

# 双孔洞排布位置对 $c$ 轴压缩镁单晶的影响

王环珠<sup>1</sup>, 薛春<sup>1</sup>, 杨千华<sup>1</sup>, 桂海莲<sup>1</sup>, 李玉贵<sup>1</sup>, 楚志兵<sup>1,2</sup>

(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)

**摘要:** 为探究双孔洞位置排布对于镁及镁合金塑性变形的影响, 应用分子动力学方法模拟在 300 K 下含不同排布位置的双孔洞镁单晶  $c$  轴压缩模型, 结合 3 种模型的应力-应变曲线、势能曲线、径向分布函数和位错密度曲线, 分析不同排布位置双孔洞镁单晶的压缩力学性能和结构演化过程。结果表明: 双孔洞镁单晶在与加载方向平行时可承受的压应力峰值和势能峰值以及对应的应变程度最大, 与加载方向垂直时次之, 当与加载方向呈 45°排布时最小, 且与  $c$  轴呈 90°排布的双孔洞镁单晶模型孔洞闭合速率最快。

**关键词:** 分子动力学; 双孔洞; 压缩; 排布位置; 加载方向

中图分类号: TG146.22

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2021)04-1391-07

材料在生产和使用过程中不可避免地会出现杂质、孔洞等微观组织缺陷<sup>[1]</sup>。这些微小缺陷虽然不会瞬间引起明显的结构及性能变化, 但是会在使用过程中对材料结构造成一定程度的影响。孔洞分布在与外力加载方向呈不同角度以及在实验材料距离中心或边界不同位置时, 其对孔洞演变规律以及材料的塑性变形规律会产生不同的影响。镁作为目前工业化应用最轻的金属结构材料之一, 应用广泛, 被誉为 21 世纪资源与环境可持续发展的绿色材料。但其室温下塑性变形能力差, 加工成品率较低, 极大地限制了镁合金材料的进一步发展。随着计算机仿真模拟方法的逐渐成熟, 越来越多的研究人员把对材料的研究重点从传统的实验研究转移到采用仿真模拟对各项性能进行科学性预测。

Agarwal 等人<sup>[2]</sup>利用分子动力学模拟研究了铝单晶冲击压缩过程中的加载取向与层裂过程中缺陷(位错、孪晶、层错等)的动态演化之间的关系。J. Zhai<sup>[3]</sup>采用分子动力学方法对镁合金在原子尺度上位错的形核、运动和缺陷摩擦所耗散能量以及应变幅度和温度对镁合金阻尼性能的影响进行了研究。T. Tian 等<sup>[4]</sup>使用分子动力学研究了镁单晶中纳米级孔洞的生长和聚结。赵鹏越<sup>[5]</sup>通过对多晶铜的纳米压痕微观模拟并对晶界及交叉点的应力和势能进行分析, 探究了其位错演化机制。王云天等<sup>[6]</sup>在高应变速率下采用分子动力

学模拟了不同温度下单晶铁的孔洞成核与生长。杨彪<sup>[7]</sup>通过分子动力学方法, 研究了完美镍单晶模型和 3 种含相同半径、不同深度孔洞的镍基单晶合金模型在纳米压痕过程中基体内部位错形核、长大的过程。梁华<sup>[8]</sup>通过分子动力学建立了含不同预制孔洞的铝单晶模型, 分别对不同晶向加载的铝单晶模型、含相同体积份额不同分布方式孔洞的铝单晶模型及温度等对材料变形影响进行了微观模拟研究。Wu<sup>[9]</sup>进行了单孔洞和多孔洞对于单轴压缩单晶铜的分子动力学影响研究, 对其位错演化规律进行了分析讨论。赵艳红<sup>[10]</sup>对含有预制球形孔洞的六棱柱单晶铜模型在不同静压情况下进行分子动力学模拟。已有研究多为体心立方或面心立方晶体金属原子模拟, 对于密排六方晶体金属的研究多为无缺陷晶体模型或含单一孔洞和微裂纹的晶体模型, 对于多孔洞影响因素的镁及镁合金原子模拟较少。

基于此本工作以镁单晶为研究对象, 讨论在预制双孔洞与  $c$  轴呈 0°、45°及 90°排布时, 沿  $c$  轴方向施加压缩下微观模型塑性变形过程中的应力和势能与应变关系, 晶体原子结构和位错密度变化情况, 径向分布函数趋势以及孔洞演变, 以此明晰双孔洞位置排布对于镁及镁合金塑性变形的影响。

## 1 模型构建与模拟方法

构造如图 1 的镁单晶结构, 通过 AtomsK 软件将

收稿日期: 2020-05-30

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: 王环珠, 女, 1993 年生, 硕士, 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: whz704@126.com

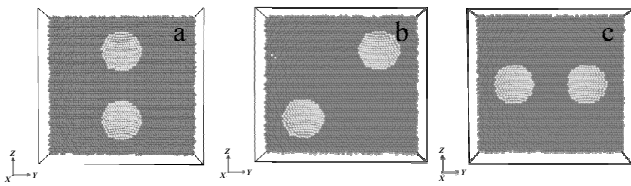


图 1 双孔洞不同排布位置的镁单晶剖面模型

Fig.1 Profile model of magnesium single crystal with two voids at different positions: (a) 0°, (b) 45°, and (c) 90°

镁单晶结构复制从而建立了 3 种双孔洞不同排布位置的镁单晶剖面模型。由于预制孔洞均位于六面体模型内部，因此将模型沿 (100) 切开，红色表示完美密排六方结构，灰色表示缺陷结构，图 1 为双孔洞不同排布位置的镁单晶剖面模型图，预制双孔洞是半径均为 2 nm 的球形孔洞，双孔洞排布位置分别与 *c* 轴平行，呈 45° 及 90°。

因为密排立方体系通常采用 4 轴坐标系，因此，建模时将笛卡尔坐标系中的 *x*, *y* 和 *z* 坐标分别对应该模型的  $[\bar{1}2\bar{1}0]$   $[\bar{1}010]$   $[0001]$  晶向，且 3 向均为周期性边界条件。模型尺寸为 9.63 nm×16.68 nm×15.64 nm，原子数目均为 105 122。Mg 原子间势函数采用 S. R. Wilson<sup>[11]</sup>和 M. I. Mendeleev<sup>[12]</sup>于 2016 年发布的 EAM 势函数。

模型模拟温度设置为 300 K，先将镁单晶模型原子弛豫 20 000 步，使系统在 *c* 轴压缩开始前达到设定温度 300 K，此时系统能量处于最低状态。接着以  $1.0 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$  应变速率沿着 *c* 轴匀速压缩 20 000 步，时间步长为 0.001 ps，此时模型应变总量达到 20%，如图 2 所示。模拟过程每隔 250 步输出原子在各方向的应力、总能量、势能、动能和原子坐标位置等信息。

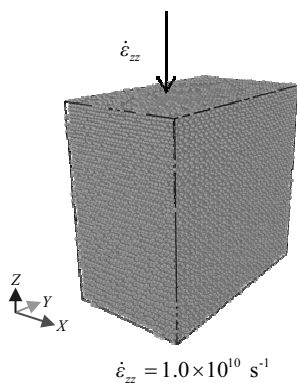


图 2 镁单晶单轴压缩模型

Fig.2 Uniaxial compression model of magnesium single crystal

采用 Lammmps 程序完成分子动力学计算后，使用 Ovito 软件对输出文件进行可视化处理。在可视化过程中，分别采用中心原子对参数分析、共近邻分析、径向分布函数计算和原子抽取算法对分子动力学模拟数据进行进一步分析，以探究双孔洞排布位置对 *c* 轴压缩镁单晶塑性变形的影响。

## 2 模拟结果分析

### 2.1 双孔洞排布位置对镁单晶压缩应力-应变的影响

图 3 为双纳米孔洞不同排布位置应力-应变关系曲线。由图 3 可以看出，应力应变曲线经历了弹性变形阶段-塑性变形阶段-稳定阶段。在弹性变形阶段，应力应变曲线呈线性增高趋势，此时晶体结构中原本点阵排列状态基本保持不变，只有极少数原子偏离原始位置。纳米孔洞排布位置的不同应变时对镁单晶模型弹性模量影响较小，这说明双孔洞排布位置的不同对弹性变形基本没有影响。随着变形程度的增加，双孔洞镁单晶模型进入塑性变形阶段，原子金属键发生断裂并偏离原始点阵位置。双孔洞镁单晶在与加载方向平行时可承受的压应力峰值和对应的应变程度最大；与加载方向垂直时可承受的压应力峰值和对应的应变程度均次之，当与加载方向呈 45°排布时可承受的压应力峰值和对应的应变程度最小。

当应变为 8%时，与 *c* 轴平行排布的双孔洞镁单晶模型达到屈服点，屈服强度为 5.81 GPa；当应变为 6.9%时，与 *c* 轴呈 45°排布的双孔洞镁单晶模型达到屈服点，屈服强度为 4.85 GPa；当应变为 7%时，与 *c* 轴垂直排布的双孔洞镁单晶模型达到屈服点，屈服强度为 5.39 GPa。这说明双孔洞与压缩方向 *c* 轴平行排布受到的影响最小，与 *c* 轴垂直排布次之，与 *c* 轴呈 45°排布受影响最大。在稳定阶段，双孔洞排布与 *c* 轴垂

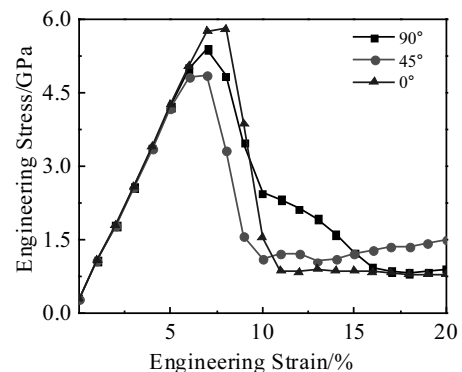


图 3 不同双孔洞排布位置镁单晶应力应变曲线

Fig.3 Stress-strain curves of magnesium single crystal with two voids at different positions

直的镁单晶的应力值没有像其他排布方式线性下降至稳定值，其下降速率经过一段先减小后增大的过程缓慢至稳定值。双孔洞排布与 *c* 轴呈 45° 的镁单晶的应力值在稳定阶段依然有小幅升高，这说明该种排布形式的塑性变形能力较高。

### 2.2 双孔洞排布位置对镁单晶压缩势能-应变的影响

图 4 为不同孔洞排布方式的势能和应变关系曲线。由图 4 可知，双孔洞不同排布位置下势能在前期一致，随着应变增大先快速上升，后上升速率变慢，逐渐升高到最大值之后小幅度下降，最后达到稳定。这是因为在弹性阶段，由于外力的压缩作用使得原子平均间距减小，故而系统势能逐渐增大；在塑形阶段，塑性变形的发生使得晶体在弹性变形阶段所积累的能量得到释放，从而使系统势能逐渐下降直至稳定。

当双孔洞半径与 *c* 轴呈 45° 排布时，势能在变形程度为 10% 处达到最大，其值为  $-1.5304 \times 10^5$  eV；当双孔洞半径与 *c* 轴呈 90° 排布时，势能在变形程度为 14% 处达到最大，其值为  $-1.5194 \times 10^5$  eV；当双孔洞半径与 *c* 轴呈 0° 排布时，势能在变形程度为 9% 处达到最大，其值为  $-1.5192 \times 10^5$  eV。与 *c* 轴呈 45° 排布的双孔洞镁单晶模型势能峰值最小；与 *c* 轴呈 90° 排布的次之，但达到峰值的应变最大；与 *c* 轴呈 0° 排布的势能峰值最大，达到峰值的应变最小。

图 5 为双孔洞排布位置势能-应变图。使用共近邻

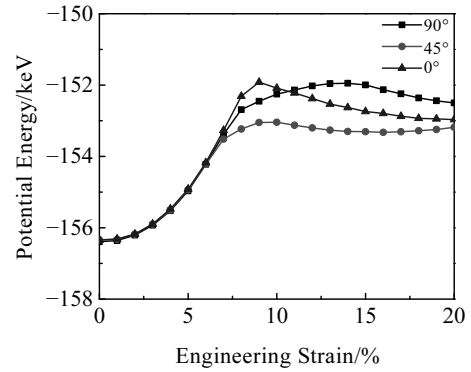


图 4 不同双孔洞排布位置镁单晶的势能应变曲线

Fig.4 Potential energy-strain curves of magnesium single crystal with two voids at different positions

分析 (CNA) 识别标注配位数不同的原子，删除配位数为 12 的完美密排六方镁原子，预制孔洞表面原子与相邻原子之间存在断键，因此其配位数与模型其他原子不同，故而在弛豫结束且压缩未开始时系统势能大小对其着色，再沿 (100) 将模型切开以观察内部结构，可以直观观察到预制孔洞的演化过程。从 3 组图变化趋势可知，孔洞周围排布的原子势能较高，位错首先在孔洞附近形核，随着应变量增加，孔洞逐渐塌缩。由于原子重排产生的非完美密排六方结构原子具有的

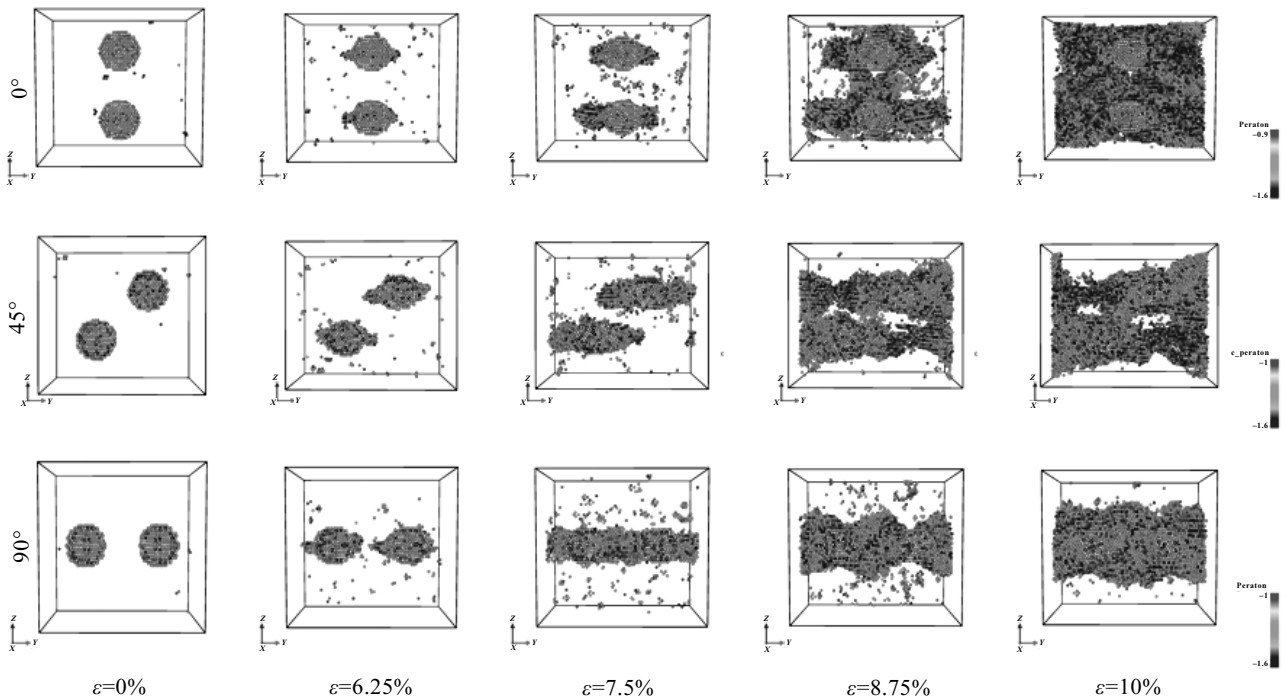


图 5 双孔洞排布位置势能-应变图

Fig.5 Potential energy-strain diagrams of double voids arrangement positions

原子势能依然比孔洞附近的原子势能低。

### 2.3 共近邻分析

采用 Ovito 软件中的自适应公共近邻分析法对原子进行可视化,用不同颜色分别标注配位数不同的原子,以观察系统的晶体结构变化,如图 6 所示。红色代表完整的密排六方结构(hcp)原子;灰色代表表面及未能识别的未知结构原子,设定为 Other;蓝色代表体心立方结构(bcc)原子,绿色代表面心立方结构(fcc)原子。图 6 为共邻分析(CNA)对变形纳米晶微结构的表征图。由图 6 可以看出,在孔洞中心连线方向附近产生大量空位。当应变量达到 7.5%时,与  $c$  轴呈  $0^\circ$  排布和与  $c$  轴呈  $90^\circ$  排布的镁单晶模型还未发生明显原子结构改变,而与  $c$  轴呈  $45^\circ$  排布的镁单晶模型,其初始 hcp 结构中的(0001)晶面已发生相对滑移而形成堆垛层错。当应变量达到 10%时,与  $c$  轴呈  $0^\circ$  排布的模型双孔洞周边原子已经在压缩作用下开始发生原子点阵结构偏离;与  $c$  轴呈  $45^\circ$  排布的模型孔洞塌缩明显,发生点阵结构偏离的原子较多,且已经在(0001)面形成 fcc 原子层;与  $c$  轴呈  $90^\circ$  排布的模型双孔洞塌缩程度介于与  $c$  轴呈  $0^\circ$  排布和与  $c$  轴呈  $45^\circ$  排布模型之间。当应变量达到 17.5%时,与  $c$  轴呈  $90^\circ$  排布的模型双孔洞已经完全闭合,与  $c$  轴呈  $45^\circ$  排布的模型孔洞塌缩明显,与  $c$  轴呈  $0^\circ$  排布的模型双孔洞塌缩程度最小。这说明与  $c$  轴呈  $0^\circ$  排布的双孔洞镁单晶模型可承受的变形程度最大,与  $c$  轴呈  $90^\circ$  排布的

双孔洞镁单晶模型孔洞闭合速度最快。

统计双孔洞不同排布位置下 bcc、fcc、hcp、ico 和未知结构原子数量与应变的关系,将其绘制为不同孔洞半径原子结构数量图,如图 7。3 种镁单晶压缩模型中的 hcp 结构首先转变为未知结构,当应变量达到屈服强度后, bcc 和 fcc 结构开始出现。对比发现,双孔洞与  $c$  轴排布位置的角度越大, hcp 结构原子数目发生骤降的应变量越小且趋势越平缓。与  $c$  轴呈  $0^\circ$  排布的模型在压缩过程结束时 hcp 结构原子发生转变的数量最多;与  $c$  轴呈  $45^\circ$  排布的模型中,压缩过程结束时 hcp 结构原子发生转变的数量最少,且 hcp 仍然是数量最多的原子结构。

### 2.4 径向分布函数分析

径向分布函数分析是对晶体点阵结构的有序化程度进行表征的方法。图 8 为不同排布位置的径向分布函数图,分别抽取了应变量为 0%、7.5%、10%、12.5%、15%和 17.5%时的径向分布函数。从图 8 可以看出,双孔洞不同排布位置镁单晶模型在应变为 0%时,在远距离处仍然有明显曲线波动,均长程有序;随着变形程度的增加,远距离处曲线波动放缓;当达到最大屈服点对应的应变后的径向分布函数,在远距离处长程有序逐渐放缓甚至消失。与  $c$  轴呈  $45^\circ$  排布的镁单晶模型在应变增大时径向分布函数曲线波动幅度较其他 2 种排布方式的大,说明这种排布方式的塑性变形能力强。

随着模拟进行而应变量逐渐增大,双孔洞不同排布

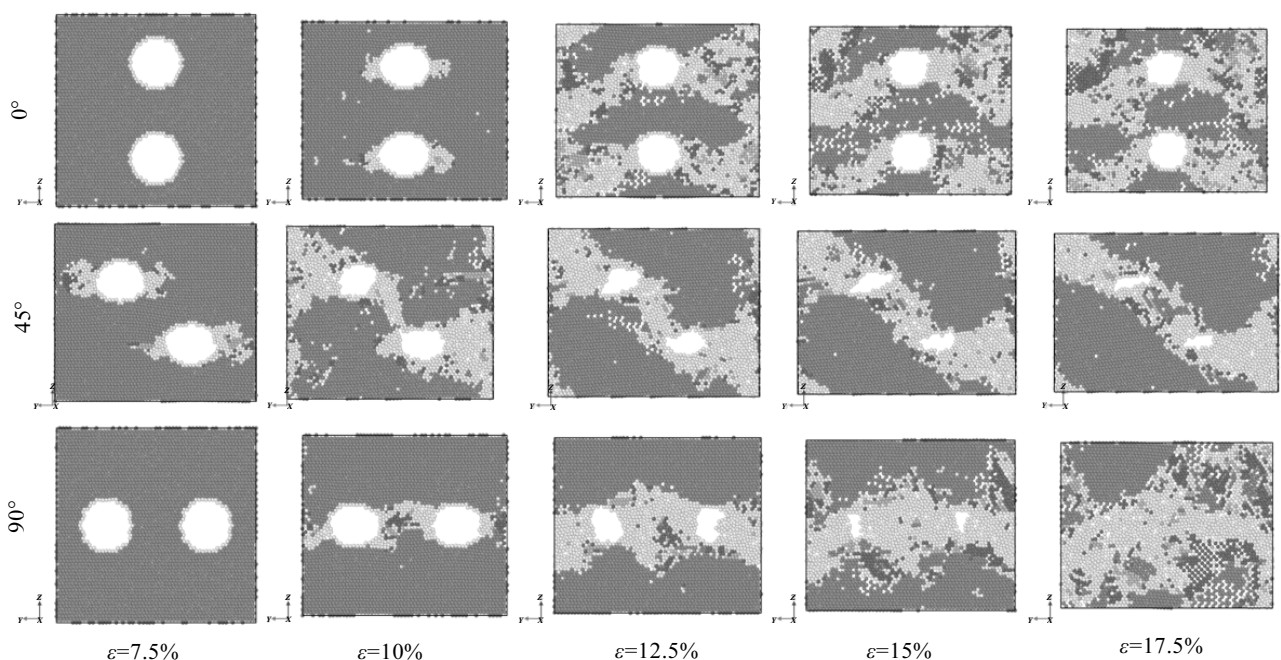


图 6 共邻分析(CNA)变形纳米晶微结构的表征

Fig.6 Characterization of microstructure of CNA deformed nanocrystals

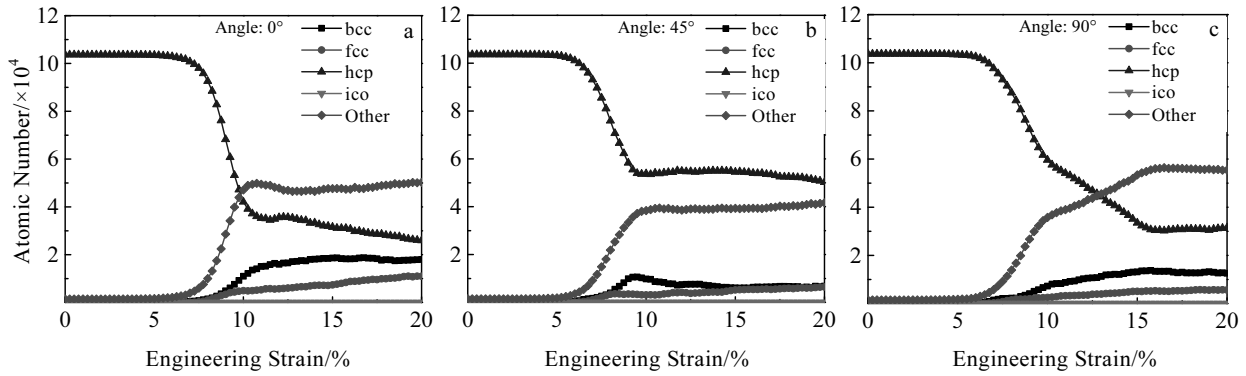


图 7 不同排布位置原子结构数量图

Fig.7 Number of atomic structure at different positions: (a) 0°, (b) 45°, and (c) 90°

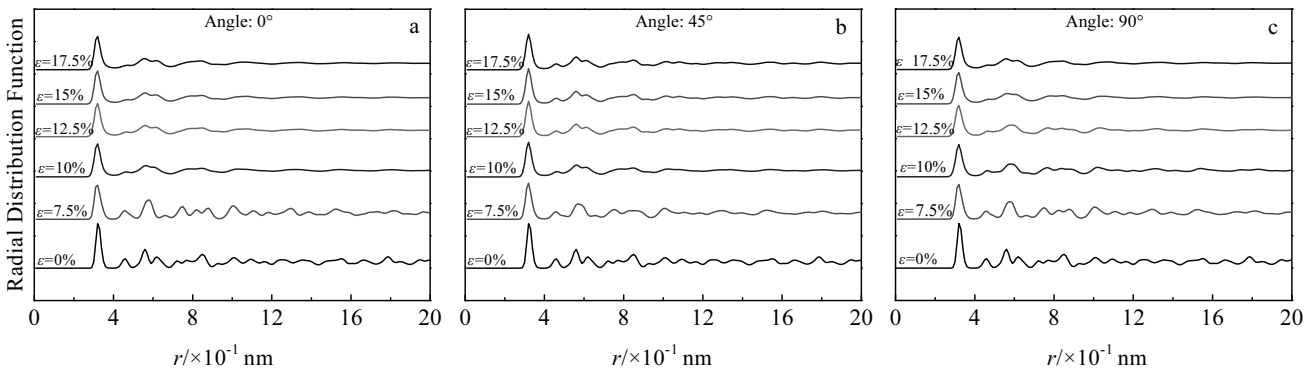


图 8 不同排布位置的径向分布函数图

Fig.8 Radial distribution function diagrams of different positions: (a) 0°, (b) 45°, and (c) 90°

位置的镁单晶模型第 1 峰值逐渐向左偏移，并且发生钝化，这是因为密排六方晶体结构的第 1 近邻原子在 0.290 nm 处，包含 12 个原子，第 2 近邻原子在 0.32 nm 处。由于振动偏移，2 个峰发生部分重叠而宽化。而随着变形程度的增加，原子发生相对位移，晶体结构逐渐转变成具有 8 个原子的体心立方结构，其第 1 近邻原子在 0.284 nm 处，由于配位数减小，第 1 峰高度降低，宽度增大。

### 2.5 位错分析

图 9 为不同排布位置双孔洞模型 DXA 位错分析可视化图，图中深蓝色代表未知位错，橙色代表  $1/3\langle 1\bar{1}00 \rangle$  位错，绿色代表  $1/3\langle 1\bar{2}10 \rangle$  位错，黄色代表  $1/3\langle 1\bar{2}13 \rangle$  位错，紫色代表  $\langle 1\bar{1}00 \rangle$  位错，浅蓝色代表  $\langle 0001 \rangle$  位错。由于图中位错线多而短，因此不对 Burgers 矢量进行标注。当应变量为 6.25% 时，与 *c* 轴呈 45° 和 90° 排布的镁单晶模型已经产生位错，而与 *c* 轴呈 0° 排布的镁单晶模型还未产生位错结构。当应变

量为 7.5% 时，3 种不同排布位置模型均产生位错，与 *c* 轴呈 45° 排布的镁单晶模型产生的位错明显最多，而且位错类型中包括  $1/3\langle 1\bar{1}00 \rangle$  位错和  $1/3\langle 1\bar{2}10 \rangle$  位错。随着变形程度增大，位错密度逐渐增高，但在变形程度为 8.75% 时，与 *c* 轴平行排布的模型位错数量骤然增多甚至超过与 *c* 轴呈 45° 排布的镁单晶模型产生的位错数量。

图 10 是不同排布位置双孔洞模型位错密度。综合分析可知，与 *c* 轴呈 45° 排布的模型最先产生位错，在高形变率载荷下，位错密度持续增大，塑性变形前期晶体中的位错几乎全部为可动位错，随着应变继续增大可动位错密度开始下降，这是由于位错的积累而形成的位错林对位错运动起到阻碍的作用。与 *c* 轴呈 0° 排布的模型第一位错发生较其他 2 种模型晚，达到第 1 峰值后波动下降，但稳定趋势较与变形方向呈 45° 排布模型的位错密度更大。与 *c* 轴呈 90° 排布的模型第 1 峰值位错密度远小于另外 2 种模型。这说明与 *c*

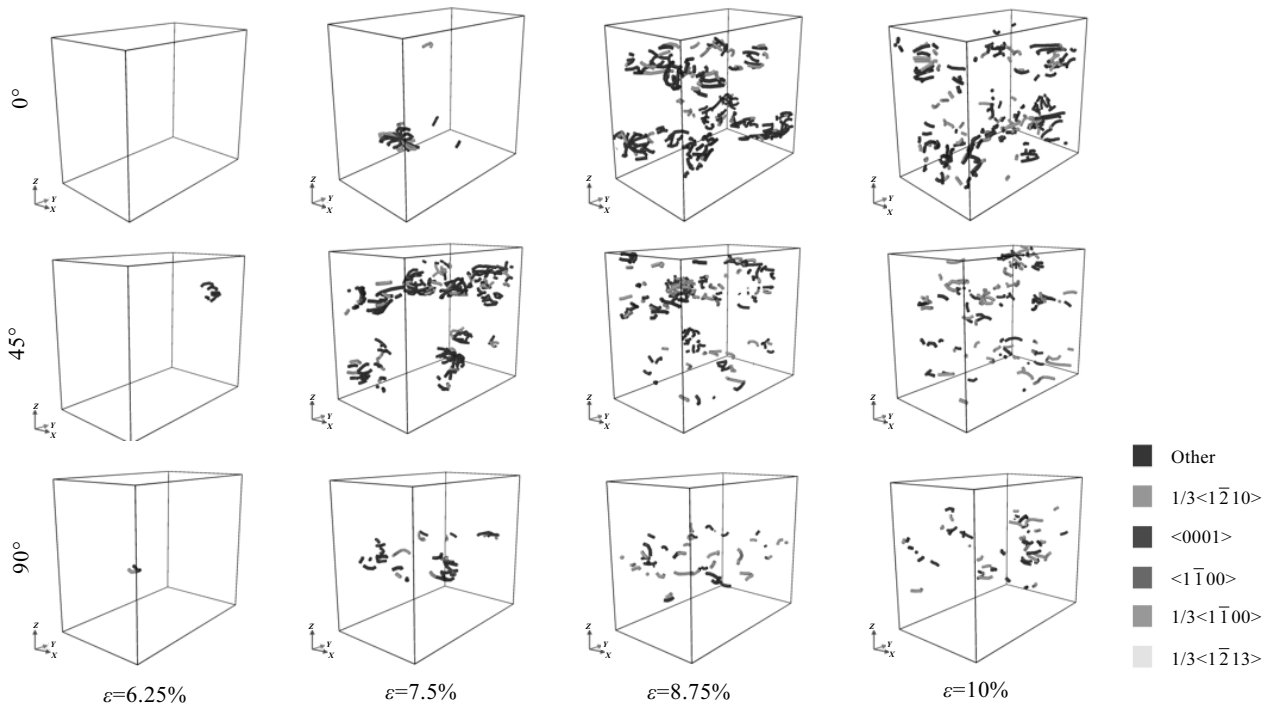


图 9 不同排布位置双孔洞模型位错分析可视化图

Fig.9 Visualization diagrams of dislocation analysis of two void model with different arrangement positions

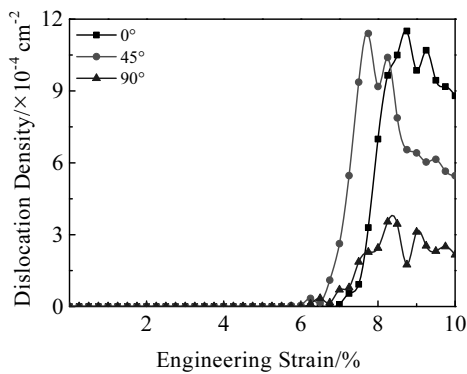


图 10 不同排布位置双孔洞模型位错密度

Fig.10 Dislocation density of two void model at different positions

轴呈 0°排布的模型在相同应变条件下，可承受的塑性变形程度最大。

### 3 结 论

1) 双孔洞排布位置对镁单晶晶体塑性行为尤其是屈服强度影响的区别较为明显，应力-应变曲线及径向分布函数曲线分析均说明双孔洞镁单晶在与加载方向平行时可承受的压应力峰值和对应的应变程度最

大；与加载方向垂直时可承受的压应力峰值和对应的应变程度均次之，当与加载方向呈 45°排布时可承受的压应力峰值和对应的应变程度最小。

2) 与  $c$  轴呈 45°排布的双孔洞镁单晶模型势能峰值最小；与  $c$  轴呈 90°排布的次之，但达到峰值的应变最大；与  $c$  轴呈 0°排布的势能峰值最大，达到峰值的应变最小。

3) 采用共近邻分析法可知，与  $c$  轴呈 0°排布的双孔洞镁单晶模型可承受的变形程度最大，与  $c$  轴呈 90°排布的双孔洞镁单晶模型孔洞闭合速率最快。

4) 根据位错分析可知，与  $c$  轴呈 0°排布的模型在相同应变条件下，可承受的塑性变形程度最大。

### 参考文献 References

[1] Feng Xinfeng(奉新锋). *Thesis for Master Degree*(硕士论文) [D]. Xiangtan: Xiangtan University, 2016

[2] Agarwal G, Dongare A M. *Computational Materials Science*[J], 2018, 145: 68

[3] Zhai J, Song X, Xu A *et al. Metals and Materials International* [J], 2019, 12: 21

[4] Tang T, Kim S, Horstemeyer M F. *Acta Materialia*[J], 2010, 58(14): 4742

[5] Zhao Pengyue(赵鹏越), Guo Yongbo(郭永博), Bai Qingshun

- (白清顺) *et al. Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2018, 54(7): 1051
- [6] Wang Yuntian(王云天), Zeng Xiangguo(曾祥国), Yang Xin(杨鑫). *Acta Physica Sinica*(物理学报)[J], 2019, 68(24): 246102
- [7] Yang Biao(杨彪), Zheng Bailin(郑百林), Hu Xingjian(胡兴健) *et al. Acta Metallurgica Sinica*[J], 2016, 52(2): 129
- [8] Liang Hua(梁华). *Thesis for Master Degree*(硕士论文)[D]. Mianyang: China Academy of Engineering Physics, 2018
- [9] Wu Minjie, Hu Xiaomian. *Acta Physica Sinica*[J], 2015, 64(17): 1
- [10] Zhao Yanhong(赵艳红), Li Yingjun(李英骏), Yang Zhian(杨志安) *et al. Chinese Journal of Computational Physics*(计算物理)[J], 2006(3): 95
- [11] Wilson S R, Mendeleev M I. *The Journal of Chemical Physics* [J], 2016, 144(14): 144 707
- [12] Sun D Y, Mendeleev M I, Becker C A *et al. Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*[J], 2006, 73(2): 024116

## Influence of the Arrangement of Double Voids on the $c$ -Axis Compressed Magnesium Single Crystal

Wang Huanzhu<sup>1</sup>, Xue Chun<sup>1</sup>, Yang Qianhua<sup>1</sup>, Gui Hailian<sup>1</sup>, Li Yugui<sup>1</sup>, Chu Zhibing<sup>1,2</sup>

(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)

**Abstract:** The molecular dynamics method was used to simulate the  $c$ -axis compression model of two voids single crystal magnesium with different arrangement positions at 300 K. Combined with the stress-strain curve, potential energy curve, radial distribution function and dislocation density curve of the three models, the compression mechanical properties and structural evolution process were analyzed. The results show that the maximum compressive stress, peak potential energy and corresponding strain can be tolerated when the single crystal is parallel to the loading direction, the second is perpendicular to the loading direction, and the smallest is 45° arrangement with the loading direction. The double void model with 90° arrangement with  $c$  axis has the fastest voids closure rate.

**Key words:** molecular dynamics; double voids; compression; arrangement position; loading direction

---

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: piegen@126.com