

剪切应变下刃型位错的滑移机理的晶体相场模拟

高英俊 全四龙 邓芊芊 罗志荣 黄创高 林葵

Phase-field-crystal simulation of edge dislocation climbing and gliding under shear strain

Gao Ying-Jun Quan Si-Long Deng Qian-Qian Luo Zhi-Rong Huang Chuang-Gao Lin Kui

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 106104 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.106104

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.106104>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I10>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

轴对称构件受力分析的插值粒子法

Interpolating particle method for mechanical analysis of space axisymmetric components

物理学报.2015, 64(10): 100204 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.100204>

镁基合金自由枝晶生长的相场模拟研究

Phase-field modeling of free dendritic growth of magnesium based alloy

物理学报.2015, 64(6): 060201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.060201>

Mn-N 共掺 p 型 ZnO 的第一性原理计算

First-principles study of Mn-N co-doped p-type ZnO

物理学报.2014, 63(19): 196101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.196101>

黏弹性问题的改进的复变量无单元 Galerkin 方法

Improved complex variable element-free Galerkin method for viscoelasticity problems

物理学报.2014, 63(18): 180203 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.180203>

第一性原理研究 Te-N 共掺 p 型 ZnO

First-principles study of p-type ZnO by Te-N codoping

物理学报.2012, 61(17): 176105 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.176105>

剪切应变下刃型位错的滑移机理的晶体相场模拟*

高英俊^{1)†} 全四龙¹⁾ 邓芊芊¹⁾ 罗志荣¹⁾²⁾ 黄创高¹⁾ 林葵¹⁾

1)(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, 南宁 530004)

2)(玉林师范学院物理科学与工程技术系, 玉林 537000)

(2014年7月15日收到; 2014年11月24日收到修改稿)

针对刃型位错的滑移运动, 构建包含外力场与晶格原子密度耦合作用的体系自由能密度函数, 建立剪切应变作用体系的晶体相场模型. 模拟了双相双晶体系的位错攀移和滑移运动, 计算了位错滑移的Peierls势垒和滑移速度. 结果表明: 施加较大的剪切应变率作用, 体系能量变化为单调光滑曲线, 位错以恒定速度做连续运动, 具有刚性运动特征; 剪切应变率较小时, 体系能量变化出现周期波动特征, 位错运动是处于低速不连续运动状态, 运动出现周期“颠簸”式滑移运动, 具有黏滞运动特征; 位错启动运动, 存在临界的势垒. 位错启动攀移运动的Peierls势垒要比启动滑移Peierls势垒大几倍. 位错攀移和滑移运动特征与实验结果相符合.

关键词: 位错滑移, 剪切应变, Peierls势, 晶体相场模型

PACS: 61.72.Bb, 02.60.Cb, 68.35.-p, 81.40.Lm

DOI: 10.7498/aps.64.106104

1 引言

材料在介观和宏观尺度上的性能在很大程度上由复杂的拓扑几何缺陷所决定^[1,2], 例如空位、空洞、位错、晶界和微裂纹等. 这些缺陷起因于在原子尺度发生的复杂非平衡动力学过程^[3-6]. 金属材料的加工变形过程与材料微观缺陷、特别是与位错的运动有着非常重要的关系. 在目前情况下, 材料的位错、空位运动很难由实验实时观测到, 因此, 计算机模拟实验已成为研究这些纳微米尺度的微观缺陷的重要手段和实验补充^[7]. 相场方法是当今研究微观结构演化的强有力的数值计算方法^[8,9]. 传统的相场方法^[10-14]是建立在平衡态均匀场基础上的, 忽略了许多由原子的周期排列结构产生的物理特性, 难以反映晶体学结构特性以及原子尺度的行为信息, 因而无法从根本上阐明微观组织演化过程中原子尺度上的动力学机理.

最近, Elder等^[15-18]基于密度泛函理论提出

了晶体相场(phase-field-crystal, PFC)模型. 该模型给出了新的自由能密度函数形式, 引入了原子密度函数的周期序参量. 它将液态的密度场定义为一常数, 将晶体相的密度场表示成周期性函数(波)的形式, 进而通过周期的原子密度函数表现晶体的原子点阵结构. 这样的周期结构的密度场就很自然地与弹性效应、晶粒取向和位错的运动等由周期结构产生的物理特性紧密地关联起来^[16]. PFC模型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微秒量级的原子、缺陷运动的行为. 目前, PFC方法已成功模拟了位错滑移、攀移和亚晶界湮没^[19]、晶界位错预熔化^[20,21]、异质外延生长^[22,23]、晶体结构的相转变^[24]、韧性材料的微裂纹扩展与连通^[25]、纳米孪晶结构设计等^[26]. 针对材料的加工变形的微结构与性能的关系, PFC方法的研究前沿和发展方向^[27-31]主要集中在: 将加工变形的外界作用因素引入PFC模型中, 建立形变和位错动力学的PFC模型, 用于超塑性、裂纹扩展、疲劳、断裂、蠕变等行为和性能的机理研究.

* 国家自然科学基金(批准号: 51161003)、广西自然科学基金重点基金(批准号: 2012GXNSFDA053001)、广西大学广西有色金属及特色材料加工重点实验室开放基金(批准号: GXKFJ12-01)和广西研究生教育创新计划项目基金(批准号: YCSZ2014039)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: gaoyj@gxu.edu.cn

在研究材料变形过程的位错运动时, Elder 等^[16,18]提出了一个施加外应变场的思想, 但没有明确建立施加剪切应变的数学模型和具体的耦合外力场的自由能函数的数学表述; 文献^[19, 20]通过引入变形等体积方案来施加压缩和拉伸应变, 用于研究位错运动. 本文尝试通过引入剪切外力场作用函数, 构建包含外力场与原子密度函数耦合的 PFC 自由能密度函数, 用于研究剪切应变下晶体的位错攀移和滑移运动特征, 揭示原子晶格势垒、剪切应变对位错运动特征的作用机理.

2 PFC 模型与方法

2.1 自由能密度函数

与传统的相场模型不同, PFC 模型的周期局域原子密度函数是通过自由能函数对保守的原子密度场变量取极小值得到的. 因此, 该模型能够揭示晶体学结构特性以及原子尺度的行为. 对于固态金属材料, 其原子的位置不依赖于时间, 呈规则排列. 因此, 要求相场变量必须能够反映原子周期性排列的特征. 引入周期性相场变量, 其局域位置的最大值对应于原子的位置; 另一方面, 液相中的原子位置随时间随机变化, 取时间平均可看成为常量. 符合这两方面要求的相场变量定义, 可用原子密度场函数作为相场变量, 其表达式^[16]可写成

$$\rho(r) = \sum_{n,m} a_{n,m} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} + \rho_0, \quad (1)$$

式中, 等号右边第一项反映晶格原子的周期排列结构特征, 其中 \mathbf{G} 为倒格矢, $a_{n,m}$ 为振幅; 第二项 ρ_0 反映液相的原子无规则运动的平均原子密度, 为一个常量, 与体系的化学势有关. 考虑到外部剪切力场的耦合作用情况下, 借鉴文献^[17, 22, 27, 32—34]的引入外力场耦合作用的思想和方法, 本文在原有的 PFC 模型自由能密度函数的基础上, 引入剪切外力场与体系原子密度函数耦合的作用项 $V_{\text{ext}} \cdot \rho$, 得到包含外力场作用的体系无量纲的自由能函数, 可以写成

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

式中, $r (> 0)$ 是反映体系的温度参量, 它与实际温度 T 有近似关系, $r = \alpha(T_m - T)$, 其中 T_m 为熔点, α 为比例参量, 由实验根据具体材料来确定; ∇^2 为

Laplace 算子; V_{ext} 为外力场, 其具体的数学表达式将在本文后面的章节详细给出. 该自由能模型能够自然地包含晶体结构的物理特征, 例如多晶取向、弹性效应、弹塑性变形等.

2.2 二维体系的极小自由能密度函数

对于二维晶格点阵, 倒格矢为 $\mathbf{G} = n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2$, 其中 \mathbf{b}_1 和 \mathbf{b}_2 为倒格子基矢, n_1 和 n_2 为整数. 对于三角格子, 倒格子基矢可以写成

$$\mathbf{b}_1 = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}} \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \hat{x} + \frac{1}{2} \hat{y} \right), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}} \hat{y}, \quad (3)$$

其中 \hat{x} 和 \hat{y} 为单位矢量, a 为三角格子的晶格常数. 对二维体系的极小自由能函数的解做单模近似, 可得到平衡时三角格子固相的原子密度函数 ρ , 可写成单模形式

$$\rho(x, y) = A_0 \left[\cos(qx) \cos\left(\frac{qy}{\sqrt{3}}\right) - \frac{1}{2} \cos\left(\frac{2qy}{\sqrt{3}}\right) \right] + \rho_0, \quad (4)$$

式中, q 为波矢, 等于 $\sqrt{3}/2$; A_0 是一个特定常数, 反映固相原子密度周期结构的振幅, 由自由能函数取极小值得到; ρ_0 为反映体系液相的平均原子密度. 将 (4) 式代入 (2) 式, 对 A_0 求导数, 求出极小自由能函数 F_0 和 A_0 . 求得 A_0 的表达式为

$$A_0 = \frac{4}{5} \left(\rho_0 + \frac{1}{3} \sqrt{-15r - 36\rho_0^2} \right), \quad (5)$$

其中, ρ_0 和 r 为体系自由能函数的两个重要参数. 由体系的极小自由能密度函数, 可以计算并给出体系不同相区的相图. 对于二维体系, 相区有液相和固相, 且固相有三角格子相和条状相两种. 按照平衡相图的计算方法^[16]得到的二维相图如图 1 所示.

2.3 动力学方程

由于原子密度场 ρ 为保守场, 所以演化的无量纲动力学方程满足 Chan-Hilliard 方程^[16]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta \rho} = \nabla^2 \{ [-r + (1 + \nabla^2)^2] \rho + \rho^3 + V_{\text{ext}} \}. \quad (6)$$

为求解复杂的动力学方程 (6) 式, 还必须将动力学方程在时间和空间进行离散化处理, 即采用数值求解的办法. 在本文的数值求解中, 采用显型 Euler 迭代公式^[26,35]:

$$\rho(t + \Delta t) = \rho(t) + \frac{d\rho}{dt} \cdot \Delta t, \quad (7)$$

式中, Δt 为离散时间步长. 此外, 为使数值解具有稳定性, 需将 Laplace 算子作用考虑到次近邻格点 [35,36]:

$$\nabla^2 \rho_i = \frac{1}{(\Delta x)^2} \left[\frac{1}{2} \sum_j (\rho_j - \rho_i) + \frac{1}{4} \sum_n (\rho_n - \rho_i) \right], \quad (8)$$

式中, Δx 为离散空间步长, j 和 n 分别代表 i 的最近邻格点与次近邻格点. 利用可视化函数 $\rho(x, y)$ 给出原子密度函数分布图.

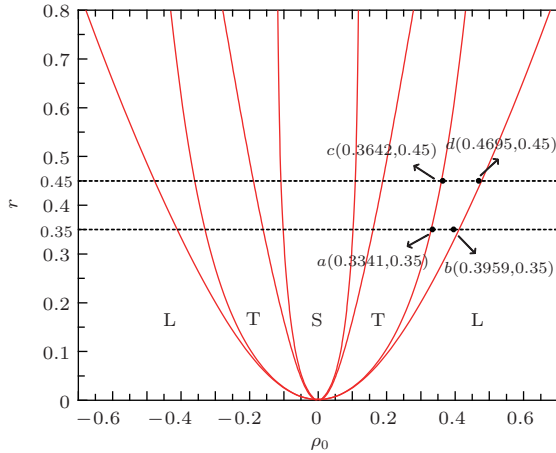


图1 二维PFC相图 其中L表示液相区, S表示条状相区, T表示三角结构相区; 图中坐标点 (ρ_0, r)

Fig. 1. Two-dimensional phase diagram of PFC: L, T and S represent liquid phase, triangular phase, strip phase, respectively.

3 模拟实验区域的设计与剪切应变的施加

3.1 模拟实验区域的设计

以 FCC 面心立方晶格的 $\{111\}$ 平面作为模拟实验的结构体系. 要在等效于 $\{111\}$ 平面的二维三角原子晶格点阵中产生单个孤立的刃位错, 可以利用单模近似的三角结构的原子密度分布函数公式 (4) 来设置. 可采用设置晶格常数不等的两个晶粒, 由于原子错配排列, 在晶界上可形成一个孤立的刃位错, 从而获得单个位错的双晶体系. 例如, 在双晶体系, 上半部分晶粒, 采用波矢为 \mathbf{q}_1 的原子密度函数分布 $\rho(\mathbf{q}_1, x, y)$, 使体系上半部分每行具有 N 个原子排列; 在体系的下半部分晶粒, 采用波矢为 \mathbf{q}_2 的原子密度函数分布 $\rho(\mathbf{q}_2, x, y)$, 使体系下半部分每行具有 $N + 1$ 个原子排列, 得到在晶界上形成一个刃位错. 由于两个晶粒的晶格常数不同, 可以看成为两个相. 因此, 体系为双相双晶结构. 在

本文的双相双晶模拟区域设置中, 取 $\mathbf{q}_1 = 0.830$, $\mathbf{q}_2 = 0.814$. 这样, 在 256×256 的二维三角格子平面上, 上半部晶粒的三角点阵结构的原子密度分布中, 每排有 27 个原子; 下半部晶粒的原子密度分布中, 每排有 28 个原子. 晶界的原子错配度近似为 $\varepsilon = (a_1 - a_2)/a_1 = (\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1)/\mathbf{q}_2 \sim 4\%$. 由于晶界处的原子排列存在错配, 因此, 存在较强的畸变能, 经过大约 1×10^5 时间步的弛豫, 畸变能得以释放, 使体系处于平衡状态, 可形成稳定的孤立位错结构, 其位错位置不随时间而改变. 于是, 用于模拟位错运动的双相双晶模拟区域设置完成.

PFC 模型中的温度参数和应变率, 可用与典型金属的熔点相对应和时间尺度相匹配的物理单位表示出来. 例如, 以 Cu 在 $1063 \text{ }^\circ\text{C}$ 的情况作为参考, 与模型中 $r = 0.3$ 时的温度是相当的, 使用的应变率范围约为 $10^{-3} < \dot{\varepsilon} < 10^2 \text{ s}^{-1}$. 参量取值在这些范围可以观察到位错运动速度大约在 $10^{-7} \sim 10^{-4} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 量级, 这一范围明显低于声速极限而更接近于实验所能达到的值, 这时对应的位错密度近似为 $10^{10} \text{--} 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. 对于设定的 r 值, 与之相应的 ρ_0 取值如图 1 所示, 取在液固两相共存的边界上. 这样的参数取值方法, 能够使界面更加稳定, 具体的参数值选取见表 1, 其中 t 的单位为时间步 (ts), $1 \text{ ts} = 0.2 \text{ s}$.

表1 模拟实验参数取值
Table 1. Parameters for sample preparation.

r	ρ_l	ρ_s	应变率范围
0.45	0.4695	0.3642	$\dot{\varepsilon} = 5.0 \times 10^{-2} \text{--} 1.0 \times 10^{-2}/t$

3.2 施加剪切应力场的函数表示

由于 PFC 方法不能直接模拟固相自由表面, 因此, 不能像在分子动力学 (MD) 方法中使用固相自由表面来对双晶体系施加剪切应变 [37], 但通过在固相自由表面设置若干原子层厚度的液相区域与之衔接, 使得化学势从样品晶体相经过液相后到达真空自由表面区域的变化较为平稳 [37]. 这时, 就可以应用 PFC 方法, 将剪切应力场施加在样品边界的原子上, 模拟晶粒在剪切应变下的位错运动情况. 此时, 不要求上下两边界满足周期性边界条件, 而只需模拟区域的左右边界满足周期性边界条件.

对设计好的模拟区域施加剪切应力, 同样存在力的三要素: 力的作用点、大小和方向, 图 2 中给出了物理意义上施加剪切应力的示意图. 考虑到剪

切应力作用引起模拟区域内部的原子运动, 需将外应力场与原子密度场进行耦合作用, 这时要求外加力场的形式与原子密度场的形式能够相匹配. 本文采用具有单模近似的周期外力场作为剪切力场, 这样的外力场的选取优势在于不会改变体系的相图结构 [17,27]. 在这样的周期外力场的作用下, 就能做到使晶粒内部位错运动, 克服附近的原子晶格的 Peierls 势, 实现位错的攀移和滑移运动 [38].

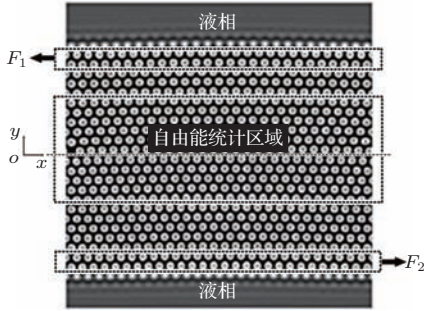


图2 剪切应力的施加示意图 F_1 和 F_2 为剪切应力, $F_1 = -F_2$; 上下两端为液相, 靠近液相的两层原子为外应变作用区; F_1 作用区域为 $81 \leq y \leq 97$, F_2 作用区域为 $-97 \leq y \leq -81$

Fig. 2. the sketch map of shear strain exerting on the sample. The top and bottom zone are the liquid phase. The exerting region for F_1 and F_2 is a two atomic layer width in y direction, which are about $81 \leq y \leq 97$ or $-97 \leq y \leq -81$.

在模拟剪切应力作用下的刃型位错运动时, 需要对图 2 的模拟区域左右两侧边界应用周期性边界条件. 如图 2 所示, x 坐标轴位于样品的中心水平方向, 将模拟区域分成为上下两半. 设置晶粒靠近上下两端液相区的最外两原子层为外力场耦合区域, 施加的周期外力场用 V_{ext} 表示, 具体施加的上和下外力场分别用 $F_1(x, y)$ 和 $F_2(x, y)$ 表示. 文献 [37] 施加两个方向相反的剪切应变的外力场的形式, $F_1(x, y)$ 和 $F_2(x, y)$ 分别设置为

$$\begin{aligned}
 & F_1(\mathbf{q}_1, x, y) \\
 &= A[\cos(\mathbf{q}_1 x + n\dot{\epsilon}\Delta t) \cos(\mathbf{q}_1 y/\sqrt{3}) \\
 &\quad - \cos(2\mathbf{q}_1 y/\sqrt{3})/2] + \rho_0 \\
 & 81 \leq y \leq 97, \\
 & F_2(\mathbf{q}_2, x, y) \\
 &= A[\cos(\mathbf{q}_2 x - n\dot{\epsilon}\Delta t) \cos(\mathbf{q}_2 y/\sqrt{3}) \\
 &\quad - \cos(2\mathbf{q}_2 y/\sqrt{3})/2] + \rho_0 \\
 & -97 \leq y \leq -81.
 \end{aligned} \tag{9}$$

式中 $\dot{\epsilon}$ 为恒定剪切应变率; \mathbf{q}_1 和 \mathbf{q}_2 分别为上、下半部晶粒的波矢, 本文取 $\mathbf{q}_1 = 0.830$ 和 $\mathbf{q}_2 = 0.814$; n

为外力场的作用下原子移动一个格子距离所需的时间步; A 为外力场的振幅强度(无量纲量), 本文计算时取 $A = 1$; $F_1(x, y)$ 为沿着负 x 方向的作用力, 作用在上半部晶粒顶层的二原子层侧面上, 而 $F_2(x, y)$ 为沿着正 x 方向的作用力, 作用在下半部晶粒底层的二原子层侧面上; 施加外力场作用顶层和底层的二原子层时, 每进行 n 个时间步, 则让原子晶格弛豫, 于是剪切应力从顶层和底层逐渐传递到模拟区域中部的位错周围原子. 由于外力场的函数形式与原子密度场的形式一致, 两者容易产生耦合作用, 由此产生了施加剪切应力的物理效果. 图 2 模拟区域的中间方框区域为计算位错运动时体系自由能变化的统计区域.

这里的二维三角晶体的原子晶格点阵等价于 fcc 晶格的 $\{111\}$ 平面族或 hcp 晶格的 $\{0001\}$ 平面族. 这些密堆平面和连续的滑移方向, 构成了韧性金属的许多公共滑移系. 利用 fcc 晶格作为参考, 在这种几何结构上施加剪切应力, 将导致在 $\{111\}$ 滑移面上沿 $\langle 110 \rangle$ 方向滑移.

3.3 平均剪切应变计算方法

计算晶粒内部位错附近原子的平均剪切应变的方法, 首先通过确定出 $\rho(x, y)$ 的所有极大值的位置来确定原子的位置, 并确认出每个位置的最近邻的原子数. 若某一格点周围的最近邻格点数大于或者小于 6 个格点, 那么这个地方必然是靠近刃型位错的核心, 按照这样的办法就可以判断出密度最大值位置是否为刃型位错所在位置. 此时, 注意到平衡时每一个原子在正 y 方向与另一个原子的距离近似等于 $2a_y$. 如果发现这个原子在 x 方向偏离 dx_i 的距离, 则切应变就等于 $dx_i/2a_y$, 体系的平均切应变可表示为

$$\bar{\gamma} = \frac{1}{2Ma_y} \sum_{i=1}^M dx_i, \tag{11}$$

这里 M 是双晶粒体系的原子数目, a_y 是 y 方向上原子间距, $a_y = \sqrt{3}a/4$, a 为三角原子晶格的邻近两个原子的中心距离.

刃型位错在外加剪切应力的作用下发生滑移. 考虑到实际材料所能承受的载荷, 以及材料发生塑性变形的特征, 晶体相场方法模拟刃型位错滑移和攀移时, 施加的剪切应变率的大小量级能够做到与实际施加的应变率量级相当, 这也是晶体相场方法

表2 材料加工过程中恒定应变率作用的实验效果 [38,39]

Table 2. Experimental effect [38,39] under constant strain rate in materials working processes.

应变率范围	对应的实验状态	实际的变形效果
$\dot{\epsilon} < 10^{-6} - 10^{-3} \text{ s}^{-1}$	低速应变实验	可视为准静态变形
$\dot{\epsilon} < 10^{-3} - 10^2 \text{ s}^{-1}$	中速应变实验	明显变形 (如: 剪切、压缩、扭转、挤压等)
$\dot{\epsilon} < 10^2 - 10^4 \text{ s}^{-1}$	高速应变实验	瞬间剧烈变形 (如: 爆炸、射击、弹丸冲击等)

用于材料加工变形模拟实验的优势. 表2给出了通常实际材料加工过程中恒定应变率的适用范围, 及其对应的实际材料加工的宏观物理效果.

为了与实际材料加工所施加的应变率相符, 本文将应变率大小选定在中速应变率范围, 即在 $\dot{\epsilon} = 3.33 \times 10^{-3} \sim 5.0 \times 10^{-2}/t$ 之间, 其中 t 为无量纲时间. 在这范围的应变率作用具有特定的物理效果, 具体见表2.

4 结果与分析

4.1 位错滑移和攀移运动

虽然剪切应力是直接施加在模拟区域的上端和下端两层厚的原子层上, 但是通过原子层间的耦合相互作用, 可将剪切应力逐层传递到刃型位错核心处使位错运动. 图3展示了外加剪切应变率为 $\dot{\epsilon} = 1.49 \times 10^{-2}/t$ 时, 位错的滑移和攀移运动. 由图3(d)可见, 经过 $t = 30000$ 时间步 (ts), 位错沿水平方向滑移了13个原子位置, 而攀移沿竖直方向只越过3个原子层. 由此可见, 滑移运动相对较为容易, 因为滑移的原子晶格阻力较小. 这一过程中, 体系的自由能变化曲线如图4(d)所示. 由该图可见自由能曲线出现3个大的峰谷特征, 这对应于位错的攀移过程克服原子晶格的阻力势垒和应变能的释放过程. 3个峰对应于位错攀移越过3原子层. 相对于攀移过程, 位错做滑移运动时, 原子晶格阻

力较小. 因此, 位错做滑移运动, 对应的体系自由能的变化较小, 只能在自由能曲线高峰的谷底处看到较小的峰谷结构, 如图4(d)中矩形方框区域所示, 这对应于滑移过程的体系能量变化.

在不同剪切应变率下, 体系能量变化如图4所示. 由图4(a)的自由能曲线可见, 当应变率 $\dot{\epsilon}$ 较大时, 如 $\dot{\epsilon} > 5.0 \times 10^{-2}/t$ 时, 自由能曲线单调增加. 而在 $\dot{\epsilon} = 3.12 \times 10^{-2}/t$ 时, 在图4(b)的自由能曲线中, 可见能量增加到转折处, 存在一个尖峰, 然后下降, 再上升出现平台结构. 转折处出现的尖峰和谷对应于位错发生攀移, 与图5(b)的 y 方向位置曲线的台阶刚好对应; 而 x 方向的位置曲线是一条直线, 斜率表示滑移的平均速度. 由此可知, 在较大应变率作用下, 位错运动是沿 x 轴方向的连续匀速运动, 原子晶格对位错运动的阻力可看成为常数, 具有刚性特征. 当剪切应变率 $\dot{\epsilon} \leq 1.52 \times 10^{-2}/t$ 时, 由图4(c)可见, 自由能曲线出现一个较大的峰, 然后陡然下降, 这一特征比图4(b)情况更明显. 之后自由能曲线出现周期性的小峰谷结构, 对应的位错滑移运动的位置变化曲线如图5(c)所示. 由此图可见, 位错首先沿 y 方向攀移一个原子层, 然后再沿 x 方向进行滑移, 滑移位置随时间变化出现了一系列均匀的台阶状结构, 表明位错在滑移的过程中, 在每个滑移位置上需要停留一定的时间, 积累能量. 当能量达到某临界值时, 位错越过原子晶格势垒, 向前运动, 然后释放应变能. 由于滑移停留的时间

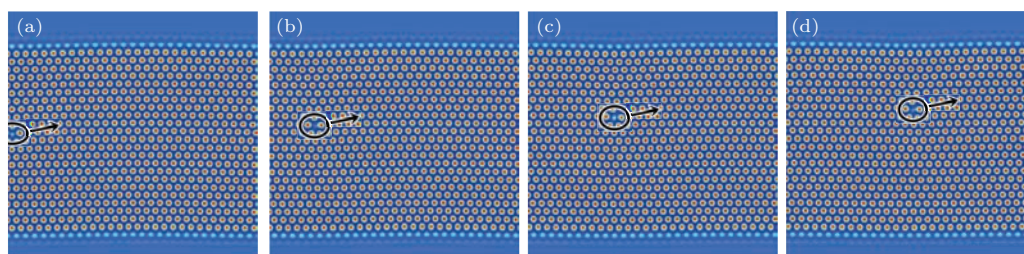


图3 (网刊彩色) 在剪切应变 $\dot{\epsilon} = 1.49 \times 10^{-2}/t$ 的作用下, 刃位错攀移和滑移运动随时间的演化 (a) $t = 0$; (b) $t = 13000$; (c) $t = 24800$; (d) $t = 30000$

Fig. 3. (color online) Evolution of edge dislocation climbing and gliding under shear strain with $\dot{\epsilon} = 1.49 \times 10^{-2}/t$ at: (a) $t = 0$, (b) $t = 13000$, (c) $t = 24800$, (d) $t = 30000$.

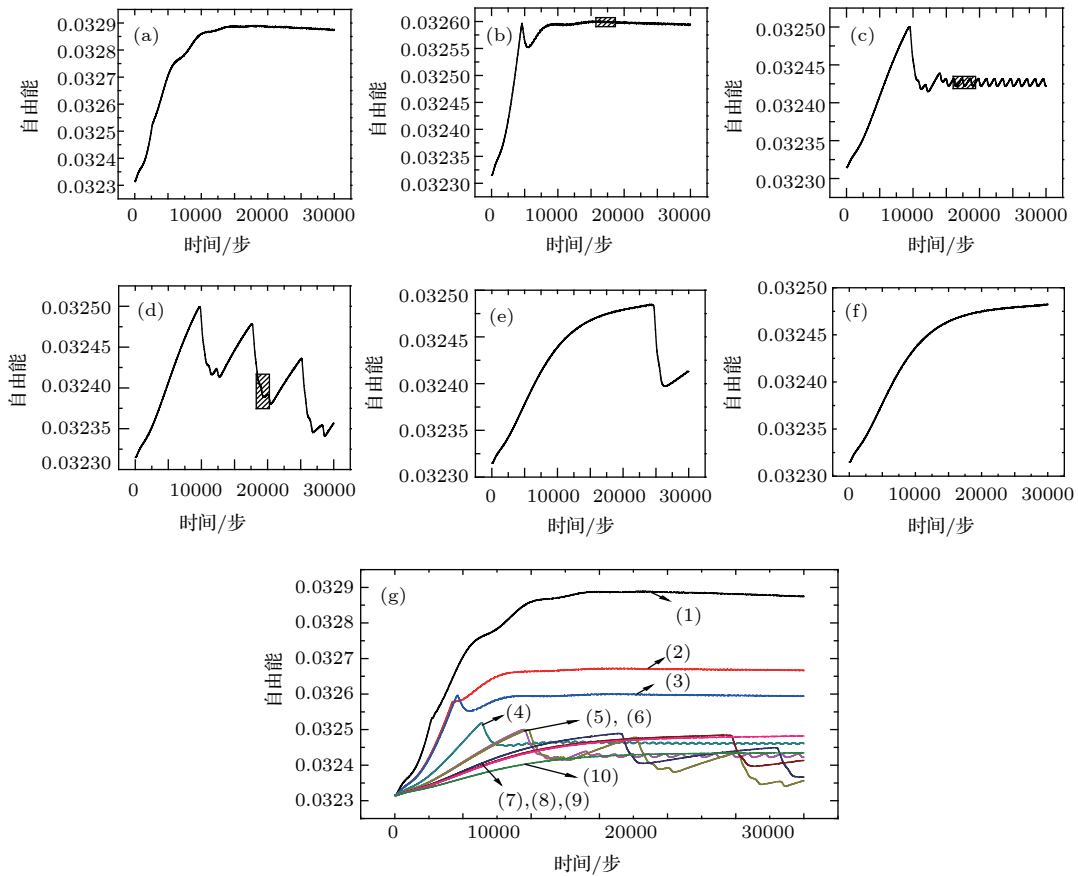


图4 (网刊彩色) 体系在不同的剪切应变作用下的自由能曲线 应变率 $\dot{\epsilon}$: (a) $5.0 \times 10^{-2}/t$; (b) $3.12 \times 10^{-2}/t$; (c) $1.52 \times 10^{-2}/t$; (d) $1.49 \times 10^{-2}/t$; (e) $1.19 \times 10^{-2}/t$; (f) $1.18 \times 10^{-2}/t$; (g) 不同应变率的自由能曲线 $\dot{\epsilon}$: (1) $5.0 \times 10^{-2}/t$; (2) $3.23 \times 10^{-2}/t$; (3) $3.12 \times 10^{-2}/t$; (4) $2.0 \times 10^{-2}/t$; (5) $1.52 \times 10^{-2}/t$; (6) $1.49 \times 10^{-2}/t$; (7) $1.23 \times 10^{-2}/t$; (8) $1.19 \times 10^{-2}/t$; (9) $1.18 \times 10^{-2}/t$; (10) $1.0 \times 10^{-2}/t$

Fig. 4. (color online) The free energy vs time curve under different shear strain, strain rate $\dot{\epsilon}$ (a) $5.0 \times 10^{-2}/t$, (b) $3.12 \times 10^{-2}/t$, (c) $1.52 \times 10^{-2}/t$, (d) $1.49 \times 10^{-2}/t$, (e) $1.19 \times 10^{-2}/t$, (f) $1.18 \times 10^{-2}/t$, (g) the free energy vs time curve under different strain rate $\dot{\epsilon}$ (1) $5.0 \times 10^{-2}/t$, (2) $3.23 \times 10^{-2}/t$, (3) $3.12 \times 10^{-2}/t$, (4) $2.0 \times 10^{-2}/t$, (5) $1.52 \times 10^{-2}/t$, (6) $1.49 \times 10^{-2}/t$, (7) $1.23 \times 10^{-2}/t$, (8) $1.19 \times 10^{-2}/t$, (9) $1.18 \times 10^{-2}/t$, (10) $1.0 \times 10^{-2}/t$.

相同, 于是自由能曲线形成这种周期峰谷结构和位置曲线出现规则台阶状结构. 这时的位错滑移运动是处于低速不连续运动状态, 出现了类似于“颠簸”式周期运动特征, 对应的是自由能曲线出现周期性的小峰谷结构. 两者的对应关系见图6(a)所示, 图中上部为自由能曲线, 下部为对应的位错沿 x 方向位置随时间的变化曲线. 当剪切应变率减小到 $\dot{\epsilon} = 1.49 \times 10^{-2}/t$ 时, 自由能曲线如图4(d)所示, 出现了3个大的峰谷结构, 而周期排列的小峰谷结构消失了, 对应的位错运动的位置随时间变化的曲线如图5(d)所示. 由此图可见, y 方向的位置出现3个大的台阶结构, 对应于沿 y 方向位错攀移了3个原子层, 而 x 方向的位置变化由许多小的台阶结构组成, 并存在2个大的平台结构. 小的台阶结构对应于位错沿 x 方向滑移变化, 越过的原子晶格势垒的数目; 大的平台对应于位错攀移时, 在 x 轴方向

的晶格位置的停留时间. 比较二者可见, 攀移过程中, 位错在该位置停留时间要比位错滑移时停留时间要长4—5倍. 当剪切应变率进一步减小时, 例如 $\dot{\epsilon} \leq 1.19 \times 10^{-2}/t$ 时, 如图4(e)所示, 体系自由能曲线是单调增加的, 只在最后阶段才出现较陡的下降, 这一过程对应的位错位置随时间的变化曲线如图5(e)所示, 可见位错在经过较长的时间后, 才滑移了几个原子晶格的位置和攀移了一个原子层, 之前一直保持静止不动. 当应变率 $\dot{\epsilon} \leq 1.18 \times 10^{-2}/t$ 时, 位错始终保持静止不动, 不发生滑移和攀移, 如图5(f)所示. 由此说明, 应变率 $\dot{\epsilon} = 1.18 \times 10^{-2}/t$ 是位错能够产生滑移的临界外加应变率. 图4(g)给出了不同剪切应变率下的体系自由能的变化曲线, 图5(g)给出了对应这些剪切应变率下, 位错沿 x 轴方向滑移的位置随时间的变化. 由图5(g)可见, 在整个过程中, 位错滑移的位置随时间的变化

近似线性, 应变率 $\dot{\epsilon}$ 越大, 则直线斜率越大, 则滑移运动的平均速度越大. 图 6 (a), (b) 和 (c) 分别为图 4 (b), (c) 和 (d) 的自由能曲线局部放大图和对应的位错滑移位置随时间的变化曲线. 由图可见, 自由能曲线的峰谷周期变化, 与位错的滑移越过原子

格点的台阶时间相对应, 特别是 $\dot{\epsilon} = 1.52 \times 10^{-2}/t$ 时符合得非常好. 根据图 5 (g) 的位置曲线, 可以求出位错滑移的平均速度. 各情况的滑移速度分别列在表 3.

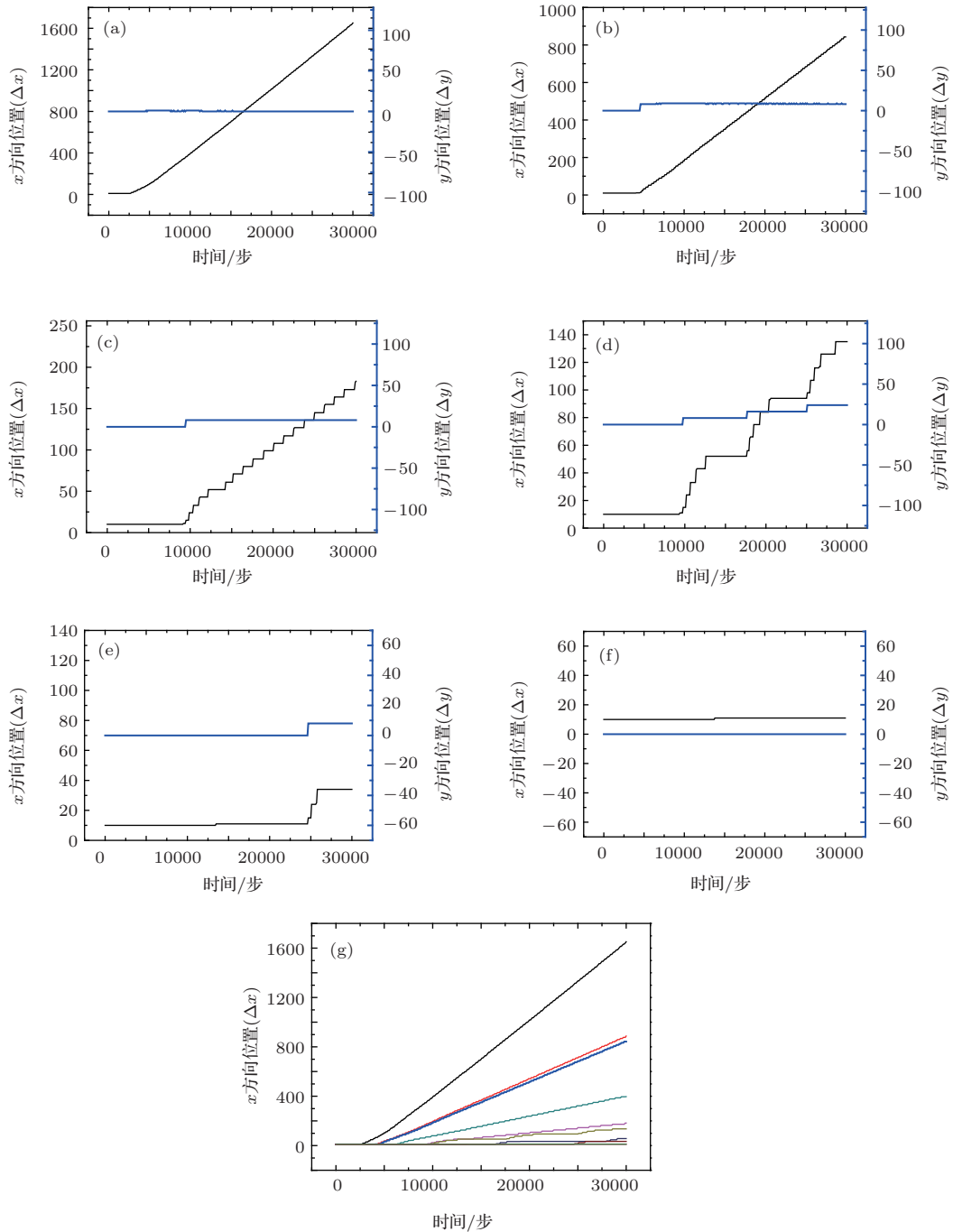


图 5 (网刊彩色) 体系在不同的剪切应变作用下位错位置随时间变化曲线 应变率 $\dot{\epsilon}$: (a) $5.0 \times 10^{-2}/t$; (b) $3.12 \times 10^{-2}/t$; (c) $1.52 \times 10^{-2}/t$; (d) $1.49 \times 10^{-2}/t$; (e) $1.19 \times 10^{-2}/t$; (f) $1.18 \times 10^{-2}/t$; (g) 不同应变率作用下的位错位置曲线: (1) $5.0 \times 10^{-2}/t$; (2) $3.23 \times 10^{-2}/t$; (3) $3.12 \times 10^{-2}/t$; (4) $2.0 \times 10^{-2}/t$; (5) $1.52 \times 10^{-2}/t$; (6) $1.49 \times 10^{-2}/t$; (7) $1.23 \times 10^{-2}/t$; (8) $1.19 \times 10^{-2}/t$; (9) $1.18 \times 10^{-2}/t$; (10) $1.0 \times 10^{-2}/t$

Fig. 5. (color online) The curve of dislocation position vs time under different shear strain, strain rate $\dot{\epsilon}$ (a) $5.0 \times 10^{-2}/t$, (b) $3.12 \times 10^{-2}/t$, (c) $1.52 \times 10^{-2}/t$, (d) $1.49 \times 10^{-2}/t$, (e) $1.19 \times 10^{-2}/t$, (f) $1.18 \times 10^{-2}/t$, (g) the curve of dislocation position vs time under different strain rate (1) $5.0 \times 10^{-2}/t$; (2) $3.23 \times 10^{-2}/t$; (3) $3.12 \times 10^{-2}/t$; (4) $2.0 \times 10^{-2}/t$; (5) $1.52 \times 10^{-2}/t$; (6) $1.49 \times 10^{-2}/t$; (7) $1.23 \times 10^{-2}/t$; (8) $1.19 \times 10^{-2}/t$; (9) $1.18 \times 10^{-2}/t$; (10) $1.0 \times 10^{-2}/t$.

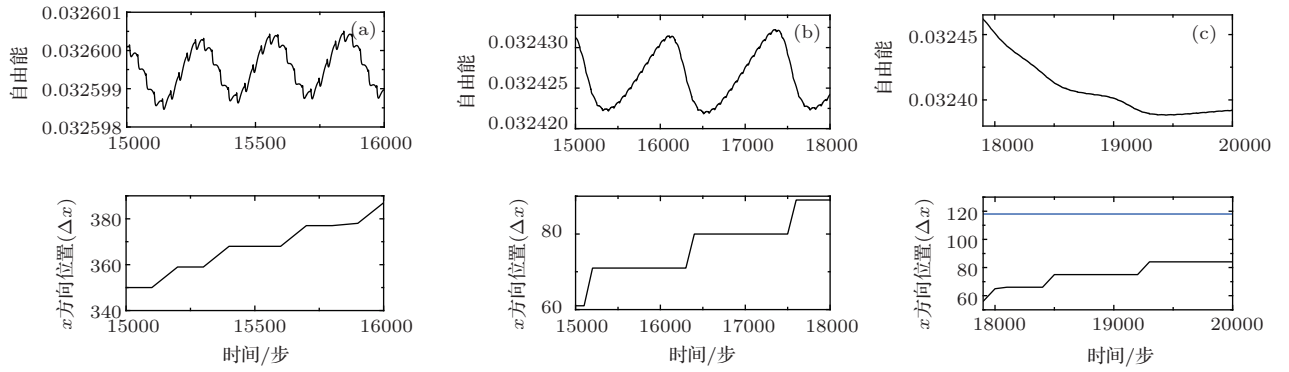


图6 在图4中的自由能曲线方框的放大图和对应的位错位置曲线 应变率 $\dot{\epsilon}$: (a) $3.12 \times 10^{-2}/t$; (b) $1.52 \times 10^{-2}/t$; (c) $1.49 \times 10^{-2}/t$

Fig. 6. The enlarged map of the free energy in the block of Fig. 4, and the corresponding position of dislocation, strain rate $\dot{\epsilon}$ (a) $3.12 \times 10^{-2}/t$, (b) $1.52 \times 10^{-2}/t$, (c) $1.49 \times 10^{-2}/t$.

表3 计算得到的平均应变值 γ_p 、临界应变率 $\dot{\gamma}_p$ 、位错平均滑移速度 ν_s 和能垒 $\Delta E_p^{\text{glide}}$

Table 3. Average strain γ_p , critical strain rate $\dot{\gamma}_p$, average sliding speed ν_s and energy barrier $\Delta E_p^{\text{glide}}$ by calculating.

$\dot{\epsilon}/t$	γ_p	$\dot{\gamma}_p/ts$	$\nu_s/gp \cdot ts^{-1}$	$\Delta E_p^{\text{glide}}$
5.0×10^{-2}	0.105	4.2×10^{-5}	55×10^{-3}	3.831×10^{-3}
3.12×10^{-2}	0.085	2.1×10^{-5}	36×10^{-3}	3.097×10^{-3}
2.0×10^{-2}	0.060	1.5×10^{-5}	12.5×10^{-3}	2.186×10^{-3}
1.49×10^{-2}	0.045	1.12×10^{-5}	7.5×10^{-3}	1.640×10^{-3}
1.19×10^{-2}	0.040	1.0×10^{-5}	2.5×10^{-3}	1.458×10^{-3}
1.0×10^{-2}	0.035	7.0×10^{-6}	1.33×10^{-3}	1.276×10^{-3}

gp: 表示格子单元; ts: 时间步.

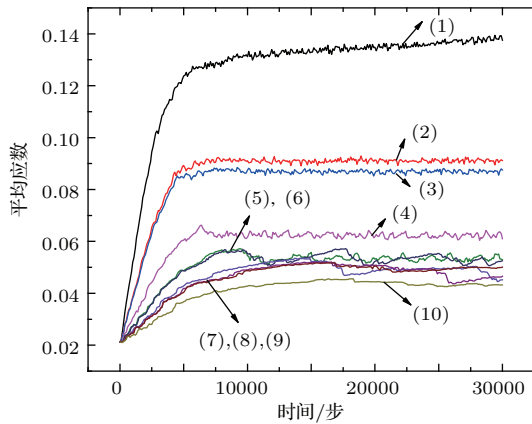


图7 (网刊彩色) 平均剪切应变 $\bar{\gamma}$ 随时间变化曲线 图中曲线的数字对应的应变率 $\dot{\epsilon}$ 如下: (1) $5.0 \times 10^{-2}/t$; (2) $3.23 \times 10^{-2}/t$; (3) $3.12 \times 10^{-2}/t$; (4) $2.0 \times 10^{-2}/t$; (5) $1.52 \times 10^{-2}/t$; (6) $1.49 \times 10^{-2}/t$; (7) $1.23 \times 10^{-2}/t$; (8) $1.19 \times 10^{-2}/t$; (9) $1.18 \times 10^{-2}/t$; (10) $1.0 \times 10^{-2}/t$

Fig. 7. (color online) Average shear strain $\bar{\gamma}$ vs time, strain rate $\dot{\epsilon}$ (1) $5.0 \times 10^{-2}/t$; (2) $3.23 \times 10^{-2}/t$; (3) $3.12 \times 10^{-2}/t$; (4) $2.0 \times 10^{-2}/t$; (5) $1.52 \times 10^{-2}/t$; (6) $1.49 \times 10^{-2}/t$; (7) $1.23 \times 10^{-2}/t$; (8) $1.19 \times 10^{-2}/t$; (9) $1.18 \times 10^{-2}/t$; (10) $1.0 \times 10^{-2}/t$.

由图4可见, 自由能-时间曲线可以明显地反映位错攀移运动引起的自由能变化, 而对于滑移运动引起的自由能变化, 只有在应变率不太大的情况下, 才能明显地反映周期的峰谷结构. 这些说明位错攀移克服的势垒较大, 较难启动攀移运动, 而滑移的阻力势垒较低, 这些特征与实验结果是完全符合的. 由图4(c)可见, 攀移的势垒高度大致是滑移势垒高度的5—8倍. 这是因为滑移运动只受到最近邻的原子影响, 而攀移运动需要克服多层原子的阻力. 由图3可见, 攀移大致受到5—8层原子的阻力.

由图7可见, 平均剪切应变-时间曲线在初始阶段可近似看成是线性关系, 经过一段时间后, 直线开始变弯曲, 转折点对应的平均应变值就相当于临界剪切应变值 γ_p . 由此可以求出临界剪切应变值 γ_p , 即位错滑移的Peierls势垒. 该应变临界值表示, 对应于施加的剪切应变率 $\dot{\epsilon}$ 位错滑移所能够克服的临界原子晶格势垒的大小. 由图7可见, 施加的 $\dot{\epsilon}$ 越大, 位错滑移所能克服的临界势垒 γ_p 就越

大. 通过求平均剪切应变曲线的线性初始阶段的斜率, 就可以得到作用在位错周围原子的平均应变率 $\dot{\gamma}_p$. 对图 7 的几种情况的应变曲线, 求出转折点对应的平均应变值 γ_p 和平均应变率 $\dot{\gamma}_p$, 结果分别列于表 3. 由图 7 可见, 位错要启动滑移, 需要一定的时间积累应变能量, 当应变达到临界值 γ_p 时, 位错才开始运动. 在越过势垒 γ_p 的过程中, 位错不断地释放能量, 因此, 应变曲线后期保持平稳状态. 图 5 的位错滑移的位置变化也反映了这些特征. 由图 7 中的第 5 到第 8 条曲线还可见, 对于外加应变率 $\dot{\epsilon}$ 较小时, 平均应变值 γ 的曲线在后期存在较大的波动, 这对应于位错的攀移过程. 由表 3 可见, 位错周围原子受到的平均剪切应变率 $\dot{\gamma}_p$ 与外加应变率 $\dot{\epsilon}$ 相比小 3 个量级, 说明外部施加的应变率 $\dot{\epsilon}$ 要比实际作用在位错周围原子的应变率 $\dot{\gamma}_p$ 要大得多. 由于对应于滑移能垒 $\Delta E_p^{\text{glide}}$ 的临界应变 [18,40,41] γ_p 可表示为

$$\gamma_p = \sqrt{\frac{6\Delta E_p^{\text{glide}}}{q_{\text{eq}}^4 A_0^2}}. \quad (12)$$

按照本模拟实验的设置条件, 取平均波矢 $q = 0.822$, $A_0 = 0.692$, $\rho_0 = 0.3642$, 利用 (12) 式计算得到对应于 γ_p 的无量纲滑移能垒 $\Delta E_p^{\text{glide}}$ 的大小, 结果列于表 3. 可见对应于施加的剪切应变率 $\dot{\epsilon}$ 越大, 位错所能够克服的临界滑移能垒也越大.

4.2 位错滑移的微观机理

对于图 4 至图 6 模拟的位错滑移运动的曲线特征, 可以应用位错微观滑移机理解释. 位错在低速运动状态具有黏滞滑动特征, 而在高速运动状态下转变成更具连续性运动的特点, 这是可以预想到的. 因为当剪切应力近似相等于是滑移应力时, 位错可以突破晶格势垒启动滑移运动. 在大的剪切应力 γ 作用下, 即 $\gamma \gg \gamma_p$ 情况, 晶格势垒 γ_p 的影响就变得次要了. 根据上节模拟实验的观察分析, 大致可将位错的滑移运动分为如下几种特征运动, 它们与 $\dot{\gamma}$ 有不同的依赖关系. 通常剪切应变率 $\dot{\gamma}$ 支配滑移运动的最大速率, 滑移速度与剪切应变率 $\dot{\gamma}$ 有如下关系 [18]:

$$v_s = \frac{\dot{\gamma}}{\rho_d \mathbf{b}}, \quad (13)$$

其中 ρ_d 是由体系尺寸决定的位错密度, \mathbf{b} 是柏氏矢量.

当施加较大的剪切应变率 $\dot{\epsilon}$ ($> 5.0 \times 10^{-2}$) 时, 位错运动会很快达到过阻尼范围, 邻近的原子层沿着 x 方向开始出现彼此相对的滑动, 很快达到以恒定速率运动的稳定状态. 这一过程具有刚性位移特征. 如图 4(a) 和图 5(a) 所示的情况, 这时位错的快速运动是做过阻尼滑移运动.

在中间值范围的 $\dot{\epsilon}$ ($5.0 \times 10^{-2} > \dot{\epsilon} > 3.12 \times 10^{-2}$), 位错会趋向连续滑移运动直至达到稳定速率. 对于施加剪切应变率的体系, v_s 的值由方程 (13) 定义, 这个速率可以通过 Orowan 方程 [42] 计算得到

$$\dot{\gamma}_{\text{plastic}} = \rho_d \mathbf{b} v_s. \quad (14)$$

这时滑移速度要求塑性变形释放应变与施加的应变率精确地符合. 这种情况对应于图 4(b) 和图 5(b).

对于较低的 $\dot{\epsilon}$ ($3.12 \times 10^{-2} > \dot{\epsilon} > 1.49 \times 10^{-2}$), 特别是在 $1.49 \times 10^{-2}/t \leq \dot{\epsilon} \leq 1.52 \times 10^{-2}/t$ 范围, 位错运动处于低速不连续运动状态, 表现出“颠簸”式的周期运动特征. 位错先是克服了 Peierls 势 γ_p , 滑移了一个短的距离后停止. 然后当应力累计到一定程度, 可以再次克服势垒之后, 重复循环之前的运动过程. 这种“颠簸”形式的周期运动, 每当位错滑移速度大于体系的速度 v_s 时, 就会发生. 位错滑移释放的应变率短暂地大于此时施加的应变率, 因此, 能量降低到 Peierls 势垒以下, 滑移停止, 直到应变能再次升高到足够大的值, 才能够再次滑移运动. 这种情况对应于图 4(c), (d) 和图 5(c), (d), 自由能曲线出现周期性的小峰谷结构. 在这种情况下, 晶格处于软化状态, 位错的运动具有黏滞滑移特征 [43]. 对于更低的 $\dot{\epsilon}$ ($< 1.49 \times 10^{-2}$), 外加剪切应变通过原子层的耦合, 无法达到启动位错滑移运动的临界应变值 γ_p . 因此, 尽管存在剪切应变作用, 位错仍保持静止不动, 如图 4(f) 和图 5(f) 所示. 以上位错运动特征与实验结果 [43] 相符合.

5 结 论

1) 针对位错的攀移和滑移运动, 构建包含剪切外力场与原子密度耦合的体系自由能密度函数, 建立剪切应变作用体系的晶体相场模型. 该模型能够很好地模拟双相双晶体系的位错攀移和滑移运动, 还能够计算位错滑移的 Peierls 势垒和滑移速度. 该模型所施加的剪切应变率能够做到与实际实验的应变率情况相符合.

2) 施加较大的剪切应变率作用, 位错滑移运动会很快达到过阻尼范围, 位错以恒定速度做连续滑移运动, 具有刚性运动特征; 剪切应变率较小时, 体系能量变化出现周期波动特征, 位错滑移运动是处于低速不连续运动状态, 运动出现周期“颠簸”式攀移或滑移运动, 具有黏滞运动特征; 位错启动运动, 存在临界的势垒. 位错启动攀移运动的Peierls势垒要比启动滑移Peierls势垒大几倍. 这些位错攀移和滑移运动特征与实验结果相符合.

参考文献

- [1] Xu H J, Liu G X 2001 *Fundamentals of Materials Science* (Beijing: Beijing Industry Press) pp265–279 (in Chinese) [徐恒均, 刘国勋 2001 材料科学基础 (北京: 北京工业出版社) 第 265—279 页]
- [2] Hu G X, Cai X 2010 *Fundamentals of Materials Science* (Shanghai: Shanghai Jiao Tong University Press) pp99–129 (in Chinese) [胡庚祥, 蔡珣 2010 材料科学基础 (上海: 上海交通大学出版社) 第 99—129 页]
- [3] Bobylev S V, Ovid'ko I A 2003 *Phys. Rev. B* **67** 132506
- [4] Ovidko I A, Skiba N V 2012 *Scripta Mater.* **67** 13
- [5] Gukkin M Y, Ovidko I A 2001 *Phys. Rev. B* **63** 064515
- [6] Gukkin M Y, Ovidko I A 2004 *Acta Mater.* **52** 3793
- [7] Zhang L, Wang S Q, Ye H Q 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2497 (in Chinese) [张林, 王绍青, 叶恒强 2004 物理学报 **53** 2497]
- [8] Moelans N, Blanpain B, Wollants P 2008 *Calphad* **32** 268
- [9] Wang Y, Li J 2010 *Acta Mater.* **58** 1212
- [10] Chen L Q 2002 *Annu. Rev. Mater. Res.* **32** 113
- [11] Steinbach I 2009 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **17** 73001
- [12] Gao Y J, Luo Z R, Hu X Y 2010 *Acta Metall. Sin.* **46** 1161 (in Chinese) [高英俊, 罗志荣, 胡项英 2010 金属学报 **46** 1161]
- [13] Luo B C, Wang H P, Wei B B 2009 *Sci. Bull.* **54** 7 (in Chinese) [罗炳池, 王海鹏, 魏炳波 2009 科学通报 **54** 7]
- [14] Wang J C, Li J J, Yang Y J 2009 *Sci. China E* **38** 16 (in Chinese) [王锦程, 李俊杰, 杨玉娟 2009 中国科学: E 辑 **38** 16]
- [15] Elder K R, Katakowski M, Haataja M, Grant M 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 245701
- [16] Elder K R, Grant M 2004 *Phys. Rev. E* **70** 51605
- [17] Elder K R, Provatas N, Berry J, Stefanovic P, Grant M 2007 *Phys. Rev. B* **75** 064107
- [18] Berry J, Grant M, Elder K R 2006 *Phys. Rev. E* **73** 31609
- [19] Ren X, Wang J C, Yang Y J, Yang G C 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 3595 (in Chinese) [任秀, 王锦程, 杨玉娟, 杨根仓 2010 物理学报 **59** 3595]
- [20] Gao Y J, Zhou W Q, Deng Q Q, Luo Z R, Lin K, Huang C G 2014 *Acta Metall. Sin.* **50** 886 (in Chinese) [高英俊, 周文权, 邓芊芊, 罗志荣, 林葵, 黄创高 2014 金属学报 **50** 886]
- [21] Berry J, Elder K R, Grant M 2008 *Phys. Rev. B* **77** 224114
- [22] Yu Y M, Rainer B, Axel V 2011 *J. Crystal Growth* **318** 18
- [23] Gao Y J, Huang L L, Deng Q Q, Lin K, Huang C G 2014 *Front. Mater. Sci.* **8** 185
- [24] Gao Y J, Luo Z R, Huang C G, Lu Q H, Lin K 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 050507 (in Chinese) [高英俊, 罗志荣, 黄创高, 卢强华, 林葵 2013 物理学报 **62** 050507]
- [25] Gao Y J, Luo Z R, Huang L L, Lin K 2013 *Chin. J. Non-ferrous Metals* **23** 1892 (in Chinese) [高英俊, 罗志荣, 黄礼琳, 林葵 2013 中国有色金属学报 **23** 1892]
- [26] Gao Y J, Wang J F, Luo Z R, Lu Q H, Liu Y 2013 *Chin. J. Comput. Phys.* **30** 577 (in Chinese) [高英俊, 王江帆, 罗志荣, 卢强华, 刘瑶 2013 计算物理 **30** 577]
- [27] Stefanovic P, Haataja M, Provatas N 2009 *Phys. Rev. E* **80** 046107
- [28] Chan P Y, Tsekenis G, Dantzig J 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 015502
- [29] Huang Z F, Elder K R, Provatas N 2010 *Phys. Rev. E* **82** 21605
- [30] Yang T, Zhang J, Long J, Long Q H, Chen Z 2014 *Chin. Phys. B* **23** 088109
- [31] Hakim V, Karma A 2009 *J. Mech. Phys. Solid* **57** 342
- [32] Toth G I, Tegze G 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 025502
- [33] Chan P Y, Tsekenis G, Dantzig J 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 015502
- [34] Muralidharan S, Heataja M 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 126101
- [35] Gao Y J, Luo Z R, Huang L L, Hu X Y 2012 *Acta Metall. Sin.* **48** 1215 (in Chinese) [高英俊, 罗志荣, 黄礼琳, 胡项英 2012 金属学报 **48** 1215]
- [36] Gao Y J, Zhang H L, Jin X, Huang C G, Luo Z R 2009 *Acta Metall. Sin.* **45** 1190 (in Chinese) [高英俊, 张海林, 金星, 黄创高, 罗志荣 2009 金属学报 **45** 1190]
- [37] Trautt Z T, Adland A, Karma A 2012 *Acta Mater.* **60** 6528
- [38] Zhang S 2013 *M. S. Dissertation* (Nanning: Guangxi University) (in Chinese) [张爽 2013 硕士学位论文 (南宁: 广西大学)]
- [39] Zhang J S 2004 *Strength of Materials* (Harbin: Harbin Institute Press of Technology) pp45–205 (in Chinese) [张俊善 2004 材料强度学 (哈尔滨: 哈尔滨工业大学出版社) 第 45—205 页]
- [40] Romanov A E, Vladimirov V J 1992 *Dislocation in Solids* (Vol. 9) (Amsterdam: North-holland) pp191–402
- [41] Hirth J P, Lothe J 1982 *Theory of Dislocation* (New York: Wiley) pp82–450
- [42] Derek H 1975 *Introduction to Dislocations* (Oxford, UK: Pergamon Press) pp50–250
- [43] Phillips R 2001 *Crystals, Defect and Microstructure*. (Cambridge, UK: Cambridge University Press) pp210–420

Phase-field-crystal simulation of edge dislocation climbing and gliding under shear strain*

Gao Ying-Jun^{1)†} Quan Si-Long¹⁾ Deng Qian-Qian¹⁾ Luo Zhi-Rong¹⁾²⁾
Huang Chuang-Gao¹⁾ Lin Kui¹⁾

1) (*Guangxi Colleges and Universities Key Laboratory of Novel Energy Materials, College of Physics Science and Engineering, Guangxi University, Nanning 530004, China*)

2) (*Institute of Physics Science and Engineering Technology, Yulin Normal University, Yulin 537000, China*)

(Received 15 July 2014; revised manuscript received 24 November 2014)

Abstract

Structural kinetics in crystalline solids is driven heterogeneously at an atomic level by localized defects, which in turn drive mesoscopic and macroscopic phenomena such as structural phase transformation, fracture, and other forms of plastic flows. A complete description of such processes therefore requires a multiscale approach. Existing modeling methods typically operate exclusively either on an atomic scale or on a mesoscopic scale and macroscopic scale. Phase-field-crystal model, on the other hand, provides a framework that combines atomic length scale and mesoacpoic/diffusive time scale, with the potential reaching a mesoacpoic length through systemic multiscale expansion method. In order to study the dislocation movement under shear strain, the free energy density functional including the exerting shear force term is constructed and also the phase field crystal model for system of shear stain is established. The climb and glide of single dislocation in two-grain system are simulated, and the glide velocity of dislocation and the Peierls potential for dislocation gliding are calculated. The results show that the energy curve changing with time are monotonically smooth under a greater shear strain rate, which corresponds to dislocation movement at a constant speed, which is of rigorous characteristic; while under less shear strain rate, the energy change curve of system presents a periodic wave feature and the dislocation movement in the style of periodic “jerky” for gliding with the stick-slip characteristic. There is a critical potential for dislocation starting movement. The Peierls potential wall for climbing movement is many times as high as that for gliding movement. The results in these simulations are in a good agreement with the experimental ones.

Keywords: dislocation glide, shear strain, Peierls potential, phase field crystal model

PACS: 61.72.Bb, 02.60.Cb, 68.35.-p, 81.40.Lm

DOI: 10.7498/aps.64.106104

* Project supported by the National Nature Science Foundation of China (Grant No. 51161003), the Nature Science Foundation of Guangxi Province, China (Grant No. 2012GXNSFDA053001), Ministry-Province Jointly-Constructed Cultivation Base for State Key Laboratory of Processing for Non-Ferrous Metal and Featured Materials of Guangxi, China (Grant No. GXKFJ12-01) and Education Innovation Foundation of Postgraduate of Guangxi, China (Grant No. YCSZ2014039).

† Corresponding author. E-mail: gaoyj@gxu.edu.cn