

微纳尺度断裂的分子动力学模拟

曹伟 肖杰

(南京航空航天大学机械结构力学及控制国家重点实验室纳米科学研究所 南京 210016)

摘要: 阐述了在微纳尺度研究断裂问题的必要性,着重介绍了分子动力学的基本原理及镶嵌原子势函数的发展。并通过基于镶嵌原子势函数的分子动力学模拟,研究了含半椭圆表面裂纹的镍单晶纳米体块拉伸变形及断裂行为。结果表明:表面裂纹存在降低了材料的强度,但对塑性的影响不明显;位错首先在裂尖处形成,沿滑移面向自由表面运动,随后自由表面也会形成位错,沿滑移面向内部运动;在裂纹扩展过程中,与传统的裂尖钝化不同,半椭圆裂纹在拉伸过程中会逐渐变尖成为三角形。

关键词: 分子动力学;镶嵌原子势;镍单晶;断裂

中图分类号: TN104.1 **文献标识码:** A **国家标准学科分类代码:** 130.15

Molecular dynamics simulation of fracture in micro and nano scale

Cao Wei Xiao Jie

(State Key Laboratory of Mechanics and Control of Mechanical Structures, Key Laboratory for Intelligent Nano Materials and Devices of Ministry of Education and Institute of Nano Science, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China)

Abstract: This paper expounds the necessity to investigate fracture problems in micro and nano scale. The basic principles in molecular dynamics and development of Embedded Atom Method are introduced. By molecular dynamics simulation with EAM method, the mechanical and fracture properties of nickel single crystal with semi-elliptical surface crack under uniaxial tension are investigated. The result shows that the existence of crack reduce the material intensity, but have little effect on plasticity; dislocation firstly forms at crack tip and emits to the surface along the slip plane; different from crack blunting in traditional fracture mechanics, the semi-elliptical crack deforms sharp to triangle during the crack propagation process.

Keywords: molecular dynamic simulations; Embedded Atom Method; nickel single crystal; fracture

1 引言

工程材料在生产制造过程中,无法避免的存在微缺陷和裂纹,由此引发的断裂失效也成为结构安全中的重要问题^[1-4]。镍基高温合金是航空发动机热端及冷端的关键性结构材料^[5],因此,从原子尺度研究镍的断裂行为有重要的实际工程意义。

传统的断裂理论是基于经典的连续介质力学建立,但当尺度下降到原子级时,经典的连续介质理论将不再适用,因此在微纳尺度研究断裂力学需要建立新的理论及研

究方法。分子动力学模拟具有沟通宏观特性和纳观结构的作用,对于许多在理论分析和实验观察上都难以了解的现象可以做出一定的微观解释。近几十年,随着计算机技术的发展以及相关理论的成熟,分子动力学已经逐渐成为微纳尺度断裂力学的重要研究方法^[6-7]。由于原子在体系内的受力情况由描述原子间相互作用的势函数决定,因此根据不同的体系,选取合适的原子势函数至关重要。近十几年,基于多体势模型发展的镶嵌原子法,被广泛应用于描述金属晶体中原子间相互作用,并在微纳尺度断裂领域得到了一系列有意义的结果^[8-9]。

收稿日期:2015-01

2 分子动力学方法的基本原理

通过牛顿第二定律,求解多粒子体系的运动方程,即为分子动力学的基本原理。

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} &= \frac{d \vec{v}_i}{dt} = \vec{a}_i \\ \vec{v}_i &= \vec{v}_i^0 + \vec{a}_i t \\ \vec{r}_i &= \vec{r}_i^0 + \vec{v}_i^0 t + \frac{1}{2} \vec{a}_i t^2 \end{aligned} \quad (1)$$

先通过每个分子的坐标计算系统的势能,由每个原子的势能计算其所受的力与加速度,再通过式(1)可以计算出经过一个非常短的时刻后分子的速度及位置,接着又可以计算得到新的势能,经过不断的循环迭代及更新,便可以得到每个时刻分子运动的位置、速度以及加速度的信息,这就是分子动力学进行计算模拟的基本思路。

3 镶嵌原子势

1982年,Daw和Bakes首次提出的经典的嵌入原子势(EAM)。该方法的主要思想是将体系势能分为2个部分,一部分为原子核对它附近周围原子的原子核的排斥作用所产生的相互作用对势;另一部分是原子的核外电子与所处环境中电子云的静电作用所产生的嵌入势,体系总势能的表达式为:

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

式中: F 是嵌入势函数,第二项是对势项函数,可以根据需求选取不同的形式。 ρ_i 是除了第*i*个原子以外所有原子在*i*处产生的电子云密度之和:

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} \rho_j(r_{ij}) \quad (3)$$

式中: $\rho_j(r_{ij})$ 是第*j*个原子的核外电子在*i*原子处产生的电荷密度。 r_{ij} 是第*i*个原子与第*j*个原子之间的距离。在具体的金属模拟过程中,嵌入势和对势的确定需要拟合模拟金属的宏观参数,这样可以大大提高计算的精确度。

而后,Finnis和Sinclair提出了嵌入势的平方根形式,而这种形式也是多体势函数的一种形式。Ackland等根据Finnis和Sinclair的研究结果,分析各种参数如结合能、表面能、弹性常数的影响,进一步研究得出了金属铜、铝、镍、银的多体势函数,极大的提高了计算工作者的对比度和真实性。将式(2)中对应的多体项和对势项分别表示为:

$$\begin{aligned} \rho_i(r_{ij}) &= \sum_{k=1}^2 A_k (R_k - r_{ij})^3 H(R_k - r_{ij}) \\ \phi_{ij}(r_{ij}) &= \sum_{k=1}^6 a_k (r_k - r_{ij})^3 H(r_k - r_{ij}) \end{aligned} \quad (4)$$

为了将EAM势发展成为能适用于共价键材料的势

函数,Baskes进一步修正了EAM势。他将原子的*s*、*p*、*d*、*f*层电子云形状的不同考虑进来,这样相应电子云密度就可以用下列几项表达:

$$\begin{aligned} \rho_i^{(0)} &= \sum_{j \neq i} \rho_j^{a(0)}(r_{ij}) \\ (\rho_i^{(1)})^2 &= \sum_a \left[\sum_{j \neq i} \frac{r_{ij}^a}{r_{ij}} \rho_j^{a(1)}(r_{ij}) \right]^2 \\ (\rho_i^{(2)})^2 &= \sum_{\alpha, \beta} \left[\sum_{j \neq i} \frac{r_{ij}^\alpha r_{ij}^\beta}{r_{ij}^2} \rho_j^{a(2)}(r_{ij}) \right]^2 - \frac{1}{3} \left[\sum_{j \neq i} \rho_j^{a(2)}(r_{ij}) \right]^2 \\ (\rho_i^{(3)})^2 &= \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \left[\sum_{j \neq i} \frac{r_{ij}^\alpha r_{ij}^\beta r_{ij}^\gamma}{r_{ij}^3} \rho_j^{a(3)}(r_{ij}) \right]^2 \end{aligned} \quad (5)$$

总的电子密度则由式(6)给出:

$$(\rho_i)^2 = \sum_{h=0}^3 t_i^{(h)} (\rho_i^{(h)})^2 \quad (6)$$

式中: $t_i^{(h)}$ 是常系数,在修正的EAM势中,嵌入能项采用了:

$$F(\rho) = AE\rho \ln \rho \quad (7)$$

式中: A 、 E 是系数,是与模拟的材料有关。修正的EAM势考虑的因素较多,仅在研究对象是共价键材料时,需要考虑原子的核外电子云的密度。

虽然EAM势的表达形势比较复杂,但是由于它可以在没有增加计算量的情况下很好的描述金属中原子的相互作用,得到了研究者的广泛关注,一直在不断的发展^[10-12]。模拟工作也采用了EAM势。

4 微纳尺度断裂的分子动力学模拟

4.1 研究内容及参数设置

基于镶嵌原子势函数的分子动力学模拟,研究了含半椭圆表面裂纹镍单晶纳米块体单轴拉伸变形及断裂行为。模拟中镍单晶的势函数参数是由S. M. Foiles等人测试得出。在整个模拟过程中,采用热浴法调节体系温度,使整个体系温度维持10 K。在加载之前,整个体系采用正则系综(NVT)充分弛豫,达到平衡状态,弛豫之后,能量达到稳定最低。通过速度加载方式进行分子动力学模拟,加载速率为1 m/s,模拟的时间步长设为1 fs,期间每一万步记录并输出原子的坐标、势能、应力的信息。

4.2 分子动力学模型

模型的建立通过Material Studio软件完成,图1所示为含半椭圆表面裂纹镍单晶纳米块体的初始模型,包含66 409个原子,块体尺寸通过 $H \times W \times B$ 来表示,其中*H*为高度,大小为8.1 nm,*W*为宽度,大小为12.3 nm,*B*为厚度,大小为6.9 nm。预置半椭圆表面裂纹的尺寸通过 $a \times c \times t$ 来表示,其中*a*为裂纹深度,大小为2.3 nm,*c*为裂纹宽度,大小为4.6 nm,*t*为裂纹厚度,大小为0.35 nm。将模型置于大小为352 nm × 247 nm × 176 nm盒子内部,盒子采用周期性边界条件。

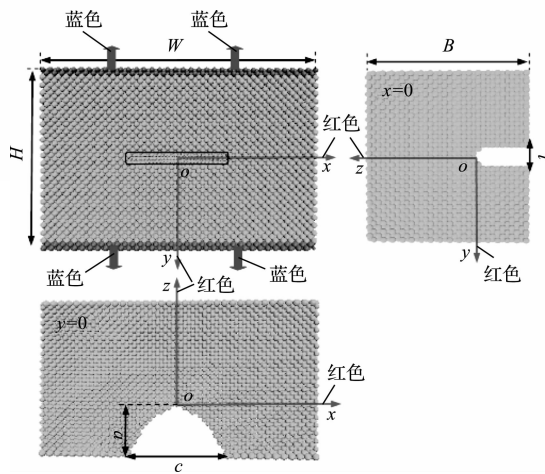


图1 初始模型(蓝色箭头表示加载方向, 红色表示加载原子)

4.3 分子动力学模拟结果

通过应力应变曲线图2看出,含有半椭圆表面裂纹的镍单晶块体,充分弛豫后,在速度加载方式的情况下,先进入线弹性变形阶段,弹性极限为10.2 GPa,对应的临界应变值为8%,而对于不含初始裂纹的完美镍单晶块体,其屈服强度为12.5 GPa,对应的临界应变值为10%。随后,材料进入塑性变形阶段,在塑性阶段曲线表现为锯齿状,应力值在5 GPa左右波动。每一个波峰下降的过程对应位错滑移面产生的过程,而每一个波谷上升的过程,对应于结构弛豫并将位错发射到表面的过程。显然,由于半椭圆表面裂纹的影响,材料的强度有着明显的降低,对塑性的影响不是特别明显。

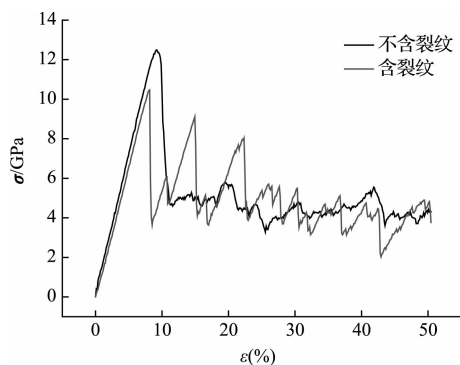


图2 应力应变曲线

通过可视化的后处理软件Ovito,可以观察整个单轴拉伸的动态过程。通过进行键角分析,可以得到晶体中不同与面心立方(FCC)晶格的其他晶格类型,图中红色部分表示密排六方(HCP)晶格,即为位错。在整个单轴拉伸的模拟过程中,由每一万步输出的原子的坐标、能量以及应力数据,可以做出整体的三维位错分布图,裂纹面的位错分布图及应力云图,分别为图3的(a)、(b)、(c)。

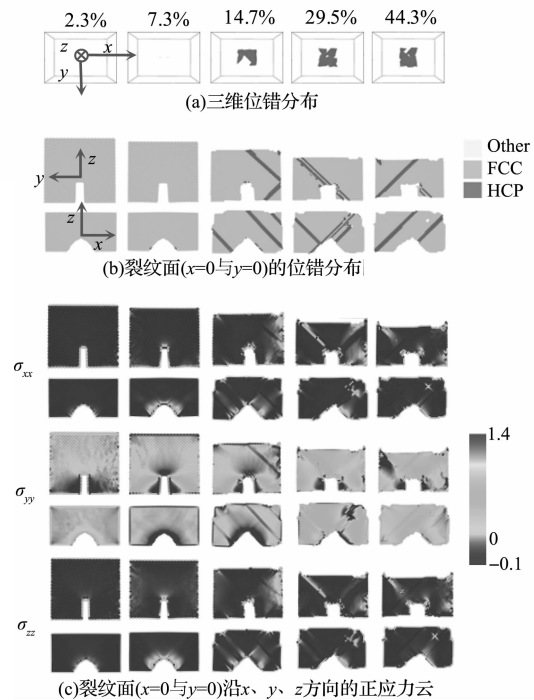


图3 随着拉伸应变值的增加(单位为 eV/eb \times V_a, V_a 表示原子的体积)

由三维的位错分布图3(a)可以看出,在弹性变形阶段,整个盒子内没有位错的产生。当拉伸超过临界应变,位错首先在裂尖处产生,随着应变的持续增大,位错沿着(111)以及(111)面开始向自由表面运动,最终得到释放,在过程中,由于相互作用而引起的局部的应力集中,会导致新的位错形成,新的位错又开始沿着滑移面开始运动,位错在运动过程中会相互影响,容易引起位错的堆积。由于位错堆积导致的原子的重新排列,导致了拉伸过程的颈缩。图(b)给出了裂纹面的位错分布图,由于裂尖附近局部的应力集中,位错首先在裂尖产生,并沿45°发射到表面,导致了裂纹的形状由原来的半椭圆,逐渐变尖,形成了最后的三角形形状,这与传统的裂尖变钝的情况有所不同,主要原因就是由于在原子尺度内,由晶体学理论,滑移时,滑移面应是面间距最大的密排面,滑移方向是原子的最密排方向,一个滑移面与其上的一个滑移方向组成一个滑移系。对于面心立方晶体,面心立方金属的滑移面为{111},共有4组,包含3个滑移方向,因此共有12个滑移系,滑移方向沿45°方向导致了位错沿45°方向发射,导致半椭圆裂纹变尖为三角形。图(c)给出了裂纹面的正应力分布云图,从整体分布可以看出正应力沿x,z方向远远小于y拉伸方向的大小。通过 σ_{yy} 的分布可以看出,弹性变形阶段,裂尖处有明显的应力集中现象,随着应变增大,应力集中越明显。塑性阶段开始以后,伴随着裂尖附近位错的产生,应力集中得到了缓解,随着位错的运动并在表面得到释放,应力集中也得到释放。

5 结 论

分子动力学在微纳尺度断裂研究领域有着重要的应用,描述原子间相互作用的势函数影响着计算的精确度。近些年发展起来的镶嵌原子势在模拟金属体系中有广泛应用,通过基于镶嵌原子势的分子动力学模拟,研究了含半椭圆表面裂纹镍单晶纳米体块的拉伸变形及断裂行为,发现裂纹只影响强度,对塑性的影响不大;在拉伸过程中,与传统的裂尖变钝不同,裂纹由原来的半椭圆变尖为三角形,并从晶体学理论做出了解释。

参 考 文 献

- [1] 黄海鸿,姚结艳,刘儒军,等. 基于金属磁记忆技术的车桥桥壳损伤检测[J]. 电子测量与仪器学报, 2014, 28(7): 770-776.
- [2] 李鑫. 小波分析在滚动轴承故障信号处理中的应用[J]. 国外电子测量技术, 2013, 32(6): 65-67.
- [3] 胥永刚,孟志鹏,赵国亮. 基于双树复小波变换的轴承复合故障诊断研究[J]. 仪器仪表学报, 2014, 35(2): 447-452.
- [4] 张保钦,雷保珍,赵林惠,等. 风机叶片故障预测的振动方法研究[J]. 电子测量与仪器学报, 2014, 28(3): 285-291.
- [5] 王会阳,安云岐,李承宇,等. 镍基高温合金材料的研究进展[J]. 材料导报: 纳米与新材料专辑, 2012, 25(2): 482-486.
- [6] MUSAZADEH M, DEHGHANI K. Molecular dynamic simulation of crack propagation in nanocrystalline Ni containing different shapes and types of second phases [J]. Computational Materials Science, 2011, 50(11): 3075-3079.
- [7] ZHANG P, MA L, FAN F, et al. Fracture toughness of graphene [J]. Nature Communications, 2014: 3782.
- [8] WEN Y H, ZHU Z Z, ZHU R Z. Molecular dynamics study of the mechanical behavior of nickel nanowire: strain rate effects [J]. Computational Materials Science, 2008, 41(4): 553-560.
- [9] SANDOVAL L, URBASSEK H M. Finite size effects in Fe nanowire solid-solid phase transitions: a molecular dynamics approach [J]. Nano Letters, 2009, 9(6): 2290-2294.
- [10] NOURANIAN S, TSCHOPP M A, GWALTNEY S R, et al. An interatomic potential for saturated hydrocarbons based on the modified embedded atom method [J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2014, 16(13): 6233-6249.
- [11] SAIDI P, FROLOV T, HOYT J, et al. An angular embedded atom method interatomic potential for the aluminum-silicon system [J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2014, 22(5): 055010.
- [12] ASADI E, ZAEEM M A, NOURANIAN S, et al. Two phase solid-liquid coexistence of Ni, Cu, and Al by molecular dynamics simulations using the modified embedded-atom method [J]. Acta Materialia, 2015(86): 169-181.

作 者 简 介

曹伟,1990年出生,硕士研究生,主要方向为微纳尺度断裂力学研究。

E-mail: caowei6328567@163.com