

## 条状晶位错运动的晶体相场模拟\*

# Phase field crystal Study on Dislocations Movement in Strip Grain

邓芊芊<sup>1</sup>, 胡绪志<sup>1</sup>, 黄礼琳<sup>1,2</sup>, 罗志荣<sup>2</sup>, 高英俊<sup>1\*\*</sup>

DENG Qianqian<sup>1</sup>, HU Xuzhi<sup>1</sup>, HUANG Lilin<sup>1,2</sup>, LUO Zhirong<sup>2</sup>, GAO Yingjun<sup>1</sup>

(1. 广西大学物理科学与工程技术学院, 广西高校新能源重点实验室, 广西南宁 530004; 2. 玉林师范学院物理科学与工程技术系, 广西玉林 537000)

(1. Guangxi Key Laboratory of Novel Energy Materials of College and University, College of Physics Science and Engineering, Guangxi University, Nanning, Guangxi, 530004, China; 2. Institute of Physics Science and Engineering Technology, Yulin Normal University, Yulin, Guangxi, 537000, China)

**摘要:**【目的】研究条状晶内不同矢量位错相互作用的情况,以揭示其运动和能量变化规律。【方法】采用晶体相场(PFC)模型,模拟4块取向差较小的条状晶所形成的4条亚晶界在应力作用下的湮没机制,并从位错运动和能量变化角度分析该机制。4条亚晶界中,2条是对称倾侧亚晶界,2条为非对称倾侧亚晶界结构。【结果】取向差较小的条状晶所形成的晶界为亚晶界,亚晶界上双位错组数量由相邻两晶粒的取向差的大小决定;而在应力作用下,亚晶界的湮没过程主要有3个阶段:位错攀移及体系能量升高的第1阶段,位错分离及体系能量下降的第2阶段,位错相互作用及体系能量波动升高的第3阶段;由于存在非对称倾侧亚晶界,整个湮没过程比对称倾侧亚晶界的湮没过程较复杂一些。【结论】位错的相互作用存在4种情况:两位错相向运动,当位错矢量方向完全相反且在同一直线上时,相遇后发生湮没;位错相向运动,但运动方向不在一条直线上且距离较近,则可以相互吸引,最后依然可以湮没;如果运动方向不在一条直线上且距离较远,则无法相互吸引,它们只会朝着各自的运动方向继续运动;如果运动方向在一条直线上,但是位错方向不完全相同,它们相遇后不会湮没,而是组合形成一个复合位错。

**关键词:** 晶体相场模型 亚晶界 位错 相互作用

**中图分类号:** TG111.2 **文献标识码:** A **文章编号:** 1002-7378(2017)04-0223-05

**Abstract:**【Objective】In this paper, the interaction between dislocations with different vectors in the strip crystal is studied to reveal the regularity of its movement and energy.【Methods】The phase field crystal (PFC) model is used to simulate the annihilation mechanism of 4 sub-grain boundaries (SGBs) formed by 4 strip grains with smaller orientation under stress. The

annihilation mechanism is analyzed from the perspective of dislocation movement and energy change. In these 4 sub-grain boundaries, two of them are symmetrical tilt SGBs and the other two are asymmetric tilt SGBs.【Results】Studies show that the grain boundary formed by the strip grains with smaller orientations is SGB. The number of double dislocation groups in the

**收稿日期:** 2017-07-10

**作者简介:** 邓芊芊(1990-),男,博士,主要从事材料微观结构数值模拟。

\* 国家自然科学基金项目(51161003, 51561031), 广西自然科学基金重点项目(2012GXNSFDA053001)和广西大学大创项目(201610593220, 201610593218)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试验研究, E-mail: gaoyj@gxu.edu.cn.

SGB is determined by the orientation of the two adjacent grains. Under the stress, the annihilation process of SGBs is mainly composed of 4 stages: The first stage of dislocations climbing and system energy arising, the second stage of dislocations separation and system energy decrease, the third stage of dislocations interaction and system energy fluctuation increase. Due to the existence of asymmetric tilt SGB, the whole annihilation process is more complicated than that of the symmetric tilt SGB. **【Conclusion】** There are three cases of dislocation interaction: Two dislocations move forward; if these dislocations have opposite vectors at the same line, they will annihilate; if these dislocations are not at the same line their distance is closer, they can attract each other and then annihilate; if these dislocations are not at the same line their distance is relatively far, they cannot be attracted to each other but just keep moving in the direction of their movement; if the direction of movement is in a straight line, but the direction of dislocation is not exactly the same, when they meet, they do not annihilate, but combine to form a compound dislocation.

**Key words:** phase field crystal model, sub-grain boundary, dislocation, interaction

## 0 引言

**【研究意义】**晶体材料通常由大量晶粒组成,取向不同的两晶粒间便会形成晶界<sup>[1-2]</sup>。按照两晶粒取向差的大小,晶界可大致分为小角度晶界和大角度晶界。小角度晶界的取向差小于 $10^\circ$ ,由一系列位错按特定方式排列而成。晶体中的位错引起晶体点阵结构发生畸变<sup>[2]</sup>,但在稳定条件下,位错可以保持稳定结构。在外加应力的作用下,位错会发生运动,致使晶界(包括亚晶界)迁移,甚至是湮没<sup>[3-5]</sup>。因此,晶界的结构和迁移方式对晶体材料的加工具有重要影响<sup>[6]</sup>,也是拓扑几何缺陷(空位、空洞、位错、晶界和微裂纹等)决定材料在介观和宏观尺度上的性能的一个重要例证<sup>[6]</sup>。然而,以目前的实验条件,很难实时观察晶体内部这些微结构的动态过程,但借助计算机模拟方法可以弥补这些实验上的不足。特别是近几年提出的晶体相场(PFC)方法<sup>[7-9]</sup>,能够在扩散时间尺度( $10^{-6}$  s)上描述纳米尺度的原子运动,相对于分子动力学(MD)与传统相场方法<sup>[10-12]</sup>具有一定的优势。**【前人研究进展】**PFC方法已得到广泛应用,例如可用于位错和晶界的迁移<sup>[13-14]</sup>、裂纹扩展<sup>[15-16]</sup>、结构相变<sup>[17-18]</sup>、晶界熔解<sup>[19-20]</sup>、小角度对称倾转亚晶界的湮没过程<sup>[21-23]</sup>和空位相互作用<sup>[24-26]</sup>等。**【本研究切入点】**应用PFC方法模拟四晶粒的晶界位错运动和相互作用,分析位错的运动和自由能变化之间的内在联系,揭示位错运动、位错反应形式以及能量变化规律。**【拟解决的关键问题】**应用PFC方法模拟了取向差不同的条状晶形成对称和非对称亚晶界位错在外加应力作用

下的运动、相互作用以及湮没的过程,同时从能量变化角度分析该过程的规律。

## 1 模型与方法

原子密度场函数 $\rho(r)$ 用相场变量表示,

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

其中 $a_{n,m}$ 代表Fourier系数, $G$ 代表倒格矢, $r$ 代表空间位置矢量。晶格原子的周期排列结构特征由 $\sum a_{nm}$ 所体现, $\rho_0$ 代表原子平均密度。体系的自由能函数 $F$ 表示为

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

其中 $\gamma$ 代表温度的参数。

Cahn-Hilliard动力学方程与时间相关,可以用来描述保守的原子密度场变量的演化,方程的表达式为

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

对(3)式求解,得到稳定的三角相的二维单模近似解 $\rho$ 为

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

其中,波矢 $q = \sqrt{3}/2$ ,振幅 $A = 4/5(\rho_0 + 1/3\sqrt{-15r - 36\rho_0^2})$ 。

## 2 样品的制备与应变施加

采用周期性边界条件进行模拟,选取空间步长为 $\Delta x = \Delta y = \pi/4$ ,时间步长 $\Delta t = 0.5$ 。模拟参数

$\gamma = -0.25, \rho_0 = 0.285$ 。计算区域  $L_x \times L_y = 1024\Delta x \times 516\Delta y$ , 设置成 8 个不同区域: 4 个晶粒区域, 晶粒的初始取向角分别为  $0^\circ, -2^\circ, 2^\circ, -2^\circ$ , 如图 1 所示。样品经过  $10^5$  步弛豫, 体系处于稳定状态。

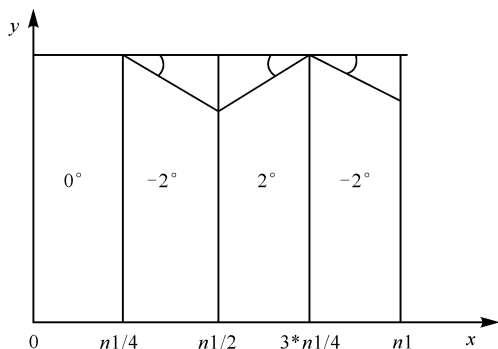


图 1 晶粒初始化示意图

Fig. 1 Schematic diagram of initial grains

对样品施加应变。在二维条件下, 变形采用等面积模型, 即

$$\Delta x \Delta y = \Delta x' \Delta y', \quad (5)$$

式(5)中,  $\Delta x'$  和  $\Delta y'$  分别为变形后的空间步长,  $\Delta x$  和  $\Delta y$  分别为变形前的空间步长。设  $n$  为时间步数,  $\Delta t$  为时间步长, 应变速率为  $\dot{\epsilon}$ , 则应变变量  $\epsilon = n \dot{\epsilon} \Delta t$ 。设在  $x$  方向上给体系一个拉应力, 则

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

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

### 3 结果与分析

在外应力的作用下, 体系自由能曲线图像如图 2 所示, 晶界位错的运动如图 3 所示, 图 3 中 a~m 与图 2 自由能曲线每一点对应。整个过程通过自由能曲线可细分为 6 个阶段, a~c 为第 1 阶段, c~f 为第 2 阶段, f~g 为第 3 阶段, g~h 为第 4 阶段, h~i 为第 5 阶段, i~m 为第 6 阶段。即自由能图像上的每一个极大值和极小值都对应一个阶段的终点

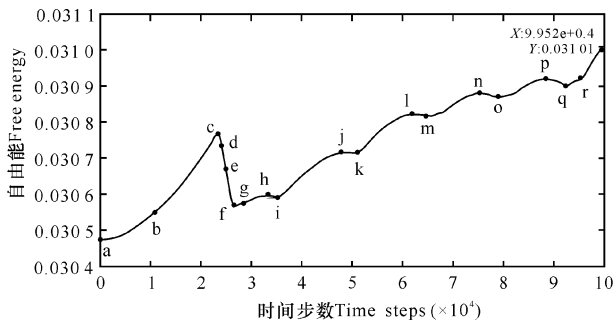


图 2 自由能曲线

Fig. 2 Free energy curve

和起点。弛豫后加力前的样品晶粒结构如图 3a 所示, 晶界能看到 12 个位错, 分别用 A~L 表示。AB、CD、EFGH、IJKL 这 4 列晶界中, 同一列晶界的位错方向相同, 而每一列都与相邻列的位错方向相反。加应变后, 位错开始运动, AB 和 CD 分别竖直向下和竖直向上作攀移运动, EFGH 和 IJKL 也是如此, 如图 3b 所示。此时由自由能图像可知, 在这一过程中, 随着位错的攀移, 能量不断增加, 在积累到足够的能量后, 即到了 c 点后, 能量开始下降, 位错也开始分解(图 3c)。

由图 3d 可知, 继续加力至 24 000 步, 可以看到明显的位错分解图像, A 分解为 A1 和 A2, B 分解为 B1 和 B2, C~K 位错也是如此, 而位错 L 尚且没有完全分解, 因为位错 A 未分解之前的运动方向为竖直向下, 所以分解后的 A1 和 A2 朝着远离对方的方向运动, 即竖直向下, 即 A1 和 A2 分别沿着左下和右下运动; 同理, 位错 B1 和 B2 分别沿着左下和右下运动, 位错 C1、D1 和 C2、D2 分别沿着左上和右上运动, 图 3e 即为运动过程的图像。随着应变的施加, 位错 A2 和 D1 会相遇, 由于两者的位错方向刚好相反, 相遇后会产生湮没现象; 同理, 位错 D2 和 F1 也会产生湮没现象, 位错 A1 和 J2 也会湮没, 此时晶粒的状态对应图 3f, 能量也同时降低到极小值。此时, 晶粒内还有 3 对相距比较近的位错: H2-I1、E2-J1、K1-F2, 其中 H2-I1 和 K1-F2 这两对位错相距更近一些, E2-J1 稍微远一点。

由图 3g 可知, 相距更近的位错对 H2-I1 和 K1-F2 相互吸引, 最终湮没, 而相距较远的位错对 E2-J1 仍然保持着原来的运动方向。此时, 可以看到, 图 2 的自由能曲线图像再次出现了一个极小值 g。至此, 第 4 阶段结束。第 5 阶段 g~h、第 6 阶段 h~i (图 3g~i) 所示) 与第 1 阶段 a~c、第 2 阶段 c~f 相似。在第 5 阶段中, 剩余的位错随着应力的施加继续攀移, 对应图 2 能量也继续增加, 当能量达到足够高时, 位错就会摆脱晶界的束缚而产生滑移, 最终两两相遇的位错发生湮没现象。第 6 阶段完成后, 整个体系只剩下 2 对位错, 直到 q 点之前, 这两对位错都没有发生湮没现象, 只是一直在晶粒内运动。经过长时间的相向运动, 它们最终还是在同一直线上相遇, 至此, 整个体系重新变成没有进行任何旋转变化的单晶。

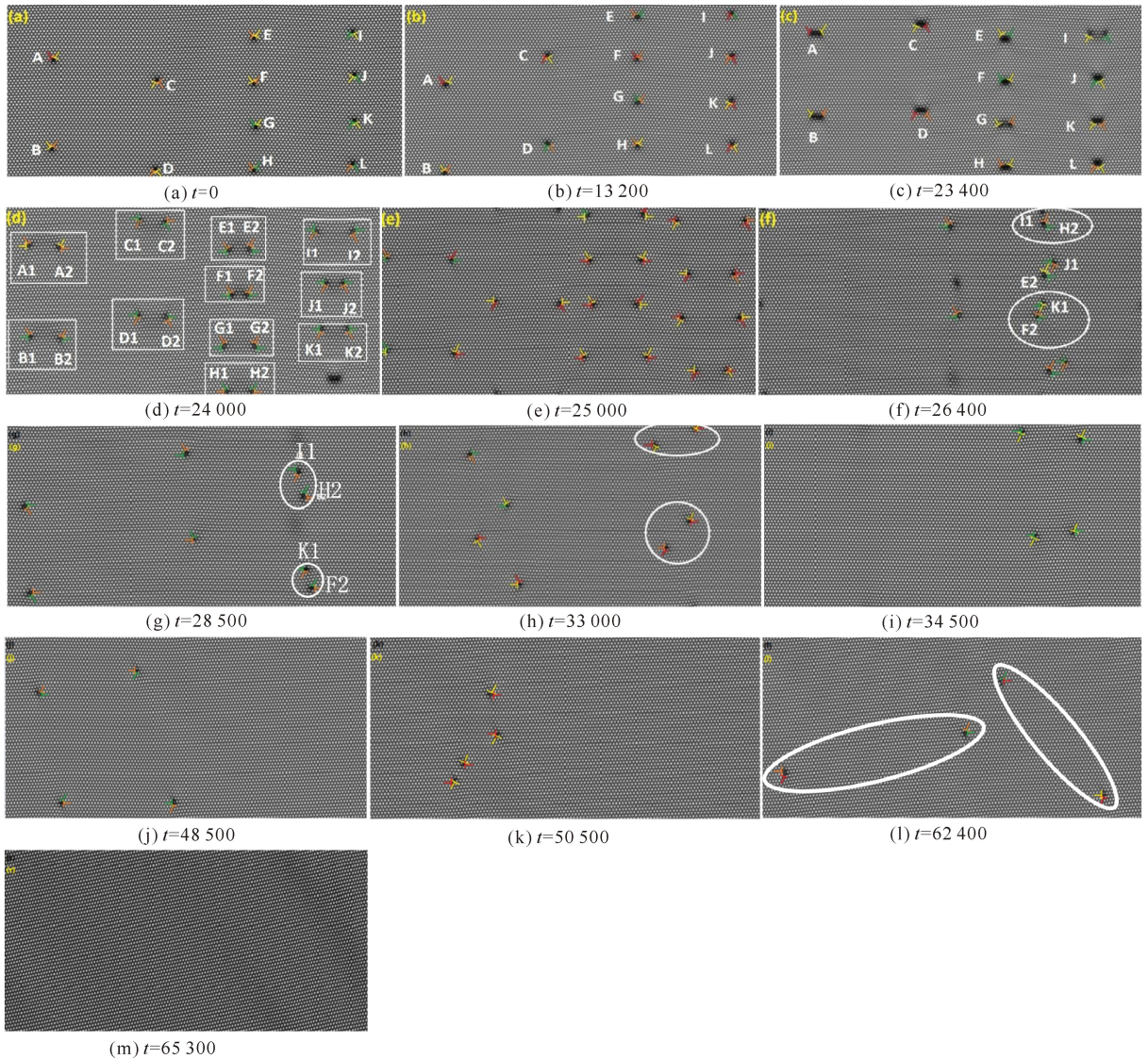


图3 体系演化过程

Fig. 3 System evolution process

根据以上分析,可以很好的理解图2自由能曲线呈现波动式上升的变化。最初存在一个较高的峰,这是由于较多的位错攀移;较陡的下降,是因为较多的位错同时湮没。之后的峰谷波动就较为平缓,因为位错攀移和湮没的数量减少了。

#### 4 结论

位错的相互作用存在4种情况:二位错相向运动,若位错矢量方向完全相反且在同一直线上,则相遇后发生湮没;如果运动方向不在一条直线上,但距离较近,则可以相互吸引,最后依然可以湮没;如果运动方向不在一条直线上,且距离较远,则无法相互吸引,只会朝着各自的运动方向继续运动;如果运动方向在一条直线上,但是位错方向不完全相同,它们相遇后不会湮没,而是组合形成一个复合位错。

#### 参考文献:

- [1] 徐恒均,刘国勋.材料科学基础[M].北京:北京工业大学出版社,2001.  
XU H J, LIU G X. Fundamentals of materials science [M] Beijing: Beijing University of Technology Press, 2001.
- [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  
HU G X, CAI X, RONG Y H. Fundamentals of materials science [M]. 3rd ed, Shanghai: Shanghai Jiaotong University Press, 2010
- [3] BOBYLEV S V, OVID'KO I A. Transformations of faceted grain boundaries in high- $T_c$  superconductors [J]. Physical Review B, 2003, 67(13):132506.
- [4] OVID'KO I A, SKIBA N V. Enhanced dislocation emission from grain boundaries in nanocrystalline materials [J]. Scripta Materialia, 2012, 67(1):13-16.

- [5] GUKKIN M Y, OVIDKO I A. Transformations of low-angle tilt boundaries in high-Tc superconductors [J]. *Physical Review B*, 2001, 63(6):064515.
- [6] HAYAKAWA M, YAMAGUCHI K, KIMURA M. Visualization of subgrain structure for a ferritic 12Cr-2W steel using backscattered scanning electron microscopy [J]. *Materials Letters*, 2004, 58(21):2565-2568.
- [7] 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.
- [8] 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.
- [9] BERRY J, GRANT M, ELDER K R. Diffusive atomistic dynamics of edge dislocations in two dimensions [J]. *Physical Review E*, 2006, 73(1):31609.
- [10] WANG Y Z, LI J. Phase field modeling of defects and deformation [J]. *Acta Materialia*, 2010, 58(4):1212-1235.
- [11] YU Y M, BACKOFEN R, VOIGT A. Morphological instability of heteroepitaxial growth on vicinal substrates: A phase-field crystal study [J]. *Journal of Crystal Growth*, 2011, 318:18-22.
- [12] ELDER K R, ROSSI G, KANERVA P, et al. Patterning of heteroepitaxial overlayers from Nano to micron scales [J]. *Physical Review Letters*, 2012, 108(22):226102.
- [13] GAO Y J, HUANG L L, DENG Q Q, et al. Phase field crystal simulation of dislocation configuration evolution in dynamic recovery in two dimensions [J]. *Acta Materialia*, 2016, 117:238-251.
- [14] 罗志荣, 卢成健, 高英俊. 相场法研究初始微结构对晶粒长大的影响 [J]. *广西科学*, 2016, 23(5):432-436, 442.
- LUO Z R, LU C J, GAO Y J. Phase field study on effect of initial microstructure on grain growth [J]. *Guangxi Sciences*, 2016, 23(5):432-436, 442.
- [15] 黄礼琳, 叶里, 胡绪志, 等. 不同晶向取向的裂纹扩展演化模拟 [J]. *广西科学*, 2016, 23(5):454-458, 469.
- HUANG L L, YE L, HU X Z, et al. Simulation study of crack propagation and evolution in different crystal orientations [J]. *Guangxi Sciences*, 2016, 23(5):454-458, 469.
- [16] 温振川, 宁岁婷, 张睿, 等. 纳米级缺口起裂临界条件的晶体相场模拟 [J]. *广西科学*, 2016, 23(5):448-453.
- WEN Z C, NING S T, ZHANG R, et al. Phase-field-crystal simulation of critical conditions for the crack initiation of nanoscale notch [J]. *Guangxi Sciences*, 2016, 23(5):448-453.
- [17] CHEN L Q. Phase-field method of phase transitions/domain structures in ferroelectric thin films: A review [J]. *Journal of the American Ceramic Society*, 2008, 91(6):1835-1844.
- [18] GREENWOOD M, ROTTLE J, PROVATAS N. Phase-field-crystal methodology for modeling of structural transformations [J]. *Physical Review E*, 2011, 83(3):031601.
- [19] MELLENTHIN J, KARMA A, PLAPP M. Phase-field crystal study of grain-boundary premelting [J]. *Physical Review B*, 2008, 78(18):184110.
- [20] 高英俊, 黄礼琳, 周文权, 等. 高温应变下的亚晶界湮没与位错旋转机制的晶体相场模拟 [J]. *中国科学: 技术科学*, 2015, 45(3):306-321.
- GAO Y J, HUANG L L, ZHOU W Q, et al. Phase field crystal simulation of subgrain boundary annihilation and dislocation rotation mechanism under strain at high temperature [J]. *Scientia Sinica: Technologica*, 2015, 45(3):306-321.
- [21] 高英俊, 袁龙乐, 刘瑶, 等. 不同温度晶界位错湮没过程的晶体相场模拟 [J]. *广西科学*, 2014, 21(3):203-208.
- GAO Y J, YUAN L L, LIU Y, et al. Phase field crystal simulation of dislocation annihilation at different temperature [J]. *Guangxi Sciences*, 2014, 21(3):203-208.
- [22] 刘瑶, 袁龙乐, 卢强华, 等. 晶体相场模拟取向角对晶界湮没过程的影响 [J]. *广西科学*, 2016, 23(5):437-442.
- LIU Y, YUAN L L, LU Q H, et al. Phase-field-crystal simulation of effect of different orientation angle on annihilation of grain boundary [J]. *Guangxi Sciences*, 2016, 23(5):437-442.
- [23] 杨瑞琳, 刘瑶, 胡绪志, 等. 双位错滑移运动的晶体相场模拟 [J]. *广西科学*, 2016, 23(5):443-447.
- YANG R L, LIU Y, HU X Z, et al. Phase-field-crystal simulation of double dislocation Gliming [J]. *Guangxi Sciences*, 2016, 23(5):443-447.
- [24] 黄世叶, 李胜男, 胡绪志, 等. 晶界位错运动的空位晶体相场模拟 [J]. *广西科学*, 2016, 23(5):459-464.
- HUANG S Y, LI S N, HU X Z, et al. Vacancy phase-field-crystal simulation of dislocation motion of grain boundary [J]. *Guangxi Sciences*, 2016, 23(5):459-464.
- [25] 叶里, 胡绪志, 黄礼琳, 等. 拉应力作用下晶界位错运动过程的晶体相场模拟 [J]. *广西科学*, 2016, 23(5):470-473, 484.
- YE L, HU X Z, HUANG L L, et al. Phase-field-crystal simulation of grain boundary dislocation motion under tensile stress [J]. *Guangxi Sciences*, 2016, 23(5):470-473, 484.
- [26] 叶里, 黄礼琳, 孔令一, 等. 晶体弹性行为的晶体相场模拟 [J]. *广西科学*, 2016, 23(5):474-477.
- YE L, HUANG L L, KONG L Y, et al. Phase-field-crystal simulation for elastic behavior of crystals [J]. *Guangxi Sciences*, 2016, 23(5):474-477.