



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

夏文强 赵彦 刘振智 鲁晓刚

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

Xia Wen-Qiang Zhao Yan Liu Zhen-Zhi Lu Xiao-Gang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 096102 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20212278

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212278>

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

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

温度对小角度对称倾斜晶界位错运动影响的晶体相场模拟

Phase field crystal simulation of the effect of temperature on low-angle symmetric tilt grain boundary dislocation motion

物理学报. 2019, 68(17): 170504 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190051>

取向角对小角度非对称倾斜晶界位错运动影响的晶体相场模拟

Phase field crystal simulation of effect of misorientation angle on low-angle asymmetric tilt grain boundary dislocation motion

物理学报. 2020, 69(14): 140504 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200133>

运动晶界与调幅分解相互作用过程的相场法研究

A phase-field study on interaction process of moving grain boundary and spinodal decomposition

物理学报. 2022, 71(7): 078101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211973>

氦泡在bcc钨中晶界处成核长大的分子动力学模拟

The nucleation and growth of Helium bubbles at grain boundaries of bcc tungsten: a molecular dynamics simulation

物理学报. 2020, 69(4): 046103 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191069>

Fe-Cr合金晶界偏析及辐照加速晶界偏析的相场模拟

Phase field simulation of grain boundary segregation and radiation-enhanced segregation in Fe-Cr alloys

物理学报. 2021, 70(11): 116101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201840>

无铅四方相钙钛矿短周期超晶格压电效应机理研究

Piezoelectric effect mechanism in lead-free tetragonal perovskite short-period superlattices

物理学报. 2018, 67(7): 077701 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172710>

# 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\*

夏文强 赵彦† 刘振智 鲁晓刚

(上海大学材料科学与工程学院, 省部共建高品质特殊钢冶金与制备国家重点实验室, 上海 200444)

(2021年12月8日收到; 2022年1月4日收到修改稿)

采用晶体相场法研究了外加应变作用下, 不同取向差的四方相对称倾侧小角度晶界的位错运动与反应及反应过程中的位错组态, 通过采用几何相位法对位错周围应变场进行了表征. 结果表明, 凝固弛豫达到稳态后, 晶界两侧位错平行且方向相反, 随晶界两侧晶粒取向差增大, 位错数目增加, 距离减小, 且体系自由能增加. 在外加应变作用下, 晶界位错经历攀移、发射、反应湮灭等阶段, 体系自由能呈现波动. 当取向差增大时, 位错运动方式由攀移向攀滑转变, 产生更多类型的位错组构型, 并发生相应的位错与位错组之间的反应. 对于不同构型的位错反应, 正切应变驱动位错靠近, 负切应变驱动位错湮灭.

**关键词:** 晶体相场, 四方相, 位错反应, 晶界

**PACS:** 61.72.Bb, 61.72.Hh, 07.05.Tp

**DOI:** 10.7498/aps.71.20212278

## 1 引言

基于密度泛函的晶体相场法<sup>[1-3]</sup>(phase-field-crystal, PFC)能够实现扩散时间尺度与原子空间尺度的模拟, 且自洽耦合了晶体点阵结构, 从而被广泛用于相结构转变<sup>[4-6]</sup>、晶界变形与位错机制<sup>[7,8]</sup>、反霍尔-佩奇效应<sup>[9,10]</sup>、微观裂纹扩展<sup>[11,12]</sup>、铁电磁复合材料的微结构<sup>[13,14]</sup>、凝固的枝晶生长<sup>[15,16]</sup>等的模拟, 是探究原子尺度微观组织演化的重要方法之一.

材料的加工变形行为与晶界、位错等微观缺陷的构型及运动有关. 在外加应力、应变作用下, 位错将发生运动、分解<sup>[17]</sup>、反应<sup>[18]</sup>, 导致晶界迁移, 甚至湮灭<sup>[19-21]</sup>, 从而影响材料的力学性能. 近年来有许多关于实验方法研究晶界和位错的报道<sup>[22,23]</sup>, 但难以观察到其运动, 而通过 PFC 方法能够从理

论模拟上研究位错运动. Hirouchi 等<sup>[24]</sup>通过引入等体积法假设, 实现了在外加应变作用下 PFC 方法模拟晶界与位错的运动, 随后的研究者在此基础上进行了进一步研究<sup>[25-27]</sup>. 但由于其内在的规律及机理较为复杂, 上述研究主要讨论了外在因素对晶界、位错运动的影响.

同时, 晶界、取向等特征以及缺陷引起的应变的表征对理解晶界和位错运动有着重要意义. 基于 Mumford-Shah 型泛函<sup>[28]</sup>和能量泛函最小化的变分方法<sup>[29]</sup>能够实现对晶界的表征, 并且上述方法还能表征缺陷周围的应变场. 为了捕获多晶变形中的晶粒取向, 通过引入小波函数, 利用小波变换的方法<sup>[30]</sup>可视化晶粒取向. Wang 等<sup>[31]</sup>成功地将该方法由二维推向了三维. 除此之外, 几何相位法<sup>[32]</sup>(geometric phase approach, GPA)和峰对法<sup>[33]</sup>(peak pairs algorithm, PPA)等也能表征应变. PPA 是利用原子近邻峰之间的关系获得局部

\* 国家自然科学基金(批准号: 51771226)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhaoyan8626@shu.edu.cn

应变值,但对于原子位置的精确程度较高,而 GPA 通过计算相位场获得应变,并兼顾两个实虚空间的信息,不易受原子位置的干扰,从而常用于原子尺度下应变的表征<sup>[34,35]</sup>.

本文采用 PFC 方法模拟不同取向差下对称侧小角度晶界的结构及其外加应变下位错运动和相互作用.通过位错运动与体系自由能之间的联系,对位错的发射和位错反应湮灭的过程进行研究,分析不同位错反应的构型特征,并表征了晶界和位错周围的应变场分布,揭示位错反应的内在机理.

## 2 计算模拟方法

### 2.1 双模晶体相场模型

采用 Wu 等<sup>[36]</sup>提出的双模 PFC 模型构建四方相点阵结构,其无量纲的自由能密度函数  $F$  可以表示为

$$F = \int \left( \frac{\psi}{2} \left\{ -\varepsilon + (\nabla^2 + 1)^2 \times [(\nabla^2 + Q^2)^2 + R] \right\} \psi + \frac{\psi^4}{4} \right) dV, \quad (1)$$

式中,  $\psi(r, t)$  作为序参量表示原子密度场,其原子位置不随时间变化;而对于液相,时间发生改变,原子位置将发生变化,用常数  $\bar{\psi}_0$  表示其平均原子密度;  $\varepsilon$  为表征温度的参数,控制固-液两相区的大小,随着  $\varepsilon$  值减小,温度逐渐降低;  $Q$  为次邻近波矢幅值与最近邻波矢幅值之比,该值由晶体结构决定;  $R$  则控制双模与单模结构的相对稳定性,随着  $R$  的值增大,双模会逐渐向单模转变.对于本文构建的四方相  $Q = \sqrt{2}$ ,  $R = 1$ .

对于无量纲原子密度场  $\psi(r, t)$ ,在体积不变的情况下是一个保守场变量,其演化过程可通过 Cahn-Hilliard<sup>[1]</sup> 动力学方程来描述:

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

将 (1) 式代入 (2) 式得

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla^2 \left( \left\{ -\varepsilon + (\nabla^2 + 1)^2 \times [(\nabla^2 + Q^2)^2 + R] \right\} \psi + \psi^3 \right). \quad (3)$$

采用半隐式 Fourier 谱方法<sup>[37]</sup>对方程 (3) 进行数值求解.

采用双模近似,四方相的原子密度函数的表达式为<sup>[36]</sup>

$$\psi_{\text{sq}} = \bar{\psi}_0 + 2A_{\text{sq}}(\cos \mathbf{q}x + \cos \mathbf{q}y) + 2B_{\text{sq}} \cos \mathbf{q}x \cos \mathbf{q}y, \quad (4)$$

式中,  $\bar{\psi}_0$  为平均原子密度值;  $A_{\text{sq}}$  和  $B_{\text{sq}}$  分别表示密度波的振幅;  $\mathbf{q}$  为波矢,  $q = 1$ .

将四方相原子密度函数 (4) 式代入 (1) 式,使分别关于  $A_{\text{sq}}$  和  $B_{\text{sq}}$  自由能最小化得到  $A_{\text{sq}}$  和  $B_{\text{sq}}$ .经过能量最小化后的四方相自由能密度函数表达式为

$$f_s^{\text{sq}} = 2 \left( -\varepsilon + 3\bar{\psi}_0^2 \right) A_{\text{sq}}^2 + 2 \left( -\varepsilon + 3\bar{\psi}_0^2 \right) B_{\text{sq}}^2 + 24\bar{\psi}_0 A_{\text{sq}}^2 B_{\text{sq}} + 36A_{\text{sq}}^2 B_{\text{sq}}^2 + 9A_{\text{sq}}^4 + 9B_{\text{sq}}^4 - \frac{\varepsilon}{2}\bar{\psi}_0^2 + \frac{1}{4}\bar{\psi}_0^4. \quad (5)$$

利用公切线法则,通过化学势 ((6) 式) 与巨势 ((7) 式) 相等,求解 (6) 式与 (7) 式的方程组,可得到如图 1 所示的双模二维 PFC 相图.

$$\frac{\partial f_s^{\text{sq}}(\bar{\psi}_s)}{\partial \bar{\psi}_s} = \frac{\partial f_l(\bar{\psi}_l)}{\partial \bar{\psi}_l} = \mu_E, \quad (6)$$

$$f_s^{\text{sq}}(\bar{\psi}_s) - \mu_E \bar{\psi}_s = f_l(\bar{\psi}_l) - \mu_E \bar{\psi}_l. \quad (7)$$

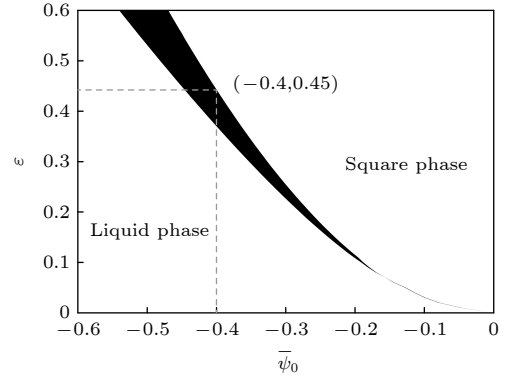


图 1 二维四方相相图 (黑色部分为两相共存区)

Fig. 1. Phase diagram of the two-dimensional square lattices (the black part is the two-phase coexistence region).

### 2.2 模拟参数设置

以四方相为对象,所设置的模拟参数如表 1 所列,平均原子密度为  $\bar{\psi}_0 = -0.4$ ,温度为  $\varepsilon = 0.45$ ,空间步长为  $\Delta x = \Delta y = \pi/4$ ,时间步长为  $\Delta t = 0.5$ ,边界条件采用周期性边界条件.计算时,模拟区域的大小为  $L_x \times L_y = 512\Delta x \times 512\Delta y$ ,初始区域分为三部分,  $0 < y < \frac{L_y}{8} + d_0$ ,  $\frac{3L_y}{8} - d_0 < y < \frac{5L_y}{8} + d_0$ ,

$\frac{7L_y}{8} - d_0 < y < L_y$  ( $0 < x < L_x$ ). 其中  $0 < y < \frac{L_y}{8} + d_0$  与  $\frac{7L_y}{8} - d_0 < y < L_y$  属于上下两侧晶粒, 取向角为  $-\frac{\theta}{2}$ ;  $\frac{3L_y}{8} - d_0 < y < \frac{5L_y}{8} + d_0$  属于中间晶粒, 取向角为  $\theta/2$ ;  $d_0$  表示两晶粒之间设置的液相区域宽度为  $L_y/8$ . 通过液-固相转变, 经过 30000 时间步长弛豫过程得到稳定的对称倾侧小角度晶界.

表 1 模拟设定的参数  
 Table 1. Parameters in the simulation.

方案	初始原子密度 $\bar{\psi}_0$	温度相关参量 $\varepsilon$	取向差 $\theta$
A	-0.40	0.45	$4^\circ$
B	-0.40	0.45	$6^\circ$
C	-0.40	0.45	$8^\circ$

### 2.3 单轴拉伸模型

采用等体积法<sup>[24]</sup>模型, 模拟不同取向四方相的形变过程, 则有

$$s = \Delta x \Delta y = \Delta x' \Delta y', \quad (8)$$

式中,  $\Delta x$  和  $\Delta y$  为初始空间步长,  $\Delta x'$  和  $\Delta y'$  为变形后的空间步长,  $s$  为模拟区域的面积. 如对体系在  $x$  方向上施加一个拉应变, 经过  $n$  个时间步长的变形后, 空间步长为

$$\Delta x' = \Delta x (1 + \varepsilon) = \Delta x (1 + n\dot{\varepsilon}\Delta t), \quad (9)$$

$$\Delta y' = \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta x'} = \frac{\Delta y}{1 + n\dot{\varepsilon}\Delta t}, \quad (10)$$

式中,  $\dot{\varepsilon}$  为应变速率, 应变量表示为  $\varepsilon = n\dot{\varepsilon}\Delta t$ , 本文中采用的应变速率为  $\dot{\varepsilon} = 5 \times 10^{-6}$ .

### 2.4 晶体应变表征方法

为了反映晶界与位错等缺陷的应变, 采用 GPA<sup>[32]</sup> 方法对其进行表征. 在 GPA 方程的构造中, 原子图像的密度场  $I(\mathbf{r})$  可以表示为

$$I(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{g}} I_{\mathbf{g}}(\mathbf{r}) e^{2\pi i \mathbf{g} \cdot \mathbf{r}}, \quad (11)$$

式中,  $\mathbf{g}$  为无畸变的参考点阵的倒格矢,  $\mathbf{r}$  为实空间的位置矢量. 通过对局部傅里叶分量  $I_{\mathbf{g}}(\mathbf{r})$  的计算, 可获得相对于参考点阵的畸变. 经滤波后, 局部傅里叶分量为

$$I_{\mathbf{g}}(\mathbf{r}) = A_{\mathbf{g}}(\mathbf{r}) e^{iP_{\mathbf{g}}(\mathbf{r})}, \quad (12)$$

式中,  $A_{\mathbf{g}}(\mathbf{r})$  为振幅场,  $P_{\mathbf{g}}(\mathbf{r})$  为相位场. 而  $P_{\mathbf{g}}(\mathbf{r})$  与位移场  $\boldsymbol{\mu}(\mathbf{r})$  关系为

$$P_{\mathbf{g}}(\mathbf{r}) = -2\pi \mathbf{g} \cdot \boldsymbol{\mu}(\mathbf{r}). \quad (13)$$

对于二维图像, 要确定位移场需要两个相位场:  $P_{\mathbf{g}_1}(\mathbf{r})$  和  $P_{\mathbf{g}_2}(\mathbf{r})$ , 因此通过 (13) 式可以得到位移场为<sup>[32]</sup>

$$\boldsymbol{\mu}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2\pi} [P_{\mathbf{g}_1}(\mathbf{r}) \mathbf{a}_1 + P_{\mathbf{g}_2}(\mathbf{r}) \mathbf{a}_2], \quad (14)$$

其中  $\mathbf{a}_1$  和  $\mathbf{a}_2$  分别为傅里叶空间中  $\mathbf{g}_1$  与  $\mathbf{g}_2$  对应实空间的非空线的矢量. 获得位移场后, 采用经典弹性力学可求得应变场<sup>[32]</sup>:

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\partial \mu_x}{\partial x}, \quad \varepsilon_{yy} = \frac{\partial \mu_y}{\partial y}, \quad (15)$$

$$\varepsilon_{xy} = \frac{\partial \mu_x}{\partial y}, \quad \varepsilon_{yx} = \frac{\partial \mu_y}{\partial x}. \quad (16)$$

## 3 模拟结果分析

为研究不同取向差的对称倾侧小角度晶界位错构型以及外加应变下位错运动和反应, 本文先在图 1 相图所示的相点模拟四方相双晶的弛豫过程, 得到稳定的晶界位错构型; 其次, 对弛豫后的晶体构型施加应变, 观察对应的位错响应, 分析位错运动行为、体系自由能、位错周围应变场等; 最后分析不同位错反应内在机理及与宏观性质的对应关系.

### 3.1 四方相双晶的弛豫过程模拟

通过表 1 中 A 方案的参数来模拟双晶凝固并得到稳定晶界构型的过程, 如图 2 所示. 设置中间晶粒与两侧晶粒的取向差为  $\theta = 4^\circ$ , 其经历了晶界逐步接触-晶界弛豫后形成稳定的对称倾侧小角度晶界. 中间晶粒两侧小角度晶界各由 4 个伯氏矢量  $\mathbf{b}$  相同的位错组成, 并且两两间距相同如图 2(d), 两行位错伯氏矢量  $\mathbf{b}$  方向相反、大小相同, 这些位错为刃型位错, 其半原子面与晶界平行.

对于不同的取向差弛豫后其稳定的晶界位错构型, 如图 3 所示. 图 3 中不同颜色的点表示两侧晶界的位错在模拟区域内的位置, 蓝色与青色的折线分别表示位错数量和位错间距的变化. 图中看到位错在晶界处呈直线排布, 当  $\theta = 6^\circ$  与  $\theta = 8^\circ$  时, 两侧位错相对于区域中心对称, 但  $\theta = 4^\circ$  时, 位错沿区域下部偏移. 随着取向差的增大, 位错数量增加, 位错间距减小, 这与小角度对称倾侧晶界的位错模型相符合:

$$d = \frac{b}{2 \sin(\theta/2)} \approx \frac{b}{\theta}. \quad (17)$$

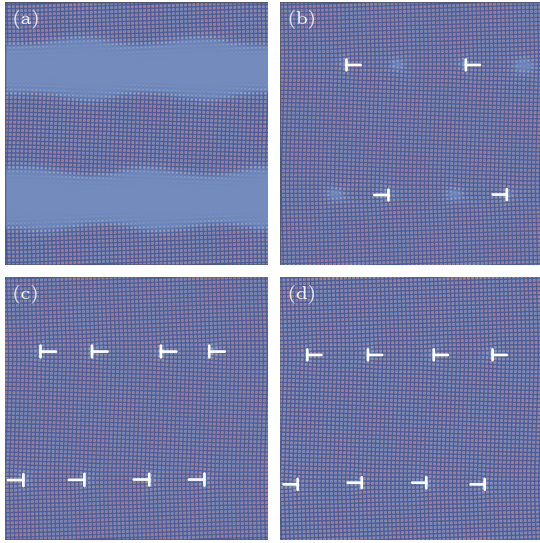


图 2  $\theta = 4^\circ$ 时双晶弛豫过程的模拟 (a)  $t = 100$ ; (b)  $t = 1300$ ; (c)  $t = 1700$ ; (d)  $t = 30000$

Fig. 2. Simulation of the relaxation process of bicrystals with  $\theta = 4^\circ$ : (a)  $t = 100$ ; (b)  $t = 1300$ ; (c)  $t = 1700$ ; (d)  $t = 30000$ .

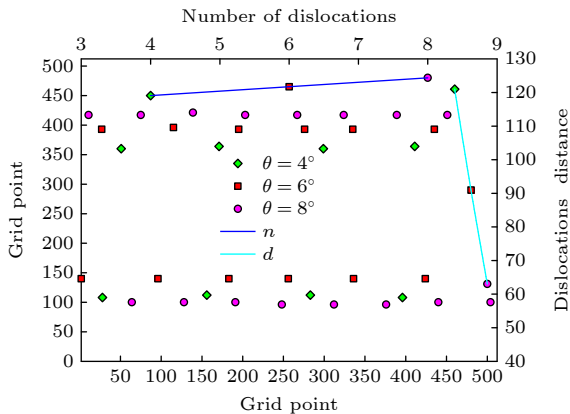


图 3 不同取向差对应的位错构型、位错数目与位错间距  
Fig. 3. Dislocation configuration, number of dislocations and dislocation distance corresponding to different misorientations.

进一步观察凝固弛豫过程中体系自由能的变化, 如图 4. 随着液相的不断消耗, 体系自由能减小, 随后保持不变, 表明体系达到了稳定状态, 不同取向差呈现相同的趋势. 但取向差越大, 稳定时体系自由能越高, 可认为, 随着取向差增大, 晶界能越大, 而导致整个体系自由能增大.

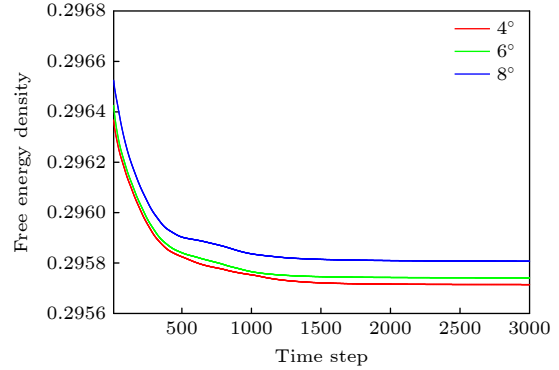


图 4 取向差对弛豫过程体系自由能变化的影响  
Fig. 4. Effect of misorientations on the change of free energy during relaxation process.

为了分析不同取向差下晶界位错附近的应变分布, 现获得晶界处  $\varepsilon_{xx}$  分量云图, 如图 5. 位错应变场呈蝴蝶状范围直线排布在晶界两侧, 随着取向差的增大, 单个位错的应变范围逐渐减小, 并且晶界位错之间的无应变区域也减小. 这表明小角度晶界的取向差与晶界附近的本征应变有着很大的联系.

### 3.2 取向差对外加应变下位错运动的影响

本文采用 2.2 节设置的 A, B 和 C 三种方案, 对弛豫后的晶体结构沿  $x$  轴施加拉应变, 同时在  $y$  轴施加压应变, 分析在此条件下不同晶界取向差  $\theta$  对对称倾侧晶界位错运动的影响.

如图 6 为  $\theta = 4^\circ$ 时晶界位错演变. 图中黑色箭头表示位错的运动方向, 蓝色虚线框中表示位错演化过程中对应的特征构型. 为便于表示晶界发射位

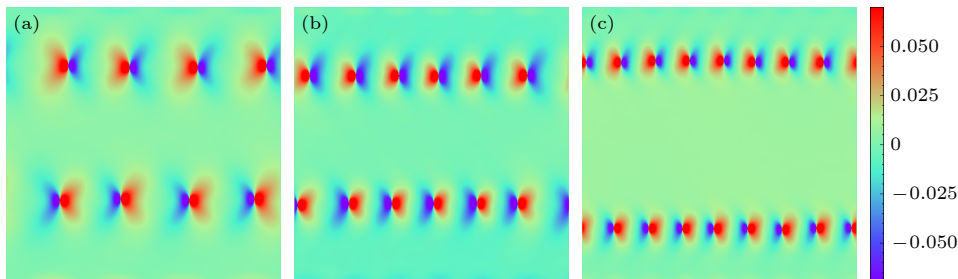


图 5 不同取向差下晶界处  $\varepsilon_{xx}$  应变云图 (a)  $\theta = 4^\circ$ ; (b)  $\theta = 6^\circ$ ; (c)  $\theta = 8^\circ$

Fig. 5. Contours of  $\varepsilon_{xx}$  strain at the grain boundary under different misorientations: (a)  $\theta = 4^\circ$ ; (b)  $\theta = 6^\circ$ ; (c)  $\theta = 8^\circ$ .

错类型及后续的位错反应, 在图 6(a) 标定了四方相的 (11) 面, 并用红色位错符号在插图 (g) 中标识四种位错类型  $n1, n2, n3, n4$ , 分别对应的伯氏矢量为:  $\mathbf{b}_1 = \frac{a}{2}[01], \mathbf{b}_2 = \frac{a}{2}[0\bar{1}], \mathbf{b}_3 = \frac{a}{2}[10], \mathbf{b}_4 = \frac{a}{2}[\bar{1}0]$ , 这里,  $a$  为晶体的点阵常数.

图中看到, 由于晶界位错攀移克服晶界弹性阻碍所需的能量小于滑移, 晶界位错先沿水平方向攀移, 且上下两列位错运动方向相反 (Step 1). 随后, 位错附近原子发生预熔化, 当预熔化区域达到一定宽度时, 两侧晶界位错将垂直于晶界方向同时发射出两个大小相等方向相反的刃位错 (Step 2).

从图 6(b) 可以观察到晶界位错分别为  $n1$  和  $n2$ , 发射位错为  $n3$  和  $n4$ . 故上述晶界位错分解发射为 L1 型 (见表 2) 位错反应. 随后, 晶界和发射位错各自进行攀移, 当  $n3$  与  $n4$  型位错相遇时发生 R1 (见表 2) 型反应, 直到  $n3$  与  $n4$  型位错全部湮灭 (图 6(c) 中的 Step 3).

随后重复 “Step 1→Step 2→Step 3” 过程, 如图 6(d)–(f) 所示. 但从图 6(f) 可以看到下侧晶界

位错不再呈直线排布, 而是在垂直方向发生了滑移, 这是由于 R1 型反应未能使  $n3$  与  $n4$  型位错全部湮灭, 剩余的发射位错和晶界位错随机形成位错组, 发生攀滑移, 而导致下侧晶界位错位置改变

$\theta = 6^\circ$  (图 7) 与  $\theta = 4^\circ$  的位错运动演化相比, 仍按 Step 1 和 Step 2 过程进行 (图 7(a) 和图 7(b)). 但晶界位错不再同时分解发射出  $n3$  与  $n4$  型位错, 而是产生如图 7(b) 中新的位错组态: 发生 L2 (红色圈) 和 L3 (黄色圈) 型 (见表 2) 的分解发射, 形成单个位错和位错组; 褐色圈中虽然也为 L1 构型, 但比较于  $\theta = 4^\circ$ , 不再具有规则的对称性; 绿色圈中的位错构型, 未分解发射. 可能原因是由于取向差增大, 晶界位错数量增加, 当施加外应变时, 各位错受到的应变不再平均化, 不一致的应变导致分解发射不同的位错组态. 在 Step 3 过程, 位错组发生分解, 而对于单个位错不再只发生攀移, 而是攀移、滑移一起进行, 如图 7(b) 与图 7(c) 中所标出的 A 与 B. 随后仅部分  $n3$  与  $n4$  型位错相遇发生 R1 构型位错反应, 如图 7(c) 中红色矩形框中所示.

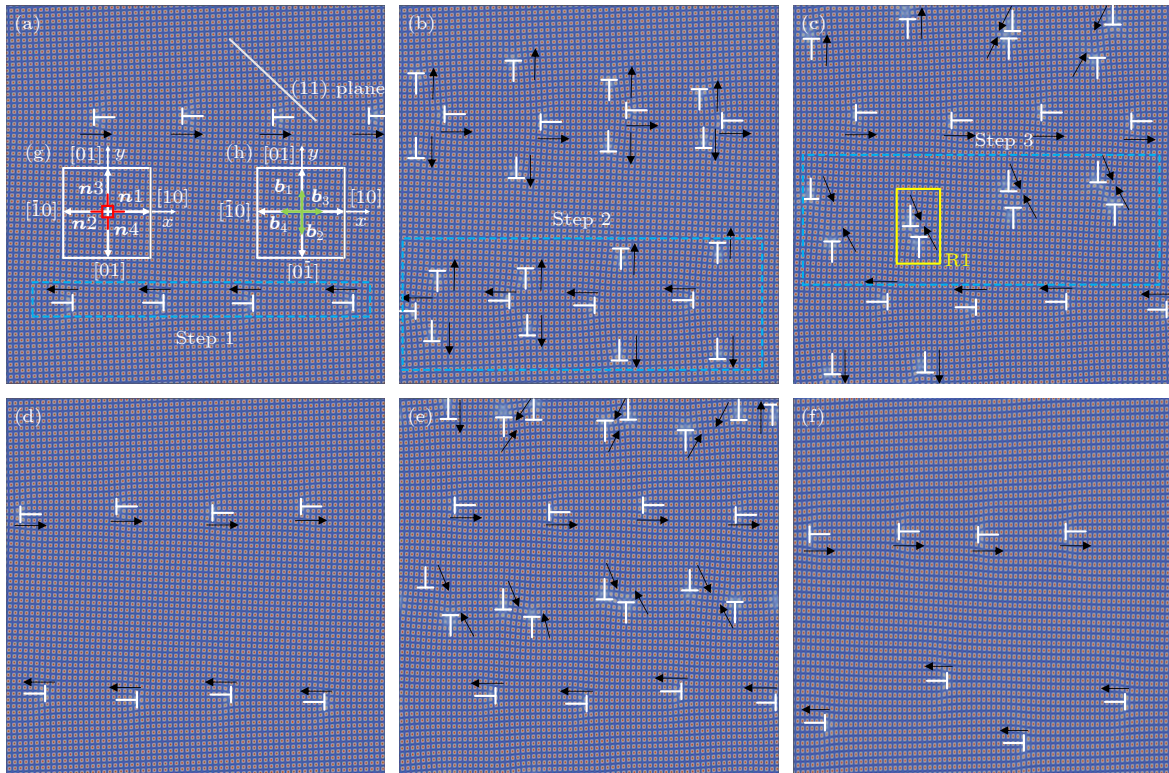


图 6 应变作用下  $\theta = 4^\circ$  时晶界位错运动模拟图 (a)  $t = 50$ ; (b)  $t = 14150$ ; (c)  $t = 15250$ ; (d)  $t = 17550$ ; (e)  $t = 29100$ ; (f)  $t = 48500$ . 图 6(a) 中插图 (g) 和 (h) 分别表示刃位错的类型和位错对应的伯氏矢量类型

Fig. 6. Simulation of grain boundary dislocation motion under strain with  $\theta = 4^\circ$ : (a)  $t = 50$ ; (b)  $t = 14150$ ; (c)  $t = 15250$ ; (d)  $t = 17550$ ; (e)  $t = 29100$ ; (f)  $t = 48500$ . Inset (g) and (h) represent the type of edge dislocation and the Burgers vector type respectively corresponding to the dislocation in Fig. 6(a).

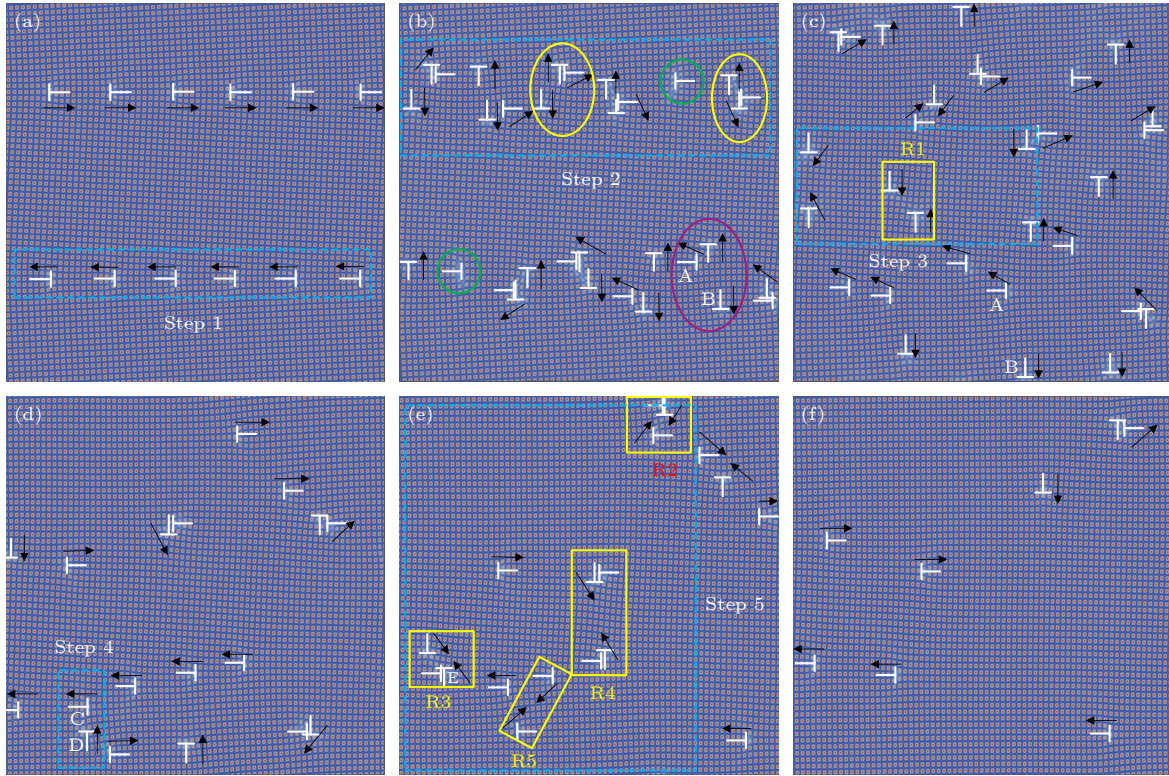


图 7 应变作用下  $\theta = 6^\circ$  时晶界位错运动模拟图 (a)  $t = 50$ ; (b)  $t = 15000$ ; (c)  $t = 16350$ ; (d)  $t = 19550$ ; (e)  $t = 23500$ ; (f)  $t = 26950$   
 Fig. 7. Simulation of grain boundary dislocation motion under strain with  $\theta = 6^\circ$ : (a)  $t = 50$ ; (b)  $t = 15000$ ; (c)  $t = 16350$ ; (d)  $t = 19550$ ; (e)  $t = 23500$ ; (f)  $t = 26950$ .

表 2 不同构型的位错分解发射与位错反应

Table 2. Dislocation decomposition and dislocation reaction of different configuration.

编号	位错分解发射	编号	位错反应
L1	$n1 \xrightarrow{\text{分解}} n1 + n3 + n4$	R1	$n3 + n4 \xrightarrow{\text{反应}} 0$
	$n2 \xrightarrow{\text{分解}} n2 + n3 + n4$	R2	$n1 + \overline{n2n4} \xrightarrow{\text{反应}} n4, n2 + \overline{n2n3} \xrightarrow{\text{反应}} n4$
L2	$n1 \xrightarrow{\text{分解}} \overline{n1n3} + n4$	R3	$n3 + \overline{n2n4} \xrightarrow{\text{反应}} n2, n4 + \overline{n1n3} \xrightarrow{\text{反应}} n1$
	$n2 \xrightarrow{\text{分解}} \overline{n2n3} + n4$	R4	$\overline{n1n3} + \overline{n2n4} \xrightarrow{\text{反应}} 0, \overline{n1n4} + \overline{n2n3} \xrightarrow{\text{反应}} 0$
L3	$n1 \xrightarrow{\text{分解}} \overline{n1n4} + n3$	R5	$n1 + n2 \xrightarrow{\text{反应}} 0$
	$n2 \xrightarrow{\text{分解}} \overline{n2n4} + n3$		

随着演化的进行, 不再重复“Step 1→Step 2→Step 3”, 而是保持原有的运动状态进行 Step 4, 攀移时晶界位错和发射位错相遇时两两结合形成位错组, 例如图 7(d) 中 C 与 D 位错, 结合后形成图 7(e) 中的 E 位错组. 这是由于发射的位错只有部分发生反应而湮灭, 模拟区域内位错数量较多, 并部分以位错组存在, 各位错受到的应变不足以驱使位错分解发射. 当演化进行到 23500 步时, 不同位错或位错组相遇发生如表 2 中标号为 R2, R3, R4, R5 的位错反应, 如图 7(e) 中红色方框中所示, 为 Step 5. 通过上述的位错反应, 位错发生湮灭, 如图 7(f) 所示, 位错数量减少, 体系畸变减

小, 取向差趋于统一, 但存在少量位错, 未能形成完美单晶状.

如图 8 所示, 当晶界两侧晶粒取向差增大到  $\theta = 8^\circ$  时, Step 1 和 Step 2 与  $\theta = 6^\circ$  时相似, 但不存在未分解发射的晶界位错, 并且发射的位错不再优先向垂直方向进行攀移, 而是如蓝色实线矩形中与邻近晶界位错结合形成位错组, 如图 8(b) 所示. 这是由于取向差的进一步增大, 导致晶界位错数与分解发射的位错数量进一步增加, 晶界处位错密度增大, 晶界位错与发射位错之间间距减少, 之间相互作用力增加, 从而发射位错优先于晶界位错形成位错组. Step 3 时位错组运动中不再分解, 这表明

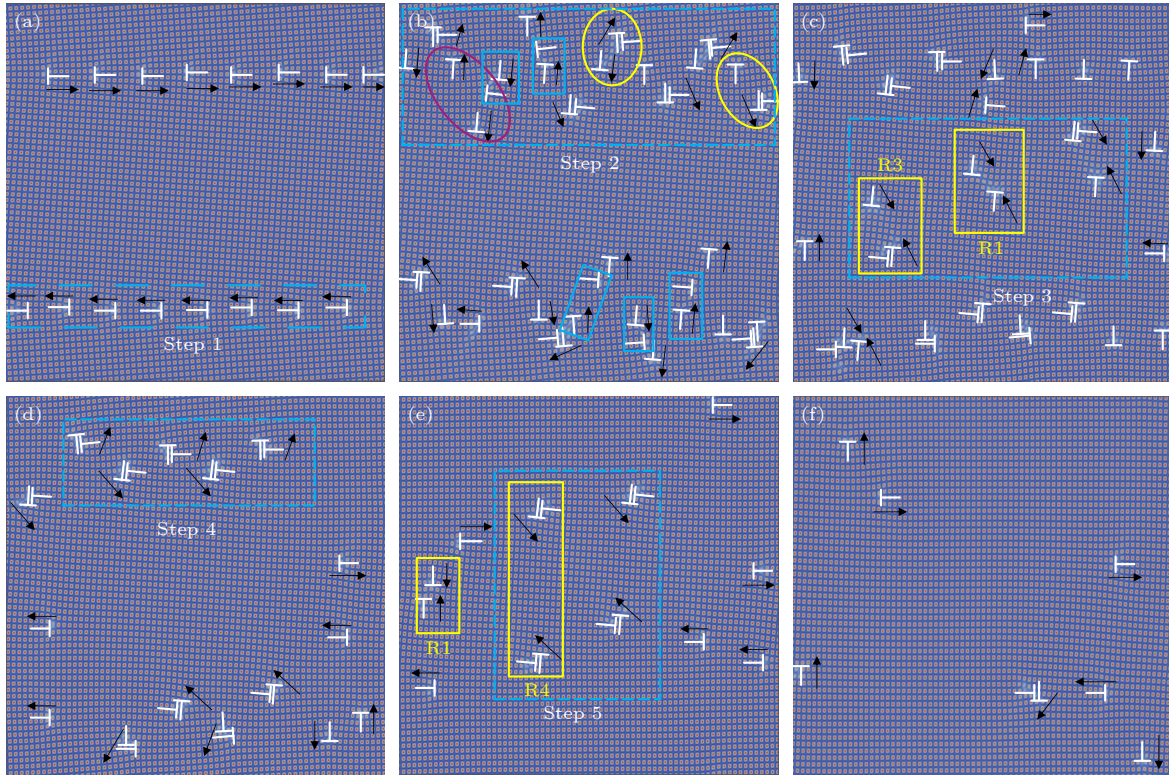


图 8 应变作用下  $\theta = 8^\circ$  时晶界位错运动模拟图 (a)  $t = 100$ ; (b)  $t = 16350$ ; (c)  $t = 17500$ ; (d)  $t = 20400$ ; (e)  $t = 25000$ ; (f)  $t = 34750$   
 Fig. 8. Simulation of grain boundary dislocation motion under strain with  $\theta = 8^\circ$ : (a)  $t = 100$ ; (b)  $t = 16350$ ; (c)  $t = 17500$ ; (d)  $t = 20400$ ; (e)  $t = 25000$ ; (f)  $t = 34750$ .

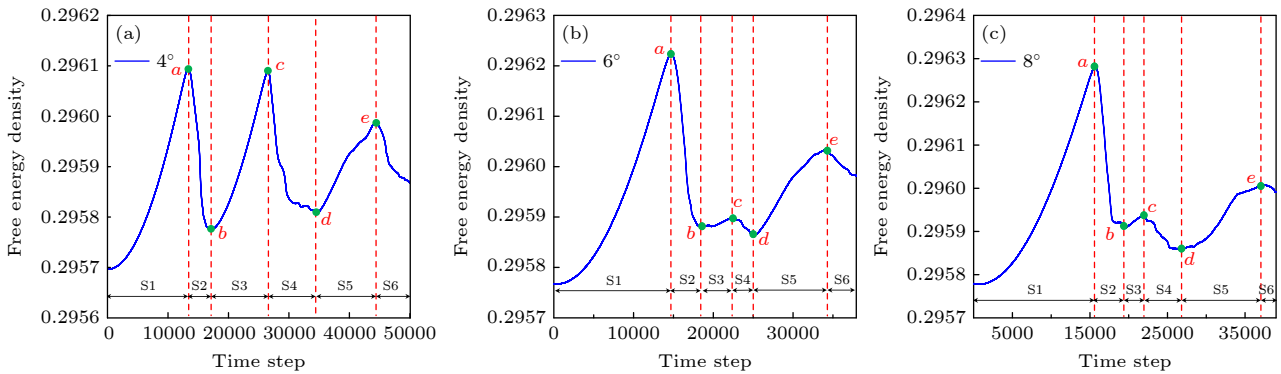


图 9 不同取向差下体系自由能变化曲线 (a)  $\theta = 4^\circ$ ; (b)  $\theta = 6^\circ$ ; (c)  $\theta = 8^\circ$   
 Fig. 9. Variations of free energy under different misorientations: (a)  $\theta = 4^\circ$ ; (b)  $\theta = 6^\circ$ ; (c)  $\theta = 8^\circ$ .

随着取向差的增大, 晶界位错对发射位错的吸引力更大, 当演化到  $t = 17500$  时, 部分发射位错或者与位错组之间发生 R1 和 R3 构型的反应, 如图 8(c).

部分位错湮灭后继续保持原有状态运动, 位错组和少数单个位错发生攀滑移, 如图 8(d), 为 Step 4. Step 5 主要为位错组发生 R4 构型的反应, 同时过程中也伴随着 R1 构型的反应, 如图 8(e). 随着位错之间的反应湮灭, 畸变减小, 最终未能形成单晶.

### 3.3 不同取向差下体系自由能变化

通过不同时刻自由能密度积分获得了体系自由能随时间的演化 (如图 9). 可以看到, 体系自由能随时间演化大致分为 6 个阶段 (S1—S6). 当  $\theta = 4^\circ$  时 (图 9(a)), 对应 3.2 节原子构型模拟结果, S1 阶段对应 Step 1 过程, 攀移导致畸变能增加, 体系自由能逐渐升高, 直到最高点 a 点, 并且此时原子也预熔化完毕; S2 阶段对应 Step2—Step3 过程, 位错的分解发射、反应导致攀移时所存储的畸



变能得到释放, 体系自由能降低, 当发射位错全部湮灭时, 体系自由能降到最低点  $b$  点. S3—S6 阶段为上述过程的重复, 但  $c$  点下降到  $d$  点的后半

段时存在能量的起伏波动且未达到与  $b$  点相同的最低点, 是由于发生 R1 型位错反应时发射未全部湮灭.

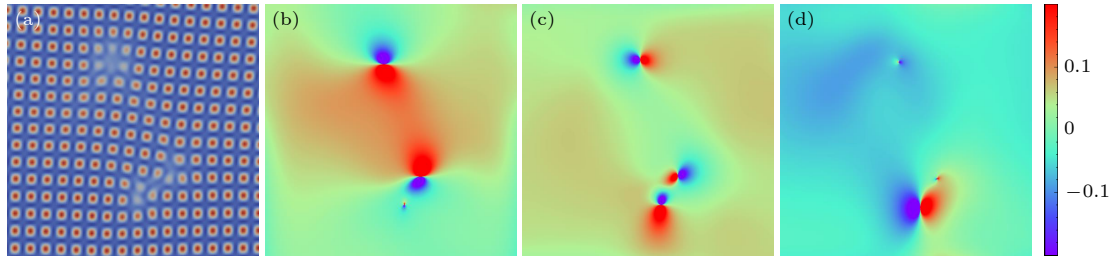


图 10 含位错组的晶体位错构型及对应的不同应变取向应变云图 (a) 晶体构型图; (b)  $\varepsilon_{xx}$ ; (c)  $\varepsilon_{xy}$ ; (d)  $\varepsilon_{yy}$

Fig. 10. Dislocation configuration of crystals containing dislocation groups and corresponding strain contours of different strain orientations: (a) Crystal configuration diagram; (b)  $\varepsilon_{xx}$ ; (c)  $\varepsilon_{xy}$ ; (d)  $\varepsilon_{yy}$ .

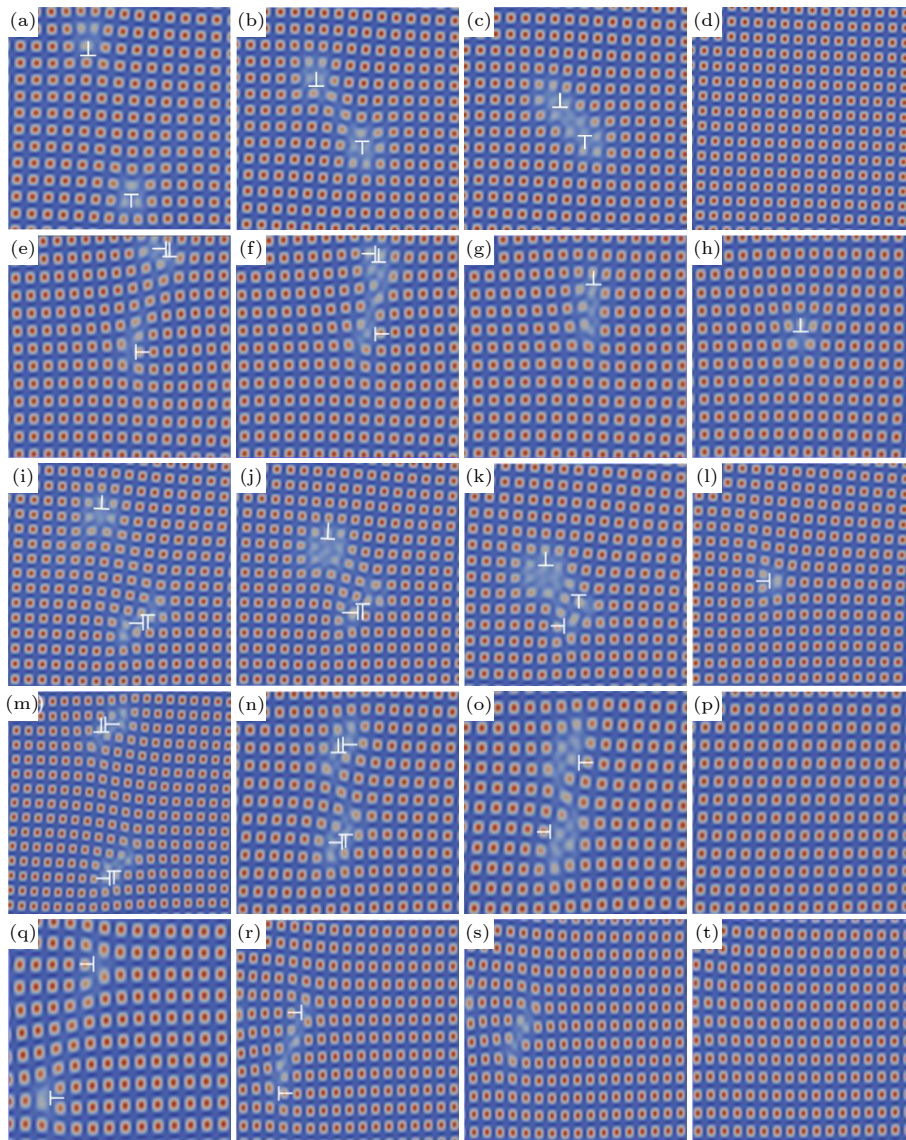


图 11 不同位错反应构型的演化图 (a)—(d) R1 构型; (e)—(h) R2 构型; (i)—(l) R3 构型; (m)—(p) R4 构型; (q)—(t) R5 构型  
Fig. 11. Evolution of different dislocation reaction configurations: (a)—(d) R1 configurations; (e)—(h) R2 configurations; (i)—(l) R3 configurations; (m)—(p) R4 configurations; (q)—(t) R5 configurations.

而进一步比较  $\theta = 6^\circ$  和  $\theta = 8^\circ$ , 如图 9(b) 和图 9(c) 所示. S1—S2 阶段能量变化依旧为其 Step 1—Step 3 过程导致. 而 S3—S4 阶段能量上升与下降的幅度相较于  $\theta = 4^\circ$  时明显降低, 这是由于其未重复“Step 1→Step 2→Step 3”, 而是 Step 4 和 Step 5 过程位错与位错组攀滑移以及位错之间反应湮灭引起自由能的增加与减少. S5 和 S6 阶段, 未湮灭完的位错继续攀移, 体系自由能上升, 当少数位错湮灭时, 能量下降到最低点.

### 3.4 位错反应演化过程及应变表征

本节将通过 GPA 方法构建位错反应类型与应变之间的关系, 探究诱发位错反应的内在因素. 从晶体构型与应变关系图 10 看到,  $\varepsilon_{xx}$  和  $\varepsilon_{yy}$  应变图中并未反映出位错组构型, 单个位错的应变范围较小, 这是因为晶界位错主应变主要分布在水平方向, 而发射位错分布在垂直方向. 因此本节选用切应变  $\varepsilon_{xy}$  作为参考, 图 11 和图 12 为 R1—R5 构型位错反应演化过程及对应的应变表征, 其反应式可

见表 2.

R1 为  $n3$  与  $n4$  型位错之间的反应. 演化过程中, 位错在  $y$  方向攀移,  $x$  方向滑移, 位错之间原子层发生错配, 并呈正切应变 (图 12(b)). 在正切应变的驱动下, 位错相互靠近, 如图 11(a) 和图 11(b). 当正切应变消失后, 位错之间仅剩两个原子层厚的预熔区, 呈负切应变 (图 12(c)). 在负切应变的驱动下, 位错湮灭, 局部应变消失, 如图 11(d) 和图 12(d) 所示.

而对于 R2 反应, 为晶界位错与位错组之间的反应, 位错组中位错呈  $90^\circ$ , 负切应变区重合, 位错与位错组在  $y$  方向滑移,  $x$  轴方向攀移, 之间错配的原子层呈正切应变, 中心处较两边应变值大, 如图 11(e) 和图 12(e). 在正切应变驱动下, 位错与位错组距离减小 3 个原子层厚度后正切应变消失, 剩下的负切应变与单个位错的负切应变区相连 (图 12(f)). 随后在负切应变的驱动下, 原子层的畸变消失,  $n1$  和  $n2$  型位错湮灭, 得到含有标准应变分布的  $n3$  型位错, 如图 11(h) 和图 12(h).

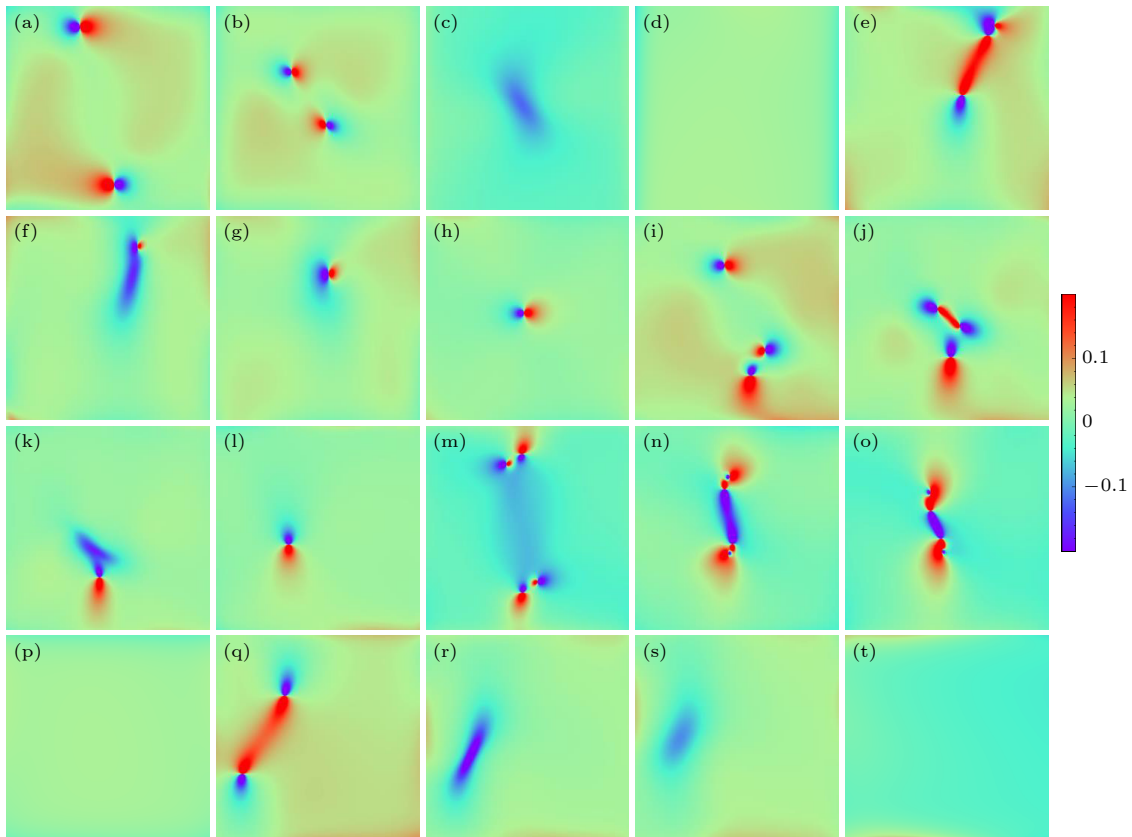


图 12 不同位错反应构型演化时应变 ( $\varepsilon_{xy}$ ) 云图 (a)—(d) R1 构型; (e)—(h) R2 构型; (i)—(l) R3 构型; (m)—(p) R4 构型; (q)—(t) R5 构型

Fig. 12. Strain ( $\varepsilon_{xy}$ ) contours during the evolution of different dislocation reaction configurations: (a)—(d) R1 configuration; (e)—(h) R2 configuration; (i)—(l) R3 configuration; (m)—(p) R4 configuration; (q)—(t) R5 configuration.

R3 构型也为位错与位错组的反应,除了攀滑移方向以及应变场分布是与 R2 相反,其过程和应变表征与 R2 相似,最后  $n_3$  与  $n_4$  位错湮灭,得到含有标准应变分布的  $n_1$  位错,如图 11(i)—(l) 和图 12(i)—(l).

R4 构型位错反应为两位错组间的演化过程,如图 11(m)—(p). 各位错组间由呈  $90^\circ$  的两位错组成. 随时间演化,位错组沿  $y$  方向靠近,并沿  $x$  方向滑移,随位错组间靠近至接近 2 层晶面间距,反向的  $n_3$  与  $n_4$  型位错湮灭,并留下较大负切应变区,最终驱动  $n_1$  与  $n_2$  型位错全部湮灭,如图 11(o) 与图 11(p) 和图 12(o) 与图 12(p).

R5 反应为  $n_1$  与  $n_2$  型位错之间的反应,除了攀滑移方向及应变场分布与 R1 相反,其过程与应变表征是与 R1 相似,最后  $n_1$  与  $n_2$  型位错湮灭见图 11(q)—(t) 与图 12(q)—(t).

## 4 结 论

本文通过晶体相场方法模拟在外应变作用下不同取向差的对称倾侧小角度晶界的位错运动与反应,研究结果如下:

1) 在外应变的作用下,不同取向差初始时均经历晶界位错的攀移、分解发射以及位错反应等过程. 随着取向差增大,位错密度增加,产生更多位错组构型,以及相应位错组之间的反应.

2) 不同取向差下体系自由能变化分为 6 个阶段. S1 阶段,位错攀移导致能量积累,体系自由能增加; S2 阶段,位错分解发射以及反应湮灭使能量得到释放,体系自由能降低; S3—S6 阶段为上述过程的重复. 随着取向差的增大, S3—S6 阶段不再重复,而是继续运动的位错及位错组的攀滑移及之间反应湮灭导致体系自由能升高与下降.

3) 不同的构型位错反应中,位错或位错组在正切应变的驱动下,通过攀滑移靠近. 当位错或位错组接近时,正切应变消失,剩下的负应变驱动位错湮灭.

## 参考文献

[1] Elder K R, Katakowski M, Haataja M, Grant M 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 245701  
 [2] Elder K R, Grant M 2004 *Phys. Rev. E* **70** 051605  
 [3] Elder K R, Provatas N, Berry J, Stefanovic P, Grant M 2007

*Phys. Rev. B* **75** 064107  
 [4] 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]  
 [5] Yang T, Gao Y, Wang D, Shi R P, Chen Z, Nie J F, Li J, Wang Y 2017 *Acta Mater.* **127** 481  
 [6] Greenwood M, Rottler J, Provatas N 2011 *Phys. Rev. E* **83** 031601  
 [7] Gao Y J, Deng Q Q, Liu Z Y, Huang Z J, Li Y X, Luo Z R 2020 *J. Mater. Sci. Technol.* **49** 236  
 [8] Gao Y J, Huang L L, Deng Q Q, Zhou W Q, Luo Z R, Lin K 2016 *Acta Mater.* **117** 238  
 [9] Zhao Y L, Chen Z, Long J, Yang T 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 118102 (in Chinese) [赵宇龙, 陈铮, 龙建, 杨涛 2013 物理学报 **62** 118102]  
 [10] Zhao Y L, Chen Z, Long J, Yang T 2014 *Acta Metall. Sin.* **27** 81 (in Chinese) [赵宇龙, 陈铮, 龙建, 杨涛 2014 金属学报 **27** 81]  
 [11] Gao Y J, Luo Z R, Huang L L, Mao H, Huang C G, Lin K 2016 *Modell. Simul. Mater. Sci.* **24** 055010  
 [12] Hu S, Chen Z, Xi W, Peng Y Y 2017 *J. Mater. Sci.* **52** 5641  
 [13] Seymour M, Sanches F, Elder K, Provatas N 2015 *Phys. Rev. B* **92** 184109  
 [14] Faghili N, Provatas N, Elder K R, Grant M, Karttunen M 2013 *Phys. Rev. E* **88** 032407  
 [15] Berghoff M, Nestler B 2015 *Comput. Condens. Matter* **4** 46  
 [16] Tang S, Wang Z J, Guo Y L, et al. 2012 *Acta Mater.* **60** 5501  
 [17] 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]  
 [18] Hu S, Chen Z, Yu G G, Xi W, Peng Y Y 2016 *Comput. Mater. Sci.* **124** 195  
 [19] Gutkin M Y, Ovid'ko I A 2001 *Phys. Rev. B* **63** 064515  
 [20] Stefanovic P, Haataja M, Provatas N 2009 *Phys. Rev. E* **80** 046107  
 [21] Bobylev S V, Gutkin M Y, Ovid'ko I A 2004 *Phys. Solid State* **46** 2053  
 [22] Ohno T, Ii S, Shibata N, Matsunaga K, Ikuhara Y, Yamamoto T 2004 *Mater. Trans.* **45** 2117  
 [23] Humphreys F J 2001 *J. Mater. Sci.* **36** 3833  
 [24] Hirouchi T, Takaki T, Tomita Y 2009 *Comput. Mater. Sci.* **44** 1192  
 [25] 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]  
 [26] Lu N, Wang Y X, Chen Z 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 180508 (in Chinese) [鲁娜, 王永欣, 陈铮 2014 物理学报 **63** 180508]  
 [27] Yang T, Chen Z, Dong W P 2011 *Acta Metall. Sin.* **47** 1301 (in Chinese) [杨涛, 陈铮, 董伟平 2011 金属学报 **47** 1301]  
 [28] Berkels B, Ratz A, Rumpf M, Voigt A 2008 *J. Sci. Comput.* **35** 1  
 [29] Elsey M, Wirth B 2014 *Multiscale Model. Sim.* **12** 1  
 [30] Singer H M, Singer I 2006 *Phys. Rev. E* **74** 031103  
 [31] Wang Z J, Li J J, Guo Y L, Tang S, Wang J C 2013 *Comput. Phys. Commun.* **184** 2489  
 [32] Hytch M J, Snoeck E, Kilaas R 1998 *Ultramicroscopy* **74** 131  
 [33] Galindo P L, Kret S, Sanchez A M, et al. 2007 *Ultramicroscopy* **107** 1186  
 [34] Hytch M J, Putaux J L, Penisson J M 2003 *Nature* **423** 270  
 [35] Guo Y, Wang J, Wang Z, Li J, Tang S, Liu F, Zhou Y 2015 *Philos. Mag.* **95** 973  
 [36] Wu K A, Adland A, Karma A 2010 *Phys. Rev. E* **81** 061601  
 [37] Chen L Q, Shen J 1998 *Comput. Phys. Commun.* **108** 147

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

Xia Wen-Qiang Zhao Yan<sup>†</sup> Liu Zhen-Zhi Lu Xiao-Gang

(*State Key Laboratory of Advanced Special Steel, School of Materials Science and Engineering, Shanghai University, Shanghai 200444, China*)

( Received 8 December 2021; revised manuscript received 4 January 2022 )

## Abstract

In this paper, the phase field crystal method is used to study the dislocation motion and reaction of the square phase symmetric tilt low-angle grain boundaries, and the dislocation configurations with different misorientation angles are analyzed under the action of applied strain. The geometric phase approach is used to characterize the strain field around the dislocations. The results show that after the solidification relaxation, the interfacial dislocations on both sides of the grain are distributed in parallel but opposite direction. With the increase of misorientation angle between grains, the number of dislocations increases, the spacing between them decreases, and the free energy of the system increases. Imposed by the applied strain, the grain boundary dislocations undergo climbing, launching, and reactive annihilation, with the free energy fluctuating. When the misorientation increases, the dislocation motion mode changes from climbing to climbing-slipping, resulting in more dislocation group configurations, and more reactions between dislocations and dislocation groups. For the dislocation reactions of different configurations, positive shear strain drives dislocations to approach, and negative shear strain drives dislocations to annihilate.

**Keywords:** phase field crystal, square phase, dislocation reaction, grain boundary

**PACS:** 61.72.Bb, 61.72.Hh, 07.05.Tp

**DOI:** [10.7498/aps.71.20212278](https://doi.org/10.7498/aps.71.20212278)

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51771226).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [zhaoyan8626@shu.edu.cn](mailto:zhaoyan8626@shu.edu.cn)