

基于分子动力学的 Al-Cu 合金拉伸应变速率和温度效应的研究

吴晓冬^{1,2}

(1. 长沙师范学院信息科学与工程学院, 长沙 410100; 2. 湖南大学整车先进设计制造技术全国重点实验室, 长沙 410082)

摘要 采用分子动力学模拟方法, 通过建立面心立方结构的 Al-Cu 合金模型, 系统研究了不同温度和应变速率下 Al-Cu 合金的拉伸变形行为及微观演化规律。模型中考虑了质量分数为 4% 的铜原子插入铝基体的情况, 并利用 ADP (Angular-dependent interatomic potential) 势函数进行原子间相互作用模拟。通过对弹性变形和塑性变形阶段的分析, 结合微观演变, 研究了温度和应变速率效应。结果表明, 随着温度升高, 弹性模量、抗拉强度和位错萌生所需的应变逐渐减小。这是由于随着温度的升高位错逐渐减少, 不同位错间的相互作用减弱, 无法形成固定位错阻碍材料运动, 导致材料强度下降。随着应变速率增加, 抗拉强度增加, 表现为正应变速率敏感性, 这与高应变速率导致空位增多、位错运动过快等因素有关。

关键词 Al-Cu 合金; 分子动力学模拟; 温度; 应变速率

中图分类号 TG146.21; U465

文献标志码 A

DOI: 10.15980/j.tzzz.T20240193

Tensile Strain Rate and Temperature Effect of Al-Cu Alloy Based on Molecular Dynamics

WU Xiaodong^{1,2}

(1. School of Information Science and Engineering, Changsha Normal University, Changsha 410100; 2. State Key Laboratory of Advanced Design and Manufacturing Technology for Vehicle, Hu'nan University, Changsha 410082)

Abstract: Molecular dynamics simulation was employed to establish a face centered cubic Al-Cu alloy model, and the tensile deformation behavior and microstructure evolution of alloy under different temperatures and strain rates were systematically investigated. Copper atoms with a mass fraction of 4% inserted into the aluminum matrix was considered, and ADP (Angular-dependent interatomic potential) potential function was utilized for interaction simulation among atoms. Temperature and strain rate effect was elucidated by analyzing elastic and plastic deformation stages combined with microscopic evolution. The results indicate that the elastic modulus, tensile strength and strain required for dislocation initiation are decreased as temperature rises, which is attributed to the weakened interaction between dislocations since dislocations are gradually decreased with increasing temperature, unable to form fixed dislocations to hinder material movement, resulting in strength reduction. As strain rate increases, the tensile strength is increased, exhibiting a sensitivity to positive strain rate, which is related to factors such as increased vacancies and rapid dislocation movement caused by high strain rates.

Key Words: Al-Cu Alloy, Molecular Dynamics Simulation, Temperature, Strain Rate

Al-Cu 合金因其高比强度、优越的导电性和导热性, 而广泛应用于汽车制造、航空航天和国防军工等领域

域^[1-2]。在实际工程应用中, Al-Cu 合金可能会面临高温和高速加载等极端条件, 材料的性能表现可能发生

收稿日期: 2024-05-09; 修订日期: 2024-07-23

基金项目: 湖南省教育厅科学研究优秀青年资助项目 (23B1130)

作者简介: 吴晓冬, 女, 1983 年出生, 讲师, E-mail: 45025605@qq.com

引用格式: 吴晓冬. 基于分子动力学的 Al-Cu 合金拉伸应变速率和温度效应的研究[J]. 特种铸造及有色合金, 2025, 45(7): 1 019-1 023.

WU X D. Tensile strain rate and temperature effect of Al-Cu alloy based on molecular dynamics[J]. Special Casting & Nonferrous Alloys, 2025, 45(7): 1 019-1 023.

[13] 侯猛. Ti-6Al-7Nb 和 Ti-6Al-4V 医用钛合金的热氧化对比研究[D]. 杭州: 浙江大学, 2010.

[14] JIANG W, PENG YC, MAO Y, et al. High pressure solidification of alloying substitution and promotion of hydrogen storage properties in AB₂-type Y-Zr-Ti-Fe based alloys[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2023, 934: 167 992.

[15] VENDE M F, SEMENOV M Y, SMIRNOV A E, et al. Effect of nitriding and oxidizing on wear and corrosion resistances of zirconium-alloyed titanium alloy[J]. Metal Science and Heat Treatment, 2023, 65(1-2): 82-88.

(编辑: 彭瑾)

明显变化。因此,深入了解 Al-Cu 合金在极端条件下的力学行为,对于提高其性能、优化设计具有积极意义。

Al-Cu 合金的优异性能得到了研究者重视,从理论、试验再到数值模拟的研究结果很多^[3-6]。数值模拟是对传统理论和试验方法的有力补充。随着计算机技术的不断发展,分子动力学模拟技术通过模拟原子层面的相互作用和运动,成为在原子尺度研究材料力学性能的强大工具。

研究者已开展了部分关于 Al-Cu 合金的分子动力学模拟研究,SHUAI X 等^[3]通过采用分子动力学/蒙特卡罗联合模拟方法模拟 Al-Cu 合金中的过剩溶质原子在晶界的偏析过程,发现晶界偏析过程中存在置换偏析和间隙偏析两种原子迁移机制。RUDD R E 等^[7]采用分子动力学模拟研究熔融的 Al-Cu 合金中压力和温度对扩散系数的影响。SATYAJIT M 等^[8]通过分子动力学模拟和有限元模拟,研究了不同加载方向的 Al-Cu 合金的纳米压痕,对比两种模拟方法对于材料性能的计算结果,呈现出结果的一致性。MOJUMDER S^[9]采用分子动力学方法研究了不同压缩载荷方向对 Al-Cu 合金塑性变形行为的影响,发现合金分别在 $\langle 110 \rangle$ 方向和 $\langle 001 \rangle$ 方向上具有最大的屈服强度和应变,并通过位错密度和位错相互作用解释了该合金的压缩应力-应变行为。

本研究以 Al-Cu 合金为研究对象,通过拉伸过程的分子动力学模拟,深入探讨温度和应变速率对合金力学性能的影响,同时对分子动力学模拟结果与试验数据之间的差异进行探讨,以增进对材料行为的全面理解。

1 模型建立

建立晶格常数为 0.405 nm 的面心立方铝模型,3 个方向的长度均设置为 15 倍晶格常数。模型中,铝基体的晶向分别设置为 $[100]_x$ 、 $[010]_y$ 、 $[001]_z$ 。根据试验测定的 Al-Cu 合金中的铜元素质量分数,在铝基体间隙中插入质量分数为 4% 的铜原子,控制铜原子间距,确保没有原子重叠,晶格模型见图 1。初始模型建立完成后,采用 LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)^[10-12]进行动力学模拟。3 个方向均采用周期性边界条件,时间步长设置为 1 fs。采用 APOSTOL F 等^[13]开发的 ADP 势函数,该势函数在传统嵌入原子势的基础上添加了角力项,计算更为精准,可用于描述铝合金中铝铜原子间的相互作用。

使用共轭梯度算法对初始结构进行优化。等温等压系综(NPT)被用于对模型进行积分,弛豫 20 ps 后达到设定温度 300、373、473、573 K 和 0 Pa 状态。达到平

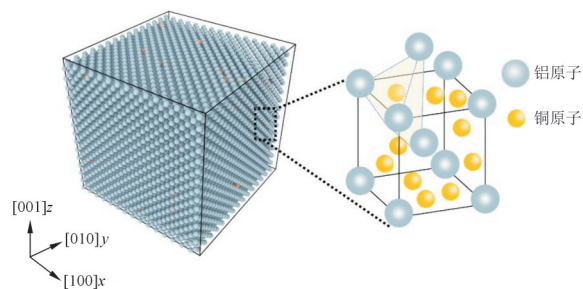


图 1 Al-Cu 合金晶格模型图

Fig.1 Lattice model of Al-Cu alloy

衡后,采用恒定应变率方式对模型 y 方向进行拉伸,应变速率为 1×10^8 、 1×10^9 、 1×10^{10} 和 $1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$,控制 x 和 z 方向的压力为 0,以确保单轴加载,拉伸过程仍然采用 NPT 系综。使用开放可视化工具 OVITO 对模型进行可视化^[14-16]。采用位错提取分析 DXA 对拉伸过程中的位错进行表征^[12,17]。

2 模拟结果与讨论

2.1 Al-Cu 合金的拉伸变形行为

图 2 是 Al-Cu 合金在温度为 300 K、应变速率为 $1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 时的应力-应变曲线。可以看出,在拉伸初期,应力-应变曲线近似呈直线,应力随着应变的增大而增大,这个阶段的拉伸变形符合胡克定律,说明材料在这个阶段处于弹性变形阶段。通过计算得到弹性模量为 60 GPa,当应变值达到 8% 左右时,应力达到峰值,即抗拉强度为 4.17 GPa。

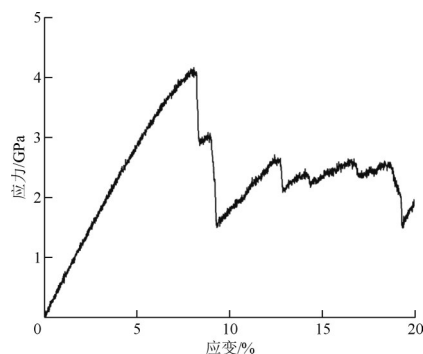


图 2 拉伸变形过程 Al-Cu 合金的应力-应变曲线

Fig.2 Stress-strain curve of tensile deformation

相关研究中试验测得该材料的弹性模量和抗拉强度分别为 70 GPa 和 443 MPa^[18]。由此可见分子动力学拉伸模拟测得的弹性模量比试验数据低,抗拉强度远比试验数据高。这是由于分子动力学模拟的拉伸过程使用的模型是完美晶体,而实际的 Al-Cu 合金为多晶,包含位错、空位、强化相等微观结构,这些微结构对材料有强化作用,导致通过试验测得的实际的 Al-Cu 合金弹性模量较大。分子动力学模拟拉伸的应变速率比实际情况高

10 个数量级左右,因此模拟所得的抗拉强度远高于实际^[19]。应力达到峰值后骤然下降,应力-应变曲线在一定范围内呈锯齿状波动,Al-Cu 合金进入塑性变形阶段。这种锯齿状的应力波动是由于产生了 Portevin Le Chatelier (PLC) 效应,其是指位错和溶质原子的动态钉扎和脱钉。

图 3 是温度为 300 K、应变速率为 $1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 的拉伸条件下 Al-Cu 合金在不同应变时的位错分布情况。位错是晶体中的缺陷,其在材料变形过程中起到重要作用,直接影响了材料的塑性变形和力学性能。由图 3 可见,Al-Cu 合金在拉伸变形过程中,合金晶体结构中的原子发生了错位和滑移,形成了一系列位错,主要的位错类型包括 $1/2\langle 110 \rangle$ 位错、 $1/3\langle 100 \rangle$ 位错、 $1/3\langle 111 \rangle$ 位错、 $1/6\langle 110 \rangle$ 位错和 $1/6\langle 112 \rangle$ 位错。在拉伸初期,即 10% 应变阶段,位错密度相对较低,位错分布较为均匀。随着应变增加至 15%,位错开始扩展,位错密度增加并形成一定的密集区域,这标志着 Al-Cu 合金进入了更为明显的塑性变形阶段。当应变达到 20% 时,由于 $1/6\langle 112 \rangle$ 位错的运动与扩展位错密度进一步增加,呈现出更加明显的集聚现象,形成了一些局部高密度位错区域,即位错缠结,位错缠结会导致加工硬化现象的出现。从图 2 可以明显看出,当应变由 18% 增加至 20% 时,应力增大。位错的运动和缠结是晶体材料塑性形变的主要机制之一。材料的塑性变形机制主要是由于位错引起的,在材料经历了弹性阶段后,由于材料本身的特性,随着应变进一步增加,产生了位错,位错的运动导致应力骤降,位错的缠结导致加工硬化,应力进而增大。

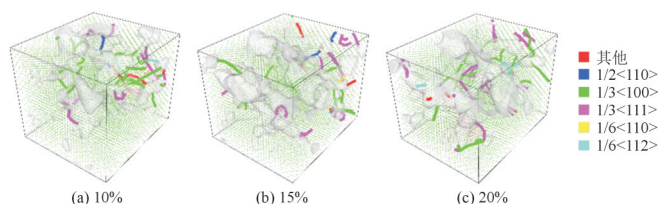


图 3 不同拉伸应变下的位错分布

Fig.3 Dislocation distribution under different tensile strains

2.2 温度对力学性能的影响

图 4 是应变速率为 $1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 、不同温度下合金的

拉伸应力-应变曲线。可以看出,相同应变速率下、不同温度时的拉伸应力-应变曲线的整体趋势基本一致,拉伸变形初期应力随着应变的增加而增加,应力增大至最大后骤然下降,之后应力-应变曲线呈锯齿状上下波动。弹性变形阶段的斜率随着温度的升高而减小,这是由于随着温度升高,热振动加剧,原子间距增大,原子间的结合力减小,因此弹性模量减小^[20]。随着温度升高,材料的抗拉强度明显减小。这是因为温度升高使位错滑移所需的临界分切应力减小,同时温度的升高也使材料开始塑性流动所需的应力降低,从而使材料的变形抗力降低^[21]。从能量角度来讲,温度越高,原子热运动增加,导致结构不稳定,强度降低^[10]。因此,温度对 Al-Cu 合金拉伸过程中的弹性变形和塑性变形阶段均有较大影响。

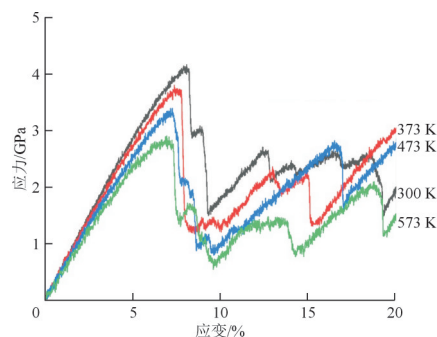


图 4 应变速率为 $1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 、不同温度下拉伸的应力-应变曲线

Fig.4 Stress-strain curves under tension at different temperatures with strain rate of $1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$

图 5 是应变速率为 $1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 、不同温度下 Al-Cu 合金拉伸时位错密度与应变的关系。可以看出,该合金的主要位错类型为 $1/6\langle 112 \rangle$ 位错,各类位错随着应变的整体变化趋势相同。随着应变增加,Al-Cu 合金的位错密度呈现出逐渐增加的趋势,这表明随着外力的作用,晶体内的位错逐渐增多,这是材料发生塑性变形的显著标志。值得注意的是,随着温度升高,位错萌生所需的应变逐渐减小。位错萌生越早,应力释放越早,屈服强度越低,因此随着温度升高,该合金的强度减小。

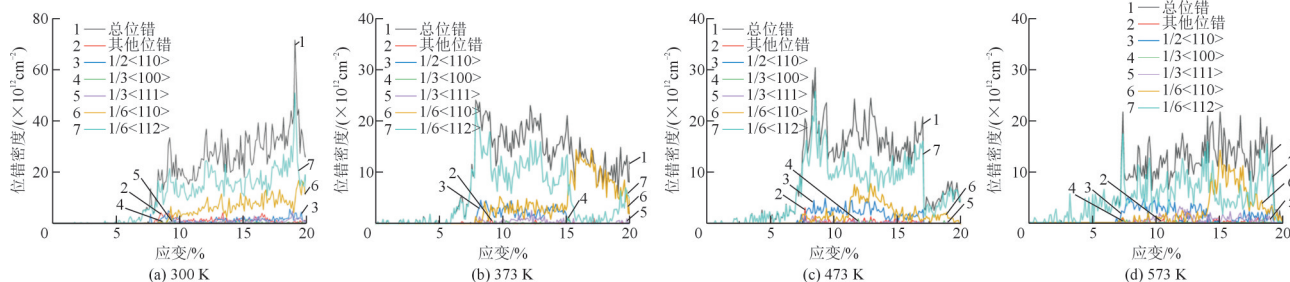


图 5 不同温度下、应变速率为 $1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 时位错密度与应变的关系

Fig.5 Relationship between dislocation density and strain at different temperatures with strain rate of $1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$

图 6 是应变速率为 $1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 、不同温度条件 Al-Cu 合金在不同应变下拉伸的位错分布情况。可以看出,

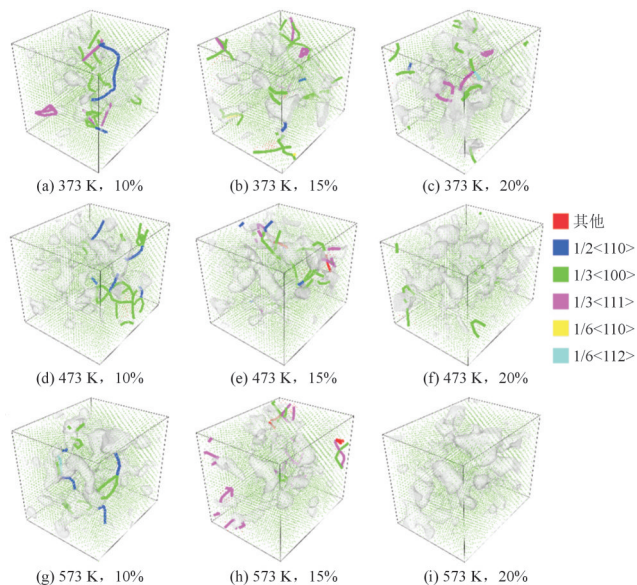


图 6 应变速率为 $1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 、不同温度下拉伸时位错分布
Fig.6 Dislocation distribution during tension at different temperatures with strain rate of $1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$

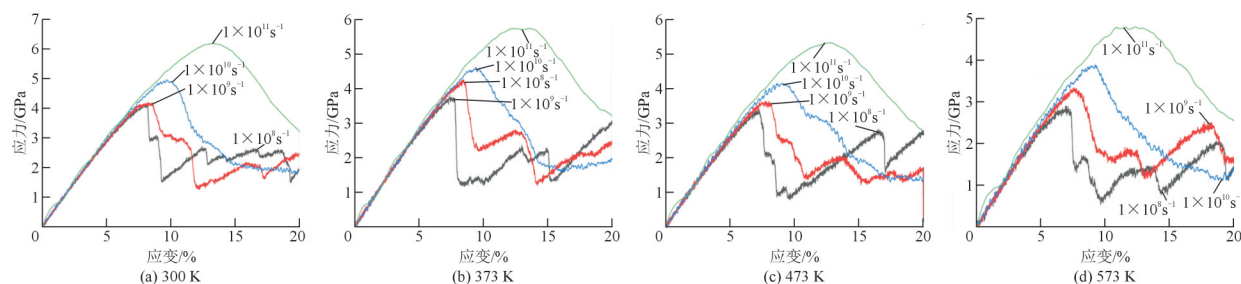


图 7 相同温度、不同应变速率时 Al-Cu 合金的拉伸应力-应变曲线
Fig.7 Tensile stress-strain curves of Al-Cu alloys at constant temperature and different strain rates

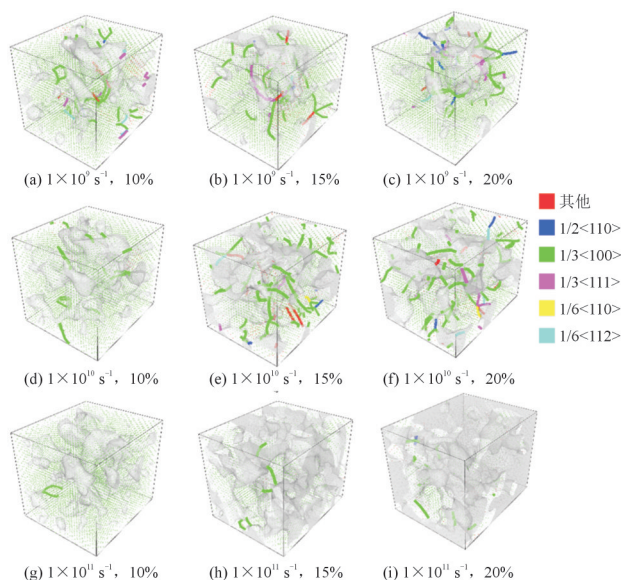


图 8 温度为 300 K、不同应变速率下拉伸时的位错分布
Fig.8 Dislocation distribution during tension with different strain rates at 300 K

相同应变下,位错随着温度的升高逐渐减少,不同位错之间的相互作用减弱,无法形成固定位错阻碍材料运动,从而导致材料强度下降^[22]。

2.3 应变速率对力学性能的影响

图 7 为不同应变速率下 Al-Cu 合金的拉伸应力-应变曲线。可以看出,不同应变速率下的应力-应变曲线都经历了弹性变形阶段和塑性变形阶段。在弹性变形阶段,应力随着应变的增加而增加,不同应变速率下的应力-应变曲线在弹性变形阶段几乎重合,说明应变速率对 Al-Cu 合金拉伸过程中的弹性变形阶段几乎没有影响。应力-应变曲线随着应变增加,应力在达到屈服强度后骤降,随着应变速率增加,抗拉强度增加,呈正应变速率敏感性,曲线在达到屈服强度后骤降的趋势减缓。

图 8 是温度为 300 K、不同应变速率下拉伸时位错分布情况。可以看出,低应变速率($1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$)时,不同应变下位错分布呈现出明显的波动,这表明材料在塑性变形阶段存在较为剧烈的不稳定性。随着应变速率

的增加,不同应变下位错分布的波动逐渐减小。值得注意的是,当应变速率达到 $1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ 时,出现了塑性变形阶段的空位汇聚现象。这一现象的解释可以从材料在高应变速率下的塑性变形机制出发。在高应变速率下,位错运动更为迅猛,导致位错密度均匀分布,减少了局部的位错集聚和脱聚。然而,随着应变速率的进一步增加,特别是达到 $1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ 时,位错运动过快,可能导致位错与空位的相互作用失衡,使得空位汇聚现象显现。因此,在图 7 中观察到,随着应变速率增加抗拉强度增大,这是由空位汇聚导致的。

3 结 论

(1)通过分子动力学模拟探究了 Al-Cu 合金在不同温度、应变速率条件下的拉伸变形行为,以及微观演化情况。发现 Al-Cu 合金的拉伸变形过程经历弹性变形和塑性变形两个阶段,位错演化主要表现为

1/6<112>位错的形成和运动。

(2)温度和应变速率对 Al-Cu 合金的力学性能影响显著。随着温度升高,弹性模量和抗拉强度减小,位错萌生所需的应变逐渐减小。位错随着温度的升高逐渐减少,不同位错之间的相互作用减弱,无法形成固定位错阻碍材料运动,从而导致材料强度下降。随着应变速率增加,抗拉强度增加,呈正应变速率敏感性,这与高应变速率拉伸导致空位增多、位错运动过快等因素有关。

参 考 文 献

- [1] WANG D Y, ZHAN L H, ZHONG J, et al. Stress-level dependency of creep ageing behavior for friction stir welded Al-Cu alloy [J]. Journal of Central South University, 2022, 29(9): 3 030-3 053.
- [2] 张震,王鸿斌,王贺,等.汽车车身板用变形铝合金研究进展[J].精密成形工程,2022,14(1):71-78.
- [3] SHUAI X, MAO H, TANG S, et al. Atomic-scale insights into microscopic mechanisms of grain boundary segregation in Al-Cu alloys [J]. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2025, 35(1):1-12.
- [4] 林波,张卫文.Fe 含量对挤压铸造 Al-Cu 合金组织演变及高温力学性能的影响[J].中国有色金属学报,2017,27(5):885-893.
- [5] HOSSEIN M N, MOHSEN M, REZA M N. Enhancement of mechanical properties of Al-Cu alloy composite reinforced by Ni element: A combination of mixture design of experiment and artificial neural network approach [J]. Materials Today Communications, 2024, 38: 107 902.
- [6] UJJVAL B, PRATAP M S, KANTA S S, et al. Strength and stability through variable micro segregation behaviour of Ta and Zr solutes at intermetallic interfaces in Al-Cu alloys [J]. Acta Materialia, 2023, 259:1-20.
- [7] RUDD R E, CABOT W H, CASPERSEN K J, et al. Self-diffusivity and interdiffusivity of molten aluminum-copper alloys under pressure, derived from molecular dynamics [J]. Physical Review, 2012, E85(3): 031 202.
- [8] SATYAJIT M, HOQUE S M T, MAHMUDUL I, et al. Numerical investigation of mechanical properties of aluminum-copper alloys at nanoscale [J]. Journal of Nanoparticle Research, 2021, 23(1): 3-10.
- [9] MOJUMDER S. Molecular dynamics study of plasticity in Al-Cu alloy nanopillar due to compressive loading [J]. Physica, 2018, B89: 53 086.
- [10] 李健,郭晓璇,马胜国,等. AlCrFeCuNi 高熵合金力学性能的分子动力学模拟[J].高压物理学报,2020,34(1):37-45.
- [11] 朱旭,江五贵,李源才,等. Ni/Ni₃Al 拉伸力学性能的分子动力学模拟[J].稀有金属材料与工程,2021,50(4):1 254-1 262.
- [12] 柏智文,丁志刚,周爱龙,等. α -Fe 单晶拉伸变形热-动力学的分子动力学模拟[J].金属学报,2024,60(6): 848-856.
- [13] APOSTOL F, MISHIN Y. Interatomic potential for the Al-Cu system [J]. Physical Review, 2011, B83(5):054 116.

- [14] 安克滢,欧小琴,宋旻. 铝铜合金拉伸变形的分子动力学模拟[J].中国有色金属学报,2022,32(10):2 989-2 998.
- [15] 薛春,杨千华,楚志兵,等. 温度对单晶镁拉伸性能影响的分子动力学研究[J].稀有金属材料与工程,2021,50(5):1 812-1 816.
- [16] 牛媛,侯兆阳,王凤龙,等. 温度对纳米孪晶 Al 强化和软化行为的影响[J].中国有色金属学报,2023,33(9):2 813-2 824.
- [17] 李泽政,申宏飞,吴文平. 含孔洞 Cu₆₄Zr₃₆ 及 Cu/Cu₆₄Zr₃₆ 复合材料拉伸变形的分子动力学研究[J].材料导报,2024(15): 235-240.
- [18] 张欣,苏儒. 2024 铝合金的高温拉伸性能[J].金属热处理,2019,44(4):156-160.
- [19] 叶天舟,姚欢,巫英伟,等. FeCrAl 合金拉伸力学性能分子动力学研究[J].稀有金属材料与工程,2023,52(2):777-784.
- [20] 刘晓波,熊震,方洲,等. Al₂Cu 拉伸变形的分子动力学模拟[J].中国有色金属学报,2018,28(9):1 746-1 754.
- [21] 冯悦,王文焱,谢敬佩,等. TiC/Ti 复合材料拉伸断裂机理的分子动力学模拟[J].塑性工程学报,2022,29(7):191-197.
- [22] 张荣,祁文军,张爽. Al₂CoCrFeNi 拉伸力学性能的分子动力学模拟[J].钢铁钒钛,2022,43(6):173-179.

(编辑:栗万仲)

《特种铸造及有色合金》征稿启事

《特种铸造及有色合金》杂志是中国科学技术协会主管、中国机械工程学会铸造分会和武汉机械工艺研究所共同主办的全国性科技期刊,是对国内外公开发行的中文核心期刊,中国科技论文统计与分析用刊,INSPEC、CA、MA、AJ、JST、Scopus 等国内外权威数据库及检索系统收录期刊,并获得全国优秀科技期刊一等奖、国家期刊奖、新中国 60 年有影响力的期刊、湖北省十大有影响力的自然科学期刊等。

本刊面向国内外广大科技工作者征稿,征稿内容包括:各种(黑色和有色合金)特种铸造方法、各种有色合金及复合材料的成形理论、工艺、设备、材料、测试与控制、计算机应用等方面的科技成果、生产技术和现场经验,此外还包括各相关学科和交叉学科,如挤压铸造(液态模锻)、半固态加工、新能源材料、电子封装、高熵合金、非晶合金(金属玻璃)、焊合、粉末冶金、合金化、热处理、表面处理等方面的学术和技术研究成果等。

特种铸造及有色合金杂志社(武汉)有限公司

地址:武汉市江岸区建设大道融玺 1001 大厦 10 楼

邮编:430015

电话:027-85358206,85486024,

85358127

投稿网址:www.special-cast.com

邮箱:tzzz@special-cast.com

