

不同温度晶界位错湮没过程的晶体相场模拟*

Phase Field Crystal Simulation of Dislocation Annihilation at Different Temperature

高英俊^{1,2}, 袁龙乐¹, 刘瑶¹, 卢强华¹, 黄创高^{1,2}

GAO Ying-jun^{1,2}, YUAN Long-le¹, LIU Yao¹, LU Qiang-hua¹, HUANG Chuang-gao^{1,2}

(1. 广西大学物理科学与工程技术学院, 广西南宁 530004; 2. 广西大学广西有色金属及特色材料加工重点实验室, 广西南宁 530004)

(1. College of Physics Science and Engineering, Guangxi University, Nanning, Guangxi, 530004, China; 2. Guangxi Key Laboratory for Non-ferrous Metal and Featured Materials, Guangxi University, Nanning, Guangxi, 530004, China)

摘要:【目的】针对不同温度的晶界位错湮没过程进行研究。【方法】采用晶体相场模型模拟中等角度对称倾侧晶界结构在不同温度下的晶界位错演化湮没过程, 从位错的运动形式和体系自由能的变化, 分析晶界的消失过程和位错的相互作用。【结果】具有二维三角晶格原子点阵结构形成的对称倾侧晶界是由配对的位错对按直线规则排列构成, 可以看成由2套位错 Burgers 矢量组成。晶界湮没主要有如下几方面的特征过程: 首先晶界位错攀移, 然后发生位错分解, 晶界发射位错, 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, 晶界再次发射位错, 使得位错转为作滑移运动, 与其它作滑移运动的位错在晶内相遇湮没消失。【结论】在低温情况, 位错是一对一对地按照一定的顺序发生湮没, 而高温情况, 位错湮没可以同时出现几对位错一起发生湮没。最后, 所有晶界和位错全部消失。

关键词: 晶界 位错湮没 应变 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(2014)03-0203-06

Abstract: 【Objective】The process of dislocation annihilation was studied at different temperature. 【Methods】A mid-angle symmetric tilt grain boundary (STGB) associated with emission and absorption of lattice dislocation were simulated under strain at different temperature by phase-field crystal (PFC) model. The decay of STGB and dislocation reactions of separation, annihilation and mergence and their mechanisms were analyzed from the energy point of view. 【Results】The research results show that the mid-angle STGB is composed of pair dislocations in a line arrangement in two dimensions of triangular atomic lattice, in which there are two sets of basic Burgers vectors. The evolution process of STGB decay can be divided into some typical stages as follows: A dislocation climbs firstly along the STGB under strain, then the dislocation occurs to break up into two new dislocations after it gets enough energy to overcome the active

potential barrier of dislocation, and at this time the STGB emits pair dislocations to move in gliding in grain instead of climbing along STGB; After a while of gliding, the dislocation crosses the grain boundary until it annihilates with another dislocation at the STGB right in the front, i. e. the grain boundary absorbs or merges the gliding dislocation. The remain of dislocation in the STGB can still climb along the grain boundary in

收稿日期: 2014-04-24

作者简介: 高英俊(1962-), 男, 教授, 博士生导师, 主要从事新材料设计与计算机模拟实验研究。

* 国家自然科学基金项目(51161003)和(50661001), 广西自然科学基金重点项目(2012GXNSFDA053001), 广西大学广西有色金属及特色材料加工重点实验室开放基金(GXKFJ12-01)及广西大学科研基金项目(XJZ110611)资助。

which it splits off again into two dislocations, and at the same time it looks as if STGB emits the dislocations and changes the dislocation movement from climbing to gliding again. The dislocation continues gliding until they meet another gliding dislocation in grain to annihilation. **【Conclusion】**The annihilation of dislocation is one by one in proper sequence at low temperature, while at high temperature the process appears two by two or one by one simultaneously in sequence. And finally the total dislocations are annihilated and the STGB disappears.

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

【研究意义】晶体材料通常由大量晶粒组成,取向不同的晶粒之间的交界处成为晶界。中等角度晶界^[1,2]是指位向差值在 10~25°范围的晶界,由一系列位错按特定方式排列而成。位错会引起其附近晶体点阵结构发生畸变^[2]。在稳定的环境条件下,晶界(包括亚晶界)可以保持稳定的结构,而在外加应力作用下位错会发生运动导致晶界(亚晶界)迁移甚至湮没^[3,4]。晶界的结构和迁移方式对晶粒长大,特别是对冷加工金属材料的退火有重要影响^[5]。晶界迁移过程涉及的原子运动比较快,且在非平衡条件下进行,使得对晶界迁移过程的位错,无论实验研究还是理论处理都比较困难。目前的实验条件较难实时观察晶界、亚晶界上位错的运动,以及位错反应过程,借助计算机模拟实验则可以获得材料微结构演化的细节,弥补实验的不足。**【前人研究进展】**基于密度泛函理论模型提出的晶体相场(PFC)方法^[6~9],其优势在于能够在扩散时间尺度(10⁻⁶s)描述纳米尺度的缺陷运动,在时间尺度上相比分子动力学(MD)方法具有优势。与传统相场方法^[10,11]不同,采用最新发展的PFC方法不仅能够用来研究纳米尺度下材料的微结构,而且还能够研究扩散时间尺度(10⁻⁶s)的位错运动及其对晶界的影响^[9]。**【本研究切入点】**目前,PFC方法已应用于研究位错和晶界的迁移^[9]以及小角度对称倾转亚晶界湮没的过程^[12,13]、纳米孪晶结构^[14]、纳米晶生长^[15]、晶体外延生长^[16~19]、结构相变^[20,21]、晶界熔解^[22]、裂纹扩展^[23]等现象。**【拟解决的关键问题】**应用PFC方法模拟中等角晶界的位错运动和相互作用,揭示位错的运动与体系自由能变化之间的内在联系和变化规律。

1 晶体相场模型

对于固态金属材料,其原子呈规则周期性排列。因此,要求相场变量必须能够反映原子周期性排列的特征。PFC模型通过引入具有周期结构特征的原子密度相场变量构建自由能密度函数^[7],能够揭示晶体学结构特性以及原子尺度的行为。在引入周期性相场变量中,局域位置的最大值对应于原子的位置,而液相中的原子位置随时间随机变化,取时间平均可看

成为常量。按照这两方面要求,可用原子密度场函数 $\rho(r)$ 作为相场变量,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)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,其平均值为常量。此时体系无量纲的自由能函数 F 可以写成^[7]

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

式中, γ 是反映体系温度的参数。该自由能模型自洽地包含了晶体结构的物理特征,例如晶粒取向、弹性特性、塑性变形特性等。

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^[9]

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

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^[7]

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

式中, ρ_0 为原子平均密度,振幅 $A = 4/5(\rho_0 + 1/3\sqrt{-15\rho_0 - 36\rho_0^2})$,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,通过单模近似可以获得平衡时各相的自由能密度,再利用自由能公切线法确定相图^[7]。

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^[24]求解,其离散形式为

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

整理后得

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

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

在本文的模拟中,采用二维三角晶相表征面心立方(fcc)晶体的(111)面的原子点阵结构。制备样品的热学和力学参数如表 1 所示,其中, t 为时间; $\dot{\epsilon}$ 为应变率。初始条件按如下方法设置:对于周期性的计算区域 $L_x \times L_y = 256\Delta x \times 256\Delta y$,取空间步长为 $\Delta x = \Delta y = \pi/4$,时间步长为 $\Delta t = 0.5$,边界条件为周期性边界条件。设置 2 个晶粒区域,这 2 个晶粒的初始位向差为 θ 。运用式(4)使三角晶相的取向在晶粒 I 区域 $0 < x < 1/4(N - 2d)$ 和 $1/4(3N + 2d) < x < N$ 范围内为 $\theta/2$,在中间(晶粒 II)区域 $1/4(N + 2d) < x < 3/4(N - 2d)$ 范围内为 $-\theta/2$,其中 $0 < y < L_y$ 。为了让两晶粒之间的晶界衔接得更好,经过 3×10^4 步的时间弛豫,获得稳定的 20° 角对称倾侧晶界。

表 1 样品制备的热力学参数

Sample	ρ_0	γ	θ	t	$\dot{\epsilon}$
A	0.2636	-0.40	10°	3×10^4	6×10^{-6}
B	0.2636	-0.20	10°	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变化。在二维体系的变形过程中采用等面积不变模型^[25,26],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 $\dot{\epsilon}$,应变变量 $\epsilon = \dot{\epsilon} n \Delta t$,其中 n 为时间步数, Δt 为时间步长。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 $\dot{\epsilon} = 6 \times 10^{-6}$ 。详细的二维拉伸变形模拟的数值算法见文献^[25]。

3 结果与分析

3.1 样品的晶界结构

图 1 给出 2 个温度下制备的样品的晶界结构和对应的晶界的原子密度分布。对比图 1(a 和 b),可

见,样品中 2 条平行的对称倾侧晶界结构,由配对的刃位错按直线等距离规则排列构成,它们之间的位错极性正好相反。这种对称倾侧晶界的位错对可看成由 2 套 Burgers 矢量的刃位错配对组合而成的。对比图 1(c 和 d)给出的晶界处原子密度分布,可见高温和低温的原子密度分布存在明显的不同。低温样品的晶界的原子密度呈现出振荡现象,晶界处的原子密度高低起伏,而高温情况的晶界原子密度分布,表现为向上的“脉冲”分布,峰顶处存在两个细的尖峰,原因是高温晶界处存在预熔化现象^[27](图 1b 位错附近白色区域),使得原子排列有序度降低,峰的整体变宽。

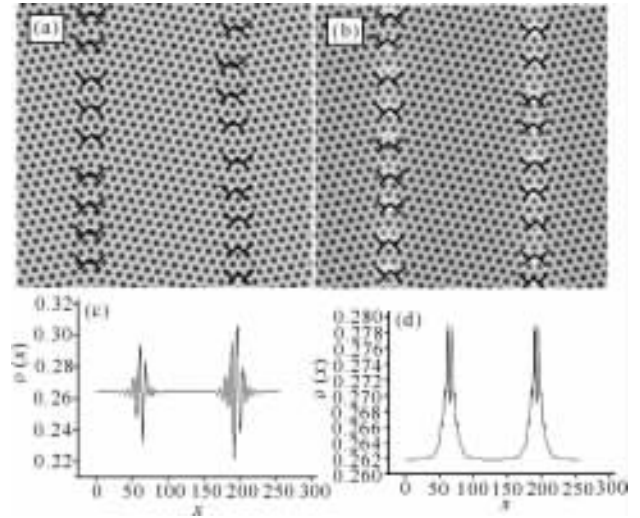


图 1 样品的晶界结构和晶界原子密度分布

Fig. 1 Grain boundary (GB) structure of sample and atomic density distribution in GB

(a) 低温晶界, (b) 高温晶界, (c) 低温晶界原子密度分布, (d) 高温晶界原子密度分布

(a) GB at low temperature, (b) GB at high temperature, (c) Density distribution at low temperature, (d) Density distribution at high temperature

3.2 外应变作用下的晶界位错运动

3.2.1 低温样品晶界位错湮没过程

图 2(a~r)给出了晶界位错的攀移、分解、滑移、湮没的过程。由图 2a 可见,二条晶界的位错整齐排列,在这 2 条晶界上各存在 9 对位错,分别用 a1, a2, a3, a4, a5, a6, a7, a8, a9 和 b1, b2, b3, b4, b5, b6, b7, b8, b9 符号标记。施加应变后,晶界位错开始作攀移运动,如图 2b 中白色箭头所示攀移运动方向。当 $t = 6600$ 时,即 $\epsilon = 0.0396$ (图 2b),晶粒两侧晶界处位错开始沿着晶界进行缓慢的攀移。当 $t = 19400$ 时,即 $\epsilon = 0.1164$ (如图 2c),左侧晶界处位错 a9 分解为位错 a9₁ 和 a9₂。当 $t = 21900$ 时,即 $\epsilon = 0.1314$ (图 2d),左边晶界分解出的位错 a9₁、a9₂ 和右边晶界位错

b4 分解出的位错 b4₂、b4₁ 在晶粒内部相遇湮没(图中画圆圈处)。由图 2e 可见,随后晶界余下的 8 对位错继续沿晶界攀移。当 $t = 31600$ 时,即 $\epsilon = 0.1896$ (如图 2f),右侧晶界处剩余的 8 对位错中位错 b7 分离为 b7₁ 和 b7₂,在 $t = 34100$ 时,即 $\epsilon = 0.2046$ (图 2g),左侧晶界位错 a4 分离出的位错 a4₂ 和右侧晶界分离出的位错 b7₁ 在晶粒内部相遇湮没(图中画圆圈处)。当 $t = 36100$ 时,即 $\epsilon = 0.2166$ (图 2h),在晶界处还剩下 7 对位错,它们继续沿着晶界攀移,当 $t = 41300$ 时,即 $\epsilon = 0.2478$ (图 2j),两边晶界处位错 a1 分解为 a1₁ 和 a1₂,b6 分解为 b6₁ 和 b6₂。在 $t = 42800$ 时,即 $\epsilon = 0.2568$ (图 k),分解出的位错 a1₂ 和 b6₁ 在晶界内部相遇湮没(图中画圆圈处),在 $t = 46300$ 时即 $\epsilon = 0.2778$,此时,晶界上还剩下 6 对位错。当 $t = 48800$ 时,即 $\epsilon = 0.2928$ (图 2m),左右两边晶界处的位错 a2 分离为 a2₁ 和 a2₂,b5 分离为 b5₁ 和 b5₂。在 $t = 51600$ 时,即 $\epsilon = 0.3096$ (图 2n),可以看到左边晶界处还有 5 对位错,而右边晶界有 3 对位错和 2 对正在分解出的位错 b8₁、b8₂ 和 b9₁、b9₂。与上述运动过程类似,左右两边晶界分离出的位错逐渐滑移至晶粒内部相遇湮没。同样的,当 $t = 57100$ 时,即 $\epsilon = 0.3426$ (图 2o),左边晶界还有 4 对位错,而右边晶界则存在 3 对位错和 1 对正在分解的位错,随着应力的不断增加,这些位错重复上述过程,并最终所有位错全部湮没,形成一个完整的单晶,如图 2r。

由图 3 可见,能量曲线存在 9 个峰和 9 个谷,每个峰对应于晶界位错发生分解,每个谷对应于 1 对位错发生湮没,完成畸变能的释放。由图 3 还可见,前面的 4 个峰较高,后面的 5 个峰较低,并近似可看成为等间距的。这说明前面 4 个峰释放的畸变能较大,而后面 5 个峰的畸变能较小,表明开始时,晶界位错攀移积累较多的畸变能。晶界位错对按照一对一对的湮没顺序进行,由此,2 条晶界各 9 对位错,两两分别发生分解,然后与对面滑移过来的位错分别湮没。因此,能量曲线共出现 9 个峰和 9 个谷的结构。

3.2.2 高温晶界位错湮没过程

高温样品与低温样品的晶界位错结构相似,由 9 个位错对排列构成。施加应变后,晶界位错先是攀移,然后出现位错对分解,与低温样品所不同的是,分别发生 3 次由 2 对位错对同时分解和湮没的情况,还有 3 次分别发生单对位错对的分解和湮没情况。从图 3b 的自由能曲线上可以看到,曲线上一共有 6 个大小不等的峰。其中前 3 个峰的峰值与谷值相差较大,间距较宽,这对应于发生 2 对位错对同时发生分解和湮没情况,共出现 3 次;后面的 3 个峰的峰值与

谷值相差较小,这对应于发生 1 对位错对的分解和湮没情况,共出现 3 次。当 $\epsilon = 0.1094$ 时,曲线上出现第 1 个峰,此时对应的位错运动是晶界处的位错对经过沿着晶界的攀移,发生第 1 次发生分离。依次,当 $\epsilon = 0.1924$,即 $\epsilon = 0.2818$ 时,对应的位错运动是晶界处的位错对发生第 2 和第 3 次分离。此后的 3 个峰也呈现出相同的规律。最后,晶界上的位错全部湮没,样品成为完整的单晶结构。对比图 3a 和 b 可见,高温情况,晶界湮没需要的应变变量较小。

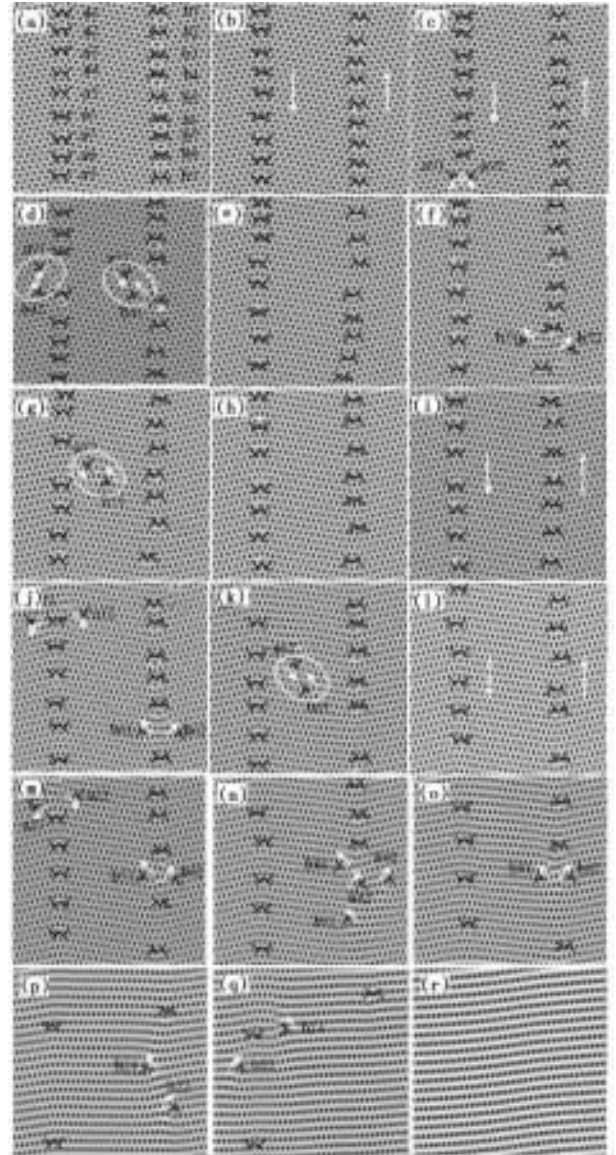


图 2 晶界位错湮没过程的模拟

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

a(3800,0.0228),b(6600,0.0396),c(19400,0.1164),d(21900,0.1314),e(25600,0.1536),f(31600,0.1896),g(34100,0.2046),h(36100,0.2166),i(38300,0.2298),j(41300,0.2478),k(42800,0.2568),l(46300,0.2778),m(48800,0.2928),n(51600,0.3096),o(57100,0.3426),p(67900,0.4074),q(85900,0.5154),r(97900,0.5874)

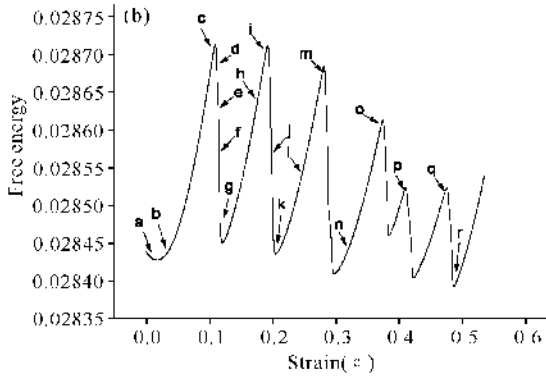
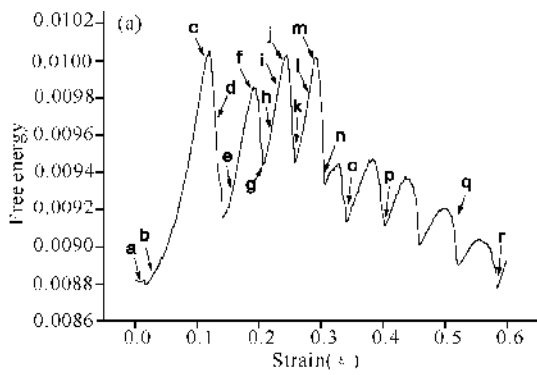


图3 体系自由能随应变变化曲线,(a)低温情况,(b)高温情况

Fig. 3 Free energy-strain curves, (a) At low temperature, (b) At high temperature

4 结论

采用晶体相场模型模拟了中等角度对称倾侧晶界结构在不同温度下的晶界位错演化湮没过程,主要结论如下:

1) 低温样品晶界的原子密度呈现出振荡现象,晶界处的原子密度高低起伏,而高温情况的晶界原子密度分布,表现为向上的“脉冲”分布,峰顶处存在两个细的尖峰,原因是高温晶界处存在预熔化现象,使得原子排列有序度降低,峰的整体变宽。

2) 晶界湮没主要特征过程是,首先晶界位错攀移,然后发生位错分解,晶界发射位错,位错由攀移运动转化为滑移运动;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,晶界再次发射位错,使得位错转为作滑移运动,与其它作滑移运动的位错在晶内相遇湮没消失。

3) 在低温情况,位错是一对一对地按照一定的顺序发生湮没,而高温情况,位错湮没可以同时出现几对位错一起发生湮没。最后,所有晶界和位错全部消失。

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
广西科学 2014年6月 第21卷第3期

版社,2001:265-279.

Xu H J, Liu G X. Fundamentals of materials science [M]. Beijing: Beijing Industry Press, 2001: 265-279.

[2] 胡庚祥,蔡珣,戎咏华.材料科学基础[M].第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]. 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 Mater, 2004, 52: 3793.

[4] Ovidko I A, Skiba N V. Enhanced dislocation emission from grain boundaries in nanocrystalline materials [J]. Scripta Mater, 2012, 67: 13.

[5] 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: 2565-2568.

[6] Elder K R, Katakowski M, Haataja M, et al. Modeling elasticity in crystal growth [J]. Phys Rev Lett, 2002, 88 (24): 245701.

[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): 51605.

[8] Stefanovic P, Haataja M, Provatas N. Phase field crystal study of deformation and plasticity in nanocrystalline materials [J]. Phys Rev 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(3): 31609-31616.

[10] 陈云,康秀红,李殿中.自由枝晶生长相场模型的自适应有限元法模拟[J].物理学报,2009,58:390-396.

Chen Y, Kang X H, Li D Z. Phase-field modeling of free dendritic growth with adaptive finite element method [J]. Acta Physica Sinica, 2009, 58: 390-396.

[11] 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,2012,48:1215-1222.

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: 1215 - 1222.

[12] 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,2011,47:1301-1306.

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: 1301-1306.

[13] 高英俊,卢成健,黄礼琳,等.晶界位错运动与位错反应过程的晶体相场模拟[J].金属学报,2014,50(1):

Gao Y J, Lu C J, Huang L L, et al. Phase field crystal simulation of grain boundary movement and dislocation reaction[J]. *Acta Metal Sin.*, 2014, 50(1): 110-118.

[14] 高英俊, 王江帆, 罗志荣, 等. 晶体相场方法模拟多层孪晶结构[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.

[15] Wu K A, Voorhees P W. Phase field crystal simulation of nanocrystalline grain growth[J]. *Acta Mater*, 2012, 60: 407-419.

[16] 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(1): 18-22.

[17] Elder K R, Rossi G, Kanerva P, et al. Patterning of heteroepitaxial overlayers from nano to micron scales[J]. *Physical Review Letters*, 2012, 108: 226102.

[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] 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.

[20] 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): 96-105.

Gao Y J, Luo Z R, Huang C G, et al. Phase-field-crystal

tal modeling for two-dimensional transformation from hexagonal to square structure[J]. *Acta Physica Sinica*, 2013, 62(5): 96-105.

[21] Greenwood M, Rottler J, Provatas N. Phase field crystal methodology for modeling of structural transformations[J]. *Phys Rev B*, 2011, 83(3): 031601.

[22] 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.

[23] 高英俊, 罗志荣, 黄礼琳, 等. 韧性材料的微裂纹扩展连通的晶体相场模拟[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]. *Chin J Nonferrous Met*, 2013, 23: 1892.

[24] Chen L Q, Shen J. Applications of semi-implicit Fourier spectral method to phase field equations[J]. *Computer Physics Communications*, 1998, 108(2): 147-158.

[25] 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.

[26] 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): 1161-1168.

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): 1161-1168.

[27] Gao Y J, Deng Q Q, Zhou W Q. Phase field crystal simulation of premelting dislocation movement under strain at high temperature[J]. *Front Mater Sci*, 2014, 8(2): 131-138.

(责任编辑: 尹 闯)