

基于晶体相场模型的石墨烯位错动力学行为研究*

王慧 武白羽 甄乐怡 周文权†

(西北农林科技大学理学院, 杨凌 712100)

(2025年7月15日收到; 2025年9月5日收到修改稿)

石墨烯晶界结构的演化规律及其位错运动机制的研究对理解石墨烯的塑性变形行为具有重要意义, 目前对于在非机械作用下石墨烯晶界的动力学行为已得到广泛研究, 但由于已有实验条件和模拟方法在时间和空间尺度方面的限制, 关于机械拉伸载荷作用下石墨烯位错动态演化过程及塑性变形问题仍知之甚少. 本文基于晶体相场模型, 研究了在单轴拉伸载荷作用下石墨烯晶界环的动力学演化过程. 模拟研究表明, 当外加应变低于临界值时, 石墨烯体系处于弹性响应阶段, 5|7位错核心区域的应变振幅随着外加载荷的增大而减小; 而当应变达到临界值时, 体系发生弹-塑性转变, 晶界环处5|7位错通过C—C键旋转, 转变为5|7|7|5位错, 此时位错核心区域的应变振幅增大, 标志着体系塑性变形的启动; 当应变超过临界值后, 体系进入塑性变形阶段, 晶界环呈现出3种特征性演化行为: 5|7位错与5|7|7|5位错之间发生缺陷结构交替转变; 位错经历“钉扎—攀移/滑移混合运动”的反复演化过程; 位错保持“钉扎”状态直至位错处裂纹形核并发生韧性断裂. 本工作为深入理解石墨烯塑性变形行为提供了重要理论基础.

关键词: 晶体相场模型, 石墨烯, 晶界环, 5|7位错**PACS:** 81.10.Aj, 31.15.es, 61.48.Gh, 61.72.Lk**DOI:** 10.7498/aps.74.20250936**CSTR:** 32037.14.aps.74.20250936

1 引言

石墨烯是一种由碳原子以蜂窝状晶格排列而成的二维材料^[1], 自2004年通过机械剥离法成功制备以来, 已成为材料科学领域的研究热点. 尽管石墨烯具有优异的力学性能, 但其在制备过程中会不可避免地引入位错和晶界等缺陷^[2-7]. 这些缺陷的存在会显著影响石墨烯的力学性能^[8-13]. 当前学术界对石墨烯力学性能的研究主要集中于石墨烯的脆性断裂行为, 而对其塑性变形过程中缺陷结构的演变机制仍缺乏深入理解. 位错作为石墨烯塑性变形的载体^[14,15], 其动力学行为直接决定了石墨烯的塑性响应机制. 因此, 深入探究石墨烯晶界结构的演化规律与位错运动机制, 对于阐明石墨烯

的塑性变形过程具有重要意义.

近年来, 关于石墨烯塑性变形机制的研究取得了重要进展, 但现有研究主要集中于非机械载荷作用下的变形行为. Lehtinen等^[16]通过高能电子束辐照实验发现, 石墨烯中5|7位错的滑移通过C—C键的旋转实现, 攀移则依赖空位的扩散与迁移过程, 而位错湮灭则由位错间的弹性相互作用驱动, 该研究为二维材料缺陷动力学的实验研究提供了直接证据. Warner等^[17]采用高能电子束轰击方法进一步验证, 石墨烯中位错运动主要由C—C键旋转及碳原子的缺失机制调控, 这些微观结构演变过程为理解石墨烯的塑性变形提供了关键依据. Gong等^[18]利用像差校正透射电子显微镜结合原位加热技术, 观察到石墨烯中5|7位错滑移和攀移的动力学过程. 在后续研究中, 该团队^[19]进一步研

* 国家自然科学基金(批准号: 52002331)和陕西省教育科学“十四五”规划(批准号: SGH22Q197)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: wqzhou@nwfufu.edu.cn

究了石墨烯中晶界环的运动过程,发现温度升高可加速晶界环内缺陷结构的动态演化速率.上述实验结果共同证实,石墨烯的塑性变形行为遵循位错主导机制.对于机械载荷作用下变形行为的研究, Yang 等^[20]探究了温度对多晶石墨烯变形行为的影响,发现低温变形条件下呈脆性断裂;而高温变形条件下则出现应力诱导的 C—C 键旋转,并伴随明显的脆-韧转变现象.通过实验手段直接观测石墨烯晶界完整的动力学过程较为困难,因此计算机模拟成为该领域的重要研究手段.分子动力学研究表明:在低温变形条件下,石墨烯表现出脆性断裂行为^[21];而在高温变形条件下,石墨烯则会发生脆-韧转变^[12],该过程主要是由 C—C 键旋转及键长变化驱动. Zhou 等^[22]基于晶体相场模型研究了石墨烯平直晶界的力学响应和变形动力学过程,为理解石墨烯的脆-韧转变机理提供了理论支撑.高丰等^[23]基于三模晶体相场法研究应变诱导石墨烯晶界的位错演化,观察到 5|7 位错通过 C—C 键旋转实现滑移.在其他二维材料的相关研究中, Yang 等^[24]结合分子动力学模拟与连续介质力学方法,研究了二硫化钼的力学行为,发现其力学性能不仅受 5|7 位错密度的影响,还与 5|7 位错的排列方式密切相关. Wu 等^[25]通过对二硫化钼进行单轴拉伸模拟发现,在扶手椅型取向向下表现为脆性断裂,而在锯齿型取向向下则会呈现脆性-韧性的双重断裂特征. Liu 等^[26]进一步研究指出,二硫化钼的韧性行为主要源于位错结构转变过程及其引发的位错反应机制.综合上述研究可知,除高能电子束辐照与热激活方法外,机械拉伸亦是激活石墨烯中拓扑缺陷运动的有效途径.

目前,有关石墨烯力学性能的模拟研究主要基于分子动力学方法.该方法虽可提供原子尺度的动态演化细节,但仍存在一定局限性:往往需要预设缺陷构型,且模拟时间尺度被限制在飞秒至纳秒量级,难以完整捕捉到位错运动过程,也无法准确描述涉及更长扩散时间尺度的晶体演化行为,比较适合探索材料在极短时间内的动力学过程.相比之下,基于经典密度泛函理论的晶体相场模型 (phase field crystal model, PFC),通过引入周期性密度场变量,可实现微观晶体结构与宏观扩散时间尺度的耦合.该模型无需预设缺陷构型,能够自洽形成位错、晶界等复杂缺陷结构,并可以模拟更长时间尺度下的演化过程,从而突破了分子动力学在时间

尺度上的限制,尤其适合模拟石墨烯中位错滑移与攀移运动、晶界迁移等涉及复杂缺陷演化的微观机制.目前,该模型已在石墨烯等二维材料的研究领域中得到广泛应用^[27-29],为理解石墨烯微观结构演化机制提供了新的研究手段.

本研究基于晶体相场模型,构建包含晶界环的石墨烯双晶体系结构,系统探究单轴拉伸载荷作用下石墨烯双晶体系从弹性响应、弹-塑性转变、塑性变形及断裂的整个变形过程,通过分析 5|7 位错的缺陷结构转变特征及晶界环的拓扑演化规律,揭示拉伸载荷作用下位错运动与石墨烯塑性变形间的内在关联,为深入理解石墨烯的塑性变形行为提供理论依据.

2 模型与方法

晶体相场模型由 Elder 等^[30,31]提出,是一种基于经典密度泛函理论发展而来的微观模拟方法.该模型以原子密度场变量 ψ 作为序参量,通过构建模拟体系的自由能泛函,定量描述材料微观结构的动态演化行为. PFC 模型的核心思想源于 Swift-Hohenberg (SH) 方程^[32],该方程最初是用于描述 Rayleigh-Benard 对流系统中的非守恒热波动场,经拓展后成功应用于晶体生长、相变等微观动力学过程的模拟研究.

PFC 模型的无量纲自由能泛函可表述为^[30]

$$\bar{F} = \int \left[\frac{\xi}{2} \psi^2 + \frac{1}{2} \psi (2\nabla^2 + \nabla^4) \psi + \frac{\lambda}{3} \psi^3 + \frac{1}{4} \psi^4 \right] d\mathbf{r}, \quad (1)$$

式中, \bar{F} 为无量纲化的自由能泛函; ψ 为无量纲化的原子密度场; ∇^2 为拉普拉斯微分算子; 系数 $\lambda=1$, 该系数与三点粒子间的关联函数相关^[33]; 参数 ξ 作为唯象温度参量,用于调控熔化过程的过冷度,具体物理意义表述如下:当 $\xi < 0$ 时,体系处于结晶态; $|\xi|$ 的数值大小与体系温度呈负相关,即 $|\xi|$ 越大,对应体系温度越低, $|\xi|$ 越小,则对应体系温度越高.

基于经典密度泛函理论的 PFC 模型推导可知^[33,34],在最低阶近似下, PFC 模型中的温度参数 ξ 可表示为

$$t = t_0 + (1500 - t_0) \frac{\xi}{1.3}, \quad (2)$$

其中, t_0 为石墨烯的熔化温度 (即 $\xi = 0$ 对应的体

系温度), 已有研究通过蒙特卡罗模拟与分子动力学模拟相结合的方法对 t_0 进行了估算, 由于原子间势函数选取的差异, t_0 的取值范围分布在 4510 K^[35] 至 5500 K^[36] 之间, 本文选取 $t_0 = 4510$ K, 该数值是由 LCBOPII 势函数通过蒙特卡罗模拟结合形核理论分析得到^[22]. 在本研究中, 设定 $\xi = 0.5$, 代入 (2) 式可得实际温度 $t = 3353$ K.

采用无量纲化的保守场 Cahn-Hilliard 动力学方程^[37] 描述体系的微观演化过程, 其表达式为

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla^2 \frac{\delta \tilde{F}}{\delta \psi} = \nabla^2 [\xi \psi + (1 + \nabla^2)^2 \psi + \lambda \psi^2 + \psi^3]. \quad (3)$$

在求解含高阶时间项的 PFC 动力学方程时, 采用半隐式谱方法^[38] 将方程 (3) 转化为矩阵形式的代数方程组. 在时间离散化过程中, 通过迭代求解该代数方程组, 进一步将方程 (3) 转化为一组仅含时间导数的常微分方程组, 以提高数值求解的效率和稳定性.

通过在 PFC 模型的自由能泛函中引入罚函数的方式来施加牵引边界条件^[39], 以模拟石墨烯体系的单轴拉伸变形过程. 该罚函数 F_e 的表达式为

$$F_e = \int \Gamma(r) [\psi_0(r) - \psi(r, t)]^2 \mathbf{d}r, \quad (4)$$

$$\psi(r_i) = \begin{cases} \psi(r_i), & r_{\text{eq}} < r_c, \\ \psi_0(r_{i-1}) + \frac{1 - d_{i-1}}{1 + \psi_0(r_i) - \psi_0(r_{i-1})} [\psi_0(r_i) - \psi_0(r_{i-1})], & r_{\text{eq}} > r_c, \end{cases} \quad (5)$$

式中, $\Delta \varepsilon = 2\Delta r/L_r$ 表示在单轴拉伸过程中, 每增加一个加载步, 体系产生的微小应变增量, 其中 Δr 为加载后任意坐标的位置变化, L_r 为区域长度; $d_i = \Delta \varepsilon |r_{\text{eq}} - r_0|$, $d_{i-1} = \Delta \varepsilon |r_{\text{eq}} - r_c|$.

3 结果与分析

3.1 石墨烯双晶体系结构

本研究基于 PFC 模型对石墨烯双晶体系进行数值模拟研究. 采用周期性边界条件, 构建尺寸为 $L_x \times L_y = 1024\Delta x \times 2048\Delta y$ 的石墨烯双晶体系结构, 空间步长设定为 $\Delta x = 0.7399$, $\Delta y = 0.7364$. PFC 模型中的晶格间距 $\ell_{\text{PFC}} \approx 4\pi/\sqrt{3}$ 对应真实石墨烯晶格常数 $\ell_0 = 2.46 \text{ \AA}$ ^[43].

式中, $\psi_0(r)$ 表示石墨烯双晶体系在无外加载荷条件下达到平衡态时的原子密度场分布函数, 而 $\psi(r, t)$ 描述体系在动力学演化过程中的原子密度场分布. 在加载区域内, 牵引函数 $\Gamma(r) > 0$; 在非加载区域内, $\Gamma(r) = 0$. 通过方程 (4) 使得牵引函数与加载区域的原子密度场 $\psi(r, t)$ 产生相互作用, 从而驱动加载区域处的原子密度场以恒定速率演化, 最终在模拟体系中实现单轴拉伸变形过程.

由于动力学方程 (3) 的有效性仅限于弹性相互作用的有效范围内, 导致数值求解过程中时间步长的选取存在严格限制. 为确保动力学方程的收敛性, 必须采用极小的时间步长, 这极大地制约了该方程在模拟加载条件下的弹性力学响应中的应用效率^[40,41]. 因此, 本研究采用基于插值算法的 PFC 计算方案^[42]: 当体系弛豫到平衡状态时, 原子密度场的空间分布特征可通过以下参数进行表征: r_0 为模拟区域中心位置的参考格点坐标 (其位移量始终为零), r_{eq} 表示平衡态原子密度场的格点坐标分布, r_c 为中心位置的实际格点坐标. 在连续加载过程中, 令 $\psi_0(r_i)$ 表示初始未加载状态下格点 r_i 处的原子密度场分布, $\psi(r_i)$ 表示加载后相同格点位置处的原子密度场分布, 根据线弹性理论的基本假设, 加载后的密度场分布可通过以下关系式描述:

图 1(a) 所示为初始模拟体系的结构示意图, 在模拟区域内设置晶粒 1 和晶粒 2, 其取向角分别设为 φ_1 与 φ_2 , 晶界角为 $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$, 晶界取向差为 2.2° . 晶界环区域形成具有六重旋转对称性的 5|7 位错排列结构 (图 1(a) 插图). 图 1(b) 为晶界环处 5|7 位错的局部放大图, 图 1(c) 则进一步展示了该位错的原子结构及其对应的 Burgers 矢量 \mathbf{b} , 其中 5|7 位错 Burgers 矢量 \mathbf{b} 与拉伸方向的夹角记为 α .

将初始模拟体系 (图 1(a)) 沿逆时针方向旋转 θ 角, 共构建 12 组石墨烯双晶模拟体系, 所有体系均沿 Y 轴正方向施加恒定应变速率的单轴拉伸载荷, 具体模型参数如表 1 所列. 模拟结果表明, 在低温变形条件下, 12 组石墨烯双晶模拟体系均表

现出脆性断裂特征 (图 2), 该结果与已有分子动力学模拟结论一致 [21,44–46].

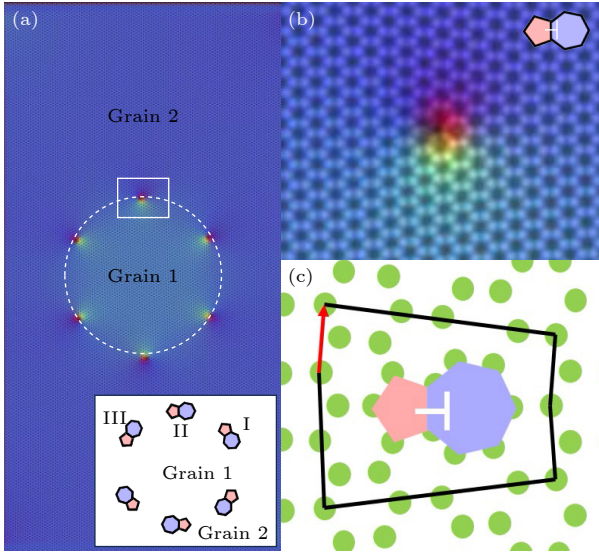


图 1 含晶界环的石墨烯双晶体系结构 (a) 石墨烯双晶体系对应的晶格取向分布云图, 插图为晶界环处 5|7 位错的排列分布图; (b) 图 (a) 中矩形区域放大图; (c) 图 (b) 中 5|7 位错对应的原子结构图及其 Burgers 矢量 (红色箭头所示)

Fig. 1. Structure of graphene bicrystal system containing a grain boundary (GB) loop: (a) Illustration of lattice orientation in the graphene bicrystal system, with the inset showing the arrangement of 5|7 dislocations at the GB loop; (b) magnified view of the rectangular region in panel (a); (c) atomic structure diagram of the 5|7 dislocation in panel (b) and its Burgers vector (indicated by the red arrow).

表 1 12 组石墨烯双晶体系的参数

Table 1. Parameters of the twelve graphene bicrystal systems.

体系 编号	晶粒取向角		体系 旋转 角度 $\theta / (^\circ)$	b 与Y轴夹角 $\alpha / (^\circ)$		
	$\varphi_1 / (^\circ)$	$\varphi_2 / (^\circ)$		I号 位错	II号 位错	III号 位错
1	1.1	-1.1	0	59.5	0.3	60.7
2	6.1	3.9	5	54.5	5.3	65.7
3	11.1	8.9	10	49.5	10.3	70.7
4	16.1	13.9	15	44.5	15.3	75.7
5	21.1	18.9	20	39.5	20.3	80.7
6	26.1	23.9	25	34.5	25.3	85.7
7	31.1	28.9	30	29.5	30.3	90.7
8	36.1	33.9	35	24.5	35.3	95.7
9	41.1	38.9	40	19.5	40.3	100.7
10	46.1	43.9	45	14.5	45.3	105.7
11	51.1	48.9	50	9.5	50.3	110.7
12	56.1	53.9	55	4.5	55.3	115.7

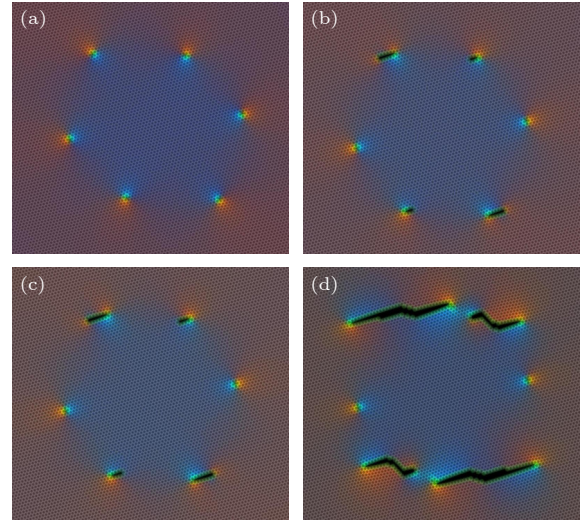


图 2 双晶体系 10 的脆性断裂过程 (a)–(d) $\epsilon_e = 0.59\%$, 5.85% , 6.09% , 7.58%

Fig. 2. Brittle fracture process in bicrystal system 10: (a)–(d) $\epsilon_e = 0.59\%$, 5.85% , 6.09% , 7.58% .

3.2 晶界环拓扑结构的演化过程

图 3 所示曲线完整揭示了石墨烯双晶体系从弹性变形、弹-塑性转变直至体系失效的演化过程. 以石墨烯双晶体系 3 为例, 晶界环处的六个 5|7 位错 (分别标记为 I/I', II/II', III/III') 呈镜像对称分布 (图 3(a)). 模拟结果表明, 在单轴拉伸载荷作用下, 晶界环上 5|7 位错的动态演化过程表现出镜像对称性: 当外加应变 $\epsilon_e = 3.25\%$ 时, II/II' 位错对通过 C—C 键旋转 90° 发生结构转变, 形成如图 3(b) 所示的 5|7|7|5 位错构型; 转变后的缺陷结构仍保持镜像对称性, 并进入“钉扎”状态, 即保持 5|7|7|5 位错结构不变; 当应变进一步加载至 $\epsilon_e = 3.72\%$ 时, I/I' 号位错对发生与 II/II' 位错对同样的缺陷结构转变; 当应变加载至 $\epsilon_e = 3.89\%$ 时, II/II' 号位错开始运动, 随着应变增大至 $\epsilon_e = 4.19\%$, 该位错运动至图 3(d) 所示的位置, 其运动轨迹符合镜像对称规律. 值得注意的是, III/III' 号位错在整个加载过程中始终保持 5|7 位错结构, 未发生缺陷结构转变或运动过程. 此外, 对其余 11 组石墨烯双晶体系进行单轴拉伸模拟, 发现这 11 组双晶体系晶界环处的 I/I', II/II' 及 III/III' 位错对的缺陷结构转变、运动乃至断裂过程都遵循镜像对称规律. 基于此, 后续研究可重点分析 I, II, III 号位错的演化行为, 其对应镜像位错 (I', II', III') 的演化规律可通过对称操作直接得出.

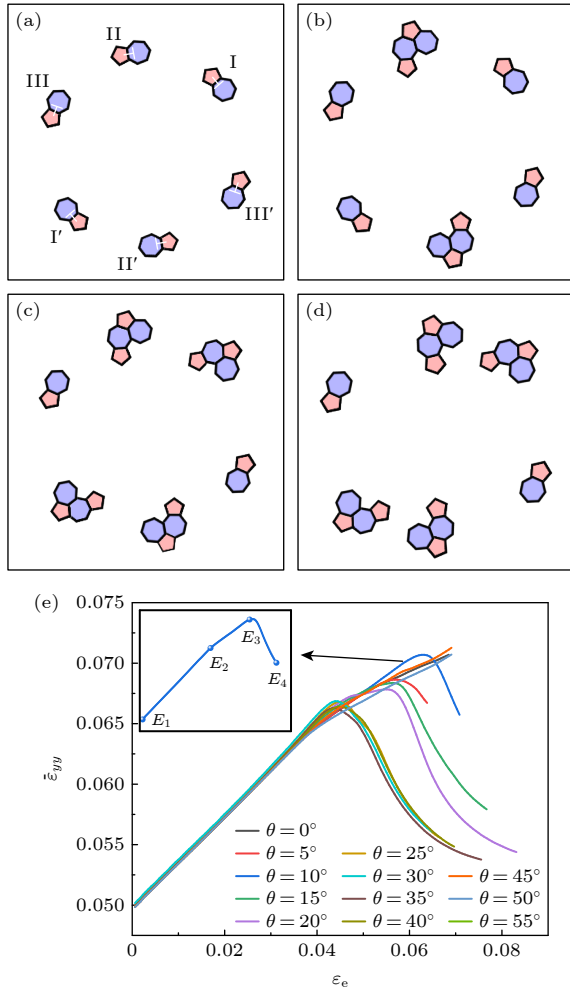


图3 石墨烯双晶体系晶界环拓扑结构演化过程示意图, 其中 (a)–(d) $\varepsilon_e = 0.59\%$, 3.25% , 3.72% , 4.19% ; (e) 12 组不同晶体取向石墨烯双晶体系的平均响应应变 $\bar{\varepsilon}_{yy}$ -外加应变 ε_e 响应曲线

Fig. 3. Schematic diagram of topological structure evolution of the GB loop in the graphene bicrystal systems: (a)–(d) $\varepsilon_e = 0.59\%$, 3.25% , 3.72% , 4.19% . (e) Response curves of average strain versus applied strain for twelve graphene bicrystal systems with different crystallographic orientations.

图3(e)插图展示了石墨烯双晶体系3在变形过程中原子的平均响应应变 $\bar{\varepsilon}_{yy}$ 与外加应变 ε_e 的变化关系, 该力学响应曲线可分为3个阶段: 弹性阶段 (E_1 – E_2), 平均响应应变与外加应变呈线性比例关系; 当外加应变达到临界值 E_2 后, 曲线开始呈现非线性特征, 标志着该体系开始进入塑性变形阶段 (E_2 – E_3), 这一转变与晶界环处 5|7 位错向 5|7|7|5 位错的缺陷结构转变直接相关; 当应变达到临界值 E_3 时, 曲线出现拐点并急剧下降, 表明该体系进入失效阶段 (E_3 – E_4), 此时晶界环上位错核心处萌生裂纹并扩展. 对其余 11 组双晶体系的力

学响应曲线的分析表明 (图3(e)), 其变形规律与体系3一致.

3.3 晶界环的弹性响应过程

在单轴拉伸加载的初始阶段, 含有晶界环的石墨烯双晶体系呈现典型的弹性响应特征, 体系内部尚未启动塑性变形过程. 以双晶体系7晶界环处 I 号位错为例, 图4(a)是 5|7 位错的微观结构图, 该缺陷作为石墨烯的典型拓扑缺陷, 由共享 C–C 键的五元环与七元环构成, 在整个弹性响应阶段中始终保持 5|7 位错结构不变. 图4(b)为图4(a)对应的局部应变等值线图, 其中压缩应变值用 CS (compressive strains) 表示, 定义为 ε_c , 拉伸应变值用 TS (tensile strains) 表示, 定义为 ε_t , 应变振幅 $\Delta\varepsilon = \varepsilon_t - \varepsilon_c$. 图4(c)给出了晶界环处 I 号位错的 Burgers 矢量与拉伸方向之间的夹角 $\alpha = 29.5^\circ$ 时, 其平均局部应变 ($\bar{\varepsilon}_{yy} - \varepsilon_{yy}^0$) 与外加应变 ε_e 的关系曲线 ($\bar{\varepsilon}_{yy}$ 是体系内所有原子的平均应变, ε_{yy}^0 则对应加载初始时刻的平均应变), 发现晶界环处 5|7 位错核心区域的应变振幅随外加载荷的增大而逐渐减小. 对其余 11 组双晶体系弹性阶段 I 号位错和 II 号位错的应变振幅分析表明 (如图5所示), 对于 I 号位错 (其 Burgers 矢量与外加应变之间的夹角 $\alpha \in [59.5^\circ, 4.5^\circ]$), 发现随着夹角 α 的减小, 位错核心处的应变振幅增大; 而 II 号位错 (其 Burgers 矢量与外加应变之间的夹角 $\alpha \in [0.3^\circ, 55.3^\circ]$), 其应变振幅随夹角 α 的增大而减小.

3.4 晶界环的弹-塑性转变行为

本节研究了含晶界环的石墨烯双晶体系在单轴拉伸载荷下的弹-塑性转变过程, 模拟结果表明, 当施加单轴拉伸载荷时, 晶界环处的 5|7 位错首先启动载荷响应, 通过 C–C 键的旋转发生缺陷结构转变, 标志着体系从弹性响应阶段向塑性变形阶段过渡, 其发生弹-塑性转变的外加应变临界值记为 $\varepsilon_{crit}^\alpha$. 以双晶体系10为例, 通过对图6(c)的位错核心区域的平均局部应变曲线进行分析, 可以看出, 当外加应变处于 $\varepsilon_e = 3.16\%$ – 3.22% 范围内时, 体系处于弹性阶段, 如图6(a)所示; 当应变达到临界值 $\varepsilon_{crit}^{45.3^\circ} = 3.28\%$ 时, 晶界环处的 5|7 位错通过 C–C 键顺时针旋转 90° , 转变为图6(b)所示的 5|7|7|5 位错构型, 此时蓝色曲线对应的平均局部应

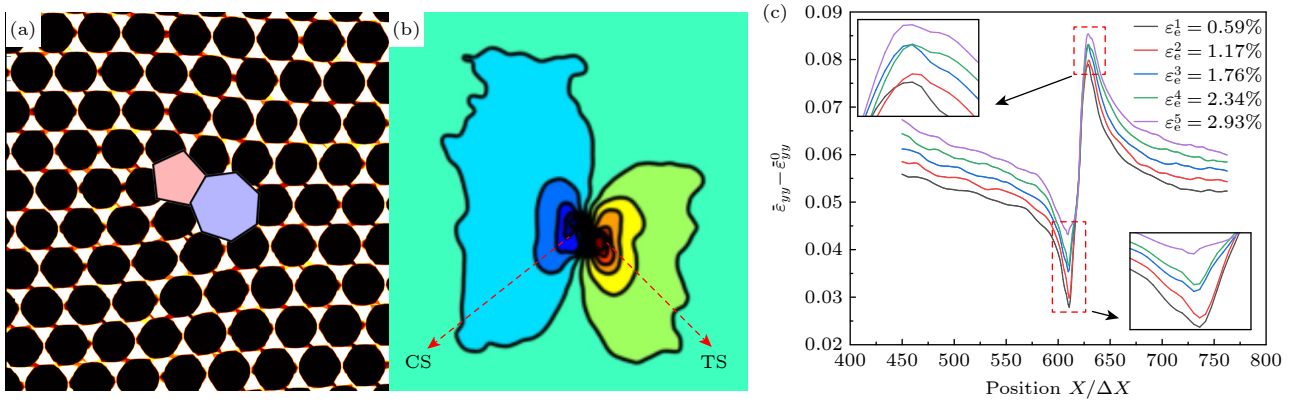


图 4 双晶体系 7 中晶界环 I 号位错 ($\alpha = 29.5^\circ$) 在应变作用下的弹性响应过程 (a) 5|7 位错微观结构图; (b) 图 (a) 的局部应变分布云图及压缩应变 (CS) 值和拉伸应变 (TS) 值; (c) 5|7 位错核心处的平均局部应变 ($\bar{\varepsilon}_{yy} - \bar{\varepsilon}_{yy}^0$)-外加应变 ε_e 响应曲线

Fig. 4. Bicrystal system 7, elastic response process of dislocation I ($\alpha = 29.5^\circ$) in the GB loop under strain: (a) Microstructure of the 5|7 dislocation; (b) strain distribution contour of panel (a) with values of compressive strain (CS) and tensile strain (TS); (c) response curves of average local strain ($\bar{\varepsilon}_{yy} - \bar{\varepsilon}_{yy}^0$) versus applied strain ε_e at the 5|7 dislocation core.

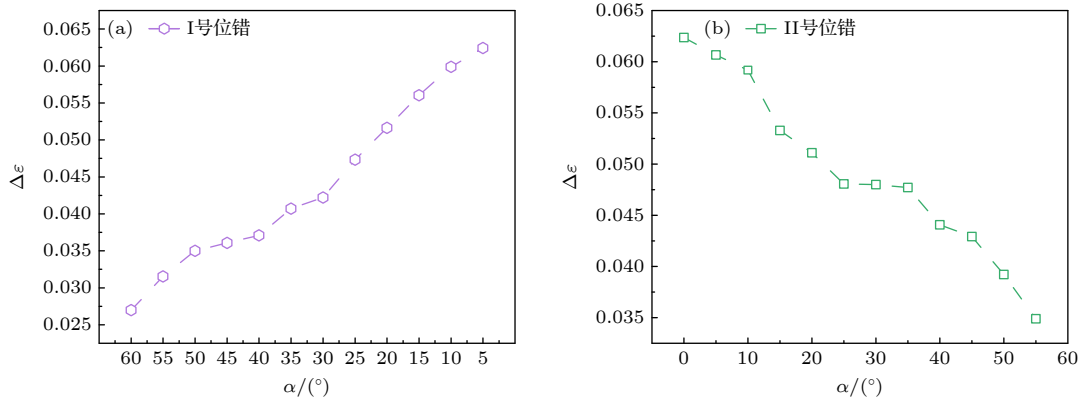


图 5 弹性响应阶段双晶体系晶界环处 5|7 位错应变振幅的变化 (a) I 号位错; (2) II 号位错

Fig. 5. Variation in strain amplitude at 5|7 dislocations within the grain boundary loop during elastic response stage: (a) Dislocation I; (b) dislocation II.

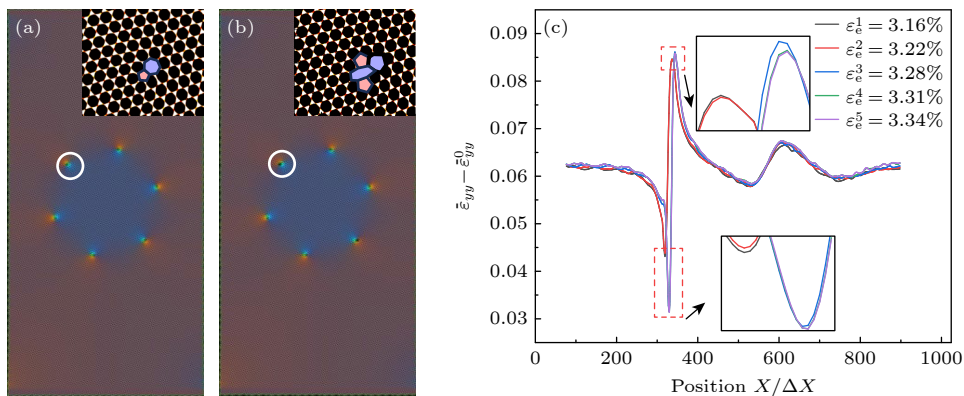


图 6 双晶体系 10, 晶界环 II 号位错 ($\alpha = 45.3^\circ$) 结构转变图, 其中 (a) $\varepsilon_e = 3.22\%$, (b) $\varepsilon_e = 3.28\%$; (c) 弹-塑性转变过程的平均局部应变 ($\bar{\varepsilon}_{yy} - \bar{\varepsilon}_{yy}^0$)-外加应变 ε_e 响应曲线

Fig. 6. Elastoplastic transition in bicrystal system 10, microstructural evolution of defect structure transformation at dislocation II ($\alpha = 45.3^\circ$) in the GB loop: (a) $\varepsilon_e = 3.22\%$; (b) $\varepsilon_e = 3.28\%$. (c) Response curves of average local strain ($\bar{\varepsilon}_{yy} - \bar{\varepsilon}_{yy}^0$) versus applied strain ε_e .

变振幅较黑色和红色曲线显著增大, 该结构转变标志着体系从弹性阶段过渡至塑性变形阶段. 通过对 12 组不同的石墨烯双晶体系的模拟结果进行总结, 我们得出如下规律: 当外加应变达到临界值 $\epsilon_{c_i,ii}^\alpha$ 时, 晶界环处的 5|7 位错通过 C—C 键旋转发生缺陷结构转变, 且位错核心处的应变振幅较弹性响应阶段显著增大. 这一位错结构转变过程, 不仅揭示了石墨烯双晶体系塑性变形的内在本质, 更为判定塑性变形的起始时刻提供了可靠的微观判据.

为探究温度对 C—C 键旋转诱导位错结构转变临界应变的影响规律, 对双晶体系 10 在不同温度下进行单轴拉伸模拟 (图 7). 结果显示, 晶界环

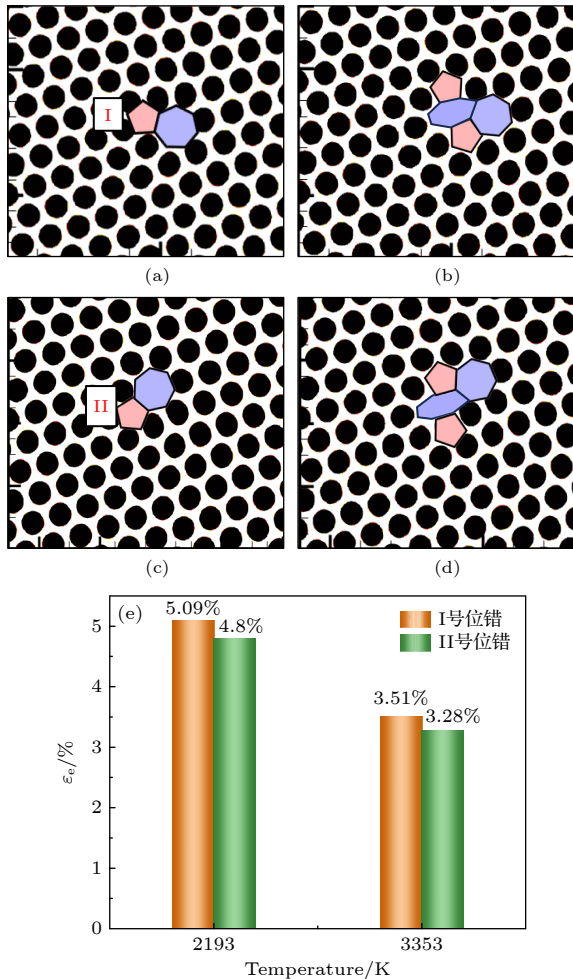


图 7 不同温度下, 石墨烯双晶体系 10 微观结构转变图, 其中 (a), (b) I 号位错; (c), (d) II 号位错; (e) 临界应变随温度变化的柱状图

Fig. 7. Temperature-dependent microstructural transformation in graphene bicrystal system 10: (a), (b) Dislocation I; (c), (d) dislocation II. (e) Bar chart of critical strain versus temperature.

处的 5|7 位错向 5|7|7|5 位错转变的临界应变与温度有密切关系. 在温度为 2193 K 时, I 号位错发生上述转变所需的临界应变为 5.09% (图 7(a), (b)), 而当温度升至 3353 K 时, 临界应变降至 3.51%; 对于 II 号位错, 发生结构转变的临界应变由 4.8% 降至 3.28% (图 7(c), (d)). 以上结果一致表明, 随着温度升高, 5|7 位错向 5|7|7|5 位错转变的临界应变显著降低. 该现象与已有实验研究^[19]的结论相符, 说明温度升高可以加速缺陷结构的演化, 从而使体系在较低的应变下发生塑性变形.

3.5 晶界环的塑性变形行为

3.5.1 5|7 位错 \rightleftharpoons 5|7|7|5 位错缺陷结构的交替变化

在单轴拉伸载荷作用下, 晶界环处 5|7 位错的缺陷结构转变以 C—C 键旋转为核心机制, 且该旋转可反复进行, 推动位错完成“5|7 \rightarrow 5|7|7|5 \rightarrow 5|7”的多次结构转变过程. 以双晶体系 12 中晶界环处的 I 号位错 ($\alpha = 4.5^\circ$) 为例, 加载应力以应力波的形式从加载端传入石墨烯双晶体系, 该位错的局部能量密度均值随外加应变的变化曲线如图 8(k) 主图所示. 对该曲线分别绘制上、下包络线 (见图 8(k)), 可见两者均呈上升趋势, 表明 I 号位错核心区域应力持续提高, 导致局部应力集中增强. 取曲线的第 1 个能谷 A_1 点为 5|7 位错的最稳定状态; 随着外加载荷的持续增大, 5|7 位错在 A_2 点跨过能垒 (5.00 eV), 进而驱动图 8(f) 中 5|7 位错的红色 C—C 键旋转, 转变为图 8(g) 的 5|7|7|5 位错, 完成首次缺陷结构转变, 该过程中能量势垒的数值与 Li 等^[47]和 Kim 等^[48]通过对石墨烯中局部 sp^2 电子结构计算得到 C—C 键旋转的激活能范围 (5—10 eV) 高度吻合; 此外, Gong 等^[18]使用电子束诱导石墨烯中位错的 C—C 键旋转, 所得到能垒为 5.00 eV, 上述实验结果与本研究的模拟数据一致, 为本文所获得结果的准确性提供了有力支撑. 随后, 5|7|7|5 位错进入“钉扎”状态, 直至外加应变增加至 $\epsilon_e = 3.83\%$ 时, 再次通过 C—C 键旋转, 转变为图 8(h) 所示的 5|7 位错, 完成第 2 次位错结构转变. 随着外加载荷的持续增大, 5|7 位错与 5|7|7|5 位错通过 C—C 键的旋转交替发生缺陷结构的转变, 完成晶界环中位错的动力学演化过程. 对图 8(l) 所示的位错核

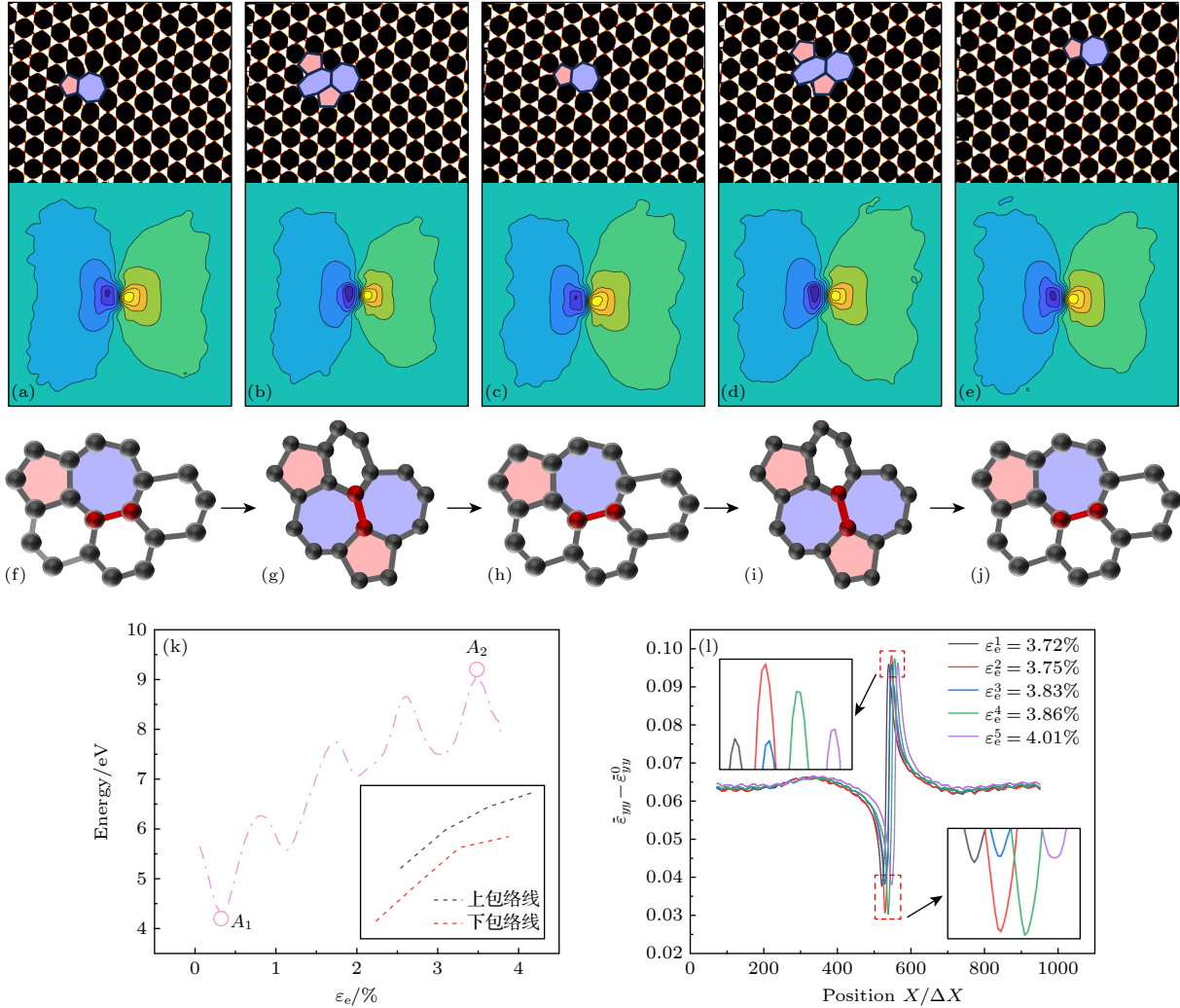


图 8 双晶体系 12, 晶界环 I 号位错 ($\alpha = 4.5^\circ$) 在应变作用下的微观结构演化图与应变响应过程 (a)–(e) 位错缺陷结构微观演化图及其所对应的位错核心区域的应变等值线图 ($\varepsilon_e = 3.72\%$, 3.75% , 3.83% , 3.86% , 4.01%); (f)–(j) 为对应的演化过程示意图; (k) I 号位错的局部能量密度均值-外加应变曲线; (l) 位错核心处的平均局部应变 ($\bar{\varepsilon}_{yy} - \varepsilon_{yy}^0$)-外加应变 ε_e 响应曲线

Fig. 8. Bicrystal system 12, microstructural evolution and strain response of dislocation I ($\alpha = 4.5^\circ$) in the GB loop under applied strain: (a)–(e) Microscopic evolution of dislocation defect structures and corresponding strain contour plots at the dislocation core region ($\varepsilon_e = 3.72\%$, 3.75% , 3.83% , 3.86% , 4.01%); (f)–(j) schematic diagrams of the corresponding evolutionary stages; (k) curve of average local energy density versus applied strain for dislocation I; (l) response curves of average local strain ($\bar{\varepsilon}_{yy} - \varepsilon_{yy}^0$) at the dislocation core versus applied strain ε_e .

心区域的平均局部应变曲线的分析表明, 在 $5|7$ 位错 $\rightarrow 5|7|7|5$ 位错转变过程中, 位错核心区域的应变振幅增大, 而在 $5|7|7|5$ 位错 $\rightarrow 5|7$ 位错转变过程中, 应变振幅减小. 这是由于位错结构转变引起位错构型的变化, 从而引起位错核心区域应变场范围的扩大与缩小. 在双晶体系 1 的晶界环处, II 号位错与双晶体系 12 晶界环处 I 号位错有同样的规律, 其缺陷结构的转变过程由 C—C 键旋转驱动. 这些研究结果揭示了石墨烯晶界位错运动的原子尺度机制, 为理解石墨烯的塑性变形提供了重要依据.

3.5.2 $5|7|7|5$ 位错遵循“钉扎 \rightleftharpoons 攀移/滑移运动”的交替演化行为

在石墨烯双晶体系的塑性变形过程中, 晶界环处位错的动态演化不仅依赖于 C—C 键这一核心机制, 且 C—C 键的旋转会进一步作为关键诱因, 触发位错发生攀移/滑移运动, 进而实现位错的动态演化. 以双晶体系 4 中晶界环的 II 号位错 ($\alpha = 15.3^\circ$) 为例 (图 9), 当外加应变达到临界值 $\varepsilon_{\text{crit}}^{15.3^\circ} = 3.19\%$ 时, $5|7$ 位错发生结构转变 (图 9(a)), 转化为 $5|7|7|5$ 位错 (图 9(b)), 标志着体系进入塑性变

形阶段. 该 5|7|7|5 位错在塑性变形过程中的动力学行为如下: 在 $\varepsilon_e = 3.19\% - 3.89\%$ 范围内, 5|7|7|5 位错处于“钉扎”状态. 对图 9(g) 所示的局部能垒密度均值曲线分析可知, $B_1 - B_2$ 段中, 应力波传播至位错“钉扎”点, 外界输入的能量高于“钉扎”过程消耗的能量, 曲线呈上升趋势; $B_2 - B_3$ 段中, 应力波在“钉扎”点反射并伴随能量耗散, 曲线随之下降; $B_3 - B_4$ 段中, 后续入射应力波与反射波叠加, 导致位错区域的应力幅值再次升高. 当外加应变加载至 B_4 点 ($\varepsilon_e^3 = 3.89\%$) 时, 位错核心累积的应变能超过晶格势垒 (能垒约 1.83 eV), 5|7|7|5 位错开始进行攀移/滑移运动, 沿 X 轴方向滑移了一个原子间距, 同时沿 Y 轴方向攀移了一个原子间距; 在 $\varepsilon_e = 3.89\% - 3.92\%$ 范围内, 5|7|7|5 位错再次进入“钉扎”状态, 位错核心区域的应变振幅较运动阶段有所降低 (图 9(h) 中蓝色曲线); 当应变增至 $\varepsilon_e^4 = 3.92\%$ 时, 5|7|7|5 位错吸收能量发生第 2 次攀移/滑移运动; 上述 5|7|7|5 位错“钉扎”与“攀移/滑移运动”的过程反复进行, 直至位错运动至图 9(e) 所示位置, 最终在 $\varepsilon_e^6 = 4.01\%$ 时被裂纹尖端吸收 (图 9(f)).

为进一步验证模拟结果的可靠性, 基于位错线

张力理论, 对晶界环上位错的“钉扎-脱钉”过程的能垒展开定量计算. 计算涉及的参数取值如下: 位错线长度 L 通过晶界环半径 $R = 6.319$ nm 与张角 $\vartheta = 11.25^\circ$ 计算得到, 其值约为 $L \approx 1.241$ nm; 设定石墨烯在高温条件下的剪切模量为 $G = 25$ GPa^[22]; 位错的 Burgers 矢量模长 $|b| = 0.246$ nm; 位错核心最小尺寸 $R_0 = 0.35$ nm. 针对本研究中的石墨烯双晶体系晶界环这一特殊构型, 位错线张力 T 采用二维材料中混合位错的经典简化表达式进行计算^[49,50]: $T \approx (1/2)Gb^2 \ln(R/R_0)$. 经计算: $T \approx 1.36$ eV/nm, 对应的脱钉能垒 $E_T = TL \approx 1.69$ eV. 考虑到位错攀移所需的扩散能垒约为 0.08—0.2 eV, 因此“钉扎-脱钉”的总能垒范围为 1.77—1.90 eV, 该计算结果与 PFC 模拟所得的 1.83 eV 能垒 (图 9 所示的能量差) 高度吻合, 从而验证了模拟结果的准确性.

3.5.3 5|7|7|5 位错遵循“钉扎→裂纹形核”的规律

在石墨烯双晶体系的塑性变形过程中, 晶界环处的位错并非均能作为塑性变形的主要载体, 个别位错在整个变形过程中受到强烈“束缚”而被钉扎无法运动, 并最终在其应力集中区域诱发裂纹形

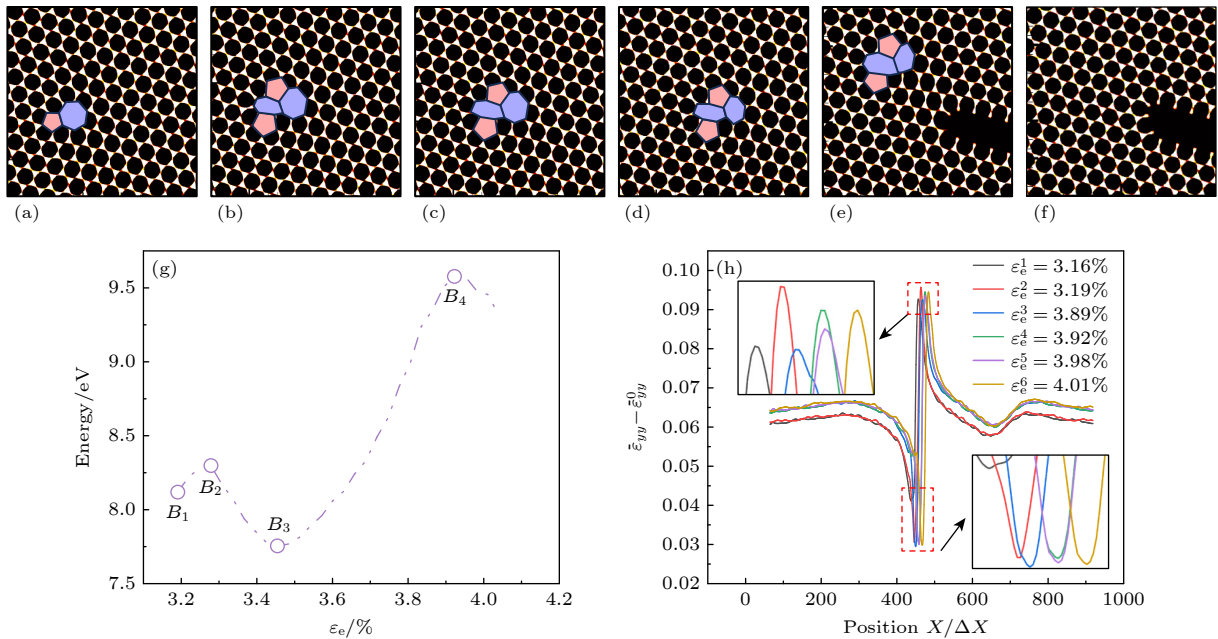


图 9 双晶体系 4, 晶界环 II 号位错 ($\alpha = 15.3^\circ$) 在应变作用下的微观结构演化图与应变响应过程 (a)–(f) $\varepsilon_e = 3.16\%$, 3.19% , 3.89% , 3.92% , 3.98% , 4.01% ; (g) II 号位错的局部能量密度均值-外加应变曲线; (h) 位错核心处的平均局部应变 ($\bar{\varepsilon}_{yy} - \varepsilon_{yy}^0$)-外加应变 ε_e 响应曲线

Fig. 9. Bicrystal system 4, microstructural evolution and strain response of dislocation II ($\alpha = 15.3^\circ$) in the GB loop under applied strain: (a)–(f) $\varepsilon_e = 3.16\%$, 3.19% , 3.89% , 3.92% , 3.98% , 4.01% ; (g) curve of average local energy density versus applied strain for dislocation II; (h) response curves of average local strain ($\bar{\varepsilon}_{yy} - \varepsilon_{yy}^0$) at the dislocation core versus applied strain ε_e .

核. 以双晶体系 4 中晶界环的 I 号位错 ($\alpha = 44.5^\circ$) 为例 (图 10), 当外加应变达到临界值 $\varepsilon_{e1}^{44.5^\circ} = 3.54\%$ 时, 晶界环处的 5|7 位错转变为 5|7|7|5 位错, 体系进入塑性变形阶段, 随后, 5|7|7|5 位错未发生位错结构转变及攀移与滑移运动, 而是直接进入“钉扎”阶段 (图 10(b), (c)). 在“钉扎”阶段中, 随着外加载荷的持续进行, 5|7|7|5 位错核心区域的应变振幅逐渐增大 (图 10(e)), 这是由于位错受晶格势垒的束缚产生应力集中所致. 当外加应变增至 4.19% 时, 位错核心处萌生裂纹并扩展. 通过对 12 组双晶体

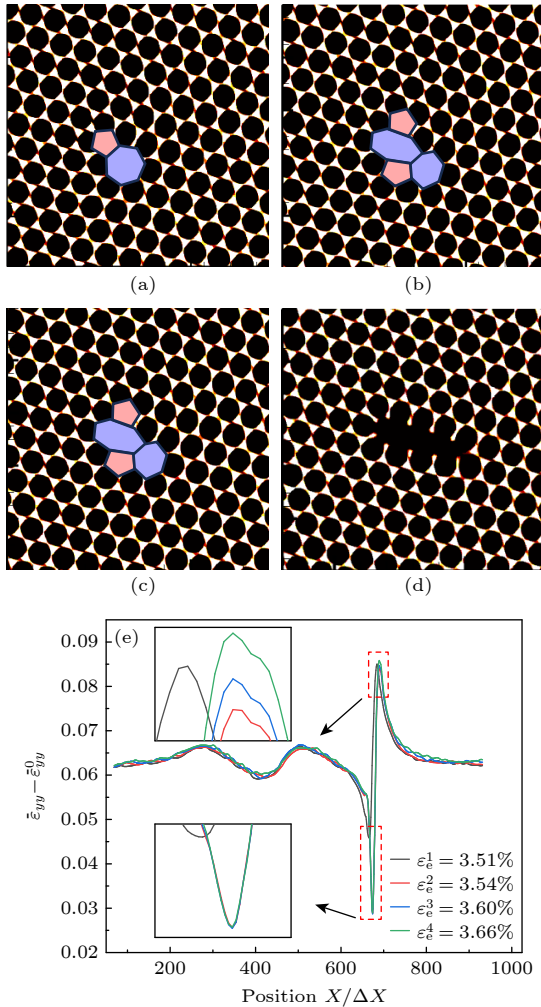


图 10 双晶体系 4, 晶界环 I 号位错 ($\alpha = 44.5^\circ$) 在应变作用下的微观结构演化图与应变响应过程 (a)–(d) $\varepsilon_e = 3.51\%$, 3.54% , 3.60% , 4.19% ; (e) 所对应的位错核心处的平均局部应变 ($\bar{\varepsilon}_{yy} - \varepsilon_{yy}^0$)-外加应变 ε_e 响应曲线

Fig. 10. Bicrystal system 4, microstructural evolution and strain response of dislocation I ($\alpha = 44.5^\circ$) in the GB loop under applied strain: (a)–(d) $\varepsilon_e = 3.51\%$, 3.54% , 3.60% , 4.19% ; (e) corresponding response curves of average local strain ($\bar{\varepsilon}_{yy} - \varepsilon_{yy}^0$) at the dislocation core versus applied strain ε_e .

系的模拟结果进行总结发现, 当 $\alpha \in [24.5^\circ, 54.5^\circ]$ 范围内, 位错演化规律与双晶体系 4 中晶界环 I 号位错的行为一致. 然而, 并非所有位错会表现出类似的结构转变与“钉扎”过程, 模拟结果表明, 当 $\alpha \in [70.7^\circ, 110.7^\circ]$ 范围内, 晶界环处的位错在弹性阶段, 弹-塑性转变阶段以及塑性变形阶段始终维持 5|7 位错结构. 以双晶体系 3 中晶界环 III 号位错 ($\alpha = 70.7^\circ$) 为例 (图 11), 在整个变形过程中, 位错核心区域的应变振幅减小 (图 11(d)), 未发生弹-塑性转变过程, III 号位错始终保持稳定的 5|7 位错构型, 未观察到位错结构转变以及攀移与滑移运动 (图 11(a)–(c)). 这一现象的物理机制在于: 当 5|7 位错的 Burgers 矢量与单轴拉伸加载方向之间的夹角接近 90° 时, 位错结构的动态演化需要克服较高的能量势垒.

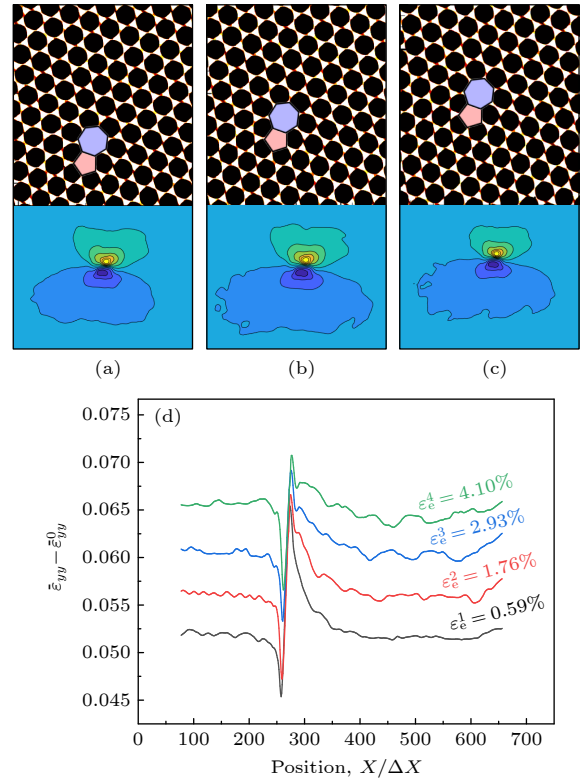


图 11 双晶体系 3, 晶界环 III 号位错 ($\alpha = 70.7^\circ$) 在应变作用下的微观结构图与应变响应过程 (a)–(c) $\varepsilon_e = 0.59\%$, 1.76% , 2.93% ; (d) 所对应的位错核心处的平均局部应变 ($\bar{\varepsilon}_{yy} - \varepsilon_{yy}^0$)-外加应变 ε_e 响应曲线

Fig. 11. Bicrystal system 3, microstructural evolution and strain response of dislocation III ($\alpha = 70.7^\circ$) in the GB loop under applied strain: (a)–(c) $\varepsilon_e = 0.59\%$, 1.76% , 2.93% ; (d) corresponding response curves of average local strain ($\bar{\varepsilon}_{yy} - \varepsilon_{yy}^0$) at the dislocation core versus applied strain ε_e .

4 结 论

本研究基于晶体相场 (PFC) 模型, 在原子尺度上模拟了单轴拉伸载荷作用下石墨烯双晶体系中晶界环的缺陷结构转变与动态演化过程, 主要结论如下:

1) 弹性响应阶段, 对 12 组石墨烯双晶体系的研究表明, 随着外加应变的增大, 晶界环处 5|7 位错核心区域的应变振幅逐渐减小。

2) 弹-塑性转变阶段, 当外加应变达到临界值时, 12 组石墨烯双晶体系晶界环处的 5|7 位错均通过 C—C 键的 90° 旋转, 转变为 5|7|7|5 位错结构, 转变过程中位错核心区域应变振幅增大, 可作为体系从弹性阶段过渡至塑性变形阶段的微观判据。

3) 塑性变形阶段, 石墨烯晶界环处位错动力学行为与位错伯氏矢量和单轴拉伸加载之间的夹角 α 密切相关。当 $\alpha \in [0^\circ, 4.5^\circ]$, 5|7 位错与 5|7|7|5 位错发生缺陷结构交替变化; 当 $\alpha \in [5.3^\circ, 25.3^\circ]$, 5|7|7|5 位错在外加载荷的作用下经历“储能-耗散-再储能”的能量涨落, 表现为“钉扎”状态与攀移/滑移运动的交替演化行为; 当 $\alpha \in [24.5^\circ, 54.5^\circ]$, 5|7|7|5 位错进入“钉扎”状态, 在外加载荷持续作用下, 位错核心区域应力集中诱发穿晶裂纹并扩展; 当 $\alpha \in [70.7^\circ, 110.7^\circ]$, 晶界环处 5|7 位错因其 Burgers 矢量与单轴拉伸方向之间的夹角趋近于 90°, 其动力学过程需要克服较高的能量势垒, 进而抑制了缺陷结构转变、位错运动及裂纹形核过程。

参考文献

- [1] Tiwari S K, Sahoo S, Wang N, Huczko A 2020 *J. Sci. : Adv. Mater. Devices* **5** 10
- [2] Slepchenkov M M, Glukhova O E 2019 *Coatings* **9** 74
- [3] Lherbier A, Dubois S M M, Declerck X, Niquet Y M, Roche S, Charlier J C 2012 *Phys. Rev. B* **86** 75402
- [4] Mortazavi B, Ahzi S 2013 *Carbon* **63** 460
- [5] Geim A K 2009 *Science* **324** 1530
- [6] Hansora D P, Shimpi N G, Mishra S 2015 *JOM* **67** 2855
- [7] Dervishi E, Ji Z, Htoon H, Sykora M, Doorn S K 2019 *Nanoscale* **11** 16571
- [8] Wong C H, Vijayaraghavan V 2012 *Materials Science and Engineering: A* **556** 420
- [9] He L C, Guo S S, Lei J C, Sha Z D, Liu Z S 2014 *Carbon* **75** 124
- [10] Fu Y, Ragab T, Basaran C 2016 *Comput. Mater. Sci.* **124** 142
- [11] Zhang X L, Zhang J L, Yang M 2020 *RSC Adv.* **10** 19254
- [12] Gamboa-Suárez A, Seuret-Hernández H Y, Leyssale J M 2022 *Carbon Trends* **9** 100197
- [13] Zandiatashbar A, Lee G H, An S J, et al. 2014 *Nat. Commun.* **5** 3186
- [14] Cottrell A H, Bilby B A 1949 *Proc. Phys. Soc. London, Sect. A* **62** 49
- [15] Nabarro F R N 1952 *Adv. Phys.* **1** 269
- [16] Lehtinen O, Kurasch S, Krasheninnikov A V, Kaiser U 2013 *Nat. Commun.* **4** 2098
- [17] Warner J H, Margine E R, Mukai M, Robertson A W, Giustino F, Kirkland A I 2012 *Science* **337** 209
- [18] Gong C, Robertson A W, He K, Lee G D, Yoon E, Allen C S, Kirkland A I, Warner J H 2015 *ACS Nano* **9** 10066
- [19] Gong C, He K, Chen Q, Robertson A W, Warner J H 2016 *ACS Nano* **10** 9165
- [20] Yang Z, Huang Y H, Ma F, Sun Y J, Xu K W, Chu P K 2015 *Eur. Phys. J. B* **88** 135
- [21] Grantab R, Shenoy V B, Ruoff R S 2010 *Science* **330** 946
- [22] Zhou W Q, Wang J C, Lin B, Wang Z J, Li J J, Huang Z F 2019 *Carbon* **153** 242
- [23] Gao F, Li H Q, Song Z, Zhao Y H 2024 *Acta. Phys. Sin.* **73** 248101 (in Chinese) [高丰, 李欢庆, 宋卓, 赵宇宏 2024 *物理学报* **73** 248101]
- [24] Yang L, Liu J J, Lin Y W, Xu K, Cao X Z, Zhang Z S, Wu J Y 2021 *Chem. Mater.* **33** 8758
- [25] Wu J Y, Gong H, Zhang Z S, He J Y, Ariza P, Ortiz M, Zhang Z L 2019 *Appl. Mater. Today* **15** 34
- [26] Liu J, Šesták P, Zhang Z, Wu J 2022 *Mater. Today Nano* **20** 100245
- [27] Yamanaka A, McReynolds K, Voorhees P W 2017 *Acta Mater.* **133** 160
- [28] Li J Y, Ni B, Zhang T, Gao H J 2018 *J. Mech. Phys. Solids* **120** 36
- [29] Qi Y, Krajewski P 2007 *Acta Mater.* **55** 1555
- [30] Elder K R, Grant M 2004 *Phys. Rev. E* **70** 51605
- [31] Elder K R, Katakowski M, Haataja M, Grant M 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 245701
- [32] Swift J, Hohenberg P C 1977 *Phys. Rev. A* **15** 319
- [33] Huang Z F, Elder K R, Provatas N 2010 *Phys. Rev. E* **82** 21605
- [34] Elder K R, Provatas N, Berry J, Stefanovic P, Grant M 2007 *Phys. Rev. B* **75** 64107
- [35] Los J H, Zakharchenko K V, Katsnelson M I, Fasolino A 2015 *Phys. Rev. B* **91** 45415
- [36] Singh S K, Neek-Amal M, Peeters F M 2013 *Phys. Rev. B* **87** 134103
- [37] Stefanovic P, Haataja M, Provatas N 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 225504
- [38] Tegze G, Bansal G, Tóth G I, Pusztai T, Fan Z, Gránágy L 2009 *J. Comput. Phys.* **228** 1612
- [39] Stefanovic P, Haataja M, Provatas N 2009 *Phys. Rev. E* **80** 46107
- [40] Heinonen V, Achim C V, Ala-Nissila T 2016 *Phys. Rev. E* **93** 53003
- [41] Zhou W Q 2019 *Ph. D. Dissertation* (Xi'an: Northwestern Polytechnical University) (in Chinese) [周文权 2019 博士学位论文 (西安: 西北工业大学)]
- [42] Zhou W Q, Wang J C, Wang Z J, Huang Z F 2019 *Phys. Rev. E* **99** 013302
- [43] Taha D, Mkhonta S K, Elder K R, Huang Z F 2017 *Phys. Rev. Lett.* **118** 255501
- [44] Wei Y J, Wu J T, Yin H Q, Shi X H, Yang R G, Dresselhaus M 2012 *Nat. Mater.* **11** 759
- [45] Wu J T, Wei Y J 2013 *J. Mech. Phys. Solids* **61** 1421
- [46] Liu T H, Pao C W, Chang C C 2012 *Carbon* **50** 3465
- [47] Li L, Reich S, Robertson J 2005 *Phys. Rev. B* **72** 184109
- [48] Kim Y, Ihm J, Yoon E, Lee G D 2011 *Phys. Rev. B* **84** 75445
- [49] Blaschke D N, Szajewski B A 2018 *Philos. Mag.* **98** 2397
- [50] Bonilla L L, Carpio A, Gong C, Warner J H 2015 *Phys. Rev. B* **92** 155417

Dynamical behavior of graphene dislocations based on crystal phase field model*

WANG Hui WU Baiyu ZHEN Leyi ZHOU Wenquan[†]

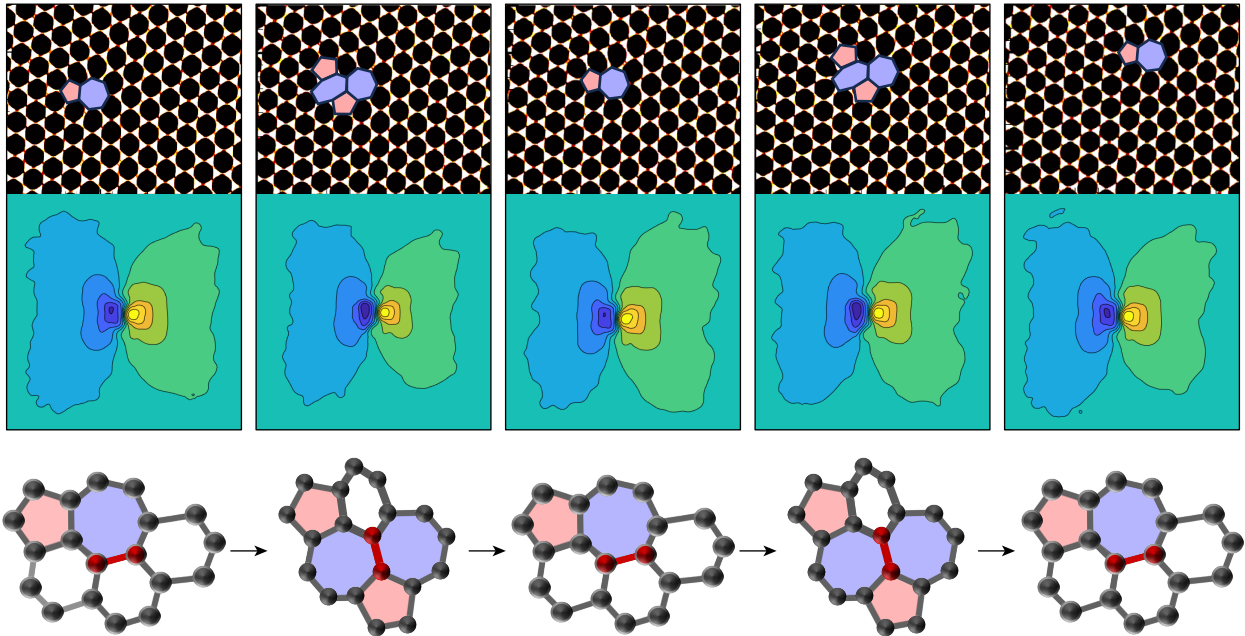
(College of Science, Northwest A & F University, Yangling 712100, China)

(Received 15 July 2025; revised manuscript received 5 September 2025)

Abstract

The study of the evolution of grain boundary (GB) structures and the mechanisms of dislocation motion in graphene is of significance in uncovering the physical essence of plastic deformation behavior of graphene. Currently, the dynamic behavior of graphene GBs under non-mechanical loads has been extensively investigated. However, due to the inherent limitations of existing experimental conditions and simulation methods in terms of temporal and spatial scales, the dynamic evolution process of dislocations in graphene under mechanical tensile loads and their intrinsic correlation with plastic deformation are still poorly understood. In this work, a phase-field crystal (PFC) model based on classical density functional theory (DFT) is adopted. Combining periodic density field variables, the model achieves cross-scale coupling between microscopic crystal structures and macroscopic diffusion time scales, enabling efficient simulation of long-term evolution processes. It is particularly suitable for characterizing microscopic mechanisms involving complex defect evolution in graphene, such as dislocation glide and climb, and GB migration.

In this work, the complete deformation process of a graphene bicrystal system containing a GB loop under uniaxial tensile loading is simulated on an atomic scale, including elastic response, elastic-plastic transition, plastic deformation, and fracture. The transformation characteristics of 5|7 dislocation core structures and the



* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 52002331) and the 14th Five-Year Plan for Educational Science of Shaanxi Province, China (Grant No. SGH22Q197).

[†] Corresponding author. E-mail: wqzhou@nwfau.edu.cn

topological evolution of the GB loop within the system are systematically investigated. The simulation results reveal that when the applied strain is below a critical value, the system exhibits the elastic response, characterized by a linear relationship between the average response strain and the applied strain. As the strain reaches the critical value, the 5|7 dislocations at the GB loop undergo transformation into 5|7|7|5 dislocations through C—C bond rotation. This transition is accompanied by a significant increase in the strain amplitude at the dislocation cores, marking the onset of plastic deformation. Beyond the critical strain, the system thus enters the plastic deformation stage, during which the GB loop exhibits three different types of evolution behaviors: 1) alternating transformations between 5|7 and 5|7|7|5 dislocation structures driven by repeated C—C bond rotation; 2) a cyclic evolution of dislocations involving “pinning \rightleftharpoons mixed climb/glide motion”, accompanied by energy fluctuations described as “energy storage-dissipation-restorage”; 3) dislocations remaining in a “pinned” state until stress concentration in their core regions initiates transgranular cracking, ultimately leading to ductile fracture of the system.

This study provides important theoretical insights into the physical mechanisms underlying the plastic deformation behavior of graphene.

Keywords: phase-field crystal model, graphene, grain-boundary, 5|7 dislocation

PACS: 81.10.Aj, 31.15.es, 61.48.Gh, 61.72.Lk

DOI: [10.7498/aps.74.20250936](https://doi.org/10.7498/aps.74.20250936)

CSTR: [32037.14.aps.74.20250936](https://cstr.net.cn/detail/32037.14.aps.74.20250936)

基于晶体相场模型的石墨烯位错动力学行为研究

王慧 武白羽 甄乐怡 周文权

Dynamical behavior of graphene dislocations based on crystal phase field model

WANG Hui WU Baiyu ZHEN Leyi ZHOU Wenquan

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 218101 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250936

CSTR: 32037.14.aps.74.20250936

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250936>

当期内容 View table of contents: <https://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

三模晶体相场法研究应变诱导石墨烯晶界位错演化

Strain induced dislocation evolution at graphene grain boundary by three-mode phase-field crystal method

物理学报. 2024, 73(24): 248101 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20241368>

基于分子动力学模拟的石墨烯镁基复合材料力学行为

Mechanical behavior of graphene magnesium matrix composites based on molecular dynamics simulation

物理学报. 2022, 71(8): 086201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211753>

金刚石晶界辅助石墨烯沉积的成核机理仿真

Simulation research on nucleation mechanism of graphene deposition assisted by diamond grain boundary

物理学报. 2022, 71(8): 086103 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211981>

应变诱发四方相小角度对称倾侧晶界位错反应的晶体相场模拟

Phase field crystal simulation of strain-induced square phase low-angle symmetric tilt grain boundary dislocation reaction

物理学报. 2022, 71(9): 096102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212278>

石墨烯的形貌特征对其场发射性能的影响

Influence of morphological characteristics of graphene on its field emission properties

物理学报. 2024, 73(8): 086101 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231784>

基于粗粒化分子动力学的自支撑石墨烯镜面屈曲研究

Mirror buckling analysis of freestanding graphene membranes by coarse-grained molecular dynamics method

物理学报. 2023, 72(24): 246801 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20231120>