

纳米多晶镁在不同条件下压缩的分子动力学模拟

杨千华¹, 薛 春¹, 楚志兵¹, 李玉贵¹, 马立峰²

(1. 太原科技大学 材料科学与工程学院, 山西 太原 030024)

(2. 太原科技大学 机械工程学院, 山西 太原 030024)

摘 要: 为设计和开发具有优异力学性能的镁基纳米结构合金, 本研究利用 Voronoi 几何方法构造了晶粒随机取向的纳米多晶镁模型, 利用分子动力学软件实现了不同条件下纳米多晶镁的压缩模拟, 借助可视化软件对模拟结果进行了相关分析。结果表明: 随着温度升高, 晶粒由细化转变为融合长大; 压缩应变率影响晶粒细化的时间, 压缩应变率增大, 晶粒内部原子仍保持原有结构, 只有晶粒边缘处原子位置移动, 晶粒细化较晚发生, 屈服强度增大, 极限应变减小, 弹性模量增大; 纳米多晶镁中原子位置发生偏移, 更易形成 fcc 结构, 产生 Shockley 不全位错, Shockley 不全位错与 fcc 结构的生长规律呈正比例。

关键词: 纳米多晶镁; 分子动力学; 压缩变形; Shockley 不全位错

中图分类号: TG146.22

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2022)04-1293-11

纯金属镁(Mg)是地球上最轻的金属之一, 在地壳中分布丰富, 是结构轻量化的良好母材, 对于在航空航天及交通运输业中的应用具有重要意义^[1-5]。由于镁为密排六方(hcp)结构, 如图 1 所示, 有较少的滑移系, 其变形机制与面心立方金属不同, 这严重限制了它的应用^[6,7]。纳米晶金属和合金在研究中会表现出与粗晶金属和合金不同的特征机械性能, 与粗晶多晶材料相比, 纳米晶材料表现出更高的强度、硬度和韧性。因此, 纳米结构是提高镁合金强度和塑性的有效途径^[8-13]。近几十年来, 计算能力得到极大提高, 分子动力学模拟作为一种新的计算材料手段, 已成功用于研究晶格畸变、晶粒生长、变形等方面^[14-18]。但很少有学者以此研究纳米晶 Mg 的强度和变形机制^[19]。

葛佳琪等人^[20]在 200~300 °C 温度下对纯镁挤压后发现材料的晶粒尺寸由应变速率和温度决定, 纯镁在 225 °C 挤压后晶粒内部存在较多的基面位错, 同时也存在<c+a>非基面位错。左代等人^[21]研究了纯镁在不同条件下拉伸的力学行为及微观组织演变, 发现: 峰值应力随拉伸温度的升高和应变速率的降低而下降。Zeng 等人^[22]发现细晶 Mg 滑动产生的变形由滑动晶粒之间的晶粒旋转来调节, 晶粒中的位错滑向晶界, 并在晶界处湮灭。Xie 等人^[23]发现在室温下沿 c 轴压缩的镁单晶中主要的滑移方式是锥形滑移。Wang 等人^[24]在不同应变速

率下压缩纳米晶镁的试验中发现, 纳米晶镁优异的压塑性主要来源于晶界主导的变形机制和主位错滑移。Ono^[25]等人发现了在 77~523 K 温度区间变形的多晶镁符合 Hall-Petch 关系, 多晶镁的屈服应力随温度的升高而减小, 在室温下, 镁合金的塑性变形以非基面滑移为主。Li^[26]对多晶镁在不同应变速率下的压缩动态力学性能进行了研究, 并对其微观组织进行了表征, 发现屈服强度对应变速率不敏感。Hasan 等人^[27]采用经典分子动力学(MD)模拟方法研究了纳米晶镁的单轴拉伸变形, 在较大晶粒尺寸的样品中, 观察到位错主导的变形, 而在较小晶粒尺寸的样品中, 观察到晶界滑移、晶界旋转等基于晶界的机制。亓宏刚^[28]采用分子动力学方法研究了在不同温度下单轴压缩镁单晶的微观变形机制及微结构演化行为, 发现: 压缩时最主要的变形机制不是通常认为的压缩孪晶, 而是<c+a>型锥面滑移。

综上所述, 发现鲜有学者利用分子动力学方法来系统研究压缩条件对纳米多晶镁的影响。因此, 本研究利用 Voronoi 几何方法构造了随机晶粒取向的纳米多晶镁(nano polycrystalline Mg, NPC Mg), 利用 LAMMPS 实现了不同条件下 NPC Mg 的压缩模拟, 借助 OVITO 可视化软件对模拟结果进行了相关分析, 揭示了 NPC Mg 的力学性质, 为设计和开发具有优异力学性能的镁基纳米结构合金提供了理论依据, 为今后高性能镁基纳米晶合

收稿日期: 2021-04-29

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); 山西省优秀青年基金(201901D211312); 山西省高等学校科技成果转化培育项目(2019KJ028); 山西省研究生教育创新计划(2019SY482)

作者简介: 杨千华, 男, 1997 年生, 硕士生, 太原科技大学材料科学与工程学院, 山西 太原 030024, E-mail: s20190347@stu.tyust.edu.cn

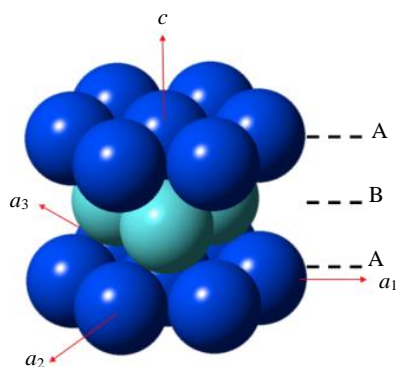


图 1 镁的 hcp 结构与堆积顺序

Fig.1 hcp structure of magnesium and stacking order^[20]

金的开发提供了必要的基础知识。

1 仿真过程

势函数是描述体系粒子总能量 E 与粒子坐标 (r) 的数学函数形式^[29-32]。在本次分子动力学模拟中,一般使用嵌入原子方法(EAM)势计算金属和金属合金的成对相互作用:

$$E_i = F_\alpha \left(\sum_{j \neq i} \rho_j (\gamma_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{\alpha\beta} (\gamma_{ij}) \quad (1)$$

式中, E_i 为原子 i 的总能量, F 为嵌入能量, 是原子电子密度 ρ 的函数, γ 为原子 i 和 j 的原子间距, ϕ 为一对电位相互作用, α 、 β 为原子 i 和 j 的元素类型。

利用 AtomsK 软件^[33]构造随机晶粒取向的 NPC Mg, 模型初始尺寸为 19.26 nm×22.2395 nm×20.84 nm, 包含 20 个初始晶粒, 原子数为 384 020。设置 X 轴、 Y 轴、 Z 轴分别对应晶向 $[\bar{1}2\bar{1}0]$ 、 $[\bar{1}010]$ 、 $[0001]$ 。将建立的 NPC Mg 编入 LAMMPS 中^[34], 设置 X 、 Y 、 Z 均为周期

性边界条件, 采用 NPT 系综, 设置加载方向为 Z 轴, 即 $[0001]$ 晶向。如图 2a 所示, 为探究温度对 NPC Mg 压缩变形的影响, 将 NPC Mg 先分别在不同温度下进行弛豫, 使能量达到平衡, 然后在相应温度下进行压缩变形, 设置压缩速度均为 0.01 s^{-1} , 运行 20 000 步, 最终变形达到 20%。如图 2b 所示, 为探究应变速率对 NPC Mg 压缩变形的影响, 将 NPC Mg 在 300 K 的温度下进行弛豫, 能量达到平衡后, 然后按照不同压缩速度进行压缩, 保证最终变形达到 20%。

2 模拟结果

将模拟所得的结果导入到可视化软件 OVITO 中, 利用其中的功能: common neighbor analysis (CNA)、dislocation analysis (DXA)、polyhedral template matching (PTM) 和 grain segmentation (GS) 进行分析。CNA 可以识别模型中各种晶体结构, 如面心立方 (fcc)、体心立方 (bcc)、密排六方 (hcp) 结构和 Other 结构, 即晶界 (grain boundary) 中的原子。DXA 可以确定每个位错的 Burgers 向量, 并标识位错交界处。GS 可以观察到模拟中的晶粒变化^[35-40]。

图 3 为不同压缩条件下 NPC Mg 的晶粒变化, 其中 $\varepsilon_{\text{UYS}}\%$ 为最大屈服强度处的应变。可以看出: 随着压缩量增大, NPC Mg 在压缩过程中发生晶粒细化。随着温度升高, 这种晶粒细化现象减弱。当温度达到 700 K 时, 随着压缩的进行, 出现晶粒的融合长大。

图 4 为不同压缩条件下 NPC Mg 的晶粒变化曲线。根据图 3a, 当温度低于 700 K 时, NPC Mg 在压缩过程中仍发生晶粒细化, 且随着温度升高, 晶粒细化减弱; 当温度超过 700 K, NPC Mg 在压缩过程中晶粒数目减少, 发生晶粒融合长大。温度升高, 引起 NPC Mg 中晶界处原子数目增加, 原子动能增加, 晶界逐渐融合,

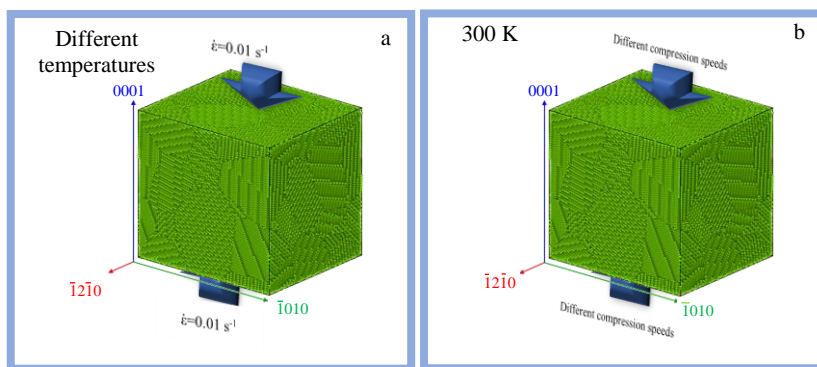


图 2 不同温度和不同压缩应变率下的分子动力学模拟示意图

Fig.2 Schematic diagrams of molecular dynamics simulation at different temperatures (a) and different compression strain rates (b)

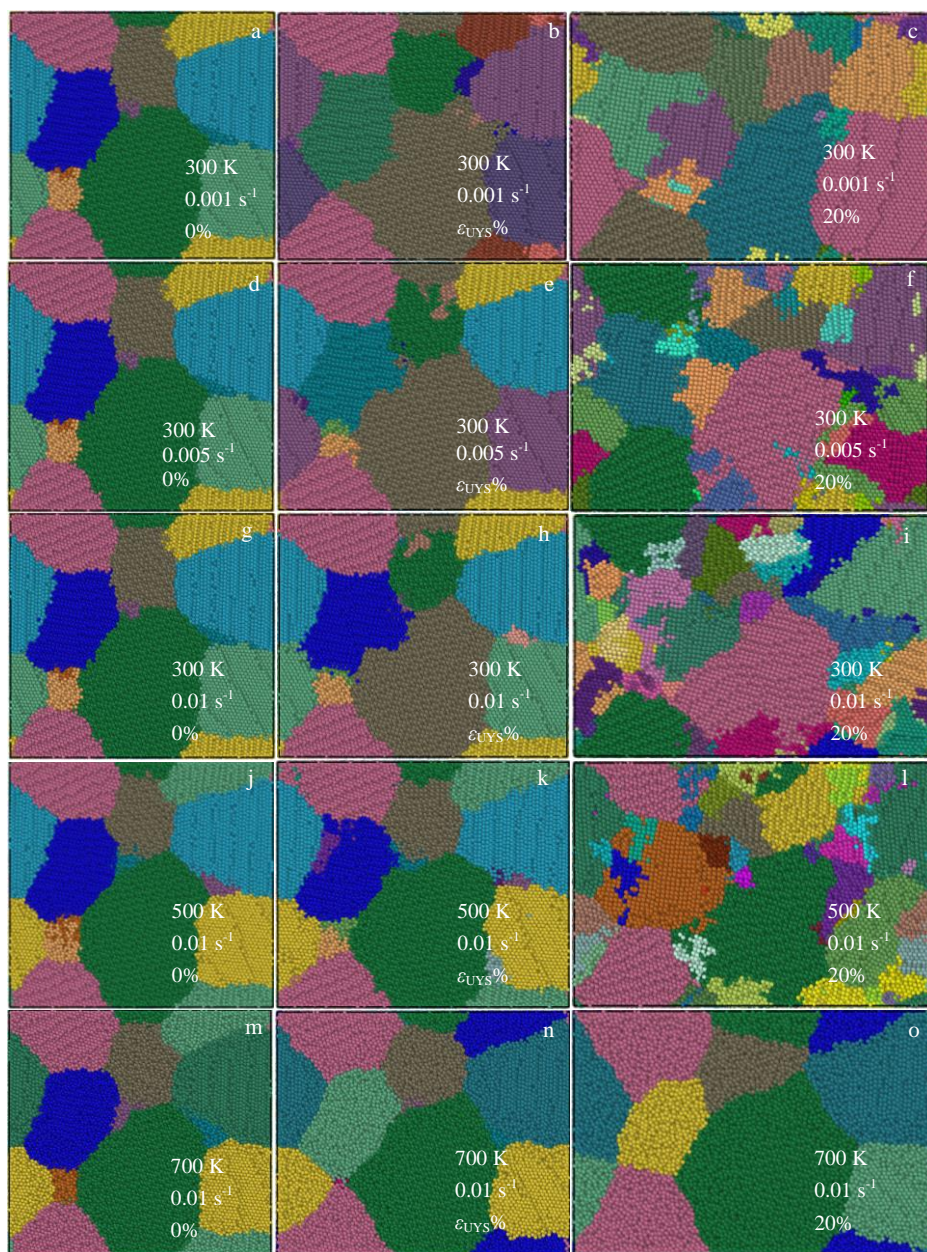


图 3 不同压缩条件下 NPC Mg 的晶粒变化

Fig.3 Grain change of NPC Mg under different compression conditions

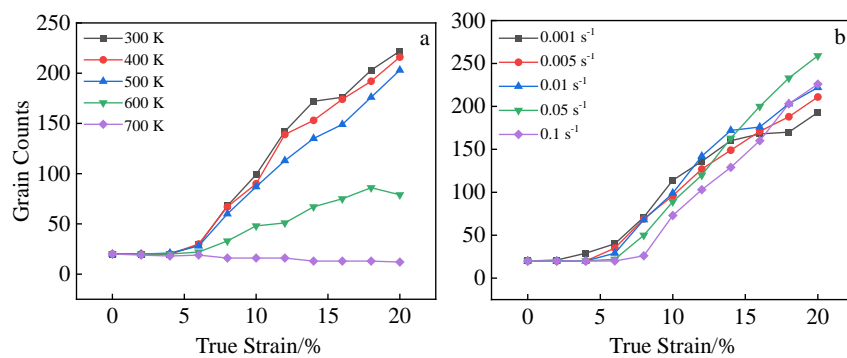


图 4 不同压缩条件下 NPC Mg 的晶粒变化曲线

Fig.4 Grain change curves of NPC Mg at different temperatures (a) and compression strain rates (b)

晶粒数目减少, 因此温度影响晶粒的变化形式。根据图 3b, 随着压下量增大, NPC Mg 的晶粒数目增加, 晶粒细化, 且晶粒细化开始的时间随着压缩应变率增大而延迟, 说明压缩应变率影响发生晶粒细化的时间, 压缩应变率越大, 晶粒细化越晚发生。

3 分析与讨论

3.1 温度的影响

图 5a 为不同温度下压缩 NPC Mg 的真应力-真应变

曲线, 图 5b 为极限应变(ϵ_{UYS})与屈服强度随温度变化的曲线, 图 5c 为势能与动能随温度变化的曲线, 可以看出: 随着温度升高, NPC Mg 的屈服强度降低, 极限应变增大, 弹性模量降低。这是因为随着温度升高, NPC Mg 中原子动能增加, 势能减小, 晶界处原子数量增多, 原子结构发生转变, 压缩时的屈服应力减小, 弹性模量降低。

图 6 为不同温度下压缩 NPC Mg 的原子结构识别结果, 其中红色原子呈 hcp 结构, 绿色原子呈 fcc 结构, 蓝

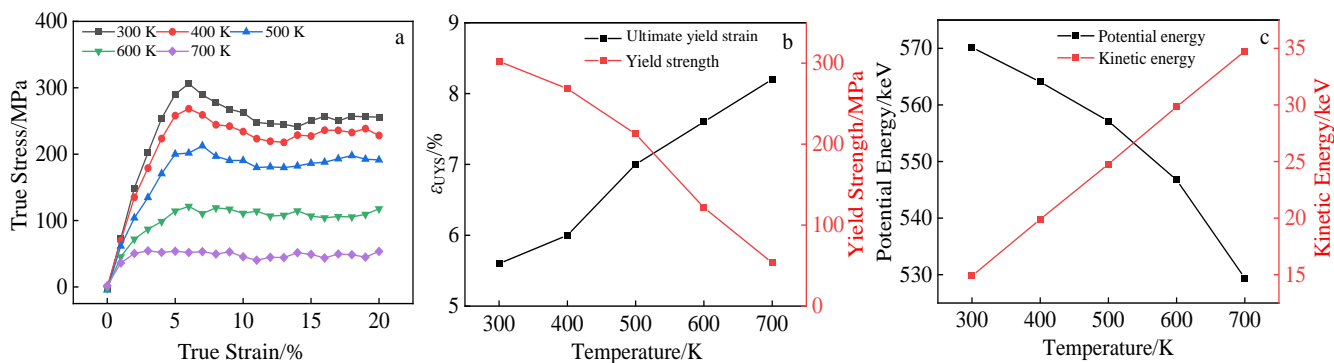


图 5 不同温度下压缩 NPC Mg 的力能曲线

Fig.5 Force energy curves of compressed NPC Mg at different temperatures: (a) true stress-true strain curves, (b) curves of ultimate yield strain and yield strength as a function of temperature, and (c) curves of potential energy and kinetic energy as a function of temperature

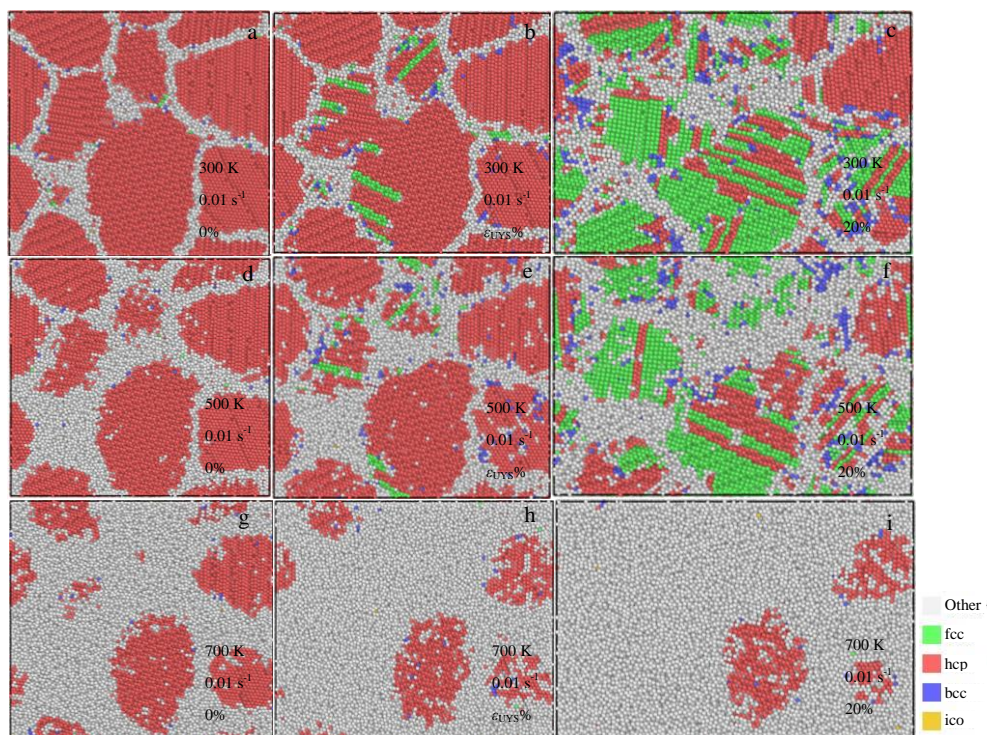


图 6 不同温度下压缩 NPC Mg 的 CNA 结果

Fig.6 CNA results of compressed NPC Mg at different temperatures: (a~c) $T=300$ K, (d~f) $T=500$ K, and (g~i) $T=700$ K

色原子呈 bcc 结构, 黄色原子呈 ico 结构, 白色原子呈 Other 结构。可以看出: 随着压缩量增大, NPC Mg 中的原子受到挤压, 位置发生变化, 部分 hcp 结构转变成 fcc 结构、bcc 结构和 Other 结构。根据图 5b, fcc 结构在晶界处形核, 逐渐向晶粒内部延伸, 压缩量达到 20% 时, fcc 结构的数量已经相当多。随着温度升高, NPC Mg 中原子的动能增加, 原子位置发生变化, 结构转变成 Other 结构, 晶界扩大。在压缩过程中, fcc 结构的转变被抑制, 晶粒不再细化, 发生融合长大。

图 7 为不同温度下压缩 NPC Mg 的原子结构分数变化的曲线, GI atoms 表示晶粒内部(grain interior)原子, GB atoms 表示晶界(grain boundary)原子。随着温度升高, 晶界处原子数量增多, 原子结构在弛豫过程中已经发生了 hcp 结构→Other 结构的转变, 温度越高, 这种转变越剧烈。随着压缩量的增加, hcp 结构逐渐转化成 fcc 结构和 Other 结构, 但温度越高, hcp 结构转化成 fcc 结构越少, Other 结构越多, 说明温度对晶界影响明显, 温度越高, 晶界扩散越快。

图 8 为不同温度下压缩 NPC Mg 的位错线分布, 图 9 为不同温度下压缩 NPC Mg 的位错密度变化曲线。随着压缩量增加, 模型中位错线数量增多, 位错线长度增加, 位错密度增大。随着温度升高, 晶粒细化减弱, 压缩过程中产生的位错线减少, 位错密度降低。当温度达到 700 K 时, 晶界扩散, 晶粒融合, NPC Mg 中几乎已经不产生位错。根据图 9 发现, NPC Mg 中除了 Other 位错(一些不常见位错)外, 密度变化最大的位错为

$1/3 \langle \bar{1}100 \rangle$ 位错(Shockley 不全位错)^[41]。通过与图 7 对比发现, NPC Mg 中出现 fcc 结构时, 恰好 $1/3 \langle \bar{1}100 \rangle$ 位错(Shockley 不全位错)也开始增加, 因此可以推断镁原子受到压缩时, 晶体结构更容易由 hcp 转变成 fcc, 此时由于原子位置发生变化, 形成了 $1/3 \langle \bar{1}100 \rangle$ 位错(Shockley 不全位错)。

3.2 压缩应变率的影响

图 10a 为不同压缩应变率下 NPC Mg 的真应力-真应变曲线, 图 10b 为极限应变(ε_{UYS})与屈服强度随压缩应变率变化的曲线, 图 10c 为势能与动能随压缩应变率变化的曲线, 随着压缩应变率增大, NPC Mg 的晶粒细化更加明显, 晶粒数目增加, 晶界增多, 屈服强度增大, 极限应变减小, 弹性模量增大。但压缩应变率对势能和动能的影响很小, 因为压缩应变率越大, 只有少量原子位置发生变化, 部分原子仍保持原有结构, 故势能和动能未发生较大变化。

图 11 为不同压缩应变率下 NPC Mg 的原子结构识别结果, 可以看出: 随着压缩量增大, NPC Mg 中的原子受到挤压, 位置发生变化, 部分 hcp 结构转变成 fcc 结构、bcc 结构和 Other 结构。随着压缩应变率增大, 晶粒内部原子位置来不及发生改变, 仍保持原有的 hcp 结构, 晶粒边缘处的原子转变为 Other 结构, 使晶界扩大, 因此结构转变缓慢, 相同压缩量下 fcc 结构减少。

图 12 为不同压缩应变率下 NPC Mg 的原子结构分数变化的曲线。根据图 12a, 12b, 随着压缩应变率增大, 晶粒边缘处的原子发生移动, 构成晶界, GB 原子数量增加。

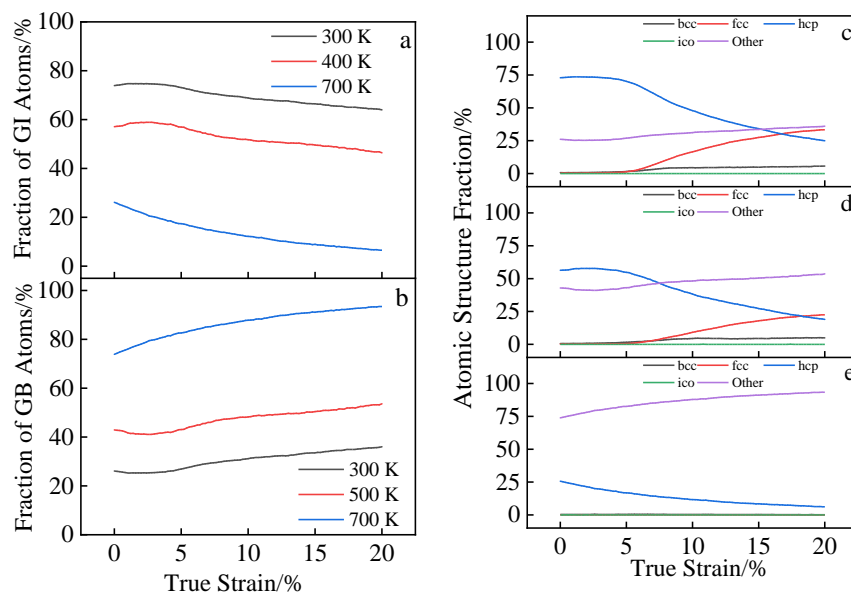


图 7 不同温度下压缩 NPC Mg 的原子结构变化曲线

Fig.7 Atomic structure change curves of compressed NPC Mg at different temperatures: (a) GI atoms, (b) GB atoms; (c) 300 K, (d) 500 K, and (e) 700 K

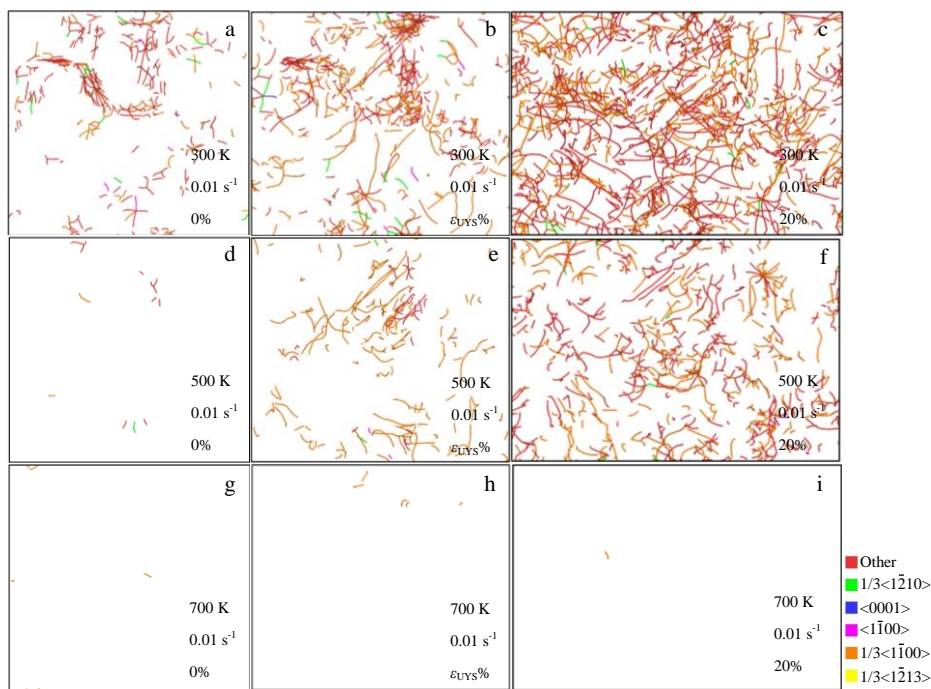


图 8 不同温度下压缩 NPC Mg 的位错线分布

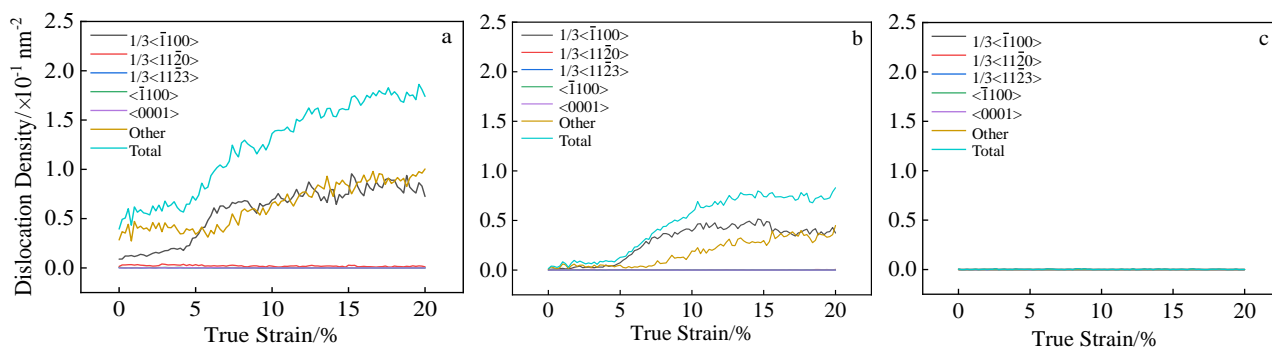
Fig.8 Dislocation line distribution of compressed NPC Mg at different temperatures: (a~c) $T=300$ K, (d~f) $T=500$ K, and (g~i) $T=700$ K

图 9 不同温度下压缩 NPC Mg 的位错密度变化曲线

Fig.9 Dislocation density curves of compressed NPC Mg at different temperatures: (a) 300 K, (b) 500 K, and (c) 700 K

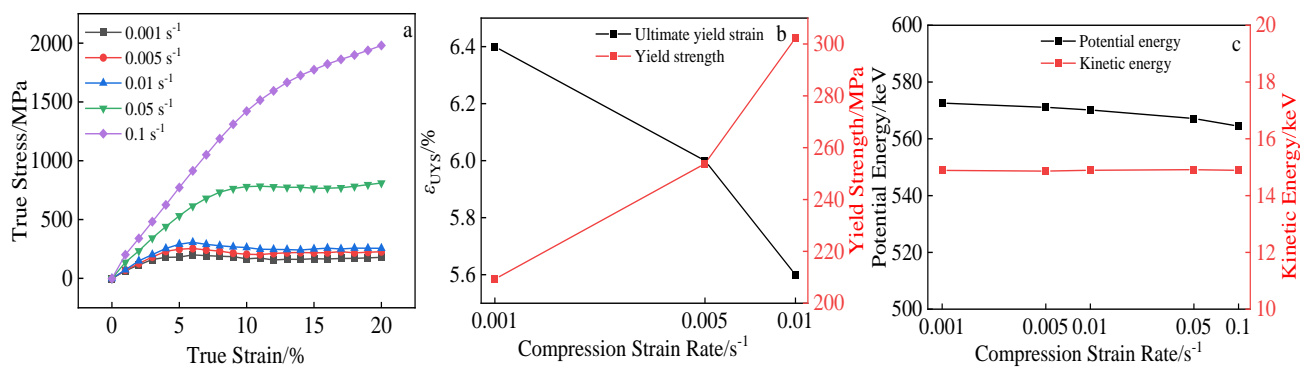


图 10 不同压缩应变率下 NPC Mg 的力学性能曲线

Fig.10 Mechanical property curves of NPC Mg at different compression strain rates: (a) true stress-true strain curves, (b) curves of ultimate yield strain and yield strength as a function of compression strain rates, and (c) curves of potential energy and kinetic energy as a function of compression strain rates

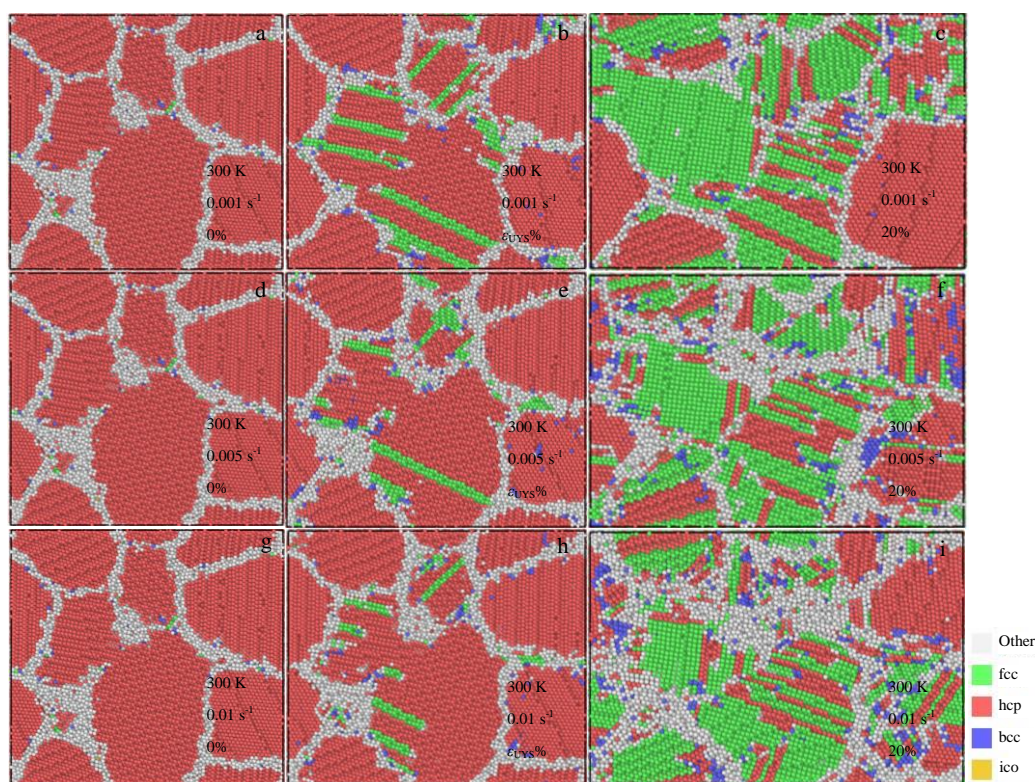


图 11 不同压缩应变率下 NPC Mg 的 CNA 结果

Fig.11 CNA results of compressed NPC Mg at different compression strain rates: (a~c) $\dot{\epsilon}=0.001 \text{ s}^{-1}$, (d~f) $\dot{\epsilon}=0.005 \text{ s}^{-1}$, and (g~i) $\dot{\epsilon}=0.01 \text{ s}^{-1}$

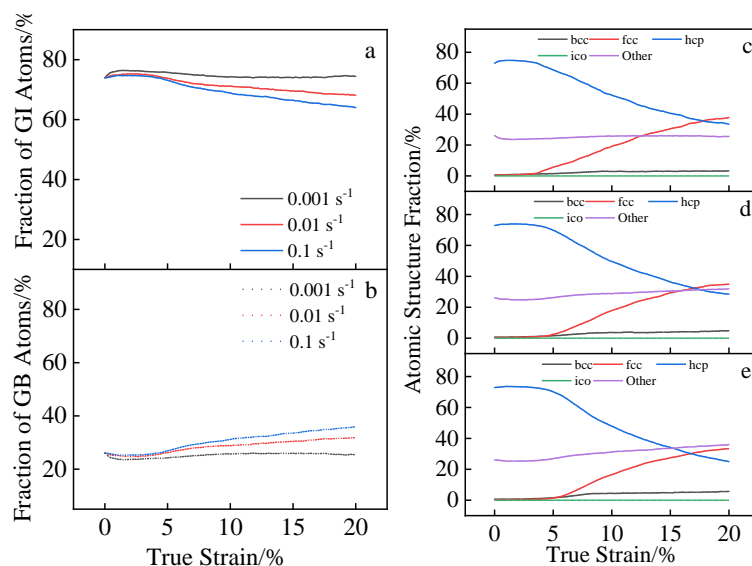


图 12 不同压缩应变率下 NPC Mg 的原子结构变化曲线

Fig.12 Atomic structure change curves of NPC Mg at different compression strain rates: (a) GI atoms, (b) GB atoms; (c) $\dot{\epsilon}=0.001 \text{ s}^{-1}$, (d) $\dot{\epsilon}=0.005 \text{ s}^{-1}$, and (e) $\dot{\epsilon}=0.01 \text{ s}^{-1}$

根据图 12c~12e, 随着压缩量的增加, hcp 结构逐渐转化成 fcc 结构和 Other 结构, 压缩应变率越大, 晶粒边缘处原子更易获得能量转化为 Other 结构, 晶粒内部原子

仍保持 hcp 结构, 很少转变成 fcc 结构。

图 13 为不同压缩应变率下 NPC Mg 的位错线分布, 图 14 为不同压缩应变率下 NPC Mg 的位错密度变化曲

线。随着压缩量增加,模型中位错线数量增多,位错线长度增加,位错密度增大。随着压缩应变率增大,晶粒边缘处的原子位置发生移动,晶粒变细,位错线长度减小,晶界原子数量增加,位错线数量增加,总位错密度减小。根据图 14 发现,NPC Mg 中除了 Other 位错外,密度变化最大的位错依然是 $1/3\langle\bar{1}100\rangle$ 位错(Shockley 不全位错)。通过与图 13 对比,Shockley 不全位错的增长规律与 fcc 结构仍然相同。

3.3 压缩过程中的 Shockley 不全位错与 fcc 结构

图 15 为不同变形条件下 Shockley 不全位错与 fcc 结构增长的曲线,可以明显看到,Shockley 不全位错与 fcc 结构的增长规律完全一致,即镁原子受到压缩,由原来的 hcp 结构转变为 fcc 结构,此时由于原子位置发生变化,形成 Shockley 不全位错。图 16 为不同变形条件下 Shockley 不全位错与 fcc 结构变化的分子动力学图示,可以发现 Shockley 不全位错一直在 fcc 结构原子周围,且由于原子位置发生变化,Shockley 不全位错向 fcc 结构增长的方向移动。

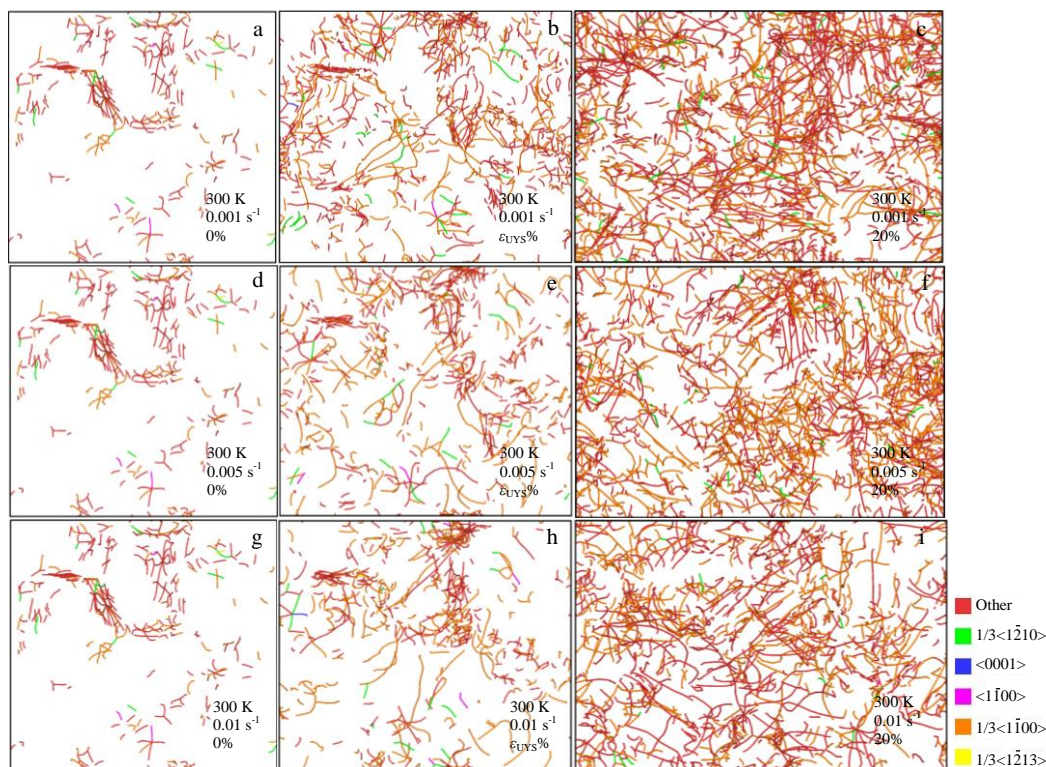


图 13 不同压缩应变率下 NPC Mg 的位错线分布

Fig.13 Dislocation line distribution of NPC Mg at different compression strain rates: (a~c) $\dot{\epsilon}=0.001\text{ s}^{-1}$, (d~f) $\dot{\epsilon}=0.005\text{ s}^{-1}$ and (g~i) $\dot{\epsilon}=0.01\text{ s}^{-1}$

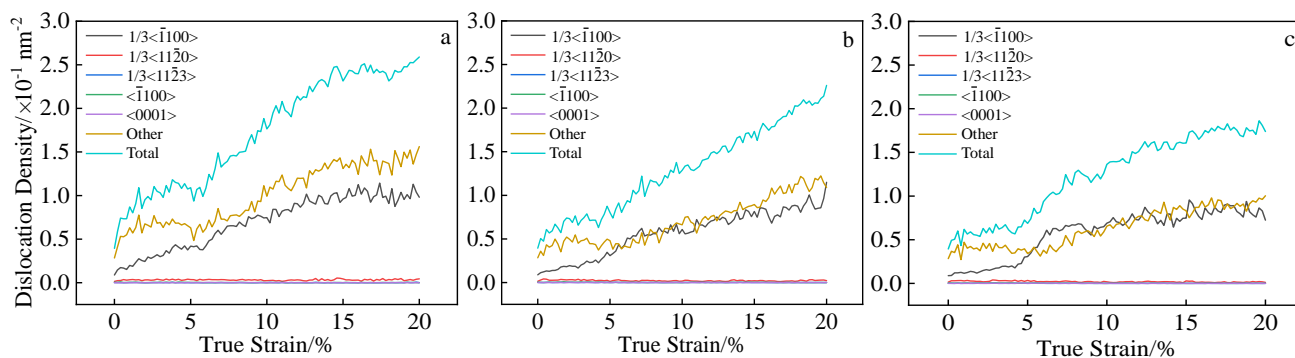


图 14 不同压缩应变率下 NPC Mg 的位错密度变化曲线

Fig.14 Dislocation density curves of NPC Mg at different compression strain rates: (a) $\dot{\epsilon}=0.001\text{ s}^{-1}$, (b) $\dot{\epsilon}=0.005\text{ s}^{-1}$, and (c) $\dot{\epsilon}=0.01\text{ s}^{-1}$

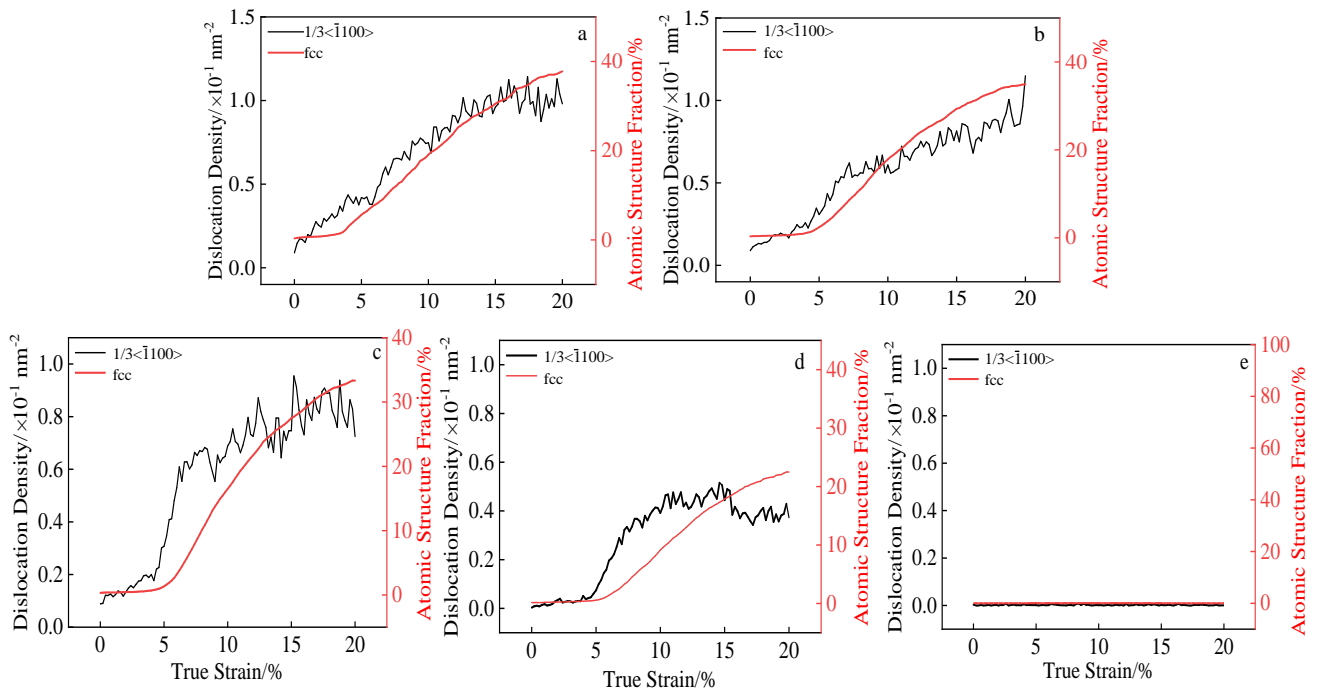


图 15 不同变形条件下 Shockley 不全位错与 fcc 结构曲线

Fig.15 Shockley incomplete dislocation and fcc structure curves under different deformation conditions: (a) $T=300\text{ K}$, $\dot{\epsilon}=0.001\text{ s}^{-1}$; (b) $T=300\text{ K}$, $\dot{\epsilon}=0.005\text{ s}^{-1}$; (c) $T=300\text{ K}$, $\dot{\epsilon}=0.01\text{ s}^{-1}$; (d) $T=500\text{ K}$, $\dot{\epsilon}=0.01\text{ s}^{-1}$; (e) $T=700\text{ K}$, $\dot{\epsilon}=0.01\text{ s}^{-1}$

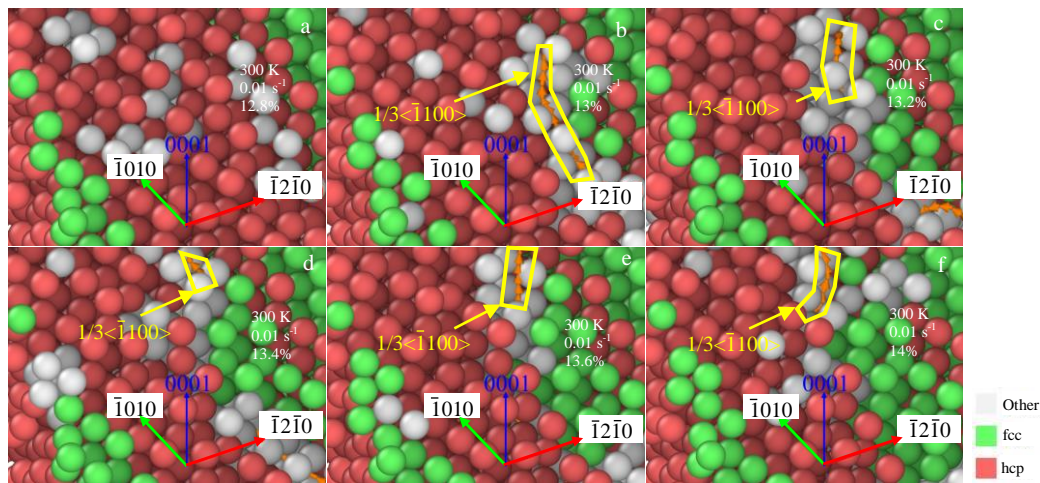


图 16 不同应变下 Shockley 不全位错与 fcc 结构的分子动力学图示

Fig.16 Molecular dynamics diagrams of Shockley incomplete dislocation and fcc structure under different strains: (a) 12.8%, (b) 13%, (c) 13.2%, (d) 13.4%, (e) 13.6%, and (f) 14%

4 结 论

1) 压缩过程中, 随着温度升高, 晶粒由细化转变为融合长大。原子动能增加, 原子结构由 hcp 结构向 fcc 结构的转变速率降低, 更多的转变成 Other 结构, 晶界处原子数目增加, 晶界扩散, 屈服应力减小, 弹性模量降低。

2) 压缩应变率增大, 晶粒内部原子仍保持原有结构, 晶粒边缘处原子位置移动, 晶界扩大, 晶粒细化越晚发生, 屈服强度增大, 极限应变减小, 弹性模量增大。

3) 压缩过程中, 纳米多晶镁中原子位置发生偏移, 更易形成 fcc 结构, 产生 Shockley 不全位错, Shockley 不全位错与 fcc 结构的增长规律呈正比例。

参考文献 References

- [1] Pollock Tresa M. *Science*[J], 2010, 328(5981): 986
- [2] Mordike B L, Ebert T. *Materials Science and Engineering A*[J], 2001, 302(1): 37
- [3] Xu Tiancai, Yang Yan, Peng Xiaodong *et al. Journal of Magnesium and Alloys*[J], 2019, 7(3): 536
- [4] Lu K. *Science*[J], 2010, 328(5976): 319
- [5] Zha Min, Zhang Hongmin, Yu Zhiyuan *et al. Journal of Materials Science and Technology*[J], 2018, 34(2): 257
- [6] Wang J, Hirth J P, Tomé C N. *Acta Materialia*[J], 2009, 57(18): 5521
- [7] Alaneme Kenneth Kanayo, Okotete Eloho Anita. *Journal of Magnesium and Alloys*[J], 2017, 5(4): 460
- [8] Gleiter H. *Acta Materialia*[J], 2000, 48(1): 1
- [9] Xu Wenwu, Song Xiaoyan, Lu Nianduan *et al. Acta Materialia*[J], 2010, 58(2): 396
- [10] Song Xiaoyan, Gao Yang, Liu Xuemei *et al. Acta Materialia*[J], 2013, 61(6): 2154
- [11] Suryanarayana C, Froes F H. *Materials Science and Engineering A*[J], 1994, 179-180: 108
- [12] Dong Y H, Chen I W. *Journal of the American Ceramic Society*[J], 2015, 98(8): 2333
- [13] Mahata Avik, Sikdar Koushik. *Journal of Magnesium and Alloys*[J], 2016, 4(1): 36
- [14] Zheng G P, Wang Y M, Li M. *Acta Materialia*[J], 2005, 53(14): 3893
- [15] Wu Xinghui(吴兴惠). *Course of Modern Material Calculation and Design*(现代材料计算与设计教程)[M]. Beijing: Electronic Industry Press, 2002
- [16] Wang Hui(王 慧), Hu Yuanzhong(胡元中), Zou Kun(邹 鲲) *et al. Scientia Sinica*(中国科学)[J], 2001, 31(3): 261
- [17] Jia Zhengming(郑正明), Yang Genqing(杨根庆), Cheng Zhaonian(程兆年) *et al. Acta Physica Sinica*(物理学报)[J], 1994, 43(4): 609
- [18] Zhang Daiyu(张岱宇), Liu Fusheng(刘福生), Li Xijun(李西军) *et al. Chinese Journal of High Pressure Physics*(高压物理学报)[J], 2003, 17(1): 16
- [19] Moitra Amitava. *Computational Materials Science*[J], 2013, 79: 247
- [20] Ge Jiaqi(葛佳琪), Yang Wenpeng(杨文朋), Wang Shimeng(王诗蒙) *et al. Nonferrous Metal Engineering*(有色金属工程)[J], 2019, 9(9): 99
- [21] Zuo Dai(左 代), Feng Yijun(冯壹君), Nie Huihui(聂慧慧) *et al. Hot Working Technology* (热加工工艺) [J], 2020, 49(22): 64
- [22] Zeng Zhuoran, Zhou Mengran, Lynch Peter *et al. Acta Materialia*[J], 2021, 206: 116 648
- [23] Xie Kelvin Y, Alam Zafir, Caffee Alexander *et al. Scripta Materialia*[J], 2016, 112: 75
- [24] Wang Xin, Jiang Lin, Zhang Dalong *et al. Materialia*[J], 2020, 11: 100 731
- [25] Ono N, Nowak R, Miura S. *Materials Letters*[J], 2004, 58(1-2): 39
- [26] Li Qizhen. *Materials Science and Engineering A*[J], 2012, 540: 130
- [27] Hasan Md Shahrier, Lee Rachell, Xu Wenwu. *Journal of Magnesium and Alloys*[J], 2020, 8(4): 1296
- [28] Qi Honggang(齐宏刚). *Thesis for Doctorate*(博士论文)[D]. Beijing: Beijing Jiaotong University, 2013
- [29] Xia Lu(夏 璐), Chen Yongtai(陈永泰), Wang Saibei(王塞北) *et al. Precious Metals*(贵金属)[J], 2013(4): 82
- [30] Caro A, Crowson D A, Caro M. *Physical Review Letters*[J], 2005, 95(7): 75 702
- [31] Stukowski Alexander, Sadigh Babak, Erhart Paul *et al. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2009, 17(7): 75 005
- [32] Zhou X W, Johnson R A, Wadley H N G. *Physical Review B*[J], 2004, 69(14): 144 113
- [33] Hirel Pierre. *Computer Physics Communications*[J], 2015, 197: 212
- [34] Plimpton Steve. *Journal of Computational Physics*[J], 1995, 117: 1
- [35] Stukowski Alexander. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2010, 18(1): 15 012
- [36] Larsen P M, Schmidt S, Schiøtz J. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2016, 24(5): 55 007
- [37] Polak W Z. *Computational Materials Science*[J], 2022, 201: 110 882
- [38] Panzarino Jason F, Rupert Timothy J. *JOM*[J], 2014, 66(3): 417
- [39] Stukowski Alexander, Bulatov Vasily V, Arsenlis Athanasios. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2012, 20(8): 85 007
- [40] Honeycutt J Dana, Andersen Hans C. *Journal of Physical Chemistry*[J], 1987, 91(19): 4950
- [41] Bergehezan A, Fourdeux A, Amelinckx S. *Acta Metallurgica*[J], 1961, 9(5): 464

Molecular Dynamics Simulation of Compression of Nanocrystalline Magnesium Under Different Conditions

Yang Qianhua¹, Xue Chun¹, Chu Zhibing¹, Li Yugui¹, Ma Lifeng²

(1. College of Materials Science and Engineering, Taiyuan University of Science and Technology, Taiyuan 030024, China)

(2. College of Mechanical Engineering, Taiyuan University of Science and Technology, Taiyuan 030024, China)

Abstract: To design and develop magnesium-based nanostructured alloys with excellent mechanical properties, a model of nanocrystalline magnesium with random grain orientation was constructed by the Voronoi geometry method. The compression simulation of nanocrystalline magnesium under different conditions was realized by molecular dynamics software. The simulation results were analysed by visualization software. The results show that with the increase of temperature, the grain size changes from refinement to fusion growth. The compression strain rate affects the time of grain refinement. With the increase of compression strain rate, the atoms in the grain still keep the original structure, only the atoms at the edge of the grain move, the grain refinement occurs later, the yield strength increases, the ultimate strain decreases, and the elastic modulus increases. The shift of atomic position in nano polycrystalline magnesium makes it easier to form fcc structure, resulting in Shockley incomplete dislocation, which is in positive proportion to the growth rule of fcc structure.

Key words: nanocrystalline magnesium; molecular dynamics; compression deformation; Shockley incomplete dislocation

Corresponding author: Chu Zhibing, Ph. D., Professor, College of Materials Science and Engineering, Taiyuan University of Science and Technology, Taiyuan 030024, P. R. China, E-mail: 1611758235@qq.com