文章编号：1004-0609(2014)08-2073-10

晶界位错发射与湮没过程的晶体相场模拟

高英俊[1,2]，卢成健[1,3]，罗志荣[1,3]，林 葵[1,2]，黄创高[1,2]

(1. 广西大学 物理科学与工程技术学院，南宁 530004；
2. 广西大学 广西有色金属及特色材料加工重点实验室，南宁 530004；
3. 玉林师范学院 物理科学与工程技术学院，玉林 537000)

摘 要：采用晶体相场模型模拟位向差为 7.70°的对称倾侧晶界位错在外加应力作用下的运动形式和演化过程；计算位错分离的激活能，并从能量变化角度分析位错运动过程中发生的分解、湮没和合并机制；分析该对称倾侧晶界在外力作用下晶界湮没过程不同特征阶段的差异。结果表明，晶界的湮没存在不同的特征阶段，主要阶段如下：位错的攀移，位错的分解与滑移，位错湮没；位错的再攀移与位错再分解、再湮没，或者出现了若干短暂的新阶段，如滑移位错与晶界上其他位错发生合并而被晶界吸收，或者滑移位错与另一滑移位错在晶内发生合并形成新位错组，或者滑移位错与另一滑移位错发生湮没消失。晶界上全位错的分解实质是产生了一对新的符号相反的柏氏矢量；分位错在晶界上的湮没或合并实质是分位错与晶界上的全位错形成的一对符号相反的柏氏矢量发生抵消；分位错与分位错在晶粒内部的湮没消失，其实质是 2 个分位错之间的 2 对符号完全相反的位错柏氏矢量相互抵消。

关键词：晶界；位错；湮没；分解；晶体相场模型
中图分类号：TF80 **文献标志码**：A

Phase field crystal simulation of dislocation emission and annihilation at grain boundary

GAO Ying-jun[1,2], LU Cheng-jian[1,3], LUO Zhi-rong[1,3], LIN Kui[1,2], HUANG Chuang-gao[1,2]

(1. College of Physics Science and Engineering, Guangxi University, Nanning 530004, China;
2. Guangxi Key Laboratory for Non-ferrous Metal and Featured Materials, Guangxi University, Nanning 530004, China;
3. Institute of Physics Science and Engineering Technology, Yulin Normal University, Yulin 537000, China)

Abstract: The movement and evolution of the dislocation for a low-angle grain boundary (GB) with orientation of 7.70° under stress were simulated by using the phase-field crystal model. The dislocation reaction of separation, annihilation and mergence and these mechanisms were analyzed from the energy point of view, and the activation energy of dislocation separation was calculated. The difference of feature stages for the annihilation process of dislocation under stress was shown through comparing two grain boundaries with different misorientations. The results show the obvious difference of typical stages of the annihilation process of GB. The main stages of GB annihilation include the dislocation climb, dislocation separation and dislocation slide, dislocation annihilation; again the dislocation climb and dislocation separation, dislocation annihilation, or instead of the dislocation climb, some new stages presented during the GB annihilation. For example, the sliding dislocation is merged by the dislocation inside the GB or absorbed by GB, or one sliding dislocation reacts with another sliding dislocation in the grain to merge into a new dislocation pairs, or the sliding dislocation reacts with another dislocation to present annihilation and disappear. The essence of dissociation of the full dislocation is that the new dislocation pairs with opposite Burgers vector are created, while that of annihilation or merge

基金项目：国家自然科学基金资助项目(51161003)；广西自然科学重点项目资助项目(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资助项目(GXKFJ12-01)；广西研究生教育创新计划项目基金资助项目(YCSZ2014039)
收稿日期：2013-08-30；**修订日期**：2014-03-25
通信作者：高英俊，教授，博士；电话：0771-3232666；E-mail: gaoyj@gxu.edu.cn

of dislocations is that the pair opposite Burgers vectors between the partial dislocation and the full dislocation on the grain boundary bring about to counteract. The annihilation of two dislocation pairs in the grain is produced by perfect counteracting of the two-opposite-pair Burgers vectors of these two dislocation pairs.

Key words: grain boundary; dislocation; annihilation; separation; phase-field crystal

晶体材料通常由大量晶粒组成，晶界就是位向不同的晶粒之间的交界面，每个晶粒内部有时又由若干个位向稍有差异的亚晶粒组成。小角度晶界一般是指2个晶粒间位向差小于10° 的晶界[1−2]。晶界、亚晶界是一种面缺陷，它是由一系列位错按特定方式排列而构成。位错会引起它附近晶体点阵结构的弹性畸变，是一种内应力源[2]。在稳定的环境条件下，晶界(包括亚晶界)可以保持稳定的结构，而在外加应力作用下位错会发生运动导致晶界迁移，甚至湮没[3−6]。晶界位错的结构和迁移方式对材料的性能产生重要影响[7]，晶界位错运动在晶粒长大特别是冷加工金属材料的退火中有重要作用[1−2]。位错运动涉及的原子运动过程比较快，而且是在非平衡条件下进行的。目前的实验条件还较难做到实时观察晶界、亚晶界上位错的分布和运动，但借助计算机强大的计算功能，可以进行细致的模拟实验，实时观察晶界、位错的运动过程，弥补真实实验的不足。

采用最新发展的晶体相场模型[8−10]可以研究纳米尺寸下材料的微结构，研究各种因素对位错分布和运动及其对晶界演化的影响[11]。目前已有研究者[12−13]利用晶体相场模型模拟了外加应力、温度、位向差等因素对亚晶界湮没的影响过程。实际上，晶界的演化是十分复杂的，除了外加因素的影响外，位向差和晶界的初始状态对晶界的演化都有影响[14]。在晶界区域处，原子排列存在着失配。晶界的位向差不同，其失配程度也不同，这会引起晶界演化机理产生明显差异。因此，为了更准确地揭示晶界位错的迁移过程，本文作者针对小角度晶界位错在外应力作用下，对位错的发射和吸收的作用，以及位错相遇湮没的过程进行研究，分析位错相互作用的反应特征，揭示这些作用的内在机理。

1 晶体相场模型

1.1 体系的能量函数

传统相场模型[15−17]是建立在热力学理论基础上的描述体系演化的动力学模型，它可以描述晶体微米尺度的微观结构及其演化规律，如可用来研究金属的凝固、再结晶与晶粒长大等现象，但是难以描述原子尺度下的位错运动过程。新建立的晶体相场(PFC)模型是近几年提出的，该模型是基于密度泛函理论而建立的[8]，其优势在于能够描述原子空间尺度和扩散时间尺度上的现象，并能揭示原子尺度效应。晶体相场已用于研究位错和纳米晶晶界的迁移[11]、多晶凝固[18]、外延生长[19−20]、结构相变[21−22]、晶界熔解[23]、微裂纹扩展[24]等现象。

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[9]，能够揭示晶体学结构特性以及原子尺度的行为。该原子密度场函数($\rho(r)$)作为相场变量，其表达式[9]可写成

$$\rho(r)=\sum_{n,m}a_{n,m}\mathrm{e}^{i\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{r}}+\rho_0 \tag{1}$$

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；$\boldsymbol{G}$ 为倒格矢；$\boldsymbol{r}$ 为空间位置矢量；$a_{n,m}$ 为振幅。此时体系无量纲的自由能函数(F)可以写成[9]

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

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、弹性效应和塑性变形等。

1.2 二维体系的极小自由能密度函数

对于二维晶格点阵，倒格矢为 $\boldsymbol{G}=n_1\boldsymbol{b}_1+n_2\boldsymbol{b}_2$，其中 $\boldsymbol{b}_1$ 和 $\boldsymbol{b}_2$ 为倒格子基矢。对于三角格子，倒格子基矢可以写成[9]

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

式中：$\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 分别表示 x 和 y 方向的矢量；a 为晶格常数。

对二维体系的极小自由能函数的解取单模近似，可得到平衡时三角格子固相的原子密度函数 ρ，可近似写成[9]

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

式中：$\boldsymbol{q}$ 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，其表达式为

$$A_0=\frac{4}{5}(\rho_0+\frac{1}{3}\sqrt{-15\gamma-36\rho_0^2}) \tag{5}$$

式中：ρ_0 和 γ 为体系自由能函数的两个重要参数。由体系的极小自由能密度函数，可以计算并绘制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，且固相有三角格子相和条状相两种，文献[9]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得到的二维相图，如图 1 所示。

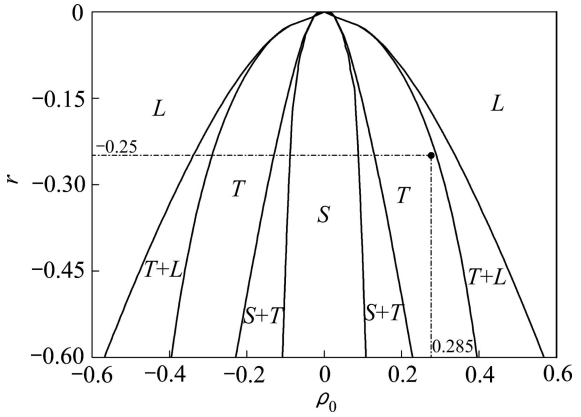

图 1　单模近似得到的二维相图[12]

Fig. 1　Two dimensional phase diagram of phase field crystal[12] (*L*, *S* and *T* indicate liquid, strip and triangular phases, respectively)

1.3　演化动力学方程

保守的原子密度场变量的演化可用与时间相关的 Cahn-Hilliard 动力学方程描述[9]

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=\nabla^2\frac{\delta F}{\delta\rho}+\zeta=\nabla^2\left[\gamma\rho+\rho^3+(1+\nabla^2)^2\rho\right]+\zeta \tag{6}$$

式中：ζ 为高斯随机噪声项，具有零平均值。在此，不需考虑 ζ 的作用。

为求解复杂的动力学方程(6)，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。

2　数值计算方法

2.1　数值计算与初始条件

对动力学方程(6)采用半隐式 Fourier 谱方法[25]求解，其离散形式为

$$\frac{\rho_{\boldsymbol{k},t+\Delta t}-\rho_{\boldsymbol{k},t}}{\Delta t}=-k^2\{[\gamma+(1-k^2)^2]\rho_{\boldsymbol{k},t+\Delta t}+(\rho)^3_{\boldsymbol{k},t}\} \tag{7}$$

整理式(7)后得：

$$\rho_{\boldsymbol{k},t+\Delta t}=[\rho_{\boldsymbol{k},t}-\boldsymbol{k}^2(\rho)^3_{\boldsymbol{k},t}\Delta t]/\{1+\boldsymbol{k}^2[\gamma+(1-\boldsymbol{k}^2)^2]\Delta t\} \tag{8}$$

式中：$\rho_{\boldsymbol{k},t+\Delta t}$ 为 Fourier 空间 $t+\Delta t$ 时刻的原子密度；$\boldsymbol{k}$ 为 Fourier 空间的波矢。

在本模拟中，晶体结构中原子排列点阵的演化主要由式(8)确定。首先，由式(4)设置晶体中原子密度 ρ 的初始分布，然后，进行 Fourier 变换，求 $\boldsymbol{k}$ 空间的波矢，利用式(8)求 ρ 的演化规律；最后，把 ρ 从 $\boldsymbol{k}$ 空间转换为 $\boldsymbol{r}$ 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。

在本模拟中，采用三角相表征晶体结构。选取模拟参数 $\rho_0=0.285$，$\gamma=-0.25$，取空间步长为 $\Delta x=\Delta y=\pi/4$，时间步长为 $\Delta t=0.5$。边界条件为周期性边界条件。初始条件按如下方法给出：对于周期性的计算区域 $L_x\times L_y=256\Delta x\times 256\Delta y$，运用式(4)使三角相的取向在晶粒 I 区域 $0<x<\frac{1}{4}(N-2d)$ 和 $\frac{1}{4}(3N+2d)<x<N$ 范围内为 $\theta/2$，在中间(晶粒 II)区域 $\frac{1}{4}(N+2d)<x<\frac{3}{4}(N-2d)$ 范围内为 $-\theta/2$，其中 $0<y<L_y$，本模拟中取 θ=7.70°。经过 1000 步的时间弛豫，获得稳定的对称倾侧晶界。

2.2　外应力的施加

在外加应力作用下，晶粒会发生变形，引起晶界和位错运动变化。在二维体系的变形过程中采用等面积不变[26−27]模型，则有

$$S=\Delta x\Delta y=\Delta x'\Delta y' \tag{9}$$

设无量纲的应变速率为 $\dot{\varepsilon}$，应变量 $\varepsilon=\dot{\varepsilon}n\Delta t$ (其中 n 为时间步数，Δt 为时间步长)。设在 x 方向上给体系一个拉应力，则有

$$\Delta x'=(1+\varepsilon)\cdot\Delta x=\Delta x+n\cdot\dot{\varepsilon}\cdot\Delta x\cdot\Delta t \tag{10}$$

$$\Delta y'=\Delta y/(1+\varepsilon)=\Delta y/(1+n\cdot\dot{\varepsilon}\cdot\Delta t) \tag{11}$$

由此可见，在 y 方向上体系受到一个压应力。无量纲应变速率设为 $\dot{\varepsilon}=5\times10^{-6}$。详细的二维拉伸变形模拟的数值算法见文献[26]。

3　结果与分析

3.1　应变作用下的晶界湮没过程

3.1.1　晶界全位错分解与位错的相互作用

图 2(a)所示为模拟样品中的对称倾侧的小角度晶

界，该直线晶界由规则排列的配对的刃位错等距排列而成，组成配对的刃位错组，其中 2 个多余原子排列平面之间的夹角近似为 60°。为了清晰起见，本实验中将晶界上的配对位错对叫做全位错(注意，这里的全位错与文献[1−2]中全位错的概念不完全相同)，由晶界上的全位错分解发射的位错对叫做分位错，实际上，分位错也是由两个单刃位错并合而成的位错对。本实验中选取位向差值为 7.70°的对称倾侧的小角度晶界进行模拟研究，该晶界位向差比文献[12]中晶界位相差稍小，但在整个晶界演化过程中出现了许多新的特点，并不能用文献[12]的 4 个典型阶段描述。本模拟中得到的晶界湮没和位错相互作用分别过程如图 2(a)~(f)所示。

由图 2(a)可见，初始的晶界由 4 个等距离排列的全位错排成一列队形，注意到每个全位错又由 2 个单刃位错组合而成。从图 3 可以看到，晶界湮没的自由能−应变曲线分成 3 个典型的特征阶段。第 1 阶段对应全位错沿晶界攀移积累能量过程(见图 2(a))。此时晶界能量随着应变量的增大而显著增加(见图 3 中曲线第 1 阶段)。这一阶段，全位错作攀移运动，直到出现晶界发射位错的时刻，这时，体系自由能达到最大值。第 2 阶段对应于图 3 中能量急剧下降阶段，这一阶段是全位错发生分解，晶界发射位错，位错的运动由攀移转换为滑移形式。由于晶界全位错发生分解，需要足够的能量克服晶格阻力，因此，需要累积能量。当达到临界能量值时，全位错分解成 2 个分位

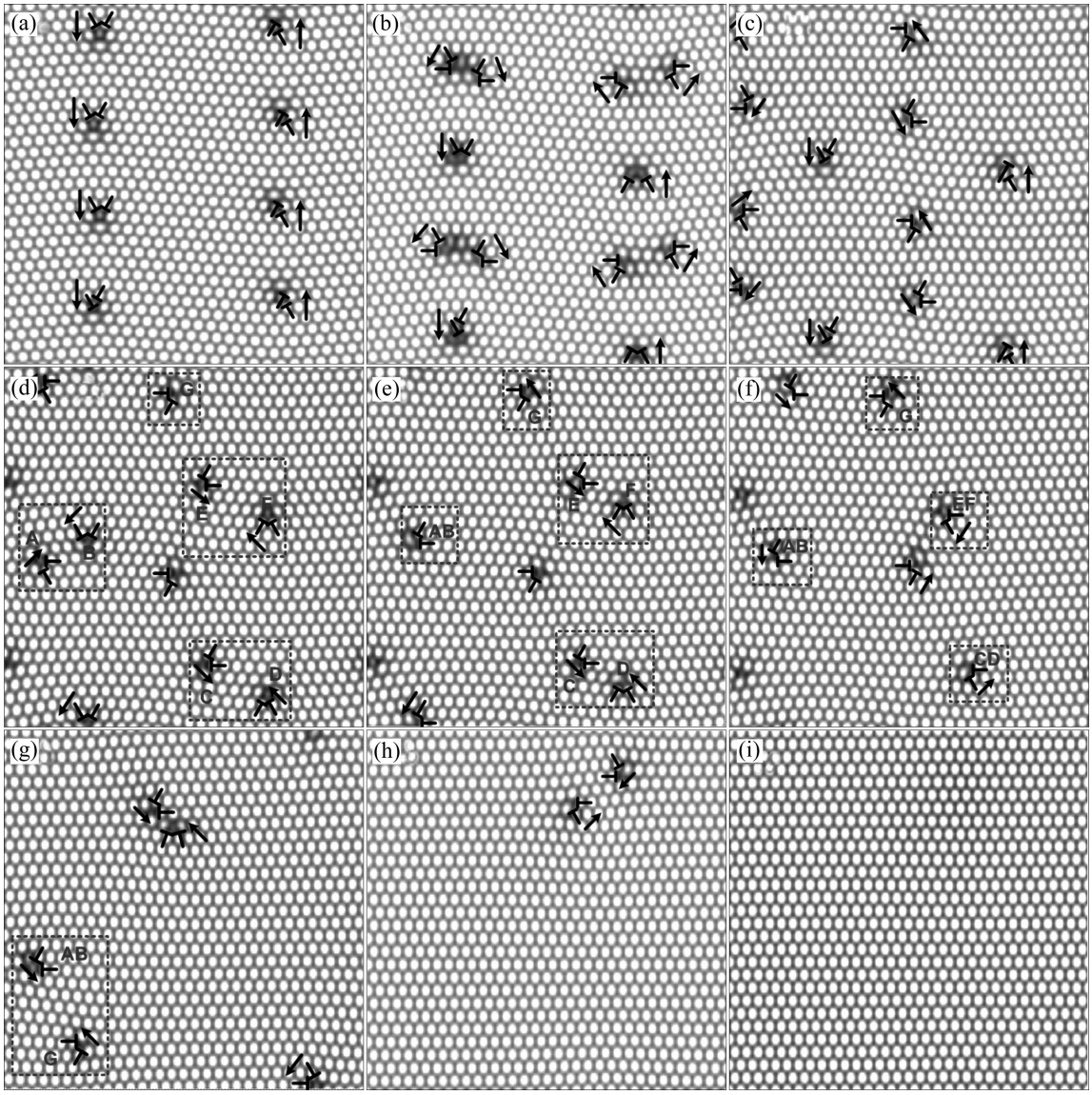

图 2 不同应变下位向差θ=7.70°时的晶界湮没过程模拟

Fig. 2 Grain boundary annihilation simulated at θ=7.70° and different strains: (a) ε=0.045; (b) ε=0.0825; (c) ε=0.0855; (d) ε=0.0915; (e) ε=0.0960; (f) ε=0.1050; (g) ε=0.1275; (h) ε=0.1410; (i) ε=0.1440

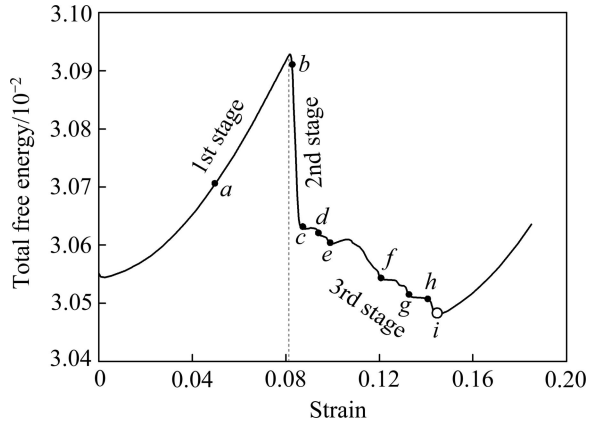

图 3　位向差θ=7.70°时的自由能−应变曲线

Fig. 3　Free energy−strain curve for orientation angle θ=7.70° of grain boundary

错(每个分位错同样由 2 个刃位错组合而成，但刃位错的柏氏矢量发生变化)，快速释放能量，使体系自由能迅速减小。第 3 阶段较为复杂，并没有出现余下的晶界全位错继续攀移，使体系能量增加的阶段，而是由几个暂短的能量降低阶段组成。主要包括如下过程：分位错滑移穿过晶粒内部到达对面晶界，并在晶界上湮没，即被晶界吸收(即与晶界上的全位错合并，合二为一)，这一过程如图 2(d)所示，例如，分位错 A 被晶界全位错 B 吸收生成新的位错组 AB，分位错 E 被晶界全位错 F 吸收生成新的位错组 EF，分位错 C 被晶界全位错 D 吸收生成新的位错组 CD，对应于图 3 曲线中 *d*–*e* 阶段；接下来晶界上新生成的位错组 AB、EF、CD 继续滑移，再与其他方向滑移过来的位错组相遇发生湮没，直至所有位错组相遇再全部湮没，晶界完全消失，如图 3 所示，从 *e* 点到 *i* 点这一过程，对应于图 2(e)~(i)。从图 3 可见，第 2 和第 3 阶段的能量曲线都呈下降趋势，表明在这两个阶段，发生的是滑移分位错在晶界上的湮没，以及分位错之间的湮没。这时，位错的畸变能不断释放，能量不断减少。晶界吸收分位错的实质是晶界上的全位错和晶粒内的滑移分位错相互吸引而并合在一起，生成新的位错组，并改变原滑移方向，向另一方向滑移，转向约 120°角。晶界上的全位错初次与晶内滑移的分位错相遇合二为一，生成的位错组中多余原子面的方向保留了原来两个位错组中不同方向的原子面，而相反方向的原子面就被抵消，对比图 2(d)和(e)中的 A、B、AB 位错的结构可以看出位错组中多余原子面方向的变化。当晶界上经过合并的位错组继续吸收晶粒内的滑移分位错时，其与晶粒内的位错组相遇会发生完全湮没，一起消失。这是因为此时 2 个分位错的 2 个多余原子面方向完全相反，全部抵消，如图 2(g)和 2(h)所示。图中箭头所指表示位错运动方向。

3.1.2　晶界初次吸收分位错的局部自由能变化

由图 2(d)和 2(e)可见，从对面晶界发射过来的分位错 A 和晶界上的全位错组 B 相遇发生合并(即位错组 A 在晶界上湮没，或者叫作位错组 A 被晶界吸收)生成新的位错组 AB，计算得到它们在相遇前后的局部能量及其变化率与应变量的关系曲线，如图 4(a)和(b)所示，图中的小圆圈表示 A 和 B 位错组已合二为一，生成新的位错组 AB。从图 4(a)和(b)可以看到，由于晶界此前已发生位错组分解脱离晶界，晶界的局部能量有所下降，但晶界吸收位错过程的能量还维持在较高水平，在 0.1551~0.1569 之间，能量释放的速率也较高，达到 0.78。由如图 3 中 *d*–*e*–*f*–*g*–*h* 阶段可见，随着位错组不断在晶界湮没，晶界位错的畸变能不断减小，能量值也逐渐降低。

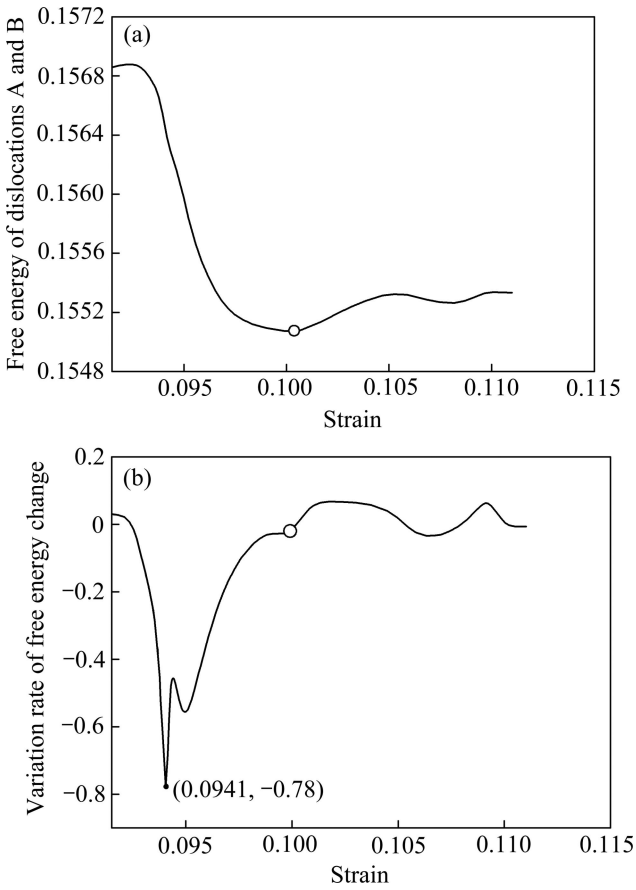

图 4　位错被晶界吸收的局部自由能与应变关系曲线以及位错被晶界吸收的局域自由能变化率与应变关系曲线

Fig. 4　Local free energy–strain curve of dislocation absorbed by grain boundary(a) and variation rate of local free energy–strain curve of dislocation absorbed by grain boundary(b)

3.1.3 晶界再次吸收分位错的自由能变化

图 2(g)中晶界上的位错组 AB 再次吸收从晶粒内滑移过来的分位错 G，它们相遇后发生湮没并消失，如图 2(g)~(h)所示。模拟计算得到位错组 AB 与位错 G 相遇前后的局部能量及其变化率与应变的关系曲线如图 5(a)和 (b)所示，图中的小圆圈表示该位错组已相遇并完成湮没。从图 5(a)可以看到，晶界在吸收位错之前，能量曲线呈上升趋势，表明位错向晶界靠近时，引起较大的畸变，使位错与晶界附近的应变能增加。当位错与晶界上的位错发生合并时，即晶界吸收位错，则出现能量迅速降低，畸变迅速减小。比较图 4(a)和图 5(a)可见，第二次晶界吸收位错时，位错靠近晶界过程，引起较大晶格畸变，使得能量增加，而晶界初次吸收位错情况，能量增加现象不明显。由图 5(a)可以看到，在晶界吸收位错的末阶段，此时，应变量为 0.132，对应的晶界的能量降到了低点，变为 0.03155，同时，由图 5(b)可见，能量释放的速率也达到最快。晶界吸收位错使位错数量减少，导致晶界的能量下降。

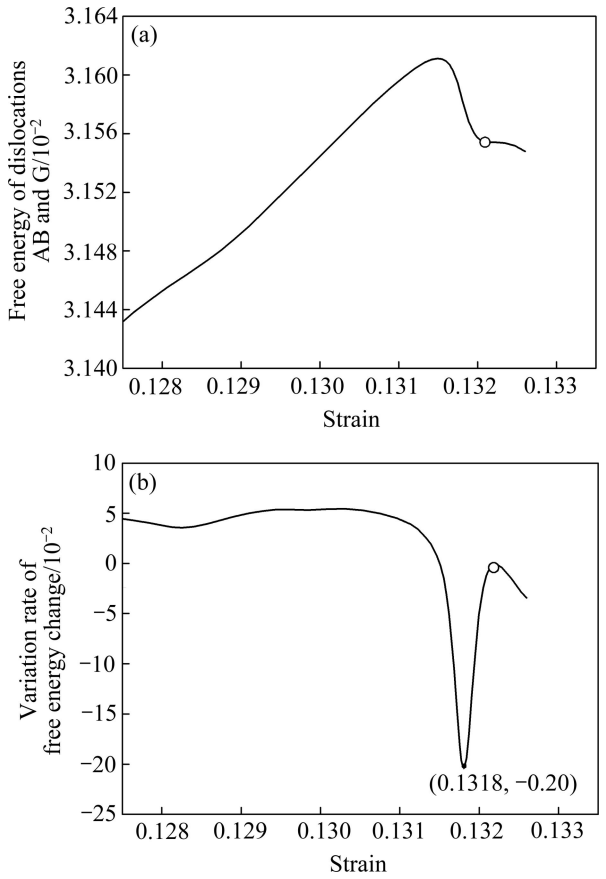

图 5 位错被晶界吸收而湮没的自由能与应变关系曲线以及位错被晶界吸收湮没的自由能变化率与应变关系曲线

Fig. 5 Local free energy–strain curve of dislocation annihilated at grain boundary(a) and variation rate of local free energy–strain curve of dislocation annihilated at grain boundary(b)

3.2 亚晶界的产生、迁移和湮没

由图 2(a)所示的对称倾侧晶界结构可以看到，晶界由规则排列的配对全位错排列成直线构成，每个全位错的两个多余原子排列平面之间的夹角近似为 60°。当晶界上的全位错分解时，亚晶界就开始生成，如图 2(b)所示。图中左边晶界上的两组全位错分解出两个向左滑移运动排列的分位错(即亚晶界)，和两个排列向右滑移运动的分位错(即亚晶界)。亚晶界的生成减小了原晶界的对称倾侧晶界的位向差，降低了晶界能。在外加应变力的作用下，亚晶界运动与对面晶界分裂出来的相向运动的亚晶界相遇发生湮没消失，或者被对面晶界直接吸收。亚晶界的迁移运动，实质是规则排列的一组分位错同向运动的结果。亚晶界之间相遇可发生湮没，也可以发生相向运动互相穿过而不发生湮没。由图 2(c)可以看到，这时出现了不稳定的亚晶界结构，亚晶界由 4 个位错组排列而成，处于原来的两条晶界之间，即位于晶粒中间，将晶粒分成两部分。该亚晶界上的位错柏氏矢量方向不同，可看成由 4 套柏氏矢量构成。在应变的作用下，位错向 2 个不同方向滑移，亚晶界结构很快瓦解，最后与对面晶界相遇发生湮没。晶界上的全位错发生分解，实质是晶界分解出新的亚晶界结构，即生成新的位错柏氏矢量，使得晶粒倾侧角发生了变化，减少了晶界的位向差，降低了晶界的能量；而生成的亚晶界在应力的作用下是不稳定的，继续迁移运动，与对面滑移过来的倾角相反的亚晶界相遇而发生亚晶界湮没。全位错只能沿晶界攀移，通过位错分解，产生新的位错柏氏矢量方向，才能改变位错的运动方向，启动滑移系，产生位错滑移运动。

3.3 位错反应类型与机理

对于二维三角格子原子排列平面(见图 2(f)和(i))，对称倾侧晶界结构如图 2(a)所示。本文模拟的二维三角格子原子排列方向与 x 轴的夹角 φ=0。文献[28]指出，这时的柏氏矢量只存在 6 个可能的矢量方向，其中独立的柏氏矢量只有 2 个，其他方向的柏氏矢量可由这 2 个方向的基本柏氏矢量组合而成。图 6(a)给出了刃位错多余半原子面的 6 个方向，对应的 6 个可能方向的位错柏氏矢量如下：

$$\boldsymbol{b}_1=a(\frac{1}{2}\boldsymbol{y}+\frac{\sqrt{3}}{2}\boldsymbol{x})；\ \boldsymbol{b}_2=a(-\frac{1}{2}\boldsymbol{y}+\frac{\sqrt{3}}{2}\boldsymbol{x})；\ \boldsymbol{b}_3=-a\boldsymbol{y}；$$

$$\boldsymbol{b}_4=-a(\frac{1}{2}\boldsymbol{y}+\frac{\sqrt{3}}{2}\boldsymbol{x})；\ \boldsymbol{b}_5=a(\frac{1}{2}\boldsymbol{y}-\frac{\sqrt{3}}{2}\boldsymbol{x})；\ \boldsymbol{b}_6=a\boldsymbol{y}。$$

式中：$\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 为单位矢量；a 为原子间距。由图 6 (b)可见，其他 4 个方向的柏氏矢量可以用 2 个基本柏氏

矢量 $\boldsymbol{b}_1$ 和 $\boldsymbol{b}_2$ 组合表示如下：$\boldsymbol{b}_3=\boldsymbol{b}_2-\boldsymbol{b}_1$；$\boldsymbol{b}_4=-\boldsymbol{b}_1$；$\boldsymbol{b}_5=-\boldsymbol{b}_2$；$\boldsymbol{b}_6=\boldsymbol{b}_1-\boldsymbol{b}_2$。

对于由二套刃位错 $\boldsymbol{b}_1$ 和 $\boldsymbol{b}_2$ 构成的小角对称倾侧晶界，即有 $\boldsymbol{b}_1+\boldsymbol{b}_2=d\theta\boldsymbol{n}=\boldsymbol{B}$，其中，$\theta$ 为晶界的倾侧角，$\boldsymbol{b}_1$ 与 $\boldsymbol{b}_2$ 的夹角为 60°，$\boldsymbol{B}$ 可看成由 $\boldsymbol{b}_1$ 和 $\boldsymbol{b}_2$ 配对组成的全位错的柏氏矢量。如果位错不发生反应，则不会产生新方向的位错柏氏矢量。图 7(a)所示为对称倾侧晶界上的全位错放大图，可以看出构成全位错的 2 个单刃位错 $\boldsymbol{b}_1$ 和 $\boldsymbol{b}_2$ 的多余原子面方向分别为 $\boldsymbol{H}_1$ 和 $\boldsymbol{H}_2$，夹角成 60°，与图 7(b)中 HRTEM 照片给出的对称倾侧晶界上的全位错结构对比，两者完全一致。

假设可以忽略应力作用引起的原子排列格子的畸变影响，按照图 6 定义的位错的多余原子面可能的 6 个方向 $\boldsymbol{H}_i$ 和对应的柏氏矢量 $\boldsymbol{b}_i$，则图 8(a)中的全位错 $\boldsymbol{B}_1$ 分解前所包含的 2 个单刃位错的多余半原子面的排列方向分别为 $\boldsymbol{H}_1$ 和 $\boldsymbol{H}_2$，图 8(c)给出了分解后的 2 个新位错组 $\boldsymbol{B}_2$ 和 $\boldsymbol{B}_3$ 所包含的多余半原子面方向分别为 $\boldsymbol{H}_1$ 和 $\boldsymbol{H}_6$，$\boldsymbol{H}_2$ 和 $\boldsymbol{H}_3$。全位错的分解反应式写成：$\boldsymbol{B}_1=\boldsymbol{B}_2+\boldsymbol{B}_3$，即 $\boldsymbol{B}_1=\boldsymbol{b}_1+\boldsymbol{b}_2=\boldsymbol{B}_2+\boldsymbol{B}_3=(\boldsymbol{b}_1+\boldsymbol{b}_6)+(\boldsymbol{b}_2+\boldsymbol{b}_3)$，其中 $\boldsymbol{b}_3$ 和 $\boldsymbol{b}_6$ 是新产生的方向相反的柏氏矢量。所谓全位错分解，就是新产生了一对方向相反的柏氏矢量，例如，$\boldsymbol{b}_3$ 和 $\boldsymbol{b}_6$。分解前的全位错的全柏氏矢量 $\boldsymbol{B}_1$ 与分解后的两个位错组 $\boldsymbol{B}_2$ 和 $\boldsymbol{B}_3$ 的全柏氏矢量之间的夹角为 60°，而分解后的两个位错组 $\boldsymbol{B}_2$ 和 $\boldsymbol{B}_3$ 的全柏氏矢量之间的夹角为 120°。图 9 所示为 2 个位错组合并的反应过程：$\boldsymbol{B}_4+\boldsymbol{B}_5=\boldsymbol{B}_6$，即 $\boldsymbol{B}_4+\boldsymbol{B}_5=(\boldsymbol{b}_3+\boldsymbol{b}_4)+(\boldsymbol{b}_1+\boldsymbol{b}_2)=\boldsymbol{B}_6=\boldsymbol{b}_2+\boldsymbol{b}_3$，其中 $\boldsymbol{b}_1$ 和 $\boldsymbol{b}_4$ 是 2 个原位错组包含的方向相反的一对柏氏矢量，所谓两个位错组合并的反应过程，就是这一对 $\boldsymbol{b}_1$ 和 $\boldsymbol{b}_4$ 方向相反的柏氏矢量相遇发生湮没的过程。合并前 2 个位错组 $\boldsymbol{B}_4$ 和 $\boldsymbol{B}_5$ 的全柏氏矢量之间的夹角

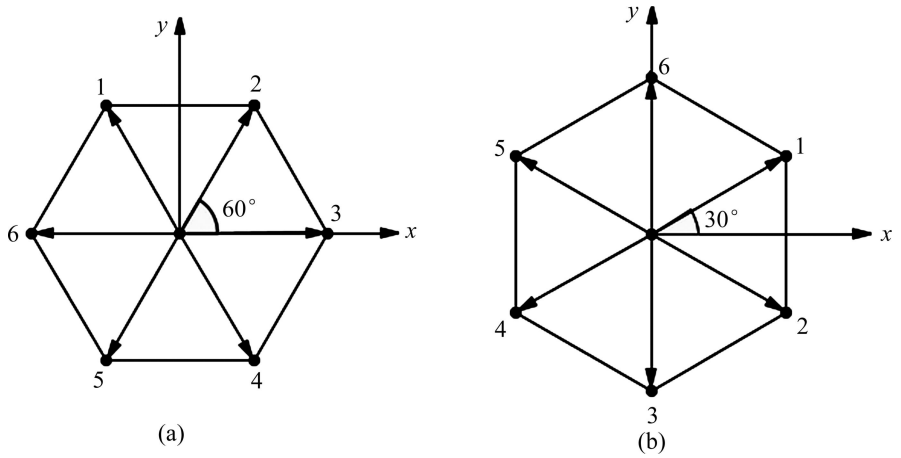

图 6　二维三角格子原子排列平面中刃位错的多余原子面的原子排列方向 $\boldsymbol{H}_i$ 以及与原子排列方向 $\boldsymbol{H}_i$ 对应的柏氏矢量 $\boldsymbol{b}_i$ 的方向

Fig. 6　Atomic arrangement direction $\boldsymbol{H}_i$ of excess atomic plane of edge dislocation in 2D triangle lattice plane(a) and Burgers vector direction $\boldsymbol{b}_i$ of edge dislocation corresponding to atomic arrangement direction $\boldsymbol{H}_i$(b)

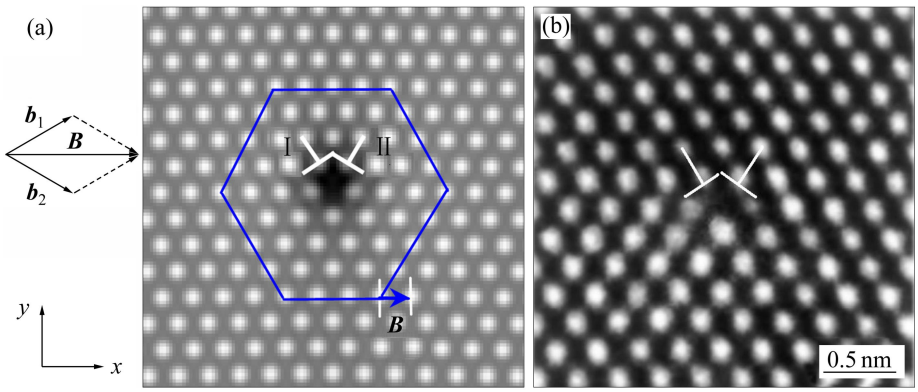

图 7　位错组的 PFC 模拟图与 HRTEM 照片[29]对比图

Fig. 7　Comparison of dislocation structure by simulation with by HRTEM photo[29]: (a) PFC simulation of dislocation structure; (b) HRTEM photo of dislocation structure in (111) plane for Al metal

为 120°，而合并后的全柏氏矢量 $\boldsymbol{B}_6$ 与合并前两个位错组 $\boldsymbol{B}_4$ 和 $\boldsymbol{B}_5$ 的全柏氏矢量之间的夹角为 60°。图 10 所示为两个位错组相遇发生湮没消失的过程。湮没的位错反应式如下：$\boldsymbol{B}_7+\boldsymbol{B}_8=0$，即 $\boldsymbol{B}_7+\boldsymbol{B}_8=(\boldsymbol{b}_2+\boldsymbol{b}_3)+(\boldsymbol{b}_5+\boldsymbol{b}_6)=(\boldsymbol{b}_2+\boldsymbol{b}_5)+(\boldsymbol{b}_3+\boldsymbol{b}_6)=0$，所谓两个位错组湮没的反应过程，就是 $\boldsymbol{b}_2$ 与 $\boldsymbol{b}_5$、$\boldsymbol{b}_3$ 与 $\boldsymbol{b}_6$ 这 2 对方向相反的柏氏矢量发生抵消，即二对刃位错相遇湮没消失。湮没前两个刃位错组 $\boldsymbol{B}_7$ 和 $\boldsymbol{B}_8$ 的全柏氏矢量夹角为 180°，表明 $\boldsymbol{B}_7$ 和 $\boldsymbol{B}_8$ 的全柏氏矢量方向完全相反，相遇后全部抵消。全位错的分解实质是产生了一对新的符号相反的柏氏矢量；分位错在晶界上的湮没或合并实质是分位错与晶界上的全位错形成的一对符号相反的柏氏矢量发生抵消；分位错与分位错在晶粒内部的湮没消失，其实质是 2 个分位错之间的二对符号完全相反的柏氏矢量相互抵消。

与文献[12]情况对比，本模拟中位错运动和相互作用过程分为以下几种情况：在某些情况下不仅可以看到 2 个滑移分位错在晶粒内相遇湮没消失，而且可

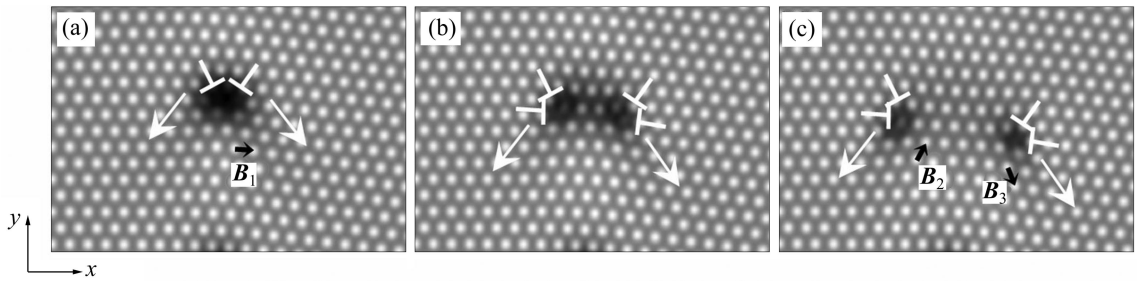

图 8 全位错组分离成两个分位错的过程

Fig. 8 Reaction process of one full dislocation separating to two dislocation pairs (Black arrows represent Burgers vectors of dislocation next to it; white arrows represent moving directions of dislocations pair next to it): (a) ε=0.0825; (b) ε=0.0835; (c) ε=0.0855

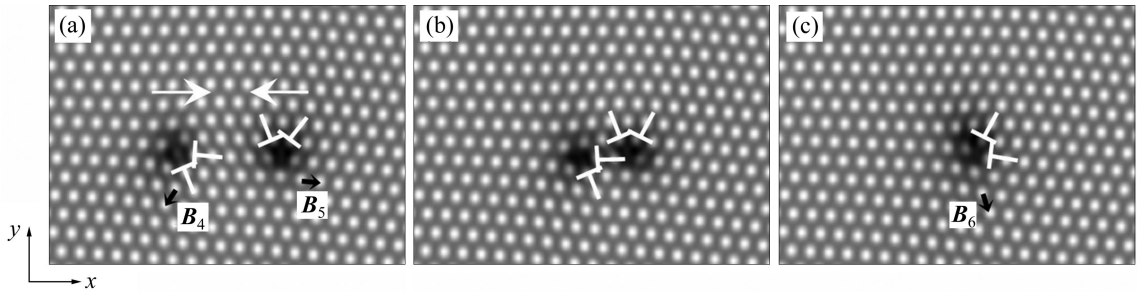

图 9 两个分位错合并成一个位错组的过程

Fig. 9 Reaction process for two dislocation pair mergence (Black arrows represent Burgers vectors of dislocation next to it; white arrows represent moving directions of dislocations pair next to it): (a) ε=0.0915; (b) ε=0.0942; (c) ε=0.0960

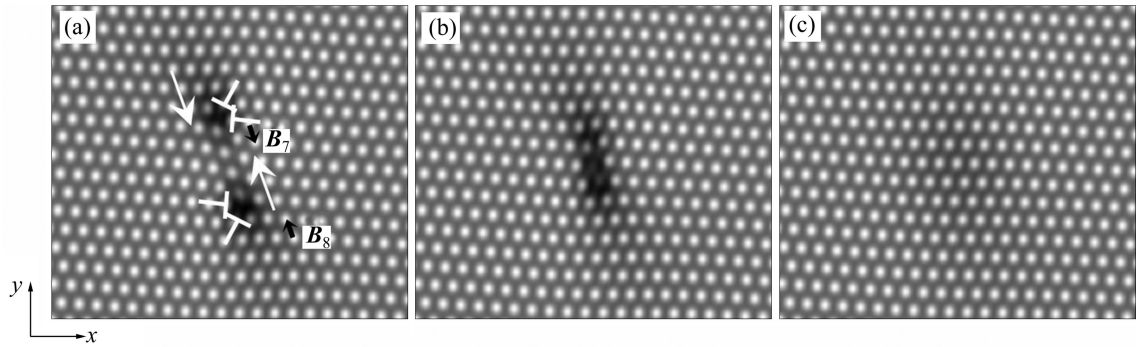

图 10 两个分位错相遇发生湮没消失的过程

Fig. 10 Reaction process for annihilation of two dislocation pairs (Black arrows represent Burgers vectors of dislocation next to it; white arrows represent moving directions of dislocations pair next to it): (a) ε=0.1275; (b) ε=0.1296; (c) ε=0.1354

以观察到在晶粒内相遇发生合并(合二为一)；或者看到其是在晶界上被晶界吸收，即在晶界发生两个位错组的合并，即合二为一。这些情况都可在本模拟中观察到，而在文献[12]的位向差为 8.0°的晶界位错湮没过程中，并没有看到位错相遇发生合并或吸收的位错反应。可见，晶界位错湮没过程对初始位向差较为敏感，本模拟中晶界位向差与文献[12]的晶界位向差尽管相差很小，但出现的湮没特征阶段则有较大的差别。这些情况在实验中不易观察到，而在本计算机模拟实验中则容易观察到，这也体现出计算模拟实验的优势。

4　结论

1) 在二维三角原子晶格排列中，对称倾侧小角度晶界由配对的刃位错等间距排列而成，实际上是由独立的二套柏氏矢量构成，不存在独立的单个刃位错。晶界区域特别是晶界上的刃位错中心区域具有较高的能量密度，而晶粒内部区域则具有较低的能量密度。在应力作用下，刃位错以位错对的形式运动，位错发生反应也是成对进行，不存在独立的单个刃位错的个体运动。

2) 在外应力作用下，晶界上的全位错作攀移运动，当应变达到临界值时，全位错分解为 2 个方向滑移运动的分位错，这一过程可以将晶界看成是位错发射源。分位错可以在晶粒内部与相向运动而来的另一分位错相遇而发生湮没，也可以滑移运动到对面的晶界，与晶界上的全位错合并。

3) 晶界全位错攀移过程积累的能量越高，其分解时释放的能量就越迅速。全位错分解时，其能量释放值最大；位错在晶界湮没即晶界吸收分位错的情况下，能量释放次之；分位错在晶粒内相遇的消失过程中能量释放值最小。

4) 全位错的分解实质是产生了一对新的符号相反的柏氏矢量；分位错在晶界上的湮没或合并的实质是分位错与晶界上的全位错形成的一对符号相反的柏氏矢量发生抵消；分位错与分位错在晶粒内部的湮没消失，其实质是 2 个分位错之间的 2 对符号完全相反的位错柏氏矢量完全抵消。

REFERENCES

[1] 徐恒均, 刘国勋. 材料科学基础[M]. 北京: 北京工业出版社, 2001: 265−279.
XU Heng-jun, LIU Guo-xun. Fundamentals of materials science[M]. Beijing: Beijing Industry Press, 2001: 265−279.

[2] 胡赓祥, 蔡　珣, 等. 材料科学基础[M]. 3 版. 上海: 上海交通大学出版社, 2010: 99−129.
HU Geng-xiang, CAI Xun. Fundamentals of materials science[M]. 3rd ed. Shanghai: Shanghai Jiao Tong University Press, 2010: 99−129.

[3] BOBYLEV S V, GUTKIN M Y, OVIDKO I A. Decay of tilt boundaries in deformed nanocrystalline materials[J]. J Phys D, 2004, 37(2): 269−272.

[4] OVIDKO I A, SKIBA N V. Enhanced dislocation emission from grain boundaries in nanocrystalline materials[J]. Scripta Mater, 2012, 67(26): 264515−12.

[5] GUKKIN M Y, OVIDKO I A. Transformations of low-angle tilt boundaries in high-T_c superconductors[J]. Phys Rev B, 2001, 63: 064515.

[6] GUKKIN M Y, OVIDKO I A. Transformations of grain boundaries in deformed nanocrystalline materials[J]. Acta Mater, 2004, 52: 3793−3799.

[7] HAYAKAWA M, YAMAGUCHI K, KIMURA M. Visualization of subgrain structure for a ferritic 12Cr-2W steel using backscattered scanning electron microscopy[J]. Materials Letters, 2004, 58: 2565−2568.

[8] ELDER K R, KATAKOWSKI M, HAATAJA M, GRANT M. Modeling elasticity in crystal growth[J]. Physical Review Letters, 2002, 88(24): 245701−4.

[9] ELDER K R, GRANT M. Modeling elastic and plastic deformations in nonequilibrium processing using phase field crystals[J]. Physical Review E, 2004, 70(5): 51605.

[10] STEFANOVIC P, HAATAJA M, PROVATAS N. Phase field crystal study of deformation and plasticity in nanocrystalline materials[J]. Physical Review E, 2009, 80(4): 046107.

[11] BERRY J, GRANT M, ELDER K R. Diffusive atomistic dynamics of edge dislocations in two dimensions[J]. Physical Review E, 2006, 73(3): 31609−12.

[12] 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[J]. 金属学报, 2011, 47: 1301−1306.
YANG Tao, CHEN Zheng, DONG Wei-ping. Phase field crystal simulation of stress–induced annihilation of sub-grain boundary with double-array dislocation[J]. Acta Metallurgica Sinica, 2011, 47: 1301−1306.

[13] 任　秀, 王锦程, 杨玉娟, 杨根仓. 纯物质晶界结构及运动的晶体相场法模拟[J]. 物理学报, 2010, 59(5): 3595−3600.
REN Xiu, WANG Jin-cheng, YANG Yu-juan, YANG Gen-cang, Simulation of the structure and motion of grain boundary in pure substances by phase field crystal model[J]. Acta Physica Sinica, 2010, 59(5): 3595−3600.

[14] 徐　瑞, 荆天辅, 徐庭栋. 材料热力学与动力学[M]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学出版社, 2003: 164−177.
XU Rui, JING Tian-fu, XU Ting-dong. Thermodynamics and kinetics of materials[M]. Harerbin: Harerbin Industry University

Press, 2003: 164−177.

[15] 潘诗琰, 朱鸣芳. 双边扩散枝晶生长的定量相场模型[J]. 物理学报, 2012, 61(22): 228102.
PAN Shi-yan, ZHU Ming-fang. Quantitative phase-field model for dendritic growth with two-sided diffusion[J]. Acta Physica Sinica, 2012, 61(22): 228102.

[16] 陈 云, 康秀红, 李殿中. 自由枝晶生长相场模型的自适应有限元法模拟[J]. 物理学报, 2009, 58(1): 390−398.
CHEN Yun, KANG Xiu-hong, LI Dian-zhong. Phase-field modeling of free dendritic growth with adaptive finite element method[J]. Acta Physica Sinica, 2009, 58(1): 390−398.

[17] 高英俊, 罗志荣, 黄礼琳, 胡项英. 变形合金的亚晶组织演化的相场模型[J]. 金属学报, 2012, 48(10): 1215−1222.
GAO Ying-jun, LUO Zhi-rong, HUANG Li-lin, HU Xiang-ying. Phase field model for microstructure evolution of subgrain in deformation alloy[J]. Acta Metallurgica Sinica, 2012, 48(10): 1215−1222.

[18] ELDER K R, HUANG Z, PROVATAS N. Amplitude expansion of the binary phase-field-crystal model[J]. Physical Review E, 2010, 81(1): 11602.

[19] YU Y M, BACKOFEN R, VOIGT A. Morphological instability of heteroepitaxial growth on vicinal substrates: A phase-field crystal study[J]. Journal of Crystal Growth, 2011, 318(1): 18−22.

[20] ELDER K R, ROSSI G, KANERVA P, SANCHES F, YING S C, GRANATO E, ACHIM C V, ALA-NISSILA T. Patterning of heteroepitaxial overlayers from nano to micron scales[J]. Physical Review Letters, 2012, 108(22): 226102.

[21] 高英俊, 罗志荣, 黄创高, 卢强华, 林 葵, 晶体相场方法研究二维六角相向正方相结构转变[J]. 物理学报, 2013, 62(5): 050507−8.
GAO Ying-jun, LUO Zhi-rong, HUANG Chuang-gao, LU Qiang-hua, LIN Kui. Phase-field-crystal modeling for two-dimensional transformation from hexagonal to square structure[J]. Acta Physica Sinica, 2013, 62(5): 050507−8.

[22] GREENWOOD M, ROTTLER J, PROVATAS N. Phase field crystal methodology for modeling of structural transformations[J]. Phys Rev B, 2011, 83(3): 031601.

[23] BERRY J, ELDER K R, GRANT M. Melting at dislocations and grain boundaries: A phase field crystal study[J]. Physical Review B, 2008, 77(22): 224114.

[24] 高英俊, 罗志荣, 黄礼琳, 林 葵. 韧性材料的微裂纹扩展和连通的晶体相场模拟[J]. 中国有色金属学报, 2013, 23(7): 1892−1899.
GAO Ying-jun, LUO Zhi-rong, HUANG Li-lin, LIN Kui. Phase-field-crystal modeling for microcrack propagation and connecting of ductile material[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2013, 23(7): 1892−1899.

[25] CHEN L Q, SHEN J. Applications of semi-implicit Fourier-spectral method to phase field equations[J]. Computer Physics Communications, 1998, 108(2): 147−158.

[26] HIROUCHI T, TAKAKI T, TOMITA Y. Development of numerical scheme for phase field crystal deformation simulation[J]. Computational Materials Science, 2009, 44(4): 1192−1197.

[27] 高英俊, 罗志荣, 胡项英, 黄创高. 相场方法模拟 AZ31 镁合金的静态再结晶过程[J]. 金属学报, 2010, 46(10): 1161−1172.
GAO Ying-jun, LUO Zhi-rong, HU Xiang-ying, HUANG Chuang-gao. Phase field simulation of static recrystallization for AZ31 Mg alloy[J]. Acta Metallurgica Sinica, 2010, 46(10): 1161−1172.

[28] WU K A, VOORHEES P W. Phase field crystal simulations of nanocrystalline grain growth in two dimensions[J]. Acta Mater, 2012, 60: 407−419.

[29] MILLS M J, DAW M S, FOILES S M. High-resolution transmission electron microscopy studies of dislocation cores in metals and intermetallic compounds[J]. Ultramicroscopy, 1994, 56(1): 79−93.

[30] 高英俊, 袁龙乐, 刘 瑶, 卢强华, 黄创高. 不同温度的晶界位错湮没过程的晶体相场模拟[J]. 广西科学, 2014, 21(3): 203−208.
GAO Ying-jun, YUAN Long-le, LIU Yao, LU Qiang-hua, HUANG Chuang-gao. Phase field crystal simulation of dislocation annihilation at different temperature[J]. Guangxi Science, 2014, 21(3): 203−208.

(编辑 龙怀中)