

基于准连续介质方法模拟纳米多晶体 Ni 中 裂纹的扩展*

邵宇飞[†] 王绍青

(中国科学院金属研究所, 沈阳材料科学国家(联合)实验室, 沈阳 110016)

(2010 年 1 月 6 日收到; 2010 年 1 月 22 日收到修改稿)

通过准连续介质方法模拟了纳米多晶体 Ni 中裂纹的扩展过程. 模拟结果显示: 裂纹尖端的应力场可以导致晶界分解、层错和变形孪晶的形成等塑性形变; 在距离裂纹尖端越远的位置, 变形孪晶越少; 在裂纹尖端附近相同距离处, 层错要远多于变形孪晶. 这反映了局部应力的变化以及广义平面层错能对变形孪晶的影响. 计算了裂纹尖端附近区域原子级局部静水应力的分布. 计算结果表明: 裂纹前端晶界处容易产生细微空洞, 这些空洞附近为张应力集中区, 并可能促使裂纹沿着晶界扩展. 模拟结果定性反映了纳米多晶体 Ni 中的裂纹扩展过程, 并与相关实验结果符合得很好.

关键词: 多尺度模拟, 纳米材料, 裂纹, 变形孪晶

PACC: 6185, 6146, 4630N

1. 引 言

近年来, 纳米金属和合金由于其独特的力学性能, 引起了材料研究者极大的兴趣. 与同成分的粗晶材料相比, 纳米金属和合金表现出更高的强度和硬度, 更好的低温超塑性变形能力, 以及更出色的耐摩擦性能^[1, 2]. 但是, 多数纳米金属材料的拉伸延伸率很低. 即使对于 Cu, Ni 等面心立方金属, 除了个别实验结果外, 很多方法制备出来的纳米样品, 其拉伸延伸率也很小, 比相应的粗晶材料小得多^[2, 3]. 这种有限的拉伸塑性变形能力在很大程度上限制了材料的实际应用. 为了深入理解这种有限拉伸塑性对应的微观机理, 人们尝试通过实验手段^[4-6]和计算机模拟方法^[7-10]来研究纳米金属的断裂行为.

分子动力学方法可用于裂纹尖端形变问题的研究^[11, 12], 然而这种计算机模拟方法一般需要建立一个较大的模型, 以尽量避免边界条件的影响. Abraham 等^[13]曾经成功模拟韧性断裂过程中数百条位错的萌生以及相互作用过程. 但是他们的模拟不得不采用近 10^9 个原子, 而且需要运行在最先

进的计算机上. 近年来 Tadmor 和 Hai^[14]发展出一种多尺度模拟方法——准连续介质方法 (the quasicontinuum method, 简称 QC), 并通过它研究了单晶 Al 中裂纹尖端附近变形孪晶的形核过程. 针对另一种弹塑性形变问题, 王华滔等^[15]采用 QC 模拟了 Al 薄膜的纳米压痕过程; Shimokawa 等^[16]通过 QC 研究了 Al 双晶模型中裂纹尖端发射的位错与晶界的相互作用过程; Miller 等^[17]采用 QC 分析了 Ni 双晶模型中脆性和韧性断裂行为; Zhou 等^[18]通过 QC 分析了单晶 Ni 裂纹尖端附近原子级应力分布情况.

人们研究晶体 Ni 的断裂问题, 是由于 Ni 具有简单的面心立方结构和广泛的工业应用背景, 被视为理想的模型材料. 例如, Shan 等^[5]在纳米多晶体 Ni 的原位拉伸实验中发现裂纹前端的晶粒可以快速地形成结块, 并且这种结块存在块间和块内两种断裂模式; Xie 等^[6]观察到纳米多晶体 Ni 的疲劳裂纹尖端附近存在剪切带.

Swygenhoven 等^[19]通过分子动力学方法研究了纳米多晶体 Ni 的晶界结构以及界面能. 许多实验和模拟结果已经证实晶界可以通过界面迁移、界面滑移以及发射和吸收位错等塑性变形方式影响纳米

* 国家重点基础研究发展计划(批准号:2006CB605103)资助的课题.

[†] E-mail: yfshao@imr.ac.cn

金属的力学行为. 对于纳米面心立方金属, Swygenhoven 等^[20]提出广义平面层错能 (generalized planar fault energies, 简称 GPFE) 的概念, 以此分析晶界发射位错问题. Wu 和 Zhu^[21]在纳米多晶体 Ni 的实验中观察到来自于晶界的分位错可以在晶粒内形成层错和变形孪晶, 并且认为 GPFE 和晶粒尺寸会影响到变形孪晶的形核. 裂纹尖端附近的局部应力很高, 强烈的局部应力可以造成晶界发射位错和变形孪晶的形成^[22]. 最近, Zhou 和 Qu^[10]通过分子动力学模拟发现在纳米多晶体 Ni 裂纹附近添加孪晶可以提高材料的断裂韧性. 晶界结构和晶界相对于裂纹的取向也会对裂纹的扩展造成影响^[22]. Farkas 等^[7]曾经通过分子动力学模拟了纳米多晶体 Ni 中张开型裂纹的扩展过程, 他们观察到完全的沿晶断裂过程以及裂纹尖端附近存在位错和变形孪晶^[22], 然而他们没有进一步研究裂纹尖端附近的应力场对这些缺陷的影响. 另一方面, 尽管人们通过实验手段对纳米多晶体 Ni 的断裂行为做了一系列的工作, 然而对于原子尺度上的细节以及裂纹尖端的应力场对局部塑性形变的影响仍然缺乏足够的理解. 因此, 通过先进的计算机模拟方法深入研究纳米多晶体 Ni 的断裂行为仍然是十分必要的.

本文通过 QC 模拟了纳米多晶体 Ni 中裂纹的扩展过程. 模拟结果定性地反映了晶界对裂纹扩展的影响, 同时还观察到裂纹尖端附近局部应力的变化以及变形孪晶与层错之间的竞争. 我们的结果与相关的实验结果做了对比, 符合得较好.

2. 模型与方法

2.1. QC 简介

QC 是一种连续介质力学方法与晶格静力学方法相结合的多尺度模拟方法^[23, 24]. 该方法选取模型中一些原子作为代表性原子, 以减少整个系统的自由度. 整个模型可以分为两种区域: a) 连续介质区域, 即模型中不重要的广大区域, 通过以代表性原子为节点的有限三角单元近似计算原子位移和能量; b) 晶格静力学区域, 即模型中值得关心的区域, 严格按照晶格静力学方法求解. 随着三角单元形变梯度的变化, 两种不同区域可以自动调整, 以准确捕捉缺陷运动的原子级细节. 在每一次加载之后, 整个系统按照一定算法进行能量弛豫, 得到稳

定结构.

2.2. QC 的数学描述

假设存在一个含有 N 个原子的系统, 其初始构型下第 i 个原子位置为

$$\mathbf{X}_i = \mathbf{X}_0 + l_i \mathbf{A}_1 + m_i \mathbf{A}_2 + n_i \mathbf{A}_3, \quad (1)$$

其中, \mathbf{X}_0 为第 i 个原子所属晶粒的参考原子位置, l_i, m_i, n_i 为整数, $\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \mathbf{A}_3$ 为 Bravais 晶格矢量.

加载过程中当前构型下第 i 原子位置为

$$\mathbf{x}_i = \mathbf{X}_i + \mathbf{u}_i, \quad (2)$$

其中, \mathbf{u}_i 为第 i 个原子的位移.

选择 N_{rep} 个代表性原子, 系统位移场近似为

$$\mathbf{u}^h(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_{N_{\text{rep}}}) \approx \mathbf{u}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_N), \quad (3)$$

系统总能量近似为

$$E^{\text{tot}, h} \approx \sum_{a=1}^{N_{\text{loc}}} n_a E_a(\mathbf{u}^h) + \sum_{b=1}^{N_{\text{nl}}} n_b E_b(\mathbf{u}^h), \quad (4a)$$

$$N_{\text{loc}} + N_{\text{nl}} = N_{\text{rep}}, \quad (4b)$$

其中, N_{loc} 是连续介质区域内的代表性原子总数, N_{nl} 是晶格静力学区域内的代表性原子总数. E_a (或 E_b) 为相应区域内第 a (或第 b) 个代表性原子的能量, n_a (或 n_b) 为能量权重因子. QC 可以采用嵌入原子势方法计算代表性原子能量, 有

$$E_i = 1/2 \sum_{j \neq i} V_{ij}(r_{ij}) + F_i(\bar{\rho}_i), \quad (5a)$$

$$\bar{\rho}_i = \sum_{j \neq i} \rho_j(r_{ij}), \quad (5b)$$

其中, V_{ij} 是原子核间相互作用对势函数, r_{ij} 是原子 i 与其近邻 j 之间的距离, F_i 可以理解为依赖于电子云密度的嵌入能, ρ_j 为近邻 j 对原子 i 的电子云密度贡献.

当需要考虑外力对系统所做的功时, 系统总能量可以表示为

$$\Phi = E^{\text{tot}, h} - \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{rep}}} f_{\alpha} \mathbf{u}_{\alpha}, \quad (6)$$

按照一定算法, 反复迭代直到满足下式:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{u}_{\alpha}} = 0. \quad (7)$$

最后求得稳定结构所对应的位移场、失稳力以及系统总能量等必要参数. 具体可见文献[25].

2.3. 含有裂纹的纳米多晶体 Ni 模型

在本文的工作中, 我们建立了一个含有裂纹的纳米多晶体 Ni 模型. 模型在纸面内采用非周期性边界条件, 大小为 $400 \text{ nm} \times 400 \text{ nm}$, 沿垂直纸面方向

采用周期性边界条件. 所有晶粒沿垂直于纸面方向的取向均为 $[\bar{1}10]$, 因此模型沿 $[\bar{1}10]$ 晶向上只取一个重复单元的长度. 对于当前采用的势函数, 其大小为 0.2489 nm. 裂纹长度约为 194 nm, 宽度约为 2.5 nm. 如图 1(b) 所示, 裂纹尖端附近区域为晶格静力学区域, 大小为 $36 \text{ nm} \times 36 \text{ nm}$, 包含 61 个晶粒, 平均晶粒直径为 5 nm, 采用 Voronoi 算法构建^[26]. 远离裂纹尖端的区域为连续介质区域, 见图 1(a). 为了保持两种区域界面耦合处能量分布的连续性, 整个连续介质区域被一个单晶体所填充. 这里我们假设连续介质区域承受弹性形变, 并且不考虑其各向异性对于裂纹扩展的影响. Voronoi 多晶体

中每个晶粒绕 z 轴旋转一定角度, 角度大小是随机的. 整个模型若完全采用分子动力学方法处理, 需要数百万个原子, QC 仅采用了约 3×10^4 个代表性原子 (即三角单元的节点), 大大减少了所需要的自由度. 值得注意的是, 裂纹尖端的形貌会对裂纹的扩展行为有影响. 通过模拟单晶 Al 中裂纹尖端附近区域内的形变过程, Hai 和 Tadmor^[27] 发现有的形貌会导致全位错发射, 有的则会导致变形孪晶的形成. 然而在本文的模拟中, 我们更关心晶界对裂纹扩展的影响, 而没有研究裂纹形貌的不同所造成的差别.

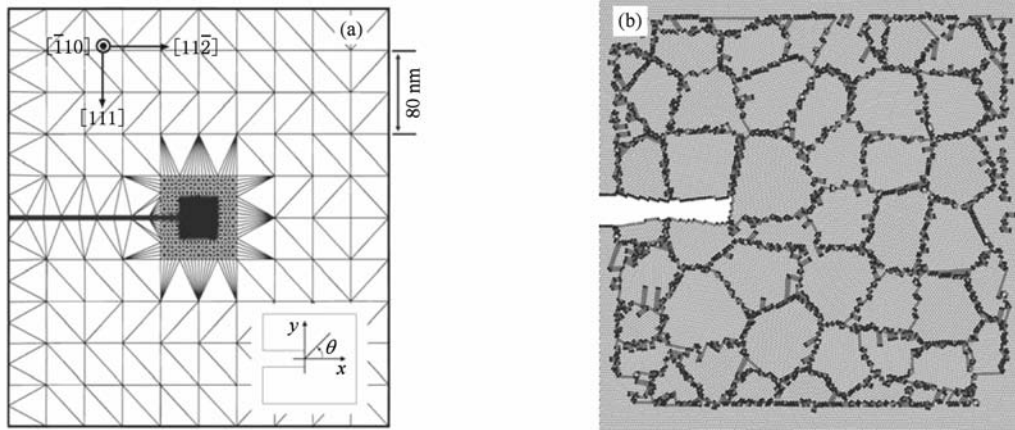


图 1 含有裂纹的纳米多晶体 Ni 准连续介质模型 (a) 模型全景图, 裂纹尖端附近区域为晶格静力学区域, 远离裂纹的部分为连续介质区域, 左上角标示着连续介质区域的晶体取向, 右下角为坐标示意图; (b) 放大后的晶格静力学区域

模型的加载过程通过控制边界原子的位移来实现. 在几种断裂模式中, 张开型断裂是最危险的. 在这种模式下, 坐标为 (x, y) 的原子可由如下公式计算位移^[28]:

$$u_x = \frac{K}{8G} \sqrt{2r} \left[(2\kappa - 1) \cos \frac{\theta}{2} - \cos \frac{3\theta}{2} \right], \quad (8a)$$

$$u_y = \frac{K}{8G} \sqrt{2r} \left[(2\kappa + 1) \sin \frac{\theta}{2} - \sin \frac{3\theta}{2} \right], \quad (8b)$$

其中 u_x, u_y 是位移的 x, y 分量, K 为应力强度因子, r 为该原子到坐标原点的距离, G 为多晶 Ni 的剪切模量, $\kappa = (3 - \nu)/(1 + \nu)$ (ν 为多晶 Ni 的 Poisson 比), θ 为该原子相对于 x 轴正向的旋转角, 如图 1(a) 所示. 这里我们取 $G = 76.0 \text{ GPa}$, $\nu = 0.312$ ^[29]. 加载步长由应力强度因子控制, $\Delta K = 0.008 \text{ MN} \cdot \text{m}^{-3/2}$. 每次加载后, 由共轭梯度算法进行能量弛豫, 一旦系统所受的总失稳力小于 $1.602 \times 10^{-3} \text{ nN}$, 系

统就被认为达到平衡状态. 由于模型沿垂直纸面方向的尺寸很小, 可以把该模型按平面应力问题处理, 按如下 Irwin 的脆性断裂理论^[28] 估算应变能量释放率:

$$G = \frac{1}{E} K^2, \quad (9)$$

这里, G 为应变能量释放率, E 为杨氏模量. 对于多晶 Ni, $E = 199.5 \text{ GPa}$ ^[29].

2.4. 结果显示与应力分析

本文模拟中所用到的 Ni 原子间相互作用势函数, 是 Mishin 等^[30] 发展的嵌入原子势. 我们采用可视化软件 Atomeye^[31] 结合公共近邻分析方法 (common neighbor analysis)^[32] 来分析裂纹附近结构的变化. 具有面心立方 (FCC) 局部结构的原子被标记成白色; 具有密排六方 (HCP) 局部结构的原子被

标记成灰色;不具有前两者局部结构的原子,如位错核等缺陷区域内的原子,被标记为黑色.在面心立方金属中,单层 HCP 原子构成孪晶界;两层紧邻的 HCP 原子构成内禀层错;两层 HCP 原子中间隔一层 FCC 原子,这样的结构为外禀层错.为了分析裂纹尖端附近应力对裂纹扩展的影响,我们根据粗粒化局部应力概念(coarse-grained atomistic local stress)^[33],按照如下公式计算了原子尺度上的应力分布:

$$\sigma_i^{\alpha\beta} = \frac{1}{\Omega} \left\{ \sum_l \frac{P_l^\alpha P_l^\beta}{m_l} \Lambda_l + \frac{1}{2} \sum_{k \neq l} \left(-\frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) \frac{r^\alpha r^\beta}{|\mathbf{r}|} \eta_{lk}(\mathbf{r}) \Big|_{r=r_{lk}} \right\}, \quad (10)$$

$$\sigma_i^{\text{hydro}} = -\frac{1}{3}(\sigma_i^{11} + \sigma_i^{22} + \sigma_i^{33}), \quad (11)$$

其中 Ω 为平均体积,是以原子 i 为中心一定半径的球体积,这里取 Ω 的半径为 0.5 nm ^[34], α 和 β 表示 Descartes 坐标分量, P_l 和 m_l 是原子 l 的动量和质量, Λ_l 是阶跃函数,即当原子 l 落在 Ω 所在球体内时为 1,否则为零, φ 为原子间相互作用势函数, $\eta_{kl} = \eta_{lk}$ 为原子 k 与原子 l 间键长落在 Ω 所在球体内的分数.在 QC 中,因为采用静力学方法求解能量最小值,所以(10)式的第一项忽略不计. σ_i^{hydro} 为原子 i 附近静水应力.

3. 结果与讨论

3.1. 载荷和能量曲线

图 2 给出了加载过程中得到的载荷和能量曲线.随着 K 的增加,载荷与应变能逐渐变大.当 K 达

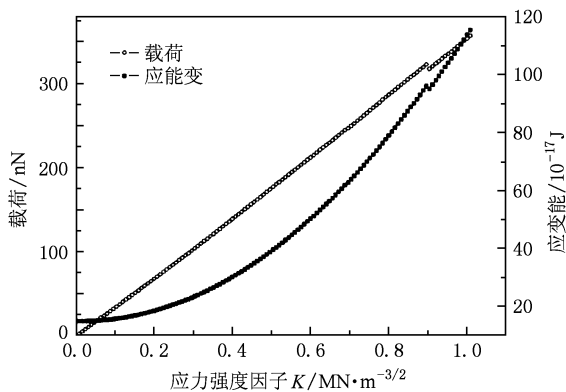


图 2 应力强度因子-载荷和应力强度因子-应变能曲线

到 $0.905 \text{ MN} \cdot \text{m}^{-3/2}$ 时,两条曲线突然下降,随后继续上升.两条曲线的突然降落现象,反映了裂纹尖端附近应变能和应力的释放.根据(9)式计算的 Irwin 应变能释放率约为 $4.11 \text{ J} \cdot \text{m}^{-2}$,与文献[7]中的 $4.6 \text{ J} \cdot \text{m}^{-2}$ 符合得很好.根据图 2 中应变能曲线估算出的能量释放率约为 $6.04 \text{ J} \cdot \text{m}^{-2}$ (释放的能量 $1.007 \times 10^{-17} \text{ J}$ 除以扩展面积,扩展面积为约 6.7 nm 的扩展长度与模型厚度 0.2489 nm 的乘积),约为(9)式结果的 1.5 倍.如果考虑到平均值约为 $1.47 \text{ J} \cdot \text{m}^{-2}$ (文献[19]的结果为 $1.60 \text{ J} \cdot \text{m}^{-2}$) 的晶界能的影响,则 Irwin 值减至 $2.64 \text{ J} \cdot \text{m}^{-2}$,甚至小于图 2 曲线估算值的一半.这是由于裂纹尖端附近区域发生了塑性变形.相对于 Irwin 值,多释放的那部分能量转变为塑性变形所做的功.尽管如此,这里的结果表明塑性功与表面能相当,脆性断裂的特征非常明显.

3.2. 裂纹附近的层错与变形孪晶

图 3 给出了裂纹扩展前后裂纹尖端附近区域结构变化.当 K 达到 $0.897 \text{ MN} \cdot \text{m}^{-3/2}$ 时,可以看到裂纹尖端附近晶粒内有层错和变形孪晶形成.注意图 3(a) 中黑色线圈处的晶界.为了便于对比,我们将图 1(b) 所示的结构置于图 3(a) 的右上角.可以看到黑色线圈处一条最初完全无序的大角晶界在裂纹尖端应力场的作用下发生了解析,变成了一组扩展位错.这样的结构也可以被看做一个内部含有层错的小晶粒.该晶粒与其前后两个相邻晶粒之间的晶界,则为两条小角晶界.通过这样的晶界运动,裂纹尖角处的应力得到释放.对比图 1(b),黑色线圈附近的裂纹尖角形貌并没有较大变化.图 3(b) 显示了裂纹沿晶界扩展过程.扩展后,裂纹尖端附近区域发生了更强烈的塑性变形.我们统计了扩展前后裂纹尖端附近区域内变形孪晶与层错的数目,并分析了孪晶或层错所在晶粒到裂纹尖端的距离对这些缺陷的影响.如图 4 所示,我们发现扩展后层错与变形孪晶的数目多于扩展前.前文我们提到,根据图 2 得到的能量释放率要大于根据(9)式得到的 Irwin 值.多释放出来的那部分能量,被用于层错和孪晶的形核和运动,以及其他局部塑性形变过程.仔细观察图 4(b),可以看到距离裂纹尖端越远,变形孪晶越少.在裂纹尖端附近相同距离处,层错要远多于变形孪晶.这说明在本文的模拟中,变形孪晶的形成需要更高的局部应力.

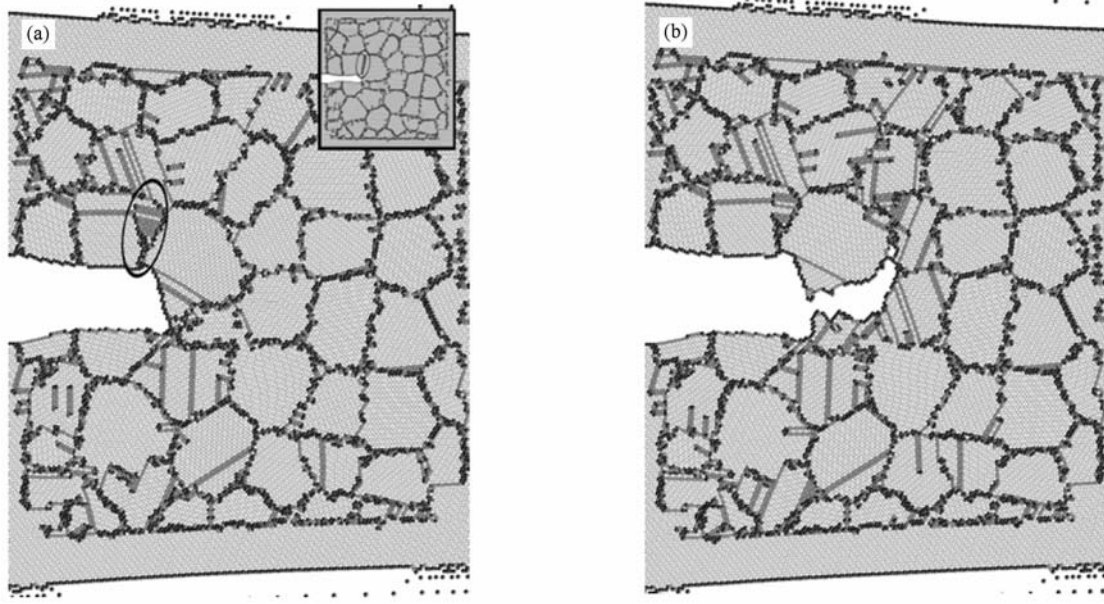


图3 裂纹扩展前后尖端附近区域的细微结构 (a) $K=0.897 \text{ MN}\cdot\text{m}^{-3/2}$, 扩展前; (b) $K=0.905 \text{ MN}\cdot\text{m}^{-3/2}$, 扩展后

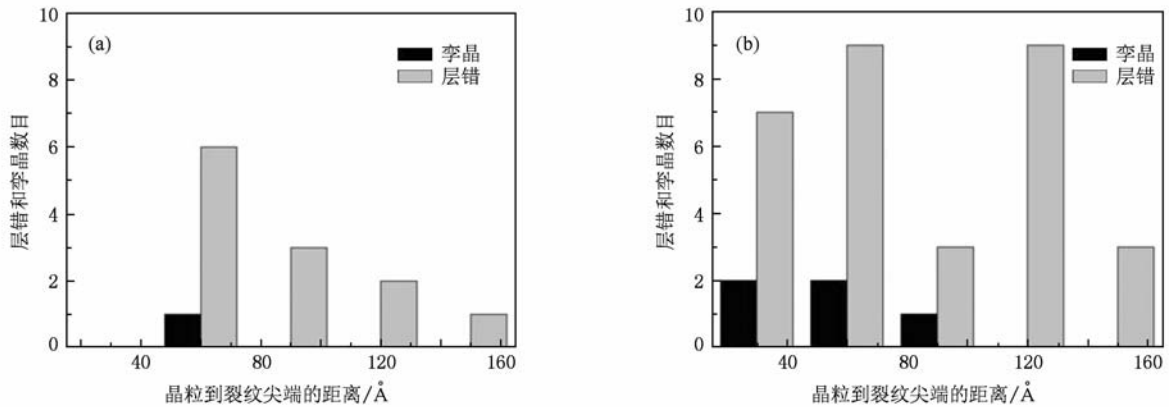


图4 裂纹扩展前后尖端附近区域内层错与变形孪晶的数目 横坐标表示层错或孪晶所在晶粒到裂纹尖端的距离 (a) $K=0.897 \text{ MN}\cdot\text{m}^{-3/2}$, 扩展前; (b) $K=0.905 \text{ MN}\cdot\text{m}^{-3/2}$, 扩展后

3.3. GPFE 的影响

层错与变形孪晶之间的竞争关系可以通过 GPFE 加以分析. GPFE 中存在三个重要能量参数: 非稳堆垛层错能 (unstable stacking fault energy) γ_{usf} , 层错能 (stacking fault energy) γ_{sf} , 和非稳孪晶层错能 (unstable twinning fault energy) γ_{utf} . 我们通过 QC 计算了本文所采用的 Ni 势函数所对应的 GPFE. 如图 5 所示, 建立一个大小为 $30 \text{ nm} \times 30 \text{ nm}$ 的 Ni 单晶模型. 模型中心附近 $30 \text{ nm} \times 15 \text{ nm}$ 的区域按晶格静力学方法处理, 靠近上下边界的部分为连续介质区域. 在纸面内, 晶向 $[\bar{1}1\bar{2}]$ 平行于上下边界, (111) 晶面与上下表面平行. 模型沿垂直于纸面方

向采用周期性边界条件, 其周期长度与上文的多晶模型相同, 为 0.2489 nm . 在计算 GPFE 的过程中, 首先选择模型中间的某一原子面为滑移面, 令滑移面下方的原子固定不动, 同时令滑移面及其上方的原子以固定步长沿 $[\bar{1}1\bar{2}]$ 晶向剪切运动, 再通过 Newton-Raphson 算法进行能量弛豫, 得到稳定结构. 如果令模型做刚性剪切运动, 即不允许内部原子在垂直于剪切方向的平面内移动, 则得到的能量是非弛豫的, 否则会得到弛豫后的能量. 这里令步长为 0.005 nm . 在一次剪切之后, 可以得到 γ_{usf} 和 γ_{sf} , 以及稳定的内禀层错结构. 以滑移面上方相邻晶面为参考面, 按上述步骤继续剪切变形, 则可以得到 γ_{utf} . 在计算能量时, 需要避免表面以及连续介质-晶格静

力学耦合区域的影响. 所以我们只对虚线框内原子进行能量求和, 并将之除以剪切面积, 以得到 GPFE. 表 1 是 QC 以及文献[35]的计算结果.

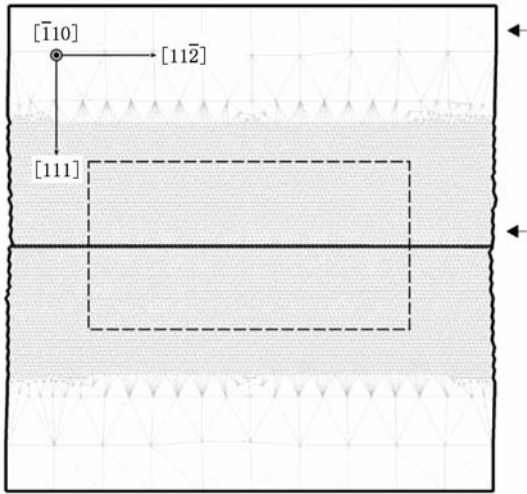


图 5 计算金属 Ni 广义平面层错能的 QC 模型

在本文的模拟中, 层错与变形孪晶之间的竞争受 $(\gamma_{\text{urf}} - \gamma_{\text{sf}}) / \gamma_{\text{ustf}}$ 这一比值的影响. 在向完好晶体内发射一条领头 Shockley 分位错之后, 会形成一条层错. γ_{ustf} 为发射一条这样的领头位错所需要克服的能垒; 在领头位错发射之后, 如果在其滑移面的最近邻晶面内再发射一条 Shockley 分位错, 就会造成变形孪晶的形核 (实际上是形成了外禀层错, 外禀层错可以被视为变形孪晶的胚核), 那么这时需要克服能垒就是 $(\gamma_{\text{urf}} - \gamma_{\text{sf}})$. 对于本文采用的 Ni 势函数, QC 计算出这一比值为 0.82, 与根据第一性原理计算得到的 0.87^[36] 十分接近. 这说明两个能垒相当. 然而, 领头位错的发射会造成应力的释放. 只有当材料中的局部应力足够高, 以至于释放之后的局部

应力仍可以持续地发射 Shockley 位错时, 变形孪晶才会形成. 所以我们看到距离裂纹尖端越远, 变形孪晶越少. 最近 Wu 和 Zhu^[21] 在实验上观察到了 GPFE 和晶粒尺寸对纳米晶体 Ni 中变形孪晶的影响. 我们采用的是二维模型, 不同于 Wu 等的三维等轴晶实验条件. 尽管如此, 我们通过裂纹尖端局部应力的变化, 类似地观察到了 GPFE 对变形孪晶与层错的影响.

表 1 非弛豫/弛豫的广义平面层错能

	$\gamma_{\text{ustf}}^{\text{u}}$		$\gamma_{\text{sf}}^{\text{u}}$		$\gamma_{\text{urf}}^{\text{u}}$	
	$\gamma_{\text{ustf}}^{\text{r}}/\text{mJ}\cdot\text{m}^{-2}$	$\gamma_{\text{ustf}}^{\text{u}}/\text{mJ}\cdot\text{m}^{-2}$	$\gamma_{\text{sf}}^{\text{r}}/\text{mJ}\cdot\text{m}^{-2}$	$\gamma_{\text{sf}}^{\text{u}}/\text{mJ}\cdot\text{m}^{-2}$	$\gamma_{\text{urf}}^{\text{r}}/\text{mJ}\cdot\text{m}^{-2}$	$\gamma_{\text{urf}}^{\text{u}}/\text{mJ}\cdot\text{m}^{-2}$
QC 方法	404	367	129	126	468	428
文献[35]方法	405	—	129	—	—	—

注: 上标“u”表示非弛豫能量, “r”表示弛豫后的能量.

3.4. 应力分析

根据 (10) 和 (11) 式, 我们计算了裂纹尖端附近的静水应力, 见图 6. 图 6(a) 中的白色箭头表明, 裂纹即将扩展前, 在晶界处形成微观孔洞. 由图 3(a) 可知, 该孔洞的形成与位错有关. 来自裂纹尖端表面的位错塞集在晶界, 导致该晶界处原本致密的原子键合状态被破坏, 形成微观孔洞. 最近, Cao 和 Wei^[8] 在纳米晶体 Ni 的分子动力学模拟中发现晶界和三叉晶界容易产生纳米孔洞. 这些纳米孔洞的生长和聚合, 会导致裂纹的形成和传播, 最后造成脆性的沿晶断裂. Kumar 等^[4] 在电沉积纳米 Ni 的拉伸实验中观察到裂纹附近晶粒中存在位错, 裂纹前端晶界内形成孔洞, 并且导致裂纹沿其扩展. 在本文的模拟中, 图 6(a) 表明裂纹前端的孔洞承受着强烈的张应力, 并促使裂纹沿此处扩展, 与 Kumar 等的实验结果符合得很好.

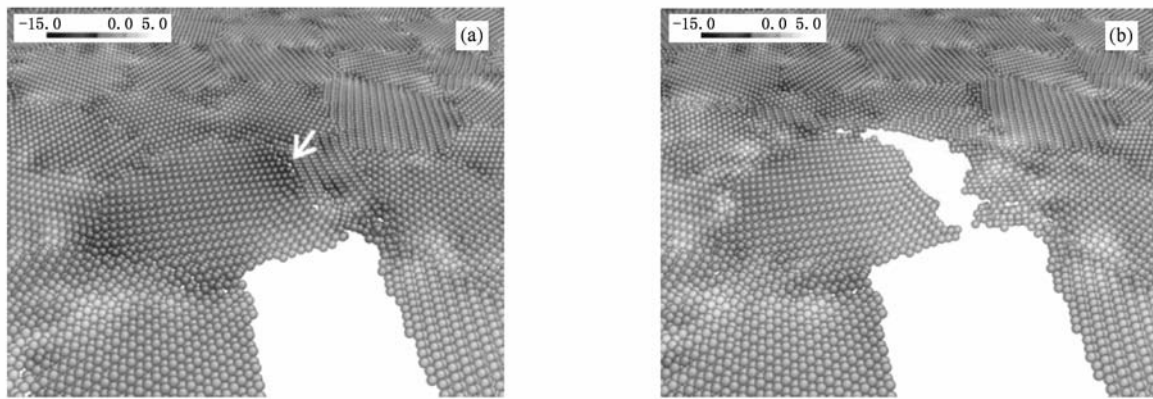


图 6 裂纹扩展前后尖端附近区域的静水应力分布 (单位为 GPa) (a) $K = 0.897 \text{ MN}\cdot\text{m}^{-3/2}$, 扩展前; (b) $K = 0.905 \text{ MN}\cdot\text{m}^{-3/2}$, 扩展后

4. 结 论

本文采用 QC 方法模拟了纳米多晶体 Ni 中裂纹的扩展过程. 模拟结果显示裂纹尖端的应力场可以导致晶界分解、层错和变形孪晶的形成等塑性形变. 我们观察到, 裂纹扩展后层错和变形孪晶的数目要明显多于扩展前. 通过能量曲线计算能量释放率, 并和相应的 Irwin 值比较, 发现 Irwin 值仅相当于能量曲线结果的 40%. 多于 Irwin 值的那部分能量被用于新生成的层错、变形孪晶以及其他承载塑性变形的缺陷. 我们还注意到, 在距离裂纹尖端越远的位置变形孪晶的数目越少; 在裂纹尖端附近相同距离处, 层错要远多于变形孪晶. 这反映了局部应

力的变化以及广义平面层错能对变形孪晶的影响. 最后我们计算了裂纹附近区域原子级局部应力的分布. 计算结果表明, 裂纹前端晶界处的细微孔洞附近区域承受强烈的张应力并促使裂纹沿其扩展. 一系列模拟和实验结果表明, 这种晶界主导的裂纹萌生和扩展机理可能会导致材料在经过有限的塑性应变之后发生脆性断裂, 从而限制了其在工业上的实际应用. 值得注意的是, 我们采用的是静力学模拟, 没有考虑温度的影响. 因此, 我们的结果更适于纳米晶体 Ni 的低温准平衡态断裂过程. 尽管如此, 我们的模拟结果定性地反映了纳米多晶体 Ni 的裂纹扩展过程, 并与 Kumar 等电沉积纳米 Ni 的实验结果符合得较好.

- [1] Meyers M A, Mishra A, Benson D J 2006 *Prog. Mater. Sci.* **51** 427
- [2] Dao M, Lu L, Asaro R J, Hosson J T M, Ma E 2007 *Acta Mater.* **55** 4041
- [3] Zhao Y H, Topping T, Bingert J F, Thornton J J, Dangelewicz A M, Li Y, Liu W, Zhu Y T, Zhou Y Z, Lavernia E J 2008 *Adv. Mater.* **20** 3028
- [4] Kumar K S, Suresh S, Chisholm M F, Horton J A, Wang P 2003 *Acta Mater.* **51** 387
- [5] Shan Z W, Knapp J A, Follstaedt D M, Stach E A, Wiezorek J M K, Mao S X 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 105502
- [6] Xie J J, Wu X L, Hong Y S 2007 *Scripta Mater.* **57** 5
- [7] Farkas D, Swygenhoven H V, Derlet P M 2002 *Phys. Rev. B* **66** 060101
- [8] Cao A J, Wei Y G 2007 *Phys. Rev. B* **76** 024113
- [9] Farkas D, Willemann M, Hyde B 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 165502
- [10] Zhou H F, Qu S X 2010 *Nanotechnology* **21** 035706
- [11] Cao L X, Wang C Y 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 413 (in Chinese) [曹莉霞、王崇愚 2007 物理学报 **56** 413]
- [12] Xie H X, Wang C Y, Yu T, Du J P 2009 *Chin. Phys. B* **18** 251
- [13] Abraham F F, Walkup R, Gao H J, Duchaineau M, Rubia T, Seager M 2002 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **99** 5783
- [14] Tadmor E B, Hai S 2003 *J. Mech. Phys. Solids* **51** 765
- [15] 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]
- [16] Shimokawa T, Kinari T, Shintaku S 2007 *Phys. Rev. B* **75** 144108
- [17] Miller R E, Ortiz M, Phillips R, Shenoy V, Tadmor E B 1998 *Eng. Fracture Mech.* **61** 427
- [18] Zhou T, Yang X H, Chen C Y 2009 *Int. J. Solids Struct.* **46** 1975
- [19] Swygenhoven H V, Farkas D, Caro A 2000 *Phys. Rev. B* **62** 831
- [20] Swygenhoven H V, Derlet P M, Froseth A G 2004 *Nature Mater.* **3** 399
- [21] Wu X L, Zhu Y T 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 025503
- [22] Farkas D, Petegem S V, Derlet P M, Swygenhoven H V 2005 *Acta Mater.* **53** 3115
- [23] Tadmor E B, Ortiz M, Phillips R 1996 *Philos. Mag. A* **73** 1529
- [24] Tadmor E B, Phillips R, Ortiz M 1996 *Langmuir* **12** 4529
- [25] Miller R E, Tadmor E B 2002 *J. Computer-Aided Mater. Design* **9** 203
- [26] Voronoi G Z 1908 *J. Reine Angew. Math.* **134** 199
- [27] Hai S, Tadmor E B 2003 *Acta Mater.* **51** 117
- [28] Sih G C, Liebowitz H 1968 *Fracture: An Advanced Treatise* (Vol. 2) (New York: Academic Press) p67
- [29] Meyers M A, Chawla K K 2009 *Mechanical Behavior of Materials* (2nd Ed) (New York: Cambridge University Press) p114
- [30] Mishin Y, Farkas D, Mehl M J, Papaconstantopoulos D A 1999 *Phys. Rev. B* **59** 3393
- [31] Li J 2003 *Modeling Simul. Mater. Sci. Engng.* **11** 173
- [32] Honeycutt J D, Andersen H C 1987 *J. Phys. Chem.* **91** 4950
- [33] Cormier J, Rickman J M, Delph T J 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 99
- [34] Saramas M, Derlet P M, Swygenhoven H V 2003 *Phys. Rev. B* **68** 224111
- [35] Zimmerman J A, Gao H J, Abraham F F 2000 *Modeling Simul. Mater. Sci. Engng.* **8** 103
- [36] Siegel D J 2005 *Appl. Phys. Lett.* **87** 121901

Quasicontinuum simulation of crack propagation in nanocrystalline Ni *

Shao Yu-Fei[†] Wang Shao-Qing

(*Shenyang National Laboratory for Materials Science, Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016, China*)

(Received 6 January 2010; revised manuscript received 22 January 2010)

Abstract

The propagation process of crack in the nanocrystalline Ni is simulated via the quasicontinuum method. The results show that the stress near the crack tip could prompt the disassociation of grain boundaries, and the formation of stacking faults and deformation twins. Farther from the crack tip, fewer deformation twins can be found. There are more stacking faults than deformation twins in the grains, which approximately have the same distance to the crack tip. The effect on deformation twins from the variation of local stress and generalized planar fault energies is manifested by these results. The distribution of hydrostatic stress on atomic-level around the crack tip is also calculated. It is shown that nanovoids can be easily created in grain boundaries in front of the crack tip. There exists an intense tensile stress state in the grain boundary regions around these nanovoids. As a result of the stress accumulation, the crack propagates along the grain boundaries. Our simulated results qualitatively uncover the propagation process of crack in nanocrystalline Ni, which agrees well with the relevant experimental results.

Keywords: multiscale simulation, nanomaterials, crack, deformation twin

PACC: 6185, 6146, 4630N

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2006CB605103).

[†] E-mail: yfshao@imr.ac.cn