

## 不同晶向取向的裂纹扩展演化模拟\*

# Simulation Study of Crack Propagation and Evolution in Different Crystal Orientations

黄礼琳, 叶里, 胡绪志, 黄创高, 卢强华, 高英俊\*\*

HUANG Lilin, YE Li, HU Xuzhi, HUANG Chuanggao, LU Qianghua, GAO Yingjun

(广西大学物理科学与工程技术学院, 广西南宁 530004)

(College of Physical Science and Technology, Guangxi University, Nanning, Guangxi, 530004, China)

**摘要:**【目的】研究具有不同初始晶向倾角的样品在单轴拉应变作用下的纳观尺度裂纹扩展行为, 了解裂纹的生长特征和扩展规律, 揭示纳米级裂纹扩展机理及其对材料断裂的影响。【方法】采用晶体相场法观察不同晶向倾角下裂纹的扩展演化图及对应的应力分布图。【结果】当拉应变作用达到临界值时, 无预应变的样品裂口开始起裂, 并伴随着位错出现。在晶向倾角为  $0^\circ$ 、 $5^\circ$  时, 裂口在起裂时, 缺口两端裂纹和裂口相连接, 裂纹主要是解理脆性断裂模式扩展; 在晶向倾角为  $10^\circ$  时, 裂口向左右两边各发射一个位错, 位错在滑移过程中留下一系列空位, 空位连通形成裂纹再与主裂口相连, 裂纹主要是韧性断裂模式扩展。【结论】不同晶向取向对裂纹的扩展演化有重要影响。

**关键词:** 微裂纹 晶向取向 位错发射 晶体相场

**中图分类号:** TG111 **文献标识码:** A **文章编号:** 1005-9164(2016)05-0454-05

**Abstract:** 【Objective】The samples with different initial crystal orientations and the crack propagation behavior of nano scale under uniaxial tensile strain are studied, to understand the growth characteristics and propagation law of crack, and to reveal the mechanism of nano scale crack propagation and its effect on material fracture. 【Methods】The crack propagation evolution and the corresponding stress distribution of different crystal orientations are observed by means of the phase-field-crystal method. 【Results】The tensile strain is applied onto the samples without pre-deformation, and the crack begins to propagation with dislocations when the strain reaches the critical value. For the sample with crystal orientation at  $0^\circ$  and  $5^\circ$ , the crack begins to propagation and connects to the notch, and the crack propagation is of cleavage brittle fracture mode; For the sample with crystal orientation at  $10^\circ$ , a dislocation is emitted from the left and right

sides of the crack, and the dislocation in the process of slipping leaves a series of vacancies, which grow up and form cracks, and then connect to the main crack. The crack is of ductile fracture mode propagation. 【Conclusion】Different crystal orientation has an important influence on the crack propagation and evolution.

**Key words:** micro cracks, crystal orientation, dislocation emission, phase-field-crystal

收稿日期: 2016-08-20

修回日期: 2016-09-21

作者简介: 黄礼琳(1980—), 男, 博士研究生, 主要从事纳米材料设计与模拟实验研究。

\* 国家自然科学基金项目(51161003), 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实验研究, E-mail: gaoyj@gxu.edu.cn。

## 0 引言

**【研究意义】**材料的变形与破坏主要源自材料的微结构,如空位、位错、晶界与微裂纹等<sup>[1]</sup>。要想深入研究材料的变形与破坏的特性与机理,还需要开展多尺度分析,把宏观分析与微纳观分析结合起来,在更深层次上找到问题的根源和变形破坏机制<sup>[2]</sup>。加载的材料通常会表现出可逆行为,当加载除去后,变形就会消失,并且储能能在变形原子键的弹性能得以释放。然而,对于塑性变形和裂纹开裂情况,这一行为是不可逆的。材料在变形中会有能量损耗,其主要来自两个方面:一是断裂产生新表面时所损耗的,二是位错形核和发射位错时所损耗的。因此,对于存在裂纹缺陷的材料变形行为的检验,特别是当位错的形核和运动是由非弹性变形主导的情况,是非常重要的。

**【前人研究进展】**目前已有许多断裂模拟研究,如高英俊等<sup>[3]</sup>研究韧性材料的微裂纹扩展和连通,毛鸿等<sup>[4]</sup>研究材料裂纹分叉的机理,刘晓波等<sup>[5]</sup>对铝裂纹扩展行为进行分子动力学模拟,Song 等<sup>[6]</sup>用相场法研究铁电体的裂纹尖端,Abdolahi 等<sup>[7]</sup>则用相场法模拟铁电体材料的断裂,张跃等<sup>[8]</sup>进行脆断微裂纹形核的原位观察。在这些模拟研究方法中,既有单尺度分子动力学模拟,也有复杂的多尺度模拟技术。分子动力学模拟有一定的局限性,即它的时间尺度主要适用于原子振动的时间尺度( $10^{-14} \sim 10^{-10}$  s),难以拓展到原子扩散的时间尺度( $10^{-6}$  s),而且由于分子动力学模拟强烈依赖于原子势函数的选择,这就要求所加载的应变力速率远高于实际工业生产的应变力速率( $10^2$  s<sup>-1</sup>),达到  $10^7 \sim 10^9$  量级<sup>[9]</sup>。这使其对微裂纹的扩展模拟与实际存在相当距离。**【本研究切入点】**晶体相场方法(PFC)<sup>[10-14]</sup>是基于密度泛函理论、继承传统相场模型优势而建立的,它能够揭示晶体学结构特性以及空间尺度为原子尺度、时间尺度为扩散时间尺度下的结构演化。由于该方法能够很好地描述扩散时间尺度上的微结构演化行为<sup>[15-17]</sup>,不针对特定材料,因此更适合用于研究微纳米尺度上的裂纹扩展细节<sup>[18-19]</sup>。**【拟解决的关键问题】**应用 PFC 方法研究不同初始晶向倾角条件下,单轴拉伸应变作用的裂纹生长特征和扩展规律,揭示纳米级裂纹扩展机理及其对材料断裂的影响。

## 1 PFC 模型与方法

### 1.1 PFC 模型

基于 PFC 模型的液态金属研究如枝晶生长已有许多报道,但更多的是用于固态金属研究。对于固态

金属材料,其原子的位置呈规则周期性排列,通过引入周期性相场变量,其局域位置的最大值对应于原子的位置;对于均匀相(液相等)中的原子分布为均匀分布,其值为常量。用周期原子密度函数作为相场变量,要符合上述两方面的要求,其表达式<sup>[11-14]</sup>可以写成

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

式中,等号右边第 1 项反映的是晶格原子密度的周期排列特征,第 2 项反映的是均匀相(如液相)的原子密度均匀分布。此时,系统无量纲的自由能函数可以写成<sup>[11]</sup>

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

式中, $\rho$  为局域原子密度, $\gamma$  为与温度有关的唯象参数, $\nabla^2$  为拉普拉斯算子。

在单模近似下,可以求得公式(2)的一个稳定特解为

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

式中, $A = \frac{4}{5}\rho_0 + \frac{4}{15}\sqrt{-15\gamma - 36\rho_0^2}$ ,反映晶相原子密度周期结构的振幅; $q = \sqrt{3}/2$ ,是在能量函数取极小值时所得; $\rho_0$  为平均密度。

### 1.2 动力学方程与数值计算

采用保守场 Cahn-Hilliard 动力学方程<sup>[15,18]</sup>描述原子密度随时间的演化,该方程具体如下:

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

其中  $t$  为时间变量。对无量纲动力学演化方程(4)采用半隐式傅里叶伪谱方法<sup>[20-21]</sup>求解,其离散形式为

$$\frac{\hat{\rho}_k(t + \Delta t) - \hat{\rho}_k(t)}{\Delta t} = [ - (1 + \gamma)k^2 + 2k^4 + k^6 ] \hat{\rho}_k(t + \Delta t) - k^2 \hat{\rho}_k^3(t), \quad (5)$$

式中  $\hat{\rho}_k(t + \Delta t)$  为傅里叶空间下  $t + \Delta t$  时刻的原子密度,  $\hat{\rho}_k(t) = \int e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\gamma}} \hat{\rho}_k(\vec{\gamma}, t) d\vec{\gamma}$ ,  $\hat{\rho}_k^3(t) = \int e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\gamma}} \hat{\rho}_k^3(\vec{\gamma}, t) d\vec{\gamma}$ ,  $\vec{k}$  为傅里叶空间的波矢,满足  $\vec{k}^2 = |\vec{k}|^2$ 。  $\rho_{i,j}^t$  和  $\rho_{i,j}^{t+\Delta t}$  分别为  $t$  和  $t + \Delta t$  时刻的原子密度。整理方程(5)后得:

$$\hat{\rho}_k(t + \Delta t) = \frac{\hat{\rho}_k(t) - k^2 \Delta t \hat{\rho}_k^3(t)}{1 + k^2 \Delta t [\gamma + (1 - k^2)^2]}. \quad (6)$$

### 1.3 样品制备

本研究晶体相用二维三角点阵相表示,其中平衡相为条状相、三角相和液相(图 1)。选取原子密度参

量为  $\rho_0 = 0.49$ , 温度参量  $\gamma = -1.0$  (图 1 中 B 点), 缺口处的参数设置为  $\rho_1 = 0.79, \gamma = -1.0$  (图 1 中 A 点)。应用公式(3)设置单晶体结构。计算模拟区域为  $1024\Delta x \times 512\Delta y, \Delta x = \Delta y = \pi/3$ , 其原子排列方向与  $y$  轴夹角  $\theta$  为  $0^\circ, 5^\circ, 10^\circ$ 。在样品的中心位置, 设置一半径  $r = 8$  的圆形缺口作为初始裂口。由于不涉及材料的物性参数, 模拟所用的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。设置的 3 组样品参数如表 1 所示。

有增量  $d = \dot{\epsilon} n \Delta t$ , 其中,  $\dot{\epsilon}$  为无量纲的应变速率,  $n$  为施加拉应变的时间步长数,  $\Delta t$  为时间步长,  $\Delta y' = \Delta y(1 + n \dot{\epsilon} \Delta t)$ 。

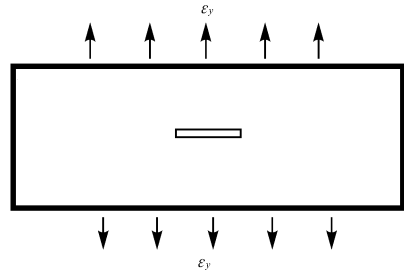


图 3 y 轴施加拉应变的示意图

Fig. 3 Schematic diagram of tensile strain applied to y axis

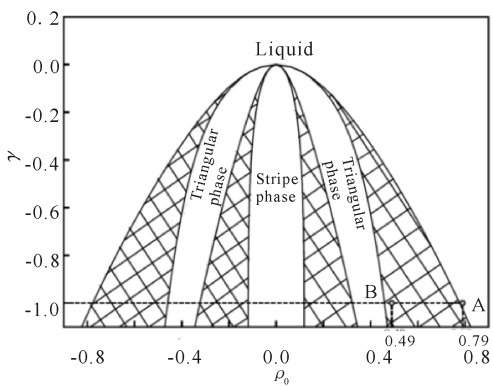


图 1 单模近似得出的二维相图(阴影部分代表两相共存区)<sup>[7]</sup>

Fig. 1 The two-dimensional phase diagram obtained by the single mode approximation(The shadow parts represent the two phase coexistence region)<sup>[7]</sup>

表 1 3 组不同晶向倾角的裂口样品参数

Table 1 3 groups of the split sample parameters of different crystal orientations

| Sample | $\gamma$ | $\rho_0$ | $\rho_1$ | $\theta$   | $\dot{\epsilon}$   |
|--------|----------|----------|----------|------------|--------------------|
| A      | -1.0     | 0.49     | 0.79     | $0^\circ$  | $6 \times 10^{-6}$ |
| B      | -1.0     | 0.49     | 0.79     | $5^\circ$  | $6 \times 10^{-6}$ |
| C      | -1.0     | 0.49     | 0.79     | $10^\circ$ | $6 \times 10^{-6}$ |

### 1.4 拉应变作用的施加

为观察裂纹的萌生和扩展情况, 对设置的含有裂口的样品施加拉应变作用。首先, 经过  $5 \times 10^4$  步弛豫, 得到含缺口的稳态样品(图 2, 其放大区域给出实验的坐标体系), 然后再沿  $y$  轴方向(图 3 所示)施加拉应变。在变形过程中,  $x$  方向空间步长保持不变,  $y$  方向空间步长随着应变速率在每一时间步长下都

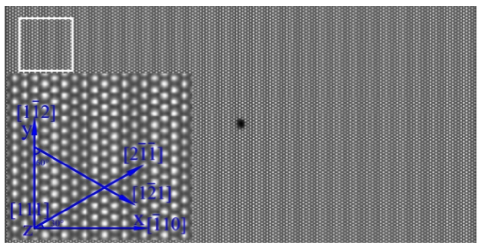


图 2 初始样品

Fig. 2 Initial sample

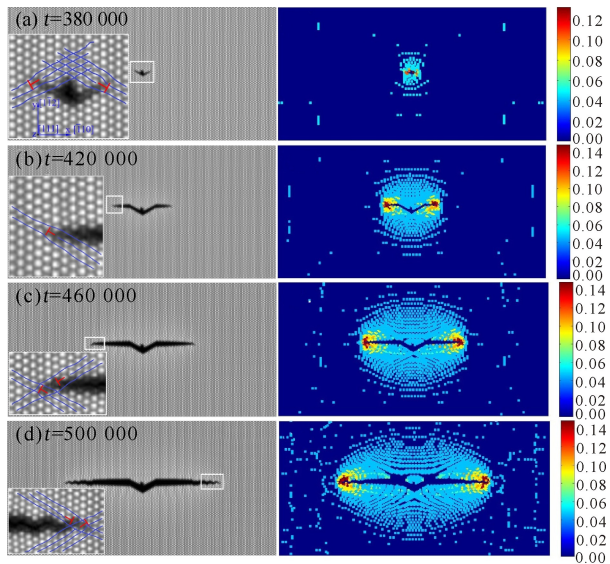
## 2 结果与分析

### 2.1 初始晶向倾角为 $0^\circ$ 的裂纹生长

当外加应变变量达到临界应变值 0.138 时, 裂口开始起裂(图 4a), 裂纹开裂方向分别向左上  $[\bar{1}2\bar{1}]$  方向和右上  $[\bar{2}1\bar{1}]$  方向, 与  $y$  轴的夹角为  $60^\circ$ , 裂纹长度约为 4~5 个原子距离, 两端裂尖的裂口附近都出现位错结构(图 4a 中的放大区域所示)。当外加应变变量增加到 0.162 时, 裂纹已经由与  $y$  轴夹角  $60^\circ$  的向左上和右上扩展, 转变为向左边水平方向和右边水平方向扩展(图 4b), 在裂尖的放大细节图上可以观察到裂纹尖端仍然出现位错, 但左边位错方向与图 4a 相比发生转向, 顺时针旋转  $60^\circ$ , 位错的柏氏矢量沿  $[\bar{2}1\bar{1}]$  方向。外加应变变量继续加大, 裂纹仍然沿左边水平方向和右边水平方向扩展, 裂纹长度增加, 左边位错矢量方向不变(图 4c)。到扩展后期, 外加应变变量达到 0.210, 裂纹总体仍然沿左边水平方向和右边水平方向扩展(图 4d), 裂纹长度约为模拟区域的三分之二, 但尖端可以看到较明显的锯齿状, 右边裂尖处的位错与图 4a 的相比逆时针转动  $60^\circ$ 。表明裂纹尖端位错滑移方向改变, 沿  $[\bar{1}2\bar{1}]$  和  $[\bar{2}1\bar{1}]$  方向交替变化, 形成锯齿边缘结构(图 4d 中的放大区域所示)。整个裂纹的形状呈解理状, 裂尖前端没有出现塑性变形区, 也没有空洞形成和位错发射现象, 表明裂纹的扩展属于脆性解理扩展。

### 2.2 初始晶向倾角为 $5^\circ$ 的裂纹生长

开始阶段, 在  $y$  向的拉应变作用下, 裂口发生应力集中; 当外加应变变量达到临界应变值 0.138 时, 裂口向两边发射滑移位错, 这是典型的局部塑性变形的表现。由图 5a 可见, 距裂口约 2 个原子距离的左右两边各出现一个位错, 左右两边位错矢量方向相反, 柏氏矢量几乎沿水平方向, 且此时没有出现与裂



左图为裂纹扩展,右图为对应的应力分布

Left is the crack propagation, right is the stress distribution of the corresponding

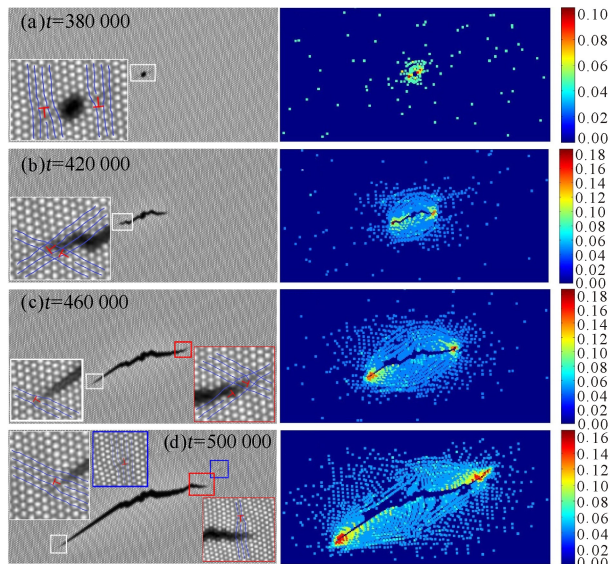
图4 样品A的裂纹扩展演化

Fig. 4 Crack propagation evolution of sample A

口相连接的裂纹。当外加应变变量达到 0.162 时(图 5b),左右两边已经形成明显的裂纹并与裂口相连接,由图 5b 的放大细节图可知,左边的裂尖有一个位错,其柏氏矢量方向与水平方向夹角约  $60^\circ$ 。此时位错滑移受阻,裂尖应力集中,裂纹前进转向,裂纹边缘呈锯齿状,即左边裂纹扩展方式为扩展-转向-扩展。总体来说,裂纹向左下延伸与水平方向呈约  $30^\circ$ ,即  $[\bar{2}11]$  方向;右端裂纹向右边水平方向延伸。当外加应变变量达到 0.186 时(图 5c),左边裂纹向左下方扩展,扩展方式改为解理扩展,方向为  $[\bar{2}11]$ ;右边裂纹扩展方式仍然为扩展-钝化-扩展,裂纹形状呈锯齿状,总体上裂纹扩展方向水平向右;右边裂尖也有一个位错,其柏氏矢量方向为向上右偏  $60^\circ$ ,方向为  $[101]$ 。到扩展后期(图 5d),左边裂纹位错滑行阻力较小,形成解理裂纹,解理裂纹扩展方向为  $[\bar{1}21]$ ,其裂尖位错方向与图 5c 相同,依旧为向下水平右偏  $60^\circ$ ,裂纹右边仍然为锯齿状扩展,裂尖的刃位错的半原子面垂直向上。

### 2.3 初始晶向倾角为 $10^\circ$ 的裂纹生长

由图 6a 可见,由于裂口应力集中,当外加应变变量达到临界应变值 0.138 时,裂口向左右两侧各发射一个位错,位错滑移方向分别为方向为向上右偏沿  $[\bar{2}11]$  方向和向下左偏沿  $[\bar{2}11]$  方向,位错在滑移过程中沿滑移线诱发生成一系列孤立的空位,空位发展成空洞,然后空洞长大连通,形成裂纹。在空位前端,



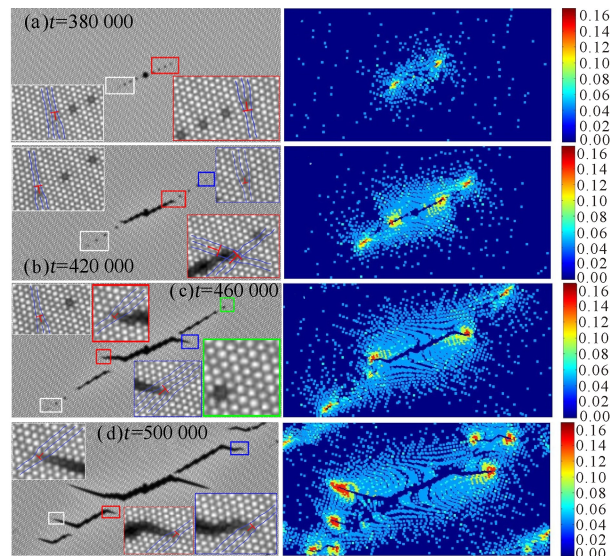
左图为裂纹扩展,右图为对应的应力分布

Left is the crack propagation, right is the stress distribution of the corresponding

图5 样品B的裂纹扩展演化

Fig. 5 Crack propagation evolution of sample B

左边的刃位错滑移方向沿  $[\bar{1}21]$  方向,右边的刃位错滑移方向沿  $[\bar{2}11]$  方向(图 6a,b)。当外加拉应变继续增加时,靠近裂口的空位发展成空洞,空洞相互连接,形成一条与水平方向夹角  $30^\circ$  的倾斜裂纹(图 6b)。由图 6b 右下角放大图可见,在裂尖处出现应力集中,在裂尖生成新的位错。随着外加拉应变的进一步增加,在裂口处向左下和右上延伸的过程中,裂尖应力集中,引起裂尖钝化并使裂纹扩展方向转



左图为裂纹扩展,右图为对应的应力分布

Left is the crack propagation, right is the stress distribution of the corresponding

图6 样品C的裂纹扩展演化

Fig. 6 Crack propagation evolution of sample C

向;远离裂口处的空位则相互连接成新的裂纹,方向与原主裂纹扩展方向相同。在拉应变作用下,远离主裂纹的空位末端处的位错沿新的方向滑移,出现裂纹分叉(图 6c, d),形成二次裂纹扩展。主裂纹钝化转向的尖端也出现位错(图 6d),由此可见主裂纹两端钝化转向后开始呈解理状生长,而远离裂口的空位形成的新裂纹也开始钝化转向,该新裂纹的裂尖处也出现位错,位错的方向为左侧的位错向上右偏 60°,右侧的位错向下左偏 60°。该二次裂纹与主裂纹的扩展方向夹角约为 60°。整个区域形成几条不连通的裂纹,表明裂纹主要是韧性断裂模式扩展。

### 3 结论

本研究采用晶体相场法,研究具有不同初始晶向倾角的样品在施加拉应变作用下的裂纹尖端扩展行为,得出如下主要结论:

1)晶向角为 0°、5°的样品,裂纹主要是解理脆性断裂模式扩展;晶向角为 10°的样品,裂纹主要是韧性断裂模式扩展。随着晶向角的变化,裂纹从脆性向韧性裂纹扩展模式转化。

2)裂纹作解理脆性扩展时,在裂尖处存在一对位错锁结构,由于位错的柏氏矢量垂直于裂纹扩展方向,这导致在裂尖处存在应力应变集中,原子键呈解理方式断开,裂纹沿光滑直线扩展;裂纹作韧性断裂扩展时,在裂尖前方不远处发生位错滑移运动,且在位错滑移轨道上产生空洞,空洞生长扩大并连通,形成裂纹,此时裂纹边缘呈锯齿形状。

#### 参考文献:

[1] 张俊善. 材料强度学[M]. 哈尔滨:哈尔滨工业大学出版社,2004:83-116.  
ZHANG J S. Strength of Materials[M]. Harbin: Harbin Institute of Technology Press,2004:83-116.

[2] 杨卫. 宏微观断裂力学[M]. 北京:国防工业出版社,1995.  
YANG W. Macro and Micro Fracture Mechanics[M]. Beijing: National Defend Industry Press,1995.

[3] 高英俊,罗志荣,黄礼琳,等. 韧性材料的微裂纹扩展和连通的晶体相场模拟[J]. 中国有色金属学报,2013,23(7):1892-1899.  
GAO Y J, LUO Z R, HUANG L L, et al. Phase-field-crystal modeling for microcrack propagation and connecting of ductile materials[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals,2013,23(7):1892-1899.

[4] 毛鸿,罗志荣,黄世叶,等. 材料裂纹扩展分叉机理的晶体相场法研究[J]. 广西科学,2015,22(5):499-505.

MAO H, LUO Z R, HUANG S Y, et al. Phase-field-crystal modeling for crack propagation and branch of materials[J]. Guangxi Sciences,2015,22(5):499-505.

[5] 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):1408-1413.  
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):1408-1413.

[6] SONG Y C, SOH A K, NI Y. Phase field simulation of crack tip domain switching in ferroelectrics[J]. J Phys D: Appl Phys,2007,40(4):1175-1182.

[7] ABDOLLAHI A, ARIAS I. Phase-field modeling of fracture in ferroelectric materials[J]. Archives of Computational Methods in Engineering, 2015, 22(2):153-181.

[8] 张跃,王燕斌,褚武扬,等. 脆断微裂纹形核的原位观察[J]. 科学通报,1994,39(2):117-120.  
ZHANG Y, WANG Y B, CHU W Y, et al. In situ observation of brittle microcrack nucleation[J]. Chinese Science Bulletin,1994,39(2):117-120.

[9] CAO Z H, WANG L, HU K, et al. Microstructural evolution and its influence on creep and stress relaxation in nanocrystalline Ni[J]. Acta Mater, 2012, 60(19):6742-6754.

[10] 黄礼琳,华平,王玉玲,等. 凸曲率衬底外延生长界面演化的晶体相场模拟[J]. 广西科学,2014,21(3):214-246.  
HUANG L L, HUA P, WANG Y L, et al. Simulation of epitaxial growth interface on convex substrate using phase field crystal method [J]. Guangxi Sciences, 2014,21(3):241-246.

[11] 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.

[12] 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.

[13] 高英俊,黄礼琳,周文权,等. 高温应变下的亚晶界湮没与位错旋转机制的晶体相场模拟[J]. 中国科学:技术科学,2015,45(3):306-321.  
GAO Y J, HUANG L L, ZHOU W Q, et al. Phase field crystal simulation of subgrain boundary annihilation and dislocation rotation mechanism under strain at high temperature[J]. Sci Sin Tec,2015,45(3):306-321.

(下转第 469 页 Continue on page 469)

[9] CHO H, JEONG S H, PARK M H, et al. Overcoming the electroluminescence efficiency limitations of perovskite light-emitting diodes[J]. *Science*, 2015, 350(6265): 1222-1225.

[10] STRANKS S D, SNAITH H J, Metal-halide perovskites for photovoltaic and light-emitting devices[J]. *Nature Nanotechnology*, 2015, 10(5): 391-402.

[11] KIM Y H, CHO H, HEO J H, et al. Multicolored organic/inorganic hybrid perovskite light-emitting diodes

[J]. *Advanced Materials*, 2015, 27(7): 1248-1254.

[12] HOYE R L Z, CHUA M R, MUSSELMAN K P, et al. Enhanced performance in fluorene-free organometal halide perovskite light-emitting diodes using tunable, Low electron affinity oxide electron injectors[J]. *Advanced Materials*, 2015, 27(8): 1414-1419.

(责任编辑:陆雁)

(上接第 458 页 Continue from page 458)

[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, 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.

[16] CHAN P Y, TSEKENIS G, DANTZIG J, et al. Plasticity and dislocation dynamics in a phase field crystal model[J]. *Physical Review Letters*, 2010, 105(1): 015502.

[17] HEINONEN V, ACHIM C V, ELDER K R, et al. Phase-field-crystal models and mechanical equilibrium[J]. *Phys Rev E*, 2014, 89(3): 032411.

[18] 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 Compu-*

tational Physics, 2014, 31(4): 471-478.

[19] 郭刘洋, 陈铮, 龙建, 等. 晶体相场法研究应力状态及晶体取向对微裂纹尖端扩展行为的影响[J]. *物理学报*, 2015, 64(17): 178102.

GUO L Y, CHEN Z, LONG J, et al. Study on the effect of stress state and crystal orientation on micro-crack tip propagation behavior in phase field crystal method[J]. *Acta Phys Sin*, 2015, 64(17): 178102.

[20] CHENG M, WARREN J A. An efficient algorithm for solving the phase field crystal model[J]. *Journal of Computational Physics*, 2008, 227(12): 6241-6248.

[21] 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.

GAO Y J, LUO Z R, HUANG C G, et al. Phase-field-crystal modeling for two-dimensional transformation from hexagonal to square structure[J]. *Acta Phys Sin*, 2013, 62(5): 050507.

(责任编辑:米慧芝)