

α -Ti 中 a 型位错的运动及相互作用的分子动力学模拟

王 皞, 徐东生, 杨 锐

(中国科学院 金属研究所, 沈阳 110016)

摘 要: 采用分子动力学模拟研究 α -Ti 中 a 型刃位错和螺位错的运动特点及其相互作用。对于独立的刃位错和螺位错, 发现刃位错滑移时位错芯形态保持不变, 而螺位错芯存在两种不同的分解方式: 三维分解和基面分解, 并导致不同的滑移特征; 三维分解的螺位错沿基面滑移时需转变为基面分解, 而基面分解的螺位错沿柱面滑移时需转变为三维分解状态, 从而导致其开动困难。刃位错与螺位错之间存在多种不同形式的相互作用, 其位错反应可形成其他形式复杂的缺陷。

关键词: α -Ti; 位错; 分子动力学; 位错反应

中图分类号: TF 804.3

文献标志码: A

Molecular dynamics simulations of glide and interaction of a-type dislocations in α -titanium

WANG Hao, XU Dong-sheng, YANG Rui

(Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110006, China)

Abstract: Molecular dynamics simulations were performed for α -titanium to investigate the gliding behavior and interaction of a-type edge and screw dislocations. For isolated edge and screw dislocations, the former are found to glide maintaining their characters, whereas for the latter there exist two distinct dissociation patterns, i.e. 3-dimension dissociation and basal-plane dissociation, resulting in distinct gliding behaviors. The 3-dimension dissociated dislocation needs to transform into basal-plane dissociation, in order to initialize gliding on the basal plane, while the basal-plane dissociated dislocation has to transform into 3-dimension dissociation to glide on the prism plane, both of which produce further resistance to the dislocation glide. There are different kinds of interaction between the edge and screw dislocations, which generate complex defects other than dislocations.

Key words: α -titanium; dislocation; molecular dynamics; dislocation reaction

α 相在钛合金中具有重要作用, 其位错行为对合金高温性能, 如蠕变、疲劳和断裂等有密切影响。 α -Ti 具有密排六方结构, 按柏氏矢量可将其位错滑移方式分为: 1) 柱面、基面和一阶锥面上 a 类滑移, 柏氏矢量为 $a/3\langle 11\bar{2}0 \rangle$; 2) 一、二阶锥面上 c+a 类滑移, 柏氏矢量为 $a/3\langle 11\bar{2}3 \rangle$ 。变形过程中常以 a 类位错的柱面滑移为主, 而随着温度、合金元素含量以及缺陷浓度的升高, 可出现基面、锥面滑移乃至形变孪晶。一般认为, 刃位错容易开动, 而螺位错的滑移对 α -Ti 的变

形起主要控制作用^[1-5]。模拟结果表明, 螺位错芯的三维扩展导致其滑移阻力较大, 而刃位错的平面芯结构一般比较紧凑, 不会对滑移造成过多负面影响^[6-7]。这与透射电镜观测到的变形后样品中有大量螺位错残留相吻合^[4]。同时符合原位透射电镜的观测, 即在 α -Ti 的变形过程中, 螺位错的运动速度小于刃位错^[5]。近期研究表明, α -Ti 中不同位错的芯结构对其滑移行为有重要影响, 位错芯在滑移面及其以外方向的三维分解会改变其滑移阻力^[8], 从而影响其滑移行为。此外,

位错间相互作用对 α -Ti的位错结构有重要影响^[9],位错滑移行为的改变可能对其相互作用及产物产生影响,进而导致力学性能发生变化。

本研究在以往能量学和位错芯结构研究的基础上,采用分子动力学模拟,从微观角度研究 α -Ti基面和柱面位错开动和滑移的不同行为以及位错间的相互作用的原子过程。通过理想化的模型增强对 α -Ti位错行为的理解。

1 计算方法

为满足周期性边界条件,位错的构建采用位错偶的方式。对于刃位错,首先去掉相应原子层,而后进行弛豫,具体方法参见文献[10];对于螺位错,首先沿位错线选取适当大小的圆柱体,按弹性位移场移动其中原子(见图1),而后对晶胞进行分子动力学弛豫。

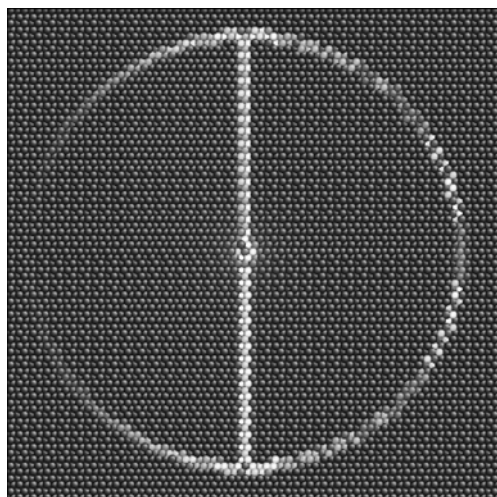


图1 按螺位错弹性位移场移动柱体内原子后的构型

Fig.1 Atomic configuration after elastic displacement field of screw dislocation

周期性边界条件的使用可能导致邻近镜像晶胞内的位错对模拟晶胞内位错的弹性作用,为确保该作用的影响足够小,且同一晶胞内的位错偶之间的作用与滑移阻力相比足够小,采用垂直于位错线方向足够大的模拟晶胞。在位错滑移的模拟中,采用的模拟晶胞含10万个原子,在位错相互作用的模拟中,晶胞含50万至100万个原子。

得到位错的稳定构型后,分别在不同温度下沿基面和柱面以恒应变速率(10^8 s^{-1})进行剪切。应变速率对临界剪切应力的影响较小,测试显示若进一步将应变速率降至 10^7 s^{-1} ,临界剪切应力下降幅度仅在1%左

右,因而其他形变计算的剪切变形速率均采用 10^8 s^{-1} 。

动力学计算中时间步长取0.5 fs,模拟晶胞体积控制采用Parrinello-Rahman方法^[11],温度控制采用恒温热浴。原子间作用采用嵌入原子势^[12],该势可较好地描述 α -Ti的基本性质如弹性常数、点缺陷和面缺陷能等。

2 计算结果和讨论

以下结果中,在刃位错部分显示了整个位错偶构型,其位错偶高度保证其中任一根位错的分解宽度受另一根位错的影响很小;而在螺位错部分,由于其位错偶构型较易湮灭,模拟中位错偶的高度较大,为清楚显示位错的滑移,只显示一根位错周围的构型。

2.1 刃位错的滑移

对所构建的刃位错偶进行弛豫发现,无论其滑移面在基面或柱面,位错都呈平面分解状态。由于基面层错能较低(60 mJ/m^2),其分解宽度较大,而在柱面上分解宽度很小(层错能为 361 mJ/m^2),其平衡构型分别如图2(a)和(b)所示。为方便显示,使用了高度较小的位错偶,实际计算中则采用一系列不同高度的位错偶。

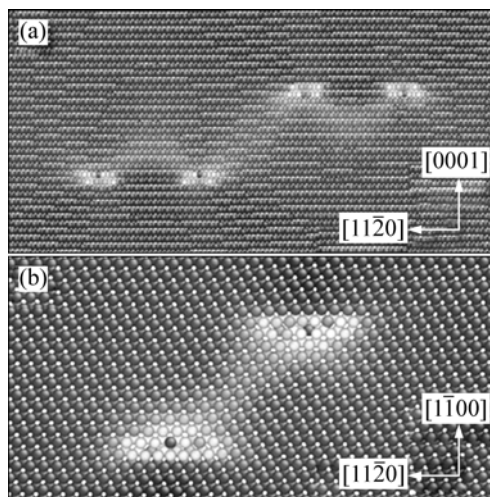


图2 滑移面为基面(a)和柱面(b)的刃位错偶平衡构型

Fig.2 Equilibrium configurations of edge dislocation dipoles glissile on basal (a) and prism (b) planes

对上位错偶构型施加剪切应力的发现,刃位错很容易开动,但随着位错偶高度的降低,其临界应力由0.02 GPa增至0.2 GPa。温度升高导致该临界应力

略有下降。在滑动过程中, 每根位错原有的平面分解状态始终不变(见图 3)。这符合以往的实验及模拟研究的结论, 表明刃位错在变形过程中保持自身特性, 其行为也保持一致。



图 3 刃位错偶中的两根位错在外加切应力作用下在基面开动

Fig.3 Glide of constitutive dislocations in dipole on basal plane under external shear stress with dissociation states having no perceivable change

2.2 螺位错的滑移

以往研究已经阐明, 根据位错芯形态不同, α -Ti 中螺位错可能有两种稳定构型, 分别为三维分解状态和基面分解状态, 其所形成的位错芯结构如图 4 所示, 其中(a), (b), (a')和(b')从不同角度显示了三维芯结构,

(c)和(d)所示分别为沿滑移面法线和位错线方向的投影。为了便于展示三重对称结构, (a), (b)和(a')采用了配位数来标示原子颜色。与刃位错比较可见, 螺位错的芯结构更加复杂, 这必然对其开动有着重要影响。在基面分解的情况下(见图 4(c)), 整个扩展位错仅能平行于基面滑移, 除非扩展位错束集, 否则无法沿其它面滑移。而在三维分解状态下, 单位螺位错分解为 3 个大小相等的偏位错, 并表现为三重对称的构型(见图 4(b))。因而只要条件合适, 其可以在基面、柱面乃至锥面之间发生交滑移, 进而对力学行为产生重要影响。值得强调的是, 以上螺位错三维芯结构的结果与 LEGRAND^[6]以及 BACON 和 VITEK^[7]采用对势、Finnis-Sinclair 势以及 Bond-Order 势函数所得的位错分解特点一致, 表明螺位错芯的这种复杂分解对所选用的势函数并不敏感, 为 α -Ti 的本征性质, 其对力学行为的影响具有一定普适性。

鉴于螺位错复杂的芯结构变化及其对力学性能的可能影响, 本节将着重探讨螺位错的滑移行为。采用前面描述的加载方式及变形条件模拟发现, 螺位错的滑移可分为如下两种情况: 1) 与刃位错相似, 基面分解的螺位错沿基面滑移时以及三维分解的螺位错沿柱面滑移时, 其位错形态不变; 2) 以上位错分别沿柱面和基面滑移时, 则需要首先分别转变为三维分解和基面分解, 而后开始滑移。以下着重介绍第二种情况下的螺位错滑移。

三维位错芯基面滑移的开动过程如图 5(a1~a5)所

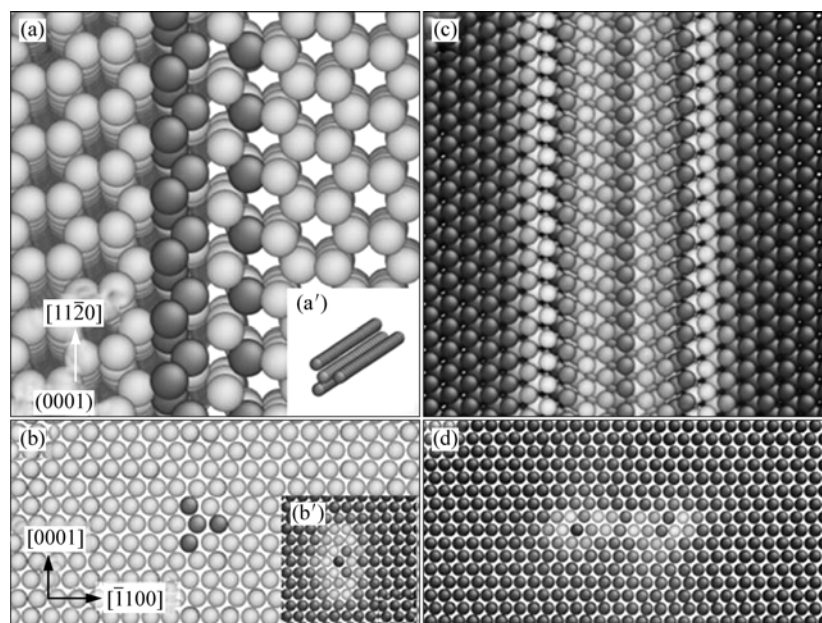


图 4 螺位错芯的三维分解(a, b)和基面分解(c, d)构型

Fig.4 Equilibrium dipolar configurations of screw dislocations with different core structures (Only atoms in vicinity of dipoles are displayed)

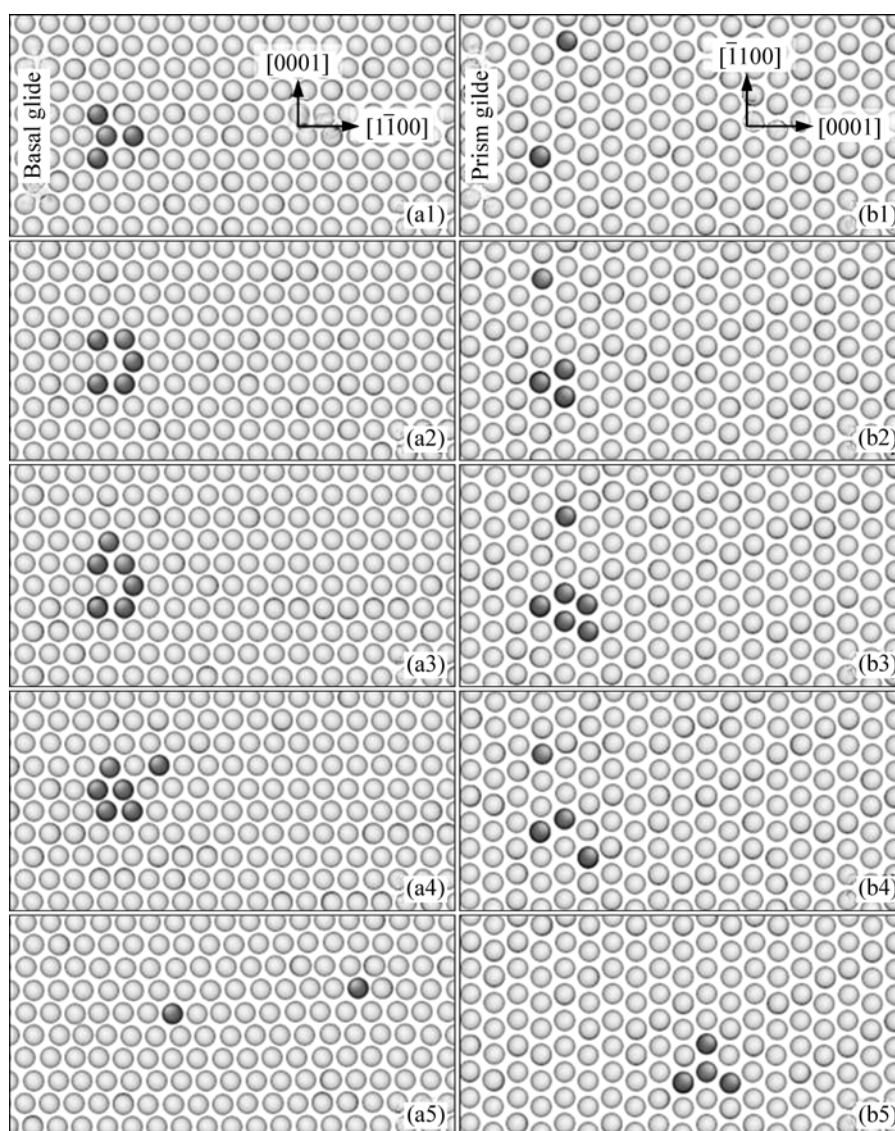


图 5 三维芯结构的螺位错沿基面滑移(a1~a5)和基面分解的螺位错沿柱面滑移(b1~b5)的开动过程

Fig.5 Activation of basal glide of screw dislocation with 3D core structure and of prism glide of screw dislocation initially dissociated on basal plane

示。为便于显示，图中略去正常配位数的原子，只显示位错附近的原子。其中(a1)为原始三维分解状态的螺位错芯，当切应力达到一定大小后，位错芯经过中间构型(a2)、(a3)和(a4)由三维分解状态转变为基面分解状态(a5)，随后其滑移行为与普通扩展位错的基面滑移一致。而基面分解的螺位错在外加切应力下沿柱面滑移时(见图 5(b1~b5))，需要首先将扩展位错束集(见图 5(b2~b4))，然后转变为三维位错芯(见图 5(b5))，而后保持形态沿柱面滑移。

以上由螺位错芯的特殊构型导致的位错开动的不同的构型转换也对相应的临界应力产生影响。原本三维分解的螺位错沿基面滑移时，其转变为基面分解的过程发生在相对较小的应力下，随后在更大的应力下

开动，在应力—应变曲线上体现为两个屈服点。而基面分解的螺位错沿柱面滑移时，其转变和开动连接在一起，即只有一个屈服点。由此可以归纳出，这两种螺位错开动必须同时满足：1) 位错芯由分解状态束集到滑移面；2) 沿滑移面的应力分量达到临界剪切应力。以上影响的一个直接结果是导致位错临界开动应力以及滑移阻力的增加，从而与实验中观测到的柱面直螺位错残留^[4]以及螺位错的运动速度小于刃位错^[5]相一致。结合以往六角^[7]和体心金属中位错分解的模拟研究结果^[13]，以及近期在 α -Zr 中的位错芯研究结果^[14]，螺位错芯不同形式的分解本质上不依赖于所使用的势函数，并且很可能也不敏感地依赖于具体材料，而只依赖于晶体结构。

2.3 位错反应

以柏氏矢量为 $1/3[11\bar{2}0]$ 的纯刃型位错和 $1/3[\bar{2}110]$ 的纯螺型位错为例,初步探讨位错间相互作用的产物。这两种位错都是 α -Ti 中常见的 a 类位错,其相互作用对变形行为有重要影响^[9],例如位错滑移受到晶粒取向限制而发生柱面滑移向基面滑移的转变。

图 6(a)所示为所构建的位错初始构型,为便于显示,略去了正常配位数的原子。其中两根位错的滑移面位于同一(0001)面,柏氏矢量间和位错线间夹角分别为 60° 和 30° 。2 根位错分解后形成 4 根偏位错 1—4,其柏氏矢量分别为 $1/3[01\bar{1}0]$, $1/3[10\bar{1}0]$, $1/3[\bar{1}010]$ 和 $1/3[\bar{1}100]$ 。将该构型在 300 K 下弛豫 200 ps,位错间发生反应,图 6(a)中右上角的两根柏氏矢量相反的偏位错湮灭,形成图 6(b)中的汇于一节点的 6 根偏位错以及

孤立的点缺陷。该节点具有一定的可动性,在弛豫过程中会发生运动形成如图 6(c)所示的构型。弛豫后的稳定构型如图 6(d)所示,此时孤立的点缺陷被图 6(c)中紧邻的位错吸收。将图 6(d)中虚线所围部分放大后显示于图 6(e),可见 6 根位错均为混合位错。

以上位错反应的产物虽具有一定的可动性,但所需应力及运动能力显然不如独立的位错。考虑到实际情况中往往涉及多个类似位错的相互反应,其相互作用及产物会更加复杂,其可动性会更低,从而阻碍 α -Ti 中位错滑移,尤其当刃位错需要由一个晶粒转向另一个晶粒滑移时,后者中的螺位错由于临界开动应力较大而不可动,其与刃位错发生反应形成复杂产物,并进一步阻碍后续位错的运动。此外,这种位错反应还导致原本可动的螺位错变得不可动,从而影响材料的塑性。

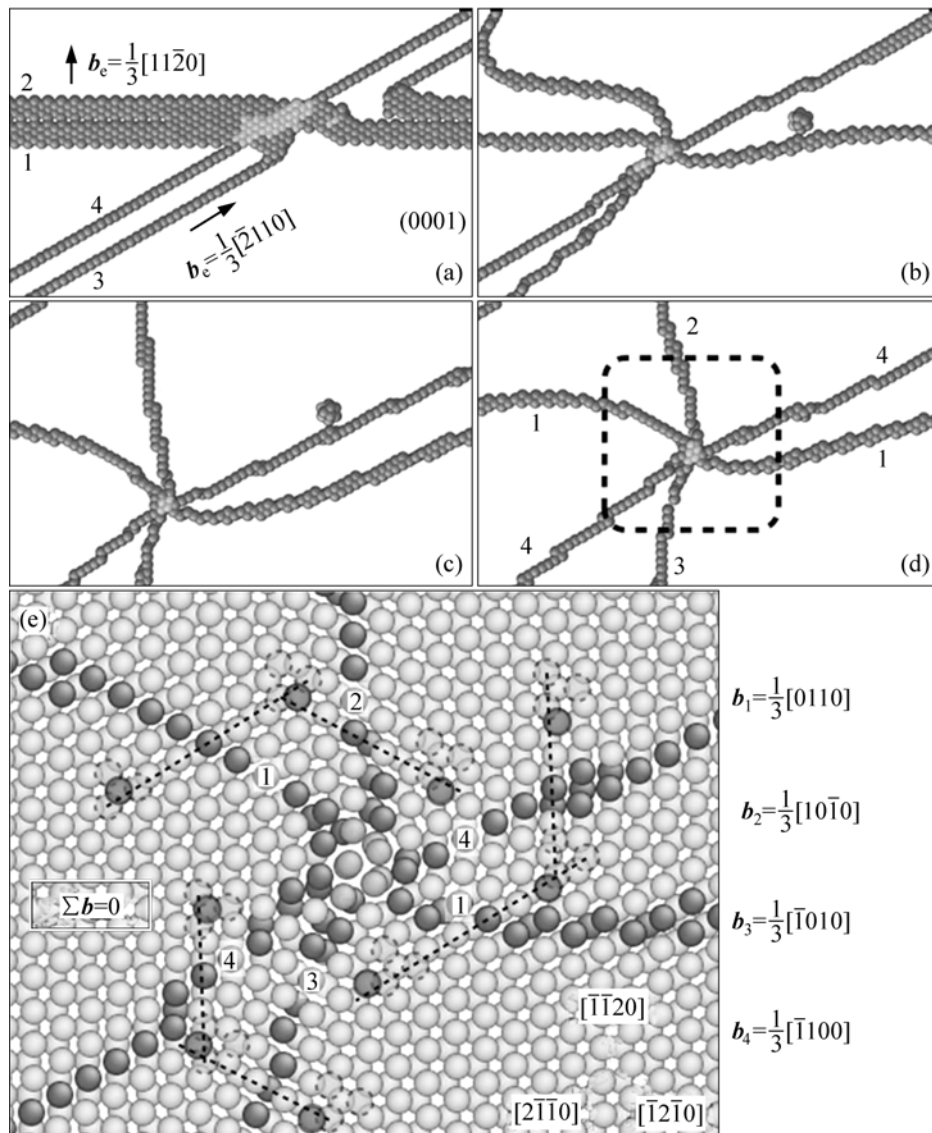


图 6 单位刃位错与单位螺位错的位错反应

Fig.6 Reaction between unit edge and screw dislocations

3 结论

1) α -Ti 中位错具有较为复杂的芯结构, 其中螺位错可能具有三维分解和平面分解两种不同的构型。

2) 位错的滑移行为由其芯结构决定。 α -Ti 中刃位错滑移时保持其形态, 而螺位错的不同分解方式导致不同的滑移特征, 三维分解的螺位错沿基面滑移时需要转变为基面分解, 而基面分解的螺位错沿柱面滑移时需要转变三维分解状态, 并进而导致其开动困难。

3) α -Ti 中刃位错与螺位错之间存在多种不同形式的相互作用, 其直接的位错反应可以形成形式复杂的缺陷, 如汇聚于一点的多根位错, 其产物不但对运动位错造成阻碍, 而且使原来的螺位错不可动, 从而影响材料的塑性。

REFERENCES

- [1] CONRAD H. Rate controlling mechanism during yielding and flow of alpha-titanium at temperatures below $0.4 T_m$ [J]. Acta Metallurgica, 1966, 14: 1631–1633.
- [2] CONRAD H. Effect of interstitial solutes on the strength and ductility of titanium[J]. Prog Mater Sci, 1981, 26: 123–404.
- [3] BIGET M P, SAADA G. Low-temperature plasticity of high-purity alpha-titanium single-crystals[J]. Philos Mag A, 1989, 59: 747–757.
- [4] NAKA S, LASALMONIE A, COSTA P, KUBIN L P. The low-temperature plastic-deformation of alpha-titanium and the core structure of a-type screw dislocations[J]. Philos Mag A, 1988, 57: 717–740.
- [5] FARENC S, CAILLARD D, COURET A. An in-situ study of prismatic glide in alpha-titanium at low-temperatures[J]. Acta Metall Mater, 1993, 41: 2701–2709.
- [6] LEGRAND B. Relation between the electronic-structure and ease of gliding in hexagonal close-packed metals[J]. Philos Mag B, 1984, 49: 171–184.
- [7] BACON D J, VITEK V. Atomic-scale modeling of dislocations and related properties in the hexagonal-close-packed metals[J]. Metall Mater Trans A, 2002, 33: 721–733.
- [8] 王 峰, 徐东生, 杨 锐. 分子动力学模拟 α 钛中的位错行为[J]. 稀有金属材料与工程, 2008, 37: 654–657.
WANG Hao, XU Dong-sheng, YANG Rui. Molecular dynamics simulation of dislocation behavior in α -titanium[J]. Rare Metal Mat Eng, 2008, 37: 654–657.
- [9] AGRAWAL S, SARGENT G, CONRAD H. Hexagonal dislocation networks in titanium[J]. Metallurgical and Materials Transactions B, 1974, 5: 2415–2422.
- [10] WANG H, XU D S, YANG R, VEYSSIÈRE P. The transformation of narrow dislocation dipoles in selected fcc metals and in γ -TiAl[J]. Acta Materialia, 2009, 57: 3725–3737.
- [11] PARRINELLO M, RAHMAN A. Polymorphic transitions in alkali-halides — A molecular-dynamics study[J]. Journal de Physique, 1981, 42: 511–515.
- [12] ZOPE R R, MISHIN Y. Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti-Al system[J]. Phys Rev B, 2003, 68: 024102.
- [13] DUESBERY M S, VITEK V. Plastic anisotropy in bcc transition metals[J]. Acta Materialia, 1998, 46: 1481–1492.
- [14] KHATER H A, BACON D J. Dislocation core structure and dynamics in two atomic models of α -zirconium[J]. Acta Materialia, 2010, 58: 2978–2987.

(编辑 袁赛前)