

小角度非对称倾侧晶界形貌和变形的晶体相场模拟

张 帅, 陈 铮, 杨 涛

(西北工业大学 凝固技术国家重点实验室, 陕西 西安 710072)

摘 要: 采用双模晶体相场模型, 计算了二维正方相相图, 并以正方相为研究对象, 在原子尺度上, 模拟了小角度非对称倾侧晶界结构及变形过程。结果表明, 小角度非对称倾侧晶界由刃型位错和刃型位错组构成; 在外加应力作用下, 位错先于位错组滑移并进行短程的攀移, 最后合并, 位错组分离为滑移方向相反的 2 个刃型位错并最终与其它晶界位错组分离出的异号刃型位错合并, 完成晶粒的合并。

关键词: 双模晶体相场模型; 正方相; 晶界结构

中图分类号: TG111.2

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2014)03-0610-05

晶体相场 (phase field crystal model) 已成为模拟凝固过程微观组织形成的重要方法^[1-3]。它可以模拟空间上原子尺度, 时间上扩算尺度的现象, 这是分子动力学在现阶段计算机技术条件下所不能完成的^[4]。

实际应用晶体材料大多为多晶体, 多晶体中含有大量晶界, 因而晶界对多晶体材料的物理化学性质有重要影响, 例如晶界应力诱发腐蚀开裂, 晶界杂质偏析, 扩散快速通道, 低温晶界强化, 高温晶界滑动蠕变, 晶界迁移引起晶粒长大等^[5]。由于晶界的性质取决于晶界结构, 所以晶界结构的研究显得尤为重要。

国内主要采用Elder^[6]提出的单模晶体相场模型, 以二维三角相为研究对象。三角相与面心立方晶胞 {111} 形貌相同, 对观测带来很大不便。杨涛^[7]等人利用晶体相场模拟了应力诱发双位错组亚晶界湮没。任秀^[8]等人利用晶体相场模拟了纯物质的晶界结构及运动。目前主要研究的是对称倾侧晶界 (symmetrical tilt grain boundaries), 对非对称倾侧晶界 (asymmetrical tilt grain boundaries) 的研究则较少, 而在实际中, 非对称倾侧晶界更具有一般性。

本研究采用Wu^[9]提出的双模晶体相场, 以二维正方相为研究对象, 研究小角度非对称倾侧晶界的晶界结构及在外加应力作用下的变形过程。

1 模型介绍

1.1 晶体相场模型

晶体相场采用周期性的局域原子密度泛函来描述

系统的自由能^[9], 为了体现周期性, 密度场 $n(\vec{r})$ 被展开成一系列的密度波的形式:

$$n(\vec{r}) = n_0 \left(1 + \sum_i u_i e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} \right) \quad (1)$$

式中, \vec{r} 为空间向量; \vec{k}_i 为晶体点阵的倒易矢量; u_i 为展开项系数; n_0 为 $n(\vec{r})$ 的平均值。与单模晶体相场只保留式(1)中1组倒易矢量不同, 双模晶体相场保留式(1)中2组倒易矢量, 从而可以模拟更多类型的晶体。

模拟过程中, 液/固体系中无量纲纯物质的自由能 F :

$$F = \int d\vec{r} \left\{ \frac{\psi}{2} \left[-q + (\nabla^2 + 1)^2 \left[(\nabla^2 + Q_1^2)^2 + R_1 \right] \right] \psi + \frac{\psi^4}{4} \right\} \quad (2)$$

式中, ψ 为具有周期性的局域原子密度 (以下简称原子密度); q 表示无量纲过冷度; Q_1 是与晶体相结构有关的常数; R_1 为控制模型稳定性的参量。

动力学方程为:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta \psi} \quad (3)$$

式中, t 表示时间变量。

液态原子密度 $\psi_l(\vec{r})$ 为:

$$\psi_l(\vec{r}) = \bar{\psi} \quad (4)$$

固态原子密度 $\psi_s(\vec{r})$ 为:

$$\psi_s(\vec{r}) \approx \bar{\psi} + 2 * A_s (\cos x + \cos y) + 4 * B_s (\cos x * \cos y) \quad (5)$$

对于二维正方相, 液态的自由能密度 $f_1^{sq}(\bar{\psi}_l)$ 为

收稿日期: 2013-03-18

基金项目: 国家自然科学基金 (51075335, 51174168, 10902086, 51274167); 西北工业大学基础研究基金 (JC20120222)

作者简介: 张 帅, 男, 1987 年生, 硕士, 西北工业大学凝固技术国家重点实验室, 陕西 西安 710072, E-mail: 517916@163.com

$$f_1^{sq}(\bar{\psi}_1) = -(q-4-R_1)\frac{\bar{\psi}_1^2}{2} + \frac{\bar{\psi}_1^4}{4} \quad (6)$$

固态的自由能密度 $f_s^{sq}(\bar{\psi}_s)$ 为：

$$f_s^{sq}(\bar{\psi}_s) = 2(-q+3\bar{\psi}_s^2)A_s^2 + 2(-q+3\bar{\psi}_s^2+R_1)B_s^2 + 24\bar{\psi}_s A_s^2 B_s + 36A_s^2 B_s^2 + 9A_s^4 + 9B_s^4 - \frac{q}{2}\bar{\psi}_s^2 + \frac{R_1}{2}\bar{\psi}_s^2 + 2\bar{\psi}_s^2 + \frac{1}{4}\bar{\psi}_s^4 \quad (7)$$

式中, A_s 和 B_s 是关于 q 和 $\bar{\psi}_s$ 使 $f_s^{sq}(\bar{\psi}_s)$ 取最小的函数。对式(7)分别求关于 A_s 和 B_s 的偏导,并使其等于0得到

$$\begin{cases} 4(-q+3\bar{\psi}_s^2)A_s + 48\bar{\psi}_s A_s B_s + 72A_s B_s^2 + 36A_s^3 = 0 \\ 4(-q+3\bar{\psi}_s^2+R_1)B_s + 24\bar{\psi}_s A_s^2 + 72A_s^2 B_s + 36B_s^3 = 0 \end{cases} \quad (8)$$

求解关于 A_s 和 B_s 的二元三次方程组,得到 A_s 和 B_s 关于 q 和 $\bar{\psi}_s$ 的表达式,将 A_s 和 B_s 的表达式代入式(7)使 $f_s^{sq}(\bar{\psi}_s)$ 变为关于 q 和 $\bar{\psi}_s$ 的函数。对于两相共存区液相线和固相线分别满足^[4]式(9)和式(10)：

$$\left. \frac{\partial f_s^{sq}(\bar{\psi}_s)}{\partial \bar{\psi}_s} \right|_{\bar{\psi}_s} = \left. \frac{\partial f_1^{sq}(\bar{\psi}_1)}{\partial \bar{\psi}_1} \right|_{\bar{\psi}_1} \quad (9)$$

$$f_s^{sq}(\bar{\psi}_s, q) - f_1^{sq}(\bar{\psi}_1, q) = \left. \frac{\partial f_1^{sq}(\bar{\psi}_1)}{\partial \bar{\psi}_1} \right|_{\bar{\psi}_1} (\bar{\psi}_s - \bar{\psi}_1) \quad (10)$$

通过取不同的 q 得到对应液相线和固相线的原子密度,绘制二维正方相相图,如图1所示。

1.2 计算方法与参数选取

对动力学方程(3)采用半隐式谱方法求解^[7],其离散形式为：

$$\frac{\bar{\psi}_{n+1} - \bar{\psi}_n}{\Delta t} = -k^2 \times \left\{ \left[-q + (-k^2 + 1)^2 \left[(-k^2 + Q_1^2)^2 + R_1 \right] \right] \bar{\psi}_{n+1} + \bar{\psi}_n^3 \right\} \quad (11)$$

式中, $\bar{\psi}$ 表示原子密度 ψ 的傅里叶变换形式；参数 $Q_1 = \sqrt{2}$ ； $R_1 = 0$ 。

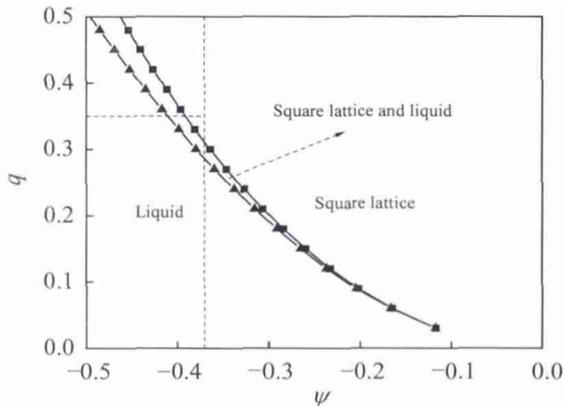


图 1 二维正方相相图

Fig.1 Phase diagram of the two-dimensional square lattices

模拟中,选取 $\psi = -0.37$, $q = 0.35$ 如相图所示,对应的 $A_s = 0.1471$, $B_s = 0.0914$ 。空间步长 $\Delta x = \Delta y = \pi/4$,时间步长 $\Delta t = 0.5$ 。采用周期性边界条件,初始条件按如下方法给出：对于周期性计算区域 $512\Delta x \times 512\Delta y$,通过式(5)使晶体在 $0 < y < L_y$ 和 $3L_y/4 < y < L_y$ 范围内取向为 θ_1 ,在 $L_y/4 < y < 3L_y/4$ 范围内为 θ_2 ,其中 $0 < x < L_x$ 。同时为了不影响晶界的性质,在各晶粒之间取为过冷液相,并经历一段时间演化直到系统达到平衡。

变形过程采用等体积条件假设^[10],如图2所示。应变变量 $\varepsilon = \dot{\varepsilon}n\Delta t$,其中, $\dot{\varepsilon}$ 为无量纲的应变速率,取 $\dot{\varepsilon} = 6 \times 10^{-6} / \Delta t$, n 为时间步长。根据等体积条件假设,变形前后空间步长满足：

$$\begin{cases} \Delta y' = (1 + \varepsilon)\Delta y = \Delta y + n\dot{\varepsilon}\Delta y\Delta t \\ \Delta x' = \frac{\Delta x\Delta y}{\Delta y'} = \frac{\Delta x}{1 + n\dot{\varepsilon}\Delta t} \end{cases} \quad (12)$$

2 结果与分析

2.1 小角度非对称倾侧晶界结构

如图3所示,晶界与晶界两侧晶粒的对称面呈一定角度^[5],即倾斜度角(inclination angles),从而构成非对称倾侧晶界。由于非对称倾侧晶界和对称倾侧晶界有一定联系,先研究对称倾侧晶界。

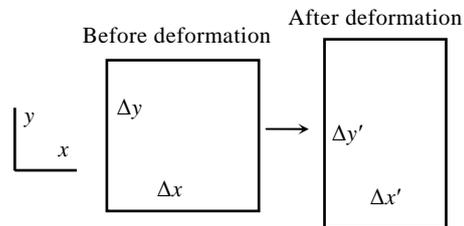


图 2 二维拉伸变形模拟的数值算法示意图

Fig.2 Numerical scheme of two-dimension tensile deformation simulation

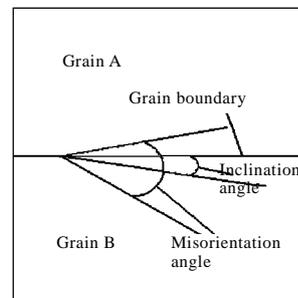


图 3 非对称倾侧晶界示意图

Fig.3 Scheme of asymmetrical tilt grain boundaries

对称倾侧晶界由均匀排列的刃型位错构成，刃型位错的半原子面与晶界平行。如果相邻位错间的距离为 D ，本研究中 D 的单位为 1 个原子间距；两晶粒的取向差 (misorientation angles) 为 θ ，模拟过程中 $\theta = |\theta_1 - \theta_2|$ ；刃型位错的柏氏矢量的大小为 b ，本研究中 b 为 1 个原子间距，则根据对称倾侧晶界位错模型有 $\tan\theta = b/D$ 。分别模拟取向差 θ 为 $2^\circ, 4^\circ, 6^\circ, 8^\circ$ 的对称倾侧晶界，测量较完整的位错间距，并求算数平均得到其平均位错间距 D ，绘制表 1。由表 1 可以看出，模拟结果与位错模型结论基本相符。

对于非对称倾侧晶界，根据参数选取，晶体在 y 方向均匀生长，晶界为水平方向，则倾斜度角 $\delta = \left| \frac{\theta_1 - \theta_2}{2} \right|$ ，根据正方相的对称性， $0^\circ < \delta < 45^\circ$ 。

图 4 表示 θ 为 6° ， δ 分别为 $3^\circ, 10^\circ, 14^\circ, 18^\circ, 24^\circ, 30^\circ$ 的晶界结构。由图 4a 可以看到当 δ 很小的时候，刃型位错半原子面大体依然按水平方向沿晶界排列，但已经开始偏转，位错之间的距离仍与对称倾侧晶界相同，都近似为 10 个原子间距。随着 δ 的增大，出现刃型位错组，位错组中 2 个刃型位错的半原子面分别在晶界两侧晶粒内部，其它刃型位错半原子面与晶界的角度逐渐增大，如图 4b。随着 δ 的继续增大，刃型位错半原子面逐渐全部偏转到晶体内部，位错组之间的距离 D^* 逐渐减少，如图 4c, 4d, 4e, 4f 中白色线段所示。并且晶界被位错组分为数段，各段之间形貌相似，如图 4e, 4f 所示。测量位错组间距并求算数平均得到表 2。

从表 2 可以看出位错组间距是 $\theta=6^\circ$ 对称倾侧晶界中位错间距 9.6 的整数倍。

2.2 小角度非对称倾侧晶界变形

图 5 表示 θ 为 6° ， δ 为 30° 的非对称倾侧晶界，在 y 方向拉应力作用下晶界位错运动和晶界消失的过程。在应力作用下，晶界上的刃型位错穿过晶界，由中间晶粒向上下晶粒内部滑移，位错组在晶界的阻碍下只是做短程的沿晶界移动，如图 5a 所示。应变继续增加，刃型位错继续滑移，一些位错组开始分离，如图 5b 所示。当应变增加到一定程度，位错组全部分离，晶界

表 1 取向差和模拟得到的位错间距

Table 1 Misorientation angles and simulated distance between dislocations

$\theta/(^\circ)$	$\tan\theta$	D	b/D
2	0.0349	28	0.0357
4	0.0699	14.3333	0.0698
6	0.1051	9.6	0.1042
8	0.1405	7.4286	0.1346

表 2 倾斜度角和位错组间距

Table 2 Inclination angles and simulated distance between double-array dislocations

$\delta/(^\circ)$	D^*
14	39
18	30
24	20.5
30	20

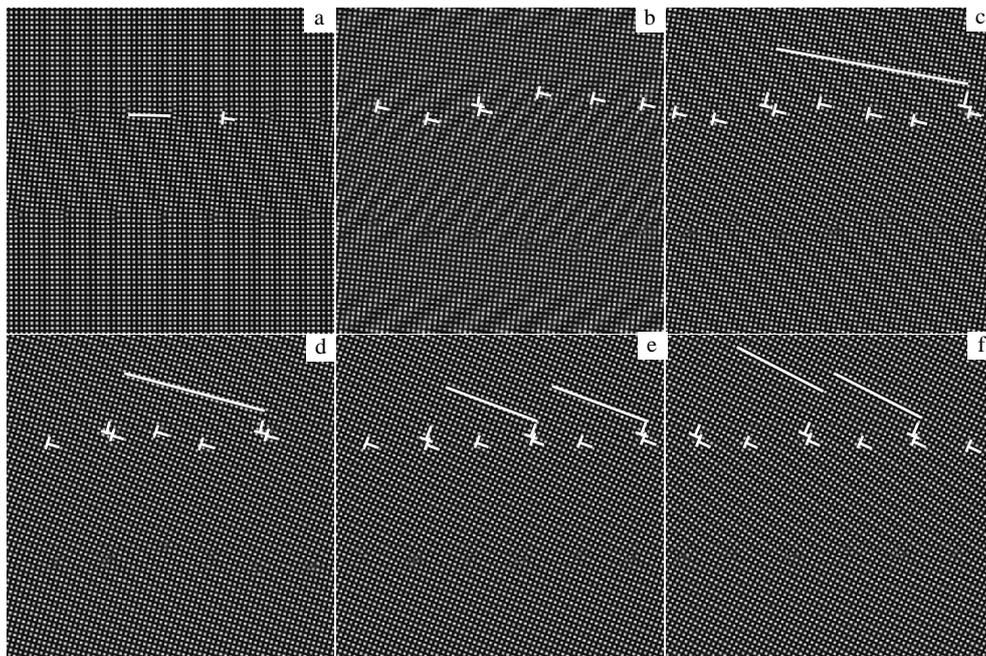


图 4 $\theta=6^\circ$ 非对称倾侧晶界结构

Fig.4 Structures of asymmetrical tilt grain boundaries at $\theta=6^\circ$: (a) $\delta=3^\circ$, (b) $\delta=10^\circ$, (c) $\delta=14^\circ$, (d) $\delta=18^\circ$, (e) $\delta=24^\circ$, and (f) $\delta=30^\circ$

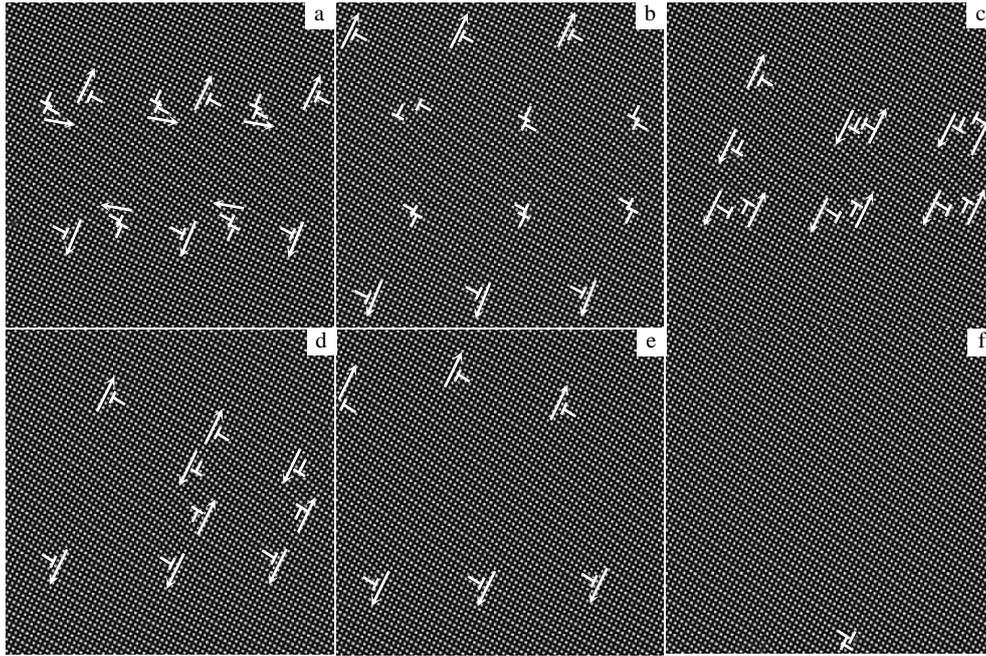


图 5 $\theta=6^\circ, \delta=30^\circ$ 非对称倾侧晶界变形过程

Fig.5 Deformation of $\theta=6^\circ, \delta=30^\circ$ asymmetrical tilt grain boundaries at $\epsilon=0.018$ (a), 0.0504 (b), 0.060 12 (c), 0.0657 (d), 0.072 (e), and 0.093 24 (f)

彻底消失，组成位错组的位错分别向相反的方向滑移，根据模型的周期性，已滑移出的刃型位错分别与相邻晶界滑移出的异号刃型位错合并抵消，这个过程中为了使正负刃型位错抵消，刃型位错也进行短程的攀移，从而调整与异号位错的位置合并抵消，如图5c所示。随着应变继续增加，由位错组分离的刃型位错在滑移过程中与对应晶界位错组分离的异号刃型位错合并抵消，此过程中也伴随位错的短程攀移，从而调整位错与异号位错的方位达到合并抵消，如图5d所示。由位错组分离的另一组刃型位错，分别与相邻晶界分离的异号刃型位错合并抵消，其过程也伴随位错的短程攀移，如图5e。当所有位错合并抵消后，晶粒合并完成，如图5f。

从能量角度进行分析，图6表示晶粒合并过程的几个阶段。当 ϵ 大约增大到0.056时，晶界上的刃型位错合并，从而使总自由能下降，当刃型位错合并结束，随着应变的增加，体系的自由能开始增大，当 ϵ 大约增大到0.064时，位错组分离，使体系的畸变能降低，继续增大应变，当 ϵ 增大到0.068时相邻晶界位错组分离出的异号刃型位错在晶粒内部合并，使体系的自由能降低，继续增加应力，体系的自由能又开始增大，当 ϵ 增大到0.092时，刃型位错组分离的另一组位错分别与相邻晶界分离的异号刃型位错合并体系的自由能降低，晶粒合并完成。

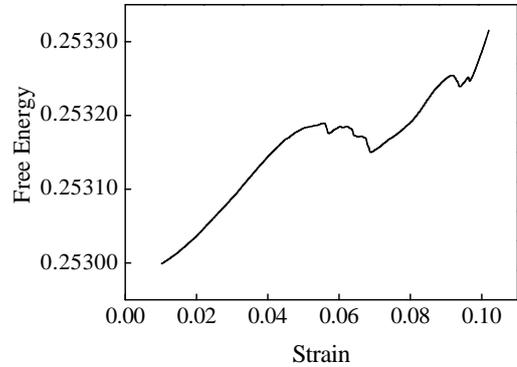


图 6 演化过程的应变自由能曲线

Fig.6 Strain-free energy curve of evolutionary process

3 结 论

1) 小角度非对称倾侧晶界主要由刃型位错和刃型位错组组成，晶界被位错组分为数段，各段之间形貌相似，位错组之间的距离为对应的对称倾侧晶界位错间距的整数倍。

2) 在外加应力作用下，小角度非对称倾侧晶界上的位错先于位错组滑移，最终与相邻晶界滑移出的异号刃型位错合并抵消。随着应变的增加，位错组分离为滑移方向相反的2个刃型位错，并分别与相邻晶界位

错组分离的异号刃型位错合并抵消，最终晶粒合并完成，在位错与异号位错合并抵消过程中，位错也会做短程的攀移。

参考文献 References

- [1] Stefanovic P, Haataja M, Provatas N. *Phys Rev Lett*[J], 2006, 96: 225 504
- [2] Berry J, Grant M, Elder K R. *Phys Rev*[J], 2006, E 73: 031 609
- [3] Wu K A, Voorhees P W. *Phys Rev*[J], 2009, B 80: 125 408
- [4] Jaatinen A, Ala-Nissila T. *J Phys: Condens Matter*[J], 2010, 22: 205 402
- [5] Yu Yongning(余永宁). *Fundamentals of Materials Science* (材料科学基础)[M]. Beijing: Higher Education Press, 2006: 421
- [6] Elder K R, Grant M. *Phys Rev*[J], 2004, E 70: 051 605
- [7] Yang Tao (杨涛), Chen Zheng (陈铮), Dong Weiping (董卫平). *Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2011, 47(10): 1301
- [8] Ren Xiu (任秀), Wang Jincheng (王锦程), Yang Yujuan(杨玉娟) *et al.* *Acta Physica Sinica*(物理学报) [J], 2010, 59(5): 3595
- [9] Wu K A, Adland A, Karma A. *Phys Rev*[J], 2010, E81: 061 601
- [10] Hirouchi T, Takaki T, Tomita Y. *Comput Mater Sci*[J], 2009, 44: 1192

Simulation of Structure and Deformation of Asymmetrical Tilt Grain Boundaries with Small Misorientation Angles by Two-Mode Phase Field Crystal Method

Zhang Shuai, Chen Zheng, Yang Tao

(State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

Abstract: The phase diagram of the two-dimensional square lattices was calculated using the two-mode phase field crystal model. The structure and deformation of asymmetrical tilt grain boundaries (GBs) with small misorientation angles was simulated. The results show that asymmetrical tilt GBs are composed of dislocations and double-array dislocations. The dislocations glide before double-array dislocations and climb across a short distance to merge with the negative dislocations under applied stress. The double-array dislocations are separated by two dislocations, which glide to the opposite direction and merge with negative dislocation separated from other double-array dislocations.

Key words: two-mode phase field crystal model; square lattices; structure of GB

Corresponding author: Chen Zheng, Professor, State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, P. R. China, Tel: 0086-29-88486023, E-mail: chenzh@nwpu.edu.cn