

# 铜纳米丝的应变率和尺寸效应的 分子动力学模拟 \*

徐 洲 王秀喜 梁海弋

(中国科学技术大学中国科学院材料力学行为和 Design 重点实验室)

**摘 要** 用分子动力学方法对铜纳米丝的应变率效应和尺寸效应进行了模拟研究. 结果表明, 随着加载应变率的增大, 铜纳米丝从低应变率下的静态响应逐渐呈现出较高应变率下的准静态以及高应变率下的动态响应特征, 其变形机制以及应力 - 应变曲线的形态也随之发生变化. 在静态和准静态区域, 位错运动是铜纳米丝塑性变形的主要来源, 而在高应变率动态加载时, 铜纳米丝出现整体结构的非晶化, 最大屈服应力也随着应变率的升高而增大, 强化现象明显. 当铜纳米丝的截面尺寸变化时, 其弹性模量、屈服应力以及屈服应变、进入强化区域的临界应变率等都发生相应的变化, 尺寸效应显著.

**关键词** 材料科学基础学科, 应变率和尺寸效应, 分子动力学模拟, 铜纳米丝, 敏感度, 强化应变

**分类号** TB383, TG113

**文章编号** 1005-3093(2003)03-0262-06

## Molecular dynamics simulation of the strain rate effect and size effect for Cu nanowire

XU Zhou WANG Xiuxi\*\* LIANG Haiyi

(Key Laboratory of Mechanical Behavior and Design of Materials of CAS, USTC, Hefei 230026)

\* supported by National Natural Science Foundation of China (No.10172081). Manuscript received July 15, 2002; in revised form September 5, 2002.

\*\* To whom the correspondence is addressed, Tel:(0551)3601245,

E-mail: xxwarg@ustc.edu.cn

**ABSTRACT** The strain rate effect and size effect of nanowire were studied by using molecular dynamics simulation. The results show that the strain rate effect of nanowire is very obvious. The response characteristic of nanowire transfers from static to quasi-static and furthermore to dynamical response with the increasing of strain rate. The deformation mechanism varies with different strain rates. In the static and quasi-static regions, which were called insensitive and transition region respectively, the main source of plastic deformation is contributed from dislocation movements. However, the whole structure may be amorphous and hardened under high strain rates in strengthening region. The size effect of nanowire is very distinct as well. As the cross section area changes, its Young's modulus, yield stress, yield strain and the critical strain rate will shift correspondingly.

**KEY WORDS** foundational discipline in materials science, strain rate and size effect, molecular dynamics simulation, Cu nanowire, sensitivity, hardening strain

对材料的力学响应性能随着加载速率变化的研究有重要的理论意义和应用价值<sup>[1~3]</sup>. 材料微观结构的动态演化是一种涉及多尺度多层次的复杂过程, 其中原子层次的位错、孪晶、相变

\*国家自然科学基金资助项目 No.10172081. 2002 年 7 月 15 日收到初稿; 2002 年 9 月 5 日收到修改稿.

本文联系人: 王秀喜, 合肥市 230026, 中国科技大学力学和机械工程系

以及细观尺度的孔洞、夹杂等都影响材料的动态性能. 深入洞察材料在不同加载速率下的力学响应特性, 需要结合材料的微观结构特征来进行. 人们在纳米材料力学性能的试验以及理论研究方面已经做了许多工作<sup>[4,5]</sup>. 由于目前尚无法通过实验详细地了解纳米器件的力学性能, 基于原子、分子层次考察结构和材料特性的分子动力学方法就成为一个重要的研究手段. 分子动力学模拟表明, 硅在常温下是脆性材料, 但是纳米单晶硅在高速加载情况下, 仍可能发生塑性变形<sup>[6]</sup>; 纳米铜丝的屈服和断裂机制与其尺寸大小、原子结构以及温度有关<sup>[7]</sup>; Ikeda<sup>[8]</sup> 和 Brancio<sup>[9]</sup> 等利用分子动力学方法发现, 当加载应变率高于某一数值时, 纳米丝的塑性变形机制将发生变化, 即出现所谓非晶化现象. 原子数从 100 个到 1 亿个的单晶 Ni 构型在不同剪切应变率加载下的变形过程中, 起源于自由表面的位错是导致微观以及宏观屈服的主要因素<sup>[10]</sup>. 材料在不同尺度下具有不同的特性, 其变形机制以及相应的特征时间尺度也不同. 本文应用分子动力学方法研究纳米丝结构的拉伸力学性能及其变形机制.

## 1 分子动力学模拟过程

铜纳米丝的初始构型用几何方法生成, 原子按理想面心结构排布, 纳米丝的横截面 (XY 面) 为正方形, Z 向为长度方向. X、Y、Z 坐标轴分别对应面心立方的 [001]、[010]、[001] 晶向. 本文共生成四个纳米丝构型, 截面尺寸分别为  $5a_0 \times 5a_0$ 、 $7a_0 \times 7a_0$ 、 $10a_0 \times 10a_0$ 、 $15a_0 \times 15a_0$ , 长度方向均为  $15a_0$ , 其中  $a_0$  为铜的晶格常数 (0.361 nm). X、Y 表面为自由面, Z 向采用周期性边界条件. 原子数分别为 1815、3325、6615、28830 个. 在模拟过程中利用 Nosé-Hoover 方法进行等温调节<sup>[11,12]</sup>, 将温度控制在绝对零度, 以避免原子热激活软化的影响, 只考虑应变率效应的作用. 数值积分方案采用速度形式的 Verlet 算法<sup>[13]</sup>. 模拟过程的第一步先对各初始构型弛豫足够步数使得能量达到稳定状态, 时间步长  $2 \times 10^{-15}$  s, 在弛豫过程中采用 Parrinello-Rahman<sup>[14]</sup> 等应力调节, 使压力保持为零, 允许构型自由收缩; 第二步对弛豫后的铜纳米丝沿 Z 轴均匀拉伸, 调整加载步长和时间间隔, 以达到所需的加载应变率. 对不同的纳米丝构型分别计算一定的应变率组数, 使其覆盖每一根纳米丝的静态、准静态以及动态加载范围. 文中的应力是纳米丝中原子应力的平均值.

## 2 结果与讨论

### 2.1 应力 - 应变曲线

图 1 给出了各种应变率下的应力 - 应变曲线, 各条曲线都有明显的线性弹性段. 对应于图 1a 的应变率到达屈服点  $P_0$  ( $\varepsilon=0.1282$ ,  $\sigma=10.7$  GPa) 后应力骤然下降, 继续增大应变, 曲线呈锯齿状发展, 应力在每一次下降之后又出现短暂的线性上升, 然后又迅速下降, 在 5 GPa 附近振荡; 图 1b 中的各曲线在经过点  $P_0$  后先出现一小幅下降, 然后随着应变的增大而抬升, 且应变率越高, 抬升的幅度越大, 但其极大值点的应力都没有超过初始屈服应力 (图 1e). 短暂的抬升过后, 应力随着应变的增大而下降, 其下降斜率明显小于图 1a 中的数值, 到达一定应变以后呈波折状发展; 图 1c 中的各应力 - 应变曲线在超过点  $P_0$  以后继续上升, 但是存在一定的波折, 表现出一定的强化现象, 且应变率越高, 强化程度愈高, 曲线越过最高点以后缓慢下降, 然后呈平缓状发展. 图 1d 中的三条曲线表明, 不同应变率下的曲线都经历了一段相同的上升过程, 越过点  $P_0$  以后, 其形状才表现出本质的区别. 综上所述在应变率小于  $4.0 \times 10^8$   $s^{-1}$  时, 应力 - 应变曲线都有类似于图 1(a) 的形态, 铜纳米丝对小于  $4.0 \times 10^8$   $s^{-1}$  的加载应变率几乎不敏感, 呈

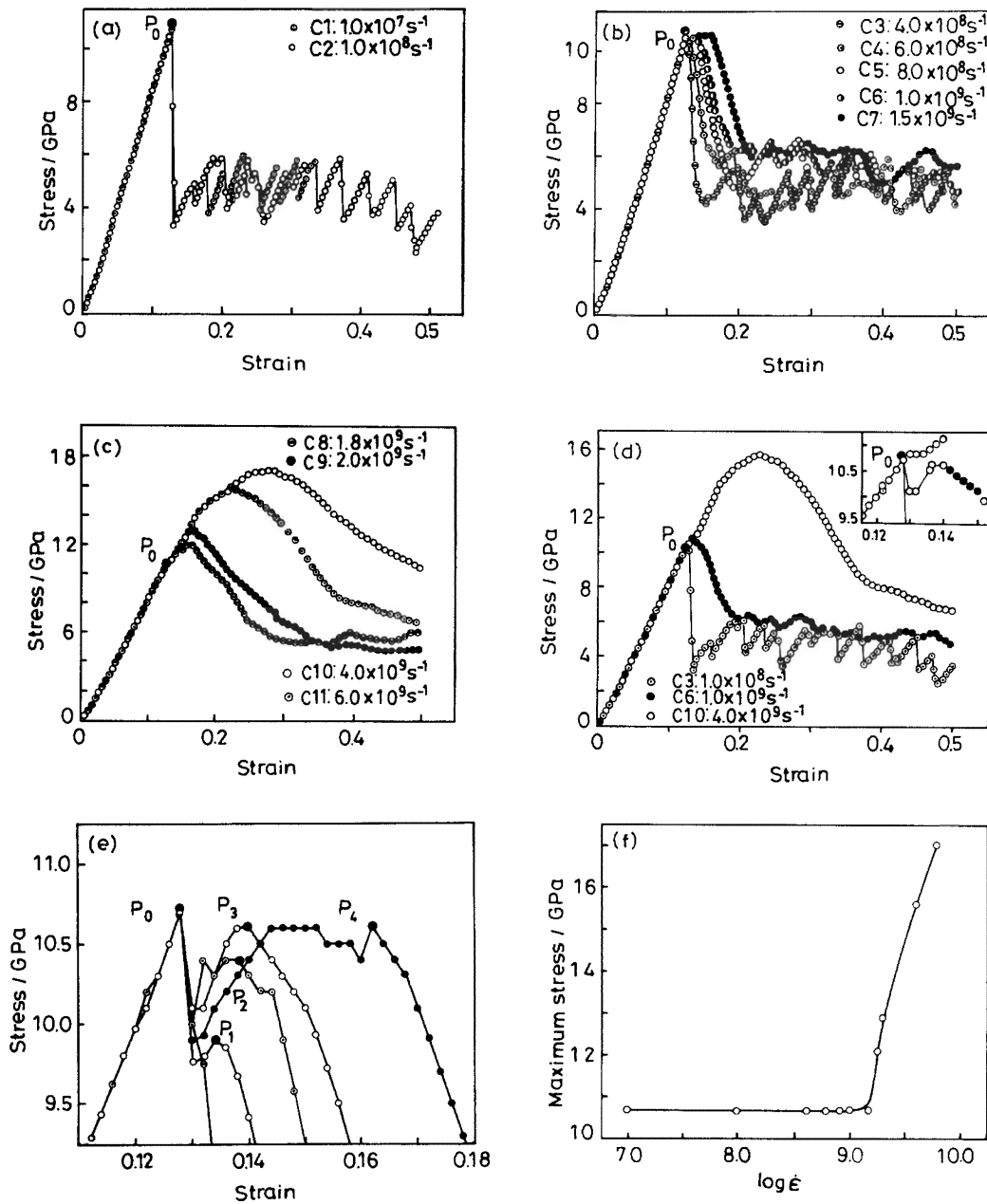


图 1  $5 a_0 \times 5 a_0$  截面各应变率下的应力 - 应变曲线

Fig.1 Strain-stress curves of  $5 a_0 \times 5 a_0$  under different strain rates (a) insensitive region, (b) transition region, (c) hardening region, (d) typical  $\sigma$ - $\epsilon$  curves, (e) local zoom-in view of (b), (f) strain rate vs strength

静态或准静态响应, 称此段为应变率不敏感区域; 应变率超过  $1.8 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$  后, 曲线都有类似于图 1(c) 的特征, 且强化现象随着应变率的增大愈加明显, 铜纳米丝的动态特征十分显著, 称此

段为应变率的突变区域(或称为强化区);对于  $4.0 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$  和  $1.8 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$  之间的应变率,曲线的形态类似于图 1(b),称此段区域为过渡区,过渡区内铜纳米丝的响应特性从准静态逐渐向动态转变.在应变率对数值小于  $9.176(\dot{\epsilon} = 1.5 \times 10^9 \text{ s}^{-1})$  之前,其最大屈服应力几乎保持不变;超过  $9.255(\dot{\epsilon} = 1.8 \times 10^9 \text{ s}^{-1})$  之后,其强度随着应变率的增加而迅速上升,应变率的强化效应显著(图 1f).

## 2.2 纳米丝在不同应变率区域的变形机制

在应变率不敏感区,纳米丝的破坏应力和相应的破坏应变与应变率无关.当应变值大于 0.1282 后,由于  $\{111\}\langle 110 \rangle$  滑移系的开动,在纳米丝中出现了第一批堆垛层错,对应着应力应变曲线的首次突然下降.继续拉伸则导致大量小规模滑移事件,应力应变曲线小幅上升后迅速下降,呈锯齿状发展.在不同应变阶段,纳米丝在各应变水平始终保持良好的晶体结构,其中堆垛层错或是穿越纳米丝,或是相互交截;纳米丝的塑性变形主要由滑移或孪晶引起;应变达到一定水平后,纳米丝出现颈缩现象,先期生成的堆垛层错在应变增大后消失.在连续两个加载步之间的时间间隔大于纳米丝中完成位错运动所需要的时间.一个加载步结束后,相应的位错运动也已完成,在拉伸过程中纳米丝处于平衡状态.此范围内的拉伸加载属于静态或准静态加载,纳米丝具有与应变率无关的特征.

在过渡区,应力-应变曲线以及响应特性逐渐表现出与静态加载不同的特征.在此区内不同应变水平的纳米丝仍保持良好的晶体结构,塑性变形仍由滑移、孪晶引起.但若保持加载过程中某一应变值不变,而进行弛豫,纳米丝的总体能量则逐步降低并趋于稳定,且其中的位错会进一步扩展.在此区内,连续两个加载步之间的时间间隔小于纳米丝达到平衡所需时间,在位错没有充分扩展之前又受到下一步拉伸载荷的作用,使纳米丝在拉伸过程中始终难以达到稳定平衡状态,且应变率越高这种非平衡效应越明显,即过度区内的加载特性开始由准静态向动态转变,纳米丝变形特性具有应变率相关特征.但是此时纳米丝的最大屈服应力没有明显升高.

在突变区,当应变大于一定数值后,在局部区域原子出现一定程度的混乱,增大应变导致位错增殖率提高,位错密度迅速增大,局部区域的混乱程度迅速上升,并不断向外拓展,有序晶体结构区范围逐步缩小.当应变增加到一定程度时,纳米丝出现整体的非晶化或液态结构,且不再出现颈缩现象.在应变率过渡区,应变率提高导致纳米丝非平衡效应趋于显著,但纳米丝始终以生成新位错的方式进行塑性变形.在突变区,纳米丝的非平衡效应突破了某一个临界状态,其位错塑性变形机制转变为局部混乱区域不断扩展,最终导致整体非晶化的塑性变形机制.

## 2.3 尺寸效应分析

在低应变率( $1.0 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ )情况下,各种截面的纳米丝都处于静态拉伸状态,且其应变率相同.在图 2a 中的弹性加载段,每条曲线原点处的曲线斜率都较小,存在着初始弯曲即初始弹性模量软化现象;随着应变的增大,斜率逐渐增加并趋于稳定.随着截面尺寸的增大,曲线的斜率增加即纳米丝的弹性模量变大,屈服应力以及相应的屈服应变减小(图 2b).随着截面的增大,表面原子所占的比例减小,表面效应逐渐减弱,因而表面应力对其内部原子的束缚程度降低,内部原子的活动自由度增加,位错传播过程中的阻力变小,且起源于表面的位错的发射几率提高.这可能是导致随着截面增大纳米丝的弹性模量增大、屈服强度以及屈服应变降低的主要原因.

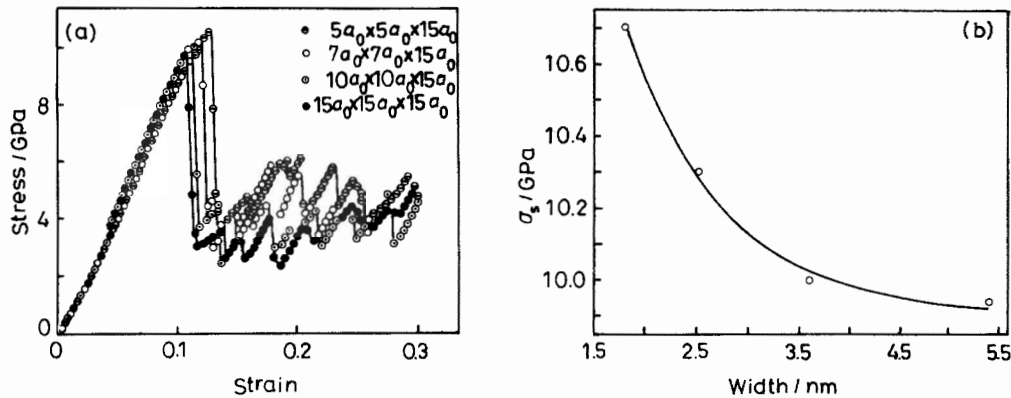


图 2 不同截面尺寸纳米丝的准静态拉伸性能

Fig.2 Quasi-static responding characters under different sectional dimensions (a)  $\sigma$ - $\epsilon$  curves under quasi-static loading (Strain rate= $1.0 \times 10^8$ /s), (b) relationship between yielding stress and sectional dimension

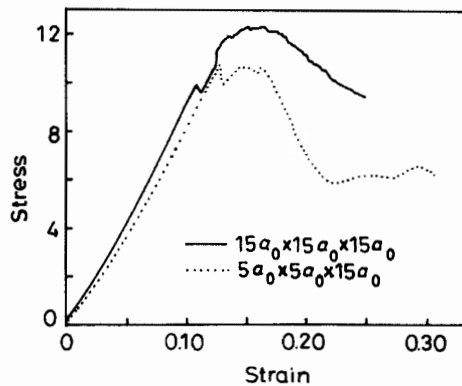


图 3 应变率为  $1.5 \times 10^9$ /s 时应力与应变的关系

Fig.3  $\sigma$ - $\epsilon$  relation under  $\dot{\epsilon} = 1.5 \times 10^9$ /s

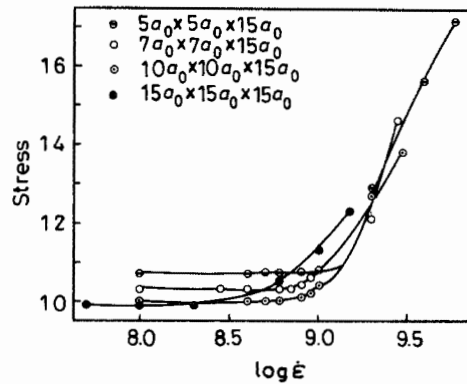


图 4 应变率与最大应力的关系

Fig.4 Maximum stress versus strain rate

图 3 表明, 在动态加载范围, 曲线的初始弹性段仍发生偏离, 与静态加载的情况相同; 但是二者的最大应力以及相应的最大应变则完全不同. 虽然静态加载时截面尺寸越小, 纳米丝的屈服强度越高, 但是在图所示的高应变率加载下,  $15 a_0 \times 15 a_0$  纳米丝的最大屈服应力却大于  $5 a_0 \times 5 a_0$  时的情况, 其强化现象已经十分明显, 而  $5 a_0 \times 5 a_0$  截面的曲线在屈服点附近发生流动, 最大屈服应力仍然没有明显的提高. 故在此应变率下截面较大的纳米丝的强化现象更加显著. 这主要是由于  $15 a_0 \times 15 a_0$  纳米丝进入动态加载的临界应变率值比  $5 a_0 \times 5 a_0$  截面的值要小的缘故 (图 4).

在各自不同的应变率区域, 由于截面尺寸的变化, 各构型对相同加载应变率的响应情况又有所差异. 从图 4 可以看出, 对于任意一根纳米丝, 曲线在小于某一应变率之前曲线都保持水

平(静态或准静态加载阶段),即最大屈服应力保持不变,呈应变率无关特性,但是不同构型的最大屈服应力随着截面尺寸的增大而减小,当应变率超过某一临界值以后,最大屈服应力随着应变率的增加而迅速上升(高应变率动态加载阶段),纳米丝呈现出明显的强化现象.对于不同尺寸的纳米丝,进入强化区域的临界应变率数值随着截面尺寸的增大而减小,表现出明显的尺寸效应.

### 3 结 论

用分子动力学方法可以模拟不同应变率下不同截面铜纳米丝的拉伸过程.铜纳米丝拉伸对应变率的响应特性可分为不敏感区、过渡区和强化区.在拉伸过程中,铜纳米丝在不敏感区表现出应变率无关特性,在过渡区处于非平衡状态.新位错的产生是这两区域纳米丝消耗外力功的主要方式.在强化区,在铜纳米丝中出现原子混乱区域不断扩展乃至整体结构的非晶化的现象,铜纳米丝最大屈服应力随着应变率的增大而迅速上升,呈现强化现象.在静态加载阶段,铜纳米丝的屈服强度以及相应的屈服应变随着截面尺寸的增大而减小,弹性模量随着截面尺寸的增大而增大.随着截面尺寸的增加,铜纳米丝进入动态加载的临界应变率减小.在同一应变率下,小截面尺寸铜纳米丝的最大屈服应力随着加载应变率变化,大截面尺寸铜纳米丝的最大屈服应力与应变率无关.

### 参 考 文 献

- 1 M.A.Meyers, *Dynamic Behavior of Materials* (John Wiley & Sons, Inc, Wiley-Interscience Publication, 1994) p.1
- 2 Woei-Shyan Lee, Chi-Feng Lin. Impact Properties and Microstructure Evolution of 304L Stainless Steel. *Materials Science & Engineering A*, **308**, 124(2001)
- 3 R.J.Clifton. Dynamics Plasticity. *Journal of Applied Mechanics*, **50**, 941(1983)
- 4 R.K.Soong, G.D.Bachand, H.P.Neves, A.G.Olkhovets, H.G.Craighead, C.D.Montemagno, Powering an Inorganic Nanodevice with a Biomolecular Motor. *Science*, **290**, 1555(2000)
- 5 H.Noji, R.Yasuda, M.Yoshida, K.K.Jr, Direct observation of the rotation of F1-ATPase, *Nature*, **386**(20), 299(1997)
- 6 Doyama, Masao; Nozaki, Tadatoshi; Kogure, Yoshiaki; Yokotsuka, Tatsuo., Plastic deformation of pure silicon nanocrystals by molecular dynamics. *Nanostructured Materials*, **12**, 333(1999)
- 7 H.Mehrez, S.Ciraci, Yielding and fracture mechanisms of nanowires, *PRB*, **56**(19), 12632(1997)
- 8 H.I.Yue Qi, Tahir Cagin, Konrad Samwer, W.L.Johnson, W.A.Goddard III, Strain rate induced amorphization in metallic nanowires, *PRL*, **82**(14), 2900(1999)
- 9 Paulo S.Branicio, Jose-Pedro Rino, Large deformation and amorphization of Ni nanowires under uniaxial strain: A molecular dynamics study, *PRB*, **62**(24), 16950(2000)
- 10 M.F.Horstemeyer, M.I.Baskes, S.J.Plimpton, Length scale and time scale effects on the plastic flow of FCC metals, *Acta mater*, **49**, 4363(2001)
- 11 S.Nose, A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods. *J.Chem.Phys.*, **84**(1), 551(1984)
- 12 W.G.Hoover, Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions. *Physical Review A*, **31**(3), 1695(1985)
- 13 M.P.Allen, D.J.Tildesley, *Computer Simulation of liquids* (Oxford, Clarendon Press, 1987) p.78
- 14 M.Parrinello, A.Rahman, Polymorphic Transitions in Single Crystals: A New Molecular Dynamics Method. *Journal of Applied Physics*, **52**(12), 7182(1981)