

向错强度与阻尼系数对纳米晶材料小角度晶界湮没的影响*

Influence of Disclination Strength and Damping Coefficient on Decay of Low Angle Grain Boundaries in Nanocrystalline Materials

刘晓骅, 叶里, 温振川, 邓芊芊, 高英俊**

LIU Xiao-hua, YE Li, WEN Zheng-chuan, DENG Qian-qian, GAO Ying-jun

(广西大学物理科学与工程技术学院, 广西南宁 530004)

(College of Physical Science and Engineering, Guangxi University, Nanning, Guangxi, 530004, China)

摘要:【目的】研究一维纳米晶材料演化过程中的小角度晶界湮没过程, 探究向错强度与阻尼系数对位错湮没的影响。【方法】建立位错运动方程, 计算模拟小角度晶界的晶格位错在外应力作用下发生的变化。【结果】随着切应力增加, 晶界由过阻尼运动变为无穷远的单向运动, 向错强度越大晶界越难以湮没, 并且晶界位错由同时湮没转变为两端先湮没, 中心后湮没; 阻尼系数越大, 湮没临界切应力越大, 但到达一定值时, 阻尼系数不再影响临界值。【结论】晶界湮没存在临界切应力, 向错强度主要影响临界切应力, 阻尼系数主要影响位错初始速度和运动停止时间。

关键词: 位错滑移 剪切应力 晶界湮没 向错

中图分类号: TG111.2 **文献标识码:** A **文章编号:** 1005-9164(2015)05-0511-06

Abstract: 【Objective】The evolution process of the annihilation of small angle grain boundaries in an one-dimensional crystal material was researched, and the effects of disclination strength and damping coefficient on the annihilation of dislocations were explored. 【Methods】The movement equations of dislocations were established, and the dislocation motions in low angle grain boundaries were calculated and simulated under external shear stress. 【Results】With shear stress progressing, the movement of grain boundary turns to directional motion in which dislocations can go to infinity. The bigger the value of disclination strength is, the more difficult the grain boundary annihilation is. Furthermore, grain boundary annihilation changes from simultaneously running away to central dislocation releasing after escaping of dislocations in both ends. The bigger the damping coefficient is, the bigger the critical shear stress of annihilation.

But when it reaches a certain point, damping coefficient doesn't have an impact on critical stress anymore. 【Conclusion】There is a critical value for grain boundary annihilation. Disclination strength mainly affects critical value, while damping coefficient plays an indispensable role in original velocity and motion ceasing time of dislocation.

Key words: dislocation slip, shear stress, grain boundary annihilation, disclination

收稿日期: 2015-07-15

修回日期: 2015-09-10

作者简介: 刘晓骅(1993-), 男, 硕士研究生, 主要从事纳米材料性能与计算模拟实验方面的研究。

* 国家自然科学基金项目(51161003, 50661001)和广西研究生教育创新计划基金项目(YCSZ2014039, YCSZ2015029)资助。

** 通讯作者: 高英俊(1962-), 男, 教授, 博士生导师, 主要从事纳米结构材料设计与计算模拟实验方面的研究, E-mail: gaoyj@gxu.edu.cn.

0 引言

【研究意义】纳米晶材料(NCM)展现了优异的形变特性,其变形机理已成为研究热点^[1~15]。通常这种材料是极硬或极脆的,但某些纳米晶金属、陶瓷、合金甚至表现出超塑性,故有必要研究这类材料晶界位错在应力作用下的演化机理。**【前人研究进展】**NCM的延展性可以通过控制剪切带中的局部位错流得以实现,通常情况下,其塑性或超塑性变形机理是通过晶格位错滑移、晶界位错滑移、晶界扩散蠕变、三叉晶界连接扩散蠕变、孪晶化、旋转等之间的竞争来决定。在本文中,我们考虑相对较大的晶粒($d > 30 \text{ nm}$),对于这种晶粒中,晶格位错的滑移占主导。传统的晶格位错源^[16]作用,例如 Frank-Read 源的作用,在纳米尺度晶界效应的材料中受到抑制,但该类材料的阻尼系数与向错强度会对位错滑移产生显著影响。在这种情况下,NCM 的晶界体积分数很高,能够作为晶格位错源强烈影响塑性流。在多晶材料粗化过程的内应力作用下,小角晶界经历结构转变。因此,自然会考虑加载的 NCM 晶界在外应力、向错和阻尼作用下经历怎样的显著改变。**【本研究切入点】**尽管文献^[17]提出一个理论模型,用于描述在剪切应力作用下,NCM 的小角晶界湮没过程,但没有对晶界位错在切应力作用下的运动细节、向错强度和阻尼系数的影响进行深入分析。本课题组曾对小角晶界的湮没情况进行了研究,取得了系列成果^[18~21],但有些方面还有待进一步探讨。**【拟解决的关键问题】**在文献^[17]的基础上,通过数值模拟计算,引入向错强度和阻尼系数的变化,研究切应力作用下的小角晶界的衰变过程,揭示晶界位错的运动特征以及向错强度和阻尼系数对位错滑移的影响。

1 模型与方法

考虑在三叉晶界连接处的小角晶界,如图 1 所示。在未施加剪切应力时,晶界位错直线排列,形成位错墙,其间距为 h ,晶界的长度为 d 。位错的柏氏矢量为 \vec{b} 。为明确起见,假设晶界的倾侧取向角 θ 满足补偿关系, $\theta + \theta_1 + \theta_2 = 0$ 和 $-\theta + \theta_1' + \theta_2' = 0$, (θ_1, θ_2) 和 (θ_1', θ_2') 为三叉晶界的取向参数,分别对应于晶界上三叉点 A 和下三叉点 B。

对该体系施加切应力作用,将会引起位错发生位移,设滑移系沿 x 水平方向。为了获得位错的运动方程,首先分析位错的受力。位错受到 3 种类型力作用:外部施加的切应力,位错之间的相互作用力,位错

墙形成的向错偶极子的作用力。向错的强度用 ω 表示,则第 i 个位错的受力表示为

$$F_i = b\tau + Db^2 \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \frac{(x_i - x_k) \{ (x_i - x_k)^2 - (y_i - y_k)^2 \}}{\{ (x_i - x_k)^2 + (y_i - y_k)^2 \}^2} - Db\omega \left(\frac{x_i y_i}{x_i^2 + y_i^2} - \frac{x_i (y_i - d)}{x_i^2 + (y_i - d)^2} \right). \quad (1)$$

设第 i 个位错的坐标 $(x_i, y_i) = (x_i, y_i = ih)$, 这时小角晶界的第 i 个位错的运动方程可写为

$$m \frac{d^2 x_i}{dt^2} + \beta \frac{dx_i}{dt} = F_i, i = 1, 2, \dots, N. \quad (2)$$

本文计算时假设晶界 N 有 15 个位错,位错质量取 $m = \frac{\rho b^2}{2} = 2.4 \times 10^{-16} \text{ kg/m}$, β 为阻尼系数,取 $\beta \approx 5 \times 10^{-5} \text{ Pas}$ 。运用 MATHEMATICA 8.0 计算软件求方程的数值解,计算中所用的参数值如下: $G = 82 \times 10^9 \text{ Pa}$, $\nu = 0.29$, $a = 2.87 \times 10^{-10} \text{ m}$, $b = \frac{1}{2} a \{111\} = 2.5 \times 10^{-10} \text{ m}$, $N = 15$, $\theta = 0.1 (\approx 5.7^\circ)$, $\omega = \theta = 0.1, h = 10 b$ 。

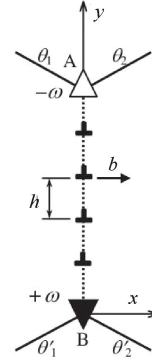


图 1 三叉晶界连接处的小角晶界位错排列示意图

Fig. 1 Schematic diagram about small-angle grain boundary dislocations arrangement at the junction of trigeminal boundary

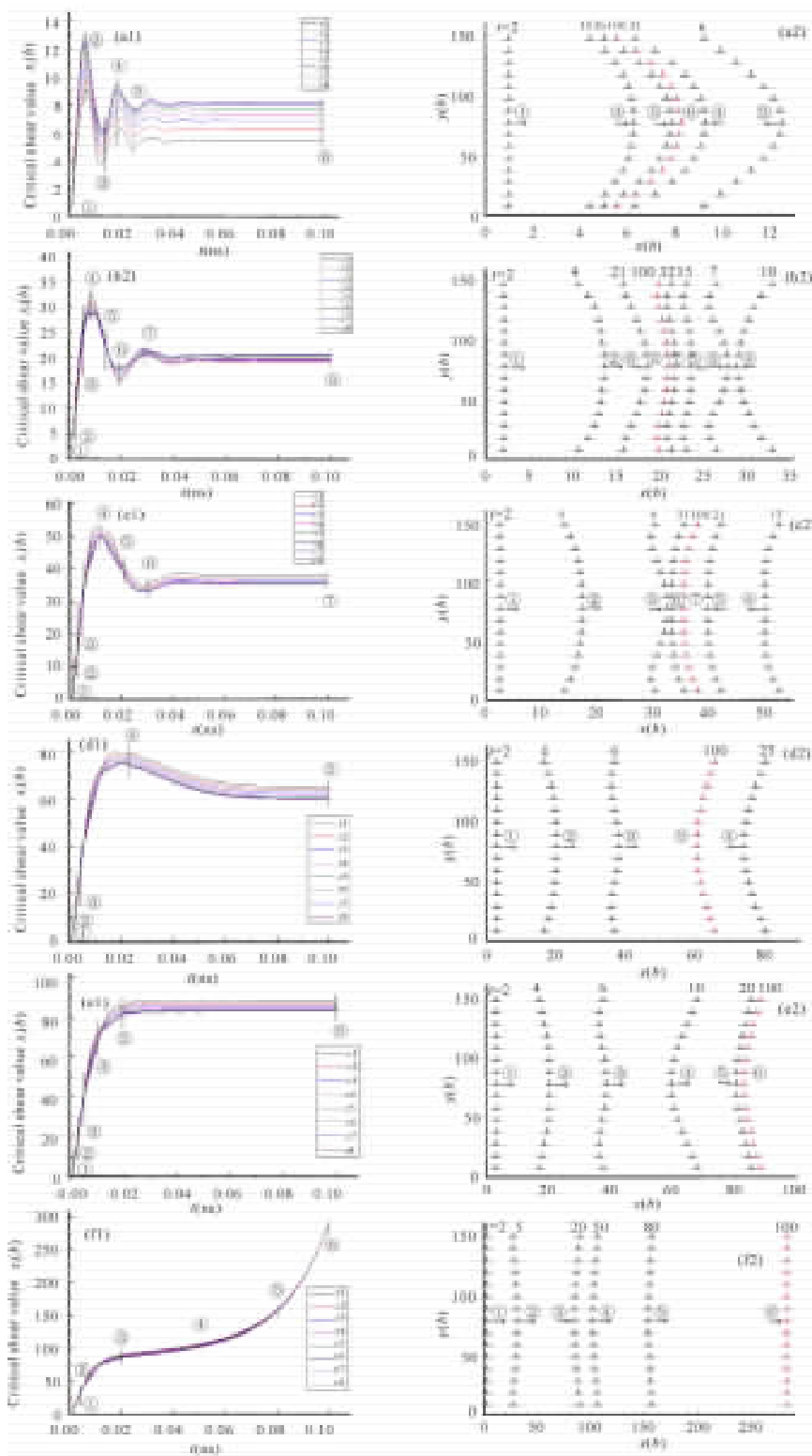
2 结果与分析

2.1 切应力对晶界整体运动的影响

根据计算结果,该模型下的位错运动具有高度对称性,即 $x_i(t) = x_{N-i+1}(t), i = 1, \dots, 8$ 。为了表示方便,只研究 $x_1(t) \sim x_8(t)$ 的情况。由图 2 可以看出

1) 剪切应力较小, $\tau = 0.5 \text{ GPa}$ 时,晶界位错排列运动,由直线排列变成弧形排列,并且中间的位错 x_8 走在最前,弧形的位错排列线出现来回往复运动情况,最后在某一时刻静止,整个位错线保持向前凸的弧形。

2) 剪切应力增加到 $\tau = 1.0 \text{ GPa}$ 时,位错排列的整体运动出现了新的现象。开始阶段,位错整体排列线由直线形转变成弧形,向前突。然后两端的位错运动加快,逐渐赶上中间的位错,位错排列线形成弓字



(a) $\tau = 0.5$ GPa, 运动过程为①→②→③→④→⑤→⑥; (b) $\tau = 1.0$ GPa, 运动过程为①→②→③→④→⑤→⑥→⑦→⑧; (c) $\tau = 1.3$ GPa, 运动过程为①→②→③→④→⑤→⑥→⑦; (d) $\tau = 1.5$ GPa, 运动过程为①→②→③→④→⑤; (e) $\tau = 1.525$ GPa, 运动过程为①→②→③→④→⑤→⑥; (f) $\tau = 1.54$ GPa, 运动过程为①→②→③→④→⑤→⑥→无穷远。

(a) With $\tau = 0.5$ GPa, motion process of grain boundary: ①→②→③→④→⑤→⑥; (b) With $\tau = 1.0$ GPa, motion process of grain boundary: ①→②→③→④→⑤→⑥→⑦→⑧; (c) With $\tau = 1.3$ GPa, motion process of grain boundary: ①→②→③→④→⑤→⑥→⑦; (d) With $\tau = 1.5$ GPa, motion process of grain boundary: ①→②→③→④→⑤; (e) With $\tau = 1.525$ GPa, motion process of grain boundary: ①→②→③→④→⑤→⑥; (f) With $\tau = 1.54$ GPa, motion process of grain boundary: ①→②→③→④→⑤→⑥→infinity.

图2 晶界(红色晶界时刻为0.1 ns)各位错运动的位置随时间的变化(左图)和晶界位错排列形状随时间的演化(右图)

Fig. 2 The motion locations of every dislocation in the grain boundary with time increasing(Left column) and the shape of dislocations in grain boundary with increasing time(Right column). The time of red grain boundary is 0.1 ns

形,然后又超过中间的位错形成向前凹的弧形。从图 2b 中的④位错线形状看出,位错排列在折回运动中速度依然是从中心位错到两端位错递增,再次形成弓形排列和向前凸的弧形排列,最终以弓形排列振荡并停止。

3) 剪切应力增加到 $\tau = 1.3$ GPa 时,结果与 $\tau = 1.0$ GPa 的情况类似。不同在于位错排列形成向前凹的弧形,见图 2c 中的④位错线形状后,以该形状做复往运动并停止。

4) 剪切应力为 $\tau = 1.5$ GPa 时,晶界线也是由直线形先变成向前凸的弧形,然后是弓形,再到向前凹的弧形,最终保持向前凹的弧形静止,见图 2d。位错排列振荡不明显,仅在第一次折回过程中便到达静止位置。

5) 剪切应力接近临界值 $\tau = 1.525$ GPa 时,位错排列在经历直线形、弧形、弓形和弧形的运动过程后,不往回运动,很快到达静止位置,见图 2e。

6) 当剪切应力达到 $\tau = 1.54$ GPa 时,开始阶段位错排列呈现向前凸的弧形线,接着变成向前凹的弧形线。位错线不断向前运动,最后又变成直线,所有的位错肩并肩地一起向前不停运动,这时位错可以走向无穷远,完全脱离原来的晶界,出现晶界衰落。

7) 由图 2a 可见,晶界位错位置随时间的变化呈现阻尼衰减振荡的形式,开始出现 3 个明显的相对平衡位置的振荡,但随时间增加振幅不断减小,最后振幅趋于零,所有的位错停止不动。由图 2b 可见,剪切应力增大,位错位移的阻尼振动更加明显,振荡的次數明显减少,较快地达到平衡位置,保持不动。当剪切应力增大到 $\tau = 1.54$ GPa(超过临界切应力 τ_c),位错位移曲线由阻尼振荡形式转变成单调增加形式,如图 2f 所示,而且整个晶界上的位错运动步调趋于一致,远离初始位置,不会静止。整体来看,剪切应力越大位错的平衡位置就越远。

2.2 向错强度 ω 对晶界湮没的影响

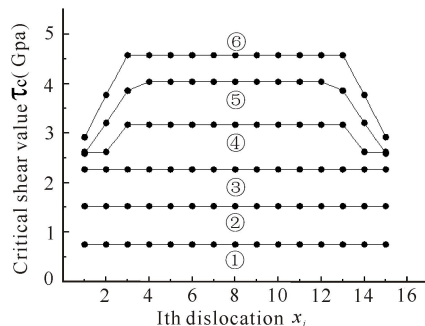
ω 的正负表示向错的极性,绝对值的大小表征向错的变形程度。根据公式(1),当 ω 不同时,位错的受力也不同,晶界湮没的情况也就不同。我们选取不同的 ω 值,分别计算出各个位错被释放的临界切应力值,并将其绘制成临界切应力值 τ_c 与第 i 个位错 x_i 的关系图(图 3),可以看出

1) 向错强度 ω 较小时,位错湮没临界切应力如图 3 曲线①~③所示,各个临界值相同。向错强度 $\omega > 0.20$ 时,位错湮没临界值曲线出现了新的现象,如图 3(曲线④~⑥)所示,两端位错的临界值较小,中间位错的临界值较大,临界值曲线形成向下凹的弧形

排列。

2) 当 ω 较小时,整个晶界同时湮没,随着 ω 增大,两端位错先湮没,随后向中心发展,中心位错最后发生湮没。

3) 随着向错强度的增大,各个位错的临界切应力逐步增大,并且两端与中间的临界值差越来越大。这说明向错强度越大,向错对位错运动的阻碍作用越强,越是靠近晶界中部阻碍效果越明显。



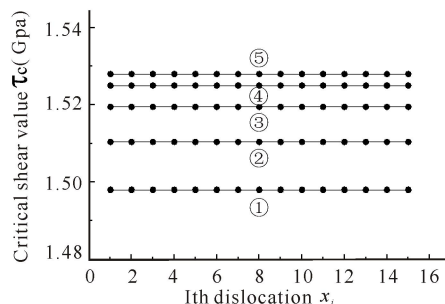
① $\omega = 0.05$, ② $\omega = 0.10$, ③ $\omega = 0.15$, ④ $\omega = 0.20$, ⑤ $\omega = 0.25$, ⑥ $\omega = 0.30$

图 3 第 i 个位错 x_i 的临界切应力值 τ_c 与向错强度 ω 的关系

Fig. 3 The relationship between critical shear value τ_c of i th dislocation x_i and intensity of disclination ω

2.3 阻尼系数 β 对晶界湮没的影响

由之前的讨论得知, $\omega > 0.10$ 时,整个晶界同时湮没。令 $\beta = \beta_0 \times q$, $\beta_0 \approx 5 \times 10^{-5}$ Pas,以 q 为倍数,画出第 i 个位错 x_i 的临界切应力值 τ_c 与阻尼系数 β 的关系图(图 4)。



① $q = 0.7$; ② $q = 0.8$; ③ $q = 0.9$; ④ $q = 1$; ⑤ $q = 2$, $q = 5$, $q = 10$, $q = 50$, $q = 100$

图 4 第 i 个位错 x_i 的临界切应力值 τ_c 与阻尼系数 β 的关系

Fig. 4 The relationship between critical shear value τ_c of i th dislocation x_i and damping coefficient β

可以看出

1) 当阻尼系数的倍数 $q \leq 1$ 时,如图 4 中曲线①~④所示,随着 q 的增加,各个位错湮没的临界切应力值逐渐增加。

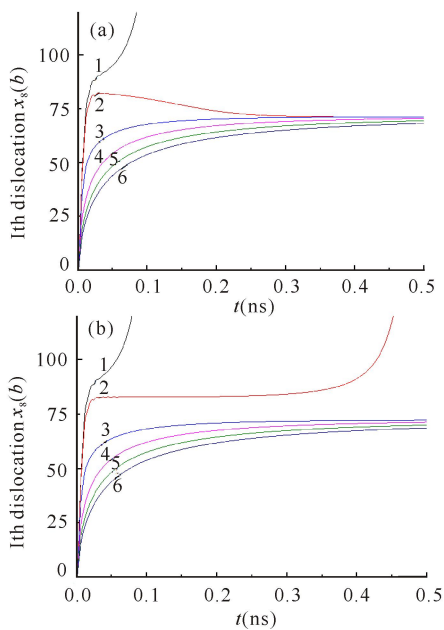
2) 当阻尼系数的倍数 $q > 1$ 时,如图 4 中曲线

⑤,它代表了当 $q = 2, 5, 10, 50, 100$ 倍时的情况,无论阻尼系数倍数如何变化,各个位错湮没的临界值恒定。

3)图 4 中 5 条曲线都是平行于 x 轴的水平线,说明无论阻尼系数倍数为何值时,整个晶界同时湮没。

继续研究在外切应力接近临界值 $\tau = 1.525$ GPa 时,不同阻尼系数下的中心位错的运动情况。由于阻尼系数太大会导致无法在一副图内展示,故针对中心位错讨论 $q = 0.9, 1, 2, 4, 6, 8$ 的情况。

由图 5 可知,随着阻尼系数的增加,位错运动的初始速度逐步放慢,运动停止时间逐渐变长。图 5 a 中,除了曲线 1 湮没外,其余各个位错都将停止在相同位置。图 5 b 中,除曲线 1 和 2 湮没外其余曲线代表的位错静止在相同的位置。经过验证,当 $q = 0.7, 0.8, 0.9, 1, 5, 10, 50, 100$ 时也符合上述现象。



(a) $\tau = 1.524 \rightarrow \tau_c^-$, (b) $\tau = 1.525 \rightarrow \tau_c^+$
1: $q = 0.9$; 2: $q = 1$; 3: $q = 2$; 4: $q = 4$; 5: $q = 6$; 6: $q = 8$

图 5 阻尼系数 β 对中心位错湮没的影响

Fig. 5 The influence of damping coefficient β on annihilation of central dislocation

3 结论

本文通过建立位错运动方程,计算模拟小角度晶界的晶格位错在外应力作用下发生的运动,发现以下现象:

1)剪切应力较小时,晶界位错线脱离初始晶界面后振荡并停止,不同的剪切应力对应的晶界运动形状也不同;剪切应力超过临界值时,晶界不振荡,一直向前运动到无穷远处,晶界湮没。

2)向错强度越大,其对晶界位错湮没的阻碍能力

越强,而且随着向错强度的增加,晶界由同时湮没转变为两端先湮没中间后湮没。

3)阻尼系数较小时,阻尼系数越大,晶界湮没越困难。当阻尼系数到达一定值时,阻尼系数不再影响晶界湮没的临界值。

4)整体来看,阻尼系数越大,位错初始速度越小,运动停止时间越长。但阻尼系数不影响晶界同时湮没现象。未湮没的位错停止位置相同。

参考文献:

- [1] Pande C S, Masumura R A, Armstrong R W. Pile-up based Hall-Petch relation for nanoscale materials[J]. Nanostructured Materials, 1993, 2(3): 323-331.
- [2] Malygin G A. Breakdown of the Hall-Petch law in micro-and nanocrystalline materials[J]. Physics of the Solid State, 1995, 37: 1248-1253.
- [3] Masumura R A, Hazzledine P M, Pande C S. Yield stress of fine grained materials[J]. Acta Materialia, 1998, 46(13): 4527-4534.
- [4] Kim H S, Estrin Y, Bush M B. Plastic deformation behaviour of fine-grained materials[J]. Acta Mater, 2000, 48: 493-504.
- [5] 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 L, Wang Y L, et al. Dislocation structure evolution in low angle grain boundary[J]. Guangxi Sciences, 2013, 20(4): 316-320.
- [6] Fedorov A A, Gutkin M Y, Ovid'ko I A. Triple junction diffusion and plastic flow in fine-grained materials[J]. Scripta Materialia, 2002, 47(1): 51-55.
- [7] Murayama M, Howe J M, Hidaka H, et al. Atomic-level observation of disclination dipoles in mechanically milled, nanocrystalline Fe[J]. Science, 2002, 295(5564): 2433-2435.
- [8] Ovid'ko I A. Deformation of nanostructures[J]. Science, 2002, 295(5564): 2386-2386.
- [9] Gutkin M Y, Kolesnikova A L, Ovid'ko I A, et al. Disclinations and rotational deformation in fine-grained materials [J]. Philosophical Magazine Letters, 2002, 82(12): 651-657.
- [10] Gutkin M Y, Ovid'ko I A, Skiba N V. Crossover from grain boundary sliding to rotational deformation in nanocrystalline materials[J]. Acta Materialia, 2003, 51(14): 4059-4071.
- [11] 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 boundary[J]. Guangxi Sciences, 2013, 20(4): 311-315.
- [12] Hahn H, Padmanabhan K A. A model for the deformation of nanocrystalline materials [J]. Philosophical Magazine B, 1997, 76(4): 559-571.
- [13] Konstantinidis D A, Aifantis E C. On the "anomalous"

hardness of nanocrystalline materials[J]. *Nanostructured Materials*, 1998, 10(7):1111-1118.

- [14] Fedorov A A, Gutkin M Y, Ovid'ko I A. Transformations of grain boundary dislocation pile-ups in nano-and polycrystalline materials[J]. *Acta Materialia*, 2003, 51(4):887-898.
- [15] Chen M, Ma E, Hemker K J, et al. Deformation twinning in nanocrystalline aluminum[J]. *Science*, 2003, 300(5623):1275-1277.
- [16] 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*, 2013, 50(1):110-120.
Gao Y J, Lu C J, Huang L L, et al. Phase field crystal simulation of dislocation movement in grain boundary and dislocation reaction[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2013, 50(1):110-120.
- [17] Bobylev S V, Gutkin M Y, Ovid'ko I A. Decay of low-angle tilt boundaries in deformed nanocrystalline materials[J]. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2004, 37(2):269-273.
- [18] 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. Phase field crystal

simulation of nano twin crystal structure[J]. *Computational Physics*, 2013, 30(4):577-581.

- [19] Gao Y J, Deng Q Q, Quan S L, et al. Phase field crystal simulation of grain boundary movement and dislocation reaction[J]. *Frontiers of Materials Science*, 2014, 8(2):176-184.
- [20] 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 dislocations movement in pre-melting grain boundary under high temperature strain[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2014, 50(7):886-896.
- [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(3):203-208.
Gao Y J, Yuan L L, Liu Y, et al. Phase field crystal simulation of process of dislocation annihilation in grain boundary under various temperature[J]. *Guangxi Sciences*, 2014(3):203-208.

(责任编辑:尹 闯)

(上接第 510 页 Continue from page 510)

- [22] 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 dislocations movement in pre-melting grain boundary under high temperature strain[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2014, 50(7):886-896.
- [23] 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(3):203-208.
Gao Y J, Yuan L L, Liu Y, et al. Phase field crystal simulation of process of dislocation annihilation in grain boundary under various temperature[J]. *Guangxi Sciences*, 2014(3):203-208.

- [24] Bobylev S V, Gutkin M Y, Ovid'ko I A. Decay of low-angle tilt boundaries in deformed nanocrystalline materials[J]. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2004, 37(2):269-273.
- [25] 王亚男, 陈树江, 董希淳. 位错理论及其应用[M]. 北京:冶金工业出版社, 2007.
Wang Y N, Chen S J, Dong X C. *Dislocation Theory and Its Application* [M]. Beijing: Metallurgical Industry Press, 2007.

(责任编辑:尹 闯)