

# 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 周承恩

(中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室, 北京 100080)

**摘要** 纳米材料是由尺度在 1~100 nm 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 1.79~5.38 nm 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** 纳米晶体, 力学性质, 分子动力学

## 引 言

纳米晶体材料由于具有与粗晶材料不同的力学性质而备受人们的关注. 当晶粒尺寸减小到纳米尺度时, 它的硬度、强度和延展性都发生很大的变化<sup>[1~3]</sup>. 已有文献指出, 尺寸效应可能改变了材料的变形机制<sup>[4]</sup>. 常规晶体材料的塑性变形主要是通过位错的运动来实现的, 界面阻碍位错的运动从而阻碍了变形的进行, 引起材料的强化. 然而, 当晶粒的尺度减小到纳米尺度, 界面的体积百分数急剧增加, 它可能对纳米材料的变形起着积极的推动作用. 目前, 对纳米材料的变形机制提出了几种机理, 如空隙相的存在, 大量的三叉界, 位错运动的减少, 晶界滑移, 晶界运动, 以及晶粒旋转等等, 均还没有取得一致的结论<sup>[5~7]</sup>. 尽管目前已有许多实验结果, 但对纳米晶体材料的弹性与塑性变形仍缺少清晰、直观的认识. 这部分是由于重复实验条件和控制关键的参数如密度和晶界结构的困难. 所以目前对纳米材料的实验研究大多还是局限于对它的弹性模量, 硬度的测量, 以及蠕变测试<sup>[8~10]</sup>.

计算机技术的飞速发展材料科学的理论研究提供了良好的条件. 一般来说, 对材料结构和性能的计算模拟由两部分组成: (1) 材料自身的模型化; 它的结构要受两个因素制约, 即结构应尽量接近实验观察到的形态和受到计算机内存和计算时间的限制. (2) 对实验观察到的物理性质及有代表性的特征进行模拟计算. 对材料的结构和性能的计算模拟的计算模型有两类: 连续体模型和原子级模型. 连续体模型就是把材料看作连续的介质, 采用的方法大多是有限元方法, 它的研究对象是有限小的单元. 原子级模型是把材料看作由许多单个原子的聚集体, 它的研究对象则是单个原子. 材料的各个宏观量则由所有原子的统计量给出. 目前, 经常采用的原子级模拟方法有分子动力学方法、蒙特卡罗方法和晶格动力学方法.

分子动力学计算机模拟作为研究复杂的凝聚态系统的有力工具, 既能得到原子的运动轨迹, 还能像做实验一样做各种观察, 特别是许多与原子有关的微观细节, 在实际实验中无法获

得,而在计算机模拟中可以方便地得到.这种优点使分子动力学在材料科学中显得非常有吸引力.由于纳米材料的晶粒尺寸在纳米量级,使得运用分子动力学计算机模拟纳米材料的性质成为可能.由于分子动力学研究不受样品制备和测试技术的限制,因此分子动力学模拟能够找出反映纳米晶体微观结构和力学性质之间的内禀本质,有助于人们对纳米材料的微观结构与性能之间关系的理解.在纳米材料的分子动力学模拟中,不仅需要选择正确的势函数,而且要选择合适的晶粒数和晶粒尺寸,即所要模拟的总原子数.模拟纳米材料的总原子数一般在  $10^4$  个以上,考虑到计算量及结果的准确性,目前采用大都是多体势函数.有关分子动力学模拟在纳米材料中的应用,可参见文献 [11].但是分子动力学模拟要受到空间尺度(模拟的模块尺寸在纳米量级)和时间尺度(模拟的时间在纳秒量级以下)的限制以及计算机速度和内存的限制,随着对纳米材料研究的深入以及计算机硬件的性能的提高、高效计算方法的发展(比如并行算法),分子动力学计算机模拟在纳米材料研究中的作用有望进一步拓宽.

本文采用分子动力学模拟了纳米晶体铜的单向拉伸变形过程,研究了变形过程中纳米晶体内部的微观结构变化,并给出了相关的模拟结果与结论.

## 1 纳米晶体单向拉伸的模拟

为了模拟纳米晶体的力学性质,我们构造了 5 个纳米晶体样品.构造的方法如下:在一个给定的立方体中(边长为 8.67 nm),分别任意选取 8, 27, 64, 125 和 216 个中心,然后根据 Voronoi 结构 [12] 的构造方法,构造出 5 个不同平均晶粒尺寸的纳米晶体样品,即: Cu-5.38, Cu-3.59, Cu-2.69, Cu-2.15 和 Cu-1.79, 分别表示平均晶粒大小为 5.38, 3.59, 2.69, 2.15, 与 1.79 nm, 分别包含的原子数大约为 55300 个原子.为了消除晶界上不合适的位形,每个纳米样品分别在 300 K, 一个大气压下弛豫 50 ps (5000 步).采用的方法是分子动力学模拟结合 Finnis-Sinclair 多体势函数 [13,14], 调温和调压分别采用了 Berendsen [15], Parrinello-Rahman [16] 方法.为了消除表面带来的影响,我们对模块采取了周期性边界条件进行了延扩.原子的运动轨迹通过对牛顿第二运动方程积分得到的,积分采用的方法是 Leap-frog 法 [17]. 本文模拟采用的时间单位是  $\tau_0 = 10^{-14}$  s, 能量单位是 1 eV, 长度单位为铜的晶格常数  $a_0 = 0.3615$  nm.

本文的主要部分是模拟纳米晶体的单向拉伸变形.为消除温度对变形的影响,我们模拟了 0 K 下的纳米晶体的单向拉伸.模拟的步骤如下:对在 300 K 下弛豫得到的位形,再降到 0 K 下弛豫 50 ps, 以此时的位形作为单向拉伸的初始位形;以后每一次拉伸 0.01, 弛豫 50 ps, 以保证系统回到平衡态,然后再进一步地拉伸,直到总拉伸量达到 0.10 为止.在拉伸过程中,沿 Z 轴方向为拉伸方向,同时调节 X, Y 方向的尺寸,以保证沿此两方向的压力保持在一个大气压.为了模拟 0 K 下的弹性模量,我们对每个纳米晶铜样品每一步的拉伸量为 0.001, 直到总的变形量为 0.005 为止.

为了便于结构分析,我们采用了局部晶序分析技术 [18], 对纳米晶体的拉伸过程前后的位形进行了结构分析.在此定义三种类型的原子:凡是具有局部 fcc 结构的原子归类于晶粒内部,具有局部 hcp 结构的原子归类于堆垛层错;其他所有的原子归属于晶界上.

## 2 模拟的结果

### 2.1 结构与能量分析

图 1 给出了纳米 Cu-5.38 样品未变形前的二维原子结构图.从该图可以清晰地看到, fcc 结构的原子位于晶粒的内部,而 other 原子都均匀地分布在晶界上. hcp 原子的比例很小,且

都零散地分布在晶界面区域中. 这说明这种结构分析方法是合适的.

图 2 显示了 5 个纳米样品的结构分析结果. 从此图我们可以看到, 随着平均晶粒尺寸的减小, fcc 原子的比例从 54% 下降到 12.5%, 相应的, other 原子则从 33.5% 上升到 82.8%, 而 hcp 原子的比例则保持在 2.5% 与 5.5% 之间, 这暗示晶界的比例有显著的增加. 如果认为未变形前的 hcp 原子也属于晶界, 就可以作出原子的平均能量与晶粒尺寸的关系如图 3 所示. 可以看到, 随着晶粒尺寸的减小, 系统与晶粒内部的原子的平均能量升高, 而晶界的原子平均能量则呈现下降的趋势. 晶粒内部的原子能量的升高主要是由于晶粒尺寸的减小, 导致晶粒内部的晶格畸变加剧, 致使内部的原子偏离理想单晶的结构所致. 界面上原子的平均能量减小则是由于随着晶粒的减小, 一部分晶粒内部的原子转化为界面上的原子, 而由于晶粒内部的原子能量本来就小于界面上的原子能量, 因此导致了界面上原子的平均能量的降低. 晶界上原子的能量降低相对于晶粒内部原子的能量上升来说比较小, 所以从总体的表现来看, 纳米晶体系统内部的原子能量仍然是呈现上升趋势的.

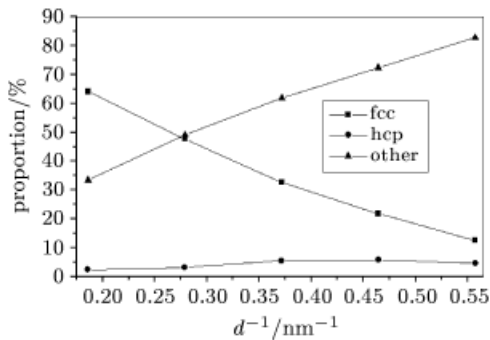


图 2 纳米晶体样品的结构随晶粒尺寸的变化关系  
Fig.2 The structural variation of nc Cu as a function of grain size

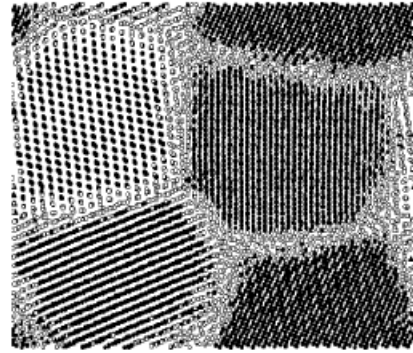


图 1 纳米 Cu<sub>5.38</sub> 样品弛豫后的原子结构图  
图中实心圆球代表 fcc 原子, 实心三角形代表 hcp 原子, 空心圆球代表 other 原子

Fig.1 Snapshots of the simulated nc Cu<sub>5.38</sub> sample before deformation, which contains 8 grains and about 55300 atoms, giving the mean grain diameter of 5.38 nm. Solid circles, triangles, and open circles denote fcc atoms, "hcp" atoms, and "other" atoms, respectively

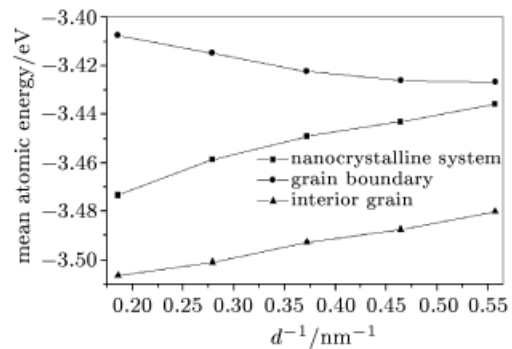


图 3 纳米晶体样品原子的平均能量随晶粒尺寸的变化关系  
Fig.3 The grain size dependence of the mean atomic energy of system, interior grain and grain boundary

## 2.2 弹性模量

弹性模量的物理本质表征着原子间的结合力, 它是反映材料内部原(离)子键合强度的重要参量. 目前已有大量的文献涉及到对它的研究. 研究的结果表明: 纳米晶体的杨氏模量都低于相应的粗晶多晶体的杨氏模量, 但在降低的百分比上有所不同. 早期的研究结果显示纳米晶体的杨氏模量要低于相应多晶体的 15%~50% 左右, 这些结果主要是由于纳米样品内部存在微空隙造成的<sup>[19]</sup>. 后来的研究则表明其比常规多晶体仅略小 5% 左右, 并且随着晶粒尺寸的减小, 弹性模量降低. 在一些计算机模拟中也得到了同样的结论. 目前已有一些理论来解释弹性模量

的降低, 如空隙相的存在、不精确的测量、低密度的样品等等<sup>[20]</sup>, 但还没有一个统一的结论.

本文也研究了纳米晶铜的弹性模量. 为了研究弹性模量, 我们模拟了每个纳米晶铜样品的单向拉伸变形. 为了保证纳米晶体处在弹性变形范围内, 我们每一次仅拉伸 0.001, 总的拉伸量为 0.005. 然后对拉伸后得到的应力 - 应变值采用最小二乘法线性拟合, 其斜率就是该样品的杨氏模量. 这种方法是在力学测试中获取弹性模量常用的方法之一, 一些计算机模拟也采用了这种办法<sup>[21]</sup>.

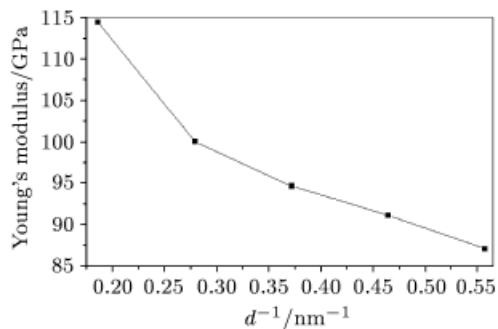


图 4 模拟的纳米晶体样品的弹性模量  
随晶粒尺寸的变化关系

Fig.4 Elastic modulus as a function of grain size. The figure shows the strong dependence of elastic modulus on grain size, i.e., the decreasing of elastic modulus with reduced grain size

图 4 显示了拟合得到的杨氏模量与晶粒尺寸的关系. 由该图可见, 当晶粒尺寸从 5.38 nm 减小到 1.79 nm 时, 杨氏模量从 114.5 GPa 下降到 87.7 GPa, 杨氏模量下降了 20% 左右. 显然, 模拟的结果要低于相应的常规多晶铜的杨氏模量值 (大约为 128 GPa). 杨氏模量的降低可能是由于大体积界面存在的缘故. 由于界面上的原子间距要大于单晶内的原子间距, 它势必影响到原子间的键合强度, 造成原子间结合力的削弱. 在常规多晶体中, 由于界面所占的体积比例很小, 界面相的存在对它的弹性模量影响很小, 但在纳米晶体中, 特别是晶粒尺寸在小于 6 nm 时, 界面的比例已经超过 30%, 这时, 界面的体积比例非常大, 对弹性模量的

影响自然很大. 在本文中, 当晶粒尺寸为 1.79 nm 时, 界面上的原子比例已高达 87.5%, 必然导致它的弹性模量剧烈地下降.

### 2.3 应力 - 应变关系

材料的应力 - 应变关系反映了该材料的所受应力随应变的变化关系. 它在材料的性质研究中起着重要的作用. 不同的材料, 一般来讲, 它的应力 - 应变曲线特征是有所不同的. 图 5 显示了对 5 个纳米晶铜样品的单向拉伸模拟结果, 其中, 曲线是采用多项式拟合得到的. 与一些实验结果相比, 模拟的拉伸应力具有更高的应力水平. 这可能与实验所用的纳米样品试件中存在着各种缺陷, 如空隙 (pore)、晶格或表面缺陷 (lattice or surface defects)、混有杂质 (impurities) 有关. 这些缺陷对材料的力学性质具有很重要的影响. 很多材料的提前失效和破坏都与这些微缺陷的发展与演化有关. 势函数也是影响应力水平的一个因素, 但一般来说, 它只是影响应力的大小, 并不影响它们的变化趋势. 我们在此采用的 Finnis-Sinclair 多体势, 在许多的分子动力学模拟的实践中, 就已经证明了它的有效性和可靠性. 由图 5 可知, 纳米晶体的强度随着晶粒的减小而降低, 这与同

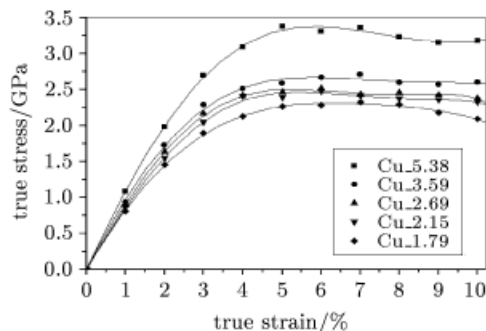


图 5 模拟的纳米晶体样品的真应力 - 应变曲线.  
图中的曲线是通过多项式拟合模拟的值得到的

Fig.5 The true stress versus the true strain for five samples. The curves are polynomial fitting of simulated results of each samples

质粗晶体正好相反. 如果我们定义流动应力为应力-应变曲线中的最大应力值, 则显然可见, 纳米晶铜的流动应力也随着晶粒尺寸的减小而降低, 呈现出与传统的晶体强化机制相反的趋势.

#### 2.4 Hall-Petch 关系

常规多晶体的强度随着晶粒尺寸的减小而升高. 这种现象可以由屈服应力  $\sigma_y$  与平均晶粒尺寸  $d$  之间的 Hall-Petch 关系来描述

$$\sigma_y = \sigma_0 + kd^{-1/2} \quad (1)$$

其中  $\sigma_y$  是材料发生 0.002 塑性应变时的屈服应力,  $\sigma_0$  是移动单个位错时产生的晶格摩擦阻力,  $k$  为斜率,  $d$  为平均晶粒尺寸. 它是长期以来描述金属材料屈服应力与晶粒尺寸之间关系经典表示式, 是在多晶体的位错塞积模型基础上导出的<sup>[22]</sup>. 对于传统的多晶体而言, 晶界的自由能相对于晶粒内部来说很高, 可以视为位错运动的势垒. 在外力作用下, 为了在相邻晶粒内部产生切变变形, 晶界处必须产生足够大的应力集中, 细化晶粒可产生更多的晶界, 如果晶界的结构不发生变化, 则需要施加更大的外力才能产生位错塞积, 从而使材料强化. 可见, 强度并不随着晶粒的减小而无限地增加. 从理论上讲, 材料强度不可能超过其完整晶须的强度, 它可以看作强度的最高值. 此外, 当晶粒非常细小的情况下, 晶界处的任何弛豫过程均可导致强度的下降, 从极限角度来讲, 当晶粒尺寸减小到零时, 材料已经变成非晶态, 强化效应已经不起作用. 因此, 就强度而言, 必然存在一个临界尺寸  $d_c$ : 在  $d > d_c$  时, 材料的强度随着晶粒尺寸的减小而升高, 呈现强化效应, 表现为  $k > 0$ , 即正 Hall-Petch 效应; 反之, 当  $d < d_c$  时, 材料的强度随着晶粒尺寸的减小而降低, 呈现弱化效应, 表现为  $k < 0$ , 即反 Hall-Petch 效应. 不同的材料,  $d_c$  值有所不同. 在目前的实验研究中, 这两种现象都曾经观察到.

我们在图 6 给出了模拟的纳米晶铜的屈服应力与晶粒尺寸的关系. 由该图可见, 它的屈服应力也随着晶粒的减小而减小, 表现出明显的反 Hall-Petch 关系. 我们对屈服应力  $\sigma_y$  与  $d^{-1/2}$  关系作最小二乘拟合, 则可以得到

$$k = -(1.645 \pm 0.0878) \text{ GPa} \times \text{nm}^{1/2}$$

$$\sigma_0 = (2.498 \pm 0.0535) \text{ GPa}$$

可见,  $k$  值是个负值, 它的绝对值要高出实验得到的正 Hall-Petch 关系的相应值 (晶粒尺寸为 12~85nm 的纳米晶铜:  $k = 470 \text{ MPa} \cdot \text{nm}^{1/2}$ ) 的 2.5 倍<sup>[23]</sup>. 实验中虽然也观察到了纳米晶铜的反 Hall-Petch 关系, 遗憾的是没有给出相应的  $k$  值, 无法做进一步的比较.  $k$  值出现负值, 暗示着此时的变形机理已不再可以用常规的多晶体理论来解释, 它必然有它内在的因素在起作用.

#### 2.5 变形机制

传统的 Hall-Petch 关系, 可以由位错塞积 (dislocation-pileup) 或位错网 (dislocation-network) 模型来解释. 但是目前的实验结果表明纳米晶体内部位错很少. 因为可移动位错数量很少, 以

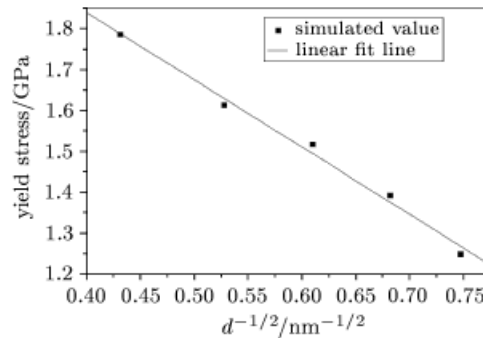


图 6 模拟得到的纳米晶体的屈服应力与晶粒尺寸的关系  
Fig.6 The yield stress as a function of grain size. The yield stress defined as the stress where the strain departs 0.2% from linearity, decreases with decreasing of grain size, resulting in reverse Hall-Petch effect

至于不能够影响纳米材料的塑性变形, 必然存在新的变形机制, 如晶界滑移、晶粒旋转、晶界运动, 在起作用. 这些机理在实验和计算机模拟中已得到验证. 可移动位错也可以通过多种途径产生, 如 Frank-Read 位错源, 产生和增殖, 对纳米材料的变形起着一定的作用.

为了研究它的变形机制, 我们对模拟的纳米晶铜变形前后的位形进行了分析. 图 7 是变形过程中的纳米晶铜 Cu<sub>5.38</sub> 的原子位移矢量图. 它是根据该样品在应变为 0 与 0.01 两个弛豫平衡后得到位形图得到的. 从该图中, 我们可以看到, 在纳米晶体的拉伸过程中, 发生了晶界滑移, 晶界运动以及晶粒旋转. 这种变形机制在纳米金属的研究中已得到实验验证<sup>[6]</sup>. 对这些纳米样品的模拟研究表明晶界面具有较高的能量, 而且纳米晶体中含有大量的晶界面. 因此, 在外力的作用下, 界面上的原子很容易运动, 它们对变形起着主要贡献.

为了进一步研究它的变形机制, 我们对模拟的纳米晶铜变形前后的位形进行了结构分析. 图 1 是变形前的结构分析图. 由此图可见, 晶粒内部基本是 fcc 结构, 少量的 hcp 结构以及其它的结构原子都均匀地分布在晶界上. 而图 8 是变形量为 0.1 时的原子结构分析图, 它们的剖面位置是与图 1 一致的. 在图 9 中可以清晰地看到晶粒内部出现了相当数量的 hcp 结构原子. hcp 结构原子的大量出现意味着堆垛层错的存在, 它是由于位错在晶粒内部运动的结果. 这说明在变形过程中, 位错运动确实起着一定的作用.

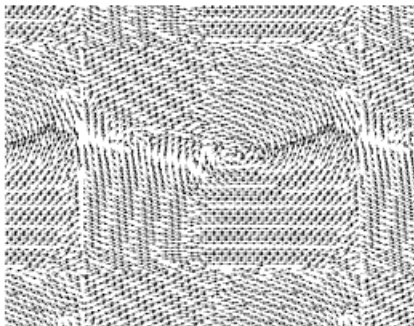


图 7 纳米晶 Cu<sub>5.38</sub> 样品的原子位移矢量图. 它是根据应变量为 0 和 1% 时的原子的位形作出的

Fig.7 The displacement vector plot of simulated nc Cu<sub>5.38</sub> from undeformed to 1% strain, which revealing the presence of grain rotation, grain boundary sliding, and grain boundary motion during the deformation

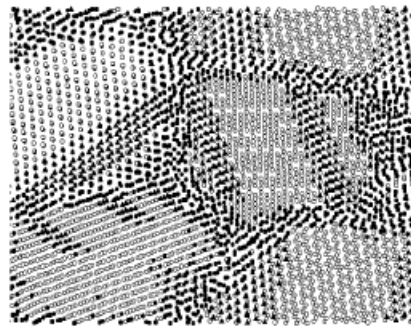


图 8 纳米 Cu<sub>5.38</sub> 样品应变量为 10% 的原子位形图, 图中空心圆球代表 fcc 原子, 实心三角形代表 hcp 原子, 实心圆球代表 other 原子

Fig.8 Snapshots of simulated Cu<sub>5.38</sub> sample with 10% strain. Open circles, triangles and solid circles represent "fcc"; atoms, "hcp" atoms, and "other" atoms, respectively. We may clearly see some stacking faults in the grains

图 9 是 hcp 结构与应变量的关系. 由该图可见, 在变形量小于 4% 时, 具有 hcp 结构的原子所占总原子数的比例基本没有发生变化, 而在变形量大于 5% 时, 它的比例才逐渐增加. 在小的变形下, 晶界滑移和晶界运动更容易发生. 但随着变形的增加, 由图 5 可知, 外加的应力也进一步加大, 当应力足够大时, 便可激发启动晶粒内部的位错源使之产生位错运动, 导致晶粒内部的堆垛层错的出现. 并且, 在变形过程中, 当平均晶粒尺寸从 1.79 nm 上升到 5.38 nm 的 5 个纳米晶铜样品, 具有 hcp 结构的原子比例增加量分别为 1.07%, 1.59%, 2.17%, 3.64% 和 9.51%. 可见, 随晶粒尺寸的增大, 纳米晶体的 hcp 结构的原子所占比例显著增大. hcp 结构的增多反映了晶体内部由于位错运动所造成的堆垛层错比例的升高, 暗示了位错运动程度的增加. 根据 Schiotz 的建议<sup>[24]</sup>, 增加的 hcp 原子对变形的贡献最大为

$$\varepsilon_{\max} = 2^{-3/2} \Delta f_{\text{hcp}} \approx 0.354 \Delta f_{\text{hcp}} \quad (2)$$

其中,  $\varepsilon_{\max}$  为对应变的最大贡献值,  $\Delta f_{\text{hcp}}$  为 hcp 结构原子所占总原子数的比例的增加量. 从(2)式, 我们可以计算总变形量为 10% 的拉伸中, 位错对 5 个纳米晶体的变形的最大贡献量依次为 0.378%, 0.562%, 0.767%, 1.287% 和 3.362%. 显然, 对于平均晶粒尺寸越大的纳米晶体, 位错运动的贡献越大. 但是, 这只是理论上的最大贡献量, 实际贡献值肯定要比它小, 甚至可能远小于此值, 因此, 位错虽然在变形中起着一定作用, 但它的作用是有限的、次要的. 主要的变形还是通过界面的滑移、运动及晶粒转动来实现的.

### 3 结论

本文采用分子动力学模拟了 0 K 下纳米晶体铜的单向拉伸变形. 模拟的结果表明: 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.

### 参 考 文 献

- 1 Siegel RW. Mechanical properties of nanophase materials. *Materials Science Forum*, 1997, 235-238: 851~860
- 2 Sanders PG, Youngdahl CJ, Weertman JR. The strength of nanocrystalline metals with and without flaws. *Materials Science and Engineering A*, 1997, 234-236: 77~82
- 3 Koch CC, Malow TR. The ductility problem in nanocrystalline materials. *Materials Science Forum*, 1999, 12-314: 565~574
- 4 Gleiter H. Nanostructured materials: state of the art and perspectives. *Nanostructured Materials*, 1995, 16: 3~14
- 5 Hahn H, Mondal P, Padmanabhan KA. Plastic deformation of nanocrystalline materials. *Nanostructured Materials*, 1997, 9: 603~606
- 6 Lu L, Sui ML, Lu K. Superplastic extensibility of nanocrystalline copper at room temperature. *Science*, 2000, 287: 1463~1466
- 7 Mishra RS, Valiev RZ, Mukherjee AK. The observation of tensile superplasticity in nanocrystalline materials. *Nanostructured Materials*, 1997, 9: 473~476
- 8 Qin XY, Zhang XR, Cheng GS, Zhang LD. The elastic properties of nanostructured Ag measured by laser ultrasonic technique. *Nanostructured Materials*, 1998, 10(4): 661~672
- 9 Yang MC, Ye F, Sun XC, Sun XK, Wei WD. Study on microhardness of bulk nanocrystalline copper. *Nanostructured Materials*, 1997, 9: 481~484
- 10 Sanders PG, Rittner M, Kiedaisch E, Weertman JR, Kung H, Lu YC. Creep of nanocrystalline Cu, Pd, and Al-Zr. *Nanostructured Materials*, 1997, 9: 433~440
- 11 文玉华, 周富信, 刘曰武. 纳米材料的研究进展. *力学进展*, 2001, 31(1): 47~61 (Wen Yuhua, Zhou Fuxin, Liu Yuewu. Progress in nanostructured materials. *Advances in Mechanics*, 2001, 31(1): 47~61 (in Chinese))

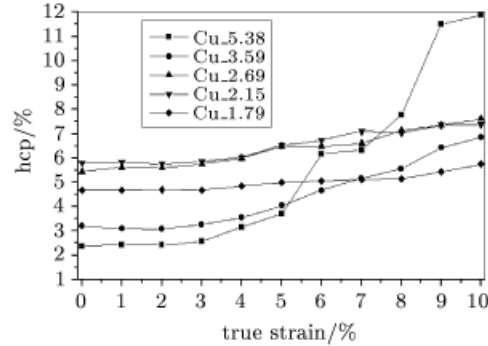


图 9 模拟得到的纳米晶体的 hcp 结构变化与晶粒尺寸的关系  
Fig.9 The strain dependence of "hcp" atoms percentage of for each grain size



- 12 Finney JL. Fine structure in randomly packed, dense clusters of hard spheres. *Materials Science and Engineering*, 1976, 23: 199~205
- 13 Finnis MW, Sinclair JE. A simple empirical  $n$ -body potential for transition-metals. *Philo Mag A*, 1984, 50(1): 45~55
- 14 Ackland GJ, Vitek V. Many-body potentials and atom-scale relaxations in noble-metal alloys. *Phys Rev B*, 1990, 41(15): 10324~10333
- 15 Berendsen HJC, Postma JPM, Gunsteren WFV, Nola AD, Haak JR. Molecular dynamics with coupling to an external bath. *The Journal of Chemical Physics*, 1984, 81: 3684~3690
- 16 Parrinello M, Rahman A. Polymorphic transitions in single crystals: a new molecular dynamics method. *Journal of Applied Physics*, 1981, 52(12): 7182~7190
- 17 Honeycutt RW. The potential calculation and some applications. *Methods in Computational Physics*, 1970, 9: 136~211
- 18 Honeycutt JD, Andersen HC. Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones clusters. *J Phys Chem*, 1987, 91: 4950~4963
- 19 Gleiter H. Nanocrystalline materials. *Progress in Materials Science*, 1989, 33(4): 223~315
- 20 Shen TD, Koch CC, Tsui TY, Pharr GM. On the elastic moduli of nanocrystalline Fe, Cu, Ni, and Cu-Ni alloys prepared by mechanical milling/alloying. *Journal of Materials Research*, 1995, 11(10): 2892~2896
- 21 Chen ZY, Yuan Q, Ding JQ. Molecular dynamics simulations on the consolidation process and relaxed structure of nanocrystalline alpha-iron. *Chinese Physics Letters*, 1993, 10(2): 103~106
- 22 Hertzberg RW. *Deformation and Fracture Mechanics of Engineering Materials*. New York: John Wiley & Sons, 1976. 103~156
- 23 Weertman JR. Hall-Petch strengthening in nanocrystalline metals. *Materials Science and Engineering A*, 1993, 166: 161~167
- 24 Schiotz J, Vegge T, Tolla FDD, Jacobsen KW. Atomic-scale simulations of the mechanical deformation of nanocrystalline metals. *Physical Review B*, 1999, 60(17): 11971~11983

## MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF THE UNIAXIAL TENSILE DEFORMATION OF NANOCRYSTALLINE COPPER

Wen Yuhua      Zhou Fuxin      Liu Yuewu      Zhou Cheng'en

(State Key LNM, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

**Abstract** Nanocrystalline (nc) materials are characterized by a typical grain size from 1 to 100 nm. The uniaxial tensile deformation of computer produced nc coppers is simulated by using molecular dynamics with Finnis-Sinclair potential. The mean grain size of simulated nc coppers is varied within the 5.38 to 1.79 nm range. With grain size decreasing, the mean atomic energy of nc systems and interior grain has increased, but that of grain boundaries has descended slowly. The Young's modulus depends strongly on the grain size, and decreases with decreasing grain size. The simulated nc coppers show a reverse Hall-Petch effect. Most of the plastic deformation is due to grain boundary sliding, grain boundary motion, and grain rotation, and a minor part is caused by dislocation activities in the grains, which are consistent with experimental results. The dislocation activities begin to play a role in the large strain (over 5%); This role is progressively distinct with grain size increasing.

**Key words** nanocrystalline materials, mechanical properties, molecular dynamics