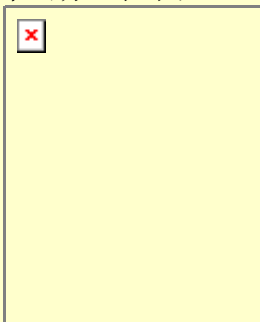


本期封面



2001年10期

栏目:

DOI:

论文题目: 吸附促进位错发射、运动以及裂纹扩展的分子动力学模拟

作者姓名: 李忠吉 刘辉 高克玮 乔利杰 褚武扬

工作单位: 北京科技大学材料物理系, 北京100083

通信作者: 褚武扬

通信作者Email: lqiao@ustb.edu.cn

文章摘要: 根据反演法获得的对势和EAM多体势计算了纯Al位错发射的临界应力强度因子 K_{Ie} 以及Griffith裂纹解理扩展的临界应力强度因子KIG. 结果表明, 用对势算出的值和断裂力学计算结果更相近. 因此, 用对势来研究吸附的影响是可行的. 分子动力学模拟表明, Ga吸附在裂纹表面将使 $KIG=0.42 \text{ MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$ 降至 $KIG=0.32 \text{ MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$, 这表明吸附使表面能 γ 降至 $\gamma^*(=0.58\gamma)$. Ga吸附使 $K_{Ie}=0.31 \text{ MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$ 降至 $K_{Ie}=0.24 \text{ MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$; Ga吸附使位错运动的临界分切应力从 $T_c=2.05 \text{ MPa}$ 降至 $T_c=1.82 \text{ MPa}$. 这就表明, Ga吸附后能降低Al的表面能, 从而促进位错发射和运动.

关键词: Al, Ga, 分子动力学模拟, 位错发射

分类号: TG111.91, 0647.32

关闭