

取向角对小角度非对称倾斜晶界位错运动影响的晶体相场模拟*

祁科武 赵宇宏[†] 田晓林 彭敦维 孙远洋 侯华

(中北大学材料科学与工程学院, 太原 030051)

(2020年1月18日收到; 2020年4月22日收到修改稿)

采用晶体相场法模拟纳米尺度下小角度非对称倾斜晶界结构和位错运动, 从外应力作用下晶界位错运动位置变化和晶体体系自由能变化角度, 分析取向角对小角度非对称倾斜晶界结构和晶界位错运动的影响规律. 研究表明, 不同取向角下组成小角度非对称倾斜晶界的位错对类型相同. 随取向角增大晶界位错对增加, 且晶界更易形成 $n1n2$ 型和 $n4n5$ 型位错对. 外应力作用下, 不同取向角晶界位错对初始运动状态均沿晶界进行攀移运动, 随体系能量积累, 取向角越大出现晶界位错对分解的个数越多, 且均为 $n1n2$ 型和 $n4n5$ 型位错对发生分解反应. 不同取向角下小角度非对称倾斜晶界体系自由能曲线都存在四个阶段, 分别对应位错对攀移、位错对滑移及分解、位错对反应抵消形成单晶和体系吸收能量自由能上升过程. 进一步对比发现随取向角增大, 晶界湮没形成的单晶体系所需时间增加.

关键词: 晶体相场, 取向角, 晶界, 位错

PACS: 05.70.Np, 07.05.Tp, 61.72.Mm

DOI: 10.7498/aps.69.20200133

1 引言

晶体晶界影响金属材料的微观组织结构, 进而影响材料的宏观性能. 研究过程中发现, 对于取向角较小的晶粒间形成的亚晶界结构通常可用位错模型解释. 在外应力作用下晶界发生迁移, 不同取向角下晶界位错结构和排列形式大有不同, 从而影响金属晶体的宏观物理化学性能, 因此研究不同取向角下晶界位错结构和反应机理对于深入研究材料性能具有重要理论和现实意义.

目前虽然有大量关于金属晶界结构的研究^[1,2], 但在实验条件下观察晶界结构变化和位错反应仍十分困难. 随着计算机技术的快速发展, 包含物

理、数学、计算科学和材料学的交叉学科计算材料科学受到许多专家学者的广泛关注. 由 Elder 等^[3-5] 基于密度泛函理论提出的晶体相场法 (phase field crystal, PFC) 可模拟原子空间尺度和扩散时间尺度晶界结构和晶界迁移运动过程, 其仿真模拟结果与理论和实验具有较好的一致性, 被用于解决各种材料问题. 与分子动力学^[6] 相比, PFC 模型突破时间尺度限制, 能反映材料微观结构变化; 与传统相场法^[7-16] 相比, PFC 模型采用局部时间平均的原子密度场, 能反映晶体点阵周期性结构, 从而便于研究如位错缺陷、晶格畸变和弹塑性变形等与某些周期性相关的材料物理特性. 与其他计算模拟方法^[17-22] 比较而言, PFC 模型由于其突出的优点已广泛用于研究晶界迁移和湮没^[23,24]、晶界预熔与动

* 国家自然科学基金 (批准号: 51774254, 51774253, 51701187, 51674226, 51804279, 51801189)、山西省科技重大专项 (批准号: 20191102008)、山西省平台基地和人才专项 (批准号: 201805D211036)、中央引导地方科技发展专项资金 (批准号: YDZX20191400002796) 和山西省科技成果转化引导专项 (批准号: 201804D131039) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: zhaoyuhong@nuc.edu.cn

态回复^[25–27]、凝固过程与枝晶生长^[28–30]、微裂纹尖端扩展^[31–33]、相结构转变^[34,35]和 Kirkendall 效应^[36,37]等各个方面。

对于采用 PFC 法研究晶界结构和迁移运动已有许多相关报道^[24,38]，为了更进一步对比不同类型晶界结构，探讨晶界湮没过程机理，本文从晶界位错运动反应和体系自由能变化两方面，研究外应力作用下取向角对小角度非对称倾斜晶界位错反应机理和晶界湮没的影响。

2 晶体相场法模型

由 Elder 等^[3–5]提出的 PFC 法，借鉴经典密度泛函理论^[39–42]，使用具有周期对称性的原子密度场变量，能较好反映晶体结构特征和原子尺度行为。在 PFC 模型中，自由能函数的最低要求是它在一定的参数范围内能够在基态中产生一个周期性的晶格结构。能够满足这一要求的最简单的能量泛函由 Swift-Hohenberg 提出^[3,4]，通常称为 SH 型晶体相场模型，其形式为

$$F = \int d\mathbf{r} \left(\frac{\phi}{2} \left[a\Delta T + \lambda(q_0^2 + \nabla^2)^2 \right] \phi + u \frac{\phi^4}{4} \right), \quad (1)$$

式中 ϕ 为原子密度， α ， λ 和 u 是与拟合材料性质相关的唯象参数， \mathbf{r} 为空间向量， ΔT 为反映体系温度的参数， q_0 为与平衡晶格间距成反比的常数， ∇^2 为拉普拉斯算子， F 是体系自由能。

PFC 模型局部守恒序参量 ϕ 的演化服从 Cahn-Hilliard 动力学方程，表示形式为

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} = \nabla^2 \Gamma \frac{\delta F}{\delta \phi}, \quad (2)$$

式中， τ 是时间变量， Γ 是迁移率， δ 为 Dirac 函数。对方程 (1) 和 (2) 进行无量纲化处理，可得无量纲化后的自由能方程 (3) 和动力学方程 (4)：

$$F = \int d\mathbf{x} \left(\frac{\rho}{2} \left[-r + (1 + \nabla^2)^2 \right] \rho + \frac{\rho^4}{4} \right), \quad (3)$$

式中， ρ 为原子密度序参量， r 为无量纲化后反映体系温度的参数， r 值越小，体系温度越低。

无量纲化的动力学方程为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla^2 (\omega (\nabla^2)^2 \rho + \rho^3), \quad (4)$$

式中， $\omega (\nabla^2)^2 = r + (1 + \nabla^2)^2$ ， t 为尺度标准化后的时间变量。

二维空间下， F 由 ρ 构造的自由能泛函具有三种平衡相，分别为液相（常数值）、三角相以及条纹相，皆为周期函数。由 (4) 式可得到二维体系中稳定的晶态三角相无量纲局域密度的单模近似解为

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

式中， ρ_0 为均匀原子密度分布，

$$A = \frac{4}{5} \left(\rho_0 + \frac{1}{3} \sqrt{-15r - 36\rho_0^2} \right), \quad q = \frac{\sqrt{3}}{2}.$$

利用三种平衡相的极小自由能函数，按照吉布斯斯自由能公切线法确定二维相图^[4]，如图 1 所示。

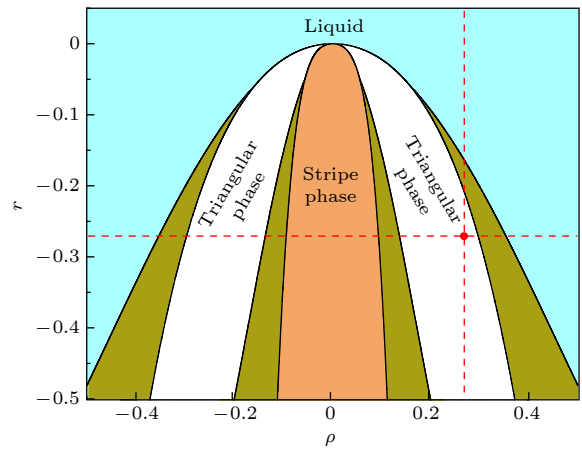


图 1 单模近似下的二维相图

Fig. 1. Two-dimensional phase diagram as calculated in a one-mode approximation.

3 计算方法

对 (3) 式进行半隐式 Fourier 谱方法求解，可以得到其离散化形式为

$$\frac{\rho_{\mathbf{k},t+\Delta t} - \rho_{\mathbf{k},t}}{\Delta t} = -k^2 \left\{ \left[r + (1 - k^2)^2 \right] \rho_{\mathbf{k},t+\Delta t} + (\rho^3)_{\mathbf{k},t} \right\}, \quad (6)$$

式中， $\rho_{\mathbf{k},t}$ 为 Fourier 空间 t 时刻原子密度， $\rho_{\mathbf{k},t+\Delta t}$ 为 Fourier 空间 $t + \Delta t$ 时刻原子密度， \mathbf{k} 为 Fourier 空间波矢，且满足 $k^2 = |\mathbf{k}|^2$ 。

此次模拟过程中，用二维三角相表征面心立方 {111} 面的原子点阵结构，模拟晶体体系小角度非对称倾斜晶界结构所用模拟参数为 $\rho_0 = 0.285$ ，空间步长为 $\Delta x = \Delta y = \pi/4$ ，时间步长为 $\Delta t = 0.5$ 。在三角相中，取向角 θ 被定义为两相邻晶粒之间

$\langle 110 \rangle$ 方向的夹角, 倾斜度角 φ 为两晶粒 $\langle 110 \rangle$ 方向夹角的角平分线与晶界的夹角. 取倾斜度角 $\varphi = 20^\circ$, 研究不同取向角 θ 对小角度非对称倾斜晶界位错运动的影响, 实际模拟非对称晶界结构如图 2 所示, 模拟边界条件为周期性边界条件. 初始模拟区域设置如下: 设置模拟计算区域的面积为 $L_x \times L_y = 512\Delta x \times 512\Delta y$, 模拟区域可划分为 2 个初始液相区与 2 个晶粒区, 设置宽度为 d_0 的带状液相区. 通过 (5) 式设置中间晶粒区域 $1/4(L_y + 2d_0) < y < 3/4(L_y - 2d_0)$ 范围的晶粒取向为 θ_1 , 其上下两侧晶粒区域 $0 < y < 1/4(L_y - 2d_0)$ 和 $1/4(3L_y + 2d_0) < y < L_y$ 范围晶粒取向为 θ_2 , 而 $0 < x < L_x$. 为使初始晶界具有良好原子排列, 设置两晶粒间带状液相区宽度为 10. 模拟时进行 30000 步的时间弛豫, 使得液相区完全凝固结晶, 体系由固-液体系向固相体系发生相变, 自由能持续降低, 最终固相晶体体系达到稳定状态.

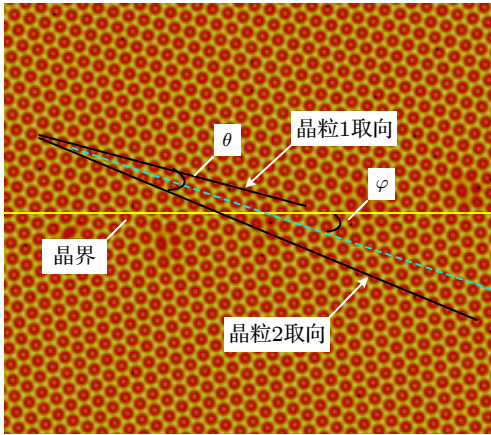


图 2 小角度非对称倾斜晶界结构

Fig. 2. Low-angle asymmetric tilt grain boundary structure.

外应力作用下会促使位错运动及晶界偏移, 此次模拟过程中采用等面积不变模型^[43], 使得模拟区域具有统一性, 其假设条件为

$$S = \Delta x \Delta y = \Delta x' \Delta y', \quad (7)$$

式中, Δx 和 Δy 为变形前空间步长, $\Delta x'$ 和 $\Delta y'$ 为变形后空间步长. 应变变量 ε 满足 $\varepsilon = \dot{\varepsilon} n \Delta t$ (其中, $\dot{\varepsilon}$ 为无量纲化应变速率, 本文取 $\dot{\varepsilon} = 6 \times 10^{-6} / \Delta t$, n 为时间步数). 现假设在 x 方向上对体系施加一个拉应力, 则满足:

$$\Delta x' = (1 + \varepsilon) \Delta x = \Delta x + n \dot{\varepsilon} \Delta x \Delta t, \quad (8)$$

$$\Delta y' = \Delta x \Delta y / \Delta x' = \Delta y / (1 + n \dot{\varepsilon} \Delta t). \quad (9)$$

4 模拟结果与分析

此次所用模拟参数设置如表 1 所列, 其他参数设置如第 3 节所述.

表 1 模拟所采用的参数

Table 1. Parameters used in the simulation.

方案	初始原子密度 ρ_0	温度相关参量 r	取向角 $\theta(^{\circ})$
A	0.285	-0.27	6
B	0.285	-0.27	7
C	0.285	-0.27	8
D	0.285	-0.27	9

4.1 不同取向角晶界位错对运动过程

对 A, B, C, D 四种方案弛豫后得到的试样施加外应力, 分析外应力作用下不同取向角对小角度非对称倾斜晶界位错运动的影响. 图 3 为取向角为 8° 时非对称倾斜晶界位错运动情况. 从图 3 中可以看出, 经过 30000 步的弛豫过程后, 体系自由能已达到一个稳定状态, 晶界结构稳定. 对模拟区域 x 方向施加拉应力, y 方向施加压应力, 小角度非对称倾斜晶界位错对初始运动状态与小角度对称倾斜晶界位错对初始运动状态相同, 晶界处位错对进行攀移运动, 运动方向为图 3(a) 中箭头所指方向. 这是由于晶界处位错对进行滑移运动时需要克服晶界弹性阻碍, 所需能量大于晶界位错对进行攀移运动所需能量, 因而晶界处位错对进行攀移运动.

为便于分析晶界位错对类型和位错反应, 用面心立方结构 (111) 面原子排列表征二维三角相结构, 根据刃型位错多余半原子平面, 可将晶界处刃型位错类型分为图 4(a) 所示的六种类型, 具体为 $n_1 = [\bar{1}01]$, $n_2 = [\bar{1}10]$, $n_3 = [01\bar{1}]$, $n_4 = [10\bar{1}]$, $n_5 = [1\bar{1}0]$, $n_6 = [011]$. 对应的柏氏矢量可以表示为图 4(b) 所示的六种类型 $b_1 = (a/2)[1\bar{2}1]$, $b_2 = (a/2)[11\bar{2}]$, $b_3 = (a/2)[\bar{2}11]$, $b_4 = (a/2)[\bar{1}2\bar{1}]$, $b_5 = (a/2)[\bar{1}\bar{1}2]$, $b_6 = (a/2)[2\bar{1}\bar{1}]$, 其中 $a = \sqrt{2}a^*$, a 为面心立方结构的晶格常数, a^* 为二维三角相原子间距. 从图 3(a) 中可以观察到, 初始晶界的位错对分别有 n_1n_2 , n_2n_3 , n_4n_5 和 n_5n_6 四种类型. 可以看出上层晶界由 6 个 n_1n_2 型位错对和 2 个 n_2n_3 型位错对组成, 而下层晶界由 6 个 n_4n_5 型位错对和 2 个 n_5n_6 型位错对组成. 随着外应力的持续作用,

体系自由能不断增加,晶界位错对畸变区能量势垒降低, $n2n3$ 型位错对沿晶界向上运动, $n5n6$ 型位错对沿晶界向下运动. 而剩余的 $n1n2$ 型位错对和

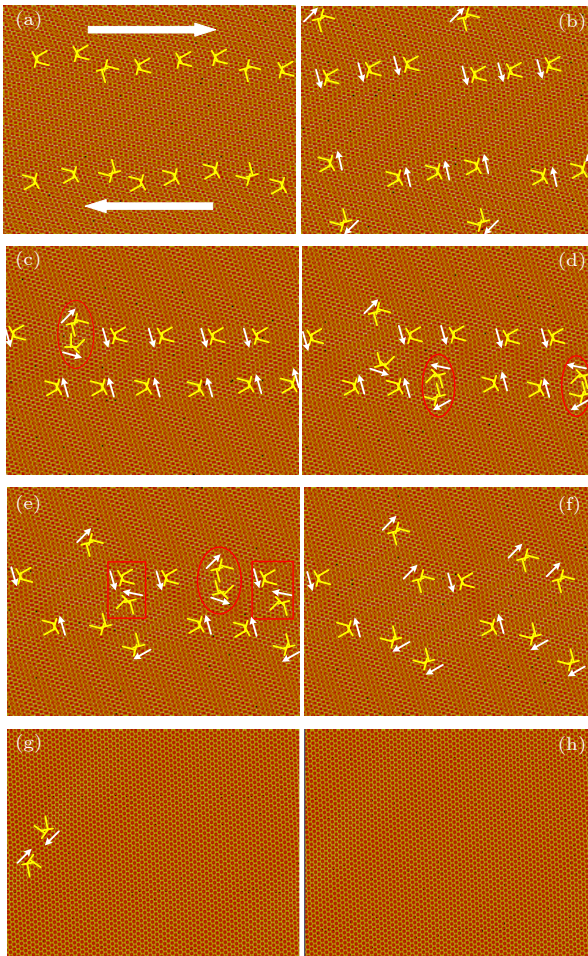


图3 应力作用下 $\theta = 8^\circ$ 时晶界位错运动模拟图 (a) $n = 400$; (b) $n = 11400$; (c) $n = 21200$; (d) $n = 21600$; (e) $n = 22000$; (f) $n = 22500$; (g) $n = 57050$; (h) $n = 57500$

Fig. 3. Simulation diagram of grain boundary dislocation motion under stress with $\theta = 8^\circ$: (a) $n = 400$; (b) $n = 11400$; (c) $n = 21200$; (d) $n = 21600$; (e) $n = 22000$; (f) $n = 22500$; (g) $n = 57050$; (h) $n = 57500$.

$n4n5$ 型位错对沿晶界相互靠拢. 在 21200 步时, 如图 3(c) 红色圆圈标记所示, 一个 $n1n2$ 型位错对发生分解, 且 $n1n2$ 型位错对分解生成新的 $n2n3$ 型位错对和 $n1n6$ 型位错对 (图中圆圈标记为位错对分解, 方框标记为位错对相互靠近发生位错反应, 后图标记同理). 用刃型位错表示其分解反应如图 5 所示, 可以写为 $n1n2 = n2n3 + n1n6$, 用柏氏矢量表示也可写为 $b1b2 = b2b3 + b1b6$. 随着演化的进行, 分解后得到的 $n2n3$ 型位错对向上攀移运动, 而 $n1n6$ 型位错对向下攀移运动. 在时间步数为 21600 步时, 下层晶界出现位错对分解, 两个 $n4n5$ 型位错对分解成 $n3n4$ 型位错对与 $n5n6$ 型位错对, 进而 $n3n4$ 型位错对向上运动, $n5n6$ 型位错对向下运动. 用刃型位错表示其分解反应如图 6 所示, 可以写为 $n4n5 = n3n4 + n5n6$, 用柏氏矢量表示也可写为 $b4b5 = b3b4 + b5b6$. 当演化进行到 22000 步时, 晶界位错对变化十分明显, 出现位错对分解与位错对反应. 首先有 $n1n6$ 型位错对与 $n4n5$ 型位错对发生位错反应生成 $n5n6$ 型位错对, 接着有 $n1n2$ 型位错对分解为 $n2n3$ 型位错对和 $n1n6$ 型位错对 (如图 3(e) 圆圈标示), $n1n2$ 型位错对与 $n3n4$ 型位错对反应生成 $n2n3$ 型位错对 (如图 3(e) 方框标示). 在外应力的持续作用下, 不同位错对之间发生反应生成新的位错对, 符号相反的位错对相互抵消, 在时间步数达到 57050 步时, 晶界位错对仅剩下两个符号相反的位错对相互靠近, 在 57500 步时相互抵消, 位错对已经完全消失, 晶体体系形成完整单晶结构.

图 7—图 9 分别是取向角为 $6^\circ, 7^\circ, 9^\circ$ 时的原子密度演化图, 与图 3 对比可以发现, 不同取向角下晶界位错结构相似. 对于取向角为 6° 的小角非对称晶界而言, 上层晶界由 5 个 $n1n2$ 型和 1 个

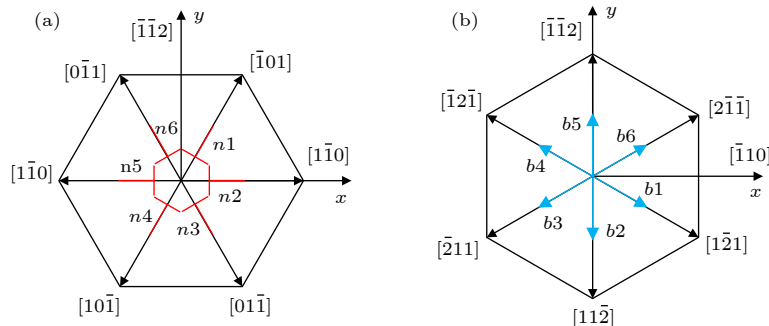


图4 (a) 刃型位错类型; (b) 位错对应的柏氏矢量类型

Fig. 4. (a) Edge dislocation types and (b) its corresponding Burgers vector types.

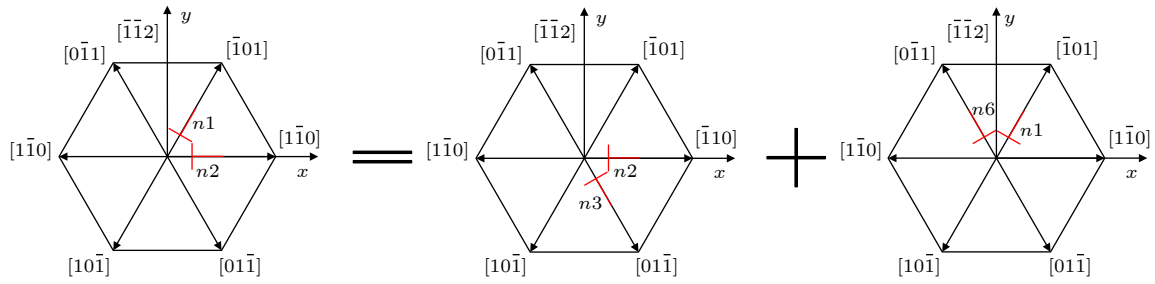


图 5 n_1n_2 型位错对分解为 n_2n_3 型位错对和 n_1n_6 型位错对

Fig. 5. The n_1n_2 dislocation pairs is decomposed to n_2n_3 and n_1n_6 dislocation pairs.

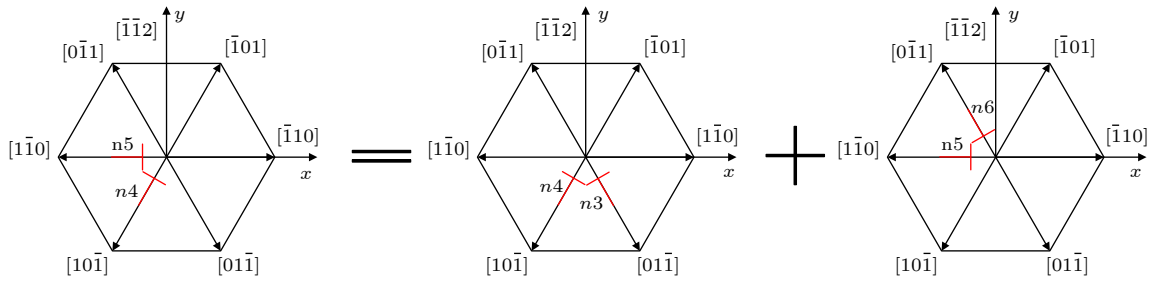


图 6 n_4n_5 型位错对分解为 n_3n_4 型位错对和 n_5n_6 型位错对

Fig. 6. The n_4n_5 dislocation pairs is decomposed to n_3n_4 and n_5n_6 dislocation pairs.

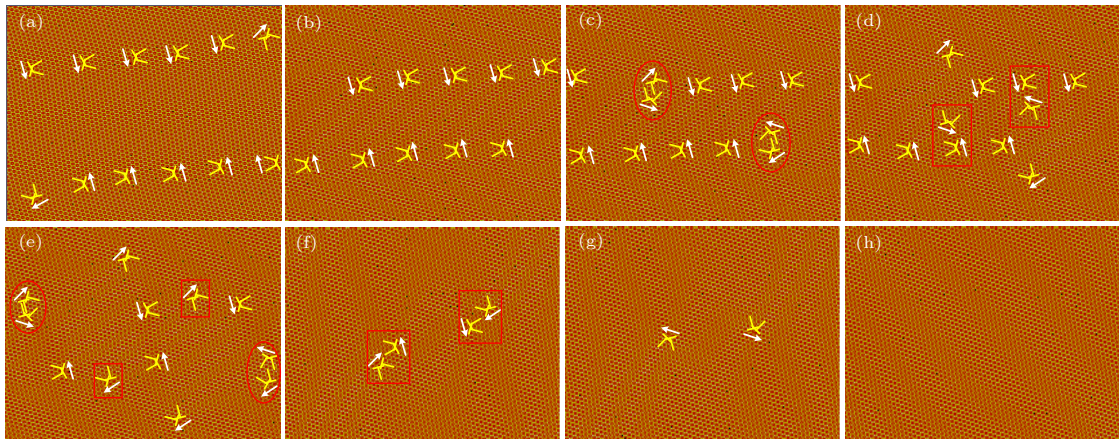


图 7 应力作用下 $\theta = 6^\circ$ 时晶界位错运动模拟图 (a) $n = 9500$; (b) $n = 18500$; (c) $n = 20600$; (d) $n = 21500$; (e) $n = 23500$; (f) $n = 31100$; (g) $n = 31800$; (h) $n = 37500$

Fig. 7. Simulation diagram of grain boundary dislocation motion under stress with $\theta = 6^\circ$: (a) $n = 9500$; (b) $n = 18500$; (c) $n = 20600$; (d) $n = 21500$; (e) $n = 23500$; (f) $n = 31100$; (g) $n = 31800$; (h) $n = 37500$.

n_2n_3 型位错对组成, 下层晶界由 5 个 n_4n_5 型和 1 个 n_5n_6 型位错对组成. 当取向角为 7° 时上层晶界由 5 个 n_1n_2 型和 2 个 n_2n_3 型位错组成, 下层晶界由 5 个 n_4n_5 型和 2 个 n_5n_6 型位错对组成. 而当取向角增到 9° 时, 上层晶界由 7 个 n_1n_2 型和 2 个 n_2n_3 型位错对组成, 下层晶界由 7 个 n_4n_5 型和 2 个 n_5n_6 型位错对组成. 可以看出, 取向角对晶界位错对的数量有着较大影响, 随着取向角的增

大, 晶界位错对明显增多, 位错对间距减小, 且对于上层晶界而言, 取向角增大时, n_1n_2 型位错对更易于 n_2n_3 型位错对形成, 下层晶界则是 n_4n_5 型位错对更易于 n_5n_6 型位错对形成. 图 7—图 9 与图 3 对比发现, 取向角对小角度非对称倾斜晶界构成的位错对组合类型并无影响, 上层晶界均由 n_1n_2 型和 n_2n_3 型位错对组成, 下层晶界均由 n_4n_5 型和 n_5n_6 型位错对组成, 且在晶界的形成过

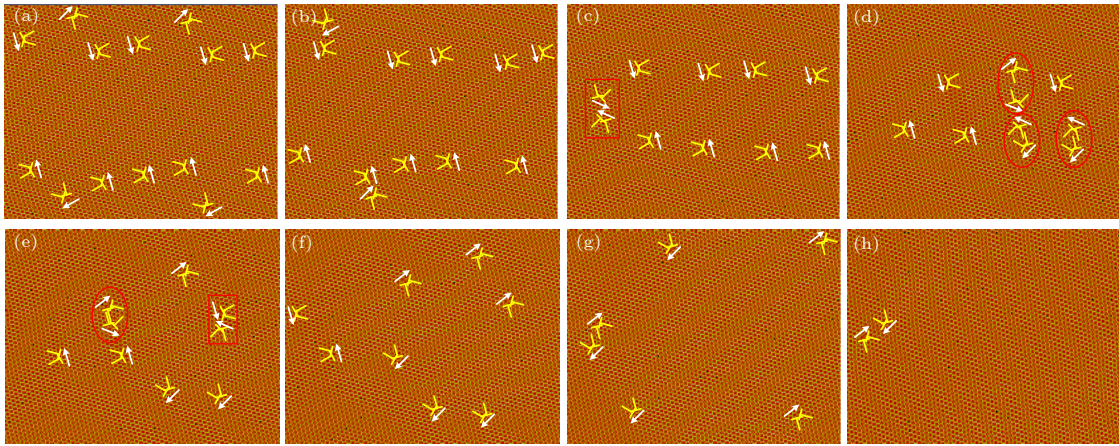


图 8 应力作用下 $\theta = 7^\circ$ 时晶界位错运动模拟图 (a) $n = 9100$; (b) $n = 12950$; (c) $n = 18500$; (d) $n = 22500$; (e) $n = 23200$; (f) $n = 24050$; (g) $n = 26450$; (h) $n = 39600$

Fig. 8. Simulation diagram of grain boundary dislocation motion under stress with $\theta = 7^\circ$: (a) $n = 9100$; (b) $n = 12950$; (c) $n = 18500$; (d) $n = 22500$; (e) $n = 23200$; (f) $n = 24050$; (g) $n = 26450$; (h) $n = 39600$.

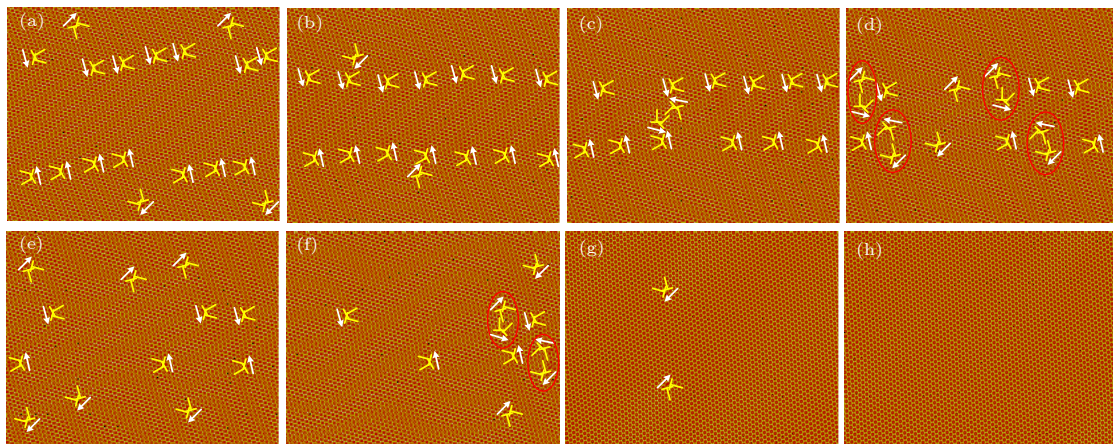


图 9 应力作用下 $\theta = 9^\circ$ 时晶界位错运动模拟图 (a) $n = 10850$; (b) $n = 18750$; (c) $n = 21600$; (d) $n = 22550$; (e) $n = 24350$; (f) $n = 27000$; (g) $n = 54800$; (h) $n = 58000$

Fig. 9. Simulation diagram of grain boundary dislocation motion under stress with $\theta = 9^\circ$: (a) $n = 10850$; (b) $n = 18750$; (c) $n = 21600$; (d) $n = 22550$; (e) $n = 24350$; (f) $n = 27000$; (g) $n = 54800$; (h) $n = 58000$.

程中,更易于出现 $n1n2$ 型与 $n4n5$ 型位错对. 在 x 方向拉应力, y 方向压应力的作用下,上层晶界发射 $n2n3$ 型位错对,下层晶界发射 $n5n6$ 型位错对,且不受取向角大小的影响,剩余的晶界位错对向中间进行滑移运动.

对比观察发现,小角非对称倾斜晶界在不同取向角下位错对发生分解反应有所不同. 在取向角为 6° 时间步数为 20600 步时,发生位错对第一次分解(如图 7(c) 圆圈标示),上层晶界的一个 $n1n2$ 型位错对分解为一个 $n2n3$ 型位错对和一个 $n1n6$ 型位错对,下层晶界的一个 $n4n5$ 型位错对分解为一个 $n3n4$ 型位错对和一个 $n5n6$ 型位错对.

在 23500 步时,如图 7(e) 所示,同样出现上层晶界一个 $n1n2$ 型位错对分解为一个 $n2n3$ 型位错对和一个 $n1n6$ 型位错对,下层晶界的一个 $n4n5$ 型位错对分解为一个 $n3n4$ 型位错对和一个 $n5n6$ 型位错对,在形成单晶的过程中出现四次位错对分解. 在取向角为 7° 时,如图 8(d) 和图 8(e) 圆圈标示,出现四个位错对分解情形,而取向角为 8° 和 9° 时,分别出现 5 个位错对分解(图 3(c)—图 3(f) 圆圈所示)和 6 个位错对分解情形(图 9(d) 和图 9(f) 所示). 可以看出随着取向角的增大,小角非对称倾斜晶界位错对分解数量变多,且仅有 $n1n2$ 型位错对和 $n4n5$ 型位错对发生分解.

4.2 不同取向角下体系自由能变化

从体系自由能角度分析取向角对晶界位错对运动的影响,从图 10 中可以看出,不同晶粒取向角下晶界体系自由能变化趋势大致相同.自由能曲线变化都有上升和下降阶段,按照自由能曲线变化大致可分为 S1, S2, S3 和 S4 四个阶段.以取向角为 6° 时为例分析体系自由能变化, S1 阶段对应在外加应力的作用下,最初晶界处位错对沿晶界做攀移运动,随着晶体体系能量积累,而后上层晶界的 n_1n_2 型位错对和下层晶界的 n_4n_5 型位错对进行滑移运动相互靠近,而上层晶界的 n_2n_3 型位错对和下层晶界的 n_5n_6 型位错对则从晶界处发射向晶界内进行滑移运动.在 S1 阶段中,体系自由能变化曲线有小段的下降,这是由于晶界发射的 n_2n_3 型位错对与 n_5n_6 型位错对发生位错反应相互抵消,位错对所储存的畸变能得到释放,晶界体系的自由能下降.如图 10(a) 所示,在时间步数达到 20500 步时,体系自由能出现极大值,此时将进入 S2 阶段.在 S2 阶段中,因晶体体系不断积累能量,当体系能量达到一定值时,位错对积累的能量达到临界值从而发生位错分解.如图 7(c) 所示,在

20600 步时,可以明显观察到上层晶界 n_1n_2 型位错对分解为柏氏矢量夹角约 120° 的 n_2n_3 型位错对和 n_1n_6 型位错对,下层晶界 n_4n_5 型位错对分解为柏氏矢量夹角约为 120° 的 n_3n_4 型位错对和 n_5n_6 型位错对.分解后的位错对在外应力的作用下继续发生滑移运动,与晶界处位错对相遇继续发生位错反应,体系自由能降低.当时间步数达到 23500 步时,同样出现 n_1n_2 型位错对分解为 n_2n_3 型位错对和 n_1n_6 型位错对, n_4n_5 型位错对分解为 n_3n_4 型位错对和 n_1n_6 型位错对,分解后的位错对继续进行滑移运动.当体系能量下降达到极小值时,说明位错对分解反应阶段已经结束,晶体体系自由能开始上升,进入 S3 阶段.在 S3 阶段中,位错对仍进行滑移运动,无位错对分解情形发生,只出现位错对反应生成新位错对以及位错对相互抵消.由于位错对相互反应生成新位错对及位错对相互反应抵消所释放的畸变能不足以抵消外力作用下体系所增加的能量,因而晶体体系能量呈现上升趋势.随着时间的增加,位错对不断相遇反应生成新位错对和位错对相遇反应抵消,直至位错对完全抵消形成完整单晶.在位错对完全反应抵消

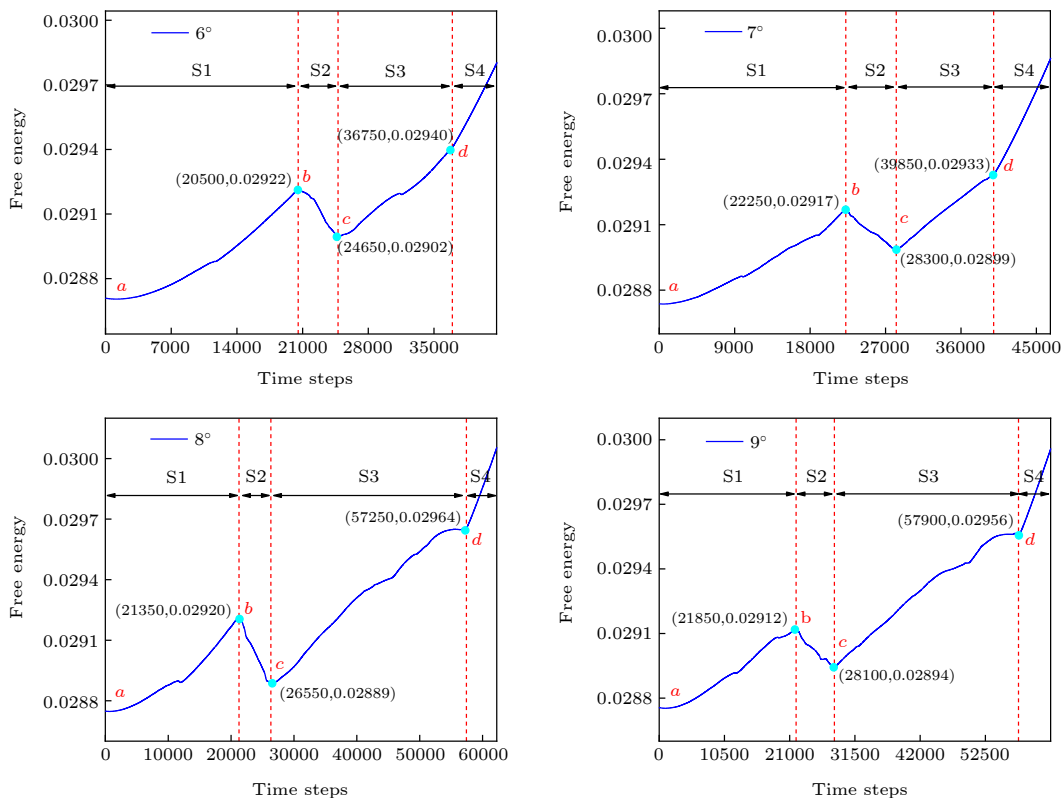


图 10 不同取向角下体系自由能变化曲线

Fig. 10. Free energy curve of system under different misorientations.

后,体系自由能变化进入 S4 阶段,此时晶体体系已形成完整的单晶结构,无位错对运动和位错对之间相互反应,在外应力的作用下晶体体系不断吸收能量,体系自由能持续增长,且增长速率加快.

对比图 10 的四幅图可以观察到,取向角为 6° , 7° , 8° 和 9° 时,体系自由能进入 S4 阶段所需的时间步数分别为 36750, 39850, 57250 和 57900 步.可以看出,随着取向角的增加,体系自由能进入 S4 阶段所需时间步数增加,说明在取向角增大的情况下,小角非对称晶体体系形成完整单晶结构的过程所需时间也相应增加.从不同取向角的原子演化图中可以观察到,在取向角为 6° 和 7° 时,晶界位错对均发生 4 次分解,而当取向角增至 8° 和 9° 时,分别进行了 5 次和 6 次晶界位错对分解.因而可以得到在随取向角增大晶界位错对增多的同时,在外应力的作用下晶界位错对分解的数量也会随之增多,这样使得晶界位错对积累的畸变能得到及时的释放,加剧位错对之间的反应,能够更早地形成单晶结构.

5 结 论

本文采用晶界相场模型研究了取向角对小角度非对称倾斜晶界位错对运动的影响,研究结果表明:

1) 不同取向角下,组成晶体体系小角度非对称倾斜晶界的位错对类型相同,上层晶界由 n_1n_2 型和 n_2n_3 型位错对组成,下层晶界由 n_4n_5 型和 n_5n_6 型位错对组成.随着取向角增大,晶界处位错对数量也相应增加,且晶界更易形成 n_1n_2 型位错对和 n_4n_5 型位错对;

2) 在外应力作用过程中,不同取向角下晶界位错对初始运动状态相同,均沿晶界进行攀移运动.随着体系能量积累,位错对进行滑移运动并发生位错对分解反应,取向角越大,晶界位错对分解个数越多,且不同取向角下晶界位错对出现分解的位错对类型均为 n_1n_2 型和 n_4n_5 型;

3) 不同取向角下小角度非对称倾斜晶界体系自由能曲线存在四个阶段. S1 阶段为体系积累能量,晶界位错对攀移运动,无位错对反应发生,体系能量增加; S2 阶段为位错对滑移运动,位错对之间发生位错反应,且出现位错对分解,体系能量降低; S3 阶段为位错对相互反应抵消,直至晶界湮没

形成单晶,体系能量缓慢增长; S4 阶段为形成单晶后体系继续吸收能量,自由能增长迅速.对比不同取向角下体系自由能曲线发现,增大取向角会使晶界湮没形成单晶体系时间增长.

参考文献

- [1] Li X H, Wen X, Zhao H H, Ma Z Q, Yu L M, Li C, Liu C X, Guo Q Y, Liu Y C 2019 *J. Alloys Compd.* **779** 175
- [2] Chen Y Y, Hu Z P, Xu Y F, Wang J Y, Schützendübe P, Huang Y, Liu Y C, Wang Z M 2019 *J. Mater. Sci. Technol.* **35** 512
- [3] Elder K R, Katakowski M, Haataja M, Grant M 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 245701
- [4] Elder K R, Grant M 2004 *Phys. Rev. E* **70** 051605
- [5] Elder K R, Provatas N, Berry J, Stefanovic P 2007 *Phys. Rev. B* **75** 064107
- [6] Wang J, Yu L M, Huang Y, Li H J, Liu Y C 2019 *Comput. Mater. Sci.* **160** 105
- [7] Zhao Y H, Zhang B, Hou H, Chen W P, Wang M 2019 *J. Mater. Sci. Technol.* **35** 1044
- [8] Zhang B, Zhao Y H, Chen W P, Xu Q Y, Wang M, Hou H 2019 *J. Cryst. Growth* **522** 183
- [9] Sun Y Y, Zhao Y H, Zhao B J, Yang W K, Li X L 2019 *J. Mater. Sci.* **54** 11263
- [10] Fan D, Chen L Q 1997 *Acta Mater.* **45** 611
- [11] Sun Y Y, Zhao Y H, Hou H, Zheng X J, Guo H J 2018 *Rare Metal Mat. Eng.* **47** 3000 (in Chinese) [孙远洋, 赵宇宏, 侯华, 郑晓娟, 郭慧俊 2018 稀有金属材料与工程 **47** 3000]
- [12] Kang Y S, Zhao Y H, Hou H, Jin Y C, Chen L W 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 188102 (in Chinese) [康永生, 赵宇宏, 侯华, 靳玉春, 陈利文 2016 物理学报 **65** 188102]
- [13] Tian X L, Zhao Y H, Tian J Z, Hou H 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 230201 (in Chinese) [田晓林, 赵宇宏, 田晋忠, 侯华 2018 物理学报 **67** 230201]
- [14] Zhao Y H, Tian X L, Zhao B J, Sun Y Y, Guo H J, Dong M Y, Liu H, Wang X J, Guo Z H, Umar A, Hou H 2018 *Sci. Adv. Mater.* **10** 1793
- [15] Zhao B J, Zhao Y H, Sun Y Y, Yang W K, Hou H 2019 *Acta Metall. Sin.* **55** 593 (in Chinese) [赵宝军, 赵宇宏, 孙远洋, 杨文奎, 侯华 2019 金属学报 **55** 593]
- [16] Sun Y Y, Zhao Y H, Hou H, Jin Y C, Zheng X J 2018 *Chin. J. Nonferrous Met.* **28** 71 (in Chinese) [孙远洋, 赵宇宏, 侯华, 靳玉春, 郑晓娟 2018 中国有色金属学报 **28** 71]
- [17] Tian J Z, Zhao Y H, Hou H, Han P D 2017 *Solid State Commun.* **268** 44
- [18] Tian J Z, Zhao Y H, Wang B, Hou H, Zhang Y M 2018 *Mater. Chem. Phys.* **209** 200
- [19] Zhang J B, Wang H F, Kuang W W, Zhang Y C, Li H, Zhao Y H, Herlach D 2018 *Acta Mater.* **148** 86
- [20] Kuang W W, Wang H F, Li X, Zhang J B, Zhou Q, Zhao Y H 2018 *Acta Mater.* **159** 16
- [21] Fang H, Xue H, Tang Q Y, Zhang Q Y, Pan S Y, Zhu M F 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 048102 (in Chinese) [方辉, 薛桦, 汤倩玉, 张庆宇, 潘诗琰, 朱鸣芳 2019 物理学报 **68** 048102]
- [22] Zhao Y H, Wang S, Zhang B, Yuan Y, Guo Q W, Hou H 2019 *J. Solid State Chem.* **276** 232
- [23] Wu K A, Voorhees P W 2012 *Acta Mater.* **60** 407
- [24] Qi K W, Zhao Y H, Guo H J, Tian X L, Hou H 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 170504 (in Chinese) [祁科武, 赵宇宏, 郭慧俊, 田

- 晓林, 侯华 2019 *物理学报* **68** 170504]
- [25] Olmsted D L, Buta D, Adland A, Foiles S M, Asta M, Karma A 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 046101
- [26] Gao Y J, Qin H L, Zhou W Q, Deng Q Q, Luo Z R, Huang C G 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 106105 (in Chinese) [高英俊, 秦河林, 周文权, 邓芊芊, 罗志荣, 黄创高 2015 *物理学报* **64** 106105]
- [27] Berry J, Elder K R, Grant M 2008 *Phys. Rev. B* **77** 224114
- [28] Nourian A, Asadi E 2018 *Comput. Mater. Sci.* **145** 224
- [29] Chan V W L, Pisutha-Arnond N, Thornton K 2017 *Comput. Mater. Sci.* **135** 205
- [30] Asadi E, Zaem M A 2015 *Jom* **67** 186
- [31] Hu S, Xi W, Chen Z, Wang S, Zhang T H 2017 *Comput. Mater. Sci.* **132** 125
- [32] Hu S, Wang S 2019 *Phys. B* **552** 104
- [33] Gao Y J, Deng Q Q, Huang L L, Ye L, Wen Z C, Luo Z R 2017 *Comput. Mater. Sci.* **130** 64
- [34] Greenwood M, Ofori-Opoku N, Rottler J, Provatas N 2011 *Phys. Rev. B* **84** 064104
- [35] Greenwood M, Rottler J, Provatas N 2011 *Phys. Rev. E* **83** 031601
- [36] Elder K R, Thornton K, Hoyt J J 2011 *Philos. Mag.* **91** 151
- [37] Lu G M, Lu Y L, Hu T T, Chen Z 2015 *Comput. Mater. Sci.* **106** 170
- [38] Guo H J, Zhao Y H, Sun Y Y, Tian J Z, Hou H, Qi K W, Tian X L 2019 *Superlattices Microstruct.* **129** 163
- [39] Zhao Y H, Deng S J, Liu H, Zhang J X, Guo Z H, Hou H 2018 *Comput. Mater. Sci.* **154** 365
- [40] Wen Z Q, Hou H, Tian J Z, Zhao Y H, Li H J, Han P D 2018 *Intermetallics* **92** 15
- [41] Wen Z Q, Zhao Y H, Hou H, Wang B, Han P D 2017 *Mater. Des.* **114** 398
- [42] Zhao Y H, Qi L, Jin Y C, Wang K, Tian J Z, Han P D 2015 *J. Alloys Compd.* **647** 1104
- [43] Hirouchi T, Takaki T, Tomita Y 2009 *Comput. Mater. Sci.* **44** 1192

Phase field crystal simulation of effect of misorientation angle on low-angle asymmetric tilt grain boundary dislocation motion*

Qi Ke-Wu Zhao Yu-Hong[†] Tian Xiao-Lin Peng Dun-Wei
Sun Yuan-Yang Hou Hua

(*Material Science and Engineering Institute, North University of China, Taiyuan 030051, China*)
(Received 18 January 2020; revised manuscript received 22 April 2020)

Abstract

Grain boundary affects the microstructure of metal material, and thus further its macroscopic properties. As is well known, under the action of applied stress, the grain boundary migrates. The structures and arrangements of grain boundary dislocations at different misorientation angles are very different, which affects the macrophysical and chemical properties of metal crystal. Therefore, it is of great theoretical and practical significance to study the dislocation structure and reaction mechanism of grain boundary under different misorientations for further studying the material properties. The phase field crystal method is used to simulate the low-angle asymmetric tilt grain boundary structure and dislocation motion on a nanoscale. From the perspective of the change of the position of the grain boundary dislocation motion under the applied stress and the change of the free energy of the crystal system, the influences of the misorientation angle on the low-angle asymmetric tilt grain boundary structure and the motion of the grain boundary dislocation are analyzed. The results show that the types of dislocation pairs of low-angle asymmetric tilt grain boundaries at different misorientation angles are the same. With the increase of misorientation angle, the grain boundary dislocation pairs increase, and n_1n_2 and n_4n_5 type dislocation pairs are more easily formed at the grain boundaries. Under the action of applied stress, the initial movement states of the grain boundary dislocation pairs at different misorientation angles are all climbing along the grain boundaries. As the system energy accumulates, the larger the misorientation angle is, the more the number of decomposed grain boundary dislocation pairs decomposed will be, and only in the dislocation pairs of n_1n_2 and n_4n_5 type there occurs decomposition reaction. There are four stages in the free energy curve of the low-angle asymmetric tilt grain boundary system at different misorientation angles, which correspond to the dislocation pairs climbing, dislocation pairs sliding and decomposition, dislocation pairs reaction to form single crystal, and the free energy rising process of the system. Further research shows that as the misorientation angle increases, the time for the single crystal system formed by the dislocation of grain boundary pairs to annihilate is required to be long.

Keywords: phase field crystal, misorientation, grain boundary, dislocation

PACS: 05.70.Np, 07.05.Tp, 61.72.Mm

DOI: [10.7498/aps.69.20200133](https://doi.org/10.7498/aps.69.20200133)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51774254, 51774253, 51701187, 51674226, 51804279, 51801189), the Science and Technology Major Project of Shanxi Province, China (Grant No. 20191102008), the Platform and Talent Project of Shanxi Province, China (Grant No. 201805D211036), the Guiding Local Science and Technology Development Project by the Central Government, China (Grant No. YDZX20191400002796), and the Transformation of Scientific and Technological Achievements Special Guide Project of Shanxi Province, China (Grant No. 201804D131039).

[†] Corresponding author. E-mail: zhaoyuhong@nuc.edu.cn