DOI: 10.16579/j.issn.1001.9669.2024.05.022

拉伸情形下孔洞缺陷对单晶镁裂纹扩展影响的分子动力学模拟*

MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF THE EFFECT OF VOID DEFECTS ON CRACK GROWTH OF SINGLE CRYSTAL MAGNESIUM UNDER TENSILE CONDITIONS

柯昌锐** 蓝永庭*** 解远航 丁浩川 华振虎

(广西科技大学 机械与汽车工程学院, 柳州 545616)

KE ChangRui LAN YongTing XIE YuanHang DING HaoChuan HUA ZhenHu

(*School of Mechanical and Automotive Engineering, Guangxi University of Science and Technology, Liuzhou* 545616, *China*)

摘要 采用分子动力学方法对预设裂纹和孔洞的单晶镁模型进行了沿*C*轴拉伸加载的数值模拟,研究在镁晶体中不同位置的孔洞缺陷对裂纹扩展的影响。模拟结果分析表明,在相同特征尺寸下,孔洞会影响单晶镁模型的屈服强度,不同孔洞位置的模型屈服强度不同,其中当孔洞位于裂纹[10$\bar{1}$0]方向时,模型的屈服强度最低。孔洞能在一定程度上缓解裂纹在该方向上的应力集中,影响裂纹的孪晶扩展速率。裂纹处靠近孔洞侧的孪晶生长速度相对较慢,其中孔洞位于裂纹[10$\bar{1}$0]方向时,孪晶生长速度最慢。孔洞对裂纹的扩展方向影响较小,一般情况下裂纹与孔洞合并后沿拉伸方向扩展,整体呈现比较对称的锥面扩展,但孔洞位于裂纹[0001]方向时,裂纹并未与孔洞出现明显的联合现象。

关键词 单晶镁 孔洞 裂纹 孪晶 分子动力学

中图分类号 O346.1 TG146.22

Abstract The numerical simulation along the *C*-axis stretching process of a single crystal magnesium model with preset cracks and void defects was carried out by molecular dynamics method, and the effect of void defects at different positions on crack propagation in single crystal magnesium was studied. The simulation results show that under the same characteristic size, the yield strength of the single crystal magnesium model is affected by the voids at different location. When the voids are located in the crack [10$\bar{1}$0] direction, the yield strength of the model is the lowest. The void can alleviate the stress concentration of the crack in the void direction, and affect the twins growth rate of the crack. The twin growth rate near the void of the crack is relative slowly, and the twin growth rate is the slowest when the void is located at [10$\bar{1}$0] direction. The voids have a little influence on the propagation direction of the crack. Generally, the crack extends in the tensile direction after combining with the voids, and the overall appearance is a more symmetrical cone expansion. But, when the voids are located in the crack [0001] direction, there is no obvious connection between the cracks and the voids.

Key words **Single crystal magnesium; Void; Crack; Twin; Molecular dynamics**

Corresponding author: LAN YongTing, E-mail: 100000877@gxust.edu.cn

The project supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 12262003, 11862002), the Guangxi Natural Science Foundation of China (No. 2022GXNSFAA035537), and the Doctoral Fund Project of Guangxi University of Science and Technology (No. 21Z13).

Manuscript received 20221124, in revised form 20230222.

0 引言

作为21世纪新型轻金属材料,镁合金具有密度低、比强度高等优点,在各个工业领域应用广泛。然而,在镁合金材料内部却往往存在着大量弥散分布的微观缺陷(如孔洞、微裂纹等),其中微孔洞与微裂纹的成核、生长和聚并与镁合金的损伤和断裂密切相关,也是影响镁合金力学性能的关键[1-6]。在镁合金受到外加载荷的整个形变过程中,不同的缺陷对镁合金的变形机制影响不尽相同[7]。在受到外加载荷作用

*20221124收到初稿, 20230222收到修改稿。国家自然科学基金项目(12262003, 11862002), 广西自然科学基金项目(2022GXNSFAA035537), 广西科技大学博士基金项目(21Z13)资助。

**柯昌锐, 男, 1998年生, 陕西镇坪人, 汉族, 广西科技大学硕士研究生, 主要研究方向为镁合金疲劳与断裂行为。

***蓝永庭(通信作者), 男, 1975年生, 广西宾阳人, 汉族, 广西科技大学机械与汽车工程学院教授, 博士, 主要研究方向为金属材料细观力学行为。

时，缺陷的生长和演化是导致材料失效的直接原因，因此探究镁及镁合金塑性变形机制一直是目前研究者们关注和研究的重要方向。但是，受限于观测手段，目前的研究方法往往难以准确地观察材料内部的微裂纹、微孔洞等细观缺陷的演化过程，因此采取适当的研究方法从细观上来探究微孔洞与微裂纹等缺陷的演化规律就十分必要。

作为一种描述原子之间相互作用和构型的数值计算方法，分子动力学基于经典牛顿力学建立原子层次上的运动体系，通过计算粒子之间的相互作用力并记录每一时刻体系内粒子的位置和动量，从而得到特定条件下系统中粒子的运动轨迹[8-10]，故而能在微观层次上探究金属材料的塑性变形机制以及微观缺陷的演化机制。该方法能够有效模拟镁金属在受到外加载荷时，材料内部原子的变化情况，从而能够在特定条件下模拟材料中的孔洞、位错和孪生等缺陷的演化。豆雨辰[11]利用分子动力学研究了基面层错对$[10\bar{1}2]$孪晶的强化作用，研究表明该I_1层错和I_2层错对$[10\bar{1}2]$孪晶有明显的强化作用。付蓉等[12]用分子动力学模拟了γ-TiAl合金微裂纹的扩展行为，发现室温下裂纹呈脆性解理扩展，随着温度升高，微裂纹由脆性解理扩展转向为韧性扩展。TANG T等[13]模拟了单晶镁中孔洞的生长和聚合，研究发现模型的大小、加载速度和温度对孔洞的演化和孪晶的生长等均有明显的影响，但对应力-应变曲线的初始斜率的影响较小。梁华等[14]模拟了含孔洞的单晶铝单轴拉伸过程中晶向、孔洞体积分数、空位体积分数等对孔洞生长的影响，结果表明不同的晶向，孔洞生长变形的微观机制不同。王云天等[15]探究了温度对三轴拉伸下的单晶铁中孔洞成核与生长影响，发现孔洞成核与生长是拉应力下降的主要原因。马磊等[16]探究了单晶钨在单轴拉伸下的裂纹扩展行为，发现不同晶向的裂纹在扩展时，裂纹尖端的演化存在差异。以上研究对受外加载荷下的材料内部缺陷的演化和生长进行了分子动力学模拟，但对不同缺陷之间的共同影响研究较少。然而，实际材料中往往存在着多种缺陷，在对材料的缺陷演化进行研究时，从细观上探究不同缺陷之间的相互影响和作用，更有助于理解和解释材料的损伤机制。并且，作为密排六方晶体，镁的力学性能具有各向异性，不同位置和形状的缺陷都会对裂纹的扩展产生不同的影响。为探究两种不同缺陷的相互影响，本文在单晶镁模型中预制了微孔洞和裂纹两种不同的缺陷，并设置了不同位置微孔洞的排布，利用分子动力学探究了沿C轴拉伸情形下不同的微孔洞位置分布对裂纹扩展的影响。

1　分子动力学模型

单晶镁具有密排六方结构，其原子量为24.305，晶格常数为$a=b=0.321$ nm，轴比$c/a=1.623$。本文使用Atomsk建模软件[17]建立镁的密排六方晶体结构的单晶模型，如图1所示，其四轴坐标采用Miller-Bravais坐标系[18]表示，如图2所示。模型中x、y和z轴指向分别为$[10\bar{1}0]$、$[\bar{1}2\bar{1}0]$、[0001]晶向，模型尺寸为254 Å×222 Å×208 Å，模型总原子数为511 886。

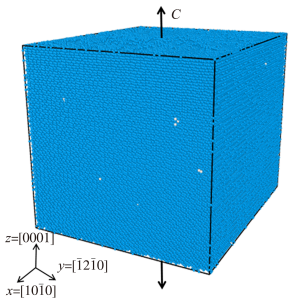


图1　单晶镁模型

Fig. 1　Model of magnesium single crystal

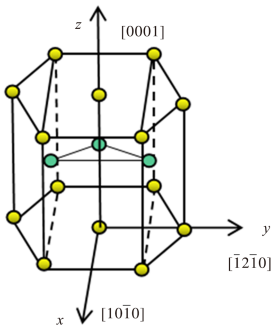


图2　镁晶体结构

Fig. 2　Magnesium crystal structure

在宏观情况下，孔洞的形状大多为类椭球形，裂纹为条形，为探究孔洞对预制裂纹扩展的影响，在单晶模型的基础上预设4种不同情形的孔洞和裂纹原子模型。为方便观测裂纹和孔洞的位置分布，将原子尺寸缩小，从而仅显示裂纹孔洞形状，4种原子模型如图3所示。图3(a)所示为仅含条形裂纹缺陷的模型，裂纹位于模型中心(总模型大小为256 Å×222 Å×208 Å)，裂纹中心坐标为(128 Å，111 Å，104 Å)，裂纹面为$\{0001\}[\bar{1}2\bar{1}0]$裂纹尺寸为11 Å×51 Å×12 Å。为保证垂直载荷方向上的孔洞特征尺寸[19]相同，图3(b)、图3(c)、图3(d)所示为同时含有球形孔洞和条形裂纹的模型，球形孔洞的半径均为8 Å，球形孔洞与条形裂纹的绝对距离均为33 Å。图3(b)所示模型中，球形孔洞位于条形裂纹的[0001](z轴正方向)，孔洞中心坐标为(128 Å，111 Å，137 Å)。图3(c)所示模型中，球形孔洞位于条形裂纹的$[10\bar{1}0]$(y轴正方向)，孔洞中心坐标为(128 Å，111 Å，104 Å)。图3(d)所示模型中，球形孔洞

位于条形裂纹的一个[10$\bar{1}$2]孪生面，孔洞中心坐标为(163 Å，111 Å，73 Å)。

模型中预设裂纹和孔洞均取在模型中心，将使用分子动力学模拟软件Lammps中的边界条件设置为周期性边界条件[20](消除边界效应)，模拟温度为300 K。为得到结构致密的单晶镁组织，保证系统内原子处在该温度状态下的平衡状态，在对模型进行加载前，先在等压等温系综下对系统进行充分弛豫，弛豫20 000步。弛豫结束后，沿着[0001]方向(坐标系z轴方向)进行匀速拉伸，拉伸时间步长为0.001 ps，运行30 000步，所得的数据在可视化软件OVITO[21]中进行分析。

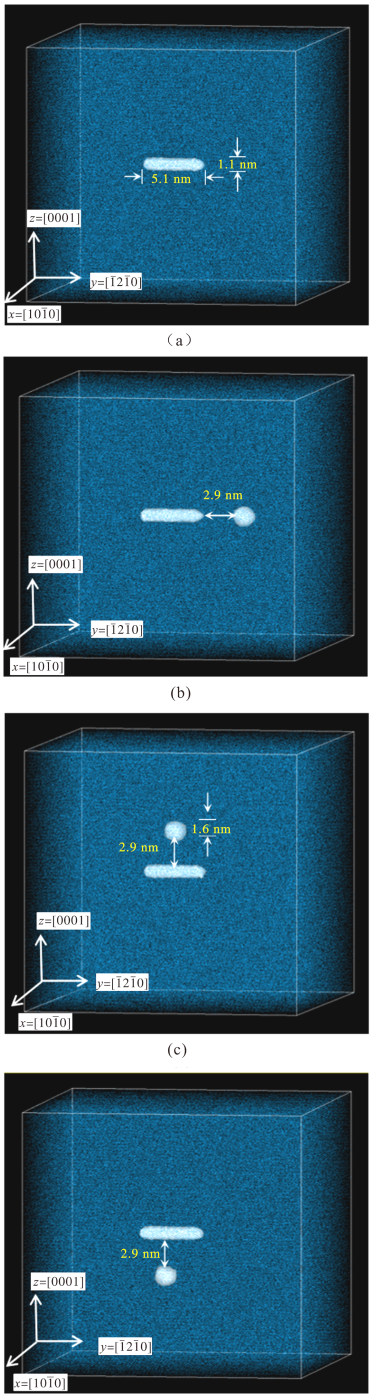


图3 单晶镁的4种原子模型

Fig. 3 Four atom models of single crystal magnesium

分子动力学的模拟中需要势函数来确定分子之间的相互作用力，本文采用嵌入原子势方法(Embedded Atom Method，EAM)[22]，该方法能有效地描述金属的结合能的形成和原子间相互作用，准确地复现模拟中各类缺陷的演变情况，故适用于研究金属在塑性变形中内部的缺陷以及裂纹扩展。势函数采用的是SUN D Y等[23]024116提出的EAM势函数，EAM嵌入原子势所描述的晶体系统的势能表达式为

$$E=\sum_i F_i(p_i)+\frac{1}{2}\sum_{j\neq 1}\phi_{ij}(r_{ij})$$

式中，将体系的总能量E近似为两部分：一部分是体系的嵌入能F_i，与电子密度ρ有关，ρ_i为其他邻近原子在i处产生的电子密度；另一部分是两体势，与原子间距r有关，φ_{ij}为原子i与第j个原子之间的对势作用函数，r_{ij}为原子i与原子j之间的距离。SUN D Y等[23]024116分别将拟合得到的Mg的电子云密度函数数值和原子间距数值等分为10 000份，并对连续函数进行离散化，从而得到适用于Mg金属的势函数。

2 结果与分析

2.1 应力-应变曲线

图4所示为不同孔洞位置的单晶镁拉伸应力-应变曲线。

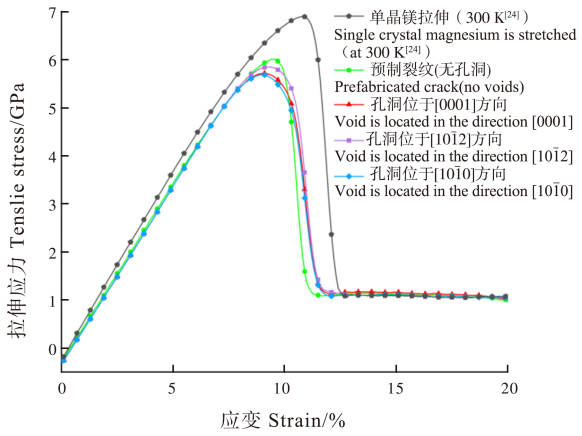


图4 不同孔洞位置的单晶镁拉伸应力-应变曲线

Fig. 4 Stress-strain curves of single crystal magnesium at different void locations

由图4可知，含孔洞的模型以及不含孔洞的模型其应力-应变曲线的整体走势基本相同，不同孔洞位置对晶体的弹性模量基本没有影响。在拉伸初始阶段，应力随着应变的加载呈现逐渐上升趋势，因为原子间距扩大，致使原子间作用力逐渐增加，所以应力不断增加；当达到屈服应力点后开始急剧下降，并最终趋于一个较低的稳定值。经对比本文中单晶模型的拉

伸曲线走势与薛春等[24]所模拟的单晶镁拉伸曲线基本一致，由于本文模型中预设了缺陷存在，故整体应力幅值较低。在弛豫过程中，无孔洞模型的屈服点的应力峰值为 6.02 GPa，此时的应变为 ε = 9.4%；孔洞位于裂纹[0001]方向的模型的屈服点应力峰值为 5.84 GPa，此时的应变为 ε = 9.2%；孔洞位于裂纹[10$\bar{1}$2]方向的模型的屈服点应力峰值为 5.71 GPa，此时的应变为 ε = 9.0%；孔洞位于裂纹[10$\bar{1}$0]方向的模型的屈服点峰值为 5.68 GPa，对应的应变为 ε = 9.0%。在模拟过程中，材料中逐渐出现位错和空位，在已预设了裂纹和孔洞的体系中，裂纹和孔洞会随着拉伸的进行而联合。由于位错形核的产生需要一定的应力[25]，当两者联合后，材料中位错成核所需要的应力变小，故应力峰值较小。

2.2　预制裂纹拉伸分析

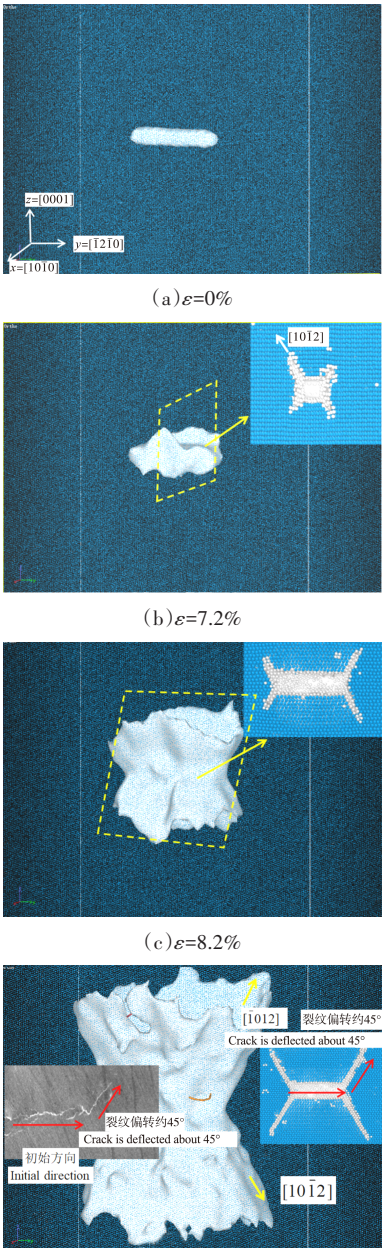
中心预制微裂纹模型（无孔洞），不同拉伸应变时刻的单晶镁裂纹扩展如图 5 所示。

如图 5(b)所示，在拉伸应变达到 ε = 7.2% 时（此时拉应力为 5.2 GPa），拉伸加载开始传递到裂纹处，裂纹周围产生大量空位并联合，裂纹呈现一定程度的钝化，并且[10$\bar{1}$2]方向孪生速度较快，通过对裂尖原子进行标定，测得此时的速度为 60 Å/ps。如图 5(c)所示，在拉伸应变达到 ε = 8.2% 时，[$\bar{1}$012]和[10$\bar{1}$2]两个方向的塑性变形对裂纹扩展路径产生影响，裂尖的上下侧的变形孪晶逐渐扩展，此时孪晶长度较短并且厚度仅有 2 层原子，锥面孪生结合后形成环状孪晶带。如图 5(d)所示，当拉伸应变达到 ε = 7.2% 时，可以清晰地看到，裂纹随着应力的增大而逐渐扩展，但扩展方向并不是完全沿拉伸方向，而是沿锥面孪晶方向扩展，整体呈现比较对称，扩展中出现的点缺陷、间隙和空位联合后诱导裂纹沿[$\bar{1}$012]和[10$\bar{1}$2]方向扩展。从聂德福等[26]对 AZ31 镁合金进行的 z-x 方向的拉伸加载试验，可以看出在单次过载拉伸过程中裂纹的扩展路径并不是沿原方向扩展，而是沿拉伸方向偏离约 45°。在室温的拉伸加载中，由于镁的柱面和锥面的临界剪应力远远高于基面滑移而且难以激活，平行于 C 轴方向的应变则主要由锥面孪生产生，而[10$\bar{1}$2]孪生的切变量最小，在 C 轴拉伸情况下，[10$\bar{1}$2]孪生的剪切带和空位的相互联合促进裂纹的扩展。可见，模拟裂纹扩展方向与宏观试验裂纹的扩展方向基本吻合。

2.3　预制裂纹和孔洞（位于[0001]方向）拉伸分析

预制微裂纹和孔洞模型，孔洞位于裂纹[0001]方向时，不同拉伸应变时刻的单晶镁裂纹扩展如图 6 所示。

如图 6(b)所示，在拉伸应变达到 ε = 7.0% 时，裂纹处开始产生[$\bar{1}$012]方向孪晶。由于孔洞是球形，其

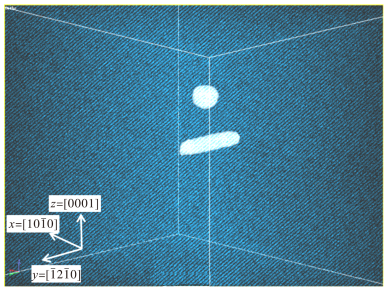


(a)ε=0%　(b)ε=7.2%　(c)ε=8.2%　(d)ε=9.2%

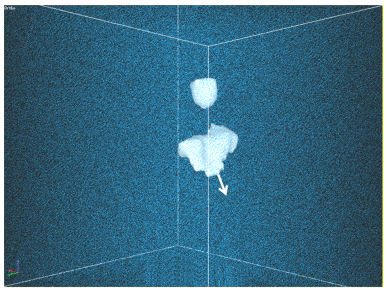
图 5　无孔洞时单晶镁裂纹扩展

Fig. 5　Crack propagation of single crystal magnesium without voids

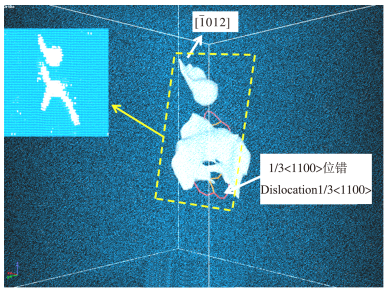
周围应力分布较为均匀，没有出现较为明显的应力集中，形状仍未发生明显变化。如图 6(c)所示，随着加载的进行，在拉伸应变达到 ε = 7.7% 时，通过对孔洞处原子进行标定，测得孔洞上侧的{10$\bar{1}$1}[10$\bar{1}$2]孪晶生长速度为 43 Å/ps，明显快于其他方向的孪晶生长速度 5 Å/ps。与此同时，晶体中开始产生 1/3< 1$\bar{1}$00 > 不全位错与其他位错。如图 6(d)所示，在拉伸应变达到 ε = 8.9% 时，对比相同拉伸程度的裂纹处的塑性变形程度发现，[10$\bar{1}$2]孪晶（长度为 180.16 Å）同样要快于[10$\bar{1}$2]孪晶（长度为 134.2 Å）生长速度。这一现象与 LIU X 等[27]98-107描述的裂纹扩展与孪生存在竞争关系的现象基本吻合。孔洞的存在缓解了裂纹在该方



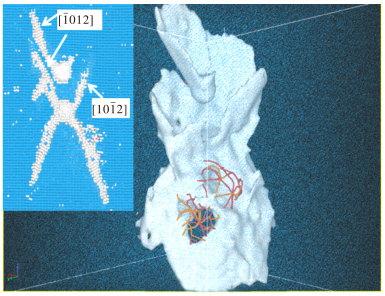
(a)ε=0%



(b)ε=7.0%



(c)ε=7.7%



(d)ε=8.9%

图6 孔洞位于裂纹[0001]方向时单晶镁裂纹扩展

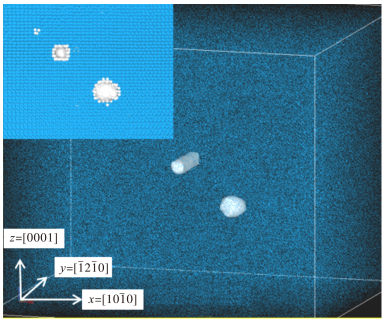
Fig. 6 Crack propagation of single crystal magnesium when the void is located in [0001] direction

向上的应力集中,减缓了裂纹处上侧[10$\bar{1}$2]方向上孪晶的生长速度,这是由于孔洞不断合并空位扩展为裂纹的过程中,裂纹扩展与孪生存在显著竞争关系。持续加载,裂纹处的孪晶继续扩展,但并未与孔洞处裂纹出现明显的联合现象。

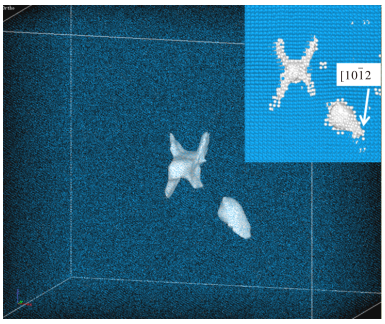
2.4 预制裂纹和孔洞(位于[10$\bar{1}$2]方向)拉伸分析

预制微裂纹和孔洞模型,孔洞位于裂纹[10$\bar{1}$2]方向时,不同拉伸应变时的单晶镁裂纹扩展如图7所示。

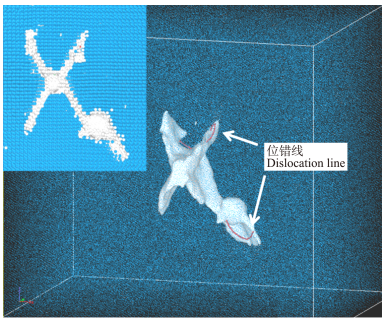
如图7(b)所示,当拉伸应变达到ε = 7.2%时,裂纹处靠近孔洞方向([10$\bar{1}$2]方向)孪晶生长速度较慢,在该时刻生长速率为35 Å/ps,而同时刻裂纹沿[$\bar{1}$012]



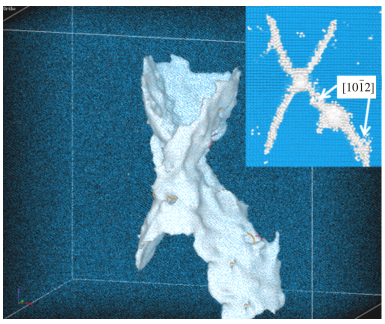
(a)ε=0%



(b)ε=7.2%



(c)ε=7.7%



(d)ε=8.8%

图7 孔洞位于裂纹[10$\bar{1}$2]方向时单晶镁裂纹扩展

Fig. 7 Crack propagation of single crystal magnesium when the void is located in [10$\bar{1}$2] direction

方向的扩展速率为56 Å/ps。因为孔洞处[10$\bar{1}$2]孪晶的生长使得材料整体在该方向上的应力集中得到释放,孔洞处的孪晶生长则主要沿[10$\bar{1}$2]方向,而其他方向上的孪晶则未有明显生长,此时的扩展未呈现对称性。如图7(c)所示,当拉伸应变达到ε = 7.7%时,裂纹和孔洞处原子出现位错,位错线移动方向与锥形孪晶生长方向相同,在与附近生成的空位联合后诱导裂纹进一步扩展,裂纹[10$\bar{1}$2]孪晶与孔洞结合。随着

加载的进行，如图 7(d)所示，当拉伸达到 ε = 8.8%时，孪晶不断长大并且变宽，裂纹逐渐与孔洞联合，沿着[10$\bar{1}$2]方向快速扩展。对比杨蒙蒙等[28]在高应变速率下 AZ31 镁合金绝热剪切带中微孔洞和裂纹的扩展试验，试验中微裂纹主要沿着平行孪晶带以及联合孔洞穿透等轴晶进行扩展，与本文中微裂纹联合孔洞沿着锥面孪晶界扩展情况相同，并且绝热剪切带的局部失稳区域，可近似为瞬时的等温等压状态，与本文的模拟条件吻合。

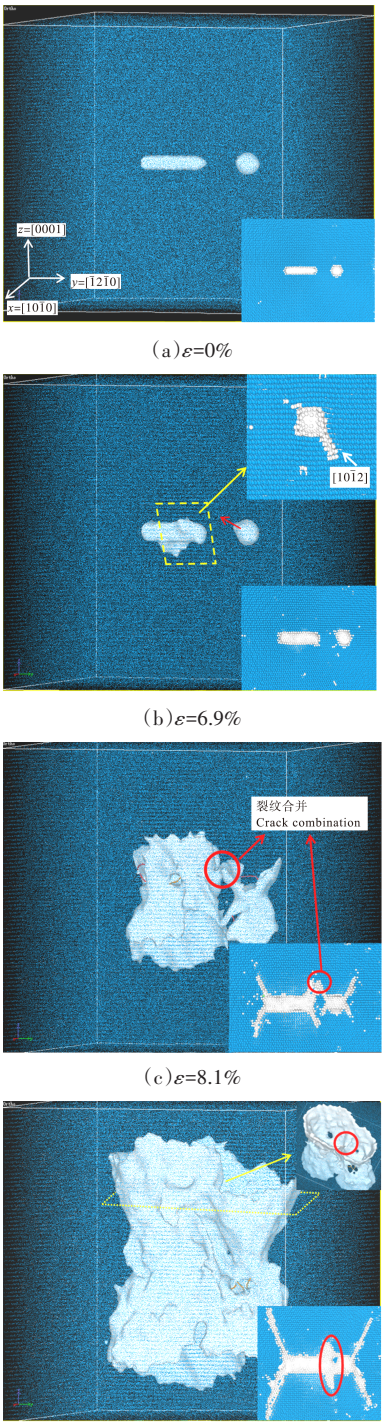
2.5　预制裂纹和孔洞(位于[10$\bar{1}$0]方向)拉伸分析

预制微裂纹和孔洞模型中，孔洞位于裂纹[10$\bar{1}$0]方向时，不同拉伸应变时的单晶镁裂纹扩展如图 8 所示。

如图 8(b)所示，当拉伸应变达到 ε = 6.9%时，模型达到最大弹性形变，随着继续加载，模型进入塑性变形阶段，裂纹尖端和孔洞周围不断有空位缺陷产生，裂纹处开始产生[10$\bar{1}$2]孪晶，此时刻的生长速度为 41.5 Å/ps。如图 8(c)所示，当 ε = 8.1%时，裂纹和孔洞处的孪晶逐渐长大，裂纹尖端处孪晶与孔洞处孪晶开始合并，由于孔洞的存在影响了裂尖的应力分布，裂尖靠近孔洞一侧的孪晶生长速度变慢，在该时刻速度为 20.1 Å/ps，而另一侧的孪晶生长速度为 48 Å/ps，这是由于孔洞处孪生变形消耗了一定能量，从而抑制裂纹的扩展[29]。在进一步拉伸后，如图 8(d)所示，当拉伸应变达到 ε = 9.0%时，裂纹逐渐扩展与孔洞联合，观察俯视图，联合处[10$\bar{1}$2]锥面孪晶生长速度缓慢，此时刻速度为 18.3 Å/ps。裂纹和孔洞联合后，沿锥面孪生的方向继续扩展，整体呈现较为对称，扩展路径与无孔洞裂纹扩展相似。

3　讨论

在高应变拉伸速率下，扩展初期裂纹尖端应力集中，在裂尖处的变形机制主要是[10$\bar{1}$2]变形孪晶和空位的联合扩展，并且孪晶的形成改变了晶体的位向，激发晶体进一步变形，致使裂纹继续沿该方向扩展。而孔洞的存在，缓解了裂纹在该方向上的应力集中，影响了孪晶的扩展速度[30]169-194。从总体裂纹扩展上分析，裂纹的扩展形式基本相同，呈现比较对称的锥面扩展。含有孔洞的模型中，ε = 8.9%时，如图 9 所示，孔洞分别位于裂纹的[0001]、[10$\bar{1}$2]和[10$\bar{1}$0]方向，其裂纹的扩展距离分别为 194.42、194.98、197.56 Å。位于预设裂纹的[0001]孔洞，棱柱面滑移较难启动[31]，其主要扩展为{$\bar{1}$011}[10$\bar{1}$2]变形孪晶，并且在塑性变形阶段，孔洞处的裂纹扩展与预设裂纹的扩展



(a)ε=0%　(b)ε=6.9%　(c)ε=8.1%　(d)ε=9.0%

图 8　孔洞位于裂纹[10$\bar{1}$0]方向时单晶镁裂纹扩展

Fig. 8　Crack propagation of single crystal magnesium when the void is located in [10$\bar{1}$0] direction

没有明显联合，相较于后两种孔洞排布，[0001]孔洞排布在 C 轴拉伸时所需应力峰值较高。此时刻的应力接近峰值应力，其中[10$\bar{1}$2]和[10$\bar{1}$0]孔洞模型的应力非常接近，仅相差 0.014 GPa，因为分布在[10$\bar{1}$2]和[10$\bar{1}$0]方向的孔洞的孪生与裂纹处的[10$\bar{1}$2]孪生竞争[27]98-107[30]169-194程度较弱。从裂纹局部孪生和扩展方向上分析，通过对比图 5(c)、图 6(c)、图 7(c)和图 8(c)

处的裂纹可以看出，不存在孔洞时，裂纹尖端处的孪晶生长和扩展都呈现较为对称的情况，主要是{$\bar{1}$011}[10$\bar{1}$2]变形孪晶和空位的联合形成的锥状扩展；而在存在孔洞时，裂纹靠近孔洞的一侧的孪晶生长速度普遍相对较慢，其中[10$\bar{1}$0]孔洞排布时，裂纹处的{$\bar{1}$011}[10$\bar{1}$2]变形孪晶生长速度最慢，仅为20.1 Å/ps。

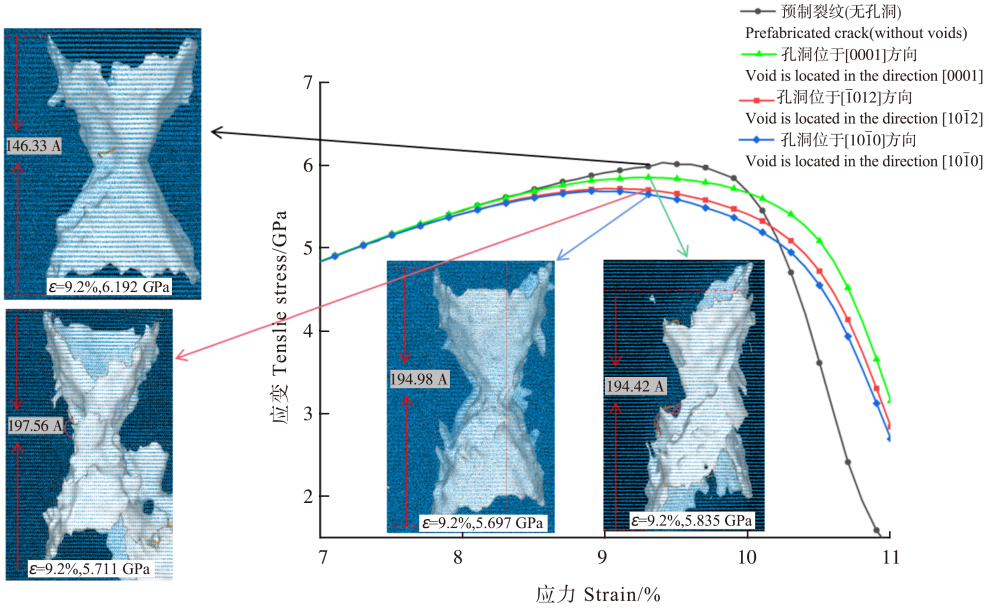


图9 单晶镁裂纹扩展对比

Fig. 9 Crack propagation comparison of single crystal magnesium

4 结论

本文利用分子动力学方法研究了在C轴拉伸情形下，单晶镁中预制孔洞和裂纹，在特征尺寸相同的情况下，孔洞的存在以及位置的变化所引起的裂纹扩展的影响。主要得出以下结论：

1）孔洞的存在会影响单晶镁模型的屈服强度，在相同特征尺寸的情况下，不同孔洞位置的模型屈服强度不同，其中当孔洞位于裂纹[10$\bar{1}$0]方向时，模型的屈服强度最低。

2）孔洞能在一定程度上缓解裂纹在该方向上的应力集中现象，影响裂纹的孪晶扩展速率，裂纹靠近孔洞的一侧的孪晶生长速度相对较慢，其中[10$\bar{1}$0]孔洞排布时孪晶生长速度最慢。

3）孔洞的存在对裂纹的扩展方向影响较小，一般情况下裂纹与孔洞联合沿着拉伸方向扩展，整体呈现比较对称的锥面扩展，但孔洞位于裂纹[0001]方向时，裂纹并未与孔洞出现明显的联合现象。

参考文献(References)

[1] LIU J Q, HUANG M S, LI Z H, et al. Microvoid growth mechanism in FCC polycrystals and a statistical damage model [J]. International Journal of Plasticity, 2021, 137: 102888.

[2] SONG J F, SHE J, CHEN D L, et al. Latest research advances on magnesium and magnesium alloys worldwide [J]. Journal of Magnesium and Alloys, 2020, 8(1): 1-41.

[3] 刘 庆. 镁合金塑性变形机理研究进展[J]. 金属学报, 2010, 46(11): 1458-1472.
LIU Qing. Research progress on plastic deformation mechanism of Mg alloys [J]. Acta Metallurgica Sinica, 2010, 46 (11): 1458-1472 (In Chinese).

[4] POLMEAR I J. Magnesium alloys and applications [J]. Materials Science and Technology, 1994, 10(1): 1-16.

[5] 张占领, 张艳琴, 刘 真. 镁合金压铸件常见缺陷及改进措施[J]. 铸造技术, 2019, 40(7): 718-721.
ZHANG ZhanLing, ZHANG YanQin, LIU Zhen. Common defects of magnesium alloy castings and improvement measures [J]. Foundry Technology, 2019, 40 (7): 718-721(In Chinese).

[6] 樊振中, 陈军洲, 陆 政, 等. 镁合金的研究现状与发展趋势[J]. 铸造, 2020, 69(10): 1016-1029.
FAN ZhenZhong, CHEN JunZhou, LU Zheng, et al. Research status and development trend of magnesium alloys [J]. Foundry, 2020, 69 (10): 1016-1029(In Chinese).

[7] SHIBUTANI Y, MATSUNAKA D. Defects mechanics; three-body problem of defects interaction among crack, dislocations and twin boundary in magnesium [C]//Solid State Phenomena. Trans Tech Publications Ltd., Switzerland, 2017, 258: 11-16.

[8] ZEPEDA-RUIZ L A, STUKOWSKI A, OPPELSTRUP T, et al. Probing the limits of metal plasticity with molecular dynamics simulations[J]. Nature, 2017, 550(7677): 492-495.

[9] SHAW D E, DENEROFF M M, DROR R O, et al. Anton, a special-

purpose machine for molecular dynamics simulation [J]. Communications of the ACM, 2008, 51(7): 91-97.

[10] HOLLINGSWORTH S A, DROR R O. Molecular dynamics simulation for all[J]. Neuron, 2018, 99(6): 1129-1143.

[11] 豆雨辰. 基于第一性原理和分子动力学的镁合金强韧化基础研究[D]. 重庆:重庆大学, 2015:73-89.
DOU YuChen. Basic research on strengthening and toughening of magnesium alloys based on first-principles and molecular dynamics [D]. Chongqing: Chongqing University, 2015:73-89(In Chinese).

[12] 付　蓉, 芮执元, 剡昌锋, 等. 单晶γ-TiAl合金微裂纹扩展行为的分子动力学模拟[J]. 功能材料, 2015, 46(13):13100-13105.
FU Rong, RUI ZhiYuan, YAN ChangFeng, et al. Molecular dynamics simulation of micro-crack propagation behavior in single crystal γ-TiAl [J]. Journal of Functional Materials, 2015, 46 (13): 13100-13105(In Chinese).

[13] TANG T , SUNGHO K, HORSTEMEYER M F. Molecular dynamics simulations of void growth and coalescence in single crystal magnesium[J]. Acta Materialia, 2010, 58(14) : 4742-4759.

[14] 梁　华, 李茂生. 孔洞和空位对单晶铝力学性能影响的分子动力学研究[J]. 计算物理, 2019 (2): 211-218.
LIANG Hua, LI MaoSheng . Molecular dynamics study of mechanical properties of single crystal aluminum with voids and vacancies [J] Chinese Journal of Computational Physics, 2019 (2): 211-218 (In Chinese).

[15] 王云天, 曾祥国, 杨　鑫. 高应变率下温度对单晶铁中孔洞成核与生长影响的分子动力学研究[J]. 物理学报, 2019, 68(24): 229-245.
WANG YunTian, ZENG XiangGuo, YANG Xin. Molecular dynamics study on the effect of temperature on void nucleation and growth of single crystal iron at a high strain rate [J]. Acta Physics Sinica, 2019, 68 (24): 229-245(In Chinese).

[16] 马　磊, 黄俊源. 单轴加载下钨中裂纹扩展机理的研究[J]. 机械强度, 2020, 42(4): 1012-1016.
MA Lei, HUANG JunYuan. Study on crack propagation mechanism of tungsten under uniaxial loading [J]. Journal of Mechanical Strength, 2020, 42 (4) : 1012-1016(In Chinese).

[17] HIREL P. Atomsk: a tool for manipulating and converting atomic data files [J]. Computer Physics Communications, 2015, 197: 212-219.

[18] FRANK F C. On Miller-Bravais indices and four-dimensional vectors[J]. Acta Crystallographica, 1965, 18(5): 862-866.

[19] MURAKAMI Y. Material defects as the basis of fatigue design[J]. International Journal of Fatigue, 2012, 41: 2-10.

[20] TANG T, KIM S, HORSTEMEYER M F. Fatigue crack growth in magnesium single crystals under cyclic loading: molecular dynamics simulation[J]. Computational Materials Science, 2010, 48 (2): 426-439.

[21] STUKOWSKI A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO-the open visualization tool [J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2010, 18 (1): 015012.

[22] POTIRNICHE G P, HORSTEMEYER M F, WAGNER G J, et al. A molecular dynamics study of void growth and coalescence in single crystal nickel[J]. International Journal of Plasticity, 2006, 22(2): 257-278.

[23] SUN D Y, MENDELEV M I, BECKER C A, et al. Crystal-melt interfacial free energies in hcp metals: a molecular dynamics study of Mg[J]. Physical Review B, 2006, 73(2): 024116.

[24] 薛　春, 杨千华, 楚志兵, 等. 温度对单晶镁拉伸性能影响的分子动力学研究[J]. 稀有金属材料与工程, 2021, 50(5):1812-1816.
XUE Chun, YANG QianHua, CHU ZhiBing, et al. Molecular dynamics study on the influence of temperature on tensile properties of single crystal magnesium [J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2021, 50 (5): 1812-1816(In Chinese).

[25] HIRTH J P, LOTHE J, MURA T. Theory of dislocations (2nd ed.) [J]. Journal of Applied Mechanics, 1983, 50(2): 476-477.

[26] 聂德福, 赵　杰. AZ31镁合金疲劳裂纹扩展和过载效应[J]. 中国有色金属学报, 2008, 18(5):771-776.
NIE DeFu, ZHAO Jie. Fatigue crack growth and overload effect in AZ31 magnesium alloy [J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2008, 18(5): 771-776(In Chinese).

[27] LIU X, ZHU B W, XIE C, et al. Twinning, dynamic recrystallization, and crack in AZ31 magnesium alloy during high strain rate plane strain compression across a wide temperature[J]. Materials Science & Engineering, A. Structural Materials: Properties, Misrostructure and Processing, 2018, 733: 98-107.

[28] 杨蒙蒙, 闫迎亮, 耿苏楠, 等. AZ31镁合金变形局域化与裂纹扩展[J]. 热加工工艺, 2023, 52(22):119-122.
YANG MengMeng, YAN YingLiang, GENG SuNan, et al. Deformation localization and crack extension of AZ31 magnesium alloy [J]. Hot Working Technology, 2023, 52(22):119-122 (In Chinese).

[29] 肖　罡, 万泉慧, 朱必武, 等. 高应变速率轧制AZ31镁合金的组织及微裂纹演变[J]. 机械工程材料, 2021, 45(11):18-23.
XIAO Gang, WAN QuanHui, ZHU BiWu, et al. Microstructure and microcrack evolution of AZ31 magnesium alloy during high strain-rate rolling [J]. Mechanical Engineering Materials, 2021, 45 (11): 18-23(In Chinese).

[30] PARTRIDGE P G. The crystallography and deformation modes of hexagonal close-packed metals[J]. Metallurgical Reviews, 1967, 12 (1): 169-194.

[31] SU H H, ZHOU X Z, ZHENG S J, et al. Atomic-resolution investigations on formation and evolution of symmetric tilt grain boundaries near the $\{10\bar{1}2\}$ twin orientation in a Mg alloy [J]. Scripta Materialia, 2020, 187: 113-118.