

# 激光温喷丸诱发单晶铜位错扩展的分子动力学模拟

孟宪凯 周建忠 黄舒 盛杰 苏纯 杨祥伟

江苏大学机械工程学院, 江苏 镇江 212013

**摘要** 为了研究面心立方金属在热力耦合作用下的微观组织,采用分子动力学方法对激光温喷丸在单晶铜内诱导的位错扩展进行了模拟,并使用中心对称参数研究了变形量对位错扩展的影响规律,以及温度对塑性变形诱导位错扩展的作用,进而从加工硬化的角度分析了其对激光温喷丸强化效果的影响。结果表明,激光温喷丸过程中,塑性变形以“空位簇-不全位错-堆垛层错”的方式诱导产生不全位错与堆垛层错。随塑性变形增加,激光温喷丸的硬化效果逐渐增加。并且,温度可以促进塑性变形过程中位错的形核与扩展,200℃以内,激光温喷丸的硬化效果随温度的增加而增强,温度增至250℃时,硬化效果由于位错湮灭而减弱。

**关键词** 激光光学; 激光温喷丸; 位错扩展; 分子动力学

中图分类号 TG17

文献标识码 A

doi: 10.3788/CJL201542.0702003

## Molecular Dynamics Simulation of Dislocation Development in Monocrystalline Copper induced by Warm Laser Peening

Meng Xiankai Zhou Jianzhong Huang Shu Sheng Jie Su Chun Yang Xiangwei

School of Mechanical Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang, Jiangsu 212013, China

**Abstract** In order to study the microstructure of face center cubic metals induced by thermo-mechanical impact, molecular dynamics method was used to investigate the dislocation evolution of monocrystalline copper treated by warm laser peening (WLP). The effects of plastic strain on the dislocation development were researched through centrosymmetry parameter. Moreover, the effects of temperature on the dislocation development induced by plastic strain during WLP were also investigated. Finally, the strengthening effects of WLP were analyzed by work hardening. It is shown that partial dislocation and stacking faults are induced by plastic strain in the way of “vacancy group-partial dislocation-stacking faults”. As the plastic strain increases, the amount of stacking faults and their stacking extent increases, which leads to a better effect of WLP in work hardening. A higher temperature can promote the nucleation and development of dislocations induced by WLP. The hardening effect of WLP increases with the temperature within 200℃, and the hardening effect reduces while it increases to 250℃ because of the dislocation annihilation.

**Key words** laser optics; warm laser peening; dislocation development; molecular dynamics

**OCIS codes** 140.3540; 120.6810; 160.3900; 220.4610

## 1 引言

激光温喷丸(WLP),通过高能短脉冲激光诱导的冲击波压力与温度的耦合作用改变材料表面微观组织,例如位错堆积与位错缠结,从而有效改善材料力学性能的稳定性<sup>[1-2]</sup>。Ye等<sup>[3]</sup>从动态应变时效(DSA)以及动态析出(DP)的角度揭示了WLP的强化机理,表明WLP可以通过DSA与DP在AISI4140钢内部诱导产生纳米级析出物以及高密度的位错,并对材料的强度与硬度产生积极的影响。由此可见,WLP强化效果与位错有着

收稿日期: 2014-12-15; 收到修改稿日期: 2015-01-26

基金项目: 国家自然科学基金(51175236,31405204)、高等学校博士学科点专项科研基金(20123227110022)、中国博士后科学基金(2014T70477,2013M540417)、江苏省科技支撑项目(BE2013097)、江苏省自然科学基金(BK20141166)

作者简介: 孟宪凯(1986—),男,博士研究生,主要从事激光冲击强化方面的研究。E-mail: mengdetiankong10@126.com

导师简介: 周建忠(1964—),男,教授,博士生导师,主要从事激光先进制造技术方面的研究。E-mail: zhoujz@ujs.edu.cn

极其重要的联系,然而WLP中位错结构与扩展规律尚不清楚,这限制了WLP的深入研究。

随着计算机硬件与软件的快速发展,在原子尺度上对位错的结构及其演变进行模拟研究逐渐成为可能,分子动力学(MD)作为该领域一种极为有效的模拟手段,受到国内外的广泛关注<sup>[4-5]</sup>。Bringa等<sup>[6]</sup>通过MD方法研究了冲击波过程中粒子速度与冲击波速度之间的关系,还对比了不同势函数下的冲击波传播过程,结果表明由于嵌入原子势(EAM势)考虑了不为零的堆垛层错能,其更加适合研究金属材料的冲击波响应。分子动力学的发展及应用,为探索激光温喷丸的强化机理提供了手段。

已有研究表明,位错结构以及位错扩展对金属材料的力学性能有重要的影响<sup>[7-8]</sup>,直接关系到激光温喷丸的强化效果。目前国内外学者主要采用实验或有限元分析的方法研究激光温喷丸后材料的位错结构与分布<sup>[1,9]</sup>,但这些方法很难直观地观测到晶体缺陷的结构变化。本文采用分子动力学方法,以面心立方晶格结构的单晶铜为对象,研究了激光温喷丸过程中塑性变形对单晶铜位错结构与位错扩展的影响,分析了温度对塑性变形诱导单晶铜位错扩展的作用,并从位错结构与位错扩展角度研究了激光温喷丸的强化规律。

## 2 模拟方法

单晶铜属于面心立方晶格结构的晶体,晶格常数为0.3615 nm。单晶铜的初始模型使用晶格周期性排列的方法构建,如图1所示,其中 $x$ 、 $y$ 、 $z$ 分别代表[100]、[010]与[001]晶向,模型尺寸为37.96 nm×10.85 nm×10.85 nm,原子总数为398000,原子间的相互作用势采用Daw等<sup>[10]</sup>提出的EAM势:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \Phi_{ij}(\gamma_{ij}) + \sum_i F_i(\rho_i), \quad (1)$$

式中EAM势将原子总势能 $E$ 分为两个部分:原子核间的对势能 $\Phi_{ij}(\gamma_{ij})$ 以及原子核镶嵌在电子云中的嵌入能 $F_i(\rho_i)$ ,其中 $\rho_i$ 为其他原子的核外电子在第 $i$ 个原子处产生的电子云密度之和, $\gamma_{ij}$ 为第 $i$ 个原子与第 $j$ 个原子之间的距离。EAM势考虑了原子核嵌入在电子云中所产生的势能,因此更加适用于研究金属以及合金的原子运动和晶格点阵结构变化。

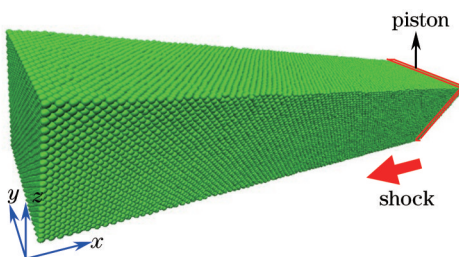


图1 单晶铜模型

Fig.1 Model of monocrystalline copper

激光诱导冲击波的产生采用活塞加载法<sup>[11]</sup>,即在活塞表面施加一个恒定的粒子速度,从而在材料内激发产生冲击波,其波前和波后状态参量如Rankir Hugoniot关系式<sup>[6]</sup>:

$$\rho(U_s - U_p) = \rho_0(U_s - U_{p0}), \quad (2)$$

$$P - P_0 = \rho_0(U_s - U_{p0})(U_p - U_{p0}), \quad (3)$$

$$e - e_0 = \frac{1}{2}(P - P_0) \left( \frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho} \right), \quad (4)$$

式中 $U_s$ 为冲击波速度; $U_{p0}$ 、 $U_p$ 分别为冲击压缩前后的粒子速度; $\rho_0$ 、 $\rho$ 分别为冲击压缩前后材料的密度; $P_0$ 、 $P$ 分别为冲击压缩前后材料的压强; $e_0$ 、 $e$ 分别为冲击压缩前后材料的内能。

激光温喷丸通过温度与压力耦合可以实现高应变率的塑性变形,活塞的粒子速度高达2 km/s。为了在模拟过程中快速出现堆垛层错以提高模拟效率,同时保证位错有足够的时间形核与扩展,WLP模拟过程采用1 km/s的活塞速度。其模拟过程为:首先使用共轭梯度法将系统能量降低到最小状态。然后置于恒温环境中弛豫10 ps,使晶格结构趋于稳定。不同温度时单晶铜原子平均势能如图2所示。弛豫2 ps后,不同温度时单晶铜原子平均势能在稳定值附近极小的范围内波动,说明系统基本达到稳定状态。弛豫完成后,对

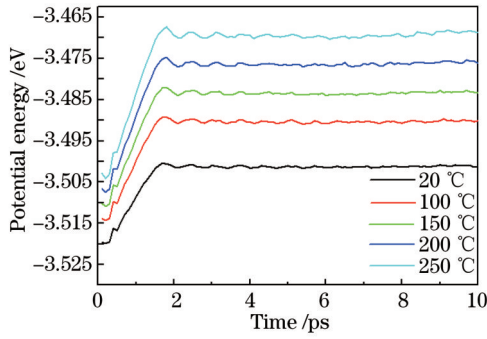


图2 原子平均势能随弛豫时间的变化曲线

Fig.2 Potential Energy as a function of relaxation time

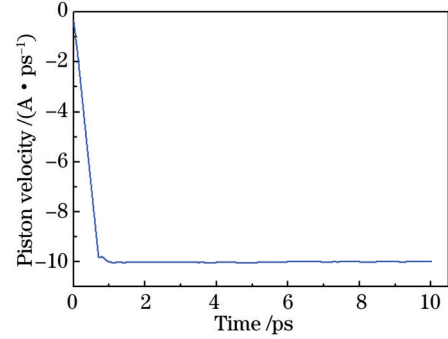


图3 加载过程中活塞的速度变化曲线

Fig.3 Piston velocity during loading

活塞沿 $-x$ 方向施加 $1 \text{ km/s}$ 的粒子速度,加载时间为 $10 \text{ ps}$ ,加载过程中活塞的速度变化如图3所示。

使用中心对称参数表征单晶铜的位错演变。中心对称参数 $C_s$ 是通过近邻原子与中心原子的相对位置判断晶格畸变变化的参数<sup>[12]</sup>:

$$C_s = \sum_{i=1}^{N/2} |R_i + R_{i+N/2}|^2, \quad (5)$$

式中 $N$ 为最近邻原子数, $R_i$ 、 $R_{i+N/2}$ 为中心原子指向近邻原子的矢量。当近邻原子相对于中心原子保持对称时, $R_i$ 与 $R_{i+N/2}$ 会相互抵消, $C_s$ 为零;当晶格在外部载荷(力或温度等)作用下产生畸变时,近邻原子与中心原子的相对位置发生变化从而破坏了正常的晶格结构, $C_s$ 不为零。位错周围的晶格畸变比较严重,因此可以通过 $C_s$ 来识别材料的位错结构与扩展情况,具体参数如表1所示<sup>[13]</sup>。堆垛层错原子的 $C_s$ 越高说明堆垛层错的堆垛方式越复杂,堆垛层错能也越大,外界克服堆垛层错使位错继续扩展滑移所做的功增加,塑性变形变得困难,故材料硬度升高。因此根据堆垛层错的 $C_s$ 值可以判断位错的结构以及堆积程度,进而从加工硬化的角度分析WLP的强化效果。

表1 中心对称参数识别晶格缺陷<sup>[13]</sup>

Table 1 Lattice defects distinguished by  $C_s$ <sup>[13]</sup>

Lattice defects	Normal	Partial dislocations	Stacking faults	Surface atoms	Others
$C_s / (10^{-2} \text{ nm}^2)$	$C_s < 3$	$3 < C_s < 5$	$5 < C_s < 9$	$9 < C_s < 20$	$C_s > 20$

### 3 结果与讨论

#### 3.1 塑性变形对位错结构与位错扩展的影响

模拟过程中使用恒定的活塞速度,不同加载时间代表了不同的塑性变形,因此可通过加载时间研究塑性变形对位错的影响。图4所示为 $20 \text{ °C}$ 时不全位错和堆垛层错扩展过程。可知, $0 \text{ ps}$ 时单晶铜内不存在位错,只有少量的空位点缺陷,如图4(a)、4(e)所示。 $2 \text{ ps}$ 时,单晶铜出现了大量的空位,如图4(b)、4(f)所示; $5 \text{ ps}$ 时,单晶铜内部可以看到明显的不全位错,这是因为单晶铜内积攒的过饱和空位在塑性变形过程中凝聚成不同规模的空位簇,并在塑性变形作用下崩塌形成<sup>[14]</sup>;并且不全位错之间存在不同规模的呈片状分布的层错带<sup>[15]</sup>;

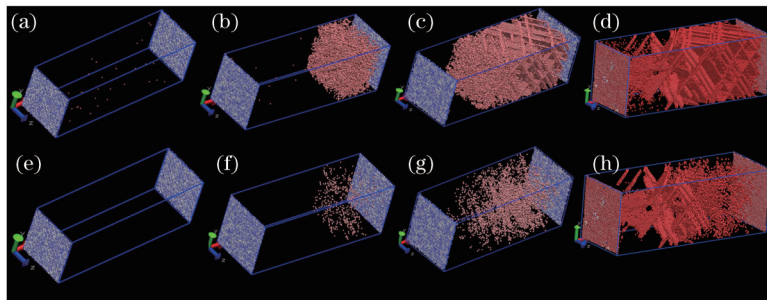


图4 不同加载时间的位错扩展图。不全位错(a) 0 ps; (b) 2 ps; (c) 5 ps; (d) 10 ps。堆垛层错(e) 0 ps; (f) 2 ps; (g) 5 ps; (h) 10 ps

Fig.4 Development of dislocations at different loading time. Partial dislocations of (a) 0 ps; (b) 2 ps; (c) 5 ps; (d) 10 ps.

Stacking faults of (e) 0 ps; (f) 2 ps; (g) 5 ps; (h) 10 ps

不全位错以交叉形式扩展,位错数目以及层错规模不断增加,如图4(c)所示;此时虽然不存在明显的堆垛层错,但是不全位错扩展路径上的过饱和空位以及不全位错成核点为堆垛层错的出现奠定了基础;如图4(g)所示。10 ps时,不全位错随塑性变形增加继续扩展,位错数目迅速增加,如图4(d)所示。并且此时图4(h)中可以看到不全位错间的层错发生堆积,从而出现了明显的堆垛层错。

空位簇崩塌形成位错的过程如图5所示。图5(a)中的若干过饱和空位在塑性变形作用下发生凝聚成为空位簇,并逐渐演变为图5(b)所示的片状的空位簇。由于这种片状的空位簇结构不稳定,在外界影响下极易崩塌形成位错,因此过饱和空位可以为位错的形核提供成核位置。位错在空位崩塌处成核后会在滑移面内不断扩展,向更加复杂的位错结构转变,如图5(c)所示。

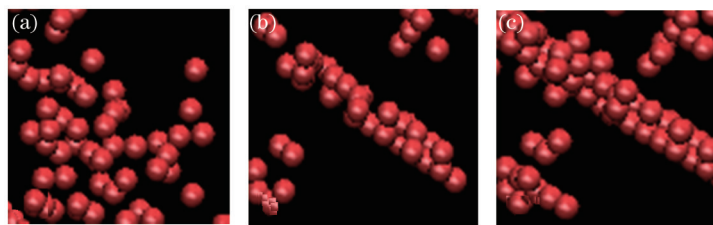


图5 空位凝聚形成位错过程。(a) 空位簇; (b) 空位簇崩塌形成位错; (c) 位错扩展

Fig.5 Nucleation of dislocations induced by vacancies. (a) Vacancies; (b) nucleation of dislocations; (c) development of dislocations

堆垛层错的原子数及  $C_s$  随加载时间的变化分别如图6和图7所示。由图6可知,随着加载时间的增加,堆垛层错原子数目从0逐渐增加到22980,并在9 ps左右达到了饱和。说明从0 ps到9 ps之间,堆垛层错随着塑性变形的增加出现增殖与扩展,位错数目与规模逐渐增加,并在9 ps后趋于饱和。在此过程中,堆垛层错  $C_s$  由  $5.25 \times 10^{-2} \text{ nm}^2$  增加到  $5.58 \times 10^{-2} \text{ nm}^2$ ,如图7所示。表明随着塑性变形逐渐增大,堆垛层错的堆垛方式趋于复杂,激光喷丸诱导的加工硬化效果更加显著。

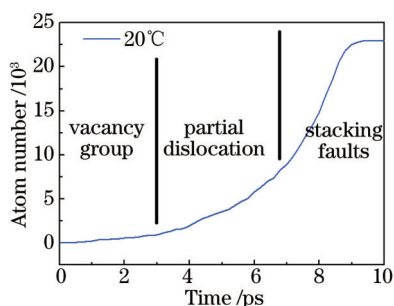


图6 堆垛层错的原子数随加载时间的变化曲线

Fig.6 Atom number of stacking faults as a function of loading time

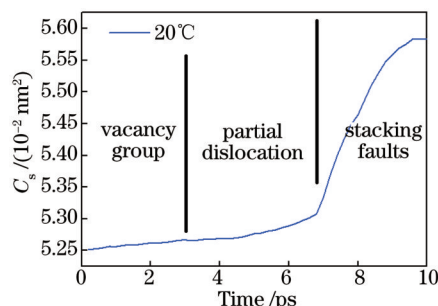


图7 堆垛层错  $C_s$  随加载时间的变化曲线

Fig.7  $C_s$  of sacking faults as a function of loading time

根据图4~图7,可以将堆垛层错的扩展过程大致分为3个阶段:1) 空位簇扩展区。该阶段堆垛层错原子数极低并增加缓慢,同时堆垛层错  $C_s$  也较小。这是因为该阶段塑性变形量较小,不全位错与过饱和空位的数目极少,但是该阶段空位随塑性变形的增加逐渐凝聚形成空位簇,其能够为位错提供成核位置。2) 不全位错扩展区。堆垛层错原子数以一定速率增加,但是堆垛层错原子  $C_s$  增加缓慢。这是因为该阶段空位簇迅速崩塌形成不全位错并迅速扩展,层错数目不断增加,但层错并未出现堆积,单晶铜内的堆垛层错数目较少,故该阶段以不全位错扩展为主。3) 堆垛层错扩展区。该阶段不全位错的密度达到饱和,并在塑性变形作用下发生堆积,故堆垛层错原子数以较高的速率增加并趋于饱和。同时堆垛层错原子  $C_s$  也随塑性变形量的增加迅速增至  $5.58 \times 10^{-2} \text{ nm}^2$ ,堆垛方式更加复杂,堆垛层错能也迅速增高。因此,堆垛层错扩展区为激光喷丸过程中产生加工硬化的主要阶段。

### 3.2 温度对塑性变形诱导的位错扩展的影响

图8与图9分别为不同温度下WLP后堆垛层错的原子数及平均中心对称参数随加载时间的变化曲线。可知,温度在200 °C内时,10 ps后堆垛层错的原子数以及  $C_s$  均随温度的增加而增大,说明温度对塑性变形诱导的位错增殖与扩展有促进作用,这与已有文献结果一致<sup>[6]</sup>。因此随着温度的增高,堆垛层错的数量逐渐增加,堆



垛方式也更加复杂,这使得塑性变形愈发困难,WLP加工硬化效果更加显著。当WLP温度增至250℃时,堆垛层错的原子数以及 $C_s$ 均有所下降,说明此时的位错增殖与扩展速度相对于200℃时有所降低,堆垛层错的数量以及堆垛方式的复杂程度均有所下降,WLP硬化效果有所降低。因此从WLP诱导的加工硬化程度来看,WLP单晶铜的最佳喷丸温度在200℃左右。根据Picu等<sup>[17]</sup>的研究,塑性变形诱导位错增殖可以分为两个部分:

$$\frac{d\rho}{d\varepsilon} = \left. \frac{d\rho}{d\varepsilon} \right|_{pr} + \left. \frac{d\rho}{d\varepsilon} \right|_{re}, \quad (6)$$

式中 $\left. \frac{d\rho}{d\varepsilon} \right|_{pr}$ 为加工硬化导致的位错增殖, $\left. \frac{d\rho}{d\varepsilon} \right|_{re}$ 为热激活过程导致的位错湮灭。随着塑性变形的增加,金属材料在流变应力的作用下不断发生位错的形核与扩展,位错密度不断增大,这即是由加工硬化导致的位错增殖;另一方面,位错在高温下还存在热激活现象,当温度达到材料的热激活温度,部分相互钉扎的位错继续产生攀移或者交滑移等位错运动,并在位错攀移与交滑移过程中不断吸收滑移路径周围的位错,发生位错湮灭,使位错数目降低。

图8,图9分别为堆垛层钛原子数和堆垛层错 $C_s$ 随加载时间的变化曲线,可知,温度对堆垛层错的原子数以及 $C_s$ 的影响主要集中在空位簇扩展区以及堆垛层错扩展区,而在全位错扩展区内,温度的影响较小, $C_s$ 甚至有所下降。这是由于不全位错的形核与扩展速率主要依赖于成核点的密度,而温度对于位错成核点密度的影响在空位簇扩展区已经达到饱和,故不全位错在高温下的扩展速率没有明显的提高。而在空位簇扩展区,因为塑性变形较小,温度对空位的影响较为突出,随着原子运动加剧,单晶铜内的空位缺陷数量增加,更易发生凝聚与崩塌,这也为位错的形核与扩展提供了大量的成核位置。在堆垛层错扩展区,不同温度时WLP诱导的堆垛层错原子数以及 $C_s$ 均急剧增长,但与室温时激光喷丸不同的是,WLP诱导的堆垛层错在初始形核与扩展时出现了短时间的平台,使堆垛层错扩展初期的扩展速率略低于室温,其原因还有待于进一步研究。在经过短暂的平台后,室温时激光喷丸诱导的堆垛层错的原子数与 $C_s$ 迅速增加并在9 ps左右达到饱和,而WLP中的堆垛层错在大于9 ps时仍继续扩展,并最终超越激光喷丸得到更大程度堆积的堆垛层错,这表明加载10 ps后,WLP比室温激光喷丸的硬化效果更为显著。

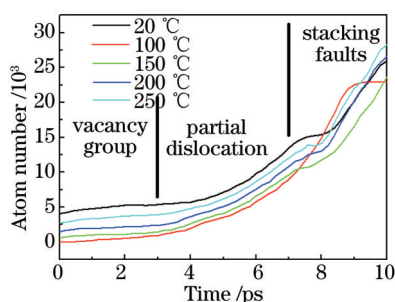


图8 堆垛层错原子数随加载时间的变化曲线

Fig.8 Atom number of stacking faults as a function of loading time

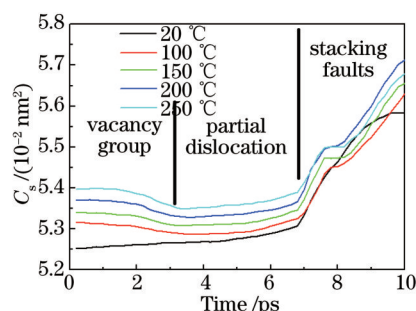


图9 堆垛层错 $C_s$ 随加载时间的变化曲线

Fig.9  $C_s$  of stacking faults as a function of loading time

图10为加载10 ps时不同温度WLP后的堆垛层错分布图。WLP温度低于200℃时,位错的左端面随温度的增加不断右移,而堆垛层错的原子数不断增加,表明堆垛层错的堆积程度随温度的增加而增大。这是由于温度低于200℃时,堆垛层错的扩展速率随温度的增加而增大,而堆垛层错会阻碍位错的攀移与交滑移等位错运动,从而导致了更加严重的位错塞积以及更加复杂的堆垛层错。当温度增至250℃时,温度对堆垛层错的负面影响开始凸显,位错的热激活机制导致位错的攀移与交滑移继续进行,位错攀移或交滑移的过程中不断吸收滑移路径周围的位错,导致位错湮灭。因此位错的左端面较200℃时左移,堆垛层错原子数减少,堆积程度降低,WLP的加工硬化效果随之下降,表明WLP在200℃左右可取得最佳的加工硬化效果。

## 4 结 论

基于分子动力学模拟方法,研究了激光温喷丸过程中塑性变形对位错结构与位错扩展的影响,并讨论了温度对塑性变形诱导位错扩展的作用,激光喷丸过程中,塑性变形以“空位簇-不全位错-堆垛层错”的方

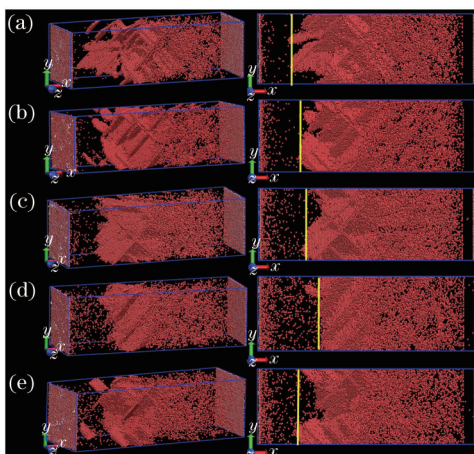


图10 加载10 ps时不同WLP温度下的堆垛层错分布图。(a) 20 °C; (b) 100 °C; (c) 150 °C; (d) 200 °C; (e) 250 °C

Fig.10 Stacking faults of different temperatures at 10 ps. (a) 20 °C; (b) 100 °C; (c) 150 °C; (d) 200 °C; (e) 250 °C

式诱导产生不同结构的位错,并且随着塑性变形的增加,堆垛层错的数量以及堆垛层错能也随之增加,喷丸的硬化效果更加显著。激光温喷丸过程中,温度的作用主要集中在空位簇扩展区和堆垛层错扩展区,在200 °C以内,高温可以促进塑性变形诱导的位错形核与扩展,特别是堆垛层错的扩展。随着温度的增加,堆垛层错的数量和堆积复杂程度逐渐升高,WLP的硬化效果更加显著。温度增至250 °C时,受热激活与位错湮灭的影响,堆垛层错的数量和堆积复杂程度有所降低,WLP的硬化效果随之下落。从激光温喷丸诱导产生的加工硬化程度来看,激光温喷丸单晶铜材料的最佳喷丸温度在200 °C左右。

#### 参考文献

- 1 C Ye, Y L Liao, S Suslov. Ultrahigh dense and gradient nano-precipitates generated by warm laser shock peening for combination of high strength and ductility[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2014, 609: 195–203.
- 2 Meng Xiankai, Huang Shu, An Zhongwei, *et al.*. Finite element analysis of shock wave pressure induced by warm laser peening[J]. *Acta Optica Sinica*, 2013, 33(s1): s114014.  
孟宪凯, 黄舒, 安中伟, 等. 激光温喷丸过程中冲击波压力的有限元分析[J]. *光学学报*, 2013, 33(s1): s114014.
- 3 C Ye, S Sergey, B J Kim, *et al.*. Fatigue performance improvement in AISI 4140 steel by dynamic strain aging and dynamic precipitation during warm laser shock peening[J]. *Acta Materialia*, 2011, 59(3): 1014–1025.
- 4 N N Nedialkov, S E Imamova, P A Atanasov, *et al.*. Mechanism of ultrashort laser ablation of metals: molecular dynamics simulation[J]. *Applied Surface Science*, 2005, 247(1–4): 243–248.
- 5 Liu Xuan, Wang Yang. Femtosecond laser ablation of metals: a molecular dynamics simulation study[J]. *Chin Opt Lett*, 2005, 3(1): 57–59.
- 6 E M Bringa, J U Cazamias, P Erhart. Atomistic shock Hogoniot simulation of single-crystal copper[J]. *Journal of Applied Physics*, 2004, 96(7): 3793–3799.
- 7 Lu Jinzhong, Luo Kaiyu, Feng Aixun, *et al.*. Micro-structural enhancement mechanism of LY2 aluminum alloy by means of a single laser shock processing[J]. *Chinese J Lasers*, 2010, 37(10): 2662–2666.  
鲁金忠, 罗开玉, 冯爱新, 等. 激光单次冲击LY2铝合金微观强化机制研究[J]. *中国激光*, 2010, 37(10): 2662–2666.
- 8 Li Xingcheng, Zhang Yongkang, Lu Yalin, *et al.*. Research of corrosion resistance for AZ31 magnesium alloy by laser shock peening[J]. *Chinese J Lasers*, 2014, 41(4): 0403002.  
李兴成, 张永康, 卢雅琳. 激光冲击AZ31镁合金抗腐蚀性能研究[J]. *中国激光*, 2014, 41(4): 0403002.
- 9 G Tani, L Orazi, A Fortunato, *et al.*. Warm laser shock peening: new developments and process optimization[J]. *CIRP Annals—Manufacturing Technology*, 2011, 60(1): 219–222.
- 10 M S Daw, M I Baskes. Semiempirical, quantum mechanical calculation of hydrogen embrittlement in metals[J]. *Phys Rev Lett*, 1983, 50(17): 1285–1288.
- 11 Chen Kaiguo, Zhu Wenjun, Ma Wen, *et al.*. Propagation of shockwave in nanocrystalline copper molecular dynamics simulation[J]. *Acta Physica Sinica*, 2010, 59(2): 1225–1232.

- 陈开果, 祝文军, 马 文, 等. 冲击波在纳米金属铜中传播的分子动力学模拟[J]. 物理学报, 2010, 59(2): 1225-1232.
- 12 LAMMPS Documentation manual[M]. <http://lammps.sandia.gov/doc/Manual.html>. 2013.
- 13 Bai Qingshun, Tong Zhen, Liang Yingchun. Simulation of scale dependency on tensile mechanical properties of single crystal copper Nano-Rod[J]. Acta Metallurgica Sinica, 2010, 46(10): 1173-1180.  
白清顺, 童 振, 梁迎春. 单晶Cu纳米杆拉伸力学特性的尺寸依赖性模拟[J]. 金属学报, 2010, 46(10): 1173-1180.
- 14 J Friedel. Dislocations[M]. Wang Yu, Transl. Beijing: Science Press, 1984: 93-95.  
J.弗里埃德尔. 位错[M]. 王 煜, 译. 北京: 科学出版社, 1984: 93-95.
- 15 Wang Yanan, Chen ShuJiang, Dong Xichun. Dislocation Theory and Application[M]. Beijing: Metallurgical Industry Press, 2007: 80-82.  
王亚男, 陈树江, 董希淳. 位错理论及其应用[M]. 北京: 冶金工业出版社, 2007: 80-82.
- 16 He Anmin, Shao Jianli, Qin Chengsen, *et al.*. Molecular dynamics simulation of the anisotropy of surface melting of metal Al[J]. Acta Physica Sinica, 2009, 58(8): 5667-5672.  
何安民, 邵建立, 秦承森, 等. 单晶Cu冲击加载及卸载下塑性行为的微观模拟[J]. 物理学报, 2009, 58(8): 5667-5672.
- 17 R C Picu, A Majorell. Mechanical behavior of Ti-6Al-4V at high and moderate temperatures-Part II: constitutive modeling[J]. Mat Sci Eng A, 2002, 326(2): 306-316.

栏目编辑: 殷建芳