

## 剪切应力作用下位错运动的晶体相场模拟\*

# Phase-field-crystal Simulation of Dislocation Gliding under Shear Strain

黄世叶, 刘晓骅, 谢 森, 柳钰玲, 高英俊\*\*

HUANG Shi-ye, LIU Xiao-hua, XIE Sen, LIU Yu-ling, GAO Ying-jun

(广西大学物理科学与工程技术学院, 广西南宁 530004)

(College of Physical Science and Engineering, Guangxi University, Nanning, Guangxi, 530004, China)

**摘要:**【目的】研究剪切应变作用下晶体的位错攀滑运动特征, 揭示原子晶格势垒、剪切应变对位错运动特征的作用机理。【方法】根据位错滑移运动, 构建包含外力场与晶格原子密度耦合作用项的体系自由能密度函数, 建立剪切应变作用体系的晶体相场模型, 模拟位错攀移和滑移运动, 计算临界应变。【结果】位错攀移克服的势垒大于滑移的阻力势垒; 位错启动运动, 存在临界的势垒; 施加较大的剪切应变率作用, 体系能量变化为单调光滑曲线, 位错以恒定速度作连续运动, 具有刚性运动特征; 剪切应变率较小时, 体系能量变化出现周期波动特征, 位错运动是处于低速不连续运动状态。【结论】位错攀移和滑移运动特征与实验结果相符合。

**关键词:** 位错滑移 剪切应变 模拟 晶体相场模型

**中图分类号:** TG111.2 **文献标识码:** A **文章编号:** 1005-9164(2015)04-0400-07

**Abstract:** 【Objective】The feature and mechanism of dislocation gliding and climbing movement were studied under shear strain. 【Methods】The free energy density functional is constructed including the exerting shear force and atomic density term, and also the phase field crystal model is established for the system of shear stain. The process of glide and climb is simulated and critical shear strain is calculated. 【Results】Dislocation climbing to overcome the barrier is greater than the slip resistance barrier. There is a critical barrier for activating dislocation movement. The results show that the energy curves changing with time are monotonous smooth under greater shear strain rate, and of rigorous character corresponding to dislocation movement, and move with a constant speed; while under less shear strain rate, the energy change curves of system present a periodic wave feature. There is a critical potential for dislocation starting movement.

【 Conclusion 】 The results in these simulations are in a good agreement with the experimental ones.

**Key words:** dislocation glide, shear strain, simulation, phase field crystal model

收稿日期: 2015-04-25

作者简介: 黄世叶(1993-), 男, 硕士, 主要从事材料微结构演化的研究。

\* 国家自然科学基金项目(51161003), 广西自然科学基金项目(2012GXNSFDA053001)和广西大学实验技能和科技创新能力训练基金项目(SYJN20130408, 20130410, 20130412, 20130416)资助。

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

## 0 引言

【研究意义】材料在介观和宏观尺度上的性能在很大程度上由复杂的拓扑几何缺陷所决定<sup>[1,2]</sup>, 如空位、空洞、位错、晶界和微裂纹等。这些缺陷起因于在

原子尺度发生的复杂非平衡动力学过程<sup>[3~6]</sup>。金属材料的加工变形过程与材料微观缺陷,特别是位错的运动有着非常重要的关系。在目前情况下,材料的微观结构的演化很难由实验实时观测到,因此,计算机模拟实验已成为了解和认识这些微观信息的重要手段和实验补充<sup>[7]</sup>。【前人研究进展】Elder等<sup>[8~10]</sup>基于密度泛函理论提出了晶体相场(Phase-field-crystal, PFC)模型。PFC模型既可以描述晶体学结构特性以及原子尺度的行为,又可以揭示特征时间尺度为 $10^{-6}$ 秒量级的原子、缺陷运动的行为。目前,PFC方法已成功模拟了位错滑移、攀移和亚晶界湮没<sup>[11,12]</sup>、晶界位错预熔化<sup>[13]</sup>、异质外延生长<sup>[14,15]</sup>、晶体结构的相转变<sup>[16]</sup>、韧性材料的微裂纹扩展与连通<sup>[17]</sup>、纳米孪晶结构设计<sup>[18]</sup>等。在材料变形过程的位错运动研究中,Elder等<sup>[8]</sup>提出了一个施加外应变场的思想,任秀等<sup>[19]</sup>通过引入变形等体积方案来施加压缩和拉伸应变。【本研究切入点】目前还没有明确建立外加剪切应变施加的数学模型和具体的耦合外力场的自由能数学表述来研究位错运动。【拟解决的关键问题】本文通过引入剪切外力场作用函数,构建包含外力场与原子密度函数耦合作用的PFC自由能密度函数,用于研究剪切应变作用下晶体的位错攀滑运动特征,揭示原子晶格势垒、剪切应变对位错运动特征的作用机理。

## 1 PFC模型

### 1.1 体系的自由能密度函数

与传统的相场模型不同,PFC模型的自由能密度函数是通过自由能函数对保守的原子密度场变量取极小值得到的。因此,该模型能够揭示晶体学结构特性以及原子尺度的行为。对于固态金属材料,其原子的位置不依赖于时间,呈规则排列。因此,要求相场变量必须能够反映原子周期性排列的特征。引入周期性相场变量,其局域位置的最大值对应于原子的位置;而液相中的原子密度分布,不随时间变化,可看成为常量<sup>[20~21]</sup>。符合这两方面要求的原子密度场函数可作为相场变量,其表达式<sup>[16]</sup>写成

$$\rho(r) = \sum_{n,m} a_{n,m} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} + \rho_0. \quad (1)$$

式(1)中,右边第1项反映晶格原子的周期排列结构特征,第2项反映液相的原子无规则运动,平均值为一个常量。考虑到外部应变势场的耦合作用情况下,借鉴文献<sup>[17~22]</sup>引入外力场耦合作用的思路和方法,本文在原有的PFC模型<sup>[8]</sup>自由能密度函数基础上,引入外力场与体系原子密度耦合作用项,此时包

含外力场作用的体系无量纲的自由能函数可写成

$$F = \int \left\{ \frac{\rho}{2} [r + (1 + \nabla^2)^2] \rho + \frac{\rho^4}{4} + V_{\pm} \cdot \rho \right\} dr. \quad (2)$$

式(2)中, $r$ 是反映体系的温度参量, $\nabla^2$ 为Laplace算子, $V_{\pm} \cdot \rho$ 为外加力场与样品原子密度函数的耦合作用, $V_{\pm}$ 为外力场。该自由能模型自洽地包含了晶体结构的物理特征,如多晶取向、弹性效应、弹塑性变形等。

### 1.2 二维体系的极小自由能密度函数

对二维三角格子体系的极小自由能函数的解作单模近似,得到平衡时三角格子固相的原子密度函数 $\rho$ ,可写成单模形式<sup>[8]</sup>

$$\rho(x, y) = A_0 \left[ \cos(qx) \cos\left(\frac{qy}{\sqrt{3}}\right) - \frac{1}{2} \cos\left(\frac{2qy}{\sqrt{3}}\right) \right] + \rho_0. \quad (3)$$

式(3)中, $A_0$ 是一个特定常数,反映固相原子密度周期结构的振幅,由自由能函数取极小值得到; $\rho_0$ 为反映体系液相的原子密度分布平均值。将式(3)代入式(2),对 $A_0$ 和 $q$ 分别求导数,求出极小自由能函数 $F_0$ 和 $A_0$ 。由体系的极小自由能密度函数,可计算并画出体系不同相区的相图。对于二维体系,相区有液相和固相,固相有三角格子相和条状相两种。按照平衡相图的计算方法得到二维PFC相图<sup>[8]</sup>。

### 1.3 动力学方程

由于原子密度场 $\rho$ 为保守场,所以演化的无量纲动力学方程满足Chan-Hilliard方程<sup>[15]</sup>

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta \rho} = \nabla^2 [ (r + (1 + \nabla^2)^2) \rho + \rho^3 + V_{\pm} ]. \quad (4)$$

采用数值求解的办法,在时间和空间对动力学方程进行离散化处理。本文采用显型Euler迭代公式<sup>[16]</sup>对数值进行求解

$$\rho(t + \Delta t) = \rho(t) + \frac{d\rho}{dt} \cdot \Delta t. \quad (5)$$

式(5)中, $\Delta t$ 为离散时间步长。为使数值解具有稳定性,将Laplace算子作用考虑到次近邻格点<sup>[23,24]</sup>

$$\nabla^2 \rho_i = \frac{1}{(\Delta x)^2} \left[ \frac{1}{2} \sum_j (\rho_j - \rho_i) + \frac{1}{4} \sum_n (\rho_n - \rho_i) \right]. \quad (6)$$

式(6)中, $\Delta x$ 为离散空间步长, $j$ 和 $n$ 分别代表 $i$ 的最近邻格点与次近邻格点。利用可视化函数 $\rho(x, y)$ 得出原子密度函数分布图。

## 2 样品制备与模拟实验

### 2.1 样品制备方法

以二维三角晶相表征面心立方(FCC)晶格的 $\{111\}$ 平面作为模拟实验的结构体系。要在等效于 $\{111\}$ 平面的二维三角原子晶格点阵中产生单个孤立的刃位错,可以利用三角结构的原子密度分布函数来设置。可设置晶格常数不等的2个晶粒,在晶界上由于原子错配排列形成一个孤立位错。例如,在双晶体系,上半部分晶粒,采用波矢为 $q_1$ 的原子密度函数分布 $P(q_1, x, y)$ ,使体系上半部分每行具有 $N$ 个原子排列;在体系的下半部分晶粒,采用波矢为 $q_2$ 的原子密度函数分布 $\rho(q_2, x, y)$ ,使体系下半部分每行具有 $N+1$ 个原子排列。在上下两部分晶粒的交接面上取向相同,但由于晶格常数存在错配,因此,在晶界上形成一个刃位错。在本文的双晶模拟样品制备中,取 $q_1=0.830, q_2=0.814$ 。这样,在 $128 \times 128$ 的二维三角格子平面上,上半部晶粒的三角结构的原子密度分布中,每排有27个原子;下半部晶粒的原子密度分布中,每排有28个原子,错配度近似为 $\epsilon=(a_1-a_2)/a_1=(q_2-q_1)/q_2=3\%$ 。由于晶界处的原子排列存在错配,因此,存在较强的畸变能,经过大约 $4 \times 10^4$ 时间步的弛豫,可形成稳定的孤立位错结构。这时体系的位错处于稳定状态,位置不随时间而改变。于是,用于模拟位错运动的实验样品制备完成。PFC模型中的应变率和温度参数,可用与典型金属的熔点相对应和时间尺度相匹配的物理单位表示。具体的参数值选取见表1。

表1 不同温度条件的模拟参数

Table 1 Simulation parameters under different temperature parameters

No.	$r$	$\rho_0$	$\rho_s$	应变率 Strain rate $\dot{\epsilon}$
1	-0.4	0.446	0.345	$3.34 \times 10^{-3}/t$
2	-0.4	0.446	0.345	$3.57 \times 10^{-3}/t$
3	-0.4	0.446	0.345	$4.00 \times 10^{-3}/t$
4	-0.4	0.446	0.345	$6.67 \times 10^{-3}/t$

### 2.2 剪切应变的施加

对制备的样品施加剪切应力作用(图1)。考虑到外加剪切应力作用引起样品内部的原子运动,将外力场与原子密度场进行耦合作用,要求外力场的形式与原子密度场的形式能够相匹配。采用具有单模近似的周期外力场作剪切应力场,就能使晶粒内部位错附近的原子运动克服Peierls势,实现位错的滑移运动<sup>[25]</sup>。

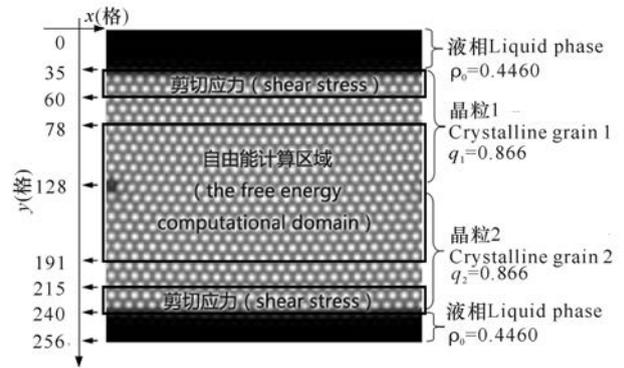


图1 物理意义上施加剪切应变的示意图

Fig. 1 The sketch map of shear strain exerting on the sample

如图1所示,取原点位于样品中心, $x$ 坐标轴沿水平方向。设置体系上下两端液固相共存区邻近的两行原子层为耦合外力场区域,周期外力场用 $V_{\pm}(x, y)$ 表示,上下外力场分别用 $V_+(x, y)$ 和 $V_-(x, y)$ 表示。借鉴文献[21, 24]施加两个方向相反的剪切应变的外力场的形式, $V_+$ 和 $V_-$ 分别设置为

$$V_+ = A[\cos q_1(x + na_y \dot{\epsilon} \Delta t) \cos(q_1 y / \sqrt{3}) - \cos(2q_1 y / \sqrt{3}) / 2] + \rho_l + \dots, y > 0,$$

$$V_- = A[\cos q_2(x - na_y \dot{\epsilon} \Delta t) \cos(q_2 y / \sqrt{3}) - \cos(2q_2 y / \sqrt{3}) / 2] + \rho_l + \dots, y < 0. \quad (7)$$

式(7)中 $\dot{\epsilon}$ 为恒定剪切应变率, $q_1$ 为上半部晶粒的波矢, $q_2$ 为下半部晶粒的波矢; $n$ 为原子移动一个格子距离所需的时间步; $a_y$ 是 $y$ 方向上原子间距; $A$ 为外力场的振幅强度(无量纲量),本文计算时取 $A=1$ ;  $V_+(x, y)$ 为沿着正 $x$ 方向的作用力,作用在上半部晶粒顶层的二原子层侧面上, $V_-(x, y)$ 为沿着负 $x$ 方向的作用力,作用在下半部晶粒底层的二原子层侧面上。由于外力场的函数形式与原子密度场的形式相似,因此,两者容易产生耦合作用。于是,体系原子之间跟随着外力场的作用作耦合运动,可见施加应变的物理效果。

## 3 结果与分析

虽然剪切应变是直接施加在样品最上端和最下端两层的原子层上,但是通过原子层间的耦合相互作用,可将剪切应变逐层传递到刃型位错核心处作位错运动。图2展示了外加剪切应变率为 $\dot{\epsilon} = 3.33 \times 10^{-3}/t$ 时,位错的滑移和攀移运动过程,红色箭头为位错初始所在的原子列。由图2h可见,经过 $t = 36300$ 时间步,位错沿水平方向滑移了26个原子位置,竖直方向攀移越过9个原子层。由此可见,因为滑移的原子晶格阻力较小,滑移运动相对较为容易。

这一过程体系的自由能变化曲线如图 3b 所示。由图 3b 可见自由能曲线出现 9 个大的峰谷特征, 这对应于位错的攀移过程克服原子晶格的阻力势垒和应变能的释放过程。9 个峰对应于位错攀移越过 9 层原子层。从自由能曲线来看, 位错每次攀移前能量都会上升, 而攀移过后能量下降。

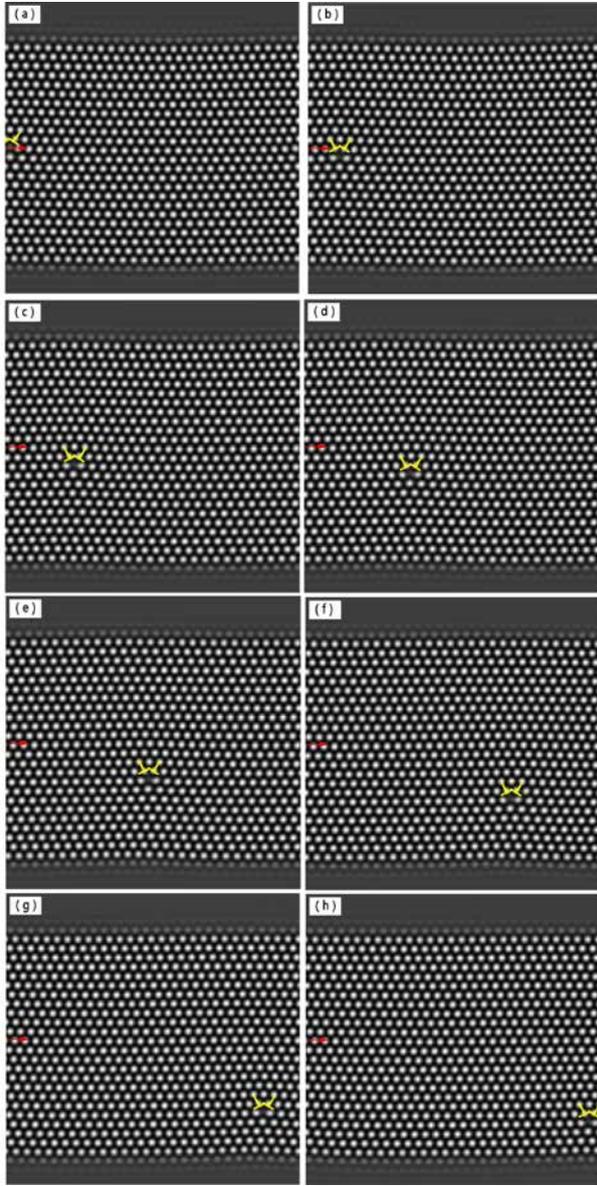


图 2 位错的攀移和滑移位置随时间的变化情况

Fig. 2 Evolution of edge dislocation climbing and gliding under shear strain with  $\dot{\epsilon} = 3.33 \times 10^{-3}/t$

(a)  $t = 300$ ; (b)  $t = 7500$ ; (c)  $t = 12300$ ; (d)  $t = 16800$ ; (e)  $t = 20700$ ; (f)  $t = 26700$ ; (g)  $t = 33600$ ; (h)  $t = 36300$ 。

由图 3b 可见, 位错滑移越过原子时的自由能变化并不是很明显。相对于攀移过程, 位错作滑移运动时, 原子晶格阻力较小, 其能量变化较小, 没有看到明显的峰谷结构。从平均剪切应变曲线图 3c 来看, 在位错开始运动前, 平均剪切应变单调增加, 位错开始

运动后, 平均剪切应变出现大的波动, 对应位错的攀移运动。

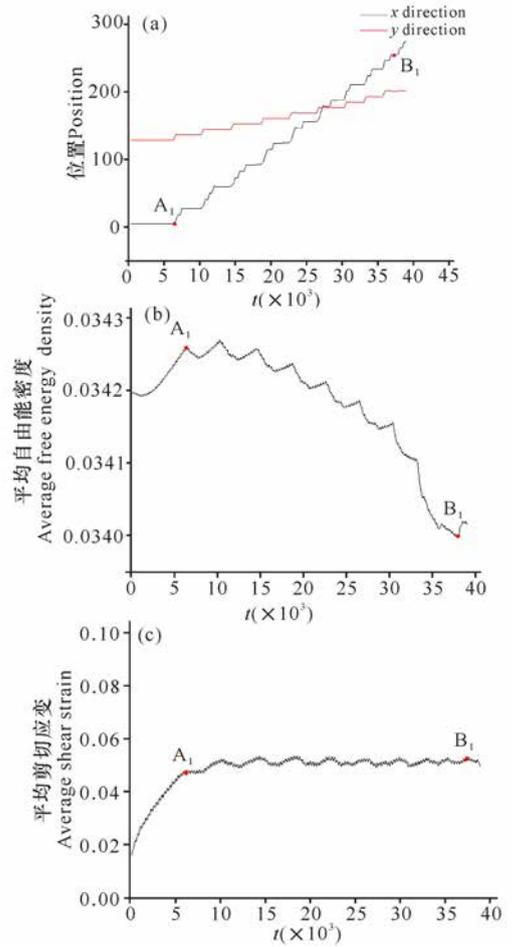


图 3 位错攀移时位置(a)、体系自由能密度(b)、平均剪切应变(c)随时间变化曲线 ( $\dot{\epsilon} = 3.33 \times 10^{-3}/t$ )

Fig. 3 The curve of dislocation climbing position(a), free energy(b), average shear strain(c) vs time

由图 4b 可见, 当剪切应变率  $\dot{\epsilon} = 3.57 \times 10^{-3}/t$  时, 自由能曲线单调增加, 出现 2 个较高的尖峰后, 曲线趋于平缓, 但出现了连续的周期小峰结构。2 个尖峰对应于攀移过程, 与图 4a 中的 2 个位置平台对应。位错的位置曲线的平均斜率对应的是平均滑移速度, 直线近似为匀速运动。由此可知, 在较大应变率作用下, 位错运动是沿  $x$  轴方向的连续匀速运动, 原子晶格对位错运动的阻力可看成为常数, 具有刚性运动特征<sup>[10]</sup>。

由图 5b 可见, 当剪切应变率等于  $\dot{\epsilon} = 4.00 \times 10^{-3}/t$  时, 自由能曲线在出现一个较大的峰后, 陡然下降, 之后出现周期性的小峰谷结构, 趋于平缓。对应的位错滑移运动的位置变化曲线如图 5a 所示, 位错首先沿  $y$  方向攀移一个原子层, 然后再沿  $x$  方向进行滑移, 滑移位置随时间变化出现了一系列均匀台阶状结构, 表明位错在滑移的过程中, 在每个滑移位置

上需要停留一定的时间,积累能量。当能量达到某临界值时,位错越过原子晶格势垒,向前运动,然后释放应变能。由于滑移停留的时间相同,于是自由能曲线形成周期峰谷结构(图 5b)和位置曲线出现规则台阶状结构(图 5a)。从 5a 可见,位错从  $A_3$  运动到  $B_3$  共跨跃了 26 个台阶,平均速度为  $0.00133 ax/t$ 。

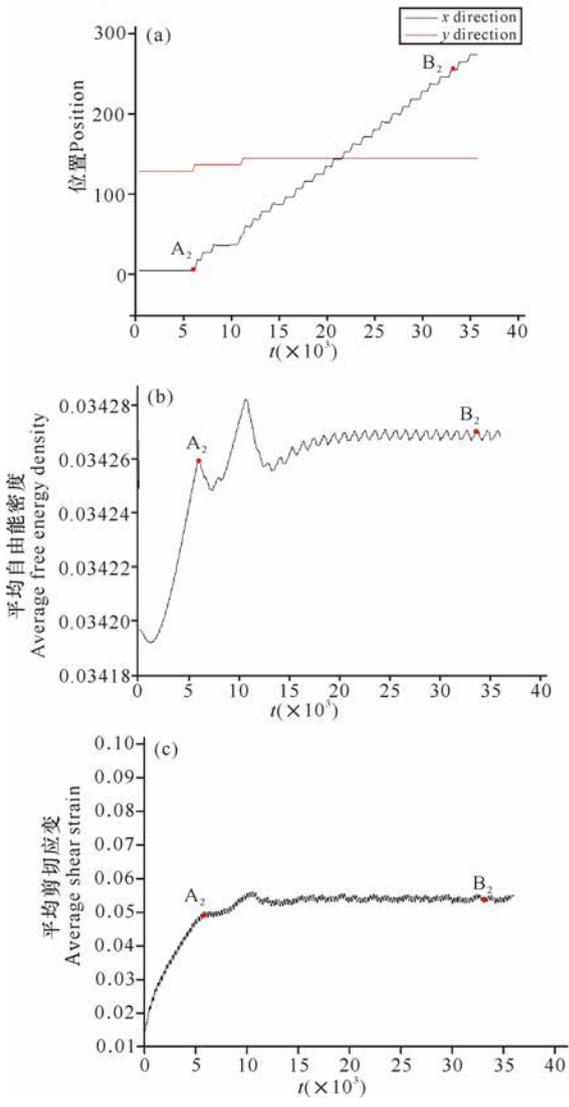


图 4 位错滑移时位置(a)、体系自由能密度(b)、平均应变(c)随时间变化曲线( $\dot{\epsilon} = 3.57 \times 10^{-3}/t$ )

Fig. 4 The curve of dislocation climbing position(a), free energy(b), average shear strain(c) vs time

由图 6b 可见,当剪切应变率减小到  $\dot{\epsilon} = 6.67 \times 10^{-3}/t$  时,自由能曲线出现 1 个大的峰谷结构,而周期排列的小峰谷结构减弱。对应的位错滑移运动的位置随时间变化曲线如图 6a 所示,在整个过程中,位错从  $A_4$  运动到  $B_4$ , 共有 26 个台阶,平均速度为  $0.00289 ax/t$ 。位错滑移的位置随时间的变化近似是线性的,应变率  $\dot{\epsilon}$  越大,直线斜率越大,则滑移运动的平均速度越大。图 6 可见,自由能曲线的峰谷周期变化,与位错的滑移越过原子格点的台阶时间相对应

情况,符合得非常好。

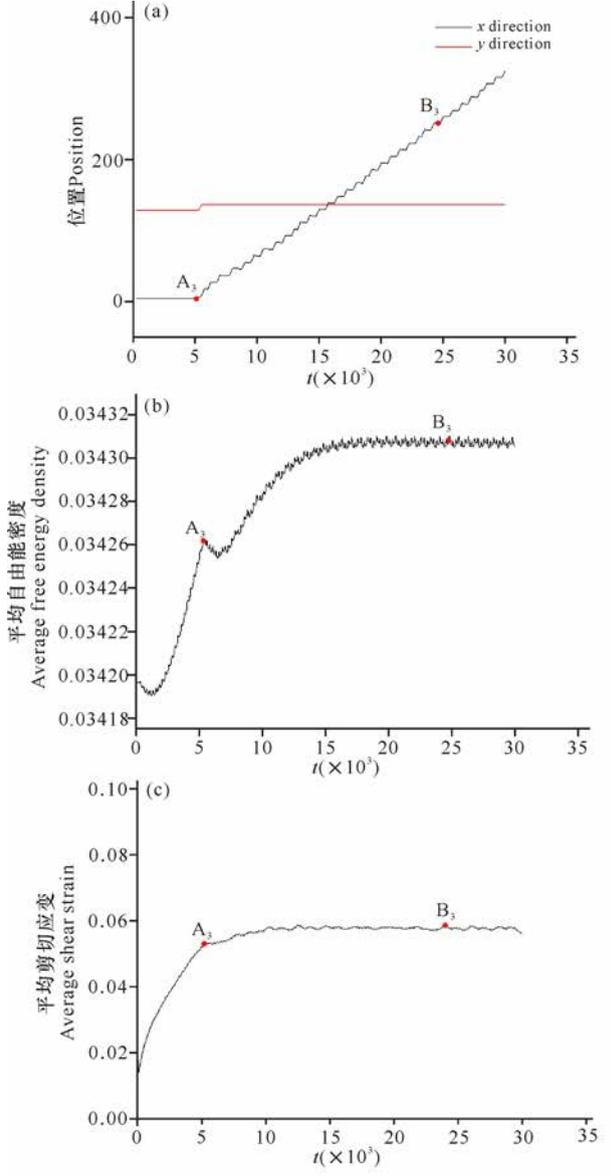


图 5 位错滑移时位置(a)、体系自由能密度(b)、平均应变(c)随时间变化曲线( $\dot{\epsilon} = 4.00 \times 10^{-3}/t$ )

Fig. 5 The curve of dislocation climbing position(a), free energy(b), average shear strain(c) vs time,

由图 3~6 的自由能曲线可见,滑移运动引起的自由能变化,只有在应变率稍大些的情况下,才能明显地看到滑移运动的周期峰谷结构。这说明位错攀移克服的势垒较大,较难启动攀移运动,而滑移的阻力势垒较低,这些特征与实验结果是相符合的。由图 4b 和 5b 还可见,攀移的势垒高度大致是滑移势垒高度的 3~5 倍。这是因为滑移运动只受到最近邻的原子影响,而攀移运动需要克服多层原子的阻力。

由图 3~6 可见,平均剪切应变随时间变化曲线在初始阶段可近似看成是线性关系。经过一段时间后,直线开始弯曲,转折点对应的平均应变变量相当于

临界剪切应变值  $\gamma_p$ , 由此可得到  $\gamma_p$  值(表 2), 即位错滑移的 Peierls 势垒。该应变临界值对应于施加的剪切应变率  $\dot{\epsilon}$ , 位错滑移所能克服的临界原子晶格势垒大小。通过求平均剪切应变曲线的初始阶段的线性斜率, 得到作用在位错周围原子的平均应变率  $\dot{\gamma}_p$  (表 2)。由表 2 可见, 施加的  $\dot{\epsilon}$  越大, 位错滑移所能克服的临界势垒  $\gamma_p$  就越大; 且位错周围原子受到的平均剪切应变率  $\dot{\gamma}_p$  与外加应变率  $\dot{\epsilon}$  相比小 3 个量级, 这说明外部施加的应变率  $\dot{\epsilon}$  要比实际作用在位错周围原子的应变率  $\dot{\gamma}_p$  要大得多。根据图 3~6 的位置曲线, 可求出位错滑移的平均速度  $v_s$ 。

表 2 临界应变时平均应变值  $\gamma_p$ 、应变率  $\dot{\gamma}_p$ 、位错平均滑移速度  $v_s$

Table 2 The critical potential of average strain  $\gamma_p$ , critical strain rate  $\dot{\gamma}_p$ , and average sliding speed  $v_s$

$\dot{\epsilon}$ ( $t^{-1}$ )	$\gamma_p$	$\dot{\gamma}_p$ ( $ts^{-1}$ )	$v_s$ (g. p. /ts)
$3.34 \times 10^{-3}$	$4.7 \times 10^{-2}$	$5.0 \times 10^{-6}$	$7.3 \times 10^{-3}$
$3.57 \times 10^{-3}$	$4.9 \times 10^{-2}$	$6.1 \times 10^{-6}$	$9.2 \times 10^{-3}$
$4.00 \times 10^{-3}$	$5.3 \times 10^{-2}$	$7.2 \times 10^{-6}$	$16.1 \times 10^{-3}$
$6.67 \times 10^{-3}$	$6.0 \times 10^{-2}$	$8.2 \times 10^{-6}$	$19.2 \times 10^{-3}$

注: g. p. 表示格子单元; ts 表示时间步。

Note: g. p. , lattice element; ts, time step.

对于图 3~6 模拟的位错滑移运动曲线特征, 可以应用位错微观滑移机理解释<sup>[26,27]</sup>。剪切应变率较小时, 体系能量变化出现周期波动特征, 位错滑移运动是处于低速不连续运动状态, 运动出现周期波动式攀移或滑移运动, 具有粘滞运动特征; 施加较大的剪切应变率作用, 位错以恒定速度作连续滑移运动, 具有刚性运动特征。因为当剪切应力近似等于滑移应力时, 位错可以突破晶格势垒启动滑移运动。在大的剪切应力  $\gamma$  作用下, 即  $\gamma \gg \gamma_p$  情况, 晶格势垒  $\gamma_p$  的影响就变得次要了。

#### 4 结论

采用晶体相场模型模拟了剪切应力作用下的位错运动, 主要结论如下:

1) 滑移运动只受到最近邻的原子影响, 而攀移运动需要克服多层原子的阻力, 因此位错攀移克服的势垒较大, 较难启动攀移运动, 而滑移的阻力势垒较低, 攀移的势垒高度大致是滑移势垒高度的 3~5 倍。由滑移运动引起的自由能变化, 只有在应变率稍大的情况下, 才能明显地看到滑移运动的周期峰谷结构。

2) 位错启动运动时, 存在临界的势垒。施加的  $\dot{\epsilon}$  越大, 位错滑移所能克服的临界势垒  $\gamma_p$  就越大; 且位错周围原子受到的平均剪切应变率  $\dot{\gamma}_p$  与外加应变率  $\dot{\epsilon}$  相比小 3 个量级, 说明外部施加的应变率  $\dot{\epsilon}$  要比实际作用在位错周围原子的应变率  $\dot{\gamma}_p$  要大得多。

3) 剪切应变率较小时, 体系能量变化出现周期波动特征, 位错滑移运动是处于低速不连续运动状态, 运动出现周期波动式攀移或滑移运动, 具有粘滞运动特征; 施加较大的剪切应变率作用, 位错以恒定速度作连续滑移运动, 具有刚性运动特征。

4) 位错攀移和滑移运动特征与实验结果相符合。

#### 参考文献:

[1] 徐恒均, 刘国勋. 材料科学基础[M]. 北京: 北京工业出版社, 2001: 265-279.  
Xu H J, Liu G X. Fundamentals of Materials Science

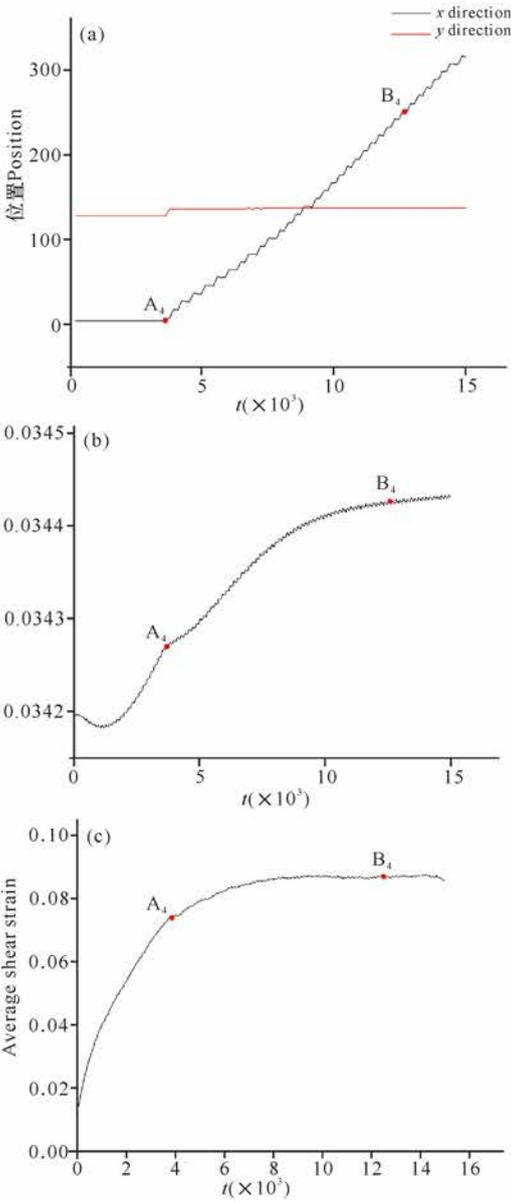


图 6 位错滑移时位置(a)、体系自由能密度(b)、平均应变(c)随时间变化曲线( $\dot{\epsilon} = 6.67 \times 10^{-3} / t$ )

Fig. 6 The curve of dislocation climbing position(a), free energy(b), average shear strain(c) vs time

- [M]. Beijing: Beijing Industry Press, 2001; 265-279.
- [2] 胡庚祥, 蔡珣, 戎永华. 材料科学基础[M]. 第3版. 上海: 上海交通大学出版社, 2010; 265-279.  
Hu G X, Cai X, Rong Y H. Fundamentals of Materials Science[M]. 3rd ed. Shanghai: Shanghai Jiao Tong University Press, 2010; 265-279.
- [3] Bobylev S V, Ovidko I A. Transformations of faceted grain boundaries in high-Tc superconductors[J]. Physical Review B, 2003, 67: 132506.
- [4] Ovidko I A, Skiba N V. Enhanced dislocation emission from grain boundaries in nanocrystalline materials[J]. Scripta Mater, 2012, 67: 13.
- [5] Gukkin M Y, Ovidko I A. Transformations of low-angle tilt boundaries in high-Tc superconductors[J]. Physical Review B, 2001, 63: 64515.
- [6] Gukkin M Y, Ovidko I A. Strengthening and softening mechanisms in nanocrystalline materials under superplastic deformation[J]. Acta Mater, 2004, 52: 3793.
- [7] 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, 53: 2497.  
Zhang L, Wang S Q, Ye H Q. Molecular dynamics study of the structure change in a high-angle Cu grain boundary by heating and quenching[J]. Acta Physica Sinica, 2004, 53: 2497.
- [8] Elder K R, Grant M. Modeling elastic and plastic deformations in nonequilibrium processing using phase field crystals[J]. Physical Review E, 2004, 70: 51605.
- [9] Elder K R, Provatas N, Berry J, et al. Phase-field-crystal modeling and classical density functional theory of freezing[J]. Physical Review B, 2007, 75: 64107.
- [10] Berry J, Grant M, Elder K R. Diffusive atomistic dynamics of edge dislocations in two dimensions[J]. Physical Review E, 2006, 73: 31609.
- [11] 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: 3595.  
Ren X, Wang J C, Yang Y J, et al. Simulation of the structure and motion of grain boundary in pure substances by phase field crystal model[J]. Acta Physica Sinica, 2010, 59: 3595.
- [12] 罗志荣, 黄世叶, 茹谢辛, 等. 晶体相场法模拟大角度晶界的变形过程[J]. 广西科学, 2013, 20(4): 311-315.  
Luo Z R, Huang S Y, Ru X X, et al. Phase-field-crystal modeling for deformation process of high-angle grain boundary[J]. Guangxi Sciences, 2013, 20(4): 311-315.
- [13] Berry J, Elder K R, Grant M. Melting at dislocations and grain boundaries: A phase-field crystal study[J]. Physical Review B, 2008, 77: 224114.
- [14] 陈成, 陈铮, 张静, 等. 晶体相场法模拟异质外延过程中界面形态演化与晶向倾侧[J]. 物理学报, 2012, 61(10): 108103.  
Chen C, Chen Z, Zhang J, et al. Simulation of morphological evolution and crystallographic tilt in heteroepitaxial growth using phase-field crystal method[J]. Acta Physica Sinica, 2012, 61(10): 108103.
- [15] Yu Y M, Rainer B, Axel V J. Morphological instability of heteroepitaxial growth on vicinal substrates: A phase-field crystal study[J]. Crystal Growth, 2011, 318(1): 18-22.
- [16] 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: 50507.  
Gao Y J, Luo Z R, Huang C G, et al. Phase-field-crystal modeling for two-dimensional transformation from hexagonal to square structure[J]. Acta Physica Sinica, 2013, 62: 50507.
- [17] 高英俊, 罗志荣, 黄礼琳, 等. 韧性材料的微裂纹扩展和连通的晶体相场模[J]. 中国有色金属学报, 2013, 23: 1892.  
Gao Y J, Luo Z R, Huang L L, et al. Phase-field-crystal modeling for microcrack propagation and connecting of ductile materials[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2013, 23: 1892.
- [18] 卢成健, 蒋丽婷, 王玉玲, 等. 晶体相场法模拟小角度晶界的位错结构及其演化[J]. 广西科学, 2013, 20(4): 316-320.  
Lu C J, Jiang L T, Wang Y L, et al. Simulating structure of dislocation and its evolution in low angle grain boundary by phase-field-crystal method[J]. Guangxi Sciences, 2013, 20(4): 316-320.
- [19] Hirouchi T, Takaki T, Tomita Y. Effects of temperature and grain size on phase-field-crystal deformation simulation[J]. Int J Mech Sci, 2010, 52: 309.
- [20] Toth G I, Tegze G. Heterogeneous crystal nucleation: The effect of lattice mismatch[J]. Phys Rev Lett, 2012, 108: 25502.
- [21] Pak Y C, Tsekenis G, Dantzig J. Plasticity and dislocation dynamics in a phase-field-crystal model[J]. Phys Rev Lett, 2010, 105: 15502.
- [22] Muralidharan S, Heataja M, Validated A. RP-HPLC method for simultaneous estimation of paracetamol and diclofenac potassium in pharmaceutical formulation[J]. Phys Rev Lett, 2010, 105: 126101.
- [23] 高英俊, 罗志荣, 黄礼琳, 等. 变形合金的亚晶组织演化的相场模型[J]. 金属学报, 2012, 48: 1215.  
Gao Y J, Luo Z R, Huang L L, et al. Phase field model for microstructure evolution of subgrain in deformation alloy[J]. Acta Metallurgica Sinica, 2012, 48: 1215.
- [24] Trautt Z T, Adland A, Karma A. Coupled motion of asymmetrical tilt grain boundaries: Molecular dynamics and phase-field-crystal simulations[J]. Acta Mater, 2012, 60: 6528.
- [25] 张爽. 晶体相场法模拟应力作用下位错的运动过程[D]. 南宁: 广西大学, 2013.  
Zhang S. Phase Field Crystal Simulation of Dislocation Movement under the Stress[D]. Nanning: Guangxi University, 2013.
- [26] Romanov A E, Vladimirov V J. Dislocation in Solids: Vol 9[M]. Amsterdam: North-holland, 1992: 191-402.
- [27] Hirth J P, Lothe J. Theory of Dislocation[M]. New York: Wiley, 1982.

(责任编辑: 竺利波)