

晶体相场法研究应力状态及晶体取向对微裂纹尖端扩展行为的影响

郭刘洋 陈铮 龙建 杨涛

Study on the effect of stress state and crystal orientation on micro-crack tip propagation behavior in phase field crystal method

Guo Liu-Yang Chen Zheng Long Jian Yang Tao

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 64, 178102 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.178102

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.178102>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphys.ac.cn/CN/Y2015/V64/I17>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

软模板纳米压印技术及其对共轭高分子的取向控制研究

Pattern transfer and molecular chain orientation modulation by soft template during the nanoimprint lithography

物理学报.2014, 63(22): 228104 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.228104>

高温高压方法合成碳包覆 γ -Fe₂O₃纳米棒及其磁学性能

HPHT synthesis and magnetic property of γ -Fe₂O₃@C core-shell nanorods

物理学报.2014, 63(10): 108101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.108101>

粗晶和纳米晶Sm₃Co合金的制备及其性能研究

Preparation and properties of polycrystalline and nanocrystalline Sm₃Co alloys

物理学报.2014, 63(9): 098102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.098102>

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

Phase field crystal study on grain boundary evolution and its micro-mechanism under various symmetry

物理学报.2013, 62(21): 218101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.218101>

有序金纳米颗粒阵列的制备及光吸收特性研究

Fabrication of ordered Au nanoparticles array and its optical absorption properties

物理学报.2013, 62(19): 198101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.198101>

晶体相场法研究应力状态及晶体取向对微裂纹尖端扩展行为的影响*

郭刘洋 陈铮[†] 龙建 杨涛

(西北工业大学凝固技术国家重点实验室, 西安 710072)

(2015年1月31日收到; 2015年5月6日收到修改稿)

采用晶体相场模拟研究了单向拉伸作用下初始应力状态、晶体取向角度对单晶材料内部微裂纹尖端扩展行为的影响, 以(111)晶面上的预制中心裂纹为研究对象探讨了微裂纹尖端扩展行为的纳观机理, 结果表明: 微裂纹的扩展行为主要发生在 $\langle 0\bar{1}1 \rangle(111)$ 滑移系上, 扩展行为与扩展方向与材料所处的初始应力状态及晶体取向紧密相关. 预拉伸应力状态将首先诱发微裂纹尖端生成滑移位错, 进而导致晶面解理而实现微裂纹尖端沿 $[0\bar{1}1]$ 晶向扩展, 扩展到一定程度后由于位错塞积, 应力集中, 使裂纹扩展方向沿另一滑移方向 $[10\bar{1}]$, 并形成锯齿形边缘; 预剪切应力状态下, 微裂纹尖端首先在 $[10\bar{1}]$ 晶向解理扩展, 并诱发位错产生, 形成空洞聚集型长大的二次裂纹, 形成了明显的剪切带; 预偏变形状态下微裂纹尖端则直接以晶面解理形式 $[10\bar{1}]$ 在上进行扩展, 直至断裂失效; 微裂纹尖端扩展行为随晶体取向不同而不同, 较小的取向角度会在裂纹尖端形成滑移位错, 诱发空位而形成二次裂纹, 而较大的取向角下的裂纹尖端则以直接解理扩展为主, 扩展方向与拉伸方向几近垂直.

关键词: 晶体相场, 微裂纹扩展, 应力状态, 取向角

PACS: 81.07.-b, 81.40.NP, 81.40.Jj

DOI: 10.7498/aps.64.178102

1 引言

材料在制造和使用过程中总是不可避免地出现微裂纹等缺陷, 微裂纹的扩展一定程度上决定了材料的服役寿命, 因此一直是材料科学和固体物理学重要的研究课题. 早期研究人员从材料断裂的宏观现象出发, 建立了断裂力学模型和理论来解释裂纹扩展的相关行为. 但裂纹萌生和扩展实际上是在纳米尺度开始的, 且该尺度下的材料力学性质具有尺寸效应, 建立在宏观连续介质上的断裂力学不再适用于该尺度下的裂纹扩展过程, 因此极有必要研究纳米尺度下的裂纹扩展机理.

随着材料科学的发展以及科学计算方法不断优化, 利用计算机模拟研究化学反应、材料性能和微结构演化已成为大趋势. 尤其是计算机模拟

突破了传统实验手段研究尺度, 给研究微裂纹的扩展带来了新的方法. 当前, 利用计算机研究材料中裂纹萌生与扩展的主要模拟方法有分子动力学模拟^[1-5]、蒙特卡洛模拟^[6-8]、有限元模拟^[9-11]以及相场模拟^[12-16]. 如, 利用分子动力学模拟, Cao等^[2]模拟了 α -Fe裂纹的单轴拉伸实验中的形变过程; Ma等^[3]模拟研究了循环加载条件下体心立方铁单晶中疲劳裂纹的扩展机理; Li等^[4]则模拟了铁单晶中多孔层对裂纹扩展的影响; Guo等^[5]结合连续动力学模型和分子动力学研究了I型裂纹动态扩展的过程机理. 在Monte Carlo模拟方面, Cadini等^[6]对疲劳裂纹扩展进行了预测; Ganchenkova等^[7]和Arafin等^[8]则分别模拟研究了多晶的裂纹扩展和晶间应力腐蚀裂纹扩展. 借助误差修正后的有限元模拟法, Loehnert等^[10]研究了微裂纹扩展的复合机理和组织演化; Colombo

* 国家自然科学基金(批准号: 51474176和51274167)资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: chenzh@nwpu.edu.cn

等^[11]则构筑了三维裂纹扩展模型. 利用相场模拟法, Spatschek等^[13]研究了快速裂纹扩展; Song等^[14]和 Abdollahi等^[15]研究了压电和铁电材料的裂纹扩展; Elder等^[12]和 Humadi等^[16]则利用拓展的相场法(即晶体相场法)模拟研究了裂纹的扩展, 证实了裂纹扩展的分岔机理.

其中, 有限元模拟和蒙特卡洛模拟多用于宏观、介观尺度的裂纹扩展现象研究, 不能描述裂纹扩展的微观细节; 分子动力学模拟虽然已经大量用于微结构演化动力学过程研究, 但其主要适用于原子振动时间尺度(10^{-14} — 10^{-12} s), 很难拓展到裂纹扩展的扩散时间尺度(10^{-6} s), 而且分子动力学模拟强烈依赖势函数的选择, 要求加载的应变速度也往往是实际工业生产应变速度(10^2 s⁻¹)的5—7个数量级, 与微裂纹扩展实际尚存在相当距离^[12]. 相场方法虽然克服了分子动力学上述缺点, 成为了多尺度模拟研究微结构演化强有力的计算模拟方法, 但传统的相场方法忽略了材料由于原子周期性排列而固有的物理特性^[12,17], 且其平均场理论更是难以反映材料晶体学结构特性, 无法在纳米尺度上描述微结构演化现象. 为了解决相场方法的局限, Elder等^[12,17]基于密度泛函理论提出了晶体相场模型, 继承了相场法物理激励的特点, 不针对特定的材料, 因而更适合研究裂纹扩展行为的基本特性; 其次, 晶体相场法引入周期性原子密度函数描述晶体学结构, 自然地耦合了弹性效应、位错运动等周期性结构物理特性, 具有描述原子排列和位错的本质特点^[17,18]; 此外, 晶体相场模型的特征时间尺度继承了传统相场方法, 能够很方便地描述扩散时间尺度上的裂纹扩展行为^[18], 更适合研究微纳米尺度裂纹扩展演化过程. 同时, 运用晶体相场法模拟研究纳观尺度上的裂纹扩展现象和机理目前尚未见报道. 因此, 本文采用晶体相场模型, 通过在晶体相中预制初始孔洞缺陷作为裂纹扩展策源地, 模拟了单晶材料中心微裂纹在单轴拉伸作用下的扩展过程, 讨论了初始应力状态和晶体取向对微裂纹尖端扩展行为的影响.

2 晶体相场模型

2.1 晶体相场模型的构建

不同于传统相场模型采用空间均一的序参量, 晶体相场模型采用周期性的局部时间原子概率密

度 ρ 作为序参量, 其不仅能自洽耦合晶体周期性的物理现象和性质, 而且所对应的时间尺度远大于周期原子振动对应的时间尺度, 而小于扩散时间尺度, 故该模型可用以描述扩散时间尺度和原子长度尺度上的微观演化过程.

在液相等均匀无序相中, 原子位置随机分布, 原子概率密度 ρ 对时间取平均为常数 ρ_0 ; 在固相中, 原子位置不依赖于时间, 呈规律性排列, 原子概率密度是与晶格周期相同的周期函数 $\rho(r)$, 并且在原子所处位置取得峰值, 这使得晶体相场模型能描述源于晶体周期性的物理性质^[18]. 由此可得液/固体系中纯物质的无量纲最小化自由能函数可表示为

$$F = \int d\mathbf{r} \left\{ \frac{\rho}{2} [a\Delta T + \lambda(q_0^2 + \nabla^2)^2] \rho + u \frac{\rho^4}{4} \right\}, \quad (1)$$

其中, \mathbf{r} 为空间向量; a, u, q_0 和 λ 为材料对应的特定参数; ∇^2 为 Laplace 算子; ΔT 为系统过冷度.

由于 ρ 为保守场序参量, 根据 Cahn-Hilliard 保守动力学方程得相应的动力学演化方程为

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \Gamma \nabla^2 \mu + \eta \\ &= \Gamma \nabla^2 \{ [r + \lambda(q_0^2 + \nabla^2)^2] \rho + u \rho^3 \} + \eta, \quad (2) \end{aligned}$$

式中, μ 为化学势; Γ 为密度场的迁移率; r 为无量纲过冷度; η 为高斯随机噪声项, 具有零均值且满足两点相关性.

为简化处理, 本文取 $(\Gamma, a, \lambda, \mu) = (1, 2\pi, 1, 1)$. 同时结合晶体周期对称性, 对原子概率密度 ρ 进行单模近似^[19], 得平衡时三角相原子概率密度的谐波展开式为

$$\rho = A \left[\cos(q_0 x) \cos\left(\frac{q_0 y}{\sqrt{3}}\right) - \cos\left(\frac{2q_0 y}{\sqrt{3}}\right) / 2 \right] + \rho_0, \quad (3)$$

其中振幅 $A = 4(\rho_0 + \sqrt{-15r - \rho_0^2/3})/5$, $q_0 = \sqrt{3}/2$, ρ_0 为平均密度.

在单模近似下应用公切线法则, 联合求解方程 (1), (2), (3) 可得简单晶体相场模型构筑的二维相图, 如图 1 所示, 其中平衡相为液相、三角相和条状相.

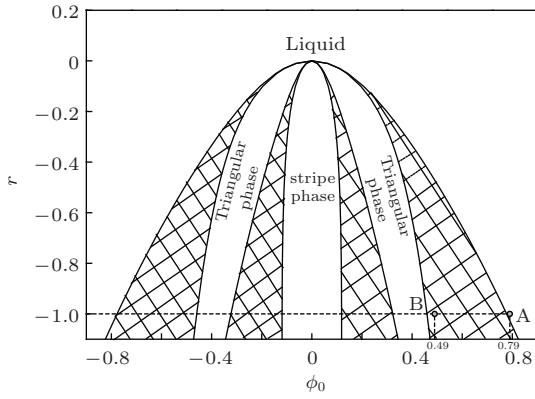


图1 单模近似构筑的二维相图 (阴影部分代表两相区)
Fig. 1. Two-dimensional phase diagram as calculated in a one-mode approximation (hatched areas in the figure correspond to coexistence regions).

2.2 数值计算方法与参数设置

对无量纲动力学演化方程(2)采用半隐式 Fourier 谱方法^[20]求解, 其离散形式为

$$\frac{\rho_{\mathbf{k},t+\Delta t} - \rho_{\mathbf{k},t}}{\Delta t} = -k^2 \{ [r + (1 - k^2)^2] \rho_{\mathbf{k},t+\Delta t} + \rho_{\mathbf{k},t}^3 \}. \quad (4)$$

变形整理后

$$\rho_{\mathbf{k},t+\Delta t} = \frac{\rho_{\mathbf{k},t} - k^2 \Delta t \rho_{\mathbf{k},t}^3}{1 + k^2 \Delta t [r + (1 - k^2)^2]}, \quad (5)$$

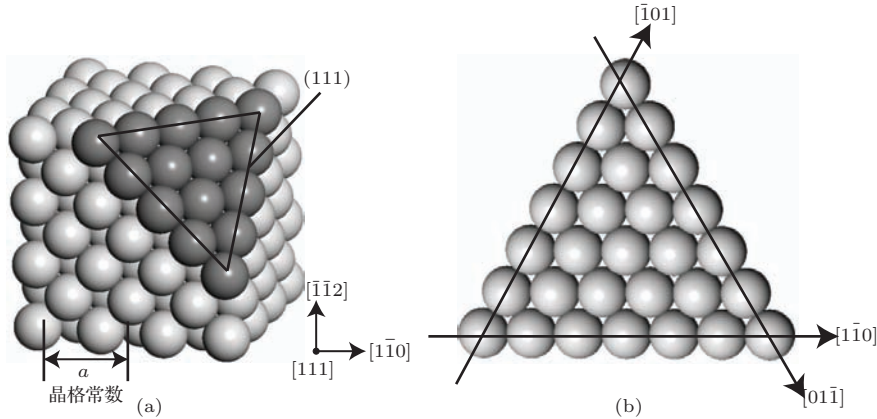


图2 模拟的面心立方晶格及原子排列 (a) (111)面原子排列; (b) (111)面晶向示意图
Fig. 2. Face-centred cubic crystal lattice: (a) atomic arrangement of (111) plane; (b) crystal orientation schematic diagram of (111) plane.

试验模拟空间采用周期性边界条件, 并将其离散为四方网格, 大小设置为 $512\Delta x \times 512\Delta y$, 取空间步长 $\Delta x = \Delta y = \pi/3$, 时间步长 $\Delta t = 0.1$. 根据单模近似下的二维相图(图1), 本文选用无量纲密度变量为 $\rho_0 = 0.49$ 的三角相表征晶体相, 对应的温

式中,

$$\rho_{\mathbf{k},t} = \int d\mathbf{x} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \rho_t(\mathbf{x})$$

是序参量 ρ 的傅里叶变换形式, 同理

$$\rho_{\mathbf{k},t}^3 = \int d\mathbf{x} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \rho_t^3(\mathbf{x}),$$

\mathbf{k} 为 Fourier 空间的波矢, 满足 $k^2 = |\mathbf{k}|^2$.

2.3 变形施加方法和参数设置

对平衡三角相原子概率密度的谐波展开(3)式进行修正, 得到剪切变形和偏变形下的密度分别为 $\rho(x + \xi y, y)$ 和 $\rho(x(1 + \xi), y(1 - \xi))$, 式中 ξ 代表无量纲变形量.

变形过程中保持 y 方向的空间步长不变, x 方向空间步长随应变速率在每一时间步长下均有一增量 $d = \dot{\epsilon} \Delta x n \Delta t$, 其中 $\dot{\epsilon}$ 为无量纲的应变速率, n 为时间步长数.

由于三角相对应面心立方晶体, 为减少计算时间, 节约计算成本, 本文模拟以面心立方单晶中(111)晶面为研究对象, 取 x 轴即水平方向表征 $[1\bar{1}0]$ 晶向, y 轴即垂直方向表征 $[\bar{1}\bar{1}2]$ 晶向, 如图2所示, 同时在 z 方向即(111)面厚度方向采用周期边界, 从而将三维面心立方晶体的裂纹扩展模型转化为二维的平面应变问题.

度变量取为 $r = -1.0$, 如图1中B点所示. 为模拟中心裂纹, 在试样中心预制大小为 $10\Delta x \times 40\Delta y$ 的矩形缺口作为初始裂纹, 其参数设置为 $\rho_0 = 0.79$, $r = -1.0$, 如图1中A点所示, 之所以选取该点是因为该点对应的是液相与三角相共存区附近的原

子概率密度, 有利于三角相向裂纹结构转变.

3 结果与讨论

3.1 初始应力状态的影响

首先对模拟试样分别施加应变量为 ξ 为 1.8% 的拉伸、剪切和偏变形的预先应变, 使试样处于不同的初始应力状态下, 随后预制初始中心裂纹制成缺陷试样, 充分弛豫, 使系统趋于稳定, 并由人为初始构型变化为真实初始构型. 然后以 $\dot{\epsilon} = 6 \times 10^{-6} / \Delta t$

的应变速率分别对不同预应力状态下的缺陷试样施加 x 方向的单轴拉伸应变, 以便研究初始应力状态对微裂纹扩展的影响. 其他参数设置: 温度变量取为 $r = -1.0$, 晶体取向取为 $\theta = 10^\circ$.

不同预应变状态下微裂纹扩展演化过程如图 3 所示, 其中图 3(a1) 对应的是预拉伸状态下的缺陷试样充分弛豫后的微观组织图, 此时 x 轴单向拉伸应变 $\epsilon = 0$; 图 3(a2), (a3) 为图 3(a1) 中矩形区域沿 x 轴单向拉伸应变分别为 $\epsilon = 0.12$ 和 $\epsilon = 0.24$ 时对应的微观组织的放大图 (图 3(b), (c) 以及图 5 与此类似, 不再赘述).

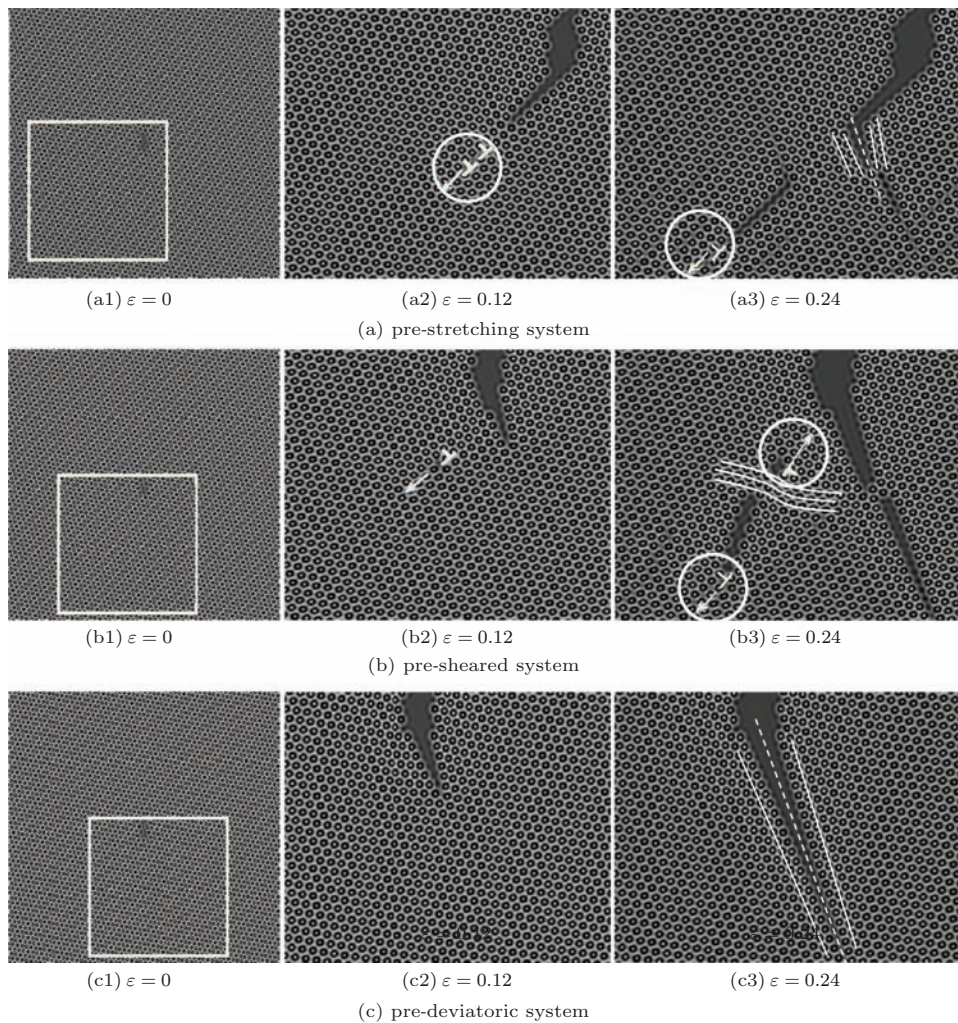


图 3 不同初始应力状态下的微裂纹扩展图 (图中圆圈中垂直符号和箭头分别代表位错及其滑移方向)

Fig. 3. The crack propagation processes of single crystal with different initial stress states under uniaxial tensile deformation (the vertical signs indicate the dislocations with arrows the corresponding slipping directions).

由图 3 可以看出, 微裂纹扩展的过程大体一致, 都随着拉伸应变不断施加而呈现扩展—钝化—扩展的特征. 初始阶段由于应力未达到裂纹扩展临

界应力, 预制裂纹没有出现明显的变化. 当应力超过临界应力时, 预制裂纹尖端有一个稳态的钝化过程, 原子间距离改变, 而预制裂纹区域进一步扩大,

直至裂纹尖端产生了应力集中超过了某个方向上的原子结合力, 导致该原子键断裂, 从而驱动裂纹尖端向前扩展, 才发生了微裂纹的扩展行为. 但由于初始应力状态的不同, 扩展速度明显不同, 且扩展行为机理也有明显差别.

由图 3 (a) 可知, 经过预拉伸变形的缺陷试样, 在沿 x 轴单向拉伸作用下, 裂纹尖端逐渐形成应力集中, 使得裂纹尖端附近的原子晶格发生错排, 从而导致二次缺陷——滑移位错的形成, 滑移位错的进一步形成使得应力集中得到释放. 然后位错在应力作用下沿与拉伸应力呈 45° 的方向即 $[0\bar{1}1]$ 晶向滑移, 裂纹随之向前扩展, 至一定水平时, $[0\bar{1}1]$ 晶向发生位错塞积, 使得裂纹扩展方向发生改变为沿 $[10\bar{1}]$ 晶向, 主次滑移系的先后开动进一步促进了裂纹尖端的扩展行为, 形象地与文献 [3] 和文献 [21] 相互印证. 同时此间的应力作用直接使得原子键断裂, 实现微裂纹尖端的解理断裂扩展, 并以裂纹尖端中心线为轴线形成了类似孪晶的对称原子晶格排列, 且距离裂纹尖端越远孪晶越少, 这与邵宇飞等 [22] 的研究结果一致. 与此同时, $[0\bar{1}1]$ 晶向上塞积的位错在应力作用下反应促使滑移位错两侧发生晶面解理, 形成二次裂纹, 并向前扩展, 直至与主裂纹联接, 最终形成锯齿形边缘. 文献 [4] 的研究也间接证实了这一点. 由此可知预拉伸应力下的裂纹受到水平拉伸应力后主要以位错滑移以及位错诱发晶面解理的方式扩展.

由图 3 (b) 可知, 经预剪切变形的缺陷试样中预制裂纹钝化变大后在应力持续作用下, 裂纹尖端附近沿 $[10\bar{1}]$ 方向的原子键断裂, 裂纹尖端首先以晶面解理的方式扩展, 同时裂纹尖端生成了滑移位错并沿 $[0\bar{1}1]$ 进行, 如图 3 (b2) 所示. 随后位错发射

分解为沿 $[01\bar{1}]$ 和 $[0\bar{1}1]$ 滑移方向相反的两个滑移位错, 应力驱动位错反应并向前滑移, 导致了空位的形成. 这与肖纪美等 [23] 的试验研究理论一致. 且位错沿 $[0\bar{1}1]$ 滑移后留下的空位以空洞聚集方式相互聚合长大, 并联接, 萌生二次裂纹, 该过程与 Cao 等 [2] 的模拟结果类似. 同时可以观察到两个位错之间形成了明显的剪切带 (如图 3 (b3) 中曲线标志所示), 与早期试验研究 [24] 一致. 剪切带的出现加剧了裂纹尖端附近原子的错排和应力分布不均, 因此可以看见沿 $[10\bar{1}]$ 方向扩展的主裂纹尖端前端又发生了钝化, 而导致裂纹前方大约两个原子的距离处重新积累应力, 诱发裂纹尖端解理面平移而出现了二次解理裂纹. 二次裂纹的扩展使得应力松弛, 随后主裂纹与二次裂纹联接. 由此可知, 预剪切应力下的裂纹受到水平拉伸应力后主要以原子键断裂解理扩展, 并诱发位错产生, 形成空洞聚集性长大的二次裂纹.

由图 3 (c) 可知, 经预偏变形的缺陷试样中的微裂纹尖端, 经历过钝化过程后, 直接在水平拉伸应力作用下打开 $[10\bar{1}]$ 晶向上的原子键, 并始终以晶面解理的方式向前扩展, 直至模拟试样失效. 该过程中裂纹尖端附近并没有形成位错、空位或剪切带等现象, 进一步佐证了试验关于纳米解理微裂纹不会转化成孔洞的研究 [25]. . , 这也验证了低振幅偏应力不会引起位错增殖或位错组态的变化 [26]. 但可以发现以解理方式扩展的裂纹尖端形成了以尖端中心线为轴线的对称原子排列, 即如图 3 (a3) 中的类孪晶结构.

为了进一步探究裂纹尖端行为规律, 图 4 示出了不同初始应力状态下模拟试样的能量-应变曲线

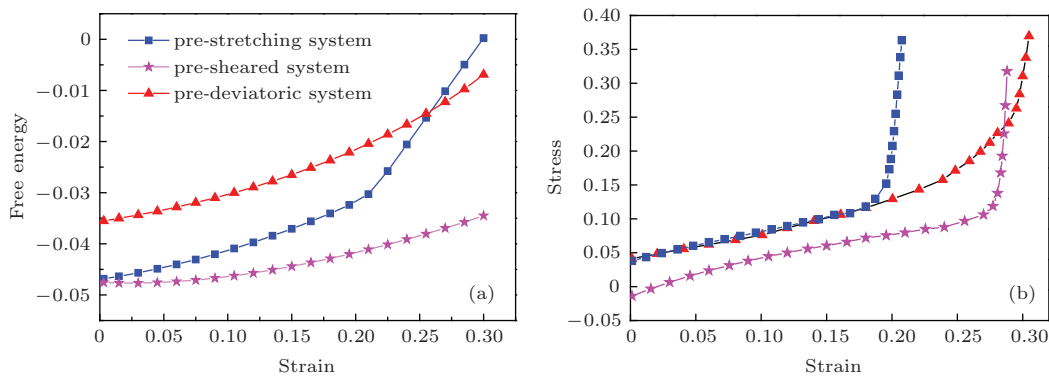


图 4 初始应力状态对 (a) 自由能-应变曲线和 (b) 真应力-应变曲线的影响

Fig. 4. The influences of initial stress state on (a) free energy-time step curves (b) real stress-strain curves.

(图 4(a)) 和真应力-应变曲线(图 4(b)). 由于不断施加较大的应变, 引进应变能, 且不对外传递, 所以微裂纹缺陷试样体系能量不断升高, 且微裂纹尖端扩展所需的能量远远小于应变施加引起的能量变化. 进一步由图 4(a) 可知, 经 1.8% 预变形后经弛豫至平衡状态后, 预偏变形的模拟试样系统能量最高, 预剪切系统能量最低. 这就解释了相同情况下预剪切状态下的裂纹尖端扩展速度较为缓慢. 由于预拉伸状态下的微裂纹尖端主要以位错滑移和位错诱发解理而扩展, 因此后期当其他两种状态下的微裂纹以晶面直接解理扩展时, 拉伸状态下的微裂纹体系就集聚了更多的能量, 应力集中程度较大(如图 4(b)) 以促进位错滑移和诱发解理, 因此出现了后期预拉伸状态的能量超过了预偏变形体系.

同时从图 4(b) 可以看出, 预拉伸状态和预偏变形状态下的模拟试样中的应力水平高于同等条件下的预剪切状态, 这主要因为经过弛豫后的预剪切系统内部仍存在残余应力, 在等应变速率加载初期, 较小的外加应力诱发部分残余应力的释放, 而此时系统处于弹性变形阶段, 储存的能量较低, 并能通过松弛效应加以释放, 造成了在变形初期预剪切系统的能量随应变的增加而降低, 从而导致由 $\sigma = dF/d\varepsilon$ 计算所得的真应力小于零. 不同预应力状态下的应力-应变曲线变化趋势相同, 由于预拉伸和预剪切状态下的微裂纹尖端扩展机理中含有滑移位错的形成和诱发空位产生, 所以变形后期上述状态的应力水平明显高于预偏变形状态.

3.2 晶体取向的影响

根据以上三种初始状态, 以预剪切系统为例考察单轴拉伸下晶粒取向对单晶内部裂纹扩展的影响. 取变形速率 $\dot{\varepsilon} = 6 \times 10^{-6} / \Delta t$, $r = -1.0$, 晶粒取向角 θ 分别设置为 10° , 25° , 35° , 40° , 60° 和 80° . 模拟结果表明, 当 $\theta = 10^\circ$, 35° 和 40° 时, 应力集中诱发裂纹尖端附近原子键断裂, 使得其沿 $[10\bar{1}]$ 方向以解理方式向前扩展, 应力释放并形成了滑移位错, 之后滑移位错反应发射以空穴集聚型方式形成二次微裂纹, 如图 3(b) 所示; 其中, 对于取向角为 10° 和 35° 的系统, 位错滑移中不断在已滑移区域留下空位, 图 3(b) 所示, 而对于取向角为 40° 的系统, 位错滑移过程中产生的空位较少, 主要是主裂纹的扩展而无二次裂纹的萌生.

当 $\theta = 60^\circ$ 时, 经弛豫后晶体中仍存在部分位错, 随着应力的施加, 主裂纹沿 $[0\bar{1}1]$ 晶向解理扩展, 扩展至一定程度后裂纹尖端由于应力释放形成滑移位错, 位错仍沿 $[0\bar{1}1]$ 晶向向前滑移, 即主裂纹尖端扩展机理由直接解理变成了位错诱发解理扩展. 同时, 模拟试样内因预剪切作用产生的异号位错分别沿 $[\bar{1}01]$ 和 $[10\bar{1}]$ 晶向滑移, 滑移过程中诱发晶面解理, 形成了大约四个原子宽度的两个二次微裂纹, 并形成了明显的剪切带, 进一步证实了剪切应力状态下裂纹扩展会形成剪切带, 如图 5(b3) 所示. 与此类似, $\theta = 80^\circ$ 时, 微裂纹扩展过程中也导致了原有位错分解为异号位错, 并在位错之间产生了更为明显的剪切带, 如图 5(c3). 与 $\theta = 60^\circ$ 时的扩展不同的是, 晶体取向为 $\theta = 80^\circ$ 时, 裂纹尖端始终保持以晶面解理的机理进行扩展, 并在进行至一定程度后, 在两个原子距离处发生了裂纹尖端解理面平移, 产生新的微裂纹, 随后与主裂纹联接. 整个过程中, 裂纹扩展方向与应力方向几近垂直即沿 $[11\bar{2}]$ 方向.

当 $\theta = 25^\circ$ 时, 微裂纹尖端首先以解理方式进行扩展长大, 同时应力集中程度加大, 裂纹尖端趋于不规则化. 达到一定程度后, 主裂纹又开始钝化, 裂纹尖端生成的滑移位错沿着 $[10\bar{1}]$ 向前运动, 并在滑移的部分不断形成空位, 在应力作用下空位联接导致晶面解理, 因而形成新的微裂纹, 如图 5(a) 所示.

图 6 示出了取向角对单轴拉伸下含初始微裂纹模拟试样能量-应变曲线的影响(图 6(a)) 及对真应力-应变曲线的影响(图 6(b)). 由图可知, 应变施加前各系统能量趋于一致, 随应变的增加, 能量先减小而后逐渐增大, 前期能量减少主要是用以提供裂纹尖端扩展所需的驱动力. 其中 $\theta = 60^\circ$ 的系统变化最快, 而的系统能量变化几乎一致, 最后为 $\theta = 25^\circ$ 对应的缺陷试样. 这使得 $\theta = 10^\circ$, 35° , 40° 和 80° 的真应力基本相同, 小于 $\theta = 60^\circ$ 却大于 $\theta = 25^\circ$ 对应缺陷试样的真应力. 因为所受真应力最大, 能量高变化快, 所以 $\theta = 60^\circ$ 尖端扩展速度最大. 而由于 $\theta = 40^\circ$ 对应的微裂纹扩展过程中发生了位错滑移, 产生的空位少, 应力松弛不充分, 使得其较早发生失效, 对应的临界应变减小, 而 $\theta = 25^\circ$ 对应的微裂纹后期主要以位错诱发空位以及空位联接形成新的裂纹向前扩展, 因此其应力集中得到释放, 扩展速度最为缓慢.

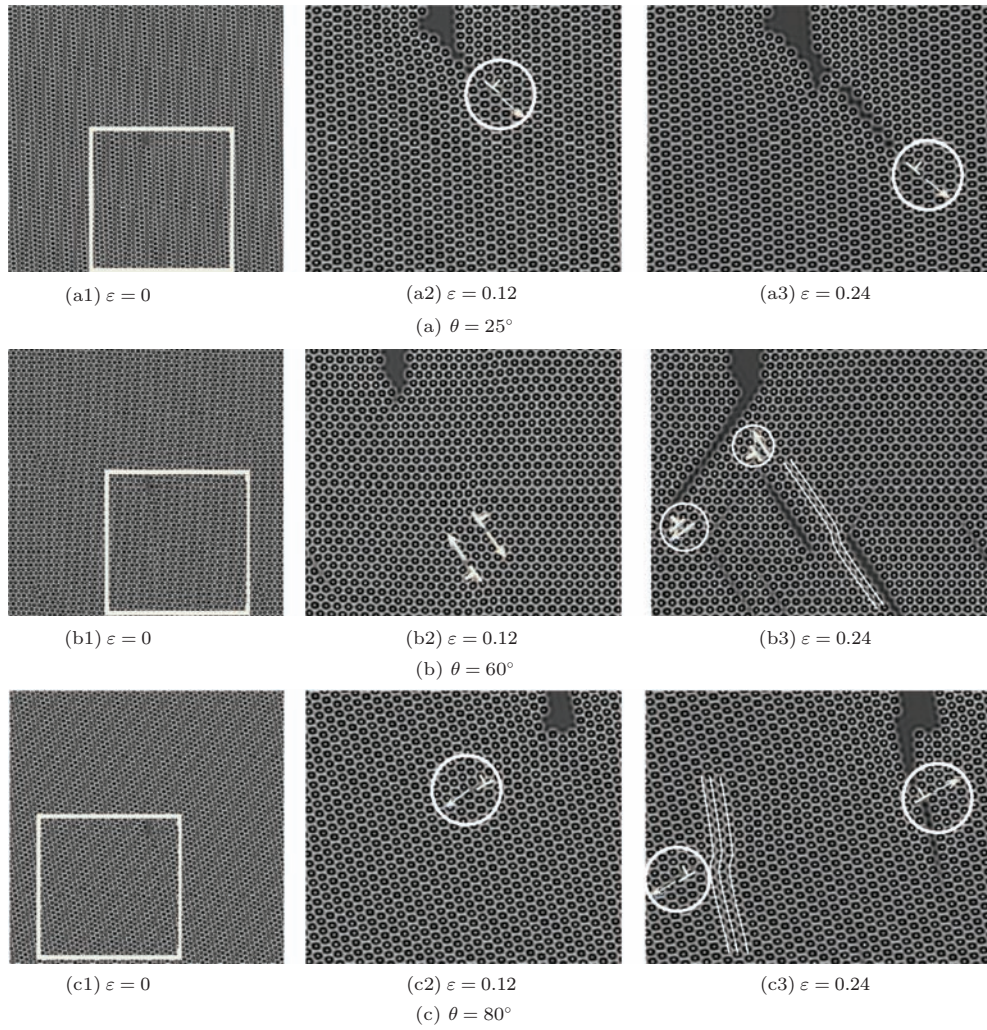


图5 不同取向角单晶的微裂纹扩展图 (图中圆圈中垂直符号和箭头代表位错及其滑移方向)

Fig. 5. The crack propagation processes of single crystal with different orientation angle under uniaxial tensile deformation (the vertical signs indicate the dislocations with arrows the corresponding slipping directions).

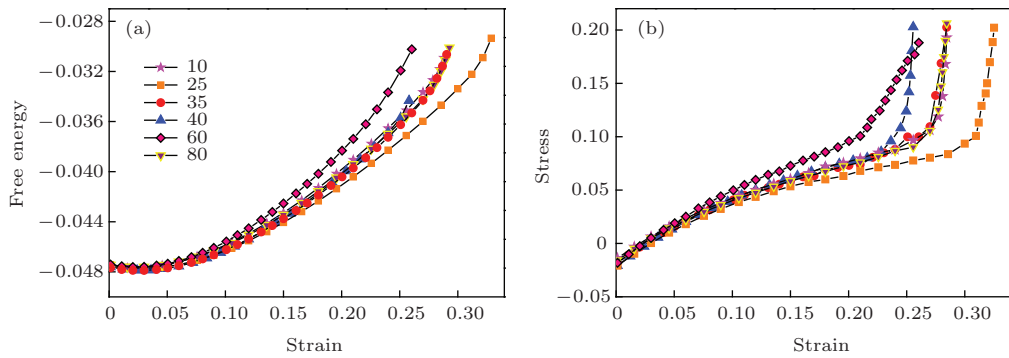


图6 (网刊彩色) 取向角对 (a) 自由能-应变曲线和 (b) 应力-应变曲线的影响

Fig. 6. (color online) The influences of different orientation angle on (a) free energy-time step curves (b) real stress-strain curves.

4 结 论

本文采用晶体相场模型研究了单轴拉伸应力条件下不同预应力状态和晶体取向对单晶材料中

心微裂纹尖端扩展行为的影响, 研究结果表明:

1) 微裂纹在 $[1\bar{1}0]$ 晶向的单向拉伸作用下, 其扩展主要是在 $(0\bar{1}1)(111)$ 滑移系上进行的. 预拉伸应力状态下首先诱发裂纹尖端滑移位错的生成并

沿着 $[0\bar{1}1]$ 晶向向前运动,从而促进诱发该方向晶面解理扩展而实现微裂纹扩展.一定程度后形成位错塞积,导致裂纹尖端扩展方向沿 $[10\bar{1}]$ 晶向,从而形成了锯齿状的扩展路径;预剪切状态下体系能量最低,应力程度较低,所以主要以原子键断裂解理扩展,并诱发位错产生,形成空洞聚集性长大的二次裂纹;预偏变形状态下的微裂纹能量和应力水平都较高,因此其裂纹尖端扩展则直接以解理形式进行,直至断裂失效未产生滑移位错.

2) 预剪切应力下的微裂纹扩展时会在两位错之间形成明显的剪切带;而微裂纹尖端直接解理扩展时会在尖端两侧形成以尖端中心线为轴线的对称原子排列,即类孪晶结构.

3) 裂纹尖端扩展性为随取向角不同也有一定的变化:当取向角较小时,扩展过程中或出现位错诱发空位,空位集聚型长大而引发二次裂纹;而当取向角超过一定角度后,裂纹尖端则主要是解理断裂,扩展方向几乎与外部作用力方向垂直,而且会促进异号位错运动而产生明显的剪切带.

参考文献

- [1] Zhang J X, Ghosh S 2013 *J Mech. Phys. Solids*. **61** 1670
- [2] Cao L X, Wang C Y 2006 *Chin. Phys.* **15** 2092
- [3] Ma L, Xiao S, Deng H, Hu W 2014 *Int. J. Fatigue*. **68** 253
- [4] Li D, Meng F Y, Ma X Q, Qiao L J, Chu W Y 2011 *J. Mater. Sci. Technol.* **27** 1025
- [5] Guo Wu R, Tie G T 2014 *Chin. Phys. B* **23** 118704
- [6] Cadini F, Zio E, Avram D 2009 *Probabilist. Eng. Mech.* **24** 367
- [7] Ganchenkova M G, Borodin V A 2004 *Mater. Sci. Eng. A-struct.* **387** 372
- [8] Arafin M A, Szpunar J A 2009 *Corros. Sci.* **51** 119
- [9] Mergheim J 2009 *Int. J. Numer. Meth. Eng.* **80** 269
- [10] Loehnert S, Prange C, Wriggers P 2012 *Int. J. Fracture*. **178** 147
- [11] Colombo D, Massin P 2011 *Comput. Method. Appl. M.* **200** 2160
- [12] Elder K R, Grant M 2004 *Phys. Rev. E*. **70** 51605
- [13] Spatschek R, Brener E, Karma A 2011 *Philos. Mag.* **91** 75
- [14] Song Y C, Soh A K, Ni Y 2007 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **40** 1175
- [15] Abdollahi A, Arias I 2015 *Arch. Comput. Method. E.* **22** 153
- [16] Humadi H, Ofori-Opoku N, Provatas N, JHoyt J 2013 *JOM*. **65** 1103
- [17] Berry J, Grant M, Elder K R 2006 *Phys. Rev. E*. **73** 31609
- [18] Haataja M, Provatas N, Stefanovic P 2009 *Phys. Rev. E*. **80** 46107
- [19] 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]
- [20] Ren X, Wang J C, Yang Y J, Yang G C 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 3595 (in Chinese) [任秀, 王锦程, 杨玉娟, 杨根仓 2010 物理学报 **59** 3595]
- [21] Tian S G, Xue Y C, Zeng Z, Shu D L, Xie J 2014 *Rare. Metal. Mat. Eng.* **43** 1092 (in Chinese) [田素贵, 薛永超, 曾征, 舒德龙, 谢君 2014 稀有金属材料与工程 **43** 1092]
- [22] Shao Y F, Wang S Q 2010 *Acta Phys. Sin.* **10** 7258 (in Chinese) [邵宇飞, 王绍青 2010 物理学报 **10** 7258]
- [23] Xiao J M, Gu B, Zhang J W, Qiao L J, Chen Q Z 1994 *Acta Metall. Sin.* **30** 362 (in Chinese) [肖纪美, 谷飙, 张静武, 乔利杰, 陈奇志 1994 金属学报 **30** 362]
- [24] Li J X, Chu W Y, Gao K W, Qiao L J 2003 *Acta Metall. Sin.* **39** 359 (in Chinese) [李金许, 褚武扬, 高克玮, 乔利杰 2003 金属学报 **39** 359]
- [25] Gao K W, Chen Q Z, Chu W Y, Xiao J M 1994 *Sci. China. Ser. A* **24** 993 (in Chinese) [高克玮, 陈奇志, 褚武扬, 肖纪美 1994 中国科学(A辑) **24** 993]
- [26] Tan Q 1991 *Acta Metall. Sin.* **27** 21 (in Chinese) [谭启 1991 金属学报 **27** 21]

Study on the effect of stress state and crystal orientation on micro-crack tip propagation behavior in phase field crystal method*

Guo Liu-Yang Chen Zheng[†] Long Jian Yang Tao

(State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

(Received 31 January 2015; revised manuscript received 6 May 2015)

Abstract

A nanometer scale mechanism for micro crack propagation under uniaxial tension in single crystals is investigated using phase field crystal (PFC) simulation. The uniaxial tensile loading is strain controlled. And three initial typical stresses of pre-existing center crack in (111) crystal plane of face centered cubic structure are chosen to study the effects of initial stress state on micro-crack propagation. Moreover, the influences of different crystal orientations, when the crystal suffers from uniaxial tension, are also investigated. Due to the influence of time scale and length scale in the PFC method, the motion of dislocations, vacancies, shear band and twinning structure should be observed and described during the propagation process of micro cracks. In addition, the free energy curves of different processes are drawn and discussed in order to explain the different behaviors of the crystal in the propagation of cracks. Simulation results show that the propagation behavior of micro cracks can be closely associated with the initial stress state. It is found that the propagation behavior mainly occurs in the $\langle 0\bar{1}1 \rangle(111)$ slip system. Besides, the crystal orientation has a significant effect on the mechanism of activation and evolution. In the pre-stretching system, slip dislocation is induced near the micro-crack tip, and then its slide in $[0\bar{1}1]$ direction will cause the cleavage of a certain crystal plane, and promote the micro cracks to extend. However, to a certain level, the propagating direction of the micro-crack tip will turn to another slip direction $[10\bar{1}]$. As a result, zigzag edge appears. By contrast, in the pre-shear system, the tip of the micro crack propagates in a cleavage mode, and results in the appearance of slip dislocation $[10\bar{1}]$ near the micro-crack tip. Afterwards, the motion of slip dislocation promotes the production of vacancies. And owing to the aggregation and combination of vacancies, secondary cracks form and propagate in the process that follows. At the same time, in a pre-deviatoric system, the micro crack propagates forward with direct cleavage of $[10\bar{1}]$ slip direction near the micro-crack tip until the single crystal sample fractures. Furthermore, no slip dislocation appears during the whole process. The mechanism of micro-crack tip propagating behavior varies with crystal orientation. When the crystal orientation angle is lower, the micro-crack tip prefers to produce slip dislocation around it, and the following dislocation slide will induce vacancies, then a secondary crack also forms because of the aggregation and combination of vacancies. On the other hand, when the aggregation degree is higher, the micro-crack tip is inclined to directly propagate in a cleavage mode, and its propagating direction is nearly perpendicular to the stretching direction.

Keywords: phase field crystal, micro-crack propagation, stress state, orientation angle

PACS: 81.07.-b, 81.40.NP, 81.40.Jj

DOI: [10.7498/aps.64.178102](https://doi.org/10.7498/aps.64.178102)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51474176, 51274167).

[†] Corresponding author. E-mail: chenzh@nwpu.edu.cn