

体心立方金属钽 II 型裂纹尖端缺陷萌生的多尺度分析*

陆怀宝 黎军硕 倪玉山[†] 梅继法 王洪生

(复旦大学力学与工程科学系, 上海 200433)

(2010 年 10 月 24 日收到; 2010 年 12 月 6 日收到修改稿)

本文采用多尺度准连续介质法 (quasi-continuum method, QC) 模拟体心立方 (body-centered-cubic, bcc) 金属钽 (Ta) II 型裂纹尖端位错的形核与发射过程, 获得位错发射位置与应力强度因子关系曲线, 分析裂纹尖端缺陷萌生过程, 研究全位错分解以及扩展位错形成机理. 位错活动在不同阶段表现出不一致的特征, 新位错的发射对于位错运动具有促进作用. 研究表明, 裂纹扩展初始阶段首先萌生点缺陷, 点缺陷随着加载强度增加会萌生新的点缺陷, 点缺陷最终运动到边界, 导致 II 型断裂破坏. 在全位错发射之前有不全位错的形核与发射表明全位错的分解分步进行, 从势能曲线上来看, 也就是两个极小值点的形成机理不同.

关键词: 多尺度, 准连续介质法, II 型裂纹, 扩展位错

PACS: 61.46.Hk, 61.72.Lk, 62.20.F-, 62.20.mt

1. 引言

体心立方 (bcc) 金属钽 (Ta) 是一种耐高温金属, 被广泛应用在耐高温不锈钢、钽质电容、电子设备、化工以及医疗等相关领域^[1, 2]. 研究金属材料 Ta 的断裂机理, 对于改进工程材料, 增加其使用寿命具有重要意义. 自从 Gleiter^[3] 提出纳米材料的概念并成功地制备纳米粉末以来, 对纳米材料及其结构的研究逐渐成为多学科领域的前沿课题; 对于金属材料断裂的研究, 已不再局限于宏观领域, 逐渐深入到纳米这一微观领域. Miller 等^[4, 5] 提出了纳米尺度韧脆断裂准则, 研究了 Ni 晶体裂纹扩展过程中的晶界迁移及晶界上位错发射现象; Shenoy 等^[6] 模拟了位错与晶界及裂纹与晶界之间的交互作用过程; Hai 和 Tadmor^[7] 研究了不同加载模式和方向下单晶 Al 裂纹尖端扩展过程; Tadmor^[8] 在 Rice 位错形核框架^[9] 基础上提出了形变孪晶的 Peierls 准则; Shao 等^[10] 研究了多晶体 Ni 裂纹尖端变形孪晶的形成与影响因素. 但是, 这些研究大多集中在面心立方 (fcc) 金属, 而对 bcc 金属的断裂问题仍需进行更深入的探讨. 尽管 Tang 等^[11] 模拟了 bcc 金属 Mo 的 II 型裂纹扩展过程, 并观察到了三个不全位

错, 但并没有分析全位错的形成与分解过程. 因此, bcc 金属裂纹尖端如何扩展, 特别是 II 型裂纹的扩展机理, 需要更深入仔细的研究和分析.

分子动力学 (MD) 方法是目前常用的一种分子仿真方法, 使用该方法能在原子尺度上观察位错的形核与发射^[12], 以及研究裂纹尖端初始扩展时原子间的相互作用^[13]. 然而, 由于 MD 方法以每一个原子作为计算节点, 导致其计算尺度受限, 并不可避免的引起边界效应. 相比而言, 多尺度方法在刻画纳米尺度材料的变形行为时更加灵活和有效. 准连续介质法 (quasi-continuum method, QC) 是目前较为广泛应用的多尺度方法之一, 它在模拟原子系统时, 耦合了原子尺度和连续介质尺度, 能够模拟较大尺度纳米材料的缺陷行为^[4-8, 14-16]. 本文采用 QC 方法对 bcc 纳米金属 Ta 的 II 型裂纹尖端扩展过程进行多尺度模拟, 研究位错发射位置与应力强度因子之间的关系, 探究 bcc 金属裂纹尖端缺陷萌生机理, 分析扩展位错在裂纹扩展过程中的作用.

2. 多尺度计算模型

QC 方法是由 Tadmor^[17] 在 1996 年提出的一种

* 国家自然科学基金 (批准号: 10576010) 资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: niyushan@fudan.edu.cn

多尺度数值计算方法,主要用于大规模原子系统的模拟. 该方法耦合了连续介质尺度和原子尺度,在变形梯度较小的区域选取代表性原子 (representative atoms) 作为计算节点,其他非代表性原子的力学量是代表性原子力学量的函数;在变形梯度大的区域保留原始原子密度,选取每个原子作为计算节点. 对于一给定的代表性原子,通过定义截断半径 r_{cut} ,QC 自动比较代表性原子截断半径范围内的单元的变形梯度. r_{cut} 一般经验地选取为两到三倍的原子势截断半径. 判定准则如下:

$$\max_{a,b;k} |\lambda_k^a - \lambda_k^b| < \varepsilon, \quad (1)$$

其中 λ_k^a 是单元 α 右伸长张量 $U_a = \sqrt{F_a^T F_a}$ 的第 k 个特征值,上标 a 和 b 为代表原子截断半径 r_{cut} 之内的所有原子, ε 为根据经验设定的参数,本文模拟中 ε 取为 0.15. 满足以上不等式的代表原子就是局部代表原子,反之则是非局部代表原子. 取定代表性原子以及确定局部和非局部后,系统的能量以代表性原子的位移为参数;按能量最小化原理求出代表性原子的位移,通过插值求出所有原子的位移. QC 代表性原子的选择使得既能有效模拟原子系统的运动,而又不必计算每个原子,提高了计算规模和效率. 为了进一步提高计算的精确度, QC 方法允许网格自适应^[18, 19],适当的网格自适应过程增加了变形梯度大的区域的节点数,保证了计算精度.

为了研究 bcc 金属 Ta II 型裂纹尖端扩展过程缺陷萌生机理,本文对其进行多尺度数值模拟. II 型裂纹多尺度计算模型及加载方式如图 1 所示,模型沿 x 和 y 方向的尺寸分别为 200 nm 和 200 nm,沿 z 方向采用周期性边界条件,该多尺度计算模型尺寸比分子动力学模型大一个数量级. 图 1 中间的放大区域为裂纹尖端的局部放大效果图,其显示了裂纹尖端附近的代表性原子的选择和裂纹尖端的形貌. 为了便于与断裂力学中理想尖端裂纹的弹性场进行比较,裂纹的最尖端仅被抽掉了一个原子层厚度. 边界条件施加在远离裂纹尖端的区域(如图 1 中两个 F 区),按弹性理论施加位移条件,如下式所示:

$$u_x = \frac{K_{\parallel}}{4\mu} \sqrt{\frac{r}{2\pi}} \left[(9 - 8\nu) \sin \frac{\theta}{2} + \sin \frac{3\theta}{2} \right], \quad (2)$$

$$u_y = -\frac{K_{\parallel}}{4\mu} \sqrt{\frac{r}{2\pi}} \left[(3 - 8\nu) \cos \frac{\theta}{2} + \cos \frac{3\theta}{2} \right], \quad (3)$$

其中, u_x 和 u_y 分别为 x 和 y 方向的位移, K_{\parallel} 为应力强度因子, μ 为剪切模量, ν 为材料的泊松比, (r, θ)

为极坐标. 通过控制应力强度因子 K_{\parallel} 使 F 区产生位移,每加载一步应力强度因子增加 0.005. 每次加载后,执行一次系统能量最小化,以求得每个代表性原子的平衡位置.

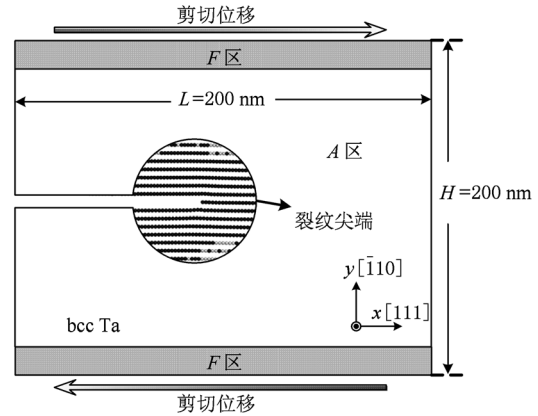


图 1 bcc 金属 Ta II 型裂纹扩展模型及加载示意图

晶向选择分别为 $x[111], y[\bar{1}10], z[\bar{1}\bar{1}2]$, 选择该晶向是因为 $[111]$ 是 bcc 晶体的滑移方向, $\{110\}$ 是最密排面,也是常见的滑移面. $(1\bar{1}0)$ 滑移面上一个全位错的分解过程,如图 2 所示,顶点和中心处的两个 A 原子处于同一状态,虚线箭头代表的是 $1/2[111]$ 全位错,原子从 A 到下一个 A 的全位错分解过程由 $A \rightarrow A' \rightarrow A'' \rightarrow A$ 几个步骤组成,如图中实线矢量所指.

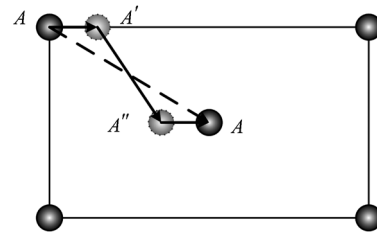


图 2 bcc 晶体全位错的分解

全位错分解表达式为

$$\frac{a}{2} [111] \rightarrow \frac{a}{8} [110] + \frac{a}{4} [112] + \frac{a}{8} [110]. \quad (4)$$

本文基于嵌入原子势 (embedded-atom method, EAM)^[20] 对原子系统进行描述,金属 Ta 原子间的作用势采用 Li 等人^[21] 提出的 EAM 原子势. 采用 QC 方法结合金属 Ta 的 EAM 原子势计算获得的材料参数以及实验结果如表 1 所示,由表可知,多尺度计算

结果与实验结果非常符合^[22].

表 1 基于 EAM 原子势计算和实验获得的 Ta 材料参数

Ta	$a/\text{\AA}$	C_{11}/GPa	C_{12}/GPa	C_{44}/GPa
QC	3.3	247.4	143.5	86.6
实验	3.3	266.3	158.2	87.4

3. 模拟结果与讨论

3.1. 位错发射位置与应力强度因子关系

本文对 bcc 金属 Ta 的 II 型裂纹进行了多尺度模拟, 获得了三条位错发射位置与应力强度因子关系曲线, 如图 3 所示. 本文所有的全位错位置以靠近裂纹尖端的分位错的位置计算. 由图 3 可知, 随着应力强度因子的增加, 裂纹尖端经历了多次位错的形核与发射, 在不同阶段, 位错活动表现出不同的特征.

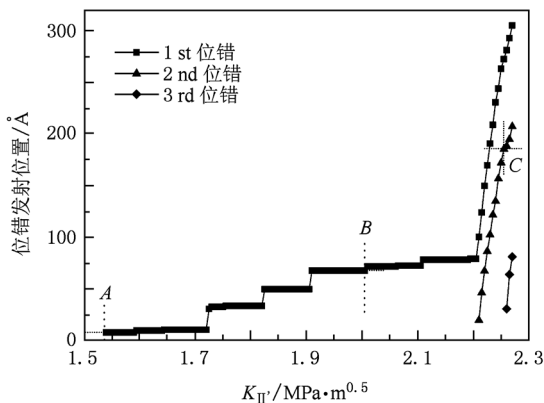


图 3 位错发射位置与应力强度因子关系曲线

全位错在 Peach-Koehler 力的驱动下克服位错映像力 (Image force) 的阻碍作用, 沿着滑移方向开动堆垛层错面向前运动. 当驱动力与阻碍力平衡时, 位错处于静止状态, 随着应力强度因子 K_{II} 的增加, Peach-Koehler 力增加, 再次驱动位错向前运动. 随着应力强度因子 K_{II} 的增加, 裂纹尖端经历长时间的弹性变形, 势能逐渐增加, 当达到发射不全位错的能量势垒时 (应力强度因子 K_{II} 达到 1.54, 图 3 点 A), 第一次发射不全位错 $a/8[110]$, 不全位错的运动相当缓慢. 当 $K_{II} = 1.725$ 时, 第一个全位错发射, 位错初始平衡在距裂纹尖端 30.88 Å 的位置. 在全位错发射后, Peach-Koehler 力与位错映像力以及界面镜像力基本平衡, 位错在滑移面内处于平衡

状态, 位错成核使裂纹尖端局部应力强度因子降低. 之后, 尽管加载强度增大, 位错却从初始平衡位置缓慢地向前运动. 当 K_{II} 增加到 1.825 时, Peach-Koehler 力在竞争中再次占据优势, 推动位错向前运动到 49.85 Å 的位置. 再次平衡后, 位错再次经历缓慢运动; 当 $K_{II} = 1.91$ 时, 曲线连续性中断, 突跳至 67.92 Å; 直到 $K_{II} = 2.065$ 时, 再次发射不全位错 (图 3 中点 B), 不全位错的发射说明裂纹尖端局部应力强度因子已达到发射不全位错的临界值.

当 K_{II} 达到 2.21 时发射第二个全位错, 第一个全位错产生的应力场显然对第二个全位错有阻碍作用, 全位错的初始平衡位置降低为 19.85 Å (第一个全位错为 30.88 Å). 第二个全位错发射之后, 极大地促进了第一个位错向前运动, 同时第二个位错也以极快地速度向前运动, 从图 3 可知, 应力强度因子只增加了 0.05, 却推动第一个位错向前运动了 195.29 Å, 第二个全位错向前运动了 198.97 Å; 而在第二个位错发射之前, 位错平衡位置与应力强度因子关系曲线则经历了多次间断式的突跳上升. 当 K_{II} 达到 2.255 时第三次不全位错成核 (图 3 中点 C), 不全位错的成核使裂纹尖端缺陷程度增加.

在两个全位错极快地向前运动地同时, 当 K_{II} 达到 2.26 时, 发射了第三个全位错. 在前两个位错的综合作用下, 第三个全位错的平衡位置增加至 30.89 Å, 与第一个全位错的平衡位置相当. 此时, 第一个全位错已经运动到距离裂纹尖端 279.62 Å 的位置, 第二个全位错已经运动到距离裂纹尖端 186.68 Å 的位置. 正是由于多尺度 QC 方法可以模拟较大尺度的模型, 所以才能观察到三个位错的运动以及相互影响.

由分析可知, 位错运动时, 在某些点会突跳式的向前发展; 位错的发射, 对已发射位错的运动具有促进作用. 对于 bcc 金属, 在全位错发射之前, 在裂纹尖端有不全位错的成核. 由此说明, 体心立方 {110} 面滑移导致的全位错分解是分步进行的, 三个不全位错的柏格斯矢量的和构成了全位错的柏格斯矢量.

3.2. II 型裂纹尖端缺陷萌生过程分析

多尺度方法模拟尺度可达到几百纳米, 在这样的尺度下研究纳米材料的断裂过程更具有实际意义. 对于 bcc 金属 Ta 的 II 型断裂, 本文模拟得到了多次位错的形核与发射. 位错所在区域引起塑性变

形,是材料的缺陷区域;研究位错的运动规律对于分析缺陷的萌生具有重要意义.

为了进一步揭示纳米金属材料 Ta 的 II 型断裂机理,图 4 给出了裂纹尖端位错的平衡位置以及缺陷萌生区域局部放大图. 其中,灰色框内的灰色区域代表了缺陷萌生的位置. 当应力强度因子 $K_{II} =$

1.725 时,位错形核发射至距离裂纹尖端 30.88 \AA 的位置(图 4(a)),形成缺陷;放大的区域为缺陷周围原子排列情况,位错扩展后,分别在 A', B', C' 多出半个原子面,形成三个不全位错,以分位错 $a/8 [110]$ 领先扩展,中间的分位错是 $a/4 [112]$;堆垛层错带不等长, A' 与 B' 之间包含 6 个原子, B' 与 C'

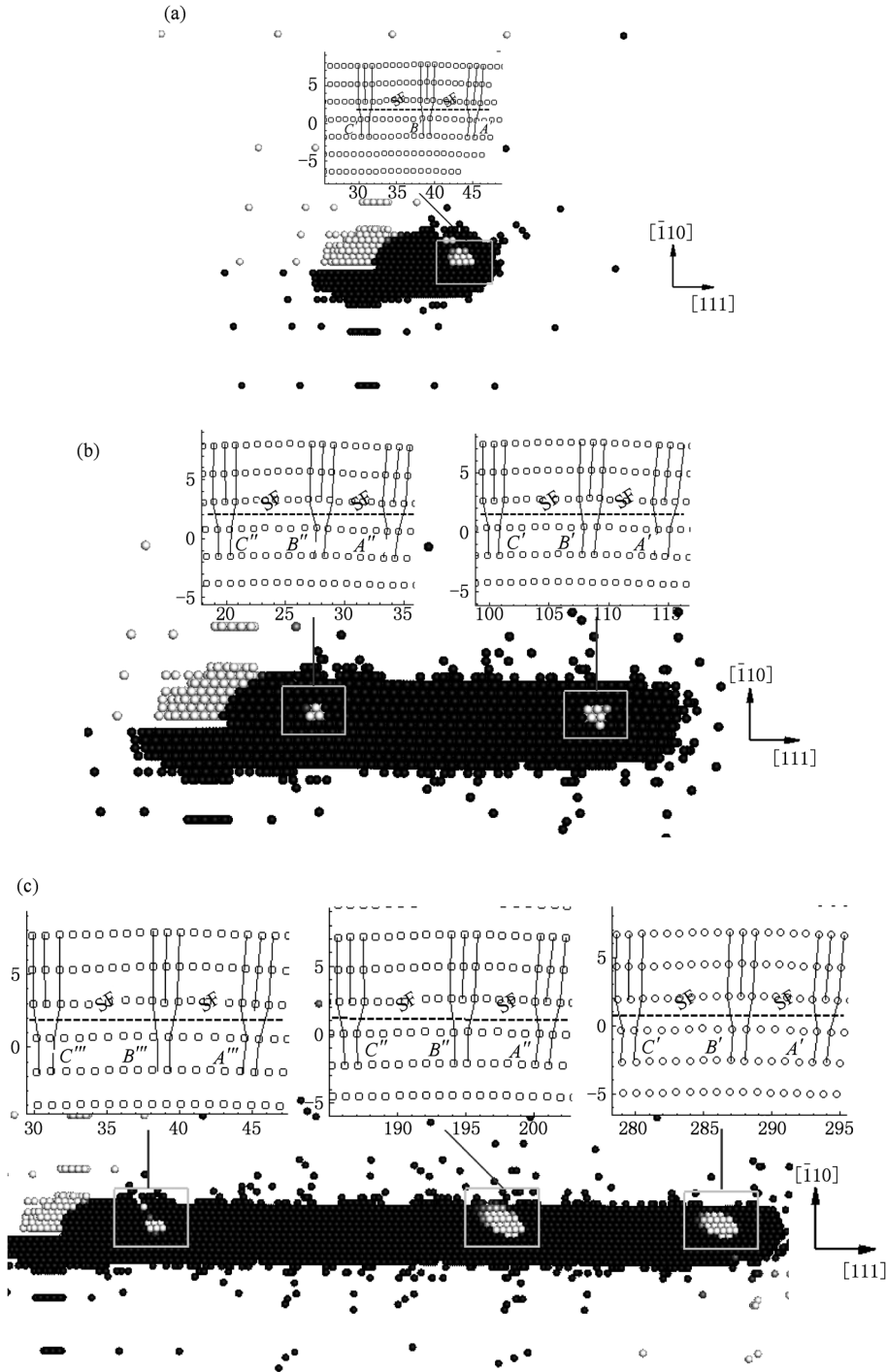


图 4 裂纹尖端缺陷萌生位置及局部放大原子图 (a)应力强度因子 $K_{II} = 1.725$; (b)应力强度因子 $K_{II} = 2.21$; (c)应力强度因子 $K_{II} = 2.26$. 原子颜色代表 Z 向位移,灰色表示 Z 向位移大,黑色表示 Z 向位移小

之间包含 8 个原子,全位错扩展宽度为 15.16 Å. bcc 金属 Ta 的位错扩展宽度非常的窄,这与其极高的层错能有关. 当应力强度因子 K_{II} 继续加载到 2.21 时,第二个位错在距离裂纹尖端 19.85 Å 的位置形核,第一个位错已经发射至距离裂纹尖端 100.38 Å 的位置(图 4(b)),在两处形成缺陷;观察缺陷周围原子排列情况,位错分解类似于第一个全位错的分解,在缺陷内部相邻分位错 A' 与 B' , B' 与 C' 之间形成了层错带,但是两处缺陷之间的原子排列仍然保持完整的晶体点阵;新缺陷两端分位错分别距离裂纹尖端 19.85 Å, 34.12 Å;此时,第一个全位错的两个端部分位错分别距离裂纹尖端 100.38 Å, 114.66 Å;全位错扩展的长度分别为 14.27 Å 和 14.28 Å,堆垛层错带包含的原子数不变. 随着加载强度增大,在裂纹尖端的应力得到提升,当达到临界水平时,会引起新的缺陷萌生. 图 4(c) 为当应力强度因子 K_{II} 增加到 2.26 时,缺陷萌生情况:在距离裂纹尖端 30.89 Å 的位置新位错形核,引起塑性变形;同时,已经萌生的点缺陷发射至 186.68 Å 和 279.62 Å 的位置;同样,在缺陷内部相邻两个分位错 A'' 与 B'' , B'' 与 C'' 之间形成了层错带,而相邻两处缺陷之间的原子排列仍然保持完整的晶体点阵;初始发射时,第三个全位错的扩展宽度与已经发射的两个全位错的扩展宽度相当.

3.3. 扩展位错形成机理

多尺度模拟结果显示,滑移和位错形核是 II 型 {110} 面裂纹扩展的主要变形特征. 形核后的位错引起局部变形能升高,处于不稳定状态,使得位错倾向于分解扩展. 对于 bcc 金属 Ta,扩展后的分位错之间形成层错带,两相邻分位错之间分别包含 6 个和 8 个原子.

为了进一步研究 bcc 金属扩展位错形成机理,本文将基于 Peierls 概念^[23] 对此进行分析. Peierls 概念假设裂纹尖端滑移面上的剪切力 $\tau(x)$ 与剪切位移 $\delta(x)$ 有周期性的关系 $\tau(x) = f(\delta)$,定义面间势能 $\Phi(\delta) = \int \tau d\delta$,使得 $\tau = d\Phi/d\delta$. Rice^[9] 使用 Peierls 概念对 fcc 金属位错分解过程进行了分析; Tador^[7] 在 Peierls 概念的基础上对 II 型断裂提出了 Peierls 形变孪晶准则. Rice 提出了不稳定层错能 γ_{us} 的概念,不稳定层错能是 $\Phi(\delta)$ 曲线上的最大值,并且指出不稳定层错能决定着位错形核与发射的临界应力强度因子.

模拟结果表明,全位错在临界应力强度因子下分解成三个不全位错,分解后的不全位错按形核发射位置先后顺序依次定义为 b_1, b_2, b_3 ,它们由堆垛层错隔开,三个不全位错形成过程中势能与剪切位移的关系示意图如图 5 所示. $\Phi_1(\delta_1), \Phi_2(\delta_2), \Phi_3(\delta_3)$ 分别表示不全位错 b_1, b_2, b_3 的势能函数. 对于 bcc 金属 {110} 面上的滑移导致的位错,参看(4)式, b_1 与 b_3 相同,它们与滑移方向成 35.3°角,它们的势能函数也相同,第二个分位错 b_2 与滑移方向成 43.3°,这导致它滑移时势能函数与两边分位错的势能函数不同. II 型裂纹几何结构和加载方式如图 1,随着应力强度因子的增加,第一个分位错 b_1 的势能函数 $\Phi_1(\delta_1)$ 从 0 开始增加,越过峰值不稳定层错能 γ_{us} 之后,滑移位错 b_1 并稳定在残余状态 γ_{sf} , γ_{sf} 就是层错带的层错能. 此时,剪切位移 δ_1 逐渐增加到 b_1, b_1 形核后在 Peach-Koehler 力与位错映像力以及界面镜像力三个力的综合作用下发射至平衡位置,裂纹尖端与不全位错之间层错带的层错能为 γ_{sf} . 继续加载,第二个分位错的滑移开始,按照势能函数 $\Phi_2(\delta_2)$ 从初始值 γ_{sf} 开始增加,同样在到达不稳定层错能 γ_{us} 之后,滑移位错 b_2 并稳定在残余状态 γ_{sf} ,也就是说两个分位错被层错能为 γ_{sf} 堆垛层错隔开;第三个不全位错 b_3 的势能函数 $\Phi_3(\delta_3)$ 从 γ_{sf} 开始增加,剪切位移 δ_3 开始由 0 增加到 b_3 后,势能回到 0,三个不全位错 b_1, b_2, b_3 的柏格斯矢量和构成了一个全位错的柏格斯矢量.

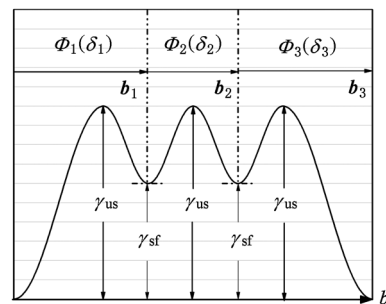


图 5 三个不全位错形核过程中,势能与剪切位移关系的示意图

图 5 中势能曲线的极小值点对应堆垛层错的层错能,由模拟结果可知,两次极小值产生的机理不相同. 回顾第一个全位错分解过程, K_{II} 达到 1.54 时形成第一个极小值, K_{II} 达到 1.1725 时形成第二个极小值. 第一个极小值是因为第一个不全位错 b_1 的形核,在裂纹尖端与不全位错平衡处形成了层错能为 γ_{sf} 堆垛层错带. 而第二个极小值的产生则用

来平衡不全位错 b_2 和 b_3 之间的斥力。

4. 结 论

QC 多尺度方法,能够分析较大尺度的原子缺陷问题,突破边界效应的束缚,更接近于实际问题。基于 QC 理论,本文对 bcc 金属 Ta 的 II 型裂纹尖端扩展进行了多尺度模拟,观察到变形过程中微观结构的变化过程,发现滑移和位错形核是主要的变形特征,得到以下结论:

1. 基于位错发射位置与应力强度因子关系曲线,本文对全位错的运动进行了仔细的讨论:位错运动在不同阶段特征不一致,第一个位错在发射初始阶段,运动缓慢,在某些临界值,突跳式地向前运动,但是第二个以及第三个位错的发射对于位错运

动具有促进作用,使得位错快速远离裂纹尖端。

2. 对裂纹尖端缺陷萌生的分析结果表明,裂纹扩展初始阶段萌生点缺陷,点缺陷随着加载强度增加会萌生新的点缺陷,点缺陷最终运动到边界,导致 II 型断裂破坏。

3. 通过对位错分解过程进行分析得到:位错运动过程中扩展位错基本保持不变,即使新的位错形核与分解,扩展宽度仍然变化不大。

4. 从势能与剪切位移的关系出发,对扩展位错形成机理进行了研究,势能曲线的极小值点对应堆垛层错的层错能;因为 bcc 金属位错分解产生三个不全位错,所以势能曲线有两个极小值点,而且这两个极小值点的形成机理并不相同;从扩展位错的原子排列上看,在三个位置多出三个半原子面,每相邻两个半原子面之间形成层错能为 γ_{st} 的堆垛层错带。

-
- [1] Buckman R W 2000 *JOM* **52** 40
- [2] Cardonne S M, Kumar P, Michaluk C A, Schwartz H D 1995 *Int. J. Refract. Met. Hard Mater.* **13** 187
- [3] Gleiter H 1989 *Proc. Mater. Sci.* **33** 223
- [4] Miller R, Ortiz M, Phillips R, Shenoy V, Tadmor E B 1998 *Eng. Fract. Mech.* **61** 427
- [5] Miller R, Tadmor E B, Phillips R, Ortiz M 1998 *Modelling Simul. mater. Sci. Eng.* **6** 607
- [6] Shenoy V B, Miller R, Tadmor E B, Phillips R, Ortiz M 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 742
- [7] Hai S, Tadmor E B 2003 *Acta Mater.* **51** 117
- [8] Tadmor E B, Hai S 2003 *J. Mech. Phys. Solids* **51** 765
- [9] Rice J R 1992 *J. Mech. Phys. Solids* **40** 239
- [10] Shao Y F, Wang S Q 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 7258 (in Chinese) [邵宇飞、王绍青 2010 物理学报 **59** 7258]
- [11] Tang Q H, Wang T C 1999 *J. Mater. Res.* **14** 4035
- [12] He A M, Shao J L, Wang P, Qin C S 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 8836 (in Chinese) [何安民、邵建立、王 裴、秦承森 2010 物理学报 **59** 8836]
- [13] Xie H X, Wang C Y, Yu T, Du J P 2009 *Chin. Phys. B* **18** 251
- [14] Wang H T, Qin Z D, Ni Y S, Zhang W 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1057 (in Chinese) [王华滔、秦昭栋、倪玉山、张 文 2009 物理学报 **58** 1057]
- [15] Zhang Z N, Ge X R 2005 *Eur. J. Mech. A-Solids* **24** 243
- [16] Zhou T, Yang X H, Chen C Y 2009 *Int. J. Solids Struct.* **46** 1975
- [17] Tadmor E B 1996 *The Ph. D. Dissertation* (Brown University)
- [18] Tadmor E B, Phillips R, Ortiz M 1996 *Langmuir* **12** 4529
- [19] Tadmor E B, Ortiz M, Phillips R 1996 *Philos. Mag. A* **73** 1529
- [20] Daw M S, Baskes M I 1984 *Phys. Rev. B* **29** 6443
- [21] Li Y, Siegel D J, Adams J B, Liu X Y 2003 *Phys. Rev. B* **67** 125101
- [22] Featherston F H, Neighbours J R 1963 *Phys. Rev.* **130** 1324
- [23] Peierls R 1940 *Proc. Phys. Soc.* **52** 34

Multiscale analysis of defect initiation on the atomistic crack tip in body-centered-cubic metal Ta^{*}

Lu Huai-Bao Li Jun-Wan Ni Yu-Shan[†] Mei Ji-Fa Wang Hong-Sheng

(Department of Mechanics and Engineering Science, Fudan University, Shanghai 200433, China)

(Received 24 October 2010; revised manuscript received 6 December 2010)

Abstract

The quasi-continuum method (QC), a multiscale method, is used to analyze body-centered-cubic (bcc) metal tantalum (tantalum, Ta) type II crack-tip dislocation nucleation. Based on the relationship curves between dislocations emission position and stress intensity factor, the processes of dislocation defect initiation and development are investigated. Dislocation travels forward with different characteristics in different stages and the new nucleated dislocations expedite the already nucleated dislocation to move away from the crack tip. The analysis of initiation of the crack tip defects shows that they are the local defects that first appear, and with loading, more local defects emerge, which eventually move to the boundary, and lead to the type II fracture. Furthermore, dislocation dissociation as well as extended dislocation is discussed. The partial dislocation nucleating before the perfect dislocation nucleation and emission is full proof that the dissociation of perfect dislocation takes place step by step, which means that the two minimum points on the energy curve have different formation mechanisms.

Keywords: multiscale, quasi-continuum method, type II fracture, extended dislocation

PACS: 61.46.Hk, 61.72.Lk, 62.20.F-, 62.20.mt

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 10576010).

[†] Corresponding author. E-mail: niyushan@fudan.edu.cn