

文章编号: 1000-5862(2016)02-0126-07

含裂纹 bcc 铁拉伸与疲劳的分子动力学模拟研究

袁玉全¹, 曾祥国², 胡燕飞¹

(1. 四川理工学院理学院, 四川 自贡 643000; 2. 四川大学建筑与环境学院, 四川 成都 610065)

摘要: 采用分子动力学模拟方法研究了含 (011) 型中心裂纹的金属 α -Fe 在拉伸载荷和疲劳载荷作用下裂纹扩展的微观机制. 研究表明: 在拉伸载荷作用下, 材料因应力集中导致了由 bcc 到 hcp 的相变, 裂纹呈现严重钝化扩展现象, 整个过程还伴随着层错、孪晶等现象的发生; 在循环载荷作用下时, 位错沿滑移面 (-211) 和 $(2-11)$ 快速发射, 从而使得裂尖处应力得以快速释放, 疲劳裂纹扩展相当缓慢, 裂纹出现止裂现象, 整个疲劳加载过程未发现孪晶、相变等现象.

关键词: 分子动力学; 中心裂纹; α -Fe; 拉伸; 疲劳; LAMMPS

中图分类号: O 483 **文献标志码:** A **DOI:** 10.16357/j.cnki.issn1000-5862.2016.02.04

0 引言

材料中不可避免地存在着各种微缺陷如空位、孔洞、夹杂、微裂纹等, 严重影响材料的力学性能. 材料的破坏往往是从这些微缺陷附近开始萌生和扩展的. 因此, 微缺陷附近的变形过程和失效机理吸引了工程界和学术界的广泛关注. 实验和理论表明, 材料的特性取决于材料的原子结构与微观结构^[1]. 尽管微观实验仪器扫描隧道显微镜 (STM) 和原子力显微镜 (AFM) 的分辨率都已经达到了原子尺寸量级, 可以做到直接移动原子水平^[2], 但目前人们要实现裂纹尖端附近的变形和失效机理的动态观察仍然是非常困难的. 幸而, 随着计算机水平的发展, 分子动力学模拟技术刚好弥补了这一不足, 可以展现材料在这一过程区的微观动态过程.

已有大量利用分子动力学方法对材料变形和失效过程中缺陷附近微结构演化机理进行研究. A. S. Argon 等^[3-5] 在 20 世纪 80 年代就利用分子动力学模拟方法进行了微裂纹的扩展研究, 但限于当时的计算水平, 他们重点研究了裂纹的扩展以及裂纹区域的脆—塑转变过程. 随着计算水平的提高, 研究体系的规模逐渐扩大, 缺陷扩展过程中位错、相变、孪晶等微结构演化机制也逐渐被研究. 张永伟等^[6] 采用了 3 维原子真实构型模拟了裂尖原子的位错发射和

位错在裂尖附近的力学行为, 得到了一系列有趣的结果. S. J. Zhou 等^[7] 对 3 维裂尖处的位错发射机制进行了模拟研究, 模拟的原子数目达到 3.5 亿之多. R. Komanduri 等^[8] 研究了多种 fcc 和 bcc 单晶体在单向拉伸载荷下的变形与失效机理, 揭示了在指定晶向时微缺陷的形成和坍塌扩展机制. L. Kucherov 等^[9] 研究了拉伸载荷下 hcp 材料裂尖处孪晶形核机制, 发现其孪晶形核过程经历了 2 个不同阶段. 最近, Cheng Shaohuan 等^[10], Wu Wenping 等^[11] 等就缺陷扩展和微结构演化机制对模型尺寸的依赖性做了详细研究.

近年, 分子动力学研究也扩展到材料在疲劳载荷下失效过程的微观机制研究领域, 不过这方面的工作还相对较少. Chang Winjin 等^[12] 分析了超低应变率下温度对单晶铜单向拉伸和疲劳破坏的影响机制. K. Nishimura 等^[13] 考虑了 α -Fe 中晶界对疲劳裂纹扩展过程中的作用机制. G. P. Potirniche 等^[14] 通过对不同裂纹取向的单晶镍和铜的疲劳破坏过程分析, 指出不同的晶向对剪切带和疲劳裂纹扩展有重要影响. Tang Tian 等^[15-16] 对单晶镁疲劳载荷的分析也表明, 疲劳裂纹的扩展机制与裂纹方向、温度均有依赖关系.

金属单质铁常温下以 α -Fe 形式存在, 为体心立方 bcc 结构, 因金属铁在结构中有广泛的用途, 学者们对它微观尺度上的失效和破坏机理做了大量的

收稿日期: 2015-11-10

基金项目: 国防重点基金 (B1520132013-4), 四川理工学院人才引进项目 (2015RC41, 2015RC44) 和四川省教育厅科研课题 (15ZB0207) 资助项目.

作者简介: 袁玉全 (1975-) 男, 四川泸县人, 副教授, 博士, 主要从事计算固体力学和原子分子物理的研究.

研究. 但目前很多关于用分子动力学研究 α -Fe 的工作都仅仅考虑材料在某一特定晶向下的失效机理^[17-18], 尽管曹莉霞等^[19]用 F-S 多体势^[20]模拟研究了沿几种典型晶体取向的 α -Fe 裂纹在外载作用下的变形及相关缺陷的形成和发展过程. 遗憾的是, 作者没有考虑 α -Fe 在疲劳载荷作用下材料位错发展及裂纹扩展的情况. 而现实工况中, 结构受疲劳载荷作用而失效的情况相当普遍, 因而这一研究有着重要的意义. A. Uhnáková 等^[21-23]研究了室温下带边裂纹单晶的 α -Fe 在 I、II、III 型疲劳加载下, 裂纹扩展和位错发射机理, 但没有考虑不同晶向的影响, 对裂纹扩展过程中一些重要的现象也未详尽描述.

为了能更全面地理解材料的微观断裂行为, 本文系统地建立了几种典型的 α -Fe 裂纹分子动力学模型, 采用大规模分子动力学模拟程序 LAMMPS^[24], 全面系统地研究了预制初裂纹单晶 α -Fe 拉伸与疲劳破坏失效的微观机理, 详尽揭示了材料不同晶向对微裂纹扩展方式、位错形核与发射、孪晶、相变等微观过程的影响机制. 限于篇幅, 将分开进行报道, 本文详细报道 (010) [101] 型裂纹的破坏机制.

1 模型和方法

标准的实验和理论工作都指出, 体心立方铁的解理面是 (100) 和 (110) 面, 主要的滑移系是 {110} $\langle 111 \rangle$ 和 {112} $\langle 111 \rangle$ ^[25-26], 为此, 建立了 4 种不同取

向的裂纹模型. 对于一个特定的裂纹取向, 用裂纹所在的平面和裂纹前沿方向这 2 个量来进行标定, 即 (裂纹所在平面) [裂纹前沿方向] 的形式, 本研究所取的 4 种裂纹构型对应分别为 (010) [101], (010) [001], (0-11) [100], (01-1) [011], 将针对 (01-1) [011] 型中心微裂纹的破坏机制进行详细研究.

图 1 为模拟中所用的几何构型, a_0 为中心裂纹宽度, $a_0/w = 0.05$, W, H, t 分别表示 x, y, z 3 个方向的模型尺寸. 位移载荷沿 y 方向施加, 在整个模拟过程中, 将顶部和底部各 1.25 个晶格常数高度的原子在 y 方向刚化, x 和 z 方向取为周期性边界条件, y 方向取非周期性边界条件.

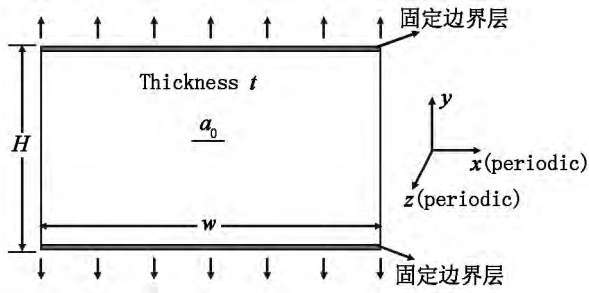


图 1 模型几何构型

按图 1 建立了不同晶向的 4 种 α -Fe 分子动力学裂纹模型. 对于 (01-1) [011] 型裂纹模型, 其晶体取向与坐标轴关系及其模型尺寸列于表 1, 模型尺寸为 22.93 nm \times 32.42 nm \times 1.63 nm, 模拟体系达到了 103 040 个原子.

表 1 模型的几何参数

模型	x	y	z	W/nm	H/nm	t/nm	总原子数/ N
1	[100]	[01-1]	[011]	22.93	32.42	1.63	103 040

原子间相互作用采用 M. Mendelev 等^[27]拟合的嵌入原子势, 为了验证该势函数的可靠性, 文章计算了 α -Fe 的一些重要物理量, 并与实验和其他工作所获得的参数对比, 如表 2 和表 3 所示.

通过 M. Mendelev 等^[27]势函数下的材料晶格常数和弹性常数与实验值的比较, 表 2 表明, 除 C_{11} 以外, 其他都符合的较好. 表 3 还表明, 与其他工作一致, (110) 和 (100) 面的表面能更小, (110) 表面最小, 最有可能成为 α -Fe 的最优解理面, 符合实验规律^[25-26]. 该势函数在各项物理性能上有极高的可靠性, 可以运用于本文对于 α -Fe 裂纹的拉伸和疲劳的变形与失效机理研究工作.

表 2 晶格常数和弹性常数计算与实验值比较

		本势函数 计算值	实验值 (298 K) ^[28]
晶格常数	a/nm	0.285 5	0.286 6
弹性常数	C_{11}/GPa	244	226 \pm 2
	C_{12}/GPa	145	140 \pm 8
	C_{44}/GPa	116	116 \pm 1

表 3 α -Fe 不同晶面的表面能

表面	$\gamma_s /$ ($\text{J} \cdot \text{m}^{-2}$) [本文]	$\gamma_s /$ ($\text{J} \cdot \text{m}^{-2}$) ^[29]	$\gamma_s /$ ($\text{J} \cdot \text{m}^{-2}$) ^[26]
(100)	1.787	1.973	1.554
(110)	1.641	1.874	1.374
(111)	1.984	2.296	1.700

模拟温度限制在 100 K, 时间积分步长取为 0.001 ps, 采用 Velocity-Verlet 算法求解运动方程. 模

拟开始前,对系统进行能量最小化并在 NVE 系综下弛豫,接着在 NPT 系综下,沿 y 方向上下对称地施加拉伸载荷以及拉伸和压缩载荷,以模拟产生拉伸载荷和循环载荷,整个模拟计算采用大规模分子动力学模拟程序 LAMMPS^[24].为了尽可能接近实际加载情况,本文采用沿拉伸方向线性地分配拉伸速度的方法,给模型施加需要的速度,如下图 2 所示,模拟过程每隔 200 步统计记录相关数据.

在分子动力学计算中,基于计算效率的考虑,不宜采用较低的应变率,参考其它成功的分子动力学模拟工作^[30],在模拟过程中给模型施加 $3 \times 10^{-9} \text{ s}^{-1}$ 的应变率.加载过程如下:对模型首先进行单向拉伸,同时观察构型和应力应变的变化情况,以得到裂纹扩展的临界应变 ε_{cri} ,从而确定最大循环加载应变 ε_{max} .循环加载过程中,取最小应变与最大应变比例关系为 $\varepsilon_{\text{min}}/\varepsilon_{\text{max}} = 0.75$ 来确定 ε_{min} ,然后,按图 2 (b) 所示加载循环载荷,以模拟材料疲劳失效过程.

研究发现各类裂纹构型扩展的临界应变和最大应变值与裂纹取向密切相关,差别较大.对于本文报道的 $(01-1)[011]$ 裂纹,按上述方法取得 $\varepsilon_{\text{cri}} = 0.06298$, $\varepsilon_{\text{max}} = 0.05698$.

2 模拟结果和分析

在本文分析的所有构型图中,观察平面都取为 $x-y$ 平面.

2.1 $(01-1)[011]$ 裂纹单向拉伸下材料变形与失效机理分析

图 3 为 $(01-1)[011]$ 裂纹构型拉伸时的应力-应变曲线和疲劳载荷下的裂纹长度与循环周次的关系.由图 3 知,单向拉伸载荷作用下 $(01-1)[011]$ 裂纹构型的应力经过了一个比较缓慢的上升过程,而且上升过程为曲线上升,比较复杂,直到 25 700 时间步时,应力开始回落,材料达到极限强度.

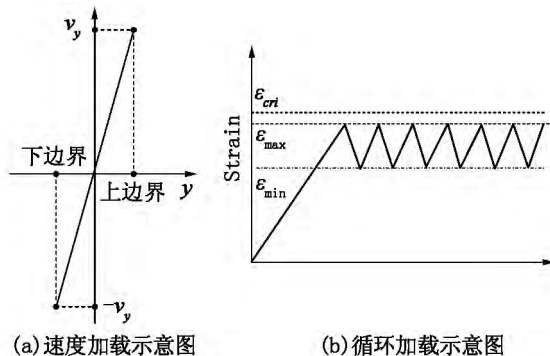


图 2 拉伸和循环加载示意图

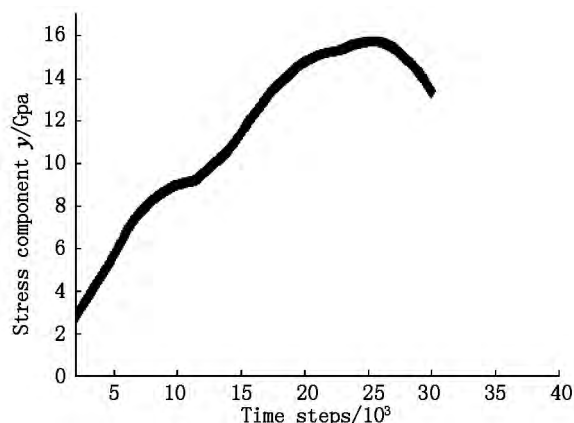


图 3 载荷方向的拉伸应力-时间步关系

在拉伸过程中,裂纹面逐渐张开变大,裂纹前段产生大面积塑性形变,上下滑移面上逐渐产生原子滑移,形成位错(图 4(a)),当加载到 23 500 步时,根据图 4(b) 的中心对称参数(CSP)^[31]云图显示,裂尖前方产生大块面积的不同于 $\alpha\text{-Fe}$ 结构的疑似层错区域,裂纹张口明显增大且呈现典型的钝化特征,裂纹并不明显扩展.通过公共近邻分析技术(CNA)^[32-33],发现图 4(b) 中的 CSP 变化区为密排六方的 HCP 结构,如图 4(d) 所示.随着进一步加载,裂纹张开位继续移加大,相变区往前移动,相变区和位错区进一步扩大,裂尖钝化现象加剧,材料仍能继续承载,直到 25 000 步时,应力曲线开始下降.到 30 000 步时,已经有大量位错和相变区,同时出现大量孪晶区域,而且各区域孪晶方向也不一致,层错区域出现少量因堆垛顺序发生变化而形成的 fcc 结构,如图 4(e).

1956 年, D. Bancroft 等^[34]发现 $\alpha\text{-Fe}$ 中会发生冲击相变现象, F. M. Wang 等^[35]测量出这些相变结构为 hcp 结构, K. S. Cheung 等^[36]和 K. Nishimura 等^[37, 38]等用模拟证明这些相变产生的原因是裂尖处的应力集中现象所导致.为了找出图 4(d) 中 $\text{bcc} \rightarrow \text{hcp}$ 相变的机制,研究了构型发生相变前后材料中原子应力分布情况.当发生 hcp 相变之前,即图 5(a) 缺陷附近区域的应力明显增强,发生应力集中现象,当 hcp 结构产生后,由图 5(b) 可知,此区域的应力随之下降,通过相变,应力得到松弛,只留下相变区边沿还有较大的应力,这些应力会使相变区继续扩大外移,对应图 3 中的应力曲线,在这个阶段也确实有相应的下降波动.根据这些现象可以推断,此处发生 bcc 到 hcp 相变的根本原因,是因为裂纹钝化而产生的应力集中所导致的(这与通常发生的 bcc-fcc 相变是不同的,后者是因为原子之间的滑移而导致堆垛顺序不同而产生的,如图 4(e) 中的 fcc

层错) ,因此材料变形与失效过程中的相变不但可由原子之间的滑移引起的堆垛顺序改变而产生 ,也可由应力导致材料发生相变. 同时 ,通过本文研究 ,

也证实了 D. Bancroft^[34] 等发现的 α -Fe 冲击实验中的相变确实是 bcc-hcp 相变.

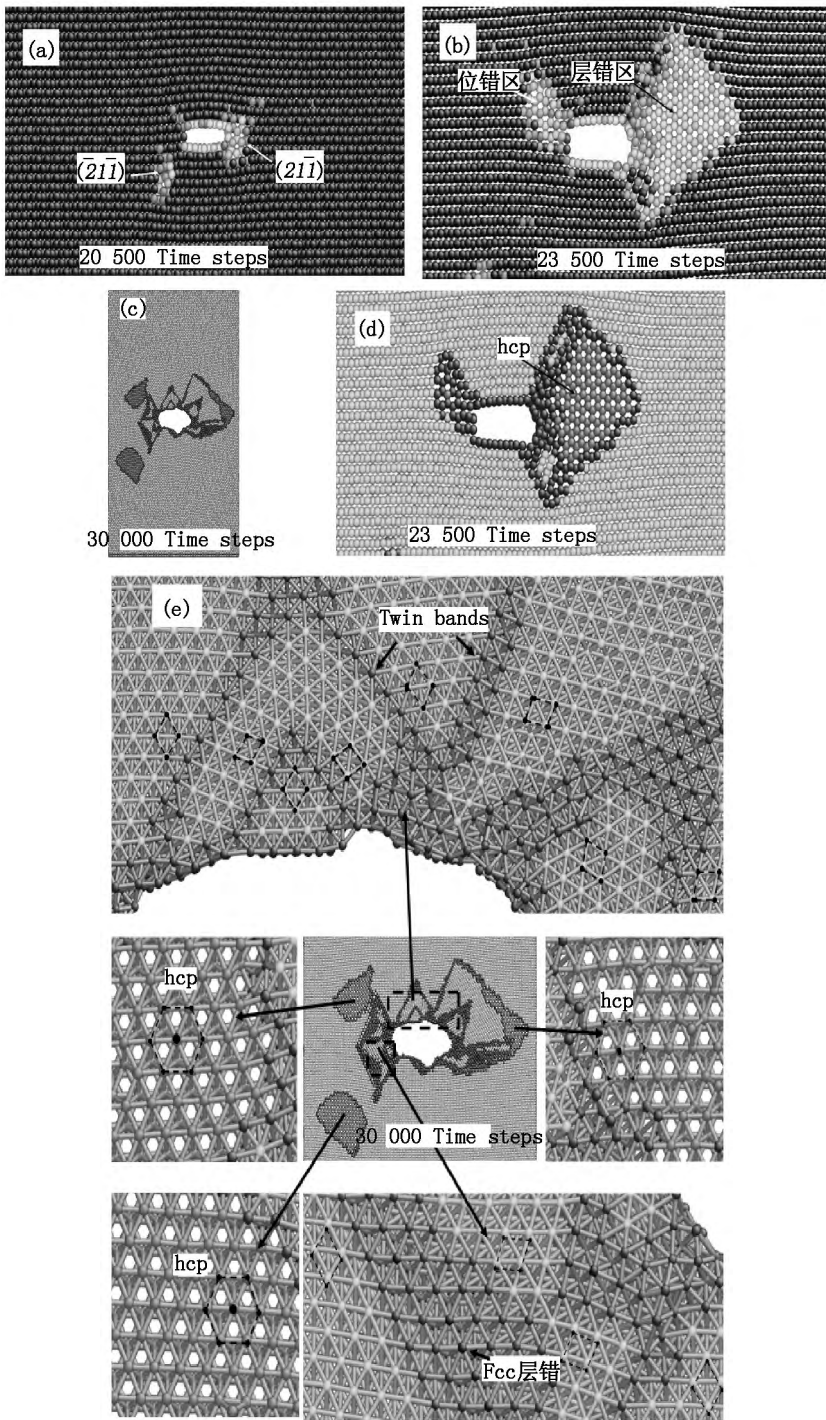


图 4 裂纹构型拉伸过程典型时间步构型图

不过 ,对于裂纹拉伸扩展时 ,在图 3 中 10 000 时间步到 17 000 时间步之间 ,有一个明显的应力波动 ,目前仍未找到具体原因 ,有待后续专门研究. 由于材料变形过程中 ,产生了孪晶、层错以及相

变等现象 ,导致材料拉伸过程中的物理机制相当复杂 ,应力应变曲线也呈现出丰富的变化过程 ,同时 ,也表明孪晶和相变的出现 ,使得本裂纹构型的拉伸强度相较于其它几种构型也是最大的.

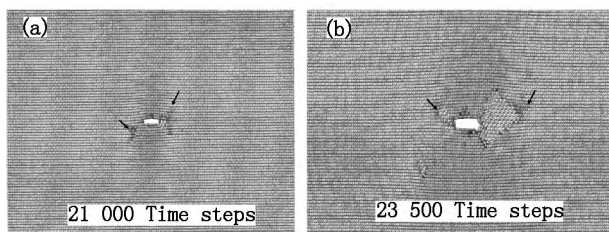


图5 相变前后构型应力云图

2.2 (01-1) [011] 裂纹在循环载荷下的疲劳失效分析

在循环加载的过程中,构型剪切方向出现应力集中区域,导致此区域产生位错,形成塑性区,但此塑性区范围很小,并很快通过位错发射远去,位错发射方向为沿滑移面($\bar{2}11$)和($2\bar{1}1$),裂纹出现严重钝化,发生止裂现象,图6为第1和第12个循环末

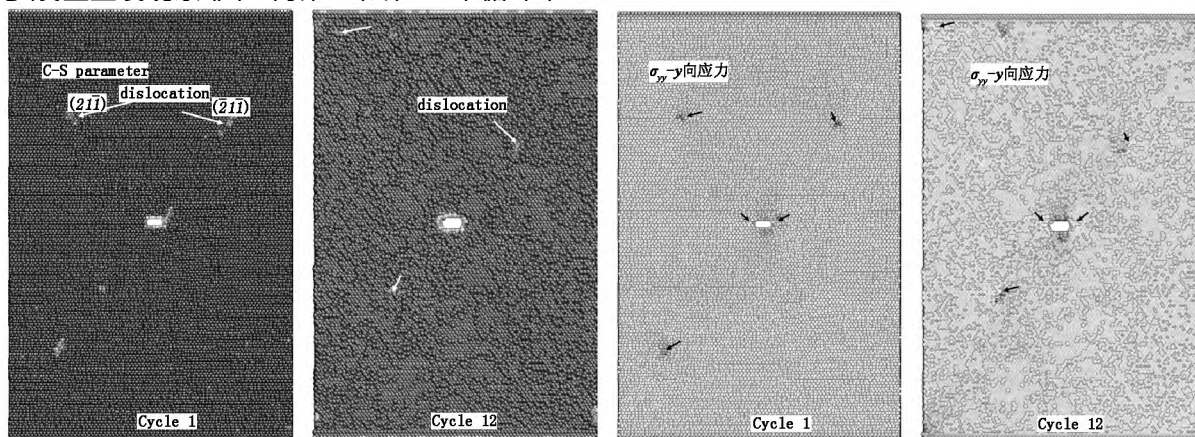


图6 裂纹构型D在各循环结束应变最大时的构型图

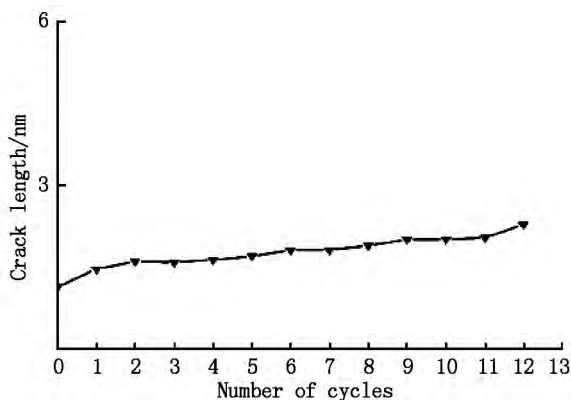


图7 裂纹长度与循环周次关系

3 结论

本文详细分析了含(01-1) [011]型裂纹的单晶 α -Fe在I型单向拉伸和循环载荷作用下变形与失效的微观机理。研究发现,在拉伸载荷作用下,由于裂纹尖端的应力集中现象导致了 bcc-hcp 相变,

原子构型的中心对称参数云图和拉伸方向的应力云图。可以清楚看到,位错在加载过程中,不断从裂尖处发射出去,经过的地方,晶格发生畸变,形成应力集中区域,此区域也随位错不断发射,应力不断得到释放,由于裂尖处产生的应力已随位错发射而得到释放,所以裂尖处的应力不足以使裂纹扩展,因此裂尖也就出现钝化现象。随着循环次数的增加,应力发射、位错发射不断重复此过程,裂纹扩展出现止裂现象,到第12个循环结束,裂纹只仅仅扩展了约1 nm的长度,见图7。同时,在循环加载过程中,由于产生的应力很快随位错发射出去,材料中没有足够的能使 α -Fe产生相变的应力,所以与拉伸过程不同,循环加载过程中未发现相变或孪晶现象。

同时随着相变区的扩大和迁移,裂尖处应力得到释放而使裂纹呈现严重钝化现象,整个过程还伴随着层错、孪晶等现象的发生;在循环载荷作用下,由于变形导致的位错沿滑移面($\bar{2}11$)和($2\bar{1}1$)快速发射,从而使得裂尖处应力得以及时释放,致使裂纹呈现严重钝化而出现接近止裂现象,疲劳裂纹扩展相当缓慢,整个疲劳加载过程无孪晶、相变等现象发生。总之,含(01-1) [011]型裂纹的 α -Fe的变形与失效过程,是一个与加载方式相关的位错、层错、孪晶和相变等多种微观机制共同作用的复杂过程。

致谢:感谢四川理工学院高性能科学与工程计算中心提供计算支持。

4 参考文献

- [1] Shackelford J F. Introduction to Materials Science for Engineers [M]. 6th ed. New Jersey: Prentice Hall 2004.
- [2] Eigler D M, Schweizer E K. Positioning single atoms with a

- scanning tunnelling microscope [J]. *Nature*, 1990, 344 (6266): 524-526.
- [3] Argon A S, Yip S. Molecular dynamics simulation of crack tip processes in α -iron and copper [J]. *Journal of Applied Physics*, 1983, 54(9): 4864-4878.
- [4] Mullins M. Computer simulation of fracture using long range pair potentials [J]. *Acta Metallurgica*, 1984, 32(3): 381-388.
- [5] Dienes G J, Paskin A. Molecular dynamic simulations of crack propagation [J]. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 1987, 48(11): 1015-1033.
- [6] Zhang Yongwei, Wang Ziqiang, Tang Qiheng. Simulation of nucleation and emission of dislocations by molecular-dynamics method [J]. *Journal of Applied Physics*, 1995, 77(6): 2393-2399.
- [7] Zhou S J, Lomdahl P S, Voter A F, et al. Three-dimensional fracture via large-scale molecular dynamics [J]. *Engineering Fracture Mechanics*, 1998, 61(1): 173-187.
- [8] Komanduri R, Chandrasekaran N, Raff L M. Molecular dynamics (MD) simulation of uniaxial tension of some single-crystal cubic metals at nanolevel [J]. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2001, 43(10): 2237-2260.
- [9] Kuchеров L, Tadmor E B. Twin nucleation mechanisms at a crack tip in an hcp material: Molecular simulation [J]. *Acta materialia*, 2007, 55(6): 2065-2074.
- [10] Cheng Shaohuan, Sun C T. Size-dependent fracture toughness of nanoscale structures: a crack-tip stress approach in molecular dynamics [J]. *Journal of Nanomechanics and Micromechanics*, 2014, 4(4): 1-3.
- [11] Wu Wenping, Yao Zongzhuan. Sample size dependence of crack-tip microstructure and stress evolutions in single crystal nickel [J]. *CMES: Computer Modeling in Engineering & Sciences*, 2013, 93(4): 235-252.
- [12] Chang Winjin, Fang Tehua. Influence of temperature on tensile and fatigue behavior of nanoscale copper using molecular dynamics simulation [J]. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 2003, 64(8): 1279-1283.
- [13] Nishimura K, Miyazaki N. Molecular dynamics simulation of crack growth under cyclic loading [J]. *Computational Materials Science*, 2004, 31(3): 269-278.
- [14] Potirniche G P, Horstemeyer M F, Jelinek B, et al. Fatigue damage in nickel and copper single crystals at nanoscale [J]. *International Journal of Fatigue*, 2005, 27(10): 1179-1185.
- [15] Tang Tian, 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.
- [16] Tang Tian, Kim S, Jordon J B, et al. Atomistic simulations of fatigue crack growth and the associated fatigue crack tip stress evolution in magnesium single crystals [J]. *Computational Materials Science*, 2011, 50(10): 2977-2986.
- [17] Anna Machová, Glenn E Beltz. Ductile-brittle behavior of (001) [110] nano-cracks in bcc iron [J]. *Materials Science and Engineering A*, 2004(387/389): 414-418.
- [18] 吴映飞, 王崇愚, 郭雅芳. 体心立方铁中裂纹扩展的结构演化研究 [J]. *自然科学进展*, 2005, 15(2): 206-211.
- [19] 曹莉霞, 王崇愚. α -Fe 裂纹的分子动力学研究 [J]. *物理学报*, 2007, 56(1): 413-422.
- [20] Finnis M W, Sinclair J E. A simple N-body potential for transition metals [J]. *Philosophical Magazine A*, 1984, 50(1): 45-55.
- [21] Uhnáková A, Machov Uhnáková A, Hora P. 3D atomistic simulation of fatigue behavior of a ductile crack in bcc iron [J]. *International Journal of Fatigue*, 2011, 33(9): 1182-1188.
- [22] Uhnáková A, Pokluda J, Machová A, et al. 3D atomistic simulation of fatigue behavior of a ductile crack in bcc iron loaded in mode II [J]. *Computational Materials Science*, 2012, 61(8): 12-49.
- [23] Uhnáková A, Pokluda J, Machová A, et al. 3D atomistic simulation of fatigue behaviour of cracked single crystal of bcc iron loaded in mode III [J]. *International Journal of Fatigue*, 2011, 33(12): 1564-1573.
- [24] Plimpton S J. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics [J]. *Journal of Computational Physics*, 1995, 117(1): 1-49.
- [25] 冯端. 金属物理学 [M]. 北京: 科学出版社, 1999.
- [26] Hu S Y, Ludwig M, Kizler P, et al. Atomistic simulations of deformation and fracture of α -Fe [J]. *Modelling & Simulation in Materials Science & Engineering*, 1998, 6(5): 567-586.
- [27] Mendeleev M, Han S, Srolovitz D, et al. Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron [J]. *Philosophical Magazine*, 2003, 83(35): 3977-3994.
- [28] Leese J, Lord A E. Elastic stiffness coefficients of single-crystal iron from room temperature to 500°C [J]. *Journal of Applied Physics*, 1968, 39(8): 3986-3988.
- [29] Machová A. Molecular dynamic simulation of microcrack initiation by impact loading [J]. *Materials Science and Engineering: A*, 1992, 149(2): 153-165.
- [30] Potirniche G P, Horstemeyer M F, Jelinek B, et al. Fatigue damage in nickel and copper single crystals at nanoscale [J]. *International Journal of Fatigue*, 2005, 27(10/11/12): 1179-1185.

- [31] Kelchner C L ,Plimpton S J ,Hamilton J C. Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation [J]. Physical Review B ,1998 ,58(17) : 11085-11088.
- [32] Honeycutt J D ,Andersen H C. Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones clusters [J]. Journal of Physical Chemistry ,1987 ,91(19) : 4950-4963.
- [33] Yuan Yuquan ,Zeng Xiangguo ,Chen Huayan ,et al. Molecular dynamics simulation on microstructure evolution during solidification of copper nanoparticles [J]. Journal of the Korean Physical Society ,2013 ,62(11) : 1645-1651.
- [34] Bancroft D ,Peterson E L ,Minshall S. Polymorphism of iron at high pressure [J]. Journal of Applied Physics , 2004 ,27(3) : 291-298.
- [35] Wang F M ,Ingalls R. Iron bcc-hcp transition: local structure from X-ray-absorption fine structure [J]. Physical Review B ,1997 ,57(10) : 5647-5654.
- [36] Cheung K S ,Harrison R J ,Yip S. Stress induced martensitic transition in a molecular dynamics model of α -iron [J]. Journal of applied physics ,1992 ,71(8) : 4009-4014.
- [37] Nishimura K ,Miyazaki N. Molecular dynamics simulation of crack propagation in polycrystalline material [J]. CMES- Computer Modeling in Engineering and Sciences , 2001 ,2(2) : 143-154.
- [38] Nishimura K ,Miyazaki N. Molecular dynamics simulation of crack growth under cyclic loading [J]. Computational materials science ,2004 ,31(3) : 269-278.

Molecular Dynamics Simulation for bcc Iron with Central Crack under Uniaxial Tensile and Fatigue Loading

YUAN Yuquan¹ ,ZENG Xiangguo² ,HU Yanfei¹

(1. School of Science ,Sichuan University of Science & Engineering ,Zigong Sichuan 643000 ,China;

2. College of Architecture and Environment ,Sichuan University ,Chengdu Sichuan 610065 ,China)

Abstract: The mechanical behaviors around a crack tip for α -Fe with $(01 - 1)$ $[011]$ centered pre - crack defect under uniaxial tensile and fatigue loading was studied using molecular dynamics simulation method. The phase transition from bcc to hcp was revealed under uniaxial tensile loading ,which induced by stress concentration ,and the phenomenons of crack tip blunting ,stacking faults and twins were found under tensile loading. While under fatigue loading ,the fatigue crack grows very slowly because the quick emission of dislocations along the $(-2 1 - 1)$ and $(2 - 1 1)$ slip plane release the stress around crack tip in time ,and there is no twin and phase transition happen throughout the process of fatigue loading. The results indicate that the mechanism of deformation and failure for α -Fe with crack defect is a complicated process ,which is the result that many mechanisms act together ,such as dislocation emission ,loading way ,twin and phase transition ,etc.

Key words: molecular dynamics simulation; central crack; α -Fe; tension; fatigue; LAMMPS

(责任编辑: 冉小晓)