

DOI: 10.13657/j.cnki.gxkxyxb.20181204.004

孔令一, 刘哲源, 李依轩, 等. 小角对称晶界及亚晶界湮没过程的晶体相场模拟[J]. 广西科学院学报, 2018, 34(4): 287-291.

KONG L Y, LIU Z Y, LI Y X, et al. Phase field crystal study on small angle symmetry grain boundary and sub-grain boundary annihilation process[J]. Journal of Guangxi Academy of Sciences, 2018, 34(4): 287-291.

小角对称晶界及亚晶界湮没过程的晶体相场模拟^{*}

Phase Field Crystal Study on Small Angle Symmetry Grain Boundary and Sub-Grain Boundary Annihilation Process

孔令一, 刘哲源, 李依轩, 黄宗吉, 高英俊^{**}

KONG Lingyi, LIU Zheyuan, LI Yixuan, HUANG Zongji, GAO Yingjun

(广西大学物理科学与工程技术学院, 广西南宁 530004)

(School of Physical Science and Technology, Guangxi University, Nanning, Guangxi, 530004, China)

摘要:【目的】研究六角相的位错相互作用的情况,以揭示其运动及能量变化规律。【方法】采用晶体相场(Phase-Field Crystal, PFC)模型,模拟小角对称双晶所形成的晶界及亚晶界在应力作用下的湮没机制,并从位错运动及能量变化角度分析该机制。【结果】亚晶界运动分为3个阶段:第一阶段是体系能量增加,反映了位错的攀移和滑移过程,以及生成的亚晶界迁移;第二阶段是体系自由能量降低的阶段,反映了亚晶界位错相互之间靠近吸引,发生湮没的过程;第三阶段是重复前两个阶段,最后位错全部湮没消失,形成完整单晶。【结论】PFC模型能较好地用于研究六角相双晶在施加应力作用下由位错形成的晶界(包括亚晶界)的运动。

关键词:亚晶界 晶向取向 双晶 晶体相场

中图分类号:TB31 文献标识码:A 开放科学(资源服务)标识码(OSID):

文章编号:1002-7378(2018)04-0287-05

微信扫一扫,与作者在线交流



Abstract:【Objective】The dislocation interaction in the six angular phase is studied to reveal its movement and energy variation.【Methods】The phase field crystal (PFC) model is used to simulate the annihilation mechanism of the grain boundary and sub-grain boundary formed by small-angle symmetric double crystal under the stress action, and the mechanism is analyzed from the perspective of dislocation motion and energy change.【Results】The movement of sub-grain boundary is divided into three stages: The first stage is the increase of the system energy, reflecting the migration and slip process of dislocations and the migration of the sub-grain boundary. The second stage is the stage of the reduction of the system free energy, which reflects the close proximity of the sub-grain boundary dislocation to interaction and the annihilation process occurs. The third stage is to repeat the first two stages, and finally all dislocations will annihilate to form a perfect single crystal.【Conclusion】PFC model can be used to study the movement of grain boundaries (including sub-grain boundaries) formed by dislocations under the action of stress by hexagonal bi-crystals.

收稿日期:2018-08-10

作者简介:孔令一(1994-),女,硕士研究生,主要从事材料微结构与模拟实验研究。

* 国家自然科学基金项目(51161003)和广西自然科学基金项目(2018GXNSFAA138150)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.

energy, which reflects the close proximity of the sub-grain boundary dislocation to interaction and the annihilation process occurs. The third stage is to repeat the first two stages, and finally all dislocations will annihilate to form a perfect single crystal.【Conclusion】PFC model can be used to study the movement of grain boundaries (including sub-grain boundaries) formed by dislocations under the action of stress by hexagonal bi-crystals.

Key words: sub-grain boundary, crystal orientation, double-crystal, phase field crystal

0 引言

【研究意义】亚晶界是由一系列位错按特定的方式排列而成的一种面缺陷,广泛存在于晶粒内部,其结构与迁移方式对材料的力学行为有重要的影响^[1]。通常认为亚晶界是一种位错源,即位错在应变作用下发生分离作用,形成新晶体^[2],就是所谓的亚晶界,该过程实质上是生成了亚晶粒^[3]。在应力作用下,位错发生迁移进而导致亚晶界的湮没。但是在现有实验条件下较难观察到亚晶界上位错的分布以及施加应力后的动态过程,所以我们选用计算机模拟的方法来研究这个问题。现在已经有很多学者用各种计算机模拟方法对小角双晶位错进行相关研究,例如分子动力学(Molecular dynamic simulations, MD)法^[4-5],晶体相场(Phase-Field Crystal, PFC)法^[6-10]等。但是由于 MD 方法所施加的应变作用,量级上往往与实际实验情况相差较大^[1],因此该方法存在局限性,而 Elder 等^[11]基于密度泛函理论提出的晶体相场模型能够在原子尺度和扩散时间尺度上模拟材料的微观结构转变和演化,具有较大的优势,并且已经有很多人对这个模型进行了应用^[12-17],所以本研究也采用晶体相场法。**【前人研究进展】**杨涛等^[1]用晶体相场法研究了应力诱发双位错亚晶界湮没,并得到了不同应力和温度下对于位错淹没情况的影响,以及高英俊等^[2]用晶体相场法研究高温应变下晶界湮没机理,用晶粒长大来解释能量变化曲线,使我们对亚晶界的湮没机制有了更深入的理解。**【本研究切入点】**关于小角双晶被施加压力后亚晶界上位错分布及动态过程变化特征还未见报道,本研究将用亚晶界的湮没来解释自由能曲线的变化。**【拟解决的关键问题】**应用 PFC 模型模拟取向角为 4° 的双晶对称的亚晶界在外加应力作用下亚晶界的运动以及湮没的过程,同时从能量变化角度分析其变化过程的规律。

1 模型与方法

1.1 体系的能量密度函数

根据文献^[18],原子密度场函数相场的表达式可写为

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

式子右边第一项是原子的周期排列特征项,第二项是反映均匀相的原子密度。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 γ 代表温度的参数。

保守的原子密度场变量的演化可用与时间相关的 Cahn-Hilliard 动力学方程描述:

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

可以利用式(3)将动力学方程(4)写为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla^2 (\gamma \rho + (1 + \nabla^2)^2 + \rho^3). \quad (4)$$

由于方程(4)是高阶的非线性偏微分方程,我们将采取半隐式伪谱法^[18]来求解该动力学方程。在本研究中,我们将空间步长 $\Delta x, \Delta y$ 均取为 $\pi/4$, 时间步长为 0.5, 模拟区域为 $1.024\Delta x \times 1.024\Delta y$ 。六角相的单相原子密度函数形式为

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

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

1.2 样品的制备与应变施加

在外加应变的条件下,晶粒变形,引起晶界、亚晶界的位错运动。模拟中将采取等面积不变模型^[5],即 $\Delta x \Delta y = \Delta x' \Delta y'$, 其中 $\Delta x, \Delta y$ 是变形前的空间步长, $\Delta x', \Delta y'$ 是变形后的空间步长。设 ϵ 为无量纲的应变率,在本次模拟中取值为 5×10^{-6} 。则应变大小为 $\epsilon = \epsilon \cdot n \cdot \Delta t$, n 为时间步数, Δt 为时间步长。在 x 方向给样品一个拉应变, y 方向则收到一个压应变。即 $\Delta x' = (1 + \epsilon)\Delta x$, $\Delta y' = \Delta x \Delta y / \Delta x' = \Delta y(1 + \epsilon)$ 。本研究选取的参数为 $(r, \rho_0) = (-0.10, -0.189)$, 旋转角度为 4° 。弛豫 10 万步后的样品见图 1, 可以看到分两条晶界。左、

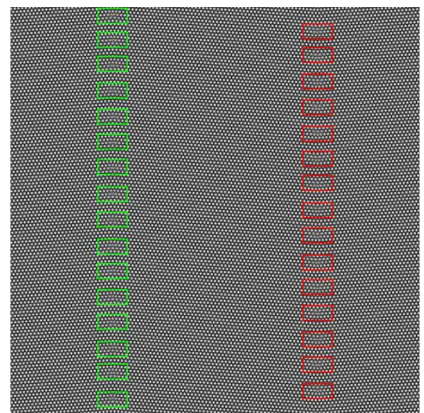


图1 样品的晶界位错排列

Fig. 1 The arrangement diagram of grain boundary dislocation of sample

右两边晶界上的位错将随着步数的增加,分两次湮没,将左边的位错命名为 A、B 组位错,将右边的位错命名为 C、D 组位错。位错细节图将在图 3 中展示出来。

2 结果与分析

在外加应力作用下,整个体系的畸变能不断增加^[19](图 2 中 a~b 段),总的自由能上升,当应力达到一定值时导致位错发生滑移(图 2 中 c 点),使得畸变能降低(图 2 中 c~f 段)。随着应力的不断增加,当施加的应力足以克服晶界的位错复分解的阻力时,左右两条晶界中各有一半的位错有序地从两条晶界发射,余下的位错将继续沿着晶界攀移;从晶界发射的位错,继续滑移运动直至遇到伯格氏矢

量大小相等方向相反的位错从而发生湮没。详细的晶界湮没过程如图 3a~j 所示。

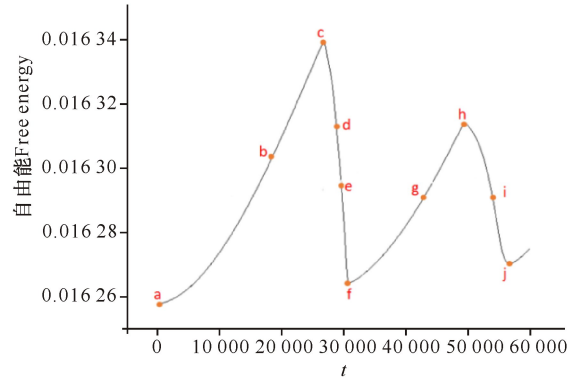
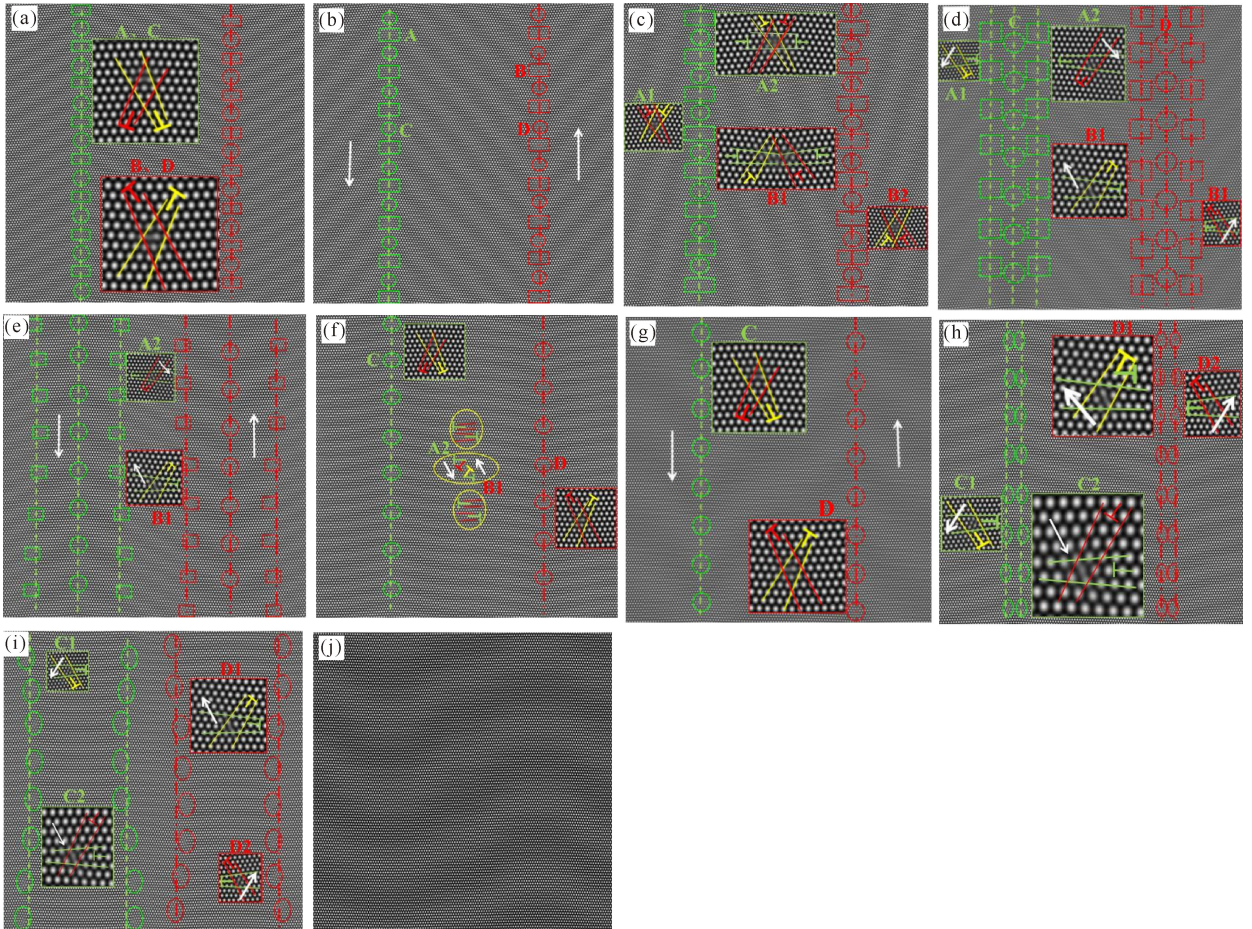


图 2 自由能-时间变化曲线

Fig. 2 The curve of free energy-time change



绿色方框和圆圈分别示意 A 组和 C 组位错,红色方框和圆圈分别示意 B 组和 D 组位错,白色箭头代表位错的攀移方向或者滑移方向

The green block and circle represent A group dislocations and C group dislocations respectively. The red block and circle represent B group dislocations and D group dislocations respectively. The white arrow represents the climbing direction or slip direction of the dislocation

(a) $\epsilon = 0$; (b) $\epsilon = -0.0405$; (c) $\epsilon = 0.0688$; (d) $\epsilon = 0.0706$; (e) $\epsilon = 0.0727$; (f) $\epsilon = 0.0767$; (g) $\epsilon = 0.1088$; (h) $\epsilon = 0.1235$; (i) $\epsilon = 0.1343$; (j) $\epsilon = 0.1450$

图 3 4° 对称倾侧晶界位错随时间的演化过程

Fig. 3 The evolution process of dislocations motion at 4° orientation angle

图2中a~j点均与图3a~j一一对应。由图3可见,4°晶界的湮没过程可主要分为3个过程:1)晶界位错攀移(图3a~c);2)位错分解,滑移,湮没(图3c~f);3)剩下半的晶界位错继续攀移,分解,滑移,湮没(如图3f~j),最后形成单晶。在图3a~b位错发生攀移,由于攀移会使整体的自由能升高^[19],所以相对应的图2中a~b段的自由能曲线在升高。当 $\epsilon=0.0405$ 时(图3c),位错分为4类,分别用绿色的矩形、圆形和红色的矩形、圆形表示出来。其中矩形所圈出来的位错就是即将发生分解的两组位错,将左侧的位错命名为A组,右侧的命名为B组。A组中即将分解的位错已经由两个位错(图3c中细节图A1),变为4个位错(图3c中细节图A2),B组也是同样的规律,这些位错增加的都是一对伯格斯矢量完全相反的位错,所以伯格斯矢量仍然守恒。其中A组位错将分解出A1、A2位错,B、C、D组也是同样的规律,这些分解出来的位错形成了亚晶界。在图3c~d的过程中,分解出来的位错向两侧滑移,滑移的方向已经用白色的箭头示意。并且我们可以观察到,之前的样品具有两条晶界,随着应力的增加,部分位错进行滑移,产生了新的亚晶界,新增的两条绿色与两条红色虚线就是亚晶界的所在处,亚晶界也随着位错的滑移进行运动。晶体被分为7个部分,从左到右分别为晶界1~6,最后一个部分由于边界周期性所以还是晶界1。可见,晶体在实验过程中由双晶变为六晶,各个晶体的面积随着亚晶界的运动而变化。当应力为0.0727时(图3e),亚晶界随着分解的位错运动而移动,A2组和B1组位错都是向中间运动。由于A2组中红色的位错与B1组黄色位错,以及A2组和B1组的绿色位错都是伯格斯矢量且大小相等方向相反,所以刚好发生湮没。分解的位错进行滑移运动时,初始的两组位错(即绿色和红色圆圈圈出来的位错)正在进行攀移运动,左侧的位错向下攀移,右侧的向上攀移,攀移的方向如图中箭头所示。在图3e~f过程中,位错进行了滑移和湮没,因此自由能一直处于下降的趋势。当中间只剩下3对即将湮没的位错时(图3f),自由能也到达了谷底。所有的亚晶界即将完全消失。当应力为0.1088时,样品只剩下图中圈出来的8对位错,在图3f~g的过程中,8对位错进行着攀移运动,左边绿色圈出的位错向下攀移,右边红色圈出的位错向上攀移,将左侧位错命名为C组,右侧位错命名为D组。应力加到一定的程度后,位错再次发生分解(图3h),将分解的位错分别

命名为C1、C2、D1、D2。随着分解的位错运动,样品由两条晶界,变为4条亚晶界,各组位错滑移的方向由白色箭头标出。当应力为0.1343时,在图3h~i的过程中,位错一直进行着滑移运动,亚晶界也在运动,所以自由能也一直处于下降的趋势。C2和D1组位错组成的亚晶界向中间滑移运动,C2组的红色位错与D1组的黄色位错,以及C2组与D1组的绿色位错都是伯格斯矢量大小相等方向相反的位错,刚好可以完成湮没。如图3j所示,位错已经全部湮没,形成单晶。

3 结论

施加应力下的小角双晶晶界湮没过程,主要分为3个阶段特征:第一阶段是体系能量增加的阶段,反映了位错的攀移和滑移过程,以及生成的亚晶界迁移;第二阶段是体系自由能量降低的阶段,反映了伯格斯矢量异号的亚晶界位错相互之间靠近吸引,发生湮没过程;第三阶段是重复前两个阶段,最后位错全部湮没消失,形成完整单晶。

参考文献:

- [1] 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.
- [2] 高英俊,周文权,邓芊芊,等. 晶体相场方法模拟高温应变作用的预熔化晶界的位错运动[J]. 金属学报, 2014, 50(7): 886-896.
GAO Y J, ZHOU W Q, DENG Q Q, et al. Phase field crystal simulation of strain effects on dislocation movement of premelting grain boundaries at high temperature[J]. Acta Metallurgica Sinica, 2014, 50(7): 886-896.
- [3] 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, 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]. Sci Sin Tech, 2015, 45(3): 306-321.
- [4] LIU D H, WANG A G, YU J C, et al. Molecular dynamics simulation on formation mechanism of grain

- boundary steps in micro-cutting of polycrystalline copper[J]. *Computational Materials Science*, 2017, 126: 418-425.
- [5] LI J, FANG Q, LIU B, et al. The effects of pore and second-phase particle on the mechanical properties of machining copper matrix from molecular dynamic simulation[J]. *Appl Surf Sci*, 2016, 384: 419-431.
- [6] HU S, CHEN Z. Phase-field-crystal study on the reaction mechanisms of opposite sign edge dislocations appearing in the deformation processes of asymmetric tilt sub-grain boundary system[J]. *Computational Materials Science*, 2016, 124: 193-203.
- [7] CHEN L Q. Phase-field models for microstructure evolution[J]. *Annual Review of Materials Research*, 2002, 32(1): 113-140.
- [8] 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.
- [9] BERRY J, ELDER K R, GRANT M. Melting at dislocations and grain boundaries: A phase field crystal study[J]. *Physical Review B*, 2008, 77(22): 224114.
- [10] WU K A, ADLAND A, KARMA A. Phase field crystal model for fcc ordering[J]. *Phys Rev*, 2010, 81E: 061601.
- [11] ELDER K R, HUANG Z F. A phase field crystal study of epitaxial island formation on nanomembranes [J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2010, 22(36): 364103.
- [12] GAO Y J, LUO Z R, HUANG L L, et al. Phase field crystal study of nano-crack growth and branch in materials[J]. *Modell Simul Mater Sci Eng*, 2016, 24: 055010.
- [13] 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.
- [14] 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.
- [15] 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 Gliding[J]. *Guangxi Sciences*, 2016, 23(5): 443-447.
- [16] HU S, XI W, CHEN Z, et al. Coupled motion of grain boundaries and the influence of microcracks: A phase-field-crystal study [J]. *Computational Materials Science*, 2017, 132: 125.
- [17] 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.
- 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.
- [18] 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.
- 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(5): 3595-3600.
- [19] 孔令一, 卢昱江, 邓芊芊, 等. 二维大取向角对晶界湮没过程的晶体相场模拟[J]. *广西科学院学报*, 2017, 33(4): 228-233.
- KONG L Y, LU Y J, DENG Q Q, et al. Phase field crystal simulation of grain boundary annihilation with two dimensional large orientation angle[J]. *Journal of Guangxi Academy of Science*, 2017, 33(4): 228-233.

(责任编辑:陆雁)