

温度对单晶镁拉伸性能影响的分子动力学研究

薛春¹, 杨千华¹, 楚志兵^{1,2}, 桂海莲¹, 拓雷锋¹, 高虹³, 沈卫强³

(1. 太原科技大学 重型机械教育部工程研究中心, 山西 太原 030024)

(2. 暨南大学 力学与建筑工程学院, 广东 广州 510632)

(3. 江苏武进不锈钢股份有限公司, 江苏 常州 213111)

摘要: 本研究主要运用分子动力学的模拟方法, 研究了拉伸速率为 10^{10} s^{-1} 下温度对于单晶镁性能的影响, 并对结果进行应力应变分析, 势能应变分析, 共近邻分析, 位错密度分析等。结果表明: 随着温度的升高, 单晶镁的抗拉强度峰值降低, 各峰值点对应的应变值随着温度的升高逐渐减小; 在应力峰值出现前 hcp 首先转化成 Other 结构且没有位错产生, 在应力峰值过后 fcc, bcc 结构出现, 同时产生位错, 其中位错主要为 $1/3 \langle \bar{1}100 \rangle$ 位错和未知结构位错, 对应的晶体结构的转化与位错的产生大约滞后应力峰值点 0.5% 的应变值, 并且温度对于滞后值的影响不大, 晶体结构的转化和位错的产生也随着温度的升高提前发生。

关键词: 单晶镁; 分子动力学; 温度; 晶体结构; 位错密度

中图分类号: TG146.22

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2021)05-1812-05

金属材料在使用过程中由于温度的变化引起的性能变化是限制材料使用的最困难、最复杂的问题之一, 在航空航天、交通运输等领域表现得尤为明显^[1-5]。镁作为一种质量轻、抗震性好、抗腐蚀性能好的材料, 应用领域更为广泛^[6-11], 因此广受关注。

材料的性能变化受多种因素影响, 主要有温度、应变速率、缺陷等, 其中温度的影响体现得更加普遍, 金属材料的断裂强度随着温度的升高而降低。在实验研究中常用的是利用恒温拉伸方法研究不同温度对镁合金的影响, 但是这种方法只是从宏观的角度对力学性能进行研究, 没能从原子转换、位错产生等角度对其进行说明, 这就需要从微观的角度去分析性能的变化。分子动力学模拟可以从微观角度去揭示温度对于拉伸材料变化过程中的应力应变、势能、位错的变化情况, 有助于了解材料在不同温度下拉伸的变形机制。目前, Aghababaei 和 Joshi^[12]通过分子动力学研究了镁单晶的拉伸变化机理, 说明了缺陷对于孪晶 $\{10\bar{1}2\}$ 的出现比孪晶 $\{11\bar{2}1\}$ 出现的影响更加明显; Qi 等人^[13]研究了 c 轴拉伸镁单晶结构演化的规律, 在不同的温度下, 孪晶表现出来的类型不同, 会发生孪晶的增加, 消失或产生; Guo 等人^[14]采用分子动力学的方法模拟

了不同温度下镁单晶在 c 轴拉伸下的变形行为, 研究表明低温时, 孪晶是变形的主要机制, 高温时, 非基面滑移对镁单晶的拉伸变形起重要作用。虽然目前运用分子动力学对于拉伸单晶镁有一些研究, 但是对于不同低温下的拉伸研究较少, 并且结合势能应变分析, 位错分析 (DXA), 共近邻分析 (CNA) 等分析方法的研究较少。采用镶嵌原子法 EAM (embedded atom method) 描述原子之间的相互作用, 建立镁单晶的原子模型, 应用分子动力学方法, 利用 LAMMPS 程序及 Ovito 软件, 通过应力应变分析, 势能应变分析, 位错分析, 共近邻分析等方法, 研究单晶镁在不同温度下承受轴向拉伸作用时的性能变化与变形机制。

1 分子动力学模型的建立

采用嵌入原子法 (EAM), 这种方法广泛运用于镁单晶的分子动力学模拟研究中。分子动力学运用 AtomsK 进行建模, 密排六方 (hcp) 晶体结构中晶向指数的表达方式用常用四轴坐标 Miller-Bravais 指数表示^[15], 如图 1 所示, 模型中 x , y 和 z 坐标分别为 $[\bar{1}2\bar{1}0]$, $[\bar{1}010]$, $[0001]$ 晶向, 其中 z 轴对应单晶镁中 c 轴, 模型尺寸为 $12.8 \text{ nm} \times 22.24 \text{ nm} \times 20.85 \text{ nm}$, 模

收稿日期: 2020-07-03

基金项目: 国家重点研发计划 (2018YFB1307902); 国家自然科学基金 (U1710113); 山西省研究生联合培养基地人才培养项目 (2018JD33); 山西省青年拔尖人才; 山西省优秀青年基金 (201901D211312); 山西省高等学校创新人才优秀青年学术带头人; 山西省高等学校科技成果转化培育项目 (2019KJ028); 山西省新兴产业领军人才; 山西省研究生教育创新计划 (2019SY482)

作者简介: 薛春, 男, 1994年生, 硕士生, 太原科技大学重型机械教育部工程研究中心, 山西 太原 030024, E-mail: 844924572@qq.com

型共有 256 000 个原子。在 3 个方向施加周期性边界条件,在加载之前采用 NPT 系综对模拟系统进行充分弛豫 (30ps),以确保模拟系统在加载前达到指定温度的平衡状态,其中控制的温度分别为 300, 340, 380, 420 K。弛豫结束后,以 10^{10} s^{-1} 应变速率沿着 z 轴匀速拉伸,时间步长为 0.001 ps 直至应变总量达到 20%,模拟过程每隔 100 步记录原子在各方向的应力、总能量、势能、动能及原子位置。使用 Ovito 软件对结果进行可视化处理。通过应力应变分析,势能应变分析,位错分析,径向分布函数分析 (RDF),共近邻分析等方法,研究单晶镁在不同温下承受轴向拉伸作用时的性能变化与变形机制。

Mg 原子间势函数采用的是 S. R. Wilson 和 M. I. Mendeleev 于 2016 年发布的 EAM 势函数^[16],该势函数是 D. Y. Sun 等人^[17]模拟势函的变体。系统的总势能为:

$$U = \sum_i F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{ij}(r_{ij}) \quad (1)$$

式中 F_i 是嵌入能函数; ρ_i 为除了第 i 个原子以外所有原子在 i 处产生的电子云密度之和; ϕ_{ij} 是第 i 个原子与第 j 个原子之间的对势作用函数; r_{ij} 是第 i 原子与第 j 个原子之间的距离。

2 结果与讨论

2.1 温度对拉应力的影响

图 2 为不同温度下单晶镁拉伸时对应的应力应变曲线。从图中可知,不同温度下应力应变曲线的整体走势是基本一致的,首先应力随着应变的进行逐渐增加,当达到屈服点后发生急剧下降,最后趋于平缓。当试样在屈服点之前时为弹性变形,应力表现为线性增加,应力应变曲线的斜率随着系统温度的升高而减小,即单晶镁的弹性模量随着温度的升高而减小;随着变形的增加,屈服点过后,单晶镁进入塑性变形阶

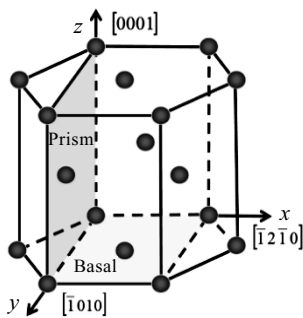


图 1 镁单晶原子模型图

Fig.1 Atomic model diagram of magnesium single crystal

段,由于位错和滑移现象已经启动,使得应力发生急剧变化,最后趋于平缓,从其中可知,在发生塑性变形时,应力应变曲线的斜率在逐渐减小,即在低温时发生的变形更加剧烈。从图中可知,随着温度的升高,拉伸应力峰值逐渐降低,且峰值出现的位置提前。温度较低时,单晶镁的应变程度较大,可以达到 10.5%,屈服点的应力最大为 6.51 GPa,这种现象很容易理解,因为原子在低温下震荡较小,晶体构型更稳定,塑性变形阻力更强,发生变形所需的能量较多。在高温时单晶镁的屈服点来临更快,主要是在高温条件下,分子的运动较快,原子间成键能较弱,使得位错成核与发射所需要的临界应力值变小,在受到外界载荷时更容易发生晶格变化。

2.2 温度对势能的影响

图 3 为不同温度下单晶镁势能与应变的关系。从图中可以看出,不同温度下单晶镁势能与应变关系的曲线变化情况基本一致,在进行塑性变形之前势能在逐渐增加,这是因为随着拉伸的进行,原子之间的距离在逐渐变大,使得之间的作用力在逐渐增加,所需势能增加;当越过屈服点时,材料发生位错和滑移现象,还有晶键断裂等现象,使得势能降低,最后逐渐趋于平缓。从图 3 中可以看出,随着温度的升高,势能峰值大,其绝对值越小,势能改变越小,且随着温度的升高,势能峰值点出现的位置提前。在屈服点之前,势能应变的曲线斜率随着温度的升高在降低,并且势能增加量较少,这是因为温度高时,虽然发生变形需要比较高的能量,但是材料在高温时就具有比较高的势能,同时高温时吸收能量较为缓慢,故表现出这种现象。在越过屈服点之后,由于位错滑移和晶键断裂等现象的产生,导致势能下降,最终趋于平缓,由于温度的不同表现出的势能值不同,随着温度的升高,材料内部所含有的势能较高,故在势能下降过程

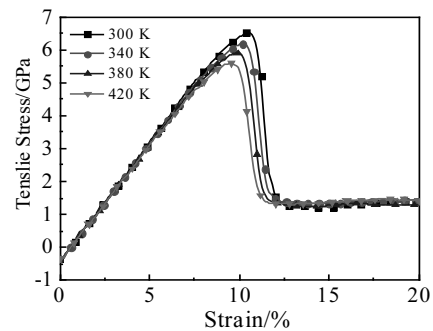


图 2 不同温度下单晶镁拉伸应力-应变曲线

Fig.2 Stress-strain curves of magnesium single crystal at different temperatures

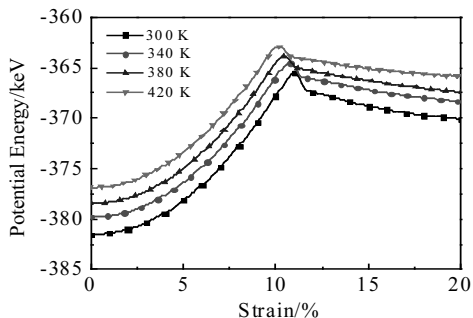


图 3 不同温度下单晶镁势能-应变曲线

Fig.3 Potential energy-strain curves of magnesium single crystal at different temperatures

中，低温时表现更加明显，最后势能也相对较低。

2.3 共近邻分析 (CNA)

图 4a~4d 分别是在 300, 340, 380 和 420 K 的不同晶体结构的数量与应变的关系图和晶体结构变化。图中应变轴上的标记点是应力应变曲线上出现峰值时对应的应变值。其中绿色代表 fcc，红色代表 hcp，蓝色代表 bcc，黄色代表 ICO，紫色代表未知结构即 Other 结构，晶体结构图是依据应力应变图选取的特殊时刻图。从图中可以看出在应力峰值出现之前，hcp 结构首先转化为 Other 结构，随着应变的进行 hcp 减少，Other 结构增加并且越接

近应力峰值点转化速率也越快；在应力达到峰值后，fcc, bcc 结构开始出现，Other 结构开始减少，随后达到相对平衡的状态，hcp 结构出现些许的恢复，最后也趋于平缓。可以发现，随着温度的升高，fcc, bcc 出现时的应变值随之减小。结合图 2 应力应变进行对比分析，发现 fcc, bcc 的出现相比于应力峰值点滞后 0.5%左右，此时应力开始快速下降，晶体结构发生转化。可以发现 hcp 与 Other 的数量在某一应变值时相同，这个应变值对应的就是应力应变过程中应力值趋于缓和时的拐点，并且随着温度的升高，这个点会向前移动即对应应变值减小。

2.4 位错密度分析 (DXA)

图 5a~5d 分别是在 300, 340, 380 和 420 K 温度下位错密度随应变的变化情况和位错变化图。图中应变轴上的标记点是应力应变曲线上出现的峰值时对应的应变值。其中位错变化图是依据应力应变图选取的特殊时刻图。由图 5 可以看出，单晶镁在应变率为 10^{10} s^{-1} 的拉伸载荷下出现的位错类型有： $1/3\langle\bar{1}100\rangle$ 位错， $1/3\langle 11\bar{2}0\rangle$ 位错， $1/3\langle 11\bar{2}3\rangle$ 位错， $\langle\bar{1}100\rangle$ 位错， $\langle 0001\rangle$ 位错，也有一些无法识别的位错，定义为 Other 位错。从图中可看出，各位错随着应变的整体变化趋势是一样的，在应力达到峰值后，才开始产生位错，其中主要的位错是 $1/3\langle\bar{1}100\rangle$ 位错和 Other 位错。可以看出随着温度的增加，各位错出现需要的应变值越来越小。

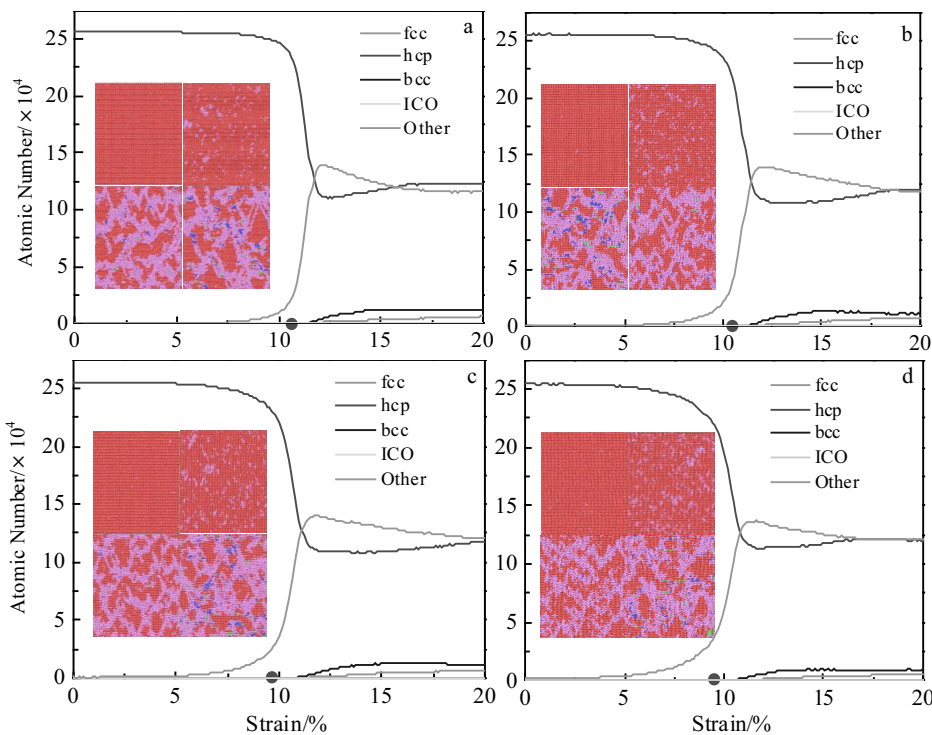


图 4 不同晶体结构数量与应变的关系

Fig.4 Relationship between the number of different crystal structures and strain at temperature of 300 K (a), 340 K (b), 380 K (c) and 420 K (d)

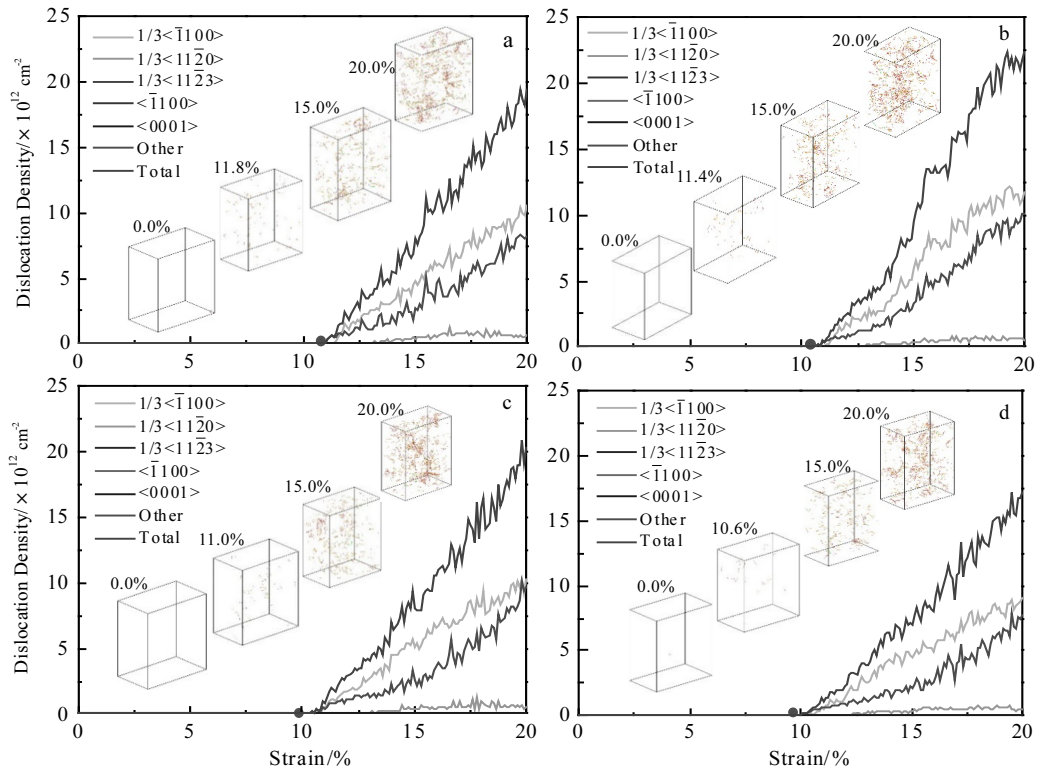


图 5 位错密度与应变关系曲线

Fig.5 Relationship between dislocation density and strain at temperature of 300 K (a), 340 K (b), 380 K (c) and 420 K (d)

300 K 时, 位错在应变 11% 时开始出现并增长; 340 K 时, 位错在 10.7% 应变时开始出现并增长; 380 K 时, 位错在 10.5% 应变时开始出现并增长; 420 K 时, 位错在 9.7% 应变时开始出现并增长。420 K 温度下位错的出现比 300 K 时提前了 1.3% 左右的应变值, 这表明随着温度的升高, 位错出现的应变将随之减小。结合图 2 进行对比分析, 发现位错密度的出现位于应力峰值之后, 滞后 0.5% 左右的应变, 此时拉应力开始快速下降, 出现因位错而引起的塑性变形。

3 结论

1) 在 300~420 K 温度下, 拉应力峰值点的出现随着温度的升高在逐渐提前, 即对应应变值减小, 且峰值在逐渐降低, 表明温度对于单晶镁的拉应力峰值有明显的影 响。

2) 系统的势能随着温度的升高而增加, 在应力峰值点后势能出现下降, 这是由于 hcp 结构转变为 bcc, fcc 结构导致势能降低, bcc, fcc 的出现大约滞后峰值 0.5% 的应变值。

3) 位错的出现滞后峰值点出现 0.4% 左右的应变, 且此滞后差距随温度的变化不大, 其中主要位错为 $1/3[\bar{1}100]$ 位错和 Other 位错, 随着温度的升高, 位

错密度逐渐增加。

参考文献 References

- [1] Gartzke Ann-Kathrin, Julmi Stefan, Klose Christian *et al.* *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*[J], 2020, 109: 103 825
- [2] Zhu Biwu, Xiao Liu, Chao Xie *et al.* *Journal of Materials Science & Technology*[J], 2020, 50: 59
- [3] Krishnan C S, Pokhrel Ritesh, Mondal Ashok Kumar *et al.* *Materials Today: Proceedings*[J], 2020, 26(Pt 2): 1136
- [4] Dai Z H, Lu L. *Materials Science & Engineering A*[J], 2020, 789: 139 690
- [5] Jayasathyakawin S, Ravichandran M, Baskar N *et al.* *Materials Today: Proceedings*[J], 2020, 27: 909
- [6] Li Wei(李 伟), Chu Zhibing(楚志兵), Wang Huanzhu(王环珠) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2020, 49(4): 1242
- [7] Zhou Jie(周 洁), Wu Rendong(吴任东), Yuan Chaolong(袁朝龙) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2020, 49(5): 1793
- [8] ChenXianhua(陈先华), Geng Yuxiao(耿玉晓), Pan Fusheng(潘复生). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀

- 有金属材料与工程[J], 2016, 45(9): 2269
- [9] Li Rongrong(李线绒), Mi Yujie(米玉洁), Nie Huihui(聂慧慧) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2020, 49(1): 320
- [10] YubRaj Paudel, Joseph Indeck, Kavan Hazeli *et al. Acta Materialia*[J], 2020, 183: 438
- [11] Fu Hailong(付海龙). *Thesis for Master*(硕士论文)[D]. Beijing: Tsinghua University, 2016
- [12] Aghababaei Ramin, Joshi Shailendra P. *Acta Materialia*[J], 2014, 69: 326
- [13] Qi Honggang, Guo Yafang, Tang Xiaozhi *et al. Acta Metallurgica Sinica (English Letters)*[J], 2011, 24(6): 487
- [14] Guo Yafang, Wang Yuesheng, Qi Honggang *et al. Acta Metallurgica Sinica, English Letters*[J], 2010, 23(5): 370
- [15] Hou Zengshou(侯增寿), Lu Guangxi(卢光熙). *Principle of Metallogy*(金属学原理)[M]. Shanghai: Shanghai Science and Technology Press, 1990
- [16] Wilson S R, Mendeleev M I. *The Journal of Chemical Physics*[J], 2016, 144(14): 144 707
- [17] Sun D Y, Mendeleev M I, Becker C A *et al. Physical Review B*[J], 2006, 73(2): 024 116

Molecular Dynamics Study of the Influence of Temperature on Tensile Properties of Single Crystal Magnesium

Xue Chun¹, Yang Qianhua¹, Chu Zhibing^{1,2}, Gui Hailian¹, Tuo Leifeng¹, Gao Hong³, Shen Weiqiang³

(1. Heavy Machinery Engineering Research Center, Taiyuan University of Science and Technology, Taiyuan 030024, China)

(2. School of Mechanics and Civil Engineering, Jinan University, Guangzhou 510632, China)

(3. Jiangsu Wujin Stainless Steel Co., Ltd, Changzhou 213111, China)

Abstract: The effect of temperature on the properties of single crystal magnesium at a tensile rate of 10^{10}s^{-1} was studied by molecular dynamics simulation method, and stress-strain analysis, potential energy strain analysis, common neighbor analysis, dislocation density analysis and other operations were performed on the results. The results show that the peak tensile strength of monocrystalline magnesium decreases with the increase of temperature, and the corresponding strain value of each peak point decreases with the increase of temperature. Before the peak stress appears, hcp first converts into Other structures without dislocation. After the peak stress, fcc, bcc structure appears at the same time, the dislocation appears, which is mainly $1/3\langle\bar{1}100\rangle$ dislocation and unknown dislocation structure. The corresponding crystal structure transformation and the generation of dislocation about lag behind the strain values of stress peaks around 0.5%, and the effects of temperature on lag value is not obvious. The crystal structure transformation and the generation of dislocation occur in advance with the increase of temperature.

Key words: single crystal magnesium; molecular dynamics; temperature; crystal structure; dislocation density

Corresponding author: Chu Zhibing, Ph. D., Professor, Heavy Machinery Engineering Research Center, Taiyuan University of Science and Technology, Taiyuan 030024, P. R. China, E-mail: chuzhibing@tyust.edu.cn