

纳米多晶金属样本构建的 分子动力学模拟研究*

马 文¹⁾²⁾ 祝文军^{2)†} 张亚林³⁾ 陈开果²⁾ 邓小良²⁾ 经福谦¹⁾²⁾

1) (国防科学技术大学物理系, 长沙 410073)

2) (中国工程物理研究院流体物理研究所冲击波物理与爆轰物理国防科技重点实验室, 绵阳 621900)

3) (中国工程物理研究院计算机应用研究所, 绵阳 621900)

(2009 年 8 月 20 日收到; 2009 年 11 月 11 日收到修改稿)

研究了分子动力学模拟中纳米多晶金属样本的构建过程. 首先采用 Voronoi 几何方法生成初始的纳米多晶铝和铜样本, 然后用快速冷凝(或共轭梯度)法得到样本的局域最低能态, 最后在恒温零应力周围环境下(常温常压 NPT 系综)退火得到最低能态样本. 使用样本的残余内应力来衡量纳米多晶样本是否与实验制备的一致. 通过监测这两步弛豫过程中晶界结构的变化形态、体系平均内应力和能量下降过程及具体的局域分布和不同弛豫条件下最终样本的弹性常数, 发现样本的能量和残余内应力都接近实验制备的纳米多晶金属. 对 Voronoi 几何法生成的晶界而言, 5—10 ps 的快速冷凝(或共轭梯度法)能量最小化, 40—100 ps 的升温(温度控制在室温到 0.65 倍熔点)退火较合适, 弛豫时间和退火温度选择在一定范围内时对弛豫样品终态的力学性质影响很小.

关键词: 纳米多晶金属, 分子动力学, 应力, 能量

PACC: 6146, 6170N, 7115Q, 6220D

1. 引 言

由于金属材料通常是以多晶状态存在的, 不同取向晶粒间的界面(晶界, grain boundary, GB)大量存在于金属材料中. 晶界对于多晶金属材料的性能, 特别是对于多晶金属的强度和塑性机理等力学行为以及其他热力学现象有重要影响^[1]. 对纳米金属材料而言, 仅从体积比来看, 晶界影响就不可忽略^[2, 3]. 由于晶界通常只有几个原子层厚度, 难以通过实验直接观察, 传统的电镜观察需要将试样减薄, 在一定程度上会破坏多晶体的晶界结构. 同时晶界的结构存在很大的不确定性, 至今仍然没有建立统一的理论模型来描述晶界, 这使得晶界问题的模拟成为近年来计算材料学的研究重点之一^[4]. 分子动力学(MD)方法是一种原子尺度的数值实验方法, 通过统计力学分析可以从 MD 模拟结果中得知系统的静态和动态特性, 对一些理论上难以说明或实验中难以观察的现象可以给出原子尺度的解释,

特别适合研究纳米材料的晶界. 另一方面, 在材料的力学性能及动态响应研究中, 受目前实验手段在时间和空间分辨率上难以测得原子尺度信息的限制, 以及基于连续介质力学的方法在研究原子尺度问题时也碰到了理论困难, MD 模拟就成了研究纳米多晶金属原子尺度信息的理想手段.

在 MD 模拟纳米多晶面心立方结构(fcc)金属的静态和动态响应过程时, 非常重要的一步就是得到尽可能与实验样品接近的模拟样本, 因为纳米材料的结构和力学性质强烈地依赖于晶界的构型^[5]. 特别是模拟样本的初始内应力会严重影响进一步的纳米多晶力学行为研究, 只有使样本局域初始内应力与实验制备样品的残余内应力相近, 或者与外加的应力相比可忽略时才能尽可能地消除人为因素对纳米多晶研究的影响. 在实验中获得纳米材料的各种方法所需要的时间都在秒量级以上, 纳米材料中的晶界有足够的时间达到最稳定的结构, 也就是晶界能量最低的状态^[6]. 在 MD 模拟研究晶界对静态和动态力学性能影响时, 可以采用单晶颗粒压

* 冲击波物理与爆轰物理国防科技重点实验室基金(批准号:9140C6703010804, 9140C6701010902)和中国工程物理研究院科学技术发展基金(批准号:2007A01004)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: wjzhu@caep.ac.cn

缩法^[7] (cluster compaction)、液体快速冷凝法^[8] (quenching from the melt) 和 Voronoi 几何法^[9, 10] (Voronoi geometrical construction) 来生成晶界的初始构型. 单晶颗粒压缩法类似于实验制备纳米多晶的惰性气体冷凝法 (inert gas condensation, IGC), 指通过 MD 模拟高压恒温下压缩不同晶粒直径和随机取向的单晶颗粒集合来得到纳米多晶样本, 此样本密度严重依赖于外压, 且样本的孔洞率较高, 模拟的时间也比较长 (约 100—200 ps). 液体快速冷凝法通过 MD 快速冷凝放置随机取向和位置单晶小颗粒的熔化态金属得到纳米多晶样本, 这种方法得到的晶界结构对冷凝时间有强烈的依赖性, 需要纳秒量级的 MD 模拟时间, 但仍然远远高于实验制备纳米多晶的冷凝时间. Voronoi 几何法是现阶段模拟晶界的通用方法, 得到的初始结构经过了广泛的验证^[9—11]. 其基本思想是类似细胞生长的过程, 在预定的空间区域内随机取定 N 个点为母点, 然后以母点为基础依照晶体结构 (fcc, bcc) 排列原子的位置, 直到相邻两个母点生长出的原子间距离小于某一给定值 d_c 时, 剔除原子间距离小于 d_c 停止生长, 然后剔除原子间距离小于 d_c 的原子, 从而得到纳米多晶样本. 图 1 为二维的 Voronoi 几何法示意图. Voronoi 几何法得到的样本中的晶界大多是大角度晶界, 通过控制晶粒间的取向差可以得到小角度或特定类型的晶界, 且晶粒大小符合 log-normal 分布^[12] 而与实验制备的块体纳米材料的晶粒大小分布一致^[13]. 这三种方法得到的纳米多晶样本的能量和残余内应力都高于实际材料, 如何根据初始构型得到尽可能接近真实材料的样本成为了首先需要解决的问题. 在 MD 模拟中由于受到模拟时间尺度的限制, 很难使晶界原子像实验中那样有充分的时间达到最低能态, 所以样本初始构型的能量最小化过程是进一步模拟纳米材料静态和动态过程的重要步骤^[5]. Schiøtz 等^[11] 使用快速冷凝能量最小化方法 (quenching, 也叫最速下降法, the steepest descents method) 和常温常压 (NPT) 系综下的退火 (annealing) 方法模拟了用 Voronoi 方法得到的纳米多晶 Cu 弛豫过程; 认识到 NPT 系综中温度的高低和弛豫时间对最终体系的物理状态影响不大, 但缺乏详细的分析, 也没有解释具体原因. 其他大多数工作中^[14—17], 只是简单说明了对初始构型的弛豫过程, 经验地使用很长的计算时间 (100 ps 左右) 来确保弛豫的充分, 而不能根据弛豫过程中的原子信息

确定弛豫多长时间为充分. 在 MD 模拟实践中如何选取合适的弛豫方法和参数才能保证下一步对材料静态或动态过程模拟的正确性, 这也是 MD 方法中构建纳米多晶金属样品的首要问题. 本文主要研究如何从 Voronoi 几何法得到的纳米多晶初始样本构建稳定的与实验样品尽可能一致的纳米多晶样本, 通过分析不同弛豫方法和参数条件下得到的最终体系原子平均能量、温度、内应力和弹性常数等宏观量, 以期阐明弛豫方法和参数对体系终态的影响程度, 以及如何调节构建过程实现模拟纳米多晶样品与真实材料的一致性.

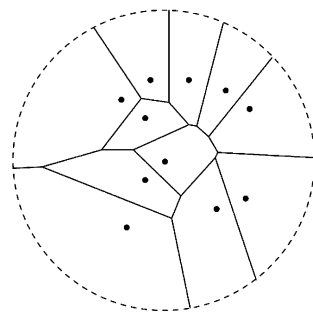


图 1 二维的 Voronoi 几何法示意图

2. 计算模拟方法

本文具体采用与文献 [9] 中类似的 Voronoi 几何法来构建初始的纳米多晶样本, 共模拟了三个样本的弛豫过程, 样本详细参数见表 1. 使用 LAMMPS^[18] 和本组开发的并行 MD 程序^[19, 20] 分别模拟了纳米多晶 Cu 和 Al 的弛豫过程, 为了消除体系大小的影响, 弛豫过程中三个方向都采用周期性边界条件. 本文使用 LAMMPS 中的共轭梯度 (conjugate gradient) 法来获得能量最小化的纳米多晶 Cu 样本, 而采用本组 MD 程序中的快速冷凝方法弛豫纳米多晶 Al 的初始结构. 为了使原子充分运动找到体系的最低能态, 消除经过第一步能量最小化弛豫的体系仍然存在的高内应力, 采用 Parrinello-Rahman 方法^[21] 控制应力和 Nosé-Hoover 方法^[22, 23] 控制温度对此体系进行 NPT 系综下的升温退火弛豫. Cu 和 Al 的相互作用采用嵌入原子方法 (EAM) 势^[24, 25] 来描述, 这两种 EAM 势的适用性都经过了本组并行 MD 程序的验证^[26, 27]. 使用键对分析方法^[28] 来分析原子结构, 依照 Cormier 等^[29] 提出的原子应力分析方法来分析体系的内应力, 弛豫过程中时间步长全

部取为 1 fs.

表 1 本文模拟样本的详细参数

样本	晶粒数	平均晶粒大小/nm	总原子数	尺寸/nm × nm × nm
Al_a	6 × 3 × 3	6.1	696437	36.4 × 18.2 × 18.2
Al_b	6 × 3 × 3	10.1	3284189	60.7 × 30.4 × 30.4
Cu	12 × 3 × 3	10	8890000	120 × 30 × 30

3. 计算结果与讨论

图 2(a) 是用 Voronoi 方法得到的样本 Al_a 的初始形貌, 其中浅灰色代表具有正常 fcc 结构的原子, 黑色表示晶界原子(下同). 样本 Al_a 的初始密度为理想单晶的 93%, 晶界原子占总原子数的 28.3%. 可以从图 2(a) 看出晶界和三晶交(triple junction, TJ)都比较平直, 此时晶界原子的能量和内应力都很高, 与真实材料相差较远. 仔细观察图 2(a) 发现用 Voronoi 方法生成的初始构型中的晶界大多是大角度(high-angle)晶界, 但也存在少量的小角度(low-angle)晶界; 图 2(a) 中的白色圆圈及其放大图就是一个典型的小角度晶界. 图 2(b) 和 (c) 则显示了样本 Al_a 的平均动能和内应力经过 1 ps 和 5 ps 快速冷凝后的纵向分布, 通过统计沿纵向切片(slice)内原子信息得到, 每个切片的纵向长度为 2 倍晶格常数. 从图 2(b) 和 (c) 可以看出经过 1 ps 的快速冷凝后体系的温度已接近零度, 而对应晶界处的内应力仍然比较高. 经过 5 ps 的快速冷凝后的内应力下降, 但仍然高达数百 MPa, 而动能没有明显的下降(见图 2(c)). 图 3 给出了样本 Al_a 整体能量和内应力的统计平均随时间的演化过程, 可以看出经过 5 ps 后原子平均能量和应力的下降趋势变缓, 此时原子平均能量与理想单晶的结合能(-3.36 eV)^[25] 相差不到 0.8%, 部分原因可归结为晶界原子的存在使平均原子能量高于理想单晶. 而我们使用更长时间(15 ps)的快速冷凝发现平均原子能量只比 5 ps 弛豫降低了 0.04%, 能量下降速度缓慢且不能明显地降低体系能量; 在局域内应力方面也没有改善. 由于快速冷凝得到的只是局域最低能态, 仍需要进一步地弛豫, 如果受到计算能力的限制可选取快速冷凝时间为 5—10 ps. 与样本 Cu 使用共轭梯度能量最小化方法相比, 二者的差别不大, 在经过约 5—10 ps 的能量最小化后平均原子能量基本不再下降, 如图 4 所示. 事实上, 快速冷凝法和共轭

梯度法在本质上是相同的, 都只能得到局域能量最低态; 不同的是快速冷凝法在优化初始能量比较高的体系时需要时间更短, 但当体系接近能量最低态时效率低, 而共轭梯度法效率比较高. 因此, 对 Voronoi 方法生成的含晶界的初始构型使用快速冷凝法或共轭梯度法进行 5—10 ps 的能量最小化弛豫使晶界原子能量快速下降都是合适的.

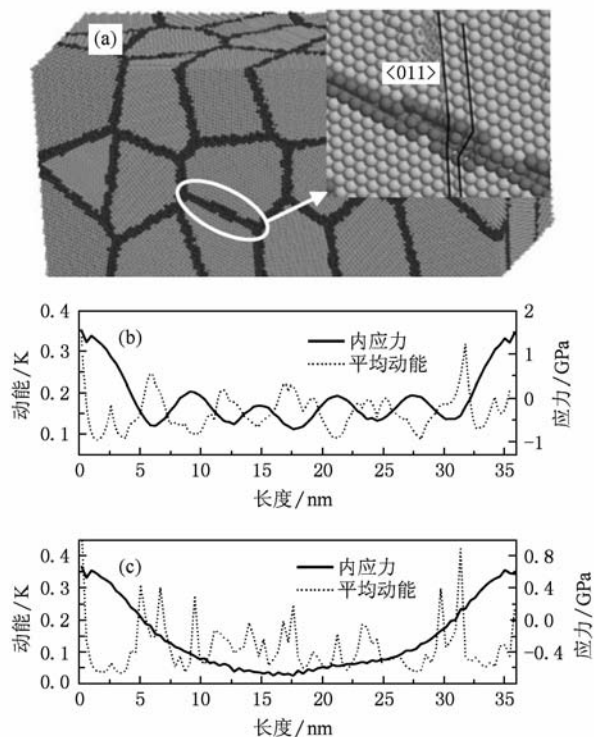


图 2 样本 Al_a 的初始构型和在快速冷凝弛豫过程中的平均动能和内应力的纵向分布 (a) 初始构型, 浅灰色表示 fcc 原子, 黑色表示晶界原子; (b) 快速冷凝弛豫过程中 1 ps 时的平均动能和内应力纵向分布; (c) 快速冷凝弛豫过程中 5 ps 时的平均动能和内应力纵向分布

上一步弛豫只能得到含晶界纳米材料的局域最低能态, 为了使模拟体系更接近真实材料, 需要对体系进行全局能量最小化(global minimization)弛豫, 我们采用模拟退火方法(simulated annealing, SA)^[30]来完成这一步骤. 由于体系经过第一步弛豫后原子动能基本为零, 无法越过势垒到达全局最低能态, 而只能停留在局域最小能态, 因此使体系升温退火是得到全局最低能态的一种有效方法. 图 5 显示了样本 Al_a 和样本 Al_b 在 300 K 退火过程中平均原子能量和内应力随时间的变化过程. 可以看出平均原子能量由于升温后的热效应在振荡中逐

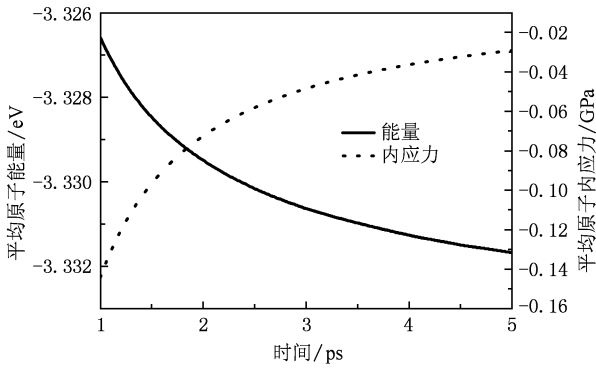


图3 样本 Al_a 在快速冷凝弛豫过程中的平均原子能量和内应力

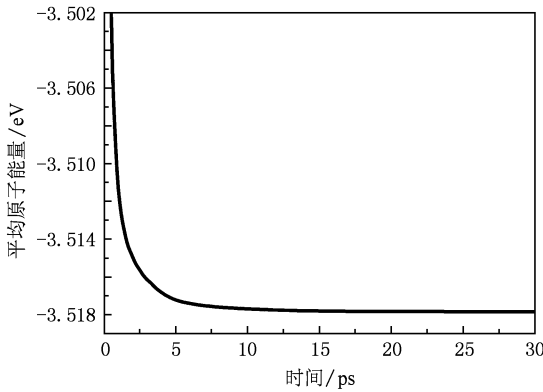
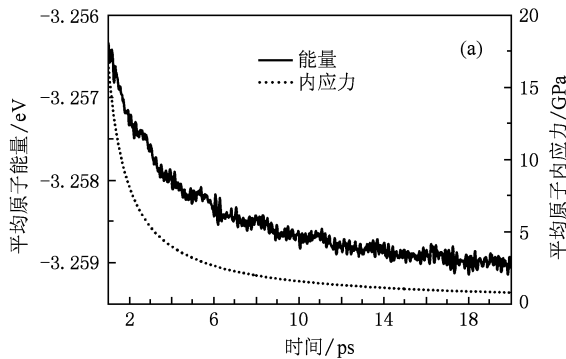


图4 样本 Cu 在共轭梯度法能量最小化过程中的平均原子能量

渐下降. 与此同时内应力下降较快, 已接近 0 MPa, 而实验制备的纳米多晶材料由于制备时间足够长, 除了在缺陷处存在微小的内应力外, 完整晶格处内应力几乎为 0, 所以从平均内应力来讲我们模拟的样品已接近实际材料. 实际上, 由于晶界原子的存在, 仍然会存在一定的局域内应力. 图 6 给出了经过



300 K 退火 20 ps 后样本 Al_a 的晶界形貌与动能和内应力的纵向分布. 从图 6(a) 可以看出, 经过快速冷凝和退火两步弛豫后, 晶界和三晶交不再平直, 而更接近不规则曲线, 这与 TEM 观察到的晶界结构一致, 并且在他人的弛豫过程中也发现了这一现象^[5]. 我们同时发现初始构型中的小角度晶界(图 2(a) 中的白色圆圈处)在弛豫过程中会发生晶粒旋转而使相邻晶粒的取向差减小, 甚至合并为同一晶粒, 如图 6(a) 中的白色圆圈所示, 这是因为对小角度晶界而言, 晶粒间取向差越小, 晶界的能量越低. 图 6(b) 和 (c) 显示动能和内应力在 1 ps 和 20 ps 时的纵向分布(切片方法同图 2). 可以看出动能在弛豫 20 ps 后在 300 K 附近振荡; 纵向内应力不再像图 2(b) 和 (c) 明显对应晶界, 而是呈不规则的分布, 但平均应力接近 0. 一方面是由于晶界经过弛豫不再具有很高的应力, 与晶粒内部应力差距不是很明显; 另一方面经过弛豫后晶界原子发生运动使应力不再集中在晶界处, 同时晶粒内部也存在一定的内应力. 经过这两步弛豫后发现样品的残余应力在百 MPa 量级, 与电气沉积法制备的近平衡态纳米金属材料的残余应力相近, 而低于严重塑性变形法得到的材料^[31]. 然而我们依旧不能认为弛豫已经足够充分. 为了说明在模拟中如何选择退火温度和模拟时间, 我们进一步模拟了样本 Al_a 和 Al_b 在更高温度和更长时间下的退火过程并计算了不同弛豫条件下的弹性常数. 图 7(a) 和 (b) 分别是样本 Al_a 在 300 K 退火 55 ps 和在 600 K 退火 40 ps 后样品终态的平均动能和内应力的纵向分布(切片方法同图 2). 从图中可以看出, 经过长时间室温下退火时应力也只能达到百 MPa 以下, 而采用更高温度(600 K)退火却能在更短时间内使样品局域内应力降低到 50 MPa 以下. 对样本 Al_b 而言, 稍低温度(500

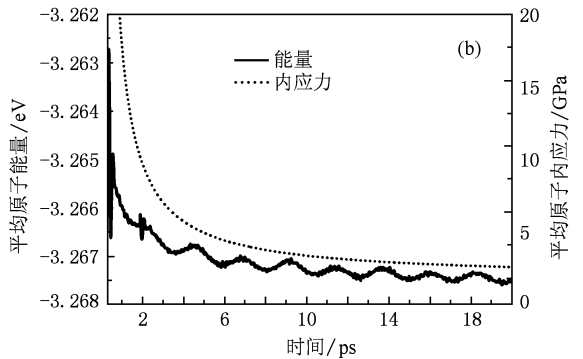


图5 模拟样本在 300 K 退火过程中的平均原子能量和内应力 (a) 样本 Al_a, (b) 样本 Al_b

K) 和更长时间的退火也只能使最大局域内应力降到 50 MPa 以下 (见图 8). 在 MD 模拟静态力学过程时, 外加的应力为几个 GPa^[11], 如果金属的残余内应力达到其十分之一, 即几百 MPa, 这种对初始结构弛豫的不彻底会严重影响晶界的变形过程, 甚至得到一些错误的模拟结果. 为了避免高局域内应力带来的问题, 我们建议弛豫时间在计算能力许可的情况下要尽量长, 但不需要超过 100 ps, 可根据计算能力选择为 40—100 ps; 而退火温度也需要尽量高, 但需要低于金属熔化温度, 可控制在室温到 0.65 倍熔点间, 因为纳米多晶金属在远低于块体材料熔点的高温就会造成晶界的预熔化^[4]. 在 MD 模拟动态力学过程时, 外加的应力高达十几到几十甚至几百 GPa^[26], 可适当减少弛豫时间将残余内应力控制在百 MPa 以下即可. 如果需要模拟某种实验制备纳米多晶金属, 特别是具有高残余应力的样品时, 可根据其残余应变推算残余内应力来适当控制弛豫的时间和退火温度, 使得模拟样品与实验样品的残余内应力相一致. 我们同时发现不同条件下弛豫后纳米多晶金属的晶界形态区别却不大, 样本最终的密度

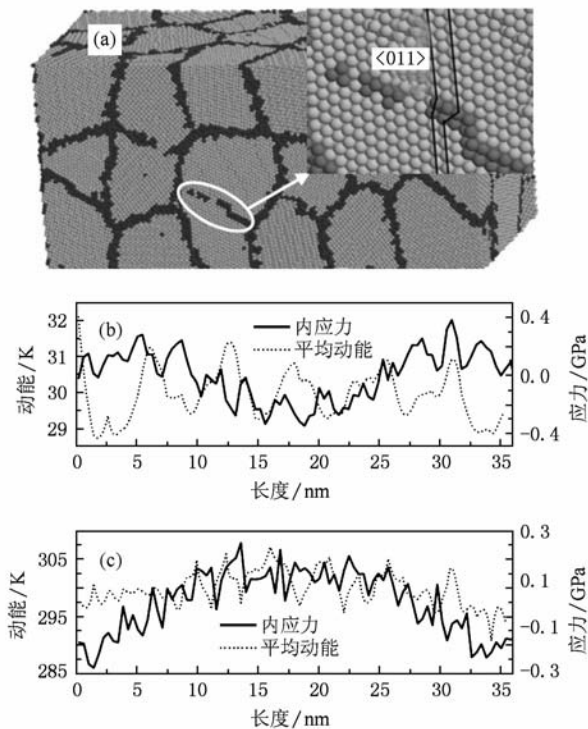


图 6 样本 Al_a 经过 5 ps 快速冷凝和 300 K 退火 20 ps 后的结构和在退火过程中 1 ps 和 20 ps 时平均动能和内应力的纵向分布 (a) 经过 5 ps 快速冷凝和 300 K 退火 20 ps 后的结构 (浅灰色代表 fcc 原子, 黑色代表晶界原子); (b) 在 300 K 退火过程中 1 ps 时的平均动能和内应力纵向分布; (c) 在 300 K 退火过程中 20 ps 时的平均动能和内应力的纵向分布

都约为单晶的 97%—99%. 从样本 Al_a 和 Al_b 弛豫后的弹性常数 (见表 2) 来看, 模拟值和实验值^[32]存在一定的差距. 这主要是因为实验值是由粗晶 Al 测得的^[32], 而我们模拟的是纳米多晶, 存在差距是可以理解的; 另外我们模拟的样本尺度还很小, 晶粒取向也是随机生成, 不能完全保证各向同性. 比较样本 Al_a 和 Al_b 弛豫后间的差异, 可以预见, 随着模拟体系的增大, 弹性常数会越来越接近实验值. 对不同弛豫条件得到样本 Al_a 的弹性常数而言, 差距并不明显, 结合前面的分析和表 2 可以认为样本 Al_a 弛豫 20 ps 是不充分的.

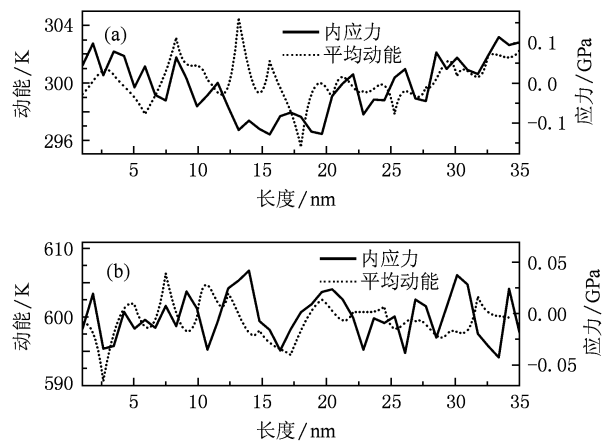


图 7 样本 Al_a 在 300 K 退火 55 ps 和在 600 K 退火 40 ps 后终态的平均动能和内应力的纵向分布 (a) 在 300 K 退火 55 ps, (b) 在 600 K 退火 40 ps

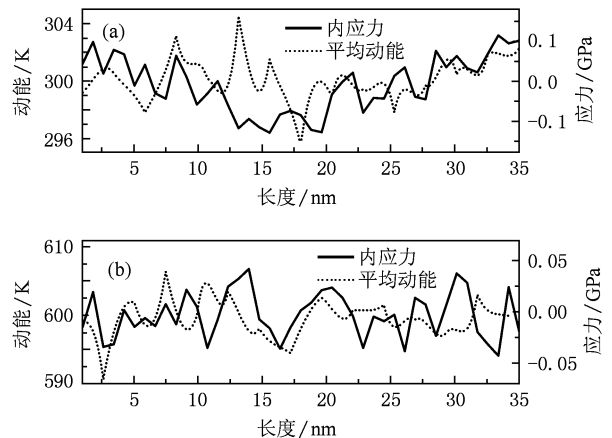


图 8 样本 Al_b 在 300 K 退火 20 ps 和在 500 K 退火 95 ps 后样品终态的平均动能和内应力的纵向分布 (a) 在 300 K 退火 20 ps, (b) 在 500 K 退火 95 ps

表 2 不同退火时间和温度下的弹性常数

样本	退火时间/ps	退火温度/K	C_{11} /GPa	C_{12} /GPa	C_{44} /GPa	各向异性因子
Al _a	20	300	110.3	51.2	22.0	0.75
	40	600	107.5	54.3	20.4	0.77
	55	300	104.6	51.1	22.1	0.83
Al _b	20	300	111.3	54.8	24.7	0.87
Al ^[32]	$C_{11} = C_{12} + 2 \times C_{44}$		106.9	53.9	26.5	1.00

4. 结 论

此前国内外的工作中尽管在大量使用 MD 方法模拟 Voronoi 几何方法生成的含晶界缺陷的纳米多晶金属的静态和动态力学过程,并且也说明了样本初始构型的弛豫过程和方法.然而未见有文献详细给出初始构型弛豫过程中晶界结构的变化形态和体系内应力和能量的具体下降过程,也就不能确认弛豫到什么程度合适,只能凭经验来设计弛豫过程和参数.本文通过不同方法和弛豫参数模拟了三个不同样本的弛豫过程,计算了弛豫过程中样本的平均能量、内应力和弹性常数等物理量,首次使用样本的残余内应力来衡量纳米多晶样本是否与实验制备样品的一致.模拟结果表明,对用 Voronoi 几何方法生成的纳米多晶金属进行局域能量最小化和全局能量最小化两步弛豫是合适的,可分别采用快速冷凝法(或共轭梯度法)和升温退火两种算法来实现.在快

速冷凝过程中由晶界带来的高能量很快下降;虽然整体平均内应力也随之下落,但体系的局部内应力仍然很高,快速冷凝时间可选择为 5—10 ps,更长时间的弛豫并不能使能量和内应力明显下降.在退火过程中原子平均能量随着晶界原子的进一步重排振荡下降,并且晶界处原子的结构发生了变化,小角度晶界可能消失;退火时间可选择为 40—100 ps,退火温度需要在室温至材料熔点的 0.65 倍之间.此时,体系的平均内应力已达到 0.1 MPa,局部内应力也低于百 MPa,与实验制备的纳米金属材料残余应力一致,达到了下一步静态或动态模拟的要求.不同退火时间和温度下得到最终样品的弹性常数变化不大,说明在合适的范围内选择弛豫时间和参数,对样本最终的性质基本无影响.

感谢中国工程物理研究院应用计算机研究所平永红在并行计算过程中提供的帮助.

- [1] Weertman J R 2002 *Nanostructured Materials: Processing, Properties, and Potential Applications* (New York: William Andrew Publishing) p397
- [2] Wang H T, Yang W 2004 *Adv. Mech.* **34** 13 (in Chinese) [王宏涛、杨卫 2004 力学进展 **34** 13]
- [3] Jiang B, Weng G J 2004 *J. Mech. Phys. Solids* **52** 1125
- [4] Zhang L, Wang S Q, Ye H Q 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2497 (in Chinese) [张林、王绍青、叶恒强 2004 物理学报 **53** 2497]
- [5] van Swygenhoven H, Derlet P M 2008 *Dislocations in Solids* (Amsterdam: Elsevier) p1
- [6] Meyers M A, Mishra A, Benson D J 2006 *Prog. Mater. Sci.* **51** 427
- [7] Kadau K, Germann T C, Lomdahl P S, Holian B L, Kadau D, Entel P, Kreth M, Westerhoff F, Wolf D E 2004 *Metall. Mater. Trans. A* **35** 2719
- [8] Koblinski P, Wolf D, Phillpot S R, Gleiter H 1999 *Scripta Mater.* **41** 631
- [9] Chen D 1995 *Comput. Mater. Sci.* **3** 327
- [10] van Swygenhoven H, Caro A 1997 *Nanostruct. Mater.* **9** 669
- [11] Schiøtz J, Vegge T, di Tolla F D, Jacobsen K W 1999 *Phys. Rev. B* **60** 11971
- [12] Dalla Torre F, van Swygenhoven H, Victoria M 2002 *Acta Mater.* **50** 3957
- [13] Frøseth A G, Derlet P M, van Swygenhoven H 2006 *Scripta Mater.* **54** 477
- [14] van Swygenhoven H, Derlet P M 2001 *Phys. Rev. B* **64** 224105
- [15] Yamakov V, Wolf D, Phillpot S R, Gleiter H 2002 *Acta Mater.* **50** 5005
- [16] Bringa E M, Caro A, Wang Y M, Victoria M, McNaney J M, Remington B A, Smith R F, Torralva B R, van Swygenhoven H 2005 *Science* **309** 1838
- [17] Xu Z, Wang X X, Liang H Y, Wu H A 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 3637 (in Chinese) [徐洲、王秀喜、梁海戈、吴恒安 2004 物理学报 **53** 3637]
- [18] Plimpton S J 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [19] Cui X L, Zhu W J, Deng X L, Li Y J, He H L 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 5545 (in Chinese) [崔新林、祝文军、邓小良、李英骏、贺红亮 2006 物理学报 **55** 5545]
- [20] Deng X L, Zhu W J, He H L, Wu D X, Jing F Q 2006 *Acta*

- Phys. Sin.* **55** 4767 (in Chinese) [邓小良、祝文军、贺红亮、伍登学、经福谦 2006 物理学报 **55** 4767]
- [21] Parrinello M, Rahman A 1980 *J. Appl. Phys.* **52** 7182
- [22] Hoover W G 1989 *Phys. Rev. A* **40** 2814
- [23] Nose S, Yonezawa F 1986 *J. Chem. Phys.* **84** 1803
- [24] Mishin Y, Mehl M J, Papaconstantopoulos D A, Voter A F, Kress J D 2001 *Phys. Rev. B* **63** 224106
- [25] Mishin Y, Parkas D, Mehl M J, Papaconstantopoulos D 1999 *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **538** 535
- [26] Zhu W J, Song Z F, Deng X L, He H L, Cheng X Y 2007 *Phys. Rev. B* **75** 024104
- [27] Wang H Y, Zhu W J, Song Z F, Liu S J, Chen X R, He H L 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3703 (in Chinese) [王海燕、祝文军、宋振飞、刘绍军、陈向荣、贺红亮 2008 物理学报 **57** 3703]
- [28] Honeycutt J D, Andersen H C 1987 *J. Phys. Chem.* **91** 4950
- [29] Cormier J, Rickman J M, Delph T J 2001 *J. Appl. Phys.* **89** 99
- [30] Bulatov V V, Cai W 2006 *Computer Simulations of Dislocations* (Oxford: Oxford University Press) p42
- [31] Wu X L, Zhu Y T, Ma E 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 121905
- [32] Liu X M 2003 *Micro- and Meso-Scale Structure and Mechanical Properties of Engineering Materials* (Hefei: University of Science and Technology of China Press) p112 (in Chinese) [刘孝敏 2003 工程材料的微细观结构和力学性能 (合肥: 中国科学技术大学出版社) 第 112 页]

Construction of metallic nanocrystalline samples by molecular dynamics simulation *

Ma Wen¹⁾²⁾ Zhu Wen-Jun^{2)†} Zhang Ya-Lin³⁾ Chen Kai-Guo²⁾ Deng Xiao-Liang²⁾ Jing Fu-Qian¹⁾²⁾

1) (Department of Physics, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

2) (National Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics, Institute of Fluid Physics, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China)

3) (Institute of Computer Application, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China)

(Received 20 August 2009; revised manuscript received 11 November 2009)

Abstract

The construction of metallic nanocrystalline (NC) samples by molecular dynamics simulation is investigated. Firstly, the initial NC aluminum and copper samples are assembled by Voronoi geometrical construction method, then the local minimized energy states of the samples are obtained by quenching (or conjugate gradient method). Finally, the simulated annealing method in normal pressure and temperature condition ensembles at zero pressure is used to approximate the global minimized energy states of the samples. The residual internal stress is employed to signify the difference between the simulated and the experimentally synthesized samples for the first time. The structure of grain boundaries, the descending process and the local distribution of the average internal stress and the energy of the samples, as well as the elastic constants of the final samples are observed during these two relaxation procedures. It is found that the energy and the residual internal stress of the samples are close to the experimental data after relaxation. It is enough to obtain the global minimum energy states through Voronoi geometrical construction to investigate the static and dynamic mechanical properties of NC metals with a 5—10 ps local energy minimization and a 40—100 ps of simulated annealing with annealing temperature between the room temperature and 65% of melting point. The annealing time and temperature are of little importance to the mechanical properties within the parameter windows properly selected.

Keywords: nanocrystalline metal, molecular dynamics, stress, energy

PACC: 6146, 6170N, 7115Q, 6220D

* Project supported by the Science and Technology Foundation of National Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics, China (Grant Nos. 9140C6703010804, 9140C6701010902) and the Science and Technology Development Foundation of China Academy of Engineering Physics (Grant No. 2007A01004).

† Corresponding author. E-mail: wjzhu@caep.ac.cn