

纳米金属材料单向拉伸应力应变关系的数值模拟研究

李林安 邸玉贤 李鸿琦

(天津大学机械学院力学系 天津 300072)

摘要: 本文利用“复合有限元”方法,将分子动力学方法引入到连续体的有限元方法中,用 Morse 势函数推导出纳米金属固体材料(如 $\alpha-Fe$, Cu, Al 等)晶界区域的本构关系,建立由晶粒、晶界、孔洞等组成的复合模型。借助有限元源程序自动生成系统 fepg 软件,调整晶粒尺寸,研究在单向线性逐步加载过程中,晶粒尺寸对材料非线性应力应变关系的影响,以及材料宏观弹性模量在加载过程中的变化情况。得出结论,随着晶粒尺寸的减小,材料的非线性特征逐渐增强,材料的延伸性也随之增强。

关键词: 纳米金属, 分子动力学, 有限元, 非线性, 应力应变关系

1. 引言

纳米材料又称超微细材料,是由微小颗粒——绝大多数是晶体,其特征尺度至少在一个方向上为纳米量级——组成的固体,其典型的晶粒尺度为 $1\sim 100\text{nm}$ 。晶粒大小是影响传统金属多晶材料(晶粒尺寸在微米以上量级)力学性能的重要因素。当晶粒尺寸减小到纳米尺度时,它的硬度、强度和延展性都发生很大的变化^[1]。通过大量的实验测试、计算模拟及理论分析,证明金属纳米材料具有非常独特的力学性能及结构—性能关系。研究变形机理的最大困难在于难以从实验获得可靠的本征力学性能参量。目前纳米材料样品制备技术上存在的问题以及纳米材料本身的结构稳定性,使准确测量纳米材料本征力学性能数据十分困难。

计算机技术的飞速发展作为材料科学的理论研究提供了良好的条件。。对材料的结构和性能的计算机模拟的计算模型有两类:连续体模型和原子级模型。连续体模型就是把材料看作连续的介质,采用的方法大多是有限元方法,它的研究对象是有限小的单元。原子级模型是把材料看作由许多单个原子的聚集体,它的研究对象则是单个原子。材料的各个宏观量则由所有原子的统计量给出。目前,经常采用的原子级模拟方法有分子动力学方法、蒙特卡罗方法和晶格动力学方法。

材料的应力-应变关系反映了该材料的所受应力随应变的变化关系。它在材料的性质研究中起着重要的作用。不同的材料,一般来讲,它的应力-应变曲线特征是有所不同的。晶粒大小是影响晶体材料力学性能的重要因素。本文提出一种“复合有限元”思想,将分子动力学方法引入到传统的有限元方法中,模拟研究晶粒尺寸对纳米金属材料在单向拉伸过程中非线性应力应变关系的影响。

2. 计算模拟方法

在晶粒内部原子严格排布在晶格格点上,有关实验及研究表明,纳米材料在受宏观载荷的情况下,在晶粒内部几乎不发生位错。在接近晶粒表面,原子开始偏移晶格,发生畸变,晶界区域原子无规则排列,材料破坏也主要发生在这里。可以假想纳米材料是由许多晶粒堆

积成的整体，晶粒和晶粒之间由晶界材料填充。这样，就可以把纳米材料看成是由晶界基体和晶粒增强相组成的复合材料，当然可以考虑三叉晶界和孔洞等。由于晶粒内部一般不发生破坏，可以认为晶粒是由线弹性均质材料组成。可以借助分子动力学原理，用原子势函数找出晶粒之间力的相互作用关系，在晶界区域填充晶界材料，使这种晶界材料的本构关系符合晶粒之间的相互作用关系，这样就建立起了连续体模型。

在本文中，我们采用如下的 Morse 势函数^[2]：

$$\phi(r_{ij}) = D[\exp\{-2\alpha(r_{ij} - r_0)\} - 2\exp\{-\alpha(r_{ij} - r_0)\}] \quad (1)$$

式中， D 为原子结合能， α 为与原子有关的常数， r_{ij} 为原子 i 与 j 的原子间距， r_0 为两原子间的平衡间距，对势函数求导可以得到原子间作用力函数。

将纳米晶体材料的细观结构简化为如图 1 所示的周期结构模型，取立方体来代表一块纳米晶体，将其平均分割成 $N \times N \times N$ 个小立方体（称为外立方体）。

在每个外立方体的中心再取一块更小的立方体（称为内立方体），内立方体代表晶粒，在晶粒内部原子严格排布在晶格格点位置上。外立方体除去内立方体部分即为晶界部分。其二维模型如图 2a 所示，图中黑色方框是晶界部分，晶界周围的区域是晶界部分。晶界原子较晶粒内部原子排布稀疏，在这里我们假定晶界原子的排布也按规则排布，仅是原子间距稍大一些，假定晶界原子间距为晶粒内部原子间距 1.18 倍，则晶界区域晶格常数为晶粒内部的晶格常数乘以 1.18，晶界中的原子也严格排布在晶界晶格上。

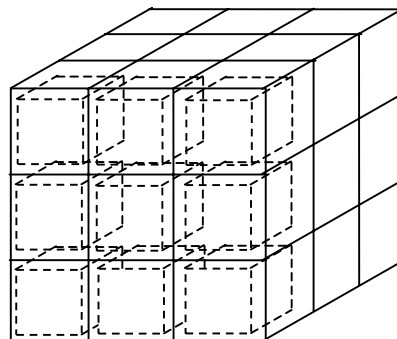


图 1 纳米材料周期结构模型

H. S. Kim 等^[3]曾经提到晶界厚度一般认可为 1nm，并取晶界厚度为 1nm 模拟了细晶材料塑性变形行为，取得比较满意的结果。本文中，晶界厚度也取为 1nm，大约占 3~4 个原子层。

从图 2a 中选取如图 2b 所示的代表性胞元，在晶界中取一个中心面，把相邻晶粒分开，每边的晶界中含两个原子层。可以通过原子间力函数求得晶粒之间相互作用力与两晶粒间距的关系函数，可以通过编程来实现。

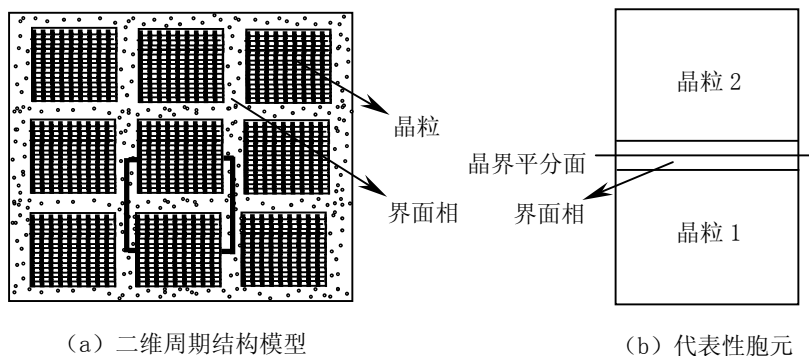


图 2 纳米晶体材料微结构简化示意图

在晶界内部，假定材料是分布均匀的，且为各向同性材料。通过上述的计算可以轻易

地得到晶界材料的本构关系。其中正应力和正应变有以下关系：

$$\left. \begin{aligned} \sigma &= \frac{F(r)}{A} \\ \varepsilon &= \frac{r - dr_0}{dr_0} \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

式中， $F(r)$ 是晶粒之间原子作用力之和， A 为两晶粒的作用面积， r 为两晶粒的间距， dr_0 为两晶粒的平衡间距。

根据式 2 可以绘出三种金属晶体材料晶界应力应变关系曲线，如图 3, 4 和 5 所示。从图中看出，晶界在受载过程中有明显的软化阶段，在本文中只研究晶界软化之前纳米材料宏

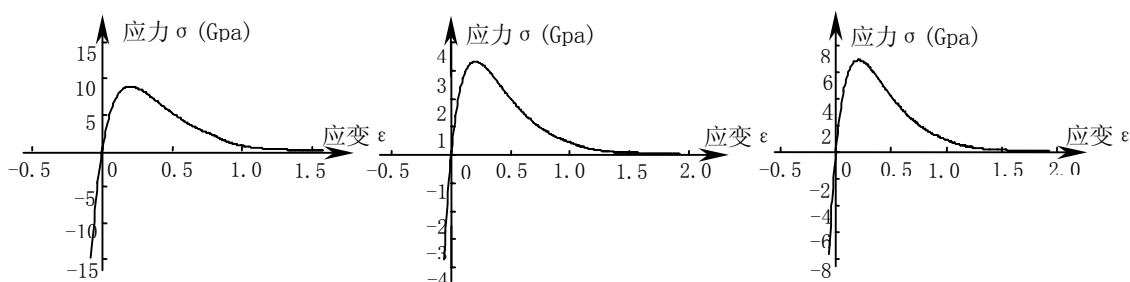


图 3 铁晶界应力应变关系曲线

图 4 铝晶界应力应变关系曲线

图 5 铜晶界应力应变曲线

观的应力应变关系。对应力应变曲线求切线斜率可得晶界弹性模量与应变关系。

3. 模拟结果

借助有限元源程序自动生成系统 fepg 软件，建立纳米金属材料的复合有限元模型。晶粒材料认为是均匀的线弹性材料，其弹性模量取同种普通晶体的弹性模量。晶界和三叉晶界认为是同种材料，其本构关系在前面已经用 Morse 势函数推导出了，孔洞部分理论上讲弹性模量为零，但是在有限元计算中不容许，在本文取很小的数值来代替。原子间距的变化对材料泊松比的影响不大^[2]，因此不同成分可以近似认为泊松比相等，都取常规晶体的泊松比。针对铁、铝、铜三种金属晶体材料，模拟得到晶粒尺寸分别为 2、20、100、1000 纳米的晶体在单向拉伸过程中的应力应变关系曲线，如图 6、8、10 所示，对应力应变关系曲线求切线斜率得到弹性模量与应变关系曲线，如图 7、9、11 所示。其中晶粒尺寸为 1000 纳米的晶体代表常规晶体，100 纳米为常规晶体与纳米晶体的界限尺寸，晶粒尺寸为 20 纳米的晶体代表典型的纳米晶体，2 纳米为其下限。注意，图中的应力值只为了研究材料的非线性趋势做示意之用，并不代表真实情况。

从图中可以看出，三种金属材料的曲线有相似之处。晶粒尺寸为 100、1000 纳米的晶体的应力应变曲线近似为直线，这与这三种金属的常规晶体表现出来的线弹性特征相一致。晶粒尺寸为 20 纳米的纳米晶体已经表现出一定的非线性特征，当晶粒尺寸下降到 2 纳米时，纳米晶体的非线性特征已经相当明显。从三种金属不同晶粒尺寸的晶体弹性模量与应变关系曲线中，可以更容易地看出晶粒尺寸对材料应力应变关系的影响。晶粒尺寸为 1000 纳米的常规晶体在加载过程中的弹性模量几乎不发生变化，与常规晶体的弹性模量十分近似。晶粒

尺寸为 100 纳米的晶体的弹性模量在逐步加载过程中有少量下降，但线性特征还是非常明显，在材料研究中可近似为线弹性材料。晶粒尺寸为 20 纳米的晶体材料的弹性模量在加载过程中有明显的降低。在应变量达到 5% 之前，弹性模量下降幅度较小，之后随着进一步加载，弹性模量开始大幅度下降。晶粒尺寸为 2 纳米的晶体材料在线性加载过程中，弹性模量随着应变量的增加几乎呈直线下降。可见，随着晶粒尺寸的减小，材料的非线性特征越来越

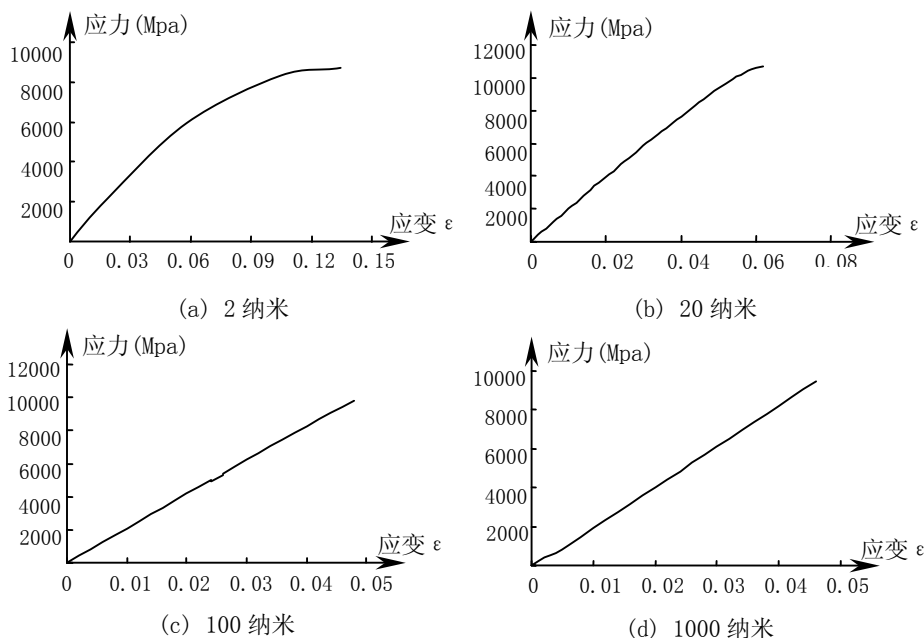


图 6 不同晶粒尺寸的铁晶体应力应变关系

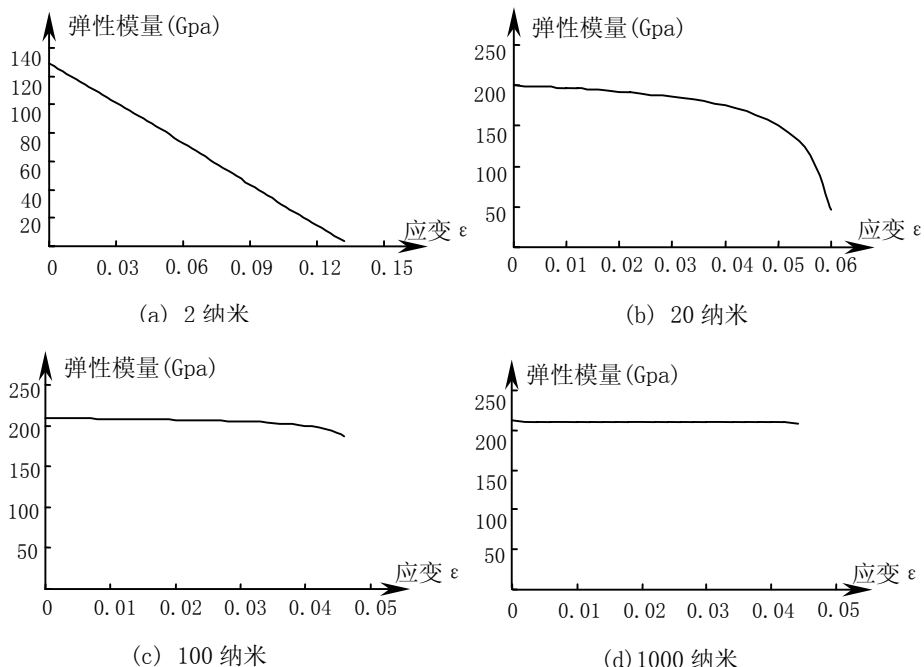


图 7 不同晶粒尺寸的铁晶体弹模与应变关系

明显。

并且研究表明，随着晶粒尺寸的减小，材料在晶界软化之前的伸长量也增大了。在

晶界软化之前，晶粒尺寸为 1000 纳米的铁晶体的伸长量为 4.6%，晶粒尺寸为 100 纳米的铁晶体可以达到的伸长量为 4.8%，晶粒尺寸为 20 纳米的纳米铁伸长量可达 6.2%，当晶粒尺寸减小到 2 纳米时伸长量高达 13.4%，为普通铁晶体（这里指晶粒尺寸为 1000 纳米的晶体）伸长量的 2.9 倍。另外，通过对铝和铜进行同样的研究得到，两种金属在晶界软化之前的伸长量随着晶粒尺寸的减小而增大，当晶粒尺寸下降到 2 纳米时，其伸长量可达普通晶体的 2.5 倍。可见，随着晶粒尺寸的不断减小，材料的伸长量逐渐增大，即材料的延展性随之

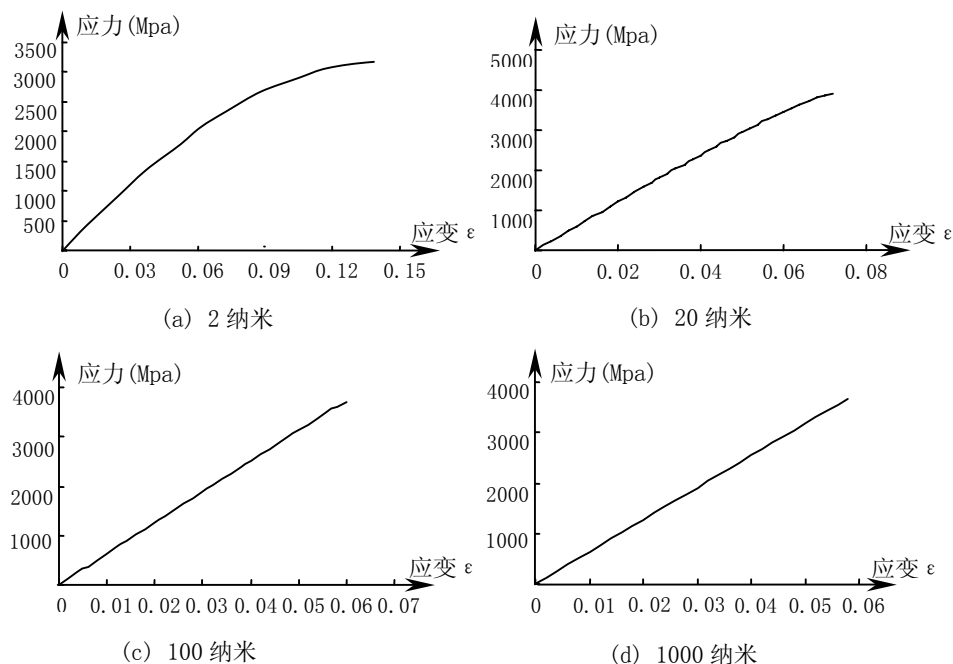


图 8 不同晶粒尺寸的铝晶体应力应变关系

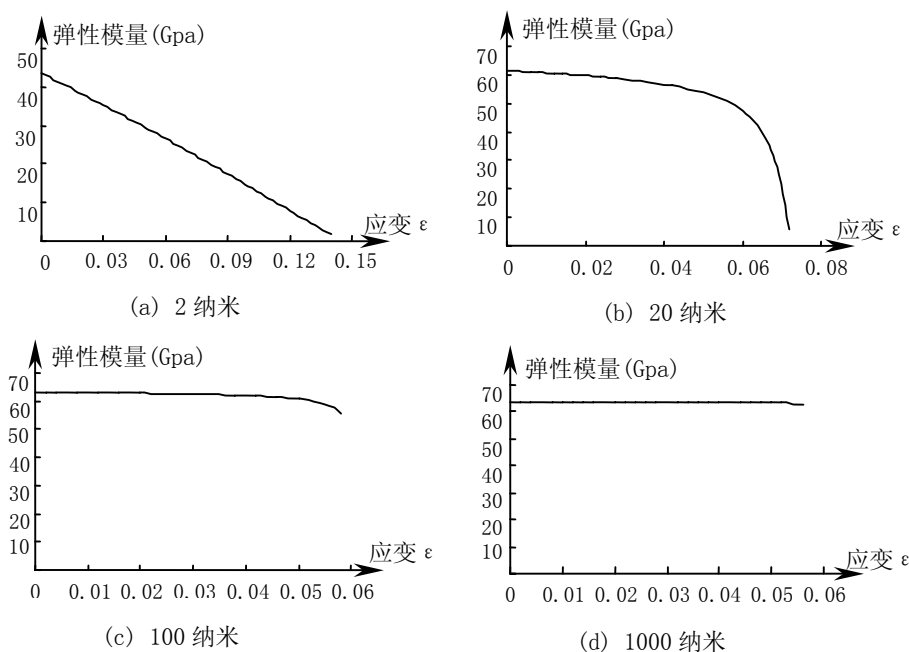


图 9 不同晶粒尺寸的铝晶体弹模与应变关系

增强。

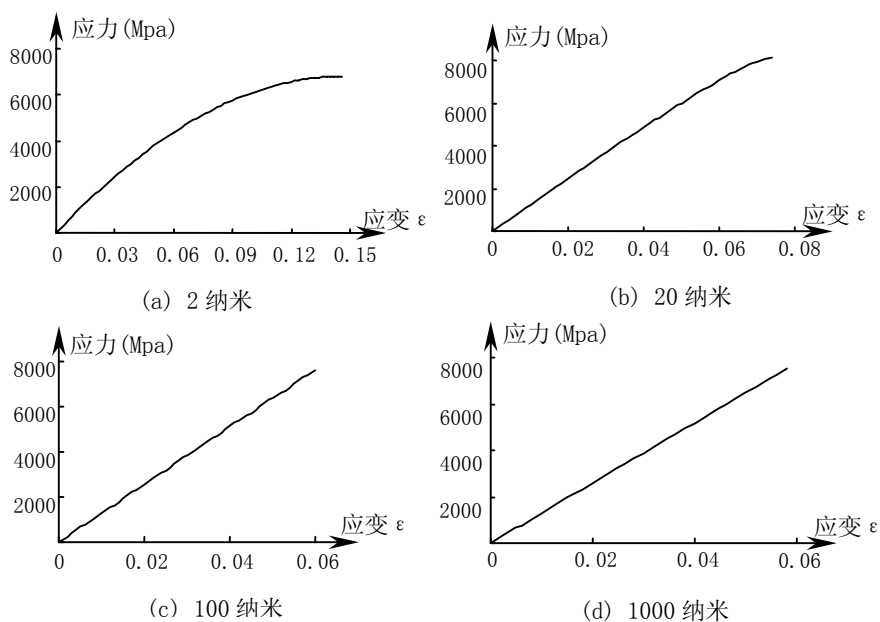


图 10 不同晶粒尺寸的铜晶体应力应变关系

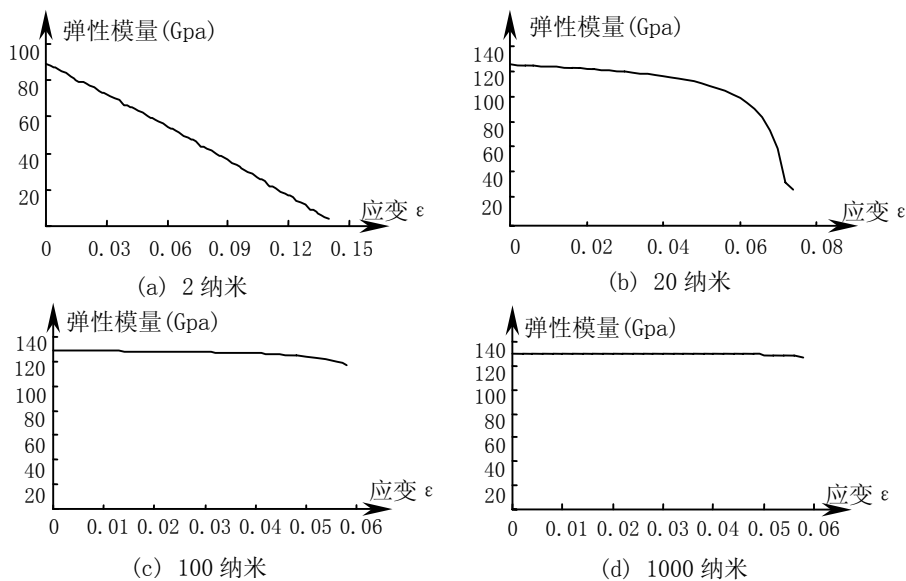


图 11 铜晶体弹性模量与应变关系

4. 结论

从铁、铝、铜三种金属不同晶粒尺寸的晶体在线性逐步加载过程中，应力应变关系曲线可以看出，随着晶粒尺寸的减小，材料的非线性本构特征更加明显，并且，材料的延展性也随之增强。图 12 是梁海弋等^[3]人用分子动力学方法模拟得到的纳米铜单晶体在单向拉伸状态下应力应变关系曲线，可

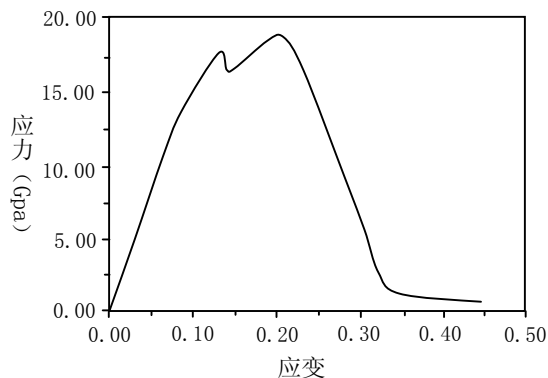


图 12 应力应变曲线

见,与本文用复合有限元方法模拟得到的三种金属晶粒尺寸在纳米量级时的应力应变关系曲线非常相似,都表现出一定的非线性特征。且其伸长量也较普通晶体增强了很多。这些特征与很多学者经过实验发现的纳米材料的韧性和超塑性不谋而合。由此可以看出晶粒尺寸对纳米材料的宏观力学性能有很大的影响,与纳米材料的其他微观结构特性共同导致了纳米材料不同于普通晶体材料的宏观力学性能。

本文的模拟思想及其模型对研究纳米材料的力学性能有着很大的潜力,但是还处在探索阶段,需要大量改进。

参考文献

- [1] 文玉华,刘曰武等,纳米晶铜单向拉伸变形的分子动力学模拟,力学学报,2002,34(1):29~36
- [2] 王刚锋,冯西桥,余寿文,纳米晶体材料的有效弹性模量与界面效应,科学通报,2002,47(14):1062~1065
- [3] 梁海弋,王秀喜等,纳米铜单晶拉伸力学性能的分子动力学模拟,中国科学技术大学学报,2001,31(4):454~458
- [4] 基于 FEFG 有限元方法,北京火箭软件有限公司,2003.

NUMERICAL SIMULATION OF THE UNIAXIAL TENSILE DEFORMATION OF NANOCRYSTALLINE METALS

Li Lin'an Di Yuxian Li Hongqi

Department of Mechanical Engineering, The university of Tianjin, 300072

Abstract Mixed atomistic (molecular dynamics) and continuum (finite element) methods offer the possibility of carrying out simulations of nanocrystalline (NC) materials mechanical property. A phase mixture model in which nanocrystalline materials(α -Fe,Cu,Al etc)is regarded as a mixture of crystalline phases and intercrystalline phases(grain-boundary, triple line junction and quadratic node)and pores is presented. Elastic modules of NC material was simulated by means of finite element program automatic generate system-FEFG. The effects of grain size were investigated in the literature. With a decrease of grain size and a volume fraction of grain boundary and porosity, it was found that, the macro elastic modulus declined step by step. The calculated results are compared with previously published experimental data.

Keywords: Nanophase metals, Molecular dynamics, Finite element, Numerical simulation, Elastic modulus