

# 纳米晶钽在单向拉伸载荷下的分子动力学模拟

潘志亮 李玉龙<sup>1)</sup>

(西北工业大学航空学院, 西安 710072)

**摘要** 利用分子动力学方法模拟了纳米晶钽在单向拉伸载荷作用下的微观结构演化情况. 结果表明纳米晶钽在塑性变形过程中可以发生从 BCC 到 FCC, HCP 结构的应力诱导相变. FCC 结构原子百分比的最大值和试样的抗拉强度成线性关系, 据此可推出一个相变发生的临界应力值. 应变率越大, 相变滞后于应力越严重. 当应变达到一定值时, 试样会发生晶间断裂现象, 定量分析发现纳米晶钽晶间断裂初始形成应变不受平均晶粒尺寸的影响, 而与应变率和模拟温度有着密切的关系.

**关键词** 分子动力学, 纳米晶钽, 相变, 晶间断裂

中图分类号: TG113.25 文献标识码: A 文章编号: 0459-1879(2006)06-0831-04

## 引 言

目前对纳米金属及合金的研究表明, 由于变形机制的不同, 导致纳米金属与普通粗晶多晶金属相比具有许多不同寻常的性能. 在粗晶金属中, 塑性变形主要是由于晶粒内位错的运动产生, 位错可以贯穿整个晶粒, 两两之间可以相互作用. 晶界经常阻碍位错的传播, 导致位错在晶界上堆积使材料发生硬化. 基于这一理论可以导出金属的 Hall-Petch 关系. 对于纳米金属, 通过对纳米晶铜进行分子动力学模拟发现, 当平均晶粒直径小于 15 nm 时, 材料的塑性变形机制从以位错运动为主过渡到以晶界滑移为主<sup>[1]</sup>, 导致纳米晶金属表现出反常的 Hall-Petch 关系.

目前, 人们对纳米金属变形机制的认识主要基于纳米晶 FCC 金属的研究, 而对纳米晶 BCC 金属的研究相对较少, 特别是纳米晶 BCC, HCP 金属在拉伸或压缩载荷下的分子动力学模拟需要进一步展开. 本文利用分子动力学方法模拟了纳米晶钽在单向拉伸载荷作用下的变形行为, 研究了不同晶粒尺寸的纳米晶钽在不同应变率, 不同温度下的微观结构的演化情况, 力求对纳米晶钽的变形机制给出一个合理而又明确的解释.

## 1 模拟方法

利用基于 Voronoi 图<sup>[2,3]</sup>的方法构建了 7

个纳米晶钽立方体试样, 每个试样包含 16 个晶粒, 试样尺寸分别为 6.6~26.4 nm, 包含原子数目  $1.5 \times 10^4 \sim 1.01 \times 10^6$ , 平均晶粒直径 3.25~13 nm.

采用内嵌原子势 (EAM) 来描述钽中原子间的相互作用<sup>[4]</sup>. 时间步长取为 2fs, 在变形模拟之前首先对产生的纳米晶试样进行分子动力学弛豫, 以使系统回到最小位能状态, 然后对其进行  $xyz$  方向压力为零的 npt 模拟<sup>[5]</sup>, 以找到一个合适的试样尺寸, 确保试样在拉伸以前的压力为零, 之后进行单向拉伸模拟. 拉伸以前在  $1 \times 10^{-6}$  K 的温度下, 试样的密度分别相当于单晶密度的 98.230%, 98.601%, 98.854%, 99.055%, 99.217%, 99.333%, 99.421%. 在模拟过程中, 试样沿  $y$  方向均匀施加拉伸变形, 同时在  $xz$  方向进行压力为零的 npt 模拟, 以确保模拟的是单向拉伸情况, 试样的总应变控制在 30% 以内. 模拟温度  $10^{-6} \sim 1500$  K, 应变率  $2 \times 10^7 \sim 2 \times 10^9$  s<sup>-1</sup>.

采用公共近邻分析方法 (common neighbor analysis)<sup>[6~9]</sup>分析变形试样的构型. 该方法采用一个三元数  $ijk$  来标识一个原子对, 凡是距离小于给定值的两个原子形成一个原子对 (键), 其中  $i$  标识这两个原子所具有的公共近邻的数目,  $j$  标识这些公共近邻所成键的数目,  $k$  标识这些键所连成的最长连续路径. 一个位于完美 fcc 晶格中的原子形成 12 个 421 型原子对; 一个位于 hcp 环境中原子形成 6 个 421 型原子对和 6 个 422 型原子对; 一个位于

2005-12-05 收到第 1 稿, 2006-09-30 收到修改稿.

1) E-mail: liyulong@nwpu.edu.cn

bcc 环境中的原子形成 8 个 666 型原子对和 6 个 444 型原子对.

### 2 结果与讨论

#### 2.1 相 变

图 1(a) 是平均晶粒尺寸为 12.99nm 的试样变形到 22.5% 时的构型图, 试样在拉伸过程中的应变率为  $2 \times 10^9 s^{-1}$ , 温度为  $10^{-6} K$ . 图中红色代表 FCC 结构原子, 金黄色代表 BCC 结构原子, 绿色代表 HCP 结构原子, 蓝色代表其他类型的原子, 包括晶界原子和位错结构原子 (如果不加特殊说明, 下面所有的原子构型图都遵守该约定). 可以看出, 在试样变形为 22.5% 时, 试样中出现大量的 FCC 结构 (红色) 和 HCP 结构原子 (绿色). 这说明纳米晶钽在单向拉伸变形过程中出现了从 BCC 到 FCC, HCP 结构的相变.

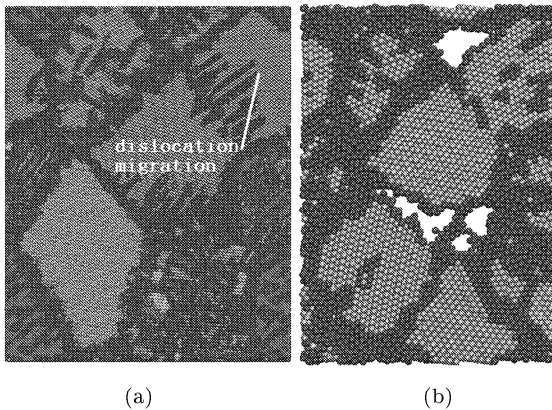
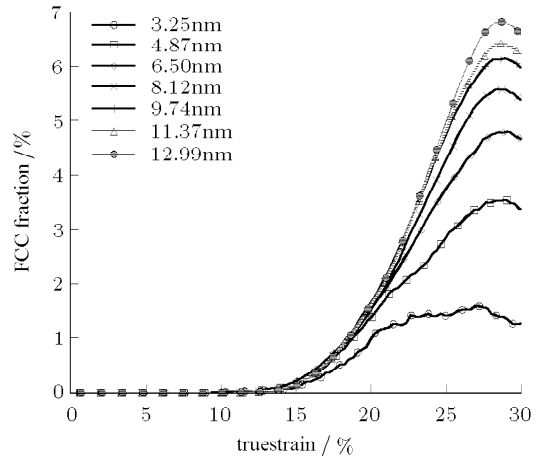
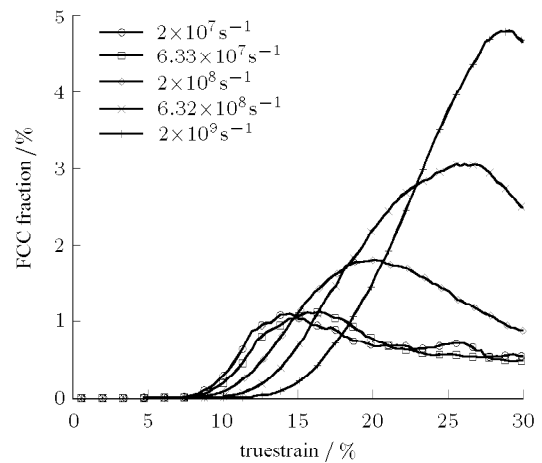


图 1 试样变形构型图  
Fig.1 Deformed configuration of the sample

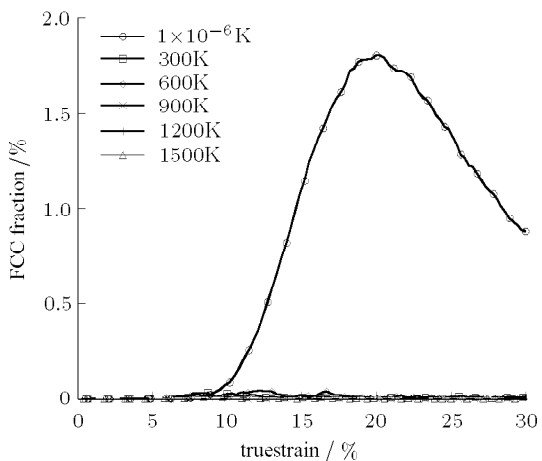
为了定量研究纳米晶钽在应力诱导下的相变现象, 分别做出不同晶粒尺寸, 不同应变率和不同模拟温度下 FCC 结构原子的百分比随应变的变化关系, 如图 2 所示. 图 2(a) 表示不同晶粒尺寸试样 FCC 结构随应变的变化情况, 从图上可以看出, FCC 结构原子的百分比随着应变的增大先增加后减小, 这一特征和应力应变曲线的变化情况是一致的. 图 2(b) 为同一个试样在不同变形应变率下 FCC 结构原子随应变的变化情况. 可以看出, 随着应变率的增加, 曲线的起点所对应的应变增加, 即相变出现滞后现象. 这表明相变发生的起点与应变率有关. 图 2(c) 表示同一个试样, 在相同应变率, 不同温度下 FCC 结构原子百分比随应变的变化情况. 可以看出, 当温度等于或大于 300K 时, 两种结构原子的百分比几乎没有什么变化, 变形过程中没有发生相变现象.



(a)



(b)



(c)

图 2 试样中 FCC 结构原子分数随应变变化曲线

Fig.2 Relationship between fraction of FCC atoms and strain

为了研究应力与相变之间的关系, 给出试样 FCC 原子的最大百分比随该试样的抗拉强度之间的

关系曲线，而不管试样平均晶粒尺寸与应变率的大小，如图 3 所示。从图 3 看出，在有相变发生的前提下，FCC 结构原子百分比最大值和应力最大值成线性关系。根据这一线性关系可以推出，当 FCC 结构百分比最大值等于零时，对应的最大应力值为 12.3 GPa，这一应力值可以看作 BCC-FCC 结构相变的临界应力值，当试样的应力小于该值的时候，相变就不再发生。温度大于或等于 300 K 时，试样中没有出现大面积的相变现象，很可能就是由于试样的最大应力(约 9 GPa) 小于 12.3 GPa 造成的。

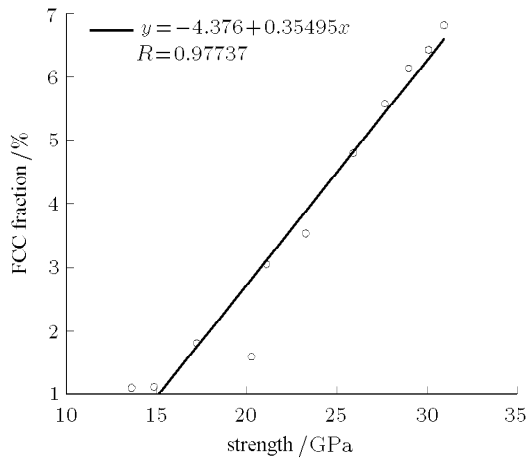
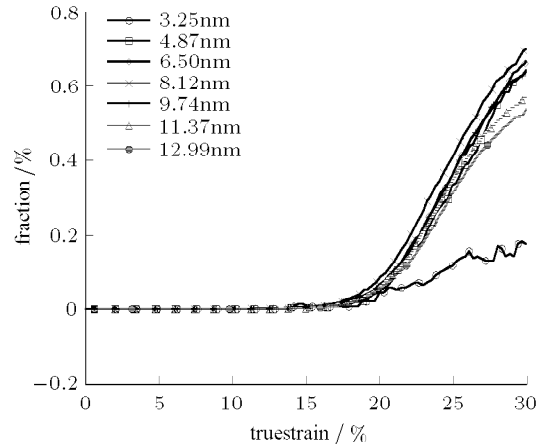


图 3 FCC 原子的最大含量随抗拉强度的关系曲线  
Fig.3 Relationship between max fraction of FCC atom and strength

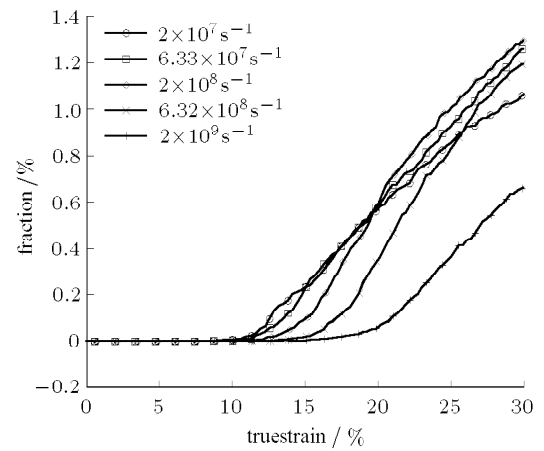
### 2.2 晶间断裂

图 1(b) 为平均晶粒尺寸为 6.5 nm 的试样变形到 30% 时的构型，应变率为  $2 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ ，温度为  $10^{-6} \text{ K}$ 。为清楚起见，只取一薄片试样。可以看出，纳米晶钽的晶界区形成明显的裂纹，这显然不同于纳米晶 FCC 金属的结果。在没有预制裂纹的情况下，至今尚未有文献报导在纳米 FCC 金属的单向拉伸变形过程中发现晶间断裂现象。晶间断裂构成了纳米 BCC 金属拉伸变形应变的一部分。

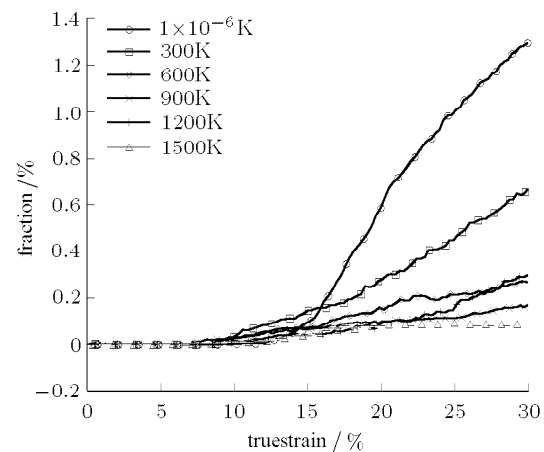
晶间断裂作为 BCC 金属可能特有的变形方式，其变形规律值得深入研究。由于裂纹面上原子的配位数很低，因此裂纹的形成可以用低配位数原子的数目或者含量来表征。低配位数原子含量开始大量增加时所对应的变形可以认为是裂纹开始形成时的变形。为了分析纳米晶钽开始出现晶间断裂时试样的变形，定义低配位数原子为配位数小于 10 的原子<sup>[10]</sup>。做出低配位数原子含量和应变的关系曲线如图 4 所示。



(a)



(b)



(c)

图 4 低配位数原子含量和应变的关系曲线

Fig.4 Relationship between fraction of low coordinated atoms and strain

图 4(a) 所示为不同平均晶粒尺寸试样在应变率相同，模拟温度相同的情况下，低配位数原子含量与

试样变形的关系曲线,可以看出裂纹初始形成应变都约为 20%,和晶粒尺寸并没有明显的关系.图 4(b)所示为不同应变率下,晶粒尺寸为 6.50 nm 试样在模拟温度为  $10^{-6}$  K 的情况下,低配位数原子含量和应变的关系曲线.可以看出,随着应变的增加,裂纹形成所对应的试样变形亦有所增加.在本文研究的应变率范围内,裂纹初始形成应变约从 12% 变化到 18%.图 4(c)所示为不同模拟温度下,平均晶粒尺寸为 6.5 nm 试样在  $2 \times 10^8 \text{s}^{-1}$  应变率下低配位数原子含量和应变的关系曲线.可以看出在  $10^{-6}$  K~900 K 范围内,随着温度的增加,低配位数原子含量随之减小,而当温度更高时,这一规律则不太明显.裂纹开始形成所对应的试样变形亦和温度有关,在本文研究范围之内,裂纹形成对应的变形从 10%(对应模拟温度 300 K)变化到约 15%(对应模拟温度  $10^{-6}$  K).因此,低配位数原子含量明显增加即裂纹形成所对应的应变基本上不受平均晶粒尺寸的影响,而与应变率和模拟温度有着更为密切的联系.

### 3 结 论

本文利用分子动力学方法模拟了纳米晶钽在单向拉伸变形过程中微观结构的演化情况,结果表明:在一定条件下,纳米晶钽在拉伸变形过程中会出现应力诱导相变和晶间断裂现象.存在一个临界的相变应力,当应力大于该值时,就会发生应力诱导相变,且 FCC 结构原子百分比的最大值随着抗拉强度的增加而增大,两者大致成线性关系.应变率越大,

相变就越滞后于应力.裂纹初始形成应变基本上不受平均晶粒尺寸的影响,而与应变率和模拟温度有着更为密切的联系.

### 参 考 文 献

- 1 Jakob Schiotz. Atomic-scale modeling of plastic deformation of nanocrystalline copper. *Scripta Materialia*, 2004, 51: 837~841
- 2 Swygenhoven H Van. Grain-boundary structures in polycrystalline metals at the nanoscale. *Physical Review B*, 2000, 62: 831~838
- 3 Derlet PM, Swygenhoven H Van. Atomic positional disorder in fcc metal nanocrystalline grain boundary. *Physical Review B*, 2003, 67: ID014202, 1-8
- 4 Guellil AM, Adams JB. The application of the analytic embedded atom method to bcc metals and alloys. *Journal of Material Research*, 1992, 7(3): 639~652
- 5 Hoover WG. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions. *Physical Review A*, 1985, 31: 1695~1702
- 6 Vorgelegt von, et al. Study of Interplay between Structure and Flow in Embed-atom Systems. Chapter 4. Tag Der Wissenschaftliche Aussprache: 22. June 2004
- 7 Daniel Faken, Hannes Jonsson. Systematic analysis of local atomic structure combined with 3D computer graphics. *Computational Materials Science*, 1994, 2: 279~286
- 8 Andrew S. Clark, Hannes Jonsson. Structure changes accompanying densification of random hard-sphere packings. *Physical Review E*, 1993, 47: 3975~3984s
- 9 Honeycutt J Dana, Andersen Hans C. Molecular dynamics study of melting and freezing of small lennard-jones clusters. *J Phys Chem*, 1987, 91: 4950~4963
- 10 Søren L. Frederiksen, Karsten W. Jacobsen, Jakob Schiotz. Simulations of intergranular fracture in nanocrystalline molybdenum. *Acta Materialia*, 2004, 52: 5019~5029

## MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS OF NANOCRYSTALLINE Ta DURING UNIAXIAL TENSILE DEFORMATION PROCESS

Pan Zhiliang Li Yulong<sup>1)</sup>

(School of Aeronautics, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

**Abstract** Using molecular dynamics simulations, the microstructure evolution of nanocrystalline Ta under uniaxial tensile loading is investigated. The results show that stress-induced phase transitions from BCC to FCC and HCP structures may take place during the deformation process. The maximum of the fraction of FCC atoms varies with the tensile strength linearly, by which we can find a critical stress when the phase transition takes place. The higher the strain rate is, the later the phase transition occurs. Intergranular fracture is also found during the deformation process. Crack-formation strain is influenced not by the mean grain size, but also by the strain rate and the simulation temperature.

**Key words** molecular dynamics, nanocrystalline Ta, phase transition, intergranular fracture

Received 5 December 2005, revised 30 September 2006.

1) E-mail: liyulong@nwpu.edu.cn