

晶界位错运动的空位晶体相场模拟*

Vacancy Phase-field-crystal Simulation of Dislocation Motion of Grain Boundary

黄世叶,李胜男,胡绪志,孔令一,卢强华,高英俊**

HUANG Shiye, LI Shengnan, HU Xuzhi, KONG Lingyi, LU Qianghua,
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】研究不同形式的应力对位错运动形式的影响。【方法】通过添加空位自由能项修正晶体相场模型(Phase-field-crystal model, PFC model),得到空位晶体相场模型(Vacancy phase-field-crystal model, VPFC model),并采用VPFC模拟小角度晶界(Grain Boundary)在外加单方向应力作用下的变形过程。【结果】在外加单方向应力作用下,小角度晶界位错组作攀移运动时系统自由能增加,位错组滑移时出现系统自由能下降和位错反应等现象。 x 方向拉应力促使位错发生负攀移,压应力促使位错发生正攀移。【结论】VPFC模型可有效模拟晶界位错、空位等微结构演化过程。

关键词:晶体相场 位错 应变 晶界

中图分类号: TG111.2 文献标识码: A 文章编号: 1005-9164(2016)05-0459-06

Abstract:【Objective】The influence of different forms of stress on dislocation movement was studied.【Methods】By adding a vacancy free energy term, we obtained a new model of vacancy phase-field-crystal (VPFC), which was used to simulate the deformation process of low-angle grain boundaries (GBs) under a single direction stress.【Results】The simulation results show that the free energy of system increases when dislocations climb on GBs whereas the free energy decreases when dislocations glide with the appearance of dislocations reaction. The tensile stress of x direction prompts dislocations to negative climbing, and compressive stress on the contrary.【Conclusion】The VPFC model can effectively simulate the microstructure evolution process of grain boundary dislocations and vacancies.

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

收稿日期: 2016-08-17

作者简介: 黄世叶(1993-), 男, 硕士研究生, 主要从事纳米材料设计与模拟实验研究。

* 国家自然科学基金项目(51161003, 50661001), 广西自然科学基金重点项(2012GXNSFDA053001), 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实验研究, E-mail: gaoyj@gxu.edu.cn。

0 引言

【研究意义】晶界(Grain Boundary)是两个取向不同的相邻晶粒之间的交接界面^[1]。通常晶界上的原子排列混乱、缺陷多、能量高,对材料力学性能影响较大^[2]。对于一般金属,晶界对位错运动起阻碍作用。在室温下,对于一般金属材料晶界的存在本身就是一种强化因素。利用晶界的上述特性控制晶界的

演化是目前的研究重点。由于晶界迁移等演化所涉及的时间尺度较小,在现有的实验条件下,很难直接被观察到。因此,计算机模拟实验成为重要的研究手段。【前人研究进展】近十年来采用计算机模拟材料的微观结构演化的方法有很多种,如分子动力学、蒙特卡洛方法、有限元分析方法等,此类方法在一定的尺度范围内模拟得出较好的结果。但是,分子动力学方法适用的特征时间尺度为 $10^{-14} \sim 10^{-12}$ s,对于扩散时间尺度 (10^{-6} s) 的微结构演化并不适合。晶体相场方法(PFC)^[3-4]是近年来提出的一种新的材料模拟方法,它采用周期性原子密度函数为相场变量,通过密度场与温度场、应力场等外场的耦合,引入动力学方程。该方法可以分辨空间原子尺度及扩散时间尺度的材料微观结构演化。目前晶体相场方法已经被用于研究应力下的位错攀移和滑移^[5-6],外延生长^[7]、裂纹扩展^[8-9]、晶界预熔化^[10-11]等现象,模拟的结果与实验结果符合。在最初的 PFC 方法中,难以模拟空位缺陷结构,说明这个模型存在一定的局限性。为了弥补最初的 PFC 模型的不足,Chan 等^[12]引进一个空位自由能项限制参数范围(非负数)。修正后的 VPFC 模型及其相图也随之发生变化,出现空位相。【本研究切入点】对比 PFC 与 VPFC 两个模型在模拟位错运动演化过程中的现象,得出模型差异,运用 VPFC 模型模拟材料微观结构演化。【拟解决的关键问题】通过添加空位自由能项修正晶体相场模型(PFC model),得到空位晶体相场法模型(VPFC model),并采用 VPFC 模型模拟在外加单方向应力作用下小角度晶界的变形过程。

1 模型与方法

1.1 模型介绍

最早的晶体相场模型是由 Elder 等^[3-4]在 2004 年提出的,它基于密度泛函理论得到的原子密度函数 ρ 作为序参量,以该序参量构建的自由能表达式为^[3]

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

式中, r 是无量纲化的温度参数, q 是原子间距。增加了空位自由能项 $f_{vac}(\rho)$ 后,系统总自由能变为

$$F = \int \left[\frac{\rho}{2} [r + (q^2 + \nabla^2)^2] \rho + \frac{\rho^4}{4} + f_{vac}(\rho) \right] dr, \quad (2)$$

其中空位自由能表达式为^[13]

$$f_{vac}(\rho) = H(\rho^n - |\rho^n|), \quad (3)$$

式中取 $n = 3$, $H = 1\,500$,空位自由能表达式是一个分段函数,当 $\rho > 0$ 时,空位自由能为 0;当 $\rho < 0$ 时,

空位自由能为较大的正值。因此,这一空位项削弱了 ρ 的负值。这使得空位晶体相场模型组成的周期结构与规则晶体相场模型有一些不同。与传统晶体相场模型一样,空位晶体相场也采用 C-H 方程^[14]控制原子密度函数随时间的演化:

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \alpha \nabla^2 \frac{\delta F[\rho]}{\delta \rho(x, t)}, \quad (4)$$

将原子密度函数代入到自由能表达式中,求出六角晶格自由能函数极小值,得到平衡时六角晶格的单模原子密度函数:

$$\rho = A \left[\cos(qx) \cos\left(\frac{qy}{\sqrt{3}}\right) + \frac{1}{2} \cos\left(\frac{2qy}{\sqrt{3}}\right) \right] + \rho_0, \quad (5)$$

式中 A 为密度振幅, q 为原子间距, ρ_0 为平均密度。二维 VPFC 模型相图^[12]如图 1 所示。

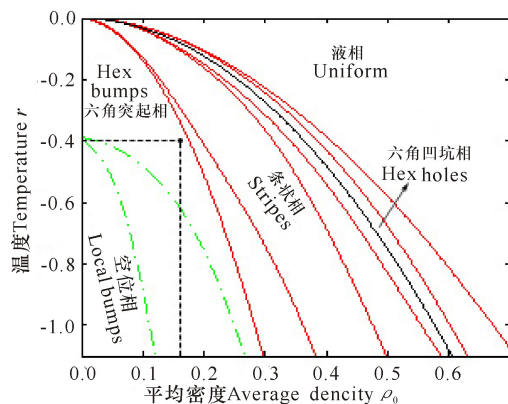


图 1 二维 VPFC 相图

Fig. 1 Two-dimensional phase diagram of vacancy phase-field-crystal

1.2 样品设置

设置一个大小为 $L_x * L_y = 512 * 512$ 的样品,空间步长设置为 $\Delta x = \Delta y = 1$,时间步长设置为 $\Delta t = 0.0075$ 。采用周期性边界条件。设置样品初始条件:在样品 $0 < x < L_x/4$ 和 $3L_x/4 < x < L_x$ 的范围内晶粒取向为 $\theta/2$,在 $L_x/4 < x < 3L_x/4$ 范围内的晶粒取向为 $-\theta/2$ (图 2a)。经过一段时间(设置弛豫时间步数为 100 000 步)演化,系统达到稳定(图 2b)。

1.3 应变力的施加

给样品施加不同方向的拉和压应力,采用 VPFC 模型模拟晶界上的位错在应变作用下的运动过程,参数见表 1,其中 θ 为晶界取向差角, r 为温度参数, ρ_0 为原子平均密度, E 为应变率。

在外应变条件下,晶界上的位错会因晶粒的变形而运动,通过公式(2),计算整个加应变过程系统的自

由能变化,并绘制系统自由能变化曲线;在曲线关键的位置选取对应的晶粒演化图进行分析,并对每一个位错进行编号;最后,对两个样品的晶粒晶列取向(二维)进行简化分析。

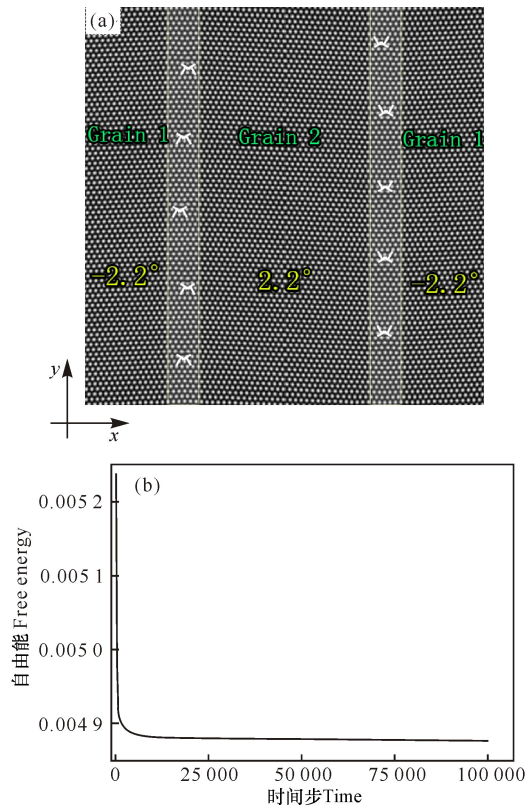


图2 样品设置(a)及弛豫过程的体系自由能变化过程(b)
Fig. 2 Prepared sample(a) and the free energy of system for relaxation process (b)

表1 样品制备参数

No.	<i>x</i> direction	<i>r</i>	ρ_0	θ	<i>E</i>
A ₁	draw	-0.4	0.16	4.4°	1.6×10^{-5}
A ₂	press	-0.4	0.16	4.4°	1.6×10^{-5}

2 结果与分析

2.1 A₁ 组实验

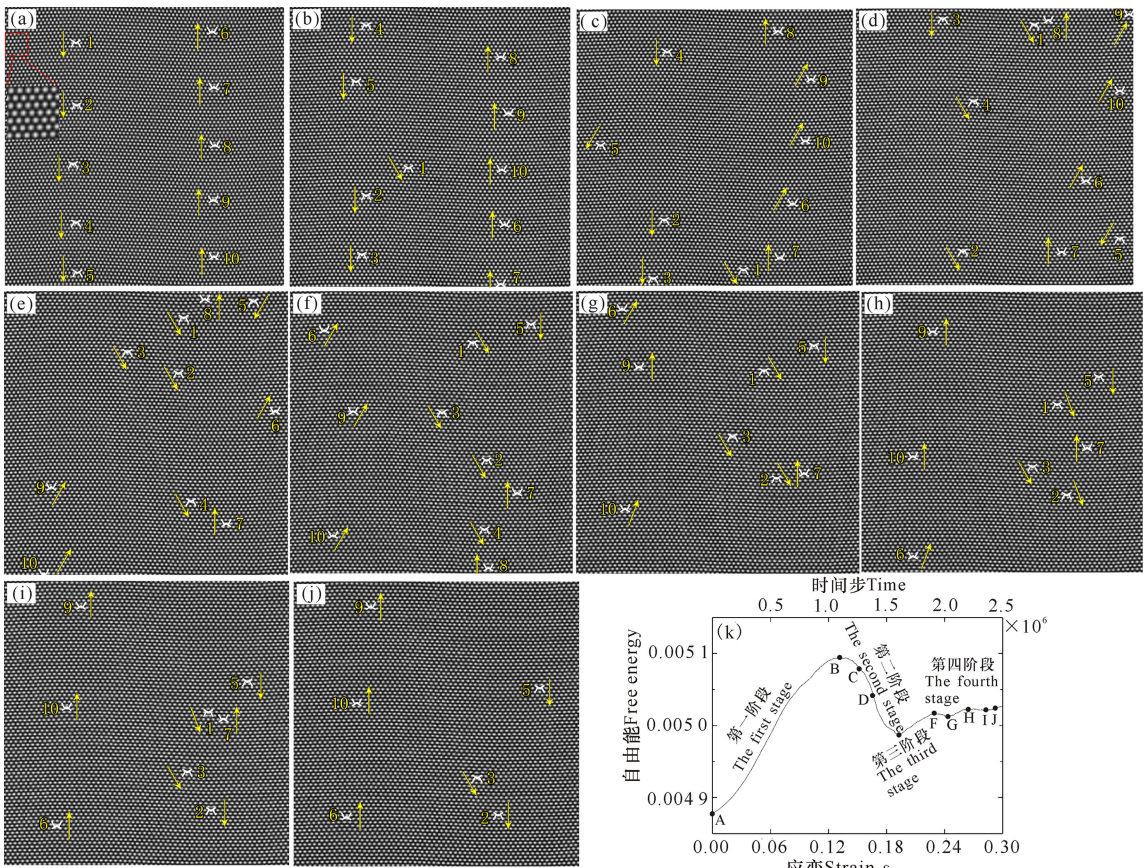
如图3所示,通过对自由能曲线和演化图的分析,可将演化过程分为4个阶段。第1阶段(图3a~b),位错组在应变作用下攀移,两个晶粒的取向差稍微减小。当应变达到0.108 0(900 000步左右)时,左边1号位错组滑移出来,其余位错组继续攀移。第2

阶段(图3b~e),系统应变继续增加,左右晶界的位错组都出现滑移。首先是左边位错组5向左滑移,随后右边的晶界上位错组6,9和10都向右边滑移出来。剩余位错组还在晶界上继续攀移。此外,通过观察位错组1和位错组2,对比得出位错组攀移速度远小于滑移速度。第3阶段(图3e~f),停留晶界上的位错继续攀移,系统自由能累积上升。第4阶段(图3f~i),原左边晶界上的位错组1至5都滑移到右边晶界的附近停留(图3i)。而右边晶界上的位错组也有部分滑移到原来左边晶界的位置,这时晶粒1,2的取向差明显减小。位错组4到达右边晶界的位置后继续向下攀移,攀移方向与位错组8相反,最后两个位错组相遇湮没。

从能量的角度分析,图3k自由能曲线中的点A~J分别对应于图3a~j。原子相互作用能可以分为畸变能和原子势能。在原子数量和相对位置不变的情况下,原子势能基本保持不变,系统能量变化的主要贡献是畸变能。在第1阶段,位错受应变的作用沿着晶界攀移,系统畸变能增加,对应的自由能曲线能量呈上升趋势,在1号位错组滑移出晶界后,系统自由能上升变慢。这是由于位错滑移出晶界后,晶界上的位错组密度减小,畸变能也随之减小。第2阶段,点B位置自由能开始下降。对应的演化图3b中,晶界上的位错组不断滑移出去,晶界上的畸变变小,系统总自由能迅速下降,对应图3k曲线上的点B~E。第3阶段,晶界上的位错继续攀移,能量积累,曲线呈上升趋势,对应能量曲线上的点E和F。第4阶段,位错4和位错8相遇湮没减少了样品的畸变,系统自由能出现微小的下降(图3k中的点F~G)。

2.2 A₂ 组实验

对样品施加*x*方向的压应力得到如图4的演化过程,在这一过程中,位错组只在*x*方向压应力作用下做攀移运动,并没有出现位错组滑移现象。而自由能曲线也出现明显的拐点(自由能曲线中的C、D两点)。图4c中,在位错10的左右两边出现新的缺陷(图中的放大区域),然后形成一对柏氏矢量相反的位错组,最后在应力的作用下沿晶列方向滑移(图4d中的红色位错)。注意到,位错组攀移的方向与A₁样品(受*x*方向拉应力)结果中攀移方向相反。

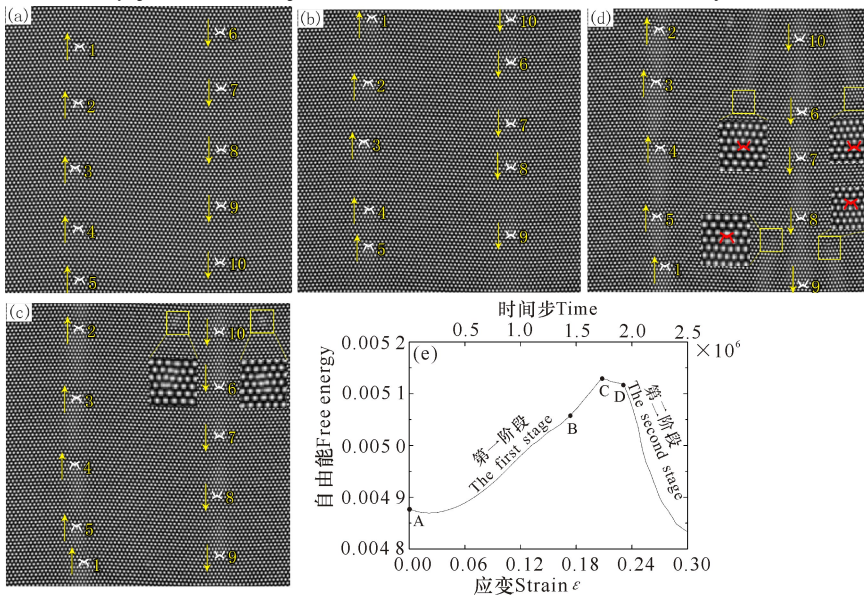


(a) $T=0$ ($\epsilon=0$); (b) $T=1\ 096\ 000$ ($\epsilon=0.131\ 5$); (c) $T=1\ 270\ 000$ ($\epsilon=0.152\ 4$); (d) $T=1\ 380\ 000$ ($\epsilon=0.165\ 6$); (e) $T=1\ 601\ 000$ ($\epsilon=0.192\ 1$); (f) $T=1\ 899\ 000$ ($\epsilon=0.227\ 8$); (g) $T=2\ 023\ 000$ ($\epsilon=0.242\ 7$); (h) $T=2\ 260\ 000$ ($\epsilon=0.271\ 2$); (i) $T=2\ 322\ 000$ ($\epsilon=0.278\ 6$); (j) $T=2\ 352\ 000$ ($\epsilon=0.282\ 2$); 曲线上的点 A~J 分别对应着演化图(a~j); 黄色箭头表示位错运动方向

The points on the curve A~J correspond to the evolution diagram (a~j); The yellow arrow indicates the direction of the movement of the dislocation

图 3 加 x 方向拉应变样品演化过程(a~j)及系统自由能变化(k)

Fig. 3 Evolutionary process of sample with tensile stress at x -direction (a~j) and the free energy of system (k)



(a) $T=0$ ($\epsilon=0$); (b) $T=1\ 250\ 000$ ($\epsilon=0.105\ 0$); (c) $T=1\ 730\ 000$ ($\epsilon=0.207\ 6$); (d) $T=1\ 916\ 000$ ($\epsilon=0.229\ 9$); 曲线上的点 A~J 分别对应着演化图(a~j); 黄色箭头表示位错运动方向

The points on the curve A~J correspond to the evolution diagram (a~j); The yellow arrow indicates the direction of the movement of the dislocation

图 4 加 x 方向压应变作用样品的演化过程(a~d)及系统自由能变化(e)

Fig. 4 Evolutionary process of sample with compression stress at x -direction (a~d) and the free energy of system (e)

2.3 简化分析结果

如图 5a~b 所示,虚线表示晶列方向,粗箭头表示受力方向,细箭头表示位错组攀移方向。T 型符号表示位错组符号,即两个单刃型位错组成的位错组可以等效为他们柏氏矢量总和的效果(图 5c),具体公式为^[5]

$$b_1 + b_2 = d\theta n = B, \quad (6)$$

由图 5a 可知,样品受到 x 方向压应力作用,原子在位错下方聚集,这时位错的半原子面向上增加,则位错向上攀移。图 5b 中,晶列受 x 方向拉应力作用,晶界两边的晶粒取向差变小,位错的半原子面向下运动,则位错向下攀移。根据位错间距 d 与柏氏矢量 B 、晶粒取向差 θ 的关系:

$$d = \frac{B}{2\sin(\frac{\theta}{2})} \approx \frac{B}{\theta}, \quad (7)$$

取向差变小,位错间距变大,则晶界上的位错密度变小,在没有位错反应的情况下,位错滑移出晶界

以减小位错密度。

在文献[6]中,作者采用 PFC 模型模拟双晶界在应力作用下的位错演化实验,观察到 x 方向拉应力和 y 方向拉应力的不同导致位错攀移的方向也不同,因为拉应力促使负攀移的发生,而压应力则会促使正攀移的发生。本研究中我们可以将样品受 x 方向压应力与受 y 方向拉应力的效果等效,研究得到的结果表明, x 方向的拉应力和 x 方向的压应力在初始阶段位错组攀移分别为负攀移和正攀移,与 PFC 模型模拟的结果相似。

VPFC 模型的优势在于模拟空位结构,这是目前 PFC 模型所不能模拟研究的微观结构。在最近一些采用 PFC 模型模拟空位-裂纹扩展的文献中,空位内的密度值并非最低值,而是接近平均原子密度值。而 VPFC 模型模拟得到的空位结构^[15],空位内的密度值是最低的零,更接近现实。

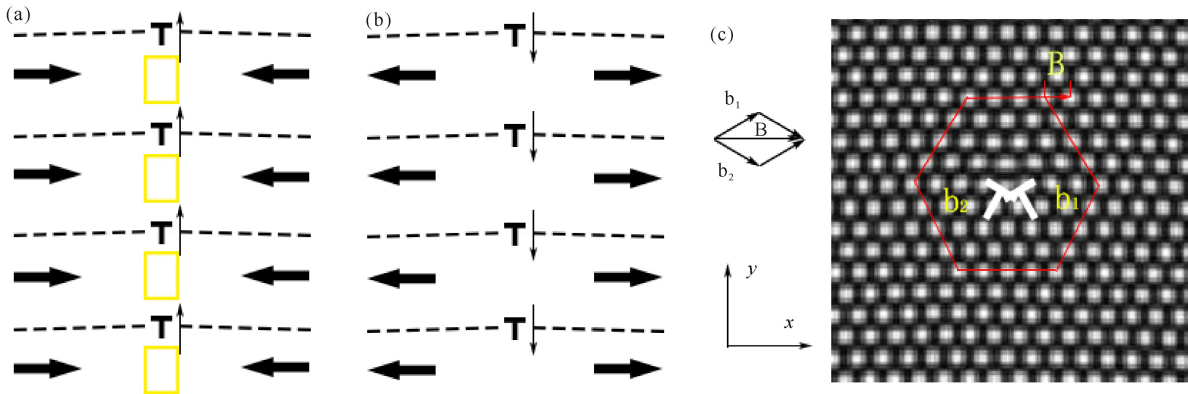


图 5 样品左边晶界受 x 方向应力的简化图(a~b)及位错组柏氏矢量合成图^[16](c)

Fig. 5 Simplified diagrams of the left boundary simple with x -direction stress (a~b) and the diagram of dislocations Burgers vector composition^[16](c)

3 结论

本研究采用 VPFC 模型模拟双晶界在单向应变的作用下位错运动情况,揭示不同应力形式对位错攀移和位错反应的影响。结果表明,样品受 x 方向的拉应力促使晶界上的位错在初始阶段发生负攀移,随后位错滑移并与其他位错相遇湮灭或合并;样品受 x 方向压应力促使晶界上的位错在初始阶段反生正攀移,位错没有滑移。VPFC 模型的优势是模拟空位结构,这一模型研究空位结构上的演化将会继续得以应用。

参考文献:

[1] 余永宁. 材料科学基础[M]. 北京:高等教育出版社, 2006.

YU Y N. Fundamentals of Materials Science[M]. Beijing: Higher Education Press, 2006.

[2] 王吉会,郑俊萍,刘家臣,等. 材料力学性能[M]. 天津:天津大学出版社,2006.
WANG J H, ZHENG J P, LIU J C, et al. Mechanical Behavior of Materials [M]. Tianjin: Tianjin University Press, 2006.

[3] 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.

[4] ELDER K R, KATAKOWSKI M, HAATAJA M, et al. Modeling elasticity in crystal growth [J]. Physical Review Letters, 2002, 88(24): 245701.

[5] 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.
- [6] 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.
- [7] 黄礼琳, 华平, 王玉玲, 等. 凸曲率衬底外延生长界面演化的晶体相场模拟[J]. *广西科学*, 2014, 21(3): 241-246.
HUANG L L, HUA P, WANG Y L, et al. Simulation of epitaxial growth interface on convex substrate using phase field crystal method[J]. *Guangxi Sciences*, 2014, 21(3): 241-246.
- [8] 郭刘洋, 陈铮, 龙建, 等. 晶体相场法研究应力状态及晶体取向对微裂纹尖端扩展行为的影响[J]. *物理学报*, 2015, 67(17): 0178102.
GUO L Y, CHEN Z, LONG J, et al. Study on the effect of stress state and crystal orientation on micro-crack tip propagation behavior in phase field crystal method[J]. *Acta Physica Sinica*, 2015, 67(17): 0178102.
- [9] 高英俊, 罗志荣, 邓芊芊, 等. 韧性材料的微裂纹扩展与分叉的晶体相场模拟[J]. *计算物理*, 2014, 31(4): 471-478.
GAO Y J, LUO Z R, DENG Q Q, et al. Phase-field-crystal modeling of microcrack propagation and branching in ductile materials[J]. *Chinese Journal of Computational Physics*, 2014, 31(4): 471-478.
- [10] 周文权, 黄世叶, 王震, 等. 高温应变作用下小角度晶界湮没过程的晶体相场模拟[J]. *广西科学*, 2014, 21(3): 247-251.
ZHOU W Q, HUANG S Y, WANG Z, et al. Phase field crystal simulation of annihilation process of small-grain boundary under stress at high temperature[J]. *Guangxi Sciences*, 2014, 21(3): 247-251.
- [11] 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.
- [12] CHAN P Y, GOLDENFELD N, DANTZIG J. Molecular dynamics on diffusive time scales from the phase-field-crystal equation[J]. *Physical Review E*, 2009, 79(3): 035701.
- [13] BERRY J, GRANT M. Modeling multiple time scales during glass formation with phase-field crystals[J]. *Physical Review Letters*, 2011, 106(17): 175702.
- [14] 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.
- [15] ROBBINS M J, ARCHER A J, THIELE U, et al. Modeling the structure of liquids and crystals using one- and two-component modified phase-field crystal models[J]. *Physical Review E*, 2012, 85(6): 061408.
- [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*, 2014, 50(1): 110-120.
GAO Y J, LU C J, HUANG L L, et al. Phase field crystal simulation of dislocation movement and reaction[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2014, 50(1): 110-120.

(责任编辑: 陆 雁)