

拉应力作用下晶界位错运动过程的晶体相场模拟^{*}

Phase-field-crystal Simulation of Grain Boundary Dislocation Motion Under Tensile Stress

叶里, 胡绪志, 黄礼琳, 卢强华, 高英俊^{**}

YE Li, HU Xuzhi, HUANG Lilin, LU Qianghua, GAO Yingjun

(广西大学物理科学与工程技术学院, 广西高校新能源材料及相关技术重点实验室, 广西南宁 530004)

(Guangxi Colleges and Universities Key Laboratory of Novel Energy Materials and Related Technology, School of Physical Science and Technology, Guangxi University, Nanning, Guangxi, 530004, China)

摘要:【目的】研究晶界位错在受到拉应变作用下的运动规律。【方法】采用晶体相场(Phase-field-crystal, PFC)方法研究拉应力作用下位错的动态演化过程, 分析演化过程体系自由能。【结果】改变拉应力的施加方向, 沿 x 轴施加拉应力时, 位错运动呈现“左上右下”运动趋势, 沿 y 轴施加拉应力时, 位错运动呈现“左下右上”运动趋势。改变拉应力的施加方向对位错的运动及自由能曲线产生明显的影响。最终位错都运动到液相区, 模拟区域成完整单晶。【结论】拉应变施加导致位错运动, 体系能量上升, 在方向不同的正应力的作用下, 位错运动方式不同, 体系原子之间跟随着外力场的作用作耦合运动, 实现施加拉应变的物理效果。

关键词: 晶体相场 模拟实验 正应力 位错

中图分类号: TG111 **文献标识码:** A **文章编号:** 1005-9164(2016)05-0470-04

Abstract:【Objective】The motion law of the grain boundary dislocation under the action of the tensile strain is analyzed.【Methods】The phase-field-crystal(PFC) method is used to study the dynamic evolution of the dislocation of the tensile stress, and the free energy of the evolution process is analyzed by using the continuous density field.【Results】When tensile stress is applied along the x axis, the dislocation movement trends to up at the left and down at the right. When tensile stress is applied along the y axis, the dislocation movement appears to down at the left and up at the right. Changing the direction of applied tensile stress affects remarkably on dislocation movement and free energy curve. Finally, all of the dislocation move to liquid phase and the simulation area becomes into a complete single crystal.【Conclusion】The tensile strain is applied to cause the dislocation motion, the energy of the system is increased, and the dislocation motion is different under the action of different normal stress. With the interaction between the atoms and the external force field, the physical effect of the tensile strain can be seen.

applied to cause the dislocation motion, the energy of the system is increased, and the dislocation motion is different under the action of different normal stress. With the interaction between the atoms and the external force field, the physical effect of the tensile strain can be seen.

Key words: phase-field-crystal, simulation experiment, normal stress, dislocation

收稿日期:2016-09-14

修回日期:2016-10-10

作者简介:叶里(1993-),男,硕士研究生,主要从事金属材料与模拟实验研究。

* 国家自然科学基金项目(51161003, 50661001), 广西自然科学基金重点项目(2012GXNSFDA053001)和广西大学大创项目(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】纳米晶体材料是近年的研究热点,在介观和宏观尺度,材料的性能很大程度由复杂的拓扑几何缺陷所决定^[1-2]。这些缺陷起因于在原子尺度发生的复杂非平衡动力学方程^[3-6]。金属材料的加工变形过程与位错的运动有着非常重要的关系。目前,材料微观结构的演化很难由实验实时观测到,因此,计算机模拟实验已成为了解和认识这些微观信息的重要手段和实验补充^[7]。**【前人研究进展】**对材料变形的研究,现已深入到微纳观层次。Elder 等^[7-9]提出的晶体相场(Phase-field-crystal, PFC)方法,既可以描述晶体学结构特性以及原子尺度的行为,又可以揭示特征时间尺度为 10^{-6} 秒量级的原子的缺陷运动行为。目前,PFC 方法已有许多的成功应用^[8-13]。**【本研究切入点】**在当前的实验条件下,对材料的纳米级行为很难原位观测^[14],因此,发挥计算模拟实验的优势,应用其研究微纳米尺度的结构极为迫切和重要^[15-17]。PFC 方法能很好地用于描述晶界和位错在扩散时间尺度下的运动特征,并用于研究晶体在正应力作用下晶界与位错运动情况。**【拟解决的关键问题】**本研究应用 PFC 方法研究在施加正应力下的位错运动特征。

1 模型与方法

1.1 PFC 方法

系统无量纲的自由能函数可以写成

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

式中, ρ 为局域原子密度; r 为与温度有关的唯象参数; ∇^2 为拉普拉斯算子。在单模近似下,可以求得式(1)的一个稳定特解为

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

式中, ρ_0 为平均原子密度, $\frac{4}{5}\rho_0 + \frac{4}{15}\sqrt{-15r - 36\rho_0^2}$, 反映固相原子密度周期结构的振幅,由能量函数取极小值,得到 $q = \frac{\sqrt{3}}{2}$ 。

1.2 动力学方程

本文采用保守场 Cahn-Hilliard 动力学方程^[18]描述原子密度随时间的演化。该方程具体表示如下:

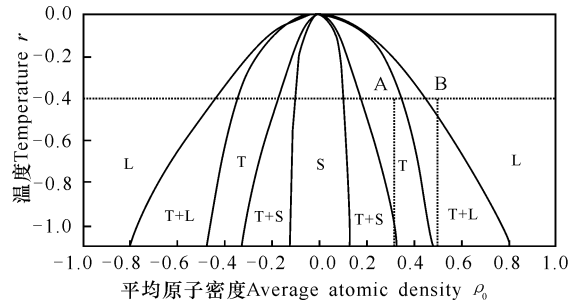
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta \rho} = \nabla^2 \{ \rho^3 + [r + (1 + \nabla^2)^2] \rho \}, \quad (3)$$

式中, ρ 为局域原子密度, r 表征体系的过冷度, ∇^2

为拉普拉斯算子, t 为时间变量。采用半隐式傅里叶伪谱方法^[19-20],对无量纲动力学方程(3)求解。

1.3 样品制备

固相基体用三角相点阵表示,选取晶体平均原子密度参数为 $\rho_0 = 0.3442$,温度参数 $r = -0.4$ (图 1 点 A)。计算模拟区域为 $512\Delta x \times 512\Delta y$,单位格子长度 $\Delta x = \Delta y = \pi/4$ 。模拟区域为双晶结构,左边晶界夹角为 1° ,右边晶界夹角为 -1° ,计算时四周边界采用周期性边界条件^[16]。初始化的模拟样品如图 2a,弛豫 50 000 步后,模拟图如图 2b;上下分别加上 40 行的液相,液相的热力学参数设置为 $\rho_{0l} = 0.4460$,温度参数 $r = -0.4$ (图 1 点 B),得到的模拟图如图 2c。空间步长随着应变速率在每一时间步长下都有一增量 $d = \epsilon n \Delta t$,其中,应变速率 $\epsilon = 6 \times 10^{-6}$, n 为时间步长数, Δt 为时间步长, $\Delta t = 0.50$ 。

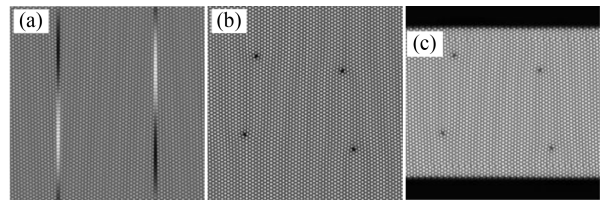


L, 液相; T, 三角相; S, 条状相

L, Liquid phase; T, Triangular phase; S, Strip phase

图 1 单模近似得到的二维相图

Fig. 1 Two-dimensional phase diagram of the single mode approximation



(a)初始样品;(b)弛豫后样品;(c)最终样品

(a)The initial sample;(b)The sample diagram of relaxation;(c)The diagram of final sample simulation

图 2 样品制备前中后模拟图

Fig. 2 Simulation of sample preparation

2 结果与分析

2.1 对样品加 x 方向拉应力和 y 方向压应力

在中部加 x 向的拉应力(图 3a),位错运动的模拟演化图如图 4 所示。可以看出,4 个位错呈 Z 状移动,左边一组两个位错都向左上运动,同时右边一组两个位错向右下运动,随着时间的推移,两组位错先后进入到液相区域中,此时,中间区域成为完整单晶,

再无位错存在。模拟初始时刻,固相区与液相区交界处是呈平直界面,位错进入液相区,此后,此界面不再平直,而是出现凹槽结构。

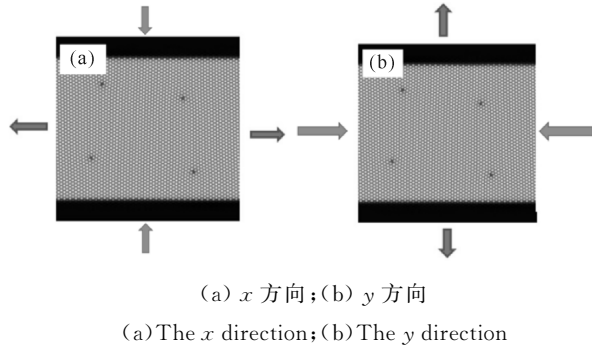
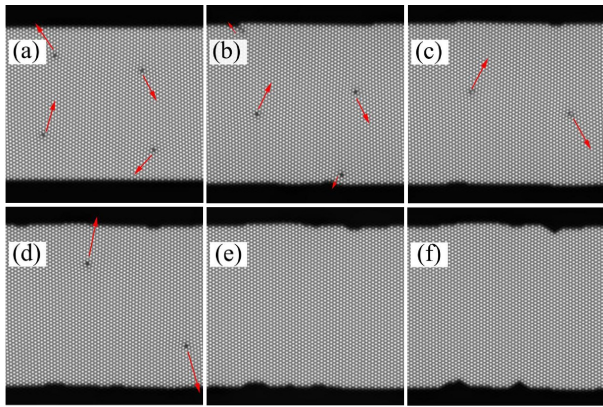


图 3 往 x 和 y 方向施加拉应力的位错运动趋势

Fig. 3 The trend of the dislocation motion in the direction of x and y



(a) $t = 55\ 000$; (b) $t = 60\ 000$; (c) $t = 65\ 000$; (d) $t = 70\ 000$; (e) $t = 75\ 000$; (f) $t = 80\ 000$

图 4 位错运动的模拟演化图

Fig. 4 Simulation evolution of dislocation motion

图 5 自由能统计区域为刨开上下两部分的液相后的剩余中间部分固相区域。图 5 点 A 是第一个极大值点即在 $t = 12\ 170$ 时,运动相反的两个位错刚好进入液相区时,位错内储存的弹性应变能得到释放,释放的弹性应变能大于增加的拉应变能,所以在点 B 即当 $t = 12\ 740$ 时整体自由能下降。从 $A \rightarrow B$ 自由能本来要上升,但是位错释放的弹性应变能使能量增加减缓。随着 x 方向拉应力的持续施加,体系自由能也持续上升。之后,直至剩下的运动方向相反的两个位错也进入到液相区,此时体系达到第二个极大值点 C 即 $t = 24\ 890$ 时,位错进入液相区后,它包含的弹性应变能得到释放,随着拉应力的持续施加,自由能也相应随之增加,跟 $A \rightarrow B$ 情况类似, $C \rightarrow D$ 位错进入液相区释放的弹性应变能大于增加的拉应变能,所以 $C \rightarrow D$ 自由能下降。接着,从点 D 即 $t = 25\ 200$ 之后,随着 x 方向拉应力的持续施加,体系自由能也相应持续上升。

2.2 对样品加 y 方向拉应力和 x 方向压应力

在中部加 y 向的拉应力(图 3b),位错运动的模拟演化图如图 6 所示:此时运动情况与上一组正好相反,左边一组两个位错都向下运动,同时右边一组两个位错向上运动。随着时间的推移,两组位错先后进入到液相区域中。此时,中间区域成为完整单晶,再无位错存在。模拟初始时刻,固相区与液相区交界处是呈平直界面,位错进入液相区以后,与 x 轴拉应力所不同的是,此时界面处依然是平直界面。

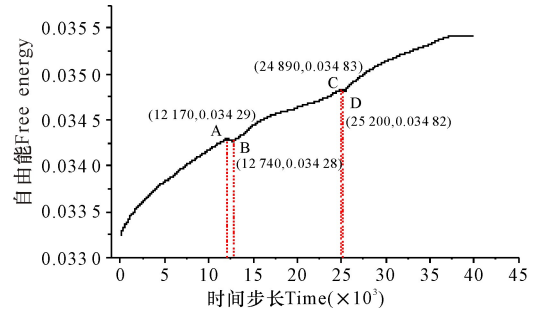
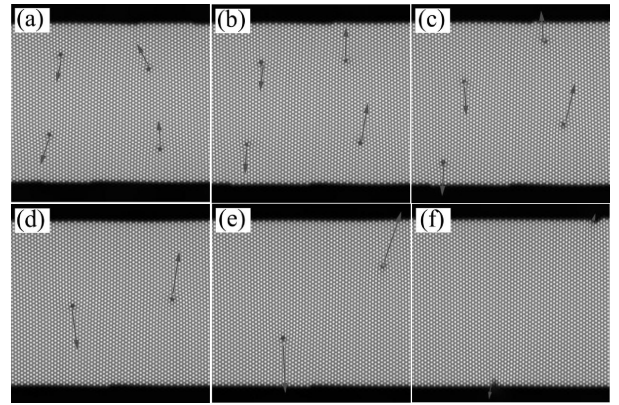


图 5 位错运动演化过程体系自由能变化曲线

Fig. 5 Free energy change curve of the evolution of dislocation motion



(a) $t = 55\ 000$; (b) $t = 60\ 000$; (c) $t = 65\ 000$; (d) $t = 70\ 000$; (e) $t = 75\ 000$; (f) $t = 80\ 000$

图 6 位错运动的模拟演化图

Fig. 6 Simulation evolution of dislocation motion

图 7 自由能统计区域为刨开上下两部分的液相后的剩余中间部分固相区域。图 7 点 A 是第一个极大值点即在 $t = 18\ 620$ 时运动相反的两个位错刚好进入液相区时,位错内储存的弹性应变能得到释放,释放的弹性应变能近似等于增加的拉应变能,所以在点 B 即当 $t = 191\ 250$ 时整体自由能保持不变,出现了类似“平台”的趋势。从 $A \rightarrow B$ 自由能本来要上升,但是位错释放的弹性应变能使能量增加减缓,所以出现了类似“平台”的趋势。随着 y 方向拉应力的持续施加,体系自由能也持续上升。之后,直至剩下的运动方向相反的两个位错也进入到液相区,此时体系达到第二个极大值点 C,即 $t = 30\ 555$,位错进入液

相区后,它包含的弹性应变能得到释放,随着拉应力的持续施加,自由能也相应随之增加,跟 A → B 情况类似,C → D 位错进入液相区释放的弹性应变能近似等于增加的拉应变能,所以 C → D 也呈现类似“平台”结构。接着,从点 D 即 $t = 30\ 900$ 之后,随着 y 方向拉应力的持续施加,体系自由能也相应持续上升。

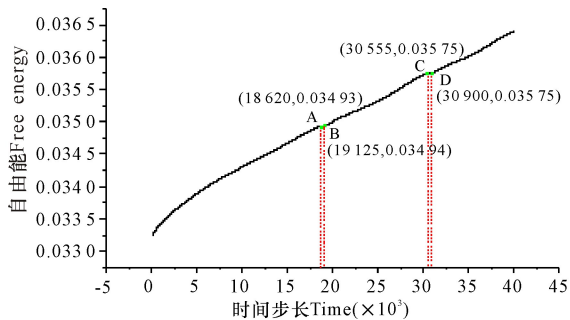


图 7 位错运动演化过程体系自由能变化曲线

Fig. 7 Free energy change curve of the evolution of dislocation motion

3 结论

虽然拉应变是直接施加在样品上下左右边缘的原子层上,但是通过原子层间的耦合相互作用,可将拉应变逐层传递到刃型位错核心处作位错运动,继而导致攀移运动。由于位错进入液相区释放的弹性应变能与增加的拉应变能近似相等,所以使能量增加减缓。当沿 x 轴施加拉应力时,左边一列两对位错向左上运动,右边一列两对位错向右下运动。当沿 y 轴施加拉应力时,左边一列两对位错向左下运动,右边一列两对位错向右上运动。可见改变拉应力的施加方向对位错的运动及自由能改变产生明显的影响。不论沿 x 轴还是 y 轴施加拉应变时,最终位错都运动到液相区,模拟区域成完整单晶,区域内再无位错存在。

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,戎永华.材料科学基础[M].第3版.上海:上海交通大学出版社,2010:265-279.
HU G X, CAI X, RONG Y H. Fundamentals of Materials Science [M]. 3rd edition. Shanghai: Shanghai Jiao Tong University Press, 2010: 265-279.

[3] BOBYLEV S V, OVID'KO I A. Transformations of faceted grain boundaries in high- T_c superconductors [J]. Physical Review B, 2003, 67: 132506.

[4] OVID'KO I A, SKIBA N V. Enhanced dislocation emis-

sion from grain boundaries in nanocrystalline materials [J]. Scripta Mater, 2012, 67(1): 13-16.

[5] GUKKIN M Y, OVID'KO I A. Transformations of low-angle tilt boundaries in high- T_c superconductors [J]. Physical Review B, 2001, 63: 64515.

[6] 张林,王绍青,叶恒强.大角度 Cu 晶界在升温、急冷条件下晶界结构的分子动力学研究[J].物理学报,2004,53: 2497.
ZHANG L, WANG S Q, YE H Q. Molecular dynamics study of the structure change in a high-angle Cu grain boundary by heating and quenching [J]. Acta Physica Sinica, 2004, 53: 2497.

[7] ELDER K R, GRANT M. Modeling elastic and plastic deformations in nonequilibrium processing using phase field crystals [J]. Physical Review E, 2004, 70: 51605.

[8] ELDER K R, PROVATAS N, BERRY J, et al. Phase-field-crystal modeling and classical density functional theory of freezing [J]. Physical Review B, 2007, 75: 64107.

[9] BERRY J, GRANT M, ELDER K R. Diffusive atomistic dynamics of edge dislocations in two dimensions [J]. Physical Review E, 2006, 73: 31609.

[10] 黄世叶,刘晓骅,谢森,柳钰玲,等.剪切应力作用下位错运动的晶体相场模拟,广西科学,2015,22(4): 400-406.
HUANG S Y, LIU X H, XIE S, LIU Y L, et al. Phase-field-crystal simulation of dislocation gliding under shear strain. Guangxi Sciences, 2015, 22(4): 400-406.

[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] BERRY J, ELDER K R, GRANT M. Melting at dislocations and grain boundaries: A phase field crystal study [J]. Physical Review B, 2008, 77: 224114.

[13] 陈成,陈铮,张静,等.晶体相场法模拟异质外延过程中界面形态演化与晶向倾侧[J].物理学报,2012,61(10): 108103.
CHEN C, CHEN Z, ZHANG J, et al. Simulation of morphological evolution in heteroepitaxial growth using phase-field crystal method [J]. Acta Physica Sinica, 2012, 61(10): 108103.

[14] YU Y M, RAINER B, AXEL V J. Heteroepitaxial growth on vicinal substrates: A phase-field crystal study [J]. Crystal Growth, 2011, 318(1): 18-22.

(下转第 484 页 Continue on page 484)

- LI L H, ZHOU X N, LIAO P D, et al. Study on the construction of intelligent monitoring and early warning system for water environmental emergencies in the Longjiang River Basin [J]. The Administration and Technique of Environmental Monitoring, 2015, 27(3): 32-36.
- [13] 赵学敏, 马千里, 姚玲爱, 等. 龙江河水体中氮磷水质风险评价[J]. 中国环境科学, 2013, 33(S1): 233-238.
- ZHAO X M, MA Q L, YAO L A, et al. Water quality risk assessment based on nitrogen and phosphorus in Longjiang River [J]. China Environmental Science, 2013, 33(S1): 233-238.
- [14] 国家环境保护总局. 地表水环境质量标准: GB 3838—2002[S]. 北京: 中国环境科学出版社, 2002.
- State Environmental Protection Administration. Environmental Quality Standards for Surface Water: GB 3838—2002[S]. Beijing: China Environmental Science Press, 2002.
- [15] 孟春芳. 用内梅罗指数法评价武陟县境内沁河水质[J]. 河南水利与南水北调, 2015(16): 3-4.
- MENG C F. Appraising the water quality of Qin River in Wuzhi County using Nemerow index method [J]. Henan Water Resources & South-to-North Water Diversion, 2015(16): 3-4.
- [16] 徐彬, 林灿尧, 毛新伟. 内梅罗水污染指数法在太湖水质评价中的适用性分析[J]. 水资源保护, 2014, 30(2): 38-40.
- XU B, LIN C Y, MAO X W. Analysis of applicability of Nemerow pollution index to evaluation of water quality of Taihu Lake [J]. Water Resources protection, 2014, 30(2): 38-40.
- [17] 秦普丰, 李细红, 侯红, 等. 硫酸锰化工厂遗址周围水体重金属污染健康风险评价[J]. 环境科学研究, 2011, 24(4): 395-400.
- QIN P F, LI X H, HOU H, et al. Health risk of heavy metal pollution in water around an abandoned manganese sulfate chemical plant site [J]. Research of Environmental Sciences, 2011, 24(4): 395-400.
- [18] 李永丽, 刘静玲. 滦河流域不同时空水环境重金属污染健康风险评价[J]. 农业环境科学学报, 2009, 28(6): 1177-1184.
- LI Y L, LIU J L. Health risk assessment on heavy metal pollution in the water environment of Luan River [J]. Journal of Agro-Environment Science, 2009, 28(6): 1177-1184.
- [19] 李涛, 石磊, 马中, 等. 海浪河水环境重金属污染健康风险评价[J]. 环境工程学报, 2014, 8(12): 5521-5526.
- LI T, SHI L, MA Z, et al. Health risk assessment on heavy metal pollution in water environment of Hailang River [J]. Chinese Journal of Environmental Engineering, 2014, 8(12): 5521-5526.

(责任编辑: 米慧芝)

(上接第 473 页 Continue from page 473)

- [15] ARAFIN M A, SZPUNAR J A. A new understanding of intergranular stress corrosion cracking resistance of pipeline steel [J]. Corros Sci, 2009, 51(1): 119-128.
- [16] 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: 50507.
- GAO Y J, LUO Z R, HUANG C G, et al. Phase-field-crystal modeling for two-dimensional transformation [J]. Acta Physica Sinica, 2013, 62: 50507.
- [17] 高英俊, 罗志荣, 黄礼琳, 等. 韧性材料的微裂纹扩展和连通的晶体相场模[J]. 中国有色金属学报, 2013, 23: 1892.
- GAO Y J, LUO Z R, HUANG L L. Phase-field-crystal modeling for microcrack propagation and connecting of ductile materials [J]. Chin J Nonferrous Metals, 2013, 23: 1892.
- [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] HIROUCHI T, TAKAKI T, TOMITA Y. Effects of temperature and grain size on phase-field-crystal deformation simulation [J]. Int J Mech Sci, 2010, 52: 309.
- [20] COLOMBO D, MASSINB P. Fast and robust level set update for 3D non-planar X-FEM crack propagation modelling [J]. Comput Method Appl M, 2011, 200: 2160-2180.

(责任编辑: 陆雁)