

立方晶体相界面位错的计算机模拟*

陈会强 杨志刚

(清华大学材料科学与工程系, 北京 100084)

摘要 介绍描述了 O 点阵模型模拟位错结构的基本原理和基本方法. 以 Bollmann 提出的 O 点阵理论为基础, 采用科学计算软件 matlab 模拟了 2 个 bcc(或 fcc) 晶体相界面的位错网络, 尝试了单个至多个 O 胞的模拟, 成功模拟出了具有 cube-on-cube 取向关系的 2 个 bcc 晶体任意取向相界面上的位错网络.

关键词 位错, 模拟, 界面, bcc 晶体

中图法分类号 TB115

文献标识码 A

文章编号 0412-1961(2007)07-0710-03

COMPUTER-BASED SIMULATION OF DISLOCATIONS ON INTERFACES OF CUBIC CRYSTALS

CHEN Huiqiang, Yang Zhigang

Department of Materials Science and Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084

Correspondent: YANG Zhigang, professor, Tel: (010)62795031, Fax: (010)62771160,

E-mail: zgyang@tsinghua.edu.cn

Supported by Program for New Century Excellent Talents in University

Manuscript received 2006-08-01, in revised form 2007-02-02

ABSTRACT This paper presents the basic principles and methods of Simulating Dislocations Using O-lattice. Based on Bollmann's O-lattice theory, the science calculation software, matlab, was used to establish a dislocation network on the interface of two bcc (or fcc) crystals. A single O-cell were and multiple O-cells simulated firstly, and then the dislocation configuration on the interface with an arbitrary crystal orientation for bcc crystals was simulated.

KEY WORDS dislocation, simulation, interface, bcc crystal

位错是晶体中的线性缺陷, 材料在凝固、固态相变、外延生长等过程中都可能形成位错. 同时, 实验证实很多相界面具有位错结构^[1-5]. 这些界面位错是由于晶格错配造成的, 因此可以通过几何错配的计算来定量描述位错结构. 位错的概念是 1934 年提出的, 50 年代以后才从实验中观察到位错. 直到现在, 人们也只能观测到有限的几个简单位错相界面上形成的位错.

由于理论及实验上的困难, 已有的工作往往是计算一维失配相界的位错结构, 或者是将相界存在的一维位错(位错网)简化为一组位错线的结构来处理^[6-9], 而这种做法忽略了界面上多组位错的相互作用, 与实际情况的不能完全相符合. 1967 年, Bollmann 在研究了晶界两边晶粒阵点之间的匹配之后提出了 O 点阵的概念, 用几何学的方法来描述互相穿插点阵中阵点的最近邻关系^[10,11]. 1989 年, Spanos^[12] 把这一理论应用于相界面上位错网

的研究, 以便模拟出任何取向界面的位错结构模型, 但仅给出了 fcc 晶体两相界面上的位错结构, 本文则重点把这种方法推广到两个 bcc 晶体的相界面上.

1 O 点阵模型模拟位错结构的基本方法

O 点阵理论是用几何方法描述相互交接的两个理想晶体点阵 I 及 II, 用坐标找出两个点阵的对应关系, 由此建立起 O 点阵^[7-9,13,14]. 以点阵 I 为基本坐标系, 选择其中任意一个阵点作为原点, 进行齐次线性非退化变化 A 时, 就可以得到点阵 II. 点阵 I 的矢量用 $\vec{x}^{(1L)}$ 表示时, 则点阵 II 的矢量 $\vec{x}^{(2L)}$ 如下式:

$$\vec{x}^{(2L)} = A\vec{x}^{(1L)}$$

这里的 A 变换不包括平移, 只是旋转, 非退化是可逆的, 即 $|A| \neq 0$, 允许 A^{-1} 存在, 即 $\vec{x}^{(1L)} = A^{-1}\vec{x}^{(2L)}$. 由此可见, 点阵 I 与点阵 II 之间存在着阵点的一一对应关系. 这样就可以通过点阵 I 上离原点最近的一个点, 经过 A 变换得到点阵 II. 如此循环, 将这些原点组成的点阵, 成为 O 点阵.

* 收到初稿日期: 2006-08-01, 收到修改稿日期: 2007-02-02

作者简介: 陈会强, 男, 1984 年生

简单的说，O 点阵的结点是这样的点：在点上各晶格的近邻关系是相同的，只差一个转角。O 点阵的结点不一定是原子占据的点。具体来说，O 点阵结点周围的近邻关系是相同的，只差一个旋转角。而这些结点都可以作为转换的原点。因此，O 点阵就是所有可能的原点组成的点阵，从该原点出发，使一个点阵经过所有可能的原点组成的点阵，从该原点出发，使一个点阵经过非退化均匀的线性转换可产生另一点阵。

Bollmann 提出的模型中设想让界面切过 O 点阵，界面与所交的 O 胞壁的截线是界面上错配度最严重的区域，被认为是最可能的位错位置。而位错结构的周期性是自然形成的两相间择优界面结构的重要特征，可以利用 O 点阵中的周期性 O 胞结构的截面，模拟实际界面的周期性结构。这也是计算机模拟相变界面位错的基本理论基础。计算机模拟过程中，首先画出 O 胞模型图，对于给定的任意位向界面，求出该界面与 O 胞外表面的交线——即为该界面上的位错线。

本文选择了以 Fortran 语言为基础的科学计算软件 matlab，利用 matlab 强大的计算和图形功能成功地完成了相界面位错（两相为 bcc 或为 fcc 晶体，保持 cube-on-cube 关系）的模拟。

2 模拟结果

2.1 单个模型的尝试

首先对单个 O 胞进行模拟。以 bcc 为例，两个晶格常数分别为 a_1 和 a_2 的 bcc 晶体按 cube-on-cube 关系组成的相界面上，首先构建出其 O 胞结构图（图 1a），O 点阵的点阵常数为 $a_1 a_2 / (a_1 - a_2)$ 。给出 (001) 界面取向，可求出该界面与 O 胞壁的交线——即为该晶面上的位错线（图 1b 中的虚线所示）。对于 bcc 晶体两相的 (111) 和 (345) 界面，其位错模拟结果分别见图 2 和图 3。对于 fcc 晶体相界面也可以用同样的方法得出其位错网，但注意其 O 胞与 bcc 的 O 胞不同，如图 4 所示；为了更为清晰地观察位错网络，本文还在图中右侧单独给出了位错

网络的全貌，并且在右图中标出了各段位错线的 Burgers 矢量。

2.2 64 个 O 胞模型体系的模拟结果

在一个 O 胞模拟成功之后，为了更加直观地表现位错网络的连续性，考虑用 64 个 $(4 \times 4 \times 4)$ O 胞进行模拟。选定晶体类型 (bcc, fcc) 之后，给定任意一晶体的晶面指数，就可以由程序给出这个晶面上的位错网络，以 bcc 晶体的模拟为例，图 5 示出其晶胞模型。

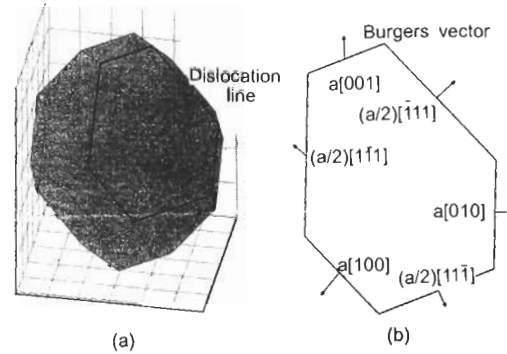


图 2 2 个 bcc 晶体 (111) 界面的位错线及 Burgers 矢量
Fig.2 Simulated dislocation line (a) and Burgers vectors (b) on (111) plane of crystals two bcc crystals

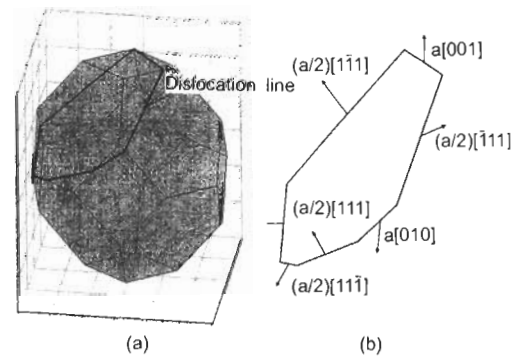


图 3 2 个 bcc 晶体 (345) 面的位错线及 Burgers 矢量
Fig.3 Simulated dislocation line (a) and Burgers vectors (b) on (345) plane of two bcc crystals

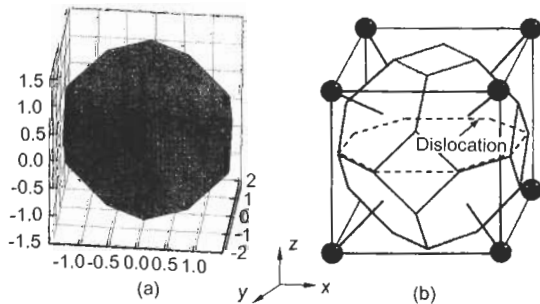


图 1 bcc 晶体 O 胞图及与 001 界面相交形成的 (001) 界面位错

Fig.1 The theoretical O-cell of bcc (a) and the dislocation (dashed lines) on (001) interface (b)

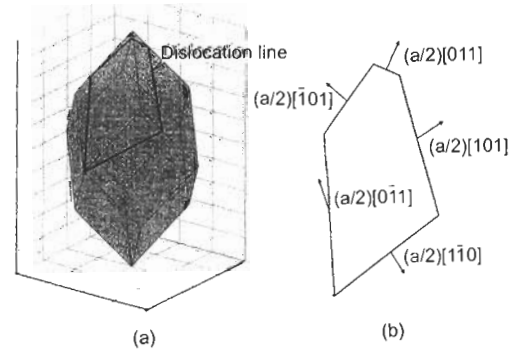


图 4 2 个 fcc 晶体 (345) 面的位错线及 Burgers 矢量
Fig.4 Simulated dislocation line (a) and Burgers vectors (b) on (345) plane of two fcc crystals

图6示出了(001), (110)与(111)3个低指数相界面上模拟的位错网络及相应的Burgers矢量.

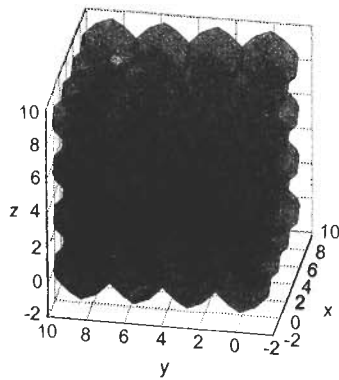


图5 64个空间连续O胞的bcc模型
Fig.5 bcc model formed from 64 O-cells

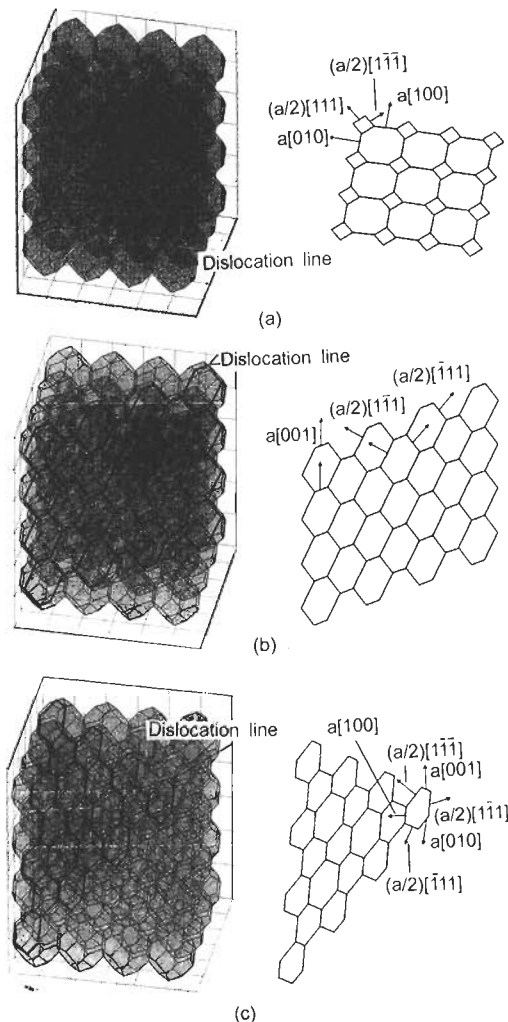


图6 2个bcc晶体的(111)相界面的位错模拟
Fig.6 Simulated dislocation nets (thick lines) and Burgers vectors on interfaces of (001) (a), (110) (b) and (111) (c) for two bcc crystal with 64 O-cells model

3 结论

通过以上部分模拟结果与已有实验图片及数据的对比,发现模拟结果与文献[4,5]实验结果相符.因此,用计算机模拟相界面上的位错网是可行的.在实验无法勘察位错外貌和结构,或者研究自然条件下很难出现位错的界面(例如研究一些高能界面上的位错)时,用计算机模拟位错可以为位错研究提供依据.在本工作中,运行程序后,任意输入一个界面的晶面指数就可以由程序画出其上的位错网络,使得两相界面上的位错计算和结构研究更加方便.

参考文献

- [1] Zhang W Z. *Acta Metall Sin*, 2002; 38: 785 (张文征. 金属学报, 2002; 38: 785)
- [2] Ye H Q. *Structures and Characteristics of Interfaces in Materials*. Beijing: Science Press, 1999 (叶恒强. 材料界面结构与特性. 北京: 科学出版社, 1999)
- [3] Sutton A P, Balluffi R W. *Interfaces in Crystalline Materials*. Oxford: Oxford University Press, 1995
- [4] Smith D A, Shiflet G. *Mater Sci Eng*, 1987; 86: 67
- [5] How J M. *Interfaces in Materials*. New York: John Wiley and Sons, 1997
- [6] Porter D A, Easterling K E. *Phase Transformations in Metals and Alloys*. New York: Chapman & Hall, 1992
- [7] Feng D. *Metal Physics*. Vol.I, Beijing: Science Press, 1987: 375 (冯端. 金属物理学. 第一卷, 北京: 科学出版社, 1987: 375)
- [8] Song Y J. *Grian Boundaries and Strength of Metals*, Xi'an: Xi'an Jiaotong University Press, 1987 (宋余九. 金属的晶界与强度. 西安: 西安交通大学出版社, 1987)
- [9] Yu Y N. *Principles of Physical Metallurgy*. Beijing: Metallurgical Industry Press, 2000 (余永宁. 金属学原理. 北京: 冶金工业出版社, 2000)
- [10] Bollmann W. *Crystal Defects and Crystalline Interfaces*. Berlin: Springer, 1970
- [11] Bollmann W. *Crystal Lattices, Interfaces, Matrices*. Geneva: Bollmann, 1982
- [12] Spanos G. *PhD Thesis*, Carnegie-Mellon University, Pittsburgh, PA, 1989
- [13] Lin D L. In: Li H D, Xiao J M eds., *Surface and Interfaces in Materials*, Beijing: Tsinghua University Press, 1990: 165 (林栋梁. 见: 李恒德, 肖纪美主编, 材料表面与界面, 北京: 清华大学出版社, 1990: 165)
- [14] LUO C P, Liu Z Y. In: Li H D, Xiao J M eds., *Surface and Interfaces in Materials*, Beijing: Tsinghua University Press, 1990: 201 (罗承萍, 刘正义. 见: 李恒德, 肖纪美主编, 材料表面与界面, 北京: 清华大学出版社, 1990: 201)
- [15] Laird C, Aaronson H I. *Acta Metall*, 1967; 15: 73
- [16] Stephens D E, Purdy G R. *Acta Metall*, 1975; 23: 1343