

晶体相场模拟取向角对晶界湮没过程的影响*

Phase-field-crystal Simulation of Effect of Different Orientation Angle on Annihilation of Grain Boundary

刘瑶,袁龙乐,卢强华,黄创高,高英俊**

LIU Yao, YUAN Longle, LU Qianghua, HUANG Chuanggao, GAO Yingjun

(广西大学物理科学与工程技术学院,广西高校新能源材料及相关技术重点实验室,广西南宁530004)

(Guangxi Colleges and Universities Key Laboratory of Novel Energy Materials, School of Physical Science and Technology, Guangxi University, Nanning, Guangxi, 530004, China)

摘要:【目的】研究大角晶界的位错运动和相互作用,揭示晶界发射位错的内在原因。【方法】采用晶体相场模型模拟不同取向角的晶界位错湮没过程。【结果】晶界湮没有如下主要过程:开始时位错沿晶界攀移,随后晶界发生位错发射,位错运动方式由攀移转化为滑移;位错滑移穿过晶粒内部,在到达对面晶界处发生湮没;其余的晶界位错仍作攀移运动,再次出现晶界发射位错;滑移位错与其它位错在晶内相遇发生湮没。【结论】位错在晶界处湮没,自由能曲线的谷较浅,而在晶粒内部湮没,能量曲线的谷较深;晶界攀移的位错越多,能量曲线的峰越高。

关键词:晶界 位错湮没 取向角 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(2016)05-0437-06

Abstract:【Objective】The dislocation motions and their interaction of grain boundary are analyzed to reveal the intrinsic reason of emission dislocation of grain boundary.【Methods】Grain boundaries (GB) with different orientation angles under strains are simulated by phase-field-crystal (PFC) model.【Results】The process of the GB decay can be divided into several main typical stages as follows: Dislocation climbs firstly along the GB, and then the GB emits pair dislocations to glide in grain instead of climbing along GB; gliding for a while, the dislocation crosses the grain and annihilates at the opposite side of grain boundary. The remains of dislocation in the GB can still climb along the GB, and then the GB emits the dislocations to glide again. Gliding dislocations encounter with other dislocations inside the grain and the annihilation occurs.【Conclusion】The valley for dislocation annihilation on GB is shallow, while that inside the grain is deep. The more the numbers of dislocation for climbing are, the higher the peak of the curve is.

Key words: grain boundary, dislocation annihilation, orientation angle, phase-field-crystal model

收稿日期:2016-07-10

作者简介:刘瑶(1982-),女,讲师,主要从事金属材料与模拟实验研究。

* 国家自然科学基金项目(51161003,50661001)和广西自然科学基金重点项目(2012GXNSFDA053001)资助。

** 通信作者:高英俊(1962-),男,教授,博士生导师,主要从事材料纳微结构的设计与模拟实验研究,E-mail: gaoyj@gxu.edu.cn。

0 引言

【研究意义】通常晶体材料由大量晶粒组成,晶粒之间因取向不同而形成晶界,位错在晶界上按特定方式排列^[1]。在外加应力作用下,晶界位错一般会攀移或滑移,导致晶界运动甚至瓦解^[2]。故晶界结构和其运动方式会对晶粒长大有重要影响^[3]。【前人研究进展】由于晶界迁移过程涉及的原子运动很快,利用当

前的实验手段很难实时观察晶界、亚晶界上缺陷的运动。而依靠计算模拟实验可以得到材料微结构演化的细节,填补实验的缺憾。与经典相场方法^[4]不同,先进的晶体相场方法(PFC)^[5-7],不仅能够模拟纳米尺度的微观缺陷,还能够模拟扩散时间尺度(10^{-6} s)的位错运动,甚至用于研究位错运动对晶界的影响^[8]。【本研究切入点】虽然 PFC 方法已应用于研究位错和晶界的运动^[9],例如小角度晶界湮没的特征^[10]以及其它领域^[11-14],但大角晶界湮没情况还少见报道。【拟解决的关键问题】应用 PFC 方法研究大角晶界的位错运动和相互作用,揭示晶界发射位错的内在原因。

1 晶体相场模型

PFC 模型引入具有周期结构特征的原子密度作为相场变量^[6],其表达式^[7]可写成

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

式中, $a_{n,m}$ 为 Fourier 系数, \vec{G} 为倒格矢, \vec{r} 为空间位置矢量。式(1)中右边第一项反映晶格原子的周期排列结构特征,第二项 ρ_0 反映液相的原子均匀无序特征。此时体系无量纲的自由能函数 F 可以写成^[6]

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

式中, γ 是反映体系温度的参数。该自由能模型能够自洽地包含例如晶粒取向,弹、塑性变形特性等晶体结构的物理特征。

可用 Cahn-Hilliard 动力学方程^[6]描述保守的原子密度场变量的演化:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta \rho} = \nabla^2 (\gamma \rho + (1 + \nabla^2)^2 + \rho^3), \quad (3)$$

式中, t 为时间变量。由式(2)得到稳定的三角相的二维单模近似解 ρ 为^[6]

$$\rho = A [\cos(qx) \cos(qy/\sqrt{3}) - \cos(2qy/\sqrt{3})/2] + \rho_0, \quad (4)$$

式中, ρ_0 为原子平均密度,振幅 $A = 4/5(\rho_0 + 1/3\sqrt{-15r - 36\rho_0^2})$, 波矢 $q = \sqrt{3}/2$ 。

由式(2)表示的自由能极小值,可得到对应的 3 种平衡相,即液相(Liquid)、条状相(Stripe)和三角相(Triangular)。在二维系统中,由各相的极小自由能,并利用公切线法则确定相图^[6]。

2 计算方法

2.1 数值计算与初始条件

对式(3)采用半隐式 Fourier 谱方法^[15]求解,其

离散形式为

$$\frac{\rho_{\vec{k},t+\Delta t} - \rho_{\vec{k},t}}{\Delta t} = -k^2 \{ [\gamma + (1 - k^2)^2] \rho_{\vec{k},t+\Delta t} + (\rho)_{\vec{k},t}^3 \}. \quad (5)$$

整理后得

$$\rho_{\vec{k},t+\Delta t} = [\rho_{\vec{k},t} - k^2 (\rho)_{\vec{k},t}^3 \Delta t] / \{ 1 + k^2 [\gamma + (1 - k^2)^2] \Delta t \}, \quad (6)$$

式中, $\rho_{\vec{k},t+\Delta t}$ 为 Fourier 空间 $t + \Delta t$ 时刻的原子密度, $\rho_{\vec{k},t}$ 为 Fourier 空间 t 时刻的原子密度, \vec{k} 为 Fourier 空间的波矢。

本文采用文献[15]给出的方法进行样品制备。表 1 给出了样品制备参数热学和力学参数,其中, t 为弛豫时间; $\dot{\epsilon}$ 为应变率, θ 为晶界两侧晶粒取向夹角。

表 1 样品制备的热力学参数

Table 1 Parameter of thermodynamics for sample processing

Sample	ρ_0	γ	θ	t	$\dot{\epsilon}$
A	0.263 6	-0.40	10°	3×10^4	6×10^{-6}
B	0.263 6	-0.40	16°	3×10^4	6×10^{-6}
C	0.263 6	-0.40	20°	3×10^4	6×10^{-6}
D	0.263 6	-0.40	28°	3×10^4	6×10^{-6}

2.2 外应变的施加

在外加应变作用下,晶粒会发生变形,引起晶界和位错运动。在二维体系的变形过程中采用等面积不变模型^[16-17],则有

$$\Delta x \Delta y = \Delta x' \Delta y', \quad (7)$$

式中, Δx 、 Δy 为变形前的空间步长, $\Delta x'$ 、 $\Delta y'$ 为变形后的空间步长。设无量纲的应变率为 $\dot{\epsilon}$, 应变量为 $\epsilon = \dot{\epsilon} n \Delta t$, 其中 n 为时间步数, Δt 为时间步长。假设在 x 方向上给体系一个拉应变, 则有

$$\Delta x' = (1 + \epsilon) \Delta x = \Delta x + n \dot{\epsilon} \Delta x \Delta t, \quad (8)$$

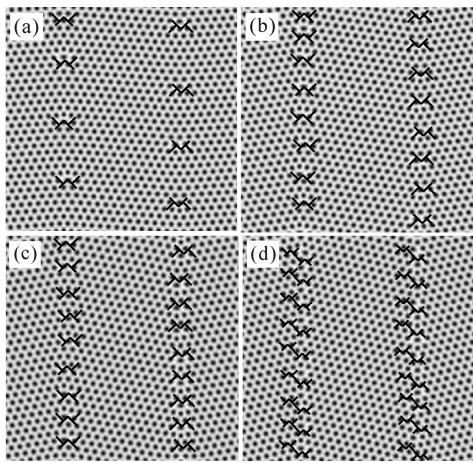
$$\Delta y' = \Delta y / (1 + \epsilon) = \Delta y / (1 + n \dot{\epsilon} \Delta t), \quad (9)$$

由此可见,在 y 方向上体系受到一个压应变。无量纲应变速率设为 $\dot{\epsilon} = 6 \times 10^{-6}$ 。详细的二维变形的数值算法见文献[17]。

3 结果与分析

3.1 样品的晶界位错结构

由图 1 可见,对称倾侧晶界的夹角越大,晶界的位错排列越密,其中的 8°、16°和 20°晶界位错排列为整齐,而 28°大角晶界的位错排列为复杂,呈现交错排列结构。



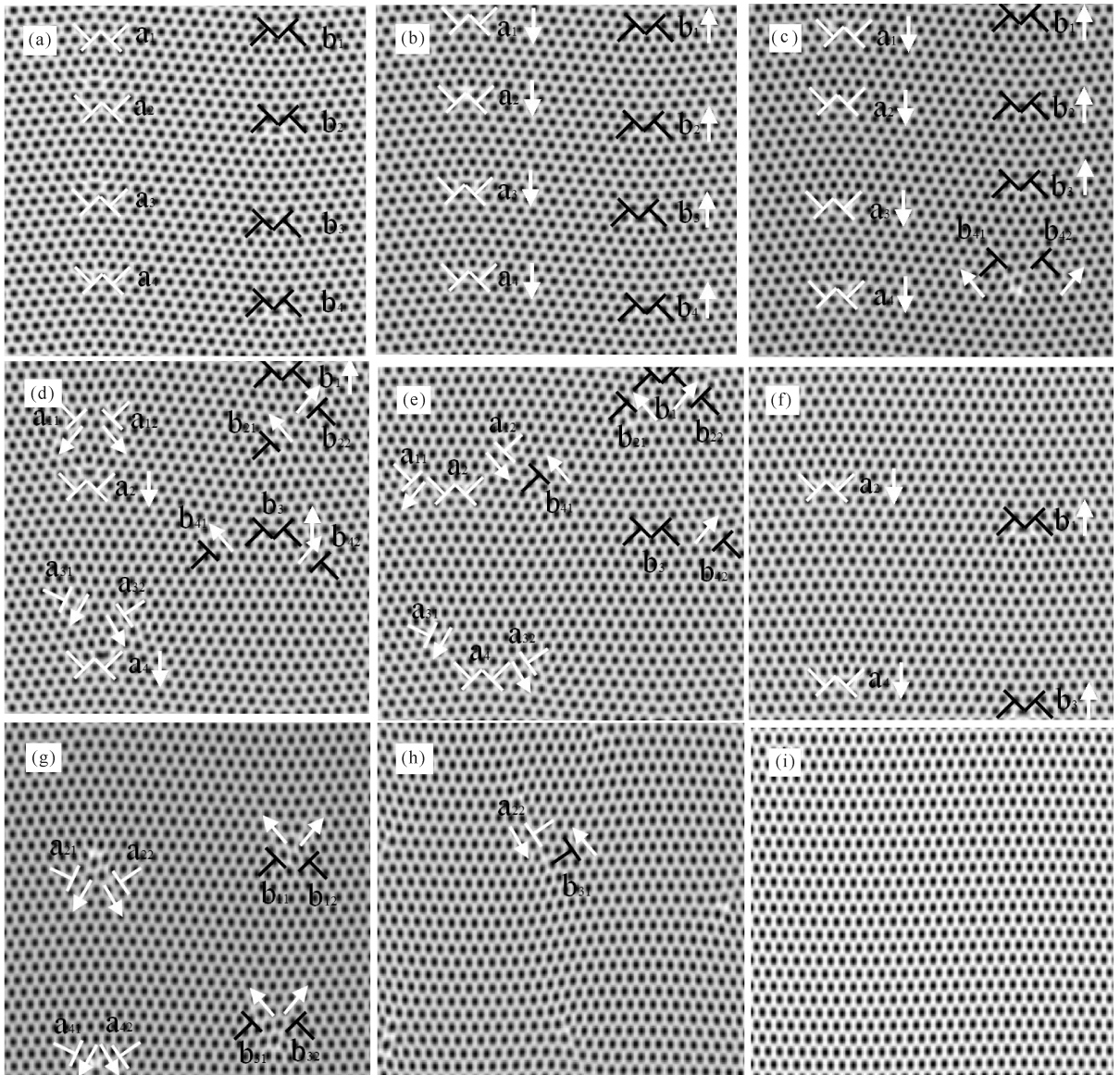
(a)8°, (b)16°, (c)20°, (d)28°

图1 晶界位错样品

Fig.1 Sample of grain boundary dislocation structure

3.2 外加应变下晶界位错运动情况

由图2可见晶界的取向差为8°时,晶界上分别由4对位错对(标记为 a_1, a_2, a_3, a_4 和 b_1, b_2, b_3, b_4)排列而成。位错通常在原子面滑移过程中,所需要的能量要比攀移过程所需的能量要低很多。由于晶界位错滑移,需要克服额外的变形作用,而晶界位错攀移则不需要^[9],所以随着应变的不断增大,首先位错沿晶界进行攀移,当施加的应变足以克服晶界的额外阻力时,左右两条晶界中各有部分位错有序地从晶界发射,即晶界发射位错,余下的位错则继续沿晶界攀移;从晶界发射的位错,继续滑移运动直至与极性相反的位错相遇发生湮没。详细的晶界湮没过程,如图2(a)~(i)所示。



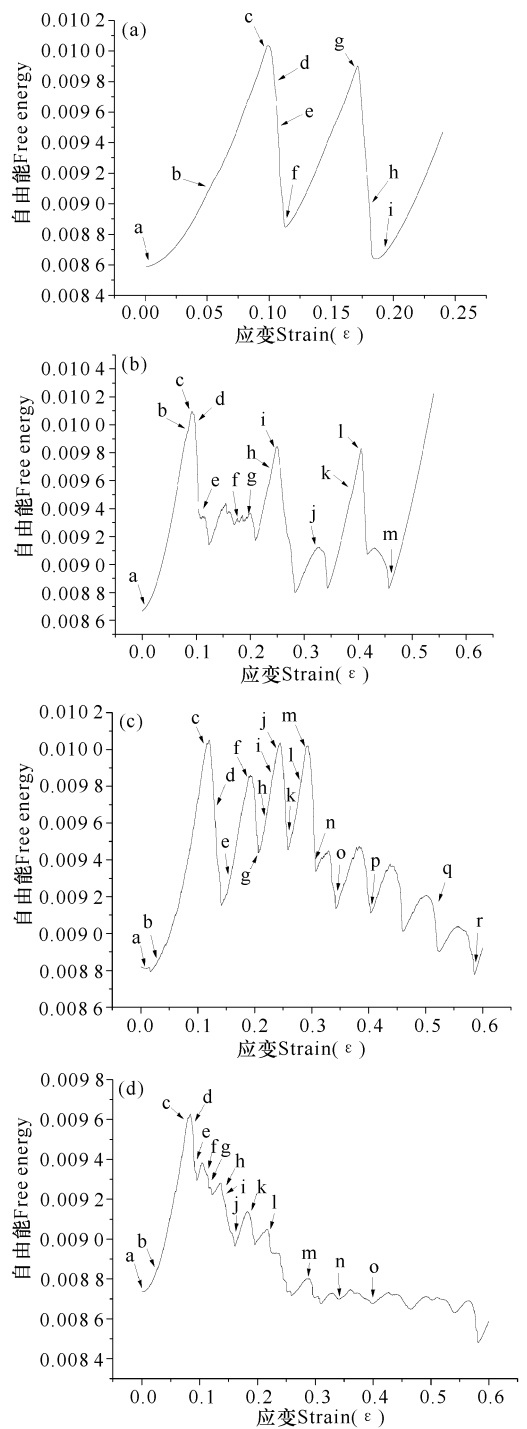
(a) $\epsilon=0$, (b) $\epsilon=0.0528$, (c) $\epsilon=0.0984$, (d) $\epsilon=1.050$, (e) $\epsilon=0.1074$, (f) $\epsilon=0.1194$, (g) $\epsilon=0.1722$, (h) $\epsilon=0.1812$, (i) $\epsilon=0.1986$

图2 8°对称倾侧晶界位错随时间的演化过程

Fig.2 Annihilation process simulation of grain boundary at different time t and different strain ϵ at 8°

由图 3(a)可见,8°晶界的湮没过程可分为 4 个阶段:1) 晶界位错攀移;2) 位错分解、滑移、湮没;3) 剩余的晶界位错继续攀移;4) 晶界位错分解、滑移、湮没。而 16°,20°,28°的自由能曲线,出现了多个峰和谷,有的峰很高,有的峰很低,有的谷很深,有的谷很浅,说明晶界取向差越大,晶界位错越大,晶界位错湮没的过程就越复杂。峰的高低,谷的深浅,反映了位错同时湮没的数量和在不同位置的湮没情况。例如,在晶界上湮没合并,谷较浅,在晶粒内部湮没,谷较深,同时湮没的位错数目越多,谷越深;晶界同时攀移的位错数目越多,峰越高。图 3(b)存在 3 个较高的峰和若干个较低的峰,以及若干较深的谷和较浅的谷。图 3(c)也有类似情况,存在 4 个较高的峰和 4 个较低的峰。由于 28°大角晶界的位错排列较为复杂,位错呈现交错排列结构,应变施加过程,位错没有明显的攀移过程,因此,图 3(d)的曲线只有一个较高的峰,其余的峰都较低,这反映了大角晶界位错湮没的能量变化特点。

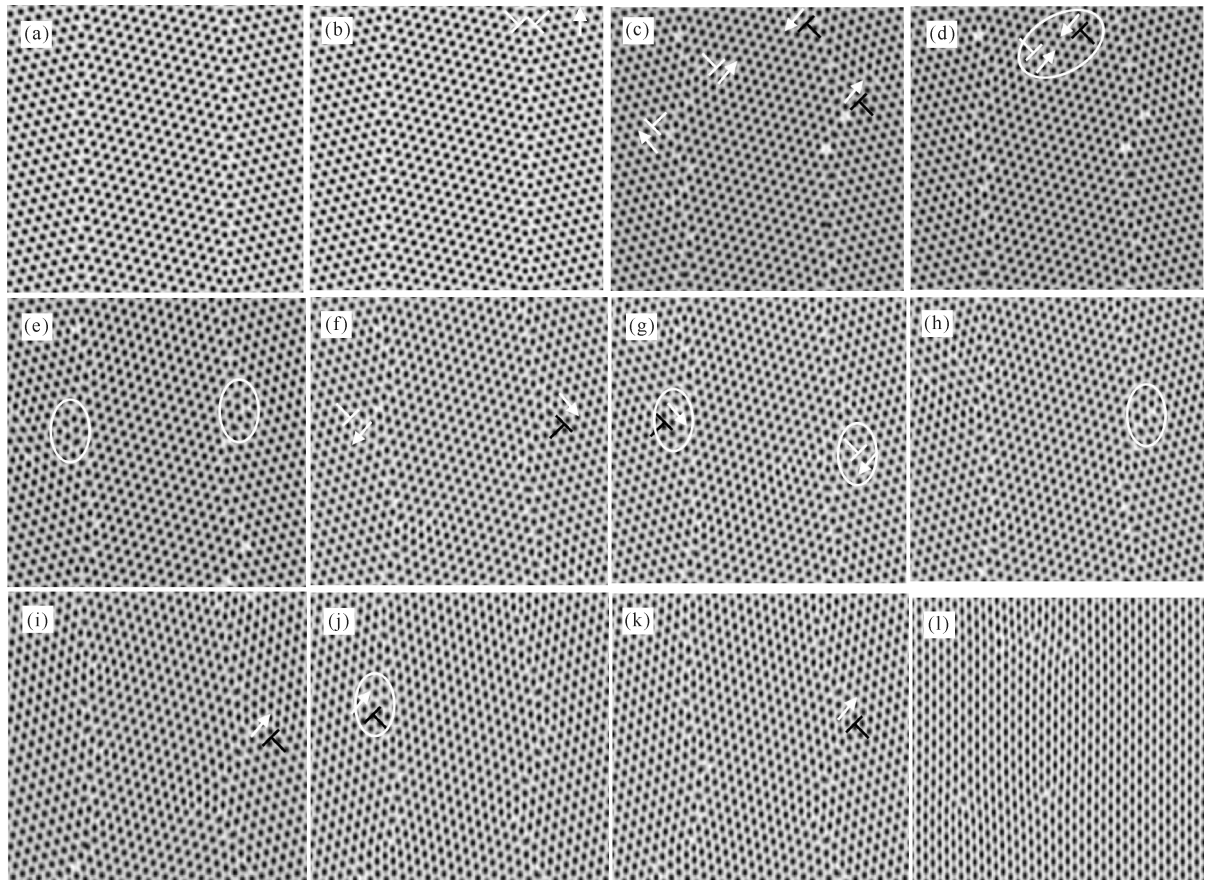
由图 4(a)可见,位错在大角晶界上十分紧密排列。当 $\epsilon = 0.0306$ 时(图 4b),有位错开始沿着晶界攀移。随着应变量的增加,位错沿着晶界攀移的数目增加。当 $\epsilon = 0.0864$ 时(图 4c),晶界上位错攀移开始分解。在 $\epsilon = 0.0888$ 时(图 4d),位错分解后在晶粒内部相遇并湮没(图中白色圆圈处)。当 $\epsilon = 0.0984$ 时,由图 4(e)可见,晶界的曲折化趋势明显,还能看见一个“突出的尖点”(见白色圆圈处)。当 $\epsilon = 0.1050$ 时(图 4f),晶界曲折处“尖点”发射位错,当它滑移到对面晶界时,就与对面晶界相遇,可发生湮没(图 4g)。当 $\epsilon = 0.1188$ 时(图 4h),余下的位错在晶界上又组成整齐的晶界。随着外加应变的逐步增加,右侧晶界又会出现锯齿曲折的“尖点”(图 4h 中圆圈处)。在 $\epsilon = 0.1368$ 时,图 4(i)右侧的晶界“尖点”发射位错。当 $\epsilon = 0.1620$ 时(图 4j)发射的位错在另一晶界上进行湮没。当 $\epsilon = 0.1698$ 时(图 4k),晶界上还有 8 组位错对。随着应变的持续增加,这余下的位错对可依次进行分解,随后发生湮没。



(a)8°, (b)16°, (c)20°, (d)28°

图 3 自由能随应变变化的曲线

Fig. 3 Free energy-strain curves



(a) $\epsilon = 0$, (b) $\epsilon = 0.0306$, (c) $\epsilon = 0.0864$, (d) $\epsilon = 0.0888$, (e) $\epsilon = 0.0984$, (f) $\epsilon = 0.1050$, (g) $\epsilon = 0.1122$, (h) $\epsilon = 0.1188$, (i) $\epsilon = 0.1368$, (j) $\epsilon = 0.1620$, (k) $\epsilon = 0.1698$, (l) $\epsilon = 0.2424$

图4 晶界取向角为 28° 的样品,晶界位错运动演化

Fig. 4 Dislocation annihilation process simulation of grain boundary with different strain ϵ at 28°

4 结论

采用晶体相场模型模拟不同取向差的晶界位错演化湮没过程,主要结论如下:

1) 晶界湮没主要特征阶段是,首先晶界位错攀移,然后发生位错分解,位错由攀移运动转化为作滑移运动;接着滑移位错穿过晶粒内部,直到在对面晶界上湮没;剩余的晶界位错继续作攀移运动,然后又出现位错分解作滑移运动,最后在晶内湮没消失。晶界取向差越大,晶界位错越多,晶界位错湮没的过程就越复杂。

2) 体系自由能曲线出现了峰谷结构,反映了位错同时湮没的数量和在不同位置的湮没情况。位错在晶界上湮没合并,体系自由能曲线的谷较浅;在晶粒内部湮没,曲线的谷较深;同时湮没的位错数目越多,曲线的谷越深;晶界同时攀移的位错数目越多,曲线的峰越高。

参考文献:

[1] 徐恒钧,刘国勋.材料科学基础[M].北京:北京工业大学出版社,2001:265-279.

学出版社,2001:265-279.

XU H J, LIU G X. Fundamentals of Materials Science [M]. Beijing: Beijing University of Technology Press, 2001:265-279.

[2] 胡庚祥,蔡珣,戎咏华.材料科学基础[M].3版.上海:上海交通大学出版社,2010:99-129.

HU G X, CAI X, RONG Y H. Fundamentals of Materials Science [M]. 3rd edition. Shanghai: Shanghai Jiao Tong University Press, 2010:99-129.

[3] BOBYLEV S V, GUTKIN M Y, OVID'KO I A. Transformations of grain boundaries in deformed nanocrystalline materials[J]. Acta Materialia, 2004, 52(13): 3793-3805.

[4] 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. ZHANG S, HUANG L L, ZHANG W L, et al. Phase field simulation for microstructure evolution of ceramic powder sintering system[J]. Guangxi Sciences, 2012, 19(4): 337-340.

[5] ELDER K R, KATAKOWSKI M, HAATAJA M, et al. Modeling elasticity in crystal growth[J]. Physical Review Letters, 2002, 88(24): 245701.

- [6] ELDER K R, GRANT M. Modeling elastic and plastic deformations in nonequilibrium processing using phase field crystals [J]. *Physical Review E*, 2004, 70 (5): 051605.
- [7] STEFANOVIC P, HAATAJA M, PROVATAS N. Phase field crystal study of deformation and plasticity in nanocrystalline materials[J]. *Physical Review E*, 2009, 80(4):046107.
- [8] BERRY J, GRANT M, ELDER K R. Diffusive atomistic dynamics of edge dislocations in two dimensions [J]. *Physical Review E*, 2006, 73(3):031609.
- [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.
YANG T, CHEN Z, DONG W P. Phase field crystal simulation of stress-induced annihilation of sub-grain boundary with double-array dislocation[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2011, 47(10):1301-1306.
- [10] 高英俊, 王江帆, 罗志荣, 等. 晶体相场方法模拟纳米孪晶结构[J]. *计算物理*, 2013, 30(4):577-581.
GAO Y J, WANG J F, LUO Z R, et al. Nano-twin structure simulation with phase field crystal method [J]. *Chinese Journal of Computational Physics*, 2013, 30(4):577-581.
- [11] 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):050507.
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(5):050507.
- [12] 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拟[J]. *中国有色金属学报*, 2013, 23(7):1892-1899.
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(7):1892-1899.
- [13] 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 boundaries [J]. *Guangxi Sciences*, 2013, 20(4):311-315.
- [14] 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.
- [15] 毛鸿, 罗志荣, 黄世叶, 等. 材料裂纹扩展分叉机理的晶体相场法研究[J]. *广西科学*, 2015, 22(5):499-505.
MAO H, LUO Z R, HUANG S Y, et al. Phase-field-crystal modeling for crack propagation and branch of materials[J]. *Guangxi Sciences*, 2015, 22(5):499-505.
- [16] 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(10):1215-1222.
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(10):1215-1222.
- [17] 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.
GAO Y J, LUO Z R, HU X Y, et al. Phase field simulation of static recrystallization for AZ31 Mg alloy[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2010, 46(10):1161-1172.

(责任编辑:尹 闯)

(上接第 436 页 Continue from page 436)

- [11] KRILL III C E, CHEN L Q. Computer simulation of 3-D grain growth using a phase-field model[J]. *Acta Materialia*, 2002, 50(12):3059-3075.
- [12] 魏承炆, 李赛毅. 温度梯度对晶粒生长行为影响的相场模拟[J]. *物理学报*, 2011, 60(10):132-139.
WEI C Y, LI S Y. Effect of temperature gradient on grain growth behavior from phase field simulations[J]. *Acta Physica Sinica*, 2011, 60(10):132-139.
- [13] KURTZ S K, CARPAY F M A. Microstructure and normal grain growth in metals and ceramics. Part II. Experiment[J]. *Journal of Applied Physics*, 1980, 51(11):5745-5754.
- [14] LOUAT N P. On the theory of normal grain growth [J]. *Acta Metallurgica*, 1974, 22(6):721-724.
- [15] SAHAY S S, MALHOTRA C P, KOLKHEDE A M. Accelerated grain growth behavior during cyclic annealing[J]. *Acta Materialia*, 2003, 51(2):339-346.
- [16] SAHAY S S, KUMAR B V H, KRISHNAN S J. Microstructure evolution during batch annealing[J]. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 2003, 12(6):701-707.

(责任编辑:陆 雁)