

高温应变下的晶界湮没机理的晶体相场法研究

高英俊 秦河林 周文权 邓芊芊 罗志荣 黄创高

Phase field crystal simulation of grain boundary annihilation under strain strain at high temperature

Gao Ying-Jun Qin He-Lin Zhou Wen-Quan Deng Qian-Qian Luo Zhi-Rong Huang Chuang-Gao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 106105 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.106105

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.106105>

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

数字剪切散斑干涉法研究铝合金中 Portevin-Le Chatelier 带的离面变形行为

Digital shearography investigation on the out-plane deformation of the Portevin-Le Chatelier bands

物理学报.2014, 63(6): 066201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.066201>

多晶银纳米线拉伸变形的分子动力学模拟研究

Molecular dynamics simulation of polycrystal silver nanowires under tensile deformation

物理学报.2014, 63(1): 016201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.016201>

累积轧制 Ti/Al 复合材料的微观结构演变和力学性能研究

The evolution of microstructure and mechanical properties of Ti/Al composite synthesized by accumulative roll-bonding

物理学报.2012, 61(18): 186104 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.186104>

析出相在铝镁合金 Portevin-Le Chatelier 效应中的作用研究

Effect of precipitation on Portevin-Le Chateliereffect in Al-Mg alloys

物理学报.2011, 60(9): 096201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.60.096201>

晶界对纳米多晶铝中冲击波阵面结构影响的分子动力学研究

Molecular dynamics investigation of shock front in nanocrystalline aluminum: grain boundary effects

物理学报.2011, 60(1): 016107 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.60.016107>

高温应变下的晶界湮没机理的晶体相场法研究*

高英俊[†] 秦河林 周文权 邓芊芊 罗志荣 黄创高

(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)

(2014年6月29日收到; 2014年11月30日收到修改稿)

应用晶体相场方法研究高温应变下的预熔化晶界位错湮没机理. 结果表明, 原预熔化晶界上的位错在应变作用下发生分离运动, 形成新晶界, 即亚晶界. 该过程的实质是生成了亚晶粒; 亚晶界的迁移过程的本质是亚晶粒长大、吞噬旧晶粒的过程; 亚晶界之间的湮没是亚晶粒完全吞噬旧晶粒过程的结束, 体系转变成成为单个晶粒结构. 根据原子密度序参数沿 x 和 y 方向的投影值随应变量的变化特征, 可以揭示出高温应变作用下, 预熔化亚晶界相遇湮没的本质是两对极性相反的偶极子位错对发生二次湮没, 该湮没的微观过程是通过位错连续二次滑移湮没而实现的, 其湮没的速率较低温时的湮没速率要小许多.

关键词: 晶界分解, 位错, 高温, 晶体相场模型**PACS:** 61.72.Mm, 62.20.F-, 81.05.Bx**DOI:** 10.7498/aps.64.106105

1 引言

现代材料的性能, 特别是超塑性材料、纳米晶材料和复合材料的性能极为依赖于其内部的界面位错结构^[1], 例如晶界和相界结构. 所有能够改变晶界和相界性质的过程都会极大地影响金属和陶瓷多晶材料的性能. 晶界结构的转变就是这一过程的重要体现. 晶界的研究一直是界面科学中最基本最活跃的领域, 晶界结构随高温温度的变化所发生的改变也是材料微结构与性能研究所关注的热点问题^[2,3], 特别是当体系温度接近熔点时, 由于晶界处的熔点温度低于完整晶粒的熔点温度, 会出现晶界预熔化现象^[4-10]. 最先报道的晶界的预熔化现象发生在偏聚的杂质原子的 Al 晶界上^[11], 之后又有报道^[9,12] 在 Cu 和 Ag 上发生晶界预熔化. 文献^[13] 还报道了 Cu-Bi 体系的晶体熔化转变实验, 发现形成液状的晶界, 有利于提升晶界原子的扩散. 晶界的预熔化转变有利于颗粒烧结的颈接过程^[3], 但不利于晶界的抗腐蚀性, 易出现晶界脆性^[14]. 晶

界预熔的出现对多晶材料的强度和断裂等力学行为以及热学现象都有重要的影响^[15]. 利用晶界预熔化的这些特性, 通过控制晶界组成、结构和相转变等性质来改造金属材料的性能是材料科学工作者的研究重点.

上述的预熔化现象是在高温情况下由于材料缺陷内部局域应力作用而出现的现象, 无须施加外应力作用. 最先通过施加外应力作用观察到晶界预熔化现象, 是由 Lnoko 等^[16,17] 报道的. 他们用透射电子显微镜 (TEM) 观察发现, 在整个退火实验的双晶 Cu 薄膜上, 当所施加的拉伸塑性变形达到 0.3 应变, 在温度约为 $0.5T_M$ 时就开始出现晶界预熔化 (GBPM) 现象. 同样, 在类似的变形 Ag 和 Ni 双晶薄膜上也出现了 GBPM 现象. 因此, Lnoko 等^[16] 将这种类型的 GBPM 称作为外应变诱发晶界预熔化 (SIGBPM). 由于 SIGBPM 被看作是在高温下对材料变形有着重要作用和影响, 例如对材料中的蠕变、超塑、中温脆性等影响. 因此, 开展应变诱发晶界预熔化作用研究, 对于蠕变、超塑、中温脆性的进一步研究具有重要意义.

* 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

目前的固体熔化理论模型^[10]主要有熔化的两相理论、Lindemann 熔化准则、力学不稳定判据、热弹性失稳判据和缺陷熔化判据等,但这些理论的应用还存在一定的局限性. 由于晶界通常只有几个原子层厚度,在现有的实验条件下很难直接观察到晶界预熔化现象,因此采用强大的计算机模拟技术可弥补实验的不足^[18]. 近期已有学者采用分子动力学(MD)方法^[19-21]或 Monte-Carlo 方法^[22,23]研究晶界在材料块体熔点附近的预熔化行为. MD 方法研究表明,施加外应变时,应变效应导致热力学熔点降低,促进表面熔化进程^[23]. 文献^[24]报道了应变对 Cu 金属的预熔化的作用,表明应变效应引起固相自由能增加是金属 Cu 表面热稳定性下降的主要因素. 由于 MD 方法所施加的应变作用,量级上往往与实际实验情况相差较大^[23],因此该方法存在一定的局限性. 应用传统相场方法,也有对晶界预熔化进行研究,但对晶界熔化的细节难以反映出来^[25,26].

近年来, Elder 等^[27,28]基于密度泛函理论提出了晶体相场模型(phase field crystal model, PFC),该模型能够在原子尺度和扩散时间尺度上模拟材料的微观结构转变和演化,具有较大的优势. PFC 模型自提出以来就得到了广泛应用和发展,已被用于材料的晶体外延生长^[29-31]、相结构转变^[32-34]、微裂纹扩展^[35]、位错的滑移和攀移^[36,37]、共格孪晶晶界结构^[38]、晶界预熔化^[39,40]、晶粒旋转^[41]、纳米晶变形过程等^[42]现象的研究. 目前,应用 PFC 方法研究高温下晶界和位错等缺陷的局部内应力作用下引起的晶界预熔化现象已有一些报道^[43-45],取得了一些有意义的结果^[43-48]. 但是,对于体系温度靠近熔点附近,并已存在稳定的预熔化或熔化结构的情况下,对该体系施加应变作用,此时的晶界位错等缺陷预熔化或熔化区域结构随施加应变作用的变化特征,目前还未见报道. 在作者前期工作的基础上^[40,49],本文采用 PFC 模型,研究高温应变下的晶界预熔化区域的演化过程,揭示该过程的晶界迁移特征,以及位错湮没过程的内在细节.

2 模型与方法

2.1 晶体相场模型

对于固态金属材料,其原子呈规则周期排列. 因此,要求相场变量必须能够反映原子周期性排列

的特征. PFC 模型通过引入具有周期结构特征的原子密度相场变量构建自由能密度函数^[28],能够揭示晶体学结构特性以及原子尺度的行为. 在引入周期性相场变量中,局域位置的最大值对应于原子的位置,而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. 按照这两方面要求,可用原子密度场函数作为相场变量,其表达式^[28]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,第二项反映液相的原子均匀无序特征,平均值为一个常量. 此时体系无量纲的自由能函数^[28]可以写成

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

式中, γ 是反映体系温度的参数, ∇^2 为 Laplace 算子.

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. 对于三角格子,倒格子基矢可以写成

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

对二维体系的极小自由能函数的解取单模近似,可得到平衡时固相三角格子的原子密度函数 ρ , 可近似写成^[28]

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

式中, A_0 是一个待定常数,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 为反映体系均匀无序相(例如液相、无序固溶相)的原子密度分布平均值. 将(4)式代入(2)式,对 A_0 和 q 分别求导数,求出极小能量函数 F_0 , 可写成

$$\begin{aligned} F_0 &= -\frac{1}{10}\gamma^2 + \left(\frac{1}{2} + \frac{7}{50}\gamma\right)\rho_0^2 - \frac{13}{500}\rho_0^4 \\ &+ \left(\frac{4}{75}\gamma\rho_0 + \frac{16}{125}\rho_0^3\right)\sqrt{-15\gamma - 36\rho_0^2}. \end{aligned} \quad (5)$$

求得振幅 A_0 的表达式为

$$A_0 = \frac{4}{5} \left(\rho_0 + \frac{1}{3} \sqrt{-15\gamma - 36\rho_0^2} \right), \quad (6)$$

其中, ρ_0 和 γ 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, 相区有均匀无序相 (即液相) 和固相, 且固相有三角晶格相和条状相两种, 文献 [28] 已给出均匀相和三角晶格相、条状相的极小自由能函数形式. 利用这些相的极小自由能函数, 再按照平衡相图的计算方法得到二维相图 [28,36].

保守的原子密度场变量的演化可用与时间相关的 Cahn-Hilliard 动力学方程 [49] 描述

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta \psi} + \zeta \\ &= \nabla^2 [\gamma \rho + \rho^3 + (1 + \nabla^2)^2 \rho] + \zeta, \end{aligned} \quad (7)$$

式中, ζ 为高斯随机噪声项, 具有零平均值. 在本文中不需考虑 ζ 的作用.

2.2 数值计算方法

为求解复杂的动力学方程 (7), 还必须将动力学方程在时间和空间上进行离散化处理, 即采用数值求解的办法. 对动力学方程 (7) 采用半隐式 Fourier 谱方法 [50] 求解, 其离散形式为

$$\begin{aligned} \frac{\rho_{\mathbf{k},t+\Delta t} - \rho_{\mathbf{k},t}}{\Delta t} \\ = -k^2 \{ [\gamma + (1 - k^2)^2] \rho_{\mathbf{k},t+\Delta t} + (\rho_{\mathbf{k},t})^3 \}. \end{aligned} \quad (8)$$

上式整理后得:

$$\rho_{\mathbf{k},t+\Delta t} = \frac{\rho_{\mathbf{k},t} - k^2 \cdot (\rho_{\mathbf{k},t})^3 \cdot \Delta t}{1 + k^2 \cdot [\gamma + (1 - k^2)^2] \cdot \Delta t}, \quad (9)$$

式中, $\rho_{\mathbf{k},t+\Delta t}$ 为 Fourier 空间 $t+\Delta t$ 时刻的原子密度, \mathbf{k} 为 Fourier 空间的波矢, k 为 \mathbf{k} 的模.

本文中晶体的原子排列点阵的演化主要由 (9) 式确定. 首先, 由 (4) 式设置晶体中原子密度 ρ 的初始分布, 然后, 进行 Fourier 变换, 求 \mathbf{k} 空间的波矢, 利用 (9) 式求 ρ 的演化规律; 最后, 把 ρ 从 \mathbf{k} 空间转换为 \mathbf{r} 空间, 从而显示 ρ 的图像, 即晶体中的

原子排列. 由此可以观察晶界结构中位错的运动及晶界的演变. 利用 (2) 式, 还可以计算体系自由能在晶界演化过程中的变化特征, 从能量角度对位错运动和晶界演化进行分析.

3 模拟区域设计和应变施加

3.1 模拟区域设计

为简单明了起见, 本文研究体系设置为双晶体系. 设置模拟区域的尺度范围为 $L_x \times L_y = 512\Delta x \times 512\Delta y$ 正方形, 满足周期边界条件. 将样品区域分为三个矩形区域: $0 < x < L_x/4$, $L_x/4 < x < 3L_x/4$, $3L_x/4 < x < L_x$. 然后, 应用 (4) 式, 在 $0 < x < L_x/4$ 和 $3L_x/4 < x < L_x$ 区域范围内, 设置晶粒取向角为 $\theta = 4^\circ$ (θ 为三角相原子面与 y 轴的夹角) 的三角晶格相结构; 在 $L_x/4 < x < 3L_x/4$ 范围内设置晶粒取向角为 $\theta = -4^\circ$ 的三角晶格相结构, 这样得到的单相双晶的晶界取向角之差为 8° . 同时, 为了形成稳定匹配的晶界, 在两晶粒之间设置一窄的液相带区域, 液相区宽度为 $d = 8\Delta x$, 经过一段时间的弛豫, 可形成稳定匹配的晶界.

模拟区域设置分为两个阶段: 第一阶段设置低温下的双晶模拟区域, 其参数分别选取表 1 中第一阶段所对应的参数值. 该阶段体系弛豫时间步长为 1×10^4 步, 此时双晶间设置的液相区迅速凝固形成稳定的晶界, 得到两个低温双晶模拟区域, 即样品 A_0 和 B_0 . 第二阶段将低温下所设置的双晶模拟区域 B_0 升高到指定温度. 在该高温阶段体系弛豫足够长时间, 直至体系达到热平衡状态, 即预熔化结构达到稳定状态, 得到高温模拟区域 B, 简称高温样品 B. 该阶段所对应的参数值如表 1 中第二阶段参数所示. 设置好的高、低温双晶模拟区域如图 1 (a), (b) 所示.

表 1 双晶模拟区域的设置参数

Table 1. Parameter of simulation region for bi-grain system.

Sample	Parameters of first stage at low temperature	Sample	Parameters of second stage at high temperature
A_0	$r = -0.30, \varphi_0 = -0.180$	—	—
B_0	$r = -0.30, \varphi_0 = -0.180$	B	$r = -0.10, \varphi_0 = -0.180$

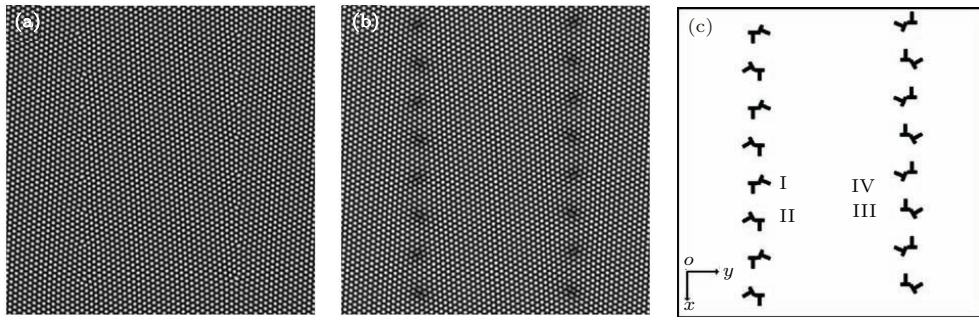


图1 不同温度下的预熔化晶界位错形貌图及其位错排列特征

Fig. 1. Grain boundary and dislocation structure with premelting region at different temperature: (a) sample A₀ at low temperature; (b) sample B at high temperature; (c) dislocation structure at grain boundary of the two samples.

3.2 应变的施加

施加应变于所设置好的高温晶界预熔化的双晶模拟区域B. 变形模拟过程中, 沿 x 方向施加拉应变, 沿 y 方向施加压应变. 设应变率为 $\dot{\epsilon}$, 则 x 方向的应变量为 $\epsilon_x(t) = \dot{\epsilon} \cdot n \cdot \Delta t$, y 方向的应变量为 $\epsilon_y(t) = -\dot{\epsilon} \cdot n \cdot \Delta t$, n 为时间步数. 变形采用等体积(面积)条件假设^[42,51]. 根据等体积条件假设

$$S = \Delta x \Delta y = \Delta x' \Delta y', \quad (10)$$

式中, Δx 和 Δy 为初始空间步长, $\Delta x'$ 和 $\Delta y'$ 为变形后的空间步长. 经过 n 个时间步长后, 空间步长为^[51]

$$\begin{aligned} \Delta x' &= \Delta x / (1 + n\dot{\epsilon}\Delta t), \\ \Delta y' &= \Delta y (1 + n\dot{\epsilon}\Delta t). \end{aligned} \quad (11)$$

由此可见, 在 x 方向上体系则受到一个拉应变作用, 在 y 方向上体系则受到一个压应变作用. 无量纲应变速率设为 $\dot{\epsilon} = 6 \times 10^{-6}$. 详细的二维拉伸变形模拟的数值算法见文献^[51].

4 结果与分析

4.1 预熔化晶界的位错结构

从图1(a), (b)的高温和低温模拟区域中的两列等倾对称晶界, 可以看到各列晶界由8个晶格位错对^[52]组成且排成一列, 同一列晶界处的相邻晶格位错对之间的Burgers矢量方向不同, 且其夹角约为 60° , 而晶界处相间隔的位错对的Burgers矢量则相同, 如图1(c)所示. 由此可见, 在同一晶界上有两种不同类型的晶界位错^[52](即晶格位错对)结

构, 不同列的晶界的晶格位错对的Burgers矢量彼此相反^[37,53]. 因此, 两列晶界共有四种不同类型的晶格位错对(分别用I, II, III和IV表示), 如图1(c)所示. 从图1(a)和(b)中可以看出, 低温A₀和高温B模拟区域的晶格位错对构基本相同, 所不同的是高温模拟区域B中的位错周围存在明显的预熔化特征^[54](图中黑色区域). 预熔化区域中的位错结构还能够从图1(b)中清楚地辨认, 表明该区域并没有熔化为纯液相, 固相结构仍然坚固, 但原子排列有序度有所下降. 为了更清晰地表示晶界的位错结构, 图1(c)给出了两列晶界的晶格位错对的排列. 下面对高温晶界预熔化模拟区域B施加应变作用, 观察晶界位错以及局部预熔化区域在应变作用下的运动和相互作用.

4.2 高温模拟区域B的位错运动

图2展示了高温模拟区域B在 x 轴方向施加拉应变和 y 轴方向施加压应变作用下, 晶界上的位错分离运动和生成的亚晶界湮没消失的演化过程. 由图2(a), (b)可见, 开始时, 体系是双晶结构. 在应变作用下, 晶界发生分解, 晶界位错开始向两边滑移, 由于同类型位错的滑移方向和速率相同, 使得做滑移运动的同类型位错始终位于同一条直线上, 这些从晶界滑移出来的位错直线排列可以看成为亚晶界. 因此, 形成了4条由位错对构成的亚晶界, 其位错Burgers矢量方向各不同. 分别用I, II, III和IV表示这四列亚晶界, 如图2(b)所示. 这4条亚晶界构成了四个晶粒的晶界, 这些晶粒的取向角分别为 4° , 0° , -4° , 0° , 其中, 取向角为 4° 和 -4° 的为原晶粒, 取向角为 0° 的晶粒为亚晶粒, 亚晶粒被原晶粒分隔开来, 如图2(c)所示. 例如, 亚晶界I和

II 之间, 亚晶界 III 和 IV 之间的晶粒就是新生成的亚晶粒, 两者的取向角相同都为 0° , 被原晶粒分隔开来, 与原晶粒的取向角为 4° . 在图 2(c) 中用 2 和 4 标出这两个亚晶粒, 而用 1 和 3 标出两个原晶粒. 这时, 体系由双晶结构转变成 4 晶粒结构, 其中有两个取向角为 0° 的亚晶粒. 并且, 随着应变的增加, 亚晶界滑移运动, 使得亚晶粒的面积不断扩大, 吞噬了原有的晶粒. 最后, 这两个亚晶粒的晶界相遇, 亚晶粒发生合并, 成为同一晶粒, 亚晶界湮没消失, 位错周围的预熔化区域也消失, 整个样品成为完整单晶粒结构.

可以从能量的角度分析位错对的运动和亚晶界湮没的过程. 由图 3(a) 的体系自由能曲线可见, 曲线明显分为四个阶段. 第一阶段是能量增加阶段, 对应的是晶界位错分离做攀移和滑移运动, 见图中的 a-b-c 段. 第二阶段是能量变化平缓阶段, 对应于曲线 c-d 段. 由图 2(d) 可见, 晶界分离出的 2 条亚晶界 II 和 III 的位错 Burgers 矢量异号, 这两列亚晶界位错相向滑移运动. 例如图 2(d) 中亚晶界 II 的位错对 A 与相向滑移的亚晶界 III 的位错对 B 和 C 的极性正好相反. 由于位错 A 和 B 的滑移方

向不在同一条直线上, 因此, 这两个异号 Burgers 矢量的位错靠近时会受到一个排斥的力矩作用 [54], 当这两个位错达到临界最近距离时, 则转化为彼此相互远离运动, 靠近的过程使得体系的能量增加; 由于位错 A 和 C 的滑移方向接近在同一条直线上, 因此, 滑移靠近到一定距离时, 彼此存在相互吸引作用 [54], 且这两个位错对的距离越近, 相互吸引越强. 由此引起位错畸变能的释放, 减小体系能量, 抵消了由于施加应变引起的体系应变能增加, 从而体系能量曲线会出现平缓阶段. 第三阶段是能量增加阶段, 由于高温应变作用下, 晶格发生局部软化, 使得位错对 A 与侧面的位错对 B 之间的相互排斥, 形成力矩作用, 引起局部预熔化区域的原子点阵发生扭转, 增加了畸变能, 使得体系能量增加, 见图 3 中曲线 d-e 段, 该过程如图 2(d), (e) 所示. 这一过程涉及三个位错 A, B 和 C 之间的相互作用. 第四阶段是体系能量迅速降低阶段, 对应的是正面相遇的亚晶界的滑移位错对 A 和 C 发生湮没, 完全释放畸变能, 预熔化区域消失, 体系能量降低到最小值, 见图 3(a) 中的能量曲线 e-f 段.

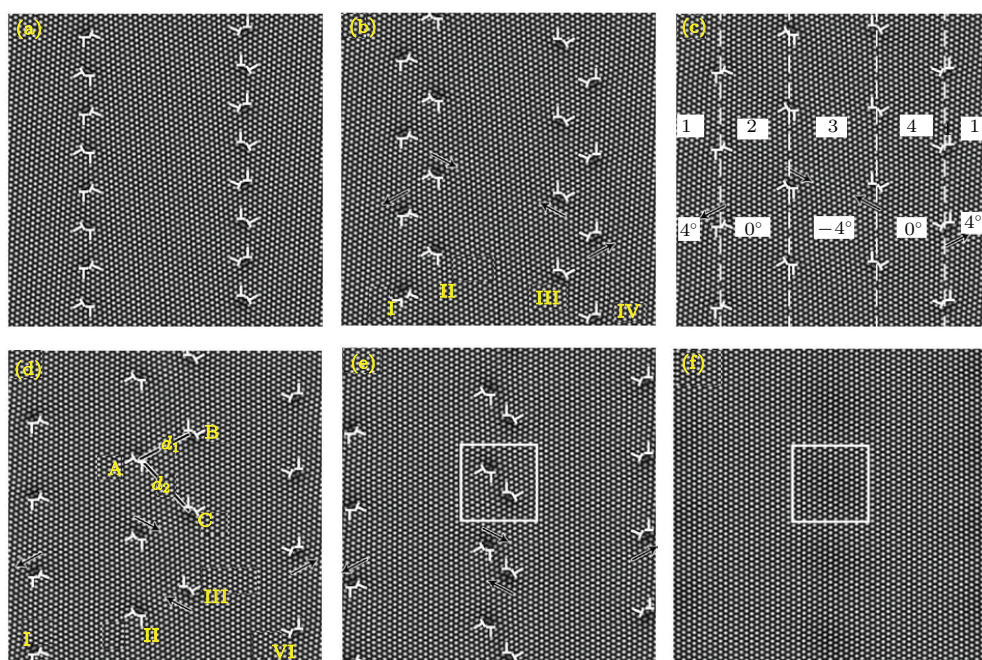


图 2 样品 B 在应变下晶界的位错运动与湮没过程

Fig. 2. Dislocation movement and annihilation of grain boundary under strain at high temperature for sample B. Strain: (a) 0.003; (b) 0.0294; (c) 0.0516; (d) 0.0582; (e) 0.0664; (f) 0.0732.

计算图 2(e) 中的方框内的偶极子位错对从相互滑移靠近到湮没的过程的能量变化曲线, 如图 3(b) 所示. 由该图可见, 相向滑移运动的位错

对在靠近的过程, 能量不断增加, 如图 3(b) 中曲线 a-c 段; 当靠近到一定距离时, 能量迅速增加, 如图 3(b) 中曲线 c-d 段. 当达到极大值后, 开始迅速

减少,如图3(b)中曲线e-f段,这一过程对应于相互靠近的位错开始发生湮没,释放畸变能,最后畸变消失,湮没完成.由图3(a),(b)可见,该能量曲线的峰较圆滑,不像在低温下的能量曲线的峰[36,37]

是尖锐的,原因是高温情况下,由于存在预熔化现象,使得位错反应时,出现位错扭转或转动,减缓了位错湮没的速度,使得能量释放速度较慢,从而形成的峰就变得较为钝化.

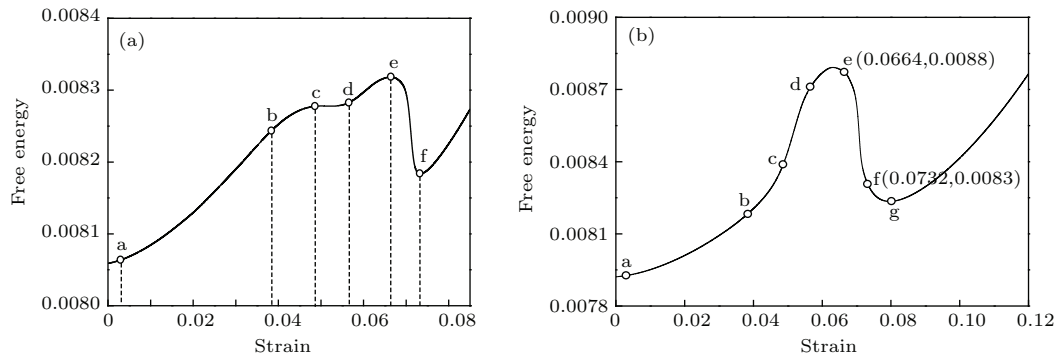


图3 (a) 样品B的自由能随应变的变化曲线; (b) 图2(e)中的方框内能量变化曲线

Fig. 3. (a) The curve of free energy change vs strain for sample B; (b) the curve of local free energy change in the white block of Fig.2.(e).

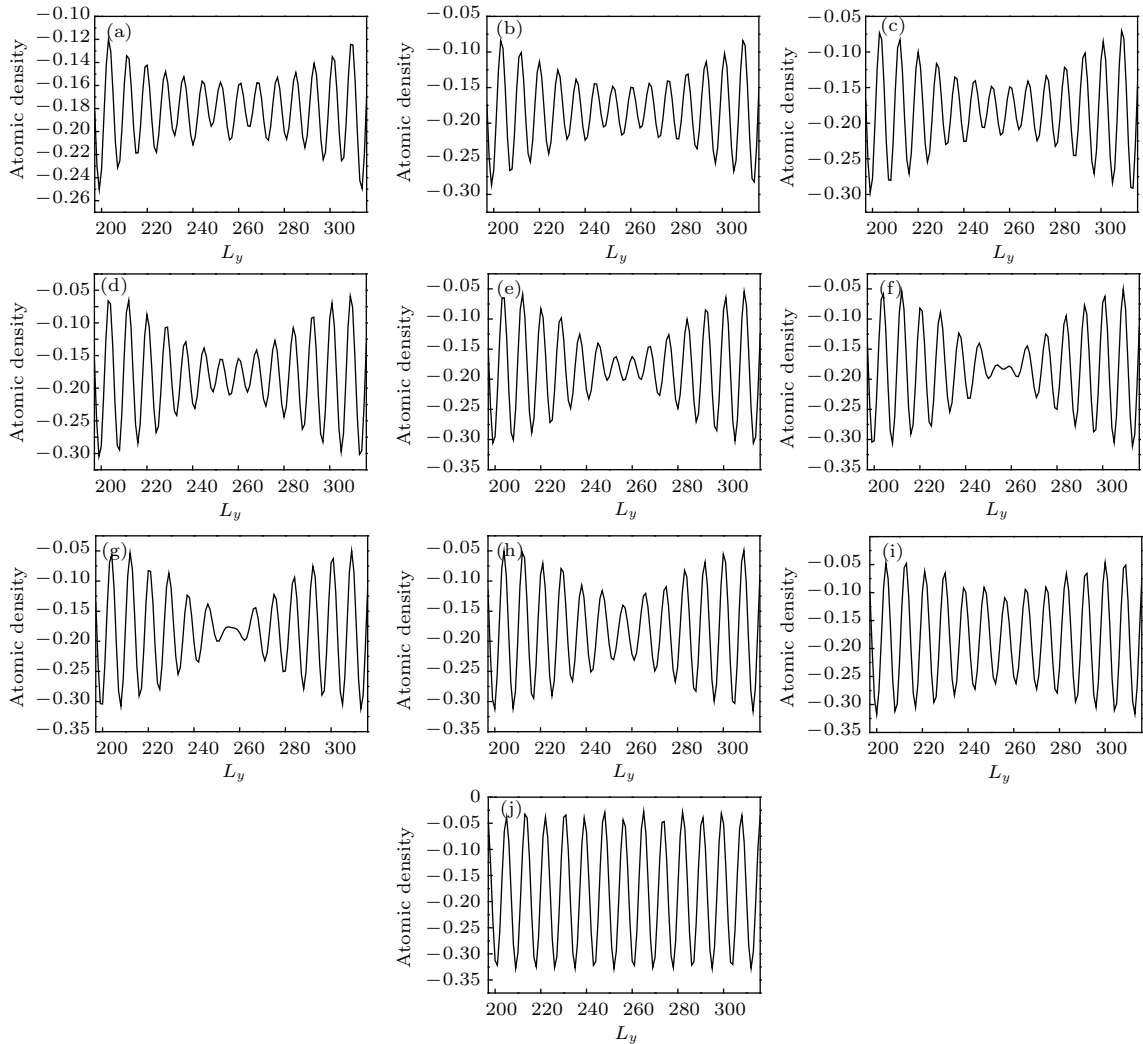


图4 在图2(e)中的白色方框区域内,沿x轴的原子密度分布曲线

Fig. 4. The atomic density distribution along the x axis in the white block region in Fig. 2.(e) : $\epsilon =$ (a) 0.048; (b) 0.0540; (c) 0.0564; (d) 0.0594; (e) 0.0612; (f) 0.0636; (g) 0.0642; (h) 0.0672; (i) 0.0690; (j) 0.0744.

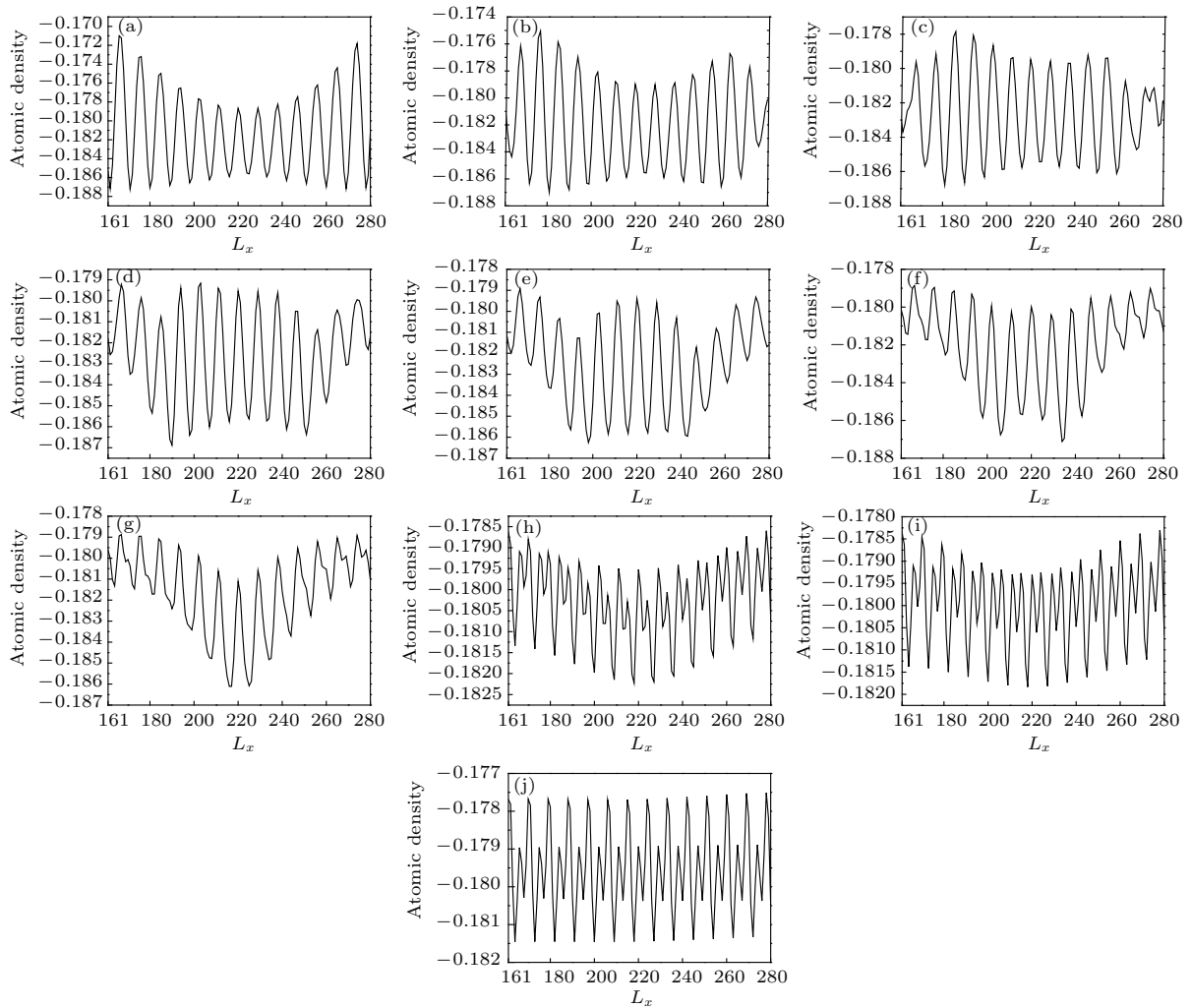


图5 在图2(e)中的白色方框区域内沿y轴的原子密度分布曲线

Fig. 5. The atomic density distribution along the y axis in the white block region in Fig. 2. (e): $\epsilon =$ (a) 0.048; (b) 0.0522; (c) 0.0576; (d) 0.0636; (e) 0.0660; (f) 0.0690; (g) 0.0708; (h) 0.0750; (i) 0.0768; (j) 0.0840.

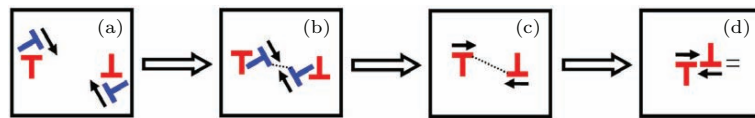


图6 (网刊彩色) 图2(e)中的白色方框内的偶极子位错对的二次湮没过程的示意图

Fig. 6. (color online) The sketch map of the two-step annihilation of polar dislocation in the white block in Fig. 2 (e).

4.3 高温预熔化的位错湮没的微观机理

在施加应变过程中, 预熔化晶界位错分离后, 形成若干亚晶界结构. 相向运动的亚晶界II和III, 是二列具有极性相反的位错对, 如图2(c)所示. 图4和图5分别给出了图2(e)中方框区域内的沿x方向和y方向投影的原子密度分布随施加应变变化的特征. 由图4(a)—(j)可见, 图2(e)中方框区域内原子密度沿x方向投影分布的变化分为两个阶段. 第一阶段如图4(a)—(g)所示, 由图4(a)可见

方框区域中心的原子密度振幅分布初始时较低, 两端的原子密度振幅较高, 这是因为两个相向滑移的位错对将要进入方框区域. 由于刃位错处的多余原子面排列方向的原子密度较高, 因此, 方框区域的原子密度分布是两端高, 中间低, 对应的位错位置如图2(d)所示. 随着位错的不断靠近, 两位错对逐渐进入图2(e)的方框区域内. 由图4(a)—(g)可见, 此时, 中心处的原子密度在不断降低, 这表明两位错对的不断靠近, 两位错对之间的中心区域晶格畸

变在不断加剧,这一过程对应于图3(a)的能量曲线b-c段.这时,相向滑移运动的两位错对连线中心处,原子排列有序度在 x 方向下降,这一过程对应于图3(a)的自由能曲线的c-d-e阶段,体系的畸变能增加.接着这两位错对进一步靠近,原子密度分布图发生了新的变化.此时,方框区域中心处的原子密度振幅开始增加,最后整个方框区域原子密度分布变成均匀分布,如图4(g)—(j)所示,这一过程为第二阶段.这表明,这两个位错对进入了湮没阶段,伴随着畸变特性也开始减弱,经过一段时间达到完全湮没,畸变区域也随之消失,样品成为完整单晶体结构.这一过程对应于图3(a)自由能曲线的e-f段,畸变能释放.

由图5的原子密度分布可见,密度变化可分为三个阶段.第一阶段为图5(a)—(d)所示,表示相向滑移运动的两位错对相距较远时,这两个位错对连线的中间区域沿 y 方向投影的原子密度振幅较低,而两端原子密度振幅分布较高,出现凹谷状,这与 x 方向的情况相似.随着这两个位错对靠近,原子密度分布在两端开始出现峰结构,如图5(b), (c)所示,这说明这两位错对进入了方框区域内.随着这两个位错对距离越来越近,原子密度分布的上包络线的两个峰的位置也越来越近,如图5(b)和(c)所示.接着这两个峰发生合并,原子密度分布从双峰结构变成了中心单峰结构,且两边形成两个谷结构,如图5(d), (e)所示.然而,这时的原子密度振幅分布的下包络线的两个峰的位置只是缓慢靠近,并没有发生合并,如图5(c)—(e)所示.这一阶段对应于柏氏矢量相反的位错对相互靠近,这两个位错对连线中心处的原子密度振幅不断提高,且密度振幅达到最大,而谷两端的振幅较小.这表明沿 y 方向的原子排列受到挤压变形作用,区域原子密度振幅增加,导致体系应变能增加,这一过程对应于能量曲线图3(a)的d-e阶段.对比图4(b)—(e),由于沿 x 方向,该区域的原子密度振幅是降低的,说明沿 x 方向原子排列是受到了拉伸应变作用,因此,这两个位错对靠近时,同时受到 x 方向的拉应变作用和 y 方向的压应变作用,相当于这两位错对连线区域内整体受到了一个扭转力矩作用.在该区域内部,原子排列将会发生适当的扭转或转动^[49].第二阶段如图5(e)—(g)所示,在应变的继续作用下,由图5(e)—(f)可见,随后原子密度分布的上包络线的单峰逐渐减弱,从单峰双谷结构逐渐变成单谷

结构,这一过程发生了第一次位错滑移湮没;此后,原子密度分布的下包络线的两个峰的位置开始逐渐靠近,直到合并成为单峰结构,整个原子密度分布图形成一个“V”字形的分布轮廓,如图5(f), (g)所示,这一过程发生了第二次位错滑移湮没.这时,中心处的原子密度最低,但密度振幅最大;而两端的原子密度分布最高,但密度振幅最小,表明中心处的原子有序度较低.这一过程对应于两个相向运动的位错对靠近后开始湮没的过程,释放畸变能,体系自由能开始下降,扭转力矩作用减弱.第三阶段为图5(h)—(j)所示,表示随着位错的湮没完成,中心处的原子密度逐渐增加,周围的原子密度分布降低,原子密度分布演化成均匀的周期分布,同时, x 和 y 方向的原子密度分布都趋于一致,亚晶界消失,成为单个晶粒结构.

图6给出了图2(e)中的白色方框内的偶极子位错对的连续二次湮没过程的示意图.图6(a)的位错对相互靠近,图5(a)—(c)的原子密度分布的变化特征反映出偶极子位错对正在彼此靠近;图6(b)的位错对相互作用,通过图5(d)—(f)的原子密度分布的变化特征,反映出位错发生第一次滑移湮没过程;图6(c)的位错对相互作用,通过图5(f), (g)的原子密度分布的变化特征,反映出位错发生第二次滑移湮没过程;图6(d)对应的是位错完成湮没的过程.图6给出的偶极子位错对的连续二次湮没过程的示意图,与图5(e)—(g)的原子密度分布的上下包络线变化的规律相符合,能很好地阐明偶极子位错对的湮没过程,实质是两对位错对之间的刃位错通过分解成两次滑移湮没过程而完成,与文献^[49]报道的高温位错滑移湮没情况有类似之处.因此,能很好地解释图3(a)自由能曲线的位错湮没的峰较为钝滑特征,而这在低温情况下是不容易出现的.

5 结 论

1) 高温应变下的预熔化晶界湮没过程,主要分为两个阶段特征:第一阶段是体系能量增加阶段,反映了应变作用下生成的亚晶界迁移,位错的攀移和滑移过程;第二阶段是体系能量降低阶段,反映了异号的亚晶界位错相互靠近吸引,发生湮没过程,但位错湮没的速率较慢,使得自由能曲线的峰结构较为钝滑.

2) 根据原子密度函数分布随应变量的变化特征, 可以反映出高温位错对的湮没过程的变化细节, 揭示出高温应变下的位错对的湮没过程, 实际上是通过分解为两次位错滑移湮没而完成的. 这一过程在低温下由于位错的湮没速率较快而不宜观察到.

参考文献

- [1] Straumal B B, Zieba P, Gust W 2001 *Int. J. Inorganic Mater.* **3** 1113
- [2] Straumal B, Kogtenkova O, Protasova S, Mazilkin A, Zieba P, Czeppe T, Wojewoda-Budka J, Faryna M 2008 *Mater. Sci. Engin. A* **495** 126
- [3] Luo J 2008 *Curr. Opinion Solid State Mater. Sci.* **12** 81
- [4] Alsayed A M, Islam M F, Zhang J, Collings P J, Yodh A G 2005 *Science* **309** 1207
- [5] Tallon J L 1978 *Nature* **276** 849
- [6] Bartis F J 1977 *Nature* **268** 427
- [7] Oxtoby D W 1990 *Nature* **347** 725
- [8] Pusey P N 2005 *Science* **309** 1198
- [9] Hsieh T E, Balluffi R W 1989 *Acta Metall.* **37** 1637
- [10] Lu K, Sheng H W, Jin Z H 1997 *Chin. J. Mater. Res.* **11** 654 (in Chinese) [卢柯, 生红卫, 金朝晖 1997 材料研究学报 **11** 654]
- [11] Chaudron G, Lacombe P, Yannaquis N 1948 *Comptes Rendus Hebdomadaires Des Seances De L Academie Des Sciences (Paris)* **226** 1372
- [12] Balluffi R W, Maurer R 1988 *Scrip. Metall.* **22** 709
- [13] Divinski S, Lohmann M, Herzig C, Straumal B, Baretzky B, Gust W 2005 *Phys. Rev. B* **71** 104104
- [14] Mu J W, Sun S C, Jiang Z H 2013 *Chin. Phys. B* **22** 037303
- [15] Wang N, Mokadem S, Rappaz M, Kurz W 2004 *Acta Mater.* **52** 3173
- [16] Inoko F, Okada T, Maraga T, Nakano Y, Yoshikawa T 1997 *Interf. Sci.* **4** 263
- [17] Inoko F, Hama T, Tagami M, Yoshikawa T 1991 *Ultra-microscopy* **39** 118
- [18] 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]
- [19] Williams P L, Mishin Y 2009 *Acta Mater.* **57** 3786
- [20] Frolov T, Mishin Y 2009 *Phys. Rev. B* **79** 174110
- [21] Keblinski P, Phillpot S R, Wolf D, Gleiter H 1997 *Acta Mater.* **45** 987
- [22] Besold G, Mouritsen O G 1994 *Phys. Rev. B* **50** 6573
- [23] Qi Y, Krajewski P E 2007 *Acta Mater.* **55** 1555
- [24] Wang H L, Wang X X, Liang H Y 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 4836 (in Chinese) [王海龙, 王秀喜, 梁海戈 2005 物理学报 **54** 4836]
- [25] Lobkovsky A E, Warren J A 2002 *Physica D* **164** 202
- [26] Mishin Y, Boettinger W J, Warren J A, McFadden G B 2009 *Acta Mater.* **57** 3771
- [27] Elder K R, Katakowski M, Haataja M, Grant M 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 245701
- [28] Elder K R, Grant M 2004 *Phys. Rev. E* **70** 051605
- [29] Yu Y M, Backofen R, Voigt A 2011 *J. Cryst. Growth* **318** 18
- [30] Elder K R, Rossi G, Kanerva P, Sanches F, Ying S C, Granato E, Achim C V, Ala-Nissila T 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 226102
- [31] Gao Y J, Huang L L, Deng Q Q, Lin K, Huang C G 2014 *Front. Mater. Sci.* **8** 185
- [32] 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]
- [33] Greenwood M, Rottler J, Provatas N 2011 *Phys. Rev. E* **83** 031601
- [34] Mkhonta S K, Elder K R, Huang Z F 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 035501
- [35] Gao Y J, Luo Z R, Huang L L, Lin K 2013 *Chin. J. Nonferrous 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]
- [36] Yang T, Chen Z, Dong W P 2011 *Acta Metall. Sin.* **47** 1301 (in Chinese) [杨涛, 陈铮, 董卫平 2011 金属学报 **47** 1301]
- [37] Gao Y J, Lu C J, Huang L L, Luo Z R, Huang C G 2014 *Acta Metall. Sin.* **50** 110 (in Chinese) [高英俊, 卢成健, 黄礼琳, 罗志荣, 黄创高 2014 金属学报 **50** 110]
- [38] Gao Y J, Wang J F, Luo Z R, Lu Q H, Liu Y 2013 *Chin. J. Computat. 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]
- [39] Mellenthin J, Karma A, Plapp M 2008 *Phys. Rev. B* **78** 184110
- [40] Gao Y J, Deng Q Q, Quan S L, Zhou W Q, Huang C G 2014 *Front. Mater. Sci.* **8** 176
- [41] Hirouchi T, Takaki T, Tomita Y 2009 *Computat. Mater. Sci.* **44** 1192
- [42] Takaki T, Tomita Y 2010 *Int. J. Mech. Sci.* **52** 320
- [43] Adland A, Karma A, Spatschek R, Buta D, Asta M 2013 *Phys. Rev. B* **87** 024110
- [44] Olmsted D L, Buta D, Adland A, Foiles S M, Asta M, Karma A 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 046101
- [45] Spatschek R, Adland A, Karma A 2013 *Phys. Rev. B* **87** 024109
- [46] Berry J, Elder K R, Grant M 2008 *Phys. Rev. B* **77** 224114
- [47] Spatschek R, Karma A 2010 *Phys. Rev. B* **81** 214201
- [48] Lu Y L, Mu H, Hou H X, Chen Z 2013 *Acta Metall. Sin.* **49** 358 (in Chinese) [卢艳丽, 牧虹, 侯华欣, 陈铮 2013 金属学报 **49** 358]
- [49] Gao Y J, Zhou W Q, Luo Z R, Lin K, Huang C G 2014 *Acta Metall. Sin.* **50** 886 (in Chinese) [高英俊, 周文权, 罗志荣, 林葵, 黄创高 2014 金属学报 **50** 886]
- [50] Cheng M, Warren J A 2008 *J. Computat. Phys.* **227** 6241
- [51] 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]
- [52] Hirth J P, Pond R C, Lothe J 2006 *Acta Mater.* **54** 4237
- [53] Long J, Wang Z Y, Zhao Y L, Long Q H, Yang T, Chen Z 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 218101 (in Chinese) [龙建, 王诏玉, 赵宇龙, 龙清华, 杨涛, 陈铮 2013 物理学报 **62** 218101]
- [54] Hirth J P, Lothe J 1968 *Theory of Dislocations* (New York: McGraw-Hill Inc. Press) pp250-350

Phase field crystal simulation of grain boundary annihilation under strain strain at high temperature*

Gao Ying-Jun[†] Qin He-Lin Zhou Wen-Quan Deng Qian-Qian
Luo Zhi-Rong Huang Chuang-Gao

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

(Received 29 June 2014; revised manuscript received 30 November 2014)

Abstract

Grain boundary (GB) research is always the most fundamental and active study field in interface science. Grain boundary premelting (GBPM) is induced as a consequence of local inner strain around defects in material at high temperature. When GB premelting is under an external stress, it is referred to as stress induced GBPM (SIGBPM). Owing to the fact that the width of a GB usually is a few atoms thick, it is difficult to observe the GBPM directly in experiment, thus the development of computational simulation experiment can make up for the shortcomings in experiment. For this reason, a new method which is named phase field crystal (PFC) model based on density functional theory is proposed. Because the method can be used to simulate the evolution of macroscopic structure of polycrystalline material on a diffusive time and atomic scale, therefore, PFC has a great advantage in simulating the evolution of microstructure. In this paper, PFC method is used to investigate the annihilation process of dislocation pairs of premelted grain boundary under strain at high temperature. Simulated results show that the essence of separation process of sub-GB (SGB) from original GB is that sub-grain structures are generated. The SGB migration is the process of the new grain swallowing up the old one. The annihilation process of GBPM under applied strain at high temperature can be divided into two stage features. The first stage is the stage of system energy increasing, which is corresponding to the process of SGB migration, dislocation gliding; the second stage is the energy decreasing, which corresponds to the interaction of SGBs and annihilation of dislocations, while the speed of annihilation in this process is slow and the peak of energy curve is wide and smooth. According to the changing process of the atomic density distribution projected along the directions of x and y axis with strain increasing, we can reveal that the nature of annihilation of double dislocation pairs at high temperature is the process of two-step annihilations, of which the detailed process is not easy to observe at low temperature due to its fast annihilating speed of dislocation pairs.

Keywords: grain boundary splitting, dislocation, high temperature, phase field crystal

PACS: 61.72.Mm, 62.20.F-, 81.05.Bx

DOI: [10.7498/aps.64.106105](https://doi.org/10.7498/aps.64.106105)

* Project supported by the National Nature Science Foundation of China (Grant Nos. 51161003), the Nature Science Foundation of Guangxi Province (Grant No. 2012GXNSFDA053001), the 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 the Education Innovation Foundation of Postgraduate of Guangxi, China (Grant No. YCSZ2014039).

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