

本期封面



2004年12期

栏目:

DOI:

论文题目: 纳米压痕形变过程的分子动力学模拟

作者姓名: 李启楷, 张跃, 褚武扬

工作单位: 北京科技大学材料物理系, 北京 100083

通信作者: 张跃

通信作者Email: yuezhang@pgschi.ustb.edu.cn

文章摘要:

根据EAM多体势, 利用分子动力学方法模拟了Ni压头压入Al基体的纳米压痕全过程. 包括压头接近和离开基体时的原子组态; 压入和上升时的载荷-位移曲线以及位错的发射和形变带的产生和变化; 同时模拟了纳米尺度的应力弛豫行为. 结果表明, 当压头尚未接触基体时就能吸引基体原子, 通过缩颈而互相连接. 当压入应力 τ_s 为1.9 MPa时, 基体Al开始发射位错; 当分切应力 $\tau_d=6.4$ MPa时, 出现形变带. 压头上升过程出现反向的拉应力, 使基体反向屈服, 在卸载过程中基体残留位错的组态不断改变. 当压头上升离开基体后能拉着基体通过缩颈而相连, 当压头和基体分离后仍粘有基体原子. 在纳米尺度也存在应力弛豫现象, 其原因是热激活引起的位错发射和运动.

关键词: 纳米压痕, 分子动力学模拟, 位错发射

分类号: TG146.11

关闭