

含球形孔洞双晶铜单向拉伸性能的 分子动力学模拟

张 宁, 杨新华*, 陈传尧

(华中科技大学 力学系, 武汉 430074)

摘 要:采用分子动力学方法模拟了在单向拉伸载荷作用下含孔洞双晶铜晶体的力学行为,研究了晶粒内部孔洞和晶界孔洞对晶体力学行为的影响。结果表明,孔洞可以显著降低双晶体的弹性模量和屈服应力。对于晶粒内部关于晶界对称的孔洞,随着孔间距的增大,晶体弹性模量和屈服应力都有明显的提高;当保持孔间距不变而改变孔半径时,随着孔体积的不断增大,晶体弹性模量和屈服应力又都呈现出递减趋势。对于晶界上的孔洞,孔洞形状对晶体拉伸性能有显著影响,并且随着孔半径的增大,晶体弹性模量和屈服应力呈现出递减趋势,如果保持孔洞总体积恒定而依次增加孔洞数量,则晶体弹性模量和屈服应力逐渐减小。

关键词:分子动力学;双晶铜;孔洞;晶界

中图分类号:O313 **文献标识码:**A

1 引 言

一般认为,材料的实际强度和刚度之所以远低于理论预计,是因为材料本身存在很多缺陷。金属在凝固过程中,晶粒和晶粒之间有可能由于缺乏液体填入而在晶界处产生孔洞,金属材料的高温蠕变也可能在晶界附近引起孔洞^[1],在高温疲劳试验中,孔洞可能汇合形成微裂纹^[2]。孔洞的产生和发展造成材料力学性能不断下降,是材料破坏的重要根源。

近年来,有关单晶孔洞效应的研究倍受关注。Yang等^[3]分析了孔洞尺寸和形状对纳米单晶铜板弹性模量的影响,研究了孔洞周围的原子应力集中现象,指出孔洞周围的原子排布是影响原子应力集中的主要因素。王玉等^[4]模拟了含孔洞纳米单晶铜悬臂梁的弯曲变形过程。Potirniche等^[5,6]分析了单晶镍中孔洞的长大与合并,研究了试样尺寸、加载应变率以及晶向对孔洞演化的影响。Stewart等^[7]模拟了含孔洞单晶铝中位错和滑移的传播。除此以外,许多学者也对多晶材料中的孔洞演化展开了研究。Gemming^[8]研究了钛酸锶中晶界空穴束对晶体结构变化的影响。Gao等^[9]研究了ODS

合金晶粒内部孔洞的变形机制。Vincent等^[10]则考察了含孔洞多晶二氧化铀的延性破坏过程。

双晶是由单晶向多晶过渡的一种晶体,研究双晶对于了解多晶的某些力学行为具有指导意义。近年来有关双晶的研究深受重视。Wen等^[11]考虑不同晶界对孔洞变形机制的影响,研究了双晶体晶界孔洞的生长特征。温志勋等^[12]基于晶体滑移理论,研究了含与不含晶界空穴的双晶体的蠕变行为。本文拟以含孔洞纳米双晶铜为研究对象,分析拉伸过程中孔洞位置、间距、半径、形状以及数量对晶体力学行为的影响。

2 基本方法

采用镶嵌原子法,原子总势能可以表示为

$$E = \sum_i F(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \Phi(r_{ij}) \quad (1)$$

式中第一项为嵌入能,第二项为对势项, $F(\rho_i)$ 为到电子云 ρ_i 的原子镶嵌能,并且

$$F(\rho_i) = D\rho_i \ln \rho_i \quad (2)$$

式中 $\rho_i = \sum_j f_i(r_{ij})$ 为原子 i 处的电子云密度, $f_i(r_{ij})$ 表示距离原子 i 为 r_{ij} 的原子 j 对原子 i 处电子云的影响。

模拟过程中利用Nosé-Hoover方法进行等温调节,温度控制在绝对零度,以避免原子热激活的影响,数值积分方法采用Verlet蛙跳法。

收稿日期:2008-08-23;修改稿收到日期:2009-07-06.

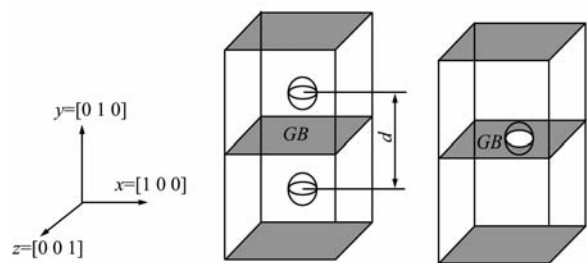
基金项目:教育部新世纪优秀人才支持计划(NCET-06-0645);湖北省杰出青年基金(2007ABB010);高校博士点基金(200804870025)资助项目.

作者简介:杨新华*(1967-),男,博士,教授,博士生导师
(E-mail:yangxinh@263.net).

3 基本模型与模拟步骤

为了研究孔洞对纳米双晶铜弹性性能的影响,选取如图 1 所示的含球形孔洞纳米双晶铜初始构型,模型(a)和(b)分别表示两种不同的孔洞分布形式。原子按理想面心结构排布,对应于 x, y, z 轴,上部单晶体的晶向为 $[-1\ 0\ 1], [1\ -2\ 1], [1\ 1\ 1]$,下部单晶体的晶向为 $[-1\ 2\ -1], [-1\ 0\ 1], [1\ 1\ 1]$ 。生成的无孔纳米阵列为 $10\text{Å} \times 10\text{Å} \times 30\text{Å}$,这里 $A = 0.361\text{ nm}$ 为铜的晶格常数,原子个数为 12486 个。在模型(a)中,以晶界为对称面,从上下晶粒中对称挖掉部分原子,形成两个半径相同的晶内孔洞;在模型(b)中,以晶界为对称面挖掉晶界附近上下晶粒中的部分原子,形成晶界孔洞。在 x 轴和 z 轴方向施加自由边界条件,在 y 轴方向施加周期性边界条件,模拟纳米双晶铜杆沿 y 轴方向上的单向拉伸变形过程。

模拟步骤:首先,对纳米双晶铜杆进行初始构型弛豫,在室温(300 K)下自由弛豫 20,000 步;然后,将温度降到绝对零度(0 K),再充分弛豫 20,000 步,达到能量稳定状态,并采用 Nose-Hoover 外部热浴法,使整个模拟过程温度始终保持在 0 K;最后,通过对弛豫后的双晶铜试样端面原子施加位移载荷方法,沿 y 方向对纳米双晶铜杆进行均匀拉伸,加载应变率为 $\dot{\epsilon} = 3.0 \times 10^8\text{ s}^{-1}$,加载步长为 $\Delta t = 1\text{ fs}$ 。



(a) 晶粒内部孔洞模型 (b) 晶界孔洞模型
(a) Voids inside crystals (b) Void on the grain boundary

图 1 含孔洞纳米双晶铜的初始原子构型

Fig. 1 Original models of nano bicrystal copper with voids

4 结果和讨论

4.1 晶内孔洞间距的影响

为了研究孔间距对弹性性能的影响,在模型(a)中,保持孔半径 $r = 2A = 0.722\text{ nm}$ 不变,不断增大两孔中心距 d ,依次取为 $1.6\text{ nm}, 2.2\text{ nm}, 2.8\text{ nm}, 3.4\text{ nm}$ 和 4.0 nm ,试样构型如图 2 所示,模拟得到的应力应变关系如图 3 所示,通过进一步分析

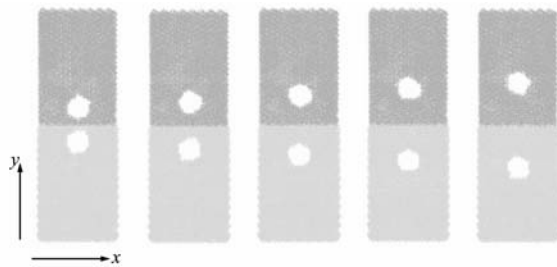


图 2 不同孔间距试样的初始构型

Fig. 2 Original sample configuration with different distances between voids

获得弹性模量,并将弹性模量与孔间距的关系描绘在图 4 之中。可以看出,与无孔试样相比,有孔纳米双晶铜的弹性模量和屈服应力都明显降低,这反映了孔洞出现给材料带来的削弱作用。随着孔间距增大,弹性模量逐渐增大,孔洞的影响越小,表明晶内孔洞离晶界越近,对弹性模量的影响越大,而且当应变超过 0.06 以后,材料逐渐由弹性阶段向塑性阶段过渡,随着应变增大,应力变化很小,说明材料已进入屈服阶段,位错和滑移现象开始出现。小孔边缘和晶界附近应力集中程度较高,首先开始屈服,位错和滑移也从此处发射;当孔间距减小时,孔洞与晶界间的距离缩小,由孔洞表面发射的位错易与晶界处位错汇合,导致位错和滑移的传播阻力减小,从而大大降低材料的强度。

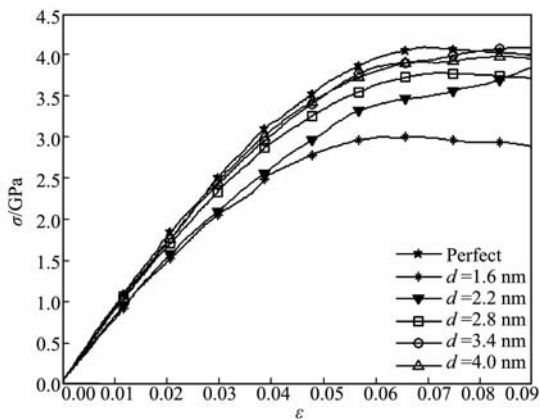


图 3 孔间距对晶体应力应变关系的影响

Fig. 3 Effects of distance between voids on the stress-strain relation

4.2 晶内孔洞尺寸的影响

在模型(a)中保持孔间距 $d = 8.3, A = 3.0\text{ nm}$ 不变,改变两孔的半径 r ,以考察孔洞尺寸对材料性能的影响。孔半径依次取为 $1.0\text{ Å}, 1.5\text{ Å}, 2.0\text{ Å}, 2.5\text{ Å}$ 和 3.0 Å ,试样构型如图 5 所示,球形孔包含的原子个数分别为 32, 115, 268, 527 和 909。模拟所得不同孔洞尺寸下的应力应变关系如图 6 所示。图 7 给出了弹性模量与孔洞半径之间的关系。容易

看出,随着孔洞半径增大,弹性模量呈明显的减小趋势,这是因为随着孔洞半径的增大,孔洞对材料的削弱作用越明显,而且孔内表面会相应增大,发生位错和滑移的概率增大,从而与表面位错和晶界位错相汇合的几率也增大,导致材料屈服应力显著降低。

4.3 晶界孔洞形状对弹性性能的影响

为了研究晶界上孔洞形状对材料弹性力学性能的影响,针对模型(b),选取 7 组晶界上含有体积相同而形状不同孔洞的试样进行模拟,如图 8 所示。孔洞位于试样的几何中心,关于 x, y, z 轴成中心对称,体积 $V = 4/3\pi(2A)^3$ 。假设孔洞沿 y 方向

的半轴长 a ,沿 x 方向的半轴长 b ,半轴比 $s = a/b$,则 7 组试样半轴比分别为 2.5, 2.0, 1.5, 1.0, 0.67, 0.5, 0.4。

沿 y 方向施加单向拉伸应变率载荷,得到应力应变关系如图 9 所示。弹性模量与半轴比之间的关系见图 10。可以发现,以 $s = 1$ (即孔洞为圆球) 为分界线,当 $s \geq 1$ 时,即椭球长轴与晶界垂直时,弹性模量和屈服应力的变化幅值相对较小;当 $s < 1$ 时,即椭球长轴与晶界平行时,出现两种情况:在 $0.67 \leq s < 1$ 区间,弹性模量变化不大,而在 $s < 0.67$

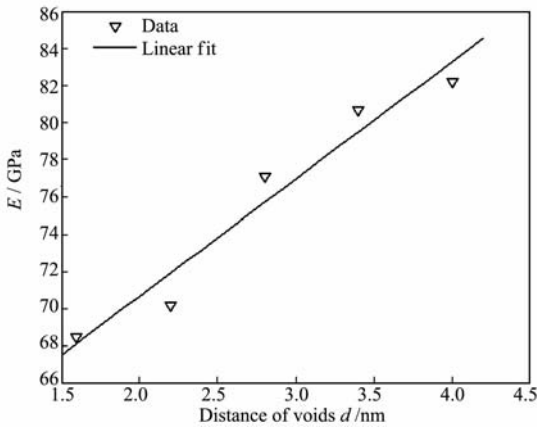


图 4 孔间距对晶体弹性模量的影响

Fig. 4 Effects of distance between voids on the elastic modulus

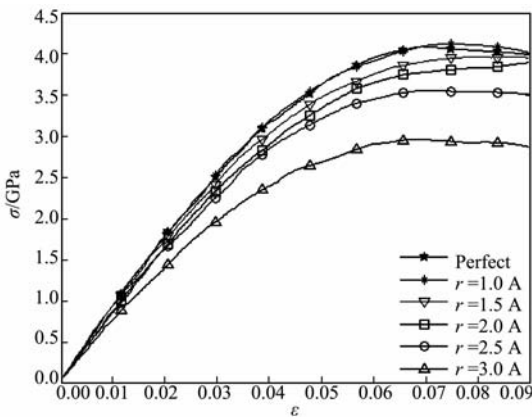


图 6 晶界孔洞尺寸对晶体应力应变关系的影响

Fig. 6 Effects of void sizes on the stress-strain relation

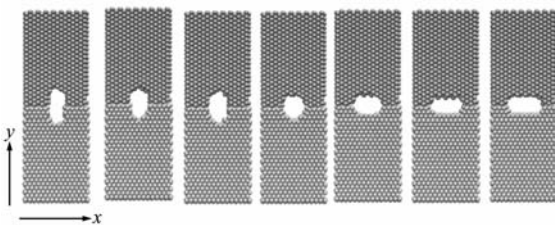


图 8 含相同体积不同形状球形孔洞的试样构型

Fig. 8 Original sample configuration with different-shaped voids on grain boundary

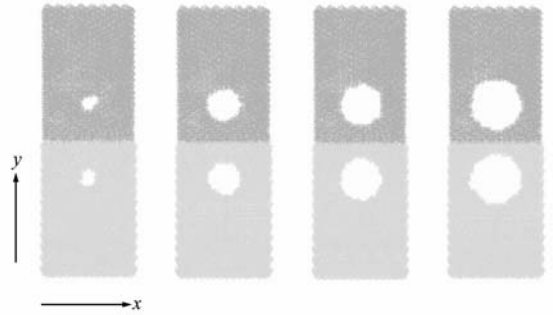


图 5 晶粒内部含不同半径孔洞的试样构型

Fig. 5 Original sample configuration with voids inside crystals

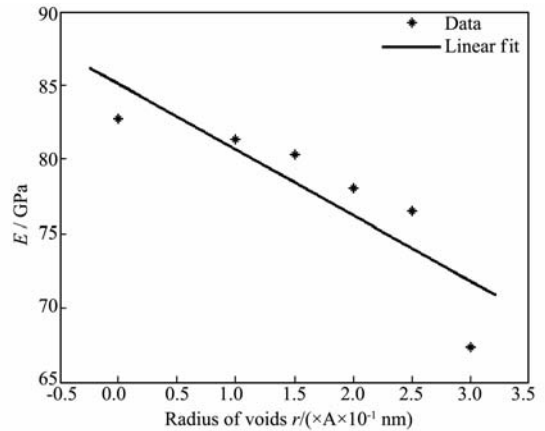


图 7 晶界孔洞尺寸对晶体弹性模量的影响

Fig. 7 Effects of void sizes on the elastic modulus

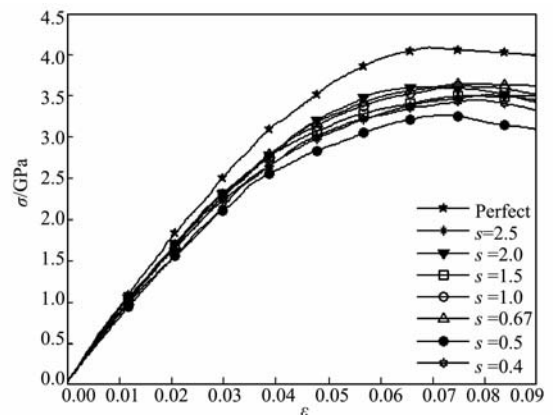


图 9 晶界孔洞形状对晶体应力应变关系的影响

Fig. 9 Effects of void shape on the stress-strain relation

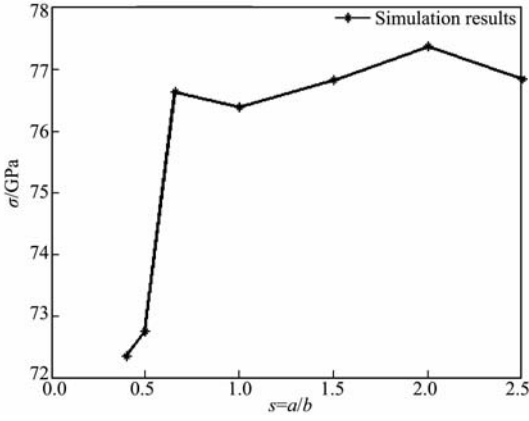


图 10 晶界孔洞形状对晶体弹性模量的影响
Fig. 10 Effects of void shape on the elastic modulus

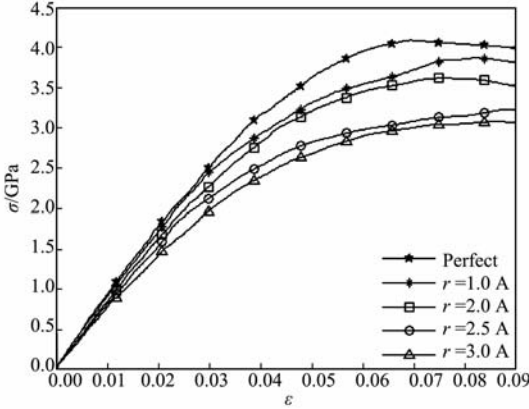


图 12 晶界孔洞尺寸对应力应变关系的影响
Fig. 12 Effects of grain-boundary void sizes on the stress-strain relation

区间,弹性模量突然变小。与 Yang^[4] 等对含不同形状孔洞单晶铜的模拟结果相比较发现,单晶铜弹性模量与孔洞半轴比大致呈现线性对数关系(文献[4]见图 8),即半轴比较小时,弹性模量较小,且变化明显,随着半轴比的增大,弹性模量增大且逐步趋于常数,双晶铜弹性模量对晶界处孔洞半轴比的响应趋势与单晶铜基本相似,区别在于存在一个突变点,这应该与晶界有着密切的关系。

4.4 晶界孔洞尺寸对弹性性能的影响

为了研究晶界上孔洞尺寸对弹性模量的影响规律,针对模型(b),保持孔洞形状为球形,依次改变孔洞半径 r 为 1.0 A, 2.0 A, 2.5 A 和 3.0 A,孔洞包含的原子数对应为 15, 128, 255 和 445。初始构型如图 11 所示。模拟得到的应力-应变关系如图 12 所示。孔洞半径对晶体弹性模量的影响如图 13 所示。可以看出,随着孔洞半径增大,弹性模量和屈服应力呈线性递减的趋势。这是因为,一方面,随着孔洞半径增大,孔洞与晶界的截面圆面积 $S = \pi r^2$ 呈平方关系增大,导致晶界面积迅速减小,晶体弹性模量迅速降低;另一方面,随着球形孔洞体积的

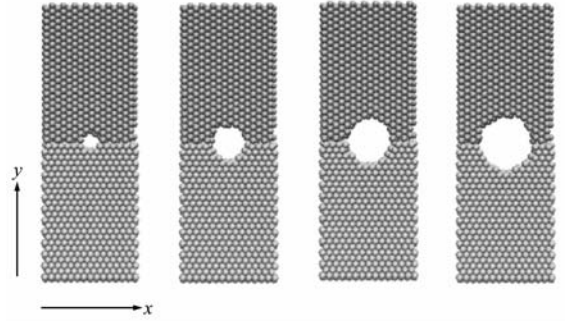


图 11 含不同尺寸晶界孔洞的试样构型
Fig. 11 Original sample configuration with different-sized voids on grain boundary

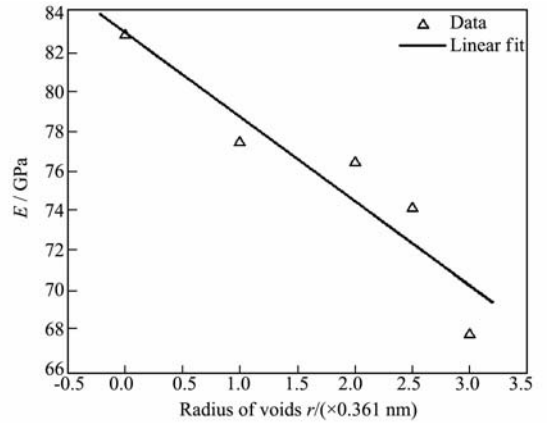


图 13 晶界孔洞尺寸对晶体弹性模量的影响
Fig. 13 Effects of grain-boundary void sizes on the elastic modulus

增大,表面积也在增大,孔洞内表面产生位错的几率增大,从而与晶界位错汇合的概率增大,同时由于孔洞表面与外表面的距离减小,与外表面位错汇合的可能性也增大,从而降低材料的屈服应力。这与 Yang^[4] 等有关单晶铜的模拟结果(见文献[4]图 5)基本一致。

4.5 晶界孔洞数量对弹性性能的影响

为了探究晶界孔洞数量对弹性性能的影响,针对模型(b),以 $r = 2A$ 时的晶界孔洞为例,保持孔洞总体积 $V = 4/3\pi r^3 = 4/3\pi \cdot 8A^3$ 不变,依次将孔洞按体积均分为 1, 2, 3 和 4 个,对应的孔洞半径依次为 0.722 nm, 0.575 nm, 0.502 nm 和 0.455 nm。晶体初始构型沿拉伸方向对晶界面的俯视图如图 14 所示。计算得到的应力应变曲线见图 15。弹性模量与孔洞数量的关系如图 16 所示。容易看出,当孔

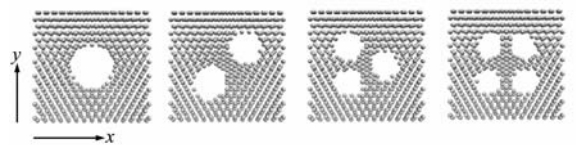


图 14 晶界上孔洞分布的初始构型俯视图
Fig. 14 Section configuration with different amount of voids on grain boundary

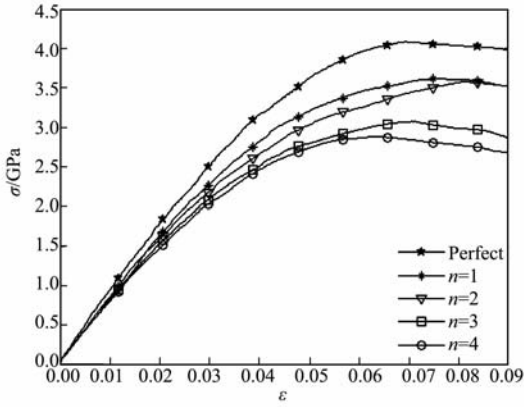


图 15 晶界孔洞数量对晶体应力应变关系的影响

Fig. 15 Effects of grain-boundary void amount on the stress-strain relation

洞体积不变时,随着孔洞数量的增多,弹性模量和屈服应力近似呈递减趋势。这是因为,一方面,当孔洞总体积 V 不变的情况下,晶界截得的孔洞截面积 $S = \sqrt[3]{3V\pi^2/4} \cdot n^{2/3}$,随着孔洞个数 n 增大,截面积 S 增大,晶界净面积减小,导致晶体弹性模量减小;另一方面,随着 n 增大,孔外侧表面与试样外表面的距离越短,孔洞表面发射的位错越容易与晶界位错和晶体外表面位错汇合;同时也容易与其他孔洞表面位错汇合,从而降低晶体屈服强度。

5 结 论

本文采用分子动力学方法对晶粒内部和晶界处含有孔洞的双晶铜试样在单向拉伸过程中力学行为进行了模拟,并通过分析得出如下结论:

(1) 孔洞的存在可以显著降低材料的弹性模量和屈服应力。

(2) 对于含有关于晶界对称的孔洞的双晶铜,随着孔间距的增大,晶体弹性模量和屈服应力明显增大,但是随着孔洞半径的增大,弹性模量和屈服应力迅速减小。

(3) 对于在晶界上含有孔洞的双晶铜试样,当椭球孔长轴与晶界垂直时,孔洞半轴比对弹性模量和屈服应力的影响不明显;当椭球孔长轴与晶界一致时,晶体弹性模量随孔洞半轴比的变化存在一个突变点。晶界孔洞体积对晶体弹性模量和屈服应力影响显著,随着孔洞半径的增大,弹性模量和屈服应力均呈递减趋势。如果保持晶界孔洞总体积不变,随着孔洞数量的增多,弹性模量和屈服应力会逐渐减小。

参考文献 (References):

[1] Westwood C, Pan J, Crocombe A D. Nucleation gro-

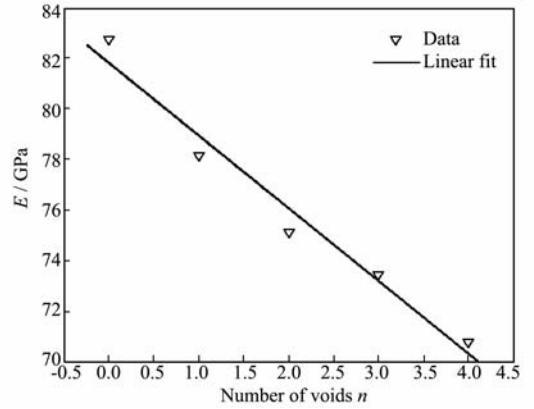


图 16 晶界孔洞数量对晶体弹性模量的影响

Fig. 16 Effects of grain-boundary void amount on the elastic modulus

wth and coalescence of multiple cavities at a grain-boundary[J]. *European Journal of Mechanics A/Solid*, 2004, **23**:579-597.

- [2] 郭 隽,陈 飞,郭成璧. 高温疲劳短裂纹萌生与扩展的实验研究[J]. *机械强度*, 2002, **24**(3):423-425. (GUO Jun, CHEN Fei, GUO Cheng-bi. Short fatigue crack initiation and propagation at elevated temperature[J]. *Journal of Mechanical Strength*, 2002, **24**(3):423-425. (in Chinese))
- [3] Yang X H, Zhou T, Chen C Y. Effective elastic modulus and atomic stress concentration of single crystal nano-plate with void[J]. *Computational Materials Science*, 2007, **40**:51-56.
- [4] 王 玉,刘 更,朱世俊. 带孔纳米单晶铜悬臂梁弯曲的分子动力学模拟[J]. *机械科学与技术*, 2006, **25**(9):1045-1048. (WANG Yu, LIU Geng, ZHU Shijun. Molecular dynamics simulation of the bending of a single crystalline nano-copper cantilever beam with holes[J]. *Mechanical Science and Technology*, 2006, **25**(9):1045-1048. (in Chinese))
- [5] Potirniche G P, Horstemeyer M F, Wagner G J, et al. A molecular dynamics study of void growth and coalescence in single crystal nickel[J]. *International Journal of Plasticity*, 2006, **22**:257-278.
- [6] Potirniche G P, Hearndon J L, Horstemeyer M F, et al. Lattice orientation effects on void growth and coalescence in fcc single crystals[J]. *International Journal of Plasticity*, 2006, **22**:921-942.
- [7] Stewart D, Cheong K S. Molecular dynamics simulations of dislocations and nanocrystals[J]. *Current Applied Physics*, 2008, **8**:494-497.
- [8] Geming S, Schreiber M. Impurity and vacancy clustering at the $\Sigma 3$ (1 1 1)[1 -1 0] grain boundary in strontium titanate[J]. *Chemical Physics*, 2005, **309**:3-

- 13.
- [9] Gao Z Y, Han F S, Wu J, et al. Mechanism of void formation in grain interior of ODS alloys [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2006, **419**:126-132.
- [10] Vincent P G, Monerie Y, Suquet P. Ductile damage of porous materials with two populations of voids[J]. *CR Mecanique*, 2008, **336**:245-259.
- [11] Wen Z X, Yue Z F. On the crystallographic study of growth characterization of isolated void in the grain boundary[J]. *Computational Materials Science*, 2007, **40**:140-146.
- [12] 温志勋,于庆民,岳珠峰.含与不含晶界空穴的双晶体蠕变行为研究[J].*计算力学学报*,2008,**25**(2):194-200.(WEN Zhi-xun, YU Qing-min, YUE Zhu-feng. Study on creep behavior of the bi-crystal with or without void in the grain boundary[J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2008, **25**(2):194-200.

Molecular dynamic simulation for uniaxial tension properties of bicrystal Cu with spherical void

ZHANG Ning, YANG Xin-hua*, CHEN Chuan-yao

(Department of Mechanics, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China)

Abstract: Molecular dynamic method is utilized for simulating bicrystal copper samples with spherical voids under uniaxial tension, and effects of two kinds of voids, inside the grains and on the boundary, on mechanical behaviors of bicrystals are investigated. It is shown from the results that the elastic modulus and yield stress of crystals decrease obviously due to voids. For the case that voids are inside the grains and symmetric with regard to the boundary, the elastic modulus and yield stress both increase with the increase of the distance between voids, and decrease with the increase of the void radius on the condition that the distance between voids is assumed to be constant. For the case that a void lies in the grain boundary, the void shape has great influence on tensile properties, and the elastic modulus and the yield stress both decrease gradually with the increase of the void radius. If the total volume of voids is fixed, the elastic modulus and the yield stress drop down when the void amount increases.

Key words: molecular dynamic; bicrystal copper; void; interface