

SiC 纳米纤维/C/SiC 复合材料拉伸行为的分子动力学研究

李丽丽 Xia Zhen-Hai 杨延清 韩明

Molecular dynamics study on tensile behavior of SiC nanofiber/C/SiC nanocomposites

Li Li-Li Xia Zhen-Hai Yang Yan-Qing Han Ming

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 117101 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.117101

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.117101>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I11>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

纳米 Ni 在 77 K 温度下压缩行为的研究

Compression behavior of nanocrystalline nickel at 77 K

物理学报.2013, 62(14): 147102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.147102>

温度对超薄铜膜疲劳性能影响的分子动力学模拟

Temperature dependence of fatigue properties of ultrathin copper films: molecular dynamics simulations

物理学报.2013, 62(10): 107103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.107103>

铁钛共掺强韧化蓝宝石晶体的研究

A method to strengthen and toughen Sapphire by codoping of Fe/Ti ions

物理学报.2013, 62(6): 066201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.066201>

<100> LiF 的低压冲击响应和 1550 nm 波长下的窗口速度修正

Elastic-plastic response of shocked <100> LiF and its window correction at 1550 nm wavelength

物理学报.2012, 61(15): 156202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.156202>

SiC纳米纤维/C/SiC复合材料拉伸行为的分子动力学研究*

李丽丽^{1)†} Xia Zhen-Hai²⁾ 杨延清³⁾ 韩明¹⁾

1)(福建工程学院材料科学与工程学院, 福州 350118)

2)(Department of Materials Science and Engineering, University of North Texas, Denton, TX 76203, USA)

3)(西北工业大学材料学院, 西安 710072)

(2014年10月21日收到; 2015年1月7日收到修改稿)

本文采用分子动力学计算方法和 Tersoff 作用势研究了无定型碳 (amorphous carbon, a-C) 涂层厚度对 SiC 纳米纤维/SiC 纳米复合材料断裂方式及力学性能的影响. 分析结果发现, 随着涂层厚度的增加, 纳米纤维的平均应力集中系数下降, 即足够厚度涂层可以同时起到增强和补韧的作用. 当 a-C 涂层厚度 $t \leq 0.3$ nm 时, 裂纹直接穿透纤维, 纳米复合材料表现出典型的脆性断裂方式; $t = 4.0$ nm 时, 裂纹发生偏转, SiC 纳米纤维发生拔出现象, 此时纳米复合材料的拉伸强度约为无涂层纳米复合材料的 4 倍, 断裂能则提高一个数量级. 计算结果表明, a-C 涂层的厚度是 SiC 纳米纤维/SiC 纳米复合材料中产生韧性机理的重要因素, 即传统微米级陶瓷基复合材料的增韧理论在纳米复合材料中仍适用. 研究结果可望为设计同时具有高强度、高韧性的陶瓷基纳米复合材料提供理论基础.

关键词: 分子动力学, 拉伸行为, 纳米复合材料, a-C 涂层

PACS: 71.15.PD, 62.20.-x, 62.23.Pq, 61.43.Er

DOI: 10.7498/aps.64.117101

1 引言

由微米级纤维增强的陶瓷基复合材料 (ceramic matrix composites, CMCs) 具有高强度、高硬度及耐磨、耐高温、耐腐蚀等其他材料无法比拟的优异性能, 已广泛应用于航空、航天及军事领域^[1-4]. 对于 CMCs, 纤维和基体都呈脆性, 所允许的变形都很小, 导致变形吸收的能量也很少, 因此只能通过增加裂纹的扩展路径来提高这类材料的吸能效果, 进而改善陶瓷材料的韧性. 在传统微米级 CMCs 中, 引入或调整微米级纤维和基体之间的界面可以使得基体裂纹在界面处发生偏转, 通过随之发生界面脱黏、纤维引起的裂纹桥接、纤维滑移和最终的纤维断裂等一系列消耗能量机理来实现

增韧的效果^[4-11].

纳米纤维因具有比微米级更优异的性能^[12], 可望能够进一步提高材料的力学性能. 目前已有实验室制备出由 SiC 纳米纤维 (SiC nanofiber, SiC_{NF}) 和微米级 SiC 纤维 (SiC fiber, SiC_f) 混合增强的 SiC_{NF}/SiC_f/SiC 复合材料^[13], 以及由碳纳米管 (carbon nanotubes, CNTs) 增强 Al₂O₃ 基体的纳米复合材料^[14-16] 和石墨烯增强银的纳米复合材料^[17]. 与传统的微米级 CMCs 相比, 纳米复合材料中由于增强相的纳米效应, 增强相与基体之间的界面面积更大, 从而使界面在整个纳米复合材料结构中占有较大的比例. 因而, 纳米复合材料的界面效应会更加显著地影响整个复合材料的力学性能^[13-16]. 关于微米级纤维增强 CMCs 的大量研究^[7-11] 证明, 为了获得高韧性, 纤维/基体界面

* 国家自然科学基金 (批准号: 51071125) 和福建省中青年教育科研项目 (批准号: JA14218) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: lilshd18@gmail.com

必须有适宜的结合强度, 以利于发生裂纹桥接和界面脱黏, 从而使裂纹可以沿着界面发生偏转, 并能继续承载, 经历这些耗能行为进而获得高的韧性. 因此, 精确评价裂纹的偏转、扩展行为并且从根本了解涂层对纳米纤维/基体界面的影响具有重要意义, 以期设计同时具有高强度、高韧性的纳米纤维增强 CMCs 提供理论依据. 虽然传统微米级 CMCs 材料中关于涂层的工程设计已有大量研究^[4-11], 而且已有关于 CNTs/ Al_2O_3 纳米复合材料的文献^[14-16], 然而目前对于纳米 CMCs 中涂层的设计鲜有报道.

本文采用分子动力学 (molecular dynamics, MD) 方法模拟了覆有无定型碳 (amorphous carbon, a-C) 涂层的单晶 $\beta\text{-SiC}_{\text{NF}}$ 增强 SiC 基体复合材料的拉伸行为, 重点探索了 a-C 涂层对 $\beta\text{-SiC}_{\text{NF}}$ /SiC 复合材料的断裂模式的影响, 以及对拉伸力学性能和平均应力集中系数的作用规律, 并考察了基体裂纹在不同厚度的 a-C 涂层中的扩展行为. 本文研究结果可望为设计这类纳米 CMCs 以获得高强、高韧的综合力学性能提供理论基础.

2 原子模型及计算方法

纳米复合材料模型原胞是由一根覆有 a-C 涂层的单晶 $\beta\text{-SiC}_{\text{NF}}$ 和单晶 $\beta\text{-SiC}$ 基体组成, 模型含有约 12 万个原子, 尺寸为 $10.0\text{ nm} \times 11.5\text{ nm} \times 11.5\text{ nm}$, 其中 SiC_{NF} 的半径为 1.0 nm , 长度为 10.0 nm , 如图 1 所示. SiC_{NF} 的横截面为六边形, 如图 1(a) 所示, 其半径定义为六边形的中心到顶点和边的平

均距离. 为了建立 SiC_{NF} 表面的 a-C 涂层, 本文参照 Li 等^[18,19] 先前的工作, 在 SiC_{NF} 涂覆一定厚度的金刚石, 然后将金刚石模型加热、保温后淬火, 从而形成 a-C 涂层. 工艺过程如图 2 所示. 本文建立的 a-C 涂层密度为 1.2 g/cm^3 , 厚度 t 分别为 0, 0.3, 2.0, 4.0 nm. 最后将整个模型在无外加载荷、温度为 300 K 下充分弛豫, 使体系达到平衡组态.

为了模拟基体裂纹到达涂层后的扩展行为, 本文所用 SiC 基体模型带有预置裂纹, 具体实现过程为: 在复合材料模型的中间位置, 沿垂直于 SiC_{NF} 轴向的平面切入基体, 切入深度贯穿整个基体模型, 相当于基体中的裂纹已经到达涂层/基体界面处, 如图 1(b) 和 (c) 所示.

本文采用 MD 方法 LAMMPS 开源代码模拟了单晶 $\beta\text{-SiC}_{\text{NF}}$ /SiC 复合材料沿 [111] 方向拉伸的过程. 拉伸过程是通过固定模型左端五层原子, 同时移动右端五层原子来实现, 且拉伸应变率为 $0.005\%\text{ ps}^{-1}$. 每次施加位移增量后整个模型结构弛豫 0.5 ps, 以保证系统在 300 K 温度下达到平衡稳定结构. 运动方程积分的时间步长取为 0.5 fs, 并采用 velocity-rescale 方法来控制整个体系的温度. 模型在垂直 SiC_{NF} 轴向的水平方向采用周期性边界条件. MD 计算中采用 Tersoff 经验键序势来描述 SiC_{NF} 和 SiC 基体中 Si-Si, Si-C 和 C-C 原子之间的相互作用力^[20]. 对于 a-C 涂层原子之间相互作用力, 采用第二代 REBO 势^[21], 并叠加了修正的截断方案^[22], 此多体势经常被用来研究 a-C 结构的力学性能^[23].

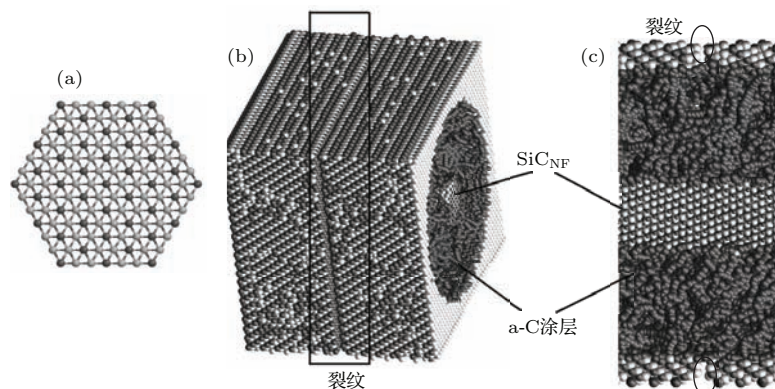


图 1 预置基体裂纹 SiC_{NF} /SiC 复合材料的原子初始构型 (a) SiC_{NF} 的横截面六边形构型; (b) 纳米复合材料; (c) 裂纹区域的局部放大模型

Fig. 1. Atomic configuration of SiC_{NF} /SiC nanocomposite with pre-defect in matrix: (a) top view of hexagonal SiC_{NF} ; (b) nanocomposite; (c) zoom in the crack area.

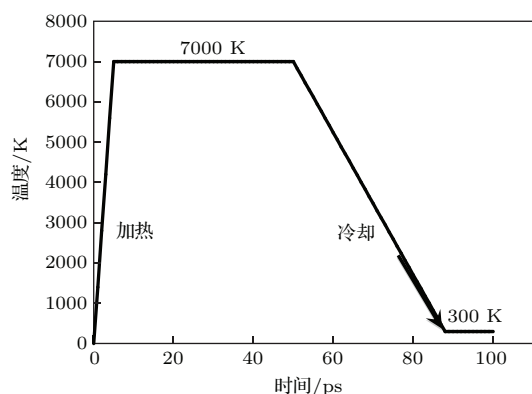
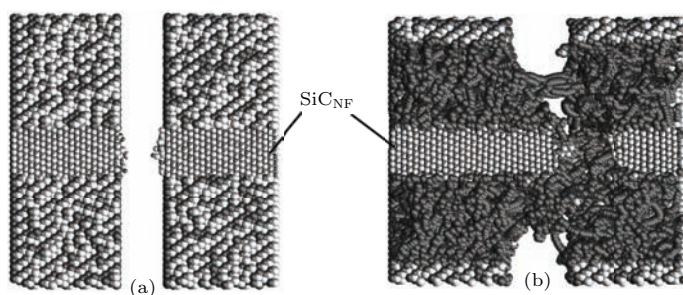


图2 生成 a-C 涂层的技术路线图

Fig. 2. The process of generating a-C coating.

3 计算结果与讨论

本文模拟了基体裂纹到达 $\text{SiC}_{\text{NF}}/\text{SiC}$ 界面的情况下, 覆有均匀密度 a-C 涂层的 $\text{SiC}_{\text{NF}}/\text{SiC}$ 复合材料在 300 K 时的拉伸行为, 其中 a-C 涂层的厚度分别为 0, 0.3, 2.0, 4.0 nm. 结果表明, 在纳米复合材料中存在两种断裂机理: 裂纹穿透纳米纤维和裂纹沿界面发生偏转, 这与传统微米级纤维增强 CMCs 材料中的断裂方式相同.

图3 不同厚度 a-C 涂层的 $\text{SiC}_{\text{NF}}/\text{SiC}$ 复合材料断裂纵向剖面原子示意图 (a) 没有涂层; (b) 涂层厚度为 4.0 nmFig. 3. Atomic configuration of fracture surface in $\text{SiC}_{\text{NF}}/\text{SiC}$ nanocomposite with a-C coating in different thickness: (a) without a-C coating; (b) thickness of a-C coating is 4.0 nm.

3.2 涂层厚度对拉伸性能的影响

在模拟 $\text{SiC}_{\text{NF}}/\text{SiC}$ 复合材料的拉伸过程中, 可以获取 SiC_{NF} 和纳米复合材料所受的力以及由于力而发生的移动位移; 根据受力的横截面积即可获得纳米复合材料的应力-应变曲线, 如图 4 所示. 可以很明显地看出, 没有复合的单根 SiC_{NF} 应力最大值远大于涂层厚度相同的纳米复合材料的应力最大值. 原因之一是由于单根纤维和纳米复合材

3.1 涂层厚度对断裂方式的影响

图 3 显示了 a-C 涂层厚度 t 分别为 0 和 4.0 nm 时 $\text{SiC}_{\text{NF}}/\text{SiC}$ 复合材料的断裂表面. 从图中可以看出, 对于没有涂层或涂层较薄 ($t \leq 0.3$ nm) 的纳米复合材料, 基体裂纹直接穿透纳米纤维, 导致断裂表面非常光滑, 此时断裂模式表现为典型的脆性断裂; 而对于涂层较厚 ($t = 4.0$ nm) 的纳米复合材料, 基体裂纹没有直接穿透纳米纤维而在涂层中发生了偏转, 随着加载的继续, 裂纹扩展方向在 a-C 涂层中发生了改变, SiC_{NF} 在远离基体预置裂纹处断裂, 并随后从涂层中拔出, 此时复合材料表现出不同的断裂表面. 纳米纤维断裂后, 由于较厚的涂层仍可以包覆纤维而承受部分载荷, 纳米复合材料不会发生突然的断裂, 而是以一种非灾难性断裂的方式发生破坏. 因此, 对覆有密度均匀 a-C 涂层的 $\text{SiC}_{\text{NF}}/\text{SiC}$ 复合材料, a-C 涂层厚度是影响拉伸过程中裂纹扩展路径的主要因素, 也是导致复合材料产生韧性机理的关键所在, 选择合适的涂层厚度 t 值有助于提高陶瓷基纳米复合材料的韧性.

料承受载荷的面积不同. 然而, 即使仅考虑纳米纤维的受力面积, 没有 a-C 涂层的 $\text{SiC}_{\text{NF}}/\text{SiC}$ 复合材料承受的最大应力约为 93 GPa, 低于复合前没有涂层的单根 SiC_{NF} 所承受的最大应力值 (~ 103 GPa). 这说明复合后纤维的应力集中增大, 没有涂层或涂层厚度较薄的纳米复合材料受应力集中影响其应力最大值降低. 复合后纤维应力集中系数将在下文讨论. 另外, 图 4 中还可以看出, 没有涂层或涂层较薄 ($t \leq 0.3$ nm) 时, SiC_{NF} 和纳米复合

材料的应力随着应变的增加而几乎呈线性增大, 随后到达应力最大值, 随着应变的继续增加, 应力表现为突然降低为零, 表明材料呈现典型的脆性断裂方式; 当涂层较厚 ($t > 2.0$ nm) 时, 材料断裂前后应力-应变曲线出现非线性特点. 特别是涂层厚度 $t = 4.0$ nm 时, 纳米复合材料的应力在达到最大值后没有发生突然降低为零, 而是表现为非线性的缓慢降低过程. 这种非线性的拖尾现象表明此时材料没有发生灾难性的脆性断裂. 这两种现象验证了上文中观察到原子拉伸模型的两种断口模式.

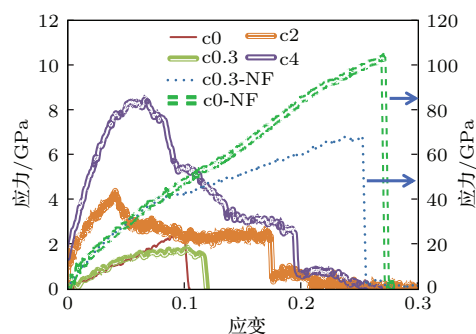


图4 (网刊彩色) 不同厚度 a-C 涂层的 SiCNF/SiC 复合材料和单根 SiCNF 的拉伸应力-应变曲线, 其中 NF 表示单根 SiCNF

Fig. 4. (colored online) Tensile stress-strain curves of SiCNF/SiC nanocomposite and single SiCNF with different thickness of a-C coating. NF denotes single SiCNF.

通过拉伸应力-应变曲线, 纳米复合材料的拉伸强度和断裂能都可获取. 拉伸强度定义为拉伸过程中纳米复合材料所受应力的临界最大值; 断裂能则由拉伸应力-应变曲线所包围的面积来获得, 可用下面公式表达:

$$E_f = \int_0^{\varepsilon} \sigma d\varepsilon, \quad (1)$$

意为单位面积材料断裂时吸收的能量, 亦称断裂能密度, 是评定材料韧性的一个重要指标. 公式中 σ 表示应力, ε 表示应变. 根据(1)式即可获得不同厚度涂层的纳米复合材料断裂能. 图5显示了拉伸过程中 SiCNF/SiC 复合材料的拉伸强度和断裂能与涂层厚度的关系. 本文主要关注涂层厚度对纳米复合材料力学性能的影响, 这里没有给出单根 SiCNF 的拉伸强度及断裂能. 从图中可以看出, 当 a-C 涂层厚度 $t \leq 0.3$ nm 时, 随着涂层厚度的增加, SiCNF/SiC 复合材料的拉伸强度和断裂能都没有表现出明显的提高; 当 a-C 涂层厚度 $t > 2.0$ nm 时, 纳米复合材料的拉伸强度和断裂能都有显著地提

高, 且拉伸强度要远高于微米级 SiC_f/SiC 复合材料的拉伸强度^[10-12]. 此时, 纳米复合材料的拉伸强度约为没有涂层时纳米复合材料拉伸强度的 4 倍; 断裂能则提高了一个数量级. 在微米级 SiC_f/SiC 复合材料的拉伸实验^[10,11] 中发现, 复合材料拉伸强度和断裂能随着涂层厚度的增加而显著提高, 即纳米复合材料中拉伸强度和断裂能随着涂层厚度的变化趋势与传统微米级复合材料拉伸实验的现象一致. 因此, 覆有 a-C 涂层的 SiCNF 也可以对陶瓷基纳米复合材料起到增强补韧的作用.

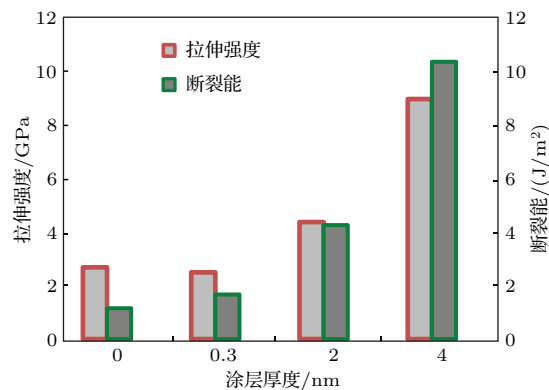


图5 (网刊彩色) SiCNF/SiC 复合材料的拉伸强度和断裂能与 a-C 涂层厚度的关系

Fig. 5. (colored online) The tensile strength and fracture energy of SiCNF/SiC nanocomposite as a function of the thickness of a-C coating.

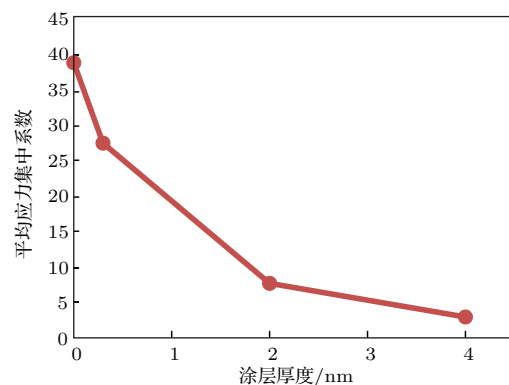


图6 SiCNF 平均应力集中系数与 a-C 涂层厚度的关系

Fig. 6. The average stress concentration factor of SiCNF vs. the thickness of a-C coating.

图6是 SiCNF 纤维在复合材料中断裂之前的平均应力集中系数随涂层厚度的变化规律. 这里平均应力集中系数定义为单根纤维断裂强度除以纤维在复合材料中断裂时的平均应力. 平均应力集中系数越大, 说明纳米复合材料在承受较低的应力时就发生断裂. 图6中可以看出, 没有涂层时复合后纳米纤维在基体中的应力集中很高, 这主要是源于

基体裂纹引起的应力集中. 随着涂层厚度的增加, 平均应力集中系数下降, 说明纳米复合材料的强度得到了提高. 这主要是由于 a-C 涂层缓解了纳米复合材料中纤维中的应力集中. 当涂层足够厚时, 如 $t = 4.0$ nm, 应力集中得到较大程度的耗散, 基体裂纹扩展路径发生偏转, 最终纤维拔出, 纳米复合材料的韧性提高.

众所周知, 在传统的微米级纤维增强 CMCs 中, 复合材料的强化和韧化关键在于对纤维/基体界面的设计, 通过引入有效的涂层使基体裂纹在纤维/基体界面处发生偏转, 在拉伸过程中发生界面脱黏、未破坏的纤维引起的裂纹“桥接”、纤维滑移和最终的纤维拔出等一系列行为. 这些行为都伴随着能量的消耗, 这种能量消耗机理很大程度上提高了 CMCs 的断裂能, 进而使最终的断裂模式转变为非灾难性的^[4]. 最近, Yang 等^[13]研究了 SiC_{NF} 和微米级 SiC_f 混合增强 $\text{SiC}_{\text{NF}}/\text{SiC}_f/\text{SiC}$ 复合材料的拉伸性能, 并指出 SiC_{NF} (直径为 20 nm) 表面覆有厚度分别为 5 nm 和 50 nm a-C 涂层的混合增强复合材料与仅由 SiC_f 增强的 SiC_f/SiC 复合材料相比, 断裂韧性分别提高了 72% 和 114%, 拉伸强度分别增加了 74% 和 97%. 同时, 实验观察到 a-C 涂层厚度为 50 nm 的 SiC_{NF} 有明显的拔出现象, 而涂层厚度为 5 nm 的 SiC_{NF} 没有拔出迹象. 尽管本文研究的纳米复合材料中 SiC_{NF} 直径和 a-C 涂层厚度均比实验^[13]中相应数值小, 计算结果仍具可比性. 另外, 即使纳米纤维的涂层厚度远远小于微米级纤维, a-C 涂层依然可以显著地增加纳米复合材料中的能量消耗, 从而改变纳米复合材料的断裂模式. 因此, 传统微米级纤维增强 CMCs 强韧化的设计思路也适用于 $\text{SiC}_{\text{NF}}/\text{SiC}$ 复合材料, 即较厚的 a-C 涂层有助于获得高强度、高损伤容限性和高抗疲劳性的 $\text{SiC}_{\text{NF}}/\text{SiC}$ 复合材料.

然而, 涂层厚度会影响到纳米纤维的体积分数, 若涂层过厚将对纳米复合材料的力学性能产生不利影响. 因此, 未来工作或许可以尝试改变涂层的结构, 以期达到韧化陶瓷基纳米复合材料的结果.

4 结 论

本文首先建立约含 12 万原子的 $\text{SiC}_{\text{NF}}/\text{SiC}$ 纳米复合材料模型, 并采用 MD 计算方法和 Tersoff

键级多体势研究了 a-C 涂层厚度对纳米复合材料断裂模式及力学性能的影响. 模拟结果表明, 在 $\text{SiC}_{\text{NF}}/\text{SiC}$ 复合材料中存在两种断裂机理: 裂纹穿透纳米纤维和裂纹沿界面发生偏转, 这与传统微米级纤维增强 CMCs 材料中断裂方式相同. 当涂层厚度 $t \leq 0.3$ nm 时, $\text{SiC}_{\text{NF}}/\text{SiC}$ 复合材料发生典型的脆性断裂方式, 此时涂层厚度对纳米复合材料的拉伸强度和断裂能没有明显的影响; 当涂层厚度 $t = 4.0$ nm 时, 裂纹在涂层中发生偏转, SiC_{NF} 发生拔出现象, 此时材料拉伸强度约为前者的 4 倍, 断裂能则比前者提高一个数量级. 分析表明, 没有涂层的纳米纤维复合后其平均应力集中系数较高, 材料拉伸强度低; a-C 涂层较厚时的 $\text{SiC}_{\text{NF}}/\text{SiC}$ 复合材料中纤维的平均应力集中系数明显降低, 说明此时涂层有效地缓解了应力集中, 材料的拉伸强度显著提高, 同时裂纹发生偏转而消耗了更多能量, 因而材料的韧性得到改善. 本文研究结果可望为设计同时具有高强度、高韧性的陶瓷基纳米复合材料提供理论基础.

参考文献

- [1] Karnitz M A, Craig D F, Richlen S L 1991 *Am. Ceram. Soc. Bull.* **80** 430
- [2] Donald I W, Mcmillan P W 1976 *J. Mater. Sci.* **11** 949
- [3] Marshall D B, Evans A G 1985 *J. Am. Ceram. Soc.* **68** 225
- [4] Besmann T M, Stinton D P, Kupf E R, Shanmugham S, Liaw P K 1997 *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **458** 147
- [5] Evans A G 1990 *J. Am. Ceram. Soc.* **73** 187
- [6] Curtin W A 1991 *J. Am. Ceram. Soc.* **74** 2837
- [7] Xia Z H, Curtin W A 2001 *Cer. Eng. Sci. Proc.* **22** 371
- [8] Kerans R J, Parthasarathy T A 1999 *Composites: Part A* **30** 521
- [9] Kerans R J 1995 *Scripta Metall. et Mater.* **32** 505
- [10] Yang W, Kohyama A, Katoh Y, Araki H, Yu J, Noda T 2003 *J. Am. Ceram. Soc.* **86** 851
- [11] Yang W, Noda T, Araki H, Yu J, Kohyama A 2003 *Mater. Sci. Eng. A* **345** 28
- [12] Wong E W, Sheehan P E, Liebert C M 1997 *Science* **277** 1971
- [13] Yang W, Araki H, Tang C, Thaveethavorn S, Kohyama A, Suzuki H, Noda T 2005 *Adv. Mater.* **17** 1519
- [14] Xia Z H, Riester L, Curtin W A, Li H, Sheldon B W, Liang J, Chang B, Xu J M 2004 *Acta Mater.* **52** 931
- [15] Xia Z H, Curtin W A, Sheldon B W 2004 *J. Eng. Mater. Technol.* **126** 238
- [16] Fan J P, Zhuang D M, Zhao D Q, Zhang G, Wu M S, Wei F, Fan Z J 2006 *Appl. Phys. Lett.* **89** 121910

- [17] Fan B B, Guo H H, Li W, Jia Y, Zhang R 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 148101 (in Chinese) [范冰冰, 郭焕焕, 李稳, 贾瑜, 张锐 2013 物理学报 **62** 148101]
- [18] Li L, Niu J B, Xia Z H, Yang Y Q, Liang J Y 2011 *Scripta Mater.* **65** 1014
- [19] Li L, Solá F, Xia Z H, Yang Y Q 2012 *J. Appl. Phys.* **111** 094306
- [20] Tersoff J 1989 *Phys. Rev. B* **39** 5566
- [21] Brenner D W, Shenderova O A, Harrison J A, Stuart S J, Ni B, Sinnott S B 2002 *J. Phys. Condensed Matter.* **14** 783
- [22] Pastewka L, Pou P, Pérez R, Gumbsch P, Moseler M 2008 *Phys. Rev. B* **78** 161402
- [23] Pastewka L, Moser S, Gumbsch P, Moseler M 2011 *Nature Mater.* **10** 34

Molecular dynamics study on tensile behavior of SiC nanofiber/C/SiC nanocomposites*

Li Li-Li^{1)†} Xia Zhen-Hai²⁾ Yang Yan-Qing³⁾ Han Ming¹⁾

1) (Department of Materials Science and Engineering, Fujian University of Technology, Fuzhou 350118, China)

2) (Department of Materials Science and Engineering, University of North Texas, Denton, TX 76203, USA)

3) (School of Materials Science and Engineering, Northwestern polytechnical University, Xi'an 710072, China)

(Received 21 October 2014; revised manuscript received 7 January 2015)

Abstract

Fracture behavior and mechanical properties of SiC nanofiber (SiC_{NF}) reinforced SiC nanocomposites as influenced by the thickness of amorphous carbon (a-C) coatings are studied via molecular dynamics simulations using Tersoff potential. To simulate the condition that a matrix crack arrives at the interface between matrix and coating, a pre-setting matrix crack is created. Results show that the tensile stress-strain curve of nanocomposites without and/or with thin a-C coatings (e.g., $t \leq 0.3$ nm) demonstrates an abrupt drop after achieving a maximum value, while nonlinear tails appear in the curves of nanocomposites with thick a-C coatings (e.g., $t > 2.0$ nm). It is demonstrated that the SiC_{NF} is penetrated by the matrix crack when it is uncoated and/or coated by a thin a-C layer ($t \leq 0.3$ nm) and the nanocomposite fails in a typical brittle mode; whereas the crack deflection path changes and the SiC_{NF} is pulled out from the matrix when the a-C coatings are thick enough (e.g., 4 nm), showing a different fracture mode in nanocomposites. Compared to nanocomposites without an a-C coating, the tensile strength of nanocomposites with a-C coating of 4.0 nm thickness is about four times higher, and the fracture energy increases around an order of magnitude. Furthermore, the average stress concentration factor for SiC_{NF} in nanocomposites, defined as the ratio of tensile strength of single SiC_{NF} to the average stress of the nanofiber in the composite when it is broken, is extracted and shows a decreasing trend with increasing coating thickness, indicating that a-C coating can therefore be expected to simultaneously enhance the tensile strength and fracture energy of the SiC_{NF}/SiC nanocomposites. This work sheds light on the toughening mechanism in SiC_{NF}/C/SiC nanocomposites where a-C coating plays a significant role, indicating that the toughening mechanism in conventional ceramic matrix composites on a microscale is still valid on a nanoscale. Simulation results suggest that coating thickness in material design is efficient for engineering SiC_{NF}/SiC nanocomposites with high strength and toughness.

Keywords: molecular dynamics simulations, tensile behavior, nanocomposite, a-C coating

PACS: 71.15.PD, 62.20.-x, 62.23.Pq, 61.43.Er

DOI: 10.7498/aps.64.117101

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51071125), and the Education Scientific Research Project for Young Teachers of Fujian, China (Grant No. JA14218).

† Corresponding author. E-mail: lilshd18@gmail.com