

材料裂纹扩展分叉机理的晶体相场法研究*

Phase-Field-Crystal Modeling for Crack Propagation and Branch of Materials

毛 鸿¹, 罗志荣^{1,2}, 黄世叶¹, 黄礼琳¹, 卢强华¹, 高英俊^{1**}

MAO Hong¹, LUO Zhi-rong^{1,2}, HUANG Shi-ye¹, HUANG Li-lin¹, LU Qiang-hua¹, GAO Ying-jun¹

(1. 广西大学物理科学与工程技术学院, 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. 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】进一步探索材料裂纹扩展分叉的机理。【方法】采用晶体相场模型研究平面应力作用下材料裂纹扩展的动态演化过程, 分析裂纹扩展过程体系自由能 G 、裂纹面积分数 S 、裂口周长 L 的变化特征; 分别从 G 、 S 、 L 的变化阐述裂纹扩展以及三者与裂纹扩展临界应变 ϵ_c 的对应关系; 探讨裂口扩展和主裂纹分叉与体系能量 G 的内在关联。【结果】无应力施加时期, 裂纹面积分数 S 和裂口周长 L 没有变化; 施加拉伸应力后, 当系统应变达到一定程度时, S 和 L 开始同时增加, 此时的应变大小对应于裂纹启裂临界应变 ϵ_c 值。【结论】应力施加导致材料中心裂口处应力集中, 体系能量上升, 系统能量曲线一阶导数的拐点对应于中心裂纹启裂时刻或临界应变。自由能曲线一阶导数拐点处能量上升速率变缓, 表明此时弹性应变能得到释放。

关键词: 晶体相场模型 临界应变 弹性应变能 裂纹扩展

中图分类号: TG111 **文献标识码:** A **文章编号:** 1005-9164(2015)05-0499-07

Abstract: 【Objective】The dynamic process of crack propagation under the biaxial tensile deformation is simulated by using the phase-field-crystal model. 【Methods】The variation characteristics of the factors, such as the free energy G , crack area fraction S , crack circumference L , on crack propagation were analyzed. The crack propagation dynamic process and the corresponding relation of the critical strain for crack propagation were illustrated based on the changes of G , S , L in crack propagation. Both the crack propagation and the main crack bifurcation were investigated with their relationship to system energy G . 【Results】The crack area S scores and fissure perimeter L did not change without applying stress. When the strain of system reached a certain extent, S and L began to increase at the same time. At this point the strain magnitude corresponds to the crack critical strain ϵ_c . 【Conclusion】Application of stress to the center of the crack induces the stress concentration. The inflection point of first derivative for the free energy curve is corresponding to the crack propagation time. The first derivative of the free energy curve can be slowed down at the inflection point, which indicates that the elastic strain energy can be released at this time.

Key words: phase - field - crystal model, critical strain, elastic strain energy, crack propagation

收稿日期: 2015-07-25

作者简介: 毛 鸿(1988-), 男, 硕士研究生, 主要从事纳米材料性能与计算模拟实验方面的研究。

* 国家自然科学基金项目(51161003, 50661001)和广西研究生教育创新计划基金项目(YCSZ2014039, YCSZ2015029)资助。

** 通讯作者: 高英俊(1962-), 男, 教授, 博士生导师, 主要从事纳米结构材料设计与计算模拟实验方面的研究, E-mail: gaoyj@gxu.edu.cn.

0 引言

【研究意义】工程材料对外加载荷作用下裂纹扩展的敏感性研究是工程应用中的重要课题。工程术

语“疲劳”通常指应力作用引起材料性能发生变化的现象,特别是当这些变化导致材料开裂或失效的时候,而疲劳裂纹扩展则是材料局部塑性损伤累积的过程^[1]。由材料加工而成的部件在往复载荷作用下,一般都会发生疲劳破坏。随着人们对复合材料组织结构的深入研究,材料内部微裂纹行为的研究也越来越受到关注^[2]。材料在介观和宏观尺度上的性能在很大程度上由其内部的微观缺陷,如空位、空洞、位错、晶界和微裂纹所决定。这些缺陷起因于原子尺度发生的复杂非平衡动力学过程^[3]。【前人研究进展】相场方法^[4]是研究微观结构演化的数值计算方法^[5,6]。传统的相场方法^[7~9]是建立在平衡均匀场基础上,忽略许多由原子的周期排列结构产生的物理特征,难以反映晶体学结构特性以及原子尺度的行为信息。因而,无法从根本上阐明微观组织演化过程中原子尺度上的动力学机理。最近,Elder等^[3,4,10]基于密度泛函理论提出晶体相场(Phase-field-crystal,PFC)模型。该模型将液态的密度场定义为常量,将固相的密度场表示成周期性函数(波),进而通过周期性的原子密度场就能很自然地与弹性效应、晶粒取向和位错的运动等由周期结构产生的物理特性紧密地关联起来^[11]。PFC模型既可以描述晶体学结构特性以及原子尺度的行为,又可以揭示时间尺度为 10^{-6} 秒量级的原子、缺陷运动的行为特征^[2,12,13]。可以预见,PFC方法在今后的微结构演化的研究中将展示其强大的优势,为研究原子尺度组织结构的 10^{-6} 秒量级的行为特征提供先进和强有力的帮助^[14]。目前,PFC方法已经有了一些具体的应用,例如位错滑移、攀移和湮灭^[15]、结构转变^[16]、异质外延生长^[17,18]等研究。PFC方法最新的研究集中于将加工变形的外界作用因素加入PFC模型中,建立形变和位错动力学的PFC模型,用于断裂、蠕变等行为和性能的机理研究,例如Elder等^[19]应用PFC方法在单轴拉伸条件下对裂纹扩展进行了初步模拟,高英俊等^[9,14,16]应用PFC方法对微裂纹扩展和连通进行了研究。【本研究切入点】目前,材料微裂纹扩展的研究主要针对那些已经发生畸变的材料内部裂纹的自扩展行为^[20],但是,材料在受到外部载荷累积应变作用下的疲劳裂纹扩展行为以及裂纹分叉还鲜有报道^[21,22]。【拟解决的关键问题】采用双轴拉伸模型,应用PFC方法模拟研究材料受到外部应变作用下其内部微裂纹扩展分叉演化的过程,以期揭示材料裂纹扩展分叉的机理。

1 模型与方法

1.1 PFC模型

PFC模型的自由能密度函数是通过原子密度场变量取极小值得到的。体系无量纲的PFC自由能函数^[3]可以写成

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

式中, γ 是反映体系温度的参数, ∇^2 为Laplace算子。

对二维体系的极小自由能函数作单模近似,得到平衡时二维三角格子固相的原子密度函数^[3] ρ ,可写成如下形式

$$\rho(x, y) = A_0 \left[\cos(qx) \cos\left(\frac{qy}{\sqrt{3}}\right) - \frac{1}{2} \cos\left(\frac{2qy}{\sqrt{3}}\right) \right] + \rho_0, \quad (2)$$

式中 $A_0 = \frac{4}{5}(\rho_0 + \frac{1}{3}\sqrt{-15\gamma - 36\rho_0^2})$, $q = \sqrt{3}/2$ 。 q 为波数, A_0 为振幅, ρ_0 为平均原子密度。

1.2 动力学方程

保守的原子密度场变量的演化可用与时间相关的Cahn-Hilliard动力学方程^[4]描述:

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

式中, ζ 为高斯随机噪声项,具有零平均值,在本文中可以不考虑。

为了提高计算效率,对式(3)采用半隐式傅里叶法^[20,23]求解,整理可得

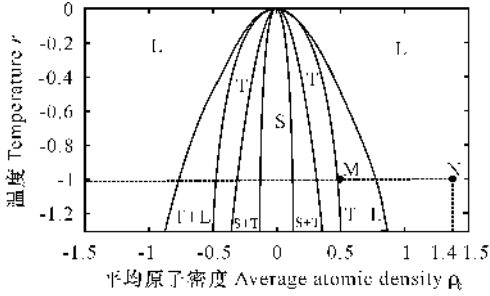
$$\tilde{\rho}_{k,t+\Delta t} = \frac{\tilde{\rho}_{k,t} - k^2 \Delta t (\tilde{\rho}_{k,t}^3)}{1 + k^2 \Delta t [r + (1 - k^2)^2]}, \quad (4)$$

式中, $\tilde{\rho}_{k,t+\Delta t}$ 和 $\tilde{\rho}_{k,t}$ 分别为 $t + \Delta t$ 和 t 时原子密度 ρ 在傅里叶空间的变换形式。

1.3 样品制备

在晶体相场模型中,对二维体系极小自由能函数作单模近似,可以获得平衡液相L、三角相T、条状相S在二维系统中的自由能密度^[20],再利用公切线法则可以将平衡态的成分点绘制成相图^[4](图1)。文中固相用三角晶相表示,选取原子密度 $\rho_0 = 0.49$ 、温度 $\gamma = -1.0$ (图1中M点),位于均匀无序相与三角格子固相共存区。对单晶样品微裂纹扩展进行模拟实验时,计算模拟区域为 $512\Delta x \times 512\Delta y$ ($64a \times 64a$),其中 a 为原子的宽度, $\Delta x = \Delta y = \pi/3$,其原子的排列方向与 x 轴夹角 θ 为 8° 。在样品中心位置,设置一个半径 $R = 8$ 的圆形缺口作为初始裂口位置,缺口处的参数设为 $\rho = 1.4, \gamma = -1.0$ (图1中N点),选取该点参数适合裂纹在三角晶相中扩展。由于不涉及具体材料的物性参数,模拟所用参数均已无量纲化处理,并将连续空间离散为正方格子,计算时采用周期

性边界条件^[24]。利用式(2)得到一个含有裂口的初始样品,并采用弛豫的方法使系统能量达到稳定状态^[25,26],样品弛豫时间步长为 10000 步,最终得到的初始样品如图 2 a 所示,其能量变化曲线如图 2 b 所示,可以看出初始样品在弛豫之后能量达到稳定平衡。



L, T, S 分别表示液相,三角相,条状相

L, T and S represent liquid phase, triangular phase and strip phase, respectively

图 1 单模近似得到的二维相图

Fig. 1 Two-dimensional phase diagram obtained by using one-mode approximation

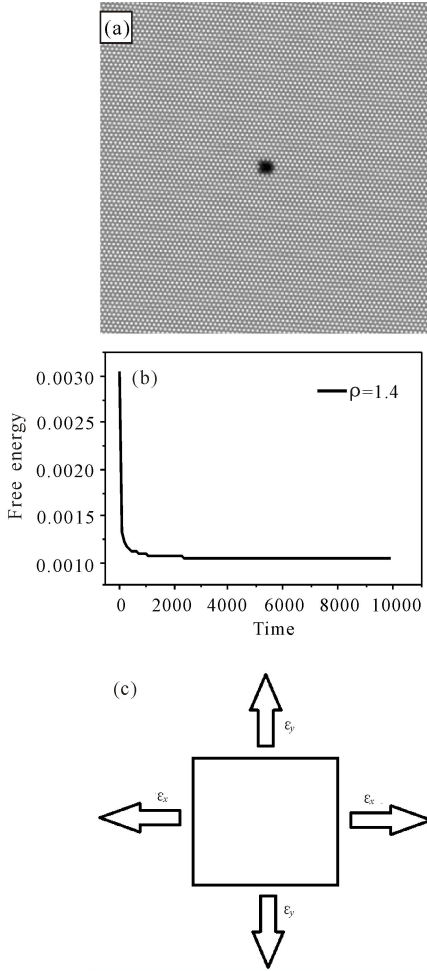


图 2 初始样品二维图(a),弛豫过程的体系自由能曲线(b)及应变的施加(c)

Fig. 2 The initial sample figure (a), the relaxation process of system free energy curve (b) and the strain applied (c)

1.4 应变的施加

对样品采用双轴拉伸加载,在受到拉伸作用后,样品中所有格点的坐标位置都会发生相应的变化^[20]。因此,可通过格点的坐标位置变换来反映应变作用所引起的样品变形。设变形前的样品中格点位置的坐标用 (x, y) 表示,受拉伸作用引起变形后,格点位置的坐标用 (x', y') 表示。样品在 x 方向和 y 方向分别受到随时间累加的应变 ϵ_x 和 ϵ_y 的拉伸作用,其中 $\epsilon_x = n * \dot{\epsilon} * \Delta t$, $\epsilon_y = n * \dot{\epsilon} * \Delta t$, $\dot{\epsilon}$ 表示应变率。变形前后坐标变换关系为 $x' = x / (1 + \epsilon_x)$ 和 $y' = y / (1 + \epsilon_y)$ 。由于应变作用引起样品变形,其内部原子密度函数变为 $\rho(x', y') = \rho(x / (1 + \epsilon_x), y / (1 + \epsilon_y))$ 。因此,在考虑应变作用引起变形的情况下,原子密度函数表达式(2)将变换为 $\rho(x', y')$,体系的能量也随之发生相应的变化,但控制演化的动力学方程的形式保持不变。将样品变形后的原子密度 $\rho(x', y')$ 代入动力学方程(3),按照数值化计算步骤进行数值求解,然后进行可视化处理,即可得到裂纹扩展的演化细节图。其中,时间步长 $\Delta t = 0.05$,应变率 $\dot{\epsilon}_x = \dot{\epsilon}_y = \dot{\epsilon} = 6 \times 10^{-6}$,模拟时间为 $n = 600000$ 步。

2 模拟结果与分析

图 3 为双轴同步拉伸后得到的裂纹扩展分叉演化图,可以看出裂纹扩展首先发生在中心裂口处^[27]。为了进一步说明应变施加过程中裂口处的应力集中情况,现选取有裂口和无裂口的两个 50×50 格点等面积区域 I 和 II (图 4 a 所示)进行能量统计,得到自由能曲线如图 4 b 所示。其中 II 曲线代表中心裂口区域自由能变化曲线, I 曲线代表非裂口区域自由能变化曲线。随着时间的演化,中心裂口处能量集中程度明显高于非裂口区域。这表明应变施加导致体系能量在裂口处集中,当能量集中到临界值,裂口周围的原子排列遭到破坏,导致裂纹的萌生和扩展。中心裂口处裂纹萌生和扩展可以分为两个阶段:裂口扩展和主裂纹分叉。裂口扩展(图 3 b 中①虚线框处)分 4

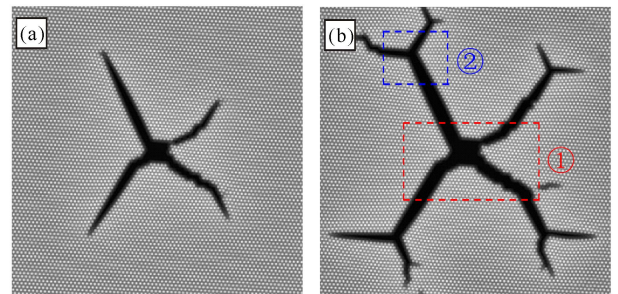


图 3 双轴拉伸裂纹扩展演化

Fig. 3 Evolution of biaxial tensile crack extension (a) 3×10^5 time steps, (b) 6×10^5 time steps

条裂纹支路,形成主裂纹,4条主裂纹发生分叉(图3b中②虚线框处),产生两条新的裂纹分支。

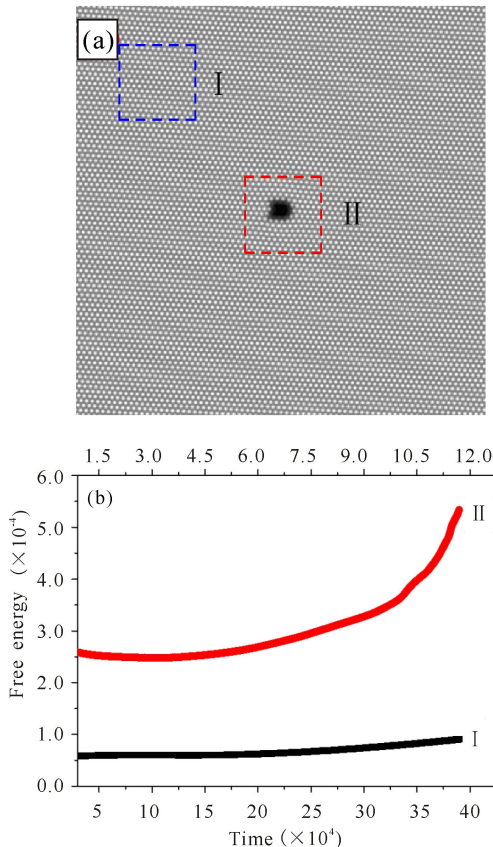


图4 晶体不同区域(a)及其自由能曲线(b)

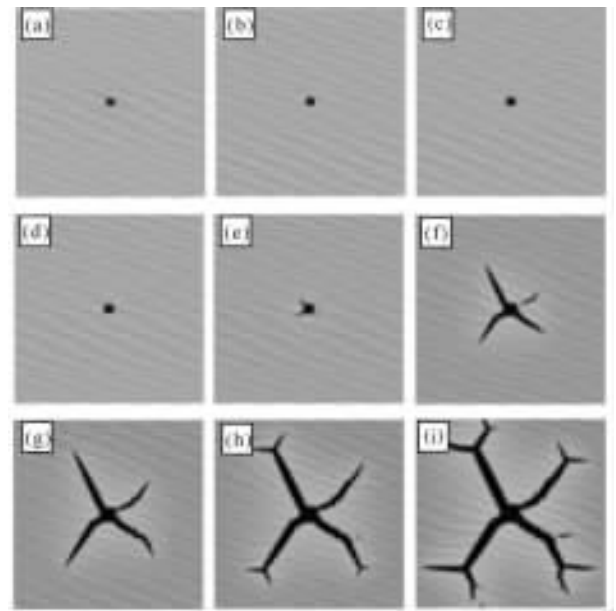
图5a~i为双轴拉伸得到的裂纹扩展演化图。由图5a~d可见双轴应变施加初期,晶体中心裂口并没有裂纹扩展,直到应力施加到E点(图6, $t = 300000$),裂口才开始多裂纹扩展;当主裂纹扩展到H点(图6, $t = 500000$)时开始出现分叉,最终形成“蟹”形裂纹图案。

晶体裂纹扩展分叉过程体系的自由能变化如图6所示,对应体系自由能拟合曲线的函数形式如下:

$$F(\epsilon) = -4.9\epsilon^3 + 1.3\epsilon^2 - 0.045\epsilon + 0.001, \epsilon = 0 \sim 0.2,$$

式中 ϵ 代表应变大小。

由体系自由能变化曲线可以看出,在双轴应变施加过程中,系统自由能经历了一个较大的上升过程,此过程在外加载荷作用下,中心裂口处形成应力集中使得体系自由能上升,而此时的应力集中程度还不足以提供产生新表面所需的能量,中心裂纹不会扩展^[28]。当系统自由能上升到拐点时(E点, $\epsilon = 0.09$),裂口开始扩展。当应变 ϵ 达到(H点, $\epsilon = 0.15$)时,自由能曲线开始下降,于是出现了主裂纹开始分叉,裂纹迅速发展,体系的自由能迅速下降。表明此时由于裂纹扩展过程体系释放的能量已经超过



(a) $t = 100000$, (b) $t = 150000$, (c) $t = 200000$, (d) $t = 250000$, (e) $t = 300000$, (f) $t = 400000$, (g) $t = 450000$, (h) $t = 500000$, (i) $t = 550000$

图5 双轴拉伸裂纹扩展演化

Fig. 5 Evolution of biaxial tensile crack extension

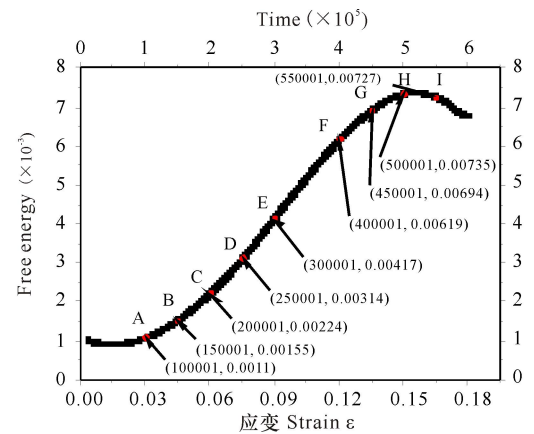


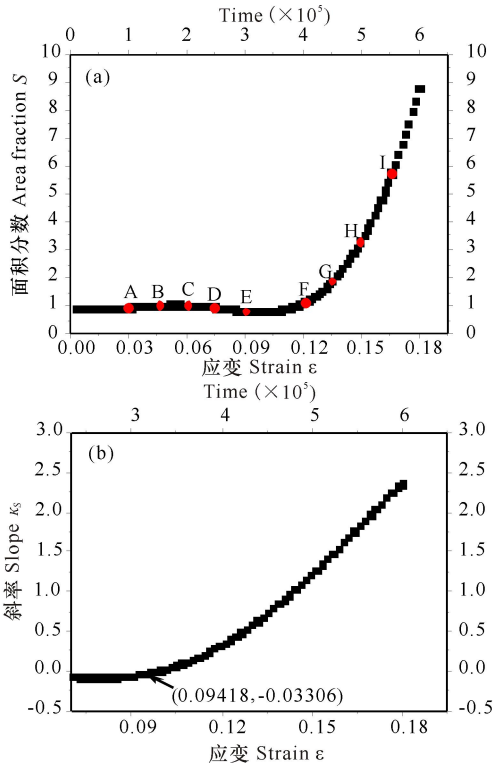
图6 裂纹演化过程体系自由能变化曲线

Fig. 6 Free energy change curve for crack evolution

了由于应变施加增加的能量。

裂纹面积分数反映裂纹在二维平面中所占有的面积比例,是随时间步长变化的参数。初始样品在平面拉伸应力作用下,裂纹面积分数的变化能够反映中心裂纹扩展演化的过程。从图7可以看出,在应变 ϵ 还未达到0.09时,裂纹面积分数 S 基本保持不变,此时所对应的面积分数为预置的中心裂口面积。当 ϵ 超过0.09时,随着时间步长的增加,裂纹面积大小开始增加,E~I阶段的裂纹面积分数不断增加,从裂纹演化图5中对应的裂纹扩展可以看出,此阶段中心裂纹已经开始扩展,裂纹面积分数越来越大。图7a表示裂纹面积分数与应变大小变化的曲线关系。随着平面应力的施加,系统应变也相应增加,相应的面

积分数也不断增加。图 7b 表示裂纹面积分数 S 曲线的斜率 κ_S 变化。 κ_S 反映裂纹面积增加的速率,可以看出,当应变还未达到 9.4% 时,裂纹面积变化的速率没有发生变化。说明中心裂纹未发生扩展。当应变超过 9.4% 时,裂纹面积增加的速率开始增加,说明裂纹扩展加快。其中系统应变变量 9.4%,即裂纹扩展的临界应变大小。



相一致。由图 7 和图 8 裂纹面积分数 S 和裂纹周长 L 参数可以看出,两个参数都能反映出裂纹的启裂时间步以及裂纹扩展临界应变大小。表明裂纹扩展临界应变大小 $\epsilon_c = 9.4\%$ 。

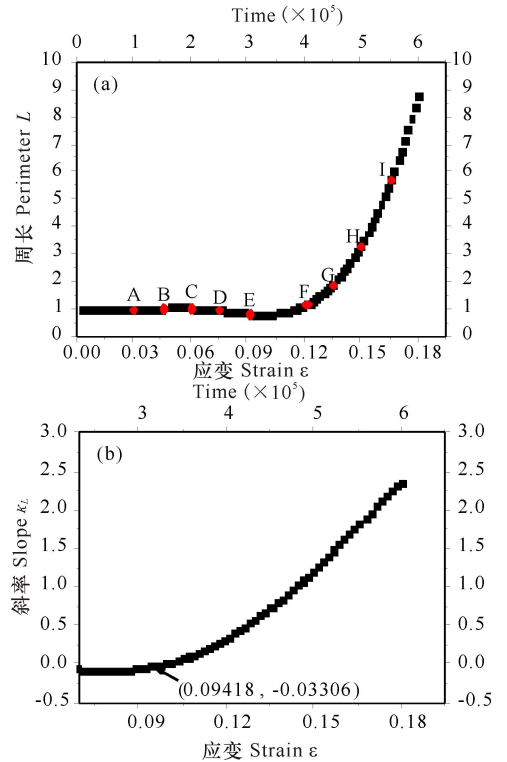


图 8 裂纹周长与时间步和应变关系曲线 (a), $\kappa_L = dL/d\epsilon$ 与应变 ϵ 的关系曲线 (b)

Fig. 8 The relationships among crack perimeter, time step and stress-strain curve(a), and between crack perimeter change rate ($\kappa_L = dL/d\epsilon$) and stress-strain curve(b)

图 7 裂纹面积与时间步和应变关系曲线 (a), $\kappa_S = dS/d\epsilon$ 裂纹面积变化率与应变 ϵ 的关系曲线 (b)

Fig. 7 The relationships among crack area, time step and stress-strain curve(a) and between crack area change rate ($\kappa_S = dS/d\epsilon$) and stress-strain curve(b)

裂纹周长 L 表示裂纹扩展形成的新表面与基体三角相之间的比例关系。在二维平面中裂纹周长 L 表示裂口长度,图 8 表示裂纹周长曲线与时间步长和应变大小关系的曲线,从图 8a 可以观察到裂口周长 L 在应力施加前接近于零。此时的裂口周长为预置缺陷周长。在图 8a 可以看到 A~E 阶段的裂口周长 L 没有变化,依然是施加应变前的裂口周长,表明在应力施加过程中中心裂纹没有发生扩展。当演化时间步在 $t = 300000$ 附近时,裂口周长变化曲线开始上升,说明中心裂口此时开始发生扩展。此时间步即为裂纹扩展启裂时间步,对应图 5e 裂纹扩展演化图。图 8a 中当系统应变未达到 9.4% 时裂口周长 L 没有变化,一直保持在零附近。从图 8b 裂口周长增长速率 κ_L 可以看出,在应变达到 9.4% 后裂口周长增加速率很明显,表明裂纹开始发生扩展,与 κ_S 的变化规律

在裂纹扩展过程中会发生裂口扩展和主裂纹分叉,而这两种形式的裂纹扩展都会使得体系自由能下降,但是自由能曲线并没有反应出表面能与应变能之间的竞争,应变的施加以及裂纹扩展形成的新表面使得系统自由能上升,裂纹扩展弹性应变能释放率增加使得整个体系自由能降低,这两种能量变化的竞争势态可以由能量曲线变化率反映,自由能函数一阶导数拐点能够反映主裂纹扩展的临界点^[29],此时的应变值即为裂纹扩展临界应变值。图 9 表示自由能一阶导数能量释放率 $\kappa_G = dG/dt$ 相关曲线^[30,31]。

由图 9 可以看出,演化的 A~E 阶段,系统自由能变化率大于 0,即体系能量是增加的过程,表明此过程自由能不断上升。能量首先经历了一段快速上升的过程,此过程验证了外载使得中心裂口处应力集中程度加大,体系应变能聚积增加。当演化达到 3×10^5 步(图 9a)附近,自由能一阶导数出现拐点,此时拐点值表明自由能上升速率增加趋势变缓,该过程对

应裂口开始扩展,裂纹扩展使得集中的能量得到部分释放。由图 9b 可以观察到裂口已经开始分支扩展,此时对应的应变大小为 9.42%(图 9a)。

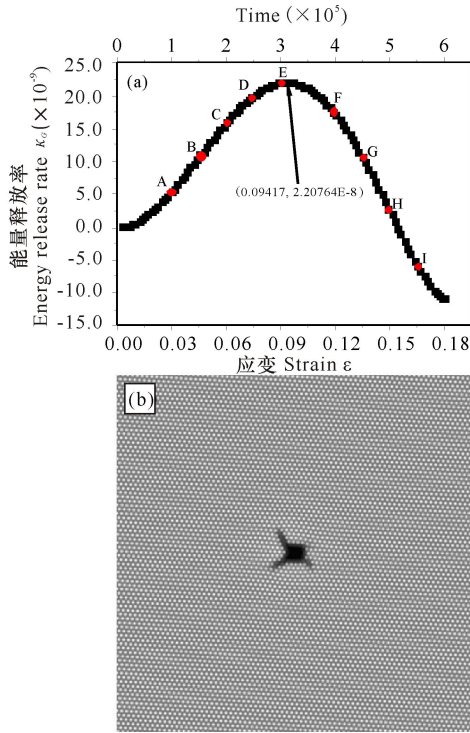


图 9 自由能曲线对时间步的一阶导数 $\kappa_G = dG/dt$ (a), 应变达到 $\epsilon_c = 0.094$ 时裂口的形貌图(b)

Fig. 9 First derivative for free energy and time step curve($\kappa_G = dG/dt$) (a), and morphology of crack evolved at $\epsilon_c = 0.094$ (b)

3 结论

本文应用 PFC 方法模拟研究材料受到外部应变作用下其内部微裂纹扩展分叉演化的过程,发现施加与时间同步累积的外部应变作用后,体系自由能逐渐上升。当中心裂口处未发生裂纹萌生和扩展之前,应变作用使得材料内部中心裂口处比非裂口缺陷处应变能集中程度高。应变的施加使得应变能集中在缺陷处。当裂纹开始扩展,裂口聚积的应变能得到释放,此时系统能量上升幅度变缓。当裂纹扩展释放应变能大于裂纹新表面形成能之和时,自由能曲线开始下降。裂纹演化图、自由能曲线变化率 κ 、裂纹面积分数 S , 裂纹周长 L 变化,这 4 个方面的特征变化指标都能反映出当累积应变大小达到 9.42%时,裂口开始扩展,此时的应变大小对应裂纹扩展临界应变值,并且主裂纹分叉能够缓解裂纹扩展。

参考文献:

[1] 米格兰比 H. 材料的塑性变形与断裂 [M]. 北京:科学出版社,1998.

M Weinheim. Plastic Deformation and Fracture of Materials[M]. Beijing: Science Press,1998.

[2] Das S D L. On a moving griffith crack at the interface of two bonded dissimilar orthotropic half - planes [J]. ZAMM,2001,81(4):281-287.

[3] Elder K R, Katakowski M, Haataja M, et al. Modeling elasticity in crystal growth[J]. Physical Review Letters, 2004,88(24):245701-245704.

[4] Elder K R, Grant M. Modeling elastic and plastic deformations in nonequilibrium processing using phase field crystals[J]. Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys, 2004,70(5):051605-051618.

[5] Moelans N, Blanpain B, Wollants P. An introduction to phase-field modeling of microstructure evolution [J]. Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry, 2008,32(2):268-294.

[6] Wang Y, Li J. Phase field modeling of defects and deformation[J]. Acta Materialia, 2010,58(4):1212-1235.

[7] Millett P C, Selvam R P, Saxena A. Molecular dynamics simulations of grain size stabilization in nanocrystalline materials by addition of dopants [J]. Acta Materialia, 2006,54(2):297-303.

[8] Steinbach I. Phase-field model for microstructure evolution at the mesoscopic scale[J]. Annual Review of Materials Research, 2013,43:89-107.

[9] 高英俊, 罗志荣, 胡项英, 等. 相场方法模拟 AZ31 镁合金的静态再结晶过程[J]. 金属学报, 2010,46(10):1161-1172.

Gao Y J, Luo Z R, Hu X Y, et al. Phase field simulation of static recrystallization for AZ31 Mg alloy [J]. Acta Metallurgica Sinica, 2010,46(10):1161-1172.

[10] Berry J, Grant M, Elder K R. Diffusive atomistic dynamics of edge dislocations in two dimensions[J]. Phys Rev E Stat Nonlin Soft Matter Phys, 2006,73(31):31609-31615.

[11] 任秀, 王锦程, 杨玉娟, 等. 纯物质晶界结构及运动的晶体相场法模拟[J]. 物理学报, 2010,59(5):3595-3600.

Ren X, Wang J C, Yang Y J, et al. Simulation of the structure and motion of grain boundary in pure substances by phase field crystal model[J]. Acta Physica Sinica, 2010,59(5):3595-3600.

[12] Zubillaga L, Turon A, Renart J, et al. An experimental study on matrix crack induced delamination in composite laminates[J]. Composite Structures, 2015,127:10-17.

[13] Gomez H, Nogueira X. An unconditionally energy-stable method for the phase field crystal equation [J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2012,249:249-252;52-61.

- [14] 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(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(4): 471-478.
- [15] 罗志荣, 黄世叶, 茹谢辛, 等. 晶体相场法模拟大角度晶界的变形过程[J]. 广西科学, 2013, 20(4): 311-315.
Luo Z R, Huang S Y, Ru X X, et al. Phase-field-crystal modeling for deformation process of high-angle grain boundary[J]. Guangxi Sciences, 2013, 20(4): 311-315.
- [16] 高英俊, 罗志荣, 黄创高, 等. 晶体相场方法研究二维六角相向正方相结构转变[J]. 物理学报, 2013, 62(5): 050507-050510.
Gao Y J, Luo Z R, Huang C G, et al. Phase field crystal modeling for 2D transformation from hexagonal to square structure[J]. Acta Physica Sinica, 2013, 62(5): 050507-050510.
- [17] Chandra Kishen J M, Konjengbam Darunkumar Singh. Stress intensity factors based fracture criteria for kinking and branching of interface crack: Application to dams [J]. Engineering Fracture Mechanics, 2001, 68(2): 201-219.
- [18] Yu Y, Backofen R, Voigt A. Morphological instability of heteroepitaxial growth on vicinal substrates: A phase-field crystal study [J]. Journal of Crystal Growth, 2011, 318(1): 18-22.
- [19] Elder K R, Rossi G, Kanerva P, et al. Patterning of heteroepitaxial overlayers from nano to micron scales[J]. Physical Review Letters, 2012, 108(21): 2261021-2261025.
- [20] 刘晓波, 徐庆军, 刘剑. 铝裂纹扩展行为的分子动力学模拟[J]. 中国有色金属学报, 2014, 24(6): 08.
Liu X B, Xu Q J, Liu J. Molecular dynamics simulation of crack propagation behavior of aluminum[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2014, 24(6): 08.
- [21] 谢培. 裂纹分叉原因分析及分叉角的预测[D]. 沈阳: 东北大学, 2011.
Xie P. Study on the Reason of Crack Branching and the Prediction of Branched Angle[D]. Shenyang: Northeastern University, 2011.
- [22] Murphy N, Ali M, Ivankovic A. Dynamic crack bifurcation in PMMA [J]. Engineering Fracture Mechanics, 2006, 73(16): 2569-2587.
- [23] 卢成健, 蒋丽婷, 王玉玲, 等. 晶体相场法模拟小角度晶界的位错结构及其演化[J]. 广西科学, 2013, 20(4): 316-320.
Lu C J, Jiang L T, Wang Y L, et al. Dislocation structure evolution in low angle grain boundary[J]. Guangxi Sciences, 2013, 20(4): 316-320.
- [24] Gomez H, Nogueira X. An unconditionally energy-stable method for the phase field crystal equation [J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2012, 249-252: 52-61.
- [25] 贺鹏飞, 李京剑, Yuan C, 等. 从微孔洞起始的热冲击裂纹的数值研究[J]. 复合材料学报, 2002(5): 79-83.
He P F, Li J J, Yuan C, et al. Initiation of crack from the pores in porous ceramics under thermal shock[J]. Compositae Sinica A, 2002(5): 79-83.
- [26] 钱怡, 崔维成. 变幅载荷下疲劳裂纹扩展规律试验研究综述[J]. 船舶力学, 2010(5): 556-565.
Qian Y, Cui W C. An overview on experimental investigation on variable amplitude fatigue crack growth rule [J]. Journal of Ship Mechanics, 2010(5): 556-565.
- [27] 侯密山. 压电材料反平面运动裂纹的能量释放率与分叉角[J]. 应用力学学报, 2001(2): 53-58.
Hou M S. Energy release rate and bifurcation angles of dynamic electroelastic for piezoelectric materials with [J]. Chinese Journal of Applied Mechanics, 2001(2): 53-58.
- [28] Meggiolaro M A, Miranda A C O, Castro J T P, et al. Stress intensity factor equations for branched crack growth[J]. Engineering Fracture Mechanics, 2005, 72(17): 2647-2671.
- [29] 肖涛, 左正兴, 刘栋, 等. 基于虚拟裂纹闭合法计算裂纹扩展的能量释放率[J]. 北京理工大学学报, 2010(1): 37-41.
Xiao T, Zuo Z X, Liu D, et al. Computation of the crack propagation energy release rate based on the virtual crack closure technique[J]. Transactions of Beijing Institute of Technology, 2010(1): 37-41.
- [30] 张双寅. 功能梯度材料裂纹能量释放率[J]. 力学与实践, 2003(1): 22-23.
Zhang S Y. Fracture energy release rate in functionally graded materials[J]. Mechanics and Practice, 2003(1): 22-23.
- [31] 甘阳, 周本濂. FeMoSiB 纳米晶薄带的裂纹扩展阻力和结构的关系[J]. 金属学报, 2001(4): 391-394.
Gan Y, Zhou B L. Study on the brittle fracture of FeMoSiB nanocrystalline alloy ribbon[J]. Acta Metallurgica Sinica, 2001(4): 391-394.

(责任编辑: 尹 闯)