

α -Fe 裂纹的分子动力学研究^{*}

曹莉霞^{1)†} 王崇愚^{2)†}

1) (钢铁研究总院功能材料所, 北京 100081)

2) (清华大学物理系, 北京 100084)

(2006 年 5 月 2 日收到, 2006 年 5 月 31 日收到修改稿)

通过分子动力学方法模拟了 α -Fe 裂纹的单轴拉伸实验中的形变过程, 研究了不同晶体取向裂纹的形变特点和断裂机理, 观察到各种形变现象, 如位错形核和发射, 位错运动, 堆垛层错或孪晶的形成, 纳米空洞的形成与连接等. 计算结果表明, 裂纹扩展是塑性过程和弹性过程相结合的过程, 其中塑性过程表现为由裂尖发射的位错导致的原子切变行为, 而弹性过程的发生则是由无位错区中的原子断键所导致. 同时还研究了 α -Fe 裂纹的形变特点和断裂机理与温度场和应力场的依赖关系.

关键词: 裂纹, 分子动力学模拟, α -Fe

PACC: 6220M, 8140N, 6185

1. 引 言

材料的断裂机理研究是发展高强度、高韧性新型材料的关键因素. 裂纹是影响材料力学性质的主要缺陷之一, 它直接影响着材料的应用前景. 裂纹扩展的动力学问题因此受到专家学者们的广泛关注和研究^[1-3].

固体材料在受外界加载的条件下, 其裂纹尖端原子的局域反应一般表现为脆性断裂(原子键破断)和塑性断裂(位错发射)两种主要的竞争模式. 对于脆性断裂, Griffith 判据^[4]已经给出了很好的解释. 而塑性断裂, 其过程则复杂得多, 它涉及到裂尖处的位错形核, 以及随后的位错运动. Rice 和 Thomson^[5]提出了材料的韧脆判据, 他们通过比较解理扩展(即原子断键)所需的能量释放率和位错形核所需的能量释放率这两个量的大小, 来表征材料的韧脆性. 随后, 基于 Peierls 理论的框架, Rice 及其合作者^[6,7]通过引入一个新的物理量“不稳定堆垛能”, 对裂纹尖端位错成核过程作了严格的描述.

尽管连续介质理论成功地描述了长程应力场下的裂纹行为, 但由于裂尖区域本质上是非线性的, 其扩展尺寸仅仅达到分子尺度, 因此需要用原子模拟的方法^[8-10]来揭示裂尖区域的特征. 近年来, 许多人

都用分子动力学方法(MD)对材料的断裂行为过程进行了模拟研究^[11-18]. Cheung 与 Yip 等人^[11]研究了 Fe 中 $[100][0\bar{1}1]$ 型裂纹扩展问题, 他们发展了原子间相对位移观测方法, 观察到裂尖位错发射现象, 同时对混合型位错进行了原子学分析. Zhou 等人^[12]对塑性晶体 Cu 进行了大规模的三维分子动力学模拟, 他们观察到了位错环的发射, 并指出位错发射行为强烈依赖于裂纹的晶体取向. Zhu 等人^[13]通过原子计算得到了 3D 位错环形核的鞍点构型和激活能, 同时分析指出塑性晶体裂尖处的位错环的均匀形核不可能是主要过程, 局域结构的非均匀性可能是控制韧脆行为的因素.

对裂尖处的位错形核和发射过程, 以及对裂纹扩展机理问题的观察研究反映了裂纹动力学研究的重要进展. 然而几乎所有的研究工作中都只研究了一种晶体取向, 或者只关注了某一特定的原子构型现象. 为了能更全面地理解材料的宏观断裂行为, 我们模拟研究了不同晶体取向的 α -Fe 裂纹在外载作用下的形变过程及相关缺陷的形成和发展过程. 通过观察不同温度场和应力场下的形变机理和竞争机理, 对不同晶体取向的裂纹所对应的各种破坏机理给出了详细地分析描述.

^{*} 国家重点基础研究发展计划(973)项目(批准号: 2006CB605102)和国家自然科学基金(批准号: 90306016)资助的课题.

[†] E-mail address: cao_lx@sohu.com

2. 计算模型和方法

我们建立了四种不同取向的裂尖模型. 对于一个特定的裂纹取向, 用裂纹前沿方向和裂纹所在的平面这两个量来进行标定. 由实验观察^[19]可知 α -Fe 的主要解理面为 (100) 面, 其次为 (110) 面, 主要的滑移体系为 $\{110\}$ 111 和 $\{112\}$ 111. 因此, 我们选择的四种裂纹构型分别为 (010] [001] [(0 $\bar{1}$ 1] [100] [(010] [101], (01 $\bar{1}$] [011], 依次编号为模型 A, B, C, D.

图 1 为模拟中所选原子胞的几何构型, n_x, n_y, n_z 分别表示 x, y, z 三方向的原子层数. 四种裂纹模型的晶体取向及其模拟胞的尺寸大小列于表 1, 体系原子总数 N 由 101400 到 140400.

图 2 所示为四种取向裂纹的裂尖-滑移面几何构型. 需要指出的是, 由于对裂纹进行 I 型加载的模拟过程中, 采用的是平面应变条件, 这样就限制了只有包含裂纹前沿方向在内的滑移系能够被激活. 模型 A 中, 裂纹前沿包含了两个 $\{110\}$ 滑移面, 它们对称地分布在裂纹面的两侧并与裂纹面成 45° 夹角. 模型 B 中裂纹前沿仅包含了一个滑移面 (011) 面, 它与裂纹面垂直. 模型 C 中, 裂纹前沿为 [101] 方向, 它包含了两个 $\{112\}$ 滑移面, 对称地分布在裂纹面的

两侧并与裂纹面成 35.26° 夹角. 对于模型 D, 其裂纹前沿为 [011] 方向, 它包含了两个对称的滑移面 ($2\bar{1}\bar{1}$) 和 ($21\bar{1}$), 它们与裂纹面的夹角为 54.73° . 由以上描述可知, 不同的裂纹构型对应于裂纹前沿不同的滑移系, 由此可以研究裂纹动态扩展中的解理断裂和滑移形变之间的竞争过程.

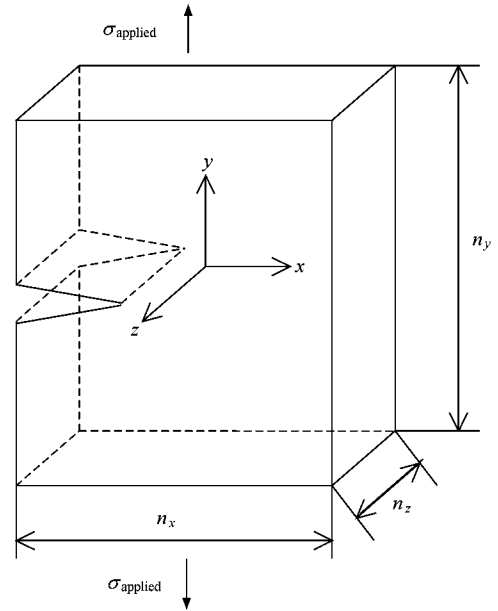


图 1 模拟胞的几何构型(坐标系及相关的尺寸大小)

表 1 四种裂纹构型的模型参数

模型	x	y	z	n_x	n_y	n_z	总原子数 N
A	[100]	[010]	[001]	260	260	6	101400
B	[011]	[0 $\bar{1}$ 1]	[100]	200	200	6	120000
C	[10 $\bar{1}$]	[010]	[101]	180	256	6	138240
D	[100]	[01 $\bar{1}$]	[011]	260	180	6	140400

裂纹的初始构型首先由各向异性线弹性解^[20]给出, 然后用 MD 方法弛豫至平衡状态. 为了模拟实验中的单轴拉伸形变, MD 中采用了均匀动态加载方式^[21, 22]. 裂纹受 I 型加载, 即分别对 y 方向上的最上层原子和最下层原子加载一个恒力, 然后用 MD 方法对体系的原子进行弛豫. x 方向取自由边界条件, z 方向取周期边界条件以模拟平面应变条件. 分子动力学中求解牛顿运动方程采用的是 Gear 算法, 时间步长取为 $\Delta t = 5 \times 10^{-5}$ s. 加载过程中保持体系温度不变, 即在 MD 模拟中经过一定的步长后, 需对原子的速度重新进行标定以达到规定的温度.

MD 模拟中, 用 Finnis-Sinclair (F-S) 多体势^[23]来描述 α -Fe 原子之间的相互作用, F-S 势函数精确拟

合了 bcc 晶体原子的各种实验参数. 由 F-S 势计算得到的 α -Fe 的 $\{100\}$, $\{110\}$ 和 $\{111\}$ 面的表面能列于表 2 中.

表 2 α -Fe 中不同晶面的表面能

表面	γ_s (J/m ²) [本工作]	γ_s (J/m ²) ^[17]	γ_s (J/m ²) ^[18]
(100)	1.92	1.973	1.554
(110)	1.70	1.874	1.374
(111)	2.18	2.296	1.700

由表 2 可以看到, 计算结果与相关文献的结果基本一致.

考虑到晶格点阵的各向异性效应, 由 Griffith 判据^[20]可以给出 I 型加载条件下裂纹的临界应力强度

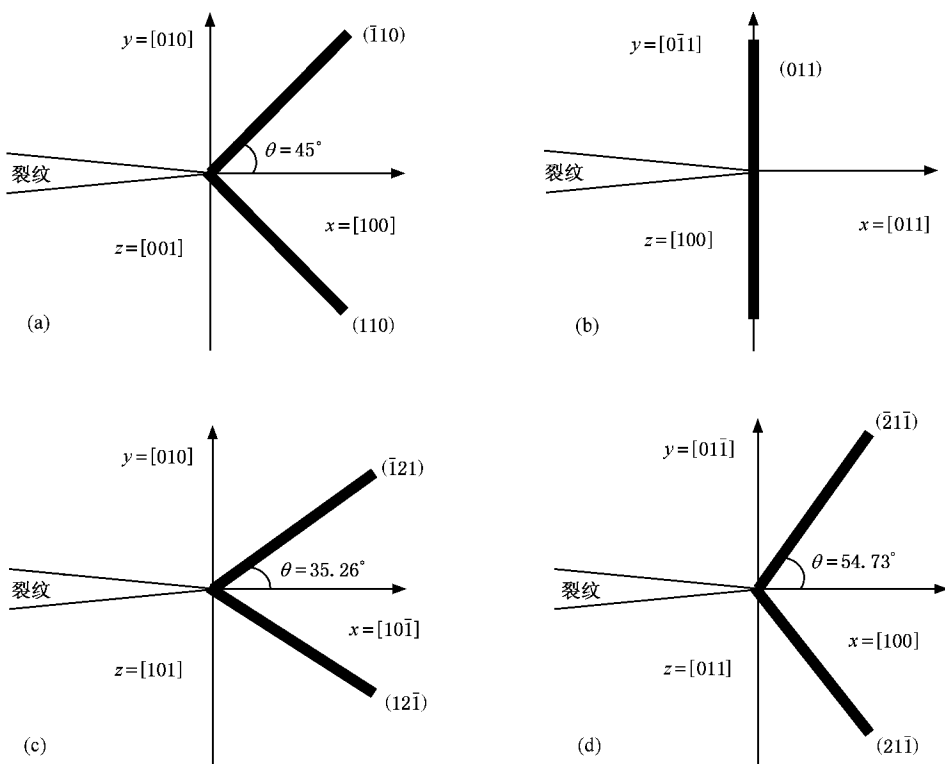


图 2 各种取向裂纹的裂尖-滑移面几何构型 A(010][001] 裂纹; B(011][100] 裂纹; C(010][101] 裂纹; D(011][011] 裂纹

因子

$$K_{IC}^G = (2\gamma)^{1/2} \{ (s_{11}s_{22}/2)^{1/2} [(s_{22}/s_{11})^{1/2} + (2s_{12} + s_{66})/2s_{11}]^{1/2} \} \quad (1)$$

其中 s_{ij} 是柔顺常数, 指数 1、2 和 6 分别表示裂纹的扩展方向, 垂直于裂纹面的方向以及平行于裂纹前沿的方向. 表 3 给出了由(1)式计算得到的四种取向

裂纹的各向异性临界应力强度因子值. 同时还给出了四种模型的裂纹半长, 根据临界应力强度因子和临界应力的关系 $K_{IC}^G = (\sigma_{IC}^G \pi l_0)^{1/2}$, 可计算出相应的临界应力值. 需要指出的是, 计算上述量时所用到的材料参数, 均与 Fe 的 F-S 势函数中的参数保持一致.

表 3 不同裂纹构型中, 由各向异性 Griffith 判据计算得到的 I 型裂纹临界应力强度因子 K_{IC}^G 和临界应力 σ_{IC}^G (其中所用参数与 Fe 的 F-S 势函数的参数一致)

模型	裂纹取向	临界应力强度因子 $K_{IC}^G/(\text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2})$	裂纹半长 $l_0/\text{\AA}$	临界应力 σ_{IC}^G/GPa
A	(010][001]	0.93	73.3	6.13
B	(011][100]	0.90	73.2	5.93
C	(010][101]	0.96	73.2	6.33
D	(011][011]	0.96	73.4	6.32

3. 计算结果

本文的主要目的是观察不同取向的 α -Fe 裂纹在 I 型外载作用下的原子结构演化过程, 同时分析其相应的形变和断裂机理. 模型的加载方式为恒拉应力加载, 外力 σ_{ext} 以 σ_{IC}^G 作为单位标定. 对裂纹分别进行了在不同应力场和不同温度场下的模拟试验, 从中将看

到不同的裂纹构型将对应于不同的形变现象和断裂特点. 通过观察不同形变时期的原子构型演化, 详细分析了 α -Fe 裂纹的形变机理和断裂机理.

3.1. 模型 A (010][001] 裂纹

图 3 所示为外载 $\sigma_{ext} = 1.33 \sigma_{IC}^G$ 温度为 5 K 时的 $x[100]-y[010]$ 面裂尖原子构型图. 通过观察原子的构型演化, 我们发现原子在 {110} 面上产生了滑移. 图

图 3(a) 为裂尖原子的初始构型. 当加载至 25 ps 时, 由图 3(b) 可以看到, 裂纹脆性解理扩展. 同时, 裂尖前端滑移面上出现了不全位错的形核和发射. 位错运动的主要方式之一表现为原子的滑移, 这与材料的塑性行为直接相关. 因此, 对于模型 A 中的裂纹取向, 在低温受拉伸应力的作用下, α -Fe 裂纹在脆性解理扩展的同时伴随有一定程度的局部塑性形变.

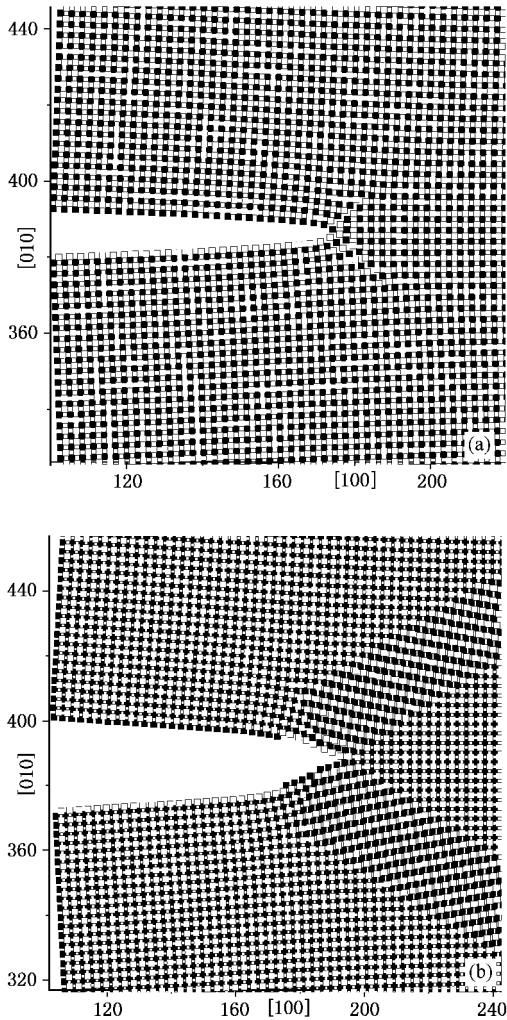


图 3 外载为 $\sigma_{\text{ext}} = 1.33\sigma_{\text{IC}}$, 温度为 5 K 时, 模型 A 中裂尖原子的 $x[100]-y[010]$ 投影图 (a) 初始的裂尖原子构型 (b) $t = 25$ ps 时, 裂纹脆性解理扩展伴随着局部塑性形变

图 4 为相同外载条件下温度为 300 K 时的裂尖原子构型. $t = 8$ ps 时 (如图 4(a)), 观察到裂纹并未扩展, 但在上下两个对称的滑移面 (110) 和 ($\bar{1}\bar{1}0$) 上均有堆垛层错形成, 在堆垛的尾部则伴随有不全位错的产生. 随着加载时间的增加, 当 $t = 25$ ps 时, 由图 4(b) 可以看到, 更多的位错沿滑移面被发射出来, 并迅速运动离开裂尖, 在其后面留下了一个无位

错区 (DFZ). 位错不断地成核并发射出来, 然后快速穿过 DFZ 区, 到达塑性区. 裂纹前端的堆垛层错带随之变长变厚, 导致了裂尖附近大量的塑性形变. 两滑移带产生的切变相交, 对应于相关的位错反应, 使得裂纹受到平面应变拉伸形变, 导致 I 型应力场下的切变过程. 室温下, 外载作用下的裂纹形变过程以裂纹扩展和裂尖形变相伴随的方式进行, 这与宏观的实验结果^[24, 25]相一致. 这些实验证据表明, 许多半脆金属在发生脆性断裂之前, 总有塑性形变产生, 甚至在裂纹的快速扩展过程中, 塑性形变也会发生.

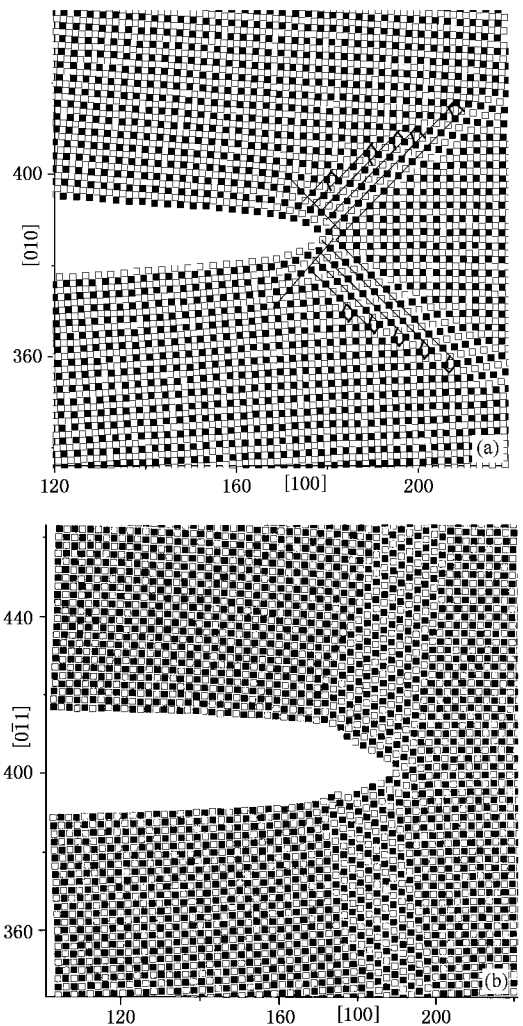


图 4 外载为 $\sigma_{\text{ext}} = 1.33\sigma_{\text{IC}}$, 温度为 300 K 时, 模型 A 中裂尖原子的 $x[100]-y[010]$ 投影图 (a) $t = 8$ ps 时, 裂纹未扩展, 但裂尖前端滑移面上有不全位错发射, 形成堆垛层错 (b) $t = 25$ ps 时, 裂纹前端产生大量塑性形变, 导致裂纹切变断裂

3.2. 模型 B ($\bar{0}11$) 100 裂纹

($\bar{0}11$) 面是 α -Fe 中的最密排面. 通过比较 (1) 式

计算的各个表面的表面能, 我们知道 $\{110\}$ 面的表面能最低, 因此, $\{110\}$ 面有可能是最优的解理面.

图 5 所示为外载 $\sigma_{\text{ext}} = 1.43 \sigma_{\text{IC}}$, 温度为 5 K 时的 $x[011]-y[\bar{0}\bar{1}1]$ 面裂尖的原子投影图. 图 5 (a) 为初始的原子构型. 当外载加载至 $t = 25 \text{ ps}$ 时, 由图 5 (b) 可以明显地看到, 裂纹呈脆性解理扩展, 此时裂纹已经扩展了 35 \AA . 同时, 还观察到, 裂尖前端垂直于裂纹面的滑移面上, 原子产生了滑移, 即裂尖区伴随有一定程度的局部塑性形变.

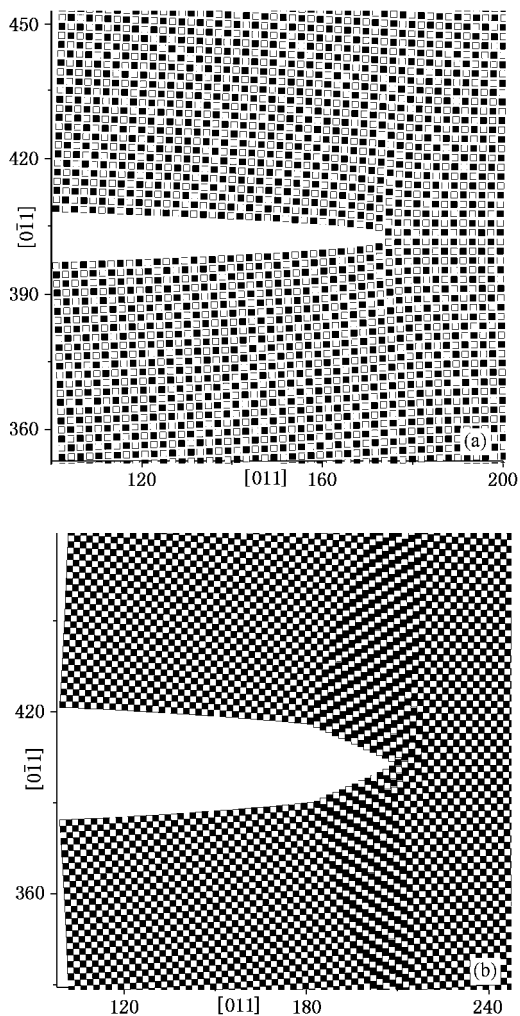


图 5 外载为 $\sigma_{\text{ext}} = 1.43 \sigma_{\text{IC}}$, 温度为 5 K 时, 模型 B 中裂尖原子的 $x[011]-y[\bar{0}\bar{1}1]$ 投影图 (a) 初始的裂尖构型 (b) $t = 25 \text{ ps}$ 时, 裂纹脆性解理扩展伴随着局部塑性形变

图 6 是在相同外载作用下, 温度为 300 K 时模拟得到的结果. 由图 6 (a) 可观察到, $t = 5 \text{ ps}$ 时, 垂直于裂纹面的 (011) 滑移面上出现了刃型位错分量. 随后, 位错滑移离开裂尖, 更多的新的位错由裂尖发射出来 (图 6 (b) 所示). 当加载至 $t = 15 \text{ ps}$ 时, 由图 6

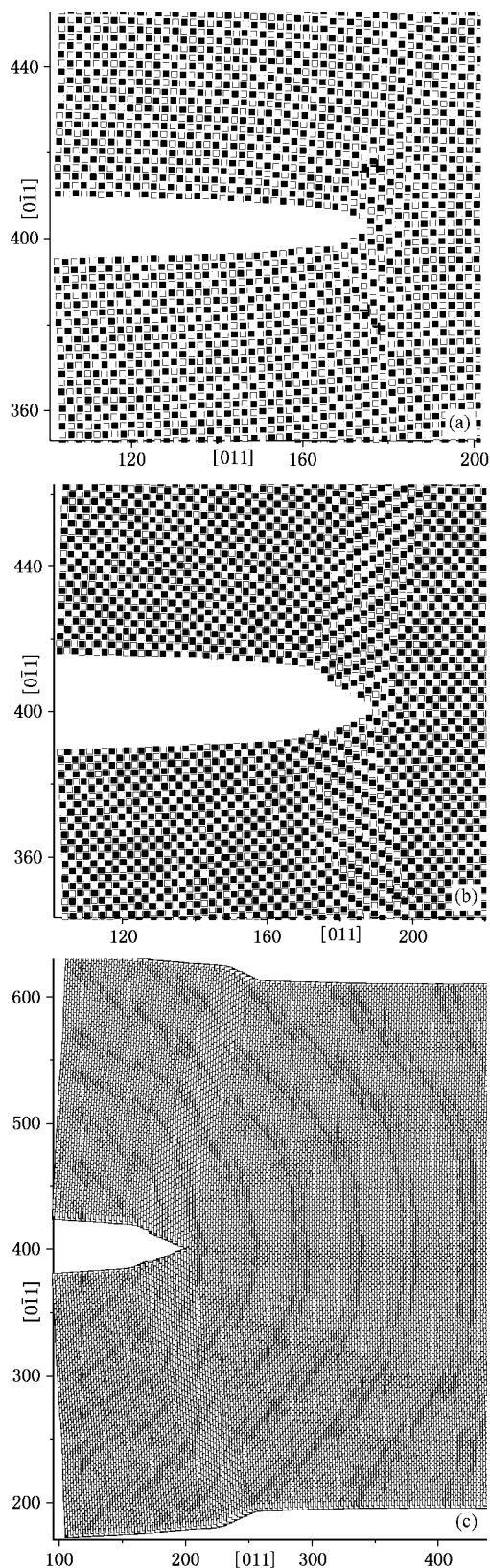


图 6 外载为 $\sigma_{\text{ext}} = 1.43 \sigma_{\text{IC}}$, 温度为 300 K 时, 模型 B 中裂尖原子的 $x[011]-y[\bar{0}\bar{1}1]$ 投影图 (a) $t = 5 \text{ ps}$ 时, 裂尖前端的 (011) 滑移面上出现刃型位错分量 (b) $t = 10 \text{ ps}$, 更多位错被发射; (c) $t = 15 \text{ ps}$, 位错运动离开裂尖, 滑出模拟胞体系, 在模拟胞的上下底边留下纽结

(c) 可以看到,位错运动滑出了模拟区域,在模拟胞的上下底边留下了纽结.此时,裂尖张开位移(CTOD)显著增加,说明裂纹出现明显的钝化效应.裂纹前端滑移带产生切变,导致平面应变拉伸形变,从而使裂纹发生剪切断裂.

模拟过程中我们观察到了沿着垂直于裂纹面的(011)滑移面有刃型位错分量产生,并随之运动离开裂尖.刃型位错分量的位错线是沿 $[100]$ 方向,如果没有相关的螺型分量的形变,那么柏氏矢量位于(011)面上沿 $[0\bar{1}1]$ 方向,这并不是bcc-Fe中的主要滑移系.因此,需要进一步通过观察 $y-z$ 面,即(011)滑移面上的原子构型来研究有关螺型位错分量的形变.由于我们在MD中模拟的是平面应变条件, z 方向仅取了6层原子作为周期单元,这就限制了在(011)面上观察螺型位错分量产生的可能性.因此,对该取向裂纹的进一步研究,需建立在3D裂纹模型的基础上进行,我们将在另一篇文章中详细描述.

3.3. 模型 C (010]101] 裂纹

图7所示为外载 $\sigma_{\text{ext}} = 1.28 \sigma_{\text{IC}}$,温度为5 K时 $x[10\bar{1}]_y[010]$ 面裂尖的原子构型.从中可以明显地看到裂尖前端发生了孪晶形变.加载初期($t = 5$ ps时),由图7(a)可观察到 $a/6[11\bar{1}]$ Shockley不全位错在滑移面 $(\bar{1}21)$ 上形核并发射,致使裂尖前端滑移面上的堆垛次序由ABCDEFABC变为ABCDEDEFA,此即意味着第一类内禀(intrinsic)层错 l_1 的形成.随着加载时间的增加,位错不断地由裂尖发射出来,当 $t = 7$ ps时,如图7(b)所示,裂尖前端滑移面的堆垛次序由ABCDEFABCDEF变为ABCDEDEDEFAB,从而形成堆垛孪晶.随后,裂尖的原子键破断,裂纹开始脆性解理扩展,同时还伴随着孪晶的“扩展”.图7(c)中, $t = 17$ ps时,裂纹扩展了25 Å,孪晶也大约为10个原子层厚.模拟结果与实验中观察到的现象^[26,27]一致,即 α -Fe裂纹在低温受外载时,裂尖层错和孪晶的形成与裂尖解理扩展是两个共同存在,相互伴随的过程.我们还发现,在 $[11\bar{1}][\bar{1}21]$ 滑移系中,孪晶形变比全位错发射更容易,这一点在文献[28]中已经从能量分析上给出了合理的解释.

图8为相同外载条件下温度为300 K时的裂尖原子构型.从中可以看到,两个倾斜的滑移系 $[11\bar{1}][\bar{1}21]$ 和 $[1\bar{1}1][12\bar{1}]$ 同时被激活.当 $t = 9$ ps时(图8(a)所示),裂尖尚未扩展,但在上下两个对称的 $\{112\}$ 滑移面上,均有孪晶生成,其末端均伴随着不

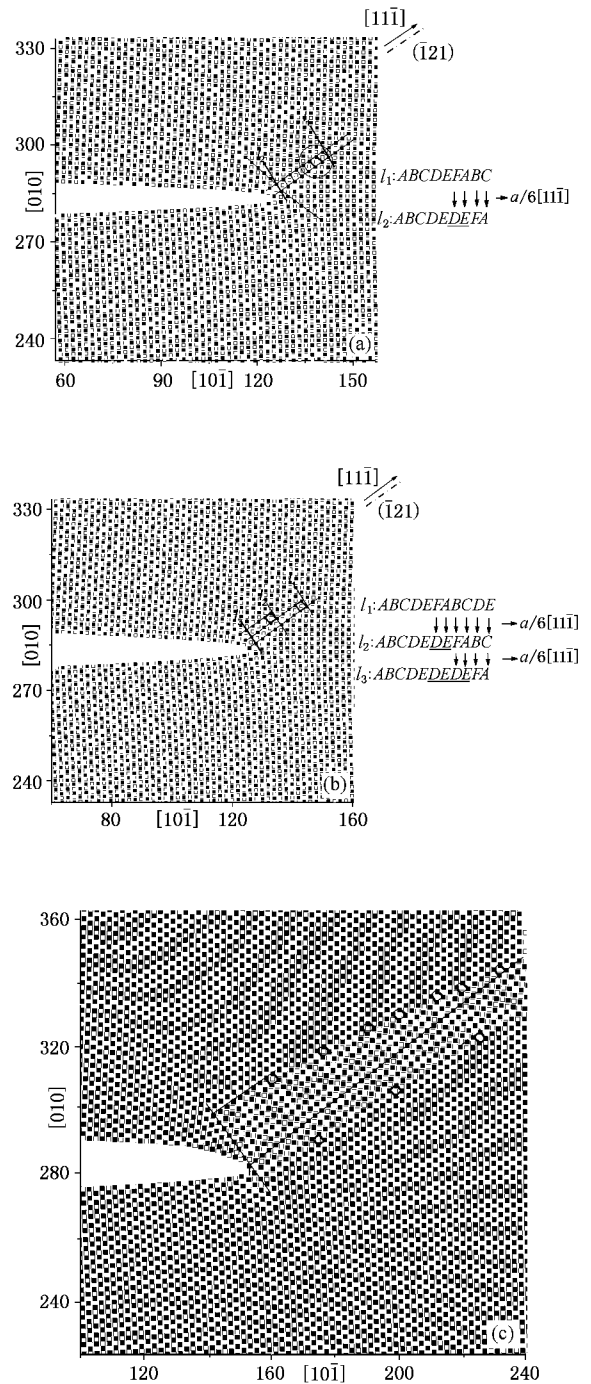


图7 外载为 $\sigma_{\text{ext}} = 1.28 \sigma_{\text{IC}}$,温度为5 K时,模型C中裂尖原子的 $x[10\bar{1}]_y[010]$ 投影图 (a) $t = 5$ ps,裂尖附近有不全位错发射,形成第一类内禀层错 (b) $t = 7$ ps,位错不断发射,裂尖处形成堆垛孪晶 (c) $t = 17$ ps,裂纹脆性解理伴随孪晶“扩展”

全位错(孪晶位错)的产生.两个孪晶位错 $a/6[11\bar{1}]$ 和 $a/6[1\bar{1}1]$ 相结合形成一个柏氏矢量为 $a/3[101]$ 的位错.当孪晶位错不断地由裂尖发射出来,孪晶的相交面上包含一个薄层的 $a/3[010]$ 位错,这将导致裂纹张口变大.当加载至 $t = 20$ ps时,由图8(b)我

们观察到, 裂尖附近的孪晶带增厚, 裂尖张口明显变大, 这说明裂尖尖端发生了钝化效应, 从而导致了纳米空洞的生成.

加, 当 $t = 20 \text{ ps}$ 时, 从图 9 (b) 中观察到裂纹开始脆性解理扩展, 且已经扩展了 31 \AA , 滑移面上的层错带也在不断地生长. 上端的层错带变得更长更宽, 同时, 裂纹下方的滑移面 ($2\bar{1}\bar{1}$) 上也出现了堆垛层错, 其末端伴随着 $1/3[11\bar{1}]$ 不全位错. 位错不断地在滑移面上形核并发射, 随后沿 111 方向滑移运动, 离开裂尖, 滑移带因此也变得更宽.

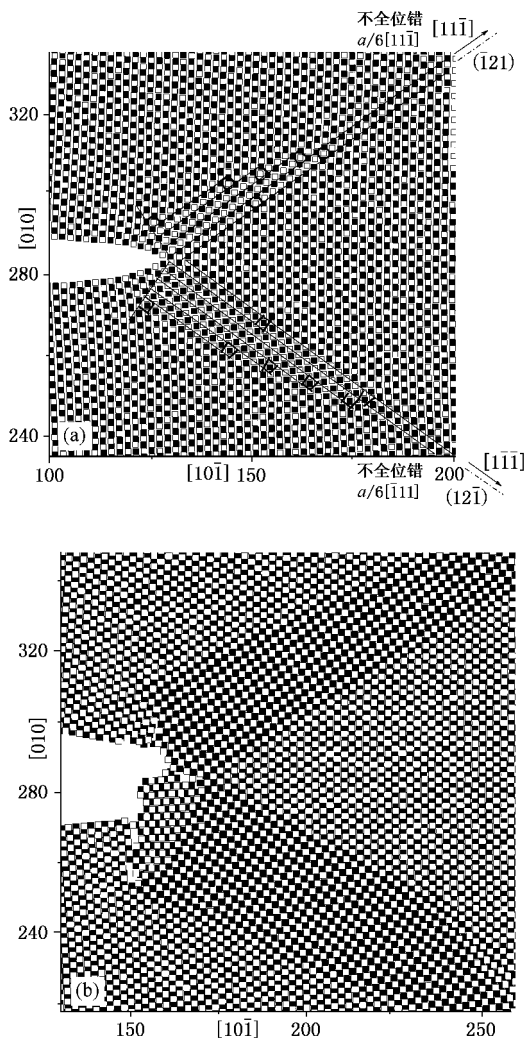


图 8 外载为 $\sigma_{\text{ext}} = 1.28 \sigma_{\text{IG}}$, 温度为 300 K 时, 模型 C 中裂尖原子的 $x[10\bar{1}]$ - $y[010]$ 投影图 (a) $t = 9 \text{ ps}$, 在两个滑移面上 ($\bar{1}21$) 和 ($12\bar{1}$) 面上均形成了堆垛孪晶 (b) $t = 20 \text{ ps}$, 裂尖钝化, 出现纳米空洞

3.4. 模型 D ($01\bar{1}$] 011 裂纹

图 9 为 $(01\bar{1}] [011]$ 裂纹在外载 $\sigma_{\text{ext}} = 1.78 \sigma_{\text{IG}}$, 温度为 5 K 时的 $x[100]$ - $y[01\bar{1}]$ 面的裂尖原子演化构型. 由图中可以看到, $t = 8 \text{ ps}$ 时 (图 9 (a) 所示), 在裂纹前端上方的滑移面 ($2\bar{1}\bar{1}$) 上有堆垛层错形成, ($2\bar{1}\bar{1}$) 面的堆垛次序由 $ABCDEFABCDEF \dots$ 变为 $ABCDEFACDEFACDEFACDEFAB \dots$. 此层错称为第二类内禀 (intrinsic) 层错 l_2 . 层错的末端伴随着不全位错的产生, 其柏氏矢量为 $1/3[11\bar{1}]$. 随着加载时间的增

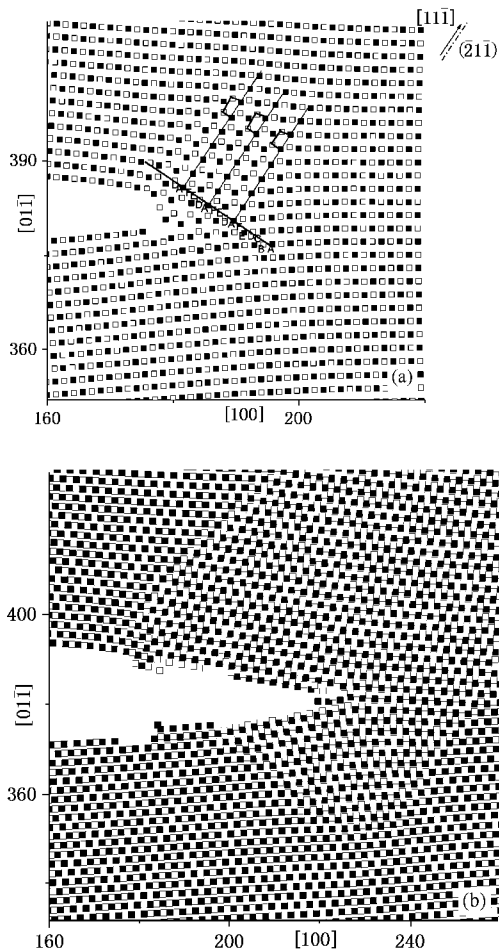


图 9 外载为 $\sigma_{\text{ext}} = 1.78 \sigma_{\text{IG}}$, 温度为 5 K 时, 模型 D 中裂尖原子的 $x[100]$ - $y[01\bar{1}]$ 投影图 (a) $t = 8 \text{ ps}$, 裂尖前端形成第二类 intrinsic 层错 (b) $t = 20 \text{ ps}$, 裂纹脆性解理扩展, 伴随着层错带的生长

图 10 为外载条件不变, 温度为 300 K 时的裂尖原子构型. 当 $t = 10 \text{ ps}$ 时, 由图 10 (a) 可观察到, 裂尖附近产生了大量的塑性形变, 上下滑移面上均有堆垛层错形成, 同时, 我们观察到裂尖张口变大, 这正是裂尖钝化的典型特征. 当加载至 20 ps 时, 裂尖附近的塑性形变量进一步增大, 裂尖的张口也随之增加, 裂纹甚至出现了分枝的现象 (如图 10 (b) 所示).

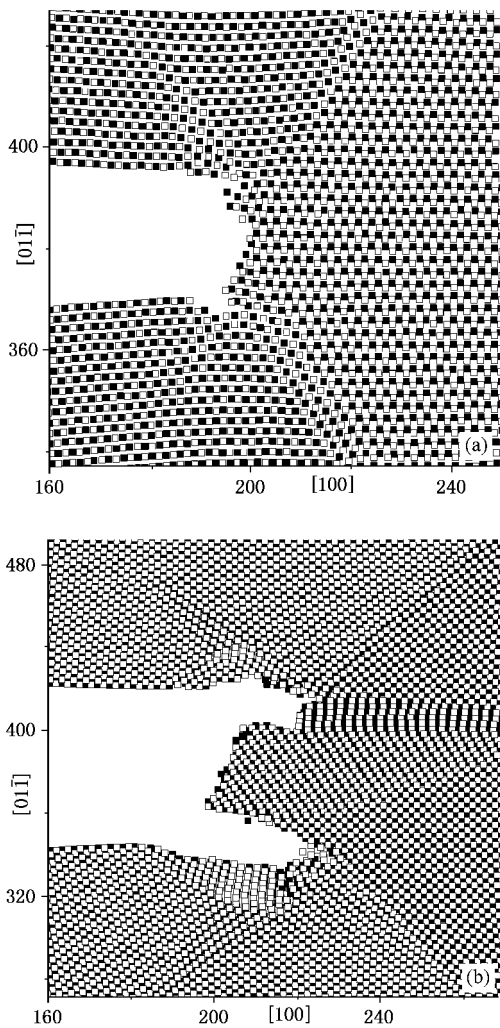


图 10 外载为 $\sigma_{\text{ext}} = 1.78 \sigma_{\text{IC}}$, 温度为 300 K 时, 模型 D 中裂尖原子的 $x[100]-y[011]$ 投影图 (a) $t = 10$ ps, 裂尖处发生大量塑性形变, 上下滑移面上均有层错产生 (b) $t = 20$ ps, 裂纹钝化并分枝

4. 分析与讨论

上述模拟结果表明, 各种取向的裂纹在不同的温度场下具有不同的形变特点和断裂机理. 裂纹的断裂行为体现为塑性过程(位错形核与运动)和弹性过程(原子断键)之间相结合的过程.

低温时($T = 5\text{K}$), 对于各种取向的裂纹, 其表现出的断裂机理均为脆性解理扩展, 同时裂尖附近伴随有局部的塑性形变. 这与实验上观察到的 $\alpha\text{-Fe}$ 低温脆性解理现象一致^[24]. 解理断裂过程中裂尖发生少量的塑性形变, 是由于材料的最大切变强度比最大拉伸强度小得多. 对于 $(010)[101]$ 裂纹, 模拟观察到裂尖解理扩展与形变孪晶生长相伴随的过程, 此现象在早期的实验中^[26, 27] 也已经被观察证实.

当温度升高到室温时($T = 300\text{K}$), 由于温度引起的热激活效应导致原子的运动能力大大增强, 原子运动活跃, 裂纹附近发生了大量的塑性形变, 致使裂纹发生韧性断裂. 但是不同取向的裂纹所表现出的形变现象和断裂机理有所不同. 模型 A 和 B 中, 裂纹的韧性断裂表现为连续的切变或滑移引起的断裂. 对于 $(010)[001]$ 裂纹, 裂纹前端的两个倾斜的 $\{110\}$ 滑移面上产生层错. 同时, 两滑移带产生的切变相交, 对应于相关的位错反应, 使得裂纹受到平面应变拉伸形变, 导致 I 型应力场下的切变过程, 从而发生剪切断裂. 对于 $(0\bar{1}1)[100]$ 裂纹, 在垂直于裂纹面的 (011) 滑移面上观察到了刃型位错分量的出现, 然后位错滑移离开裂尖, 更多的新位错由裂尖发射出来, 在裂纹前端形成一形变带. 滑移带上原子产生切变, 导致裂纹发生剪切断裂. 而模型 C 和 D 中, 裂纹的韧性断裂表现的形式为微孔洞的形成, 长大和聚集而引起的断裂. 对于 $(010)[101]$ 裂纹, 模拟观察到裂纹前端的两个上下对称的 $\{112\}$ 滑移面上, 有 $1/6$ 111 不全位错发射, 位错不断发射形成孪晶带. 裂尖张口明显增大, 伴随有纳米空洞的生成, 这说明裂纹尖端发生了明显的钝化效应. 对于 $(01\bar{1})[011]$ 裂纹, 裂纹前端的上下滑移面 $\{112\}$ 上有第二类内禀(intrinsic)堆垛层错形成, 层错的末端伴随有 $1/3$ 111 不全位错的产生. 裂尖张口增大, 裂纹出现分枝现象.

我们还模拟研究了不同大小的应力场对各种取向裂纹的形变和断裂机理的影响. 计算结果发现, 外载的大小并不影响裂尖的弹性形变(无位错区中的原子断键行为), 它只影响裂尖的塑性形变的表现形式, 因为缺陷的形核和运动具有随机性.

此外, 我们还测试检验了模型的尺寸效应. 通过对不同尺寸大小的模型进行模拟, 可以得出结论, 对于一个特定的裂纹取向, 模型的尺寸效应仅仅影响相关形变机理出现时的临界应力值, 而不影响其形变特性.

5. 结 论

用分子动力学方法模拟研究了 $\alpha\text{-Fe}$ 裂纹在单轴拉伸加载条件下的形变行为. 通过详细观察各种取向的裂纹在不同温度场和不同应力场下的原子构型演化过程, 分析了其相应的形变特点和断裂机理. 从中可以得到以下结论:

裂纹扩展是塑性过程和弹性过程相结合的过程。塑性过程表现为裂尖附近的位错形核和发射、堆垛层错或孪晶的形成，以及位错运动引起的原子切变行为；而弹性过程的发生则是由无位错区中的原子断键所导致。

各种取向的裂纹在不同的温度场下具有不同的形变特点和断裂机理。低温时，裂纹脆性解理扩展，同时伴随有裂尖附近局部的塑性形变。这与实验上观察到的 α -Fe 低温脆性解理现象一致^[24, 25]。当温度

升高到室温时，温度引起的热激活效应导致了裂纹附近大量的塑性形变，从而发生韧性断裂。对于 (010) [001] 和 (011) [100] 裂纹，韧性断裂表现为连续的切变或滑移引起的断裂；对于 (010) [101] 和 (011) [011] 裂纹，韧性断裂表现的形式为微孔洞的形成、长大和聚集以及裂纹分枝。

外加应力场的大小不影响裂尖的弹性形变（无位错区中的原子断键行为），只影响裂尖的塑性形变的表现形式，因为缺陷的形核和运动具有随机性。

- [1] Li M J, Hu H Y, Xing X S 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2092 (in Chinese) [李眉娟、胡海云、邢修三 2003 物理学报 **52** 2092]
- [2] Zhu L, Zhang A H 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 0571 (in Chinese) [朱亮、张爱华 2004 物理学报 **53** 0571]
- [3] Li X F, Fan T Y 2002 *Chin. Phys.* **11** 0266
- [4] Griffith A A 1920 *Philos. Trans. R. Soc. London A* **221** 163
- [5] Rice J R, Thomson R 1974 *Philos. Mag.* **29** 73
- [6] Rice J R 1992 *J. Mech. Phys. Solids* **40** 239
- [7] Beltz G E, Rice J R 1992 *Acta Metall. Mater.* **40** S321
- [8] Zhang L, Wang S Q, Ye H Q 2006 *Chin. Phys.* **15** 0610
- [9] Geng H R, Sun C J, Yang Z X, Wang R, Ji L L 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1320 (in Chinese) [耿浩然、孙春静、杨中喜、王瑞、吉蕾蕾 2006 物理学报 **55** 1320]
- [10] Zhou N G, Zhou L, Du D X 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 0372 (in Chinese) [周耐根、周浪、杜丹旭 2006 物理学报 **55** 0372]
- [11] Cheung K S, Yip S 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 2804
- [12] Zhou S J, Beazley D M, Lomdahl P S, Holian B L 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 479
- [13] Zhu T, Li J, Yip S 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 25503
- [14] Holian L, Ravelo R 1995 *Phys. Rev. B* **51** 11275
- [15] Cheung K S, Yip S 1994 *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **2** 865
- [16] Kohlhoff S, Gumbsch P, Fischmeister H F 1991 *Phil. Mag. A* **64** 851
- [17] Machová A 1992 *Mater. Sci. Eng. A* **149** 153
- [18] Hu S Y, Ludwig M, Kizler P, Schmauder S 1998 *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **6** 567
- [19] Feng D 1999 *Metal Physics Vol.3* (Beijing : Science Press) p504 (in Chinese) [冯端 1999 金属物理学, 第三卷 (科学出版社) 第 504 页]
- [20] Sih G C, Liebowitz H 1968 *Fracture : An Advanced Treatise*, edited by Liebowitz H (New York : Academic Press) Vol.2 p108-125.
- [21] Hua L, Rafii-Tabar H, Cross M 1997 *Phil. Mag. Lett.* **75** 237
- [22] Machová A, Ackland G J 1998 *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **6** 521
- [23] Finnis M W, Sinclair J E 1984 *Phil. Mag. A* **50** 45
Finnis M W, Sinclair J E 1986 *Erratum. Phil. Mag. A* **53** 161
- [24] Low J R 1963 *Fracture of Solids*, Wiley-Interscience, Drucker D C and Gilman J J (eds.) (New York : Academic Press) p197
- [25] Ohr S M 1985 *Mater. Sci. Eng.* **72** 1
- [26] Hull D 1960 *Acta Metall.* **8** 11
- [27] Ján B, Tibor Š 2002 *Mater. Sci. Eng. A* **323** 198
- [28] Cao L X, Wang C Y, accepted by Journal of Materials Research

Molecular dynamics simulation of fracture in α -iron^{*}

Cao Li-Xia^{1)†} Wang Chong-Yu^{2)‡}

¹ *Central Iron and Steel Research Institute, Beijing 100081, China*

² *Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China*

(Received 2 May 2006 ; revised manuscript received 31 May 2006)

Abstract

The deformation process of the crack in α -Fe has been simulated under uniaxial tensile deformation by molecular dynamics (MD) method. The effect of crystal orientations on the deformation mechanisms of the crack has been investigated. Various deformation evidences are clearly observed, such as dislocation nucleation and emission, dislocation movement, stacking faults formation or twinning, and formation and coalescence of voids. The simulated results indicate that the crack propagate by a combination of plastic and elastic processes in which the plastic portion of the crack results from the shear behavior of atoms created by the dislocations that are emitted from the crack tip, and the elastic process occurs as a result of the bond-breaking of the atoms in the dislocation-free zone. It has also been studied the deformation and fracture characteristics of the crack in α -Fe and their dependence on the stress state and the temperature.

Keywords : microcrack, MD simulation, α -Fe

PACC : 6220M, 8140N, 6185

^{*} Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 2006CB605102) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 90306016).

[†] E-mail : cao_lx@sohu.com