错包裹着层错继续向前滑移(图 3(f)).

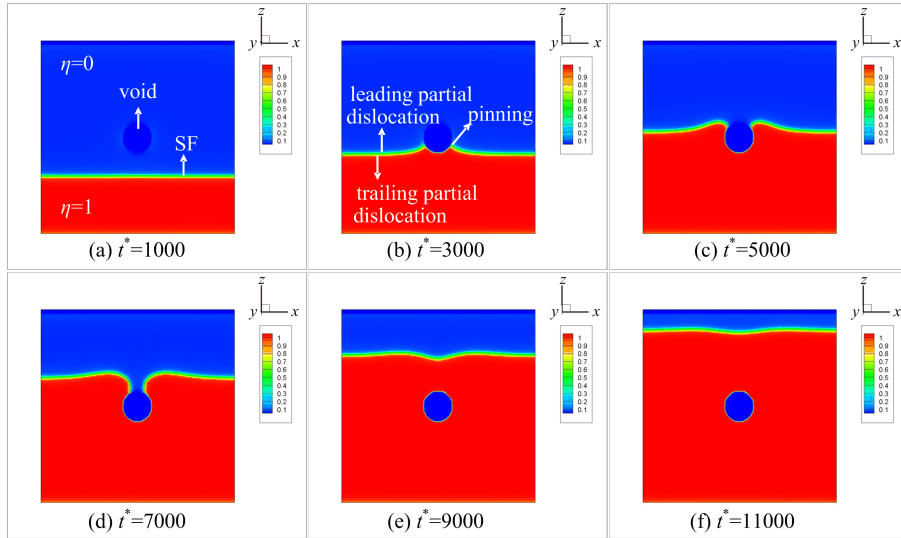


图 2 高层错能面心立方晶体铝中刃型位错穿越孔洞的过程

Fig. 2 The process of edge dislocations passing through the voids in the FCC crystal Al with high stacking fault energy

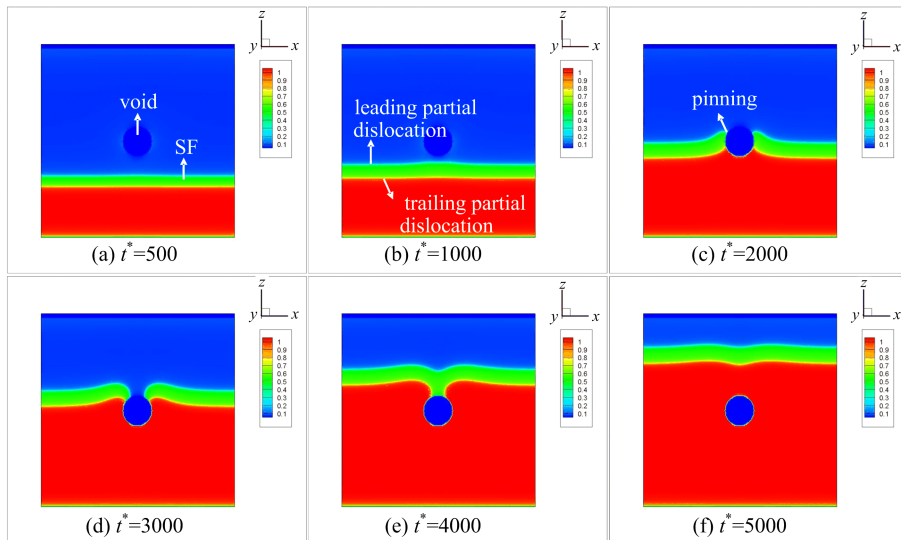


图 3 低层错能面心立方晶体铜中刃型位错穿越孔洞的过程

Fig. 3 The process of edge dislocations passing through the voids in the FCC crystal Cu with low stacking fault energy

通过对比分析上述高层错能面心立方晶体铝和低层错能面心立方晶体铜中扩展位错穿越孔洞的动力学过程,发现,层错能比较小的情况下扩展位错接近孔洞时会发生层错收缩,而绕过孔洞时会出现领先不全位错先穿越、滞后不全位错后穿越并伴随局部层错展宽的现象.由此,我们认为层错能是影响扩展位错穿越孔洞动力学过程的重要参数.

2.2 层错能对刃型位错穿越夹杂过程的影响

进一步,为了探讨位错穿越孔洞与穿越夹杂相

作用机制的异同,我们模拟了铝和铜中界面刃型位错与夹杂相的相互作用过程.

首先是在高层错能晶体铝中选取夹杂相半径为 $r = 15l$,剪切应力 $\tau_{yz} = 0.030\mu$.演化过程中表征位错的序参量 η 在滑移面上的分布如图 4 所示,我们选取的演化步长分别为 $t^* = 1\ 000, 3\ 000, 5\ 000, 7\ 000, 9\ 000, 11\ 000$.从演化过程可以看出,位错宽度比较小,位错与夹杂相的作用分为几个阶段:首先,位错在剪切应力作用下向夹杂相滑移(图 4(a)和

4(b)); 然后, 靠近夹杂相的位错段滑移受到阻碍, 而远离夹杂相的位错继续向前滑移(图 4(c)~4(e)); 当位错绕过夹杂相时, 位错继续向前滑移, 两边的位错

重新融合, 同时夹杂相处会产生不全位错环(图 4(f)). 模拟结果与文献[22]中位错环与夹杂相相互作用机制相同, 验证了本工作中所用模型的正确性.

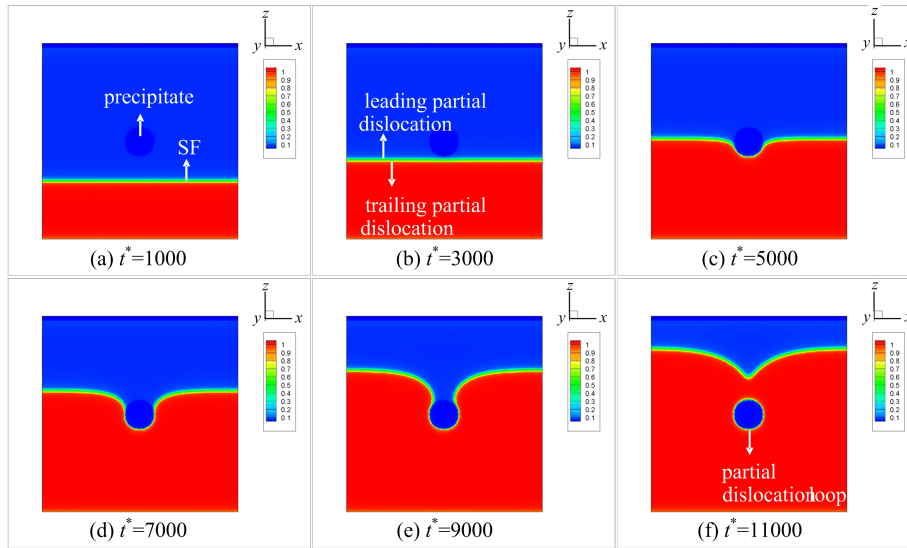


图 4 高层错能面心立方晶体铝中刃型位错穿越夹杂相的过程

Fig. 4 The process of edge dislocations passing through the inclusions in the FCC crystal Al with high stacking fault energy

进一步, 我们改变层错能参数, 模拟了铜中位错穿越夹杂相的过程, 选取夹杂相半径为 $r = 15l$, 剪切应力 $\tau_{yz} = 0.020\mu$, 表征位错的序参量 η 在滑移面上的分布如图 5 所示, 我们选取的演化步长分别为 $t^* = 500, 1000, 2000, 3000, 4000, 5000, 6000, 7000$. 从演化过程可以看出: 首先全位错在剪切应力作用下发生分解, 领先不全位错和滞后不全位错

一起向前滑移(图 5(a)和 5(b)); 领先不全位错先滑移到夹杂相并绕行(图 5(c)); 接着滞后不全位错滑移到夹杂相并绕行, 靠近夹杂相的层错宽度变小(图 5(d)和 5(e)); 领先不全位错绕过夹杂相并逐渐恢复原始状态, 靠近夹杂相的层错宽度变大(图 5(f)和 5(g)); 滞后不全位错继续向前滑移并逐渐恢复原始状态, 同时在夹杂相处产生不全位错环(图 5(h)).

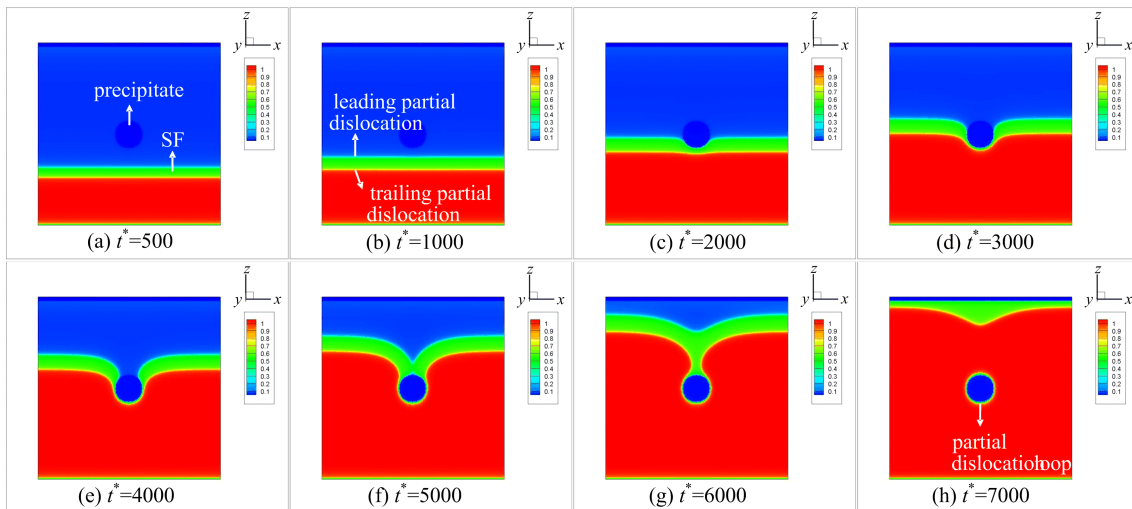


图 5 低层错能面心立方晶体铜中刃型位错穿越夹杂相的过程

Fig. 5 The process of edge dislocations passing through the inclusions in the FCC crystal Cu with low stacking fault energy

综上所述, 通过对比分析高层错能面心立方晶体铝和低层错能面心立方晶体铜中扩展位错穿越孔洞(节 2.1)及夹杂相(节 2.2)的动力学过程, 我们发现

位错接近孔洞时, 位错先被吸引到孔洞边缘发生弯曲而后被打扎, 最后脱离孔洞; 而当位错接近夹杂相时, 位错滑移受阻绕过夹杂相并产生位错环.

2.3 夹杂类型对刃型位错穿越过程的影响

基于前两节的计算结果,我们模拟了孔洞和夹杂相同时存在时高层错能晶体铝和低层错能晶体铜中刃型位错穿越孔洞和夹杂相的动力学过程,孔洞和夹杂相尺寸相同,取值为 $r = 15l$,两者在滑移面上的中心线与位错线平行。

图 6 模拟了铝中位错同时穿越孔洞和夹杂相的过程,图中夹杂相在左侧,孔洞在右侧,剪切应力 τ_{yz}

$= 0.030\mu$. 表征位错的序参量 η 在滑移面上的分布如图 6 所示,我们选取的演化步长分别为 $t^* = 1\ 000, 3\ 000, 5\ 000, 7\ 000, 9\ 000, 11\ 000$. 可以很明显的发现位错滑移接近孔洞过程中会受到孔洞的吸引,远离孔洞时会受到孔洞的拖拽;而位错接近夹杂相过程中,位错移动受到夹杂相阻碍,会出现位错绕过夹杂相滑移的现象。

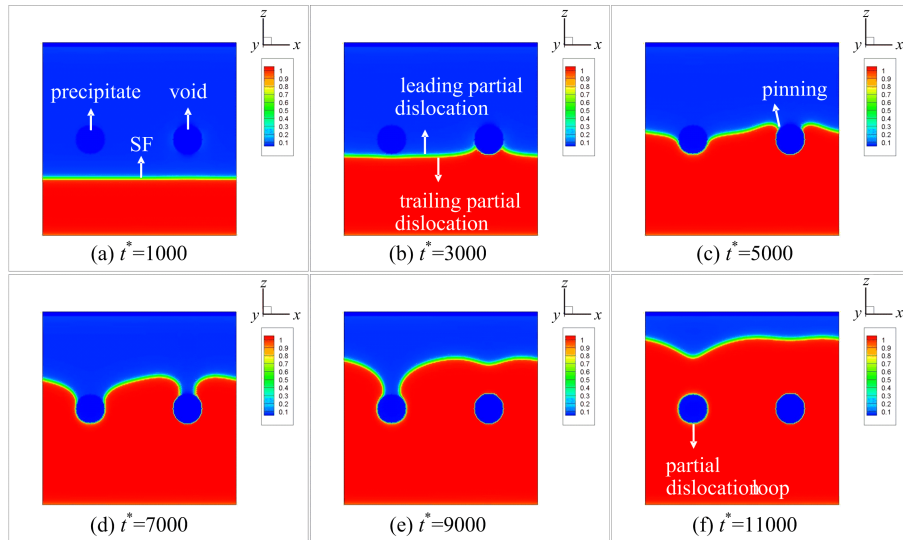


图 6 铝中刃型位错同时穿越孔洞和夹杂相的过程

Fig. 6 The process of edge dislocations passing through the voids and inclusions simultaneously in Al

接着,通过改变层错能参数模拟了铜中位错同时穿越孔洞和夹杂相(图中夹杂相在左侧,孔洞在右侧)的过程. 剪切应力 $\tau_{yz} = 0.020\mu$, 表征位错的序参量 η 在滑移面上的分布如图 7 所示,我们选取的演化步长分别为 $t^* = 500, 1\ 000, 2\ 000, 3\ 000, 4\ 000, 5\ 000, 6\ 000, 7\ 000$. 通过对比可以发现,位错

滑移接近孔洞时两个不全位错先后受到孔洞的吸引和拖拽,出现层错先变宽后变窄、再展宽、最后恢复的过程;而位错接近夹杂相时位错移动受到阻碍,两个不全位错先后绕过夹杂相滑移,出现层错先变窄后变宽、最后恢复的过程,且会在夹杂相处生成不全位错环。

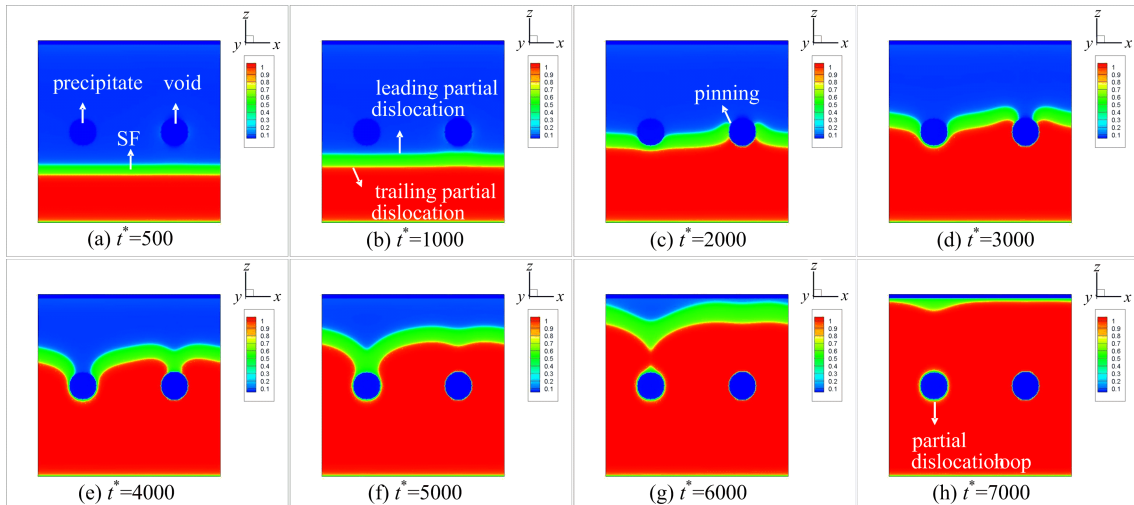


图 7 铜中刃型位错同时穿越孔洞和夹杂相的过程

Fig. 7 The process of edge dislocations passing through the voids and inclusions simultaneously in Cu

3 结论

本文中我们发展了位错与不同类型夹杂缺陷之间相互作用的相场模型,既能够在连续尺度上描述位错的长程弹性应变场,又能够兼顾短程的位错核结构反应,同时还能够考虑任意外加应力场的作用.我们分析了层错能和夹杂相类型对位错与夹杂相相互作用机制的影响规律,主要得到以下结论:

(I)结合相场微弹性理论和派纳模型建立的位错相场模型能够有效计算位错与夹杂相的长程弹性相互作用,同时可以描述扩展位错结构以及位错穿越不同夹杂相的动力学过程.

(II)层错能较大时,层错宽度较小,孔洞应力场导致位错穿越时产生弯曲;层错能比较小的情况下,层错宽度较大,扩展位错接近孔洞/夹杂相时会发生层错收窄,而绕过孔洞/夹杂相时会出现领先不全位错先穿越、滞后不全位错后穿越并伴随局部层错展宽的现象.

(III)夹杂类型对刃型位错穿越过程会产生影响:位错接近孔洞时,位错先被吸引到孔洞边缘而后被钉扎最后脱离孔洞;而当位错接近夹杂相时,位错滑移受到夹杂阻碍后绕过夹杂相并产生位错环.

综上,位错相场模拟的数值模拟结果显示,位错相场方法可以在更长的时间尺度下很好地揭示了层错能参数和夹杂类型对扩展位错滑移过程的影响规律,为深入理解长时辐照缺陷演化对辐照材料力学行为的影响提供了有效手段.

除此之外,分子动力学模拟能够获得晶体材料位错结构原子层次的信息,但是此方法受时间和空间尺度的限制,而且其高应变率条件会影响位错运动和界面演化在低应变率下的动力学特征;位错动力学在更大时空尺度考虑大规模位错群体运动有显著优势,但位错线假设难以自洽考虑涉及复杂位错核结构变化的位错反应;本文中采用的位错相场方法,能够描述晶体材料中包含位错核结构变化的位错群体在任意外力场下的运动过程,但只部分考虑了原子层次的信息而且空间尺度小于位错动力学能模拟的尺度.因此在具体分析中,我们今后可以充分结合分子动力学、位错动力学、位错相场方法的优势,建立多尺度模拟分析,从不同时间和空间尺度深入探讨金属材料辐照条件下的缺陷演化过程和变形机制.

参考文献(References)

- [1] 韩恩厚. 核电站关键材料在微纳米尺度上的环境损伤行为研究:进展与趋势[J]. 金属学报, 2011, 47(7): 769-776.
HAN Enhou. Research trends on micro and nano-scale materials degradation in nuclear power plant[J]. Acta Metallurgica Sinica, 2011, 47(7): 769-776.
- [2] 肖厦子, 宋定坤, 楚海建, 等. 金属材料力学性能的辐照硬化效应[J]. 力学进展, 2015, 45(1): 141-178.
XIAO Xiazi, SONG Dingkun, CHU Haijian, et al. Irradiation hardening for metallic materials [J]. Advances in Mechanics, 2015, 45(1): 141-178.
- [3] DUNDURS J, MURA T. Interaction between an edge dislocation and a circular inclusion[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1964, 12(3): 177-189.
- [4] KEER L M. Interaction between an edge dislocation and a rigid elliptical inclusion[J]. Journal of Applied Mechanics, 1986, 53(2): 383.
- [5] SROLOVITZ D J, PETKOVIC-LUTON R A, LUTON M J. Edge dislocation-circular inclusion interactions at elevated temperatures [J]. Acta Metallurgica, 1983, 31(12): 2151-2159.
- [6] MURA T. Micromechanics of Defects in Solids[M]. New York: Springer Science & Business Media, 2013.
- [7] FANG Q H, LIU Y W. Size-dependent interaction between an edge dislocation and a nanoscale inhomogeneity with interface effects [J]. Acta Materialia, 2006, 54(16): 4213-4220.
- [8] WANG X, PAN E. Interaction between an edge dislocation and a circular inclusion with interface slip and diffusion [J]. Acta Materialia, 2011, 59(2): 797-804.
- [9] DUDAREV S L, SUTTON A P. Elastic interactions between nano-scale defects in irradiated materials[J]. Acta Materialia, 2017, 125: 425-430.
- [10] PROVILLE L, BAKO B. Dislocation depinning from ordered nanophases in a model fcc crystal: From cutting mechanism to Orowan looping [J]. Acta Materialia, 2010, 58(17): 5565-5571.
- [11] XU S, XIONG L, CHEN Y, et al. Edge dislocations bowing out from a row of collinear obstacles in Al[J]. Scripta Materialia, 2016, 123: 135-139.
- [12] GROH S. Transformation of shear loop into prismatic loops during bypass of an array of impenetrable particles by edge dislocations[J]. Materials Science and Engineering: A, 2014, 618: 29-36.
- [13] DUTTA A, BHATTACHARYA M, GAYATHRI N, et al. The mechanism of climb in dislocation-nanovoid

- interaction [J]. *Acta Materialia*, 2012, 60 (9): 3789-3798.
- [14] ASARI K, HETLAND O S, FUJITA S, et al. The effect of stacking fault energy on interactions between an edge dislocation and a spherical void by molecular dynamics simulations [J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2013, 442(1-3): 360-364.
- [15] OKITA T, ASARI K, FUJITA S, et al. Effect of the stacking fault energy on interactions between an edge dislocation and a spherical void in fcc metals at various spatial geometries[J]. *Fusion Science and Technology*, 2014, 66(1): 289-294.
- [16] DOIHARA K, OKITA T, ITAKURA M, et al. Atomic simulations to evaluate effects of stacking fault energy on interactions between edge dislocation and spherical void in face-centred cubic metals [J]. *Philosophical Magazine*, 2018, 98(22): 2061-2076.
- [17] ZHU B, HUANG M, LI Z. Atomic level simulations of interaction between edge dislocations and irradiation induced ellipsoidal voids in alpha-iron [J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 2017, 397: 51-61.
- [18] DOS REIS M L, PROVILLE L, SAUZAY M. Modeling the climb-assisted glide of edge dislocations through a random distribution of nano-sized vacancy clusters [J]. *Physical Review Materials*, 2018, 2 (9): 093604.
- [19] DÉRÈS J, PROVILLE L, MARINICA M C. Dislocation depinning from nano-sized irradiation defects in a bcc iron model[J]. *Acta Materialia*, 2015, 99: 99-105.
- [20] HUANG Minsheng, ZHU Yaxin, LI Zhenhuan. Dislocation dissociation strongly influences on Frank-Read source nucleation and microplasticity of materials with low stacking fault energy [J]. *Chinese Physics Letters*, 2014, 31(4): 046102.
- [21] KEYHANI A, ROUMINA R. Dislocation-precipitate interaction map[J]. *Computational Materials Science*, 2018, 141: 153-161.
- [22] WANG Y U, JIN Y M, CUITINO A M, et al. Nanoscale phase field microelasticity theory of dislocations: Model and 3D simulations [J]. *Acta Materialia*, 2001, 49(10): 1847-1857.
- [23] WANG Y, LI J. Phase field modeling of defects and deformation [J]. *Acta Materialia*, 2010, 58 (4): 1212-1235.
- [24] HUNTER A, BEYERLEIN I J, GERMANN T C, et al. Influence of the stacking fault energy surface on partial dislocations in fcc metals with a three-dimensional phase field dislocations dynamics model [J]. *Physical Review B*, 2011, 84(14): 144108.
- [25] HUNTER A, ZHANG R F, BEYERLEIN I J, et al. Dependence of equilibrium stacking fault width in fcc metals on the γ -surface[J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2013, 21 (2): 025015.
- [26] SHEN C, WANG Y. Phase field model of dislocation networks [J]. *Acta Materialia*, 2003, 51 (9): 2595-2610.
- [27] SHEN C, WANG Y. Incorporation of γ -surface to phase field model of dislocations: Simulating dislocation dissociation in fcc crystals [J]. *Acta Materialia*, 2004, 52(3): 683-691.
- [28] ZHENG S, ZHENG D, NI Y, et al. Improved phase field model of dislocation intersections [J]. *npj Computational Materials*, 2018, 4(1): 20.
- [29] ZHENG S L, NI Y, HE L H. Alternative transmission mode and long stacking fault formation during a dissociated screw dislocation across a coherent sliding interface[J]. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2015, 48(39): 395301.
- [30] ZHENG S, NI Y, HE L. Phase field modeling of a glide dislocation transmission across a coherent sliding interface[J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2015, 23(3): 035002.
- [31] LIU H, GAO Y, QI L, et al. Phase-field simulation of Orowan strengthening by coherent precipitate plates in an aluminum alloy[J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2015, 46(7): 3287-3301.
- [32] WANG Y U, JIN Y M, KHACHATURYAN A G. Phase field microelasticity theory and modeling of elastically and structurally inhomogeneous solid [J]. *Journal of Applied Physics*, 2002, 92(3): 1351-1360.
- [33] CHEN L Q, SHEN J. Applications of semi-implicit Fourier-spectral method to phase field equations [J]. *Computer Physics Communications*, 1998, 108(2-3): 147-158.