



石墨烯/铝基复合材料在纳米压痕过程中位错与石墨烯相互作用机制的模拟研究

汉芮岐 宋海洋 安敏荣 李卫卫 马佳丽

Simulation of interaction behavior between dislocation and graphene during nanoindentation of graphene/aluminum matrix nanocomposites

Han Rui-Qi Song Hai-Yang An Min-Rong Li Wei-Wei Ma Jia-Li

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 066201 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20201591

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201591>

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

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

退火温度调控多层折叠石墨烯力学性能的分子动力学模拟

Manipulations on mechanical properties of multilayer folded graphene by annealing temperature: a molecular dynamics simulation study

物理学报. 2020, 69(19): 196102 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200836>

聚酰亚胺/功能化石墨烯复合材料力学性能及玻璃化转变温度的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation on the glass transition temperature and mechanical properties of polyimide/functional graphene composites

物理学报. 2017, 66(22): 227101 <https://doi.org/10.7498/aps.66.227101>

界面结构对Cu/Ni多层膜纳米压痕特性影响的分子动力学模拟

Influence of interface structure on nanoindentation behavior of Cu/Ni multilayer film: Atomic scale simulation

物理学报. 2018, 67(19): 190202 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180958>

纳米微结构表面与石墨烯薄膜的界面黏附特性研究

Interface adhesion property between graphene film and surface of nanometric microstructure

物理学报. 2018, 67(3): 030201 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172153>

石墨烯表面的特征水分子排布及其湿润透明特性的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of characteristic water molecular arrangement on graphene surface and wetting transparency of graphene

物理学报. 2019, 68(8): 086801 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182307>

氧化石墨烯褶皱行为与结构的分子模拟研究

Effect of functional groups on crumpling behavior and structure of graphene oxide

物理学报. 2020, 69(19): 193102 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200651>

石墨烯/铝基复合材料在纳米压痕过程中位错与石墨烯相互作用机制的模拟研究*

汉芮岐 宋海洋[†] 安敏荣[‡] 李卫卫 马佳丽

(西安石油大学材料科学与工程学院, 西安 710065)

(2020年9月25日收到; 2020年11月17日收到修改稿)

石墨烯因其优异的力学性能已成为增强金属基复合材料的理想增强体. 然而, 目前对石墨烯/金属基复合材料在纳米压痕过程中嵌入石墨烯与位错之间的相互作用仍不清晰. 本文采用分子动力学模拟方法, 对 90° , 45° 和 0° 位向的石墨烯/铝基复合材料进行了纳米压痕模拟, 研究了压痕加载和卸载过程中石墨烯/铝基复合材料的位错形核及演化, 以获取不同位向的石墨烯与位错的相互作用机制, 并分析其对塑性区的影响. 研究发现, 石墨烯可以有效阻碍位错运动, 并且石墨烯会沿着位错滑移方向发生弹性变形. 在纳米压痕过程中, 位错与不同位向石墨烯之间的相互作用差异导致塑性区的变化趋势不同. 研究结果表明, 在石墨烯/铝基复合材料中, 位向不同的石墨烯对位错阻碍强度和方式不同, 且石墨烯位向为 45° 的复合材料的硬度高于其他模型. 此外, 石墨烯/铝基复合材料的位错线总长度的演化规律与石墨烯位向紧密相关. 本文研究可为设计和制备高性能石墨烯/金属基复合材料提供一定的理论指导.

关键词: 分子动力学模拟, 力学性质, 纳米压痕, 石墨烯/铝基复合材料

PACS: 62.25.-g, 61.82.Rx, 81.05.ue, 31.15.xv

DOI: 10.7498/aps.70.20201591

1 引言

金属基复合材料以较高的强度重量比、较低的热膨胀系数等优异的性能被广泛地应用于航空航天、汽车工业等领域^[1]. 近年来, 利用碳纳米管、石墨烯等纳米相增强金属基复合材料取得了丰硕的成果, 使得复合材料无论是硬度、强度还是耐磨性等方面都得到了较大提高^[2]. 石墨烯则凭借其高杨氏模量和高强度等优异的力学性能备受青睐^[3-5]. Kim等^[6]通过研究单层或两层石墨烯在铜基(或镍基)复合材料中的增强机制, 证实了石墨烯的承载能力是提高材料强度的关键. 然而, 通过引入石

墨烯提升金属基复合材料的强度往往是以牺牲其塑性为代价的^[7]. 这种强韧化倒置关系制约了石墨烯/金属基复合材料的进一步发展与应用, 究其本质原因在于材料在形变过程中, 界面处易产生应力集中从而形成裂纹, 且在后续形变中不能有效阻碍裂纹扩展^[8]. 大量研究表明^[9,10], 通过调节石墨烯的构型和分布来优化复合材料韧性是一种有效的途径. 因此, 阐明石墨烯在金属基体中的构型、分布对复合材料力学性能的影响规律, 对于设计高强度高塑性的石墨烯/金属基复合材料具有重要的意义.

众所周知, 从实验上直接观测材料变形过程中结构演化的细节与规律的成本高昂, 且会受到现代

* 国家自然科学基金(批准号: 11572259)、陕西省自然科学基金(批准号: 2018JM1013)、西安石油大学材料科学与工程学院省级优势学科项目(批准号: YS37020203)和西安石油大学研究生创新与实践能力培养项目(批准号: YCS18211006)资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: hysong@xspu.edu.cn

[‡] 通信作者. E-mail: amr_lr@126.com

电子和光学显微等技术的限制, 所以人们开始探索新的途径. 得益于计算机技术的飞速发展, 分子动力学 (molecular dynamics, MD) 模拟在新材料的设计和研发中发挥着越来越重要的作用^[11–14]. 通过 MD 模拟方法揭示石墨烯/金属基复合材料中潜在的变形机理和原子微观结构的演化规律, 对于进一步设计高强高韧的复合材料起着关键作用^[15]. Weng 等^[16]采用 MD 模拟方法研究了层厚度对石墨烯/铜基复合材料力学性能的影响, 结果表明石墨烯由于极高的面内强度能有效阻碍位错的滑移, 且石墨烯/铜界面的协同作用可以明显增强复合材料的平均流动应力. Shuang 和 Aifantis^[17]通过 MD 模拟方法发现位错连续传递到石墨烯上会导致石墨烯发生局部变形, 进而提出了滑移、透射和反射三种石墨烯与位错之间的相互作用机制. 当前, 虽然对石墨烯/金属基复合材料力学性能的研究已经取得了初步成果, 然而位错与不同位向石墨烯的相互作用机制仍有待进一步揭示. 本文通过 MD 模拟方法研究了石墨烯/铝基 (Gr/Al) 复合材料的纳米压痕过程, 分析了 90° 、 45° 和 0° 三种不同位向的石墨烯与位错之间的相互作用机制, 揭示了其对 Gr/Al 复合材料塑性区的影响. 本文的研究结果为进一步设计高性能的石墨烯/金属基复合材料提供了一定的理论依据.

2 计算方法与模型

本文采用 MD 模拟方法, 利用 LAMMPS^[18] 软件模拟了 Gr/Al 复合材料在纳米压痕过程中的缺陷微观演化过程, 研究石墨烯嵌入方位对 Gr/Al 复合材料塑性区的影响. 本文构建了 4 个模型, 1 个是不含石墨烯的单晶铝, 初始模型如图 1(a) 所示. 另外 3 个模型分别是位向角 θ (即石墨烯与水平方向夹角) 为 90° 、 45° 和 0° 的模型, 为了描述方便, 分别定义为 Gr/Al- 90° 、Gr/Al- 45° 和 Gr/Al- 0° , 如图 1(b)–(d) 所示. Shuang 和 Aifantis^[17] 发现根据位错与石墨烯之间的相互作用行为, 可以把嵌入石墨烯的位向角划分为 3 个区间, 本文从 3 个区间中分别选择了一个位向角作为代表. 此外, 为了更明确考虑石墨烯与位错之间的相互作用机制, 模型中嵌入的是无缺陷的石墨烯, 本文未考虑含有掺杂原子缺陷的石墨烯对复合材料性能的影响^[19]. 铝基体的晶向为 X - $[\bar{1}10]$, Y - $[\bar{1}\bar{1}2]$ 和 Z - $[111]$, 压头

沿着垂直于 (111) 密排面进行压痕, 该晶向的选择与 Lee 等^[20] 的模型相同. 球形金刚石压头的半径是 3.0 nm, 压头与基体之间的间隙为 0.5 nm. 铝基体和两片对称石墨烯的尺寸分别为 $19.2 \text{ nm} \times 37.2 \text{ nm} \times 13.1 \text{ nm}$ 和 $14.0 \text{ nm} \times 11.9 \text{ nm} \times 2.0 \text{ nm}$, 4 个模型的原子数分别为 572850, 578586, 577947 和 576364. 值得注意的是, Gr/Al 复合材料在构建过程中, 由于石墨烯的嵌入方位不同, 在剔除铝原子的过程中原子数出现微小的差异, 但这种差异对模型总体积变化影响很小, 所以本文未考虑不同模型单位体积的压痕力. 在模拟中, X 和 Y 方向均采用周期性边界条件, Z 方向上采用自由边界条件, 模型底端固定 3 层铝原子. 从图 1(b)–(d) 可以看出, 在 Gr/Al 模型趋衡之后, 石墨烯周围已经有位错出现, 这是由于碳原子和铝原子大小不同, 并且存在界面晶格失配导致的^[17]. 在模拟过程中对压头采用位移控制, 金刚石压头沿 Z 轴以 10 m/s 的恒定速度向下压入 Gr/Al 复合材料内, 压入过程一直持续到最大压痕深度等于压头半径为止; 达到最大压痕深度后, 压头以相同的速度卸载. 在压入和卸载的阶段记录每个模拟时间步长下的压痕力.

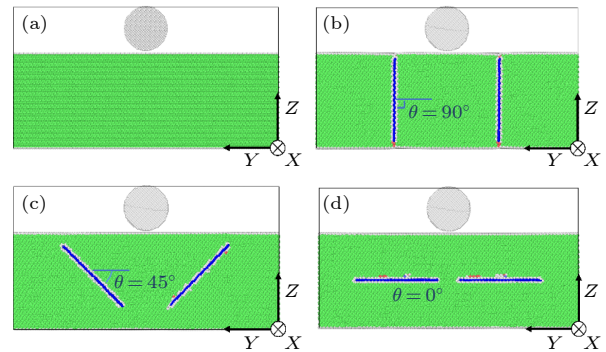


图 1 (a) 纯铝的初始模型; 石墨烯的嵌入方位分别为 (b) 90° , (c) 45° 和 (d) 0° 的 Gr/Al 复合材料的初始模型, 其中蓝色原子为对称的石墨烯片, 绿色原子为铝基体

Fig. 1. (a) Initial model of the pure Al; initial model of the Gr/Al composites with graphene orientations of (b) 90° , (c) 45° , and (d) 0° , where blue atoms represent symmetrical graphene sheets and green atoms are Al matrix.

势函数的正确选择是保证 MD 模拟结果准确性和可靠性的关键. 本文采用组合势, 铝原子之间的相互作用采用 Mishin 等^[21] 提出的嵌入原子势描述, 碳原子之间的相互作用采用 AIREBO 势^[22] 描述. 此外, 用 Lennard-Jones (L-J) 势描述碳原子

与铝原子之间的相互作用, 其中参数取值分别为 $\epsilon = 0.035078$ eV 和 $\sigma = 0.30135$ nm. 该 L-J 势函数已经广泛用于研究石墨烯/金属基复合材料的力学性能和变形机制^[23,24]. 本文采用可视化工具 (OVITO)^[25] 分析压痕过程中微观结构的演化规律, 利用公共近邻分析法 (common neighbor analysis, CNA)^[26] 分析局部原子晶体结构, 采用位错提取法 (dislocation extraction algorithm, DXA)^[27] 识别位错的类型.

3 结果与讨论

3.1 纯铝和石墨烯/铝基复合材料在加载阶段的变形行为

为了研究在加载阶段, 石墨烯嵌入方位对 Gr/Al 复合材料力学行为的影响, 图 2 给出了 Gr/Al-90°, Gr/Al-45°, Gr/Al-0° 复合材料和纯铝 4 个模型的压痕力与压痕深度之间的关系曲线. 在模拟中, 压痕力等于压痕过程中基体原子对压头原子反作用力之和^[28]. 从图 2 可以观察到, 不同石墨烯位向的 Gr/Al 复合材料和纯铝的压痕力整体上均随压痕深度增加而增大, 其中 $a-f$ 这 6 个特征点将加载阶段分成 I—V 五部分. 此外, 从图 2 可知, 压痕力在变形后期出现了明显的波动现象, 这主要是由于压头在加载过程中积累的能量随着位错的滑移不断地释放. 应该注意的是, 由于不同模型在压痕载荷下的变形行为有差异, 所以本文提供的 6 个点为近似特征点. 在 a 点 (曲线上压痕力等于 0 的点) 之前, 所有模型的压痕力从负值缓慢增加到 0,

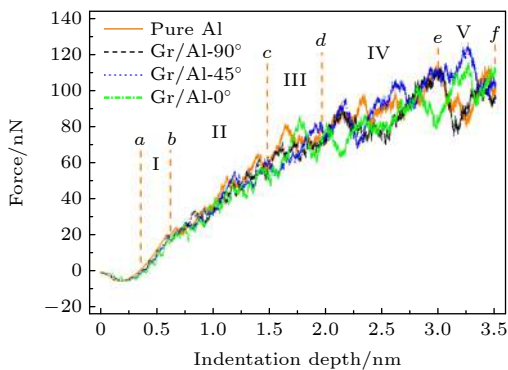


图 2 加载过程中, 纯铝和 Gr/Al 复合材料的压痕力与压痕深度的关系

Fig. 2. Relationship between indentation force and indentation depth of the pure Al and the Gr/Al composites during the loading stage.

这是因为压头原子与基体原子之间存在黏附力. 随着压痕深度增加, 进入碳原子与铝原子短程力的作用范围, 该研究与 Jiao 等^[29] 的模拟结果一致.

为了研究 Gr/Al 复合材料中位错与石墨烯的相互作用机理, 图 3 运用 DXA 法描述了纯铝和 Gr/Al 复合材料在 $b-f$ 这 5 个特征点的位错线分布图. 图 2 所示的 I 区域为弹性阶段, 在这个阶段纯铝和 Gr/Al 复合材料内部均没有新的位错产生. 纯铝在 b 点出现压痕力下降的现象, 观察图 3 中 b 点对应的位错线分布图可以看出, 肖克利不全位错在接触表面下方的压痕轴两侧开始形核, 位错的形核和滑移释放了局部集中的应力从而导致了压痕力的下降, 该研究与 Lee 等^[20] 的研究结果是一致的. 从图 3 可以看出, 所有 Gr/Al 复合材料的成核位点都位于压痕轴两侧. 研究表明, Gr/Al-90°, Gr/Al-45° 和 Gr/Al-0° 复合材料分别在压痕深度为 0.60, 0.60 和 0.64 nm 时位错开始形核. 对于 Gr/Al-0° 复合材料, 垂直于加载方向的石墨烯降低了压痕方向刚度, 导致位错成核在更大压痕深度处发生^[30]. 在区域 II, 对于纯铝模型, 基体内肖克利不全位错在压头下方的 $\{111\}$ 滑移面内滑移, 形成了图 3 中 c 点红色箭头所示的胚胎棱柱形位错环, 这与图 2 中压痕力下降的现象是相对应的. 对于 Gr/Al 复合材料, 随着压痕深度的增加, 肖克利不全位错向着石墨烯方向滑移, 压头下方的位错网络迅速扩展. 对于 Gr/Al-45° 复合材料, 在压痕深度为 1.27 nm 处, 胚胎棱柱形位错环脱离压头下方形成棱柱形位错环, 随着压痕深度增加, 石墨烯阻碍了位错环的运动. 然而, 对于 Gr/Al-90° 和 Gr/Al-0° 复合材料, 位错环没有脱离压头, 压头下方的位错网络之间通过肖克利不全位错与石墨烯连接. 在区域 III, 对于纯铝模型, 在压头下方的位错网络形成多个胚胎棱柱形位错环, 这些胚胎棱柱形位错环竞争生长, 导致曲线高度振荡. 如图 3 中 d 点红色箭头处所示, 当压痕深度增加到 1.96 nm 时, 胚胎棱柱形位错环从压头下方的位错网络中脱离出来形成棱柱形位错环向基体底部滑移. 从 Gr/Al 复合材料的位错线分布也可以观察到, 多个胚胎棱柱形位错环竞争生长, 如图 3 中 d 点所示. 棱柱形位错环滑移分为两种, 第一种是沿基体表面滑移, 这是因为在 X 和 Y 方向上存在周期性; 第二种是在基体内部向下运动, 棱柱形位错环运动到底端附近时, 由于受到固定层的影响在底端附近滑

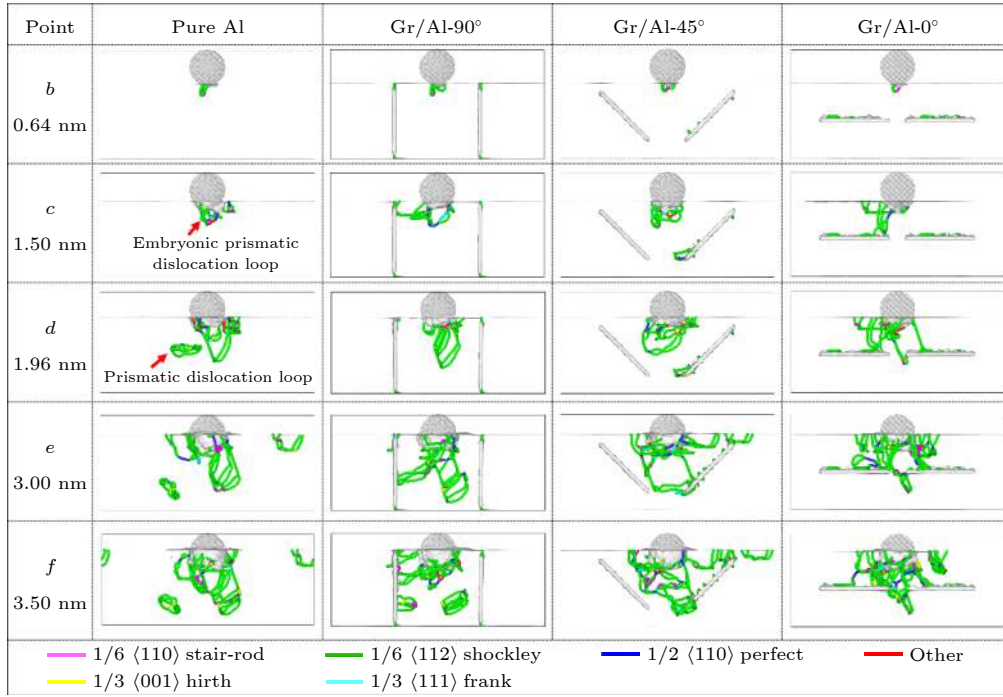


图 3 加载过程中, 纯铝和 Gr/Al 复合材料在特征点 *b*—*f* 的位错线分布图

Fig. 3. Dislocation line distribution diagram of the pure Al and the Gr/Al composites at the characteristic points *b*—*f* during the loading stage.

移. 在区域 IV, 对于纯铝, 压头下方的位错网络中的胚胎棱柱形位错环继续生长, 棱柱形位错环沿着基体表面滑移或基体内部向下滑移. 然而, 在 Gr/Al 复合材料中, 石墨烯可以有效阻挡位错环在基体内部的滑移, 其中在 Gr/Al-45°和 Gr/Al-0°复合材料中观察到位错环可以在两片对称石墨烯之间的空隙处向下扩展, 如图 3 中 *e* 点 Gr/Al 中位错线分布图所示. 当达到最大压痕深度 *f* 点时, Gr/Al 复合材料中位错与石墨烯的相互作用影响了压头下方的位错线分布, 特别是 Gr/Al-0°复合材料, 在石墨烯与压头下方之间形成位错网络. 基于以上研究可以发现, 石墨烯嵌入方位在纳米压痕过程中对基体内塑性变形过程会产生显著影响.

为了研究位错环与不同位向石墨烯之间的相互作用, 图 4(a) 给出了由 {111} 型滑移面组成的棱柱形位错环的详细结构图. 从图 4(a) 可以看出, 棱柱形位错环均由堆垛层错与伯氏矢量不同的肖克利不全位错组成. 研究该结构在材料的塑性变形过程中具有重要意义, 因为随着棱柱形位错环在基体内部或表面滑移, 可以扩大基体内部的塑性区. 与纯铝相比, Gr/Al 复合材料中石墨烯的嵌入影响了基体内部位错环的生长和滑移. 图 4(b)—(d) 所示

为利用 DXA 和位移矢量法描述的 Gr/Al-90°, Gr/Al-45°和 Gr/Al-0°这 3 个模型在压痕深度分别为 1.75, 1.59 和 1.59 nm (即图 2 中位于 III 区域) 时, 基体中位错线瞬态图和石墨烯面内原子起伏图, 其中位移矢量法利用相对位移大小进行着色. 对于 Gr/Al-90°复合材料, 从图 4(b) 可以看出石墨烯阻碍了沿表面滑移的棱柱形位错环. 在 Gr/Al-45°复合材料中, 棱柱形位错环向下滑移的过程中遇到石墨烯, 棱柱形位错环一端肖克利不全位错湮灭, 另一端固定在石墨烯表面, 如图 4(c) 所示. 对于 Gr/Al-0°复合材料, 胚胎棱柱形位错环扩展到石墨烯表面, 在压头下方与石墨烯之间形成肖克利不全位错组成的连接, 如图 4(d) 所示. 以上研究表明, 石墨烯的嵌入方位对位错的阻碍方式会有明显的影响. 此外, 从图 4(b)—(d) 石墨烯面内碳原子位移标色可以观察到位错与石墨烯之间相互作用的位置. 位错环滑移到 Gr/Al 界面处, 由于界面处没有连续的滑移面, 石墨烯面内的碳原子沿着位错环的方向发生弹性变形. 不难发现, 石墨烯在位错传播过程中起到了屏障的作用. 这是因为石墨烯面内弹性模量高达 1 TPa^[31], 位错环与石墨烯发生相互作用, 石墨烯面内碳原子位移在弹性范围

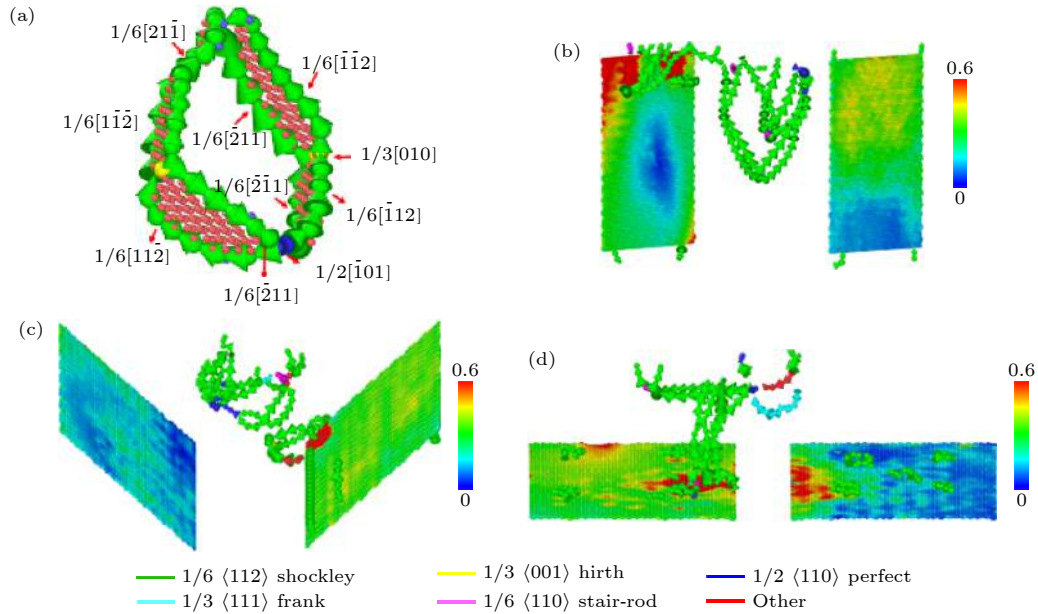


图 4 (a) 棱柱形位错环的原子结构图; (b)—(d) Gr/Al 复合材料在石墨烯嵌入位向分别为 (b) 90°, (c) 45° 和 (d) 0°, 压痕深度分别为 (b) 1.75 nm, (c) 1.59 nm 和 (d) 1.59 nm 时的位错线分布和石墨烯的表面起伏情况

Fig. 4. (a) Atomic snapshot of prismatic dislocation loop; (b)–(d) dislocation line distribution of Gr/Al composites and in-plane height profile of graphene at the indentation depth of (b) 1.75 nm, (c) 1.59 nm, and (d) 1.59 nm, with graphene orientations of (b) 90°, (c) 45°, and (d) 0°.

内, 不会导致碳—碳键断裂. 又由于石墨烯弯曲刚度低, 所以会沿位错环的方向发生弹性变形, 这与 Chang 等^[30] 在石墨烯/镍基复合材料中发现的结果是一致的. 以上研究表明, Gr/Al 复合材料在纳米压痕过程中, 随着压痕深度增加, 位错环在滑移过程中被石墨烯阻挡, 改变了塑性区的扩展趋势.

3.2 纯铝和石墨烯/铝基复合材料在卸载阶段的变形行为

为了研究在卸载阶段, 石墨烯嵌入方位对 Gr/Al 复合材料力学行为的影响, 图 5(a) 给出了 Gr/Al 复合材料和纯铝 4 个模型的压痕力与压痕深度之间的关系曲线. 从图 5(a) 可以看出, 压痕力从正值逐渐减小, 这是由于压头与基体之间的距离增大, 排斥力减弱. 随着压头继续抬升至 3.0 nm 左右, 施加在压头上的力变为负值, 这是由于压头原子与基体原子之间存在黏附力. 随着压头继续抬升至 1.2 nm 左右, 压痕力变为 0, 压头与压痕区域表面原子的距离超过了远程力的作用范围. 为了研究不同位向石墨烯对卸载阶段位错演化的影响, 图 5(b) 给出了纯铝和 Gr/Al 复合材料的总位错线长度演化曲线. 从图 5(b) 可以看出, 随着压头回升, 所有模型的位错线长度减小, 在压痕深度

2.75—2.50 nm 之间位错线长度骤然下跌, 之后达到一个平稳值. Gr/Al-90°, Gr/Al-0°, Gr/Al-45° 复合材料和纯铝的位错线总长度的平稳值分别为 45.36, 160.69, 219.73 和 136.53 nm. 4 个模型在卸载过程中位错线总长度值分别下跌了 84.14%, 55.55%, 37.95% 和 55.14%. 基体内总位错线长度演化规律与压头下方形成的位错网络紧密相关.

为了进一步分析纯铝和 Gr/Al 复合材料在卸载过程中铝基体内的位错演化行为, 图 6 利用 DXA 法给出了纯铝和 Gr/Al 复合材料在压痕深度为 3.11, 2.76 和 2.09 nm 时的位错线分布图. 对于纯铝, 在压头逐渐抬升的过程中, 塑性区内的位错逐渐向反方向运动, 棱柱形位错环与压头下方的位错网络重新组合, 基体内部的位错缺陷逐渐湮灭. 在 Gr/Al-90° 复合材料中, 位错环沿着石墨烯表面向上滑移, 与压头下方的位错网络重新组合, 在连接处形成压杆位错, 但是随着压头继续回升, 肖克利不全位错不断合成和分解, 从可视化结果看出基体内大部分位错湮灭. 从图 6(b) 和图 6(c) 可以明显看出, 在石墨烯之间的间隙处穿过的位错, 随着压头回升, 位错与石墨烯的两端产生较强的相互作用, 阻碍了位错的运动. 因此, 在 Gr/Al-45° 和 Gr/Al-0° 的铝晶体中留下了较多的位错.

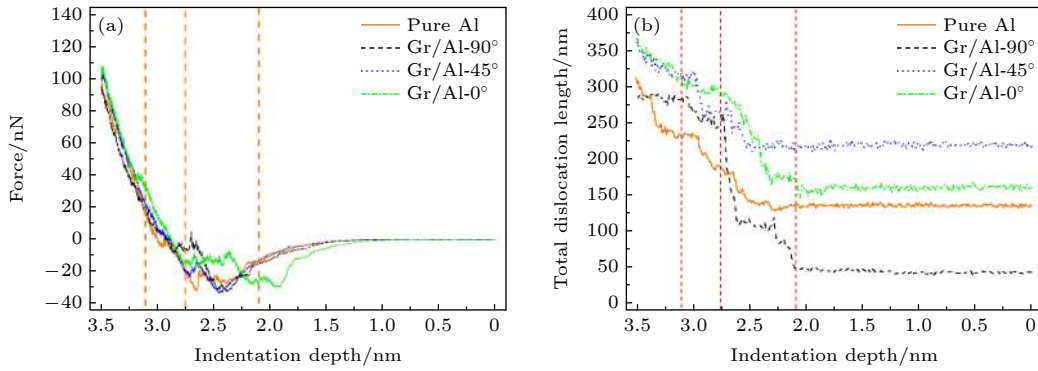


图 5 (a) 卸载过程中, 纯铝和 Gr/Al 复合材料的压痕力与压痕深度的关系; (b) 卸载过程中, 纯铝和 Gr/Al 复合材料的总位错线长度的演化

Fig. 5. (a) Relationship between indentation force and indentation depth of the pure Al and the Gr/Al composites during the unloading stage; (b) evolution of total dislocation length of the pure Al and the Gr/Al composites during the unloading stage.

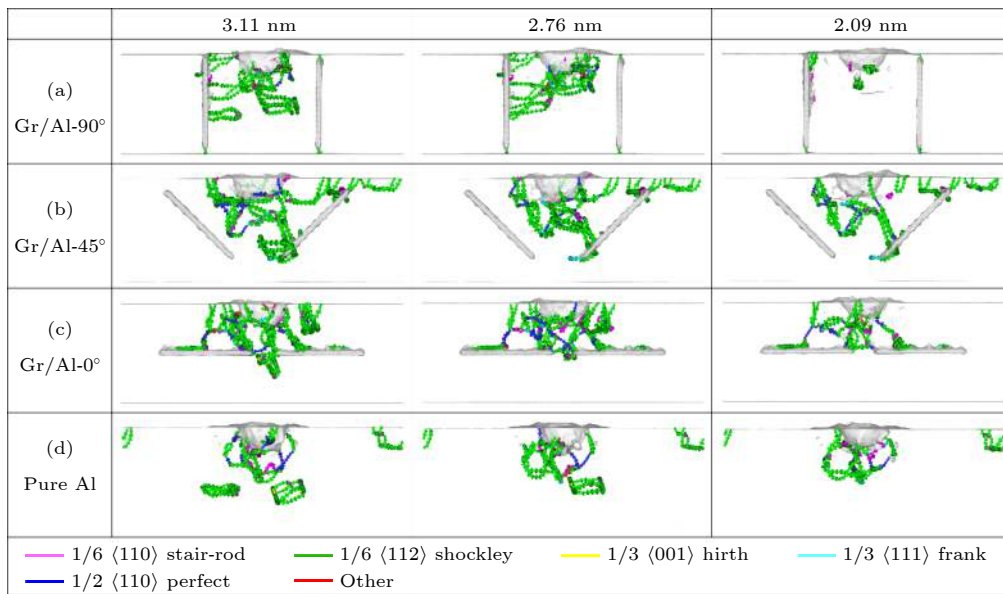


图 6 卸载过程中, 纯铝和 Gr/Al 复合材料在不同压痕深度的位错线分布图

Fig. 6. Dislocation line distribution diagram of the pure Al and the Gr/Al composites at various depths during the unloading stage.

3.3 石墨烯嵌入方位对 Gr/Al 复合材料塑性区的影响

为了分析石墨烯嵌入方位对 Gr/Al 复合材料塑性区的影响, 图 7 给出了加载阶段压痕深度为 3.50 nm 和卸载阶段压痕深度为 0.00 nm 时, 利用 CNA 法描述的原子结构图, 其中蓝色虚线是依据 Gao 等 [32] 提出的塑性区定义给出的大致轮廓. 为了方便观测, 其中具有面心立方结构的原子均被去除. Gao 等 [32] 指出塑性区中的位错可以分为两类: 压头下方附近的位错和远离压头下方附近的位错, 并且给出纯铝内半球形塑性区半径的定义为, 压头下方附近的位错网络到压头的最大距离. 从图 7 可

以看出, 对于 Gr/Al-90°和 Gr/Al-0°复合材料, 嵌入的石墨烯分别限制了宽度和深度方向的位错扩展, 改变了半球形塑性区内位错的分布. 而对于 Gr/Al-45°复合材料来说, 由于石墨烯对位错滑移的阻碍作用, 石墨烯与塑性区相切, 减小了半球形塑性区的体积. 以上研究还表明, 石墨烯在铝基体内的嵌入方位不同, 在塑性变形过程中产生的塑性应变梯度就不同. 也就是说, 不同位向的石墨烯对位错阻碍的强度不同, 对基体内塑性区的大小影响不同, 这与 Shuang 和 Aifantis [17] 的研究结果一致. 完全卸载后, 与 f (即压痕深度为 3.5 nm) 点的塑性区相比, 不同模型的塑性区的收缩大小不同. 从可视化结果计算 Gr/Al-90°, Gr/Al-0°和 Gr/Al-45°

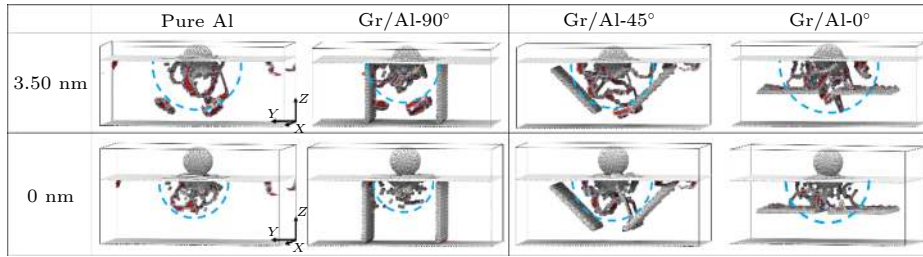


图 7 纯铝和 Gr/Al 复合材料在压痕深度 3.50 和 0.00 nm 时的微结构, 蓝色虚线表示塑性区

Fig. 7. Microstructures of the pure Al and the Gr/Al composites at indentation depth 3.50 and 0.00 nm, where the blue dotted line indicates the plastic zone.

复合材料和纯铝卸载前后塑性区的收缩大小分别为 75.68%, 53.89%, 31.92% 和 56.03%。从 3.3 节的研究发现, Gr/Al-90°复合材料的塑性区明显收缩, 值得注意的是, 该模型位错线长度值达到平稳后最低. 这也再次证明了石墨烯与位错的相互作用, 与塑性区变形趋势紧密相关.

3.4 石墨烯嵌入方位对 Gr/Al 复合材料硬度的影响

为了定量评估石墨烯嵌入方位对 Gr/Al 复合材料力学性能的影响, 图 8 给出了 Gr/Al 复合材料的硬度与石墨烯嵌入方位的关系曲线. 在这儿, 复合材料的硬度用压痕深度在 1.96 (即图 2 中的 *d* 点)—3.50 nm (即图 2 中的 *f* 点) 之间接触压力的平均值进行定量描述, 其中接触压力由压痕力除以投影到平面的接触面积计算得到 [33]. 选取该范围内的接触压力, 是因为位错环的演变过程是衡量压头下方的塑性变形强弱程度的重要依据和远离压头区域的内部缺陷演化的内在表现. 从图 8 可知, Gr/Al-45°复合材料的硬度 3.75 GPa 较纯铝的硬度 3.59 GPa 提高 4.46%, Gr/Al-90°和 Gr/Al-0°复合材料的硬度分别为 3.44 和 3.41 GPa, 与纯铝的硬度相比分别减小了 4.18% 和 5.01%. 泰勒模型 [34,35] 指出了塑性区内位错密度与硬度之间存在一定的关联, 位错密度越大, 硬度越大. 为了揭示图 8 所示的硬度随石墨烯嵌入方位的变化行为, 计算了加载阶段位错线总长度随压痕深度的变化, 发现 Gr/Al-45°和 Gr/Al-0°复合材料的总位错线长度值大于 Gr/Al-90°和纯铝的总位错线长度. 因此, Gr/Al-90°复合材料的硬度较低. 在 Gr/Al-45°复合材料中, 45°的石墨烯片与位错相互作用, 减小了塑性区的体积, 并且增大了塑性区中存储的位错数量, 进而提高了复合材料的硬度. 与 Gr/Al-45°复

合材料不同, 在 Gr/Al-0°复合材料中, 压头与石墨烯之间肖克利不全位错构成的位错网络增大了塑性区内的位错数量, 但是大量位错与石墨烯相互作用, 导致石墨烯面内产生大范围的弹性变形, 削弱了压头附近的接触压力, 从而导致了硬度的降低, 这与 Vardanyan 和 Urbassek [36] 的研究结果一致.

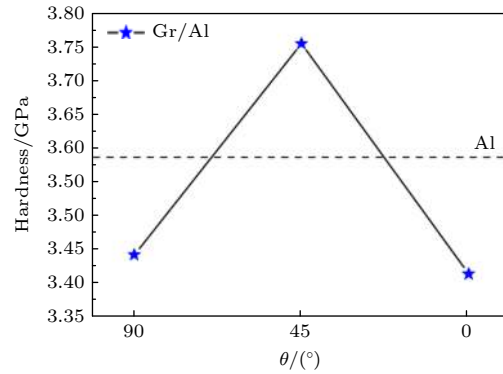


图 8 Gr/Al 复合材料的硬度随石墨烯嵌入方位的变化
Fig. 8. Relationship between the hardness of Gr/Al composites and different orientations of graphene.

4 结 论

本文采用 MD 方法研究了 Gr/Al-90°, Gr/Al-45°, Gr/Al-0°和纯铝等 4 个模型在纳米压痕过程中的微观演化规律, 系统分析了不同位向的石墨烯对 Gr/Al 复合材料的塑性区的影响. 研究发现, 在加载和卸载过程中, 石墨烯与位错之间的相互作用改变了塑性区的扩展趋势. 基体内嵌入的石墨烯均能阻碍位错滑移, 但压头下方产生的位错演化和基体内产生的塑性应变梯度受石墨烯嵌入方位的影响, 对位错阻碍的方式和强度不同. 45°位向的石墨烯与位错相互作用导致塑性区与石墨烯相切, 减小了塑性区的体积, 并且增大了塑性区内的位错数量, 提高了 Gr/Al 复合材料的硬度. 0°位向的石墨

烯与位错之间的相互作用导致石墨烯面内产生大范围的弹性变形,降低了 Gr/Al 复合材料的硬度.然而, 90°位向的石墨烯与位错相互作用方式与其他两个模型不同,完全卸载后, Gr/Al-90°基体内的位错数量最少,并且塑性区收缩最为显著.本文所得结果可为设计高性能的石墨烯/金属基复合材料提供先期的科学预测和有益借鉴.

参考文献

- [1] Miracle D B 2005 *Compos. Sci. Technol.* **65** 2526
- [2] Tjong S C 2013 *Mater. Sci. Eng., R* **74** 281
- [3] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [4] 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]
- [5] Zhong T, Li J, Zhang K 2019 *J. Appl. Phys.* **125** 175110
- [6] Kim Y, Lee J, Yeom M S, Shin J W, Kim H, Cui Y, Kysar J W, Hone J, Jung Y, Jeon S, Han S M 2013 *Nat. Commun.* **4** 2114
- [7] Bartolucci S F, Paras J, Rafiee M A, Rafiee J, Lee S, Kapoor D, Koratkar N 2011 *Mater. Sci. Eng., A* **528** 7933
- [8] Ovid'ko I A, Sheinerman A G 2014 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **47** 495302
- [9] Li Z, Guo Q, Li Z, Fan G, Xiong D B, Su Y, Zhang J, Zhang D 2015 *Nano Lett.* **15** 8077
- [10] Zhao L, Guo Q, Li Z, Xiong D B, Osovski S, Su Y, Zhang D 2019 *Int. J. Plast.* **116** 265
- [11] Ma T, Xian H X 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 130202 (in Chinese) [马通, 谢红献 2020 物理学报 **69** 130202]
- [12] Lyu G J, Qiao J C, Yao Y, Pelletier J M, Rodney D, Morthomas J, Fusco C 2020 *Scr. Mater.* **174** 39
- [13] Zhou X, Bu W, Song S, Sansoz F, Huang X 2019 *Mater. Des.* **182** 108093
- [14] Du Y, Zhou Q, Jia Q, Shi Y, Wang H, Wang J 2020 *Mater. Res. Lett.* **8** 357
- [15] Charleston J, Agrawal A, Mirzaeifar R 2020 *Comput. Mater. Sci.* **178** 109621
- [16] Weng S, Ning H, Fu T, Hu N, Zhao Y, Huang C, Peng X 2018 *Sci. Rep.* **8** 3089
- [17] Shuang F, Aifantis K E 2020 *Scr. Mater.* **181** 70
- [18] Plimpton S 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [19] Zha X H, Zhang R Q, Lin Z 2014 *J. Chem. Phys.* **141** 064705
- [20] Lee Y, Park J Y, Kim S Y, Jun S, Im S 2005 *Mech. Mater.* **37** 1035
- [21] Mishin Y, Farkas D, Mehl M J, Papaconstantopoulos D A 1999 *Phys. Rev. B* **59** 3393
- [22] Stuart S J, Tutein A B, Harrison J A 2000 *J. Chem. Phys.* **112** 6472
- [23] Silvestre N, Faria B, Canongia Lopes J N 2014 *Compos. Sci. Technol.* **90** 16
- [24] Zhou X, Liu X, Lei J, Yang Q 2020 *Comput. Mater. Sci.* **172** 109342
- [25] Stukowski A 2010 *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 015012
- [26] Faken D, Jónsson H 1994 *Comput. Mater. Sci.* **2** 279
- [27] Stukowski A, Bulatov V V, Arsenlis A 2012 *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **20** 085007
- [28] Remington T P, Ruestes C J, Bringa E M, Remington B A, Lu C H, Kad B, Meyers M A 2014 *Acta Mater.* **78** 378
- [29] Jiao S, Tu W, Zhang P, Zhang W, Qin L, Sun Z, Chen J 2018 *Comput. Mater. Sci.* **143** 384
- [30] Chang S W, Nair A K, Buehler M J 2013 *Philos. Mag. Lett.* **93** 196
- [31] Mortazavi B, Rémond Y, Ahzi S, Toniazzo V 2012 *Comput. Mater. Sci.* **53** 298
- [32] Gao Y, Ruestes C J, Tramontina D R, Urbassek H M 2015 *J. Mech. Phys. Solids* **75** 58
- [33] Li R, Liu T, Chen X, Chen S C, Fu Y H, Liu L 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 190202 (in Chinese) [李锐, 刘腾, 陈翔, 陈思聪, 符义红, 刘琳 2018 物理学报 **67** 190202]
- [34] Taylor G I 1934 *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **145** 388
- [35] Bagheripoor M, Klassen R 2020 *Mech. Mater.* **143** 103311
- [36] Vardanyan V H, Urbassek H M 2019 *Comput. Mater. Sci.* **170** 109158

Simulation of interaction behavior between dislocation and graphene during nanoindentation of graphene/aluminum matrix nanocomposites^{*}

Han Rui-Qi Song Hai-Yang[†] An Min-Rong[‡] Li Wei-Wei Ma Jia-Li

(College of Materials Science and Engineering, Xi'an Shiyou University, Xi'an 710065, China)

(Received 25 September 2020; revised manuscript received 17 November 2020)

Abstract

Graphene has been thought to be an ideal reinforcement material for metal matrix composite due to its superior mechanical properties and unique two-dimensional geometry. However, the deformation mechanism of graphene/aluminum matrix composite is still unclear. In this paper, molecular dynamics simulation is used to elucidate the evolution details of the dislocation microstructure and the underlying interaction behavior between dislocation and graphene during nanoindentation of the graphene/aluminum matrix composite with various graphene orientations. To this end, four different cases, i.e. the pure aluminum and the graphene/aluminum matrix composite with the graphene orientation of 90°, 45° and 0° are examined, respectively. Based on the force-indentation depth curve, the interaction behavior between dislocation and graphene and its effect on the plastic zone are analyzed. The results indicate that the graphene can act as an effective dislocation motion barrier, and the elastic deformation of graphene can occur locally along the direction of dislocation slip. Using the visualization technique of dislocation extraction algorithm, the nucleation and propagation of dislocation are investigated. The results show that the differences in interaction behavior between dislocation and graphene with various orientations affect the spreading trend of the plastic zone and the blocking strength of graphene to dislocation. For the composite with the graphene orientations of 45° and 0°, the interaction between graphene and dislocation causes the number of dislocations to increase. Additionally, the plastic zone of the composite with the graphene orientation of 45° is tangent to two symmetrical graphene sheets. For the composite with the graphene orientation of 90°, the interaction between graphene and dislocation shortens the total length of the dislocation line, and the volume shrinkage of plastic zone is most significant after indenter retraction. Here, the hardness is also calculated to quantitatively evaluate the influence of graphene orientation on the mechanical properties of graphene/aluminum matrix composite. The hardness of the composite with the graphene orientation of 45° is highest, which is due to the decrease of the volume of the plastic zone and the increase of dislocation number. The decrease of the hardness of the composite with the graphene orientation of 90° is attributed to the reduction of dislocation number in the plastic zone. However, for the composite with the graphene orientation of 0°, the interaction between graphene and dislocation results in the softening effect, because of a wide range of elastic deformation in the graphene plane. The study can provide a certain theoretical guidance for designing and preparing the high-performance graphene/metal matrix composites.

Keywords: molecular dynamics simulation, mechanical property, nanoindentation, graphene/aluminum matrix composite

PACS: 62.25.-g, 61.82.Rx, 81.05.ue, 31.15.xv

DOI: 10.7498/aps.70.20201591

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11572259), the Natural Science Foundation of Shaanxi Province, China (Grant No. 2018JM1013), the Provincial Superiority Discipline of Materials Science and Engineering of Xi'an Shiyou University, China (Grant No. YS37020203), and the Program for Graduate Innovation Fund of Xi'an Shiyou University, China (Grant No. YCS18211006).

[†] Corresponding author. E-mail: hysong@xsyu.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: amr_lr@126.com