



成绩

# 中国农业大学

## 科研训练课程报告

(2023-2024 学年秋季学期)

论文题目: 体心立方金属的位错动力学研究

课程名称: 工程力学科研训练

任课教师: 沈雨佳

班 级: 工力 201

学 号: 2020310020119

姓 名: 张家瑞

# 目录

1 引言.....	2
2 研究背景与意义.....	2
2.1 位错.....	2
2.2 位错滑移速度.....	4
2.3 热激活与相对论效应.....	5
2.4 位错与塑性流动.....	6
3 发展动态.....	7
3.1 多尺度模拟.....	7
3.2 离散位错动力学.....	7
3.3 ParaDiS 并行位错动力学模拟软件 .....	8
4 研究工作.....	9
5 研究计划.....	10
6 已完成工作.....	11
7 总结.....	13
参考文献.....	15

# 体心立方金属的位错动力学研究

## 1 引言

这份开题报告概述了我在 2023-2024 学年春季学期攻读工学学士学位期间的研究计划。

位错作为晶体中的线缺陷，对材料的屈服和塑性变形起着关键作用。位错滑移速度取决于施加的剪切应力、晶体纯度、温度和位错类型等因素。研究表明，位错速度与应力之间的关系可分为三个阶段，其中包括热激活效应和相对论效应的影响。离散位错动力学是一种重要的研究方法，它将位错线离散成多个直线段，通过追踪位错线的运动和碰撞来描述材料的塑性变形行为。ParaDiS 程序作为一款基于 Linux 的主流并行位错模拟软件，但在考虑温度影响时存在局限性。

该研究的目的是基于热激活和相对论效应，建立考虑温度影响下位错移动速度与切应力之间关系的模型，并将其整合到 ParaDiS 程序中。通过这一模型，我们的研究旨在深入探究温度变化对金属材料中位错移动、屈服应力以及塑性变形等方面的影响。我们计划获取应力与应变关系曲线、位错密度随应变变化的关系，研究温度对屈服应力的影响，进一步探讨温度影响下的加工硬化机制，并考虑高温蠕变特性等因素。最终，我们将研究结果与实验数据进行对比，并提供合理的理论解释。这一研究旨在为理解金属材料在不同温度条件下的力学行为提供深入的认识。

## 2 研究背景与意义

### 2.1 位错

通过原子尺度的研究有助于我们理解材料的宏观特性。金属和许多重要的非金属固体都是结晶体，其组成原子以周期、有序的方式在三维空间中排列<sup>[1]</sup>。原子的排列方式由其晶体结构描述，而大多数纯金属具有简单的晶体结构。常见的有体心立方（body-centered cubic, BCC）、面心立方（face-centered cubic, FCC）和密排六方（hexagonal close-packed, HCP）<sup>[1]</sup>。模型结构如图 1 所示。

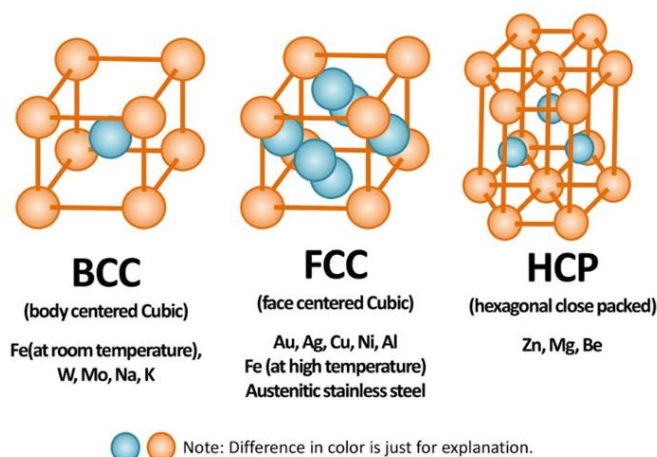


图 1 体心立方、面心立方、六方最密堆积金属模型

人们发现，从原子角度计算得到的单晶塑性变形所需的切应力值远高于实验值，而位错理论成功解释了这一现象<sup>[2]</sup>。位错理论认为，晶体实际的滑移过程并非滑移面两边的所有原子都同时做整体刚性滑动，而是通过晶体内的线缺陷，称为位错，来进行的<sup>[2]</sup>。在较低应力作用下，位错就开始移动，导致滑移面上的原子相继发生相对位移<sup>[2]</sup>。可以将这过程类比为一张地毯上出现了褶皱，通过移动地毯上的褶皱来推动整个地毯的移动，相比直接移动整个地毯更为容易。或者类比为堆木板，依次滑动木板要比同时滑动它们更为容易。

位错是晶体中的线缺陷之一，表示为晶体内部局部原子排列的异常，主要分为刃型位错、螺型位错和混合位错<sup>[2]</sup>。位错是导致屈服和塑性变形的根源，对理解晶体的物理和力学性质至关重要<sup>[1, 2]</sup>。如图 2 所示，为应力与应变关系曲线。在施加的应力小于屈服应力时，材料处于弹性变形阶段。在微观层面上，这是由分子键之间的弹性关系决定的。然而，当应力超过屈服应力时，位错的存在导致了微观层面上原子的滑移，从而引发了塑性变形。

在晶体中，位错的运动主要有两种基本形式：滑移和攀移。位错滑移是指位错线在它及其伯格斯矢量构成的平面内移动，而位错攀移是位错线垂直其伯格斯矢量而离开滑移面<sup>[1]</sup>。在扩散困难的低温条件下，如果没有点缺陷的非平衡浓度，位错攀移很难发生<sup>[1]</sup>。在此，我们将只关注位错的滑移。

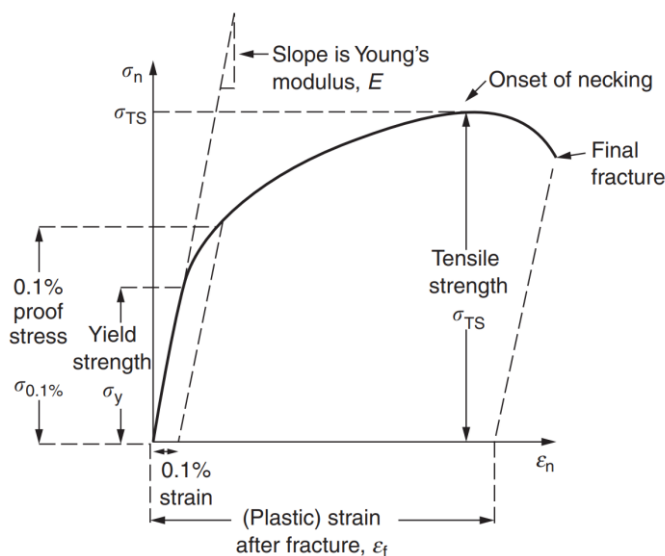


图 2 应力与应变关系曲线

## 2.2 位错滑移速度

位错的运动引发了塑性变形，因此研究位错滑移速度对我们理解屈服和塑性变形过程至关重要<sup>[2]</sup>。位错的滑移速度受到施加的剪切应力、晶体纯度、温度和位错类型等因素的影响<sup>[1, 3]</sup>。已有许多研究通过实验方法获得了纯金属或合金中位错移动速度与应力、温度之间的关系<sup>[4, 5]</sup>。外加应力与位错平均速度的大致关系如图 3 所示<sup>[6]</sup>。可以使用经验公式

$$v = A\tau^m \quad (1)$$

进行拟合，其中  $v$  为位错移动平均速度， $\tau$  为施加的剪应力， $A$  为常数， $m$  为幂律拟合指数<sup>[6]</sup>。

尽管不同材料在不同温度下的实验结果存在较大差异，但普遍认为位错移动速度和剪应力之间的关系可以分为三个阶段<sup>[3]</sup>：在低外加应力下，幂律指数  $m > 1$ ，这是由热激活效应引起的；随着应力的增加，指数  $m$  逐渐减小，当施加应力超过 Peierls 应力势垒  $\tau_p$  时，达到准线性状态，此时指数  $m \approx 1$ ，这一机制被称为“粘性阻力机制”。在这种情况下，方程式 1 可以被表达为

$$Bv = \tau b, \quad (2)$$

其中  $B$  是阻力系数， $b$  为伯格矢量。在适用的速度范围内， $B$  主要受晶格振动（声子）散射影响。在低温条件下，声子的数量较少，因此  $B$  会减小。一般认为  $B$  与温

度 $T$ 成正比例<sup>[7]</sup>；对于高应力情况，当位错移动速度接近剪切波速度 $c_s = \sqrt{G/\rho}$ ，其中 $G$ 是剪切模量， $\rho$ 是材料密度，此时指数 $m < 1$ ，相对论效应被认为是主导因素。热激活与相对论阶段的解析表达式将在下一节中说明。

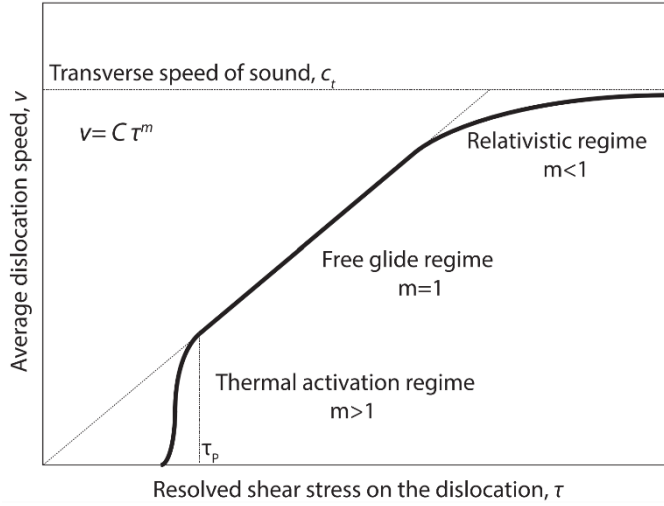


图 3 位错平均速度与切应力关系的三个阶段

### 2.3 热激活与相对论效应

在施加应力较小的情况下，应力不足以克服位错滑移的热力学势垒。因此，位错需要依靠热能来启动滑移过程。在这种情况下，位错的运动速度可以通过过渡态理论来描述，其滑移速度可表示为<sup>[8]</sup>

$$v = v_0 b \exp\left(-\frac{\Delta G(\tau, T)}{k_B T}\right), \quad (3)$$

其中 $v_0$ 为试验频率， $\Delta G$ 为活化自由能， $k_B$ 为玻尔兹曼常数。位错线的试验频率 $v_0$ 大约在 $10^{11} \text{s}^{-1}$ 的数量级<sup>[9]</sup>，这是由原子振动决定的。

式 3 中的活化自由能与温度和切应力相关，考虑<sup>[10]</sup>

$$\Delta G(\tau, T) = E_a(\tau) \left(1 - \frac{T}{T_m}\right), \quad (4)$$

其中 $T_m$ 为表面有序无序转变温度，而在最开始研究中人们认为 $T_m$ 为熔点温度<sup>[11]</sup>。由于两者差别较小<sup>[12]</sup>，在此认为 $T_m$ 近似等同为熔点温度。

位错滑移的活化自由能可以通过分子动力学计算获得<sup>[13-16]</sup>，而活化自由能与应力之间的关系可以用多种经验形式进行拟合<sup>[8]</sup>。其中，人们经常使用 Kocks 形式进行拟合，即<sup>[17]</sup>

$$E_a(\tau) = E_0 \left[ \left( 1 - \frac{\tau}{\tau_c} \right)^p \right]^q, \quad (5)$$

其中 $E_0$ 为切应力为零时位错移动的活化能， $p$ 和 $q$ 是拟合参数， $\tau_c$ 是0K时的 Peierls 应力。

随着应力的增加，位错的速度并非无限制增加，而是存在一个最大临界值，即剪切波速度。这通常可以用下述表达式来描述<sup>[18]</sup>

$$v = \frac{\bar{v}}{\sqrt{1 + \frac{\bar{v}^2}{c_s^2}}}. \quad (6)$$

## 2.4 位错与塑性流动

动态载荷作用下材料的塑性变形行为与位错行为之间的关系可以由 Orowan 方程描述<sup>[19]</sup>:

$$\dot{\gamma}_{ij} = \sum_{\beta} \rho_M^{\beta} V_D^{\beta} b_i^{\beta} n_j^{\beta} + \dot{\rho}^{\beta} \bar{l} b_i^{\beta} n_j^{\beta}, \quad (7)$$

式中：上标 $\beta$ 表示滑移系， $\rho_M$ 为运动位错密度， $b$ 为伯格斯矢量， $n$ 为滑移面法向矢量， $V_D$ 为位错速度， $\bar{l}$ 为位错运动的平均距离， $\dot{\rho}$ 为位错生成速率。基于这一物理图像，动态载荷作用下位错行为的研究大致可以分为两类：位错速度演化行为研究和位错密度演化行为研究。在此我们考虑位错速度演化的研究。

在有限变形的连续介质力学模型中<sup>[13]</sup>，有变形梯度张量

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^* \mathbf{F}_p, \quad (8)$$

其中 $\mathbf{F}^*$ 与 $\mathbf{F}_p$ 分别为弹性和塑性变形梯度，塑性变形梯度的时间速率可以表示为

$$\dot{\mathbf{F}}_p = \mathbf{L}_p \mathbf{F}_p, \quad (9)$$

其中塑性变形速度梯度

$$\mathbf{L}_p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{\alpha} \mathbf{S}_0^{\alpha}, \quad (10)$$

塑性剪切速率

$$\mathbf{S}_0^{\alpha} = \mathbf{m}_0^{\alpha} \otimes \mathbf{n}_0^{\alpha}, \quad (11)$$

其中 $\mathbf{m}_0^{\alpha}$ 与 $\mathbf{n}_0^{\alpha}$ 是固定的正交单位向量，分别定义为滑移系的滑移平面和滑移平面

法线，塑性剪切速率 $\dot{\gamma}^\alpha$ 与位错滑动速度之间的关系可以用公式7描述。

因此我们可以通过建立位错滑移速度和切应力之间的关系来构建出应变和应力的本构关系。

### 3 发展动态

#### 3.1 多尺度模拟

随着位错理论的提出，人们在不同的空间尺度上开发了多种计算方法，以深入了解位错的行为和影响。这些方法主要分为原子尺度和介观尺度两种，原子尺度涵盖了第一性原理、分子动力学模拟和蒙特卡罗计算，而介观尺度则包括离散位错动力学、连续位错动力学、动力蒙特卡罗方法和相场方法等<sup>[1, 19, 20]</sup>。在一定加载条件下，原子尺度上的位错形核、增殖和反应等行为与介观尺度上的位错集体演化行为共同影响着材料的宏观动态变形行为<sup>[19]</sup>。然而，这些模拟方法都存在各自的局限性，比如分子动力学难以处理较大空间尺度和较大变形下的塑性变形行为，而离散位错动力学则很难描述宏观尺度的塑性变形行为<sup>[1, 19]</sup>。因此，多尺度的研究对于进一步理解材料的屈服和塑性变形行为至关重要<sup>[19, 21]</sup>。在这项研究中，我们主要关注离散位错动力学。

#### 3.2 离散位错动力学

当前的预测计算工具采用并行和分层多尺度方法，将原子域与连续域紧密联系，用于研究金属和合金的物理性质，尤其是塑性变形<sup>[22]</sup>。在这一多尺度策略中，通常在微观尺度对位错系综的集体动力学进行研究，运用了离散位错弹性理论。这一理论在 20 世纪 60 年代中期首次提出，当时的开创性思想是通过直接模拟离散位错的静态和动态行为来预测晶体的塑性特性<sup>[22]</sup>。尽管有几位作者在此领域有过贡献，直到 20 世纪 80 年代末，才正式创造了离散位错动力学这一术语，以摆脱二维计算机模拟的限制，更清晰地阐明位错模式演化的物理机制和条件<sup>[22]</sup>。

自 20 世纪 80 年代以来，随着计算条件的不断改善，涌现了大量的二维离散位错动力学模拟工具<sup>[23]</sup>。这些工具通常仅考虑无限长的直刃位错组，从垂直位错



线的平面视角看,每根位错线都对应一个带有滑移系特征的离散点<sup>[22]</sup>。Deshpande 等人在有限变形框架下发展了二维离散位错动力学,通过模拟拉伸试验得出的结果显示,当限制拉伸轴的旋转时,会引起几何必需位错密度的累积,从而弱化尺寸效应而强化包辛格效应<sup>[23]</sup>。近年来,这些计算工具已经发展成为复杂的三维代码,用于深入研究位错塑性的基本机制。

离散位错动力学的基本思路是首先将位错线分离为具有一定长度的位错段,然后计算位错段受到的力,并进一步计算在一定温度等条件下的位错运动速度,以此更新位错的位置<sup>[24]</sup>。当位错之间距离很近时,根据能量法则判断它们是否发生相互反应<sup>[24]</sup>。此外,对于螺型位错,还需要判断它们是否发生交滑移机制,并相应地更新外部加载条件,同时计算位错引起的塑性应变。整个过程不断循环,直到加载完成,以实现材料塑性变形的描述<sup>[19]</sup>。

目前,主流的三维离散位错动力学程序包括劳伦斯利弗莫尔国家实验室开发的 ParaDiS 程序<sup>[25, 26]</sup>、加州大学洛杉矶分校的由 Ghoniem 等开发的程序<sup>[27]</sup>、华盛顿州立大学由 Zbib 等开发的 micr3d 程序<sup>[28]</sup>、由 Needleman 等开发的程序<sup>[29]</sup>以及法国的 Kubin 等开发的 MobiDic 程序<sup>[30-32]</sup>。

### 3.3 ParaDiS 并行位错动力学模拟软件

ParaDiS (Parallel Dislocation Simulator) 作为一款主流并行位错模拟器,能够追踪每条位错线的运动、演化、碰撞、相交或解离等行为,在大规模并行计算机上模拟单晶体的应变硬化。其主要算法包括 $O(N)$ 力计算、运动方程、时间积分、自适应网格细化、位错核心反应的处理、数据的动态分布、计算机上并行运算<sup>[26]</sup>。基于 ParaDiS,人们取得了许多重要的研究成果,例如研究了应力与应变关系曲线,位错密度随应变的变化关系,温度对屈服应力的影响,进一步研究温度影响下的加工硬化机制,并将最终结果与实验结果进行对比<sup>[33-36]</sup>。作为开源软件,ParaDiS 的框架不断得到完善,近年来已有研究人员根据已有的代码引入了一些新特性,例如引入 HCP 晶体<sup>[37]</sup>、三维弹性动力场<sup>[38]</sup>以及构建空位错相互作用模型<sup>[39]</sup>。

然而,在 ParaDiS-release2.7 中,并未考虑温度效应,即位错移动速度与切应

力的关系被设定为线性，遵循公式 2。这种设定方式导致大部分模拟结果缺乏屈服强度的特征。尽管有研究利用分子动力学模拟结果得到了位错速度与切应力之间的非线性函数，并将其与位错动力学相结合，但这些研究只是给出了现象学定律，并未提供一个通用的本构关系<sup>[40]</sup>。

基于上述原因，这项工作的目标是基于热激活和相对论效应，建立考虑温度影响下位错移动速度与切应力之间关系的模型，并将其整合到 ParaDiS 程序中。通过这个模型，我们旨在深入研究温度变化对金属材料中位错移动、屈服应力以及塑性变形等方面的影响。

## 4 研究工作

在这项工作中，我们将基于热激活和相对论效应，建立考虑温度影响下位错移动速度与切应力之间关系的模型，并将其整合到 ParaDiS 程序中，利用修改后的程序，研究温度变化对金属材料中位错移动、屈服应力以及塑性变形等方面的影响。我们计划获取应力与应变关系曲线、位错密度随应变变化的关系，研究温度对屈服应力的影响，进一步探讨温度影响下的加工硬化机制，并考虑高温蠕变特性等因素。最终，我们将研究结果与实验数据进行对比，并提供合理的理论解释。这一研究旨在为理解金属材料在不同温度条件下的力学行为提供深入的认识。

下图 4 即为研究方案：

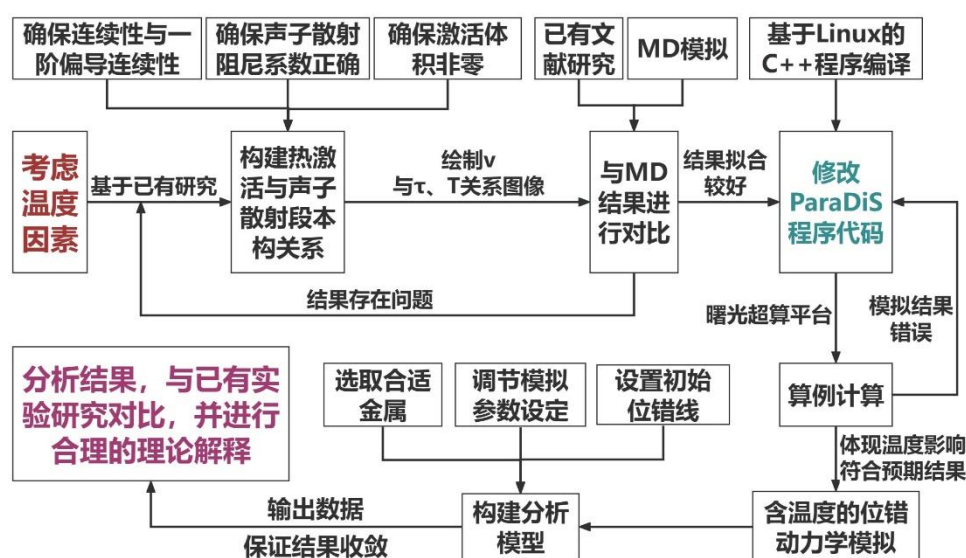


图 4 研究技术路线

我们将基于已有研究，考虑温度因素，构建热激活与声子散射段本构关系，并于分子动力学结果进行对比，之后修改 ParaDiS 程序代码，进行含温度的位错动力学模拟，最终分析结果，与已有研究对比，并进行合理的理论解释。

对于位错动力学模拟，其输入文件分为控制参数文件 .ctrl 与节点数据文件 .data，其中又包含数据文件参数，域分解和节点数据。

本研究的难点与创新点如表 1 所示。

难点	创新点
构建本构关系，完善热激活与相对论效益	考虑了温度因素，并且保证模型连续与一阶偏导连续
基于 Linux 的 C++ 程序编译，修改 ParaDiS 代码	模型涵盖到高温蠕变情况
初始模型的构建以及模拟参数的选取	规避了位错动力学模拟中缺乏屈服强度的特征
结果的分析与对照	参考分子动力学模拟结果，实现多尺度模拟

表 1 难点与创新点

## 5 研究计划

研究计划如表 2 所示。

步骤	时间	内容
1	10 月 1 日—11 月 20 日	理论知识学习
2	11 月 21 日—12 月 20 日	BCC 金属本构关系建模
3	12 月 21 日—2 月 10 日	调试 ParaDiS 代码
4	2 月 11 日—2 月 29 日	完善 FCC 金属本构关系建模
5	3 月 1 日—4 月 20 日	位错动力学模拟
6	4 月 21 日—5 月 10 日	总结成果并形成论文

表 2 研究计划

在接下来的研究中，我们将前面构建的 BCC 金属的本构关系为基础，修改 ParaDiS 程序中的 MobilityLaw 模块。同时，我们将深入探讨该模型的普适性，并努力扩展其适用范围，包括对 FCC 金属的适用性。之后，构建研究模型和输入文件，利用位错动力学模拟，研究温度变化对金属材料中位错移动、屈服应力以及塑性变形等方面的影响。并最终归纳总结研究成果，撰写论文。

## 6 已完成工作

在过去的三个月里，我们基于已有研究，构造出激活体积非零情况的位错滑移激活能函数形式，并在保证连续与一阶偏导连续的情况下构建出本构关系。最终结果与分子动力学结果进行比对，模型的拟合程度较好。

在热激活阶段，即  $\tau < \tau_c$  时，我们考虑净平均位错移动速率。这是因为位错移动并非总是朝着同一个方向，有时也会逆向移动。在这种情况下，位错的移动速度可表示为<sup>[8]</sup>

$$v = v_0 b \left[ \exp\left(-\frac{\Delta G(\tau, T)}{k_B T}\right) - \exp\left(-\frac{\Delta G(-\tau, T)}{k_B T}\right) \right], \quad (12)$$

其中  $\Delta G(-\tau, T)$  为位错逆向移动的活化能。值得注意的是，当处于高温低应力下，公式7通过近似处理可以描述蠕变现象<sup>[8]</sup>。

当  $\tau > \tau_c$ ，即  $\Delta G(\tau_c, T) = 0$  时，位错移动速度受声子散射的主导，在这之后，位错移动速度与切应力呈线性关系，即遵循公式2。为了连接热激活阶段与声子散射阶段，我们考虑速度-应力函数在  $\tau = \tau_c$  处的连续性及其一阶偏导数的连续性，因此，我们得到了

$$v = v_0 b \left[ 1 + \frac{\tilde{V}_c}{k_B T} (\tau - \tau_c) \right], \quad (13)$$

其中  $\tilde{V}_c$  为激活体积。据公式4，激活体积可表示为

$$\tilde{V}_c = -\left. \frac{\partial \Delta G(\tau, T)}{\partial \tau} \right|_{\tau=\tau_c} = -\left. \frac{\partial E(\tau)}{\partial \tau} \right|_{\tau=\tau_c} \cdot \left(1 - \frac{T}{T_m}\right) = V_c \left(1 - \frac{T}{T_m}\right), \quad (14)$$

通过变换，有声子散射系数

$$B = \frac{k_B T}{\tilde{V}_c v_0}, \quad (15)$$

然而，如果我们采用公式5中的活化能拟合函数，会导致在 $\tau = \tau_c$ 处激活体积 $\tilde{V}_c$ 恒等于零，这无法满足一阶偏导数连续的要求。这种拟合形式也会在位错成核建模中产生数值问题，特别是当激活体积被确定并积分到激活能时<sup>[41]</sup>。

为此，我们考虑另外一种拟合形式<sup>[42]</sup>

$$E_a(\tau) = \frac{E_0}{1 - e^\alpha} \left[ 1 - \exp \left( \alpha \left( 1 - \frac{\tau}{\tau_c} \right) \right) \right], \quad (16)$$

尽管这种拟合形式保证了在 $\tau = \tau_c$ 处有非零的激活体积，但相较于公式5，该拟合形式的拟合结果不够精确。在公式5中有两个拟合参数，而在公式16中只有一个。

因此，在保证激活体积非零的情况下，我们对该形式进行了修正，得到了：

$$E_a(\tau) = \frac{E_0}{1 - e^\alpha} \left[ 1 - \exp \left( \alpha \left( 1 - \left( \frac{\tau}{\tau_c} \right)^\beta \right) \right) \right], \quad (17)$$

这时激活体积可表示为：

$$\tilde{V}_c = - \left. \frac{\partial \Delta G(\tau, T)}{\partial \tau} \right|_{\tau=\tau_c} = - \frac{A\alpha\beta}{\tau_c} \left( 1 - \frac{T}{T_m} \right). \quad (18)$$

为了确保声子散射系数 $B$ 与温度 $T$ 成正比例关系<sup>[7]</sup>，我们考虑了 $\tau_c$ 与温度的相关性<sup>[43]</sup>，即

$$\tau_c(T) = \tau_c(0) \left( 1 - \frac{T}{T_m} \right), \quad (19)$$

于是，声子散射系数可表示为：

$$B = \frac{k_B T}{\tilde{V}_c v_0} = - \frac{k_B T}{A\alpha\beta v_0} \frac{T_m}{T_m - T} \tau_c = - \frac{k_B \tau_c(0)}{A\alpha\beta v_0} T. \quad (20)$$

对于相对论效应的处理，我们可以按照公式6进行设置。我们以 BCC 金属 W 中的螺旋位错为例，验证了上述本构关系的正确性<sup>[14]</sup>。图 5 展示了根据公式12进行的激活能拟合情况。根据公式6, 12, 13，得到的位错移动速度与切应力和温度的关系曲线，如图 6 所示。所得结果与分子动力学模拟结果拟合较好。

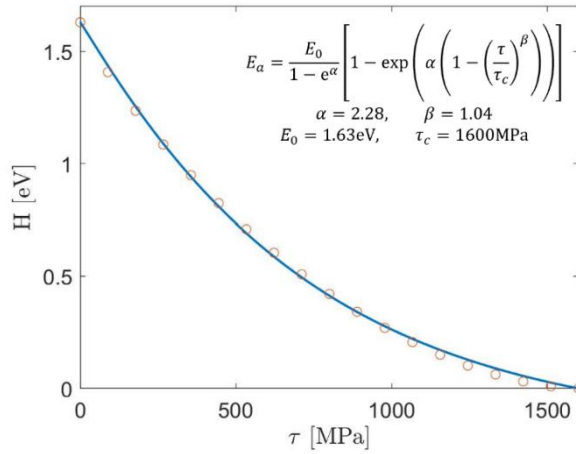


图 5 根据公式17的金属 W 中螺型位错激活能与切应力拟合

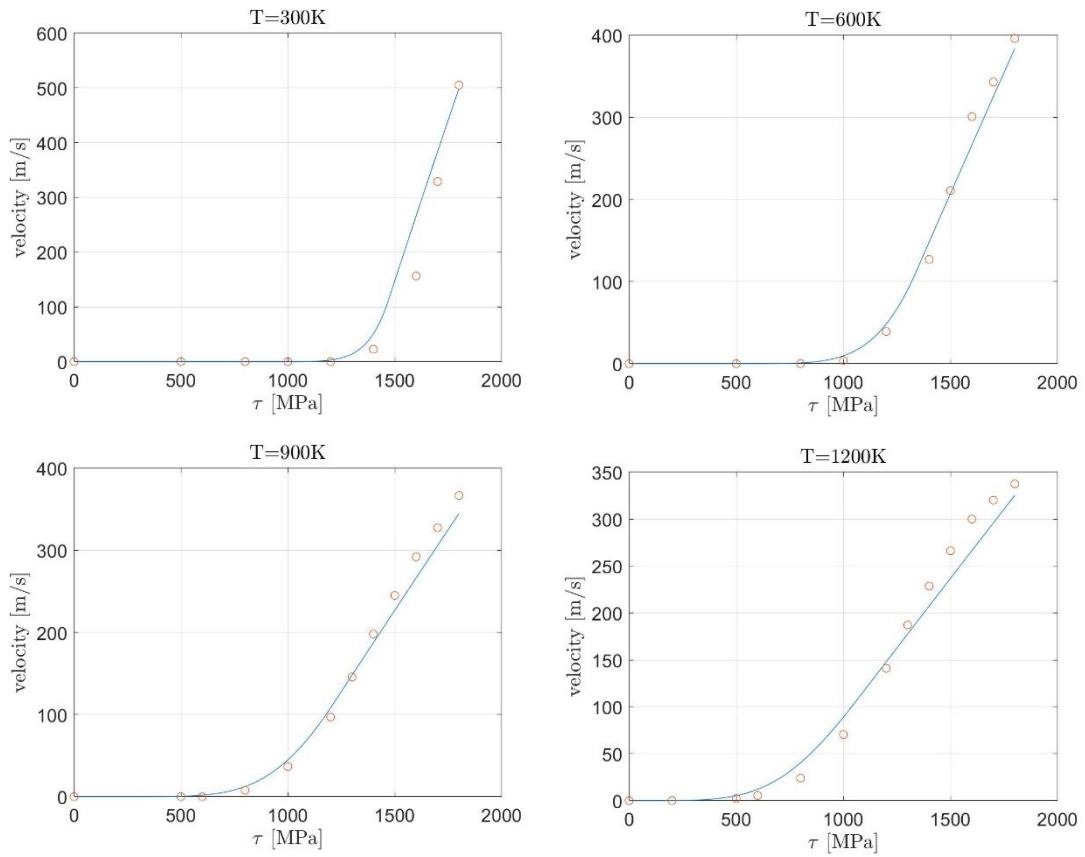


图 6 位错移动速度和切应力拟合

## 7 总结

位错是晶体中的一种线性缺陷，在材料的屈服和塑性变形中有着重要作用。位错滑移速度取决于施加的剪切应力、晶体纯度、温度和位错类型等因素。研究表明，位错速度与剪应力之间的关系可分为三个阶段，其中包括热激活效应和相

对论效应的影响。

离散位错动力学是一种重要的研究方法，它将位错线离散成多个直线段，通过追踪位错线的运动和碰撞来描述材料的塑性变形行为。ParaDiS 程序作为主流的并行位错模拟器，但在考虑温度影响时存在局限性。该研究的目标是基于热激活和相对论效应，建立考虑温度影响下位错移动速度与切应力之间关系的模型，并将其整合到 ParaDiS 程序中。

在下一步的研究中，将基于前期构建好的 BCC 金属中的本构关系，修改 ParaDiS 程序中的 MobilityLaw 模块。同时，我们将探究模型的普适性，并尽可能涵盖到 FCC 金属。之后，利用位错动力学模拟探究温度变化对金属材料中位错移动、屈服应力以及塑性变形等方面的影响。通过这一模型，我们的研究旨在深入探究温度变化对金属材料中位错移动、屈服应力以及塑性变形等方面的影响。我们计划获取应力与应变关系曲线、位错密度随应变变化的关系，研究温度对屈服应力的影响，进一步探讨温度影响下的加工硬化机制，并考虑高温蠕变特性等因素。最终，我们将研究结果与实验数据进行对比，并提供合理的理论解释。这一研究旨在为理解金属材料在不同温度条件下的力学行为提供深入的认识。最后总结成果并形成论文。

## 参考文献

- [1] Hull D, Bacon D J. Introduction to dislocations[M]. Elsevier, 2011
- [2] Ashby M F, Jones D R. Engineering materials 1: an introduction to properties, applications and design[M]. Elsevier, 2012
- [3] Gurrutxaga Lerma B, Verschueren J, Sutton A P, Dini D. The mechanics and physics of high-speed dislocations: A critical review[J]. International Materials Reviews, 2021,66(4):215-255.
- [4] Johnston W G, Gilman J J. Dislocation velocities, dislocation densities, and plastic flow in lithium fluoride crystals[J]. Journal of Applied Physics, 1959,30(2):129-144.
- [5] Stein D F, Low Jr J R. Mobility of edge dislocations in silicon-iron crystals[J]. Journal of Applied Physics, 1960,31(2):362-369.
- [6] Regazzoni G, Kocks U F, Follansbee P S. Dislocation kinetics at high strain rates[J]. Acta metallurgica, 1987,35(12):2865-2875.
- [7] Al'Shitz V A, Indenbom V L. Dynamic dragging of dislocations[J]. Soviet Physics Uspekhi, 1975,18(1):1.
- [8] Argon A. Strengthening mechanisms in crystal plasticity[M]. OUP Oxford, 2007
- [9] Cottrell A H. The Nabarro equation for thermally activated plastic glide[J]. Philosophical Magazine, 2006,86(25-26):3811-3817.
- [10] Zhu T, Li J, Samanta A, Leach A, Gall K. Temperature and strain-rate dependence of surface dislocation nucleation[J]. Physical Review Letters, 2008,100(2):25502.
- [11] Mott N F. Slip at grain boundaries and grain growth in metals[J]. Proceedings of the Physical Society, 1948,60(4):391.
- [12] Elsayed-Ali H E. Dynamics of surface melting[Z]. United States: 1991.
- [13] Narayanan S, McDowell D L, Zhu T. Crystal plasticity model for BCC iron atomistically informed by kinetics of correlated kinkpair nucleation on screw dislocation[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2014,65:54-68.
- [14] Stukowski A, Cereceda D, Swinburne T D, Marian J. Thermally-activated non-Schmid glide of screw dislocations in W using atomistically-informed kinetic Monte Carlo simulations[J]. International Journal of Plasticity, 2015,65:108-130.
- [15] Rodary E, Rodney D, Proville L, Bréchet Y, Martin G. Dislocation glide in model Ni (Al) solid solutions by molecular dynamics[J]. Physical Review B, 2004,70(5):54111.
- [16] Kumagai T, Takahashi A, Takahashi K, Nomoto A. Velocity of mixed dislocations in body centered cubic iron studied by classical molecular dynamics calculations[J]. Computational Materials Science, 2020,180:109721.
- [17] Kocks U F, AS A, MF A. Thermodynamics and kinetics of slip[J]. 1975.
- [18] Gillis P P, Gilman J J, Taylor J W. Stress dependences of dislocation velocities[J]. Philosophical Magazine, 1969,20(164):279-289.
- [19] Yao S, Pei X, Yu J, Yu Y, Bai J, Li P, Wu Q. Overview of the study of dynamical plastic deformation based on dislocation dynamics method[J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2019,33(3):30101-30107.
- [20] Bulatov V, Cai W. Computer simulations of dislocations[M]. OUP Oxford, 2006
- [21] Hartley C S. Multi-scale modeling of dislocation processes[J]. Materials Science and



- Engineering: A, 2001,319:133-138.
- [22] Yinan C, Zhanli L, Jianqiao H. Advances and application of dislocation dynamics in the mechanics of extreme environment[J]. Chinese Jouenal of High Pressure Physics, 2020,34(3):1-18.
- [23] Po G, Mohamed M S, Crosby T, Erel C, El-Azab A, Ghoniem N. Recent progress in discrete dislocation dynamics and its applications to micro plasticity[J]. Jom, 2014,66:2108-2120.
- [24] Weygand D, Mrovec M, Hochrainer T, Gumbsch P. Multiscale simulation of plasticity in bcc metals[J]. Annual Review of Materials Research, 2015,45:369-390.
- [25] Cai W. Atomistic and mesoscale modeling of dislocation mobility[Z]. Massachusetts Institute of Technology, 2001.
- [26] Arsenlis A, Cai W, Tang M, Rhee M, Opperstrup T, Hommes G, Pierce T G, Bulatov V V. Enabling strain hardening simulations with dislocation dynamics[J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2007,15(6):553.
- [27] Ghoniem N A M, Tong S, Sun L Z. Parametric dislocation dynamics: a thermodynamics-based approach to investigations of mesoscopic plastic deformation[J]. Physical Review B, 2000,61(2):913.
- [28] Zbib H M, de la Rubia T D. A multiscale model of plasticity[J]. International Journal of Plasticity, 2002,18(9):1133-1163.
- [29] Van der Giessen E, Needleman A. Discrete dislocation plasticity: a simple planar model[J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 1995,3(5):689.
- [30] Kubin L P, Canova G, Condat M, Devincere B, Pontikis V, Bréchet Y. Dislocation microstructures and plastic flow: a 3D simulation[J]. Solid state phenomena, 1992,23:455-472.
- [31] Devincere B, Madec R, Monnet G, Queyreau S, Gatti R, Kubin L. Modeling crystal plasticity with dislocation dynamics simulations: The “microMegas” code[J]. Mechanics of Nano-objects, 2011,1:81-100.
- [32] Madec R, Kubin L P. Dislocation strengthening in FCC metals and in BCC metals at high temperatures[J]. Acta Materialia, 2017,126:166-173.
- [33] Bulatov V V, Hsiung L L, Tang M, Arsenlis A, Bartelt M C, Cai W, Florando J N, Hiratani M, Rhee M, Hommes G. Dislocation multi-junctions and strain hardening[J]. Nature, 2006,440(7088):1174-1178.
- [34] McElfresh C, Bertin N, Aubry S, Marian J. A parallel discrete dislocation dynamics/kinetic Monte Carlo method to study non-conservative plastic processes[J]. Computational Materials Science, 2022,209:111332.
- [35] Xu Z, Zhang R, Ma J, Qiu D, Peng L. The effect of electric current on dislocation activity in pure aluminum: A 3D discrete dislocation dynamics study[J]. International Journal of Plasticity, 2023,171:103826.
- [36] Akhondzadeh S, Kang M, Sills R B, Ramesh K T, Cai W. Direct comparison between experiments and dislocation dynamics simulations of high rate deformation of single crystal copper[J]. Acta Materialia, 2023,250:118851.
- [37] Li M, Tian X, Jiang W, Wang Q, Fan H. Mechanism of strain hardening of magnesium single-crystals: Discrete dislocation dynamics simulations[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2023,173:105238.

- [38] Yang J, Rida A, Gu Y, Magagnosc D, Zaki T A, El-Awady J A. The three-dimensional elastodynamic solution for dislocation plasticity and its implementation in discrete dislocation dynamics simulations[J]. *Acta Materialia*, 2023,253:118945.
- [39] Liu G, Wu K, Yu P, Cheng X, Shi J, Ye C, Mao Y, Shen Y. Atomically-informed dislocation dynamics model for prediction of void hardening in irradiated tungsten[J]. *International Journal of Plasticity*, 2023,169:103727.
- [40] Starikov S, Tseplyaev V. Two-scale simulation of plasticity in molybdenum: Combination of atomistic simulation and dislocation dynamics with non-linear mobility function[J]. *Computational Materials Science*, 2020,179:109585.
- [41] Faisal A H, Weinberger C R. Exponent for the power-law relation between activation energy for dislocation nucleation and applied stress[J]. *Physical Review Materials*, 2019,3(10):103601.
- [42] Weinberger C R, Jennings A T, Kang K, Greer J R. Atomistic simulations and continuum modeling of dislocation nucleation and strength in gold nanowires[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2012,60(1):84-103.
- [43] Saroukhani S, Warner D H. Investigating dislocation motion through a field of solutes with atomistic simulations and reaction rate theory[J]. *Acta Materialia*, 2017,128:77-86.