

基于晶体塑性与内聚力模型的 Cu-Ni-Si 合金晶界起裂研究^{*}

STUDY ON CRACK INITIATION AT GRAIN BOUNDARY OF Cu-Ni-Si ALLOY BASED ON CRYSTAL PLASTICITY AND COHESIVE ZONE MODEL

陶 蒙^{**} 于培师^{***} 赵军华

(江南大学 机械工程学院 江苏省食品先进制造装备技术重点实验室, 无锡 214122)

TAO Meng YU PeiShi ZHAO JunHua

(Jiangsu Key Laboratory of Advanced Food Manufacturing Equipment and Technology,
School of Mechanical Engineering, Jiangnan University, Wuxi 214122, China)

摘要 金属材料的宏观失效行为与其微结构的损伤演化密切相关。除了原位加载实验观察以外,利用先进的数值方法对其微结构的演化进行模拟预测,逐渐成为研究金属材料多尺度损伤演化机制的有效工具。目前对于多晶金属晶粒内部的位错运动可以利用晶体塑性有限元法进行准确模拟,但对于位错导致的损伤累积和微裂纹萌生模拟依然存在较大挑战。对于大多数金属多晶材料,位错通常在晶界处塞积导致应力集中,进而在晶界处开裂。因此,实现整个过程的模拟需要构建能够同时描述位错运动与晶界开裂的数值模型。针对此问题,将晶体塑性有限元与内聚力模型相结合,实现了材料微观变形-损伤的统一描述,并建立了描述位错运动与晶界开裂的整体有限元模型。随后,以多晶 Cu-Ni-Si 合金为研究对象,模拟了材料从变形、起裂、裂纹扩展到断裂的微结构演化过程,并揭示了局部沿晶断裂到整体失效的机制,阐明了晶粒取向对初始断裂位置与裂纹扩展的影响。该模型为各类金属材料失效行为的多尺度损伤演化模拟提供了可行的技术基础。

关键词 晶体塑性 内聚力 有限元模拟 多晶金属 变形断裂

中图分类号 TB13 O34

Abstract The macroscopic failure behavior of metal materials is closely related to the damage evolution of microstructure. In addition to in-situ loading experiments, advanced numerical methods are used to simulate and predict the microstructure evolution of metal materials, which has gradually become an effective tool to study the multi-scale damage evolution mechanism of metal materials. At present, the dislocation motion inside polycrystalline metal grains can be simulated by crystal plastic finite element method, but there are still challenges in the simulation of damage accumulation and microcrack initiation caused by dislocation. For most metal polycrystalline materials, dislocations are usually plugged at grain boundaries leading to stress concentration and then cracking at grain boundaries. Therefore, the simulation of the whole process requires the construction of a numerical model that can describe both dislocation motion and grain boundary cracking. In order to solve this problem, combining the crystal plastic finite element model with the cohesive zone model to achieve a uniform description of material microscopic deformation and damage, and a global finite element model to describe dislocation motion and grain boundary cracking was established. Then, taking polycrystalline Cu-Ni-Si alloy as the research object, the microstructure evolution process from deformation, crack initiation, crack propagation to fracture was simulated, and the mechanism from local intergranular fracture to global failure was revealed, and the effect of grain orientation on initial fracture location and crack propagation was clarified. This model provides a feasible methodology for multi-scale damage evolution simulation of the failure behavior of various metal materials.

Key words Crystal plastic; Cohesive zone; Finite element modelling; Polycrystalline metal; Deformation and fracture

Corresponding author: YU PeiShi, E-mail: ypsnuaa@163.com

^{*} 20221128 收到初稿, 20221205 收到修改稿。国家自然科学基金项目 (11972171), 机械结构力学及控制国家重点实验室开放课题 (MCMSE-0422G04) 资助。

^{**} 陶 蒙, 男, 1997 年生, 安徽安庆人, 汉族, 江南大学在读硕士研究生, 主要研究方向为晶体塑性有限元。

^{***} 于培师 (通信作者), 男, 1982 年生, 山东济南人, 汉族, 江南大学副教授, 主要研究方向为机械结构强度与损伤容限设计。

The project supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 11972171), and the Open Project of State Key Laboratory of Mechanics and Control of Mechanical Structures (No. MCMSE-0422G04).

Manuscript received 20221128, in revised form 20221205.

0 引言

工程材料的断裂对其使用安全至关重要,而金属材料在宏观载荷作用下极易产生微裂纹,从而宏观性能并容易引发材料断裂,最终降低其使用寿命。因此,微纳尺度的损伤演化、裂纹萌生和扩展是金属失效的重要机制。虽然实验可以观察到微裂纹的存在^[1-2],但很难准确捕捉微裂纹萌生、扩展和破坏的整个过程^[3-4]。因此,越来越多的研究者试图通过数值模拟来解决上述问题。采用晶体塑性有限元方法^[5-6]可以描述金属材料的力学响应与相应变形行为等,模拟宏观上的边界条件和微观上的材料组织之间的交互作用。对于多晶金属材料,HILL R 等^[7]建立了晶体塑性理论运动学和几何学方程。ASARO R J 等^[8-9]以晶体塑性理论为基础,结合有限元方法对铜的力学行为做了相关研究。LU X C 等^[10-11]在此基础上研究了纳米晶铜的尺寸依赖并建立了梯度纳米晶本构模型,樊冬等^[12]利用多尺度晶体塑性有限元对材料拉-压不对称性做了相关研究。但晶体塑性理论缺乏对晶界的描述。内聚力模型则是一种表现界面的模型,可以将界面的分离过程用界面两侧的牵引力与相对位移的函数来表示^[13-14]。基于内聚力模型可以模拟一些材料在界面处的动态断裂现象^[15]。

在介观尺度模拟时,金属裂纹可以看作沿晶界萌生扩展^[16-17]。而微裂纹在晶界上萌生的原因有两个:首先是由于晶体的各向异性,晶界局部会产生高的应力集中足以超过晶界黏合力;二是由于塑性变形的不协调性,变形过程中晶界处会产生塞积位错,最终发生微裂纹萌生^[18]。针对这些机制,研究多晶金属断裂行为需要构建一个能够反映晶粒内部塑性变形并且描述晶界处位错累积对晶界处的应力分布影响的模型。

本研究将在晶体塑性有限元方法的基础上,在多晶模型晶界处构建内聚力单元,描述晶界处由于应力集中与位错塞积导致的断裂现象。晶体塑性模型根据晶粒取向和滑移系开动情况来描述每个晶粒内部由位错运动导致的塑性变形现象,而内聚力模型用于模拟晶界上的微裂纹萌生与扩展。为进一步研究该方法,对 Cu-Ni-Si 合金进行单轴拉伸模拟,探究其宏观力学行为与晶间的裂纹萌生扩展,并探讨材料微结构对 Cu-Ni-Si 合金脆性断裂的影响。

1 晶体塑性与内聚力本构模型

1.1 晶体塑性本构模型

晶体的变形是由晶格畸变引发的弹性变形和由位错滑移、孪生等导致的塑性变形组成的。在小变形框架下,弹性应变张量 $\boldsymbol{\varepsilon}^e$ 与塑性应变张量 $\boldsymbol{\varepsilon}^p$ 满足:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^e + \boldsymbol{\varepsilon}^p \quad (1)$$

材料弹性应变由胡克定律求出:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^e = \mathbf{C}^{-1} : \boldsymbol{\sigma}^g \quad (2)$$

式中, $\mathbf{C}$ 为 4 阶弹性张量; $\boldsymbol{\sigma}^g$ 是作用在晶粒上的应力张量。塑性应变则与晶粒内部滑移系运动有关。根据 Schmid 定律,滑移系的分切应力大于其临界分切应力时才会开始运动。晶粒内部的滑移面在相应滑移方向上的分切应力为

$$\boldsymbol{\tau}^\alpha = \boldsymbol{\sigma}^g : \boldsymbol{p}^\alpha \quad (3)$$

式中, $\boldsymbol{\tau}^\alpha$ 为第 α 个滑移系的分切应力; $\boldsymbol{p}^\alpha$ 为第 α 个滑移系的方向因子张量。 $\boldsymbol{p}^\alpha$ 可以表示为

$$\boldsymbol{p}^\alpha = \frac{1}{2}(\boldsymbol{m}^\alpha \otimes \boldsymbol{n}^\alpha + \boldsymbol{n}^\alpha \otimes \boldsymbol{m}^\alpha) \quad (4)$$

式中, $\boldsymbol{m}^\alpha$ 为第 α 个滑移系滑移方向的单位矢量; $\boldsymbol{n}^\alpha$ 为滑移面法向矢量。单晶体塑性变形是所有开动滑移系运动的综合结果,可表示为

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p = \sum_{\alpha=1}^N \boldsymbol{p}^\alpha \dot{\gamma}^\alpha \quad (5)$$

式中, $\dot{\gamma}^\alpha$ 为 α 滑移系的滑移率; N 为开动的滑移系总数。根据 Schmid 定律,滑移率 $\dot{\gamma}^\alpha$ 可表示为

$$\dot{\gamma}^\alpha = \dot{\alpha}^\alpha f^\alpha \left(\frac{\boldsymbol{\tau}^\alpha}{g^\alpha} \right) \quad (6)$$

式中, $\dot{\alpha}^\alpha$ 为滑移系统上的参考应变速率; g^α 为描述该系统当前强度的变量; f^α 描述应变速率对应力的依赖。而单晶的硬化情况影响单晶系统当前强度,应变硬化的特征可表示为

$$\dot{g}^\alpha = \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^\beta \quad (7)$$

式中, $h_{\alpha\beta}$ 为滑移潜硬化模量, $h_{\alpha\beta} = qh(\gamma) (\alpha \neq \beta)$, q 为常数; $\dot{\gamma}^\beta$ 为第 β 个滑移系的滑移率。 $h_{\alpha\alpha}$ 为自硬化模量,可以简单表示为

$$h_{\alpha\alpha} = h(\gamma) = h_0 \sec h^2 \left| \frac{h_0 \gamma}{\tau_s - \tau_0} \right| \quad (8)$$

式中, h_0 为初始硬化模量; τ_0 为屈服应力,等于 g^α 的初始值; τ_s 为第 1 阶段应力(塑性流动变形开始时的应力); γ 为所有滑移系统上的累积剪应变,可表示为

$$\gamma = \sum_{\alpha} \int_0^t |\dot{\gamma}^{\alpha}| dt \quad (9)$$

1.2 内聚力本构模型

晶界处的开裂过程通过引入内聚力模型进行模拟。内聚区将两侧的晶粒连接在一起,晶粒间的内聚力通过两个晶粒表面之间相对位移的函数来表示。本模型中采用双线性牵引-分离响应关系来表示该函数。这种本构是对产生新裂纹的复杂微观过程的一种唯象表示,界面分离牵引力 T 随其上、下表面的相对位移 δ 而变化,其分量间的关系可以通过势函数 φ 给出:

$$\begin{cases} T_n = \frac{\partial \varphi}{\partial \delta_n} \\ T_t = \frac{\partial \varphi}{\partial \delta_t} \\ T_s = \frac{\partial \varphi}{\partial \delta_s} \end{cases} \quad (10)$$

式中,下标 n 、 t 和 s 分别为内聚力界面的法向与两个正交的切向方向。势函数 φ 采用线性损伤模式的牵引力-分离关系。如图 1 所示, T_1 为界面初始损伤临界牵引力, δ_m^0 为对应的等效分离位移; G_c 为断裂韧性, δ_m^0 可表示为

$$\delta_m^0 = \sqrt{\delta_n^2 + \delta_t^2 + \delta_s^2} \quad (11)$$

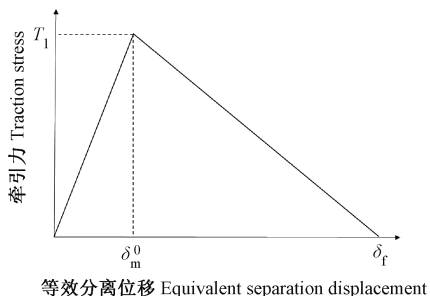


图 1 牵引力-分离关系图

Fig. 1 Relation diagram of traction-separation

2 有限元模拟与结果分析

2.1 模型构建与参数验证

借助 Python 语言,利用 Voronoi 方法编写脚本生成晶粒大小相对均匀的二维多晶微结构。研究表明^[19-20],Voronoi 多晶晶粒个数超过 50 时整体呈现宏观各向同性响应,对晶粒个数不再具有依赖性。因此,在脚本中设置参数并构建约 70 个晶粒的多晶模型,并在相邻晶粒间插入了内聚力单元。对所有晶粒借助 Python 语言脚本赋予随机取向(晶粒坐标系整体绕 y 轴逆时针方向旋转,转角即为取向角,记为 α)。不考虑晶界类型将相同的内聚区模型用于所有晶界,对沿晶开裂过程进行了数值模拟。

为了防止在施加载荷过程中产生刚性位移,需要

给模型添加约束。在模型左下角处建立坐标系并将这个点设为原点 O ,沿着 X 、 Y 两个方向的自由度设为 U_1 、 U_2 ,在模型的 YOZ 面添加约束 $U_1 = 0$,在 XOZ 面添加约束 $U_2 = 0$ 。在右边界处施加 10% 的应变载荷,整体情况如图 2 所示。

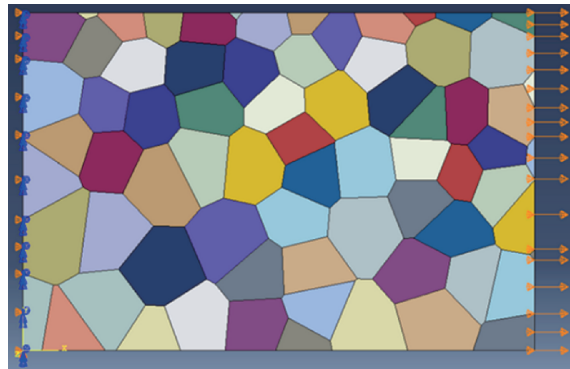


图 2 Voronoi 多晶模型

Fig. 2 Voronoi polycrystalline model

根据文献[21]确定图 1 内聚力模型相关的模拟参数,取最大开口位移 δ_m 为 8×10^{-5} mm,界面初始损伤临界分离应力为 816 MPa。式(8)中对应的 Cu-Ni-Si 合金应变硬化阶段相关参数在参照 Cu 单晶的基础上多次模拟并与相关实验拟合,最终确定参数如表 1 所示。对模型进行单轴拉伸,将结果与实验结果^[22]加以比较,如图 3 所示,模拟输出的整体应力-应变曲线能很好地吻合实验曲线。

表 1 相关模拟参数

Tab. 1 Related simulation parameters

h_0 /MPa	τ_0 /MPa	τ_s /MPa	T_1 /MPa	δ_m /mm
141.5	189.5	108.8	816	0.00008

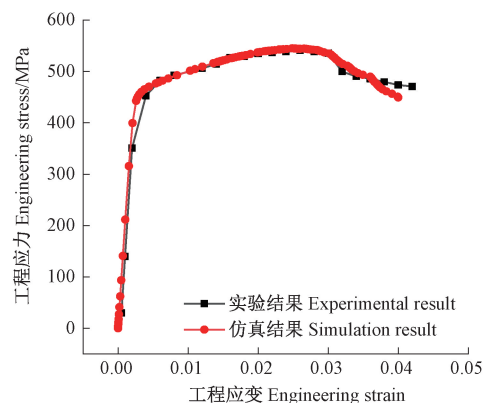


图 3 应力-应变曲线

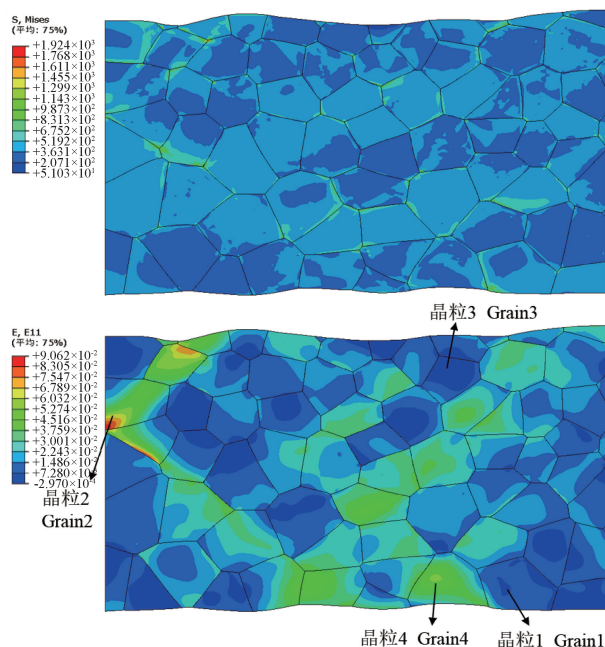
Fig. 3 Curve of stress-strain

2.2 模拟结果与分析

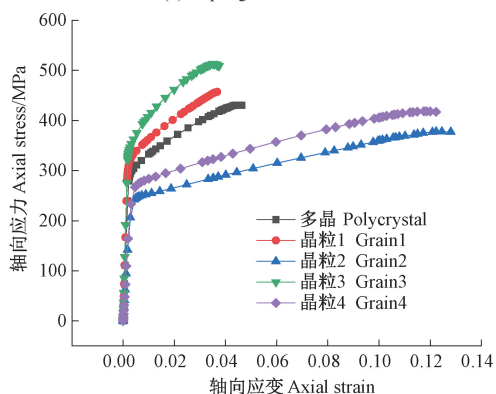
2.2.1 塑性变形与晶粒旋转分析

取拉伸过程中的同一时刻的应力-应变云图对比如图 4 所示。由图 4 可知,多晶体的应力-应变总体上

呈现不均匀性,这种不均匀性在晶粒内部与晶粒之间都会体现。晶界处有明显的应力集中,主要是因为各晶粒的热力学特性不相匹配以及晶粒内部的不平衡约束,而相应的失效情况则很有可能是从多晶交汇处开始。



(a) 应力-应变云图
(a) Nephogram of stress-strain



(b) 不同晶粒轴向应力-应变曲线
(b) Axial stress-strain curve of different grains

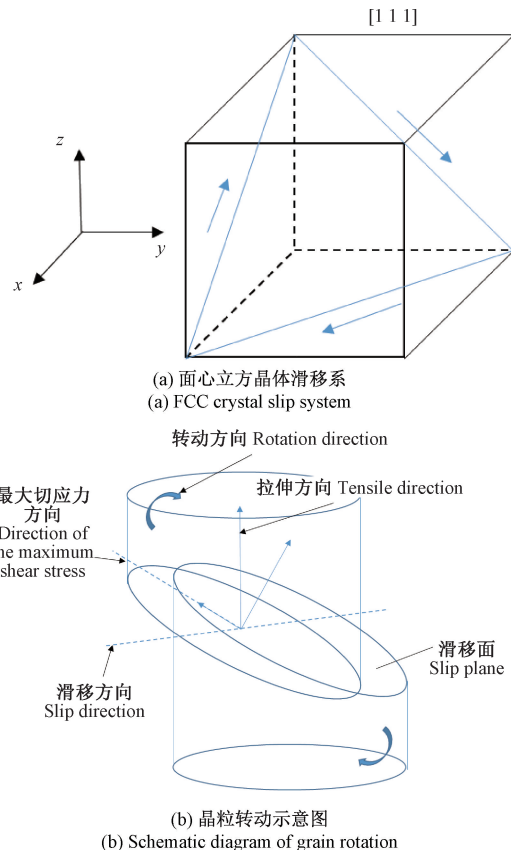
图 4 不同晶粒力学行为

Fig. 4 Mechanical behavior of different grains

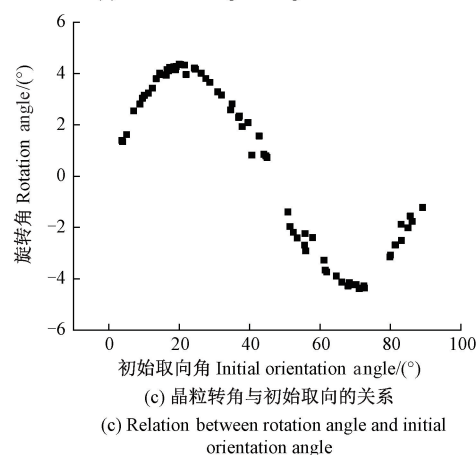
晶粒的初始取向也会影响每个晶粒在拉伸过程中的力学行为,以图 4(a)中的 4 个有明显应变差别的不同取向晶粒为代表,对比它们与多晶整体的单轴拉伸应力-应变曲线[图 4(b)]。其中,晶粒 2 与 4 是高应变集中晶粒,而 1 与 3 是低应变集中晶粒。晶粒 2 与 4 的应变硬化能力低于整体,而 1 与 3 则高于整体。宏观轴向应变为 5% 时,晶粒 1 与 3 的应力均大于宏观应力,而应变低于宏观应变,处于较硬取向;晶粒 2 与 4 则处于软取向。

根据相关资料^[23-25],在晶粒较小的多晶中,单晶体滑移时除滑移面的移动外,还伴随着晶面的转动。

单轴拉伸时,每个晶粒的转动会促使滑移面趋于转到与力轴平行的方向。而晶粒的随机初始取向会影响力轴与滑移系的夹角,从而导致晶面转动情况的不同。面心立方晶体 $[111]$ 面上的 3 个滑移系与运动过程中晶粒旋转分析如图 5(a)、图 5(b)所示。



(b) 晶粒转动示意图
(b) Schematic diagram of grain rotation



(c) 晶粒转角与初始取向的关系

(c) Relation between rotation angle and initial orientation angle

图 5 晶粒转动

Fig. 5 Grain rotation

多晶模型在沿 x 轴单轴拉伸过程中,晶粒会发生旋转,若两个滑移系的转动方向相反,在该晶粒中就会产生抵消,使晶粒转动量减小,反之则增大。以 $[111]$ 面上的滑移系为例,在模拟结果中提取拉伸变形过程中滑移系的局部坐标与整体坐标夹角的 3 个余弦值,计算出不同初始取向拉伸后(断裂前)旋转的角度。在应变相同的情况下,晶体旋转程度与晶体的

初始取向有关,取向不同会使每个滑移系分解剪应力不同。

对于滑移面 $[1\ 1\ 1]$,由于晶粒初始取向角为 α ,每个晶粒中该滑移面法向坐标在整体坐标下会从 $(1, 1, 1)$ 变成 $(\cos \alpha - \sin \alpha, 1, \cos \alpha + \sin \alpha)$ 。旋转后该滑移面的剪切应力 $\tau = \sigma \cos \beta \sin \beta$,其中 β 为旋转后的力轴方向 $(1, 0, 0)$ 与滑移面的夹角。根据向量关系可求出:

$$\cos \beta = \frac{|\cos \alpha - \sin \alpha|}{\sqrt{3}}$$

因此,滑移面的剪切应力大小与初始取向角 α 存在一定关系,而各个滑移系的切应力大小又会影响晶粒的旋转。计算得出的转角变化量与初始转角关系如图5(c)所示。

2.2.2 裂纹萌生扩展与多晶整体失效分析

随着应变不断增大,整体拉伸变形到一定程度时部分晶界会出现裂纹萌生,绝大多数的初始开裂位置在三斜晶界处。由于每次模拟时多晶模型晶粒取向是随机分布的,所以模拟结果中整体的断裂位置分布会有所不同,萌生的初始裂纹个数也会有所差异。

在多晶模型产生塑性变形的基础上继续增大应变,局部晶界处会出现裂纹萌生。该晶界处的界面刚度退化率从0开始上升,此时材料整体所受的拉伸应力为524.5 MPa,对应的拉伸应变为0.025。由图6可以看出,裂纹萌生于三晶交界处,萌生位置处于高应力区,局部Mises等效应力达到1400 MPa左右,符合裂纹萌生发生在应力集中处的规律。尽管局部损伤导致裂纹已萌生,但根据图3,此时多晶整体仍处于应变硬化阶段。

由图7中的界面刚度退化率对该处的裂纹萌生情况进行进一步观察,裂纹萌生从晶界1靠近三晶界交会处的位置产生,并在晶界1处先扩展。随着应变增加,裂纹从萌生位置沿着图中的晶界1与晶界2方向迅速扩展,而在晶界3方向扩展较慢,如图7所示。其原因是晶界3与拉伸方向的夹角接近 90° ,不利于裂纹的进一步扩展。

微观上,在晶界和晶界的三点连接处可以观察到应力集中,这与晶粒取向从一个晶粒变化到另一个晶粒时力学行为的不均匀性有关。三晶界处的裂纹扩展应力云图如图8所示。塑性变形时三晶粒内部应力分布不均且晶界处有应力集中,由图8(a)可以看出,晶界3的应力集中明显,这可能与其上、下两个晶粒初始取向有关。初始裂纹在三晶界连接处萌生并沿晶界扩展,裂纹萌生发生处应力集中明显,如图8(c)所示。在进一步加载下,第一个形成裂纹的晶界会继续扩展,并会沿着三晶界的交点处使其余两条晶界中更容易扩

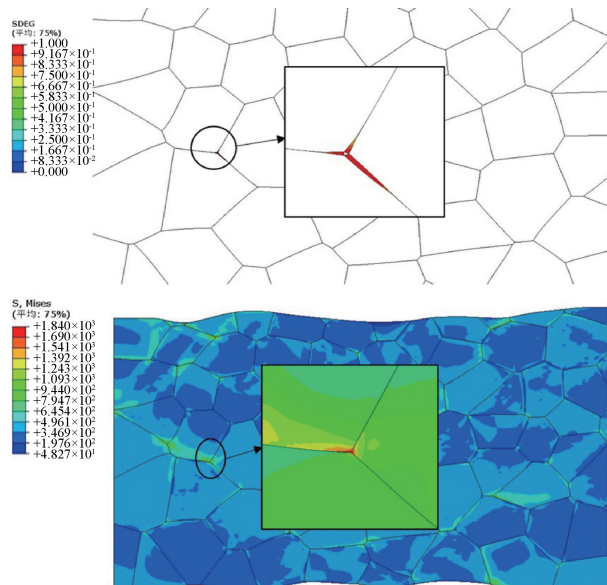


图6 裂纹萌生状态界面刚度与应力云图

Fig. 6 Surface stiffness and stress nephogram of crack initiation state

展的裂纹出现扩展,应力集中位置随着裂纹的扩展而不断改变。图7显示晶界2比晶界3更容易发生裂纹扩展。随后三晶界处的多个微裂纹结合在一起,形成一个更大的裂纹。随着整体应变继续增大,裂纹向晶界1上方与晶界2下方两个方向扩展[图8(d)]。在进一步加载下,只有一侧裂纹继续扩展,而另一侧裂纹停止扩展,这是因为该侧的偏差角大于另一侧。裂纹到达一个边界后,在进一步加载的作用下,裂纹持续扩展直至失效[图8(f)]。整体而言,裂纹沿着大致垂直于加载方向的晶界扩展,垂直于加载方向的晶界比其他晶界的开度更大。因此,损伤更容易在这些晶界处发展,并促进裂纹扩展。

在该三晶界处局部失效的同时,裂纹也会在其他晶界处萌生。失效处晶粒的晶界更容易出现裂纹萌生现象并会最终导致多晶整体断裂失效,最终结果如图9所示。

2.2.3 晶粒取向的影响

初始取向不同的多晶整体在拉伸过程中的裂纹萌生位置较为随机,如图10(a)所示。随机选取了5种初始晶粒取向,图10(b)为相应的应力-应变曲线图,从图10(b)可以看出,多晶整体的应力-应变曲线差别较小。初步得出的结论是:多晶不同的初始取向虽然对其整体力学行为影响较小,但对局部力学行为如初始裂纹萌生的位置影响较大。对模拟中可能影响裂纹萌生位置的因素进行进一步探究。

多晶金属材料的晶界裂纹萌生由晶界能控制^[26-27],在晶界能较大处易发生沿晶断裂。晶界一般可以根据两晶粒的位向差 θ 是否大于 10° 划分为大角晶界与小角晶界。大角晶界的晶界能通常高于小角晶界。晶粒

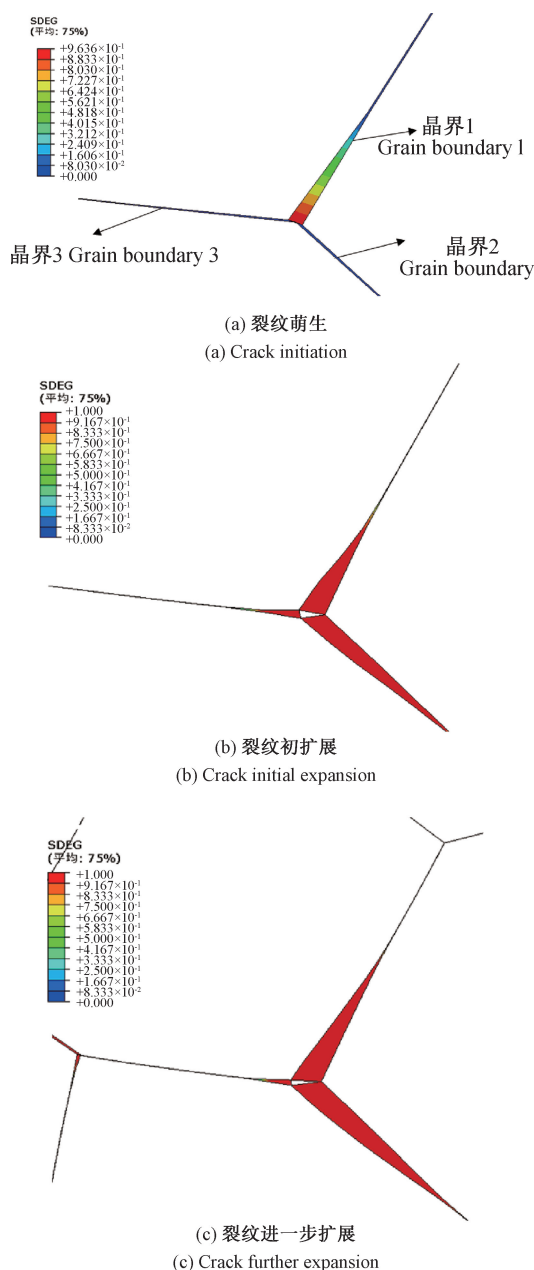


图 7 三晶界裂纹扩展处界面刚度退化率

Fig. 7 Degradation rate of interface stiffness at three grain boundaries of crack growth

的位向差 θ 可以用两晶粒初始取向角 α_1 与 α_2 之差的绝对值表示。研究表明,对于面心立方晶体的晶界,晶界能可视作位向差的函数,且位向差在 30° 与 80° 左右时有两个能量峰值,如图 11 中折线所示。对多晶整体进行 20 次随机取向建模,提取模拟结果中共 32 个裂纹萌生位置附近的晶粒位向差。若三晶粒两处晶界同时出现裂纹萌生就将位向差分别记为 θ_1 与 θ_2 , 单处则记为 θ_1 , 在图 11 中用散点表示每一次裂纹萌生位置附近晶粒的位向差。由图 11 可知,断裂处晶粒间位向差均大于 15° ,为大角晶界。位向差分布在 $25^\circ \sim 40^\circ$ 与 $65^\circ \sim 85^\circ$ 两个区间内,这与折线图中的晶界能峰值区间相对应。其中, $65^\circ \sim 85^\circ$ 区间内的点较少的原因是

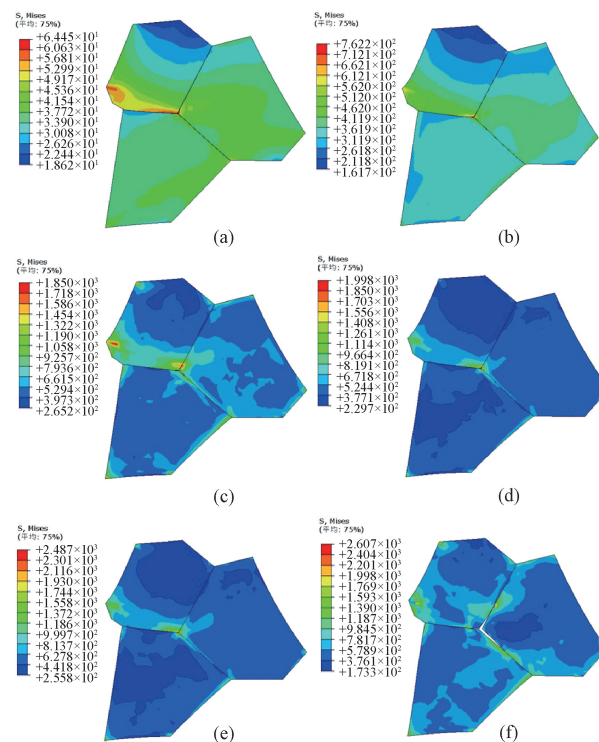


图 8 裂纹扩展应力云图

Fig. 8 Stress nephogram of crack growth

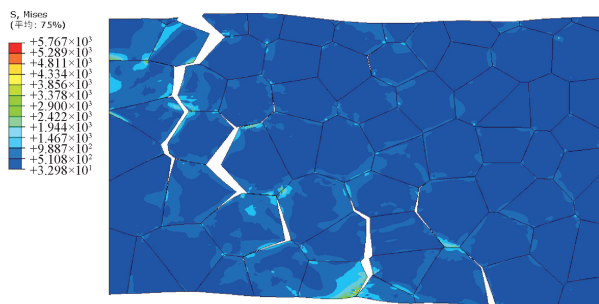


图 9 多晶整体失效力云图

Fig. 9 Stress nephogram of polycrystalline failure

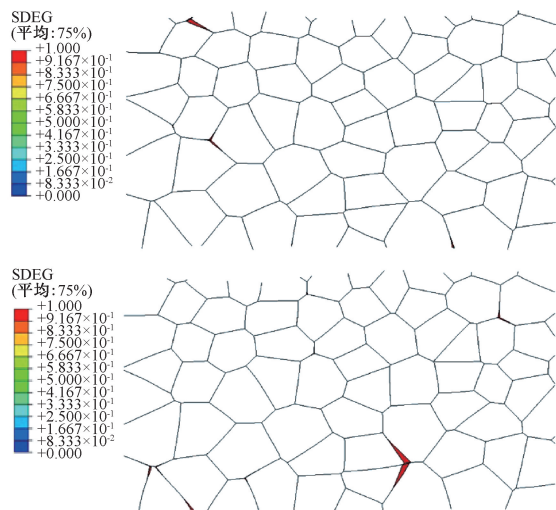
晶粒初始取向角 α 的范围是 $0 \sim 90^\circ$, 随机分布下位向差在该区间的晶粒个数相对较少。裂纹萌生位置的位向差分布区域与晶界能曲线峰值的位向差区域高度重合,结果符合能量理论。

3 结论

基于晶体塑性有限元模型结合内聚力单元,研究 Cu-Ni-Si 合金的单轴拉伸断裂行为,得到主要结论如下:

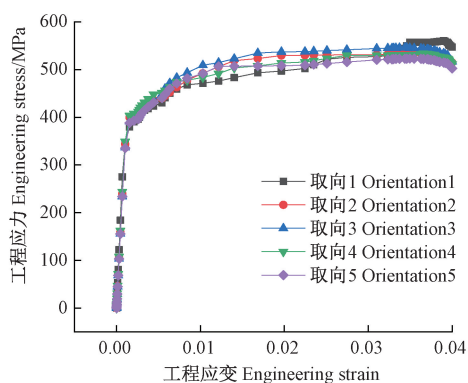
1) 采用以位错滑移为基础、率相关硬化准则为核心的晶体塑性模型结合双线性牵引-分离内聚力模型对多晶模型进行单轴拉伸的有限元模拟,验证了 Cu-Ni-Si 合金单轴拉伸应力-应变响应与单轴拉伸中可能存在的晶粒旋转情况。

2) Cu-Ni-Si 合金出现沿晶断裂现象时,裂纹大部分会在三晶界应力集中处萌生,随应变的持续增加沿着晶



(a) 晶粒取向对裂纹萌生位置的影响

(a) Effect of grain orientation on crack initiation location



(b) 不同晶粒取向下载体应力-应变曲线

(b) Global stress-strain curve with different grain orientations

图 10 不同晶粒取向的影响

Fig. 10 Effect of different grain orientations

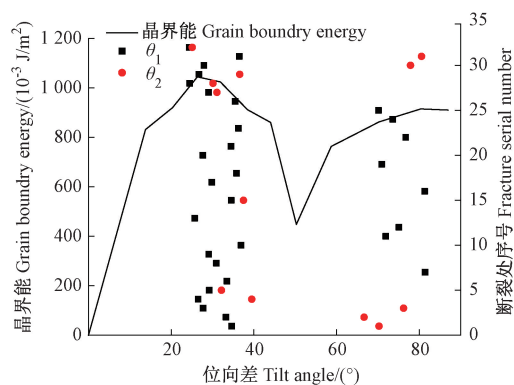


图 11 晶粒取向影响断裂位置

Fig. 11 Fracture location affected by grain orientations

界扩展并最终导致整体失效。晶粒取向会影响裂纹的萌生与扩展路径,但对于宏观的拉伸应力-应变行为影响不明显。该方法能有效模拟多晶金属沿晶断裂现象。

3) 晶界裂纹扩展会受晶界与拉伸方向夹角的影响,较小的夹角会抑制裂纹扩展。同时晶界附近晶粒的初始取向会影响裂纹的萌生与扩展,晶粒位向差在 30° 与 80° 左右时晶界更容易发生断裂。晶粒之间的

晶界是大角晶界时更容易发生裂纹萌生和沿晶界扩展。

参考文献 (References)

- [1] NASIBULLINA O A, TYUSENKOV A S. Electronic and microscopic researches of dislocation structure of metal near crack top [J]. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 2019, 537(2): 022023.
- [2] ZHAO N L, WANG W Z, LIU Y Z. Intergranular mechanical behavior in a blade groove-like component by crystal plasticity model with cohesive zone model [J]. Engineering Fracture Mechanics, 2018, 201: 196-213.
- [3] HAJSHIRMOHAMMADI B, KHONSARI M M. Thermographic evaluation of metal crack propagation during cyclic loading [J]. Theoretical and Applied Fracture Mechanics, 2020, 105: 102385.
- [4] 熊 骏, 李振环, 朱亚新, 等. 基于微结构动态演化机制的单晶镍基高温合金晶体塑性本构及其有限元模拟 [J]. 力学学报, 2017, 49(4): 763-781.
XIONG Jun, LI ZhenHuan, ZHU YaXin, et al. Microstructure evolution mechanism crystal-plasticity constitutive model for nickel-based superalloy and its finite element simulation [J]. Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics, 2017, 49(4): 763-781 (In Chinese).
- [5] 章海明, 徐 帅, 李 倩, 等. 晶体塑性理论及模拟研究进展 [J]. 塑性工程学报, 2020, 27(5): 12-32.
ZHANG HaiMing, XU Shuai, LI Qian, et al. Progress of crystal plasticity theory and simulations [J]. Journal of Plasticity Engineering, 2020, 27(5): 12-32 (In Chinese).
- [6] MOHAMMADREZA Y, GEORGE Z V, VEERA S. Crystal plasticity simulation of magnesium and its alloys: a review of recent advances [J]. Crystals, 2021, 11(4): 435.
- [7] HILL R, RICE J R. Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain [J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1972, 20(6): 401-413.
- [8] ASARO R J, NEEDLEMAN A. Overview No. 42 Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals [J]. Acta Metallurgica, 1985, 33(6): 923-953.
- [9] TAYLOR G I, ELAM C F. The plastic extension and fracture of aluminium crystals [J]. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character, 1925, 108(745): 28-51.
- [10] LU X C, ZHANG X, SHI M X, et al. Dislocation mechanism based size-dependent crystal plasticity modeling and simulation of gradient nano-grained copper [J]. International Journal of Plasticity, 2019, 113: 52-73.
- [11] ZHAO J F, KAN Q H, ZHOU L C, et al. Deformation mechanisms based constitutive modelling and strength-ductility mapping of gradient nano-grained materials [J]. Materials Science and Engineering: A, 2019, 742: 400-408.
- [12] 樊 冬, 余 丰, 李淑欣. 基于多尺度晶体塑性有限元的 GCr15 轴承钢拉-压不对称性研究 [J]. 机械强度, 2021, 43(1): 107-113.
FAN Dong, YU Feng, LI ShuXin. Investigation on tension-compression asymmetry of GCr15 bearing steel by multi-scale crystal

- plasticity finite element method [J]. *Journal of Mechanical Strength*, 2021, 43(1): 107-113 (In Chinese).
- [13] CAMACHO G T, ORTIZ M. Computational modelling of impact damage in brittle materials [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 1996, 33(20/21/22): 2899-2938.
- [14] NEEDLEMAN A. An analysis of decohesion along an imperfect interface [J]. *International Journal of Fracture*, 1990, 42(1): 21-40.
- [15] YU P S, RU C Q. Strain rate effects on dynamic fracture of pipeline steels: finite element simulation [J]. *International Journal of Pressure Vessels and Piping*, 2015, 126: 1-7.
- [16] MÉRIC L, CAILLETAUD G, GASPÉRINI M. F. E. calculations of copper bicrystal specimens submitted to tension-compression tests [J]. *Acta Metallurgica et Materialia*, 1994, 42(3): 921-935.
- [17] RITTNER J, SEIDMAN D N. $\langle 110 \rangle$ symmetric tilt grain-boundary structures in fcc metals with low stacking-fault energies [J]. *Physical Review B. Condensed Matter*, 1996, 54(10): 6999-7015.
- [18] ZHANG Z F, WANG Z G. Comparison of fatigue cracking possibility along large and low-angle grain boundaries [J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2000, 284(1/2): 285-291.
- [19] PEIRCE D, ASARO R J, NEEDLEMAN A. An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals [J]. *Acta Metallurgica*, 1982, 30(6): 1087-1119.
- [20] RICE J R. Inelastic constitutive relations for solids: an internal-variable theory and its application to metal plasticity [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1971, 19(6): 433-455.
- [21] BERVEILLER M, ZAOUI A. An extension of the self-consistent scheme to plastically-flowing polycrystals [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1978, 26(5/6): 325-344.
- [22] SUN Z D, BENABOU L, XUE H Q. Numerical modeling and simulation of intergranular fracture due to dynamic embrittlement for a CuNiSi alloy [J]. *Mechanics Research Communications*, 2016, 75: 81-88.
- [23] LI Y J, HSU C W, TING Y H, et al. Deformation induced columnar grain rotation in nanotwinned metals [J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2020, 797: 140045.
- [24] XIAO Y, LAN X Y, LU Q, et al. In-situ evidence for rotation of Si particles relative to grains in tensile deformed Al-Si alloys [J]. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China (English Edition)*, 2023, 33(6): 1655-1664.
- [25] CHANDRA S, SAMAL M K, KUMAR N N, et al. Study of variation of activation energy barrier with grain boundary misorientations associated with dislocation nucleation from different grain boundaries in Ni [J]. *Philosophical Magazine*, 2022, 102(5): 413-439.
- [26] SAEED P S, MOHAMMAD S, SAEED T M, et al. An atomistic perspective into the fracture behaviour of Fe-bicrystal [J]. *Molecular Simulation*, 2020, 46(13): 966-974.
- [27] CHANDRA N, DANG P. Atomistic simulation of grain boundary sliding and migration [J]. *Journal of Materials Science*, 1999, 34(4): 655-666.