

相场方法研究刃位错对第二相形核析出长大的影响*

Computer Simulation of the Second Phase Nucleation and Precipitation with Influence of Edge Dislocation Using Phase Field Method

田军龙, 马文婧, 刘文华, 罗志荣, 高英俊**

TIAN Jun-long, MA Wen-jing, LIU Wen-hua, LUO Zhi-rong, GAO Ying-jun

(广西大学物理科学与工程技术学院, 广西南宁 530004)

(School of Physics and Engineering, Guangxi University, Nanning, Guangxi, 530004, China)

摘要:用扩散界面相场模型研究刃位错对第二相形核析出长大的影响,建立含刃位错应变能的自由能函数,对刃位错线附近的第二相形核析出长大过程进行研究和模拟。新建立的自由能函数能有效地对刃位错线附近的第二相形核析出长大过程进行模拟。模拟结果与位错能理论及非均匀形核理论吻合得很好。

关键词:刃位错 形核 相场方法

中图分类号:O53 文献标识码:A 文章编号:1005-9164(2012)01-0050-03

Abstract:The second phase nucleation and precipitation near the edge dislocation were studied using phase-field method, and the free energy function had been established. The simulation results coincided with the theory of dislocation and the theory of non-uniform nucleation.

Key words: edge dislocation, nucleation, phase-field method

位错是一种极其重要的晶体缺陷,对晶体的晶粒长大、屈服强度、断裂强度、扩散、相变、再结晶、塑性变形等较大的影响^[1,2]。近年来,许多研究者利用相场方法研究位错对材料微结构演化的影响,如:S. Y. Hu 和 L. Q. Chen^[3]对薄膜内部周期性分布的位错对 Spinodal 分解的影响进行了研究; Leonard 和 R. C. Desai^[4]对薄膜和体材料中位错线附近的 Spinodal 分解进行了研究;D. J. Seol, S. Y. Hu 和 Y. L. Li 等^[5]对束缚的薄膜内的 Spinodal 分解进行了研究;S. Y. Hu 和 L. Q. Chen^[6]采用扩散界面模型对存在结构缺陷的溶质演化进行了研究。然而采用相场方法对于位错线附近的第二相形核析出长大的问题则研究甚少。本文采用相场方法,构建含位错作用的

自由能函数对刃位错线附近的第二相形核析出长大过程进行研究和模拟。

1 相场模型与方法

1.1 含刃位错的自由能密度函数构造

材料微结构演化的驱动力是系统的能量减小。系统的总自由能 F 由体自由能 F_{bulk} , 界面能 F_{int} 和弹性应变能 F_{el} 组成:

$$F = F_{bulk} + F_{int} + F_{el}, \quad (1)$$

体自由能决定于平衡相浓度场 $c(\vec{r}, t)$, 界面能决定于平衡共存相的浓度场及界面形状与共同协定区域。

根据朗道自由能多项式理论,系统的体自由能密度应该具有等深的双势井。构造体自由能密度函数和界面能函数如下^[3,7]:

$$f_{bulk}(c) = -A_1 (c - 0.5)^2 + B_1 (c - 0.5)^4, \quad (2)$$

$$f_{int}(c) = \beta_1 |\nabla c|^2, \quad (3)$$

式中, A_1 、 B_1 和 β_1 是参数。

刃位错的有效弹性应变能密度可表示为:

$$f_{el} = f_c + f_d + f_l, \quad (4)$$

式中, f_c 是仅由浓度 c 构造的能量项, f_d 是与浓度成

收稿日期:2011-05-19

修回日期:2011-06-18

作者简介:田军龙(1985-),男,硕士研究生,主要从事材料微结构演化及物理性能研究。

*国家自然科学基金项目(50661001,51161003),广西自然科学基金项目(0991026,0832029,0639004),广西研究生教育创新计划项目(105931003070,105931001015)资助。

**通讯作者:高英俊,教授,博士研究生导师。

分项无关的位错能量项,可看成为一常数项。 f_I 是浓度成分场与位错应变应力场相互作用能量项。 f_c 及 f_I 的具体形式^[4]为:

$$f_c = -\frac{2\alpha^2}{P_0} (c - 0.5)^2, \quad (5)$$

$$f_I = -\alpha \frac{b}{2\pi} \frac{2M_0}{P_0} c \frac{y}{x^2 + y^2}. \quad (6)$$

由式(1)~(6)且对前面系数进行处理,得到存在位错的情况下系统总自由能表达式为:

$$F(c) = \int_V \left(-A(c - 0.5)^2 + B \cdot (c - 0.5)^4 + \frac{\beta}{2} (\nabla c)^2 - \beta_a c \frac{y}{x^2 + y^2} \right) dV, \quad (7)$$

式中, $A = 1.0, B = 2.5, \beta = 0.5, \beta_a \approx [k_B(T_c - T)N_v]^{-1}(T/T_c)^{1/2}(K_0/5)(\Delta a/a)(M_0/C_0)$ 。

1.2 系统演化动力学方程

定义浓度场 $c(\vec{r}, t)$ 的物理意义,第二相形核析出长大就可以用其随时间和空间演化的动力学方程来描述。又由于浓度场变量 $c(\vec{r}, t)$ 为保守场变量,保守场变量随时间演化过程可用 Cahn-Hilliard 方程描述^[8,9],动力学方程可表示为:

$$\frac{dc(\vec{r}, t)}{dt} = L \nabla^2 \left[\frac{\partial F}{\partial c} \right], \quad (8)$$

式中, L 为扩散迁移系数,与原子的扩散系数有关。

1.3 数值化处理

为求解复杂的动力学方程组(8)式,还必须将动力学方程组在时空区间作离散化处理,即采用数值求解的方法。在模拟中,这里采用 Euler 迭代公式^[10]:

$$\phi(t + \Delta t) = \phi(t) + \frac{d\phi}{dt} \times \Delta t, \quad (9)$$

式中, Δt 为离散时间步长, ϕ 为时间和空间函数。此外,为使数值解具有稳定性,需将 Laplace 算子作用考虑到次近邻格点^[9,11]:

$$\nabla^2 \phi = \frac{1}{(\Delta x)^2} \left[\frac{1}{2} \sum_j (\phi_j - \phi_i) + \frac{1}{4} \sum_n (\phi_n - \phi_i) \right], \quad (10)$$

式中, Δx 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。在二维情况下模拟刃位错线附近的第二相形核析出长大,需将连续空间离散为四方格子,采用周期性边界条件。这里模拟采用 256×256 格子,在中心区放置一刃型位错,参数 $\beta_a = 2.0$ 。选择初始浓度 $c_0 = 0.22$ 时析出演化进行模拟,在模拟过程中没有在动力学方程中引入热力学扰动项 $\xi(\vec{r}, t)$ 来促使形核等热涨落起伏过程。

2 模拟结果和分析

图 1 给出中心处存在一刃位错,初始浓度为 $c_0 = 0.22$ 情况下的溶质析出过程:

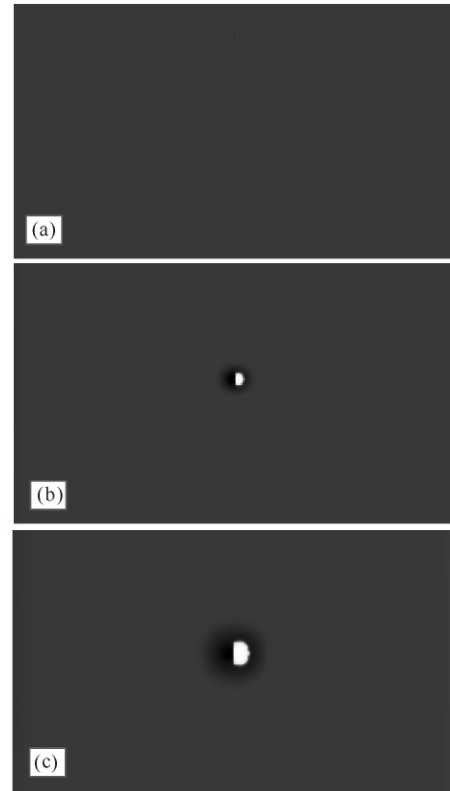


图 1 中心处存在一刃位错时成分为 0.22 处的第二相析出演化

Fig. 1 The second phase precipitation evolution with an edge dislocation in the center of the picture when $c_0 = 0.22$

(a) $T = 100$, (b) $T = 1000$, (c) $T = 6000$.

图 1 中白色区为析出相,浓度场成分值越高颜色越亮,浓度场成分值越低颜色越暗。图 1 说明,在存在位错的情况下,即使没有热力学扰动依然能在位错附近形核长大。由文献[1,2]可知,位错周围点阵引起弹性应力场导致晶体能量的增加,即位错周围产生的应变能使体系内能升高。由非均匀形核理论^[12]指出固体中,存在各种缺陷,如位错、空位、晶界、层错、杂质等。若在晶体缺陷处形核,随着晶核的形成,缺陷将消失,缺陷释放能量以供新相形核需要,使临界形核功降低,形核变得更加容易。

根据刃型位错的应力场理论^[1,2],给出刃型位错各应力分量为:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= -H \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \\ \sigma_{yy} &= H \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \\ \sigma_{zz} &= -\nu H \frac{2y(x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}, \end{aligned} \quad (11)$$

式中, $H = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)}$, G 为切变模量, ν 为泊松比, b 为氏矢量。 σ_{xx} 、 σ_{yy} 和 σ_{zz} 为 3 个正应力分量。根据式(11)可得 σ_{xx} 、 σ_{yy} 、 $(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})/2$ 过位错中心沿 y 轴方向的曲线图, 如图 2 所示。

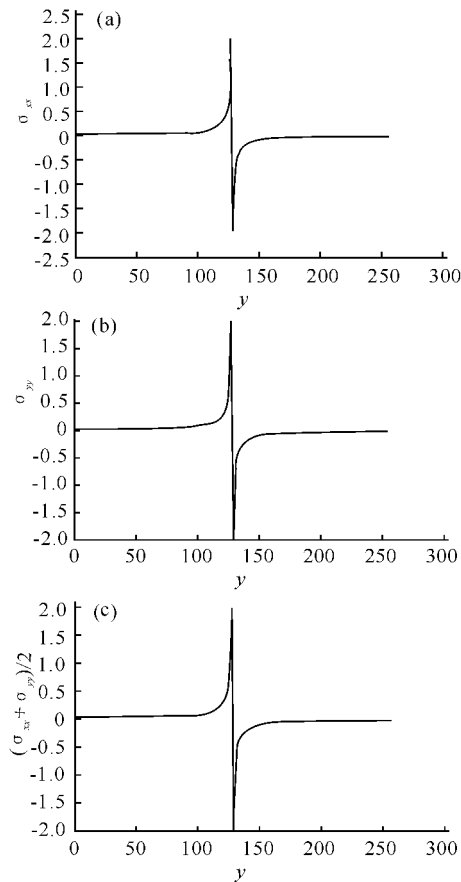


图 2 过位错中心沿 y 轴方向 σ_{xx} 、 σ_{yy} 、 $(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})/2$ 曲线

Fig. 2 The edge dislocation stress diagram of crossing the center of dislocation and along the y direction

(a) σ_{xx} , (b) σ_{yy} , (c) $(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})/2$.

图 2(a) 为过位错中心的 σ_{xx} 曲线, 图中纵坐标的单位为 $H/2$, 应力大于 0, 说明应力方向与 y 轴相同; 应力小于 0 说明应力方向为 $-y$ 轴方向。由图 2 及式(11)可知, 当 $y > 0$ 时, $\sigma_{xx} < 0$; 当 $y < 0$ 时, $\sigma_{xx} > 0$ 。这说明正刃型位错的滑移面上侧为压应力, 滑移面下侧为张应力。即如图 1 中左侧位压应力, 右侧为张应力。图 3(a)~(c) 分别为存在单个刃位错时应力 σ_{xx} 、 σ_{yy} 、 $(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})/2$ 三维分布图。图 3 立体的展示了存在单个刃位错时其应力的分布情况, 在正刃位错的上侧即模拟演化图的左侧其值大于 0 为压应力; 在正刃位错下侧即模拟演化图的右侧其值小于 0 为拉应力。

由图 1 可见, 第二相在正位错的下侧即模拟演化图中的右侧受到位错张应力处析出形核长大, 其中出现半圆形的第二相析出相; 在正位错的上侧即模拟演

化图中的左侧受到位错压应力处溶质被消耗减少, 出现颜色较深的区域。从图 1 可见, 在析出的第二相周边有一圈颜色较深的区域, 是由于起始浓度场变量为 0.22 的成分点在自由能曲线上并不处于极小值处的稳定态, 于是在位错能的作用下, 向能量极小值状态演化。由于位错下侧的张应力, 对其周围的溶质的吸引作用, 促使其周围的溶质向其扩散, 促进在此处形核长大, 从而导致其周围的溶质浓度降低。

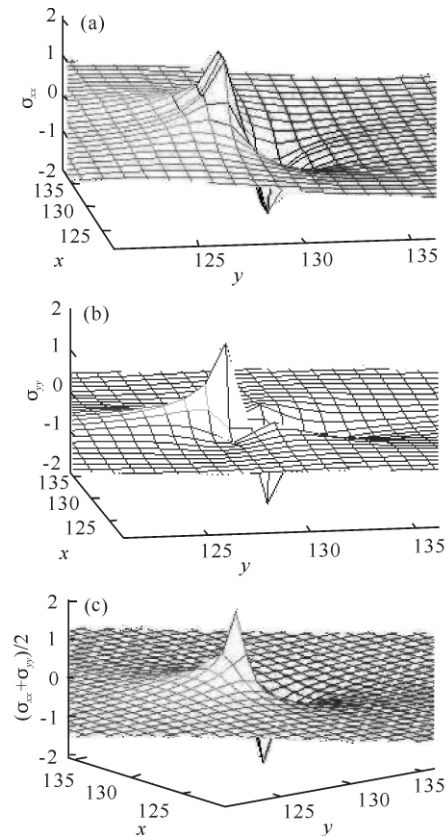


图 3 存在单个刃位错时应力 σ_{xx} 、 σ_{yy} 、 $(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})/2$ 的三维分布

Fig. 3 The 3D display figure of the edge dislocation

(a) σ_{xx} , (b) σ_{yy} , (c) $(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})/2$.

3 结论

应用扩散界面相场模型对位错线附近的第二相形核析出长大过程进行研究的结果表明, 由于位错的点阵畸变所产生的位错能促使第二相在正刃位错的下侧形核长大, 位错释放能量以供新相形核需要, 使临界形核功降低, 形核变得更加容易。由于正刃位错下侧的张应力作用, 第二相溶质原子逐渐向此处扩散聚集, 溶质浓度升高, 从而促进第二相析出长大, 析出半圆形的析出相; 由于正刃位错上侧压应力的作用, 此处第二相溶质原子逐渐向外扩散, 溶质浓度降低。这些结果与位错能理论及非均匀形核理论吻合得很好。

(下转第 56 页 Continue on page 56)

surface and bulk modes in attenuated total reflection spectra[J]. Chinese Physics B, 2011, 20(1): 15101.

- [11] Otto A. Excitation by light of ω_+ and ω_- -surface plasma waves in thin metal layers [J]. Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei, 1969, 219(3): 227-233.
- [12] Otto A. Excitation of nonradiative surface plasma waves in silver by the method of frustrated total reflection[J]. Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei, 1968, 216(4): 398-410.

- [13] 朱红祥, 柴欣生, 王双飞, 等. 衰减全反射-紫外/可见光谱技术应用[J]. 化学进展, 2007(Z1): 414-419.
- [14] 梁铨廷. 物理光学[G]. 第3版. 北京: 电子工业出版社, 2008: 401.
- [15] 王玉玲. 一维光子晶体的带隙特性研究[D]. 南宁: 广西大学, 2007.

(责任编辑: 邓大玉)

(上接第 52 页 Continue from page 52)

参考文献:

- [1] 赵品, 谢辅洲, 孙振国. 材料科学基础教程[M]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学出版社, 2005.
- [2] 胡赓祥, 蔡珣, 戎咏华. 材料科学基础[M]. 上海: 上海交通大学出版社, 2006.
- [3] Hu S Y, Chen L Q. Spinodal decomposition in a film with periodically distributed interfacial dislocations[J]. Acta Materialia, 2004, 52: 3069-3074.
- [4] Leonard F, Desai R C. Spinodal decomposition and dislocation lines in thin films and bulk materials[J]. Physical Review B, 1998, 58(13): 8277-8288.
- [5] Seol D J, Hu S Y, Li Y L. Computer simulation of spinodal decomposition in constrained films[J]. Acta Materialia, 2003, 51: 5173-5185.
- [6] Hu S Y, Chen L Q. Diffuse-interface modeling of composition evolution in the presence of structural defects [J]. Computational Materials Science, 2002, 23: 270-282.

- [7] 冯端. 金属物理学. 卷二: 相变[M]. 北京: 科学出版社, 1998.
- [8] 高英俊, 张海林, 金星, 等. 相场法研究硬质颗粒钉扎的两相晶粒长大过程[J]. 金属学报, 2009, 45(10): 1190-1198.
- [9] Fan D, Chen L Q. Diffusion-controlled grain growth in two-phase solids[J]. Acta Materialia, 1997, 45: 3297-3310.
- [10] Oono Y, Puri S. Computationally efficient modeling of ordering of quenched phases[J]. Phys Rev Lett, 1987, 58(8): 836-839.
- [11] 田军龙, 高英俊, 罗志荣, 等. 陶瓷颗粒烧结致密化过程中微气孔的扩散与演化[J]. 广西科学, 2010, 17(4): 332-336.
- [12] Caginalp Gunduz, Fife Paul. Phase-field methods for interfacial boundaries [J]. Physical Review B, 1986, 33(11): 7792-7794.

(责任编辑: 邓大玉)