

非对称倾侧亚晶界的晶体相场法研究*

鲁娜 王永欣† 陈铮

(西北工业大学, 凝固技术国家重点实验室, 西安 710072)

(2014年3月27日收到; 2014年5月17日收到修改稿)

采用晶体相场法研究非对称倾侧亚晶界结构及其在应力作用下的微观运动机制. 分别从温度、倾斜角度以及应力施加方向等方面对其结构及迁移过程进行分析和讨论. 结果表明, 非对称倾侧亚晶界由符号相同的一排刃型位错等距排列, 部分出现由两个相互垂直排列的刃型位错构成的位错组; 在应力作用下, 非对称倾侧亚晶界迁移的微观机制包括位错的滑移和攀移、位错组分解、单个位错与位错组反应、单个位错分解以及位错湮灭; 温度降低和倾斜度增大都会阻碍亚晶界的迁移过程; 应力方向改变导致位错运动方向改变, 从而改变晶界迁移形式.

关键词: 晶体相场, 亚晶界, 非对称倾侧

PACS: 05.70.Np, 07.05.Tp

DOI: 10.7498/aps.63.180508

1 引言

亚晶界是晶体中具有较小取向差角(小于 15°)的两相邻晶块间的界面. 金属晶体材料在形变和回复再结晶过程中, 位错往往进行长程排列形成亚晶界^[1,2]. 亚晶界可以分为对称倾侧型、非对称倾侧型以及扭转型. 亚晶界在外力作用下进行迁移, 其结构不断变化, 对材料的力学性能以及微观组织有很大影响^[3]. 利用实验手段很难观测到亚晶界上位错的具体运动形式, 尽管可以利用分子动力学方法对晶界及位错进行模拟^[4-6], 但它会受到时间尺度的限制, 其模拟结果并不能有效反映实际材料中的微观组织变化.

Elder等^[7,8]提出的晶体相场法, 能够描述扩散时间尺度和原子尺度上的各种由晶体周期性所决定的性质, 如多重晶粒取向、晶界、弹性性能以及缺陷等, 已经被广泛地用于研究凝固^[9]、条幅分解^[10,11]、薄膜生长^[12]等现象. 杨涛等^[13]利用该模型研究了应力作用下对称倾侧亚晶界的湮灭过程, 而对非对称倾侧亚晶界的研究尚未见到相关报道.

本文采用晶体相场法中的双模晶体相场模型研究非对称倾侧亚晶界的结构及在应力作用下的微观运动机制, 分别从温度、倾侧角以及应力施加方向等方面对其结构及演化规律进行分析, 并讨论各因素对亚晶界迁移过程的影响作用.

2 模拟方法

2.1 双模晶体相场模型

双模晶体相场模型以无量纲的晶体密度场 $\rho(\mathbf{x}, t)$ 作为序参量, 来构造自由能函数. ρ 表示局域原子密度, 具有周期性, \mathbf{x} 为空间位置, t 为时间. 液相中的所有密度场序参量的值均一, 在固相中 ρ 的最大值代表原子位置. 自由能是密度场 ρ 的函数, 最终形式为

$$F = \int d\mathbf{x} \left\{ \frac{\rho}{2} \left[-r + (\nabla^2 + 1)^2 [(\nabla^2 + Q_1^2)^2 + R_1] \right] \rho + \frac{\rho^4}{4} \right\}, \quad (1)$$

式中, r 为无量纲过冷度; R_1 为控制模型稳定性的参量; Q_1 是与晶体相结构相关的常数; ∇^2 为拉普

* 国家自然科学基金(批准号: 51274167, 51174168)和陕西省自然科学基金(批准号: 2014JM7261)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: wangyx818@126.com

拉斯算子. 本文用该模型模拟正方相结构, 所以 $Q_1 = \sqrt{2}$. 为简化, $R_1 = 0$.

无量纲的动力学方程为

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta \rho} \\ &= \nabla^2 \left\{ \rho \left[-r + (\nabla^2 + 1)^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \times [(\nabla^2 + Q_1^2)^2 + R_1] \right] + \rho^3 \right\}. \end{aligned} \quad (2)$$

据 Wu 等 [14,15] 推导, 对密度场进行双模近似得到正方相原子密度为

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{x}) &\approx \bar{\rho} + 2 \times A(\cos x + \cos y) \\ &\quad + 4 \times B(\cos x \times \cos y), \end{aligned} \quad (3)$$

式中 $\bar{\rho}$ 为平均原子密度; A 和 B 可以通过对自由能最小化求得.

在该模型中, 不同的参数取值会得到不同的周期相, 通过正方相和液相的自由能对密度场分别求导, 运用公切线法则, 就可以求出两相共存区, 得到图 1 所示的正方相和液相的相图.

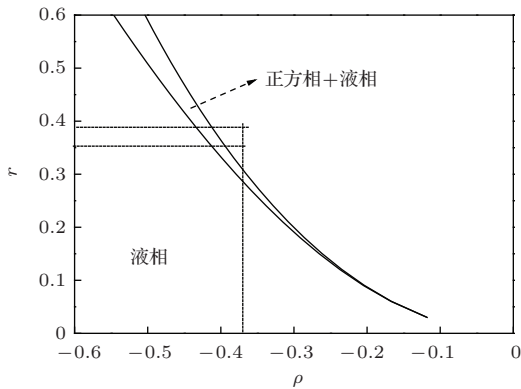


图 1 晶体相场模型的二维相图

2.2 数值计算与参数设置

本文采用半隐式傅里叶谱方法 [13] 求解双模运动方程, 其离散形式为

$$\begin{aligned} \frac{\hat{\rho}_{n+1} - \hat{\rho}_n}{\Delta t} &= -k^2 \times \left\{ \left\{ -r + (-k^2 + 1)^2 [(-k^2 + Q_1^2)^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + R_1] \right\} \hat{\rho}_{n+1} + \hat{\rho}_n^3 \right\}, \end{aligned} \quad (4)$$

式中, $\hat{\rho}$ 表示密度场 ρ 的傅里叶变换; $k^2 = |\mathbf{k}^2|$, 表示傅里叶空间的波矢; $Q_1 = \sqrt{2}$; $R_1 = 0$.

本文以正方相为研究对象, 采用周期性边界条件, 计算区域大小为 $512\Delta x \times 512\Delta y$, 空间步长为 $\Delta x = \Delta y = \frac{\pi}{4}$, 时间步长 $\Delta t = 0.5$. 取向

差角 θ 和倾斜度角 φ 之间满足关系: $\theta = \theta_1 - \theta_2$ 和 $\varphi = \frac{\theta_1 + \theta_2}{2}$. 通过控制使得 $0 < x < L_x/4$ 和 $3L_x/4 < x < L_x$ 范围内取向为 θ_1 , 在 $L_x/4 < x < 3L_x/4$ 范围内为 θ_2 , 其中 $0 < y < L_y$, 最终得到具有一定取向的非对称倾侧亚晶界. 通过改变无量纲过冷度 r 、倾斜度角 φ 的大小及拉伸方向来研究这些因素对非对称倾侧亚晶界运动过程的影响.

在拉伸变形过程中, 采用等体积变形法 [16], 变形前后空间步长满足

$$\begin{cases} \Delta y' = (1 + \varepsilon)\Delta y = \Delta y + n\varepsilon\Delta y\Delta t \\ \Delta x' = \frac{\Delta x\Delta y}{\Delta y'} = \frac{\Delta x}{1 + n\varepsilon\Delta t} \end{cases}, \quad (5)$$

式中, 应变量 $\varepsilon = \dot{\varepsilon}n\Delta t$, $\dot{\varepsilon}$ 为无量纲的应变速率, 本文取 $\dot{\varepsilon} = 6 \times 10^{-6}/\Delta t$; n 为时间步长; Δx 和 Δy 为变形前的空间步长, $\Delta x'$ 和 $\Delta y'$ 为变形后的空间步长, 满足 $\Delta y' = \frac{\Delta x\Delta y}{\Delta x'}$.

3 结果与分析

3.1 亚晶界位错组态

按照本文 2.2 中所述参数设置方法, 取温度参量 $r = 0.35$, 取向差角 $\theta = 8^\circ$, 倾斜度角 $\varphi = 15^\circ$. 模拟得到如图 2 所示的正方相原子结构图, 非对称倾侧亚晶界的位错排列及分布方式. 可以发现非对称倾侧亚晶界由符号相同的一系列刃型位错等距排列, 由于倾斜度角的存在, 为降低界面能使晶界变得更加稳定, 部分出现两个相互垂直排列的刃型位错构成的位错组; 组成位错的半原子面均终止于晶界上; 在二维情况下, 位错芯由图中的白色三角形符号代表; 相邻晶粒同一晶向之间的夹角即为取向差角 θ .

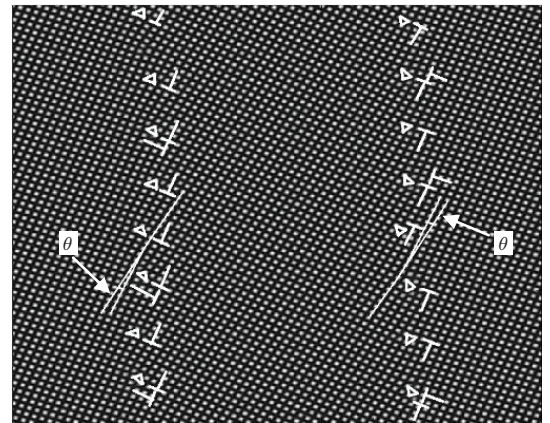


图 2 非对称倾侧亚晶界结构 ($\theta = 8^\circ$, $\varphi = 15^\circ$, $r = 0.35$)

3.2 亚晶界位错运动过程

合金经过塑性变形后产生的亚晶粒在外加应力的作用下,亚晶界上的位错会通过运动进行迁移,最终发生湮灭而消失.本节将从位错运动和能量变化两个角度分别对变形过程中非对称倾侧亚晶界的微观运动机制进行分析.参数选取同3.1节,在 X 轴方向上施加拉伸应力.

图3为在 X 方向拉应力作用下非对称倾侧晶界上位错的运动和湮灭过程,箭头表示位错的运动方向.如图3(a)所示,在应力作用下,晶界上的刃位错克服晶界阻力进行滑移和攀移,离开亚晶界,向两侧晶粒内部运动,而位错组则沿着晶界发生攀移;随着应变继续增加,使得部分位错组也能够克服晶界阻力,分离亚晶界,位错组其中一个位

错与其他晶界位错进行相同方向上的滑移和攀移,而与其垂直的位错则进行另一方向的滑移和攀移,如图3(b)中方框内所示,其余位错组较稳定,沿晶界进行特定方向的滑移和攀移;分离出来的位错进入亚晶内部,继续滑移和攀移,如图3(c)中方框内所示,单个的位错与位错组相遇发生反应,异号位错相互抵消,最终形成另一位错(如图3(d)方框内所示);应变继续增加,达到一定的几何和能量条件后,能量较高的位错变得不稳定,分解为多个小位错,如图3(e)中方框内所示,分解后的位错按照箭头所示方向进行滑移和攀移,异号的两个位错相遇,再次发生反应,相互抵消(图3(f)方框内所示),剩余的位错继续滑移和攀移;其他位错在达到条件后,也开始分解,进行3(e)和3(f)中所示运动过程,随着应变增加,新的位错又开始分解,相遇而发生

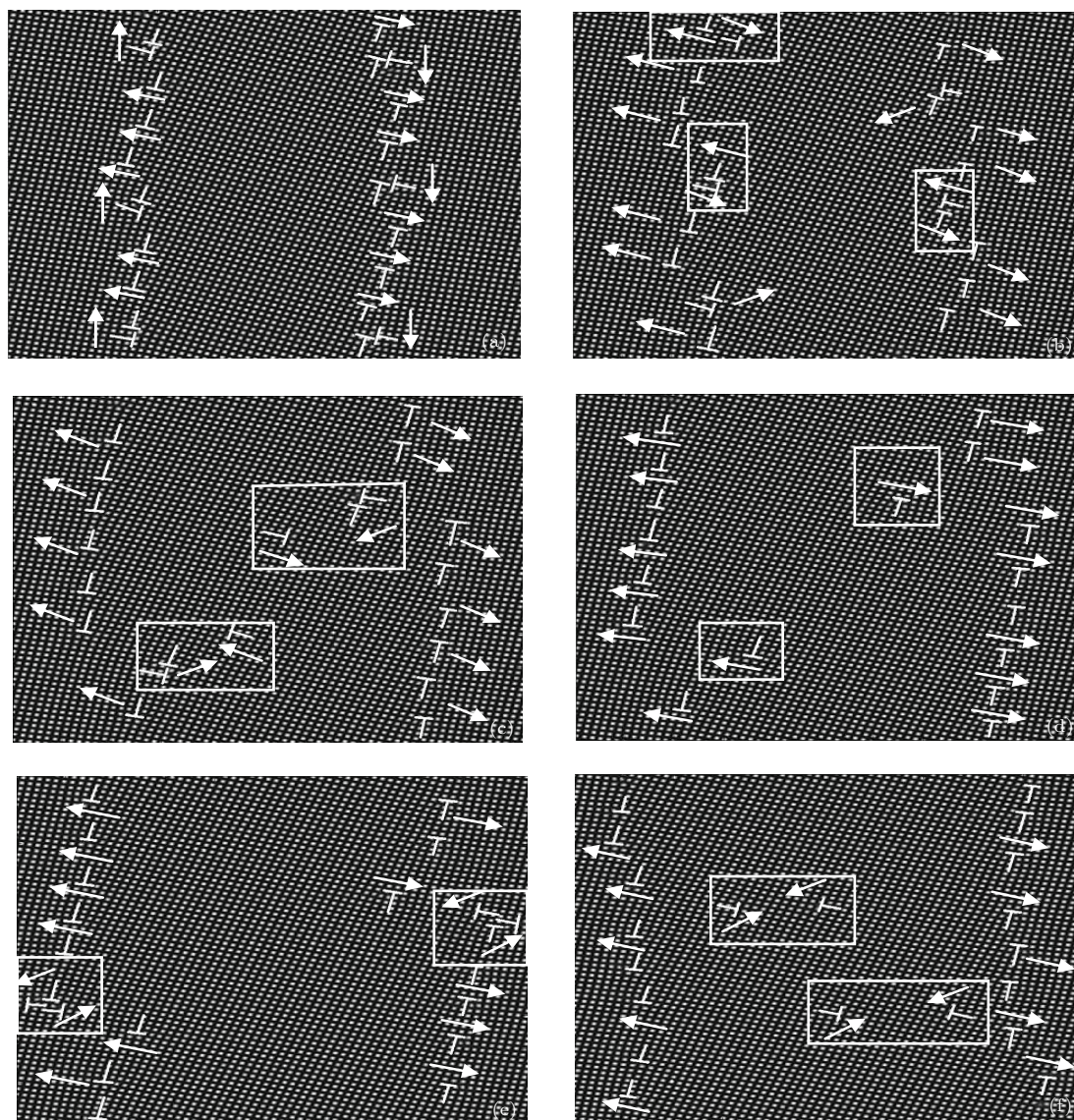


图3 $\theta = 6^\circ, \varphi = 15^\circ, r = 0.35$, x 轴向拉伸时非对称倾侧亚晶界运动过程 (a) $\varepsilon = 0.00462$; (b) $\varepsilon = 0.02868$; (c) $\varepsilon = 0.04626$; (d) $\varepsilon = 0.05298$; (e) $\varepsilon = 0.06294$; (f) $\varepsilon = 0.8622$

反应, 不断重复此过程, 直到位错全部消失, 形成一个完整的晶粒, 位错湮灭最终完成.

分析图4中的应变-自由能曲线, 最初, 体系吸收应变能使得自由能升高, 随着位错运动阻力越来越大, 畸变能也越来越大, 当 $\varepsilon = 0.032$ 时, 自由能到达峰值, 接着部分位错组不稳定开始分离(图3(b)), 能量释放使得体系自由能随之下降; 分离的位错相互吸引, 引起位错周围区域的畸变能增加, 使得体系自由能升高; 位错一旦相遇发生反应(图3(c)), 畸变能又得到释放, 由于位错运动到亚晶粒内部, 体系的界面能也有所降低, 但这些能量的降低不足以抵消系统吸收的应变能, 自由能曲线出现第二次降低; 所有位错只能进行滑移和攀移(图3(d)), 自由能继续升高; 当 $\varepsilon = 0.06294$ 时, 单个位错开始分解(图3(e)), 体系自由能降低; 分解后的位错在相遇之前同样会引起区域畸变能升高, 使得自由能增大; 当 $\varepsilon = 0.08616$ 时, 两异号位错相遇发生反应而湮灭, 自由能下降, 出现第三次降低; 而其他位错分步进行分解, 发生反应, 如此重复, 自由能也降低一升高一降低, 呈现出多个波峰和波谷交替的现象; 直到所有位错消失, 体系无法释放吸收的应变能, 自由能持续增大.

3.3 影响因素

3.3.1 温度的影响

降低温度, 取温度参量 $r = 0.38$, 得到图5所示的亚晶界迁移过程. 与图3对比发现, 由于攀移是原子扩散的过程, 温度降低导致攀移受到抑制, 单个位错及位错组攀移变得更加困难. 与图3不同的是, 位错组并不是同步发生分离, 应力集中处的位错组首先发生分离, 如图5(a)中所示位错组B和C, 先于位错组A和D分离, 这说明位错组B和C的能量高于A和D, 增加应变位错组A和D才开始

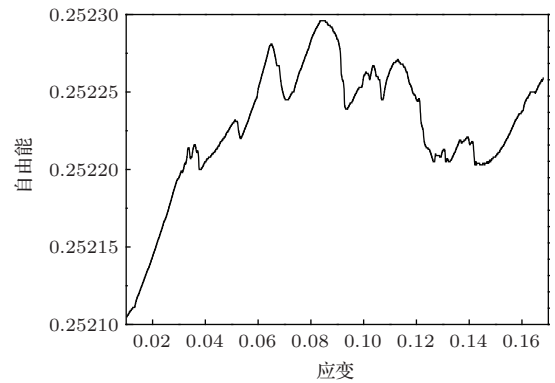


图4 应变-自由能曲线 ($\theta = 6^\circ, \varphi = 15^\circ, r = 0.35, x$ 轴向拉伸)

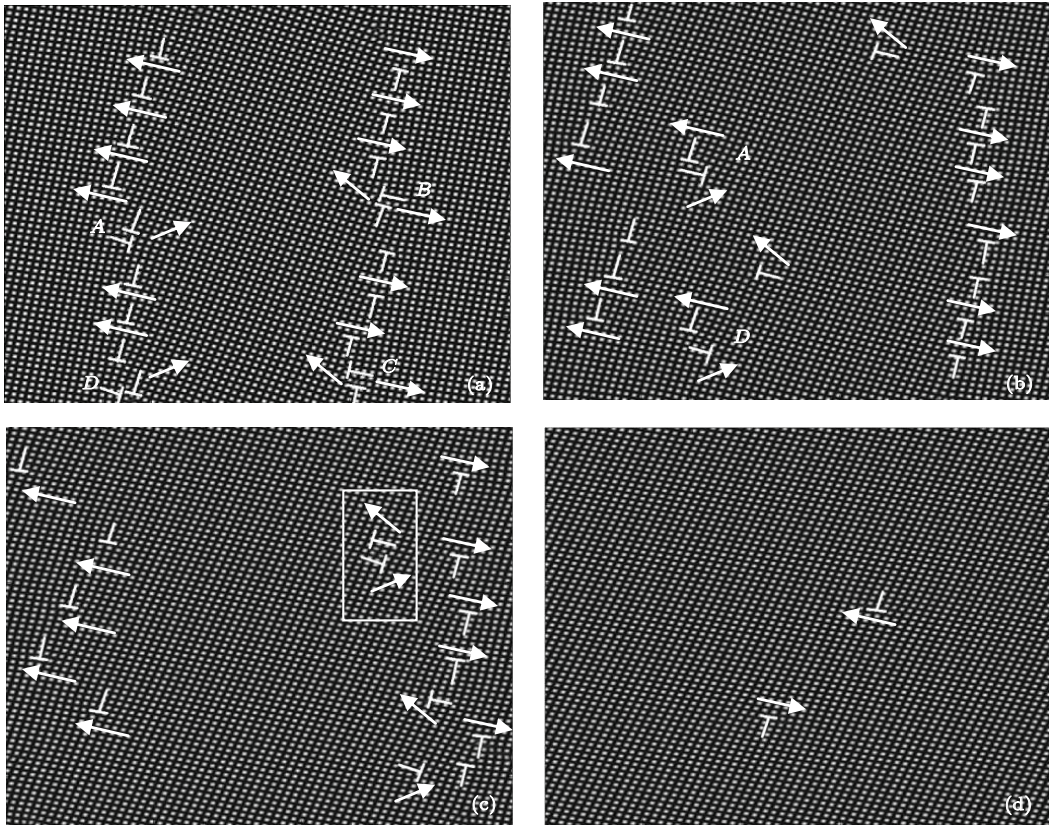


图5 $\theta = 6^\circ, \varphi = 15^\circ, r = 0.38, x$ 轴向拉伸时非对称倾侧亚晶界运动过程 (a) $\varepsilon = 0.00468$; (b) $\varepsilon = 0.0507$; (c) $\varepsilon = 0.0825$; (d) $\varepsilon = 0.165$

分离(图5(b)), 而位错组B和C分离后的单个位错已经进入亚晶粒内部; 异号的两个位错相遇发生反应而抵消(图5(c)), 不能相遇的位错沿着特定方向进行滑移和攀移出晶粒(图5(d)), 最终缺陷消失, 形成完整的晶粒.

分析图6, 与较高温度不同的是: 1) 位错组的分离是分步进行的, 使得每一次释放的能量不足以抵消体系吸收的应变能, 造成自由能变化很缓和; 2) 单个位错与位错组没有进行反应, 也不再分解, 而是直接滑移和攀移出晶粒, 导致自由能没有急剧变化, 出现多个波峰和波谷交替的现象.

3.3.2 倾斜度角的影响

改变倾斜度角, 取 $\varphi = 30^\circ$, 得到图7所示的亚晶界迁移过程. 与较小倾斜度的晶界迁移过程对比发现: 1) 晶界上的位错组更多(图7(a)), 由于初始能量不同, 位错组并不是同步发生分离; 2) 两晶界上的单个位错相互吸引, 进行滑移和攀移进入亚晶粒内部, 异号位错相遇, 发生反应而抵消, 如图7(b)和7(c)中方框内所示, 不在同一滑移系的异号位错滑移和攀移出晶粒, 如图7(b)和7(c)中的A, B位错; 3) 亚晶界的运动演化过程变慢, 位错

组的分离激活能较高, 部分位错组直到应变增加到较大时, 才开始分离(图7(c)); 4) 由图8中的应变-自由能曲线得到, 演化到中期, 大部分位错组已经分离, 异号位错发生反应, 位错滑移和攀移出晶粒, 释放大量的能量, 位错减少, 体系畸变能降低, 这些能量的降低足以抵消应变能的增加, 使得体系自由能降低到最小值.

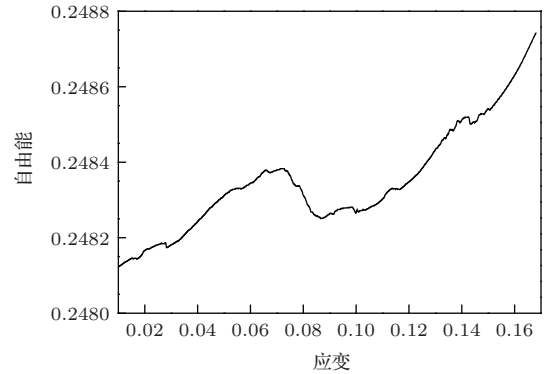


图6 应变-自由能曲线 ($\theta = 6^\circ, \varphi = 15^\circ, r = 0.38, x$ 轴向拉伸)

3.3.3 拉伸方向的影响

将 x 轴向拉伸改为 y 轴方向, 应变速率不变, 得

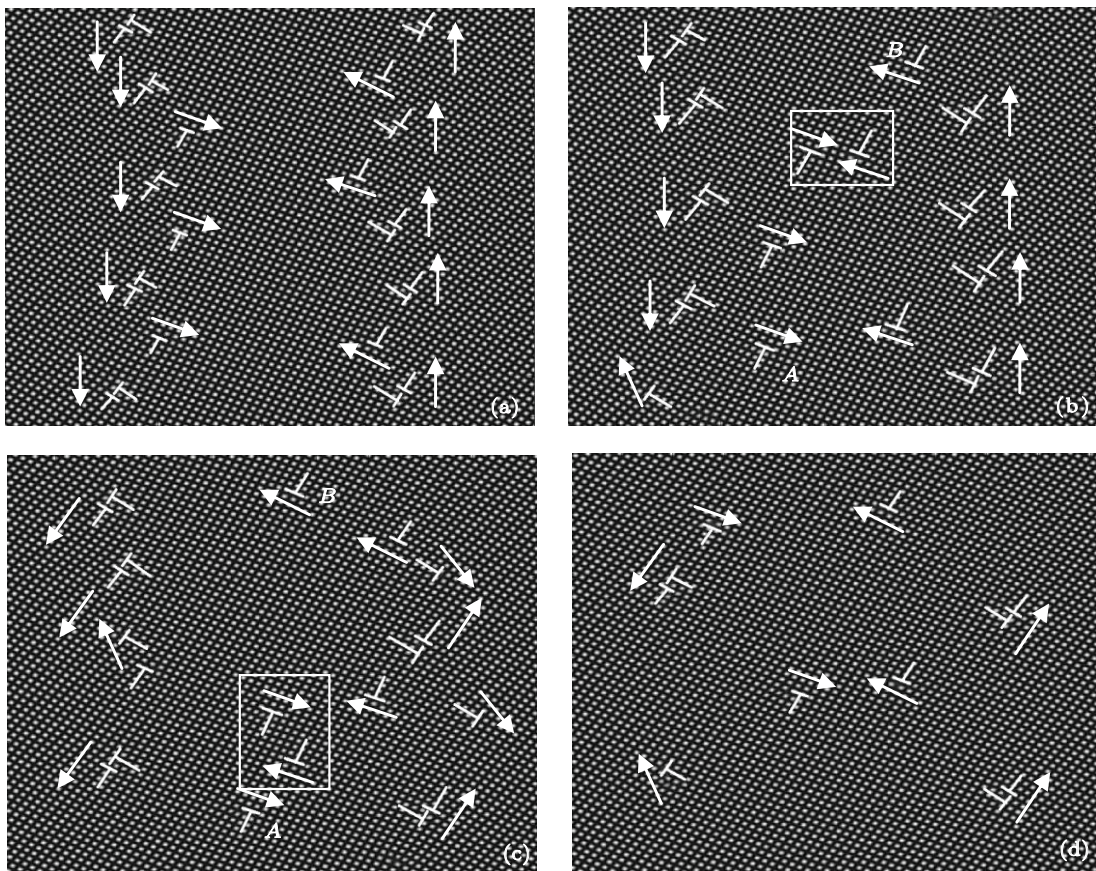


图7 $\theta = 6^\circ, \varphi = 30^\circ, r = 0.35, x$ 轴向拉伸时非对称倾斜亚晶界运动过程 (a) $\varepsilon = 0.0204$; (b) $\varepsilon = 0.03222$; (c) $\varepsilon = 0.04488$; (d) $\varepsilon = 0.05808$

到图9所示亚晶界位错运动过程, 同样得到图10所示的应变-自由能曲线.

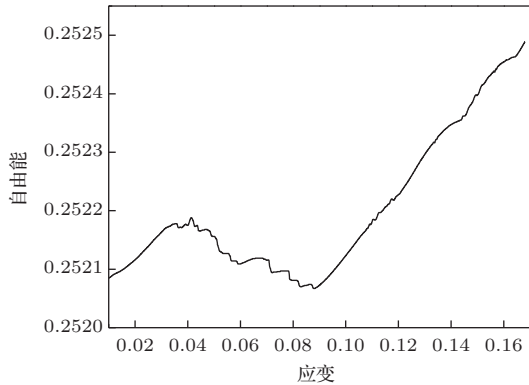


图8 应变-自由能曲线 ($\theta = 6^\circ$, $\varphi = 30^\circ$, $r = 0.35$, x 轴向拉伸)

应力方向改变时, 晶界迁移过程不同的是: 1) 初始, 两晶界上的单个位错相向运动 (图9(a)), 而不是背离晶界向两侧晶粒内部运动 (图9(a)), 应力

方向的改变, 使得位错所受的切应力的方向与原来相反, 导致位错的运动方向也与原来相反; 2) 位错组分离后 (图9(b)内方框), 位错的湮灭过程与单个位错的分解过程 (图9(c)) 以及单个位错与位错组的反应过程彼此都有时间交叠, 如图9(d)所示, 单个位错A和C分别与位错组B, D反应生成8(c)中的位错E和F, 同时单个位错进行分解 (图9(d)内方框), 而在这期间都有位错湮灭发生; 3) 同一滑移系上的异号位错相遇发生反应而湮灭的过程发生在演化过程的中后期, 如图9(d), (e), (f)中较多; 4) 位错运动方向改变, 使得位错的分解及湮灭过程都发生在晶界上, 而不是亚晶粒内部, 晶界上的畸变能反而没有减少, 两晶界距离变小, 异号位错彼此吸引造成的区域畸变能变得更大, 位错反应及分解所释放的能量并不能抵消增加的畸变能以及应变能, 自由能缓慢升高, 没有剧烈起伏.

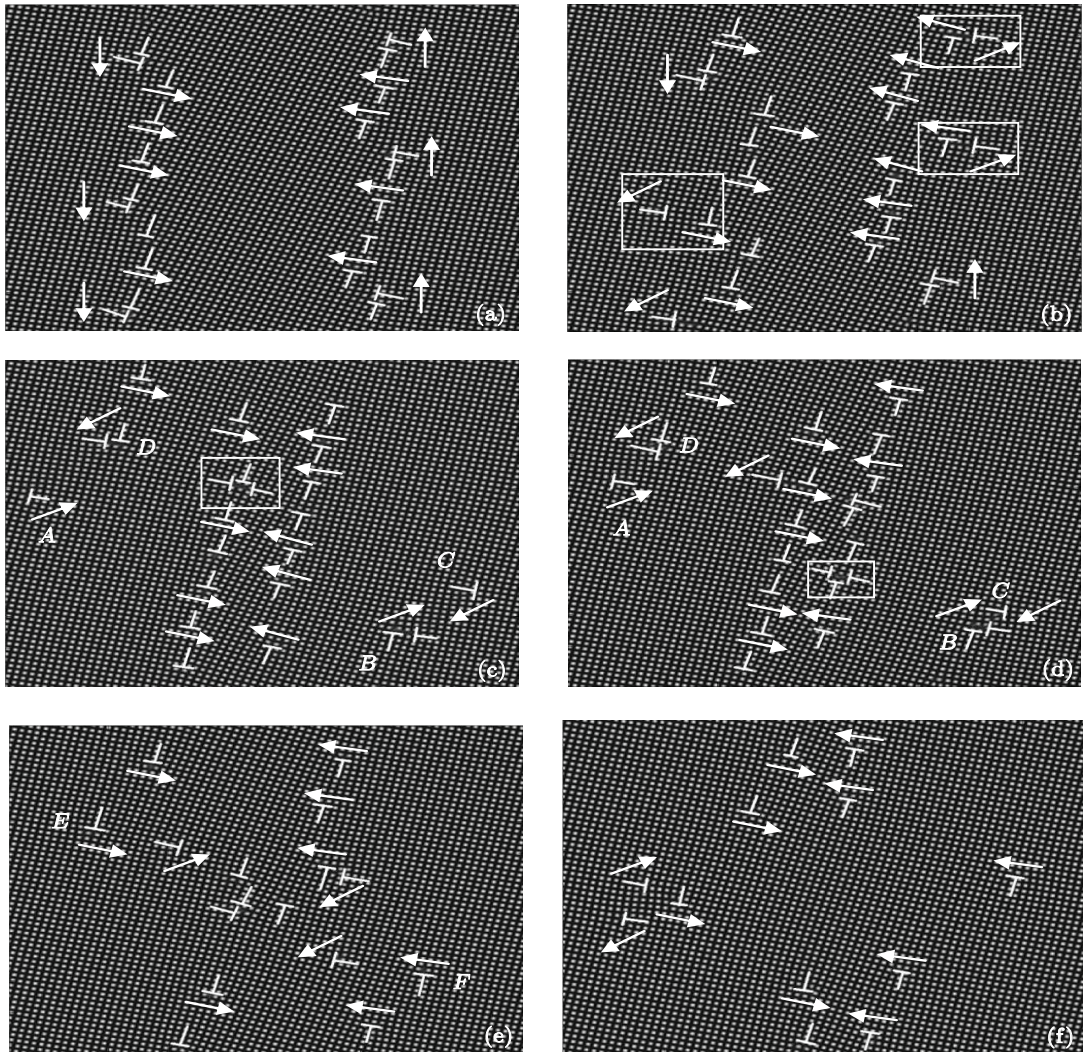


图9 $\theta = 6^\circ$, $\varphi = 15^\circ$, $r = 0.35$, y 轴向拉伸时非对称倾斜亚晶界运动过程 (a) $\varepsilon = 0.00636$; (b) $\varepsilon = 0.03348$; (c) $\varepsilon = 0.04902$; (d) $\varepsilon = 0.05262$; (e) $\varepsilon = 0.06264$; (f) $\varepsilon = 0.09618$

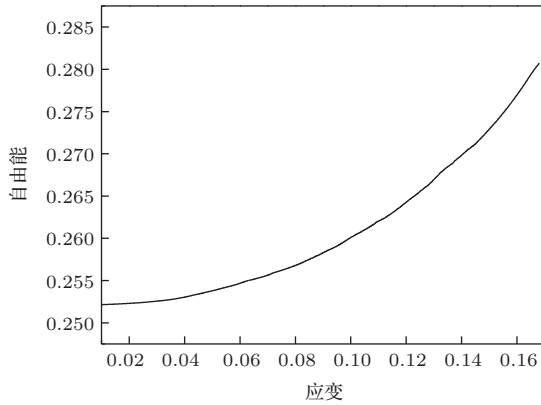


图10 应变-自由能曲线 ($\theta = 6^\circ$, $\varphi = 15^\circ$, $r = 0.35$, y 轴向拉伸)

4 结 论

1) 非对称倾侧亚晶界由符号相同的一系列刃型位错等距排列, 部分出现两个相互垂直排列的刃型位错构成的位错组.

2) 在应力作用下, 非对称倾侧亚晶界的迁移机制, 主要是位错的滑移和攀移、位错组分解、单个位错与位错组反应、单个位错分解以及位错湮灭.

3) 温度降低, 位错攀移变得困难, 应力集中处首先发生位错组分离, 单个位错没有进行分解反应.

4) 倾侧角增大, 导致亚晶界的运动演化过程变慢, 单个位错与位错组不会发生反应, 同时单个位错也不会进行分解.

5) 应力方向改变使得位错的运动方向发生改变, 导致亚晶界的迁移过程也不同.

参考文献

- [1] Raimbourg H, Kogure T, Toyoshima T 2011 *Contrib. Mineral Petrol.* **162** 1093
- [2] Sedláček R, Blum W, Kratochvíl J, Forest S 2002 *Metal. Mater.* **33** 319
- [3] Molodov D A, Gorkaya T, Gottstein G 2011 *Instit. Phys. Metal. Metal Phys.* **46** 4318
- [4] Xie H X, Liu B, Yin F X, Yu T 2013 *Chin. Phys. B* **22** 010204
- [5] He S Z, Hou G, Su C F, Wu C X 2013 *Chin. Phys. B* **22** 016101
- [6] Wang C Y, Meng Q Y, Wang Y T 2009 *Acta Metall. Sin.* **45** 400 (in Chinese) [王超营, 孟庆元, 王云涛 2009 金属学报 **45** 400]
- [7] Elder K R, Katakowski M, Grant M 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 245701
- [8] Elder K R, Grant M 2004 *Phys. Rev. E* **70** 051605
- [9] 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]
- [10] Zhang Q, Wang J C, Zhang Y C, Yang G C 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 088104 (in Chinese) [张琪, 王锦程, 张亚从, 杨根仓 2011 物理学报 **60** 088104]
- [11] Yang T, Chen Z, Zhang J, Dong W P, Wu L 2012 *Chin. Phys. Lett.* **29** 078103
- [12] Huang Z F, Elder K R 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 158701
- [13] 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]
- [14] Wu K A, Voorhees P W 2009 *Phys. Rev. B* **80** 125408
- [15] Wu K A, Adland A, Karma A 2010 *Phys. Rev. E* **81** 061601
- [16] Hirouchi T, Takaki T, Tomita Y 2009 *Comput. Mater. Sci.* **44** 1192

Phase field crystal study on asymmetrical tilt subgrain boundaries*

Lu Na Wang Yong-Xin[†] Chen Zheng

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

(Received 27 March 2014; revised manuscript received 17 May 2014)

Abstract

With the phase field crystal approach, the structure of asymmetrical tilt subgrain boundaries and their motion micromechanism under stress are studied. The effects of temperature, inclination angle and stress direction on structure and migration process are also analyzed and discussed. Simulated results show that the subgrain boundary is composed of a row of edge dislocations with the same burgers vectors and the double-array dislocations with a vertical distribution. The motion process of asymmetrical tilt subgrain boundaries contains dislocation glide and climb, dislocation separation, dislocation reaction, individual dislocation decomposition and dislocation annihilation. The decrease of temperature and the increase of inclination angle hinder the subgrain boundary migration process. The change of stress direction causes the variation of dislocation motion and thus lead to the change in migration manner of subgrain boundary.

Keywords: phase field crystal, subgrain boundary, asymmetrical tilt

PACS: 05.70.Np, 07.05.Tp

DOI: 10.7498/aps.63.180508

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51274167, 51174168), and the Shaanxi Provincial Natural Science Foundation, China (Grant No. 2014JM7261).

[†] Corresponding author. E-mail: wangyx818@126.com