

晶体相场模拟揭示晶粒取向与裂纹扩展关系

张云帆¹, 李欢庆¹, 宋卓¹, 李宁¹, 赵宇宏^{1,2,3}

- (1. 中北大学 材料科学与工程学院 新材料智能铸造先进成型山西省重点实验室 教育部共建高性能铝/镁合金材料开发应用协同创新中心, 山西 太原 030051)
(2. 北京科技大学 北京材料基因工程高精尖创新中心, 北京 100083)
(3. 辽宁材料实验室 材料智能技术研究所, 辽宁 沈阳 110004)

摘要: 采用晶体相场法, 研究了双晶系统在动态拉伸条件下, 不同取向角度对纳米双晶体系中微裂纹扩展机制的影响。结果表明, 相同拉伸条件下, 裂纹扩展方式、裂纹体积分数、裂纹扩展速率与晶粒取向相关。同取向差裂纹扩展机制差异取决于裂纹尖端附近的位错活动, 位于裂纹尖端的单个位错, 易会导致裂纹发生脆性扩展, 加快裂纹扩展速率; 裂纹尖端多个方向不同的位错可能会发生位错缠结, 进而阻碍裂纹扩展。

关键词: 晶体相场法; 动态拉伸; 裂纹扩展; 晶粒取向

中图分类号: O733 **文献标识码:** A **文章编号:** 1002-185X(2026)05-1268-11

1 引言

纳米级微裂纹是材料中常见的一种缺陷^[1], 其存在与扩展方式直接决定了材料的断裂特性^[2], 根据断裂前是否发生明显的塑性变形, 可将裂纹扩展方式分为脆性断裂^[3]与韧性断裂^[4]两大类型。也可以根据材料不同的受力情况, 将裂纹分为张开型、滑开型和撕开型裂纹^[5]。微裂纹的存在破坏了材料的完整性, 并且在裂纹尖端形成高度应力集中区域, 显著削弱了材料的强度与塑性。在实际材料加工制造过程中, 裂纹引发的断裂失效会缩短产品服役周期, 导致生产效率降低与产量损失。因此, 深入探究纳米级微裂纹的扩展机制, 不仅有助于揭示材料微观组织结构的演变规律, 还可以为工程上预防断裂失效、优化材料综合性能提供关键理论依据。

为提升材料断裂性能, 国内外科研团队借助光学显微镜、扫描电子显微镜和原位透射电子显微镜等观测技术, 围绕材料裂纹萌生及扩展^[6-11], 应力腐蚀开裂^[12-13], 热裂敏感性^[14-15], 疲劳裂纹自主愈合^[16]等现象进行了深入研究, 并揭示了温度、晶界等多种因素对裂纹扩展的影响^[17-19]。然而, 受制于环境介质复杂交互作用、实验样品制备表征的技术瓶颈, 以及高昂的实验成本投入, 传统实验方法在动态追踪金属材料微观组织演变进程时存在明显局限, 因此, 实验研究和数值模拟相结合的方法已经逐渐兴起应用于材料的各方面研究中^[20-22]。

原子模拟技术在材料科学领域的研究中彰显出独特

价值与巨大潜力, 能够深入剖析材料微观结构的形成机制, 并精准阐释其与宏观性能间的内在关联。近年来, 分子动力学模拟^[23]、第一性原理计算^[24]、相场法^[25-28]以及晶体相场法^[29-30]等一系列数值模拟方法应运而生, 已成为探究材料微观结构演变规律的有力手段, 为理解材料复杂物理化学过程提供了全新视角与理论依据。

Guo等^[31]将晶体塑性有限元法与扩展有限元法相结合, 构建了一个新的模型预测了疲劳裂纹扩展速率与初始预制裂纹长度的关系。但尚未针对相邻晶粒取向差所形成的低角度晶界与高角度晶界, 分别探讨二者对裂纹扩展的阻碍作用; Cao等^[32]通过第一性原理计算以及分子动力学模拟, 研究了AlMo0.5NbTa0.5TiZr难熔高熵高温合金中A2/B2超结构的断裂机制。但未关注实际多晶粒体系中晶粒取向差异对断裂行为的调控作用, 未区分讨论晶粒取向差异与相组成差异对裂纹萌生、扩展的影响; Gao等^[33]通过分子动力学建模, 发现裂纹扩展由裂纹尖端最大主应力驱动, 其角度决定扩展方向, 但未结合4H-SiC不同取向的滑移系类型等晶体学特性展开有关取向角度如何通过微观机制影响裂纹扩展的相关研究。

上述研究虽从不同维度揭示了裂纹扩展的部分规律, 或建立预测模型, 或分析特定合金的断裂机制, 或明确裂纹扩展的驱动因素, 但均未围绕晶粒取向角度这一核心属性展开系统性探索, 导致在众多裂纹研究中, 取向角度对裂纹扩展的系统性研究仍相对匮乏, 其角度变化

收稿日期: 2025-07-10

基金项目: 国家自然科学基金(52375394, 52275390, U23A20628, 52305429); 山西省科技重大专项(202301050201004)

作者简介: 张云帆, 男, 2001年生, 硕士, 中北大学, 山西 太原 030051, E-mail: zhaoyuhong@nuc.edu.cn

如何影响裂纹扩展的速率、路径与形态也尚不明确。

上述建模方法都存在显著的弊端。分子动力学由于原子尺度与计算规模限制,裂纹扩展路径预测难度较大,难以模拟裂纹的完整过程;有限元法由于需对裂纹尖端进行网格重建,裂纹的扩展路径受到网格的限制,精度不够高,相比之下,晶体相场(phase-field crystal, PFC)模型在原子尺度(10^{-9} m)和扩散时间尺度(10^{-6} s)上有着明显优势^[34-36],原子尺度方面,在微观结构与裂纹演化的方面耦合表征更高效,无需追踪单个原子即可完成对裂纹扩展的表征;扩散时间尺度方面,则可以突破原子运动时间步长限制,实现长时程裂纹演化与慢速扩散过程的模拟,更适用于对裂纹的相关研究。近年来,PFC模型多用于研究微裂纹的萌生^[37]、裂纹的形核与扩展^[38]、裂纹分叉和以及空位连通性^[39]、韧性脆性裂纹之间相互转变^[40]、二维三维不同维度下裂纹的扩展^[41]等方面,同时考虑了初始裂纹形状、温度^[42-44]、拉伸形式^[45]、应变施加方式、晶体取向^[46]、晶界^[47-48]和位错的运动^[49-51]等影响因素对裂纹扩展方式的影响。

鉴于此,本工作采用晶体相场法,着重研究取向角度对裂纹扩展的作用。通过构建精准模型,模拟不同取向条件下裂纹的扩展行为,深入剖析取向角度与裂纹扩展速率、路径间的内在关联,为材料抗断裂性能提升提供理论依据与技术支撑。

2 研究方法

2.1 晶体相场方法

Elder等人^[52]在2002年提出了一种基于密度泛函理论的晶体相场模型,基于非线性动力学Swift Hohenberg模型^[53]的自由能量函数提出了单模PFC模型,其无量纲自由能函数为^[54]:

$$F = \int d\mathbf{x} \left\{ \frac{\rho}{2} \left[r + (1 + \nabla^2)^2 \right] \rho + \frac{\rho^4}{4} \right\} \quad (1)$$

其中, F 为自由能函数, \mathbf{x} 为无量纲空间坐标, ρ 为无量纲原子密度, r 为无量纲过冷度, ∇^2 为拉普拉斯算子。

原子密度的单模近似解为:

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

其中, q 是波矢, x 和 y 共同构成二维正交坐标系,用于描述晶体材料在二维平面内的位置, $A = \frac{4}{5} \left(\rho_0 + \frac{1}{3} \sqrt{-15r - 36\rho_0^2} \right)$ 为振幅, ρ_0 是初始原子密度。

无量纲守恒场的序参数 ρ 满足Cahn-Hilliard动力学方程:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta \rho} = \nabla^2 \left\{ \rho \left[r + (1 + \nabla^2)^2 \right] + \rho^3 \right\} \quad (3)$$

式中, t 为时间。

采用半隐式傅里叶方法^[55]求解式(3),并将实空间的

函数变换到傅里叶空间中进行计算,得到下一时刻的原子密度:

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

式中, $\{\rho\}_{k,t+1}$ 和 $\{\rho\}_{k,t}$ 分别为 $t+1$ 和 t 时刻傅里叶空间对应的原子密度; k^2 为傅里叶空间波矢量,满足 $k^2 = |\mathbf{k}|^2$ 。

2.2 参数设置

以单晶中面心立方平面(111)为研究对象。以 $[\bar{1}\bar{1}0]$ 方向作为 x 轴,以 $[\bar{1}\bar{1}2]$ 方向作为 y 轴,如图1a和1b所示。为了便于分析裂纹扩展过程中产生的位错类型,根据边缘位错的多余半原子平面以及相应的Burgers矢量,将刃型位错类型分为6种,如图1c、1d所示。

模拟所用参数根据单模二维相图进行选择。单模PFC的二维相图由条形相、三角形相、液相三部分组成。图2a中的T和L分别代表三角相和液相,根据图2a晶体相场模型二维相图,基体参数需要选择在固相与液相区,以保证在裂纹扩展的模拟过程中三角相与液相两相始终保持稳定,基于此,基体选择温度参数 $r = -1.0$,原子密度参数 $\rho_0 = 0.49$,如图2a中A点所示。初始裂纹处参数选择需确保裂纹在模拟过程中始终不被三角相基体吞噬,因此裂纹处参数靠近两相共存区,即设为 $r = -1.0, \rho_0 = 0.79$,如图2a中B点所示。晶粒的取向角 θ_1 和 θ_2 定义为与 $[\bar{1}\bar{1}2]$ 晶向 y 轴的夹角,(图中以 $\theta_1 = 14^\circ, \theta_2 = 25^\circ$ 为例)。本工作采用单轴拉伸变形方法,沿 x 轴拉伸的示意图如图

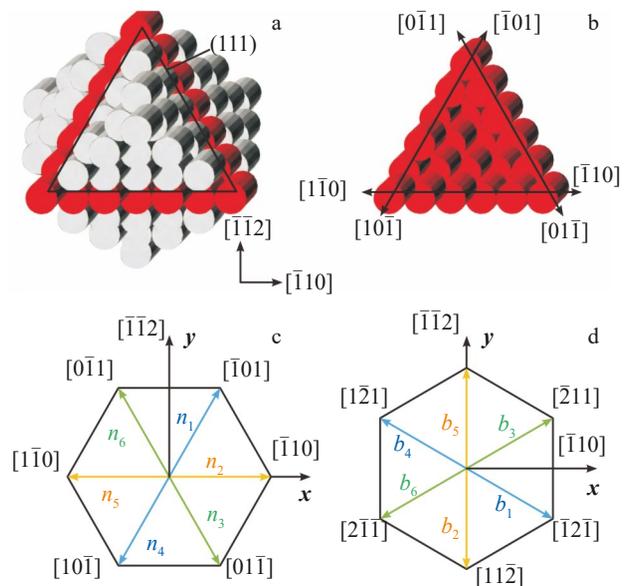


图1 面心立方结构原子排列和(111)平面原子分布与晶向图以及刃型位错类型和对应的Burgers矢量类型

Fig.1 Atomic arrangement of face-centered cubic structure (a); atomic distribution and crystallographic map of (111) plane (b); edge dislocation type (c) and corresponding Burgers vector type in Fig.1c (d)

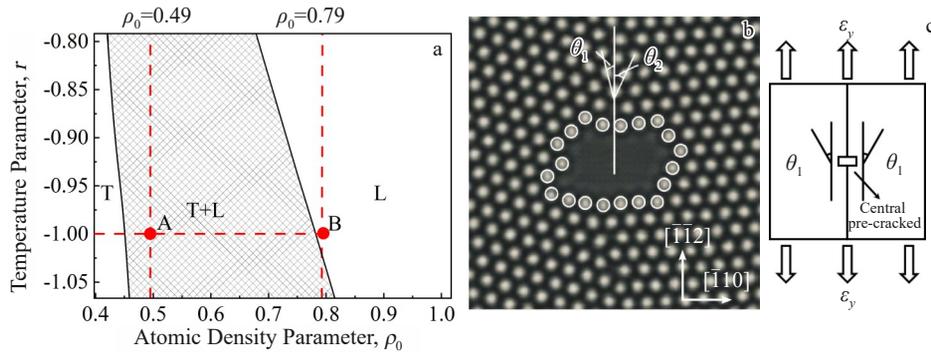


图2 PFC 模型二维相图和含裂纹的双晶PFC 原子密度分布图与沿y轴的拉伸应变系统

Fig.2 Two-dimensional phase diagram of PFC model (a), atomic density distribution of twin PFC with cracks (b), and tensile strain system along y-axis (c)

2c 所示,设置拉伸应变为 ϵ_x 。在模拟过程中,当样品受到垂直方向拉伸时,样品的坐标关系将发生变化,例如,坐标 (x,y) 代表应变施加前样品中的格点位置, (x',y') 为拉伸变形后样品中的格点位置, $y'=y(1+\epsilon_y)$, 单轴动态拉伸时, x 方向的空间步长 d 随着应变速率 $\dot{\epsilon}$ 的增大而增大, $d = y\dot{\epsilon}\Delta t, \epsilon_y = \dot{\epsilon}\Delta t, n$ 为时间步长。 x 方向拉伸后坐标为 $x', x' = x$ 。在本模型中采用周期性边界条件,其他参数如表1所示。

3 结果与分析

晶体相场模拟初期,双晶系统内因密度波动、预制裂

纹处应力集中等不稳定因素,自由能 F 较高。随着时间步长的逐渐增加,原子扩散使密度趋于均匀、初始应力释放,自由能逐渐降低到最小值。根据最小能量原理,经过 20 000 时间步长的弛豫,体系中的不稳定因素被消除,晶体结构趋于稳定,即体系达到平衡状态。

在模拟系统中,随着两侧取向角度的改变,在垂直拉应力作用下,裂纹以不同的方式扩展。如图 3a 所示,模拟结束后,初始裂纹并未发生扩展;如图 3b 所示,随着时间步长的增加,初始裂纹右侧出现一系列空位,初始裂纹左侧未发生变化;如图 3c 所示,初始裂纹右侧无变化,左侧裂纹发生脆性扩展,直至模拟区域边界;如图 3d 所示,

表 1 PFC 模拟参数

Table 1 PFC simulation parameters

Calculation area grid	Initial rectangular crack size	Spatial step	Time step	Strain rate
$L_x \times L_y = 512\Delta x \times 512\Delta y$	$60\Delta x \times 30\Delta y$	$\Delta x' = \Delta y' = \pi/4$	$\Delta t = 0.3$	$\dot{\epsilon} = 6 \times 10^{-6} / \Delta t$

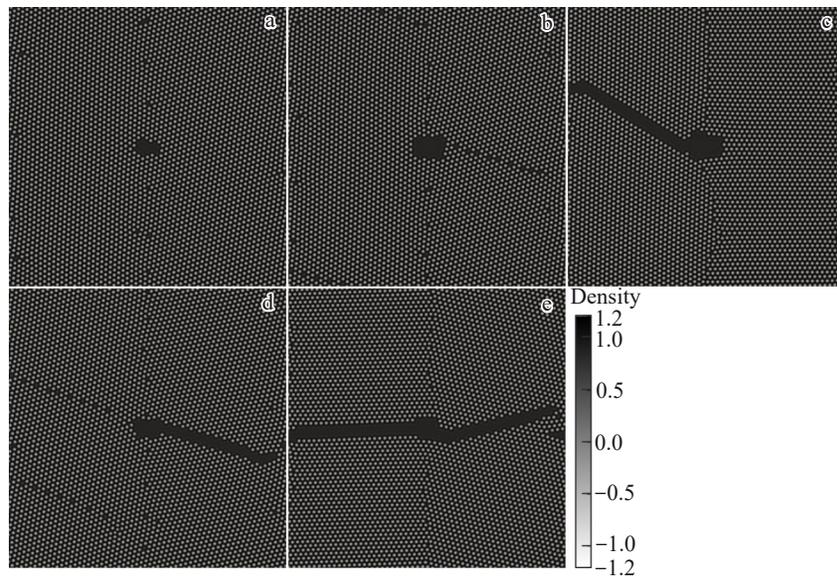


图3 双晶系统下5种裂纹扩展情况图

Fig.3 Propagation conditions of five cracks in a double crystal system: (a) without propagation of prefabricated crack; (b) vacancy migration on one side of prefabricated crack; (c) crack propagation on one side of prefabricated crack; (d) vacancy migration on one side and crack propagation on the other side of prefabricated crack; (e) crack propagation on both sides of prefabricated crack

初始裂纹左侧产生了一系列空位,右侧随着时间步长的增加,裂纹扩展至模拟区域边界;如图3e所示,初始裂纹左右两侧均发生扩展。

采用控制变量法进行取向角度的选择,首先,将两侧取向角的差值记为 $\Delta\theta$,为了避免两侧角度 θ_1 和 θ_2 同时变化引起取向角度差 $\Delta\theta$ 的取值变化归因困难,通过保持左侧角度 θ_1 恒定,改变右侧取向角度 θ_2 以及取向角度差 $\Delta\theta$ 的取值,对预制裂纹的扩展行为展开对比分析。当左侧 $\theta_1=2^\circ$ 时,改变右侧 θ_2 取值后得到的裂纹体积分数及其裂纹扩展速率如图4所示,基于图中结果,可将双晶裂纹的主要扩展行为分为以下3类:

当 $\theta_2=10^\circ、12^\circ、18^\circ$ 时,裂纹体积分数随应变变量增大呈现先急剧上升至较大值后趋于水平并仅在小范围内波动的特征,如图4a、4b所示,而裂纹扩展速率则从较高值随应变变量增加急剧下降至零后保持水平,并围绕水平线 $da/dt=0$ 小范围波动。当 $\theta_2=8^\circ、24^\circ$ 时,裂纹体积分数随应变变量增大持续增长,扩展速率呈现先降低、再增高、再次随应变变量增大而降低至一定值后又复升高的波动特征,

直至裂纹扩展完毕,由图4c、4d所示。当 $\theta_2=14^\circ、16^\circ、20^\circ、22^\circ、26^\circ$ 时,裂纹体积分数随应变变量的增加而增大至一定值后保持水平直至裂纹扩展至模拟区域边界,扩展速率首先呈大幅度直线下降,随后线性增长至最大值后开始下降,最终降至接近零值并在小范围波动,如图4e、4f所示。

4 讨论

为深入探究取向角对预制裂纹扩展模式的影响机制及其诱导裂纹扩展的内在原因,基于上一节中3类具有典型特征的裂纹扩展速率与裂纹体积分数变化规律,在每组中分别选取一个具有代表性的角度作为研究对象。通过对其在不同时间步长下的裂纹扩展形态、位错行为与应变分布进行系统分析,揭示裂纹演化规律。

4.1 $\theta_1=2^\circ, \theta_2=24^\circ$ 双晶体系

在 $\theta_1=2^\circ, \theta_2=24^\circ, \Delta\theta=22^\circ$ 双晶体系中,结合自由能曲线分析了裂纹扩展速率以及裂纹体积分数随应变变量的变化,如图5所示。依据Griffith断裂准则可知,静态条件下

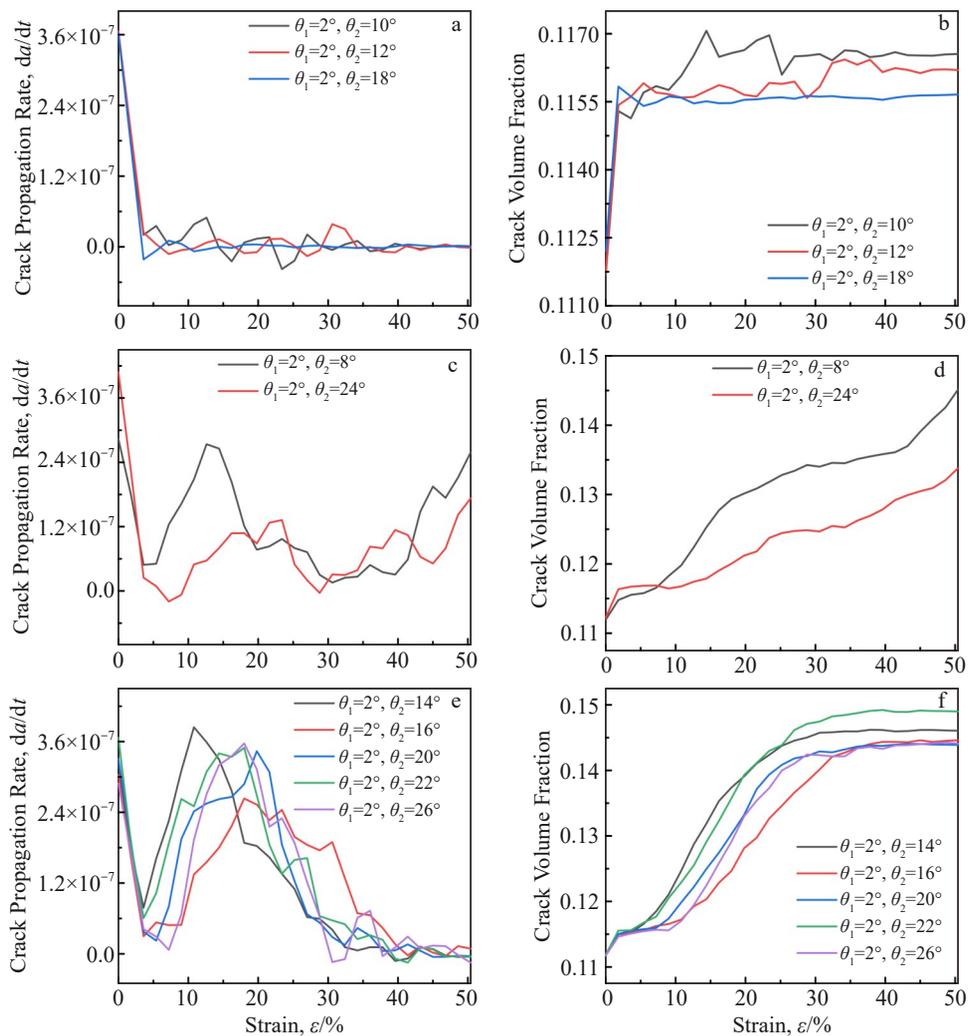


图4 不同取向角不同应变变量下裂纹扩展速率曲线和裂纹体积分数曲线

Fig.4 Crack propagation rate plots (a, c, e) and crack volume fraction plots (b, d, f) at different orientation angles and strain levels

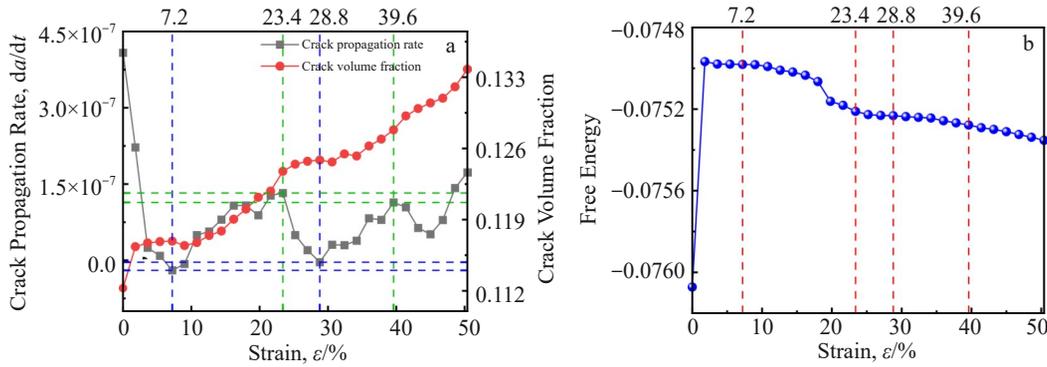


图5 $\theta_1=2^\circ, \theta_2=24^\circ$ 时不同应变下裂纹扩展速率、裂纹体积分数曲线与自由能变化曲线

Fig.5 Crack propagation rate and crack volume fraction curves (a) and free energy variation curve (b) under different strains at $\theta_1=2^\circ$ and $\theta_2=24^\circ$

发生脆性断裂的必要条件是裂纹扩展所释放的变形能等于或大于裂纹面积所需的能量。

在应变增长初期阶段,自由能曲线呈水平直线状态,表明此时无变形能释放,裂纹保持初始状态未发生扩展,裂纹扩展速率维持在 $da/dt=0$ 水平,如图 5a、5b 所示。随着应变增大,自由能曲线开始降低,由裂纹扩展释放变形能所致,表现为裂纹体积分数的线性增长,裂纹扩展速率曲线亦呈现出曲折上升特征。后续自由能曲线下降斜率逐渐减小并趋近于水平,表明此时能量释放速率减缓,裂纹体积分数增长趋于平缓,扩展速率逐渐降低至停滞状态。当自由能曲线短暂维持水平后,其再次下降且斜率增大,系统变形能加速释放并转化为裂纹扩展驱动力,裂纹体积分数随之再次显著增长,裂纹扩展速率在经历短暂波动后持续上升直至扩展过程终止。结果表明,裂纹体积分数及其扩展速率的演化规律与自由能释放存在显著的相关性。

针对该曲线中极小、极大值特征点展开研究,分析裂纹扩展机理。当应变 $\epsilon=7.2\%$ 时,裂纹扩展速率降至最低,图 6a 为应变 7.2% 的初始裂纹形貌,展示出裂纹处的位错分布情况,对此进行应变分析,其中 $\theta_1=2^\circ$ 左半部

分以及 $\theta_2=24^\circ$ 区域的应变分布如图 6b、6c 所示,红色代表拉应力,蓝色代表压应力。分析表明,预制裂纹左侧存在 Burgers 矢量为 $[2\bar{1}\bar{1}]$ 和 $[1\bar{2}1]$ 的 n_6 和 n_4 型位错(图中白色“T”形标记),二者形成的位错锁结构在局部区域产生显著压应力,对裂纹扩展形成阻碍,因此此时裂纹扩展速率较低。

针对扩展速率同样处于较低值的 $\epsilon=28.8\%$ 时的裂纹状态展开分析。如图 7a 所示,左侧裂纹前端出现显著空位,空位区域存在 Burgers 矢量为 $[\bar{1}\bar{1}2]$ 和 $[2\bar{1}1]$ 的 n_5 型与 n_3 型位错,二者与裂纹尖端 Burgers 矢量为 $[2\bar{1}\bar{1}]$ 的 n_6 型位错发生了交互作用,形成位错缠结,对应裂纹形貌应变分析图(图 7b、7c)中左侧裂纹区域大面积蓝色压应力分布,显著阻碍裂纹扩展进程;在预制裂纹右侧 $\theta_2=24^\circ$ 区域,裂纹尖端产生 Burgers 矢量为 $[\bar{2}11]$ 和 $[1\bar{2}1]$ 的 n_3 型与 n_4 型位错,两者相互作用形成了位错锁,且蓝色压应力区域强度显著高于红色拉应力区域,进而抑制裂纹扩展。在上述机制共同作用下,该应变状态下裂纹基本处于非扩展状态。

随后,对图中扩展速率较快的两个特征时刻开展同类型分析。如图 8a 所示裂纹形貌,当 $\epsilon=23.4\%$ 时,左侧裂

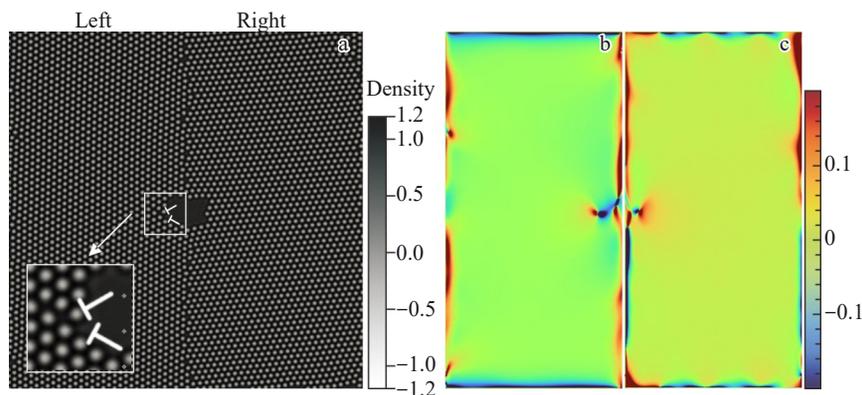


图6 应变量为 7.2% 时裂纹形貌图以及 $\theta_1=2^\circ$ 左侧区域应变分析图和 $\theta_2=24^\circ$ 右侧区域应变分析图

Fig.6 Crack morphology diagram (a), strain analysis diagram of the left part at $\theta_1=2^\circ$ (b), and strain analysis diagram of the right part at $\theta_2=24^\circ$ (c) with strain of 7.2%

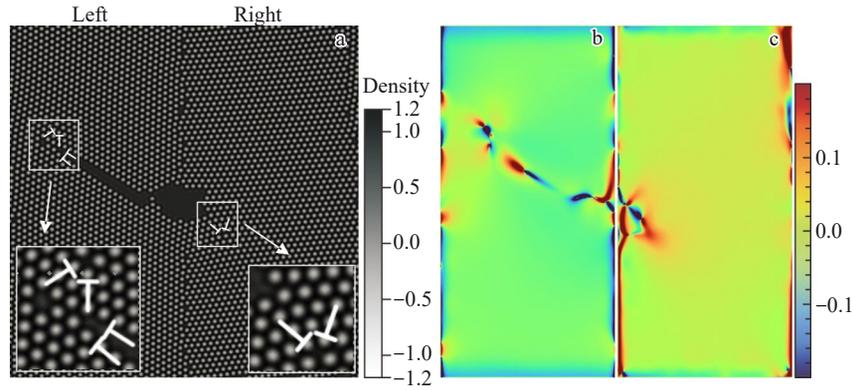


图7 应变量为28.8%时裂纹形貌图以及 $\theta_1=2^\circ$ 左侧区域应变分析图和 $\theta_2=24^\circ$ 右侧区域应变分析图

Fig.7 Crack morphology diagram (a), strain analysis diagram of the left part at $\theta_1=2^\circ$ (b), and strain analysis diagram of the right part at $\theta_2=24^\circ$ (c) with strain of 28.8%

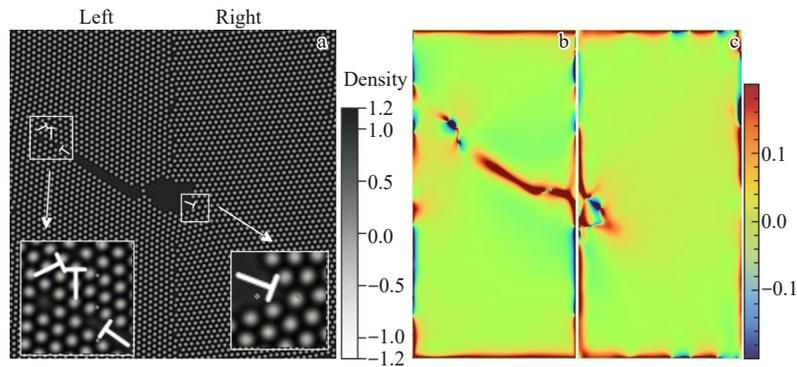


图8 应变量为23.4%时裂纹形貌图与 $\theta_1=2^\circ$ 左侧区域应变分析图和 $\theta_2=24^\circ$ 右侧区域应变分析图

Fig.8 Crack morphology diagram (a), strain analysis diagram of the left part at $\theta_1=2^\circ$ (b), and strain analysis diagram of the right part at $\theta_2=24^\circ$ (c) with strain of 23.4%

纹前端出现空位，空位区域存在着 Burgers 矢量为 $[\bar{1}\bar{1}2]$ 和 $[\bar{2}11]$ 的 n_5 和 n_3 型位错，其分布特征与 $\epsilon=28.8\%$ 时一致，呈现显著应力集中现象。此时，左侧裂纹尖端存在 n_6 型位错，Burgers 矢量为 $[2\bar{1}\bar{1}]$ 。如图 8b、8c 所示其左右两侧应变分析结果，其对应区域表现为强烈红色拉应力集中，左侧裂纹整体受拉应力主导，表明裂纹尖端位错对裂纹扩展起促进作用。而 $\epsilon=28.8\%$ 时则由于其裂纹尖端与前

方空位间距较大，二者的位错未发生交互作用，故未形成阻碍裂纹扩展的位错缠结结构。图 8a 右侧区域分析表明，预制裂纹右侧仅存在单一的 Burgers 矢量为 $[\bar{2}11]$ 的 n_3 型位错，该位错结构显著促进了裂纹的脆性扩展进程。

为验证上述结论，对 $\epsilon=39.6\%$ 时的裂纹扩展行为展开研究，如图 9a 所示，左侧裂纹已扩展至 $\epsilon=28.8\%$ 时的空位位置，形成裂纹空位连通结构。结合图 9b、9c 应变分

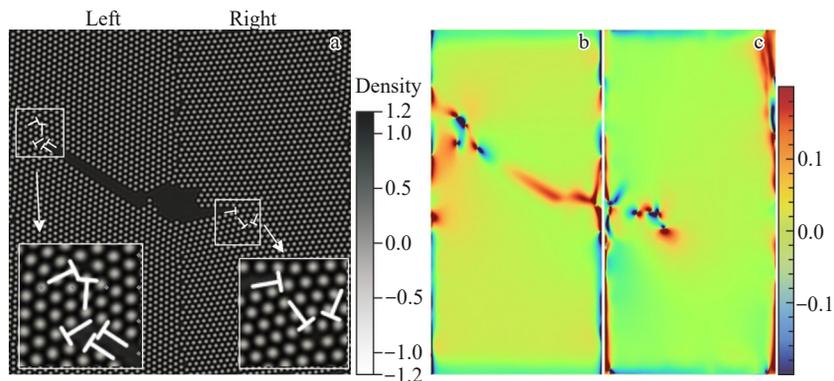


图9 应变量为39.6%时裂纹形貌图与 $\theta_1=2^\circ$ 左侧区域应变分析图和 $\theta_2=24^\circ$ 右侧区域应变分析图

Fig.9 Crack morphology diagram (a), strain analysis diagram of the left part at $\theta_1=2^\circ$ (b), and strain analysis diagram of the right part at $\theta_2=24^\circ$ (c) with strain of 39.6%

析图可知,左侧裂纹区域整体呈现红色拉应力状态,裂纹前端的 n_5 型(Burgers矢量为 $[\bar{1}\bar{1}2]$)、 n_3 型(Burgers矢量为 $[\bar{2}11]$)位错与 n_6 型(Burgers矢量为 $[2\bar{1}\bar{1}]$)、 n_4 型(Burgers矢量为 $[1\bar{2}1]$)位错协同促进裂纹扩展。尽管裂纹前端受到多方向位错作用,但由于位错方向与裂纹扩展方向夹角较大,未形成有效位错锁结构,故未对裂纹扩展产生阻碍作用。如图9a右侧裂纹扩展行为所示,其斜下方产生空位并伴随Burgers矢量为 $[\bar{2}11]$ 和 $[1\bar{2}1]$ 的 n_3 和 n_4 型位错的萌生,这些位错通过影响裂纹尖端的位错运动学行为,阻碍右侧裂纹扩展。在上述综合作用下,该时刻裂纹整体扩展速率低于 $\varepsilon=23.4\%$ 时的水平。

4.2 $\theta_1=2^\circ, \theta_2=18^\circ$ 双晶体系

在 $\theta_1=2^\circ, \theta_2=18^\circ, \Delta\theta=16^\circ$ 双晶体系中,裂纹扩展速率以及体积分数曲线如图10a所示,结合自由能曲线图10b分析可知,自由能上升至最大后保持水平不变,其对应裂纹扩展速率先以极快的线性速率下降,后于 $\varepsilon=3.6\%$ 时降至0附近并微小波动至模拟结束。裂纹体积分数在前半段呈现出与速率曲线相反的变化趋势,于 $\varepsilon=18\%$ 时达到最大,在自由能稳定后伴随小范围内波动直至模拟结束。

对初始条件下,时间步长 $\Delta t=20\ 000$ 时的裂纹形貌进行分析,如图11a所示。其左右两侧应变分析结果如图

11b、11c所示。表明,预制裂纹左右两侧均呈现显著蓝色压应力区域,未观测到拉应力分布,说明此时裂纹尚未启动扩展过程。

4.3 $\theta_1=2^\circ, \theta_2=16^\circ$ 双晶体系

在 $\theta_1=2^\circ, \theta_2=16^\circ, \Delta\theta=14^\circ$ 双晶体系中,结合自由能曲线(图12b)分析可知:当自由能维持最大值且未下降时,裂纹扩展速率先以极快的线性速率降低,于 $\varepsilon=3.6\%$ 时降至最低,随后,随着自由能曲线下降,变形能释放,裂纹扩展速率与体积分数均呈现显著增长。当自由能下降曲线斜率趋于平缓后,裂纹扩展速率进入波动下降阶段(但始终大于0),而体积分数保持稳步增长趋势。当自由能下降至某一极小值并保持微小波动后,裂纹体积分数基本无变化,扩展速率降至零并围绕零值小范围波动,直至裂纹扩展至模拟区域边界。

选取不同极值对应的应变变量进行研究。当 $\varepsilon=3.6\%$ 时,预制裂纹左侧出现红色拉应力集中区域,而右侧裂纹尖端产生空位,如图13a~13c所示。而尖端空位处虽产生位错,但未与裂纹区域发生交互作用,导致裂纹未出现明显的扩展趋势,扩展速率处于较低水平。

当 $\varepsilon=18\%$ 时,裂纹扩展速率达到峰值,预制裂纹左右两侧尖端均存在位错结构,如图14a所示。图14b、14c

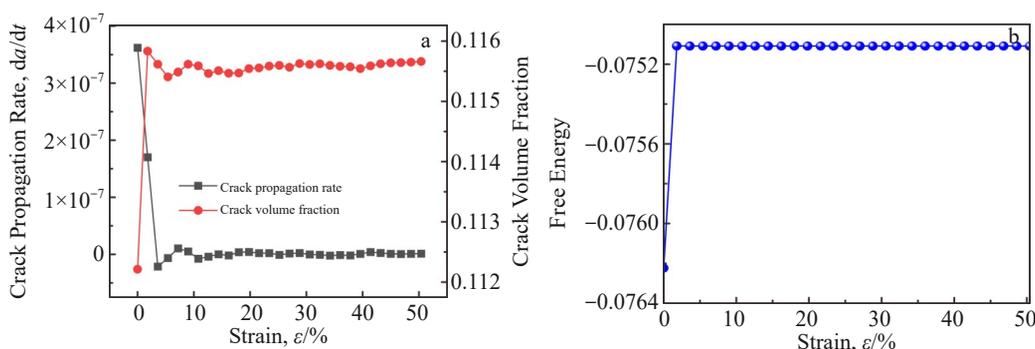


图10 $\theta_1=2^\circ, \theta_2=18^\circ$ 时不同应变变量下裂纹扩展速率、裂纹体积分数曲线与自由能变化曲线

Fig.10 Crack propagation rate and crack volume fraction curves (a) and free energy variation curve (b) under different strains at $\theta_1=2^\circ$ and $\theta_2=18^\circ$

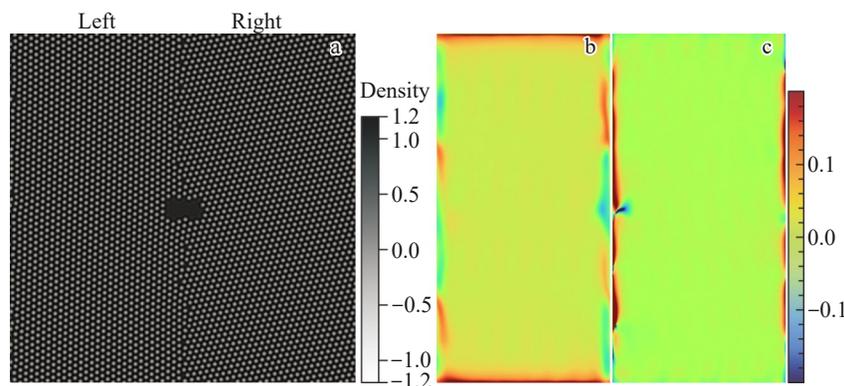


图11 时间步长为20 000时裂纹形貌图与 $\theta_1=2^\circ$ 左侧区域应变分析图和 $\theta_2=18^\circ$ 右侧区域应变分析图

Fig.11 Crack morphology diagram (a), strain analysis diagram of the left part at $\theta_1=2^\circ$ (b), strain analysis diagram of the right part at $\theta_2=18^\circ$ (c) with time step of 20 000

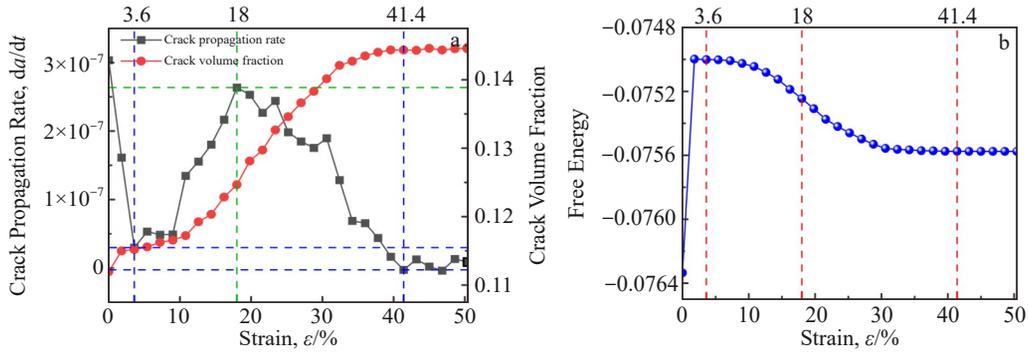


图 12 $\theta_1=2^\circ, \theta_2=16^\circ$ 时不同应变下裂纹扩展速率、裂纹体积分数曲线和自由能变化曲线

Fig.12 Crack propagation rate and crack volume fraction curves (a) and free energy variation curve (b) under different strains at $\theta_1=2^\circ$ and $\theta_2=16^\circ$

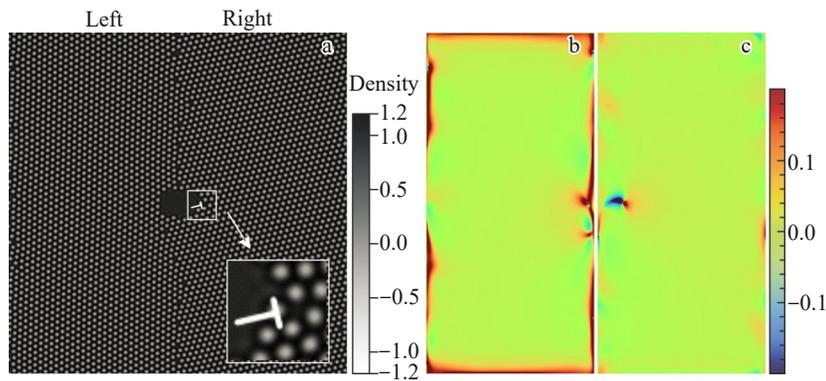


图 13 应变量为 3.6% 时裂纹形貌图与 $\theta_1=2^\circ$ 左侧区域应变分析图和 $\theta_2=16^\circ$ 右侧区域应变分析图

Fig.13 Crack morphology diagram (a), strain analysis diagram of the left part $\theta_1=2^\circ$ (b), and strain analysis diagram of the right part at $\theta_2=16^\circ$ (c) with strain of 3.6%

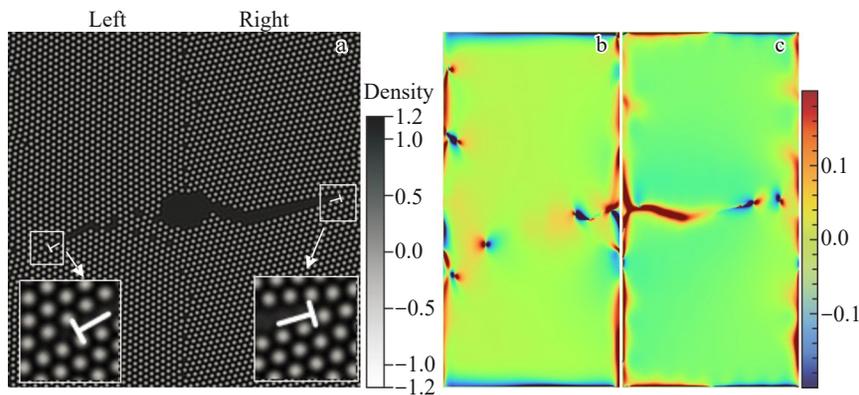


图 14 应变量为 18% 时裂纹形貌图与 $\theta_1=2^\circ$ 左侧区域应变分析图和 $\theta_2=16^\circ$ 右侧区域应变分析图

Fig.14 Crack morphology diagram (a), strain analysis diagram of the left part at $\theta_1=2^\circ$ (b), and strain analysis diagram of the right part at $\theta_2=16^\circ$ (c) with strain of 18%

应变分析表明，右侧裂纹区域呈现红色拉应力集中，其尖端存在 Burgers 矢量为 $[\bar{1}2\bar{1}]$ 的 n_1 型位错，该位错应力作用于裂纹尖端，驱动裂纹萌生扩展趋势。左侧裂纹尖端伴随着 Burgers 矢量为 $[1\bar{2}1]$ 的 n_4 型位错产生，位错运动诱发局部拉应力，从而促进裂纹扩展。

当 $\epsilon=41.4\%$ 时，裂纹已趋近模拟区域边界，如图 15a 所示。由图 15b、15c 的左右侧应变分析可知，裂纹尖端应变呈现复杂位错结构，且裂纹区域以蓝色压应力为主。

多种位错的交互作用形成应力屏障，阻碍裂纹尖端的滑移运动，致使裂纹扩展速率降至最低值。

4.4 实验验证

为验证上述晶体相场模拟所得“取向角与取向角度差会影响裂纹扩展”的结论，我们探究了放电等离子烧结成型铜样品在室温拉伸条件下的裂纹萌生与扩展行为，以下为本次实验的相关参数：烧结温度 500°C 、压力 100 MPa 、保温时间 1 h ，样品经过磨抛、氩离子抛光（电压为 6 kV ，

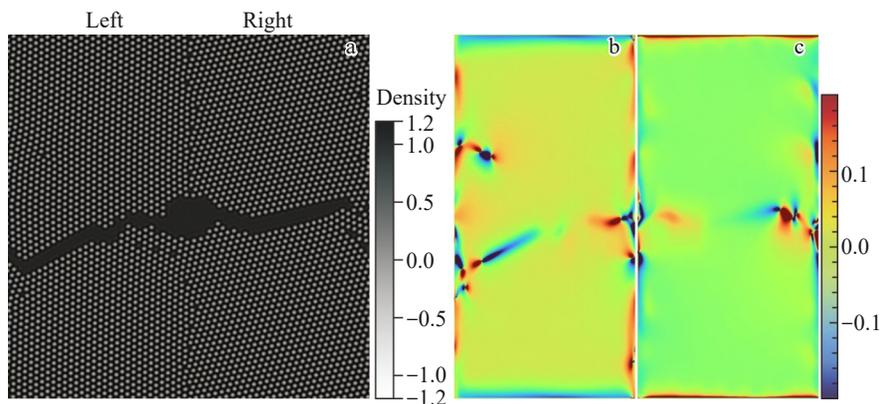


图 15 应变量为 41.4% 时裂纹形貌图与 $\theta_1=2^\circ$ 左侧区域应变分析图和 $\theta_2=16^\circ$ 右侧区域应变分析图

Fig.15 Crack morphology diagram (a), strain analysis diagram of the left part at $\theta_1=2^\circ$ (b), and strain analysis diagram of the right part at $\theta_2=16^\circ$ (c) with strain of 41.4%

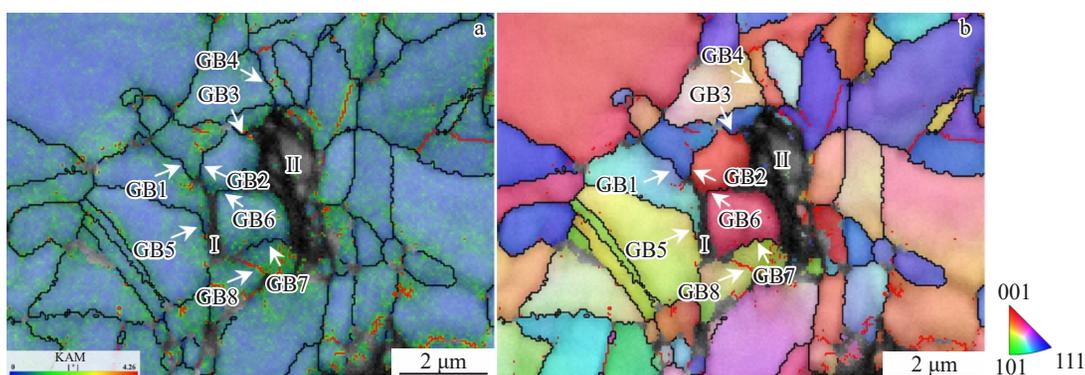


图 16 放电等离子烧结成型铜样品拉伸至 25% 应变 EBSD 表征图

Fig.16 EBSD characterization of copper sample formed by discharge plasma sintering stretched to strain of 25%: (a) BC+GB+KAM diagram and (b) BC+IPF+GB diagram

抛光时间 12 min) 后在室温下拉伸至 25% 应变, 并随后进行 EBSD 表征, 以讨论晶粒取向、位错密度与裂纹扩展行为。

图 16 显示了样品的 EBSD 结果, 其中黑色 I、II 区域, 分别命名为裂纹 I 与裂纹 II。图 16a 中红色线条代表取向角度差在 $2^\circ\sim 15^\circ$ 的小角度晶界, 黑色线条代表取向角度差大于 15° 的大角度晶界, KAM 表征晶粒内相邻测试点间的取向差, 可反映几何必要位错密度分布与晶粒局部应变变化, 定性反映材料塑性变形的均匀性。结果显示, 在应力作用下, 裂纹周边及尖端区域存在位错运动, 晶粒内部等区域仅出现微小变形, 甚至未发生明显变形。为验证模拟所得“取向角与取向角度差会影响裂纹扩展”的结论, 本研究选取裂纹附近的取向角度各不相同的 8 处晶界 (grain boundary, GB) 开展分析, 晶界的角度: $GB1=51^\circ$ 、 $GB2=46^\circ$ 、 $GB3=49^\circ$ 、 $GB4=48^\circ$ 、 $GB5=55^\circ$ 、 $GB6=36^\circ$ 、 $GB7=40^\circ$ 、 $GB8=6^\circ$ 。对于不同取向角的晶界, 对应的裂纹扩展方式存在明显差异: $GB2$ 、 $GB3$ 、 $GB4$ 与裂纹的连接处位错密度较低, 裂纹扩展受阻; $GB1$ 、 $GB5$ 与裂纹的连接区域位错堆积较多, 裂纹更易发生沿晶扩展; $GB6$ 、 $GB7$ 、

$GB8$ 三处晶界同时连接裂纹 I 与裂纹 II, 但扩展趋势各不相同, $GB6$ 左侧位错密度较高, 右侧位错密度较低, 裂纹 I 有沿晶扩展趋势, $GB7$ 周围位错密度整体较低, 两处裂纹在此处难以发生裂纹扩展、 $GB8$ 附近位错较为集中, 裂纹 I 与裂纹 II 易于在此处扩展, 存在连通为一条裂纹的趋势。综上, EBSD 表征结果验证了晶体相场模拟结论: 晶体取向角与取向角度差可调控裂纹扩展行为。

5 结论

1) 在垂直拉应力载荷作用下, 预制裂纹的扩展模式随两侧晶体取向角度的改变呈现出非线性演化特征, 大致可分为五类: 预制裂纹不扩展、预制裂纹单侧产生空位、预制裂纹单侧发生裂纹扩展、预制裂纹一侧产生空位且另一侧发生裂纹扩展、预制裂纹两侧均发生扩展。

2) 在双晶系统中, 裂纹扩展速率与裂纹体积分数曲线呈现三类典型演化模式, 其动力学行为随两侧晶体取向角度的改变表现出显著的非线性响应特征。

3) 在断裂力学框架下, 自由能向变形能的转化是诱发裂纹扩展的核心驱动力: 当自由能释放并转化为裂纹

扩展所需的变形能时,裂纹启裂并持续扩展;而当自由能保持恒定值时,系统缺乏驱动裂纹扩展的能量条件,裂纹扩展过程处于停滞状态。

4)在裂纹尖端区域,单一取向的位错通过其应力场施加拉应力作用,可显著促进裂纹的启裂与扩展进程,此时裂纹扩展行为与位错运动呈现强相关性。而当裂纹尖端存在多组取向角度各异的位错时,不同位错间可能通过交互作用形成位错锁结构,该结构通过产生局部压应力场对裂纹扩展形成力学屏障,进而显著抑制裂纹扩展速率。

参考文献 References

- [1] Buehler M J, Abraham F F, Gao H J. *Nature*[J], 2003, 426(6963): 141
- [2] Pineau A, Benzerga A A, Pardoën T. *Acta Materialia*[J], 2016, 107: 424
- [3] Kou M M, Lian Y J, Wang Y T. *Engineering Fracture Mechanics*[J], 2019, 212: 41
- [4] Shibamura K, Hosoe T, Yamaguchi H *et al. Engineering Fracture Mechanics*[J], 2018, 204: 434
- [5] Li Qingfen(李庆芬), Hu Shenghai(胡胜海), Zhu Shifan(朱世范). *Fracture Mechanics and Its Engineering Applications*(断裂力学及其工程应用)[M]. Harbin: Harbin Engineering University Press, 1998: 4
- [6] Wu Z H, Kou H C, Li J S *et al. Journal of Materials Science & Technology*[J], 2025, 217: 281
- [7] Takahashi K, Higashiyama R, Xue G *et al. Composites Science and Technology*[J], 2024, 258: 110918
- [8] Khalilabad Mahdi Masoumi, Perdahcioğlu Semih, Atzema Eisso *et al. The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*[J], 2023, 127: 2327
- [9] Liu Conghui, Xu Xu, Sun Tianzhu *et al. Acta Materialia*[J], 2023, 253: 118957
- [10] Wu Yin(吴寅), Zhang Hao(张浩), Zhu Yuping(朱玉平) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2025, 54(12): 3097
- [11] Li Yanping, Huang Wei, He Yan *et al. Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2025, 54(1): 62
- [12] Wang Jiamei, Zhu Tianyu, Wu Yule *et al. Corrosion Science*[J], 2025, 242: 112577
- [13] Gong Weijia(公维佳), Chen Shuai(陈帅), Liu Lupeng(刘禄鹏) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2025, 54(1): 109
- [14] Zhu Yankang, Zhou Kangkang, Xu Gangqiang *et al. Engineering Failure Analysis*[J], 2023, 147: 107143
- [15] Li Shu(李澍), Zhao Zhan(赵展), Jiang He(江河) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2025, 54(5): 1261
- [16] Barr C M, Duong T, Bufford D C *et al. Nature*[J], 2023, 620(7974): 552
- [17] Suzuki S, Sakaguchi M, Domen M *et al. Acta Materialia*[J], 2022, 240: 118288
- [18] Zhang Jingang, Liu Xinling, Chen Xing *et al. Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2024, 53(9): 2458
- [19] Li Leyu, Tian Fuzheng, Li Zhen *et al. Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2024, 53(7): 1874
- [20] Shuai Chuan, Liu Wei, Li Huanqing *et al. International Journal of Plasticity*[J], 2023, 170: 103772
- [21] Xu Xiaotao, Song Zhuo, Wang Kaile *et al. Journal of Materials Science & Technology*[J], 2025, 219: 307
- [22] Liang Chaoqun(梁超群), Yao Junping(尧军平), Li Yiran(李怡然) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2024, 53(6): 1709
- [23] Guo Qingwei, Hou Hua, Wang Kaile *et al. npj Computational Materials*[J], 2023, 9: 185
- [24] Wang Furong(王福容), Zhang Yongmei(张永梅), Bai Guoning(柏国宁) *et al. Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2023, 59(6): 812
- [25] Zhao Yuhong, Xing Hui, Zhang Lijun *et al. Acta Metallurgica Sinica(English Letters)*[J], 2023, 36: 1749
- [26] Chen L Q, Zhao Y H. *Progress in Materials Science*[J], 2022, 124: 100868
- [27] Zhao Yuhong, Xin Tongzheng, Song Tang *et al. MRS Bulletin*[J], 2024, 49: 613
- [28] Zhao Yuhong. *npj Computational Materials*[J], 2023, 9: 94
- [29] Song Zhuo, Li Huanqing, Wang Xiaona *et al. Journal of Materials Research and Technology*[J], 2023, 27: 6501
- [30] Li Huanqing, Zhao Yuhong, Song Zhuo *et al. Acta Materialia*[J], 2025, 301: 121573
- [31] Guo Haohan, Lu Rongsheng, Liu Fang *et al. International Journal of Fatigue*[J], 2023, 170: 107526
- [32] Cao Fuhua, Li Hongyi, Chen Yan *et al. International Journal of Plasticity*[J], 2024, 183: 104176
- [33] Gao Shang, Wang Haoxiang, Huang Han *et al. International Journal of Mechanical Sciences*[J], 2023, 247: 108147
- [34] Gomez Hector, Nogueira Xesús. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*[J], 2012, 249–252: 52
- [35] Elder K R, Grant M. *Physical Review E*[J], 2004, 70: 051605
- [36] Stefanovic Peter, Haataja Mikko, Provatas Nikolas. *Physical Review Letters*[J], 2006, 96: 225504
- [37] Hu Shi, Wang Song. *Physica B: Condensed Matter*[J], 2019, 552: 104
- [38] Gao Yingjun(高英俊), Yi Xiaoi(易小爱), Li Yixuan(李依轩) *et al. Guangxi Sciences*(广西科学)[J], 2023, 30(2): 320
- [39] Gao Yingjun(高英俊), Luo Zhirong(罗志荣), Huang Lilin(黄礼琳) *et al. The Chinese Journal of Nonferrous Metals*(中国有色金属学报)[J], 2013, 23(7): 1892
- [40] Hu Shi, Li Jianwei, Liu Quanyi *et al. Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*[J], 2021, 44(10): 2706

- [41] Ma Zhi, Zhou Long, Zhang Xulong *et al.* *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2021, 29(7): 075007
- [42] Ma Wenjing(马文婧), Wang Jin(王 进), Lv Meini(吕美妮) *et al.* *Nonferrous Metals Design(有色金属设计)*[J], 2023, 50(1): 125
- [43] Wang Jin(王 进), Ma Wenjing(马文婧), Lv Meini(吕美妮) *et al.* *Shanxi Metallurgy(山西冶金)*[J], 2022, 45(7): 1
- [44] Wang Jin(王 进), Ma Wenjing(马文婧), Lv Meini(吕美妮) *et al.* *New Technologies and New Products of China(中国新技术新产品)*[J], 2022(15): 24
- [45] Gao Yingjun, Deng Qianqian, Huang Lilin *et al.* *Computational Materials Science*[J], 2017, 130: 64
- [46] Guo Liuyang(郭刘洋), Chen Zheng(陈 铮), Long Jian(龙 建) *et al.* *Acta Physica Sinica(物理学报)*[J], 2015, 64(17): 178102
- [47] Li J, Yi X A, Liu B *et al.* *Acta Materialia*[J], 2024, 281: 120425
- [48] Hu Shi, Fan Jiulin, Liu Quanyi *et al.* *The European Physical Journal B*[J], 2020, 93: 212
- [49] Liu Zheyuan, Gao Yingjun, Deng Qianqian *et al.* *Computational Materials Science*[J], 2020, 179: 109640
- [50] Huang Lilin, Gao Yingjun, Deng Qianqian *et al.* *Computational Materials Science*[J], 2020, 173: 109413
- [51] Peng Dunwei, Zhang Yunpeng, Tian Xiaolin *et al.* *Chinese Physics B*[J], 2023, 32(4): 044601
- [52] Elder K R, Katakowski M, Haataja M *et al.* *Physical Review Letters*[J], 2002, 88(24): 245701
- [53] Swift J, Hohenberg P C. *Physical Review A*[J], 1977, 15(1): 319
- [54] Elder K R, Provatas N, Berry J *et al.* *Physical Review B*[J], 2007, 75(6): 064107
- [55] Cheng M, Warren J A. *Journal of Computational Physics*[J], 2008, 227(12): 6241

Relationship Between Grain Orientation and Crack Propagation Revealed by Phase-Field Crystal Simulation

Zhang Yunfan¹, Li Huanqing¹, Song Zhuo¹, Li Ning¹, Zhao Yuhong^{1,2,3}

(1. MOE Jointly Collaborative Innovation Center for High-Performance Al/Mg Based Materials, Shanxi Key Laboratory of Intelligent Casting and Advanced Forming for New Materials, School of Materials Science and Engineering, North University of China, Taiyuan 030051, China)

(2. Beijing Advanced Innovation Center for Materials Genome Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China)

(3. Liaoning Academy of Materials, Institute of Materials Intelligent Technology, Shenyang 110004, China)

Abstract: The influence of different orientation angles on the microcrack propagation mechanism in nano twin crystal system under dynamic tensile conditions was investigated using the phase-field crystal method. The results show that under the same tensile conditions, the crack propagation mode, crack volume fraction, and crack propagation rate are related to the grain orientation. The difference in the crack propagation mechanism of the same orientation depends on the dislocation activity near the crack tip. A single dislocation located at the crack tip can easily lead to brittle expansion of the crack and accelerate the crack propagation rate. Dislocations in different directions at the crack tip may tangle together, which in turn hinders the crack propagation.

Key words: phase-field crystal method; dynamic stretching; crack propagation; grain orientation

Corresponding author: Zhao Yuhong, Ph. D., Professor, MOE Jointly Collaborative Innovation Center for High-Performance Al/Mg Based Materials, Shanxi Key Laboratory of Intelligent Casting and Advanced Forming for New Materials, School of Materials Science and Engineering, North University of China, Taiyuan 030051, P. R. China, E-mail: zhaoyuhong@nuc.edu.cn