

晶粒尺寸对纳米多晶铁变形机制影响的模拟研究

王鹏 徐建刚 张云光 宋海洋

Molecular dynamics simulation of effect of grain on mechanical properties of nano-polycrystal α -Fe

Wang Peng Xu Jian-Gang Zhang Yun-Guang Song Hai-Yang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 236201 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.236201

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.236201>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I23>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于聚乙烯/蒙脱土纳米复合材料微观结构的力学性能模拟

Simulation of mechanical properties based on microstructure in polyethylene/montmorillonite nanocomposites

物理学报.2016, 65(19): 196202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.196202>

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>

层厚度和应变率对铜-金复合纳米线力学性能影响的模拟研究

Effects of layer thickness and strain rate on mechanical properties of copper-gold multilayer nanowires

物理学报.2015, 64(1): 016201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.016201>

界面旋转角对双晶镁力学性质影响的分子动力学模拟

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

物理学报.2014, 63(4): 046201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.046201>

纳米铜薄膜塑性变形中空位型缺陷形核与演化的分子动力学研究

Generation and evolution of vacancy-type defects in nano-Cu films during plastic deformation by means of molecular dynamics

物理学报.2013, 62(19): 196201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.196201>

晶粒尺寸对纳米多晶铁变形机制影响的模拟研究*

王鹏¹⁾²⁾ 徐建刚¹⁾ 张云光^{1)†} 宋海洋^{2)‡}

1)(西安邮电大学理学院, 西安 710121)

2)(西安石油大学材料科学与工程学院, 西安 710065)

(2016年6月1日收到; 2016年9月3日收到修改稿)

利用分子动力学模拟方法研究了拉伸荷载作用下晶粒尺寸对纳米多晶铁变形机制的影响. 研究结果表明杨氏模量随着晶粒尺寸的减小而减小. 当晶粒尺寸小于 15.50 nm 时, 纳米多晶铁的峰值应力和晶粒尺寸之间遵循反常的 Hall-Petch 关系, 此时晶粒旋转和晶界迁移是其塑性变形的的主要变形机制; 随着晶粒尺寸的增大, 变形孪晶和位错滑移在其塑性变形过程中逐渐占据主导地位. 裂纹的形成是导致大晶粒尺寸模型力学性能降低的主要因素. 纳米多晶铁在塑性变形中会出现孪晶界的迁移和退孪晶现象. 此外还研究了温度对纳米多晶铁变形机制的影响.

关键词: 分子动力学, 晶粒尺寸, 力学性质, 变形孪晶

PACS: 62.25.-g, 61.82.Rx, 07.05.Tp

DOI: 10.7498/aps.65.236201

1 引言

20 世纪中期霍尔 (Hall) 和佩奇 (Petch) 发现材料的屈服强度随着晶粒尺寸的减小而增强^[1,2], 自此人们对 Hall-Petch 现象产生了浓厚的兴趣, 并且进行了大量的研究^[3,4]. 然而, 随着晶粒细化到某一临界值时, 有些材料的屈服强度降低, 材料的性能变差, 此即反常的 Hall-Petch 现象^[5-7].

金属材料大多为多晶体材料, 其中各晶粒的空间取向不同, 各晶粒之间通过晶界相互结合. 由于纳米多晶金属材料具有传统金属材料不具备的超塑性、高强度和高延展性等力学性能, 近年来已经受到各国学者的广泛关注, 其中力学性能及其变形机理已经是研究的热点. 力学性能的研究需要分析原子间的相互作用, 这在实验中难度很高. 分子动力学 (MD) 模拟能够提供原子的运动细节, 不仅可以验证理论结果, 而且还能为实验结果提供参考, 所以人们使用分子动力学手段开展了大量

的相关研究^[8-10], 这些模拟为研究纳米多晶金属材料的变形机制提供了宝贵的见解. Zhou 等^[11]用分子动力学模拟方法研究纳米多晶铜在不同晶粒尺寸下的变形机理时发现了 Hall-Petch 现象和反常 Hall-Petch 现象, 并且观察到临界晶粒尺寸随着应变率的增加而减小. Cao 等^[12]用分子动力学模拟方法研究了温度和晶粒尺寸对多晶镍纳米线硬化向软化转变过程的影响. Zhu 等^[13]用分子动力学模拟方法研究了多晶铝纳米线晶粒尺寸和模型尺寸的耦合效应. 但纳米多晶金属材料的变形机制仍然不清晰. 目前主要对面心立方 (fcc) 结构金属 (如 Cu, Al, Ni 等) 的力学性能进行了大量研究, 对体心立方 (bcc) 结构金属力学性能的研究相对较少^[14,15]. 由于纳米多晶 bcc 金属的变形机理与纳米多晶 fcc 金属的变形机理明显不同, 目前多晶 bcc 金属的变形机理尚不明确, 许多现象还有待进一步揭示, 因此有必要研究 bcc 结构金属材料的变形机制, 从而更加全面地认识纳米金属材料的变形机制. 本文采用分子动力学模拟方法研究了二维柱状

* 国家自然科学基金 (批准号: 11572259)、教育部新世纪优秀人才支持计划 (批准号: NCET-12-1046)、陕西省青年科技新星支持计划 (批准号: 2012KJXX-39) 和陕西省国际科技合作与交流计划 (批准号: 2016KW-049) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zygsr2010@163.com

‡ 通信作者. E-mail: gsfshy@sohu.com

结构的纳米多晶铁在拉伸载荷作用下, 晶粒尺寸对纳米多晶铁变形机理的影响. 主要讨论了变形过程中的一些力学性质, 并且分析了纳米多晶铁的微观变形机理.

2 模拟方法和模拟过程

构建了8个不同晶粒尺寸的纳米多晶铁模型, 模型的初始结构通过Voronoi方法进行构建, 晶粒尺寸为3.95—26.00 nm, 原子总数为8400—420000个, 每个模型都包含4个柱状六边形晶粒. 在模型中随机选取晶粒取向. 图1所示为纳米多晶铁的初始结构. 坐标系采用 X -[110], Y -[110], Z -[001], 初始模型选取的晶格常数为0.28553 nm^[16]. 虽然二维柱状结构的纳米多晶铁是一种简单模型, 但是由于纳米多晶金属薄膜比较容易实现实验制备, 因此对柱状结构的纳米多晶金属薄膜材料的实验研究较多.

采用分子动力学模拟方法进行计算机模拟, 在模拟计算中势函数是很重要的影响因素, 决定了模拟的结果是否准确. 本文采用Ackland等^[17]提出的镶嵌原子势函数描述铁原子间的相互作用, 该势函数已广泛用于模拟金属铁的相变、位错成核、孪晶变形等力学行为^[18,19]. 系统的势能可表示为

$$U = \sum_i F_i \left[\sum_j \phi(r_{ij}) \right] + \sum_{ij} V(r_{ij}), \quad (1)$$

式中 U 为系统的总势能, F_i 为局部电子密度能量, $\sum_j \phi(r_{ij})$ 为其他原子在原子 i 处的电子云密度之和, $V(r_{ij})$ 为原子 i 和原子 j 之间的对势函数, 其中 r_{ij} 为原子 i 和原子 j 之间的距离.

采用自行编制C语言代码结合OpenMP并行技术在Linux环境下进行并行分子动力学模拟计算. 对纳米多晶铁材料进行模拟之前, 我们对该程序进行了可靠性验证. 模拟算法采用Verlet蛙跳算法, 该算法的优点是使用简便, 占用存储量少. 模拟中采用公共近邻分析方法(CNA)^[20]来分析模型的变形结构, 通过可视化工具OVITO软件^[21]进行原子结构图的绘制.

本文研究了300.0 K温度下, 晶粒尺寸对纳米多晶铁变形行为的影响. 模拟中模型的三个方向都采用周期性边界条件. 模拟过程为: 在等温和零压条件下, 先对初始构型进行弛豫, 使系统能量达到最小值; 在模型的 Z 方向上施加0.001的拉伸应变,

在 X 和 Y 方向保持零压, 然后固定 Z 方向的边界, 对系统进行弛豫, 使系统达到新的平衡状态. 重复上述施加位移载荷和弛豫的过程, 使模型原子处于准静态受力状态.

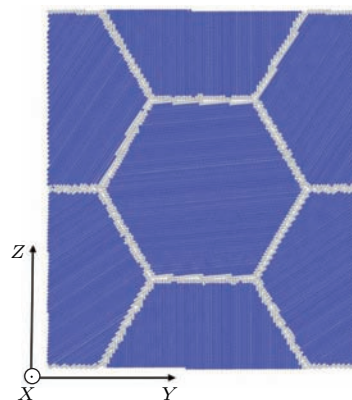


图1 纳米多晶铁初始模型的原子结构图

Fig. 1. Original atom structure of the nano-polycrystal iron sample with four hexagonal grains. Atoms are colored with the CNA method.

3 模拟结果及分析

图2所示为不同晶粒尺寸纳米多晶铁的应力-应变曲线. 应力-应变曲线能够反映纳米多晶铁的基本力学性能. 从图2可以观察到, 随着应变的增加, 所有模型的应力都会线性增加达到某一个峰值, 然后进入塑性变形阶段. 杨氏模量是应力-应变曲线在线性阶段的斜率, 从图2可以看出, 杨氏模量随着晶粒尺寸的减小而降低. 这是因为晶粒较小时模型的晶界比例较大, 相比于更大尺寸的晶粒模型, 能够更快地释放局部应变能. 因此, 随着晶粒尺寸的减小, 晶间变形阻力变小. 这一结果与fcc和hcp金属的研究结果一致^[22,23].

为了更好地对结果进行分析, 图3给出了峰值应力与晶粒尺寸之间的关系. 从图3可以看出, 纳米多晶金属铁的峰值应力随着晶粒尺寸的增大先达到一个最大值8.5 GPa, 此时模型的晶粒尺寸为15.50 nm. 当晶粒尺寸小于15.50 nm时, 纳米多晶金属铁的峰值应力和晶粒尺寸的负二次方根成反比, 表现为软化现象, 即反常Hall-Petch关系. 然而, 当纳米多晶铁的晶粒尺寸大于15.50 nm时, 峰值应力出现了波动. 这一结果与Jeon等^[24]的研究结果一致. 以上研究说明, 随着晶粒尺寸的变化, 纳米多晶金属铁的塑性变形机制可能会发生转变.

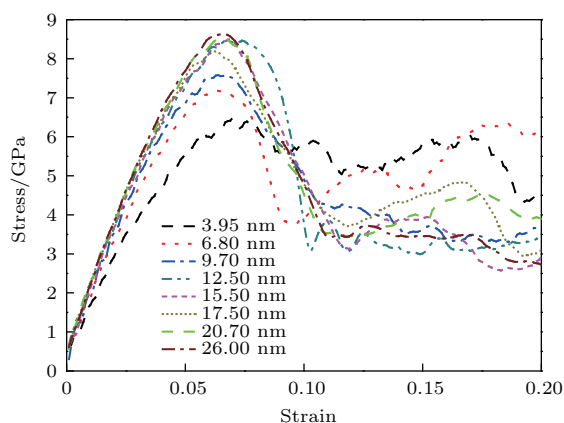


图2 (网刊彩色) 不同晶粒尺寸的纳米多晶铁在拉伸过程中的应力-应变曲线

Fig. 2. (color online) Stress-strain curves of nano-polycrystal iron with different grain sizes under tension loading.

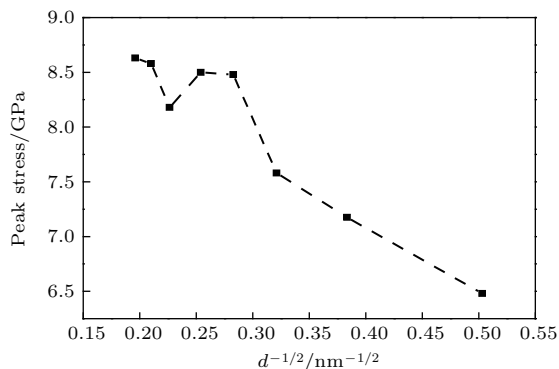


图3 峰值应力与晶粒尺寸的关系

Fig. 3. Relationship between peak stress and grain size.

为了揭示晶粒尺寸对纳米多晶铁变形机制的影响, 图4给出了晶粒尺寸为3.95和17.50 nm的纳米多晶铁在拉伸应变分别为0.06和0.105时的原子结构图, 图中蓝色代表bcc结构原子, 绿色代表fcc结构原子, 白色代表其他类型原子, 其中包括位错结构原子和晶界结构原子. 从图4(a)和图4(b)可以看出, 应变为0.06时, 2号晶粒上有少量的缺陷生成, 这说明晶体已进入塑性变形阶段. 随着应变的增加, 当应变达到0.105时, 有明显的晶界迁移现象, 导致晶粒形状的变化, 同时晶粒旋转现象也十分显著, 使得晶粒内的原子取向发生改变. 但是在整个过程中产生的变形孪晶很少. 这说明晶界迁移和晶粒旋转等变形行为是其主要塑性变形机制. 从图4(c)和图4(d)可以看出, 应变为0.06时, 孪晶成核在晶界处发生, 成核原因为 $1/6\langle 111 \rangle$ 不全位错在 $\{112\}$ 孪晶面上发射, 孪晶成核后形成孪晶带. 孪晶带上的孪晶尖部是由于孪晶胚的不稳定性造成

的. 随着应变的增加, 当应变达到0.105时, 孪晶带沿着 $\langle 111 \rangle$ 方向朝着相对的晶界处扩展, 到达晶界处湮灭, 这与Sainath等^[25]的研究结果一致. 此外, 本文采用位错提取算法分析了纳米多晶铁在拉伸载荷过程中的位错行为, 研究发现在塑性变形过程中, 大晶粒尺寸的模型中晶粒内出现了 $1/2\langle 111 \rangle$ 位错, 如图4(d)所示. 小晶粒尺寸的模型在变形过程中晶粒内没有出现位错. 这说明变形孪晶和位错滑移在大尺寸晶粒模型的塑性变形过程中起主导作用. 小晶粒尺寸模型的主要变形机制是晶界迁移和晶粒旋转, 但仍然能观察到变形孪晶; 大晶粒尺寸模型的主要变形机制是变形孪晶和位错滑移, 但是晶界迁移仍然存在, 而且大晶粒尺寸模型的晶界迁移主要是由于孪晶界的扩展引起的. 这表明在晶粒尺寸的影响下, 纳米多晶金属铁变形机制的转变不是突然发生的, 而是一个渐变的过程.

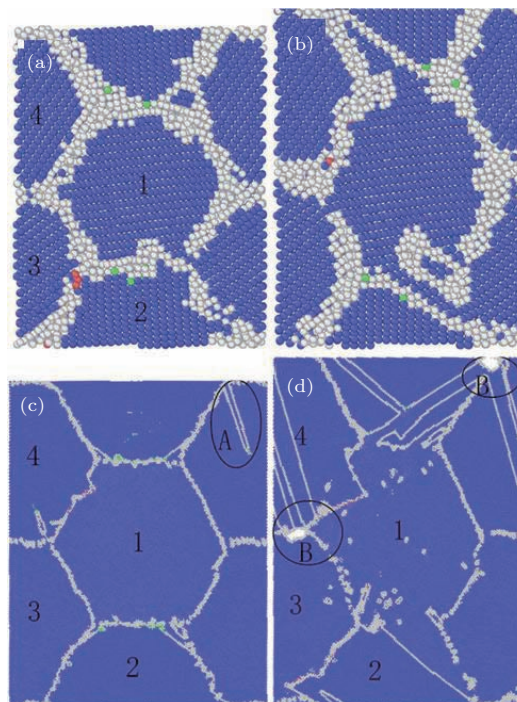


图4 (网刊彩色) 纳米多晶铁在不同应变下的原子结构图 (黑色圆圈A和B分别表示孪晶和裂纹的成核) (a) 晶粒尺寸为3.95 nm的模型在0.06应变下的原子结构; (b) 晶粒尺寸为3.95 nm的模型在0.105应变下的原子结构; (c) 晶粒尺寸为17.50 nm的模型在0.06应变下的原子结构; (d) 晶粒尺寸为17.50 nm的模型在0.105应变下的原子结构

Fig. 4. (color online) Snapshots of nano-polycrystal iron under different tensile strains (circle A shows the nucleation of deformed twins, circle B shows the nucleation of a grain boundary crack): (a) Grain size of 3.95 nm, strain of 0.06; (b) grain size of 3.95 nm, strain of 0.105; (c) grain size of 17.50 nm, strain of 0.06; (d) grain size of 17.50 nm, strain of 0.105.

在纳米多晶金属中,晶界的作用是协调相邻晶粒变形.但是,当晶界受到外力产生变形且晶界处集中的应力达到晶界强度时,晶界会受到损伤,其变形能力会减弱,不足以协调相邻晶粒的变形,随着应变的增加,便会导致沿晶断裂,从而形成裂纹.所以沿晶断裂现象常见于纳米多晶金属中.从图4(d)可以看出,在3号晶粒和4号晶粒相邻的晶界处有裂纹成核现象.这是由于该晶界与加载方向垂直,晶界受到的拉伸应力很大,应力在晶界处集中[26,27].此外,晶粒4中的孪晶带扩展至晶界处,被晶界阻碍,进而积塞,也会造成晶界处应力集中[28],应力的集中使得晶界出现沿晶断裂现象.然而,对于小晶粒尺寸的模型,即使应变达到0.2时也没有出现裂纹.这是由于塑性变形过程中,小晶粒尺寸模型的塑性变形以晶界的滑移为主,即使模型中存在垂直于加载方向的晶界,由于晶粒的旋转,在晶界处造成的应力集中也不足以使晶界受到损伤,晶界依然能协调相邻晶粒变形,晶界处不会形成裂纹.对于大晶粒尺寸的模型,裂纹的形成是其力学性能降低的一个主要因素.从图2中应力-应变曲线的下降阶段可以明显地观察到,大晶粒尺寸模型的应力相对于小晶粒尺寸模型下降得更快.可以通过减小晶粒尺寸阻碍纳米多晶金属材料裂纹的形成,这与Jeon等[24]的研究结果一致.

纳米多晶铁在塑性变形过程中会产生变形孪晶,随着应变的增加,变形孪晶会发生迁移.变形孪晶是沿 $\{112\}$ 孪晶面, $\langle 111 \rangle$ 孪晶方向发生均匀切变的过程.为了研究大晶粒尺寸的纳米多晶铁在塑性变形过程中孪晶的变形规律,图5给出了晶粒尺寸为17.50 nm的纳米多晶铁在拉伸应变分别为0.095, 0.108和0.144时的原子结构图.从图5(a)和图5(c)可以看出,在2号晶粒中红色箭头指向的孪晶界有明显的迁移过程.从图5(d)的放大图可以看出,2个 $1/12\langle 111 \rangle$ 不全位错在 $\{112\}$ 孪晶面上按照箭头指向方向集体移动,导致孪晶界发生迁移[29,30].对于bcc铁来说,形成等腰孪晶界的堆垛层错能小于形成镜像孪晶界所需要的堆垛层错能,所以在bcc纳米多晶铁中更有利于形成等腰的孪晶界[30],如图5(d)所示.此外,纳米多晶铁在塑性变形过程中出现了退孪晶现象.这是由于孪晶界由孪晶面和孪晶端部组成,孪晶面为共格界面,而孪晶端部为非共格界面[31].孪晶端部与晶界接触的区域有非常高的应力集中,提高了孪晶端部的可动性,随着孪晶端部的运动,孪晶面逐渐消失[32].如

图5(a)—(c)所示,随着应变的增加,画圈处的孪晶端部向晶粒内部移动,孪晶面逐渐减小,当孪晶端部到达对应的晶界时,孪晶面完全消失.

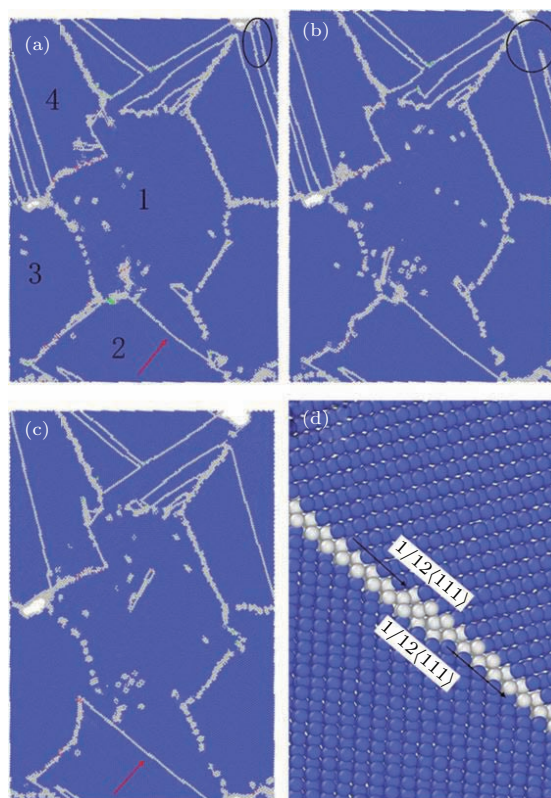


图5 (网刊彩色) 晶粒尺寸为17.50 nm的纳米多晶铁在不同应变下的原子结构图(黑色圆圈表示退孪晶) (a)应变为0.095; (b)应变为0.108; (c)应变为0.144; (d)孪晶放大的结构图

Fig. 5. (color online) Snapshots of nano-polycrystal iron with grain size of 17.50 nm under different tensile strains (circles in black show detwinning in nano-polycrystal iron): (a) The tensile strain is 0.095; (b) the tensile strain is 0.108; (c) the tensile strain is 0.144; (d) magnified view of deformed twins.

本文还研究了温度对纳米多晶铁变形机制的影响.图6为10.0 K温度下,晶粒尺寸为9.70 nm的纳米多晶铁在拉伸应变分别为0.058和0.106时的原子结构图.从图6(a)和图6(b)可以清晰地观察到拉伸过程中孪晶在晶界处成核.随着应变的增加,孪晶朝着相对的晶界处扩展,并导致晶界的变形.此外,纳米多晶铁在塑性变形过程中晶粒内部仅有一个 $1/2\langle 111 \rangle$ 位错.也就是说,温度相对较低时,晶粒尺寸为9.70 nm的纳米多晶铁在塑性变形初期以变形孪晶为主.温度为300.0 K时,晶粒尺寸为9.70 nm的纳米多晶铁在塑性变形过程中除变形孪晶外还出现了大量的位错.这说明温度对纳米多晶铁变形机制的影响主要集中在位错上,随着温

度的增加,位错容易成核和滑移,这与之前研究的温度对纳米多晶镁变形机制的影响有所差异[22].

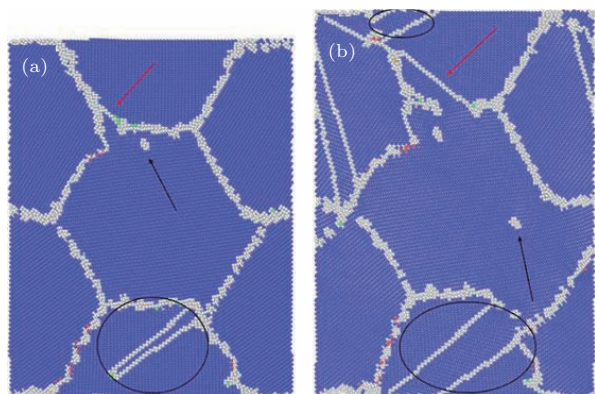


图6 (网刊彩色)晶粒尺寸为9.70 nm的纳米多晶铁在不同应变下的原子结构图(红色箭头表示孪晶界的迁移过程,黑色箭头表示位错滑移的过程,圆圈表示孪晶的成核生长过程) (a)应变为0.058; (b)应变为0.106

Fig. 6. (color online) Snapshots of nano-polycrystalline iron with grain size of 9.70 nm under different tensile strains (circles show the nucleation of deformed twins, red arrows show migration of deformed twins, and black arrows show dislocation): (a) The tensile strain is 0.058; (b) the tensile strain is 0.106.

4 结 论

本文采用分子动力学模拟方法研究了温度为300.0 K时二维柱状结构的纳米多晶铁在拉伸载荷下晶粒尺寸对其变形机制的影响. 研究结果表明,纳米多晶铁的拉伸力学性能在晶粒尺寸小于15.50 nm时出现了反常的Hall-Petch关系,此时晶界迁移和晶粒旋转现象非常明显,是其塑性变形的主要机制;晶粒尺寸大于15.50 nm时,塑性变形主要以变形孪晶和位错滑移为主导,其中变形孪晶的形成是由 $1/6\langle 111 \rangle$ 不全位错在 $\{112\}$ 孪晶面上发射所致. 对于晶粒尺寸较大的模型,模型中的晶界垂直于加载方向及其与孪晶界的相互作用都会造成晶界处的应力集中,从而引起晶界裂纹的成核,这也是导致大晶粒尺寸模型应力下降的一个主要因素. 研究结果也显示,纳米多晶铁的杨氏模量随着晶粒尺寸的减小而降低. 这是因为小晶粒尺寸模型的晶界比例较大,与大晶粒尺寸模型相比,能够更快地释放局部应变能. 此外,纳米多晶铁在塑性变形中还会发生孪晶界的迁移和退孪晶现象. 该研究为制备高性能的纳米多晶铁提供了科学的依据.

参考文献

[1] Hall E O 1951 *Proc. Phys. Soc. Sect. B* **64** 747

- [2] Petch N J 1953 *J. Iron Steel Inst.* **174** 25
- [3] Bazarnik P, Huang Y, Lewandowska M, Langdon T G 2015 *Mater. Sci. Eng. A* **626** 9
- [4] Panin V E, Armstrong R W 2016 *Phys. Mesomech.* **19** 35
- [5] Wen P, Tao G, Ren B X, Pei Z 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 126201 (in Chinese) [闻鹏, 陶刚, 任保详, 裴政 2015 物理学报 **64** 126201]
- [6] Qin X F, Sun D L, Wang T, Zhao X, Xie L, Wu Q 2015 *J. Alloys. Compd.* **640** 497
- [7] Maunig K, Earthman J C, Mohamed F A 2012 *Acta Mater.* **60** 5850
- [8] He X, Bai Q S, Bai J X 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 116101 (in Chinese) [何欣, 白清顺, 白锦轩 2016 物理学报 **65** 116101]
- [9] Dolgusheva E B, Trubitsin V Y 2014 *Comput. Mater. Sci.* **84** 23
- [10] Lin C P, Liu X J, Rao Z H 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 083601 (in Chinese) [林长鹏, 刘新健, 饶中浩 2015 物理学报 **64** 083601]
- [11] Zhou K, Liu B, Yao Y J, Zhong K 2014 *Mater. Sci. Eng. A* **595** 118
- [12] Cao R G, Deng C 2015 *Scripta Mater.* **94** 9
- [13] Zhu Y X, Li Z H, Huang M S 2013 *Scripta Mater.* **68** 663
- [14] Li X F, Hu W Y, Xiao S F, Huang W Q 2008 *Physica E* **40** 3030
- [15] Wu D, Wang X L, Nieh T G 2014 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **47** 554
- [16] Wang S, Hashimoto N, Ohnuki S 2013 *Sci. Rep.* **3** 2760
- [17] Ackland G J, Mendeleev M I, Srolovitz D J, Han S, Barashev A V 2004 *Phys-Condens. Mat.* **16** S2629
- [18] Terentyev D A, Malerba L, Hou M 2007 *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **75** 104108
- [19] Ventelon L, Willaime F 2010 *Philos. Mag.* **90** 1063
- [20] Faken D, Jonsson H 1994 *Compos. Mater. Sci.* **2** 279
- [21] Stukowski A 2010 *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 015012
- [22] Song H Y, Li Y L 2012 *J Appl. Phys.* **111** 044322
- [23] Zhou K, Liu B, Yao Y G, Zhong K 2014 *Mater. Sci. Eng. A* **615** 92
- [24] Jeon J B, Lee B J, Chang Y W 2011 *Scripta Mater.* **64** 494
- [25] Sainath G, Choudhary B K 2016 *Comput. Mater. Sci.* **111** 406
- [26] Chen M Q, Quek S S, Sha Z D, Chiu C H, Pei Q X, Zhang Y W 2015 *Carbon* **85** 135
- [27] Song Z, Artyukhov V I, Yakobson B I, Xu Z 2013 *Nano Lett.* **13** 1829
- [28] Zhang Y F, Millett P C, Tonks M, Biner S B 2012 *Acta Mater.* **60** 6421
- [29] Sainath G, Choudhary B K, Jayakumar T 2015 *Comput. Mater. Sci.* **104** 76
- [30] Shi Z, Singh C V 2016 *Scripta Mater.* **113** 214
- [31] Wang J, Li N, Anderoglu O, Zhang X, Misra A, Huang J Y, Hirth J P 2010 *Acta Mater.* **58** 2262
- [32] Ovid'ko I A, Skiba N V, Sheinerman A G 2015 *Rev. Adv. Mater. Sci.* **43** 38

Molecular dynamics simulation of effect of grain on mechanical properties of nano-polycrystal α -Fe*

Wang Peng¹⁾²⁾ Xu Jian-Gang¹⁾ Zhang Yun-Guang^{1)†} Song Hai-Yang^{2)‡}

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

2) (College of Material Science and Engineering, Xi'an Shiyong University, Xi'an 710065, China)

(Received 1 June 2016; revised manuscript received 3 September 2016)

Abstract

The nanocrystalline metals are widely investigated due to their unique mechanical properties. Currently, the available studies about deformation mechanisms of metals mainly focus on face-centered cubic metals such as Ni, Cu and Au. However, the body-centered cubic metals are still very limited, despite their industrial importance. Here, we investigate the effects of grain size and temperature on the mechanical behavior of nano-polycrystal α -Fe under uniaxial tensile loading by using molecular dynamics (MD) simulation. The models of nanocrystalline α -Fe with the grain sizes of 3.95, 6.80, 9.70, 12.50, 15.50, 17.50, 20.70 and 26.00 nm are geometrically created in three dimensions by using Voronoi construction, and these models are relaxed to reach an equilibrium state. Then, each of them has a strain of 0.001 along the Z -direction in each step, keeping zero pressure in the X - and Y -directions until the strain increases up to 0.2. A 1.0 fs time step is used in all of the MD simulations. Based on the data output, the stress-strain curves at different grain sizes are obtained. The results indicate that the peak stresses of nano-polycrystal α -Fe decrease with the decrease of grain size, exhibiting a breakdown in the Hall-Petch relation when the grain size is smaller than a critical size. The major deformation mechanism is found to change from dislocation slips and twinning-mediated plasticity in a model with a larger grain size to grain boundary sliding in a model with a smaller grain size. It should be noted that twinning is formed by the emission of $1/6\langle 111 \rangle$ partial dislocations along the $\{112\}$ slip plane. The results show that crack formation during tension is a cause of reducing the flow stress of nano-polycrystal α -Fe with a large grain size and that the Young's modulus of nano-polycrystal α -Fe decreases with the grain size decreasing. The main reason for the crack nucleation is here that grain boundaries perpendicular to the loading direction bear higher stress and the twin band interacts with grain boundaries at a larger grain size, causing the stress to concentrate at the intersections of grain boundaries. The results also show the detwinning behavior and migration of deformed twins in nano-polycrystal α -Fe. The detwinning behavior occurs via the migration of the intersection of grain boundary and twin, and this intersection is incoherent boundary. The migration of deformed twins proceeds by repeating initiation and glide of $1/6\langle 111 \rangle$ partial dislocations on adjacent $\{112\}$ planes. In addition, we find that the nucleation and propagation of dislocation become easier at higher temperature than at lower temperature.

Keywords: molecular dynamics, grain size, mechanical properties, deformed twins

PACS: 62.25.-g, 61.82.Rx, 07.05.Tp

DOI: 10.7498/aps.65.236201

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11572259), the Program for New Century Excellent Talent in University of the Ministry of Education of China (Grant No. NCET-12-1046), the New Scientific and Technological Star of Shaanxi Province (Grant No. 2012KJXX-39), and the International Cooperation and Exchanges of Shaanxi Province (Grant No. 2016KW-049).

† Corresponding author. E-mail: zygsr2010@163.com

‡ Corresponding author. E-mail: gsfshy@sohu.com