

金属Mo中刃位错运动特性的分子动力学研究

万强, 田晓耕, 沈亚鹏

西安交通大学航天航空学院机械结构强度与振动重点实验室, 710049

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 通过分子动力学方法(MDM), 采用镶嵌原子势法(EAM), 沿[111]方向插入两层(211)半原子面形成位错, 模拟了低温不同冲击载荷下和相同载荷不同温度下金属Mo中刃位错的动力学特性. 结果表明: 在低温冲击载荷下, Mo中的刃位错可以由静止加速到超过波速. 随着载荷的增加, 在位错运动的[111]方向将会出现3个波速; 在相同载荷不同温度下, 位错的速度随着温度的升高而减小, 即影响位错速度的拖动系数 $B(T)$ 随温度升高而增大. 随着冲击载荷的增大, 拖动系数随温度的变化趋势减缓, 即外加载荷对 $B(T)$ 也有影响.

关键词 [分子动力学](#), [位错](#), [拖动系数](#), [波速](#), [镶嵌原子法](#)

分类号 [O343.5](#)

Dynamics characteristics of edge dislocation in Mo by molecular dynamics

..

西安交通大学航天航空学院机械结构强度与振动重点实验室, 710049

Abstract

This investigation simulates the dynamics characteristics of edge dislocation in BCC crystal Mo under different temperature and abrupt shear strains by molecular dynamics (MD) simulation. Results show a decrease of mobility with increasing temperature, namely the drag force increased with increasing temperature and decrease with increasing loading. A stationary dislocation can surmount the wave velocity under an abrupt shear strain in crystal Mo in this simulation. Results indicate that there are three wave speeds in the [111] direction in which the dislocation moved. The movement of the edge dislocation when it surmounts the transverse wave speed and drops to subsonic is pictured.

Key words

DOI:

通讯作者 wanqiang@mailst.xjtu.edu.cn

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(1112KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献](#)

服务与反馈

- ▶ [把本文推荐给朋友](#)
- ▶ [加入我的书架](#)
- ▶ [加入引用管理器](#)
- ▶ [复制索引](#)
- ▶ [Email Alert](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含“分子动力学,位错,拖动系数,波速,镶嵌原子法”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [万强](#)
- [田晓耕](#)
- [沈亚鹏](#)