

晶体相场法模拟大角度晶界的变形过程*

Phase Field Crystal Modeling for Deformation Process of High-angle Grain Boundaries

罗志荣^{1,2},黄世叶¹,茹谢辛¹,高英俊^{1**}

LUO Zhi-rong^{1,2},HUANG Shi-ye¹,RU Xie-xin¹,GAO Ying-jun¹

(1. 广西大学物理科学与工程技术学院,广西南宁 530004;2. 玉林师范学院物理科学与工程技术学院,广西玉林 537000)

(1. College of Physics Science and Engineering, Guangxi University, Nanning, Guangxi, 530004, China; 2. College of Physics Science and Engineering, Yulin Normal University, Yulin, Guangxi, 537000, China)

摘要:采用晶体相场法模拟大角度晶界在外加应力作用下的变形过程,研究外加应力方向对晶界结构及位错运动的影响。研究表明:大角度晶界在应力作用下通过改变晶界曲率和位错运动使晶界发生迁移;晶界处位错形核所需临界应变与体系所受应力方向有关,其中沿平行晶界方向比沿垂直晶界方向所需临界应变更大。研究结果揭示了晶界是位错的源和汇,不仅能够产生位错,而且能够吸收位错。

关键词:晶体相场法 大角度晶界 位错 应变

中图分类号: TG111.2 文献标识码: A 文章编号: 1005-9164(2013)04-0311-05

Abstract: The deformation process of high-angle grain boundaries (GBs) under an applied stress and the influence of stress direction on dislocation movement were studied by phase field crystal method. The simulation results show that GBs migration occurs by changing the curvature and dislocations movement under an applied stress in high-angle GBs. The magnitude of critical strain for dislocation nucleation at GBs is related to the direction of the operative stress, of which a larger critical strain is needed when the stress is parallel to GBs than vertical to GBs. The simulation results reveal that GBs is the source and sink of dislocation, which can not only produce dislocation, but also absorb dislocation.

Key words: phase field crystal method, high-angle grain boundaries, dislocation, strain

晶界是多晶材料内部晶粒之间的界面,其对多晶材料的强度、塑性和断裂等力学性能有重要的影响。由于晶界通常只有几个原子层厚,难以通过实验直接观测,因此采用计算机模拟实验已经成为研究该原子层次问题的重要方法^[1]。在原子尺度模拟方面,分子

动力学^[2,3]是常用方法之一,但该方法适用的特征时间尺度主要在原子振动时间尺度($10^{-14} \sim 10^{-12}$ s),不易拓展到扩散时间尺度(10^{-6} s),并且,分子动力学要求加载的应变速率很大(通常为 $10^7 \sim 10^{10}$ s⁻¹),与实际工业上的应变速率(约为 10^0 s⁻¹)相差甚远。

近年来, Elder 等人^[4,5]基于密度泛函理论提出的晶体相场模型能够弥补分子动力学的不足。该模型既可以描述晶体学结构特性以及原子尺度的行为,又可以揭示扩散时间尺度的原子及缺陷运动的行为特征,在研究纳米晶材料微结构演化方面有显著优势^[5,6]。目前,已有学者采用晶体相场法对纳米晶材料进行研究。 Hirouchi 等人^[7]采用等体积假设对纳米多晶的变形过程进行了研究。任秀等人^[8]对纯物质晶界结构及运动进行了研究。杨涛等人^[9]对纳米级亚晶结构及其在应力作用下的湮没机制进行了研

收稿日期: 2013-08-05

修回日期: 2013-09-04

作者简介: 罗志荣(1981-),男,博士,主要从事金属材料微观组织结构研究。

* 国家自然科学基金(51161003, 50661001)、广西自然科学基金(2012GXNSFDA053001)、广西大学广西有色金属及特色材料加工重点实验室开放基金(GXKFJ12-01)和 2012 年广西大学本科实验技能与科技创新能力训练项目资助。

** 通讯作者: 高英俊(1962-),男,教授,博士研究生导师,主要从事新材料设计与计算机模拟实验研究。E-mail: gaoyj@gxu.edu.cn。

究。然而采用晶体相场法对大角度晶界的变形过程的研究甚少。

本文采用晶体相场法对大角度晶界的变形过程进行模拟,研究外加应力方向对晶界结构及位错运动的影响,并从能量变化角度分析变形过程中位错运动和位错相互作用的机理。

1 模型与方法

1.1 晶体相场模型

与传统相场模型^[10~13]不同,晶体相场模型采用具有周期性的局域原子密度场变量作为序参量,能够自洽地耦合弹性性能、各向异性以及晶体学对称特性。对于金属材料中的固相,其原子位置呈规则周期性排列;而液相中原子位置随时间随机变化,所以表征液相的原子密度为一个常数。因此,原子密度表达式为^[5]

$$\psi(r,t) = \sum_{n,m} a_{n,m} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} + \psi_0, \quad (1)$$

式中, \vec{G} 为倒格矢, \vec{r} 为空间位置矢量, $a_{n,m}$ 为 Fourier 系数。式(1)中等号右边第 1 项反映晶格原子的周期排列结构特征;第 2 项 ψ_0 为反映液相的原子密度分布的平均值,是一个常量。在二维情况下,三角固相的原子密度 ψ 的表达式为^[5]

$$\psi = A \left[\begin{array}{l} \cos(q_t x) \cos(q_t y / \sqrt{3}) \\ \cos(2q_t y / \sqrt{3}) / 2 \end{array} \right] + \psi_0, \quad (2)$$

式中, $q_t = \sqrt{3}/2$, $A = 4/15(3\psi_0 + \sqrt{-15\gamma - 36\psi_0^2})$ 。

体系无量纲的自由能函数 F 可以写成^[5]

$$F = \int \left\{ \frac{\psi}{2} [\gamma + (1 + \nabla^2)^2] \psi + \frac{\psi^4}{4} \right\} dr, \quad (3)$$

式中, γ 为与温度相关的参数; ∇^2 为 Laplace 算子。

1.2 动力学方程

原子密度的演化用与时间相关的保守场 Cahn-Hilliard 动力学方程描述^[5]

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta \psi} + \zeta = \nabla^2 \{ \psi^3 + [\gamma + (1 + \nabla^2)^2] \psi \} + \zeta, \quad (4)$$

式中, ζ 为满足两点相关性的 Gauss 噪声。

为了提高计算效率,对式(4)采用半隐式 Fourier 谱方法求解,整理可得^[8]

$$\hat{\psi}_{n+1} = \frac{\hat{\psi}_n - k^2 \Delta t \hat{\psi}_n^3}{1 + k^2 \Delta t [\gamma + (1 - k^2)^2]}, \quad (5)$$

式中, $\hat{\psi}_{n+1}$ 和 $\hat{\psi}_n$ 分别为第 $n+1$ 步和第 n 步时原子密度 ψ 在 Fourier 空间的变换形式,其中 $\hat{\psi}_n = \int \psi e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} d\vec{r}$; \vec{k} 为 Fourier 空间的波矢,且 $k^2 =$

$|\vec{k}|^2$; Δt 为空间步长。

1.3 样品制备

根据 Gibbs 自由能公切线法^[5]可得晶体相场模型的二维相图(图 1)。选取参数 $\psi_0 = 0.29$ 、 $\gamma = -0.26$,所选参数对应图 1 中的 A 点。选取 $512 \Delta x \times 512 \Delta y$ 的计算区域(其中 Δx 和 Δy 分别为 x 方向和 y 方向的空间步长),利用式(2)得到含 2 条晶界的纳米晶体的初始样品(图 2)。图 2 中晶粒 1 和晶粒 2 的取向角度分别为 0° 和 29° ,晶界为非对称倾斜大角度晶界,其旋转角 ϕ 为 14.5° 、取向差 θ 为 29° 。可见,晶粒内部的原子规则排列,晶界处有几个原子层厚度的晶格畸变。

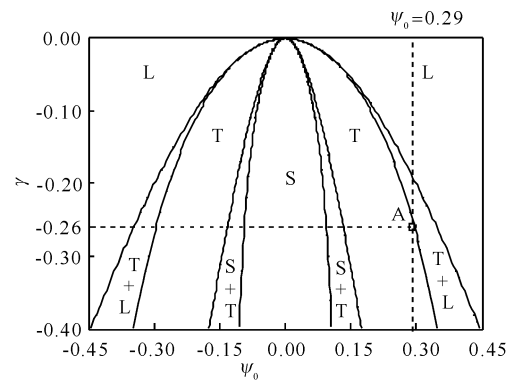


图 1 晶体相场模型的二维相图^[5]

Fig. 1 Two-dimensional phase diagram of phase field crystal^[5]

注:L,S 和 T 分别表示液相、条状相和三角相。

Note:L,S,T indicate liquid,strip,triangular phases, respectively.

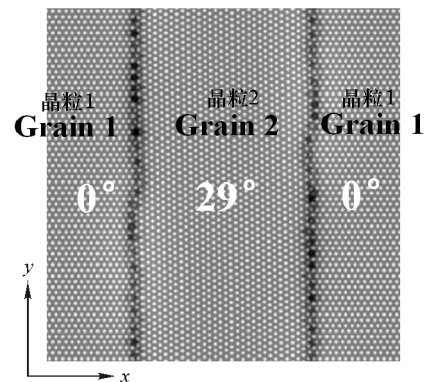


图 2 大角度晶界的形貌

Fig. 2 Morphology of high-angle grain boundaries

1.4 变形模拟的数值化

在样品变形模拟过程中采用等体积假设^[7]。若对样品施加沿 x 方向的拉伸作用,则 x 方向的空间步长在每个时间步均有一个增量 $d = \dot{\epsilon} \Delta x \Delta t$,其中 $\dot{\epsilon}$ 为应变速率。当 n 个时间步后, x 方向和 y 方向的空间步长^[7]分别为

$$\Delta x' = \Delta x + nd = \Delta x(1 + n\dot{\epsilon}\Delta t), \quad (6)$$

$$\Delta y' = \Delta x\Delta y/\Delta x' = \Delta y/(1 + n\dot{\epsilon}\Delta t). \quad (7)$$

本文不涉及具体材料的物性参数,模拟所用参数均已无量纲化处理,并将连续空间离散为四方格子,计算时采用周期性边界条件;选取 $\Delta x = \Delta y = \pi/4$, $\Delta t = 0.5$, $\dot{\epsilon} = 6.0 \times 10^{-6}$ 。在下文的研究中,用箭头表示位错的运动方向,没有标箭头的位错表示静止。

2 结果与分析

从大角度晶界受到沿垂直晶界方向(即 x 方向)拉伸作用的演化图(图 3)可见,随着变形的进行,应力作用和位错塞积使得平直晶界变得弯曲,逐渐出现褶皱(图 3(a));随着应变 ϵ 不断增加,在弯曲晶界的尖点处位错形核(图 3(b)中圆形区域),然后发射进入晶粒内部。其中一部分位错与另一条晶界发射的位错相遇发生湮没(图 3(c)中椭圆区域);其余位错被对面晶界吸收(图 3(d)中位错 E、F、G 和 H)。同时还观察到两个位错由于相互吸引而改变原来的滑移方向,最后相遇并湮没(图 3(d)和(e)中的椭圆区域)。位错湮没的实质是两个 Burgers 矢量相反的位错相遇时两个多余半原子面组合成完整晶格的过程。通过上述位错反应,晶粒内部的位错逐渐消失(图 3(f))。随着变形的继续进行,晶界的尖点处再次形核产生位错并发射进入晶粒内部,然后发生湮没(图 3(g)和(h))。从上述观察可见,晶界是位错的源和汇,不仅能够产生位错,而且能够吸收位错,这与 Tschopp 等人^[14]采用分子动力学的研究结果相一致。图 3(h)中白色虚线表示变形初态的晶界所在位置。可见体系在受到垂直晶界的变形作用时,晶界由于曲率变化和位错运动而发生了整体迁移。

从图 3 中还可以观察到,在变形过程中进入晶粒 1 内部的位错都进行滑移运动(图 3(b)中位错 A1、A2、B1 和 B2),而进入晶粒 2 内部的位错都进行正攀移运动,可见压应力有利于位错发生正攀移。同一晶界向相同方向发射的位错是同号位错,如图 3(b)中位错 A1 和 A2;不同晶界相向发射的位错是异号位错,如图 3(b)中位错 A1 和 B1,图 3(c)中位错 C2 和 D。故两晶界发射的位错在晶粒内部相遇直接湮没。

图 4 为大角度晶界受到 x 方向拉伸作用时体系自由能与应变的关系曲线,其中纵坐标为变形态自由能与变形初态自由能之间的差值。为了方便对比,图 4 中点 A~H 与图 3(a)~(h)相对应。由图 4 可见,在变形初始阶段,体系自由能单调增加,直到应变 $\epsilon = 0.0660$ 时,体系自由能达到极大值(图 4 中 B 点);当一些位错从晶界处发射后,晶界释放了一部分弹性

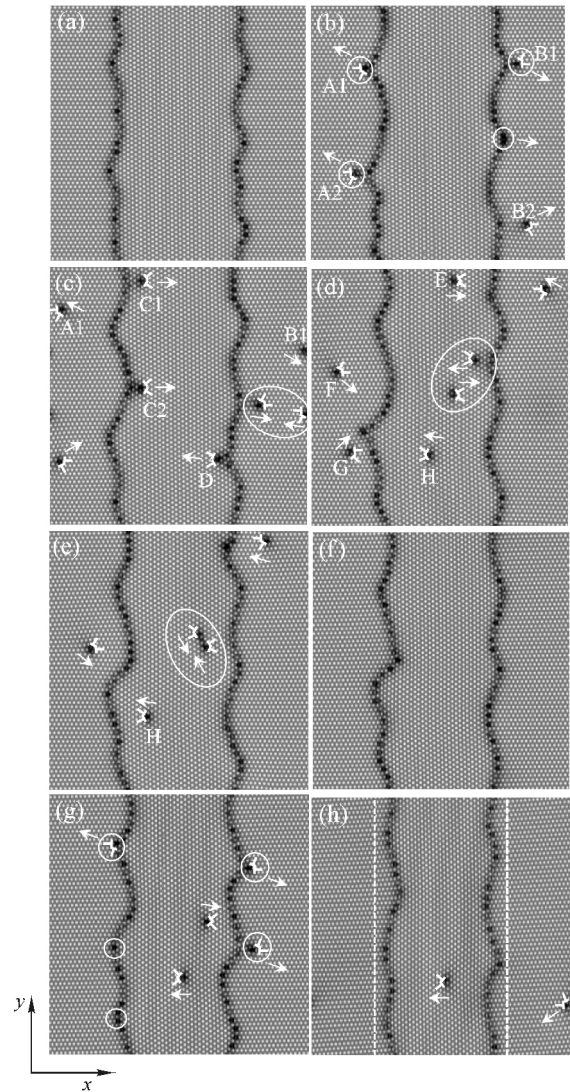


图 3 大角度晶界受 x 方向拉伸作用的变形过程

Fig. 3 Deformation process of high-angle grain boundaries (Tensile axis: x -axis)

(a) $\epsilon = 0.0450$; (b) $\epsilon = 0.0660$; (c) $\epsilon = 0.0735$; (d) $\epsilon = 0.0810$; (e) $\epsilon = 0.0870$; (f) $\epsilon = 0.0990$; (g) $\epsilon = 0.1290$; (h) $\epsilon = 0.1650$.

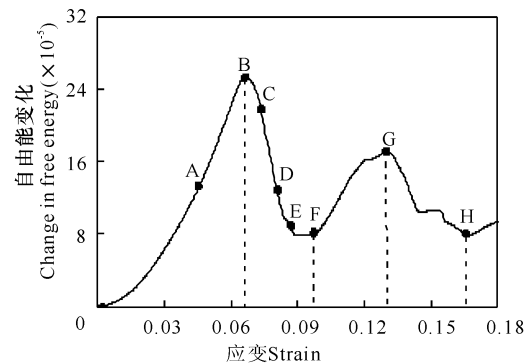


图 4 大角度晶界在 x 方向拉伸作用下体系自由能与应变曲线(图中点 A~H 与图 3(a)~(h)相对应)

Fig. 4 Energy-strain curve of high-angle grain boundaries during tensile deformation along the x -axis (The points from A to H in Fig. 4 corresponding to panels (a)~(h) in Fig. 3, respectively)

畸变能,体系自由能快速下降。当位错进入晶粒内部并通过位错反应(遇到异号位错后湮没或被晶界吸收)全部消失后,此时体系自由能达到极小值(图4中F点)。随着变形的继续进行,当应变增大到 $\epsilon = 0.1290$ 时,晶界再次出现尖点,然后不断产生位错并向晶粒内部发射(图3(g)中圆形区域),对应的体系自由能与应变的关系曲线先上升后快速下降(图4中F-G-H段)。

从大角度晶界受到沿平行晶界方向(即y方向)拉伸作用的演化图(图5)可见,在变形初始阶段,平直晶界的局部区域开始弯曲;当应变 ϵ 增大到0.0870时,在弯曲晶界的褶皱处产生位错(图5(b)中圆圈处),且位错的Burgers方向与x方向近似平行。值得注意的是,图5(b)和图3(b)中在同一晶界的同侧产生的位错,其Burgers矢量的方向不同,如图5(b)中位错A与图3(b)中位错A1,以及图5(b)中位错B

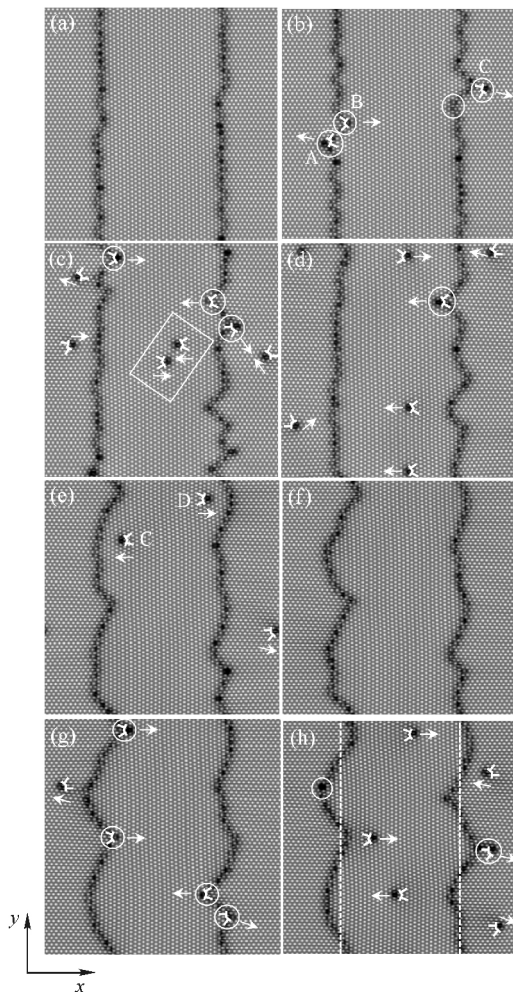


图5 大角度晶界受y方向拉伸作用的变形过程

Fig. 5 Deformation process of high-angle grain boundaries (Tensile axis: y-axis)

(a) $\epsilon = 0.0660$; (b) $\epsilon = 0.0870$; (c) $\epsilon = 0.0990$; (d) $\epsilon = 0.1080$; (e) $\epsilon = 0.1290$; (f) $\epsilon = 0.1425$; (g) $\epsilon = 0.1590$; (h) $\epsilon = 0.1710$.

与图3(c)中位错C2。从图5可见,在晶界处产生的位错均通过负攀移的方式进入晶粒内部,说明拉应力有利于位错进行负攀移。位错在运动过程中,遇到异号位错发生湮没(图5(c)中方框处),或被对面晶界吸收(图5(e)中位错C和D)。在应变较大时,晶界为了释放弹性应变能,晶界曲率不断增大(图5(e)~(f))。图5(h)中白色虚线表示变形初态的晶界所在位置。可见在受到平行于晶界方向的拉伸变形时,晶界难以整体迁移。

图6为大角度晶界受到y方向拉伸作用时体系自由能与应变的关系曲线。对比图4和图6可见,两者的体系自由能变化规律相似,但沿y方向拉伸变形时体系自由能变化峰值的应变值比沿x方向拉伸变形时更大。说明体系受到y方向(即垂直晶界方向)拉伸时位错形核所需的临界应变更大。

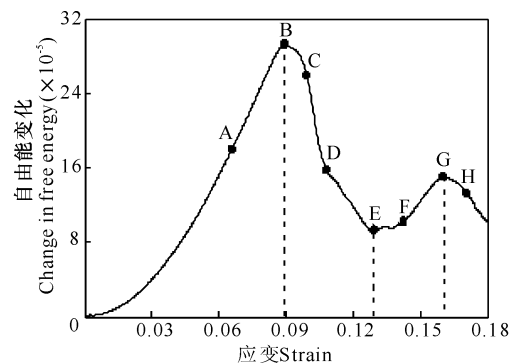


图6 大角度晶界在y方向拉伸作用下体系自由能与应变曲线(图中点A~H与图5(a)~(h)相对应)

Fig. 4 Energy-strain curve of high-angle grain boundaries during tensile deformation along the y-axis (The points from A to H in Fig. 6 corresponding to panels (a)~(h) in Fig. 5, respectively)

3 结论

本文采用晶体相场法研究了外加应力方向对大角度晶界变形过程的影响。研究表明,在应力作用下通过改变晶界曲率和位错运动可以实现大角度晶界的整体迁移,而且垂直于晶界方向的拉伸作用有利于大角度晶界的整体迁移;晶界处位错形核所需临界应变与体系所受应力方向有关,其中沿平行晶界方向比沿垂直晶界方向所需临界应变更大。研究结果揭示了晶界能够产生和吸收位错。

参考文献:

- [1] 张林,王绍青,叶恒强.大角度Cu晶界在升温、急冷条件下晶界结构的分子动力学研究[J].物理学报,2004,8(53):2497-2502.
- [2] Rapaport D C. The art of molecular dynamics simulation

- [M], 2nd ed, England: Cambridge University Press, 2004.
- [3] Yamakov V, Wolf D, Phillpot S R, et al. Dislocation processes in the deformation of nanocrystalline aluminium by molecular-dynamics simulation[J]. *Nature Materials*, 2002, 1: 45-49.
- [4] Elder K R, Katakowski M, Haataja M, et al. Modeling elasticity in crystal growth[J]. *Physical Review Letters*, 2002, 88(24): 245701.
- [5] Elder K R, Grant M. Modeling elastic and plastic deformations in nonequilibrium processing using phase field crystals[J]. *Physical Review E*, 2004, 70(5): 51605.
- [6] 高英俊, 罗志荣, 黄创高, 等. 晶体相场方法研究二维六角相向正方相结构转变[J]. *物理学报*, 2013, 62(5): 50507.
- [7] Hirouchi T, Takaki T, Tomita Y. Development of numerical scheme for phase field crystal deformation simulation[J]. *Computational Materials Science*, 2009, 44(4): 1192-1197.
- [8] 任秀, 王锦程, 杨玉娟, 等. 纯物质晶界结构及运动的晶体相场法模拟[J]. *物理学报*, 2010, 59(5): 3595-3600.
- [9] 杨涛, 陈铮, 董卫平. 应力诱发双位错组亚晶界湮没的晶体相场模拟[J]. *金属学报*, 2011, 47(10): 1301-1306.
- [10] Chen L Q. Phase-field models for microstructure evolution[J]. *Annual Review of Materials Research*, 2002, 32(1): 113-140.
- [11] Wang Y, Li J. Phase field modeling of defects and deformation[J]. *Acta Materialia*, 2010, 58(4): 1212-1235.
- [12] 高英俊, 罗志荣, 胡项英, 等. 相场方法模拟 AZ31 镁合金的静态再结晶过程[J]. *金属学报*, 2010, 46(10): 1161-1172.
- [13] 张爽, 黄礼琳, 张卫龙, 等. 相场法研究陶瓷粉末烧结体系的微观组织演变[J]. *广西科学*, 2012, 19(4): 337-340.
- [14] Tschopp M A, McDowell D L. Grain boundary dislocation sources in nanocrystalline copper[J]. *Scripta Materialia*, 2008, 58(4): 299-302.

(责任编辑: 陈小玲)

(上接第 310 页 Continue from page 310)

参考文献:

- [1] Oliver W C, Pharr G M. An improved technique for determining hardness and elastic modulus using load and displacement sensing indentation experiments[J]. *Journal of Materials Research*, 1992(7): 1564-1583.
- [2] Ohmura T, Tsuzaki K, Matsuoka S. Evaluation of the matrix strength of Fe-0.4wt.%C tempered martensite using nanoindentation techniques [J]. *Philosophical Magazine A*, 2002(82): 1903-1910.
- [3] Ohmura T, Tsuzaki K, Matsuoka S. Nanohardness measurement of high purity Fe-C martensite[J]. *Scripta Materialia*, 2001(45): 889-894.
- [4] Ohmura T, Hara T, Tsuzaki K. Relation between nanohardness and microstructures in high-purity Fe-C as quenched and quenched-tempered martensite[J]. *Journal of Materials Research*, 2003(18): 1465-1470.
- [5] Ohmura T, Hara T, Tsuzaki K. Evaluation of temper softening behavior of Fe-C binary martensitic steels by nanoindentation[J]. *Scripta Materialia*, 2003(49): 1157-1162.
- [6] Song H W, Shi B, Wang X F, et al. Characterization of a low carbon low alloy steel by nanoindentation[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2005(41): 287-290.
- [7] Liu Y, Ngan A H W. Depth dependence of hardness in copper single crystals measured by nanoindentation[J]. *Scripta Materialia*, 2001(44): 237-241.
- [8] Oliver W C, Pharr G M. Measurement of hardness and elastic modulus by instrumented indentations: Advances in understanding and refinements to methodology[J]. *Journal of Materials Research*, 2004(19): 3-20.
- [9] Scherl T, Gupta H S, Fratzl P. Measurements of mechanical properties in Ni-base superalloys using nanoindentation and atomic force microscopy[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2003(363): 211-220.

(责任编辑: 陈小玲)