

钽、铁、钨三种体心立方金属裂纹的多尺度模拟及韧脆性分析

杜浩 倪玉山

Multiscale simulations and ductile-brittle analyses of the atomistic cracks in BCC Ta, Fe and W

Du Hao Ni Yu-Shan

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 196201 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.196201

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.196201>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I19>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于聚乙烯/蒙脱土纳米复合材料微观结构的力学性能模拟

Simulation of mechanical properties based on microstructure in polyethylene/montmorillonite nanocomposites

物理学报.2016, 65(19): 196202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.196202>

聚酰亚胺/钽铌酸钾纳米颗粒复合材料结构与机械性能分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation study on the structure and mechanical properties of polyimide/ $\text{KTa}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$ nanoparticle composites

物理学报.2015, 64(12): 126202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.126202>

层厚度和应变率对铜-金复合纳米线力学性能影响的模拟研究

Effects of layer thickness and strain rate on mechanical properties of copper-gold multilayer nanowires

物理学报.2015, 64(1): 016201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.016201>

界面旋转角对双晶镁力学性质影响的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of effect of tilt angle on mechanical property of magnesium bicrystals

物理学报.2014, 63(4): 046201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.046201>

纳米铜薄膜塑性变形中空位型缺陷形核与演化的分子动力学研究

Generation and evolution of vacancy-type defects in nano-Cu films during plastic deformation by means of molecular dynamics

物理学报.2013, 62(19): 196201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.196201>

钽、铁、钨三种体心立方金属裂纹的多尺度模拟及 韧脆性分析*

杜浩 倪玉山†

(复旦大学航空航天系, 上海 200433)

(2016年6月14日收到; 2016年7月7日收到修改稿)

采用多尺度准连续介质法计算模拟了钽、铁、钨三种体心立方 (body-centered-cubic, BCC) 金属的 I 型裂纹断裂过程. 观察了加载过程中裂纹尖端区域原子的位错、孪晶等塑性变形现象, 以及裂纹的脆性开裂和扩展现象. 模拟结果表明, 不同 BCC 金属材料的裂纹在相同的加载下有不同韧脆性表现. 在一定变形范围内, 钽裂纹主要表现出的是裂纹尖端附近区域原子的位错和形变孪晶等塑性变形现象; 铁裂纹在变形过程中先后表现出了塑性变形和脆性扩展现象, 与实验结果吻合; 钨裂纹在变形过程中则主要表现出脆性扩展现象. 计算了三种金属材料的广义层错能曲线, 得到其不稳定层错能; 并分别用两种不同的韧脆性准则, 对三种材料断裂模型的韧脆性行为进行分析, 计算分析结果与模拟结果一致, 从而验证了模拟结果的正确性.

关键词: 多尺度准连续介质法, I 型裂纹, 位错, 层错能

PACS: 62.20.mt, 62.25.-g, 02.70.-c

DOI: 10.7498/aps.65.196201

1 引言

金属材料的结构强度和变形破坏涉及各类工程问题的安全性和稳定性, 一直以来都是相关领域的研究重点. 裂纹是材料常见的缺陷之一, 常常会引起材料的断裂破坏, 对材料强度有重要影响. 自从 20 世纪以来, 对裂纹和断裂现象的宏观研究已经取得了显著成果^[1]. 近年来, 随着纳米材料的发展, 宏观尺度的裂纹和断裂分析已不能满足研究需要, 微观原子尺度的裂纹和断裂机理研究成为了发展方向. 从微观尺度看, 不同类型的材料, 在裂纹扩展、断裂破坏现象和机理上都有着较大的差异. 目前, 国内外已有不少研究者对面心立方 (face-centered-cubic, FCC) 金属的裂纹问题做了研究, 如 Miller 等^[2]研究了 Ni 晶体裂纹扩展过程中的晶界迁移等现象; Cui 和 Beom^[3]对单晶 Cu 的边界裂纹问题进行了分子动力学模拟研究; 刘晓波

等^[4]对 Al 的裂纹扩展行为进行了分子动力学模拟并探讨了加载速度等因素的影响. 对于体心立方 (body-centered-cubic, BCC) 金属裂纹问题的微观研究, 目前主要集中在常见的金属铁 (Fe), 如 Inga 等^[5]用准连续介质法模拟了 Fe 的 I 型裂纹断裂破坏; 吴映飞等^[6]做了体心立方 Fe 裂纹扩展的结构演化研究. 而对于很多其他 BCC 金属, 微观断裂问题的研究目前还较少. 不同 BCC 金属材料之间断裂问题的微观差异与联系, 也有待更加深入详细的研究分析.

BCC 金属中, 除了最常见的铁 (Fe), 钽 (Ta) 和钨 (W) 也是工业生产和工程中重要的金属材料. 金属钽具有出色的力学性能, 凭借其耐高温、高强度等优点, 被广泛地用于化工、电子设备、高档仪器等领域. 金属钨由于具有高熔点、低溅射等特点, 并且与核聚变反应中等离子体具有良好的兼容性, 被用于核聚变反应堆的结构材料. 因此对这几种 BCC 金属材料的断裂破坏研究具有重要意义. 分子动

* 国家自然科学基金 (批准号: 11572090) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: niyushan@fudan.edu.cn

力学法 (molecular dynamics method, MD) 是目前原子尺度材料断裂行为研究中常用的数值模拟方法. 然而由于计算条件的限制, MD 方法所计算的模型尺度较小, 易受到边界效应等干扰. 相比之下, 多尺度模拟方法更有优势, 既能精确观测关键区域的原子行为, 又能计算较大尺度的模型. 本文采用多尺度方法中的准连续介质法 (quasi-continuum method, QC), 对纳米级 BCC 金属 Fe, Ta, 和 W 的 I 型裂纹扩展问题进行计算模拟, 观察和研究裂纹尖端塑性变形现象和裂纹的脆性扩展现象. 并从层错能等原子微观机理角度出发, 分析比较不同 BCC 材料的断裂韧脆特性.

2 计算模型

QC 方法是由 Tadmor^[7] 提出的一种多尺度数值计算方法, 该方法耦合了连续介质尺度的有限元方法和原子尺度的分子动力学方法, 在变形梯度较小的区域, 只选取一部分代表性原子 (representative atoms) 作为计算节点, 其他原子的位移通过代表原子的线性插值求得; 在变形梯度较大的区域则保留原始原子密度, 选取每个原子作为计算节点. 并且在计算过程中可以实现网格自适应, 加强了计算精度. QC 方法在精确模拟关键区域原子运动的基础上, 减少了计算原子数, 提高了计算效率, 从而能够实现模拟较大规模原子系统的目的.

图 1 为本文计算模拟的 I 型裂纹模型和加载示意图. 模型在 x 和 y 方向的尺寸分别为 200 nm 和 200 nm, z 方向取周期性的边界条件. 整个模型的尺寸比通常的分子动力学模型大一个数量级, 可以较好地克服边界效应, 得到更为准确的计算结果. 对裂纹尖端附近的区域, 采用了原子尺度模拟, 精确反映裂纹尖端附近的原子形貌. 边界条件施加在远离裂纹尖端的上下两侧区域. 通过控制应力强度因子 K_I , 使边界区域产生位移, 每加载一步应力强度因子增加 $0.005 \text{ MPa}\cdot\text{m}^{0.5}$. 每次加载后, 执行一次系统能量最小化, 求得每个代表性原子的平衡位置. 为了使模拟结果便于比较, 三种材料计算模型选取的晶向均为: $x[100], y[011], z[0\hat{1}1]$.

本文基于嵌入原子势 (embedded-atom method, EAM) 对原子系统进行描述. 金属 Ta 原子间的作用势采用 Li 等^[8] 提出的 EAM 原子势; 金属 Fe 采用 Mendeleev 等^[9] 提出的 EAM 原子势; 金

属 W 采用 Finnis 和 Sinclair^[10] 提出的 EAM 原子势. 用 QC 方法结合各金属 EAM 原子势计算获得的材料参数以及实验结果如表 1 所列. 由表 1 可知, 由 EAM 势计算所得的材料参数与实验结果^[11] 非常吻合, 确保了模拟的可靠性.

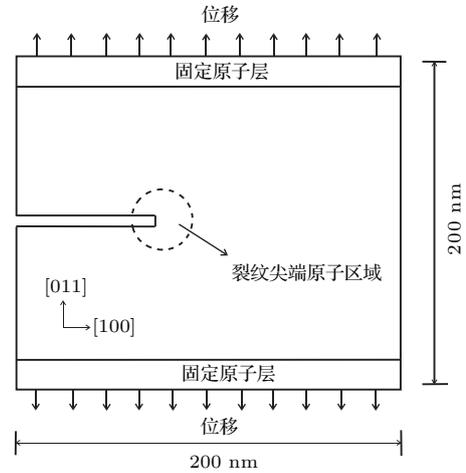


图 1 计算模型示意图

Fig. 1. Schematic of the crack model and loading.

表 1 基于 EAM 原子势计算和实验获得的材料参数
Table 1. Material parameters based on EAM potential and experiments.

材料参数		$a/\text{\AA}$	C_{11}/GPa	C_{12}/GPa	C_{44}/GPa
Ta	EAM	3.30	248	144	86
	Experiment	3.30	266	158	87
Fe	EAM	2.85	243	145	116
	Experiment	2.85	245	148	119
W	EAM	3.16	244	148	125
	Experiment	3.16	251	149	128

3 模拟结果

3.1 钽 (Ta)

BCC 金属 Ta 的 I 型裂纹模拟结果的微观原子图如图 2 所示. 观察每个加载步的原子图可以发现, 随着加载的进行, 当应力强度因子 K_I 达到 $1.49 \text{ MPa}\cdot\text{m}^{0.5}$ (后文应力强度因子单位均相同, 故省略) 时, 裂纹尖端附近的原子开始发生滑移. 滑移导致上下原子面产生了错排, 从而导致了不全位错的产生 (见图 2(a)). 首先形成的是不全位错 $\frac{a}{8}[110]$ (其中 a 为材料晶格常数, 下同). 继续加载, 原子滑移加剧, 位错由裂纹尖端向裂纹上下两侧方

向发射,如图2(b)所示.位错的形成和发射说明了裂纹尖端产生了塑性变形.裂纹尖端的能量通过位错释放,延缓了裂纹的扩展.在此塑性变形阶段中,可观察到裂纹尖端原子位错的形成、运动以及位错反应现象.由初始的不全位错 $\frac{a}{8}[110]$,拓展为三个分位错,然后合成为一个全位错 $\frac{a}{2}[11\hat{1}]$.全位错合成的表达式如下:

$$\frac{a}{8}[110] + \frac{a}{4}[11\hat{2}] + \frac{a}{8}[110] \rightarrow \frac{a}{2}[11\hat{1}]. \quad (1)$$

当应力强度因子加载到1.85时,裂纹尖端附近的原子形貌如图2(c)所示.此时裂纹尖端的上下两侧分别产生了2个原子层和3个原子层厚度的形变孪晶带.两侧孪晶带形成于 $\{112\}$ 面,是BCC金属常见的孪晶面.孪晶带随着离裂纹尖端的距离的

增加而逐渐变细并消失.

随着加载的进行,上下两侧的孪晶带都继续扩大,其中裂纹下侧扩展的速度要明显大于上侧,如图2(d)所示.直到应力强度因子加载到2.8,裂纹尖端已经形成了两条宽度分别达到5个和8个原子层厚度的孪晶带,而裂纹并没有发生明显的扩展和开裂,如图2(e)所示.

由以上模拟结果的原子图像可见,形变孪晶的产生是Ta裂纹尖端在加载过程中最主要的变形现象.孪晶带的形成和扩展吸收了外力功,这部分能量主要储存于孪晶和孪晶界面处,因此起到了对裂纹尖端的钝化作用,阻碍了裂纹的开裂.裂纹总体呈现很强的韧性行为.

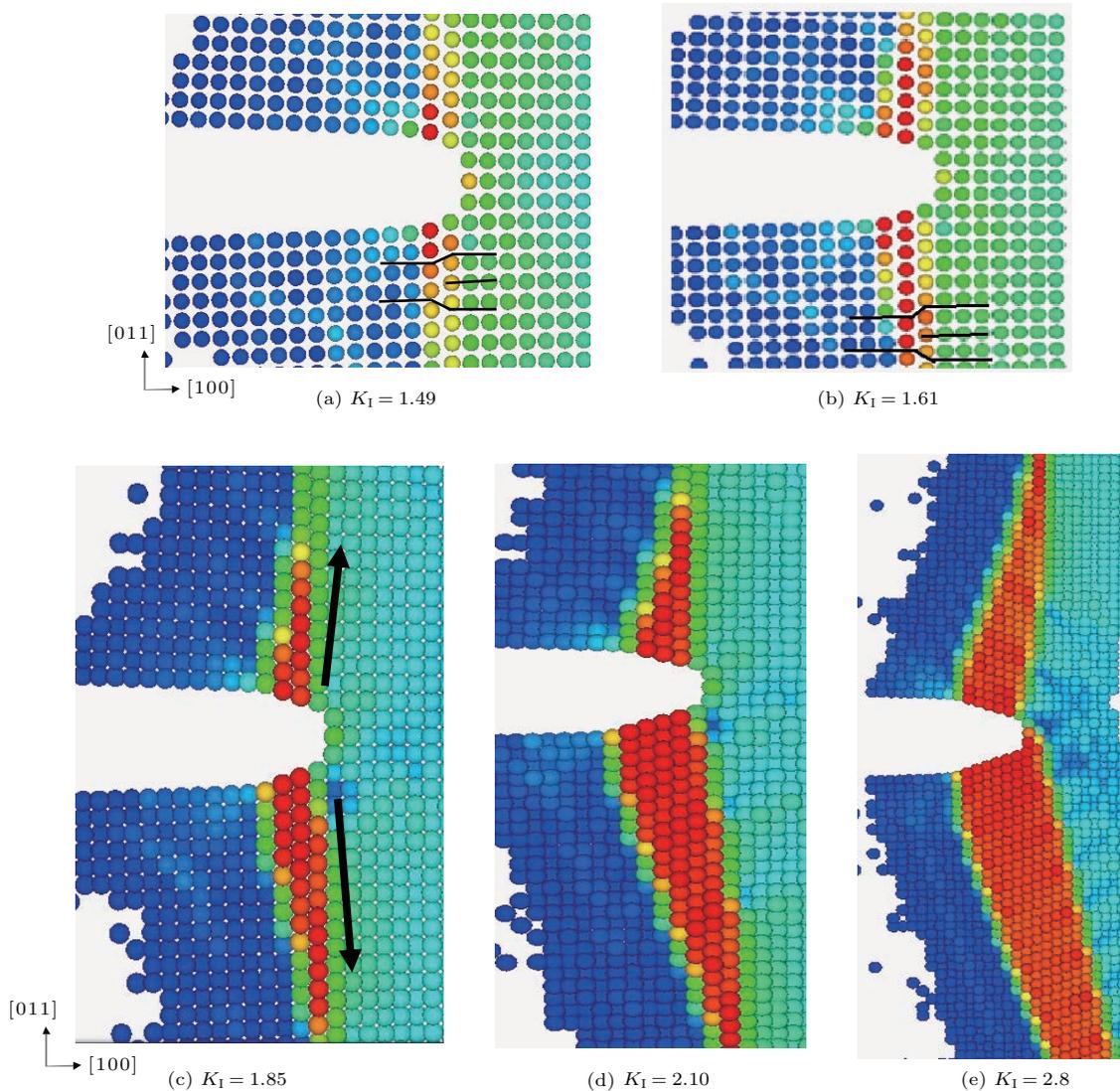


图2 (网刊彩色) Ta裂纹加载过程原子图

Fig. 2. (color online) The atomic figure of crack development process of Ta.

3.2 铁(Fe)

BCC金属Fe的I型裂纹模拟结果的微观原子图如图3所示. 通过各计算步的微观原子图可以发现, 随着加载的进行, 裂纹最尖端的部分原子开始发生了滑移. 当应力强度因子 K_I 达到1.35时, 裂纹尖端首先形成了不全位错 $\frac{a}{8}[\hat{1}\hat{1}0]$, 如图3(a)所示. 随着加载的进行, 位错数量增加并向上下两侧发射, 主要以全位错 $\frac{a}{2}[\hat{1}\hat{1}1]$ 储存在晶体内部. 当 K_I 达到1.52时, 裂纹尖端上下两侧 $\{112\}$ 面开始形成

了明显的孪晶带, 如图3(b)所示. 当 K_I 达到1.71时, 裂纹第一次发生了扩展, 开始向裂纹前端方向开裂, 如图3(c)所示. 随着位移继续加载, 裂纹继续扩展. 而扩展方向发生了一定的改变, 开始朝下侧孪晶带的孪晶界的方向偏移, 大约于裂纹方向成 40° 角, 如图3(d)所示. 与此同时, 两侧的孪晶带也都逐渐扩大. 裂纹的扩展与孪晶带扩大同时进行. 当应力强度因子达到2.8时, 裂纹已开裂了大约10个原子层的距离, 同时裂纹尖端发生了明显的钝化, 如图3(e)所示.

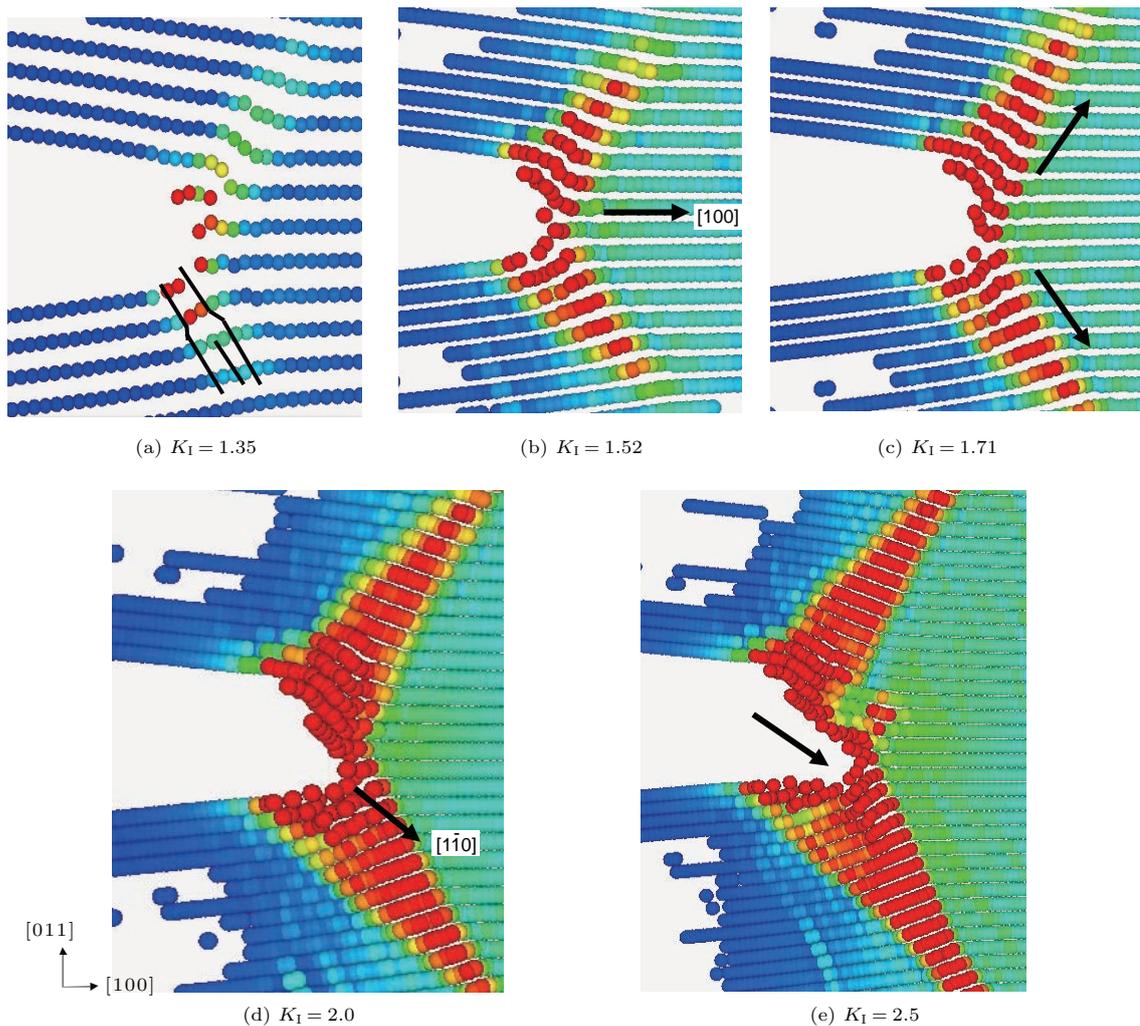


图3 (网刊彩色) Fe裂纹加载过程原子图

Fig. 3. (color online) The atomic figure of crack development process of Fe.

可见, 在Fe的该裂纹模型加载过程中, 塑性变形与脆性扩展开裂同时存在. 在初始加载阶段, 裂纹尖端附近的塑性变形是主要现象. 在裂纹尖端首先出现位错, 随后在裂纹上下两侧形成孪晶带. 继续加载, 裂纹开始发生开裂. 起先裂纹向正前方扩

展了一定的距离, 随后裂纹并未继续沿初始方向扩展, 扩展方向发生了改变, 向下侧孪晶带的孪晶界偏移. 造成该现象的原因是初始裂纹所在的 $\{0\hat{1}1\}$ 面的能量壁垒较大, 在前期阻碍了裂纹的扩展, 因此裂纹尖端先产生了位错孪晶等塑性变形. 当载荷

突破临界值后, 裂纹开始向前扩展. 但由于初始裂纹所在的 $\{0\bar{1}1\}$ 面表面能较大, 而 $\{110\}$ 面是 BCC 金属的易滑移面, 其表面能比 $\{0\bar{1}1\}$ 面要小, 因此裂纹并未一直沿初始方向扩展, 而是倾向于沿表面能较小的方向扩展, $\{110\}$ 面成为了裂纹后续扩展的新方向. 此后裂纹的扩展与孪晶带的扩大同时进行. 从整个过程的原子构型可以看出, 在整个加载过程中, 孪晶界一直处于运动的状态之中, 然而裂纹尖端始终处在孪晶和基体的交界处. 随着裂纹扩展距离的增加, 可以观察到裂纹的尖端逐渐发生钝化. 从裂纹尖端逐渐扩大的孪晶带可以看出, 在裂纹扩展的同时形变孪晶带也在吸收能量, 将一部分外力功转变为裂纹尖端的塑性形变能, 减缓了裂纹的扩展. Michal 等^[12]做了 BCC 金属 Fe 的 I 型裂纹断裂模拟实验, 在实验结果中观察到了裂纹尖端的位错孪晶等塑性变形、裂纹的脆性开裂以及裂纹尖端开裂面的钝化等现象, 与本文模拟结果相吻合.

3.3 钨(W)

BCC 金属 W 的 I 型裂纹模拟结果的微观原子图如图 4 所示. 在初始加载阶段, 裂纹尖端始终处于弹性变形阶段, 如图 4(a) 所示. 当应力强度因子 K_I 达到 1.31 时, 裂纹最前方的四个原子的金属键率先发生断裂, 裂纹产生开裂, 开始向前方扩展, 如图 4(b) 所示. 经过短暂的进一步加载, 当应力强度因子达到 1.46 时(图 4(c)), 裂纹再次向前发生非常明显的扩展. 裂纹扩展的方向与裂纹初始方向 $[100]$ 相近, 并且断裂的原子面较为规则, 这表明此晶向下裂纹在初始扩展时表现出较强的脆性断裂特征. 随着加载的进行, 裂纹继续向前快速扩展, 扩展方向有一定的改变, 但并不明显, 大约于裂纹初始方向成 15° 角. 当加载到 $K_I = 2.8$ 时, 裂纹已经向前扩展了相当长的距离, 并且在加载的后期在裂纹附近的不同位置可观察到几处较为明显的孪晶带, 如图 4(d) 所示.

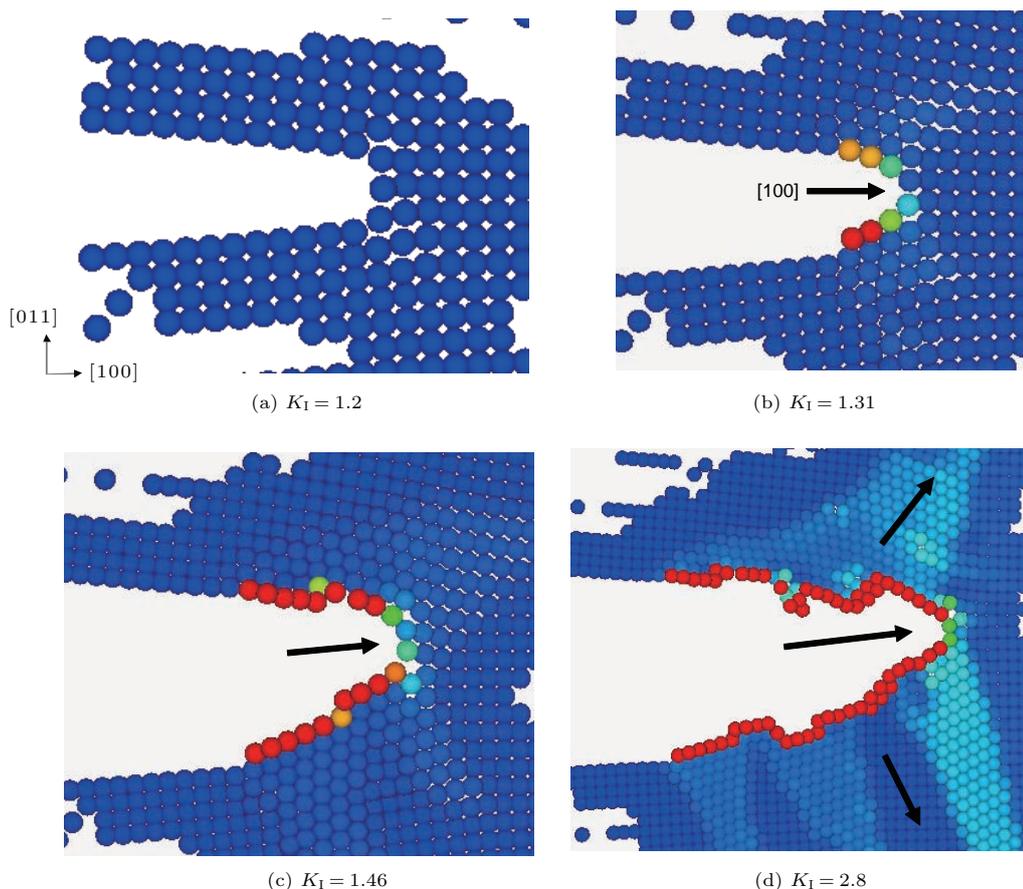


图 4 (网刊彩色) W 裂纹加载过程原子图

Fig. 4. (color online) The atomic figure of crack development process of W.

由模拟结果可知, W 裂纹在加载过程中主要表现出脆性断裂现象. 在裂纹尖端出现开裂之前, 未见有位错或形变孪晶的产生. 在裂纹尖端开裂后, 裂纹沿着与初始裂纹方向相近的方向扩展, 扩展方向明确, 速度较快. 与 Fe 相比, W 的裂纹扩展方向并没有向表面能较小的 $\{110\}$ 原子面方向发生明显的改变, 只是与初始裂纹方向偏移了一个小角度. 可见, 对 W 而言, 初始裂纹所在原子面的表面能并不足以阻碍裂纹的扩展, 因此裂纹的拓展偏向于沿裂纹初始方向进行. 在裂纹扩展一定距离后, 裂纹两侧才开始伴随着出现了孪晶带等塑性变形现象, 说明 W 的层错能势垒要明显大于表面能势垒.

4 讨论

4.1 层错能的计算

多尺度模拟结果显示, 位错和孪晶等现象是各金属材料在发生断裂破坏前的主要变形特征. 目前已有的研究表明, 金属材料的位错孪晶等微观变形破坏机理与其层错能密切相关. 例如 Rice 和 Beltz^[13] 研究发现材料断裂的应力强度因子是不稳定堆垛层错能 (unstable stacking fault energy) 的函数; Tadmor 和 Hai^[14] 指出材料内部形变孪晶的产生与不稳定孪晶能和不稳定堆垛层错能的比值有关. Vitek^[15] 在研究面心立方晶体时提出了广义层错 (generalized stacking fault, GSF) 能的概念. 将完整晶体沿滑移面分成两部分, 两部分晶体沿滑移面相对移动一滑移矢量 \mathbf{u} , 晶体在单位滑移面积上的能量增量即广义层错能. 目前已有研究者利用不同方法获得了多种金属的广义层错能曲线^[16,17], 其中以 FCC 金属居多, 但对于 BCC 金属的计算较少.

为进一步研究 BCC 金属裂纹尖端变形破坏的机理, 本文利用 EAM 对 Ta, Fe, W 这三种金属的层错能进行了计算, 得到了这三种金属在本文晶向下发生均匀剪切变形形成孪晶带时的广义层错能变化曲线. 图 5 为广义层错能计算模型示意图, 其中图 5(a) 为初始时的原子系统, 其能量为 E_0 . 计算广义层错能时, 使原子系统的上半部分相对下半部分产生剪切位移 Δx (如图 5(b) 所示), 此时系统能量为剪切位移的函数 $E(\Delta x)$. 该滑移过程中原子系统单位面积增加的能量 $\{E(\Delta x) - E(0)\}/A$ 随剪切位移 Δx 的变化曲线即为广义层错能曲线, 其

中 A 为剪切面的面积. 原子模型系统在 xy 面内的尺寸取为 $10 \text{ nm} \times 10 \text{ nm}$, 沿 z 方向取为周期性边界条件.

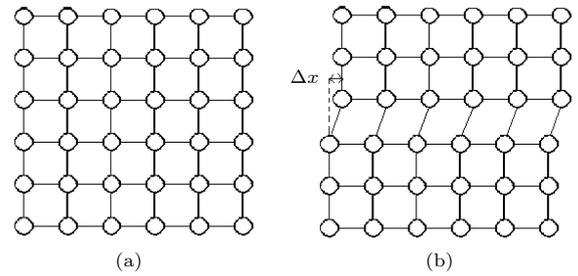


图 5 广义层错能计算的原子模型示意图

Fig. 5. Schematic of the stacking fault energy calculation model.

计算得到的 3 种材料在 $\{0\bar{1}1\}$ 面沿 $[001]$ 方向滑移一个周期的广义层错能曲线如图 6 所示.

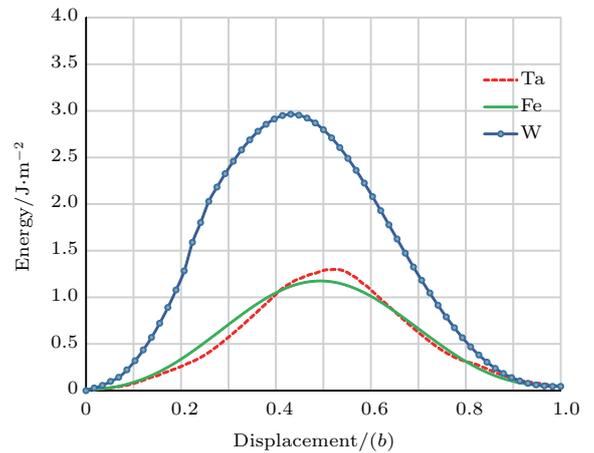


图 6 (网刊彩色) Ta, Fe, W 的广义层错能曲线

Fig. 6. (color online) Generalized stacking fault energy curve of Ta, Fe, W.

从图 6 中可以看出, 在一个滑移周期内, 这三种 BCC 金属的广义层错能曲线大致趋势相近, 呈单峰状. 广义层错能首先从 0 开始逐渐增大, 在 $1/2$ 滑移矢量左右达到峰值, 随后又逐渐减小直至 0 附近. 该曲线趋势表明, 原子在该晶向下发生滑移时, 只存在一个能量势垒, 因此原子层易滑移一个全位错矢量, 在单晶内部形成全位错, 而难以形成单层稳定的堆垛层错. 单层原子滑移后, 在该面上仍然为正常的堆垛次序, 而不存在层错结构. 广义层错能曲线体现出了原子位错滑移时所需克服的能量势垒, 根据曲线的峰值数据, 可以得到这三种金属不稳定层错能的估计值, 如表 2 所列.

表2 Ta, Fe, W的不稳定层错能
Table 2. Unstable stacking fault energy of Ta, Fe, W.

材料名称	Ta	Fe	W
不稳定层错能/ $\text{J}\cdot\text{m}^{-2}$	1.34	1.21	2.96

4.2 韧脆性分析

从三种金属材料的断裂模拟结果可以看出,不同材料的裂纹在相同加载下会表现出不同的韧脆特性.在I型裂纹模型加载下,材料的韧性主要表现为裂纹尖端附近位错的产生、形核和发射,以及形变孪晶带的生成和扩大.而脆性主要体现在裂纹的开裂和扩展.对不同材料韧脆特性的研究一直是材料科学研究的重点之一.本文分别利用了两种不同韧脆性理论模型,对Ta, Fe, W三种材料I型裂纹的韧脆特性做了计算分析.

4.2.1 基于韧脆临界判据的分析

Rice^[18]在对裂纹尖端位错形核的研究中发现,在微观尺度下临界应力强度因子与材料的层错能有关,可以写成不稳定层错能(unstable stacking fault energy, γ_{us})的函数.由经典断裂力学理论可知,对于I型裂纹,临界裂纹扩展力 G 由材料的泊松比 ν 、剪切模量 μ 和临界应力强度因子 K_{IC} 决定,如(2)式所示:

$$G_c = \frac{(1-\nu)K_{\text{IC}}^2}{2\mu}. \quad (2)$$

将临界应力强度因子 K_{IC} 用Rice提出的层错能函数代入,可得临界裂纹扩展力的另一表达式,如(3)式所示:

$$G'_c = 8 \frac{1+(1-\nu)\tan^2\theta}{(1+\cos\varphi)\sin^2\varphi} \gamma_{\text{us}}, \quad (3)$$

其中 θ 为裂纹初始方向与裂纹扩展方向的夹角, φ 为裂纹所在原子面与滑移面的夹角.

根据Griffith断裂理论,临界裂纹扩展力 G 由材料的表面能(surface energy, γ_s)决定,如(4)式所示:

$$G_c = 2\gamma_s. \quad (4)$$

对比Rice和Griffith的临界裂纹扩展力公式可知:Rice的临界裂纹扩展力是材料层错能的函数,反映了裂纹发生位错形核的能量临界值;Griffith

的临界裂纹扩展力公式是材料表面能的函数,反映的是裂纹发生脆性开裂的能量临界值.因此,在实际裂纹问题中,若裂纹扩展力 G 先达到临界值 G'_c ,即 $G_c > G'_c$,裂纹将发生位错形核;反之裂纹将先发生脆性开裂.

考虑 $G_c > G'_c$ 的情况:

$$2\gamma_s > 8 \frac{1+(1-\nu)\tan^2\theta}{(1+\cos\varphi)\sin^2\varphi} \gamma_{\text{us}}, \quad (5)$$

$$\frac{\gamma_s}{\gamma_{\text{us}}} > 4 \frac{1+(1-\nu)\tan^2\theta}{(1+\cos\varphi)\sin^2\varphi}. \quad (6)$$

即当材料表面能与不稳定层错能的比值满足(6)式时,裂纹会先形成位错形核,后发生脆性扩展;否则裂纹将先产生脆性开裂,后形成位错形核.

根据Ta, Fe, W三种金属材料的表面能数据^[19]及不稳定层错能计算值,可对本文模拟的三种材料断裂模型进行该韧脆判据的计算,计算结果如表3所列.

表3 三种材料韧脆性的Rice判据
Table 3. The Rice ductile-brittle criterion of Ta, Fe, W.

材料名称	Ta	Fe	W
$\frac{\gamma_s}{\gamma_{\text{us}}}$	2.51	2.20	1.31
$4 \frac{1+(1-\nu)\tan^2\theta}{(1+\cos\varphi)\sin^2\varphi}$	1.95	2.12	3.20

由表3可见,根据该理论判据的计算结果,对于金属Ta和金属Fe,满足(6)式,即 $G_c > G'_c$,裂纹将先产生塑性变形,后发生开裂.对于金属W, $G_c < G'_c$,裂纹将先发生开裂,后产生塑性变形.该结论与三种材料的模拟结果均相符,从而验证了模拟结果的正确性.

4.2.2 基于韧脆参数的分析

在经典宏观断裂力学理论中,Griffith^[1]用材料的表面能建立了裂纹脆性断裂的能量判据.为了进一步解释裂纹断裂破坏的微观机理,Rice^[18]从原子尺度研究裂纹尖端的力学行为,引入了不稳定层错能.不稳定层错能反映了原子间发生位错滑移所需克服的能量势垒,与材料的韧性密切相关.因此材料的表面能和层错能是影响裂纹断裂破坏的两大内在因素;而外界因素,则是裂纹尖端的应力场.图7为裂纹尖端极坐标系下的应力示意图.

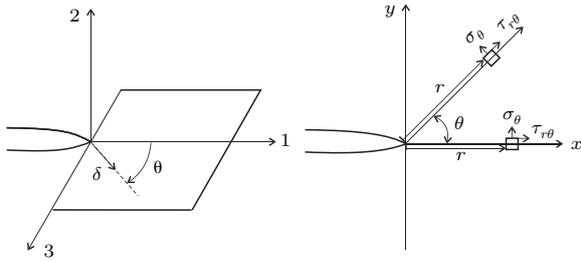


图7 裂纹尖端应力分布示意图

Fig. 7. Schematic of the stress field of crack tip.

根据断裂力学理论^[20], 极坐标系下I型裂纹尖端的应力的函数表达式为

$$\begin{cases} \sigma_r = \frac{K_I}{4\sqrt{2\pi r}} \left(5 \cos \frac{\theta}{2} - \cos \frac{3\theta}{2} \right), \\ \sigma_\theta = \frac{K_I}{4\sqrt{2\pi r}} \left(3 \cos \frac{\theta}{2} + \cos \frac{3\theta}{2} \right), \\ \tau_{r\theta} = \frac{K_I}{4\sqrt{2\pi r}} \left(\sin \frac{\theta}{2} + \sin \frac{3\theta}{2} \right). \end{cases} \quad (7)$$

考虑裂纹沿着裂纹尖端某一方向发生了脆性扩展的情况. 裂纹尖端上下两侧的原子在外力作用下发生原子键断裂而分开, 在此过程中起主导作用的外力是裂纹尖端的拉应力 σ_θ , 因此拉应力 σ_θ 是裂纹脆性开裂的主要外界动力因素. 另一方面, 根据Griffith断裂理论, 材料的表面能 γ_s 是形成新裂纹表面的能量势垒, 阻碍了裂纹表面的扩展, 是裂纹脆性开裂的内在“阻力”因素. 因此, 裂纹尖端拉应力与材料表面能的比值 $\alpha \left(\alpha = \frac{\sigma_\theta}{\gamma_s} \right)$ 可以定性表征裂纹的脆性强弱, 该值越大, 裂纹越容易发生脆性开裂.

对于裂纹尖端的塑性变形现象, 裂纹尖端密排原子层间的原子发生了相对剪切运动, 就会导致位错的产生, 部分位错沿着相邻原子面相继运动进一步形成了形变孪晶. 若原子易滑移方向与裂纹方向成 θ 角, 那么裂纹尖端剪切力 $\tau_{r\theta}$ 就是导致位错和形变孪晶的主要外界动力因素. 另一方面, 根据Rice的理论, 不稳定层错能 γ_{us} 是原子发生滑移所需克服的能量势垒, 是裂纹尖端发生塑性变形的内在“阻力”因素. 因此, 裂纹尖端剪切力与材料不稳定层错能的比值 $\beta \left(\beta = \frac{\tau_{r\theta}}{\gamma_{us}} \right)$ 可以定性表征裂纹的韧性的强弱, 该值越大, 裂纹越容易发生塑性变形.

为了能更加直观地表示材料的韧脆性, Mei等^[21]结合以上几种影响材料韧脆性的主要因素,

引入了一个无量纲的参数 ξ 来表征材料I型裂纹的韧脆性. 该参数的定义为“脆性”与“韧性”之比, 即

$$\xi \triangleq \frac{\alpha}{\beta} = \frac{\sigma_\theta \gamma_{us}}{\tau_{r\theta} \gamma_s}. \quad (8)$$

将 σ_θ , γ_{us} , $\tau_{r\theta}$ 和 γ_s 的表达式代入, 可得:

$$\xi = \frac{\gamma_{us}}{\gamma_s} \frac{3 \cos \frac{\theta}{2} + \cos \frac{3\theta}{2}}{\sin \frac{\theta}{2} + \sin \frac{3\theta}{2}} \quad (9)$$

$$= \frac{\gamma_{us}}{\gamma_s} \cdot \cot \left(\frac{\theta}{2} \right). \quad (10)$$

根据该韧脆参数 ξ 的大小, 我们可以直观地比较不同材料裂纹的韧脆性. ξ 越大, 裂纹越容易发生脆性开裂; ξ 越小, 裂纹越倾向于发生塑性变形.

由韧脆参数的计算(10)式可知, 材料I型裂纹的韧脆特性与表面能、不稳定层错能和裂纹角度有关. 对于同一种材料, 当表面能和层错能相同时, 裂纹的韧脆特性将由裂纹初始方向和开裂方向决定. 在一个周期内, \cot 函数的图像呈单调递减, 由此可知, 当初始裂纹方向与裂纹易扩展方向较接近时, 裂纹将表现出较强的脆性特征. 反之, 当初始裂纹方向与裂纹易扩展方向成较大角度时, 裂纹将更倾向于表现出韧性.

根据Ta, Fe, W三种金属材料的表面能数据^[19]和不稳定层错能计算值, 以及本文的I型裂纹断裂模拟结果, 可以计算得到这三种BCC金属材料的韧脆参数 ξ , 如表4所列.

表4 三种材料的韧脆参数 ξ
Table 4. The ductile-brittle parameter ξ of Ta, Fe, W.

材料名称	表面能 γ_s /J·m ⁻²	层错能 γ_{us} /J·m ⁻²	滑移角度 θ	韧脆参数 ξ
Ta	3.37	1.34	45°	0.96
Fe	2.66	1.21	45°	1.10
W	3.89	2.96	15°	5.78

由以上韧脆参数 ξ 的数值, 可以判断这三种金属材料I型裂纹的韧脆性, 按脆性由强到弱依次为W, Fe, Ta. 对照本文所做的三种金属I型裂纹断裂模拟结果, Ta裂纹在加载范围内主要表现出裂纹尖端位错形核、产生形变孪晶带等塑性变形现象, 未发生明显的裂纹脆性扩展; Fe裂纹在加载范围内前期主要表现为塑性变形, 后期发生了一定的脆性扩展; W裂纹在加载范围内则主要表现为明显的

脆性扩展. 可见, 该韧脆参数 ξ 对裂纹韧脆性的评价与本文原子模拟结果相吻合, 进一步验证了模拟结果的正确性.

5 结 论

利用多尺度准连续介质(QC)方法, 能够模拟计算较大尺度的裂纹问题, 消除边界效应的影响, 更接近于实际问题. 本文用QC方法对Ta, Fe, W这三种BCC结构金属的I型裂纹扩展问题进行了计算模拟, 观察到了加载过程中裂纹尖端附近微观结构的变化过程, 并得到以下结论.

Ta, Fe, W三种材料的I型裂纹模型在相同加载下, 会表现出不同的韧脆性特点. 在一定加载范围内, Ta的裂纹体现出较强的韧性, 裂纹的变化特点主要表现为裂纹尖端产生原子的位错滑移和形变孪晶等塑性变形现象. Fe裂纹在加载的初期表现出一定的韧性, 在裂纹尖端同样产生了位错滑移和形变孪晶带, 但在加载后期, 裂纹开始发生脆性开裂, 同时裂纹尖端发生钝化, 与实验结果吻合. W裂纹在整个加载过程中均体现出了较强的脆性特点, 在裂纹尖端尚未形成明显的位错孪晶时, 裂纹就已经发生了开裂.

通过对简单原子层滑移模型的计算, 得到了Ta, Fe, W三种金属在一个原子滑移周期内的广义层错能曲线及其不稳定层错能. 基于不稳定层错能, 计算了Rice提出的韧脆性临界判据, 结果表明, Ta和Fe的裂纹将先表现出塑性变形, 而W的裂纹将先发生脆性开裂. 该结论与模拟结果相符, 验证了模拟结果的正确性. 此外, 结合裂纹尖端应力场, 计算了Ta, Fe, W三种材料I型裂纹模型的韧脆参数. 根据韧脆参数可直观评价三种材料的韧脆特性, 脆性从强到弱依次为W, Fe, Ta, 与模拟结果一致, 进一步验证了模拟结果的正确性.

本文的模拟计算和韧脆性分析结果加深了对常用BCC金属的微观断裂机理和特性的了解, 对

实际工程中纳米材料的选用和结构设计具有重要参考意义.

参考文献

- [1] Giffith A A 1924 *Proceedings of the First Congress of Applied Mechanics* Delft 1924 p55-63
- [2] Miller R, Ortiz M, Phillips R 1998 *Engineer. Fract. Mech.* **61** 427
- [3] Cui C B, Beom H G 2014 *Mater. Sci. Engineer. A* **609** 102
- [4] Liu X B, Xu Q J, Liu J 2014 *The Chinese J. Non-ferrous Metals* **24** 1408 (in Chinese) [刘晓波, 徐庆军, 刘剑 2014 中国有色金属学报 **24** 1408]
- [5] Inga R V, Erling O, Christian T, Diana F 2011 *Mater. Sci. Engineer. A* **528** 5122
- [6] Wu Y F, Wang C Y, Guo Y F 2005 *Prog. Nat. Sci.* **15** 206 (in Chinese) [吴映飞, 王崇愚, 郭雅芳 2005 自然科学进展 **15** 206]
- [7] Tadmor E B 1996 *The Quasicontinuum Method* (Rhode: Brown University Press) pp8-20
- [8] Li Y, Siegel D J, Adams J B 2003 *Phys. Rev. B* **67** 125101
- [9] Mendeleev M I, Han S, Srolovitz D J, Ackland G J, Sun D Y, Asta M 2003 *Philosophical Magazine* **83** 3977
- [10] Finnis M, Sinclair E 1984 *Philosophical Magazine A* **50** 45
- [11] Featherston F H, Neighbours J R 1963 *Phys. Rev.* **130** 1324
- [12] Michal L, Anna M, Alena U, Jaroslav P, Pavel L 2016 *Int. J. Fatigue* **87** 63
- [13] Rice J R, Beltz G E 1994 *J. Mech. Phys. Solids* **42** 333
- [14] Tadmor E B, Hai S 2003 *Mech. Phys. Solids* **51** 765
- [15] Vitek V 1968 *Philosophical Magazine* **18** 773
- [16] Zimmerman J A, Gao H J, Abraham F F 2000 *Model. Simul. Mater. Sci. Engineer.* **8** 103
- [17] Lu G, Kioussis 2000 *Phys. Rev. B* **62** 3099
- [18] Rice J R 1992 *Mech. Phys. Solids* **40** 239
- [19] Wang S G, Tian E K, Lung C W 2000 *J. Phys. Chem. Solids* **61** 1295
- [20] Mei J F, Ni Y S, Li J W 2011 *Int. J. Solids Struct.* **48** 3054
- [21] Wang Z Q, Chen S H 2009 *Advanced Fracture Mechanics* (Beijing: Science Press) p14-16 (in Chinese) [王自强, 陈少华 2009 高等断裂力学 (北京: 科学出版社) 第 14—16 页]

Multiscale simulations and ductile-brittle analyses of the atomistic cracks in BCC Ta, Fe and W*

Du Hao Ni Yu-Shan[†]

(Department of Aeronautics and Astronautics, Fudan University, Shanghai 200433, China)

(Received 14 June 2016; revised manuscript received 7 July 2016)

Abstract

In order to better understand the fracture mechanism of body-centered-cubic (BCC) metal, the multiscale quasi-continuum method (QC) is employed to analyze the nano-sized mode I cracks of three kinds of BCC metal materials, i.e., Ta, Fe and W. The plastic deformation near the crack tip and the brittle cleavage process are both investigated. The simulation result shows that there are different ductile-brittle behaviors in the cracks of different BCC materials. In the same loading range, the plastic deformation, such as dislocation nucleation and emission, stacking faults and twinning, is the main phenomenon for the crack of BCC-Ta. For the crack of BCC-Fe, plastic deformation and brittle cleavage are observed successively. At the initial stage, plastic deformation is dominant, which is similar to the crack of Ta. As loading increases, the crack begins to propagate, which differs from the crack of Ta. At first, the crack propagates along the initial direction $[001]$, but then turns to $[0\bar{1}1]$ as the surface energy of $\{110\}$ is lower than that of $\{0\bar{1}1\}$. With the crack propagating, the crack tip is blunted by the plastic deformation, which is consistent with experimental results. As for BCC-W, the crack is found to propagate as brittle cleavage without plastic deformation at first. And the brittle cleavage is dominant all the time, which is a significant difference between W and the other two materials. In addition to the atomistic simulation, some theoretical calculations are also performed to analyze the ductile-brittle behaviors of the cracks. By an atomic slip model, the generalized stacking fault curves of BCC Ta, Fe and W are generated, which exhibit the unstable stacking fault energies of these materials. Based on the unstable stacking fault energy, two theoretical ductile-brittle criteria are analyzed. For the Rice-criterion, the result shows that the dislocation condition is met before cleavage for Ta and Fe, while for W the cleavage occurs before dislocation. For the ductile-brittle-parameter criterion, the result shows that Ta is the most ductile one in the three materials, followed by Fe, and W is the least ductile but the most brittle one. The analysis results of the two theoretical criteria both coincide well with the atomic simulation result, which well validates the simulation and fracture mechanisms.

Keywords: multiscale quasi-continuum method, mode I crack, dislocation, stacking fault energy

PACS: 62.20.mt, 62.25.-g, 02.70.-c

DOI: 10.7498/aps.65.196201

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11572090).

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