

# 晶体非线性弹性变形的原子级模拟研究<sup>\*</sup>

文玉华<sup>1)†</sup> 张 杨<sup>2)</sup> 朱梓忠<sup>2)</sup>

1) 兰州理工大学甘肃省有色金属新材料国家重点实验室, 兰州 730050

2) 厦门大学物理系, 厦门大学理论物理与天体物理研究所, 厦门 361005

(2007 年 4 月 17 日收到, 2007 年 7 月 12 日收到修改稿)

采用分子静力学结合量子修正 Suttner-Chen 型多体势研究了 Ni 单晶体在受单向拉伸和压缩载荷作用下的弹性响应. 考虑了三种加载方式, 即 [001]、[011] 和 [111] 单向加载. 模拟的结果表明: 晶体在 [011] 单向加载下的弹性变形表现出强烈的非线性效应. 然而沿 [001] 和 [111] 单向加载时, 它的横向变形表现为各向同性. 进一步讨论了杨氏模量和泊松比与应变的关系, 并和第一性原理计算的结果做了比较.

关键词: 晶体, 弹性变形, 分子静力学

PACC: 6220F, 6185, 7115P

## 1. 引 言

材料的力学性质对材料的应用是至关重要的. 在大多数工程材料中, 材料的强度与其内部位错的成核、增殖和运动, 以及微裂纹的传播有关<sup>[1]</sup>. 如果材料内部没有任何缺陷, 材料在达到弹性极限时就将失效. 弹性极限定义为可完全恢复的变形所能达到的最大值. 对于大多数材料而言, 在弹性范围内, 应力与应变是呈现线性的关系. 然而, 对于金属材料而言, 它的应力与应变关系常常偏离线性关系, 其弹性变形呈现显著的非线性效应<sup>[2]</sup>. 因此, 它的弹性模量也随着应变的不同而发生改变. 这种非线性行为对于理解金属材料以及由其构成的体材料的力学性质是至关重要的.

金属及其合金由于具有优异的力学性能, 在高性能结构材料与纳米材料中已得到了广泛地应用<sup>[3,4]</sup>. 因此, 弄清金属材料的力学响应对于它的应用是很关键的. 实验中常用拉伸测试来检验金属的力学性质. 然而, 由于空位、杂质、位错和界面等缺陷的存在, 直接从实验得到纯金属的本征力学响应几乎是不可能的, 而含缺陷的金属材料在一般载荷下的力学响应实际上更为复杂. 为了探讨纯金属的本征力学行为, 原子层次的计算机模拟是一个很有效的途径. 这些模拟方法, 如分子动力学模拟、蒙特卡

罗模拟, 经常运用经验或半经验的方法描述原子间相互作用<sup>[5,6]</sup>. 在这些经验的或半经验描述的框架里, 其参数通常是通过拟合材料的各种性质, 如弹性常数、晶格常数、结合能、空位能等得到的. 因此能够较好地描述材料的许多性质. Milstein 及合作者利用嵌入原子势研究了金属立方晶体(主要考虑了 bcc 与 fcc 晶系)在单向拉伸下的力学响应, 分析了它们在不同晶体取向下的弹性性质和力学特征量变化<sup>[7,8]</sup>. 本文采用分子静力学方法结合多体势, 以 Ni 金属为研究对象, 通过模拟 Ni 单晶体沿 [001]、[011] 和 [111] 方向拉伸和压缩下的力学行为, 进一步研究它的弹性响应、弹性模量以及泊松比等与应变的关系.

## 2. 模拟方法与过程

为了模拟实验中的拉伸和压缩过程, 我们采用了分子静力学方法并结合量子修正 Suttner-Chen (Q-SC) 型多体力场<sup>[9]</sup>. 这个力场的参数是通过拟合晶格常数、结合能、弹性常数、声子色散关系、空位形成能和表面能等得到的. 根据 Q-SC 力场, 系统的总势能可以表述成

$$U = \sum_i U_i = \sum_i \lambda [ \sum_{j>i} V(R_{ij}) - c\sqrt{\rho_i} ], \quad (1)$$

其中,  $V(R_{ij})$  是对势项, 表示  $i$  原子与  $j$  原子之间的

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(批准号: 10702056)和兰州理工大学甘肃省有色金属新材料国家重点实验室资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: ywhwen@xmu.edu.cn

核-核排斥作用,它具有以下形势:

$$V(R_{ij}) = \left(\frac{a}{R_{ij}}\right)^n, \quad (2)$$

$\rho_i$  是  $i$  原子的局域电子密度,由下式给出:

$$\rho_i = \sum_{j \neq i}^N \mathcal{K}(R_{ij}) = \sum_{j \neq i}^N \left(\frac{a}{R_{ij}}\right)^m. \quad (3)$$

上面三式中, $R_{ij}$  是  $i$  原子与  $j$  原子之间的距离, $a$  是晶格常数, $c$  是无量纲的参数, $\lambda$  是能量的标度因子, $n$  和  $m$  是整数且满足  $n > m$ . 对于 Ni 金属,这些参数分别为  $n = 10$ ,  $m = 5$ ,  $\lambda = 7.3767 \text{ meV}$ ,  $c = 84.745$  和  $a = 0.3516 \text{ nm}$ .

由于单晶体的各向异性性质,本文考虑三种取向的单晶体,即  $[001]$ 、 $[011]$  和  $[111]$  取向的单晶体,它的取向和构型的关系如图 1 所示. 这些晶体首先根据共轭梯度算法弛豫到能量极小值,在模拟过程中运用三维周期性边界条件进行延扩. 系统的应力张量由下式给出:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \left\{ \sum_i m_i v_i^\alpha v_i^\beta + \sum_i \sum_{j>i} F_{ij}^\alpha R_{ij}^\beta \right\}, \quad (4)$$

这里  $V$  是系统的体积, $m_i$  和  $v_i$  第  $i$  个原子的质量和速度, $R_{ij}$  和  $F_{ij}$  是第  $i$  个原子与第  $j$  个原子之间的距离与作用力, $\alpha$  与  $\beta$  可以任取  $X$ ,  $Y$  和  $Z$  方向中任意一个. 考虑到我们模拟的是静力学,(4)式右边第一项求和实际上为零. 根据晶体的对称性可知,剪切应力不论是在有、无拉伸应变的状态下均是为零的.

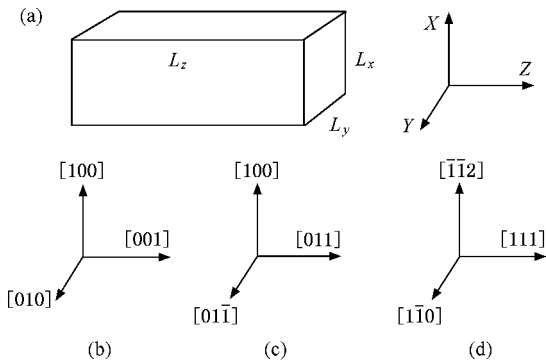


图 1 本文采用的单晶体模型示意图( $Z$  轴是加载方向,沿  $X$ ,  $Y$  和  $Z$  方向均使用周期性边界条件.(b)–(d) 表示单晶体的晶向学方向. $L_x$ ,  $L_y$  和  $L_z$  表示模型分别沿  $X$ ,  $Y$  和  $Z$  方向的长度)

在经过初始充分弛豫后,晶体处在平衡态,它的内部应力处处为零. 在此基础上,我们进一步模拟单向拉伸和压缩实验,拉伸与压缩的方向沿着  $Z$  轴方向进行. 拉伸的应变范围是从 0 到 4.0%,每步增量为 0.04%;压缩的应变范围是从 0 到 -4.0%,每步增量为 -0.04%. 对于每个应变值,我们均采用共轭

梯度算法,保持  $Z$  方向的长度不变,调整  $X$  和  $Y$  方向的长度和原子的坐标,以使得系统达到能量极小值. 当系统能量达到极小值时,我们再计算沿  $Z$  方向的正应力. 经过这样一系列过程,就可以得到应力与应变的关系. 在拉伸过程中,我们一直采用三维周期性边界条件对模型进行了延扩.

### 3. 模拟结果与讨论

在材料研究中,通常是记录拉伸和压缩测试过程中拉力和伸长量的变化关系,从而获取材料的弹、塑性变形的特征和程度等有关信息. 本文模拟了三种不同晶向的单晶体的拉伸力学行为. 在模拟拉伸变形过程中,我们直接得到一系列应力与应变的对应值,在图 2 中显示了 Ni 单晶在应变从 -4.0% 到 4.0% 范围内的弹性响应. 从图可以看到:无论拉伸还是压缩过程,在小应变范围内,应力与应变是基本成线性关系的,但当应变大于 1% 或小于 -1% 时,它们之间逐渐偏离线性关系,呈现明显的非线性关系,而且这种偏离关系沿  $[011]$  方向显得尤其明显.

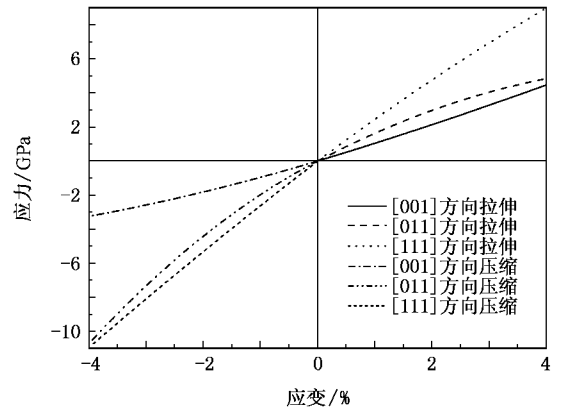


图 2 Ni 单晶沿  $[001]$ 、 $[011]$  和  $[111]$  方向拉伸和压缩时的弹性响应

我们首先研究 Ni 单晶在压缩过程的弹性响应. 对于沿  $[001]$  加载,应力-应变曲线向上弯曲,这是因为在压缩过程中,单晶体有发生从  $fcc$  结构向  $bcc$  结构的 Bain 转变的趋势<sup>[10]</sup>. 这种现象在其他的  $fcc$  结构金属的压缩变形过程中也曾观察到,由于变形量较小,这种弯曲现象并不显著. 相比之下,当沿  $[011]$  方向加载时,应力-应变曲线则向下弯曲. 随着应变的增加,单晶体呈现刚性的趋势,这是因为  $[011]$  方向是  $fcc$  晶体的原子密排方向,沿着这个方向原子间距离稍微的变化,就会引起应力剧烈的变化. 沿  $[111]$  方向的压缩曲线最接近线性关系. 由于  $[011]$

方向的压缩曲线向下弯曲,它在应变为  $-4.2\%$  时与  $[111]$  方向的压缩曲线相交(图 2 中没有显示),这种相交必然影响到  $[011]$  方向加载的力学响应.我们再观察拉伸曲线的特点.显然  $[011]$  方向的拉伸曲线向下弯曲,如果以原点为对称点的话,它和  $[001]$  方向的压缩曲线有点相似.而其他两条拉伸曲线的弯曲程度并不明显,但是这两条曲线的形状还是有所不同的(在下边我们还要讨论).总之,无论是拉伸还是压缩过程,应力与应变的关系都呈现出了明显的非线性关系,在弹性阶段的胡克定律已不再适用.

根据弹性理论,应力可由泰勒级数展开表达为

$$\sigma = \sigma_0 + a\epsilon + b\epsilon^2 + c\epsilon^3 \approx a\epsilon + b\epsilon^2, \quad (5)$$

这里  $\sigma_0$  在平衡状态时为零;当应变较小时,方程(5)中应变的高阶无穷小项可以忽略,所以应力可以表示为应变的二次项.由弹性模量的定义,可以进一步导出

$$E = \frac{d\sigma}{d\epsilon} \approx a + 2b\epsilon = E_0 + \frac{dE}{d\epsilon}\epsilon, \quad (6)$$

这里  $E_0$  和  $E$  分别为应变为零和  $\epsilon$  时的杨氏模量.

我们采用二次函数结合最小二乘法拟合图 2 中的应力-应变曲线,并总结了拟合的结果显示在表 1 中.显然,无论是压缩还是拉伸过程,拟合得到的无应变时的杨氏模量都满足  $E_{[111]} > E_{[011]} > E_{[001]}$ ,即沿着  $[111]$  方向的杨氏模量最大  $[011]$  方向次之,  $[001]$  方向的杨氏模量是最小的.作为比较, Milstein 等人<sup>[7]</sup>得到的结果分别是 138.5 GPa, 233.5 GPa 和 302.6 GPa.他们的结果总的来说比本文的结果要高出 20% 以上,出现这种结果的差异,主要是所采用的原子间作用势不同引起的.下面我们将通过进一步计算来比较与 Milstein 等人的结果.

表 1 无应变时的杨氏模量  $E_0$  和杨氏模量对应变的梯度

晶向		杨氏模量 $E_0/\text{GPa}$	$(dE/d\epsilon)/\text{GPa}$
[001]	拉伸	101.71	501.78
	压缩	100.42	959.40
[011]	拉伸	176.42	-2782.34
	压缩	173.70	-4695.88
[111]	拉伸	251.76	-1359.64
	压缩	257.56	-807.84

为了作更准确地获得 Ni 单晶的有关性质,本文也采用第一性原理计算了它的弹性模量.我们的计算采用密度泛函理论框架下的第一性原理方法,应用 VASP 程序包(Vienna *ab initio* simulation package)进行了总能量的从头计算,采用投影缀加平面波方法(PAW)<sup>[11]</sup>,并结合使用广义梯度近似(GGA)<sup>[12]</sup>.体系的波函数用平面波展开,平面波的切断能取得

足够大以保证系统的能量误差小于 0.01 eV.布里渊区的积分采用 Monkhorst-Pack 方法,所选取的  $k$  点经过了优化.我们通过对总能量的计算,得到 Ni 单晶体的平衡晶格常数  $a_0 = 0.3515 \text{ nm}$ ,这一结果非常接近于 0.3524 nm 的实验值,显示了第一性原理计算的精确性.为了模拟拉伸过程,我们对模拟的原胞沿着给定的方向施加压缩或拉伸应变,然后保持原胞沿此方向的长度不变,调节其他两个垂直方向的长度,使得系统的总能量达到最小值为止.这样,我们就可以得到应变与总能量之间一系列对应点.施加的应变范围限定在  $-1.0\%$  与  $1.0\%$  之间.平衡位置的杨氏模量则可以通过总能量对应变的二阶导数由下式给出:

$$E_0 = \frac{1}{V_0} \left( \frac{\partial^2 U_{\text{tot}}}{\partial \epsilon^2} \right)_{\epsilon=0}, \quad (7)$$

这里  $V_0$  是平衡时的体积.事实上,方程(6)与方程(7)在理论上是等价的, Diao 等人<sup>[13]</sup>的计算结果也证实了这两个表达式所计算的杨氏模量是相等的.我们通过(7)式计算得到的  $E_{[001]}$ ,  $E_{[011]}$  和  $E_{[111]}$  分别是 111.2 GPa, 192.9 GPa 和 271.0 GPa.已有的研究表明:单晶材料沿  $[011]$  方向的杨氏模量与多晶材料的体积模量大体是相等的<sup>[14]</sup>.我们采用从头计算得到 Ni 单晶体  $[011]$  方向的杨氏模量是 192.9 GPa,与 Ni 多晶体的 199.5 GPa 的杨氏模量实验值符合得很好,这显示了第一性原理计算结果是精确和可靠的.通过对比可以看到:我们运用量子修正 Q-SC 型多体力场计算得到的结果比第一性原理计算得到的杨氏模量均要小,但比 Milstein 等人的结果更接近第一性原理计算结果.

杨氏模量梯度  $dE/d\epsilon$  表征了弹性模量对应变的依赖关系.值得注意的是从杨氏模量梯度的定义看,显然,应力应变关系曲线,除去原点是奇点(如拐点)的情况外,对于同一方向,呈现了相反的依赖关系.即在压缩和拉伸过程中,杨氏模量随着应变的增加,它的变化趋势恰好是相反的.比较图 2 中三个不同方向的杨氏模量与应变的关系,还可以看到  $[001]$  方向变化趋势与  $[011]$  和  $[111]$  方向也是恰好相反的.即在沿  $[001]$  方向拉伸时,该方向的杨氏模量随着应变的增加是上升的,而沿  $[011]$  和  $[111]$  方向恰好是降低的.对于拉伸过程,  $dE/d\epsilon$  沿着  $[011]$  方向的绝对值,即 2782.34 GPa,分别是沿  $[001]$  方向的 5.5 倍和  $[111]$  方向的 2.05 倍.对于压缩过程,  $dE/d\epsilon$  沿着  $[011]$  方向的绝对值,分别是沿  $[001]$  方向的 4.9

倍和[111]方向的5.8倍.这意味杨氏模量 $E$ 沿[011]方向随应变的改变而变化最强烈,原因是[011]方向是面心立方晶体的原子最密排的方向,原子沿此方向的微小变化就能引起此方向作用力的显著改变.从表1也可以看到杨氏模量对应变关系最弱的方向是[001]方向.这一结果和其他有关Cu单晶体的研究结果是一致的<sup>[15]</sup>.

在单向拉伸过程中,横向应变可以通过其他两个方向的长度 $L_x$ 和 $L_y$ 计算出来,计算的结果显示在图3中.由于fcc晶体的对称性,当沿[001]方向拉伸时,横向应变沿[100]方向的与[010]方向的结果是相同的,所以在图2中就没有显示.值得注意的是,当沿[011]方向加载时,横向应变沿[01 $\bar{1}$ ]方向和加载应变具有相同的符号.即沿[011]方向拉伸时,晶体沿[01 $\bar{1}$ ]方向的长度也是伸长的;而当沿[011]方向压缩晶体时[01 $\bar{1}$ ]方向也会相应地缩短.这是因为当晶体沿[011]方向拉伸时[01 $\bar{1}$ ]方向承受的是拉应力;而当沿[011]方向压缩时,此方向承受的是压应力.为了和外界达到平衡[01 $\bar{1}$ ]方向必须要相应地伸长或缩短.但是,这个横向应变值相对其他方向应变而言很小.这点从图3可以看到:当拉伸应变达到4%时,沿[01 $\bar{1}$ ]方向的横向应变仅0.5%,而沿[001]方向的横向应变则有接近3.2%压缩应变.

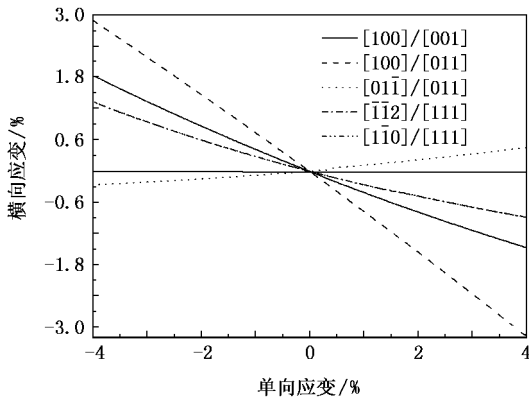


图3 横向应变随着加载应变的变化关系(符号[100][001]表示沿[001]方向加载而引起[100]方向的横向应变,其他的符号含义类似)

泊松比是描述材料性质的一个重要物理量,它定义为横向压缩量和轴向拉伸量的比值,取值一般介于-1到0.5之间(这个理论范围对各向同性材料是适用的).这里必须指出的是,一般的体材料是由大量的粗晶粒(即晶粒的大小在微米量级)构成

的,每个晶粒都有它自己的晶向,所以体材料的性质统计表现为各向同性.然而,大多数单晶体则表现出强烈的各向异性效应.假设当晶体的加载方向沿着 $n$ 方向,相应的应变为 $\epsilon_n$ ,由于拉伸产生沿着横向 $m$ 方向的应变为 $\epsilon_m$ ,则泊松比的定义由下式给出:

$$\nu_{m/n} = -\frac{d\epsilon_m}{d\epsilon_n} \approx (\nu_{m/n})_0 + \frac{d\nu_{m/n}}{d\epsilon_n}\epsilon_n, \quad (8)$$

当应变 $\epsilon_n$ 很小时,泊松比约等于后面两项之和.

我们仍然采用二次型函数拟合图3中的曲线,并把拟合的结果显示在表2中.由表中可以看出:在无应变状态下的泊松比呈现了 $\nu_{[100][011]} > \nu_{[100][001]} > \nu_{[112][111]} = \nu_{[1\bar{1}0][111]} > 0 > \nu_{[01\bar{1}][011]}$ 的变化趋势.这里有三点值得我们注意:1)  $\nu_{[01\bar{1}][011]} = -0.0855$ 为负值,但绝对值很小.对于fcc晶体而言,沿某个方向负的泊松比在理论上运用晶格弹性模型和嵌入原子方法模型计算的研究所证实<sup>[9,16]</sup>,这种负的泊松比也出现在具有hcp结构的Zn晶体中<sup>[17]</sup>.然而,目前还没有发现沿所有方向的泊松比均为负值的材料.在本文中,沿[011]方向加载时,虽然引起了沿[01 $\bar{1}$ ]方向的膨胀,但同时[100]方向是收缩的,且后者的收缩量比前者膨胀量要大得多,而且 $\nu_{[100][011]} = 0.757$ 是本文所有计算的泊松比中最大的.2)  $\nu_{[112][111]} = \nu_{[1\bar{1}0][111]}$ 意味着在沿[111]方向单向加载时,横断面的变形是各向同性的.这一点从图3中[112][111]和[1 $\bar{1}0$ ][111]曲线完全重合就可以看出.另外,考虑到 $\nu_{[100][001]} = \nu_{[010][001]}$ 是fcc晶体对称性的结果.因此,当沿[001]和[111]方向单向加载时,横断面的变形实际上是各向同性的.3) 泊松比梯度 $d\nu/d\epsilon$ 对于[100][011]是正的,而对于其他方向均为负值,这意味着只有 $\nu_{[100][011]}$ 是随着应变的增加而变大的,而其他方向的泊松比均是减小的.由于泊松比梯度总起来讲还是很小的,所以当应变很小时,泊松比通常可以当作常数来看待.

表2 拟合得到的无应变时的泊松比 $\nu_0$ 和泊松比对应变的梯度(括号内的值来自第一性原理计算结果)

晶向(m/n)	泊松比 $\nu_0$	$d\nu/d\epsilon_n$
[100][001]	0.4126 (0.4078)	-2.388
[010][001]	0.4126 (0.4078)	-2.388
[100][011]	0.757 (0.7814)	1.658
[01 $\bar{1}$ ][011]	-0.0855 (-0.0994)	-1.064
[112][111]	0.2735 (0.2712)	-2.828
[1 $\bar{1}0$ ][111]	0.2735 (0.2712)	-2.828

考虑到在小应变下泊松比可以看作常数,我们采用线性函数去拟合运用VASP计算得到的横向应变与

单向拉伸应变的比值,从而可以导出泊松比,并把结果也显示在表 2 中.由此可见,通过第一性原理计算的结果和我们采用经验的 Q-SC 型多体势计算的结果还是符合得很好,显示了我们计算模拟的有效性.

最后,值得说明的是,而且,  $\nu_{[100][011]} = 0.757$  超出了泊松比的理论范围.这是由于那个范围是根据各向同性材料推出来的,对于各向异性的单晶体并不适用.实验测得 Ni 多晶体材料的泊松比为  $\nu = 0.312$  处在  $\nu_{[100][001]}$  与  $\nu_{[112][111]}$  之间.这个值是多晶体材料中晶粒各个方向泊松比的统计平均值.直接建立单晶和多晶体材料的力学量如杨氏模量和泊松比的关系是个很有意义和挑战性的工作,尚需进一步的深入研究工作.

## 4. 结 论

本文运用分子静力学方法结合量子修正 Suttent-

Chen 多体势场研究了 Ni 单晶体沿着  $[001]$ 、 $[011]$  和  $[111]$  方向的单向拉伸和压缩的弹性行为,详细地分析了杨氏模量和泊松比随应变的变化关系.结果显示:当沿  $[001]$  和  $[111]$  方向加载时,横向变形实际上是各向同性的.在无应变状态时,杨氏模量呈现  $E_{[111]} > E_{[011]} > E_{[001]}$  的变化关系.杨氏模量随应变的改变而变化最强烈的方向是  $[011]$  方向,而最弱的是  $[001]$  方向.我们的研究显示泊松比只有  $\nu_{[011][011]}$  为负值,而其他方向的均为正值.  $\nu_{[100][011]}$  是所有泊松比中最大的,并随着应变的增加而变大,而其他泊松比则随应变的增加而减小.作为比较,我们也采用第一性原理计算了 Ni 单晶的杨氏模量和泊松比,计算的结果和采用经验的 Q-SC 型多体势计算的结果是基本一致的,我们得到了比 Milstein 等人的更接近第一性原理计算的结果.

- [ 1 ] Perez N 2004 *Fracture mechanics* ( Boston : Kluwer Academic Publishers ) p 128
- [ 2 ] Lung C W , March N H 2000 *Mechanical Properties of Metals : Atomistic and Fractal Continuum Approaches* ( Beijing : World Scientific Publishing ) p 112
- [ 3 ] Yan Y , Pennycook S J 2000 *Nature* **403** 266
- [ 4 ] Derlet P M , Meyer R , Lewis L J , Stuhr U , Van Swygenhoven H 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 205501
- [ 5 ] Binder K , Horbach J , Kob W , Paul W , Varnik F 2004 *J. Phys. : Condens. Mater.* **16** S429
- [ 6 ] Wen Y H , Zhu T , Cao L X , Wang C Y 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2520 ( in Chinese ) [ 文玉华、朱 、曹立霞、王崇愚 2003 物理学报 **52** 2520 ]
- [ 7 ] Milstein F , Chantasirawan S 1998 *Phys. Rev. B* **58** 6006
- [ 8 ] Chantasirawan S , Milstein F 1998 *Phys. Rev. B* **58** 5996
- [ 9 ] Qi Y , Kimura Y , Goddard W A 1999 *Phys. Rev. B* **59** 3527
- [ 10 ] Sandvik B P J , Wayman C M 1983 *Metall. Trans. A* **14** 835
- [ 11 ] Kresse G , Joubert D 1999 *Phys. Rev. B* **59** 1758
- [ 12 ] Perdew J P , Burke K , Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [ 13 ] Diao J , Gall K , Dunn M L 2004 *J. Mech. Phys. Solids* **52** 1935
- [ 14 ] Hertzberg R W 1983 *Deformation and Fracture Mechanics of Engineering Materials* ( New York : Wiley ) p 14
- [ 15 ] Liang H , Upmanyu M , Huang H 2005 *Phys. Rev. B* **71** 241403
- [ 16 ] Milstein F 1982 *Mechanics of Solids* ( Oxford : Pergamon ) p 417
- [ 17 ] Lubarda V A , Meyers M A 1999 *Scripta Materialia* **40** 975

# The nonlinear elastic behavior of crystalline solids : An atomistic simulation study \*

Wen Yu-Hua<sup>1 2)†</sup> Zhang Yang<sup>2)</sup> Zhu Zi-Zhong<sup>2)</sup>

1 *State Key Laboratory of Gansu Advanced Non-ferrous Metal Materials , Lanzhou University of Technology , Lanzhou 730050 , China )*

2 *Department of Physics , Institute of Theoretical Physics and Astrophysics , Xiamen University , Xiamen 361005 , China )*

( Received 17 April 2007 ; revised manuscript received 12 July 2007 )

## Abstract

In this paper , we employ molecular static approach with quantum corrected Sutton-Chen many-body potential to study the elastic responses of nickel monocrystal subjected to uniaxial tensile and compressive loading , and consider three different loadings , i. e. , the [ 001 ] , [ 011 ] and [ 111 ] loading . The simulated results show that strong nonlinear effects are found in the elastic behavior of monocrystal under the [ 011 ] loading , while the lateral deformations are essentially isotropic under [ 100 ] and [ 111 ] loadings . The further discussions are focused on the dependence of the Young 's moduli and Poisson 's ratios on the applied strain , and a brief comparison with first-principles calculations is also presented .

**Keywords :** crystal , elastic deformation , molecular static approach

**PACC :** 6220F , 6185 , 7115P

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 10702056 ) and the State Key Laboratory of Gansu Advanced Non-ferrous Metal Materials , Lanzhou University of Technology .

† Corresponding author. E-mail : yhwen@xmu.edu.cn