高温应变下的亚晶界湮没与位错旋转机制的晶体相场模拟

高英俊^{①②*}, 黄礼琳^{①②}, 周文权^①, 全四龙^①, 林葵^①, 罗志荣^{①③}

① 广西大学物理科学与工程技术学院, 南宁 530004;

② 广西大学工程防灾与结构安全教育部重点实验室, 南宁 530004;

③ 玉林师范学院物理科学与工程技术学院, 玉林 537000

* E-mail: gaoyj@gxu.edu.cn

收稿日期: 2014-08-23; 接受日期: 2014-10-17

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

摘要 采用先进的晶体相场模型, 分别模拟了不同高温条件下的小角对称倾侧晶界, 在施加应变下的晶界分解和亚晶界湮没的过程. 研究表明: 对于不靠近固-液共存温度的高温(T_1)预熔化样品, 施加应变下的晶界位错发生滑移运动, 生成亚晶界和新的晶粒. 随后, 具有相反 Burgers 矢量的位错亚晶界相向运动, 新晶粒不断吞噬旧晶粒而长大, 最后发生亚晶界相遇湮没, 亚晶界和预熔化区域消失, 双晶转变为完整单晶. 对于靠近固-液共存温度的高温(T_2)预熔化样品, 在应变作用下, 生成的亚晶界相向运动, 当接近到一定距离时, 形成位错对偶极子, 发生亚晶界位错结构二次转换, 之后亚晶界运动反向, 往回迁移运动, 最后与另一列返回的亚晶界相向靠近, 相互作用转变成“之”字形的亚晶界, 然后湮没消失, 整个体系转变为单晶. 对于高温 T_2 预熔化亚晶界, 在应变作用下, 形成位错对偶极子的过程中, 偶极子的 2 个位错对的预熔化区域开始扩张、连通, 形成近似棒状区域. 这一过程的实质是高温预熔化区内部的原子晶格变软, 使得在应变作用下, 原子排列可以较容易的发生滑移和扭转变形, 发生了不同类型的位错相互作用, 出现了位错萌生、形核和增殖, 位错分解和湮没等一系列位错反应, 由此引起了位错的 Burgers 矢量方向的改变和亚晶界位错类型交换.

关键词

亚晶界湮没
位错旋转
高温
应变
晶体相场模型

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. 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(GBPM)现象^[4-10]. 晶界的

引用格式: 高英俊, 黄礼琳, 周文权, 等. 高温应变下的亚晶界湮没与位错旋转机制的晶体相场模拟. 中国科学: 技术科学, 2015, 45: 306-321
Gao Y J, Huang L L, Zhou W Q, et al. Phase field crystal simulation of subgrain boundary annihilation and dislocation rotation mechanism under strain at high temperature (in Chinese). Sci Sin Tech, 2015, 45: 306-321, doi: 10.1360/N092014-00299

预熔化现象最先报道是发生在偏聚的杂质原子的 Al 晶界上^[11], 之后又有更多的相关报道^[9,12~14]. 上述发生的预熔化现象, 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, 无需施加外应力作用. 最先通过施加外应力作用下, 观察到晶界预熔化现象, 是由 Inoko 等人^[15,16]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 应变量, 在温度约为 $0.5T_M$ 时就开始出现晶界预熔化现象. 同样, 在类似的变形 Ag 和 Ni 双晶薄膜上也出现了晶界预熔化现象. 因此, Inoko 等^[15]将这种类型的晶界预熔化称为外应力作用诱发晶界预熔化(SIGBPM). 晶界的预熔化有利于颗粒烧结的颈接过程^[3], 但易出现晶界热裂性^[14]. 该预熔化对多晶材料的强度和断裂等力学行为, 以及热力学现象都有重要的影响^[17]. 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, 例如对材料中的超塑、中温脆性等影响, 因此, 开展对应力诱发晶界预熔化研究, 对于高温蠕变、超塑、中温脆性的深入研究具有重要意义.

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(MC)方法^[22]研究晶界在材料块体熔点附近的预熔化行为. 但 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], 因此该方法存在局限性; MC 方法由于描述晶界是锐结构而不是扩散结构, 与实际情况亦有明显的偏离, 因而也存在局限性^[24]; 应用传统相场方法(PFM), 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 等人^[27,28]基于密度泛函理论率先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, 并且还可自洽地耦合弹性能, 各相异性以及对称特性等原子尺度信息^[28]. 因此, 该模型具有明显的优势. PFC 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^[42]等现象的研究. 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较多的报

道^[43~45], 并取得了许多有意义的结果^[43~48]. 但是, 对于体系温度处于熔点附近, 并已存在稳定的预熔化或熔化结构的情况下, 研究在施加应变下的晶界位错等缺陷的预熔化或熔化区域结构的变化特征, 目前还没有见报道. 在作者前期晶界预熔化研究工作的基础上^[40,49], 本文采用先进的 PFC 模型, 针对高温条件下的预熔化晶界和位错, 研究施加应变下的预熔化亚晶界运动和湮没过程, 揭示该过程的预熔化区的相互作用和位错 Burgers 矢量方向改变, 以及预熔化亚晶界位错湮没过程的组态变化的内在机理.

2 PFC

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征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, 其表达式可写成^[28]

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

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 ρ_0 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可以写成^[28]

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

式中, γ 是反映体系温度的参数, ∇^2 为 Laplace 算子. 该能量模型自洽地包含了晶体结构的物理特征, 例如, 多晶取向、弹性效应、塑性变形等.

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^[28]

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

其中 a 为点阵晶格常数. 对二维体系的极小自由能函数的解取单模近似, 可得到平衡时三角晶格固相的原子密度函数 ρ , 可近似写成^[28]

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

式中, q 为波矢, A_0 是一个特定常数, 反映固相原子密度周期结构的振幅, 由自由能函数取极小值得到. 将(4)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

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

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 2 个重要参数. 由体系的极小自由能密度函数, 可以计算并画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, 计算得到的二维相图[28]如图 1 所示.

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[32,36]描述

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

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

为求解复杂的动力学方程式(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

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

(8)式整理后得:

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

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

本文中晶体的原子排列点阵的演化主要由(7)和(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 k 空间的原子密度, 利用(9)式求 ρ 的演化规律; 最后, 把 ρ 从 k 空间转换为 r 实空间, 从而显示 ρ 的图像, 即晶体结构中原子排列情况, 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规律, 从能量角度对位错运动和晶界演化进行分析.

3 样品设计和应变施加

3.1 模拟实验的样品设计

为了简明起见, 本文以面心立方(FCC)晶格的 {111} 平面作为模拟实验的结构体系, 样品设计为双晶结构, 模拟实验样品(以下简称样品)的尺度大约在几十个纳米. 选取二维晶粒体系作为研究对象, 主要是基于三方面考虑[51]: 第一, 分析位错的组态和相互作用, 需要考虑的因素和参数较多, 难以完全考

图 1 单模近似得到的二维相图^[28](L, T, S 分别代表液相、三角相、条状相)

(a) 二维相图; (b) 图(a)矩形方框区域的放大图

虑; 第二, 高分辨电镜实验直接观察到的变形机理, 通常都涉及到具有柱状晶的二维纳米晶薄膜; 第三, 数值实验展示出纳米块体变形与薄膜材料的变形行为高度相似。

设置样品的尺度区域为 $L_x \times L_y = 512\Delta x \times 512\Delta y$ 正方形, 满足周期边界条件. 将样品区域分为 3 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, 对于 $0 < x < L_x/4$ 和 $3L_x/4 < x < L_x$ 区域范围内, 设置取向角为 $\theta = 4^\circ$ (θ 为三角相原子排列与 y 轴的夹角) 的三角晶相结构; 在 $L_x/4 < x < 3L_x/4$ 范围内取向角设置为 $\theta = -4^\circ$ 的三角晶相结构, 这样得到的单相双晶的晶界取向差为 8° . 然后该体系经过较长时间的弛豫, 可形成稳定匹配的晶界. 体系温度的设定参考图 1 相图, 图 1(b) 中 ϕ_L^{eq} , ϕ_S^{eq} (图中虚线与相图边界的交点) 分别代表 $\gamma = -0.10$ 时, 固-液相共存区的液相边界平衡液相密度和固相边界平衡固相密度. 由图 1 可以看出当参数 γ 保持不变时, 减小 ϕ_0 相当于靠近固-液共存相区边界, 可看成体系温度随 ϕ_0 靠近固-液共存相区而升高^[48].

样品设计过程分为两个阶段: 第一阶段制作低温下的双晶样品 A_0 , 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约为 1×10^5 步, 得到低温样品 A_0 . 第二阶段将低温下所制作的 A_0 样品分别升高到指定温度和原子密度, 该阶段所对应的热力学参数值如表 1 中第二阶段参数所示, 该参数值分别对应相图 1(b) 中的 A 和 B 点. 在该高温阶段体系弛豫较长时间, 直至体系达到热平衡状态. 这时, 预熔化结构也达到稳定状态. 此时, A 样品处于远离熔点的高温区 T1, B 样品处于靠近熔点的高温区 T2. 制作好的双晶样品 A_0 , A 和 B 如图 2(a)~(c) 所示.

3.2 应变的施加

施加应变作用于制作好的预熔化样品 A 和 B, 使之发生变形. 设在 x 方向施加拉应变为 ε_x , 在 y 方向施加压应变为 ε_y , 无量纲应变速率为 $\dot{\varepsilon}$, 且应变满足 $\varepsilon_x = \varepsilon_y = \varepsilon = \dot{\varepsilon} n \Delta t$, n 为时间步数. 变形模拟过程中,

变形采用等面积(体积)条件假设^[41,52]. 根据等面积条件假设

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

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, 应力加载方式为沿 x 轴方向拉伸, 在 y 方向上则受到一个压应变. 经过 n 时间步数后, 空间步长为^[52]

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

无量纲应变速率设为 $\dot{\varepsilon} = 6 \times 10^{-6}$. 详细的二维拉伸变形模拟的数值算法见文献[42].

4 结果与分析

4.1 预熔化样品的晶界位错结构

制备得到低温样品 A_0 和高温样品 A 和 B 如图 2 所示. 样品中的 2 列位错构成了 8° 角等倾对称晶界, 可以看出各晶界由 8 个晶格位错对^[53]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° ^[54], 而晶界处相间隔的晶格位错对的 Burgers 矢量则相同. 由此可见, 同一晶界有 2 种类型的晶界位错(即晶格位错对)组态(结构), 不同列的晶界位错 Burgers 矢量彼此相反. 从图 2(a)~(c) 中可以看出低温和高温样品的晶界位错结构相同, 所不同的是高温样品中的位错周围存在明显的预熔化特征, 特别是高温样品 B 中的位错周围出现较大面积的预熔化区域^[49](图中黑色区域). 预熔化区域中的位错结构还能够从图 2(b)~(c) 中清楚地辨认, 表明该区域固相结构仍然坚固, 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 2(d) 给出了这 2 条晶界的晶格位错的排列结构示意图. 由该图可见, 这 2 列晶界共有 4 种类型晶格位错对(分别用 I, II, III 和 IV 表示)组态. 下面对高温样品 A 和 B 施加应变, 观察晶界位错以及局部预熔化区域的运动和相互作用过程.

4.2 高温样品 A 的亚晶界迁移与湮没过程

图 3 展示了高温样品 A, 在 x 轴方向施加拉应变和 y 轴方向施加压应变条件下, 晶界位错分离和亚晶界滑移运动, 以及湮没过程, 如图 3(a)~(f) 所示. 图 3(a) 给出了晶界的位错排列. 由图 3(b) 可见, 在应变

表 1 样品设计的热力学参数

样品	低温下第一阶段热力学参数		样品	高温下第二阶段热力学参数	
	γ	ϕ_0		γ	ϕ_0
A_0	-0.30	-0.180	A(T1)	-0.10	-0.180
A_0	-0.30	-0.180	B(T2)	-0.10	-0.195

图2 不同温度下的晶界位错预熔化形貌图和位错排列

(a) 低温样品 A₀; (b) 高温样品 A; (c) 高温样品 B; (d) 样品 A₀, A 和 B 的晶界预熔化化区的位错排列结构

图3 高温样品 A 在应变作用下的晶界位错运动与湮没过程

各图对应的应变变量: (a) 0.003; (b) 0.0294; (c) 0.0516; (d) 0.0582; (e) 0.0664; (f) 0.0732

施加过程, 晶界位错分解后, 晶格位错对开始滑移. 由于同类型位错对的滑移方向和速率相同, 使得做滑移运动的同类型位错对始终位于同一条直线上, 这些从晶界分解出来的直线排列位错可以看成是新生的亚晶界. 这类似文献[55]报道的剪切变形诱发的晶界整体迁移. 因此, 生成了 4 条由位错对构成的亚晶界, 其位错 Burgers 矢量各不相同, 对这 4 条亚晶界分别用 I, II, III, 和 IV 表示, 图 3(b)所示. 这 4 条亚晶界构成了 4 个晶粒的晶界, 这时的 4 个晶粒取向分别为 -4° , 0° , 4° , 0° , 如图 3(c)所示. 由于亚晶界的分离和运动, 两分离的亚晶界之间区域可以看成是形成了新的晶粒, 取向为 0° . 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晶粒, 两者的取向相同都为零, 与原晶粒的取向差为 4° , 在

图 3(c)中用 2 和 4 标出了这 2 个新晶粒. 并且, 随着亚晶界的滑移运动, 新晶粒的面积不断扩大, 吞噬原有的晶粒. 最后, 这 2 个新的晶粒的晶界相遇, 新晶粒发生合并, 亚晶界湮没消失, 预熔化区也随之消失, 样品成为完整单晶结构. 由于亚晶界 II 的位错与亚晶界 III 的位错极性相反, 亚晶界 I 的位错与亚晶界位错 IV 的位错极性相反, 它们彼此相遇则发生湮没.

由图 4 的自由能曲线, 可以从能量的角度分析位错对的运动和晶界湮没的过程. 由图 4(a)可见, 曲线明显分为 2 个阶段. 第 1 阶段是能量增加阶段, 对应的是亚晶界位错分离作攀滑移运动, 见图中的 abcde 段. 第 2 阶段是能量变化迅速下降阶段, 对应的是正面相遇的滑移亚晶界位错对发生湮没, 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 4 高温样品的自由能随应变量的变化曲线

(a) 样品 A; (b) 样品 B

图 4(a)的 ef 段。

4.3 高温样品 B 的亚晶界迁移与湮没过程

高温亚晶界在外力作用下不仅会发生亚晶界的迁移,还会发生由于相互作用而引起亚晶界位错类型的转换,出现位错预熔化区的扩展、连通和新位错萌生,体现在预熔化区域内部原子排列发生滑移和扭转。图 5 展示了高温样品 B,在 x 轴方向施加拉应变和 y 轴方向施加压应变条件下,预熔化晶界位错分离而形成的亚晶界运动,位错旋转和分解,以及亚晶界消失过程。与图 3 类似,图 5 中分别对不同类型的位错对,用罗马数字 I, III, III 和 IV 作了标记,也表示这些类型的位错构成不同类型的亚晶界。在应变作用下,亚晶界湮没过程如图 5(a)~(o)所示,体系自由能随应变变化曲线如图 4(b)所示。整个亚晶界迁移与湮没过程,从能量变化角度,可分为 5 个主要特征阶段,各阶段出现了不同形式的位错运动和相互作用现象。

第 1 阶段为图 4(b)中能量曲线 AB 段,对应图 5(a)~(f),应变范围为 $\varepsilon=0\sim0.0636$ 。该阶段的亚晶界运动与样品 A 的第一阶段的亚晶界运动完全相同,只是这时的亚晶界不会直接相遇发生湮没。

第 2 阶段为图 4(b)中曲线 BC 段,对应图 5(f)~(h)的亚晶界和位错运动过程,应变量为 $\varepsilon = 0.0636\sim0.0762$ 。这一阶段是具有 Burgers 矢量相反的位错对的亚晶界相向靠近,并保持相对稳定的距离,例如,亚晶界 II 和 III, I 和 IV。这些亚晶界之间的位错对两两相互吸引,共形成 8 对相对稳定结构的刃型

位错对偶极子^[56~58],例如位错 E 和 D 组成的位错对偶极子,如图 5(f)~(h)所示。由于这些反号位错对的滑移方向不在一条直线上,因此,这些位错对偶极子在外加拉和压应变的作用下,等效于受到一个剪切力矩的作用^[59]。由于在高温下晶格变软^[46],力矩的作用容易导致预熔化的 2 个位错对相互吸引形成的偶极子发生逆时针挤压旋转^[58]。分别比较图 5(f)~(h),发现在旋转过程中,连接位错偶极子的区域畸变明显增加,出现更明显的预熔化现象,原来的 2 个孤立的位错预熔化区发生了连通。预熔化程度的增加使得晶格软化更加明显,引起滑移运动的阻力减少,有利于原子层的相对滑移运动。在力矩的作用下,位错对偶极子预熔化区域的内部原子层的滑移扭转过程中,构成位错偶极子的位错对的 Burgers 矢量发生了两次方向改变,每次沿逆时针方向旋转约 60° ,总共约旋转了 120° ,位错的 Burgers 矢量方向变化如图 5(f)~(h)所示。这过程使得畸变能得以释放,体系能量下降。这时,亚晶界位错类型发生了转换,出现了亚晶界 I 转换为亚晶界 II 的位错结构,再转换为新的亚晶界 V 的位错结构;或者亚晶界 II 转换为亚晶界 I,再转换为新的亚晶界 VI;或者亚晶界 III 转换为亚晶界 IV,再转换为新的亚晶界 V;或者亚晶界 IV 转换为亚晶界 III,再转换为新的亚晶界 VI。这时的亚晶界 V 和 VI 的取向差已为 0° ,因此,位错 V 和 VI 可看成晶内位错,而不是亚晶界位错。亚晶界转换完成表明,此时,新晶粒已完全把旧晶粒吞噬掉了,样品已成为单晶结构。亚晶界转换的过程,就是亚晶界取向差减小的过程,尽管此时亚晶界已不存在取向差,

图5 高温样品 B 在应变下的晶界位错运动与湮没过程

各图对应的应变变量: (a) 0; (b) 0.0228; (c) 0.0348; (d) 0.0510; (e) 0.0564; (f) 0.0636; (g) 0.0672; (h) 0.0762; (i) 0.0792; (j) 0.0852; (k) 0.0960; (l) 0.0990; (m) 0.1020; (n) 0.1038; (o) 0.1092

但可认为存在孤立的位错结构. 类似情况在文献也有报道^[57]. 这种剪切力矩对位错对偶极子的作用过程, 引起的位错 Burgers 矢量旋转, 与高温样品 A 的

情况完全不同. 在高温 A 情况, 位错对偶极子相互吸引, 直接发生湮没, 并没有出现位错对的 Burgers 矢量方向发生变化的现象. 这说明晶界位错对的相互

作用特征与样品的温度密切相关.

第 3 阶段为图 4(b)中曲线 CD 段, 对应图 5(h)~(k) 的亚晶界演化, 应变范围为 $\varepsilon=0.0762\sim0.0960$. 图 5(h) 为刃型位错对偶极子即将分离的时刻, 随后位错偶对极子发生分离, 如图 5(i) 示. 在分离的过程中, 位错对偶极子之间的区域应变能释放, 该预熔化区域消失. 此时体系的预熔化区域, 只剩下环绕于分离的位错对周围, 这一过程对应于图 4(b)中能量曲线的 Cn_4 段. 随着应变量的继续增加, 分离开的位错对在应变的作用下做短程横向攀移运动, 如图 5(i)~(k) 示. 位错作攀移运动时, 体系能量几乎为平缓阶段, 如图 6(a)中的 n_4n_5 段. 对于位错的攀移运动, 文献[36]也有类似的报道, 但是文献[36,37]中的模拟结果表明位错沿晶界攀移的过程中体系能量是持续升高的, 并且位错的攀移只发生在晶界处. 而在本研究模拟中, 却发现位错对可在晶粒内作攀移运动, 并且在攀移的过程中只需要较小的激活能, 导致该阶段所对应的能量曲线随应变变化呈平缓趋势. 这说明高温情况下, 孤立位错在晶粒内的攀移比在低温下沿晶界的攀移需要更少的驱动能量. 对于图 4(b)中曲线 n_5D 段, 该段能量呈小幅度下降直至 D 点, 这说明此时位错对的排斥应力场已开始释放应变能, 导致体系能量小幅度下降.

第 4 阶段为图 4(b)中曲线 DE 段, 对应图 5(k)~(m), 应变范围为 $\varepsilon=0.0960\sim0.1020$. 该阶段为新生成的亚晶界位错 V 和 VI 相向攀移靠近. 如图 5(k)~(m) 所示, 亚晶界 V 和 VI 的位错对通过攀移, 彼此相互靠近, 这 2 类 Burgers 矢量相反的位错对之间相向挤压作用, 引起畸变能不断增加. 当亚晶界 V 和 VI 之间的距离靠近到临界距离时, 由挤压引起的畸变能达到最大临界值, 于是, 攀移的位错 V 和 VI 开始发生分解, 如图 5(m) 所示, 释放畸变能.

第 5 阶段为图 4(b)中曲线 EF 段, 对应图 5(m)~(o), 应变范围为 $\varepsilon=0.1020\sim0.1086$. 由于第 4 阶段中符号相反的攀移位错对相向运动, 产生排斥挤压作用, 使得相互靠近的位错对之间的区域积累的畸变能越来越大, 最终当外应变达到图 4(b)中曲线 E 点所对应的应变值时, 通过相向攀移靠近的异型位错对发生分解反应^[60,61], 由 V 型位错分解为 I 和 III 型位错, 类似的 VI 型位错分解为 II 和 IV 型的位错, 如图 5(m) 所示. 由于位错对分解前的畸变能的积累, 导致分解过程位错释放较多的储存能(转变成热能), 致使连接位

错对间的固相部分出现带状的预熔化区, 形成了类似“之”字形的预熔化带, 如图 5(m) 所示. 预熔化带内的符号相反的位错对通过短程滑移相遇湮没, 例如, 位错 I 与 IV 湮没, 位错 II 与 III 湮没, 如图 5(m) 所示的黑色带状区域, 导致畸变区域消失, 最终“之”字形的预熔化带消失, 整个体系成为完整单晶结构, 如图 5(o) 所示. 此时体系的总自由能大幅度下降直至最小值 F 点, 如图 4(b) 所示. 对比图 4(a)和 4(b)的自由能曲线可见, 开始的能量上升直到第一个峰阶段, 二者十分相似, 但高温样品 B 的能量曲线较为复杂, 与高温样品 A 的亚晶界湮没情况对比, 可见高温样品 B 的能量曲线出现 2 个峰结构. 第二个峰较为尖锐, 对应于位错的分解和湮没.

4.4 位错矢量方向改变与原子密度分布变化的关联

图 5(f)~(h) 给出了位错对的二次旋转结果图, 为了探究样品 B 在高温下, 剪切力矩对位错偶极子作用引起的位错对的 Burgers 矢量方向改变过程, 图 6 和图 7 分别给出了相向运动的位错对, 在图 5(f) 中矩形方框区域内的沿 x 方向和 y 方向投影的原子密度分布随应变变量变化的特征. 由图 6(a)~(j) 可见, 该相向运动的位错原子密度沿 x 方向投影分布的变化分为 3 个阶段. 第一阶段如图 6(a)~(f) 所示, 位错对偶极子在开始进入方框区域前 ($\varepsilon=0.0540$), 2 个位错对相距较远, 由图 6(a) 中可见方框区域中心的原子密度振幅分布较低, 两端的原子密度振幅较高, 这是因为 2 个相向滑移的位错对将要进入方框区域的边界, 由于位错处的原子密度在多余原子面方向较高, 因此, 方框区域的原子密度分布是两端高, 中间低, 对应的位错对偶极子的位置如图 5(d) 所示. 随着位错对的不断靠近, 2 个位错对逐渐进入图 5(f) 的方框区域内, 由图 6(a)~(f) 可见, 该中心区域处的原子密度在不断降低, 表明这 2 个位错对的不断靠近, 2 个位错对之间的连线的中心区域, 晶格畸变在不断加剧. 此时的原子密度分布降低, 表明该区域沿 x 方向受到拉应变作用. 随着这 2 个位错对进一步靠近, 原子密度分布图发生了新的变化, 开始进入到第二阶段. 此时, 方框区域中心处的原子密度振幅开始增加, 直到整个方框区域原子密度分布变成较为均匀分布, 如图 6(g)~(j) 所示. 这对应于 2 个位错对的 Burgers 矢量发生了转动. 随着位错矢量的旋转, 伴随着畸变特性也开始减弱.

图6 在高温样品 B 图 5(f)中的方框区域, 沿 x 轴投影的原子密度分布随应变的变化曲线

各图对应的应变量为: (a) 0.048; (b) 0.054; (c) 0.0576; (d) -0.0606; (e) 0.0618; (f) 0.0630; (g) 0.0660; (h) 0.0684; (i) 0.0738; (j) 0.0774; (k) 0.081; (l) 0.0834; (m) 0.0900; (n) 0.0960

第三阶段时, 偶极子位错对完成旋转, 然后开始分离, 最后滑移出图 5(f)的方框区域, 由图 6(j)~(n)可见, 对

应的原子密度分布函数是均匀周期分布, 表明该方框区域恢复为完整晶格排列。

由图 7 可见, 在整个位错对偶极子的 Burgers 矢量转动过程中, 由沿 y 轴方向投影的原子密度分布变化可分为 4 个典型阶段. 由原子密度分布图 7(a) 可见, 相向滑移运动的 2 个位错对相距较远时, 这 2 个位错对连线的中间区域的原子密度振幅较低, 而两端原子密度振幅分布较高, 出现双“驼峰”形状. 随着这 2 个位错对靠近, 原子密度分布的上包络线两端的峰结构逐渐靠近合并, 中央区域振幅增加并逐渐形成峰结构, 而两边形成谷结构, 如图 7(b)~(f) 所示; 与此同时, 原子密度分布的下包络线形成中间为谷, 两旁为峰的结构, 如图 7(c)~(f) 所示. 这时由于柏氏矢量相反的位错对相互吸引靠近, 使得沿这 2 个位错对连线中心处的原子密度振幅沿 y 方向投影提高, 且密度振幅达到最大, 而谷两端的振幅较小, 如图 7(f) 所示, 以上过程为第一阶段. 接着第二阶段是, 下包络线的 2 个峰逐渐发生合并, 这一过程的原子密度分布演化如图 7(f)~(h) 所示, 这些变化过程表明沿 y 方向的原子排列受到挤压变形作用, 偶极子中部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 4(b) 的 B- n_3 -C 阶段. 对比密度分布图 6(b)~(f), 由于沿 x 方向, 位错对偶极子的中间区域的原子密度振幅是降低的, 说明在 x 方向原子排列是受到了拉应变作用, 因此, 这 2 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, 相当于位错对偶极子连线区域内整体受到了一个扭转力矩作用. 在该区域内部, 由于高温原子晶格排列变软, 在力矩的作用下原子排列容易发生扭转或转动^[62]. 在高温下应变继续增加, 由图 7(e)~(g) 可见, 随后原子密度分布的“W”形状的上包络线的单峰逐渐减弱, 由单峰双谷结构逐渐变成单谷结构, 而此时的原子密度分布的下包络线则从双峰单谷演化成单峰结构, 中间的谷消失, 整个原子密度分布图形成一个 V 字形的分布轮廓. 在这一过程中, 位错对偶极子的内部位错发生了第一次位错矢量方向转动, 如图 5(f)~(g) 所示, 约旋转了 60° . 接下来是第三阶段, 原子密度分布的上包络线保持 V 字形的轮廓分布, 而原子密度分布的下包络线由单峰结构演化为双峰单谷的“W”形状, 这一阶段如图 7(h)~(j) 所示. 这一过程发生了第二次位错 Burgers 矢量方向旋转, 又继续旋转了约 60° . 此时, 中心处的原子密度最低, 且密度振幅最小; 而两端的原子密度分布最高, 且密度振幅较大, 如图 7(k)~(l) 所示. 随后进入第四阶段, 这些

位错对偶极子发生分解, 位错对开始分离, 如图 5(j) 所示, 伴随释放畸变能, 体系自由能开始下降, 扭转力矩作用减弱. 随着位错对的远离, 方框中心处的原子密度逐渐增加, 原子密度分布逐渐演化成均匀周期分布, 同时, x 和 y 方向的原子密度分布都趋于一致, 如图 7(l)~(n) 所示. 通过比较高温两种样品亚晶界的相互作用过程, 可以推断出高温存在一个温度临界值, 超过该温度临界值, 偶极子位错对相互作用则启动滑移位错旋转机制. 关于位错对相互作用发生旋转的力场作用分析较为复杂, 可参见文献[58,63].

4.5 位错对偶极子的旋转机理分析

为了更清晰地揭示施加应变过程中, 处于预熔化区的位错组态的变化特征和位错反应, 揭示出图 5(f)~(h) 的位错二次旋转的内在机理, 取图 5(f) 中白色矩形框中的 2 个相互靠近的位错对进行分析. 将图 5(f) 到图 5(h) 的白色矩形方框区域的位错对偶极子随应变增加的连续演化详细过程展示在图 8 中. 由图 8(a) 可见, 最初的预熔化区域内只存在 1 对红和蓝色的位错对, 其在形成亚晶界的时候就存在了. 随着施加的应变增加, 该预熔化区域的面积明显增大, 同时, 2 个位错预熔化区相互吸引靠近, 形成位错对偶极子^[56-58], 如图 8(c) 所示. 接着, 在该区域内的红蓝色位错对附近萌生出一对新的位错, 如图 8(d) 中的绿色位错对符号所示. 这时, 位错对偶极子预熔化区域的位错数目达到最多, 有 6 对位错, 此时体系能量处于极大值, 对应于图 4(b) 能量曲线的 B 点极大值. 随着应变量的继续增加, 新生成的绿色位错对的位置有所变化. 靠近位错对偶极子中心的 1 对绿色位错沿 g_1 方向滑移发生湮没, 相距较远的另 1 对绿色位错保留下来, 如图 8(e)~(f) 所示, 滑移方向 g_1 如图 9(a) 所示. 这一过程是 2 个预熔化区相向扩展并连通. 当应变进一步增加, 该相向扩展的预熔化区开始合并^[49], 形状近似为棒状区域. 此时, 预熔化区的 1 对蓝色位错发生滑移湮没, 剩下红和绿各 1 对位错, 如图 8(g) 所示, 蓝色位错滑移方向如图 9(b) 中的 g_2 方向所示, 该方向与 g_1 方向夹角约为 60° . 这时的位错对相对于图 8(a) 的位错对, Burgers 矢量方向旋转了 60° . 接下来, 红色的位错对也发生沿 g_2 方向滑移湮没, 如图 8(h) 和图 9(b) 所示, 只剩下 1 对绿色的位错, 此时的位错数目处于最少, 如图 8(i) 所示, 体系能量此时处于极小值, 对应于图 4(b) 的能量曲线的 n_3 点. 应变继续

图7 在高温样品 B 图 5(f)中的方框区域, 沿 y 轴投影的原子密度分布随应变的变化曲线

各图对应的应变变量: (a) 0.0480; (b) 0.0540; (c) 0.0576; (d) 0.0606; (e) 0.0630; (f) 0.0642; (g) 0.0660; (h) 0.0684; (i) 0.0738; (j) 0.0780; (k) 0.0804; (l) 0.0840; (m) 0.0870; (n) 0.0900

增加, 在预熔化区又有新位错对生成, 例如, 生成了 1 对新的黄色位错, 该位错与之前的蓝色位错矢量方

向是相反的, 如图 8(j)所示. 这时的预熔化区域的黄绿两对位错与开始时的红蓝两对位错进行对比, 可

图 8 高温样品 B 位错组态演化过程的图 5(f)中方的白色矩形方框区域的放大图

白色椭圆圈内的位错表示将发生湮没. 各图对应的应变变量如下: (a) 0.0588; (b) 0.0612; (c) 0.0630; (d) 0.0642; (e) 0.0648; (f) 0.0654; (g) 0.0666; (h) 0.0672; (i) 0.0684; (j) 0.0708; (k) 0.0756; (l) 0.0804

见位错对的 Burgers 矢量方向已发生了 120° 的改变. 随后, 连通合并的预熔化区域开始分解并分离, 位错对偶极子拆散分离, 如图 8(k)~(l)所示. 分解后的 2 个预熔化区向相反的方向离去. 上述位错对的旋转的整个过程表明, 在接近熔点的高温情况下, 在施加应变条件下, 预熔化区域是最容易萌生新位错形核和生长的地方, 也是位错之间容易发生滑移湮没的地方. 由图 9(a)~(c)给出了直观的预熔化区内的位错滑移湮没机理示意图. 由图 9 可见, 该区域存在 2 个方向的滑移系 g_1 和 g_2 , 两滑移系相交. 原子层滑移方向可以发生转换, 例如, 开始时, 先启动 g_1 方向的滑移系, 经过一段时间滑移后沿 g_1 方向滑移减弱, 随后 g_2 方向滑移启动, 并逐渐增强, 滑移方向由 g_1 方向转化为 g_2 方向. 在整个滑移的过程中, 滑移方向会发生 $0\sim15^\circ$ 的微小旋转, 使得位错能够容易滑移, 因为位错的 Burgers 矢量方向与滑移方向 g 有个小的夹角. 参照文献[37]的原子排列方向表示, 可以写出这 2 个滑移方向 g_1 和 g_2 近似为, $g_1=[\bar{1}\bar{1}2]$ 和 $g_2=[\bar{1}2\bar{1}]$. 由于

该位错预熔化区域的晶格软化明显^[42], 原子热运动剧烈, 这有利于原子迁移和原子排列方向的改变, 也有利于新位错生成和转变. 位错对偶极子预熔化区内的位错对 Burgers 矢量方向发生 2 次旋转现象, 并不是原有位错对的直接旋转所成, 而是在应变下, 预熔化区内部的原子点阵排列发生畸变和滑移, 引起位错的组态发生变化, 导致原位错的滑移湮没, 新位错在不同位置和沿不同方向生成, 使得新位错的 Burgers 矢量方向相对原有位错发生了明显改变^[49,64,65]. 这些过程也反映出了 2 个相互靠近、连通、合并和分离的预熔化区域之间相互作用的不同阶段.

5 结论

1) 没有施加应变时, 当体系在高温度情况下, 晶界处的晶格位错周围出现预熔化现象; 预熔化温度越接近熔点温度, 预熔化现象越明显, 该区域出现晶格原子软化现象也越突出. 对于不靠近固-液共存

图9 预熔化区内原子层滑移方向和位错滑移湮没示意图

图中的 g_1 和 g_2 表示预熔化区内原子层的 2 个滑移方向, (a) 绿位错对沿 g_1 方向滑移湮没; (b) 蓝位错对沿 g_1 方向滑移湮没和红位错对沿 g_2 方向滑移; (c) 红位错对沿 g_2 方向滑移湮没

温度的高温预熔化样品 A, 施加外应变, 这时晶界处的晶格位错发生滑移运动, 生成亚晶界和新的晶粒, 随后, 具有相反 Burgers 矢量的位错的亚晶界相向运动, 新晶粒不断吞噬旧晶粒; 最后发生亚晶界相遇湮没, 亚晶界和预熔化区域消失, 双晶转变为完整单晶。

2) 对于靠近固-液共存温度的高温预熔化样品 B, 在应变下生成的亚晶界相向运动, 当靠近到一定距离时, 形成位错对偶极子, 然后发生亚晶界结构出现二次转换, 即亚晶界位错矢量方向发生改变, 随后出现亚晶界反向往回运动, 最后与另一列返回的亚晶界相向靠近, 相互作用, 引起位错分解, 转变成“之”字形的亚晶界, 然后湮没消失。整个亚晶界迁移

过程随之结束。

3) 高温预熔化样品 B, 在应变下形成位错对偶极子后, 偶极子的 2 个位错预熔化区域开始扩张、连通、合并, 形成近似棒状区域。这一过程发生了不同类型的位错相互作用, 出现了位错对萌生、形核和增殖, 位错对的滑移和湮没, 由此引起了位错的 Burgers 矢量方向的改变和位错类型交换。这一过程的本质是预熔化区内部的原子晶格变软, 使得原子排列可以较容易的发生滑移和扭转变形, 引起内部位错发生不同类型的位错反应。预熔化区的原子排列存在 2 个滑移方向, 并且预熔化区的形状与原子排列滑移方向和位错运动密切相关。

参考文献

- 1 Straumal B B, Zieba P, Gust W. Grain boundary phase transitions and phase diagrams. *Int J Inorg Mater*, 2001, 3: 1113–1118
- 2 Straumal B, Kogtenkova O, Protasova S, et al. Wetting and premelting of triple junctions and grain boundaries in the Al-Zn alloys. *Mater Sci Eng A*, 2008, 495: 126–131
- 3 Luo J. Liquid-like interface complexion: From activated sintering to grain boundary diagrams. *Curr Opin Solid St M*, 2008, 12: 81–89
- 4 Alsayed A M, Islam M F, Zhang J, et al. Premelting at defects within bulk colloidal crystals. *Science*, 2005, 309: 1207
- 5 Tallon J L. Premelting near crystal defects. *Nature*, 1978, 276: 849–851
- 6 Bartis F J. Thermodynamic equations for dysprosium-aluminum garnet near its Néel point. *Nature*, 1977, 268: 427–430
- 7 Oxtoby D W. New perspectives on freezing and melting. *Nature*, 1990, 347: 725–728
- 8 Pusey P N. Freezing and melting: action at grain boundaries. *Science*, 2005, 309: 1198–1201
- 9 Hsieh T E, Balluffi R W. Experimental study of grain boundary melting in aluminum. *Acta Metall*, 1989, 37: 1637–1643
- 10 卢柯, 生红卫, 金朝晖. 晶体的融化和过热. *材料研究学报*, 1997, 11: 654–659
- 11 Chaudron G, Lacombe P, Yannaquis N. Intergranular corrosion of pure aluminium in relation to the behaviour of grain-boundaries during melting. *Comptes Rendus Hebdomadaires Des Seances De L Academie Des Sciences*, 1948, 226: 1372–1378
- 12 Balluffi R W, Maurer R. On rotating sphere-on-a-plate experiments and the question of whether high angle grain boundaries melt below bulk melting temperatures. *Scripta Metallurgica*, 1988, 22: 709–715
- 13 Divinski S, Lohmann M, Herzig C, et al. Grain-boundary melting phase transition in the Cu-Bi system. *Phys Rev B*, 2005, 71: 104104

- 14 Shi X M, Luo J. Grain boundaries wetting and premelting in Ni-doped Mo. *Appl Phys Lett*, 2009, 94: 251908
- 15 Inoko F, Okada T, Maraga T, et al. Strain induced grain boundary premelting in bulk copper bicrystals. *Interf Sci*, 1997, 4: 263–269
- 16 Inoko F, Hama T, Tagami M, et al. Grain boundary premelting in thin foils of deformed copper bicrystals. *Ultramicroscopy*, 1991, 39: 118–124
- 17 Wang N, Mokadem S, Rappaz M, et al. Solidification cracking of superalloy single- and bi-crystals. *Acta Mater*, 2004, 52: 3173
- 18 张林, 王绍青, 叶恒强. 大角度 Cu 晶界在升温、急冷条件下晶界结构的分子动力学研究. *物理学报*, 2004, 53: 2497–2502
- 19 Williams P L, Mishin Y. Thermodynamics of grain boundary premelting in alloys. II. Atomistic simulation. *Acta Mater*, 2009, 57: 3786
- 20 Frolov T, Mishin Y. Molecular dynamics modeling of self-diffusion along a triple junction. *Phys Rev B*, 2009, 79: 174110
- 21 Koblinski P, Phillpot S R, Wolf D, et al. Amorphous structure of grain boundaries and grain junctions in nanocrystalline silicon by molecular-dynamics simulation. *Acta Mater*, 1997, 45: 987–996
- 22 Besold G, Mouritsen O G. Grain-boundary melting: A Monte Carlo study. *Phys Rev B*, 1994, 50: 6573
- 23 Qi Y, Krajewski P E. Molecular dynamics simulations of grain boundary sliding: The effect of stress and boundary misorientation. *Acta Mater*, 2007, 55: 1555–1563
- 24 Fan D, Chen L Q. Computer simulation of grain growth using a continuum field model. *Acta Mater*, 1997, 45: 611–622
- 25 Lobkovsky A E, Warren J A. Phase field model of premelting of grain boundaries. *Physica D*, 2002, 164: 202–209
- 26 Mishin Y, Boettinger W J, Warren J A, et al. Thermodynamics of grain boundary premelting in alloys. I. Phase-field modeling. *Acta Mater*, 2009, 57: 3771–3779
- 27 Elder K R, Katakowski M, Haataja M, et al. Modeling elasticity in crystal growth. *Phys Rev Lett*, 2002, 88: 245701
- 28 Elder K R, Grant M. Modeling elastic and plastic deformations in nonequilibrium processing using phase field crystals. *Phys Rev E*, 2004, 70: 051605
- 29 Yu Y M, Backofen R, Voigt A. Morphological instability of heteroepitaxial growth on vicinal substrates: A phase-field crystal study. *J Cryst Growth*, 2011, 318: 18–22
- 30 Elder K R, Rossi G, Kanerva P, et al. Patterning of heteroepitaxial over layers from nano to micron scales. *Phys Rev Lett*, 2012, 108: 226102
- 31 Gao Y J, Huang L L, Deng Q Q, et al. Simulation of epitaxial growth on convex substrate using phase field crystal method. *Front Mater Sci*, 2014, 8: 185–182
- 32 高英俊, 罗志荣, 黄创高, 等. 晶体相场方法研究二维六角相向正方相结构转变. *物理学报*, 2013, 62: 050507
- 33 Greenwood M, Rottler J, Provatas N. Phase-field-crystal methodology for modeling of structural transformations. *Phys Rev E*, 2011, 83: 031601
- 34 Mkhonta S K, Elder K R, Huang Z F. Exploring the complex world of two-dimensional ordering with three modes. *Phys Rev Lett*, 2013, 111: 035501
- 35 高英俊, 罗志荣, 黄礼琳, 等. 韧性材料的微裂纹扩展和连通的晶体相场模拟. *中国有色金属学报*, 2013, 23: 1892–1899
- 36 杨涛, 陈铮, 董卫平. 应力诱发双位错组亚晶界湮没的晶体相场模拟. *金属学报*, 2011, 47: 1301–1306
- 37 高英俊, 卢成健, 黄礼琳, 等. 晶界位错运动与位错反应过程的晶体相场模拟. *金属学报*, 2014, 50: 110–120
- 38 高英俊, 王江帆, 罗志荣, 等. 晶体相场方法模拟纳米孪晶结构. *计算物理*, 2013, 30: 85–89
- 39 Mellenthin J, Karma A, Plapp M. Phase-field crystal study of grain-boundary premelting. *Phys Rev B*, 2008, 78: 184110
- 40 Gao Y J, Deng Q Q, Quan S L, et al. Phase field crystal simulation of grain boundary movement and dislocation reaction. *Front Mater Sci*, 2014, 8: 176–184
- 41 Hirouchi T, Takaki T, Tomita Y. Development of numerical scheme for phase field crystal deformation simulation. *Comp Mater Sci*, 2009, 44: 1192–1197
- 42 Takaki T, Tomita Y. Static recrystallization simulations starting from predicted deformation microstructure by coupling multi-phase-field method and finite element method based on crystal plasticity. *Int J Mech Sci*, 2010, 52: 320–324
- 43 Adland A, Karma A, Spatschek R, et al. Phase-field-crystal study of grain boundary premelting and shearing in bcc iron. *Phys Rev B*, 2013, 87: 024110
- 44 Olmsted D L, Buta D, Adland A, et al. Dislocation-pairing transitions in hot grain boundaries. *Phys Rev Lett*, 2011, 106: 046101
- 45 Spatschek R, Adland A, Karma A. Structural short-range forces between solid-melt interfaces. *Phys Rev B*, 2013, 87: 024109
- 46 Berry J, Elder K R, Grant M. Melting at dislocations and grain boundaries: A phase field crystal study. *Phys Rev B*, 2008, 77: 224114
- 47 Spatschek R, Karma A. Amplitude equations for polycrystalline materials with interaction between composition and stress. *Phys Rev B*, 2010, 81: 214201

- 48 卢艳丽, 牧虹, 侯华欣, 等. 晶体相场模拟晶界预熔及熔化. 金属学报, 2013, 49: 358–364
- 49 高英俊, 周文权, 邓芊芊, 等. 晶体相场方法模拟高温应变作用的预熔化晶界的位错运动. 金属学报, 2014, 50: 886–896
- 50 Cheng M, Warren J A. An efficient algorithm for solving the phase field crystal model. J Comput Phys, 2008, 227: 6241–6248
- 51 Morozov N F, Ovidko I A, Sheinerman. Special rotational deformation as a toughening mechanism in nanocrystalline solids. J Mech Phys Solids, 2010, 58: 1088–1099
- 52 高英俊, 罗志荣, 黄礼琳, 等. 变形合金的亚晶组织演化的相场模型. 金属学报, 2012, 48: 1215–1222
- 53 Hirth J P, Pond R C, Lothe J. Disconnections in tilt walls. Acta Mater, 2006, 54: 4237–4245
- 54 龙建, 王诏玉, 赵宇龙, 等. 不同对称性下晶界结构演化及微观机理的晶体相场法研究. 物理学报, 2013, 62: 218101
- 55 Tucker G J, Zimmer J A, McDowell D L. Shear deformation kinetics of bicrystalline grain boundaries in atomic simulations. Modelling Simul Mater Sci Eng, 2010, 18: 015002
- 56 Wang H, Xu D S, Yang R, et al. The formation of stacking fault tetrahedra in Al and Cu: I. Dipole annihilation and the nucleation stage. Acta Mater, 2011, 59: 1–9
- 57 Wang H, Xu D S, Yang R, et al. The transformation of edge dislocation dipoles in aluminium. Acta Mater, 2008, 56: 4608–4620
- 58 Yu W S, Wang Z Q. “Positive” and “negative” edge dislocations simultaneously interacting with GB during nanoindentation. Comp Mater Sci, 2014, 87: 150–159
- 59 Broughton J Q, Gilmer G H. Grain-boundary shearing as a test for interface melting. Modelling Simul Mater Sci Eng, 1998, 6: 87–97
- 60 Wang J, Liu L, Tome C N, et al. Twinning and de-twinning via glide and climb of twinning dislocations along serrated coherent twin boundaries in hexagonal-close-packed metals. Mater Res Lett, 2013, 1: 81–89
- 61 Li N, Wang J, Misra A, et al. Twinning dislocation multiplication at a coherent twin boundary. Acta Mater, 2011, 59: 5989–5996
- 62 Li J J, Soh A K, Wu X L. On nanograin rotation by dislocation climb in nanocrystalline materials. Scripta Mater, 2014, 78: 5–8
- 63 Hirth J P, Lothe J. Theory of dislocations. New York: McGraw-Hill Inc Press, 1968. 250–350
- 64 Guo Y L, Wang J C, Wang zhijun, et al. Phase field crystal modeling of grain rotation with small initial misorientations in nanocrystalline materials. Comp Mater Sci, 2014, 88: 163–169
- 65 Shishvan S S, Giessen E V. Dislocation source length dependent yield strength in freestanding thin films. J Mech Phys Solids, 2010, 58: 678–695

Phase field crystal simulation of subgrain boundary annihilation and dislocation rotation mechanism under strain at high temperature

GAO YingJun^{1,2}, HUANG LiLin^{1,2}, ZHOU WenQuan¹, QUAN SiLong¹, LIN Kui¹ & LUO ZhiRong^{1,3}

¹ College of Physics Science and Engineering, Guangxi University, Nanning 530004, China;

² Key Lab of Engineering Disaster Prevention and Structural Safety of Ministry of Education, Guangxi University, Nanning 530004, China;

³ Institute of Physics Science and Engineering Technology, Yulin Normal University, Yulin 537000, China

In this work, the annihilation process of subgrain boundary (SGB) and splitting of low-angle symmetric till grain boundaries (GBs) during plastic deformation in the representatively system of these materials near but below the melting point and the temperature far from liquid-solid coexistence line are simulated using the phase field crystals (PFC) model, respectively. The results show that premelting GBs at the temperature far from liquid-solid coexistence line will split into two SGBs and glide under strain. With the strain increasing, these SGBs of dislocations with opposite sign Burgers vectors are close to each other, and generate new grains to swallow up the old one. Finally these SGBs meet each other and annihilate, and then the SGBs and premelting regions disappear. The system with two grains transforms into that of one grain. The GBs at the temperature close to melting point under external exerting strain split into two SGBs with opposite sign dislocation, and move to approach other SGB split from other GB. The SGBs with opposite sign move close to each other at certain distance to form a dipole of dislocation pair in relative stability. Owing to the shear stress, the dislocation pair in the SGBs changes its direction two times, about 120°. After that, the SGBs move reverse to approach other opposite SGB, and appear to dislocation dissociation and transform into “Zigzag” shape of SGBs, and then the dissociated dislocation annihilates each other. For the premelting GB of the dislocation pair dipole under strain, it will start to extend and consolidate together, then decompose and separate from each other. In this process, the interaction of dislocation of different types occur, and also the generation of new dislocations and annihilation of dislocation by gliding, which will result in the change of Burgers vector of dislocation and the exchange of types of dislocation. The nature of this process is that the atomic lattices are softening inside the premelting region, which lead to the atomic array easily to gliding and torsional deformation under applying strain, and result in dislocation reaction in different types inside the premelting region and the change of Burgers vector of dislocation.

subgrain boundary annihilation, dislocation rotation, high temperature, strain, phase field crystal model

doi: 10.1360/N092014-00299