

单晶镁中空洞生长的分子动力学模拟

唐锦旗 尧军平 吕 昭 陈致君
(南昌航空大学航空制造工程学院)

摘 要 利用分子动力学和嵌入原子法模拟了含空洞单晶镁的单轴拉伸过程,研究拉伸晶向和空洞形状对空洞生长变形的影响。结果表明,不同晶向拉伸,单晶镁中空洞生长变形的微观机制不同。沿 $[\bar{1}210]$ 晶向拉伸时,在晶体内部出现垂直于拉伸方向的裂纹,随着加载进行,裂纹与空洞聚结,空洞生长最终导致材料失效;沿 $[0001]$ 晶向拉伸时,位错在空洞表面成核且出现堆垛层错,随着加载进行,堆垛层错成为孪晶产生的形核点,孪晶开始长大并逐步占据整个晶体最终导致材料失效。不同空洞形状对材料杨氏模量没有影响,但对材料屈服强度有一定影响。沿 $[\bar{1}210]$ 晶向拉伸,更易使含球形空洞晶体在中间位置产生垂直于拉伸方向的裂纹,致使材料的屈服强度最小。

关键词 分子动力学;单晶镁;晶向;空洞

中图分类号 TP311;TG146.22 **文献标志码** A

DOI:10.15980/j.tzzz.2021.05.007 **开放科学(资源服务)标识码(OSID):**



Molecular Dynamics Simulation of Void Growth in Single Crystal Magnesium
Tang Jinqi, Yao Junping, Lü Zhao, Chen Zhijun
(School of Aeronautical Manufacture Engineering, Nanchang Hangkong University)

Abstract: The uniaxial stretching process of single-crystal magnesium containing voids was simulated by molecular dynamics and embedded atom method, and the influence of tensile crystal orientation and void shape on the growth and deformation of voids was investigated. The results show that the microscopic mechanism of the void growth and deformation of single crystal magnesium is different when the crystal orientation is stretched. Stretching along the $[\bar{1}210]$ crystal direction, cracks perpendicular to the stretching direction appear inside the crystal. As the loading progresses, the cracks and voids coalesce and the voids grow eventually lead to material failure, while stretching along the $[0001]$ crystal direction, dislocations nucleation occurs on the surface of the cavity and stacking faults appear. As the loading progresses, the stacking faults become the nucleation point of twins. The twins begin to grow up and gradually occupy the entire crystal and eventually lead to material failure. Different cavity shapes have little effect on the Young's modulus of the material, however it will has a certain effect on the yield strength of the single crystal Mg. Stretching along the $[\bar{1}210]$ crystal direction, it is taken easier for the crystals containing spherical voids to produce perpendicular to the stretching at the middle position. Directional cracks, cracks and cavities coalesce can result in the material failure, so when stretched along the $[\bar{1}210]$ crystal direction, the yield strength of the material with spherical cavities is the smallest.

Key Words: Molecular Dynamics, Single Crystal Magnesium, Crystal Orientation, Void

空洞的成核、生长和聚结是金属材料(如金属 Al 和 Mg)断裂的主要原因^[1~5]。一旦空洞从非金属夹杂物或在颗粒与基体之间的界面成核,随后的破坏将通过空洞的生长和聚结继续进行^[2]。因此深入研究含空洞

收稿日期:2020-09-20;修改稿收到日期:2020-11-07
基金项目:国家自然科学基金资助项目(52065046,51661024)
第一作者简介:唐锦旗,男,1993 年出生,硕士研究生,南昌(330063),E-mail:690970298@qq.com
通信作者:尧军平,男,1965 年出生,教授,南昌(330063),E-mail:yyyjpsz@126.com
引用格式:唐锦旗,尧军平,吕昭,等. 单晶镁中空洞生长的分子动力学模拟[J]. 特种铸造及有色合金,2021,41(5):557-561.
TANG J Q, YAO J P, LÜ Z, et al. Molecular dynamics simulation of void growth in single crystal magnesium[J]. Special Casting & Non-ferrous Alloys, 2021, 41(5):557-561.

[13] 胡银生,余欢,王振军,等. 织物结构对 2.5D-C_f/Al 复合材料微观组织与力学性能的影响[J]. 中国有色金属学报, 2018, 28(12): 2 512-2 522.

[14] HB5214-1996. 金属室温缺口拉伸试验方法[R].

[15] 兰泽宇,余欢,徐志锋,等. 不同编织结构 C_f/Al 复合材料高温压缩性能与失效机理[J]. 航空学报, 2020,42(1):1-13.

(编辑:刘卫)

金属的微观塑性变形机制具有积极意义。由于该问题涉及的材料尺度非常小^[3],宏观上,传统的试验方法和有限元方法不能准确观察到空洞的生长变形行为^[6],因此需要一种可以观察到材料微观结构变形过程的方法。

分子动力学方法(Molecular dynamic, MD)是利用计算机模拟算法在原子层面上搭建材料模型来研究其各种物理性质,再利用数学统计原理总结出模拟体系的宏观物理量^[7~9]。该方法特别适用于研究材料微观机制的演变。利用该方法模拟材料受力情况并结合可视化软件可以观察到模型的位错、滑移和破坏细节。黄凯鑫等^[10]利用分子动力学模拟方法,研究了应变速率对含空洞镁孪晶界面塑性变形机制的影响。梁华等^[11]采用分子动力学模拟含空洞和空位单晶铝的拉伸过程,研究晶向,空洞、空位的体积分数对空洞生长的影响。POTIMICHE G P 等^[3]对单晶镍空洞的生长和聚集进行了分子动力学研究,分析了材料长度对单晶镍的破坏进程影响。结果表明,试样的长度改变了位错模式。ZHAO K J 等^[12]利用分子动力学方法模拟单晶铜中柱状空洞的生长。结果表明,对于给定的孔隙率,胞体尺寸对初始屈服强度有明显的影 响,但对宏观有效杨氏模量的影响很小。

目前,国内外研究者利用分子动力学方法对金属材料的微观塑性变形机制进行了广泛研究,并取得了许多有价值的成果,但是主要针对一种晶体取向或者某一特定原子构型进行研究。对具有密排六方(hcp)低对称性晶体结构的研究报道很少,对不同晶向和不同空洞形状影响单晶镁的塑性变形机制未见报道。为了更全面地理解金属材料的微观塑性变形机制,本课题以密排六方结构的单晶镁为对象,研究不同晶向和不同空洞形状对其微观塑性变形机制的影响。

1 分子动力学计算方法

1.1 原子间作用力

分子动力学模拟中需要势函数来确定原子间的相互作用。因此,正确选取势函数是进行模拟的第一步。嵌入式原子势函数(EAM)是常用的势函数,使用 SUN D Y 等^[13]提出的 EAM 势函数,其表达式为:

$$E = \sum_i G_i \left[\sum_{j \neq i} \rho_j^a(r_{ij}) \right] + \frac{1}{2} \sum_{ij} U_{ij}(r_{ij}) \quad (1)$$

式中, G_i 是嵌入能量和局部电子的函数密度; ρ_j^a 是球面平均原子电子密度; U_{ij} 是对势; r_{ij} 是原子*i*和*j*之间的距离。在分子动力学中,能量被用来确定作用在每个原子上的力。每个原子处,偶极力 β_{km}^i 由下式给出:

$$\beta_{km}^i = \frac{1}{\Omega^i} \sum_{j \neq i}^N f_k^i(r_{ij}) r_m^{ij} \quad (2)$$

式中, f_k^i 是原子之间的力矢量; r_m^{ij} 是*i*原子和*j*原子之间的位移矢量; N 是最近邻原子的数量; Ω^i 是原子体积。由于应力张量可以确定为材料块上的体积平均值,表达如下:

$$\sigma_{mk} = \frac{1}{N^*} \sum_i^{N^*} \beta_{km}^i \quad (3)$$

式中, N^* 是晶格中产生应力的活性原子数,表示方向分量。平均应力用于确定单轴应力应变响应。

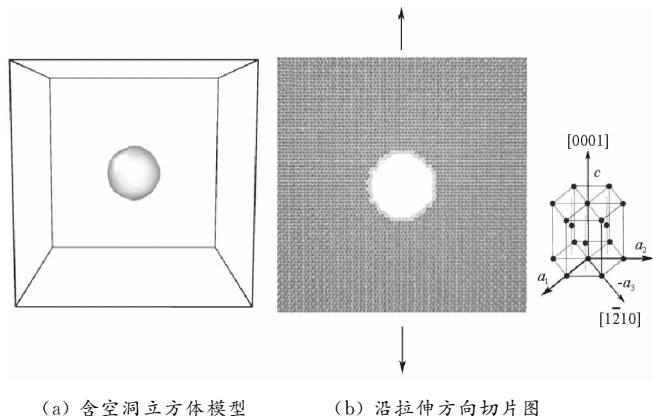
1.2 周期边界条件

分子动力学模拟实际晶体过程中,模型表面会对结构体内原子的运动产生不利影响,为避免这种影响,一般采用周期性边界条件。周期性边界条件能够消除表面效应,因此,它适用于原子数量多的体系。此外,当边界原子远离模型时,会有一个新的原子代替消失的原子。

2 计算模型的建立

单晶镁是密排六方结构(hcp)晶体,常温状态下晶格常数为: $a=b=0.321$ nm, $c=0.521$ nm,轴比 $c/a=1.62$ ^[14]。单晶镁的塑性变形方式主要是滑移,但是由于滑移系统的数量有限,孪生在单晶镁的塑性变形中也起着重要的作用^[15~17]。

基于 LAMMPS 分子动力学^[18]模拟方法,对含空洞单晶镁进行单轴拉伸模拟,见图 1。图 1a 是含空洞的单晶镁模型,是边长为 20 nm 的立方体,模型中间深色部分是根据实际情况简化的球形空洞,整个模型的原子数约为 35 万个,图 1b 是模型沿拉伸方向切片图。3 个方向均采用周期性边界条件(PPP)以消除表面效应。采用嵌入原子势(EAM)来确定镁原子间的相互作用。嵌入原子势主要用来描述简单金属和过渡金属间的势函数,它能准确地再现模拟中空洞、位错等缺陷的演化过程,特别适用于研究金属单晶在塑性变形过程中位错



(a) 含空洞立方体模型

(b) 沿拉伸方向切片图

图 1 含空洞单晶镁模型

Fig.1 Model of single crystal Mg with voids

成核和空洞变形等现象。

在进行单轴拉伸模拟之前,先采用共轭梯度法对系统进行弛豫以达到最小能量状态(即基态)。模拟的时间步长为 1 fs,在平均应变率为 $2 \times 10^{-9}/\text{s}^{-1}$,温度为 100 K 条件下对模型进行单轴拉伸。模拟得到的原子轨迹信息采用 OVITO^[19]进行可视化处理。运用位错分析法(DXA),观察晶体中的位错、堆垛层错、滑移带等缺陷。

3 模拟结果与分析

3.1 不同晶向

为研究两种拉伸晶向对单晶镁中空洞生长的影响,分别对 z -[0001] 和 x -[1210] 晶向 (x -[1210], y -[1100], z -[0001]) 进行单轴拉伸,并对其应力-应变曲线及原子构型进行分析。

图 2 为晶体沿两种不同晶向拉伸作用下的应力-应变曲线,由于金属镁的非对称结构导致曲线存在较大差异。可以看出,[0001]晶向的屈服强度为 3.98 GPa ($\epsilon=5.58\%$)比[1210]晶向的屈服强度 2.98 GPa($\epsilon=5.64\%$)大。此外,[0001]晶向的初始斜率也比[1210]晶向的大,即[0001]晶向的弹性模量比[1210]晶向的大,由此可知,[0001]晶向的位错成核所需应力较[1210]晶向的大。

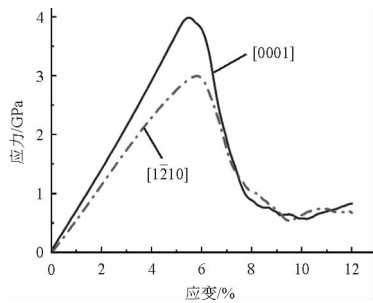


图 2 沿两种不同晶向拉伸的应力-应变曲线
Fig.2 Stress-strain tensile curves of the single crystal Mg along two kinds of orientation

根据应力-应变曲线,从初始时刻到拉伸结束选择 6 个等时间间隔的点,并画出每个时刻空洞的形状。图 3 和图 4 是沿两个晶向拉伸过程中空洞的变化,其中图 3a 和图 4a 为沿拉伸方向的空洞尺寸变化,图 3b 和图 4b 是垂直于拉伸方向的空洞尺寸变化。可以看出,在两种晶向拉伸过程中,空洞尺寸随着拉伸的进行逐渐增大,并且在沿拉伸方向上尺寸变化更为明显。

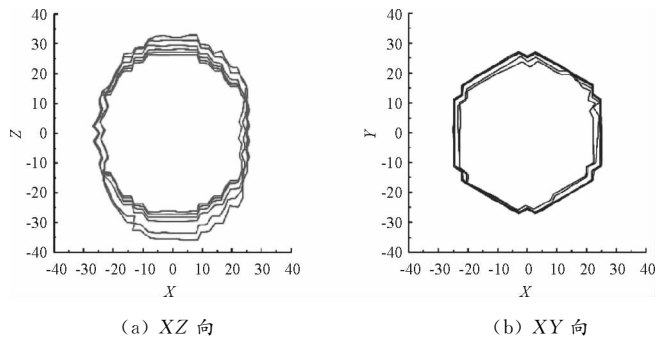


图 3 沿[0001]晶向拉伸空洞尺寸变化
Fig.3 Void size change along [0001] orientation

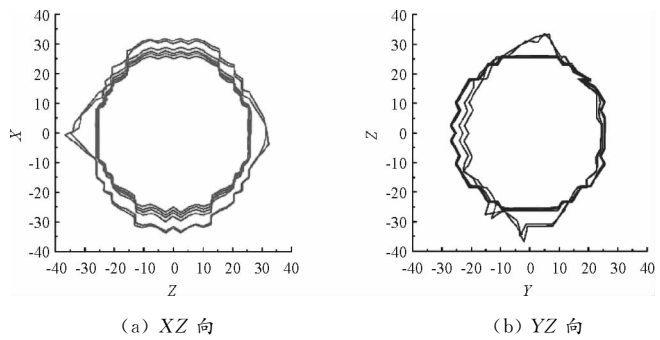


图 4 沿[1210]晶向拉伸空洞尺寸变化
Fig.4 Void size change along [1210] orientation

图 5 和图 6 是晶体沿[0001]晶向和[1210]晶向拉伸发生塑性变形前后几个时刻的位错分析图。可以看出,当应变 $\epsilon=4.56\%$ 时,除空洞表面原子发生结构变化,其他晶体内部原子仍然属于完美的密排六方结构,没有出现位错、滑移等缺陷,卸载时模型仍然可以恢复到初始形状见图 5a。图 5b~图 5d 中晶体已发生塑性

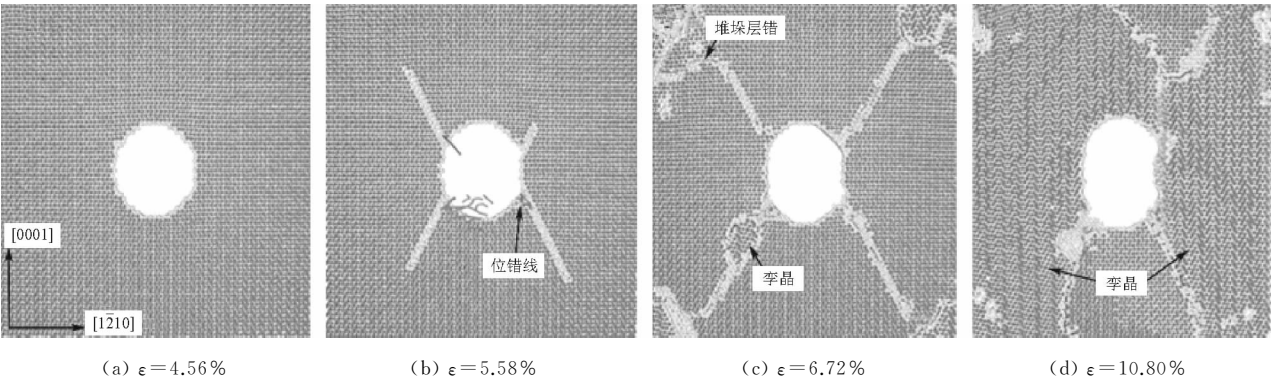


图 5 沿[0001]晶向拉伸原子构型
Fig.5 Schematic diagram of atomic with tensing along [0001] orientation

变形。当 $\epsilon=5.58\%$ 时,晶体内部位错开始在空洞附近成核,随着应变增加,观察到位错正在向晶体表面滑动,同时在此过程中产生 FCC 晶体结构原子和 $1/3\langle\bar{1}100\rangle$ 不全位错,导致晶体内部开始出现堆垛层错,见图 5b;当应变为 6.72% 时,晶体开始出现孪晶,随后孪晶不断长大,见图 5c;当 $\epsilon=10.80\%$ 时,晶体大部分几乎被孪晶占据,见图 5d。

图 6 为沿 $[\bar{1}210]$ 晶向拉伸空洞原子构型图。可以看出,当 $\epsilon=4.02\%$ 时,模型达到最大的弹性形变,拉伸

应变没有超过位错发射的临界值,因此没有位错滑移启动。随着应变不断增大,模型进入塑性变形阶段,空洞表面出现更多的点缺陷,当应变继续增加,在 $\epsilon=5.64\%$ 时,在垂直于拉伸方向出现对称滑移带并且有两个剪切环在空洞表面成核,见图 6b。在应变为 $\epsilon=6.18\%$ 时,剪切环进一步长大,晶体出现大面积位错滑移,并且开始沿 $[0001]$ 方向断裂,见图 6c。随着应变增大,在应变为 6.84% 时,空洞与裂纹聚合并向周期边界扩展导致材料进一步失效,见图 6d。

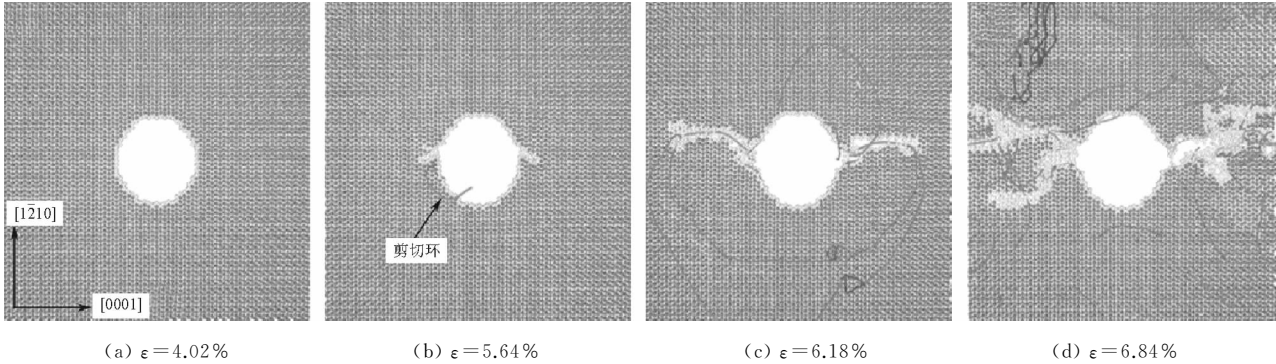


图 6 沿 $[\bar{1}210]$ 晶向拉伸空洞原子构型

Fig.6 Schematic diagram of atomic with tensing along $[\bar{1}210]$ orientation

3.2 不同空洞形状

为研究空洞形状对空洞生长的影响,设置一组不同空洞形状模型进行模拟。单晶镁模型内分别含有球形空洞、立方体空洞、圆柱体空洞,3 种空洞形状的体积分数均为 0.8% 。

分别对模型沿 $[0001]$ 晶向和 $[\bar{1}210]$ 晶向拉伸,得到的应力-应变曲线见图 7。可以看出,在沿两种晶向拉伸中,3 种空洞形状模型的斜率在弹性变形阶段几乎一致,说明空洞形状对单晶镁的杨氏模量影响很小;但是屈服强度有所不同,沿 $[0001]$ 晶向拉伸的晶体屈服强度变化很小,而沿 $[\bar{1}210]$ 晶向拉伸的晶体屈服强度变化明显,其中含圆柱体空洞的晶体屈服强度最大,含球体空洞晶体屈服强度最小。

这与所预想的不同,认为由于立方体在 8 个顶角更

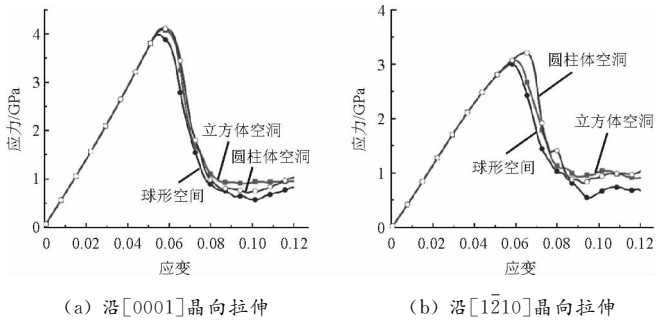


图 7 含不同空洞形状晶体应力-应变曲线

Fig.7 Stress-strain curves of single crystal Mg with different void shape

容易导致应力集中而使其屈服应力最小,可能是由于晶体的变形方式引起的。图 8 是 3 种空洞形状模型在沿 $[\bar{1}210]$ 晶向拉伸的原子构型图。可以看出,晶体沿垂直

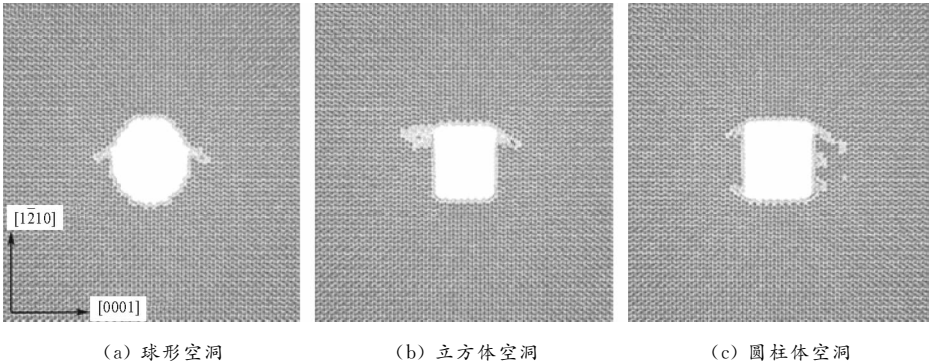


图 8 3 种空洞形状模型沿 $[\bar{1}210]$ 晶向拉伸原子构型

Fig.8 Schematic diagram of tensile atomic with three kinds void shape along $[\bar{1}210]$ orientation

于拉伸方向开始出现裂纹,且裂纹处在空洞表面垂直于拉伸方向的两侧中心位置,由于在这一位置立方体的表面和圆柱体的侧面都是比较平整的,不易发生应力集中,而在球体表面相对于前两种空洞表面会更容易出现应力集中,所以会出现含球体空洞晶体屈服强度最小。

4 结 论

(1)含空洞单晶镁沿两种不同晶向拉伸的应力-应变曲线不同,沿 $[0001]$ 晶向拉伸,模型的杨氏模量较大,说明沿该方向变形更加困难。

(2)含空洞单晶镁在不同晶向拉伸的变形方式存在差异,沿 $[0001]$ 晶向拉伸,单晶镁的微观塑性变形机制主要是位错的移动和孪晶的生长;沿 $[1\bar{2}10]$ 晶向拉伸,单晶镁的微观塑性变形机制主要是晶体内部会出现垂直于拉伸方向的裂纹,随着加载进行,裂纹与空洞聚合使空洞生长最终导致材料失效。

(3)单晶镁中空洞形状对其杨氏模量几乎没有影响,对屈服强度有一定影响,沿 $[1\bar{2}10]$ 晶向拉伸时,球形空洞模型的屈服强度最小。

参 考 文 献

- [1] BRINA E M, TRAIVIRATANA S, MEYERS M A. Void initiation in fcc metals: effect of loading orientation and nanocrystalline effects[J]. Acta Materialia, 2010, 58(13): 4 458-4 477.
- [2] TANG T, KIM S, HORSTEMEVER M F. Molecular dynamics simulations of void growth and coalescence in single crystal magnesium[J]. Acta Materialia, 2010, 58(14): 4 742-4 759.
- [3] POTIMNICHE G P, HORSTEMEBER M F, WAGNER G J, et al. A molecular dynamics study of void growth and coalescence in single crystal nickel[J]. International Journal of Plasticity, 2006, 22(2): 257-278.
- [4] ZENG X G, XU S S, CHEN H Y, et al. Molecular dynamics simulation on plasticity deformation mechanism and failure near void for magnesium alloy[J]. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2010, 20(3): s519-s522.
- [5] 胡晓燕,徐建刚,闫新兴.单晶铝空洞生长的分子动力学模拟[J].兵器材料科学与工程, 2012, 35(6): 52-55.
- [6] 姜黎明. 单晶镁裂纹扩展的分子动力学研究[D].北京:北京交通大学, 2011.
- [7] 王锡芝. 基于分子动力学的单晶纳米铜力学性能研究[D].哈尔滨:哈尔滨工程大学, 2018.
- [8] 杨宝成,彭艳,潘复生,等.基于分子动力学镁合金塑性变形机制的研究进展[J].材料工程, 2019, 47(8): 40-48.
- [9] 王煜烨,汤爱涛,潘荣剑,等.分子动力学在镁及镁合金微观塑性变形中的应用进展[J].材料导报, 2019, 33(19): 3 290-3 297.
- [10] 黄凯鑫,尧军平,胡启耀,等.应变速率对含空洞的镁孪晶界面塑性变形机制的影响[J].特种铸造及有色合金, 2020, 40(2): 220-223.
- [11] 梁华,李茂生.空洞和空位对单晶铝力学性能影响的分子动力学研究[J].计算物理, 2019, 36(2): 211-218.
- [12] ZHAO K J, CHEN C Q, SHEN P, et al. Molecular dynamics study on the nano-void growth in face-centered cubic single crystal copper[J]. Computational Materials Science, 2009, 46(3): 749-754.
- [13] SUN D Y, MENDELEY M I, BECKER C A, et al. Crystal-melt interfacial free energies in hcp metals: A molecular dynamics study of Mg[J]. Physical Review, 2006, B73(2): 024 116.
- [14] 丁志刚. 镁及其合金中位错滑移机制的理论研究[D].南京:南京理工大学, 2017.
- [15] 徐泓鹭. 密排六方结构(hcp)Mg的塑性变形行为计算模拟初步探究[D].上海:上海交通大学, 2014.
- [16] LI B, MA E. Pyramidal slip in magnesium: Dislocations and stacking fault on the $\{10\bar{1}1\}$ plane[J]. Philosophical Magazine, 2009, 89(14): 1 223-1 235.
- [17] 甘元超. 密排六方金属镁的晶体塑性力学性能研究[D].北京:北京理工大学, 2016.
- [18] PLIMPTON S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics[J]. Journal of Computational Physics, 1995, 117(1): 1-19.
- [19] STUKOWSKI A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO-the open visualization tool[J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2009, 18(1): 015 012.

(编辑:张正贺)

2021 年第一季度全球氧化铝产量增 3.6%, 至 1 663.9 万 t

据国际铝业协会数据,2021 年 3 月,全球氧化铝产量 572.5 万 t,环比增长 10.37%,同比增长 4.97%。

一季度,氧化铝产量累计达到 1 663.9 万 t,2020 年同期为 1 606.5 万 t,同比增长 3.57%;2020 年四季度产量为 1 681.5 万 t,环比下降 1.05%。

3 月,中国氧化铝产量为 331 万 t,环比增长 10.30%。一季度,中国氧化铝产量累计达到 963.1 万 t,2020 年同期为 905.2 万 t,同比增长 6.40%。

3 月,海湾地区氧化铝产量为 497 000 t,一季度累计产量为 144.5 万 t,2020 年同期为 147 万 t。

3 月,亚洲地区(不含中国)氧化铝产量为 378 000 t,环比增长 11.50%,同比增长 8.93%。一季度,亚洲地区(不含中国)氧化铝产量为 109.3 万 t,同比增长 5.5%。

3 月,大洋洲地区氧化铝产量为 16 200 t,一季度该地区总产量为 469 000 t。

(摘自中国有色网)