

超高应变率力学效应下多晶铜的微观塑性变形分子动力学模拟

王志龙 罗开玉 刘月 鲁金忠

江苏大学机械工程学院, 江苏 镇江 212013

摘要 激光冲击强化利用离子体力学效应在金属表面形成较深的残余压应力层, 细化表层晶粒, 大幅度提高金属抗疲劳、抗磨损和抗腐蚀等机械性能。目前现有实验手段很难获取超高应变速率下塑性变形过程中微观结构演变的动态过程。本文采用LAMMPS软件对在 $2 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ 应变率, 15 ns的加载时间, 300 K温度下的多晶铜塑性变形行为进行分子动力学模拟, 获得超高应变速率力学效应下多晶铜塑性变形微观结构的演变过程。超高应变率下力学效应作用下, 形变孪晶是中层错能金属亚微米晶粒细化的主要变形方式。

关键词 激光技术; 超高应变率; 力学效应; 塑性变形; 分子动力学; 多晶铜

中图分类号 TN249 **文献标识码** A

doi: 10.3788/CJL201542.0703005

Molecular Dynamics Simulation of Plastic Deformation of Polycrystalline Cu under Mechanical Effect with Ultrahigh Strain Rate

Wang Zhilong Luo Kaiyu Liu Yue Lu Jinzhong

School of Mechanical Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang, Jiangsu 212013, China

Abstract Laser shock processing utilizes mechanical effect with ultrahigh strain rate to generate deeper residual compressive stress and grain refinement layer, which improves mechanical properties, such as fatigue resistance, wear resistance and corrosion resistance. To date, it is very difficult to present dynamic microstructure evolution at ultra-short time (several ten nanoseconds) during the plastic deformation at ultrahigh strain rate using experimental method. At temperature of 300 K, a molecular dynamics of polycrystalline Cu with a loading duration of 15 ns at a strain rate of $2 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ is conducted to describe the microstructure evolution process with the LAMMPS soft. Under the mechanical effect of laser shock wave with a ultra-high strain rate, deformation twinning is the important microstructure of grain refinement of the alloys with medium stacking fault energy.

Key words laser technique; ultrahigh strain rate; mechanical effect; plastic deformation; molecular dynamics; polycrystalline Cu

OCIS codes 350.3390; 310.4925; 120.6660

1 引言

超高应变率力学效应强化技术(如激光冲击强化)具有高压、高能、超快和超高应变率等特点, 利用超高应变率力学效应使金属表层的晶粒细化, 从而提高疲劳寿命, 抗腐蚀和抗磨损能力。李兴成等^[1]研究的激光冲击 AZ31 镁合金的抗腐蚀性能, 结果表明激光冲击后自腐蚀电位提高, 腐蚀电流增大, 抗腐蚀性有所降低, 但激光冲击后镁合金抗应力腐蚀性能提高。柴艳等^[2]对 K4030 合金叶片激光冲击强化后的疲劳性能的研究表明激光冲击强化可显著提高其复合疲劳安全寿命。罗密等^[3]利用 ABAQUS 非线性有限元软件计算了激光

收稿日期: 2015-01-16; 收到修改稿日期: 2015-04-07

基金项目: 国家自然科学基金(51275220)、江苏省杰出青年基金项目(BK20140012)、江苏省“六大人才高峰”高层次人才项目(2014-ZBZZ-015)、江苏省高校自然科学研究重大项目(14KJA460002)、江苏省高校“青蓝工程”骨干教师计划等

作者简介: 王志龙(1989—), 硕士研究生, 主要从事激光表面改性技术方面的研究。E-mail: spyitachi525@sina.cn

导师简介: 鲁金忠(1975—), 男, 教授, 博士生导师, 主要从事激光冲击波非传统制造技术方面的研究。

E-mail: jzlu@ujs.edu.cn

冲击强化 7075-T6 铝合金焊缝前后的残余应力场分布,结果表明激光冲击强化使得焊缝的拉应力状态转变为高幅压应力状态。面心立方金属在力学效应下其晶粒细化过程与位错运动有十分密切的关系,高密度位错通过复杂的运动演变成各种位错组态,最终形成亚晶界或晶界将晶粒分割,使晶粒细化^[4-5]。在当前试验条件下只能反映某些特定时刻金属内部的静态微观特征,无法观察到高应变率下力学效应与金属原子微观结构相互作用演变的动态过程,很难进一步分析高应变率力学效应下金属亚晶界或晶界形成的详细过程。

分子动力学模拟是一种在原子、分子水平上求解多体问题的重要的模拟方法,可以计算纳秒量级超短时间内纳米尺度上的金属材料原子量级动力学特性,是反映超短时间内金属材料原子量级微观演化瞬时过程的有效手段^[6]。张俊杰等^[7]利用分子动力学研究了纳米晶体铜加工过程中的位错形核及运动、晶界变形和孪晶变形等问题,获得了纳米晶体铜的纳米机械加工机理。王贵民等^[8]在原子尺度上研究了纳米孪晶铜在单向拉伸载荷和压痕作用下的力学性能,提出了纳米孪晶界力学性能提高的内在机制,从原子尺度解释孪晶界在变形过程中所起到的强化和钝化机理。Kadoyoshi 等^[9]通过分子动力学模拟发现面心立方金属中由空位形成的不同尺寸的不等边六边形弗兰克位错圈可通过位错分解转变为层错四面体,并给出了形成六边形弗兰克位错圈需要满足的特定条件。以上研究基本都是采用分子动力学解决原子或者分子级别的微观组织的瞬时变化的难题。本课题组以前的研究表明,在超强激光冲击波的力学作用下能使面心立方金属从亚晶转化为细化晶粒,但是在高应变率力学效应下动态再结晶过程不清晰,而这正是激光冲击波强化面心立方金属纳米化和晶粒细化机制的关键所在。

针对上述问题,本文以多晶铜为研究对象,采用 LAMMPS 软件分子动力学模拟超高应变率力学效应下纳米多晶铜过程,包括弹性变形、塑性变形阶段,通过观察微观结构的动态演变过程,并结合现有研究成果对相关现象进行分析和解释,进一步研究纳米尺度下超高应变率力学效应强化面心立方金属的位错运动,从而获得晶粒细化机理,为大规模的激光冲击波强化等技术的工业应用提供理论依据。

2 Cu 多晶体模型建立与计算方法

模拟中多晶铜通过 Voronoi^[10]方法构建,包括 4 个晶粒,其结构如图 1 所示。其中晶粒 I 沿 X, Y, Z 轴的晶向分别为 [1 0 0], [0 1 0], [0 0 1]; 晶粒 II、晶粒 III、晶粒 IV 的晶向分别为晶粒 I 的晶向绕 Z 轴逆时针旋转 20°、30° 和 50°。其中铜原子均匀分布在 4 个晶粒中,构建的多晶铜包含 443399 个原子。

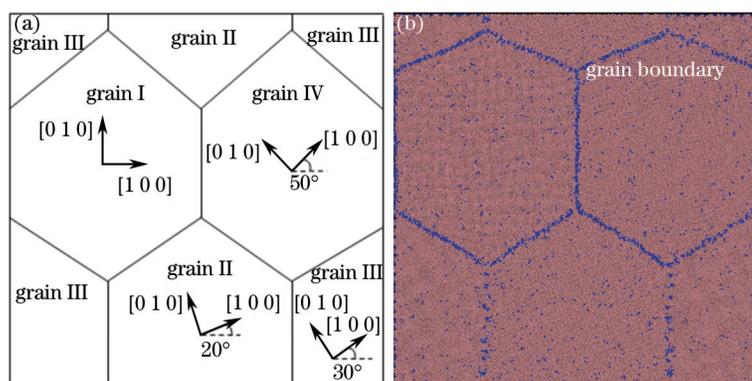


图 1 (a) Cu 多晶体结构示意图; (b) Cu 多晶体原点对应的截面图像

Fig.1 (a) Schematic illustration of polycrystalline Cu; (b) cross-section image of polycrystalline Cu at origin point

本次采用 LAMMPS^[11]软件进行分子动力学模拟,采用 Cai 等^[12]提供的铜势函数。首先根据马文等^[13]提出的纳米多晶金属样本的构建方法对初始 Cu 多晶体进行弛豫。第一步,采用最速下降法进行局部能量最小化,步长为 1 fs;第二步,采用升温退火法进行全局能量最小化,形成等温等压(NPT)系综,弛豫温度设定为 300 K,步长为 1 fs,弛豫时间为 50 ps。弛豫结束后 Cu 多晶体沿 X, Y, Z 轴的尺寸分别为 54.224, 54.224 和 1.807 nm, Z 方向上的尺寸大于原子间势函数的截断半径^[14]。加载在等温等压(NPT)系综下进行, X、Y、Z 三个方向均施加周期性边界条件,步长为 5 fs,沿 Y 轴负方向施加均匀恒定的应变率为 $2 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$,作用时间为 15 ns。采用 Ackland 等^[15]提出的缺陷原子识别方法对输出文件进行处理,对位错、滑移等晶体缺陷进行标识,并应用可视化软件 VMD^[16]显示瞬时计算结果。

3 模拟结果与分析

3.1 应力-应变曲线和微观结构的演变

图2所示为多晶铜的应力-应变曲线,图中OA段对应于弹性变形阶段。在A点(应力值为2.51 GPa)之后应力急剧下降,表明多晶铜开始进入塑性变形阶段。塑性变形阶段的应力值在0.179~2.51 GPa之间持续波动,出现多个局部峰值点和局部谷值点,这些局部峰值点的应力值均小于A点。图3(a)为A点对应的多晶铜截面图像,可知晶粒IV内的晶界发生了弯曲,同时晶粒I[图3(b)]和晶粒III[图3(c)]内靠近晶界的位置出现了滑移带,表明在塑性变形开始,滑移带开动。

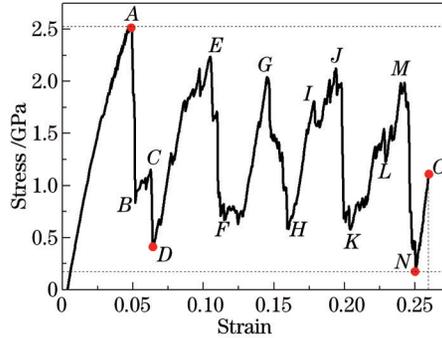


图2 多晶铜应力-应变曲线

Fig.2 Stress-strain curve of polycrystalline Cu

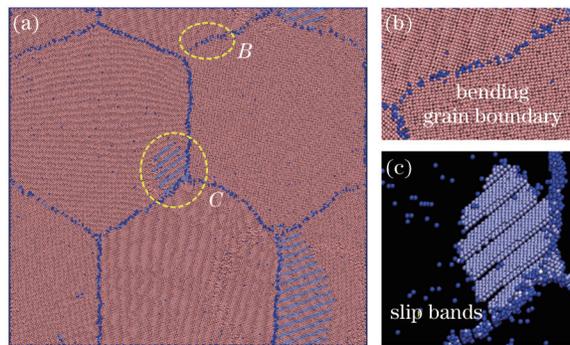


图3 (a) A点对应的多晶铜截面图像; (b) 晶粒I内滑移带(隐去FCC原子); (c) 晶粒III内滑移带(隐去FCC原子)

Fig.3 (a) Cross-section image of polycrystalline Cu at A point; (b) slip in grain I (hide FCC atoms); (c) slip in grain III (hide FCC atoms)

图4(a)所示为应力-应变曲线上D点所对应的多晶铜的截面图像,与图3(a)相比,晶粒III中的滑移带明显增多,并且晶粒I和晶粒II内已经被滑移带充满。从A点到D点总体应力值下降的趋势表明随着塑性变形的进行,其晶粒内部滑移带逐渐增多。图4(a)中晶粒内部大部分区域都被滑移带所覆盖,从而导致未滑移区域内的位错密度大幅增加,对滑移形成一定的抑制作用。因此,在D点之后,应力值逐渐上升。

图5(a)所示为应力-应变曲线上N点所对应的多晶铜的截面图像,从图5(b)中可以看到在晶粒I内出现

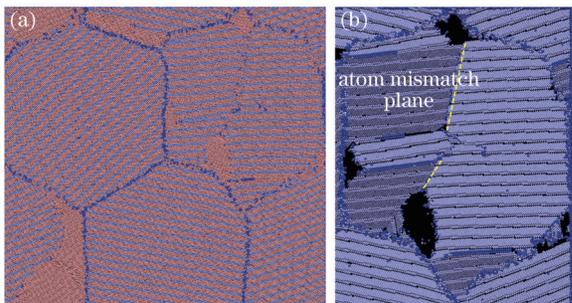


图4 (a) D点对应的多晶铜截面图像; (b) D点对应的晶粒IV (隐去FCC原子)

Fig.4 (a) Cross-section image of polycrystalline Cu at D point; (b) image of grain IV at D point (hide FCC atoms)

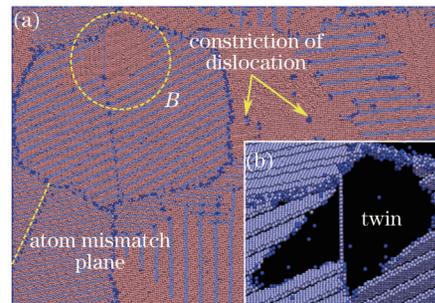


图5 (a) N点对应的多晶铜截面图像; (b) N点对应的晶粒I (隐去FCC原子)

Fig.5 (a) Cross-section image of polycrystalline Cu at N point; (b) image of grain I at N point (hide FCC atoms)

了孪晶界,孪晶同部分位错的运动密切相关,孪晶界可以阻碍与其相交的滑移面上的位错的运动,同时领先位错钉扎在孪晶界上并与孪晶界相互作用。随着位错的塞积,孪晶界与位错相互作用处应力增大导致该处分解沿着孪晶界面滑动的位错,这就释放了高度集中的应力,有利于金属晶体材料变形的韧性和延展性^[8]。

图 6(a)所示为应力-应变曲线上 *O* 点所对应的多晶铜的截面图像,从图 6(b)中可以看到晶粒 I 内孪晶界较于图 5(a)所示的已经扩展到整个晶粒,正是由于孪晶界阻碍了滑移位错运动,随之滑移带消失殆尽,孪晶要在晶体已发生一定变形的情况下才开始进行,而且降低层错能有利于孪晶的产生^[7]。孪晶界的扩展正是 MN 段应力下降的原因。

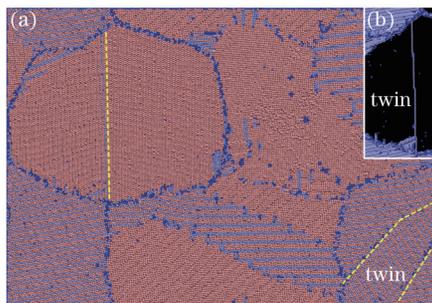


图 6 (a) *O* 点对应的多晶铜截面图像; (b) *O* 点对应的晶粒 I (隐去 FCC 原子)

Fig.6 (a) Cross-section image of polycrystalline Cu at *O* point; (b) image of grain I at *O* point (hide FCC atoms)

3.2 典型晶粒微观结构变化过程

如图 7(a)和(b)所示,当应力值增大到一定程度时会诱发二次滑移(应力-应变曲线的 *GH*, *JK*, *MN* 以及 *NO* 段),应力-应变曲线上 *G*, *J* 和 *M* 点的应力值均大于等于 2.0 GPa; 如图 A1、A2 圈内晶粒的变化,其为位错攀移,箭头所示为攀移方向,从图 7(b)中可以看出其攀移范围加大,由于位错攀移是一种扩散运动,要求晶粒内必须存在一定数量的空位,并且需要有足够的攀移力。由于较高的温度有利于扩散运动,而低温不利于扩散运动,因此通常认为位错攀移在室温下不容易发生,只有在温度升高到一定值时才可能出现^[18]。而本次模拟在室温条件下,晶粒内出现了位错攀移,这是由于在高应变率塑性变形条件下,一方面晶粒内部发生大规模的滑移以及各种位错反应,从而在晶粒内形成大量的空位;另一方面,从应力曲线可以看出晶粒内的应力值很高(约 2.0 GPa),可以提供足够大的攀移力。因此,位错攀移可以在室温条件下进行,使各亚晶界之间的作用力达到均衡的状态,形成尺寸均匀的亚晶界,从而减小内应力。如图 7(a)和(b)中所示的 B1 与 B2 圈内晶粒的变化, B1 内存在小部分的位错,在 B2 中其位错逐步扩大至占据 B2 的大部分范围,这是由于为了使位错穿透晶界,必须施加足够的的应力,以驱动位错穿过晶界的应力场^[18]。如上所述,此时晶粒内的应力值很高到达约 2.0 GPa,正是此原因造成了大量位错的产生。

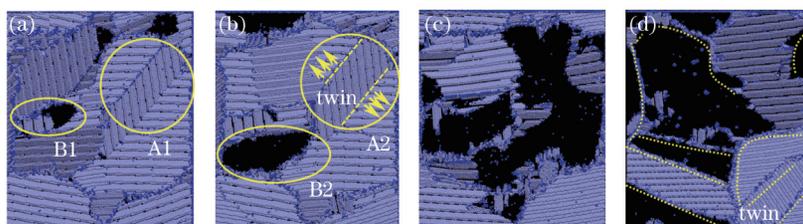


图 7 晶粒 IV 微观变化过程图(隐去 FCC 原子)

Fig.7 Microstructure transition of grain IV (hide FCC atoms)

如图 7(c)和(d)所示,晶粒 IV 内形成了更多的晶界,激光冲击形成的超高应变,形成的不同的位错导致了表面层原始晶粒内位错和位错缠结结构的形成。这些位错墙和位错缠结结构把原始粗晶粒细分成更小的不同尺寸的位错胞块。当变形应变量达到一定程度时,即位错墙和位错缠结结构内的位错密度达到一定值时,这些位错开始湮灭、重排,形成位错墙,把原始粗晶粒细分成各个不同的亚晶,形成细化的晶粒^[4]。晶粒细化后, *F* 点之后的应力-应变曲线的变化表明多晶铜体抵抗塑性变形的能力明显增强。由于晶粒细化后原子错排面、孪晶对滑移的阻碍作用明显增强,滑移(*G*点)、位错束集(*N*点)和二次滑移(*F*点)都只能在小范围内进行,减小了应力值下降的幅度,从而提高抵抗塑性变形的能力。晶界的特点和结构对滑移-晶界相互作用

产生的能量势垒有着重要影响,因为能量势垒和边界面的能量之间存在很强的相关性。晶界较低的静态界面能提供在晶界产生的滑移和形核的屏障^[9]。由于晶界的阻碍作用,晶粒内部产生滑移、位错、位错攀移等运动,使得原有的粗晶粒不断的细化,从而有效的增强了抵抗塑性变形的能力。

4 结 论

1) 在超高应变率载荷力学效应作用下,多晶铜的塑性变形以滑移方式为主,各晶粒内的滑移系按照施密特因子的大小依次开动,形成初始滑移带。

2) 在塑性变形过程中,当变形应变量达到一定程度时,即位错墙和位错缠结结构内的位错密度达到一定值时,这些位错开始湮灭、重排,形成位错墙,把原始粗晶粒细分成各个不同的亚晶,形成细化的晶粒。晶粒细化后多晶铜体抵抗塑性变形的能力明显增强。

3) 超高应变率下力学效应作用下,晶体内部会通过位错束集进行动态回复,位错束集会使晶粒内的位错大量减少,原子错排面消失,形变孪晶是中层错能金属亚微米晶粒细化的主要变形方式。

参 考 文 献

- 1 X C Li, Y K Zhang, Y L Lu, *et al.*. Research of corrosion resistance for AZ31 Magnesium alloy by laser shock processing[J]. Chinese J Lasers, 2014, 37(4): 0403002.
李兴成, 张永康, 卢雅琳, 等. 激光冲击 AZ31 镁合金抗腐蚀性研究[J]. 中国激光, 2014, 37(4): 0403002.
- 2 Y Chai, J Ren, W F He, *et al.*. Effect of laser shock processing on the fatigue property of K4030 alloy blade[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2014, 51(1): 011405.
柴 艳, 任 军, 何卫锋, 等. 激光冲击强化对 K4030 合金叶片疲劳性能的影响[J]. 激光与光电子学进展, 2014, 51(1): 011405.
- 3 M Luo, K Y Luo, Q W Wang, *et al.*. Numerical simulation of laser shock peening on residual stress field of 7075-T6 aluminum alloy welding[J]. Acta Optica Sinica, 2014, 34(4): 0414003.
罗 密, 罗开玉, 王庆伟, 等. 激光冲击 7075-T6 铝合金焊缝的残余应力场数值模拟[J]. 光学学报, 2014, 34(4): 0414003.
- 4 J Z Lu, K Y Luo, A X Feng, *et al.*. Micro-structure enhancement mechanism of LY2 aluminum alloy by means of a single laser shock processing[J]. Chinese J Lasers, 2010, 37(10): 2662-2666.
鲁金忠, 罗开玉, 冯爱新, 等. 激光单次冲击 LY2 铝合金微观强化机制研究[J]. 中国激光, 2010, 37(10): 2662-2666.
- 5 J Z Lu, K Y Luo, Y K Zhang, *et al.*. Grain refinement of LY2 aluminum alloy induced by ultra-high plastic strain during multiple laser shock processing impacts[J]. Acta Materialia, 2010, 58(11): 3984-3994.
- 6 B J Alder, T E Wainwright. Studies in molecular dynamics. I . general method[J]. The Journal of Chemical Physics, 1959, 31(2): 459-466.
- 7 Zhang Junjie. Molecular Dynamics Study of Generation Mechanism of Surface Layer in Nanomechanical Machining of Crystalline Copper[D]. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2011.
张俊杰. 基于分子动力学的晶体铜纳米机械加工表层形成机理研究[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2011.
- 8 Wang Guimin. Molecular Dynamics Simulation of the Mechanical Behavior of Nanotwinned Copper[D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2011.
王贵民. 纳米孪晶铜力学性能的分子动力学模拟[D]. 杭州: 浙江大学, 2011.
- 9 T Kadoyoshi, H Kaburaki, F Shimizu, *et al.*. Molecular dynamics study on the formation of stacking fault tetrahedra and unfaulting of Frank loops in fcc metals[J]. Acta Materialia, 2007, 55(9): 3073-3080.
- 10 J Schiøtz, T Vegge, F D DiTolla, *et al.*. Atomic-scale simulations of the mechanical deformation of nanocrystalline metals[J]. Physical Review B, 1999, 60(17): 11971-11983.
- 11 S Plimpton. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics[J]. Journal of Computational Physics, 1995, 117: 1-19.
- 12 J Cai, Y Y Ye. Simple analytical embedded-atom-potential model including a long-range force for fcc metals and their alloys[J]. Physical Review B Condensed Matter, 1996, 54(12): 8398-8410.
- 13 W Ma, W J Zhu, Y L Zhang, *et al.*. Construction of metallic nanocrystalline samples by molecular dynamics simulation[J]. Acta Physica Sinica, 2010, 59(7): 4781-4787.
马 文, 祝文军, 张亚林, 等. 纳米多晶金属样本构建的分子动力学模拟研究[J]. 物理学报, 2010, 59(7): 4781-4787.

- 14 A P Gerlich, L Yue, P F Mendez, *et al.*. Plastic deformation of polycrystalline aluminum at high temperatures and strain rate[J]. *Acta Materialia*, 2010, 58(6): 2176–2185.
- 15 G J Ackland, A P Jones. Applications of local crystal structure measures in experiment and simulation[J]. *Physical Review B*, 2006, 73(5): 054104.
- 16 W Humphrey, A Dalke, K Schulten. VMD: visual molecular dynamics[J]. *Journal of Molecular Graphics*, 1996, 14(1): 33–38.
- 17 H F Lou, M P Wang, N Tang, *et al.*. Microstructures of twin-roll cast AZ31B Mg alloy and its deformation mechanism[J]. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*, 2008, 18(9): 1584–1589.
 娄花芬, 汪明朴, 唐 宁, 等. AZ31B 镁合金的铸轧组织及其相关变形机制[J]. *中国有色金属学报*, 2008, 18(9): 1584–1589.
- 18 J P Hirth, J Lothe. *Theory of Dislocations*[M]. New York: Wiley & Sons, 1982.
- 19 M D Sangid, T Ezaz, H Sehitoglu, *et al.*. Energy of slip transmission and nucleation at grain boundaries[J]. *Acta Materialia*, 2011, 59(1): 283–296.

栏目编辑: 宋梅梅