

# 界面旋转角对双晶镁力学性质影响的分子动力学模拟\*

王琛 宋海洋<sup>†</sup> 安敏荣

(西安邮电大学理学院, 西安 710121)

(2013年9月11日收到; 2013年11月6日收到修改稿)

采用分子动力学模拟方法, 研究了在拉伸载荷下晶界对双晶镁变形机制的影响, 对不同旋转角度的模型以及对称与非对称结构的模型进行了研究. 模拟结果表明: 应变加载方向与晶向所成角度对双晶镁塑性变形阶段的流动应力能够产生明显的影响; 对称结构的双晶镁模型的塑性性质明显优于非对称结构模型. 研究结果还发现, 由于晶界区域不同的位错成核及发射等运动, 大角度双晶模型的塑性响应明显优于对应小角度模型的塑性响应.

**关键词:** 分子动力学模拟, 力学性能, 晶界

**PACS:** 62.25.-g, 61.82.Rx, 62.23.-c

**DOI:** 10.7498/aps.63.046201

## 1 引言

晶界附近的变形活动对于观察多晶断裂机制至关重要. 原子间复杂的相互作用, 诸如局部位错、位错吸收、位错位移和滑移等作用, 与晶界取向和材料结构一起, 在很大程度上影响材料的机械性能. 最近几年, 纳米金属中由晶界主导的变形机制已经引起了学者们广泛的兴趣, 并且已经应用实验方法和分子动力学模拟方法进行了广泛研究<sup>[1-11]</sup>. 目前, 与晶界取向相关的研究主要集中在面心立方结构 (fcc) 金属材料, 如金<sup>[12,13]</sup>、镍<sup>[14]</sup>和铜<sup>[15-21]</sup>. 然而在六角密堆结构 (hcp) 结构中, 因为其有限的滑移系统, 所以使得hcp金属结构的变形与fcc存在很大差异. 尽管hcp金属材料对于未来工业有很重要的意义, 但与fcc类似的针对hcp金属材料的研究却还很少. 金属镁作为hcp金属的典型代表, 因为其极低的密度<sup>[22-25]</sup>、较高强度比和高比弹性模量, 被视为一种对航天和自动化产业很重要的未来材料. 而镁孪晶也成为近年来科学研究的热点领

域. 目前, 针对镁孪晶的研究都已揭示了其独特的机械性能<sup>[23,26]</sup>. Li和Ma<sup>[23]</sup>通过分子动力学模拟方法研究发现, 金属镁中带状位错的发射与滑移能够促进变形孪晶的生成. 此外, Li和Ma<sup>[26]</sup>研究还揭示了镁孪晶中孪晶生长与晶界附近位错活动的相互作用. 然而, 旋转角度对双晶镁力学性能影响的研究却鲜有报道.

本文旨在揭示双晶镁中不同旋转角度所形成的晶界对于材料机械性能的影响, 采用分子动力学模拟方法研究了在拉伸载荷下, 晶界对双晶镁力学性能的影响. 研究结果显示, 不同结构的晶界对双晶镁的杨氏模量、屈服强度及塑性变形有不同程度的影响. 研究结果可为制备高性能的纳米多晶镁提供科学的理论依据.

## 2 模型与方法

本文应用Voronoi方法建立hcp双晶模型. 而之前大量的模拟实验表明, 通过Voronoi方法建立的多晶模型能够更符合真实条件下的实验室模拟

\* 国家自然科学基金 (批准号: 10902083)、教育部新世纪优秀人才支持计划 (批准号: NCET-12-1046) 和陕西省青年科技新星支持计划 (批准号: 2012KJXX-39) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯作者. E-mail: [gsfshy@sohu.com](mailto:gsfshy@sohu.com)

结果. 图1显示了本文所用的基本模型, 图1(a)为镁的原子结构图和hcp结构示意图, 图1(b)为本文所构造的基本模型示意图. 所有模型尺寸在 $x, y, z$ 方向大小相同, 分别为12.5, 3.9, 13.5 nm. 图1(a)

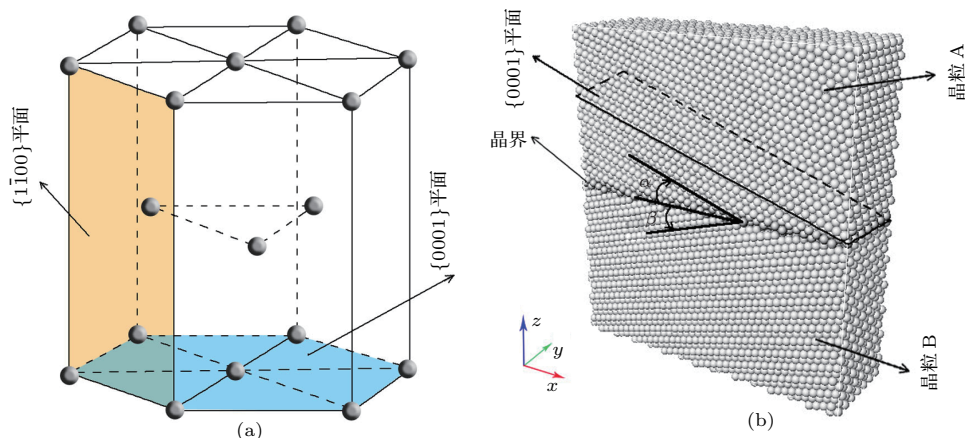


图1 双晶镁的初始模型 (a) 金属镁的原子结构示意图; (b) 研究所用基本模型

为了阐述不同晶界对变形机制的影响, 研究所用模型包含非对称(组I)与对称(组II)两种不同结构, 构造了10个基于不同旋转角度的双晶模型进行模拟. 组I为5个非对称双晶镁模型, 模型下部始终固定, 即 $\beta = 0^\circ$ (如图1(b)), 上部围绕 $y$ 轴分别旋转 $\alpha = 3^\circ, 7^\circ, 11^\circ, 17^\circ, 20^\circ$ . 类似于组I, 组II为对应于组I的5个对称模型, 模型上部与下部关于晶界成镜面对称结构, 即 $\alpha = \beta$ .

文中选用模型的原子数在28000与30000之间.  $x$ 与 $z$ 方向始终保持自由表面,  $y$ 方向施加周期性边界条件. 为了使模型达到平衡状态, 所有10个模型首先在0.01 K的温度和零压条件下进行初始趋衡. 应变方向平行于 $z$ 轴方向, 应变大小0.001. 每步加载中, 分别固定模型两端的垂直于[0001]方向的4层原子, 对其进行应变加载. 下一次应变加载前, 为了使模型达到新的平衡状态, 分别再对模型进行2000步趋衡.

进行分子动力学模拟的首要问题是要得到准确的原子之间的相互作用势函数. 我们采用Liu等<sup>[27]</sup>提出的嵌入原子势对模型进行模拟. 该势函数在此前很多研究中被成功引用以描述镁原子之间的相互作用<sup>[23-25]</sup>. 模拟中的运动方程、温度控制、压强控制分别采用Verlet算法、Nose-Hoover恒温器控温算法<sup>[28]</sup>、Parriello-Rahman恒压器控压算法<sup>[29]</sup>.

为了更清楚地观察材料的变形机制, 研究采用

中, ( $1\bar{1}00$ )平面(黄色平面)对应于图1(b)中的 $x$ - $z$ 平面. 并且, 如图1(b)所示, 模型的上部晶粒A和下部晶粒B可以以 $y$ 轴为中心进行旋转, 旋转角度分别为 $\alpha, \beta$ .

了可视化软件(open visualization tool, OVITO)<sup>[30]</sup>对材料变形过程的细节进行展示. 该软件应用公共近邻分析方法<sup>[31]</sup>, 不同晶体结构(hcp, fcc等)被标注为不同的颜色以便实验观察, 这使得研究者能够更清楚地观测诸如位错、堆垛层错等变形现象.

### 3 结果与讨论

首先本文模拟了在0.01 K条件下双晶镁的机械变形机制. 图2为基于不同旋转角度的非对称与对称双晶镁模型在0.01 K条件下的应力应变曲线. 如图所示, 应力应变曲线中, 峰值应力把曲线划分为弹性和塑性两个基本阶段. 在低应变区域中近似线性的弹性阶段中, 可以计算得出曲线对应的杨氏模量.

从图2可以看出, 随着角度的增加, 杨氏模量逐渐减小, 这是因为不同晶向与应变加载方向会导致杨氏模量大小不同<sup>[32]</sup>. 随着应变的继续加载, 曲线达到峰值应力(屈服应力), 这标志着材料进入塑性变形阶段. 此外, 屈服应力随着旋转角度的增加而减小, 并且从图2(a), (b)中可以看出, 不论旋转角度大小与材料的不同, 曲线达到屈服应力后, 都会出现急剧的减小. 如图2(a), 旋转角度为 $3^\circ$ 的非对称模型中, 曲线经过屈服应力后, 应力急速减小. 然而, 对于较大的旋转角度如 $11^\circ, 17^\circ, 20^\circ$ , 曲线在经过线性递增阶段达到屈服强度后, 应力减小速度明显较为缓慢. 值得注意的是,  $11^\circ$ 模型在应变

加载过程中发生了二次硬化, 导致其应力应变曲线在达到最大应力时所对应的应变要大于其他模型. 对于对称结构, 其曲线具有与非对称结构相同的变化趋势. 如图 2 (b),  $3^\circ$  对称模型中, 应力在达到峰值后急剧减小, 但是随着角度的不断增加, 应力在塑性阶段减小速度明显放缓, 直至达到一个相对稳定的值, 这在  $17^\circ$ ,  $20^\circ$  对应曲线中尤其明显. 这也就是说, 大角度模型的流动应力要比小角度模型的流动应力高. 由此可以推出, 大角度结构的延展性要比小角度结构优越, 产生这种情况的原因将在下文中进行讨论.

不同晶界对材料塑性变形阶段的影响不同, 本文截取了  $\alpha = \beta = 3^\circ$ ,  $17^\circ$  对称模型在应变加载过程中的原子结构图 (图 3). 图 3 (a) 中, 当材料初始趋衡达到平衡态后, 部分晶界消失, 只在原始晶界位置处留下少数点缺陷. 然而对于  $17^\circ$  模型 (图 3 (a')), 晶界在趋衡后依然清晰可见. 这是由于在小角度结构中, 晶粒在趋衡过程中发生旋转 [33], 从而致使晶界消失. 换言之, 小角度模型在趋衡过程中, 原子为了达到更低能量的稳定态, 上半部晶粒逆时针方向进行旋转. 然而对于大角度模型而言, 这种旋转却很难发生.

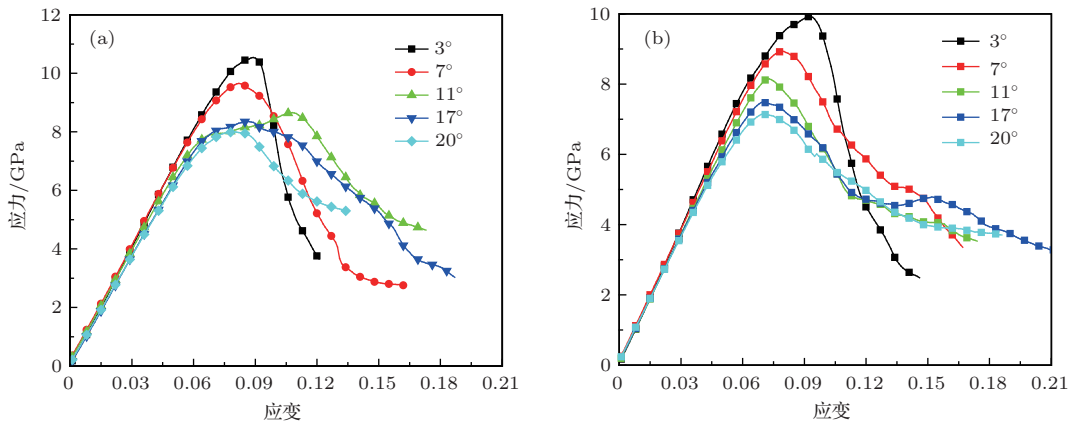


图 2 (网刊彩色) 双晶镁在拉伸过程中的应力应变曲线 (a) 非对称模型; (b) 对称模型

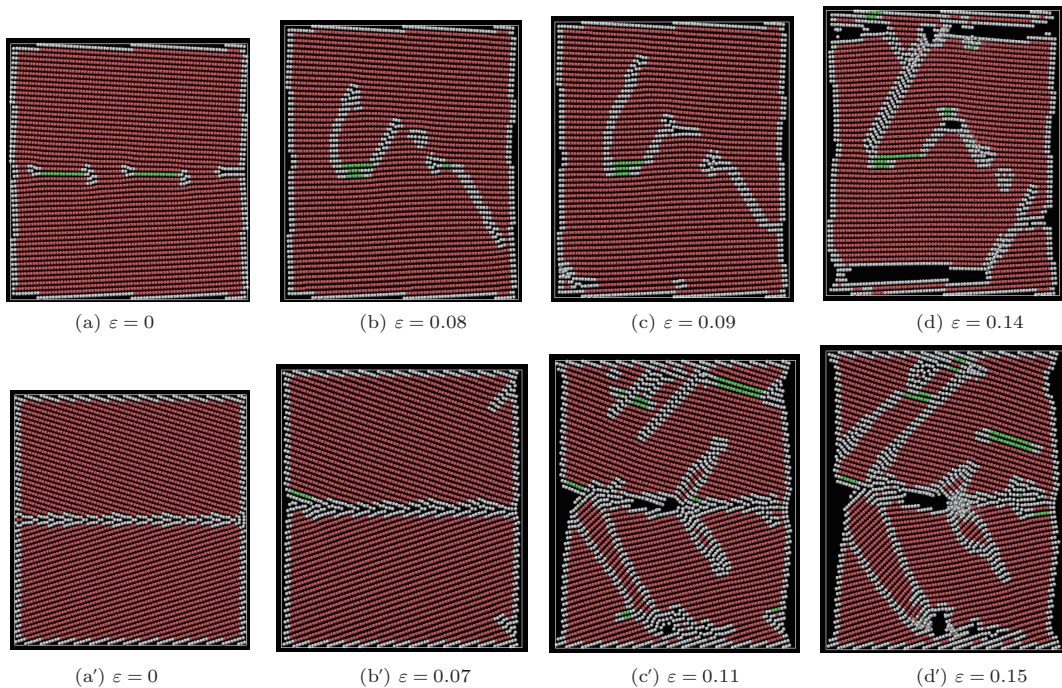


图 3 对称型双晶镁拉伸过程原子图 (a)—(d)  $3^\circ$  对称模型; (a')—(d')  $17^\circ$  对称模型

随着应变增加, 位错从模型边缘(图 3(b'))及晶界表面发射, 导致其应力应变曲线大幅度下降(图 2(b)). 然而, 如图所示, 在  $3^\circ$  模型中, 初始位错发生在应力跌落前, 这是因为当应变  $\varepsilon = 0.08$  时, 小角度模型即开始屈服(如图 3(b)). 随着应变沿  $z$  轴方向继续加载,  $3^\circ$  模型中的局部位错开始在晶界处成核并且在晶粒内向相反方向生长, 如图 3(c).

与此同时,  $17^\circ$  模型中, 大量位错开始从晶界表面发射并且可以观察到颈缩现象, 如图 3(c'). 随着应变继续增加,  $3^\circ$  模型中材料开始断裂, 而  $17^\circ$  模型的晶界附近区域出现孔洞. 相对于  $3^\circ$  小角度模型,  $17^\circ$  模型中可以观察到更多的位错现象, 即更多原子间势能释放, 这也说明  $17^\circ$  模型的塑性响应比小角度模型好. 这个结论与图 2 中的曲线结果一致.

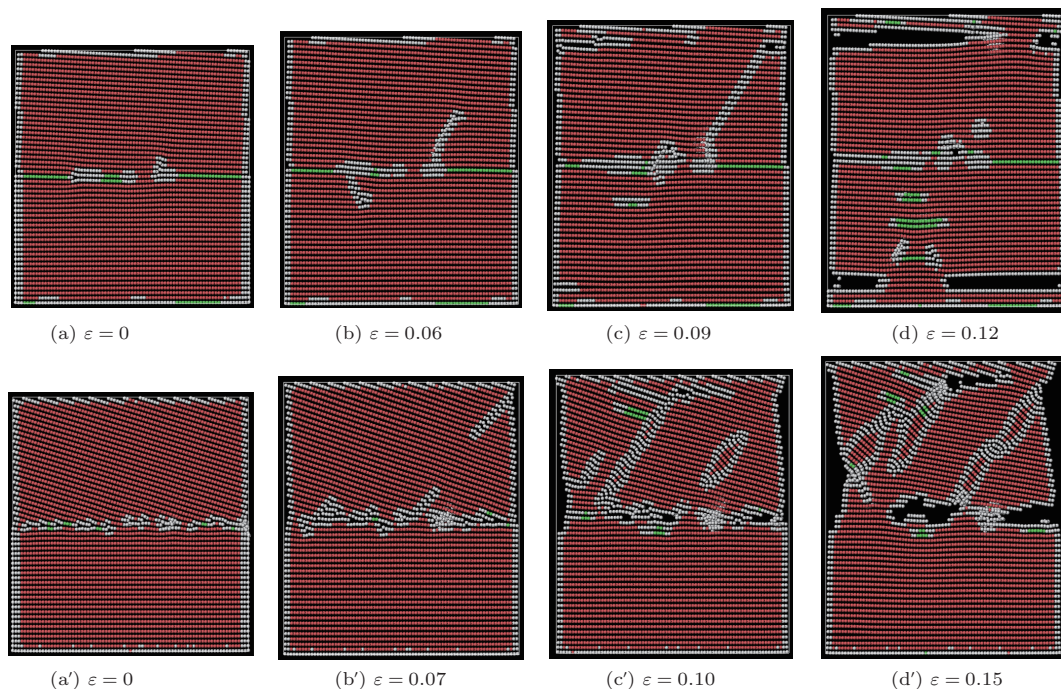


图 4 非对称型双晶镁拉伸过程原子图 (a)—(d)  $3^\circ$  非对称模型; (a')—(d')  $17^\circ$  非对称模型

图 4 为非对称模型, 即  $\beta = 0^\circ$ ,  $\alpha = 3^\circ$ ,  $17^\circ$  应变加载过程中的原子结构示意图. 如上所述, 由于晶粒的旋转, 小角度模型中晶界部分消失(如图 4(a)). 图 4(b) 中, 小角度模型中初始位错的发射并没有对应于应力应变曲线的跌落. 对于大角度模型, 初始位错由晶界表面与模型边缘发射并且伴随着应力应变曲线的跌落. 这与之前讨论的对称模型相一致.  $17^\circ$  模型中, 位错从晶界区域成核发射并且穿越晶粒生长, 直到被模型边缘吸收. 与此同时, 当应变增加至 0.10 时, 晶界附近出现少许孔洞. 然而对于  $3^\circ$  模型, 材料极易断裂, 这也是由于在曲线达到屈服点后应力的急剧下降所导致. 此外, 相对于  $3^\circ$  旋转角度,  $17^\circ$  模型中存在更多的位错活动, 这直接导致了大角度模型的塑性性质优于小角度模型, 这从图 2 曲线中的流动应力中也可以看出. 研究还发现, 对于大角度模型, 下半部晶粒中几乎没有观察到位错和滑移运动, 导致此现象的原因将

在下文中说明.

为了研究双晶镁非对称结构与对称结构的区别, 图 5 分别列举了组 I 与组 II 中  $17^\circ$  模型在应变加载过程中的原子结构. 当  $\varepsilon = 0$ , 除在晶界区域有缺陷以外, 非对称与对称模型都呈现完美的晶体结构. 当  $\varepsilon$  升至 0.07 时, 局部位错由晶界表面和模型边缘发射且沿着  $(10\bar{1}1)$  平面生长. 随着应变连续加载, 位错穿过晶粒直到被反方向晶粒边缘吸收. 如图 5(c), 与对称结构相比, 非对称结构中下部晶粒几乎没有位错运动, 这一现象与应变加载方向和  $(0001)$  平面所成角度有关. 对于非对称模型的下部晶粒而言, 应变加载方向沿着  $z$  轴方向并且与  $(0001)$  面垂直, 从而使得滑移与位错很难沿着滑移面运动. 然而, 对于双晶的上部晶粒而言, 应变加载方向并非垂直于  $(0001)$  面, 这使得位错更容易在晶界附近成核并沿着相应滑移面运动. 需要指出的是, 在小角度非对称模型中,

由于上下晶粒所成相位差很小, 故导致下部晶粒也有极少数位错发射(如图4(d)). 随着应变继续增加, 非对称模型(图5(d))还是沿着晶界处断裂. 此时对于对称模型, 一些孔洞出现在其晶界区域

(图5(d')), 与此同时, 其应力能稳定在一个值附近并且小幅度振荡(图2(b)), 这使得对称模型相比非对称模型而言具有更高的流动应力和更好的塑性响应.

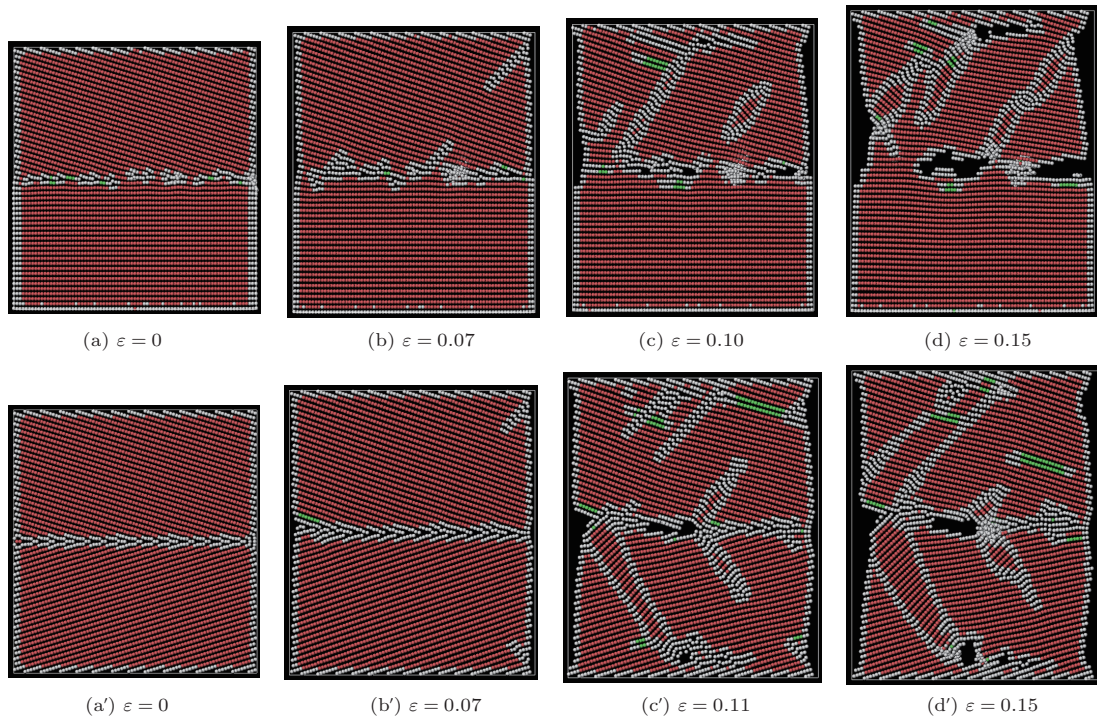


图5 非对称和对称型双晶镁拉伸过程原子图 (a)—(d) 17° 非对称模型; (a')—(d') 17° 对称模型

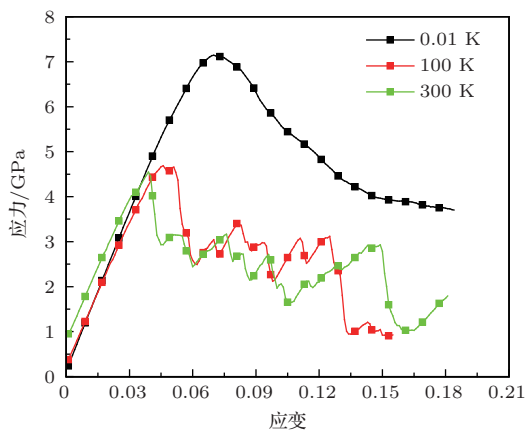


图6 (网刊彩色) 对称型双晶镁在0, 100, 300 K 条件下的应力应变曲线

另外, 本文还模拟了不同温度(0, 100, 300 K)下, 旋转角度为20° 对称模型的变形机制. 图6显示了不同温度下双晶镁在拉伸载荷下的应力应变曲线. 当应变为0时, 原子处于平衡状态, 应力应该为零. 然而, 从图6可以看出, 材料的初始应力并不为零, 特别是在300 K的情况下, 这是因为材料本身存在自由表面. 这些表面原子因没有相邻原子

所以形成断键并且具有很高的表面剩余能, 这直接导致原子偏离理想晶格中的平衡位置, 从而导致留有相应的表面张力<sup>[34]</sup>. 从图6还可以看出, 屈服应力在高温下大幅度减小. 在相对较低的温度下, 镁原子间的热运动较弱, 并且大部分原子在其平衡位置附近振动. 然而, 当温度升高时, 原子的热运动会大大加强, 且原子结构更容易达到稳态, 这是因为在高温下原子能够获得足够的能量来克服活化能垒<sup>[22]</sup>并逃离其平衡位置, 最终导致初始模型中原子的重列. 此外, 因为高温能够加速原子的运动, 使得原子更易发生位移.

## 4 结 论

本文通过构建不同旋转角度的双晶镁发现, 晶界在双晶镁的机械变形机制中发挥着重要的作用. 对于小角度双晶镁, 为了达到稳态, 晶粒会发生旋转而使得晶界消失, 并在原晶界处留下少许点缺陷, 但是在大旋转角度的模型中, 这种旋转却很难发生. 模拟结果表明, 随着旋转角度的增加, 杨氏模

量与屈服强度逐渐减小. 此外, 由于对称结构中从晶界及模型边缘发射的大量位错运动, 对称结构的塑性性质明显好于非对称结构. 对于大旋转角度的双晶镁而言, 不论对称或非对称结构, 其塑性响应都优于小角度模型. 结果显示大角度模型的流动应力明显高于小角度模型, 这是因为晶界附近区域的位错发射及孔洞成核所造成的. 最后, 本文研究了温度对材料变形机制的影响, 模拟发现在高温条件下材料的屈服强度会减小, 并且其伴随着塑性性质的改善.

### 参考文献

- [1] An M R, Song H Y, Su J F 2012 *Chin. Phys. B* **21** 106202
- [2] Ji Q G, Du Y W 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 2281 (in Chinese)[计齐根, 都有为 2000 物理学报 **49** 2281]
- [3] Xie H X, Liu B, Yin F X, Yu T 2013 *Chin. Phys. B* **22** 010204
- [4] He Y G, Lu A X, Wan Q, Zhou Y M 2009 *Chin. Phys. B* **18** 3966
- [5] Wang R Z, Xu L C, Yan H, Kohyama M 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 026801 (in Chinese)[王如志, 徐利春, 严辉, 香山正宪 2012 物理学报 **61** 026801]
- [6] Zhao X C, Liu X M, Gao Y, Zhuang Z 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 6362 (in Chinese)[赵雪川, 刘小明, 高原, 庄苗 2010 物理学报 **59** 6362]
- [7] 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]
- [8] Song H Y, Li Y L 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 226201 (in Chinese)[宋海洋, 李玉龙 2012 物理学报 **61** 226201]
- [9] Pelaez S, Mochales P G, Serena P A 2012 *Comput. Mater. Sci.* **58** 1
- [10] Song H Y, Li Y L 2012 *J. Appl. Phys.* **112** 054322
- [11] Song H Y, Li Y L 2012 *J. Appl. Phys.* **111** 044322
- [12] Wen Y H, Wang Q, Liew K M, Zhu Z Z 2010 *Phys. Lett. A* **374** 2949
- [13] Deng C, Sansoz F 2009 *Acs. Nano.* **10** 3001
- [14] Swygenhoven H V 2002 *Science* **296** 66
- [15] Lu L, Chen X, Huang X, Lu K 2009 *Science* **323** 607
- [16] Kedarnath K, Rauf G M, Dimitrios M 2009 *J. Appl. Phys.* **105** 093515
- [17] Schiøtz J, Jacobsen K W 2003 *Science* **301** 1357
- [18] Zheng Y G, Zhang H W, Chen Z, Lu C, Mai Y W 2009 *Phys. Lett. A* **373** 570
- [19] Zheng Y G, Zhang H W, Chen Z, Wang L, Zhang Z Q, Wang J B 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 041913
- [20] Wu Z X, Zhang Y Z, Srolovitz D J 2011 *Acta Mater.* **59** 6890
- [21] Cao A J, Wei Y G 2007 *J. Appl. Phys.* **102** 083511
- [22] Song H Y, Li Y L 2012 *Phys. Lett. A* **376** 529
- [23] Li B, Ma E 2009 *Acta Mater.* **57** 1734
- [24] Kim D H, Manuel M V, Ebrahimi F, Tulenko J S, Phillpot S P 2010 *Acta Mater.* **58** 6217
- [25] Kim D H, Ebrahimi F, Manuel M V, Tulenko J S, Phillpot S 2011 *Mater. Sci. Eng. A* **528** 5411
- [26] Li B, Ma E 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 035503
- [27] Liu X Y, Adams J B, Ercolessi F, Moriarty J A 1996 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **4** 293
- [28] Melchionna S, Cicotti G, Holian B L 1993 *Mol. Phys.* **78** 533
- [29] Melchionna S 2000 *Phys. Rev. E* **61** 6165
- [30] Stukowski A 2010 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 015012
- [31] Faken D, Jonsson H 1994 *Compos. Mater. Sci.* **2** 279
- [32] Milstein F, Rasky D 1982 *Philosophic Magazine A* **45** 49
- [33] Takuya U, Wakabayashi N, Hirabayashi Y, Ohno N 2008 *Int. J. Mech. Sci.* **50** 956
- [34] Qi H G, Guo Y F 2008 *Chin. J. Comput. Mech.* **25** 72 (in Chinese) [亓宏刚, 郭雅芳 2008 计算力学学报 **25** 72]

# Molecular dynamics simulation of effect of tilt angle on mechanical property of magnesium bicrystals\*

Wang Chen Song Hai-Yang<sup>†</sup> An Min-Rong

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

( Received 11 September 2013; revised manuscript received 6 November 2013 )

## Abstract

The effects of grain boundary on the deformation behavior of magnesium bicrystals under tensile loading are investigated using molecular dynamics simulation method. Deformation mechanisms of both asymmetric and symmetric magnesium bicrystals are studied. The results show that the twist angle could exert a significant influence on the flow stress in the plastic stage. It is found that the plastic property of symmetric magnesium bicrystal is much better than that of asymmetric counterpart. In addition, for bicrystalline metal with large twist angle, its plastic response is better than that with small angle, owing to the dislocation nucleation activity in the grain boundary region.

**Keywords:** molecular dynamics simulation, mechanical properties, grain boundary

**PACS:** 62.25.-g, 61.82.Rx, 62.23.-c

**DOI:** [10.7498/aps.63.046201](https://doi.org/10.7498/aps.63.046201)

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10902083), the Program for New Century Excellent Talents in University, China (Grant No. NCET-12-1046), and the New Scientific and Technological Star of Shaanxi Province, China (Grant No. 2012KJXX-39).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [gsfshy@sohu.com](mailto:gsfshy@sohu.com)