

体心立方金属钨 II 型微观裂纹的多尺度模拟研究

杜 浩, 倪玉山

(复旦大学, 上海 200433)

摘 要: 采取多尺度准连续介质计算模拟方法 (quasi-continuum method, QC), 对纳米量级体心立方 (body-centered-cubic, bcc) 金属钨 II 型裂纹尖端缺陷生成和破坏过程进行计算模拟, 得到系统的载荷位移曲线, 以及加载过程中裂纹尖端原子位移图像。凭借 QC 方法的原子精确和较高的计算效率, 共观察到了裂纹尖端 5 次全位错形核和发射现象。模拟结果表明, 宏观载荷位移曲线各突降点对应的微观本质是裂纹尖端位错的形核和发射; 位错的运动具有不连续性和周期性等特点; 位错数量不断增加和快速运动最终导致 II 型裂纹开裂和破坏。根据模拟结果, 定量化统计得到全位错位置和加载位移的关系曲线, 说明了位错的运动规律: 全位错会在裂纹尖端稳定位置形核, 并且后续会有不连续的周期性发射; 新位错的形核会导致原位错的发射, 并且随着全位错数量的增加, 位错整体运动速度加快。最后, 根据不稳定层错能理论和微观尺度的力平衡方程, 对位错形核的初始位置做了理论计算, 并对位错运动规律进行机理分析, 得到的理论结果与模拟结果相一致, 验证了模拟结果的正确性。

关键词: 多尺度准连续介质法; II 型裂纹; 位错; 层错能

中图分类号: O34

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2018)12-3721-09

随着材料科学研究的不断发展, 工程材料的精细程度也越来越高, 在很多领域都达到了纳米量级。研究表明当材料的尺寸达到纳米尺度时, 其在力、热、磁、光等方面往往会表现出与宏观条件下所不同的特性^[1-3], 这为克服材料科学领域很多长期未能解决的问题开辟了新途径, 也促成了纳米材料的发展。实际的材料往往不可避免地存在一些物理缺陷。裂纹作为影响材料力学性质的主要缺陷之一, 一直以来都是研究的重点。深入了解材料裂纹和断裂特性对强度设计和性能改进具有重要意义。尽管目前利用连续介质理论和线性假设, 已能描述大部分宏观的裂纹行为^[4], 但对于纳米尺度下微观裂纹行为和断裂破坏机理的研究还有很多工作亟待完善。

计算机模拟不受实验条件和测试技术的限制, 在材料力学行为研究中得到了广泛的应用。传统的计算模拟方法, 例如宏观有限元方法 (finite element method, FEM) 以连续介质假设为基础, 无法精确到原子尺度。微观分子动力学 (molecular dynamics, MD) 方法可以模拟原子运动的细节, 但是计算量较大, 会受制于计算机硬件条件。而近年来诞生的多尺度模拟方法 (multi-scale simulation), 结合了连续介质方法和原子方法的优势, 既能精确到原子尺度, 又能算较大尺寸

的模型以避免边界效应^[5], 很适合微观裂纹和断裂问题的研究。

目前, 国内外的研究者对金属微观裂纹和断裂的研究已取得了不少进展。例如, Miller 等人^[6,7]对单晶 Ni 的断裂问题进行了模拟, 计算了脆性断裂和位错发射的临界应力强度因子, 分析讨论了断裂和晶界之间的相互作用效应; Tadmor 等人^[8]模拟了单晶 Al 的裂纹断裂破坏, 并基于 Peierls 概念, 提出了形变孪晶的生成准则; Hai 等人^[9]模拟了不同载荷下单晶 Al 裂纹尖端的缺陷和形变孪晶生成过程, 并分析了孪晶带和载荷模式及方向的关系; Machová 等人^[10]模拟了单晶 Fe 在 {001} 易滑面的裂纹破坏情况, 并分析了裂纹尖端位错方向和密度的变化过程; Zhou 等人^[11]模拟了单晶 Ni 纳米薄片混合型裂纹的扩展过程; Cui 等人^[12]模拟了单晶 Cu 和单晶 Al 的边界裂纹扩展情况, 并从裂纹长度和扩展方向上做了对比分析; 崔晓明等人^[13]采用原位拉伸试验研究了镁合金的裂纹萌生及扩展行为, 表明了裂纹扩展方式包括沿晶扩展和穿晶扩展方式; Shiri 等人^[14]采用了多尺度方法中的动态 CADD (coupled atomistics and discrete dislocations) 法, 计算模拟了单晶 Al 和 Ni 的裂纹起裂和扩展过程, 分析了位错方向, 并进行了韧性裂纹扩展和脆性裂纹扩展

收稿日期: 2017-12-10

基金项目: 国家自然科学基金 (11572090)

作者简介: 杜 浩, 男, 1992 年生, 硕士, 复旦大学航空航天系, 上海 200433, E-mail: 14210290007@fudan.edu.cn

的特征比对。在现有的微观裂纹研究结果中，大部分针对的都是面心立方 (face-centered-cubic, fcc) 金属；对体心立方 (bcc) 金属的研究则主要集中在常见的铁，而对很多其他 bcc 金属材料还缺少详细研究。尤其是重金属材料，实验观测较为困难，相关研究资料较少。

钨是一种重要的 bcc 金属材料，其凭借最高的熔点、高强度和良好的耐蚀性等优点，在军工机械、航空航天等众多领域都有着广泛的用途。并且钨还是核聚变反应堆的重要结构材料。本研究选取单晶 bcc 金属钨为研究对象，利用多尺度准连续介质 (QC) 模拟方法，对钨在纳米尺度下的 II 型裂纹尖端缺陷生成和破坏问题进行计算模拟。从原子尺度揭示 bcc 金属 W 的 II 型裂纹在初始塑性阶段裂纹尖端的位错形核、发射等现象，并通过理论计算分析揭示其微观机理，对认识钨的微观 II 型裂纹和了解相关纳米材料的性质都具有重要意义。

1 计算模型

准连续介质方法是一种多尺度数值计算方法，最早由 Tadmor^[15]提出。该方法的核心思想是将有限元方法和分子动力学方法耦合起来。在变形梯度较小的区域进行网格划分，只计算节点原子；而在变形梯度较大的区域则对每个原子都进行计算，以保证精度。QC 方法在能准确模拟关键区域原子变化的同时，大幅减少了计算量，提高了计算效率，因此能够模拟较大规模的原子系统，避免边界效应。

本研究计算模型的示意图如图 1 所示。模型沿 x 和 y 方向的尺寸均为 200 nm，在模型中部沿 x 方向存在一条长度为 100 nm 的细长裂纹。模型尺寸的设置充分利用多尺度方法的优点，比一般分子动力学模型大 1 个数量级，能够有效地消除边界效应，更真实地揭示裂纹变化过程。在裂纹尖端附近区域采用了原子尺

度模拟，能够精确展示原子变化情况；其他区域通过网格划分，只计算代表原子。利用网格自适应功能，每次加载后都会调整代表原子的数目，以提升计算的精度和效率。在远离裂纹尖端的 2 个 F 区域，施加位移边界条件，对于 z 方向采用周期性边界条件。每次加载固定边界位移，然后按能量最小化条件，求出各代表原子的位移及其他相关量。

在体心立方金属晶体结构中，最常见的滑移面有 {110} 面和 {112} 面。为了便于观察，本研究模型的晶向面选取为 {110} 面，初始裂纹设置为沿 [111] 方向。由此，模型的 x, y, z 方向分别为: $x[111], y[\bar{1}10], z[\bar{1}\bar{1}2]$ 。

准连续介质方法采用原子势函数来描述原子间的相互作用力，系统原子的能量由原子间的相互作用势得到。本研究所做的 QC 模拟采用的原子势是 Johnson 等人^[16]提出的体心立方晶体结构嵌入原子势 (embedded atom method, EAM)。根据该 EAM 势可以算出单晶钨的晶格常数为: $a=0.31650$ nm, 3 个独立弹性常数分别为: $C_{11}=532.6$ GPa, $C_{12}=205.0$ GPa, $C_{44}=163.2$ GPa。通过文献[17]可以得到钨的弹性常数的实验数据。表 1 为弹性常数计算值与实验值的比较。

经过对比可知，由该 EAM 势计算出的钨弹性常数数值与实验数据较为吻合，误差在允许范围内。因此，该势函数具有可靠性，能够在模拟中准确反映 bcc 单晶钨的真实力学行为。

2 模拟结果

2.1 载荷位移曲线

用 QC 方法对上述钨 II 型裂纹模型进行模拟。对于每个加载步，x 方向的边界位移为 0.01 nm，共加载了 320 步。根据模拟结果，可以获得载荷-位移曲线如图 2 所示。根据载荷位移曲线，可以得到钨 II 型裂纹在剪切加载过程中的宏观变化情况。在初始阶段，各个数值点构成一条直线，即载荷和位移成正比，如图 2a 所示。由此可以判断在初始加载阶段系统的变形为弹性变形，即初始为弹性阶段。当加载位移达到 1.89 nm，即达到图中的 A 点时，对应的载荷大小为 1528.1 eV/nm，此后曲线出现了一个明显的转折：A 点之后的下一个加载步，载荷突然降低。在 A 点之后，曲线相继出现了多个转折点。由此可以判断在 A 点以后系

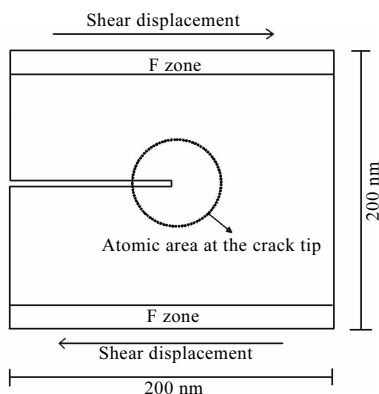


图 1 bcc-W 的 II 型裂纹模型及加载示意图

Fig.1 Schematic of the bcc-W crack mode and loading

表 1 体心立方钨弹性常数的计算值与实验值

Table 1 Calculated value based on EAM potential and experimental value of elastic constant for bcc tungsten

W elastic constant	C_{11}	C_{12}	C_{44}
Calculated value based on EAM/GPa	532.6	205.0	163.2
Experimental value/GPa	522.4	204.4	160.8

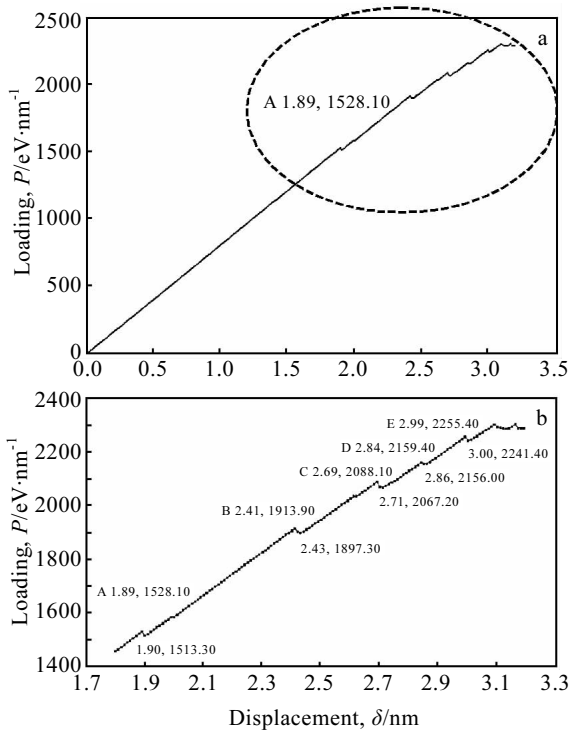


图 2 钨 II 型裂纹的载荷-位移曲线

Fig.2 Loading-displacement curves of mode II crack of tungsten

统变形进入塑性阶段。将塑性阶段对应的载荷位移曲线部分放大，如图 2b 所示。

从图 2b 中可以看出，在塑性阶段，系统的载荷位移曲线出现了多个突跳点。第 1 处突跳出现在 A 点。当位移从 1.89 nm 加载到 1.90 nm 时，载荷不再单调上升，出现了首次下降，由 1528.1 eV/nm 降低为 1513.3 eV/nm。随后，载荷随着位移的增加继续增大，曲线依然呈单调上升的直线。当位移从 2.41 nm 加载到 2.43 nm 的过程中，曲线再次出现拐点，载荷在这 2 个加载步中持续下降，由 1913.90 eV/nm 下降至了 1897.30 eV/nm。之后曲线继续呈直线上升的趋势，直到位移达到了 2.69 nm，曲线出现第 3 个拐点。此处位移从 2.69 nm 加到 2.71 nm 的过程中，载荷的值从 2088.10 eV/nm 下降至 2067.20 eV/nm。在第 3 个拐点之后，曲线继续直线上升，但是在仅仅加载了 0.15 nm 后，再次出现拐点。随后曲线拐点频繁出现，在加载最后阶段，曲线出现频繁的波动，但载荷值却不再有明显的增加，始终保持在 2290 eV/nm 附近，未超过 2300 eV/nm。由此可以判断系统已经进入到塑性流动，后续裂纹将发生开裂。

2.2 原子图像

从载荷位移曲线中已经获得了系统宏观变化情况。下面将通过染色分析，观察各个加载步的原子位

移图像，来研究不同加载阶段以及载荷位移曲线（图 2）各突跳点所对应的裂纹尖端原子结构变化和其微观机理。

在初始加载阶段，裂纹尖端附近的原子变化并不明显，裂纹尖端附近的原子总体呈现出均匀的位移，并没有发生原子层间层错。初始的弹性形变持续了很长时间，说明 bcc 金属钨原子层间存在着很大的能量势垒。当位移达到为 1.38 nm 时，裂纹尖端第 1 次产生了不全位错，如图 3 所示。此不全位错的位置距离裂纹尖端约 0.5 nm。当位移达到 1.71 nm 时，裂纹尖端产生了第 2 个不全位错，此时裂纹尖端附近的原子形貌如图 4 所示。此时 2 个不全位错分别距离裂纹尖端 0.55 和 1.92 nm。位错的出现表明裂纹尖端逐渐将进入塑性变形阶段。

根据载荷位移曲线，在图 2 的 A 点之前，即位移小于 1.89 nm、载荷小于 1528.1 eV/nm 时，曲线均表现为直线，直到 A 点以后曲线才发生转折。因此可以认为系统在 A 点以前均为弹性阶段，A 点之后才进入塑性阶段。而通过微观的原子图可以发现，在位移达到 1.89 nm 之前，裂纹尖端已有不全位错的产生(图 3，图 4)。可见少量不全位错不会引起载荷的变化。从微观原子图可以看出宏观载荷位移曲线无法体现的信息，它体现了原子尺度模拟的优势。

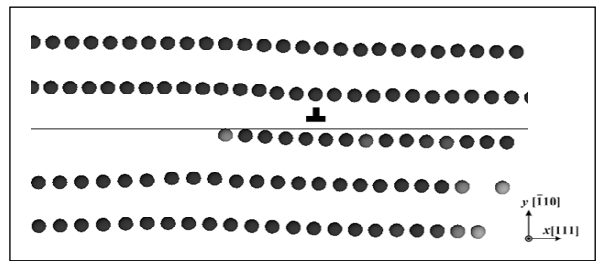


图 3 裂纹尖端的初始不全位错位置示意图 ($\delta=1.38$ nm)

Fig.3 Schematic diagram of initial partial dislocation at crack tip ($\delta=1.38$ nm)

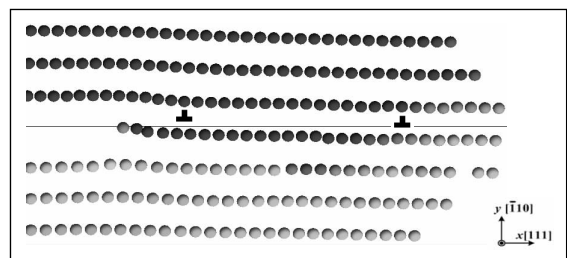


图 4 裂纹尖端的不全位错位置示意图 ($\delta=1.71$ nm)

Fig.4 Schematic diagram of partial dislocation at crack tip ($\delta=1.71$ nm)

在位移加载至 1.89 nm(图 2 载荷位移曲线中的 A 点)后,再后续加载 1 个加载步,即可以从裂纹尖端的原子图中观察到,在裂纹前沿约 3 nm 处发生了第 1 个全位错形核,如图 5 所示。该位错形核的产生与图 2 载荷位移曲线中的第 1 个突降点 A 相对应。由此揭示了宏观载荷位移曲线发生突跳现象所对应的微观本质:随着位移的增加,裂纹尖端经历了长时间的弹性变形,势能逐渐增加,当达到不全位错的能量势垒时,发生了不全位错。而这个变化并没能在载荷位移曲线上体现,此时的曲线并没有发生突变。随着加载的继续,原子层间的势能也继续增加,直到在裂纹的前端发生了全位错形核。位错形核的过程释放了大量的能量,在宏观上表现为载荷的减小,对应载荷位移曲线的突然下降。全位错的形核表明塑性变形真正产生。

随着位移加载的继续,可以发现全位错的位置会发生改变,位错核会向着远离裂纹尖端方向发射。在位错成核后,紧接着就会产生第 1 次位错发射现象。当位移达到 2.0 nm 时,位错已发射到距离裂纹尖端 4.03 nm 处,如图 6 所示。随后位错的运动变得较为缓慢。

继续加载,可以发现裂纹尖端附近会继续有不全位错产生。直到位移达到 2.42 nm 时,发生第 2 个全位错形核现象,如图 7 所示。第 2 个位错核出现在第 1 个位错核和裂纹尖端之间,距离裂纹尖端约 2.73 nm 的位置。此时,2 个位错核到裂纹尖端的距离分别为 2.73 和 5.90 nm。第 2 个全位错的形核与宏观载荷位移曲线(图 2)上的 B 点相对应。在图 2 的 B 点附近,载荷发生了突降。原子图像再次揭示宏观载荷位移曲线的突降现象对应微观尺度原子位错形核现象。

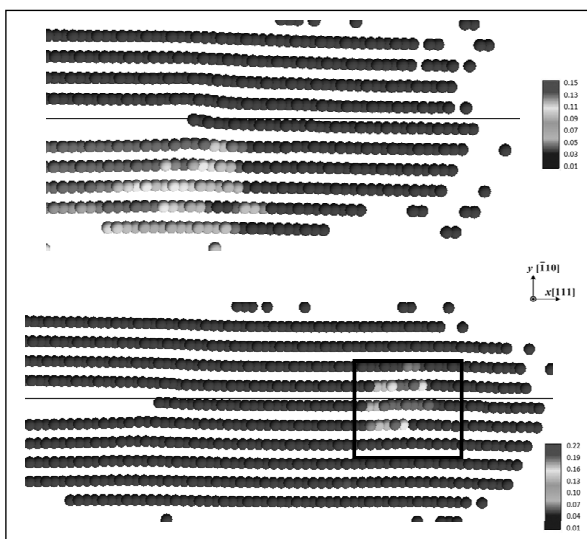


图 5 第 1 个全位错形核示意图

Fig.5 Schematic diagram of the first dislocation nucleation

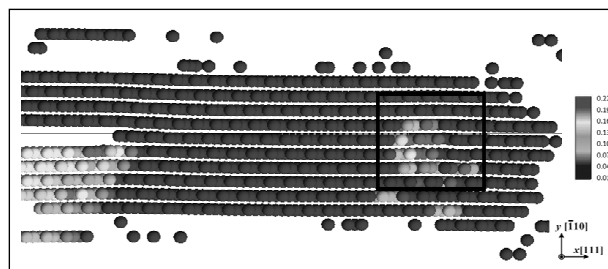


图 6 第 1 次位错发射示意图 ($\delta=2.0$ nm)

Fig.6 Schematic diagram of the first dislocation emission ($\delta=2.0$ nm)

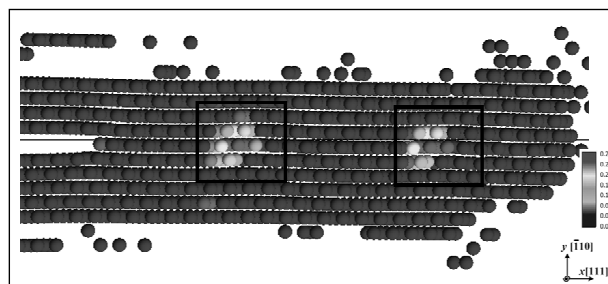


图 7 第 2 个全位错形核示意图 ($\delta=2.42$ nm)

Fig.7 Schematic diagram of the second dislocation nucleation ($\delta=2.42$ nm)

在第 2 个全位错形核后,2 个位错核均向前发射,如图 8 所示。第 1 个全位错从距离裂纹尖端 5.70 nm 处发射至 7.62 nm 处,第 2 个全位错从 2.73 nm 处发射至 3.57 nm 处。在第 2 个全位错成核前,第 1 个全位错运动非常缓慢。而在第 2 个全位错形核后,2 个全位错均发生明显的运动。这说明,第 2 个全位错的形核对第 1 个全位错有较大的影响,促进了第 1 个全位错的发射。观察载荷位移曲线(图 2) B 点附近区域可以发现,位移从 2.41 nm 到 2.43 nm 的这 2 个加载步,曲线连续出现了 2 下突降。从微观原子图分析可知,

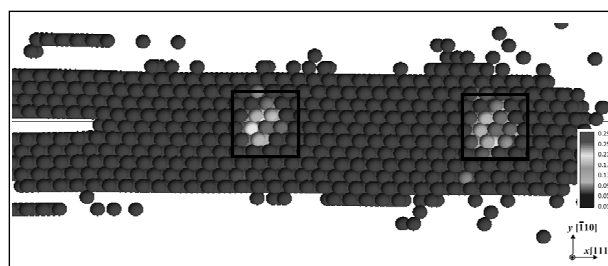


图 8 第 2 次位错发射示意图 ($\delta=2.43$ nm)

Fig.8 Schematic diagram of the second dislocation emission ($\delta=2.43$ nm)

曲线的第 1 次下降对应的微观现象是第 2 个位错的形核，而第 2 次下降对应的微观现象则是 2 个全位错的发射。由此说明，除了位错形核发射外，位错的发射也会释放能量，在宏观上表现为载荷的下降。

此后，2 个全位错都有向远离裂纹尖端的方向运动，但速度非常缓慢。直到当位移达到 2.70 nm 时，发生了第 3 次全位错形核现象，位错核的位置出现在距离裂纹尖端约 2.3 nm 处，如图 9 所示。与载荷位移曲线（图 2）中 C 点处的突降相对应。

随后 3 个全位错均向着远离裂纹尖端的方向发射。第 3 个全位错从距离裂纹尖端 2.27 nm 发射到了 3.38 nm，第 2 个全位错从 5.83 nm 发射到了 6.83 nm，第 1 个全位错从 10.20 nm 发射到了 10.74 nm。第 3 个位错的发射也对应了载荷位移曲线（图 2）上的 C 点处的下降。原子图像再次证实了宏观载荷位移曲线在拐点处的连续两步下降所对应的微观本质不同：第 1 次降低是因为位错形核，第 2 次降低是因为位错发射。

继续加载，当位移达到 2.85 nm 时，在第 3 个位错核与裂纹尖端之间，距离裂纹尖端 2.77 nm 处发生了第 4 次位错形核现象，如图 10 所示。随后各位错核都向前发射。第 4 个全位错的形核和发射对应了载荷位移曲线（图 2）上 D 点附近的变化。从以上模拟结果可见，随着加载的进行，会不断有新的位错形核，每次位错形核的发生都对应 1 个载荷位移曲线的 1 个转折点。新的位错总在靠近裂纹尖端的一侧出现，且

初始稳定位置相近。新位错形核的同时其他位错都会向远离裂纹尖端方向发射。

当位移达到 3.00 nm 时，在裂纹尖端附近约 2.85 nm 处发生了第 5 次位错形核现象，如图 11 所示。第 5 个全位错的形核和后续的发射对应了载荷位移曲线（图 2）上 E 点附近的变化。

在第 5 个位错形核发生后，继续加载，可以看到 5 个全位错均快速地向向前运动，当位移加载至 3.20 nm 时，5 个位错核和裂纹尖端的距离分别为 6.26, 9.82, 14.50, 20.07 和 24.50 nm。在这个阶段中各个位错核的快速运动对应了载荷位移曲线（图 2）尾部的变化：载荷出现了频繁的上下小幅波动，但数值不再明显地上升。由此可以认为已经进入了塑性流动阶段，随着各个位错的快速运动以及新位错的不断产生，在裂纹尖端的缺陷萌生到一定程度后，裂纹将发生开裂破坏。当位移加载至 3.30 nm 时，裂纹尖端的应变图像如图 12 所示，可见裂纹已有一定程度的开裂。综上可见，裂纹尖端原子的位错形核和发射，是裂纹尖端缺陷的主要表现，也是塑性变形和裂纹扩展的主要原因。

3 分析与讨论

3.1 全位错运动曲线

由于 QC 方法能计算到原子尺度，且计算效率较高，所以能够观察到裂纹尖端 5 次全位错形核和发射现象，以及位错的后续运动情况。通过分析以上各个

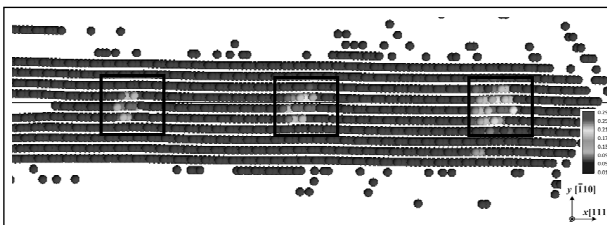


图 9 第 3 次全位错形核示意图 ($\delta=2.70$ nm)

Fig.9 Schematic diagram of the third dislocation nucleation ($\delta=2.70$ nm)

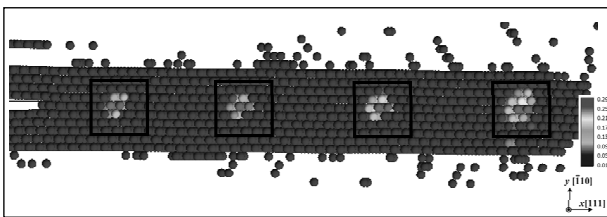


图 10 第 4 次位错形核示意图 ($\delta=2.85$ nm)

Fig.10 Schematic diagram of the fourth dislocation nucleation ($\delta=2.85$ nm)

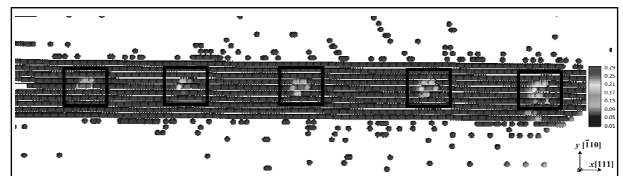


图 11 第 5 次位错形核示意图 ($\delta=3.00$ nm)

Fig.11 Schematic diagram of the fifth dislocation nucleation ($\delta=3.00$ nm)

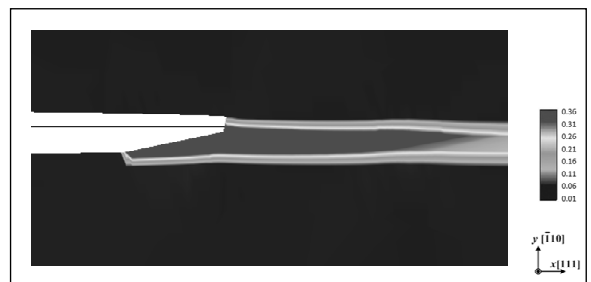


图 12 裂纹尖端应变图 ($\delta=3.30$ nm)

Fig.12 Strain contour of the crack tip ($\delta=3.30$ nm)

加载步的裂纹尖端原子位移图像可知，裂纹尖端在初始塑性阶段缺陷生成的主要表现形式是全位错的形核和发射，且位错的运动具有一定的规律，呈现出不连续、周期性的特点，在某些点会突跳式的向前发展。为了进一步研究位错运动规律，以及位错之间的相互影响，本研究对各个全位错在各加载步的位置（到裂纹尖端的距离）进行了量化追踪统计，做出了全位错位置关于加载位移的曲线。针对模拟过程中裂纹尖端出现的 5 个位错核，可以获得 5 条全位错位置与加载位移关系曲线，如图 13 所示。

从曲线可知，随着位移的加载，位错的运动出现多次突跳，呈现出不连续性。从对应的微观原子图中可知，图 13 中曲线在点 A', C', E', G', H' 处的跳跃分别对应了 5 次全位错的形核和发射。而点 B', D', F' 等位置的曲线跳跃则对应了不全位错的产生。可见，不全位错对位错核的运动影响较小，而全位错的形核是位错运动的主要影响因素。

根据位错理论，外载荷会对位错带来 Peach-Koehler 应力，也是位错运动的主要驱动力。同时，位错还受到了裂纹尖端造成的镜像阻力和晶格阻力的作用。这些力的变化导致了位错的运动。由此可以解释位错运动与加载位移的关系曲线。随着加载的增加，裂纹尖端经历长时间的弹性变形，势能逐渐增加，当达到能量势垒时，就会发生位错现象。位移 $\delta=1.90\text{ nm}$ 时，第 1 个全位错发射（图 13 中 A' 点），该全位错的初始平衡位置在裂纹尖端 4.0 nm 附近。位错成核释放了能量，使局部切应力降低，对应载荷位移曲线图 2 中 A 点的变化。之后随着加载的增加，位错只是极缓慢地向前运动。当 $\delta=2.42\text{ nm}$ 时（图 13 中 C' 点），曲线突跳至 7.6 nm，说明此时能量已达到全位错的势垒，第 2 个全位错形核。第 2 个全位错的初始平衡位置在 3.6 nm 附近，略低于第 1 个全位错的平衡位置，可见

第 1 个全位错对第 2 个全位错有阻碍作用。第 2 个全位错形核之后，紧接着向前发射，同时也促进了第 1 个位错的发射。仅在 1 个加载步内，第 1 个全位错就向前运动了 1.72 nm，第 2 个全位错向前运动了 0.90 nm。随后，前 2 个位错都经历了几次间断式的运动（例如如图 13 点 D'），但变化并不显著。当 $\delta=2.70\text{ nm}$ 时第 3 次全位错成核并发射（图 13 点 E'），3 个位错都快速向前运动。第 3 个全位错的初始平衡位置在 3.4 nm 附近，比第 2 个全位错的初始平衡位置更小。在第 3 个全位错发射并稳定后，3 个全位错继续缓慢向前运动，但速度和之前相比都明显增大。可见随着位错数量的增加，裂纹尖端缺陷程度进一步增加，位错运动的速度会加快。

随后，在位移加载至 2.85 和 3.0 nm 时，分别发射了第 4 个和第 5 个全位错，如图 13 中点 G', H' 所示。在这 2 次全位错发射前后，各位错的运动现象和前几次位错发射时基本一致，再次证明了位错运动和相互影响的规律。在第 5 个全位错发射之后，各曲线都呈现以较陡斜率上升的态势，说明各个位错都快速运动，裂纹尖端缺陷程度加剧，将很快发生开裂破坏。

通过图 13 全位错位置与加载位移曲线，更加清楚地揭示了整个加载过程中各位错的运动规律，说明位错的运动具有不连续性和周期性，且新的位错形核会导致原位错的发射。

3.2 首次位错形核位置的理论计算

模拟结果的载荷位移曲线和原子图像均表明，位错形核是裂纹进入到塑性阶段的标志。下面研究首个全位错的形核条件。根据晶体位错学理论^[18]，当全位错形核后，它主要受到 3 个力的作用，分别是外部载荷应力场引起的 Peach-Koehler (P-K) 力，由裂纹自由表面引起的位错镜像力 (image force)，以及位错运动时所受的晶格点阵阻力 (Peierls 力)。其中，P-K 力对于位错核来说是排斥力，使位错远离裂纹尖端；镜像力的效果则是将位错吸引到裂纹尖端（表面）；而 Peierls 力则起到阻碍位错运动的效果。当这几个力达到平衡时，位错核的位置才能稳定，如式 (1) 所示。

$$F_{PK}=F_i+F_p \tag{1}$$

其中， F_{PK} 为 P-K 力， F_i 为镜像力， F_p 为 Peierls 力。

因此，可以利用力平衡方程来求解位错形核的位置。考虑第 1 个全位错（柏氏矢量为 b_A ），假设其稳定的位置到裂纹尖端的距离为 r 。对于简单一维情况下裂纹尖端附近的位错镜像应力 f_i ，文献[19]给出了相应表达式：

$$f_i(r)=\frac{\mu b(1-\nu \sin^2 \varphi)}{4\pi(1-\nu)r} \tag{2}$$

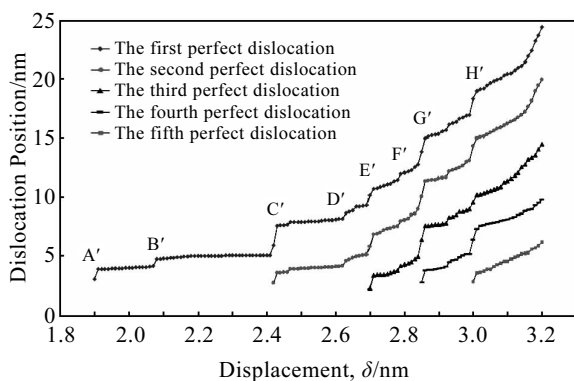


图 13 全位错位置与加载位移关系曲线

Fig.13 Movement of dislocations as displacement loading

其中, b 为位错柏氏矢量的模, ν 为材料泊松比、 μ 为材料剪切模量, φ 为滑移方向与裂纹方向的夹角。

根据 Rice 能量理论^[20], 层错能是原子发生位错滑移时所需要克服的能量势垒。因此原子从一个平衡位置到另一平衡位置所需克服的晶格点阵阻力 (Peierls 力), 可以用稳定层错能 γ_{sf} 来估计。通常稳定层错能可取为不稳定层错能的 1/3~1/2, 由此可以得到 Peierls 应力 f_p 的估计式:

$$f_p \approx \frac{1}{2} \cdot \frac{\gamma_{us}}{b} \quad (3)$$

其中, γ_{us} 是单位面积不稳定层错能。

至于 P-K 力, 是由外部载荷直接导致的, 因此可以由裂纹尖端的应力场来进行计算。根据断裂力学理论中的裂纹尖端应力场公式^[4], 对于简单纯 II 型裂纹模型, 位错所受的 P-K 应力 f_{PK} 为:

$$f_{PK}(r, K_{II}) = \tau(r, K_{II}) = \frac{K_{II}}{4\sqrt{2\pi r}} \left(\cos \frac{\varphi}{2} + 3 \cos \frac{3\varphi}{2} \right) \quad (4)$$

其中, K_{II} 为应力强度因子。当能量释放率 (裂纹拓展力) G 达到原子面间势能的峰值 (即不稳定层错能) 时, 将发生位错, 因此对于第 1 个位错形核时, 有:

$$G = \Phi_{\max} = \gamma_{us} \quad (5)$$

根据断裂力学理论, 对于纯 II 型裂纹, 能量释放率与应力强度因子又具有以下关系:

$$G = \frac{(1-\nu)K_{II}^2}{2\mu} \quad (6)$$

由此可以得到应力强度因子与不稳定层错能的关系:

$$K_{II} = \sqrt{2\mu\gamma_{us}/(1-\nu)} \quad (7)$$

根据式 (7), 可以利用不稳定层错能的数值来计算第 1 个位错形核时的应力强度因子, 从而计算 P-K 应力。

将以上各应力的计算式代入位错力平衡方程式 (1), 可以得到以下方程:

$$\frac{\sqrt{2\mu\gamma_{us}/(1-\nu)}}{4\sqrt{2\pi r}} \left(\cos \frac{\varphi}{2} + 3 \cos \frac{3\varphi}{2} \right) = \frac{\mu b(1-\nu \sin^2 \varphi)}{4\pi(1-\nu)r} + \frac{1}{2} \cdot \frac{\gamma_{us}}{b} \quad (8)$$

对于本研究的裂纹模型, 裂纹滑移角 $\varphi=15^\circ$, 金属钨的材料参数 (泊松比 $\nu=0.34$ 、剪切模量 $\mu=1.51 \times 10^{11}$ Pa, 不稳定层错能^[21] $\gamma_{us}=2.96$ J/m², 柏氏矢量的模 $b=0.274$ nm)。将以上数据代入式 (8), 可求出第 1 个位错形核位置的理论估计值: $r_A \approx 4.556$ nm。根据模拟结果的原子图像, 第 1 个位错形核的稳定位置距离裂纹尖端约为 4 nm (如图 5 所示)。可见, 理论计算结果与模拟结果基本一致, 验证了模拟结果的正确性, 也说明了该理论分析结果能够较好地估计 II 型裂纹首

次位错形核的位置。

3.3 后续位错平衡位置的分析

从 2.2 节中模拟结果的原子图可见, 位错的运动具有以下 2 个特点: (1) 在位错形核后会在初始稳定位置停留一段时间, 当载荷达到一定值时, 位错会向远离裂纹尖端的方向运动一段距离, 随后又稳定在新的平衡位置附近, 呈现出不连续、周期性特点。(2) 每当新的位错形核时, 原有位错核会向前运动一段距离, 随后稳定在新的平衡位置附近。

以下通过对位错的受力情况进行分析, 分别解释以上 2 种位错运动的机理。

(1) 全位错形核后, 主要受到 P-K 力, 镜像力和 Peierls 力这 3 个力的作用。当这几个力达到平衡时, 位错的位置才能稳定。力平衡方程如式 (1) 所示。其中 P-K 力 F_{PK} 是外载荷引起的, 随着加载的进行, 逐渐增大。而镜像力 F_i 与位错的位置 (与裂纹尖端的距离) 有关。根据层错能理论, Peierls 力作为晶格点阵阻力, 其大小是周期性变化的, 即存在峰值和谷值。在全位错初始形核位置附近, 这 3 个力相平衡。随着加载的进行, P-K 力 F_{PK} 逐渐增大, 镜像力 F_i 不变, 而 Peierls 力 F_p 也在增大, 因此位错受力依然平衡, 并不会发生运动。当 F_p 的值达到峰值后, 便不再增大。而由于外载荷一直在增加, 因此 F_{PK} 依然在增大, 打破了位错的力平衡, 因此位错向远离裂纹尖端的方向发射。由于位错位置 r 的改变会引起 F_{PK} 和 F_i 的改变, 所以当位错运动到某一位置后, 会重新达到力平衡, 而稳定在该位置附近。可见, 位错运动的不连续性主要是由 Peierls 力的周期性导致的。这也就解释了从模拟结果观察到的位错运动不连续性和周期性的特点。

(2) 由相关位错理论^[22]可知, 位错之间存在着相互作用力。对于简单一维情况, 设 2 个位错之间的距离为 x , 则其间相互作用的排斥力可表示为:

$$F(x) = \mu b^2 / 2\pi x \quad (9)$$

其中, $F(x)$ 为位错间的相互作用力, b 为位错柏氏矢量的模, μ 为材料剪切模量, x 为位错间的距离。

根据模拟结果和理论计算可知, 每次新位错形核的初始位置基本一致, 都在距离裂纹尖端 r_A 位置附近。因此, 新位错刚形核时, 与原位错的距离非常近, 位错之间会产生较大的作用力, 从而推动原位错向前发射。当 2 个位错的距离增大到一定值后, 其相互作用力减小, 又能满足新的力平衡方程, 两位错的位置再次稳定。这就解释了每当新的位错形核时, 原有位错都会向前运动一段距离, 稳定到新的平衡位置这一现象的微观机理。

而后续产生的位错, 由于受到位错间相互作用力的影响, 与第 1 个位错相比其力平衡方程会发生改变。

对于第 1 个位错 α , 形核后的力平衡方程为式 (1) 所示。当第 2 个位错 β 形核后, 位错 α 向前发射, 以满足新的力平衡方程:

$$F_{PK}(K_{II}, r) + F_{\alpha\beta}(x) = F_i(r) + F_p \quad (10)$$

其中, $F_{\alpha\beta}(x)$ 为位错 α 和 β 之间的作用力。

而此时位错 β 的力平衡方程为:

$$F_{PK}(K_{II}, r) = F_i(r) + F_p + F_{\alpha\beta}(x) \quad (11)$$

与位错 α 的初始平衡方程式 (1) 相比, 多了一项指向裂纹尖端的力 $F_{\alpha\beta}(x)$, 因此, 第 2 个位错的初始平衡位置与第 1 个位错相比, 应该更靠近裂纹尖端一些。模拟结果显示, 第 1 个位错的初始平衡位置在距离裂纹尖端 4 nm 附近 (图 5), 而第 2 个位错的初始平衡位置在 3.6 nm 附近 (图 7), 与理论分析相符。模拟中位错运动所表现出的主要特征均得到了理论解释, 也验证了模拟结果的正确性。综合模拟结果和理论分析, 充分地揭示了 bcc-W II 型微观裂纹在初始塑性阶段裂纹尖端缺陷生成过程和其微观机理。

4 结 论

采用多尺度准连续介质法 (QC) 对纳米量级的 bcc 金属钨的 II 型裂纹初始塑性阶段裂纹尖端缺陷生成过程进行计算模拟, 得到加载过程中的载荷位移曲线和各加载步对应的裂纹尖端原子位移图像。观察到裂纹尖端不全位错的产生, 5 次全位错形核与发射, 以及位错的运动等现象。模拟结果表明在初始塑性阶段, 裂纹尖端区域的位错是 bcc 金属钨 II 型裂纹尖端缺陷的主要表现形式; 位错数量的不断增加和快速运动最终将导致裂纹的断裂破坏。结合位错理论和层错能理论对模拟结果进行了分析, 得到以下结论:

(1) 宏观载荷位移曲线各突降点对应的微观本质是裂纹尖端全位错的形核和发射; 共观察到 5 次裂纹尖端的全位错形核和发射现象。

(2) 位错的运动具有不连续性和周期性的特点: 位错形核后先稳定在一定位置, 此后会不连续地向远离裂纹方向发射; 且新位错形核会导致原位错的发射。

(3) 将经典断裂力学理论与 Rice 不稳定层错能理论相结合, 求解微观尺度下位错的力平衡方程, 计算出首个位错形核平衡位置的理论估计值, 并在此基础上解释了位错运动规律及其本质机理: Peierls 力和位错间相互作用力的变化导致了位错运动的不连续性。理论分析结果与模拟结果相一致, 验证了正确性。

本研究的计算模拟和理论分析结果, 揭示了纳米尺度下 bcc 金属钨 II 型裂纹在初始塑性阶段的特性和机理, 对加深相关 bcc 金属纳米材料断裂特性的了解, 具有重要意义。

参考文献 References

- [1] Yang Dingyi(杨鼎宜), Sun Wei(孙伟). *Materials Review*(材料导报)[J], 2003, 17(10): 7
- [2] Gleiter H. *Progress in Materials Science*[J], 1989, 33(4): 223
- [3] Lu Ke(卢柯), Lu Lei(卢磊). *Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2000, 36(8): 785
- [4] Wang Ziqiang(王自强), Chen Shaohua(陈少华). *Advanced Fracture Mechanics*(高等断裂力学)[M]. Beijing: Science Press, 2009
- [5] Tan Hao(谭浩), Zheng Zhijun(郑志军), Wang Haiying(汪海英) et al. *Advances in Mechanics*(力学进展)[J], 2011(2): 3
- [6] Miller R, Ortiz M, Phillips R et al. *Engineering Fracture Mechanics*[J], 1998, 61(3-4): 427
- [7] Miller R, Tadmor E B, Phillips R et al. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 1998, 6(5): 607
- [8] Tadmor E B, Hai S. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*[J], 2003, 51(5): 765
- [9] Hai S, Tadmor E B. *Acta Materialia*[J], 2003, 51(1): 117
- [10] Machová A, Pokluda J, Uhnáková A et al. *International Journal of Fatigue*[J], 2014, 66: 11
- [11] Zhou T, Yang X H, Chen C Y. *International Journal of Solids and Structures*[J], 2009, 46(9): 1975
- [12] Cui C B, Beom H G. *Materials Science & Engineering A*[J], 2014, 609: 102
- [13] Cui Xiaoming(崔晓明), Bai Pucun(白朴存), Liu Fei(刘飞) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2017, 46(3): 728
- [14] Shiari B, Miller R E. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*[J], 2016, 88: 35
- [15] Tadmor E B. *The Quasicontinuum Method*[M]. Rhode Island and Providence Plantations: Brown University, 1996
- [16] Johnson R A, Oh D J. *Journal of Materials Research*[J], 1989, 4(5): 1195
- [17] Simmons G, Wang H. *Single Crystal Elastic Constants and Calculated Aggregate Properties: A Handbook*[M]. Cambridge: MIT Press, 1971: 85
- [18] Wang Yanan(王亚男), Chen Shujiang(陈树江), Dong Xichun(董希淳). *The Theory and Applications of Dislocation*(位错理论及其应用)[M]. Beijing: Metallurgical Industry Press, 2007
- [19] Rice J R. *Philosophical Magazine A*[J], 1974, 29(1): 73
- [20] Rice J R. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*[J], 1992, 40(2): 239

- [21] Du Hao(杜 浩), Ni Yushan(倪玉山). *Acta Physica Sinica*(物理学报)[J], 2016, 65(19): 196-201
- [22] Hull D, Bacon D J. *Introduction to Dislocations*[M]. UK: Elsevier Press, 2011

Multiscale Simulation of Mode II Atomistic Crack in BCC Tungsten

Du Hao, Ni Yushan

(Fudan University, Shanghai 200433, China)

Abstract: In order to have a better understanding of the fracture mechanisms of body-centered-cubic (bcc) metal, the multiscale quasi-continuum method (QC) was employed to analyze the nano-sized crack of bcc tungsten. The mode II crack of tungsten (W) in {110} planes along the [111] direction was simulated. The load-displacement curve and atom displacement images for each loading step were presented. The generation of partial dislocations, the nucleation and emission of perfect dislocations and the movement of dislocations in crack tip were observed. Simulation results show that partial dislocations will produce before perfect dislocation nucleation; each drop point of the load-displacement curve corresponds to the nucleation and emission of a perfect dislocation; dislocation nucleation happens several times along with the dislocation launching; the increasing number and rapid movement of dislocations eventually lead to mode II fracture. According to the simulation results, the curve of dislocation position vs displacement was presented, and the movement characteristics of dislocations were analyzed. The results show that all the dislocations will launch after a new dislocation nucleation, indicating that a new dislocation nucleation will promote dislocation movement, and dislocation movement will speed up with the increase in the number of dislocations. In addition, the phenomenon and mechanism of dislocation in bcc metal was analyzed according to the theory of crystallography and Rice' theory of unstable stacking fault energy. Finally, the forces on and between dislocation were discussed. By calculating the force balance equation in microscale, the initial equilibrium position of the dislocation was forecasted, and the movement mechanism of dislocations near the crack tip was explained, which coincides well with the simulation results.

Key words: multiscale quasi-continuum method; mode II crack; dislocation; stacking fault energy

Corresponding author: Ni Yushan, Ph. D., Professor, Department of Aeronautics and Astronautics, Fudan University, Shanghai 200433, P. R. China, E-mail: niyushan@fudan.edu.cn