

堆垛层错和温度对纳米多晶镁变形机理的影响*

宋海洋^{1)2)†} 李玉龙^{1)‡}

1) (西北工业大学航空学院, 西安 710072)

2) (西安邮电大学理学院, 西安 710121)

(2012年5月21日收到; 2012年6月19日收到修改稿)

本文采用分子动力学模拟方法研究了在拉伸载荷下, 堆垛层错和温度对纳米多晶镁力学性能的影响. 在模拟中, 采用嵌入原子势描述镁原子之间的相互作用. 计算结果表明: 在纳米晶粒中引入堆垛层错能明显增强纳米多晶镁的屈服应力, 但堆垛层错对纳米多晶镁杨氏模量的影响很小; 温度为 300.0 K 时, 孪晶在晶粒交界附近形成, 孪晶随着拉伸应变的增加而逐渐生长. 当拉伸应变达到 0.087 时, 一种基面与 X - Y 面成大约 35° 角且内部包含堆垛层错的新晶粒成核并快速增长. 也就是说, 孪晶和新晶粒的形成和繁殖是含堆垛层错的纳米多晶镁在 300.0 K 温度下的主要变形机理. 模拟结果也显示, 当温度为 10.0 K 时, 位错的成核和滑移是含堆垛层错的纳米多晶镁拉伸变形的主要形式.

关键词: 堆垛层错, 分子动力学模拟, 力学性质

PACS: 62.25.-g, 33.15.xv, 61.82.Rx

1 引言

纳米金属材料具有传统金属材料所不具有的非常独特的力学性能, 从而作为一种新型材料在航空、航天、汽车及其电子等工业中展现出广阔的应用前景. 目前, 人们对于纳米多晶金属力学性能和变形机理的认识主要基于纳米多晶面心立方结构 (fcc) 金属的研究^[1-10], 而对纳米晶六角密堆结构 (hcp) 金属及其合金材料力学性能的研究则相对非常稀少^[11-17]. 纳米多晶 hcp 金属的变形机理与纳米多晶 fcc 金属的变形机理明显不同. 对许多 hcp 金属材料来说, 其密排六方的晶体结构限制了可供位错运动的有效的滑移系数, 其塑性相对于 fcc 金属而言都比较差, 变形困难, 且易出现变形缺陷, 这在一定程度上制约了 hcp 金属在各个领域上应用. 到目前为止, 人们对纳米多晶 hcp 金属及其合

金属材料在变形过程中的变形机理的认识尚不清晰, 许多现象还有待进一步揭示^[18].

金属镁作为 hcp 金属的典型代表, 由于其具有低密度、高强度比和高比弹性模量等特点, 近年来已经成为科学研究的热点问题. Li 等用分子动力学模拟方法研究 hcp 金属镁的变形机理时发现, 带状位错的成核和滑移促使了形变孪晶的形成^[14]. Guo 等用分子动力学模拟方法研究了单晶镁在单向拉伸作用下的力学性能和微观结构的演化过程^[15]. 最近, 我们用分子动力学模拟方法研究了晶粒尺寸和温度对二维柱状结构纳米多晶金属镁力学性能的影响, 发现纳米多晶镁的变形机理对晶粒尺寸和环境温度有明显的依赖^[16,17]. 然而, 堆垛层错对纳米多晶镁力学性能影响的研究仍鲜有报道.

本文采用分子动力学模拟方法研究了二维柱状结构的纳米多晶镁在拉伸载荷作用下, 堆垛层错和温度对其变形机理的影响. 发现了温度和堆

* 国家自然科学基金重点项目 (批准号: 10932008)、国家自然科学基金青年项目 (批准号: 10902083) 和陕西省青年科技新星计划项目 (批准号: 2012KJXX-39) 资助的课题.

† E-mail: gsfshy@sohu.com

‡ E-mail: liyulong@nwpu.edu.cn

垛层错对纳米多晶镁力学性能影响的一些规律, 该研究为制备高性能的纳米多晶镁提供了科学的理论依据.

2 模拟方法和模拟过程

采用分子动力学模拟方法进行计算机模拟, 其结果是否准确的关键在于原子间相互作用势函数的选取. 在模拟计算中, 本文采用 Liu 等提出的镶嵌原子势函数^[19]描述镁原子间的相互作用, 该势函数已经被广泛用来模拟金属镁的位错成核、堆垛层错能以及孪晶变形^[13,14]. 模拟算法采用 Verlet 蛙跳法算法, 该算法的优点是使用简便, 占用存储量少. 计算程序采用 Nose-Hoover 方法^[20]进行等温调节, 保证系统在变形过程中始终保持温度不变. 本文对 10.0 K 和 300.0 K 两种温度下对晶粒中含有堆垛层错和不含有堆垛层错的纳米多晶镁的变形机理进行了模拟. 在模拟中, 采用公共近邻分析方法^[21]来分析模型的变形结构, 通过 Open Visualization Tool^[22]软件进行原子结构的做图.

纳米多晶镁的初始结构通过 Voronoi 方

法^[23]进行构建. 模型的尺寸均为 $39.8 \text{ nm}(X) \times 46.2 \text{ nm}(Y) \times 2.2 \text{ nm}(Z)$, 原子总数大约为 178000. 每个模型都包含 4 个柱状六边形晶粒, 为了避免初始结构在相邻晶粒形成孪晶, 相邻晶粒取向差别角度分别为 11.25° , 33.75° , 56.25° 和 78.75° . 图 1 分别显示了晶粒中不含堆垛层错和含堆垛层错的纳米多晶镁的初始结构. 图中深色代表 HCP 结构原子, 浅色原子代表堆垛层错, 白色代表其他类型的原子, 包括 fcc 结构原子、位错结构原子和晶界原子 (如果没有特殊说明, 下面所有的原子结构图都遵守该原则). 虽然, 二维柱状结构的纳米多晶镁是一种简单的模型, 但是由于纳米多晶金属薄膜在实验上比较容易制备, 因此对柱状结构的纳米多晶金属薄膜材料的研究在实验上已经比较普遍. 在模拟中, 试样的三个方向都采用周期边界条件. 模拟过程为: 在等温和零压条件下, 先对初始构型进行进行弛豫, 使系统的能量达到最小值; 在模型的 Y 方向上施加 0.001 的拉伸应变, 在 X 和 Z 方向保持零压, 然后固定 Y 方向的边界, 让系统弛豫 2000 步, 使系统回到平衡态. 重复上述施加位移载荷、弛豫过程, 使模型原子处于准静态受力状态.

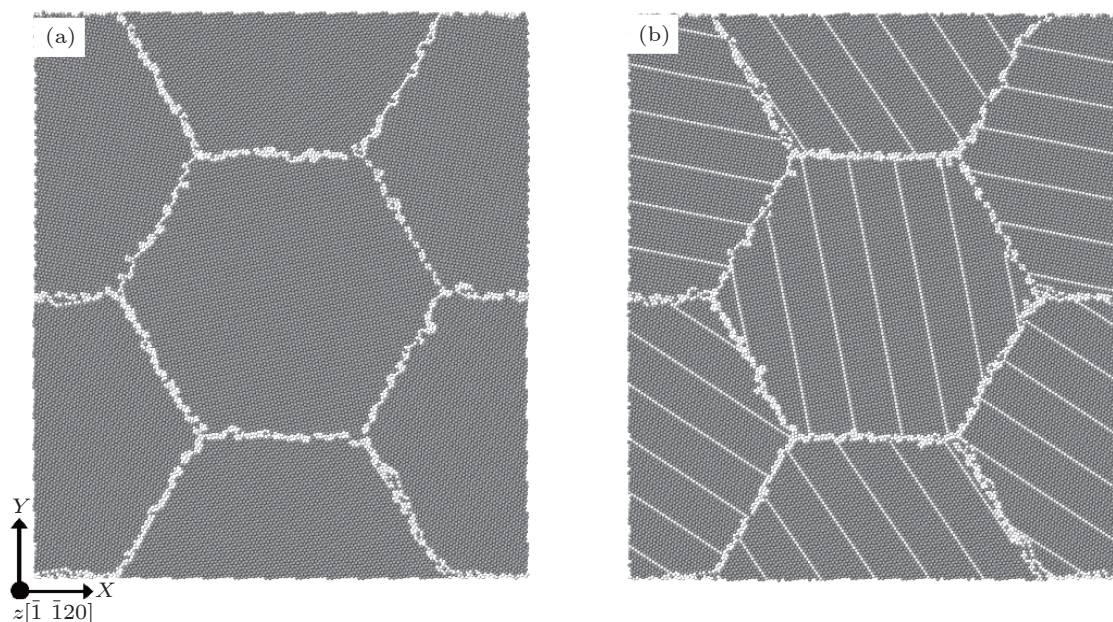


图 1 纳米多晶镁的初始构型 (深色代表 HCP 结构原子, 白色代表其他类型的原子, 浅色直线表示堆垛层错结构)
(a) 晶粒中不包含堆垛层错; (b) 晶粒中包含堆垛层错

3 模拟结果及分析

分子动力学模拟之前, 首先要对模拟的系统进行趋衡. 在 10.0 K 和 300.0 K 下, 我们对所有纳米

多晶镁进行了能量最小化, 其中 300.0 K 下趋衡是在 10.0 K 下趋衡后的模型基础上进行的. 模拟步长定为 3.0 fs, 弛豫 10000 步. 图 2 给出了温度为 10.0 K 时, 晶粒中包含厚度为 3.38 nm 的堆垛层错的纳

米多晶镁在趋衡过程中, 总的势能随时间的变化曲线. 从图 2 可以看出, 模拟 6000 步以后, 系统基本上达到了平衡.

我们首先研究了温度为 300.0 K 时, 堆垛层错厚度对纳米多晶镁力学举止的影响. 图 3 给出了晶粒中不含有堆垛层错和含有不同厚度堆垛层错的纳米多晶镁在拉伸载荷下的应力应变曲线. 应力应变关系能够反映材料的基本力学性能. 从图 3 可以看出, 不管纳米晶粒中是否包含堆垛层错, 应力应变曲线都首先经历了一个线性阶段, 当应力达到某一临界值时, 应力应变曲线进入了非线性阶段. 当材料的应力达到屈服应力之后, 纳米多晶镁即开始塑性变形. 杨氏模量是应力应变曲线在线性阶段的斜率, 从图 3 可以看出, 堆垛层错对纳米多晶镁的杨氏模量基本没有影响. 从图 3 可以明显看出, 在 300.0 K 的温度下, 堆垛层错的引入增加了纳米多晶镁的屈服应力. 晶粒中不包含堆垛层错的纳米多晶镁的屈服应力大约为 1.60 GPa, 当晶粒中包含厚度为 1.30 nm 的堆垛层错时, 纳米多晶镁的屈服应力增加到 1.75 GPa. 这种强化效应的发生主要是由于在纳米晶粒中引入均匀的堆垛层错后, 堆垛层错的界面会对位错施加一个排斥力, 该排斥力能够有效阻止晶粒界面处位错的发射和滑移, 从而增加了纳米多晶镁的屈服应力. 研究也发现, 晶粒中堆

垛层错的厚度对纳米多晶镁的力学性能也有较明显的影响.

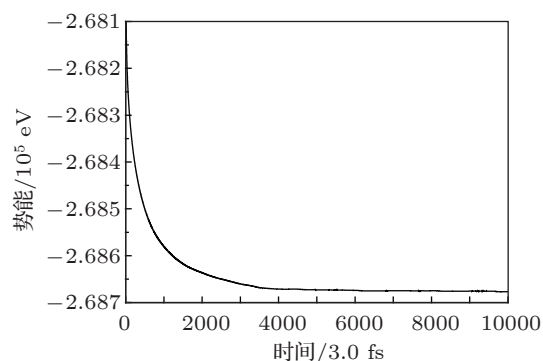


图 2 纳米多晶镁的总势能随时间的变化曲线

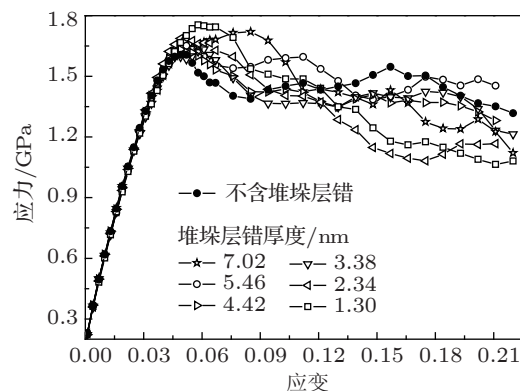


图 3 纳米多晶镁在拉伸过程中的应力应变曲线

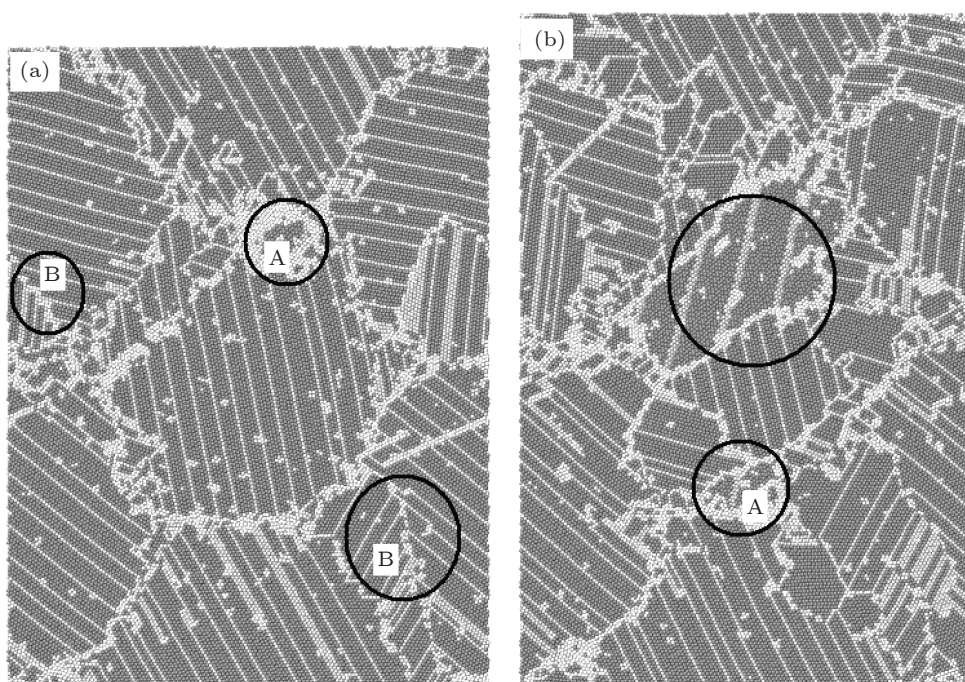


图 4 纳米多晶镁拉伸过程原子图(黑色圆圈 A 和 B 分别表示新形成的晶粒和孪晶, 深色代表 hcp 结构原子, 白色代表其他类型的原子, 浅色原子表示堆垛层错结构) (a) 应变为 0.087; (b) 应变为 0.150

为了研究在拉伸载荷下温度对纳米多晶镁变形机理的影响, 我们研究了温度分别为 10.0 K 和 300.0 K 时, 晶粒中包含厚度为 3.38 nm 的堆垛层错的纳米多晶镁的变形机理. 为了形象描述纳米多晶镁的拉伸变形过程, 图 4 给出了在温度 300.0 K 下, 纳米多晶镁受到拉伸应变 0.087 和 0.150 时的原子结构图. 从图 4(a) 和 (b) 可以看出, 在拉伸载荷下, $\{10\bar{1}2\} \langle 10\bar{1}1 \rangle$ 孪晶在晶粒交界附近形成, 孪晶随着拉伸应变的增加而逐渐生长, 并且发现孪晶的形成伴随着位错的发射和滑移. 位错首先在晶界处成核, 然后在晶粒中迅速滑移, 最后湮没在对面的孪晶界面处, 从而在孪晶界面后留下了一些堆垛层

错. 图 4 也显示, 由于在晶粒的内部出现了一些点缺陷, 这主要是由于热效应引起的. 另外, 我们还发现在拉伸载荷下, 当应变达到 0.087 时, 纳米多晶镁在晶粒交界附近区域出现了新的晶粒, 且新生成的晶粒包含有平行的堆垛层错, 如图 4(a) 和 (b) 所示. 新晶粒的 (1000) 面与 X-Y 面所组成的二面角大约是 35° . 从图 4 也能观察到, 新晶粒随着拉伸载荷的增加快速生长, 界面移动非常明显, 并且新晶粒的数量也随着应变的增加而增多. 从上面的分析可以看出, 在 300.0 K 的温度下, 孪晶和新晶粒的成核和繁殖是纳米多晶镁变形的主要形式, 是影响包含堆垛层错的纳米多晶镁变形机理的主要因素.

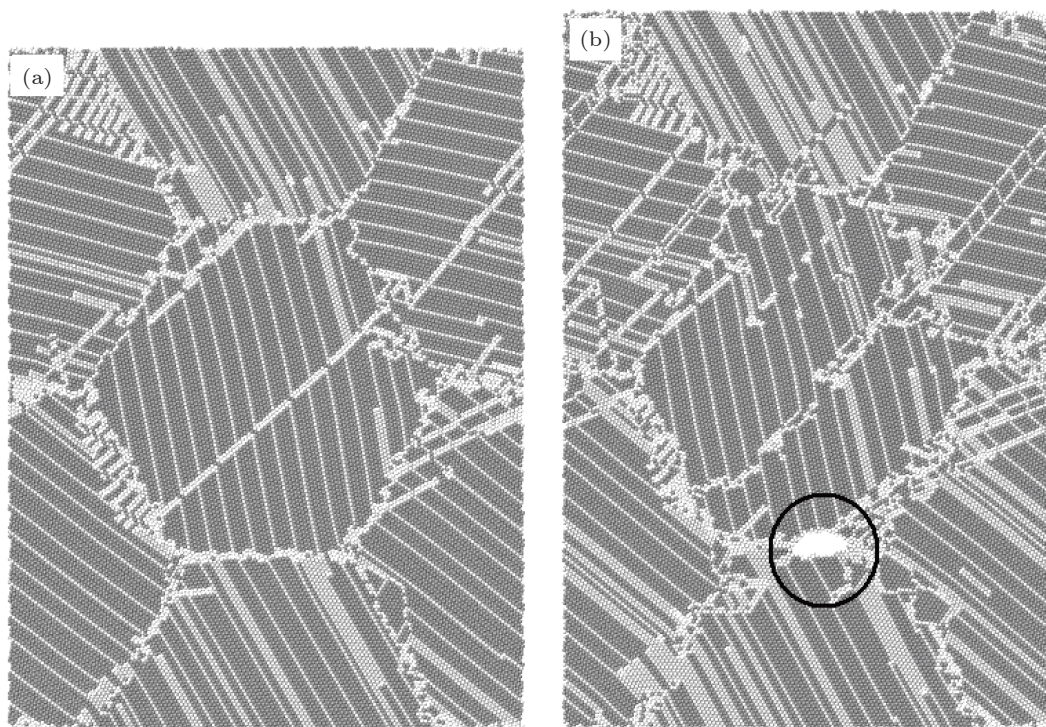


图 5 纳米多晶镁拉伸过程原子图 (黑色圆圈表示裂纹在晶粒交界处成核, 深色代表 hcp 结构原子, 白色代表其他类型的原子, 浅色原子表示堆垛层错结构) (a) 应变为 0.087; (b) 应变为 0.150

图 5 给出了温度为 10.0 K 时, 晶粒中含有堆垛层错的纳米多晶镁受到拉伸应变 0.087 和 0.150 时的原子结构图. 从图 5 可以看出, 温度对包含有堆垛层错的纳米多晶镁的变形机理有非常明显的影响. 温度为 10.0 K 时, 在拉伸载荷下纳米多晶镁并没有出现孪晶和新晶粒, 而且晶粒内部基本没有出现点缺陷, 这与 300.0 K 下纳米多晶镁的变形举止完全不同. 也就是说, 在低温情况下, 孪晶和新晶粒的成核受到了限制. 在 10.0 K 下, 纳米多晶镁的变

形主要是位错的成核和滑移. 从图 5(a) 和 (b) 也可以清楚的看到, 位错首先在晶界处成核, 然后在晶粒中滑移, 最后湮没在对面的晶界处, 从而在晶粒中留下了一些堆垛层错. 从图 5(b) 也可以发现, 当拉伸应变达到 0.150 时, 纳米多晶镁在三个晶粒的交界附近区域出现了裂纹, 裂纹的出现将会导致纳米多晶镁力学性能的降低. 当然, 在同样的拉伸应变下, 裂纹的成核与纳米多晶镁的晶粒尺寸是密切相关的^[17].

4 结论

本文用分子动力学模拟方法研究了二维柱状结构的纳米多晶镁在拉伸载荷作用下, 堆垛层错和温度对其变形机理的影响. 模拟结果表明: 在 300.0 K 的环境下, 在晶粒中引入堆垛层错能有效提高纳米多晶镁的屈服应力. 晶粒中堆垛层错的引入对纳米多晶镁的杨氏模量的影响很小; 在相对高温的情

况下, 孪晶和新晶粒的成核和繁殖是纳米多晶镁变形的主要形式, 是影响晶粒中包含堆垛层错的纳米多晶镁变形机理的主要因素; 在相对低温的情况下, 位错的成核和繁殖是晶粒中包含堆垛层错的纳米多晶镁的主要变形形式. 当拉伸应变达到 0.150 时, 裂纹在晶粒交界附近区域成核. 该研究为制备高性能的纳米多晶镁提供了科学的理论依据.

- [1] Lu L, Chen X, Huang X, Lu K 2009 *Science* **323** 607
- [2] Cao A J, Wei Y G 2007 *J. Appl. Phys.* **102** 083511
- [3] Liang H Y, Wang X X, Wu H A, Wang Y 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2308 (in Chinese) [梁海弋, 王秀喜, 吴恒安, 王宇 2002 物理学报 **51** 2308]
- [4] Zhang Y G, Lu J, Zhang H W, Chen Z 2009 *Scripta Mater.* **60** 508
- [5] Liu X M, You X C, Liu Z L, Nie J F, Zhuang Z 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1849 (in Chinese) [刘小明, 由小川, 柳占立, 聂君峰, 庄苗 2009 物理学报 **58** 1849]
- [6] Qu S X, Zhou H F 2010 *Nanotechnology* **21** 335704
- [7] Ma W, Zhu W J, Chen K G, Jing F Q 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 016107 (in Chinese) [马文, 祝文军, 陈开果, 经福谦 2011 物理学报 **60** 016107]
- [8] Ma W, Zhu W J, Zhang Y L, Chen K G, Deng X L, Jing F Q 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 4781 (in Chinese) [马文, 祝文军, 张亚林, 陈开果, 邓小良, 经福谦 2010 物理学报 **59** 4781]
- [9] Qu S X, Zhou H F 2011 *Scripta Mater.* **65** 265
- [10] Yang Z Y, Lu Z X, Zhao Y P 2009 *Comput. Mater. Sci.* **46** 142
- [11] Han J, Su X M, Jin Z H 2011 *Scripta Mater.* **64** 693
- [12] Tang T, Kim S, Horstemeyer M F 2010 *Acta. Mater.* **58** 4742
- [13] Kim D H, Ebrahimi F, Manuel M V 2011 *Mater. Sci. Eng. A* **528** 5411
- [14] Li B, Ma E 2009 *Acta. Mater.* **57** 1734
- [15] Guo Y F, Wang Y S, Qi H G 2010 *Acta Metall. Sin.* **23** 370
- [16] Song H Y, Li Y L 2012 *Phys. Lett. A* **376** 529
- [17] Song H Y, Li Y L 2012 *J. Appl. Phys.* **111** 044322
- [18] Zhu Y T, Liao X Z, Wu X L 2012 *Prog. Mater. Sci.* **57** 1
- [19] Liu X Y, Adams J B, Ercolessi F, Moriarty J A 1996 *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **4** 293
- [20] Evans D J, Holian B L 1985 *J. Chem. Phys.* **83** 4069
- [21] Faken D, Jonsson H 1994 *Compos. Mater. Sci.* **2** 279
- [22] Stukowski A 2010 *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 015012
- [23] Froseth A G, VanSwygenhoven H, Derlet P M 2005 *Acta. Mater.* **53** 4847

The effects of stacking fault and temperature on deformation mechanism of nanocrystalline Mg*

Song Hai-Yang^{1)2)†} Li Yu-Long^{1)‡}

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

2) (*School of Science, Xi'an University of Posts and Telecommunications, Xi'an 710121, China*)

(Received 21 May 2012; revised manuscript received 19 June 2012)

Abstract

The effects of stacking fault (SF) and temperature on the mechanical properties of nano-polycrystal Mg under tension loading are investigated by molecular dynamics simulations. The interatomic potential of embedded atom method (EAM) is used as the Mg-Mg interaction. The computational results show that the yield strength of nano-polycrystal Mg can be obviously enhanced when stacking fault is introduced into grains, and the effect of SF on the Young's modulus of nano-polycrystal Mg is very small. The results also show that tensile twins and new grain at 300.0 K are nucleated and initiated at grain boundaries, growing continuously with the increase of strain. The dihedral angle between the (1000) plane of new grain and the X - Y plane is about 35° . In other words, the nucleation and the growth of twins and new grains are the predominant deformation mechanism for nano-polycrystal Mg at 300.0K. We also find that at 10.0K the dislocation nucleation and slip are the predominant modes of the plastic deformation for nano-polycrystal Mg.

Keywords: stacking fault, molecular dynamics simulation, mechanical property

PACS: 62.25.-g, 33.15.xv, 61.82.Rx

* Project supported by the Key Program of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10932008), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10902083), and the Program for New Scientific and Technological Star of Shaanxi Province (Grant No.2012KJXX-39).

† E-mail: gsfshy@sohu.com

‡ E-mail: liyulong@nwpu.edu.cn