

单晶铜塑性变形的二维离散位错动力学模拟研究

王春晖 孙朝阳 郭祥如 魏云灿 蔡旺

Investigation of the plastic deformation of single crystal copper using a two-dimensional discrete dislocation dynamics model

WANG Chun-hui, SUN Chao-yang, GUO Xiang-ru, WEI Yun-can, CAI Wang

引用本文:

王春晖, 孙朝阳, 郭祥如, 魏云灿, 蔡旺. 单晶铜塑性变形的二维离散位错动力学模拟研究[J]. 工程科学学报, 2021, 43(10): 1365-1375. doi: 10.13374/j.issn2095-9389.2021.04.21.005

WANG Chun-hui, SUN Chao-yang, GUO Xiang-ru, WEI Yun-can, CAI Wang. Investigation of the plastic deformation of single crystal copper using a two-dimensional discrete dislocation dynamics model[J]. *Chinese Journal of Engineering*, 2021, 43(10): 1365–1375. doi: 10.13374/j.issn2095–9389.2021.04.21.005

在线阅读 View online: https://doi.org/10.13374/j.issn2095-9389.2021.04.21.005

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

Zr-Cu薄膜生长及力学性能的分子动力学模拟

Molecular dynamic simulations of the growth and mechanical properties of Zr—Cu films 工程科学学报. 2019, 41(4): 497 https://doi.org/10.13374/j.issn2095-9389.2019.04.010

高应变率下红砂岩"冻伤效应"

"Frostbite effect" of red sandstone under high strain rates 工程科学学报. 2019, 41(10): 1249 https://doi.org/10.13374/j.issn2095-9389.2019.01.14.002

SiC半导体不同晶面氧化机理及动力学的研究进展

Research progress on the oxidation mechanism and kinetics of a SiC semiconductor with different crystal surfaces 工程科学学报. 2021, 43(5): 594 https://doi.org/10.13374/j.issn2095-9389.2020.10.10.001

微波场下的钒渣氯化动力学

Kinetics of chlorination of vanadium slag by microwave heating 工程科学学报. 2020, 42(9): 1157 https://doi.org/10.13374/j.issn2095-9389.2019.09.20.003

外加强环式H型钢梁-方钢管角柱节点抗震性能

Seismic performance of H-shaped steel beam-to-square steel corner column connection with external strengthened ring 工程科学学报. 2018, 40(8): 1005 https://doi.org/10.13374/j.issn2095-9389.2018.08.015

基于深度循环神经网络的协作机器人动力学误差补偿

Error compensation of collaborative robot dynamics based on deep recurrent neural network 工程科学学报. 2021, 43(7): 995 https://doi.org/10.13374/j.issn2095-9389.2020.04.30.003 工程科学学报,第 43 卷,第 10 期: 1365-1375, 2021 年 10 月 Chinese Journal of Engineering, Vol. 43, No. 10: 1365-1375, October 2021 https://doi.org/10.13374/j.issn2095-9389.2021.04.21.005; http://cje.ustb.edu.cn

单晶铜塑性变形的二维离散位错动力学模拟研究

王春晖^{1,2)}, 孙朝阳^{1,2,3)}, 郭祥如⁴⁾, 魏云灿^{1,2)}, 蔡 旺^{1,2)}

 1)北京科技大学机械工程学院,北京100083 2)北京科技大学金属轻量化成形制造北京市重点实验室,北京100083 3)北京科技大学顺 德研究生院,佛山 528000 4)天津理工大学天津市先进机电系统设计与智能控制重点实验室,天津 300384
 ☑通信作者, E-mail: suncy@ustb.edu.cn

摘 要 针对亚微米尺度晶体元器件在加工和服役中出现的反常力学行为和动态变形等问题,基于离散位错动力学理论建 立了单晶铜塑性变形过程的二维离散位错动力学模型. 该模型考虑外加载荷、位错间相互力和自由表面镜像力对位错的作 用机制,引入了截断位错速度准则. 与微压缩实验对比验证了模型的正确性,并且能够描述力加载描述的位错雪崩现象. 应 用该模型分析了不同加载方式和应变率下位错演化及力学行为,结果表明:当外部约束为力加载和位移加载时,应力应变曲 线分别呈现出台阶状的应变突增和锯齿状的应力陡降,位错雪崩效应的内在机制则分别归结为位错速度的随机性和位错源 开动的间歇性;应变率在 10² ~ 4×10⁴ s⁻¹范围内,单晶铜屈服应力的应变率敏感性发生改变,位错演化特征由单滑移转变为多 滑移面激活的均匀变形,位错增殖逐渐代替位错源激活作为流动应力的主导机制. 关键词 单晶铜;离散位错动力学;加载方式;应变率;力学行为

分类号 TG142.71

Investigation of the plastic deformation of single crystal copper using a twodimensional discrete dislocation dynamics model

WANG Chun-hui^{1,2)}, SUN Chao-yang^{1,2,3)}, GUO Xiang-ru⁴, WEI Yun-can^{1,2)}, CAI Wang^{1,2)}

1) School of Mechanical Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China

2) Beijing Key Laboratory of Lightweight Metal Forming, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China

3) Shunde Graduate School, University of Science and Technology Beijing, Foshan 528000, China

4) Tianjin Key Laboratory for Advanced Mechatronic System Design and Intelligent Control, School of Mechanical Engineering, Tianjin University of Technology, Tianjin 300384, China

Corresponding author, E-mail: suncy@ustb.edu.cn

ABSTRACT Microelectromechanical systems (MEMS) that feature components with the same geometrical size as that of an individual grain have been widely used in a variety of industries, including electronics, machinery, energy, transportation, aerospace, and architecture. Owing to the widespread engineering application of MEMS and nanoelectromechanical system devices, including sensors and actuators, submicron scale crystal materials exhibit mechanical behaviors different from those of macroscale materials, such as size effect, intermittent plastic flow, and strain rate effect, that have become significant topics in mechanics and materials research in recent years. Since dislocations are the carriers of plastic deformation, understanding the dislocation mechanism of submicron crystalline materials is crucial for designing and predicting microdevice reliability. To improve the understanding of abnormal mechanical behavior and dynamic deformation of submicron scale crystal components in processing and application, a two-dimensional discrete dislocation dynamics model of single crystal copper for plastic deformation was established based on the discrete dislocation dynamics theory. The

收稿日期:2021-04-21

基金项目:国家自然科学基金委员会与英国皇家学会合作交流资助项目(51911530209);国家自然科学基金面上资助项目(52175285);国家自然科学基金NSAF联合资助项目(U1730121);北京科技大学顺德研究生院科技创新专项基金资助项目(BK19CE008)

effects of applied load, dislocation interactions, and image force by the free surface on dislocations were all considered in the numerical model, and the cutoff weighted dislocation velocity was also introduced. The model can be used to describe the "dislocation avalanche" effect under stress-controlled modes and interpret the dislocation evolution and mechanical behavior under different loading modes and strain rates, as demonstrated by microcompression experiments. When the external loading modes are force control and displacement control, the stress–strain curves show a step-like character under strain and a sharply serrated character under stress, respectively. The randomization of the dislocation velocity and intermittent activation of dislocation sources are the internal mechanisms of the dislocation avalanche effect. The strain rate sensitivity of the yield stress for single crystal copper changes in the strain rate range of 10^2 –4 × 10^4 s⁻¹. The evolution characteristics of the dislocations change from single slip plane to uniform deformations induced by multiple slip planes activation, and the dominant mechanism for the strain rate effect of yield stress is dislocation multiplication rather than dislocation source activation.

KEY WORDS single crystal copper; discrete dislocation dynamics; loading modes; strain rates; mechanical behavior

随着以传感器和激励器为代表的微机械微电 子元器件的广泛应用和发展,亚微米尺度晶体材料 表现出明显区别于宏观尺度材料的力学行为^[1-2], 如尺寸效应^[3-5]、时空不连续性^[6-7]以及应变率敏 感性^[8-9].为了评估并预测亚微米尺度晶体元器件 在加工和服役中的性能,需要搭建起反常力学响 应与微结构演化的桥梁,分析其在不同加载方式 和应变率下的力学响应和位错机制.

实验研究表明,单向压缩的亚微米尺度单晶 在不同加载方式下呈现显著的时空不连续性:在 力加载时,应力-应变曲线呈现台阶状;在位移加 载时,应力-应变曲线呈现锯齿状. 离散位错则以 类似"雪崩"的方式贡献塑性应变,在晶体表面形 成很多滑移带和滑移线^[10-11]. Papanikolaou 等^[12]和 Maaß等^[13] 通过实验发现了非常规的准周期性雪崩 式应变爆发. Csikor 等^[14] 通过三维位错动力学 (Three-dimensional discrete dislocation dynamics, 3D-DDD)模拟和相应变形行为的统计分析,确定 了位错雪崩过程中应变变化的分布,并建立了其 对微晶尺寸的依赖关系. 上述研究揭示了发生应 变突增或者应力陡降的内在原因,并基于模型和 理论表征其规律性,然而未分析加载方式对间歇 性行为的影响. Cui 等[15-16] 在 3D-DDD 模拟中通 过调整外部加载方式,发现单晶铜微柱的力学行 为从力控制下的应变爆发转变到位移控制下的准 周期振荡. 上述工作尚未分析不同加载方式下力 学特征转变的位错机理.

在类似碰撞和冲击的高应变率服役环境中, 亚微米单晶铜应变率相关的位错基动态变形机制 已成为重要的研究方向^[17-18]. Jennings 等^[19]通过实 验研究纳米单晶铜在不同应变率下的拉伸和压缩 行为,发现了流动应力的应变率敏感性随着晶体 尺寸的减小和应变率的上升出现转变,其原理被 认为是位错机制从单臂位错源增殖变化到表面形 核. Zheng 等^[20] 在传统二维离散位错动力学(Twodimensional discrete dislocation dynamics, 2D-DDD) 模型中引入热激活位错逃逸机制,分析了应力松 弛和蠕变过程中钛合金的应变率敏感性行为. 然 而,上述研究仅仅聚焦纳米尺度晶体和低应变率 下变形行为. 郭祥如等^[21] 基于 3D-DDD 分析单晶 镍压缩变形过程中流动应力和变形机制的应变率 效应,揭示了更高应变率下有效应力代替位错源 激活应力成为流动应力的主要部分这一机理. Agnihotri 与 Van der Giessen^[22] 的多晶铜拉伸变形 的工作也表达相同的观点,但是没有基于理论解 析的具体量化分析.

传统的连续介质力学理论缺乏材料的内禀长 度参数,无法描述亚微米尺度位错形核、运动、湮 灭等一系列演化反应^[23],为了简化计算模型,提高 处理晶体材料的计算效率,本文主要采用 2D-DDD 模型来研究单晶铜不同加载方式和应变率的 塑性流动问题.通过与微压缩的位移加载实验结 果对照,验证了模型的可行性.在此基础上,将加 载方式与位错演化联系起来,解释了不同加载方 式对应的特征应力-应变曲线,揭示了高应变率对 单晶铜位错演化和屈服应力的影响,确定了应变 率敏感性行为转变机制.

1 单晶铜二维离散位错动力学模型

1.1 二维离散位错动力学框架

离散位错动力学是以晶体材料弹性连续介质 中线缺陷--位错为研究对象,通过对滑移系中大量 位错的集群运动和相互反应的显式表达,描述塑 性变形特征的微尺度力学建模方法.2D-DDD模 型,如图1(a),忽略三维位错交割和螺位错交滑移 等交互作用机制,将三维位错线投影到二维平面



图1 位错的二维简化及其应力场. (a)位错线在二维平面的投影示意图; (b)水平方向和(c)倾斜 45°方向正刃型位错剪切应力场

Fig.1 Two dimensional simplification of and stress field of dislocation: (a) planar representation of the dislocation line on a 2D plane; stress field (σ_{xy}) around a positive edge dislocation in the (b) horizontal direction and (c) tilt direction with an angle of 45°

上,简化为平面模型中一个伏尔特拉(Volterra)奇 异点,通过关注刃型位错点的受力、运动和演化, 研究微尺度晶体塑性变形行为.

晶体中位错受到的应力来源主要是外部作用 和模拟区域内位错间的相互作用.根据施密特 (Schmid)定律,计算外部载荷在滑移系上对位错 的分解剪切应力^[24],位错间的相互作用是通过位 错弹性应力场起作用,2D-DDD中刃型位错在无 限大介质中的应力场公式如下^[25-26]:

$$\sigma_{xx} = -\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2+y^2)}{(x^2+y^2)^2}$$
(1)

$$\sigma_{yy} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$
(2)

$$\sigma_{xy} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$
(3)

其中, σ_{xx}, σ_{yy}, σ_{xy}分别是位错在 x 方向、y 方向的 正应力以及剪切应力, Pa; v 是泊松比, 量纲为一; (x, y) 是模拟区域任意点相对位错的位置, (m, m); G和 b 分别为晶体材料的剪切模量 (Pa) 和位 错的伯格斯(Burgers) 矢量的模, m. 由于位错间的 相互作用的计算基于水平且平行的两滑移面, 在 倾转滑移系下应力场的计算需要考虑坐标系 x-y 和滑移坐标系 x'-y'两个系统应力张量的变换, 具 体公式如下^[26]:

$$\boldsymbol{\sigma}' = \boldsymbol{R}^{(\alpha)\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{R}^{(\alpha)} \tag{4}$$

其中, σ为坐标系 x-y下的应力张量, σ'为滑移坐 标系 x'-y'下的应力张量, R^(α)为产生应力场的位错 所在滑移系 α 的坐标旋转矩阵:

$$\boldsymbol{R}^{(\alpha)} = \begin{bmatrix} \cos(\varphi^{\alpha}) & \sin(\varphi^{\alpha}) \\ -\sin(\varphi^{\alpha}) & \cos(\varphi^{\alpha}) \end{bmatrix}$$
(5)

其中, φ^{α} 是滑移系 α 中x'方向相对x方向的倾斜角度,(°);应力场旋转结果如图1(b)和图1(c)所示.

图中, n 代表位错环所在滑移面的单位法向, b 表示位错的 Burgers 矢量.

由于位错与边界以及位错之间强相互作用, 位错结构热力学不平衡态驱动位错沿滑移系运动 并重新分布,基于最小势能原理,位错运动的热力 学构型力,即位错皮奇-凯勒(Peach-Koehler)力为:

$$\boldsymbol{f}^{i} = \boldsymbol{n}^{i} \cdot \left[\boldsymbol{\sigma}^{\text{app}} + \sum_{j \neq i}^{N} \boldsymbol{\sigma}^{\prime j} \right] \cdot \boldsymbol{b}^{i} \qquad (6)$$

其中, \mathbf{n}^{i} 表示位错 i 所在滑移面单位法向, \mathbf{b}^{i} 表示 位错 i 的 Burgers 矢量, σ^{app} 表示外部作用应力张 量, 求和项 $\sum_{j\neq i}^{N} \sigma^{\prime j}$ 表示所有 N个位错 j 对位错 i 的 长程作用应力张量.

当施加在位错上的驱动力大于阻碍力时,位 错开始运动,主要包括滑移和攀移. 位错滑移是连 续弹性介质场中位错沿晶体特定滑移系运动的保 守运动,而位错攀移是在垂直滑移面通过吸收和 释放点缺陷实现位错扩散运动的非保守运动^[27]. 通常在非高温变形环境下,位错运动形式以滑移 为主. 在 Peach-Koehler 力作用下,考虑到位错运 动处于过阻尼状态,每个位错段的速度由作用在 其上的总力和黏滞阻尼系数决定,即位错*i*的滑移 速度表示为^[24,28]:

$$\mathbf{v}^i = \mathbf{f}^i / B \tag{7}$$

$$B = \frac{B_0}{1 - \bar{v}^2 / v_s^2}$$
(8)

其中, v^i 是位错 *i* 的滑移速度, m·s⁻¹; *B* 为位错滑移的黏性阻尼系数, N·s·m⁻¹; *f*^{*i*}为作用在位错 *i* 上的 Peach–Koehler 力. v是位错平均速度, m·s⁻¹; v_s 为剪 切波速, m·s⁻¹. 当位错运动速度较低时, 采用静态 黏性阻尼系数 B_0 , N·s·m⁻¹.

经历剧烈塑性变形后的金属晶体,其位错密 度可增加4~5个数量级,说明晶体在塑性变形过 程中必然发生着位错增殖.其中,弗兰克-瑞德 (Frank-Read)位错源形核是内部位错增殖的一种 主要方式.2D-DDD方法将位错源简化和近似成 滑移面上一点,当作用在点源上的分切应力τ大于 临界形核强度τ_{nuc}并保持临界发育时间t_{nuc}后,一 对带有异号 Burgers 矢量位错偶极子形核在位错 源点两侧,其分布极性与分切应力方向对应.为使 位错源开动,作用在位错源的分解切应力需克服 位错线弯曲时的线张力.根据奥罗万(Orowan)应 力判据^[21],位错源静态平衡破坏需要的临界切应 力为:

$$\tau_{\rm nuc} = 2\beta \frac{Gb}{l_0} \tag{9}$$

其中, β 为一个量化参数, 对 Frank-Read 源, $\beta \approx 1, l_0$ 为 位错源初始长度, m; 与晶体尺寸有关. l_0 满足一个 均值 l_0^{ave} 和标准差 Δl_0 的高斯分布, 以确保位错源 强度在一定范围内变动.

位错临界形核时间为[22,29]:

$$t_{\rm nuc} = \eta_1 \eta_2 \frac{l_0}{2\tau_{\rm nuc} b} \tag{10}$$

其中, η_1 是描述位错从半椭圆到完全位错环的增强因子, η_2 为与黏性阻尼系数B有关的常数,Pa·s.

一对偶极子的临界形核距离 L_{nuc} 由临界形核 应力确定^[25],从而确保当一对位错偶极子产生,作

用偶极子上外部分解切应力正好与偶极子之的间 互相吸引应力平衡:

$$L_{\rm nuc} = \frac{G}{2\pi(1-\nu)} \frac{b}{\tau_{\rm nuc}} \tag{11}$$

当同一滑移面中一对异号位错互相吸引并靠 近会发生湮灭,在 2D-DDD 模型中,设置当正负位 错相互距离小于临界距离 *L*_{anni},位错发生湮灭. *L*_{anni} 是材料相关参数, m;在计算中一般取 *L*_{anni}=6*b*^[30].

1.2 离散位错动力学模型的数值实现

本研究中离散位错动力学模型计算流程如 图 2 所示,采用前向欧拉积分算法以时间增量步 的方式进行.在每个增量步中,需要的计算主要 是:①确定当前位错的构型、应力和应变状态; ②根据位错所处应力状态计算位错运动 Peach-Koehler力;③根据式(7)~(11)的本构法则处理位 错运动、Frank-Read源形核、异号湮灭等短程位 错构型的变化.为了提高计算效率,节约计算成 本,根据应变率和计算总应变确定固定时间步增 量.同时,为了考虑实际情况位错不会超过前面位 错的特点,计算中需要对相邻位错判断,若当前时 间步内发生位错越过现象则需要对位错速度进行 修正.本文主程序基于 Matlab 平台编写,使用 C 语 言编写的 mex 子程序计算位错间相互作用.

小应变假设下的 2D-DDD 模型, 忽略了试样



图 2 2D-DDD 模型的模拟流程

Fig.2 Flow chart of the 2D–DDD model

有限变形诱导晶格转动和形状改变对滑移动量平 衡的影响,因此计算过程中应变一般不超过0.01. 总塑性应变率是所有滑移系位错运动的贡献之和:

$$\dot{\varepsilon}_{p(ij)} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^{N} \left(s_i^{(\alpha)} n_j^{(\alpha)} + s_j^{(\alpha)} n_i^{(\alpha)} \right) \dot{\gamma}^{(\alpha)}$$
(12)

其中, $\dot{\epsilon}_{p(ij)}$ 是位错滑移引起的塑性应变率, s⁻¹; ($s_i^{(\alpha)}$, $s_j^{(\alpha)}$)和($n_i^{(\alpha)}$, $n_j^{(\alpha)}$)分别是滑移系 α 的滑移方向和滑移面法向, $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 是滑移系 α 上的剪切应变率, s⁻¹.根据 Orowan 公式,

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = b\rho^{(\alpha)}\bar{v}^{(\alpha)} \tag{13}$$

其中, $\rho^{(\alpha)}$ 为滑移系 α 上位错密度, m^{-2} ; $\bar{v}^{(\alpha)}$ 为滑移 系 α 上位错平均速度, $m \cdot s^{-1}$.

1.3 单晶铜塑性变形过程 2D-DDD 模型的建立

为了分析不同加载方式和应变率对位错运动 的影响,并且验证 2D-DDD 模型的准确性,本文以 崔一南建立的 3D-DDD 模型^[15-16] 为参照,并与之 进行对比并建立 2D-DDD 模型. 初始化设置主要 包含材料参数和模型计算参数初始化,以及几何 构型初始化两个部分.本研究对象单晶铜具体的 模拟参数如表1所示.几何构型初始化主要是确 定模拟区域的尺寸、滑移面取向与排列、位错源 的位置分布以及边界条件等方面.

表1 单晶铜 2D-DDD 模拟参数

 Table 1
 Model parameters used in the 2D–DDD model for single crystal copper

G/GPa	v	<i>b</i> /nm	$ ho_{ m s}/{ m m}^{-2}$	$l_0^{\rm ave}/{\rm nm}$
42	0.34	0.256	50×10 ¹²	500
$\Delta l_0/\mathrm{nm}$	η_1	$\eta_2/(Pa \cdot s)$	$B_0/(Pa \cdot s)$	$v_{\rm s}/({\rm m}\cdot{\rm s}^{-1})$
50	1.5	9 <i>B</i>	10^{-4}	2.92×10 ³

Note: G—Shear modulus; v—Poisson's ratio; b—Burgers vector; ρ_s —Source density; l_0^{ave} —Mean value of initial length of dislocation source; Δl_0 —Standard deviation of initial length of dislocation source; η_1 —Enhancement factor; η_2 —Correlation coefficient; B_0 —Static viscous drag coefficient; v_s —Speed of shear wave.

如图 3 所示,模拟区域晶体尺寸为 1 µm×3 µm. 单晶铜是面心立方(Face-centred cubic, FCC)材料, 模拟系统的 x 轴和 v 轴分别沿着 [110] 和 [001] 方 向[31],考虑到平面应变状态的3种主动滑移系的 相对夹角近似为{0°, ±60°},由于 0°取向的滑移系 的 Schmid 因子为 0,因此忽略 0°滑移系,选取的滑 移方向分别与 x 轴成 ±60°, 滑移面间距设定为 150b. 模拟平面内无初始位错,位错源随机分布在 滑移系上,为保证多滑移系变形均匀,两个滑移系 上的位错源数目设置相当.对于单晶微柱试样,模 拟区域的左右边界视作不可逾越的障碍. 为了避 免数值计算的复杂性,参考通用的模型简化方法 和实验微柱压缩形态[31-32],与左右约束端相交的 滑移面在模型中没有考虑,而上下边界对应为微 柱的自由表面,位错运动到上下边界不仅要计算 位错所受镜像应力还要考虑位错的湮灭.

初始化完成后,沿着 [001] 方向进行压缩加载,以实现多滑移条件.为对比不同加载方式的作用效果,分别采用位移加载和力加载方式.位移控制加载时选择恒定应变率为 1000 s⁻¹,根据胡克定律可将其转变为外力增长率*o*^{app}:

$$\dot{\sigma}^{\rm app} = E^* \left(\dot{\varepsilon}_0 - \dot{\varepsilon}_p \right) \tag{14}$$

其中, E^* 为二维模型在平面应变条件下的杨氏模量, Pa;考虑到平面应变的情况, $E^* = E/(1-v^2)$, E为一般杨氏模量, Pa; $\dot{\epsilon}_0$ 为加载应变率, s^{-1} ; $\dot{\epsilon}_p$ 是 塑性应变率, s^{-1} .

力控制加载时,设定力增加率为一个恒定值, 对应式(14)位移控制加载方式,初始塑性应变率 为0.在离散位错动力学模拟中,Rao等^[33]提出了 一种利用截断塑性应变率控制力加载的方式,将 其与材料内部位错的运动联系起来.即对位错的 运动设置一个塑性应变率阈值,当位错运动引起 的塑性应变率低于该阈值时,以恒定应力速率加



图 3 单晶铜晶体学取向及计算模型. (a)FCC 晶体滑移系取向; (b)压缩载荷下 2D-DDD 计算模型

Fig.3 Crystallographic orientation and calculation model of single crystal copper: (a) slip system orientation for the FCC crystal; (b) the 2D–DDD model under compression

载,反之,外加作用应力不再增加,即力增加率为0. 这种方式需要确定临界塑性应变率和应力增量的 大小,可能会影响位错雪崩的大小.本文中利用加 权位错速度的方式^[15-16]来控制应力的加载,与塑 性应变率控制类似,存在一个加权位错速度阈值 v_{th},当加权位错速度 v_w低于该临界值时,力加载正 常进行.反之,当位错爆发式运动,加权位错速度 v_w高于该临界值时,应力保持恒定不变.位错速度 阈值 v_{th}和加权位错速度 v_w的计算公式如下:

$$v_{\rm th} = \frac{Gb^2 \sqrt{\rho_0}}{B}$$
(15)
$$v_{\rm w} = \frac{\sum_{i=1}^{n} l_i v_i}{\sum_{i=1}^{n} l_i}$$
(16)

其中, ρ_0 为初始位错密度,m⁻²;这里采用位错源密 度表示, l_i 表示位错段*i*的长度,m; v_i 表示位错段 *i*的速度,m·s⁻¹.在 2D-DDD 模型中,每个位错均 是等效的无限长,加权位错速度 v_w 即是平均位错 速度,m·s⁻¹.

2 模型验证

基于不同加载方式的单晶铜 2D-DDD 模型计 算得出力控制和位移控制加载的力学曲线,如图 4 所示.两种加载方式下,单晶铜的最高应力水平均 在100~120 MPa 范围内,初始塑性变形应力在90 MPa 左右,近似与 Frank-Read 位错源形核应力的均值 (99 MPa)对应,说明此时位错开始以位错源激活 的方式增殖并贡献塑性应变.在经历一段纯弹性 变形行为后,塑性阶段流动响应都呈现很强的不 连续性,并且这种不连续的应力-应变曲线的形状 不同:位移加载时,应力-应变曲线呈现准周期的 锯齿状;力加载时,应力-应变曲线呈现应力单调 增加的台阶状.这些不连续性的力学特征反映为 微观的位错剧烈演化,随着位错增殖或运动显著, 真实的塑性应变呈现爆发式增长.

这种现象已经在很多微拉压实验和模拟中被 发现^[34-35],通过与 Cui 等^[16]3D-DDD 模型中力加载 和实验^[36]中位移加载稳定流动应力范围的对比, 模型预测在误差允许范围内吻合良好,定量化地 验证本模型的可靠性.本工作将应变率为 10³ s⁻¹ 时 2D-DDD 的预测结果与实验的准静态压缩结果 相对比,远远高于实验中采用的应变率,因为在离 散位错动力学中,应变率小于 10³ s⁻¹时均可认为





图 4 不同加载方式下 2D-DDD 和 3D-DDD 计算^[16] 及实验^[36] 获得 的单晶铜应力-应变曲线

Fig.4 Stress-strain curves for the 2D–DDD model of the single crystal copper compared with those for the 3D–DDD model^[16] and experiments^[36] at different loading modes

准静态条件,应变率可以在一个很宽范围并且计算结果不再受应变率的影响^[21].由于单晶铜单轴 压缩实验的微柱尺寸(800 nm)和 3D-DDD 模型尺 寸(3000b)小于本模拟尺寸参数,而且 2D-DDD 模 拟忽略了位错攀移和交滑移等三维机制对塑性变 形的影响,因此可能导致模拟结果相较于实验和 其他模拟流动应力偏小.

3 结果和讨论

3.1 加载方式对单晶铜力学行为的影响

为了对比两种加载方式下单晶铜应力-应变 曲线形状的差异及解释其内在机理,以上述加载 条件为例,单独研究发生一次位错雪崩的情况,如 图 5 所示.在力和位移控制加载下,发生一次位错 雪崩事件时力学响应呈现不同的形式,前者为应 变的陡增,后者为应力的陡降.具体表现为,一次 位错雪崩时,力加载时的应变陡增,对应的应变增 量为 0.02%,而应力在此时几乎无变化;位移加载 时的应力突降,对应的应力增量为 12.89 MPa,而 应变在此时几乎无变化.

力加载时,图 6(a)对比加权位错速度和应力 随应变的变化曲线,可以看出,应力-应变曲线发 生应变突增时,加权位错速度与位错速度阈值相 等.由于外加力的增长是通过加权位错速度来调 节,当加权位错速度超过位错速度阈值时,恒定速 率上升的外加应力停止增加,此时相当于保载条 件下位错弛豫过程,位错依靠自组织演化,根据公 式(13),持续贡献塑性应变,速度抖动地下降;当 加权位错速度低于位错速度阈值时,外加应力率 大于 0,应力继续增加,直至加权位错速度再次达





Fig.5 Stress-strain curves of dislocation avalanches under different loading modes

到位错速度阈值,以上过程重复.因此,在一个完整的位错雪崩阶段,外加应力保持稳定,而塑性应变持续增加,应力应变响应表现为台阶状,就出现了应变增量大而应力增量几乎为0的现象.

位移加载时,通过对比塑性应变率变化曲线 以及应力-应变曲线,如图 6(b),每次应力陡降的 发生都出现在塑性应变率等于外加应变率的时 候.根据载荷施加公式(14),塑性应变率较小且低 于加载应变率时,外加应力速率大于零,应力持续 增加,晶体内位错和位错源受力逐渐增大.在满足 临界形核强度并保持临界发育时间后,位错源激 活驱动位错增殖,位错密度逐渐增大,塑性应变率 随之上升;当塑性应变率高于加载应变率,应力增 长率小于零,外加应力下降,位错源的受力不足以 继续增殖位错,塑性应变率随之下降.直至塑性应 变率再次低于应变率加载率,以上过程重复.因 此,位错源激活诱发位错雪崩发生时,通过降低外 加应力的大小以匹配塑性应变率和加载应变率, 就出现了应力增量变化大的现象.

对于应力控制的外部载荷,位错运动相对速 度阈值调控外加载荷的增加和停止,因此位错雪 崩效应归结于位错速度的随机性;而当外部约束 为位移控制时,由于位错源对形核强度和形核时 间的要求,各个位错源的开动表现为间歇性,位错 雪崩由位错源交替的开动和停滞主导.

3.2 应变率对单晶铜力学行为的影响

当位移加载时,应变率的大小会影响材料的 屈服应力,本文利用 2D-DDD 模拟,研究不同应 变率下位错演化对单晶铜塑性变形的影响. 图 7(a) 为4种不同应变率(10²、10³、10⁴和4×10⁴s⁻¹)的应 力-应变曲线,由于模型初始无位错的设置,所以 不同应变率下都经历一个完整重复的弹性阶段. 将 0.1% 塑性应变处设置为初始屈服点[22],提取各 应变率下的屈服应力,如图7(b)所示,屈服应力随 应变率的增大而增大,呈现典型的正应变率敏感 性行为. 然而高应变率(10⁴和4×10⁴s⁻¹)的屈服强度 与其他应变率相比具有明显的差别.一些文献[22,37] 也反映了相似的力学行为,屈服强度的应变率关 联性被分成两个作用域,在应变率低于10³ s⁻¹的 第一作用域,屈服强度随着应变率保持着相对稳 定,而在更高应变率范围的第二作用域,屈服强度 随应变率显著提高. 这两个作用域机制一般被解 释为:在较低应变率下位错以热激活方式越过障 碍,转变为高应变率下的位错阻尼运动.然而,这 些理论一般适用于讨论宏观块体或者介观多晶 等晶体内位错密度较高的情况[^{8,22,37]}.为了分析不 同应变率下微米单晶力学行为转变的位错机理, 基于上述的模拟结果并通过解析方法进行定量 分析.



質U (a/力量前加载下应力和加致世宙还反随应文供化;(D/世份量前加载下应力和应文平随应文供化

Fig.6 (a) Evolution of stress and weighted dislocation velocity with strain under stress-controlled mode and (b) evolution of stress and strain rate with strain under strain-controlled mode



图 7 不同应变率下的(a)应力-应变曲线; (b)屈服应力; (c)位错密度-应变曲线; (d)组成应力 Fig.7 Effect of strain rate on the evolution of: (a) stress vs strain; (b) yield stress; (c) dislocation density vs strain; (d) stress composition

图 7(c)展示的是不同应变率下位错密度随应 变演化曲线,整个应变率范围单晶铜屈服时的位 错密度都没有超过 10¹³ m⁻²,由位错密度增加的滞 后性可以看出,当滑移系上分解切应力达到位错 源激活强度并经历一定形核时间后,位错增殖才 会开始发生.在低于 10³ s⁻¹的应变率范围内,位错 密度随着应变率增加而增加;而在更高应变率下, 位错密度随应变率的增加而降低,且其演化的波 动性增大.考虑应变率对位错增殖和位错运动的 作用,位错滑移贡献的塑性滑移被量化为每个滑 移系上分解剪切应变的总和,不同应变率下的滑 移量分布如图 8 所示.随着应变率的上升,屈服时 单晶铜更多的滑移面被激活,塑性应变在各个滑移面分布越来越均匀,说明单一滑移面上位错源 形核时间的限制促使其他滑移面位错源的开启, 应变率的增加对位错增殖具有显著的促进作用. 在 10³ s⁻¹ 应变率以后的滑移面开启量趋于饱和, 此时位错增殖速率不再明显增加,而高应变率下 外加作用力增加,位错滑移速度加快导致滑出自 由边界更加容易,晶体内位错密度降低,并且间歇 的增殖和快速的滑出湮灭也会导致位错密度演化 的波动性增大.类似于单晶微柱变形出现尺寸效 应的"位错匮乏"机制,即使多数滑移面的位错源 开启,也不能满足施加的应变率.





本文进一步分析了屈服时位错流动应力的组成,以确定不同应变率下单晶铜力学行为.单晶铜流动应力 τ等于位错运动的热应力 τ_{th} 和非热应力 τ_a之和^[38]:

$$\tau = \tau_{\rm th} + \tau_{\rm a} \tag{17}$$

其中, τ_{th} 是施加在位错上的热应力项, Pa, 控制位 错的热激活行为, 使位错借助自身的能量起伏, 越 过包括派尔斯(Peierls)障碍等能垒的过程; τ_a 是作 用在位错上的非热应力项, Pa, 它的来源是位错间 的长程弹性相互作用力和位错源形核相关应力. 对于面心立方晶体, 在正常温度和应变率条件下, 热应力项 τ_{th} 来源主要是 Peierls 障碍, 大约为 0.5 MPa, 位错很容易克服该障碍.因此, 热应力项 τ_{th} 的影 响可以被忽略, 流动应力 τ 主要由非热应力项 τ_a 提 供.根据泰勒(Taylor)硬化法则和公式(9), 非热应 力项 τ_a 可以表示为^[39–40]:

$$\tau \approx \tau_{\rm a} = kGb \sqrt{\rho} + 2\beta \frac{Gb}{l_0} + E^* \dot{\varepsilon} t_{\rm nuc} m \qquad (18)$$

其中,第一项为位错密度相关的相互作用力, *k* 为 量纲一常数,一般取值为 0.5; *ρ* 是位错密度, m⁻²; 第二项为基于 Orowan 应力判据的位错源激活应 力;第三项是位错增殖应力,与位错形核时间相 关, *ċ*是加载应变率, m·s⁻¹; *m* 为 Schmid 因子. 对于 位错增殖应力项^[22],一旦外加应力满足第二项的 位错源形核强度, 被激活的位错源需要一段形核 时间 *t*_{nuc} 去产生一对偶极子才能完成一个完整的 位错增殖过程. 在此时间间隔内, 弹性应变增加 *ċt*_{nuc}, 因而贡献了流动应力的上升.

基于解析表达式(18)和位错密度参数,不同 应变率下单晶铜屈服应力组成如图 7(d)所示.解 析表达式计算得到的屈服应力与图 7(b)中 2D-DDD 模拟的结果吻合较好.其中,10²~10⁴ s⁻¹应 变率下模拟屈服应力略低于解析计算值,这是因 为解析表达式的位错源激活应力以初始位错源长 度均值 500 nm 计算的,为保证各滑移面上位错源 不会同时激活,位错源长度满足一个高斯分布,因 而初始激活的位错源强度一定小于均值 99.33 MPa.

值得注意的是,在4×10⁴ s⁻¹应变率时,模拟屈服应力反而略高于解析计算值,这里归因于位错阻尼运动受力,通过两种方法计算4×10⁴ s⁻¹应变率时屈服应力的差值估计,位错运动阻尼力稍大于18.27 MPa,表明阻尼作用并不是高应变率屈服应力的主导机制.阻尼力来自位错与晶格热振动之间的相互作用,可表示为: $\tau_{drag} = \frac{B\dot{\gamma}}{ob^2}$.其中, $\dot{\gamma}$ 为

剪应变率, s⁻¹. 可见, 在具有一定位错密度的晶体 内, 随着位错运动速度增加, 电子和声子对位错运 动的阻力也会随之增大. 然而, 加载应变率越高, 小尺寸试样中的位错越容易在滑移时从自由表面 逃逸, 并且位错逃逸的速度会超出位错增殖的速 度, 晶体尺寸效应开始显著^[7], 由图 7(c)可知, 高应 变率下的位错密度大大降低. 此时, 阻尼力计算值 趋向于无穷大, 与位错运动相关的阻尼力公式无 法合理表达流动应力贡献.

应变率从 10² s⁻¹ 到 4×10⁴ s⁻¹, 位错源激活应力 在屈服应力中占比逐渐减小, 位错增殖应力逐渐 增大, 说明屈服应力的应变率敏感性机制从位错 源激活转变为位错增殖. 低应变率下位错通过更 多的滑移面位错源激活来贡献塑性应变, 位错源 激活应力只与位错源初始长度有关, 与应变率无 关, 所以随着应变率增加, 屈服强度保持相对稳 定. 在较高的应变率下, 有限的内部源无法产生足 够的塑性来抵抗外部加载的增加, 位错增殖成为 屈服应力增加的主要因素, 位错增殖应力与应变 率密切相关, 因而随着应变率增加, 屈服强度显著 增加. 三维模拟也说明相似的现象, 反过来, 这些 内部位错源可能由于应力的增加而被破坏, 位错 增殖机制会从内部 Frank-Read 位错源转变为表面 形核^[18].

4 结论

(1)本文基于二维离散位错动力学理论建立的单晶铜亚微米柱压缩模型,通过引入截断位错速度准则描述力控制下的位错雪崩,模拟得出应力-应变曲线在位移加载时呈现准周期的锯齿状,力加载时时呈现应力单调增加的台阶状,模拟结果与微压缩实验结果相吻合,验证了模型在预测单晶铜位错基塑性变形行为方面的可靠性.

(2)力控制和位移控制的加载方式,不连续性行为表现为应变突增的台阶状应力-应变曲线和应力陡降的锯齿状应力-应变曲线,由于两者分别通过加权位错速度和塑性应变率调控外加载荷的大小,位错雪崩效应的内在机制归结为位错速度的随机性和位错源开动的间歇性.

(3)应变率在 10²~4×10⁴ s⁻¹ 的范围内,单晶铜 的屈服应力表现为正应变率敏感性,且应变率敏 感性机制发生改变.通过对比位错滑移塑性滑移 量分布、建立流动应力不同机制解析表达,结果表 明在高应变率时,位错演化特征为多滑移面激活 均匀变形,应变率相关的位错增殖机制代替位错

源激活主导塑性屈服.

参考文献

 Liu B, Xu Z W, Li R, et al. *In-situ* experiment on critical thickness of brittle-ductile transition of single-crystal silicon. *Chin J Eng*, 2019, 41(3): 343
 (刘冰, 徐宗伟, 李蕊, 等. 单晶硅脆塑转变临界厚度的原位实验.

工程科学学报, 2019, 41(3): 343)

- [2] Shui L, Hu Z Q. Creep fracture of a nickel base single crystal superalloy along [011] orientation. *Chin J Eng*, 2015, 37(5): 615 (水丽, 胡壮麒. 一种[011]取向镍基单晶合金的蠕变断裂. 工程 科学学报, 2015, 37(5): 615)
- [3] Bai Q S, Hu C, Bai J X, et al. Tensile properties of monocrystalline copper component based on discrete dislocation dynamics. *J Plast Eng*, 2018, 25(5): 270
 (白清顺, 胡超, 白锦轩, 等. 基于离散位错动力学的单晶铜构件 拉伸特性研究. 塑性工程学报, 2018, 25(5): 270)
- [4] Dong X H, Wang Q, Zhang H M, et al. Research progress of size effect in microforming. *Sci Sinica Technol*, 2013, 43(2): 115
 (董湘怀, 王倩, 章海明, 等. 微成形中尺寸效应研究的进展. 中国科学:技术科学, 2013, 43(2): 115)
- [5] Huang G J, Duan Z P, Wang W B. Dynamical analysis on the formation of dislocation pattern in the easy slip stage of single crystals 1. Acta Mech Sinica, 1998, 30(1): 65 (黄国君, 段祝平, 王文标. 单晶易滑移阶段位错结构形成的动 力学分析. 力学学报, 1998, 30(1): 65)
- [6] Zhang X, Aifantis K E. Accounting for grain boundary thickness in the sub-micron and nano scales. *Rev Adv Mater Sci*, 2010, 26(1): 74
- [7] Zhang X, Aifantis K E. Interpreting strain bursts and size effects in micropillars using gradient plasticity. *Mater Sci Eng:A*, 2011, 528(15): 5036
- [8] Fan H D, Wang Q Y, El-Awady J A, et al. Strain rate dependency of dislocation plasticity. *Nat Commun*, 2021, 12: 1845
- [9] He S L, Jiang W T, Bai J S, et al. Study of dynamical mechanical properties and dislocation dynamics of copper single crystals by discrete dislocation dynamics simulation. *IOP Conf Ser:Mater Sci Eng*, 2020, 770: 012094
- [10] Cui Y N. The Investigation of Plastic Behavior by Discrete Dislocation Dynamics for Single Crystal Pillar at Submicron Scale [Dissertation]. Beijing: Tsinghua University, 2014 (崔一南. 亚微米单晶柱塑性行为的离散位错研究[学位论文]. 北京:清华大学, 2014)
- [11] Gao Y. Discrete Dislocation Mechanism on Submicro-Crystal Plasticity [Dissertation]. Beijing: Tsinghua University, 2011
 (高原. 亚微米晶体塑性的离散位错机理[学位论文]. 北京: 清华 大学, 2011)
- [12] Papanikolaou S, Dimiduk D M, Choi W, et al. Quasi-periodic events in crystal plasticity and the self-organized avalanche oscillator. *Nature*, 2012, 490(7421): 517

- [13] Maaß R, Derlet P M, Greer J R. Independence of slip velocities on applied stress in small crystals. *Small*, 2015, 11(3): 341
- [14] Csikor F F, Motz C, Weygand D, et al. Dislocation avalanches, strain bursts, and the problem of plastic forming at the micrometer scale. *Science*, 2007, 318(5848): 251
- [15] Cui Y N, Po G, Ghoniem N. Controlling strain bursts and avalanches at the nano- to micrometer scale. *Phys Rev Lett*, 2016, 117(15): 155502
- [16] Cui Y N, Po G, Ghoniem N. Influence of loading control on strain bursts and dislocation avalanches at the nanometer and micrometer scale. *Phys Rev B*, 2017, 95(6): 064103
- [17] Meyers M A, Gregori F, Kad B K, et al. Laser-induced shock compression of monocrystalline copper: Characterization and analysis. *Acta Mater*, 2003, 51(5): 1211
- [18] Hu J Q, Liu Z L, Erik V D G, et al. Strain rate effects on the plastic flow in submicron copper Pillars: Considering the influence of sample size and dislocation nucleation. *Extreme Mech Lett*, 2017, 17: 33
- [19] Jennings A T, Li J, Greer J R. Emergence of strain-rate sensitivity in Cu nanopillars: Transition from dislocation multiplication to dislocation nucleation. *Acta Mater*, 2011, 59(14): 5627
- [20] Zheng Z B, Balint D S, Dunne F P E. Rate sensitivity in discrete dislocation plasticity in hexagonal close-packed crystals. *Acta Mater*, 2016, 107: 17
- [21] Guo X R, Sun C Y, Wang C H, et al. Investigation of strain rate effect by three-dimensional discrete dislocation dynamics for fcc single crystal during compression process. *Acta Metall Sin*, 2018, 54(9): 1322

(郭祥如,孙朝阳,王春晖,等.基于三维离散位错动力学的fcc结构单晶压缩应变率效应研究.金属学报,2018,54(9):1322)

- [22] Agnihotri P K, Erik V D G. On the rate sensitivity in discrete dislocation plasticity. *Mech Mater*, 2015, 90: 37
- [23] LeSar R. Simulations of dislocation structure and response. Annu Rev Condens Matter Phys, 2014, 5(1): 375
- [24] Anderson P M, Hirth J P, Lothe J. Theory of dislocations. 3rd Ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2017
- [25] Van der Giessen E, Needleman A. Discrete dislocation plasticity: A simple planar model. *Modelling Simul Mater Sci Eng*, 1995, 3(5): 689
- [26] Zheng Z B. Investigation of Cold Dwell Facet Fatigue in Titanium Alloys Utilising Crystal Plasticity and Discrete Dislocation Plasticity Modelling Techniques [Dissertation]. London: Imperial College London, 2016
- [27] Argon A. Strengthening Mechanisms in Crystal Plasticity. Oxford: Oxford University Press, 2007
- [28] Gillis P P, Gilman J J, Taylor J W. Stress dependences of dislocation velocities. *Philos Mag:A J Theor Exp Appl Phys*, 1969, 20(164): 279
- [29] Benzerga A A. An analysis of exhaustion hardening in micronscale plasticity. *Int J Plast*, 2008, 24(7): 1128
- [30] Cleveringa H H M, Van der Giessen E, Needleman A. A discrete

· 1375 ·

dislocation analysis of bending. Int J Plast, 1999, 15(8): 837

- [31] Fan H D, Li Z H, Huang M S, et al. Thickness effects in polycrystalline thin films: Surface constraint versus interior constraint. *Int J Solids Struct*, 2011, 48(11-12): 1754
- [32] Deshpande V S, Needleman A, Van der Giessen E. Plasticity size effects in tension and compression of single crystals. *J Mech Phys Solids*, 2005, 53(12): 2661
- [33] Rao S I, Dimiduk D M, Parthasarathy T A, et al. Athermal mechanisms of size-dependent crystal flow gleaned from threedimensional discrete dislocation simulations. *Acta Mater*, 2008, 56(13): 3245
- [34] Uchic M D, Dimiduk D M, Florando J N, et al. Sample dimensions influence strength and crystal plasticity. *Science*, 2004, 305(5686): 986
- [35] Liang Z Y, Huang M X. Deformation twinning in small-sized facecentred cubic single crystals: Experiments and modelling. J Mech

Phys Solids, 2015, 85: 128

- [36] Zhang J Y, Liu G, Sun J. Strain rate effects on the mechanical response in multi- and single-crystalline Cu micropillars: Grain boundary effects. *Int J Plast*, 2013, 50: 1
- [37] Liang Z Y, Wang X, Huang W, et al. Strain rate sensitivity and evolution of dislocations and twins in a twinning-induced plasticity steel. *Acta Mater*, 2015, 88: 170
- [38] Liu Z L, You X C, Zhuang Z. A mesoscale investigation of strain rate effect on dynamic deformation of single-crystal copper. *Int J Solids Struct*, 2008, 45(13): 3674
- [39] Guo X R, Sun C Y, Li R, et al. A dislocation density based model for twinning induced softening of TWIP steel. *Comput Mater Sci*, 2017, 139: 8
- [40] Wang C H, Sun C Y, Qian L Y, et al. Dynamic mechanical behaviour induced by adiabatic temperature rise of Fe–Mn–Al–C steel. *Mater Sci Technol*, 2021, 37(3): 280