

## 吸附促进位错发射、运动以及裂纹扩展的 分子动力学模拟\*

李忠吉 刘辉 高克玮 乔利杰 褚武扬

(北京科技大学材料物理系, 北京 100083)

**摘要** 根据反演法获得的对势和 EAM 多体势计算了纯 Al 位错发射的临界应力强度因子  $K_{Ie}$  以及 Griffith 裂纹解理扩展的临界应力强度因子  $K_{IG}$ . 结果表明, 用对势算出的值和断裂力学计算结果更相近. 因此, 用对势来研究吸附的影响是可行的. 分子动力学模拟表明, Ga 吸附在裂纹表面将使  $K_{IG}=0.42 \text{ MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$  降至  $K_{IG}^*=0.32 \text{ MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$ , 这表明吸附使表面能  $\gamma$  降至  $\gamma^*(=0.58\gamma)$ . Ga 吸附使  $K_{Ie}=0.31 \text{ MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$  降至  $K_{Ie}^*=0.24 \text{ MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$ ; Ga 吸附使位错运动的临界分切应力从  $\tau_c=2.05 \text{ MPa}$  降至  $\tau_c^*=1.82 \text{ MPa}$ . 这就表明, Ga 吸附后能降低 Al 的表面能, 从而促进位错发射和运动.

**关键词** Al, Ga, 分子动力学模拟, 位错发射, 运动, 裂纹解理

**中图分类号** TG111.91, O647.32 **文献标识码** A **文章编号** 0412-1961(2001)10-1013-05

## MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF ADSORPTION-ENHANCED DISLOCATION EMISSION, MOTION AND CRACK PROPAGATION

Li Zhongji, Liu Hui, Gao Kewei, Qiao Lijie, Chu Wuyang

Department of Materials Physics, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083

Correspondent: Chu Wuyang, professor, Tel: (010)62332345, Fax: (010)62332345,

E-mail: lqiao@ustb.edu.cn

Manuscript received 2001-05-15, in revised form 2001-06-25

**ABSTRACT** The effect of adsorption of liquid metal Ga on dislocation emission and motion, and crack propagation in Griffith condition for aluminium has been investigated using the pair potentials obtained based on the first principle calculation and the Mobius 3D lattice inversion formula. The molecular dynamics simulation in quasi-3D crystal shows that adsorption of Ga decreases the critical stress intensity for crack propagation in Griffith condition from  $K_{IG}=0.42 \text{ MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$  to  $K_{IG}^*=0.32 \text{ MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$  and then decreases the surface energy from  $\gamma$  to  $\gamma^*=0.58 \gamma$ . The adsorption of Ga atoms decreases the critical stress intensity for dislocation emission from  $K_{Ie}=0.31 \text{ MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$  to  $K_{Ie}^*=0.24 \text{ MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$  and reduces the critical shear stress for dislocation motion from  $\tau_c=2.05 \text{ MPa}$  to  $\tau_c^*=1.82 \text{ MPa}$ . Adsorption of Ga can enhance dislocation emission and motion.

**KEY WORDS** molecular dynamic simulation (MDS), adsorption of Ga, dislocation emission and motion (DSM), crack propagation

Lynch 对比分析断口形貌后认为, 液体金属脆是吸附促进位错发射、运动而导致裂纹在低应力下形核、扩展的结果 [1]. 文献 [2—4] 的透射电镜 (TEM) 中原位观察表明, 液体金属 (Ga, Hg) 吸附在金属 (Al, Ti, Al 合金) 表

面后首先促进位错发射和运动, 当它发展到临界条件后就导致脆性微裂纹的形核和扩展, 这和氢脆 [5] 以及应力腐蚀 [6] 类似. 这就表明, 这些环境脆断均以位错发射、运动 (局部塑性变形) 为先决条件.

用分子动力学方法 (MDS) 可模拟位错发射以及无位错区的形成 [7—9]. 如果能找到合适的互作用势函数, 则可研究液体金属吸附对位错发射、运动的影响. MDS 计算表明, 对 fcc 的 Cu 和 Al, 当裂纹面和滑移面夹角小于某一值 (如  $15^\circ$ ) 时, 则不发射位错而是解理扩展 [7,8]. 故有人认为材料的韧性依赖裂纹面取向. 这是一种误解.

\* 国家重点基础研究规划资助项目 G19990650

收到初稿日期: 2001-05-15, 收到修改稿日期: 2000-06-25

作者简介: 李忠吉, 男, 1961 年生, 朝鲜民主主义人民共和国, 博士

因为以往的计算均用二维或准三维模拟,沿厚度方向一个周期(6层)的原子均投影到(112)面,这样只显示一个滑移面(111)。当裂纹面沿(111)面时,该面上的分切应力为零,从而位错不能发射和运动,Griffith条件满足。当 $K_I=K_{IG}=\sqrt{2\gamma/A}$ ( $A$ 是和刚度系数有关的常数)<sup>[7]</sup>时,裂纹就解理扩展。但对真实的三维晶体有4个滑移面,当裂纹面沿(111)时,其它滑移面上的分切应力不为零,从而位错可沿这些面发射和运动,而不会优先沿(111)面发生解理。如采用三维MDS则可澄清这个问题。材料断裂韧性 $K_{IC}=\sqrt{(2\gamma+\gamma_p)/A}$ ,其中 $\gamma_p$ 为塑变功, $A$ 和各向异性材料的刚度系数有关<sup>[10]</sup>。用准三维MDS模拟,当裂纹面沿滑移面时, $\gamma_p=0$ ,只能求出 $K_{IG}=\sqrt{2\gamma/A}$ ,而无法获得 $K_{IC}$ 。求出 $K_{IG}$ 就可计算表面能。

用MDS来研究液体金属吸附对位错发射以及 $K_{IG}$ 或 $\gamma$ 的影响时,关键是要找到合适的相互作用势。对Al或者Cu,Finnis和Sinclair发展的镶嵌原子(EAM)多体势<sup>[11,12]</sup>已被广泛应用<sup>[8,9]</sup>。由于缺少实验数据,无法模拟Al-Ga(Ga为液体金属)的EAM多体势。另一方面,用反演方法已找到Al,Al-H<sup>[13]</sup>以及Al-Ga<sup>[14]</sup>的对势,并用它研究了H和Ga对发射位错临界应力强度因子 $K_{Ic}$ 的影响<sup>[13,14]</sup>。但在文献[14]中用EAM多体势计算纯Al的 $K_{Ic}$ ,而用对势计算Ga吸附后的 $K_{Ic}^*$ 。由于所用势的类型不同,所得结论(Ga吸附降低 $K_{Ic}$ )就有问题。为此本文的第一个目的将首先证明反演对势的合理性。对纯Al用EAM多体势和反演法获得的对势分别计算发射位错的临界应力强度因子 $K_{Ic}$ 以及裂纹扩展的 $K_{IG}$ ,并和断裂力学计算结果对比,由此即可判定利用纯Al对势的合理性。本文的第二个目的是用Al和Al-Ga对势来研究Ga吸附对 $K_{Ic}$ 和 $K_{IG}$ (或 $\gamma$ )的影响。在晶体中引入一个稳定的位错后,就可用分子动力学模拟计算位错开始运动的临界应力强度因子或临界分切应力;进一步可研究Ga吸附后的影响。因此,本文的第三个目的是研究Ga吸附对位错运动临界切应力的影响。

## 1 势函数及计算过程

用反演方法计算Al-Ga对势的方法和Al-H<sup>[13]</sup>相同。首先由第一原理算出Rose方程的平衡结合能 $E_0$ 、体积模量 $K$ 以及点阵平衡常数 $a_0$ ,见表1。用反演方法<sup>[13]</sup>,可获得Al-Al, Ga-Ga以及Al-Ga原子之间的对势,如图1。

表1 用第一原理算出的 $E_0$ 、 $K$ 和 $a_0$ 值

Table 1  $E_0$ ,  $K$  and  $a_0$  calculated from the first principle

System	$E_0, 10^{-19}$ J	$K$ , GPa	$a_0, 10^{-10}$ m
Al	5.34	99.0	4.03
Ga	5.15	80.5	4.17
Al-Ga	5.04	68.6	3.24

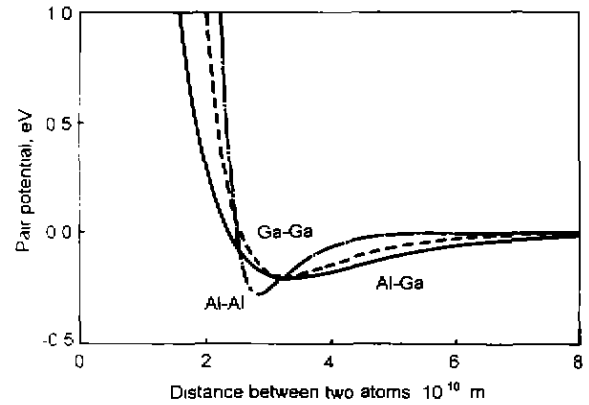


图1 Al, Ga以及Al-Ga的对势

Fig.1 The pair potentials for Al, Ga and Al-Ga

对势函数微分可求原子之间的相互作用力,由Newton第二定律可求出每个原子的加速度,用蛙跳法可计算每个原子的位置和速度<sup>[15]</sup>。在0K下模拟,在计算过程中,当原子温度高于0K时,要对晶体原子运动速度重新标定,使其回到0K<sup>[15]</sup>。单边裂纹延长线方向为 $x$ ,长为 $40a_0$ ,裂纹面法线方向为 $y$ ,宽为 $35a_0$ ,裂纹面和(111)滑移面夹角 $\theta$ 分别为 $0^\circ$ 和 $45^\circ$ 。 $z$ 方向沿 $[11\bar{2}]$ ,取一个周期,裂纹长为 $15a_0$ ,宽为 $5a_0$ ,原子总数约为6400个。加载过程中 $x, y$ 方向选择位移边界条件,各原子位移由断裂力学给出<sup>[10]</sup>, $z$ 方向选择周期性边界条件。加载速率为 $0.05 \text{ MPa} \cdot \sqrt{\text{m}}/\text{ps}$ ,时间步长为 $0.005 \text{ ps}$ 。

## 2 计算结果

对纯Al,当 $\theta=45^\circ$ 时,如用对势,则加载到 $K_I=0.31 \text{ MPa} \cdot \sqrt{\text{m}}$ ,沿(111)滑移面发射第一个偏位错,如图2a。这表明发射位错的临界应力强度因子 $K_{Ic}=0.31 \text{ MPa} \cdot \sqrt{\text{m}}$ 。如用多体势, $\theta=45^\circ$ 时可算出 $K_{Ic}=0.43 \text{ MPa} \cdot \sqrt{\text{m}}$ 。把96个Ga原子放在裂纹内侧模拟液体金属吸附,利用Al-Ga, Ga-Ga以及Al-Al的对势(见图1)来计算,则当 $K_{Ic}^*=0.24 \text{ MPa} \cdot \sqrt{\text{m}}$ 时( $\theta=45^\circ$ ),裂纹就发射第一个偏位错,如图2b。

对纯Al,当 $\theta=0^\circ$ 时裂尖并不发射位错。如用对势,则当 $K_I=0.42 \text{ MPa} \cdot \sqrt{\text{m}}$ 时,沿(111)面的裂纹就解理扩展,如图3a。由此可求出在Griffith条件下裂纹扩展的临界应力强度因子 $K_{IG}=0.42 \text{ MPa} \cdot \sqrt{\text{m}}$ 。如用多体势,则 $K_{IG}=0.50 \text{ MPa} \cdot \sqrt{\text{m}}$ 。把96个Ga原子放在裂纹内侧,则 $\theta=0^\circ$ 时,裂纹也不发射位错,当 $K_{IG}^*=0.32 \text{ MPa} \cdot \sqrt{\text{m}}$ 时,裂纹沿(111)面解理,如图3b。分子动力学的计算结果见表2。

对纯Al,在离裂纹 $r=12b$ , $\theta=45^\circ$ 的滑移面上引入一个刃型位错 $A'$ 。根据刃型位错的位移场,使位错周围的原子产生一个合适的位移,这样一来在 $A'$ 处形成一个稳定的位错,如图4a所示。用对势模拟,当加载至 $K_I=$

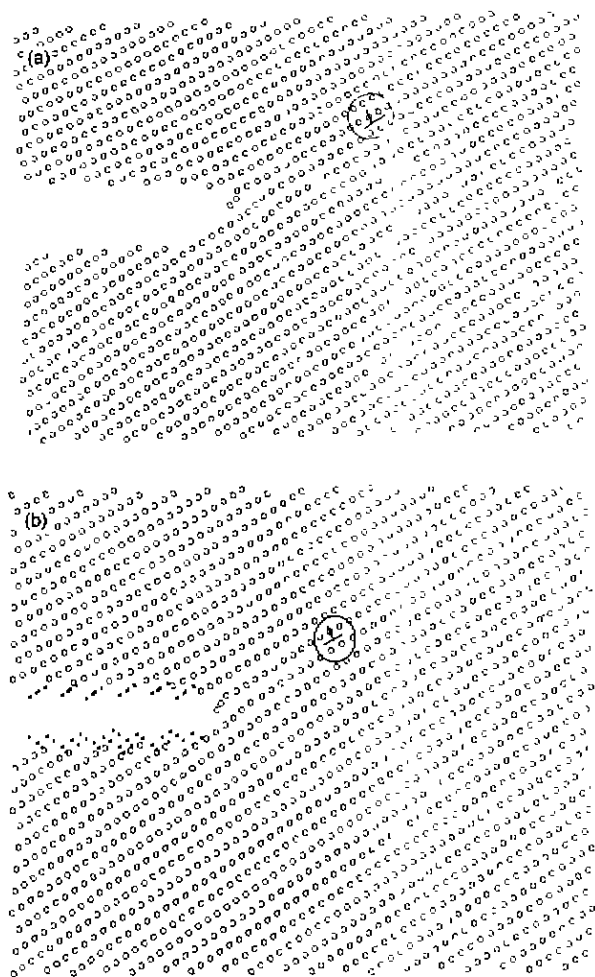


图 2 Ga 吸附对裂纹 ( $\theta=45^\circ$ ) 发射第一个偏位错的影响 (对势)

Fig.2 Effect of Ga absorption on Schockley dislocation emission ( $\theta=45^\circ$ , pair potential)  
 (a) pure Al,  $K_{Ie}=0.31 \text{ MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$   
 (b) absorption of 96 Ga atoms on the crack surface,  $K_{Ie}^*=0.24 \text{ MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$

$7.00 \times 10^{-4} \text{ MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$  时,  $A'$  位错沿滑移面向前运动一个原子间距至  $B'$  位置, 如图 4b 所示. 由此可知, 在纯 Al 中使位错开始运动的临界应力强度因子  $K_{Im} = 7.00 \times 10^{-4} \text{ MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$ . 对纯 Al, 如用 EAM 多体势模拟, 则  $K_{Im} = 7.50 \times 10^{-4} \text{ MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$ . 当裂纹表面吸附 96 个 Ga 原子后也可用同样方法在  $A'$  处产生一个稳定的刃型位错. 开始加载时, 当  $K_I = 6.30 \times 10^{-4} \text{ MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$ ,  $A'$  位错沿滑移面向前运动一个原子间距至  $B'$  位置. 由此可以知道, 当 Ga 吸附后, 位错开始运动的临界应力强度因子由  $K_{Im} = 7.00 \times 10^{-4} \text{ MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$  降为  $K_{Im}^* = 6.30 \times 10^{-4} \text{ MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$ . 这表明 Ga 吸附后不仅促进了位错发射, 也促进了位错运动. 用分子动力学模拟所算出的  $K_{Im}$  值亦见表 2.

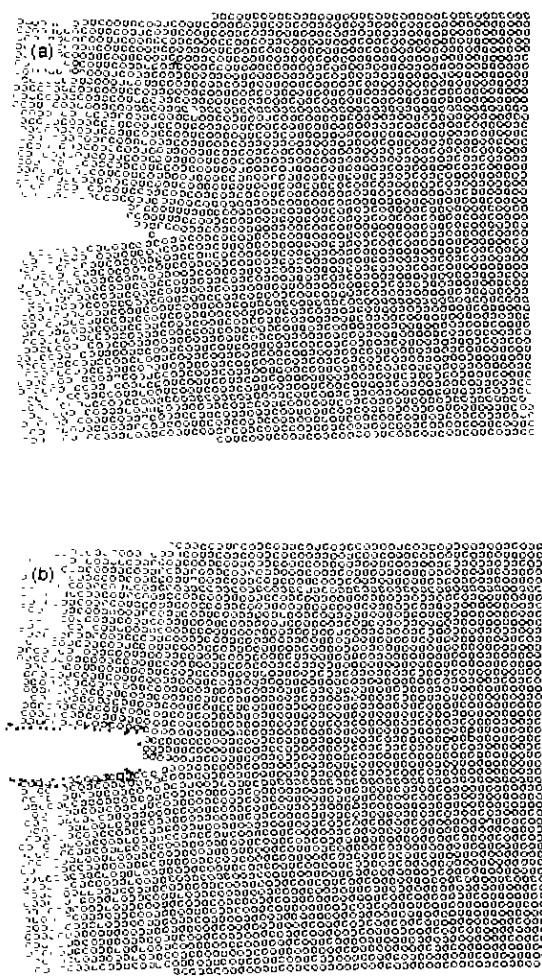


图 3 Ga 吸附对 Griffith 裂纹 ( $\theta = 0^\circ$ ) 解理扩展的影响

Fig.3 Effect of Ga absorption on the crack propagation in Griffith condition ( $\theta = 0^\circ$ , pair potential)  
 (a) pure Al,  $K_{IG}=0.42 \text{ MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$   
 (b) absorption of 96 Ga atoms on the crack surface,  $K_{IG}^*=0.32 \text{ MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$

表 2 分子动力学模拟获得的临界应力强度因子

Table 2  $K_{Ie}, K_{IG}, K_{Im}, K_{Ie}^*, K_{IG}^*$  and  $K_{Im}^*$  calculated using MDS

System	Potential	$K_{Ie}$	$K_{IG}$	$K_{Im}$
		$\text{MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$	$\text{MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$	$10^{-4} \text{ MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$
Al	EAM	0.43	0.50	7.50
	Pair	0.31	0.42	7.00
		$K_{Ie}^*$	$K_{IG}^*$	$K_{Im}^*$
System	Potential	$\text{MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$	$\text{MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$	$10^{-4} \text{ MPa}\cdot\sqrt{\text{m}}$
Al+Ga	Pair	0.24	0.32	6.30

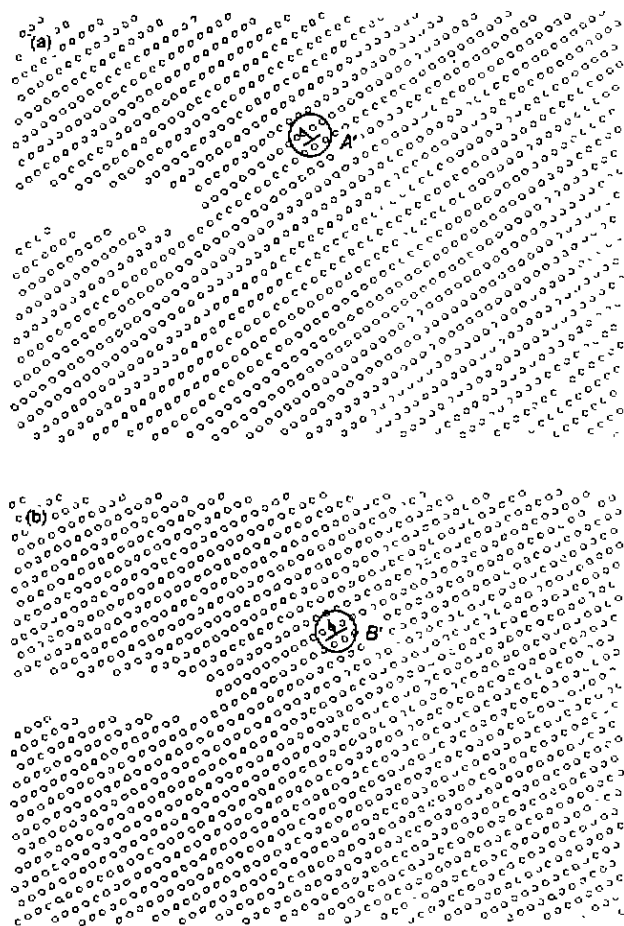


图4 加载至  $K_{IIm}=7.0 \times 10^{-4}$  MPa $\cdot\sqrt{m}$  时纯 Al 中一稳定的位错  $A'$  运动一个原子间距至  $B'$  位置

Fig.4 A stable edge dislocation  $A'$  in pure Al (a) will move one atomic distance to  $B'$  when  $K_{IIm} = 7.00 \times 10^{-4}$  MPa $\cdot\sqrt{m}$  (b)

### 3 讨论

利用断裂力学可算出<sup>[16]</sup>

$$K_{Ie} = \frac{2}{\sin \theta \cos \theta / 2} \left\{ \frac{\mu b}{(1-\nu)\sqrt{8\pi r_0}} + \sqrt{2\pi r_0} \left[ \tau_f + \frac{4\gamma \sin \theta \sqrt{e}}{\pi r_0 (1+e^3)} \right] \right\} \quad (1)$$

式中,  $b$  为位错的 Burgers 矢量模,  $\tau_f$  为摩擦力,  $\gamma$  为表面能,  $e=2.72$ ,  $r_0$  为位错中心半径.  $r_0$  是一个很难估算的量. Rice 最初认为  $r_0=2b$ <sup>[17]</sup> (对 Al), 随后认为对 fcc 的刃位错,  $r_0 = \mu b^2 / 16\pi(1-\nu)\gamma_{us} = b/0.58\pi(1-\nu) = 0.85b$ <sup>[18]</sup>.  $\tau_f$  项对  $K_{Ie}$  的贡献很小, 可忽略. 取  $b=1.65 \times 10^{-10}$  m,  $\gamma=1.14$  J/m<sup>2</sup><sup>[19]</sup>,  $\mu=25.1$  GPa<sup>[17]</sup>,  $\nu=0.347$  MPa,  $\theta=45^\circ$ , 代入式 (1) 则可得到  $K_{Ie}=0.25$  MPa $\cdot\sqrt{m}$  ( $r_0=2b$ ) 或  $K_{Ie}=0.38$  MPa $\cdot\sqrt{m}$  ( $r_0=0.85b$ ). Ohr 给出纯 Al 的  $K_{Ie}=0.29$  MPa $\cdot\sqrt{m}$

( $\theta=70^\circ$ ) 和  $K_{Ie}=0.35$  MPa $\cdot\sqrt{m}$  ( $\theta=45^\circ$ )<sup>[16]</sup>.

Griffith 条件满足时  $K_{IG}$  仅和表面能  $\gamma$  有关, 即<sup>[7]</sup>

$$K_{IG} = \sqrt{2\gamma/A} \quad (2)$$

对 Al, 和刚度系数有关的常数  $A = 14.68 \times 10^{-12}$  m<sup>3</sup>/J<sup>[7]</sup>, Al 的表面能  $\gamma=0.84$  J/m<sup>2</sup><sup>[6]</sup> 或者  $\gamma=1.14$  J/m<sup>2</sup><sup>[19]</sup>, 代入式 (2) 中则可以得到  $K_{IG}=0.34$  MPa $\cdot\sqrt{m}$  ( $\gamma=0.84$  J/m<sup>2</sup>) 或者  $K_{IG}=0.40$  MPa $\cdot\sqrt{m}$  ( $\gamma=1.14$  J/m<sup>2</sup>). Ohr 给出了  $K_{IG}=0.34$  MPa $\cdot\sqrt{m}$ <sup>[16]</sup>. 与表 2 分子动力学计算结果比较可知. 无论是  $K_{Ie}$  还是  $K_{IG}$ , 用对势得到的数值更接近用断裂力学方法算出的值. 故用反演方法来计算  $K_{Ie}$  或  $K_{IG}$  是合理的. 用对势来研究 Ga 吸附后对  $K_{Ie}$  和  $K_{IG}$  的影响是可信的.

表 2 的计算表明, Ga 吸附后  $K_{IG}$  明显下降. 由式 (2) 可以知道,  $\gamma^*/\gamma = (K_{IG}^*/K_{IG})^2 = 0.58$ . 这表明液体金属吸附能使表面能从  $\gamma=1.14$  J/m<sup>2</sup> 降至  $\gamma^*=0.58\gamma=0.66$  J/m<sup>2</sup>. 因为局部弹性模量  $\mu$  和  $\gamma$  有关, 例如<sup>[20]</sup>

$$\mu = \frac{\pi^2 d \gamma}{2(1+\nu)a^2} \quad (3)$$

其中,  $d$  为滑移面间距,  $a$  为原子间距. 吸附降低  $\gamma$  就会使被吸附处的局部弹性模量  $\mu$  降低. 即吸附 Ga 后局部弹性模量  $\mu^* = \mu\gamma^*/\gamma = 16.62$  GPa. 可认为 Ga 吸附并未改变  $r_0$ . 把  $\mu^*$  和  $\gamma^*$  代入式 (1) 可计算出  $K_{Ie}^*=0.24$  MPa $\cdot\sqrt{m}$ . 这与表 2 MDS 的计算结果  $K_{Ie}^*=0.24$  MPa $\cdot\sqrt{m}$  一致. 由此可知, Ga 吸附使  $\mu$  和  $\gamma$  下降就会使  $K_{Ie}$  下降. 由此可以认为, 吸附降低表面能后就会降低  $K_{Ie}$ , 从而促进位错发射.

裂纹前端  $A'(r, \theta)$  处沿滑移面的分切应力<sup>[10]</sup>

$$\tau = \frac{K_I}{2\sqrt{2\pi r}} \sin \theta \cos(3\theta/2) \quad (4)$$

代入  $K_{IIm} = 7.00 \times 10^{-4}$  MPa $\cdot\sqrt{m}$ ,  $r = 12b$ ,  $\theta = 45^\circ$ , 可得位错运动的临界分切应力  $\tau_c = 2.05$  MPa. 如果吸附 Ga, 将使位错运动的临界分切应力降为  $\tau_c^* = 1.82$  MPa. 这表明 Ga 吸附能降低位错运动的阻力, 促进位错运动.

Ga 吸附能促进位错的运动的原因如下. 当一个贯穿试样厚度 ( $L$ ) 的位错运动  $\Delta x$  时所做的功为<sup>[21]</sup>

$$\Delta W = -\tau L b \Delta x + \tau_f L b \Delta x + 2\gamma b \Delta x \sin(\alpha + \beta) \quad (5)$$

其中,  $\tau_f$  为点阵摩擦应力,  $\alpha$  为位错线和运动方向的夹角,  $\beta$  为位错线和 Burgers 矢量的夹角,  $\tau$  为外加应力. 位错运动的临界条件为  $\Delta W=0$ . 对于图 4a 所示的贯穿型刃型位错,  $\beta=0$ , 位错线运动方向和位错线垂直,  $\alpha = \pi/2$ . 由式 (5) 可知, 使位错运动的临界分切应力为

$$\tau_c = \frac{2\gamma}{L} + \tau_f \quad (6)$$

对单个位错,  $\tau_f$  就等于 Peierls-Nabarro 力, 即<sup>[22]</sup>

$$\tau_f = \frac{2\mu}{(1-\nu)} \exp(-4\pi r_0/b) \quad (7)$$

如  $r_0 = a/2(1-\nu)$ <sup>[22]</sup>, 其中  $a = 2.34 \times 10^{-10}$  m, 是滑移面间距 (Al), 则  $\tau_f = 0.09$  MPa. 如  $r_0 = 0.85$ , 则  $\tau_f = 1.74$  MPa.

因为分子动力学计算时厚度方向利用了周期性边界条件, 故相对长度和宽度, 厚度  $L$  应当极大. 由于无法确定具体  $L$  值, 从而无法定量计算  $\tau_c$ . 但是 Ga 吸附后的表面能  $\gamma^*$  降至  $0.58\gamma$ , 由式 (6) 可知, 位错运动阻力也从  $\tau_c$  降为  $\tau_c^*$ .

吸附促进位错发射及运动, 这和吸附导致脆断并不矛盾. 因为环境因素 (液体金属, 氢, 应力腐蚀) 促进位错发射、运动的同时也使应变高度局部化, 当宏观应变还很小时局部应变就达到临界值, 裂纹形核、扩展直至断裂, 从而使断裂应变 (整个试样的平均应变) 明显下降. 在低的  $K_{Ic}$  下位错就能发射、运动, 从而在低的  $K_{Ic}$  下裂纹就形核 (它是位错发射、运动发展到临界条件、局部应力集中等于原子键合力的结果)<sup>[2-4]</sup>, 即吸附能使材料的断裂韧性  $K_{Ic}$  下降.

#### 4 结论

(1) Ga 吸附在纯 Al 的裂纹表面, 使 Griffith 裂纹解理扩展的临界应力强度因子  $K_{IG} = 0.42$  MPa $\cdot\sqrt{m}$  降至  $K_{IG}^* = 0.32$  MPa $\cdot\sqrt{m}$ , 这表明吸附后表面能  $\gamma$  降至  $\gamma^* = 0.58\gamma$ .

(2) Ga 吸附以后能够促进位错的发射, 使发射位错的临界应力强度因子从  $K_{Ie} = 0.31$  MPa $\cdot\sqrt{m}$  降为  $K_{Ie}^* = 0.24$  MPa $\cdot\sqrt{m}$ .

(3) Ga 吸附后能促进位错运动, 使位错运动的临界应力从  $\tau_c = 2.05$  MPa 降为  $\tau_c^* = 1.82$  MPa.

#### 参考文献

- [1] Lynch S P. *Acta Metall*, 1988; 36: 2639
- [2] Su Y J, Wang Y B, Chu W Y. *Sci Chin*, 1997, 40E: 661
- [3] Lu H, Su Y J, Wang Y B, Chu W Y. *Corros Sci*, 1997; 41: 699
- [4] Lu X M, Su Y. J Qiao L J, Chu W Y. *Corrosion*, 1999; 55: 851
- [5] Lu H, Li M D, Zhang T C, Chu W Y. *Sci Chin*, 1997; 40E: 530
- [6] Chu W Y, Ga B, Gao K W, Hsiao C M. *Sci Chin*, 1997; 40E: 235
- [7] Hoagland R G, Daw M S, Foiles S M, Baskes M I. *J Mater Sci*, 1990: 5: 313
- [8] Zhang Y W, Wang T C, Tand Q H. *Scr Metall Mater*, 1995: 33: 267
- [9] Zhou G H, Lu H, Wan F R, Chu W Y. *Acta Mech Sin*, 1997; 13: 377
- [10] Chu W Y. *The Fundamentals of Fracture Mechanics*. Beijing: Science Press, 1979; 21: 271  
(褚武扬. 断裂力学基础. 北京: 科学出版社, 1979; 21: 271)
- [11] Finnis M W, Sinclair J E. *Philos Mag*, 1984; 50: 45
- [12] Ackland G J, Tichy G, Vitek V, Finnis M W. *Philos Mag*, 1987; A56: 735
- [13] Zhou G H, Zhou F X, Chen N X, Wan F R, Chu W Y. *Sci Chin*, 1998; 41E: 176
- [14] Zhou G H, Liu X M, Wan F R, Qiao L J, Chu W Y, Chen N X, Zhou F X. *Sci Chin*, 1999; 42E: 200
- [15] Heermann D W. *Computer Simulation Methods in Theoretic Physics*. 2nd ed, Berlin: Springer-Verlag, 1990: 211
- [16] Ohr S M. *Mater Sci Eng*, 1985; 72: 1
- [17] Rice J R, Thomson R. *Philos Mag*, 1974; 29: 73
- [18] Rice J R. *J Mech Phys Solids*, 1992; 40: 239
- [19] Kargal J A, Albrighy D L. *Metall Trans*, 1977; 8A: 27
- [20] Cherepanov J A. *Mechanics of Brittle Fracture*. New York: McGraw-Hill, 1979: 29
- [21] Dewald D W, Lee T C, Robertson I M, Birnbaum H K. *Scr Metall*, 1989; 23: 1307
- [22] Hirth J P. *Theory of Dislocation*. 2nd ed, New York: John Wiley and Sons Inc, 1982: 230