

纳米晶铜单向拉伸变形的分子动力学模拟

文玉华, 周富信, 刘曰武

中科院力学所, LNM实验室, 100080

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 纳米材料是由尺度在1~100nm的微小颗粒组成的体系, 由于它具有独特的性能而备受关注. 本文简要地回顾了分子动力学在纳米材料研究中的应用, 并运用它模拟了平均晶粒尺寸从1.79~5.38nm的纳米晶体的力学性质. 模拟结果显示: 随着晶粒尺寸的减小, 系统与晶粒内部的原子平均能量升高, 而晶界上则有所下降; 纳米晶体的弹性模量要小于普通多晶体, 并随着晶粒尺寸的减小而减小; 纳米晶铜的强度随着晶粒的减小而减小, 显示了反常的Hall-Petch效应; 纳米晶体的塑性变形主要是通过晶界滑移与运动, 以及晶粒的转动来实现的; 位错运动起着次要的、有限的作用; 在较大的应变下(约大于5%), 位错运动开始起作用; 这种作用随着晶粒尺寸的增加而愈加明显.

关键词

分类号

,周富信,刘曰武

中科院力学所, LNM实验室, 100080

Abstract

Key words

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(846KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献](#)

服务与反馈

- ▶ [把本文推荐给朋友](#)
- ▶ [加入我的书架](#)
- ▶ [加入引用管理器](#)
- ▶ [复制索引](#)
- ▶ [Email Alert](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 无 相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章
 - [文玉华](#)
 - [周富信](#)
 - [刘曰武](#)