

纳米多晶铜的超塑性变形机理的分子动力学探讨

闻鹏 陶钢 任保祥 裴政

Superplastic deformation mechanism of nanocrystalline copper: a molecular dynamics study

Wen Peng Tao Gang Ren Bao-Xiang Pei Zheng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 126201 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.126201

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.126201>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I12>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

聚酰亚胺/钽铌酸钾纳米颗粒复合材料结构与机械性能分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation study on the structure and mechanical properties of polyimide/ $\text{KTa}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$ nanoparticle composites

物理学报.2015, 64(12): 126202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.126202>

纳米多晶铜的超塑性变形机理的分子动力学探讨

Superplastic deformation mechanism of nanocrystalline copper: a molecular dynamics study

物理学报.2015, 64(12): 126201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.126201>

SiC 纳米纤维/C/SiC 复合材料拉伸行为的分子动力学研究

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

物理学报.2015, 64(11): 117101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.117101>

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>

纳米多晶铜的超塑性变形机理的分子动力学探讨*

闻鹏¹⁾ 陶钢^{1)†} 任保祥¹⁾ 裴政²⁾

1)(南京理工大学能源与动力工程学院, 南京 210094)

2)(中国兵器工业集团第52研究所烟台分所, 烟台 264003)

(2014年12月10日收到; 2015年1月22日收到修改稿)

在聚能装药爆炸压缩形成射流的过程中, 伴随着金属药型罩的晶粒细化, 从原始晶粒30—80 μm 细化到亚微米甚至纳米量级, 从微观层面研究其细化机理和动态超塑性变形机理具有重要的科学意义. 采用分子动力学方法模拟了不同晶粒尺寸下纳米多晶铜的单轴拉伸变形行为, 得到了不同晶粒尺寸下的应力-应变曲线, 同时计算了各应力-应变曲线所对应的平均流变应力. 研究发现平均流变应力最大值出现在晶粒尺寸为14.85 nm时. 通过原子构型显示, 给出了典型的位错运动过程和晶界运动过程, 并分析了在不同晶粒尺寸下纳米多晶铜的塑性变形机理. 研究表明: 当晶粒尺寸大于14.85 nm时, 纳米多晶铜的变形机理以位错运动为主; 当晶粒尺寸小于14.85 nm时, 变形机理以晶界运动为主, 变形机理的改变是纳米多晶铜出现软化现象即反常 Hall-Petch 关系的根本原因. 通过计算结果分析, 建立了晶粒合并和晶界转动相结合的理想变形机理模型, 为研究射流大变形现象提供微观变形机理参考.

关键词: 分子动力学, 动态超塑性变形机理, 单轴拉伸, 反常 Hall-Petch 关系

PACS: 62.20.fq, 71.15.Pd

DOI: 10.7498/aps.64.126201

1 引言

自 Munron 发明了带药型罩的聚能装药以来, 聚能装药被广泛地应用于军事和工业生产当中. 在聚能装药爆炸压缩形成射流的过程中, 伴随着金属药型罩的晶粒细化, 晶粒尺寸从30—80 μm 细化到亚微米甚至纳米量级, 关于其细化机理和动态超塑性变形机理已有许多论述^[1-4], 但从分子动力学方面探讨很少, 特别是纳米状态的动态大变形机理. 因此, 探讨该问题具有很强的科学意义.

1990年, Chokshi 和 Meyers^[5] 提出了聚能射流动态超塑性变形的概念, 人们意识到金属在高应变率条件下的超塑性特性应该是影响射流性能的主要原因, 自此动态超塑性成为了射流研究的主要方向. 他们还提出动态再结晶是一种将高应变率与流动现象结合在一起的机理, 这是超塑性的本质, 典型的例子就是射流的形成. Li^[6] 提出“界面”

流动层是材料动态超塑性变形的塑性源, 在剪切或挤压的情况下“界面”层会产生压缩或拉伸应变. Murr^[7] 给出了射流拉伸过程中晶粒细化演变模型, 并发现在高应变率塑性变形时约2/3的应变来自晶粒的变形. Meyers 等^[8] 利用厚壁圆筒压垮试验对高应变率下金属微观组织的动态演化过程进行了研究, 结果发现在绝热剪切带中, 动态超塑性变形使铜晶粒的尺寸从50 μm 降到20—100 nm 左右. Meyers 等^[9] 在其综述性文章中总结了在纳米量级下多晶金属的主要变形机理模型, 其中包括位错运动、晶界滑移和晶粒合并等.

作为试验的强有力补充和对理论模型的验证, 分子动力学方法是直观研究纳米量级多晶金属材料的有效工具. 随着计算机性能的提升和描述原子间相互作用的嵌入原子势 (embedded-atom method, EAM)^[10] 的不断改进, 可以更加准确地模拟数百万甚至千万量级原子体系的运动. Schiotz 和 Karsten^[11] 对晶粒尺寸从5 nm 到50 nm 的多晶

* 江苏省普通高校研究生科研创新计划 (批准号: KYLZ_0325) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: taogang@mail.njust.edu.cn

铜进行拉伸模拟,研究了晶粒尺寸对多晶铜力学性能的影响,发现最大流变应力出现在晶粒尺寸为10—15 nm之间. Garritt等^[12]通过对微观旋转量和格林应变张量等的计算,定量分析了纳米孪晶铜(nanotwinned copper)在变形过程中的原子数据信息,发现在变形过程中,当晶粒尺寸减小时晶界运动变得十分重要. Zhang等^[13]研究了含有裂纹的纳米孪晶铜在单轴拉伸下的塑性变形行为,发现裂纹既是位错源又是位错接收处. 国内学者也对多晶金属的力学性能进行了相关模拟研究: 袁林等^[14]研究了不同晶粒尺寸下多晶金属银的拉伸变形行为,分析了晶粒尺寸对多晶银弹性模量、屈服强度和塑性变形机理的影响; 何安民等^[15]研究了单晶铜薄膜在双向等轴拉伸应变下的塑性变形行为,发现当应变超过一定值时,单晶铜薄膜通过位错、层错和孪晶进行塑性变形; 马文和陆彦文^[16]研究了多晶铜在冲击波压缩作用下的塑性变形行为. 可以看到,这些研究多数关注晶粒尺寸、应变率和温度等对多晶金属材料力学性能的影响,并未对出现这种现象的内在变形机理做深入探讨.

本文通过分子动力学方法研究了晶粒尺寸为7.17, 9.11, 12.55, 14.85, 18.38和22.48 nm的多晶铜的拉伸力学行为,绘制了应力-应变曲线. 通过分析得到了平均流变应力转折的临界晶粒尺寸. 结合原子构型分析,深入地研究了多晶铜在纳米状态下的动态超塑性变形机理,同时建立了主要的变形机理模型.

2 计算方法

2.1 纳米多晶铜模型的建立

如图1所示,本文模拟的对象为金属铜射流,在射流形成的过程中金属铜的晶粒尺寸细化到纳米量级. 在利用分子动力学模拟研究纳米多晶金属的力学性质时,通常采用单晶颗粒压缩法(cluster

compaction)^[17]、液体快速冷凝法(quenching from the melt)^[18]和Voronoi几何方法(Voronoi geometrical construction)^[19]来生成纳米多晶模型的初始构型. Voronoi几何方法是现阶段分子动力学模拟纳米多晶金属最常用的方法,本文采用此种方法得到了初始纳米多晶铜模型. 根据已有研究可知,在晶粒尺寸降为10 nm量级时会出现流变应力的转折,作为比较,选取10 nm附近两侧的晶粒尺寸建立多晶铜. 建立的多晶铜模型的晶粒尺寸分别为7.17, 9.11, 12.55, 14.85, 18.38和22.48 nm. 在模型建立后,首先利用共轭梯度法对模型进行能量最小化处理,再利用Nose-Hoover热浴法^[20]控制体系在室温293 K下弛豫100 ps达到平衡态,同时控制体系各方向上压力为0. 图2给出了建立好的多晶

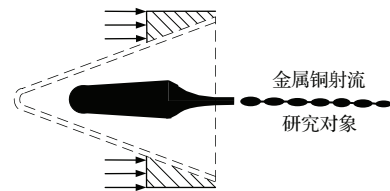


图1 模拟研究对象(金属铜射流)

Fig. 1. Research object (jet of metal copper).

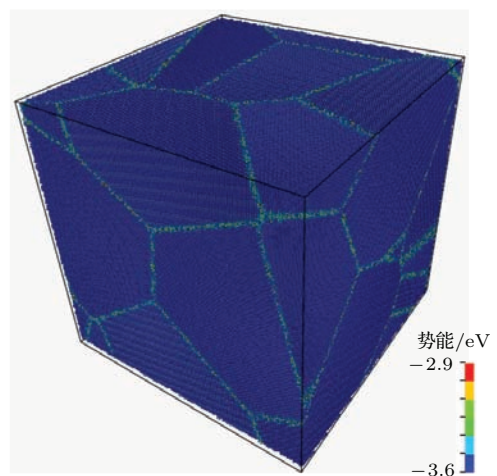


图2 纳米多晶铜模型

Fig. 2. Model of nanocrystalline copper.

表1 平衡态时初始多晶铜参数

Table 1. Parameters of nanocrystalline copper at the equilibrium state.

晶粒尺寸/nm	模型尺寸($X \times Y \times Z$)/Å	晶粒数/个	原子数量/个	晶界比例/%
7.17	115.68 × 119.65 × 119.59	8	130210	25.3
9.11	159.48 × 163.21 × 162.35	8	317622	18.6
12.55	203.05 × 206.45 × 206.84	8	699834	15.1
14.85	239.51 × 242.04 × 241.79	8	1146005	13.3
18.38	297.63 × 300.45 × 301.93	8	2199606	10.8
22.48	362.71 × 367.81 × 366.15	8	3991766	8.6

铜模型, 通过势能值对原子着色, 可以看到晶界原子由于排序混乱具有相对较高的势能. 达到平衡态时的初始多晶铜模型具体信息见表 1.

2.2 单轴拉伸过程

对弛豫后的多晶铜模型沿 X 轴方向施加均匀的拉伸应变, 应变增量为 0.002, 应变率为 $2 \times 10^9/s$, 每加载一次应变后弛豫 1000 步, 分子动力学模拟的时间步长为 0.001 ps, 即弛豫时间为 1 ps. 重复此加载和弛豫过程, 直到应变达到 0.2. 在拉伸过程中只对拉伸方向 (X 轴) 设置周期性边界, 其他方向 (Y 轴和 Z 轴) 为自由边界. 此过程属于平面应力问题, 用于模拟射流在纳米晶粒尺寸下的拉伸变形. 图 3 给出了单轴拉伸的示意图. 本文使用的势函数是 Mishin 等 [21] 建立的 EAM 势函数. 根据 Li 等 [22] 对位错显示方法优缺点的讨论, 为了有效和方便地对变形过程进行观察, 采用共同近邻分析方法 (common neighbor analysis) [23] 对原子结构进行可视化处理分析.

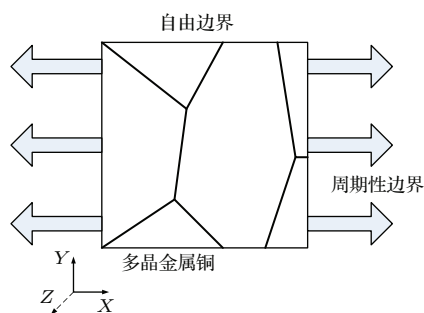


图 3 多晶铜单轴拉伸示意图

Fig. 3. Schematic diagram of the molecular dynamics straining simulation.

3 结果与讨论

3.1 应力-应变曲线

图 4 给出了不同晶粒尺寸的多晶铜在单轴拉伸作用下的应力-应变曲线. 在拉伸的初始阶段, 多晶铜为弹性变形, 在应变为 0.05 前, 应力会随着应变的增加急剧上升. 同时可以看到, 弹性模量会随着晶粒尺寸的增加而变大, 这是由于小晶粒尺寸多晶铜的晶界原子所占比例很高 (见表 1), 此时晶界原子因为错排度较大而具有较小的弹性模量 [24]. 在应变达到 0.05 左右时, 多晶铜发生屈服, 后进入塑性变形阶段. 对于晶粒尺寸大于 14.85 nm 的多晶铜, 在初始塑性阶段, 应力会有较大幅度的下降,

之后下降变得平缓并趋于稳定; 对于小晶粒尺寸多晶铜, 进入塑性阶段后应力始终保持较平缓的下降趋势.

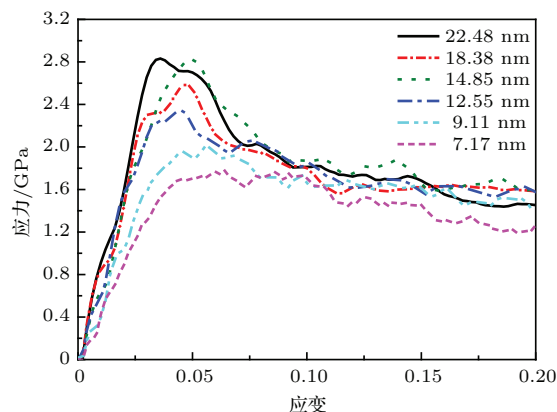


图 4 不同晶粒尺寸多晶铜在单轴拉伸作用下的应力-应变曲线

Fig. 4. Stress-strain curves of nanocrystalline copper at different grain sizes.

3.2 流变应力

对于大部分金属及其合金, 晶粒尺寸在 100 nm 以上时 (微晶和细晶量级), 由于 Hall-Petch 关系晶粒的细化会提高材料的强度. 这时的流变应力 c_y 与晶粒尺寸 d 存在函数关系, 如图 5 所示, 其中 c_0 为初始流变应力, k 为比例系数. 当晶粒尺寸减小到 10 nm 量级时, 晶粒细化会导致材料的软化, 即反常 Hall-Petch 关系 [25].

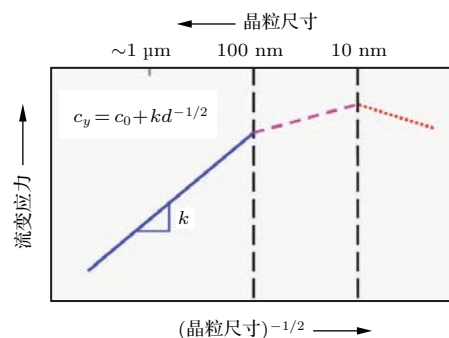


图 5 流变应力随晶粒尺寸的变化规律示意图

Fig. 5. Schematic representation of the variation of flow stress as a function of grain size.

计算各晶粒尺寸下多晶铜应变从 0.06 到 0.2 时的平均流变应力, 图 6 给出了流变应力和晶粒尺寸之间的关系. 可以看到, 随着晶粒尺寸的减小, 流变应力增加到最大值 1.83 GPa 后逐渐下降. 当晶粒尺寸大于 14.85 nm 时, 多晶铜遵循 Hall-Petch 关系; 然而当晶粒尺寸小于 14.85 nm 时, 多晶铜出现软化现象, 即反常 Hall-Petch 关

系. 通过平均流变应力得到的临界晶粒尺寸为 14.85 nm, 这与 Schiøtz 和 Karsten^[11] 得到的结论相符 (10—15 nm). 之所以出现反常 Hall-Petch 关系, 是由于随着晶粒尺寸的减小晶界效应的影响变大, 内在的变形机理发生了根本变化. 下面将结合原子构型演变进行直观、详细地研究.

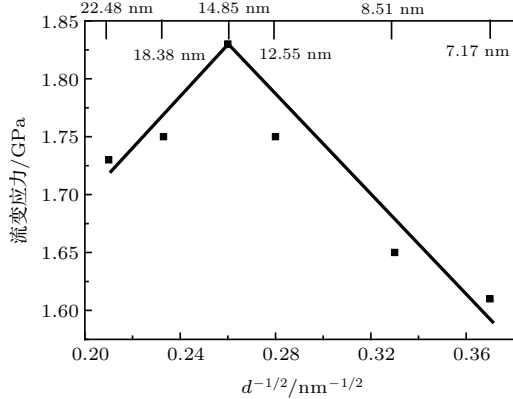


图6 多晶铜流变应力与晶粒尺寸的关系
Fig. 6. Relationship of flow stress and grain sizes of nanocrystalline copper.

3.3 变形机理

图7给出了晶粒尺寸为 22.48 nm 时多晶铜的典型位错运动过程. 在拉伸过程中存在位错启动临界应变 τ^* , 当局部区域应变 $\tau \geq \tau^*$ 时, 位错开始成核并发射. 从图7(a)可以看到, 在应变为 0.056 时两个平行的位错在晶粒左侧三晶交附近成核, 随着应变的增加位错沿着与拉伸成 45° 的方向发射, 图7(b)和图7(c)中标识出了位错发射方向. 由于位错发射路径的一侧存在堆垛层错, 一部分位错被堆垛层错所俘获, 永久地固定住. Schiøtz 和 Karsten^[11] 对大晶粒金属铜的拉伸模拟中也出现了类似的现象. 同时在晶粒中部也存在位错的发射, 其发射方向与晶粒左侧的两个位错运动方向相垂直, 图7(a)中给出了其发射方向, 在应变为 0.064 时晶粒中间的位错发射至晶界, 在晶界处湮灭. 这种运动机理首先由 Liao 等^[26] 发现, 图8为变形机理示意图.

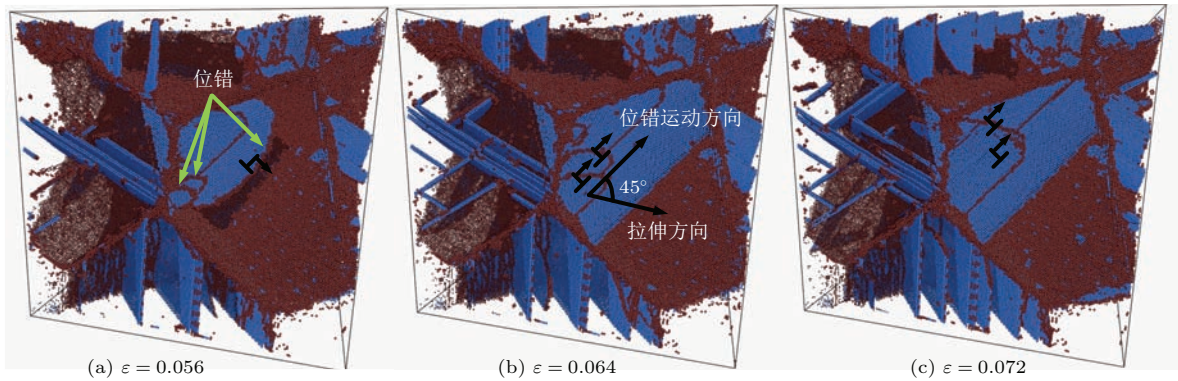


图7 晶粒尺寸为 22.48 nm 时多晶铜的典型位错运动过程. 应变量为 (a) 0.056; (b) 0.064; (c) 0.072

Fig. 7. Typical dislocation motion of nanocrystalline copper with the grain size of 22.48 nm. The strain is (a) 0.056, (b) 0.064, and (c) 0.072.

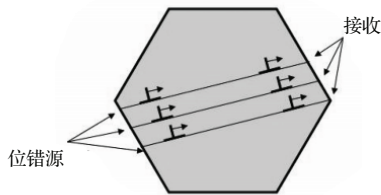


图8 位错穿晶运动示意图^[26]

Fig. 8. Sketch of dislocation travelling throughout grain^[26].

图9给出了晶粒尺寸为 22.48 nm 时多晶铜的拉伸变形图, 图中浅蓝色原子为 hcp 原子, 代表孪晶或堆垛层错, 深蓝色原子为晶粒内部理想 fcc 晶格原子, 红色原子代表晶界原子或位错核. 可以看到当应变达到 0.048 时, 位错在晶界和三晶交处

成核、发射. 位错的出现使原子间的运动变得更加容易, 即要达到相同变形量时需要较小的应力, 这也是应力-应变曲线开始下降的原因. 一般情况下, 这种位错主导的变形是不可恢复的, 此时多晶铜进入塑性变形阶段.

如图9(c)所示, 随着应变的增加, 位错增殖运动变得明显. 在应变为 0.056 时, 一些位错会穿过晶粒内部并在对应的晶界处湮灭^[26]; 同时一些位错会在传播过程中遇到阻碍发生停滞, 在晶粒内部激发新的位错产生. 如图9(c)中 A 处所示, 位错从相邻晶界上成核发射, 由于运动方向相对, 位错会在某一时刻相遇, 结果是其中的一个位错运动停滞. 如图9(c)中 B 处所示, 位错也发生停滞并在

晶粒内部激发出新的位错, 且其发射方向发生了改变. 值得注意的是, 这种晶粒内部位错成核的现象是大晶粒尺寸多晶铜所特有的. 应变继续增加至 0.16 时, 位错密度明显增加, 与图 9(a) 中应变为 0 时相比, 晶界几乎没发生运动, 基本保持原始状态, 可以认为晶粒尺寸为 22.48 nm 的多晶铜的塑性变形以位错运动为主.

图 10 给出了晶粒尺寸为 14.85 nm 的多晶铜在不同应变下的变形图. 在应变为 0.048 时位错开始从晶界和三晶交处产生, 表明塑性变形的开始. 在应变为 0.08 时位错数量有所增加, 但与晶粒尺寸为 22.48 nm 的多晶铜相比, 此时的位错数量明显降低. 当晶粒尺寸降到 14.85 nm 时, 多晶铜中除了有位错运动外, 还可以明显观察到晶界的转动. 如图 10(b) 所示, 在应变为 0.048 时, 多晶铜开始塑性变形, 晶界 A, B 和 C 之间夹角约为 120° . 随着应变增加晶界发生转动, 如图 10(c) 所示应变为 0.08 时, 晶界 A 和晶界 B 几乎转动到同一方向. 在晶界运动

的同时晶粒内部原子取向也发生了变化. 图 10(a) 给出了未加应变时晶粒 1, 2, 3 和 4 的初始晶粒取向. 可以看到在应变为 0.08 时, 晶粒 1 和晶粒 4 内部原子通过运动重排, 使晶粒取向发生转动并逐渐达到统一, 同时共有晶界 C 开始崩溃, 并伴随着位错的发射. 在应变达到 0.16 时晶界 C 消失, 晶界 A 和晶界 B 结合形成晶界 D, 晶粒 1 和晶粒 4 合并成晶粒 5. 综上所述, 当晶粒尺寸降到 14.85 nm 时, 主要变形机理以晶界运动为主. Meyers 等^[9]说明了晶界运动占主导优势的本质原因. 随着晶粒尺寸的减小, 晶界原子所占比例增加, 晶界厚度与晶粒尺寸的比值变大, 此时位错难以在晶界处成核. 同时在小晶粒尺寸下晶界长度也相对较小, 晶界滑移和转动的临界应变也会相应地减小, 晶界运动实现起来变得容易. 变形机理的改变是导致流变应力出现转折的主要原因, 也是 Hall-Petch 关系失效的本质所在.

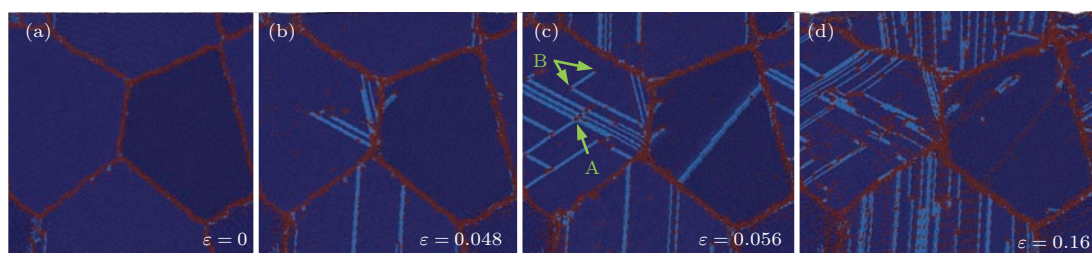


图 9 晶粒尺寸为 22.48 nm 时多晶铜的拉伸变形图. 应变量为 (a) 0; (b) 0.048; (c) 0.056; (d) 0.16

Fig. 9. Snapshots of uniaxial tensile deformation of nanocrystalline copper with the grain size of 22.48 nm. The strain is (a) 0, (b) 0.048, (c) 0.056, and (d) 0.16.

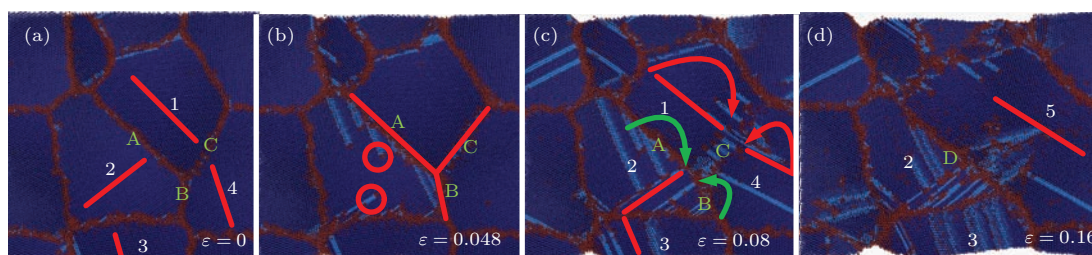


图 10 晶粒尺寸为 14.85 nm 时多晶铜的拉伸变形图. 应变量为 (a) 0; (b) 0.048; (c) 0.08; (d) 0.16

Fig. 10. Snapshots of uniaxial tensile deformation of nanocrystalline copper with the grain size of 14.85 nm. The strain is (a) 0, (b) 0.048, (c) 0.08, and (d) 0.16.

Wang 等^[27]建立了晶粒合并变形机理模型, 其主要考虑了晶粒内部原子取向的转动, 但并未考虑晶界运动的影响. 在此基础上, 图 11 给出了晶粒内部原子取向转动和晶界转动相结合的理想变形机理模型. 相邻等轴晶通过转动形成伸长的晶粒, 同时晶界向着晶粒延长方向发生转动, 这种变化使塑性变形更容易发生.

图 12 给出了晶粒尺寸为 9.11 nm 的多晶铜在不同应变下的变形图. 可以看到在拉伸过程中多晶铜内只产生了极为少量的位错, 几乎所有变形都是通过晶界的转动和滑移来实现. 当应变为 0 时, 图 12(a) 中标识出了两个相连接的三晶交结构, 分别为晶界 A, B, C 和晶界 C, D, E, 各晶界间夹角约为 120° . 在塑性变形开始即应变为 0.048 时, 晶界

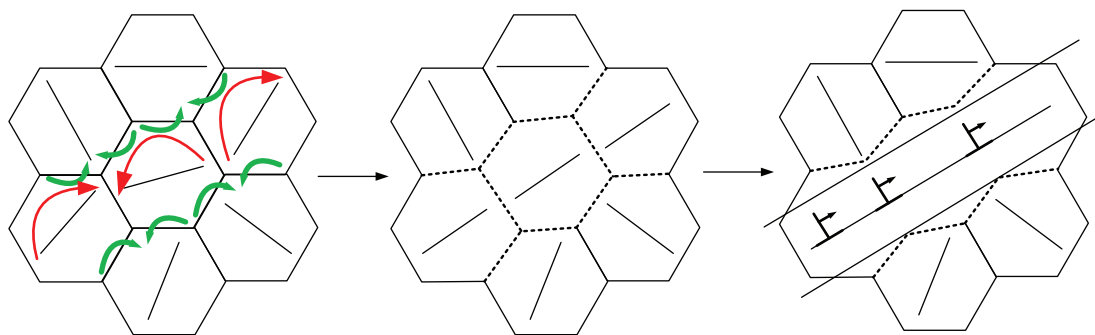


图 11 晶粒合并和晶界转动的理想变形机理示意图

Fig. 11. Schematic diagram of ideal deformation mechanism for grain coalition and grain-boundary rotation.

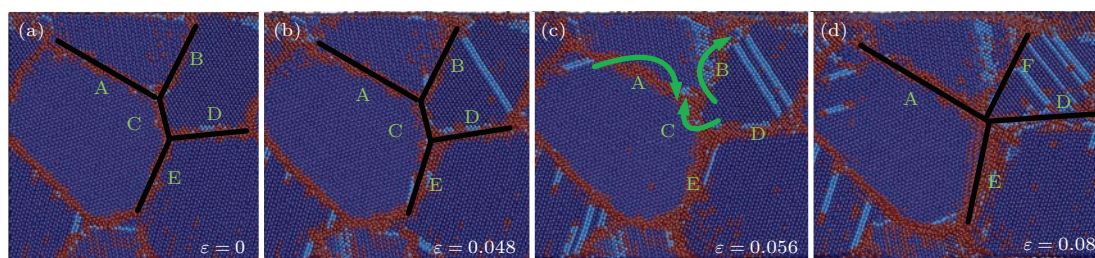


图 12 晶粒尺寸为 9.11 nm 时多晶铜的拉伸变形图. 应变变量分别为 (a) 0; (b) 0.048; (c) 0.056; (d) 0.08

Fig. 12. Snapshots of uniaxial tensile deformation of nanocrystalline copper with the grain size of 9.11 nm. The strain is (a) 0, (b) 0.048, (c) 0.056, and (d) 0.08.

几乎没发生运动, 如图 12 (b) 所示. 此后随着应变的增加, 晶界 A, B 和 C 发生明显的转动和滑移, 当应变为 0.056 时, 图 12 (c) 标识出晶界的转动方向, 晶界 A 向着晶界 C 的方向滑移延长, 晶界 B 和晶界 C 通过转动逐渐达到方向一致. 如图 12 (d) 所示, 当应变为 0.08 时晶界 B 和晶界 C 合并形成新的晶界 F, 此时两个三晶交结构演化成一个四晶交结构, 晶界 D 和晶界 F 之间夹角约为 45° . 这种以晶界转动、滑移和合并等晶界运动为主的变形机理, 更有利于多晶铜的伸长变形, 这也是在晶粒尺寸较小的情况下多晶铜实现超塑性大变形的根本原因.

4 结 论

在聚能装药的爆炸压缩形成射流的过程中, 金属药型罩晶粒细化到亚微米甚至纳米量级. 本文利用分子动力学方法计算研究了不同晶粒尺寸下纳米多晶铜的变形机理. 研究发现, 纳米多晶铜的力学性能及变形机理转折点发生在晶粒尺寸为 14.85 nm 时, 当晶粒尺寸大于 14.85 nm 时纳米多晶铜的拉伸力学性能符合 Hall-Petch 关系, 变形机理主要以位错运动为主; 当晶粒尺寸小于 14.85 nm 时出现反常 Hall-Petch 关系, 变形机理主要以晶界运动为主. 通过对仿真计算结果的分析, 建立了晶

粒合并和晶界转动相结合的理想变形机理模型, 为分析射流大变形现象提供微观变形机理参考.

参考文献

- [1] Tao G, Chen H, Shen Q C 2008 *Explosion and Shock Waves* **28** 336 (in Chinese) [陶钢, 陈昊, 沈钦灿 2008 爆炸与冲击 **28** 336]
- [2] Tian W H 2003 *Mater. Sci. Eng. A* **350** 160
- [3] Murr L E, Trillo E A, Pappu S 2002 *J. Mater. Sci.* **37** 3337
- [4] Trillo E A 2002 *Mater. Charact.* **48** 407
- [5] Chokshi A H, Meyers M A 1990 *Scr. Metall.* **24** 605
- [6] Li J C M 1961 *J. Appl. Phys.* **32** 525
- [7] Murr L E 1997 *Mater. Sci. Eng. A* **222** 118
- [8] Meyers M A, Nesterenko V F, LaSalvia J C, Xue Q 2001 *Mater. Sci. Eng. A* **317** 204
- [9] Meyers M A, Mishra A, Benson D J 2006 *JOM* **58** 41
- [10] Daw M S, Baskes M I 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 1285
- [11] Schiøtz J, Karsten W J 2003 *Science* **301** 1357
- [12] Garritt J T, Shreevart T, Jonathan A Z, David L M 2012 *J. Mech. Phys. Solids* **60** 471
- [13] Zhang H W, Fu Y F, Zheng Y G, Ye H F 2014 *Phys. Lett. A* **378** 736
- [14] Yuan L, Jing P, Liu Y H, Xu Z H, Shan D B, Guo B 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 016201 (in Chinese) [袁林, 敬鹏, 刘艳华, 徐振海, 单德彬, 郭斌 2014 物理学报 **63** 016201]
- [15] He A M, Shao J L, Wang P, Qin C S 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 8836 (in Chinese) [何安民, 邵建立, 王裴, 秦承森 2010 物理学报 **59** 8836]

- [16] Ma W, Lu Y W 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 036201 (in Chinese) [马文, 陆彦文 2013 物理学报 **62** 036201]
- [17] Kadau K, Germann T C, Lomdahl P S, Holian B L, Kadau D, Entel P, Kreth M, Westerhoff F, Wolf D E 2004 *Metall. Mater. Trans. A* **35** 2719
- [18] Koblinski P, Wolf D, Phillpot S R, Gleiter H 1999 *Scr. Mater.* **41** 631
- [19] Chen D 1995 *Comput. Mater. Sci.* **3** 327
- [20] Hoover W G 1989 *Phys. Rev. A* **40** 2814
- [21] Mishin Y, Mehl M J, Papaconstantopoulos D A, Voter A F, Kress J D 2001 *Phys. Rev. B* **63** 224106
- [22] Li D, Wang F C, Yang Z Y, Zhao Y P 2014 *Sci. China: Phys. Mech. Astron.* **57** 2177
- [23] Honeycutt J D, Andersen H C 1987 *J. Phys. Chem.* **91** 4950
- [24] Yuan F P 2012 *Sci. China: Phys. Mech. Astron.* **55** 1657
- [25] Kumar K S, Swygenhoven H V, Suresh S 2003 *Acta Mater.* **51** 5743
- [26] Liao X Z, Srinivasan S G, Zhao Y H, Baskes M I, Zhu Y T 2004 *Appl. Phys. Lett.* **84** 3564
- [27] Wang Y M, Ma E, Chen M W 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 2395

Superplastic deformation mechanism of nanocrystalline copper: a molecular dynamics study*

Wen Peng¹⁾ Tao Gang^{1)†} Ren Bao-Xiang¹⁾ Pei Zheng²⁾

1) (School of Energy and Power Engineering, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094, China)

2) (Yantai Branch of No.52 Institute of China Ordnance Industry Group, Yantai 264003, China)

(Received 10 December 2014; revised manuscript received 22 January 2015)

Abstract

In the process of the generation of jet formed by the shaped charge explosive compression, the grain of the metal liner is refined from 30–80 μm down to sub-micron or nanometer level. There is a strong scientific significance for studying the mechanism of grain refinement and dynamic superplastic deformation at a micro level. The main contents of this study are as follows. Firstly, the models of nanocrystalline copper with the grain sizes of 7.17, 9.11, 12.55, 14.85, 18.38 and 22.48 nm are established using the Voronoi geometrical construction method, and these models are relaxed in 100 ps to the equilibrium state at 293 K. Then, the tensile deformation processes of nanocrystalline copper at various grain sizes are simulated by using the molecular dynamics method. The strain increases to 0.2 gradually at a strain rate of $2 \times 10^9/\text{s}$. Based on the data output, the stress-strain curves at different grain sizes are gained and the corresponding values of the averaged flow stress are calculated. The results show that the average flow stress exhibits the maximum at a grain size of 14.85 nm. Finally, the primary deformation process of nanocrystalline copper is displayed by analyzing the atomic configuration evolvement. When the grain size is 22.48 nm, the typical dislocation motion is found and there are a huge number of dislocations in the deformation process. However, the number of dislocations decreases sharply at the grain sizes of 14.85 nm and 9.11 nm, and the grain-boundary motion is visible at these small grain sizes. The most significant work is that the deformation mechanisms of nanocrystalline copper at different grain sizes are analyzed in detail. The results indicate that the dislocation motion dominates the deformation process when the grain sizes of nanocrystalline copper are larger than 14.85 nm. As the grain sizes decrease below 14.85 nm, the grain-boundary sliding and rotation become a dominant deformation mechanism. This change of deformation mechanism is the fundamental reason for softening, which is so-called reverse Hall-Petch relationship. On the basis of previous study and this molecular dynamics simulation, combining the grain coalition and the grain-boundary rotation, an ideal deformation mechanism model is established at small grain sizes, which provides the microcosmic deformation mechanism reference for the large strain deformation of the jet.

Keywords: molecular dynamics simulation, dynamic superplastic deformation mechanism, uniaxial tension, reverse Hall-Petch relationship

PACS: 62.20.fq, 71.15.Pd

DOI: 10.7498/aps.64.126201

* Project supported by the Research and Innovation Program for Postgraduate of the Higher Education Institution of Jiangsu Province, China (Grant No. KYLZ_0325).

† Corresponding author. E-mail: taogang@mail.njust.edu.cn