

## 晶界萌生裂纹扩展的晶体相场模拟\*

# Phase field crystal Simulation of Crack Nucleation and Extension from Grain Boundary

满海<sup>1</sup>, 胡绪志<sup>1</sup>, 宁岁婷<sup>1</sup>, 黄礼琳<sup>1,2</sup>, 罗志荣<sup>2</sup>, 高英俊<sup>1\*\*</sup>

MAN Hai<sup>1</sup>, HU Xuzhi<sup>1</sup>, NING Suiting<sup>1</sup>, HUANG Lilin<sup>1,2</sup>, LUO Zhirong<sup>2</sup>, GAO Yingjun<sup>1</sup>

(1. 广西大学物理科学与工程技术学院, 广西高校新能源重点实验室, 广西南宁 530004; 2. 玉林师范学院物理科学与工程技术学院, 广西玉林 537000)

(1. Guangxi Key Laboratory of Novel Energy Materials of College and University, College of Physics Science and Engineering, Guangxi University, Nanning, Guangxi, 530004, China; 2. Institute of Physics Science and Engineering Technology, Yulin Normal University, Yulin, Guangxi, 537000, China)

**摘要:**【目的】研究双晶样品在单轴拉伸应变作用下所发生的纳米微观尺度裂纹扩展运动, 观察裂纹扩展特征, 揭示位错对裂纹扩展的作用规律。【方法】应用晶体相场(PFC)方法模拟裂纹扩展演化及其位错运动。【结果】在位错没有发射之时, 裂纹沿位错对柏氏矢量方向解理扩展, 发射位错后裂尖沿顺时针旋转 60°继续扩展。【结论】晶界滑移出的位错由于周围应力集中, 萌生出微裂纹。在裂纹扩展中, 裂纹与位错相互作用, 可以有多种形式。

**关键词:** 位错运动 裂纹扩展 晶体相场

**中图分类号:** TG111.2 **文献标识码:** A **文章编号:** 1002-7378(2017)04-0246-04

**Abstract:**【Objective】The crack propagation movement of nano crystalline microscopic scale under the uniaxial tensile strain is investigated, and the characteristics of crack propagation are observed to reveal the mechanism of dislocation on the crack propagation.【Methods】The phase field crystal (PFC) method is used to simulate the evolution of crack propagation and dislocation motion.【Results】When the dislocations are not emitted, the crack cleaves along the direction of Burgers vector along the dislocations. After the dislocations are cracked, the crack tip continues to rotate clockwise by 60°.【Conclusion】Dislocations that slip out of the grain boundaries initiate micro-cracks due to the stress concentration around them. There are four modes of interaction between cracks and dislocations during the crack propagation.

**Key words:** dislocation motion, crack propagation, phase field crystal

收稿日期: 2017-05-10

作者简介: 满海(1995—), 男, 硕士研究生, 主要从事材料数值模拟实验研究。

\* 国家自然科学基金项目(51161003, 51561031), 广西自然科学基金重点项目(2012GXNSFDA053001)和广西大学大创项目(201610593220, 201610593218)资助。

\*\* 通信作者: 高英俊(1962—), 男, 教授, 博士生导师, 主要从事材料纳微结构的设计与模拟试验研究, E-mail: gaoyj@gxu.edu.cn.

## 0 引言

【研究意义】材料是人类赖以生存和发展的物质基础。纳米材料、超导材料、光电子材料、生物医用材料以及新能源材料的性能是由其微观结构决定的。在晶体材料中, 以周期完整排列为主, 而非完整性则为次; 但对于其力学性能来说, 主要作用的是晶体的非完整性, 晶体的周期完整性却居于次要地位。

即在晶体力学行为中,缺陷起主要作用。因此,研究材料的缺陷对材料变形的影响有重要意义。【前人研究进展】晶体相场(PFC)方法就是为了解决传统相场方法无法描述晶体周期结构特性而提出的。Elder等<sup>[1-3]</sup>提出的晶体相场方法模拟在时间尺度和空间尺度具有优势,之后发展成为一种可以替代传统分子动力学模拟的方法,一些不能通过实验和其他模拟方法观察到的现象也可以用晶体相场方法实现。经过近年来的发展,晶体相场方法在模拟晶体断裂<sup>[4-5]</sup>、相结构转变<sup>[6]</sup>、纳米晶粒长大<sup>[7]</sup>、位错滑移<sup>[8]</sup>与攀移<sup>[9]</sup>等方面都有许多应用。【本研究切入点】晶体相场方法基于经典密度泛函同时结合了传统相场方法,用局域密度场表示序参量,成功地用有周期特征的原子密度函数来表现出晶格的周期排列。该方法可以很好的描述扩散时间尺度上的微结构演化行为<sup>[10-13]</sup>。【拟解决的关键问题】应用PFC方法研究双晶样品在单轴拉伸应变作用下晶界萌生的微裂纹演化机制,以及裂纹之间的相互作用,探究位错对纳米级萌生裂纹扩展的作用规律。

## 1 PFC模型与方法

### 1.1 PFC模型

引用了序参量作为局域的密度场,用一个常数代表如液相之类的无序相的密度场,同时把固态相表示为周期性波函数的形式,以密度场的最大值位置作为晶体中原子位置,进而表示出晶体的点阵结构,该原子密度场函数<sup>[4]</sup>可以写成

$$\rho(r) = \rho_0 + \sum_{nm} a_{n,m} e^{i\vec{G} \times \vec{r}} \quad (1)$$

等号左边  $\rho(r)$  代表空间中原子密度,右边第1项  $\rho_0$  代表均匀相原子平均密度,第2项代表晶体相周期排列的原子密度,用  $\vec{G}$  来代表倒格矢,  $\vec{r}$  为原子空间坐标,由此可得到一个用来表示晶体中原子位置的密度场:

$$\rho = \rho_0 + 2A_t [2\cos(qx)\cos(\frac{q}{\sqrt{3}}y) + \cos(\frac{2q}{\sqrt{3}}y)], \quad (2)$$

其中  $q = \frac{2\pi}{a}$  为波矢,  $A_t$  为常数,可由体系平均自由能取最小值得出,其为固态相原子周期结构的振幅。体系中的无量纲的自由能函数为

$$F = \int \left\{ \frac{\rho}{2} [\gamma + (1 + \nabla^2)^2] \rho + \frac{\rho^4}{4} \right\} dr, \quad (3)$$

其中  $\gamma$  为与体系温度有关的参量,  $\gamma \approx (T -$

$T_m)/L_c, \nabla^2$  是 Laplace 算子。

### 1.2 动力学方程的求解

用保守场的 Cahn-Hilliard 动力学方程<sup>[14-16]</sup>来描述原子密度随时间的演化:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta \rho} = \nabla^2 (\gamma \rho + (1 + \nabla^2)^2 \rho + \rho^3), \quad (4)$$

其中  $t$  为时间变量。使用半隐式 Fourier 谱方法<sup>[15,17]</sup>,可以把高阶梯度的 Laplace 算子表示为波矢的代数形式,也就是把实空间的函数转化到相空间去进行计算,详细步骤见文献<sup>[17]</sup>。

### 1.3 样品的制备

对双晶样品的制备步骤可参见文献<sup>[9]</sup>,设置参数:空间步长为  $\Delta x = \Delta y = \frac{\pi}{4}$ 、样品尺寸设置为  $1024\Delta x \times 512\Delta y$ 、时间步长为  $\Delta t = 0.5$ 、样品弛豫时间取  $10^5 \Delta t$ 、温度为  $\gamma = -1.0$ 、原子密度取  $\rho_0 = 0.49$ 、取向角设置为  $\theta = 0.49^\circ$ 。在经过弛豫  $10^5$  时间步长后,得到稳定的样品如图1所示。

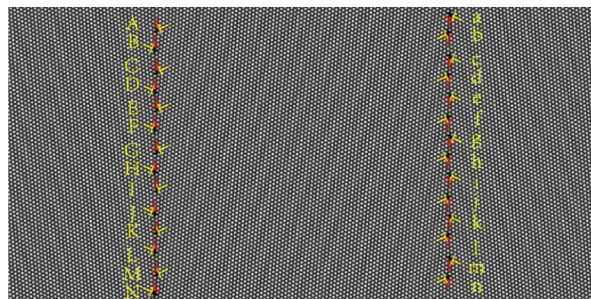


图1 弛豫 100 000 步后的初始样品

Fig. 1 Initial sample after 100 000 steps of relaxation

由图1晶界可见样品位错排列规则且均匀,每个晶界都分布着14个位错对,红色位错为竖直方向的位错,黄色位错与水平方向呈一定的夹角。

### 1.4 施加拉伸应变

对样品沿竖直方向施加拉伸应变(图2),在恒位移条件下施加应变率为15%。详细过程介绍见文献<sup>[15]</sup>。

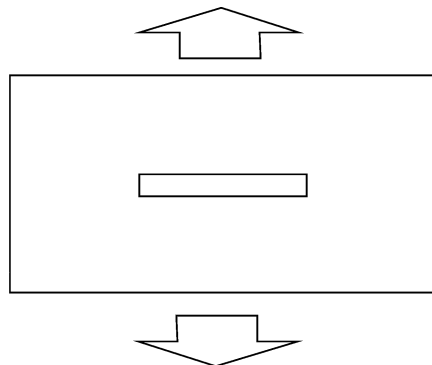


图2 y轴施加拉伸应变的示意图

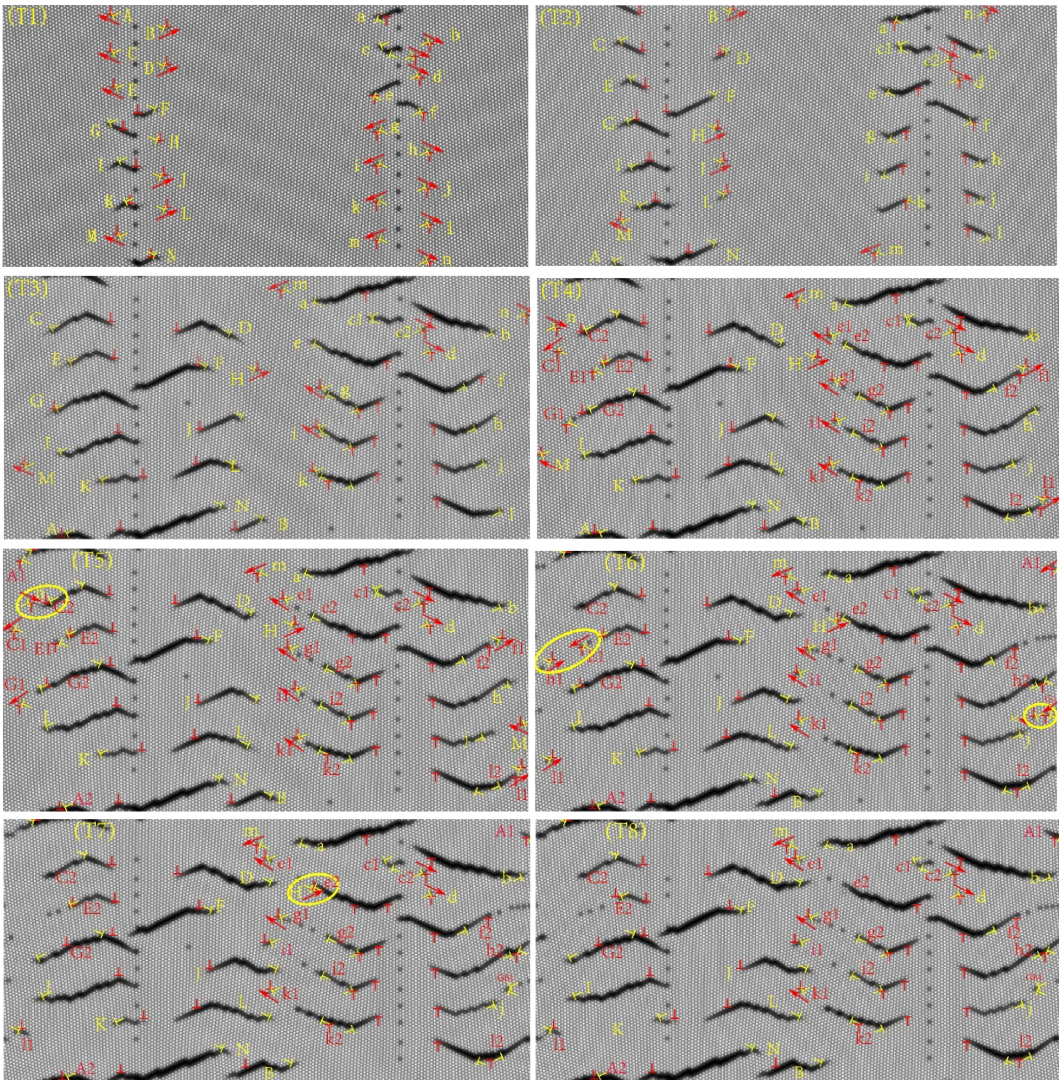
Fig. 2 Schematic diagram of applying tensile strain on y axis

## 2 结果与分析

由图 3(T1)可见,晶界处的位错萌生裂纹,并开始扩展,沿着晶列方向一部分位错沿原子滑移面滑移,表现为范性形变。另一部分位错引起裂纹解理扩展,并出现转折,如图 3(T2)所示。

由图 3 可见,在  $t = 100\ 000 \sim 200\ 000$ , 裂纹转折扩展,晶界滑移出的位错由于周围应力集中,萌生出微裂纹。位错的运动方式大致分为 4 种:第 1 种沿柏氏矢量方向(红色箭头所指方向)滑移。第 2 种是沿柏氏矢量原子滑移面进行解理扩展。第 3 种由于受到阻力,扩展方式出现弯折扩展,裂纹呈锯齿状。第 4 种则与前 3 种方式不同。仔细观察 c 处可见,有一个柏氏矢量与位错对 b 方向相同的位错对

发射出来,这属于塑性变形,同时由于柏氏矢量守恒原则,发射位错后在裂纹 c 中增加了一个沿水平方向  $30^\circ$  右上方的位错,在位错没有发射之时,裂纹沿位错对柏氏矢量方向解理扩展,发射位错后裂尖沿顺时针旋转  $60^\circ$  继续扩展。在图 3(T3)和图 3(T4),大部分裂纹之间相互吸引,改变了原来的扩展方向,裂纹扩展过程中将推开两侧的原子,这样阻碍了其他裂纹的扩展。在图 3(T4),一部分裂尖处发射位错,使裂尖塑性松弛后钝化,位错的运动轨迹中留下空位。图 3(T5)~(T8),有位错相互湮没和位错对与裂尖相互吸引之后湮没,而有的位错对虽然靠的很近,但是裂尖不在同一个原子滑移面上,导致它们最后没有连通在一起,例如 m 和 e1。



(T1)  $t = 50\ 000$ ; (T2)  $t = 100\ 000$ ; (T3)  $t = 200\ 000$ ; (T4)  $t = 230\ 000$ ; (T5)  $t = 244\ 000$ ; (T6)  $t = 300\ 000$ ; (T7)  $t = 350\ 000$ ; (T8)  $t = 450\ 000$

图 3 应变率为 15% 的裂纹演化

Fig. 3 Crack evolution at strain rate of 15%

自由能曲线初始阶段迅速下降,代表应变在初始阶段释放很快,之后呈线性趋势下降,自由能下降到了一个稳定阶段,最后能量释放完毕(图4)。对应于位错对初始阶段运动迅速,之后裂纹萌生与扩展,随着应变释放,样品形态渐渐稳定下来。

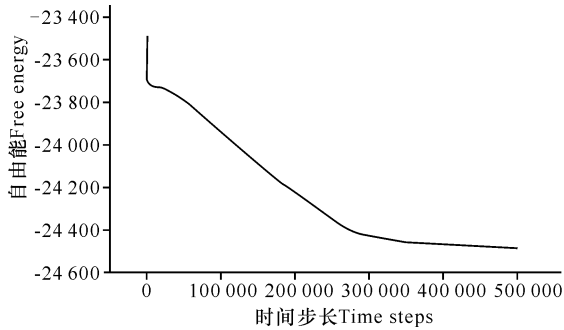


图4 样品的自由能随时间的变化曲线

Fig.4 Curve of sample's free energy changing with time

### 3 结论

晶界位错起裂过程中的主要规律如下:位错沿原子滑移面进行滑移运动,并在滑移过程中产生空位。位错也会沿位错对中某一位错的柏氏矢量方向运动。晶界滑移出的位错由于周围应力集中,萌生出微裂纹。位错对裂纹运动方式的作用分为4种:第1种是位错沿柏氏矢量方向滑移;第2种是裂纹沿柏氏矢量的滑移面进行解理扩展;第3种是由于位错受到阻力,裂纹扩展方式出现弯折扩展,呈锯齿状;第4种则与前3种方式不同,裂尖处发射位错,使裂尖塑性松弛后钝化,位错的运动轨迹中留下空位。位错相互湮没和位错对与裂尖相互吸引之后湮没。

#### 参考文献:

[1] ELDER K R, KATAKOWSKI M, HAATAJA M, et al. Modeling elasticity in crystal growth[J]. *Physical Review Letters*, 2002, 88(24): 245701.

[2] JAATINEN A, ACHIM C V, ELDER K R, et al. Thermodynamics of bcc metals in phase-field-crystal models[J]. *Physical Review E*, 2009, 80(3): 031602.

[3] ELDER K R, GRANT M. Modeling elastic and plastic deformations in nonequilibrium processing using phase field crystals [J]. *Physical Review E*, 2004, 70(5): 051605.

[4] 温振川, 宁岁婷, 张睿, 等. 纳米级缺口起裂临界条件的晶体相场模拟[J]. *广西科学*, 2016, 23(5): 448-453.

WEN Z C, NING S T, ZHANG R, et al. Phase-field-crystal simulation of critical conditions for the crack in-

itiation of nanoscale notch[J]. *Guangxi Sciences*, 2016, 23(5): 448-453.

[5] 高英俊, 卢成健, 黄礼琳, 等. 晶界位错运动与位错反应过程的晶体相场模拟[J]. *金属学报*, 2014, 50(1): 110-120.

GAO Y J, LU C J, HUANG L L, et al. Phase field crystal simulation of dislocation movement and reaction[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2014, 50(1): 110-120.

[6] 高英俊, 杨瑞琳, 王玉玲, 等. 空位晶体相场模型模拟二维晶体相形貌图[J]. *广西科学*, 2015, 22(5): 485-491.

GAO Y J, YANG R L, WANG Y L, et al. Phase field model simulation of bumps and holes pattern of two dimension crystals[J]. *Guangxi Sciences*, 2015, 22(5): 485-491.

[7] 罗志荣, 卢成健, 高英俊. 相场法研究初始微结构对晶粒长大的影响[J]. *广西科学*, 2016, 23(5): 432-436, 442.

LUO Z R, LU C J, GAO Y J. Phase field study on effect of initial microstructure on grain growth [J]. *Guangxi Sciences*, 2016, 23(5): 432-436, 442.

[8] 杨瑞琳, 刘瑶, 胡绪志, 等. 双位错滑移运动的晶体相场模拟[J]. *广西科学*, 2016, 23(5): 443-447.

YANG R L, LIU Y, HU X Z, et al. Phase-field-crystal simulation of double dislocation gliding [J]. *Guangxi Sciences*, 2016, 23(5): 443-447.

[9] HIROUCHI T, TAKAKI T, TOMITA Y. Development of numerical scheme for phase field crystal deformation simulation [J]. *Computational Materials Science*, 2009, 44(4): 1192-1197.

[10] GAO Y J, DENG Q Q, HUANG L L, et al. Atomistic modeling for mechanism of crack cleavage extension on nano-scale[J]. *Comput Mater Sci*, 2017, 130: 64.

[11] 黄世叶, 李胜男, 胡绪志, 等. 晶界位错运动的空位晶体相场模拟[J]. *广西科学*, 2016, 23(5): 459-464.

HUANG S Y, LI S N, HU X Z, et al. Vacancy phase-field-crystal simulation of dislocation motion of grain boundary [J]. *Guangxi Sciences*, 2016, 23(5): 459-464.

[12] 叶里, 胡绪志, 黄礼琳, 等. 拉应力作用下晶界位错运动过程的晶体相场模拟[J]. *广西科学*, 2016, 23(5): 470-473, 484.

YE L, HU X Z, HUANG L L, et al. Phase-field-crystal simulation of grain boundary dislocation motion under tensile stress [J]. *Guangxi Sciences*, 2016, 23(5): 470-473, 484.

- and growth of fat greenling during early development [J]. Journal of Fishery Sciences of China, 1999, 6(3): 1-4.
- [32] 初庆柱, 叶富良, 宋波澜, 等. 军曹鱼仔鱼期的摄食与生长[J]. 湛江海洋大学学报, 2005, 25(3): 8-12.  
CHU Q Z, YE F L, SONG B L, et al. Feeding and growth of *Rachycentron canadum* during early development[J]. Journal of Zhanjiang Ocean University, 2005, 25(3): 8-12.
- [33] 殷名称, 北海鲱卵黄囊期仔鱼的摄食能力和生长[J]. 海洋与湖沼, 1991, 22(6): 554-560.  
YIN M C. Feeding ability and growth of the yolk - sac larvae of North Sea Herring[J]. Oceanologia et Limnologia Sinica, 1991, 22(6): 554-560.
- [34] 王有基, 陆望明, 胡梦红, 等. 人工育苗条件下泥鳅仔鱼的摄食与生长[J]. 华中农业大学学报, 2007, 26(5): 665-669.  
WANG Y J, LU W M, HU M H, et al. Feeding and growth of *misgurnus anguillicaudatus* during early development under artificial rearing conditions[J]. Journal of Huazhong Agricultural University, 2007, 26(5): 665-669.
- [35] 殷名称, BLAXTER J H S. 海洋鱼类仔鱼在早期发育和饥饿期的巡游速度[J]. 海洋与湖沼, 1989, 20(1): 1-9.  
YIN M C, BLAXTER J H S. Cruising speeds during early development and starvation of marine fish larvae [J]. Oceanologia et Limnologia Sinica, 1989, 20(1): 1-9.

(责任编辑: 陆 雁)

(上接第 249 页 Continue from page 249)

- [13] 叶里, 黄礼琳, 孔令一, 等. 晶体弹性行为的晶体相场模拟[J]. 广西科学, 2016, 23(5): 474-477.  
YE L, HUANG L L, KONG L Y, et al. Phase-field-crystal simulation for elastic behavior of crystals[J]. Guangxi Sciences, 2016, 23(5): 474-477.
- [14] WU K A, VOORHEES P W. Phase field crystal simulations of nanocrystalline grain growth in two dimensions[J]. Acta Materialia, 2012, 60(1): 407-419.
- [15] 高英俊, 罗志荣, 邓芊芊, 等. 韧性材料的微裂纹扩展与分叉的晶体相场模拟[J]. 计算物理, 2014, 31(4): 471-478.  
GAO Y J, LUO Z R, DENG Q Q, et al. Phase-field-crystal modeling of microcrack propagation and branching in ductile materials[J]. Chinese Journal of Computational Physics, 2014, 31(4): 471-478.
- [16] 黄礼琳, 叶里, 胡绪志, 等. 不同晶向取向的裂纹扩展演化模拟[J]. 广西科学, 2016, 23(5): 454-458, 469.  
HUANG L L, YE L, HU X Z, et al. Simulation study of crack propagation and evolution in different crystal orientations[J]. Guangxi Sciences, 2016, 23(5): 454-458, 469.
- [17] 刘瑶, 袁龙乐, 卢强华, 等. 晶体相场模拟取向角对晶界湮没过程的影响[J]. 广西科学, 2016, 23(5): 437-442.  
LIU Y, YUAN L L, LU Q H, et al. Phase-field-crystal simulation of effect of different orientation angle on annihilation of grain boundary[J]. Guangxi Sciences, 2016, 23(5): 437-442.

(责任编辑: 陆 雁)