

晶体弹性行为的晶体相场模拟 *

Phase-field-crystal Simulation for Elastic Behavior of Crystals

叶 里, 黄礼琳, 孔令一, 卢强华, 高英俊 **

YE Li, HUANG Lilin, KONG Lingyi, 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】研究晶体相场模型中的弹性相互作用过程。【方法】通过连续的密度场, 采用晶体相场模型提取和跟踪每个原子在时间演化过程中的位置, 再通过求解 PFC 方程, 并运用原子的位移来构建晶体的弹性能。最后通过调优波动参量和阻尼参数 β , 获得晶体的弹性及粘弹性行为特征。【结果】当 $\beta = 0.9$ 时, 在力 F 的作用下, 晶体响应是有弹性的。位置距离越远, 其对应的应变越大, 位移变化与原子对应位置大致成正比, 具有弹性关系; 当 $\beta = 9$ 时, 在力 F 的作用下, 位移变化与原子对应位置服从粘弹性响应关系。通过调优波动参量和阻尼参数, 获得晶体的弹性及粘弹性行为特征。【结论】改变阻尼参数 β 后, 可以采用晶体相场模型模拟晶体的弹性及粘弹性行为。

关键词: 晶体相场 模拟实验 位移 弹性

中图分类号: TG111 **文献标识码:** A **文章编号:** 1005-9164(2016)05-0474-04

Abstract:【Objective】Simulation experiments are conducted in phase-field-crystal (PFC) model to analyze elastic interaction. 【Methods】Through the continuous density field, the phase field model is used to extract and track the position of each atom in the time evolution. The PFC method is used to solve the equation, and the atomic displacements are used to construct the crystal elastic energy. 【Results】When $\beta = 0.9$, the crystal response is elastic under the action of force F . The farther away from the position, the larger the strain is, and the change of displacement is roughly proportional to the position of the atom. Under the action of the force F , the change of displacement and the position of the atom correspond to the viscoelastic response when $\beta = 9$. By tuning wave parameters and damping parameters, the elastic and viscoelastic behaviors of crystals are obtained. 【Conclusion】

After changing the damping parameter β , the phase-field-crystal model can be used to simulate the elastic and viscoelastic behaviors of crystals.

Key words: phase-field-crystal, simulation experiment, displacement, elasticity

收稿日期: 2016-09-03

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) 和广西自然科学基金重点项目 (2012GXNSFDA053001) 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材料学方面的研究热点,它具有良好的形变特性,因此其形变机理引起了人们的广泛重视^[1]。要深入研究材料的变形及其特性与机理,需要把宏观分析与微纳观分析结合起来,在更深的层次上找到其变形机制^[2]。现在,对材料变形的研究早已深入到微纳观层次。纳米级微裂纹的形核与扩展在金属材料微观缺陷中普遍存在,并严重降低了金属材料的使用寿命^[3],因此,研究纳米级裂纹的萌生和扩展对预防材料的断裂,提高材料的使用寿命具有重要意义^[4]。**【前人研究进展】**近几年,基于密度泛函理论建立的晶体相场方法(PFC)^[5],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^[6],可以用于模拟纳米级的微观结构和演化过程^[6-8],并用于研究晶体弹性及粘弹性行为。**【本研究切入点】**在当前的实验测量条件下,对材料的纳米级行为很难原位观测^[9],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就显得极为迫切和重要^[10-12]。**【拟解决的关键问题】**应用PFC方法模拟材料弹塑性变形,揭示该过程的原子位移运动特征,研究材料的微结构和弹性及粘弹性行为特征。

1 PFC 模型与方法

1.1 PFC 模型

PFC 模型系统无量纲的自由能函数可以写成^[8]

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

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,可以求得式子(1)的一个稳定特解

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

式中, ρ_0 为平均原子密度, $A = \frac{4}{5}\rho_0 + \frac{4}{15}\sqrt{-15r - 36\rho_0^2}$ 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 ρ 。

1.2 动力学方程

采用保守场 Cahn-Hilliard 动力学方程^[13]描述原子密度随时间的演化。该方程具体表示如下:

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

式中, ρ 为局域原子密度, r 为与温度有关的唯象参

数,表征体系的过冷度。 ∇^2 为拉普拉斯算子, t 为时间变量。 α 是一个运动的参量, β 是一个可调的阻尼参数。

1.3 数值计算方法

对无量纲动力学演化方程(3)采用二次半隐式傅里叶伪谱方法^[14]求解,其离散形式为

$$\frac{\hat{\rho}_k(t + \Delta t) - 2\hat{\rho}_k(t) + \hat{\rho}_k(t - \Delta t)}{\Delta t^2} + \beta \frac{\hat{\rho}_k(t + \Delta t) - \hat{\rho}_k(t)}{\Delta t} = \alpha [- (1 + r)k^2 + 2k^4 + k^6] \cdot \hat{\rho}_k(t + \Delta t) - k^2 \hat{\rho}_k^3(t), \quad (4)$$

式中, $\hat{\rho}_k(t)$, $\hat{\rho}_k(t + \Delta t)$, $\hat{\rho}_k(t - \Delta t)$ 为傅里叶空间下的原子密度, k 为傅里叶空间的波矢^[13]。

1.4 样品制备与应变施加

模拟设置一个长方形 $[0, L = 360] \times [0, H = 100]$, 使它满足四周边界都是零通量条件。固相基体用三角相点阵表示,选取晶体平均原子密度为 $\rho_0 = 0.31$, 温度参数 $r = -0.4$ 。计算模拟区域为 $360\Delta x \times 100\Delta y$, 单位格子长度 $\Delta x = \Delta y = \frac{\pi}{8}$ 。对模拟所用参数进行无量纲化处理,并将连续空间离散为正方格子分布。计算时四周边界采用周期性边界条件,采用弛豫方法使系统能量达到稳定状态,样品弛豫时间步长为 50 000 步,最终得到的初始样品如图 1 所示。

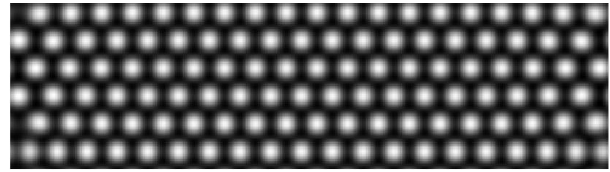


图 1 初始样品的二维图

Fig. 1 Two dimensional diagram of initial sample

在变形过程中,如图 2 所示, x 方向空间步长保持不变, y 方向空间步长随着应变速率在每一时间步长下都有一增量 $d = \dot{\epsilon} n \Delta t$, 其中应变速率 $\dot{\epsilon} = 6.5 \times 10^{-4}$, n 为时间步长数, Δt 为时间步长, $\Delta t = 0.001$ 。采用补偿函数方法^[14]施加应力作用于样品。假设原子的垂直线最初位于 $x = L$ 的位置,并进一步假设初始原子密度轮廓沿着已知的原子线 $n_{damp}(y) = n_{OM}(x = L, y)$ 。为实现水平速度 $\omega = \omega(t)e_x$, 通过调整 $F = F_0 + V(t)$, 施加拉应力作用于样品。表 1 中, A 样品表示进行弹性模拟, B 样品表示粘弹性模拟。

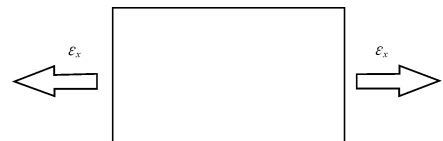


图 2 沿 x 轴方向施加拉应变的示意图

Fig. 2 Schematic diagram of tensile strain applied along x axis

表 1 不同的样品模拟参数

Table 1 Simulation parameters of different samples

样品 Sample	r	ρ_0	Δt	α	β
A	-0.4	0.31	0.001	15	0.9
B	-0.4	0.31	0.001	15	9

2 结果与分析

2.1 弹性模拟样品

由图 3 可见:1)当 $t = 120\ 000$ 时,对应图 3a,大约 $2/3$ 处位移为 0,从右往左,位移慢慢增加,应变随之增加,位移从 0 变化到 4,最大位移为 4,对应图 4 中曲线 1。2)当 $t = 140\ 000$,对应图 3b,位移从 0 增到 5,最大位移为 5,对应图 4 中曲线 2。3)当 $t = 160\ 000$ 时,对应图 3c,位移从 0 变化到 6,最大位移为 6,对应图 4 中曲线 3。由图 4 可知:位移随原子位置增加而减小。综上所述,当 $\beta = 0.9$ 时,随着力 F 的施加,位置变化小,位移变化也小,位置变化大,位移也相应变大,位置越远,应变越大,位移和位置成正比关系,形成弹性响应关系,晶体响应是有弹性的。

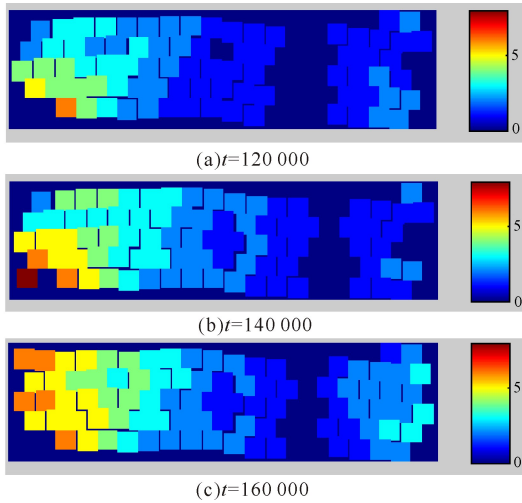


图 3 弹性模拟样品不同时刻原子位置与相对应的位移

Fig. 3 Atomic position and relative displacement at different moments of elastic sample

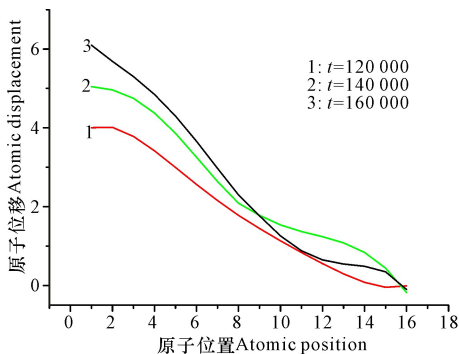


图 4 不同时刻的原子位置和位移关系曲线

Fig. 4 The atomic positions and displacement curves at different times

2.2 粘弹性模拟样品

由图 5 可见:1)当 $t = 120\ 000$ 时,从右到左,位移缓慢增加,位移从 0 变化到 3,最大位移为 3,对应图 6 中曲线 1。2)当 $t = 140\ 000$,对应图 5b,位移从 0 增到 4,最大位移为 4,对应图 6 中曲线 2。3)当 $t = 160\ 000$ 时,对应图 5c,位移从 0 变化到 7,最大位移为 7,对应图 6 中曲线 3。由图 6 可知,位移随原子位置增加而减小,但在位置 3 处,出现转折变化。综上所述,当 $\beta = 9$ 时,随着力 F 的施加,刚开始时,位置变化小,位移变化也小且几乎不变,当该变量达到一定程度,位移有一个跃迁的过程,位移变化相应也大,曲线类似于折线。 β 从 0.9 增加到 9 导致晶体出现粘弹性行为,形成粘弹性响应关系。

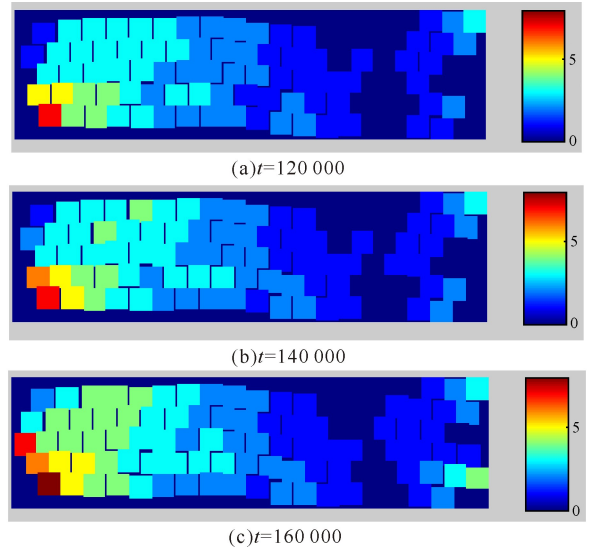


图 5 粘弹性模拟样品不同时刻原子位置与相对应的位移

Fig. 5 Atomic position and relative displacement at different moments of viscoelastic sample

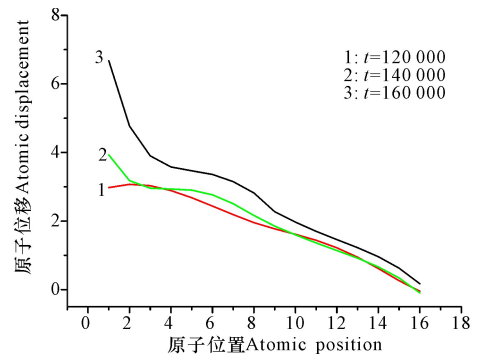


图 6 不同时刻的原子位置和位移关系曲线

Fig. 6 The atomic positions and displacement curves at different times

3 结论

应用 PFC 模型模拟研究材料弹塑性变形,得到如下结论:1)当 $\beta = 0.9$ 时,在力 F 的作用下,此时晶

体响应是有弹性的。位置距离越远,其对应的应变越大,位移变化与原子对应位置大致成正比,具有弹性关系;2)当 $\beta=9$ 时,在力F的作用下,位移变化与原子对应位置关系不服从弹性关系而是服从粘弹性响应关系。表明改变阻尼参数 β 后,可以采用晶体相场模型模拟晶体的弹性及粘弹性行为。

参考文献:

[1] 秦河林,陈建灵,黄世叶,等. 外应力作用下小角晶界的斜排位错运动研究[J]. 广西科学,2015,22(5):506-510,516.
QIN H L, CHEN J L, HUANG S Y, et al. Inclined dislocation motion of low angle grain boundaries under shear force exerting[J]. Guangxi Sciences, 2015, 22(5): 506-510, 516.

[2] 邵宇飞,王绍青. 基于准连续介质方法模拟纳米多晶体Ni中裂纹的扩展[J]. 物理学报,2010,59(10):7258-7265.
SHAO Y F, WANG S Q. Quasicontinuum simulation of crack propagation in nanocrystalline Ni[J]. Acta Physica Sinica, 2010, 59(10): 7258-7265.

[3] LOEHNERT S, PRANGE C, WRIGGERS P. Error controlled adaptive multiscale XFEM simulation of cracks [J]. International Journal of Fracture, 2012, 178(1/2): 147-156.

[4] COLOMBO D, MASSIN P. Fast and robust level set update for 3D non-planar X-FEM crack propagation modelling[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2011, 200(25/26/27/28): 2160-2180.

[5] 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.

[6] 刘晓骅,叶里,温振川,等. 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[J]. 广西科学,2015,22(5):511-516.
LIU X H, YE L, WEN Z C, et al. Influence of disclination strength and damping coefficient on decay of low angle grain boundaries in nanocrystalline materials[J]. Guangxi Sciences, 2015, 22(5): 511-516.

[7] 毛鸿,罗志荣,黄世叶,等. 材料裂纹扩展分叉机理的晶体相场法研究[J]. 广西科学,2015,22(5):499-505.
MAO H, LUO Z R, HUANG S Y, et al. Phase-field-crystal modeling for crack propagation and branch of materials[J]. Guangxi Sciences, 2015, 22(5): 499-505.

[8] 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.

[9] ARAFIN M A, SZPUNAR J A. A new understanding of intergranular stress corrosion cracking resistance of pipeline steel through grain boundary character and crystallographic texture studies[J]. Corrosion Science, 2009, 51(1): 119-128.

[10] CADINI F, ZIO E, AVRAM D. Monte Carlo-based filtering for fatigue crack growth estimation[J]. Probabilistic Engineering Mechanics, 2009, 24(3): 367-373.

[11] 刘晓波,徐庆军,刘剑. 铝裂纹扩展行为的分子动力学模拟[J]. 中国有色金属学报,2014,24(6):1408-1413.
LIU X B, XU Q J, LIU J. Molecular dynamics simulation of crack propagation behavior of aluminum[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2014, 24(6): 1408-1413.

[12] MA L, XIAO S F, DENG H Q, et al. Molecular dynamics simulation of fatigue crack propagation in bcc iron under cyclic loading [J]. International Journal of Fatigue, 2014, 68: 253-259.

[13] STEFANOVIC P, HAATAJA M, PROVATAS N. Phase-field crystals with elastic interactions[J]. Physical Review Letters, 2006, 96(22): 225504.

[14] BERNAL F, BACKOFEN R, VOIGT A. Elastic interactions in phase-field crystal models: Numerics and postprocessing [J]. International Journal of Materials Research, 2010, 101(4): 467-472.

(责任编辑:陆雁)