

DOI: 10.13656/j.cnki.gxkx.20181225.002

邓力滔, 卢昱江, 刘哲源, 等. 晶体相场法模拟晶界萌生裂纹扩展机理[J]. 广西科学, 2018, 25(6): 658-662.

DENG L T, LU Y J, LIU Z Y, et al. Phase field simulation of nucleation and propagation of crack from grain boundary[J]. Guangxi Sciences, 2018, 25(6): 658-662.

晶体相场法模拟晶界萌生裂纹扩展机理*

Phase Field Simulation of Nucleation and Propagation of Crack from Grain Boundary

邓力滔, 卢昱江, 刘哲源, 邓芊芊, 高英俊**

DENG Litao, LU Yujiang, LIU Zheyuan, DENG Qianqian, 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】在纳米微观尺度下, 双晶样品在单轴拉伸应变作用下萌生裂纹, 观察并分析开裂时的特征, 并结合对应自由能曲线及应变曲线总结裂纹扩展运动的规律。【方法】采用晶体相场(PFC)法模拟不同位错裂纹的演化图。【结果】在拉力作用下, 自由能在晶体中慢慢积累。当自由能增加到某一临界值时, 晶界位错开始萌生裂纹。但是拉力直接作用在晶体的两端, 间接作用在各处位错是不均匀的, 所以各个位错的自由能积累效率不相同, 导致位错开裂出现 3 种情况。【结论】在拉力的持续作用下, 不同位置的位错变化不相同, 位错扩展变化或萌生裂纹具有不同同时性。

关键词: 位错运动 裂纹扩展 晶体相场 应变

中图分类号: TG111.2 文献标识码: A 文章编号: 1005-9164(2018)06-0658-05

Abstract:【Objective】At the nano-microscopic scale, the double crystal samples are cracked under the uniaxial tensile strain. The characteristics of the crack are observed and analyzed, and the rules of crack propagation motion are summarized by the corresponding free energy curves and strain curves.【Methods】The phase field crystal(PFC) method is used to simulate the evolution of different dislocation cracks.【Results】Under the action of tension, free energy accumulates slowly in the crystal. When the free energy increases to a certain critical value, grain boundary dislocations begin to initiate cracks. However, the tensile force acts directly on both ends of the crystal, and the indirect effects of the dislocations are uneven. Therefore, the accumulation efficiency of the free energy of each dislocation is different, resulting in three cases of dislocation cracking.【Conclusion】Under the continuous action of the tension, the dislocation changes at different positions are different, and the dislocation expansion changes or the initiation cracks occur at different times.

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

收稿日期: 2018-07-31

作者简介: 邓力滔(1998—), 男, 本科生, 主要从事材料微观结构与性能研究, E-mail: dltgxu@163.com。

* 国家自然科学基金项目(51161003)和广西自然科学基金重点项目(2018GXNSFAA138150)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】就目前来说, 材料是人类赖以存活和进步发展的物质基础。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优越性能是由其微观尺度下的结构决定的^[1-3]。在晶体材料中, 周

期完整排列为主要材料,非完整性则次之;但对于晶体材料的力学性能来说,起主要作用的却是晶体的非完整性,其周期完整性居于次要地位。也就是说,在晶体力学行为中,缺陷起主要作用。因此,材料的缺陷对材料变形的影响有十分重要的作用,关于这方面的研究也就非常有意义^[4-6]。【前人研究进展】晶体相场(PFC)方法是为了解决传统相场方法无法描述晶体周期结构特性这一缺陷而提出的。文献^[7-9]提出的这种方法在时间尺度和空间尺度上的模拟具有很大的优势,后来更是发展成为可以替代传统分子动力学模拟的一种方法,一些难以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观察到。经过近年来的发展,晶体相场方法有了长足的进步,并在模拟晶体断裂、相结构转变、纳米晶粒长大、位错滑移与攀移等方面都有许多实际的应用^[10-14]。【本研究切入点】本研究采用的经典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。该方法可以很好地描述扩散在时间尺度上的微结构演化行为^[15-19]。【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,以及裂纹开裂时的特征,探究位错对纳米尺观下萌生裂纹及扩展的作用规律。

1 PFC 模型与方法

1.1 PFC 模型

PFC 模型能够揭示晶体点阵周期结构特性以及原子尺度下的空间分辨尺度,时间尺度为扩散时间尺度下的纳微结构演化。对于固态晶体材料,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 $\rho(r)$,其空间分布的极大值位置对应于原子点阵的位置;对于均匀相(液相等)中的原子密度分布为均匀分布,其值为常量。用周期原子密度函数 $\rho(r)$ 作为相场变量,要符合上述两方面的要求,其表达式可以写成:

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

式中,等号右边第 1 项反映的是晶格原子的周期排列结构特征,其中 G 为倒格子矢量, r 为空间坐标矢量;第 2 项反映的是均匀相(如液相)等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:

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

式中, γ 为与温度有关的参数; ∇^2 为拉普拉斯算符。在单模近似下,由二维体系自由能取极小值,可以求

得上式的晶体相的一个稳定特解为

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

式中, $A = \frac{4}{5} \rho_0 + \frac{4}{15} \sqrt{-15r - 36\rho_0^2}$ 反映六角晶相原子密度的振幅。 $q = \frac{\sqrt{3}}{2} \rho_0$, 为平均密度。本研究采用保守场 Cahn-Hilliard 动力学方程描述原子密度随时间的演化。该方程具体如下:

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

式中, t 为时间变量。对无量纲动力学演化方程,采用半隐式傅里叶伪谱方法求解。

1.2 样品制备

对双晶样品的制备步骤可参见文献^[4-6],设置参数,空间步长为 $\Delta x = \Delta y = \pi/4$, 样品尺寸设置为 $1\ 024\Delta x \times 512\Delta y$ 长方形,满足周期边界条件。将样品区域分为 3 个矩形区域: $0 < x < Lx/4$, $Lx/4 < x < 3Lx/4$, $3Lx/4 < x < Lx$ 。在 $Lx/4 < x < 3Lx/4$ 区域内设置取向角为 $\theta = -5^\circ$, 在 $0 < x < Lx/4$, $3Lx/4 < x < Lx$ 区域内设置取向角为 $\theta = 5^\circ$ (θ 为三角相原子排列与 y 轴的夹角)的三角晶相结构,这样得到的单相双晶的晶界取向差为 10° 。时间步长为 $\Delta t = 0.5$ 、样品弛豫时间取 $50\ 000 \Delta t$ 、温度参数设置为 $\gamma = -0.6$ 、原子密度取 $\rho_0 = 0.44$ 。在弛豫完毕后得到稳定匹配的晶界。如图 1 所示。

从图 1 模拟区域中的两列等倾对称晶界可以看到,各列晶界由 10 对晶格位错对组成且排成一列,第一列编号为 $a1 \sim a10$,第二列编号为 $b1 \sim b10$,同一列晶界处的相邻晶格位错对之间的柏氏矢量方向相同,不同列晶界的晶格位错对的柏氏矢量彼此相反。而第一列的 $a10$ 号位错(白色标识)是由 3 个原子空位形成的,与其余 9 对只有 1 个原子空位的位错(绿色标识)不同。因此,在晶界上共有两种类型的晶界位错(即晶格位错对)结构。如图 2 所示,对该样品沿 y 轴施加拉伸变形,设变形前 y 方向空间步长为 Δy ,在施加拉伸变形过程中,应变率 ϵ 在每一时间步长下,应变都有一增量 $\Delta\epsilon = \epsilon\Delta t$, Δt 为时间步长,则经过 n 时间步数的拉伸,拉伸后的 y 方向空间步长变为 $\Delta y^* = \Delta y(1 + n\epsilon\Delta t)$ 。再结合晶格原子密度演化的动力学方程,就可实现沿 y 轴方向施加拉伸应变作用的效果。本研究取 $\epsilon = 6 \times 10^{-6}$ 。为方便作自由能及应力曲线,弛豫完毕后,时间步数重新从 0 开始计数,用 T 表示。

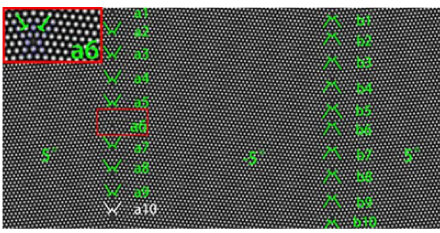


图1 弛豫 50 000 步后得到的初始样品示意图

Fig.1 Initial sample schematic after 50 000 steps of relaxation

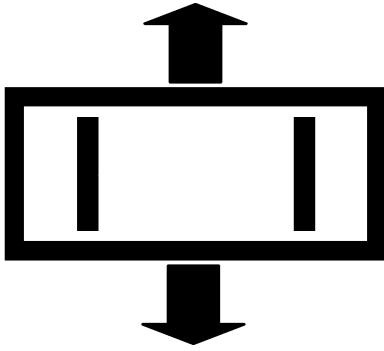


图2 y轴施加拉力的示意图

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

2 结果与分析

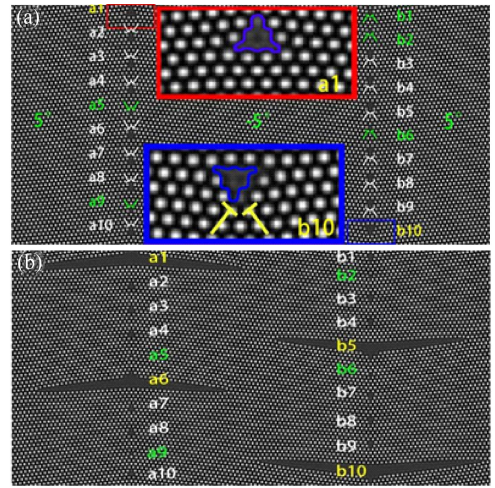
虽然我们直接将拉力施加在模拟区域的上下两端的原子层上,在原子层间的耦合相互作用下,拉力被逐层地传递到位错核心处,使位错发生运动。但是,晶体上各部分具体受到拉力的作用是不相同的。

由图 3a 可见位错 a1 和 b10(淡黄色标识)在加力后 $T = 28\ 750$ 步长时有大量原子空位形成缺陷,裂纹开始萌生。此时,a2,a3,a4,a6,a7,a8,b3,b4,b5,b7,b8,b9 这 12 对位错由原来的一个原子空隙扩展为形如 a10 葫芦状的 3 原子空隙团。而位错对 a5,a9,b1,b2,b6 不发生任何改变。

在图 3b 中当 T 增加到 38 880 步长时,a1 与 b10 沿与柏氏矢量呈 60° 方向解理扩展出一段距离。此时 a6 及 b5 和之前的 a1 及 b10 一样萌生出裂纹,只是在时间上要落后一些。位错 b1 扩展成为 3 个原子空隙团,其余位错状态不变。

比较图 3 中 a 和 b 我们可以得知,位错萌生裂纹需应变增大到临界值,有的位错受拉力作用大,如 a1,a6,b5,b10,能量积累速率快,最先达到位错萌生裂纹的能量临界值而开裂。其他一些位错相对来说能量积累以及最后开裂就会慢一些。而绝大部分位错,受拉力作用弱,能量积累速率也相对要慢,当其他位错开裂后整个晶体的自由能开始释放,导致这部分位错的能量再无法继续积累增加到开裂的临界值,因此在扩张成孔洞后就停止活动。有极少一部分位错

如 a5,a9,b2,b6,由于其位置的特殊性,受拉力影响极其微弱,在整个过程中不做任何运动,也不出现任何扩展变化。



(a) $T = 28\ 750$, (b) $T = 38\ 880$

图3 样品的裂纹扩展演化貌图

Fig.3 The crack evolution morphology of the sample

材料的自由能变化如图 4a 所示,开始时沿 a—b 下降了一段距离,说明材料在开始时有一定的自由能积累。从微观角度分析,原子在稳定晶体内彼此靠得较近,相对于平衡位置有一极小的偏差,排斥力略大于吸引力。在拉力作用下,这部分能量逐渐释放。随着拉力的继续增大,原子间吸引力也逐渐增大,自由能沿着 b—d 增加。g—i 段由于材料开裂自由能逐渐释放。图 4b 为应力应变曲线,在 e—c 段线性上

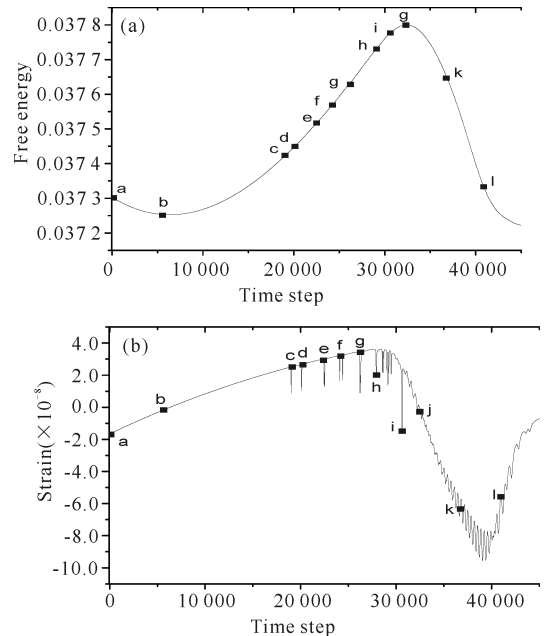


图4 自由能及应力曲线

升,说明晶体先产生弹性形变。当施加的应变超过一定值时,在 c 点处部分位错发生变化,由原来的单原子间隙变为多原子间隙,材料开始进行范性形变。在

d, e, f, g 点处出现震荡也是和 f 点一样, 是由不同位错的不同时变化扩展所引起的。两图中 h 点对应材料中位错对 a1, b10 开始萌生裂纹的时刻, i 点对应位错对 a6, b5 开裂的时刻。这和之前的讨论是一致的, 不同位错对的扩展变化或开裂具有不同同时性。

3 结论

在拉力作用下, 自由能在材料中慢慢积累。晶体最初产生弹性形变, 当能量累积超过某一临界值时, 晶体开始产生范式形变, 随后晶界位错开始萌生裂纹。但是由于拉力作用在各处位错是不相同的, 所以各个位错的自由能积累效率不相同, 导致位错运动出现 3 种情况: 第 1 种是受拉力作用大的一些位错能量积累速率快, 当积累到临界值时开始开裂, 而且这些位错开裂还具有先后顺序。第 2 种是受拉力作用相对弱一点的位错, 由于其他位错开裂使体系能量释放, 导致无法积累增加到临界值, 在扩张成多原子空位孔洞后就停止运动。第 3 种, 有极少部分位错受拉力影响十分弱, 能量几乎没有累积, 自始至终都不会运动。

参考文献:

[1] GAO Y J, WANG J F, LUO Z R, et al. Nano-twin structure simulation with phase field crystal method[J]. Chinese Journal of Computational Physics, 2013, 30(4): 577-581.

[2] 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.

[3] 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.

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

[5] JAATINEN A, ACHIM C V, ELDER K R, et al. Thermodynamics of bcc metals in phase-field-crystal models[J]. Physical Review E Statistical Nonlinear Soft Matter Physics, 2009, 80(1): 031602.

[6] ELDER K R, GRANT M. Modeling elastic and plastic deformations in nonequilibrium processing using phase

field crystals[J]. Physical Review E Statistical Nonlinear Soft Matter Physics, 2004, 70: 051605.

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

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

[9] 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): 485-490. GAO Y J, YANG R L, WANG Y L, et al. Phase field model simulation of bumps and holes pattern of two dimension crystal[J]. Guangxi Sciences, 2015, 22(5): 485-490.

[10] 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. 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.

[11] 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.

[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, 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): 471-484. 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.

[14] 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.

[15] 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.

- [16] 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.
- [17] 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.
- [18] STEFANOVIC P, HAATAJA M, PROVATAS N.

Phase field crystals with elastic interaction[J]. Phys Rev Lett, 2006, 96(22): 225504.

- [19] 刘瑶, 袁龙乐, 卢强华, 等. 晶体相场模拟取向角对晶界湮灭过程的影响[J]. 广西科学, 2016, 23(5): 437-442. LIU Y, YUAN L L, LI 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)

(上接第 657 页 Continue from page 657)

- [4] 王冠, 俞伟元, 陈学定, 等. Cu 在纯铝基体中的扩散行为研究[J]. 有色金属加工, 2005, 34(1): 36-39. WANG G, YU W Y, CHEN X D, et al. Investigation of diffusion action of Cu in pure aluminum substrate[J]. Nonferrous Metal Processing, 2005, 34(1): 36-39.
- [5] 何康生, 曹雄夫. 异种金属焊接[M]. 北京: 机械工业出版社, 1986. HE K S, CAO X F. Dissimilar metal welding[M]. Beijing: China Machine Press, 1986.
- [6] WITUSIEWICZ V T, HECHT U, FRIES S G, et al. The Ag-Al-Cu system; Part I: Reassessment of the constituent binaries on the basis of new experimental data[J]. Journal of Alloys & Compounds, 2004, 385(1/2): 133-143.
- [7] LIANG S M, SCHMID-FETZER R. Thermodynamic assessment of the Al-Cu-Zn system, part II: Al-Cu binary system[J]. Calphad, 2015, 51: 252-260.
- [8] 谢军, 吴卫军, 杜凯, 等. Al/Cu 微米级厚度薄膜扩散连接工艺及显微组织分析[J]. 原子能科学技术, 2004, 38(S1): 120-124. XIE J, WU W J, DU K, et al. Process and microstructure analysis in vacuum diffusion bonding of aluminum and copper films[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2004, 38(S1): 120-124.
- [9] 孟胶东, 曲文卿, 庄鸿寿. Al-Cu 双金属复合结构的扩散

连接试验研究[J]. 材料工程, 2003(1): 34-37.

MENG J D, QU W Q, ZHUANG H S. Experimental study on diffusion bonding of Al-Cu bimetal composite structure[J]. Material Engineering, 2003(1): 34-37.

- [10] 杨睿, 李世春, 宋玉强. Al/Cu 扩散偶相界面的实验研究[J]. 中国石油大学学报: 自然科学版, 2007, 31(2): 110-113. YANG R, LI S C, SONG Y Q. Experimental study on interface of Al/Cu diffusion couple[J]. Journal of China University of Petroleum: Natural Science Edition, 2007, 31(2): 110-113.
- [11] 尹海龙, 李世春. Al-Cu 扩散偶的界面反应[J]. 热加工工艺, 2008, 37(24): 1-4. YIN H L, LI S C. Interfacial reactions in Al-Cu diffusion couples [J]. Hot Working Technology, 2008, 37(24): 1-4.
- [12] WANGER C. The evaluation of data obtained with diffusion couples of binary single-phase and multiphase systems[J]. Acta Metallurgica, 1969, 17(2): 99-107.
- [13] PAUL T, PAUL A. Interdiffusion in the Ni-Zr System [J]. Journal of Phase Equilibria & Diffusion, 2015, 36(4): 381-389.

(责任编辑: 符支宏)