

含缺口纳晶铜的失效行为研究

佟尚¹,周剑秋^{1,2},张烽¹,杨宝童¹

(1. 南京工业大学 机械与动力工程学院,江苏 南京 210009;

2. 武汉工程大学 机械与动力工程学院,湖北 武汉 430070)

摘要:模拟了含有缺口的纳晶铜在拉伸载荷下的变形情况,研究缺口对纳晶铜失效行为的影响。结果表明,缺口对纳晶铜失效行为的影响与缺口的尺寸有关。随着缺口尺寸的增大,缺口对纳晶铜的失效影响愈发明显,缺口的临界值尺寸等于纳晶铜晶粒的平均尺寸。同时,通过不同模型间的对比发现,纳晶铜对缺口的敏感性与缺口形状和样本尺寸无关。

关键词:纳晶铜;缺口;分子模拟;剪切带;失效行为

中图分类号:TB302.3 **文献标志码:**A **文章编号:**1671-5276(2019)04-0014-03

Study of Failure Behavior of Notched Nanocrystalline Copper

TONG Shang¹, ZHOU Jianqiu^{1,2}, ZHANG Feng¹, YANG Baotong¹

(1. Department of Mechanical Engineering, Nanjing Tech. University, Nanjing 210009, China;

2. Department of Mechanical Engineering, Wuhan University of Technology, Wuhan 430070, China)

Abstract: The deformation of notched nanocrystalline copper under tensile load is simulated, and the effect of the notch on the failure behavior of nanocrystalline copper is studied. The results show that its effect is related to the size of the notch. With the size increasing, the effect becomes more obvious. The critical value of the notch is equal to the average size of the nanocrystalline copper crystal grains. At the same time, through the comparison between different models, it is found that the sensitivity of the nanocrystalline copper to the notch is independent of the notch shape and the sample size.

Keywords: nanocrystalline Cu; notch; molecular simulation; shear band; failure behavior

0 引言

纳晶材料是20世纪80年代最伟大的发明之一,凭借着自身优异的性能,在多个领域都拥有广泛的应用前景^[1-3]。纳晶材料的强度、硬度和耐磨性等性能较传统粗晶材料而言有着巨大的提升,但是韧性和塑性却有明显的降低,这个缺点极大地限制了纳晶材料的实际工程应用^[4-6]。内部结构缺陷是纳晶材料低韧性的主要原因。由于制备工艺的不完善,实验制备的纳晶材料总会存在一些结构缺陷,如缺口、裂纹、孔洞等。这些缺陷会导致应力集中现象,从而使材料内部产生剪切带,影响材料的力学性能。

随着计算机性能的不断提升,越来越多的学者借用计算机模拟来研究纳晶材料的力学性能,分子动力学模拟是经常使用的模拟方法之一^[7]。通过计算机进行纳晶材料的分子模拟,可以清晰地观察到材料变形过程中原子的运动轨迹和变形过程,发现实验研究中无法获取的信息,为实验研究和理论探索提供帮助。本文通过分子动力学模拟研究了缺口对纳晶铜失效行为的影响。

1 计算方法

本文运用分子动力学模拟软件(large-scale atomic/

molecular massively parallel simulator, LAMMPS)^[8]构建了纳晶铜样本,并采用Mishin等人开发的铜的EAM势函数^[9]作为本模型中铜原子之间的相互作用势。首先将样本的 x 轴方向设置为自由表面,并在 y 轴和 z 轴方向上施加周期性边界条件。为了消除分子间的内部应力,在施加拉伸载荷之前,先将样本进行NPT系宗下的弛豫。弛豫过程中各个方向上的压力控制为0,温度保持在300 K,整个过程持续100 ps。弛豫完成后,沿样本的 x 轴方向施加拉伸载荷,当样本的整体应变达到30%时结束加载,时间步长选0.002 ps。该过程的应变率控制为 10^9 s^{-1} ,温度仍然保持在300 K。为了研究缺口对样本失效的影响,本次模拟总共包含2个模型,尺寸分别为 $50 \times 25 \times 4 \text{ nm}^3$ 和 $80 \times 40 \times 4 \text{ nm}^3$,并且平均晶粒尺寸都为5 nm,如图1a)和图1b)所示。模拟过程采用可视化软件OVITO^[10]观察,模拟结束后通过共同近邻分析(CNA)法对观察得到的数据和图片,并进行分析处理。

2 结果分析

为了研究缺口尺寸对纳晶铜失效行为的影响,在模型的一侧设置了不同尺寸的缺口,由于模型相似,分析方法相同,以下分析过程以 $50 \times 25 \times 4 \text{ nm}^3$ 的样本和U形缺口为

基金项目:国家自然科学基金(10872087;11272143)

作者简介:佟尚(1992—),男,江苏徐州人,硕士研究生,研究方向为纳米晶体材料力学性能。

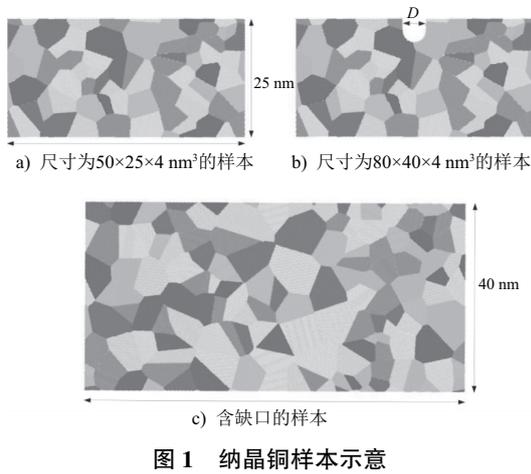


图1 纳晶铜样本示意

例,如图1c)所示。

图2所示的是不同缺口尺寸下,纳晶铜样本在拉伸过程中的应力应变曲线。为了更清楚地显示出在拉伸条件下缺口尺寸对样本变形的影响,将不含缺口以及缺口尺寸为2 nm和5 nm的纳晶铜样本的应力应变曲线放在图2a)中,不含缺口以及缺口尺寸为10 nm和15 nm的纳晶铜样本的应力应变曲线放在图2b)中。其中,图2a)中样本的缺口尺寸 $D \leq$ 晶粒的平均尺寸 d ;图2b)中样本的缺口尺寸 D 则 $>$ 晶粒的平均尺寸 d 。通过对比图2a)、图2b)两张曲线图发现,当 $D \leq d$ 时,3条曲线的走势基本相似。当应变率为6%时,应力达到最高值2.5 GPa左右,随着进一步的拉伸,应力上下波动,没有明显的变化。然而,在 $D > d$ 时,应力的最大值 $<$ 2.5 GPa,并且应力在达到最大值后不久就快速下降。

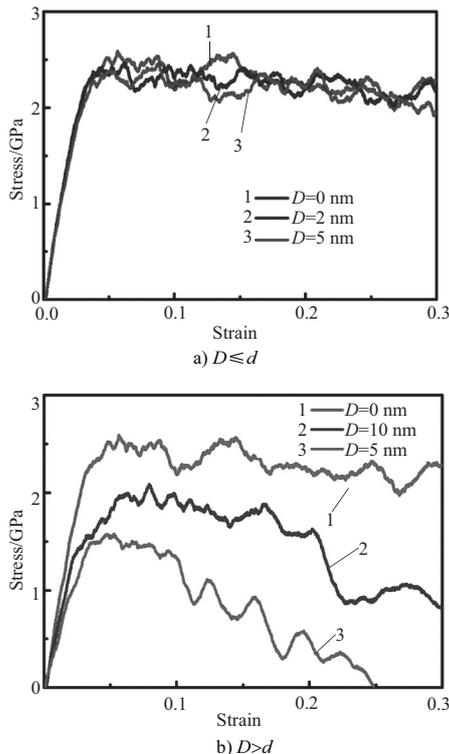


图2 含有不同尺寸缺口的纳晶铜在拉伸载荷下的应力应变曲线

图3所示的是不含缺口以及缺口尺寸为2 nm和5 nm的纳晶铜样本在拉伸载荷下微观结构演变的过程。可以发现,在应变为15%时,3个样本微观结构的变形几乎一致。这些剪切应变并没有集中在某一区域,而是在样品中随机分布,并且大小相近,因此3个样本的变形基本一致。图2说明,当 $D \leq d$ 时,样本的变形与缺口的大小无关。

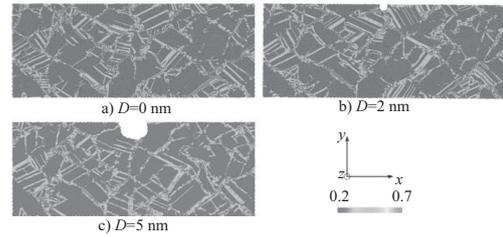


图3 缺口尺寸为0 nm、2 nm和5 nm的纳晶铜样本在拉伸载荷下的微观结构演变图

图4所示的是缺口尺寸为10 nm和15 nm的纳晶铜样本在拉伸载荷下微观结构的演化过程。当应变达到9.6%时(对应图2b)中应力应变曲线的第1次明显下降),剪切应变聚集在缺口根部并穿过整个样本,形成了一条与拉伸方向呈45°角的剪切带。通过比较几张图片可以看出,随着应变的增加,剪切带越来越明显,直到在应变为24.8%时样本断裂,同时应力应变曲线也降为0。在整个拉伸过程中,应力应变曲线在达到最高点后,整体呈下降趋势。初始的剪切应变主要出现在缺口的根部位置并在此聚集,随后穿过晶界并沿晶界滑移,直到贯穿整个试样,这也是剪切带形成的主要原因。因此,样本的失效与缺口有一定的联系。图4说明,当 $D > d$ 时,纳晶铜样本的失效受到缺口的影响。

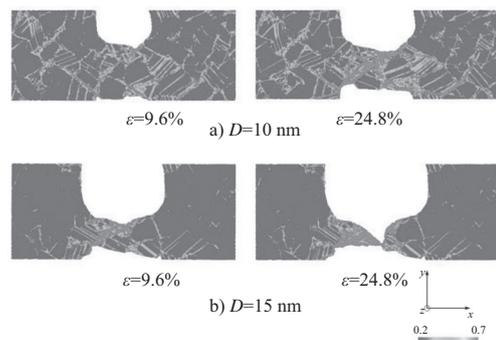


图4 缺口尺寸为10 nm和15 nm的纳晶铜样本在拉伸载荷下的微观结构演变图

模拟的结果表明,晶粒尺寸为5 nm的纳晶铜的失效行为与缺口的大小有关。当 $D \leq d$ 时,含缺口的样本的变形是均匀的,与不含缺口的样本变形相似,拉伸过程中产生的剪切应变均匀分布在样本中,并没有聚集在某一区域。相反,当 $D > d$ 时,剪切应变在缺口的根部产生并在此聚集,随后穿过晶界,沿晶界滑移直至贯穿整个试样,形成了一条明显的剪切带,并导致试样的最终失效。因此,缺口根部的应力集中是导致纳晶铜失效的一个重要因素。

从图4可以看出,应力集中主要出现在缺口的根部,

并且该位置的应力要大于整个样本的平均应力。如图2所示,当缺口的尺寸 $D \leq 5 \text{ nm}$ 时,拉伸过程中样本的最大应力大约为 2.5 GPa ,这与该材料的屈服应力近乎一致。这时,缺口处的应力大于屈服应力,因此,剪切应变通过晶界扩散到整个样本中,样本呈均匀变形。当缺口的尺寸 $D > 5 \text{ nm}$ 时,以 $D = 15 \text{ nm}$ 为例,拉伸过程中样本的最大应力大约为 1.5 GPa ,明显低于材料的屈服应力。因此,剪切应变堆积在缺口的根部,并没有发生扩散。当剪切应变达到一定临界值后,缺口根部形成一片大塑性变形区,并且随着拉伸的逐渐增加,大塑性变形贯穿了整个样本,形成了一条剪切带,最终导致材料失效。图5为CNA渲染的纳晶铜晶体结构示意图。

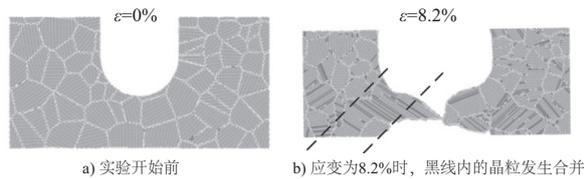
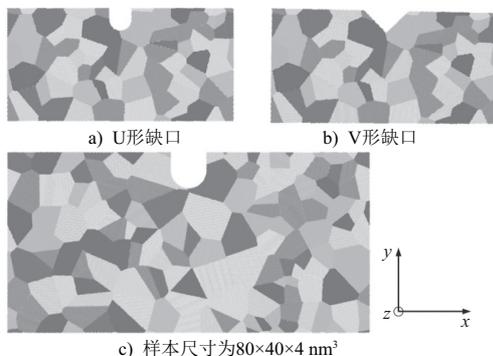


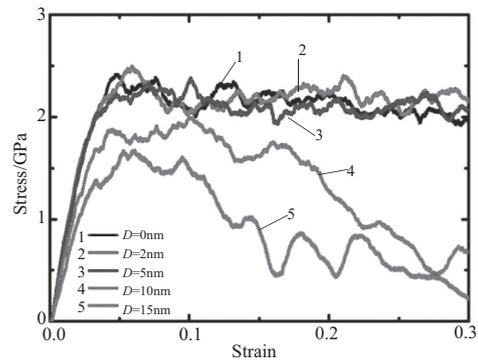
图5 通过CNA渲染、缺口尺寸为 15 nm 的纳晶铜的晶粒结构示意图

通过对比图5a)和图5b),可以发现在拉伸过程中晶粒发生了生长、合并的现象,这与前人的结论相一致。由于材料在变形过程中受到了较大的剪切应力,样本内部发生了晶界的迁移和晶粒的旋转,在二者共同作用下,发生了晶粒粗化现象,从而引起晶粒的生长。不过需要注意的是,这种现象主要发生在靠近应变局部化区域的晶界和晶粒内部,远离该区域的晶粒没有发生明显的变化,与变形前的结构基本一致。这个现象也解释了在拉伸变形中,剪切带出现在缺口根部的原因。

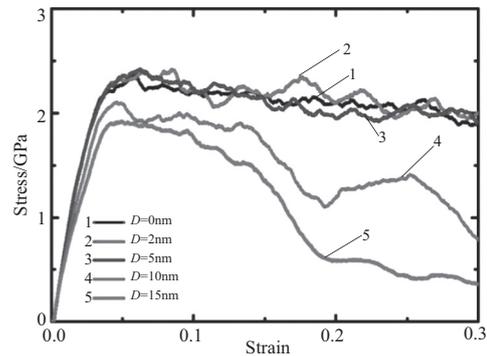
为了进一步验证上述结论,综合考虑了不同的缺口形状和样本尺寸。图6将上述模型的U形缺口改为V形缺口,在同样的条件下对样本进行拉伸,应力应变曲线如图6所示。可以看出,缺口形状改变后,应力应变曲线的变化并不明显,与上述结论相似。因此缺口对纳晶铜失效行为的影响与缺口形状无关。图6所示的是改变了样本尺寸的模型,样本尺寸由之前的 $50 \times 25 \times 4 \text{ nm}^3$,改为 $80 \times 40 \times 4 \text{ nm}^3$,而保持晶粒的平均尺寸仍为 5 nm 。图6e)是该样本在原条件下拉伸时的应力应变曲线,通过与图对比,发现曲线走势大致相同。综上所述,得到结论:缺口对纳晶铜失效行为的影响与缺口形状和样本尺寸无关。



c) 样本尺寸为 $80 \times 40 \times 4 \text{ nm}^3$



d) V形缺口下样本应力应变曲线图



e) c)图样本的应力应变曲线

图6 不同的缺口形状、样本尺寸及应力弯曲线

3 结语

本文运用分子动力学模拟建立了平均晶粒尺寸为 5 nm 的纳晶铜样本,以研究缺口对纳晶铜失效行为的影响。模拟结果表明,缺口对纳晶铜失效行为的影响与缺口的尺寸有关,并且临界值为晶粒的平均尺寸。当缺口的尺寸 $D \leq$ 晶粒平均尺寸 d 时,由于剪切应变在样本中均匀分布,样本的变形较为均匀。相反,当缺口的尺寸 $D >$ 晶粒平均尺寸 d 时,剪切应变集中在缺口根部,并随着拉伸的增加贯穿样本,形成了一条剪切带,导致材料失效。同时,通过对比发现,缺口对纳晶铜失效行为的影响与缺口形状和样本尺寸无关。这些发现为纳晶铜材料在实际生活和工程上的应用提供一定的依据。

参考文献:

- [1] 姜左. 纳米材料科学与技术展望[J]. 机械制造与自动化, 2002, 31(4): 1-2.
- [2] Wolf D, Yamakov V, Phillpot S, et al. Deformation of nanocrystalline materials by molecular-dynamics simulation: relationship to experiments? [J]. Acta Materialia, 2005, 53(1): 1-40.
- [3] Meyers M A, Mishra A, Benson D J. Mechanical properties of nanocrystalline materials [J]. Progress in materials science, 2006, 51(4): 427-556.
- [4] Singh A, Tang L, Dao M, et al. Fracture toughness and fatigue crack growth characteristics of nanotwinned copper [J]. Acta Materialia, 2011, 59(6): 2437-2446.

(下转第29页)

表 5 R 值曲线拟合算法测试结果

样本种类	厚度/mm	识别结果	r_{Al}	r_{Cu}
铝	40	铝	0.900 3	0.898 7
铝	60	铜	0.851 3	0.852 1
铜	30	铝	0.857 9	0.841 2
铜	40	铝	0.832 6	0.820 5

表 6 区域分块识别算法测试结果

样本种类	厚度/mm	识别结果	判断依据
铝	40	铝	$1\ 500 < I_L < 10\ 000$ & $R < 1.43$
铝	60	铝	$1\ 500 < I_L < 10\ 000$ & $R < 1.43$
铜	30	铜	$I_L < 1\ 500$
铜	40	铜	$I_L < 1\ 500$

从表 4 中可以看出,在使用 R 值曲线拟合算法时,当铝的厚度达到 40 mm,铜的厚度达到 30 mm 时,试件的数据与铜、铝样本拟合曲线的相关度指数区分度已经十分小,并且出现了误识别,该算法无法完成对铜、铝物料的有效识别。

从表 6 中可以看出,区域分块识别算法正确识别了所有试件的种类,其中通过低能透射信号值可正确识别 30 mm 与 40 mm 厚的铜,通过低能透射信号值与双能 R 值 2 个参数复合判别可正确识别 60 mm 厚的铝。

综合以上测试结果并结合前文分析可以得出,区域分块识别算法在适用厚度范围上相对其他基于双能 X 射线透射技术的识别算法有了较大的提升,将铜、铝的识别厚度范围分别扩大到了 2 mm~40 mm 和 1 mm~60 mm。

4 结语

本文主要对基于双能 X 射线透射技术的识别算法进

行研究,对多种识别算法进行了分析,针对各识别算法应用于废有色金属回收系统中存在的不足,提出了一种区域分块识别算法,并以铜、铝为例进行了试验验证。结果表明本文提出的算法扩大了可识别物料的厚度范围,有效提高了物料种类识别的准确率。

参考文献:

- [1] Mesina M B, De Jong T P R, Dalmijn W L. Automatic sorting of scrap metals with a combined electromagnetic and dual energy X-ray transmission sensor[J]. International Journal of Mineral Processing, 2007, 82(4): 222-232.
- [2] Bonnin A, Duvauchelle P, Kaftandjian V, et al. Concept of effective atomic number and effective mass density in dual-energy X-ray computed tomography[J]. Nuclear Instruments & Methods in Physics Research, 2014, 318(7): 223-231.
- [3] Kutila M, Viitanen J, Vattulainen A. Scrap Metal Sorting with Colour Vision and Inductive Sensor Array[C]. International Conference on Computational Intelligence for Modelling, Control and Automation and International Conference on Intelligent Agents, Web Technologies and Internet Commerce Vol. IEEE Computer Society, 2005:725-729.
- [4] 王艳翔. 双能 X 射线物质识别系统的研究[D]. 太原:中北大学,2017.
- [5] Zhi-Qiang Chen, Tiao Zhao, Liang Li. A curve-based material recognition method in MeV dual-energy X-ray imaging system[J]. Nuclear Science and Techniques, 2016, 27(1): 173-180.
- [6] 张润生,杨立瑞,孔维武. 双能量 X 射线材料分辨特性与有效原子序数关系分析[J]. 警察技术, 2010(2): 40-41.
- [7] 杨斌,叶文华,熊田忠,等. 双能 X 射线透射系统的噪声分析与滤波方法研究[J]. 机电工程, 2015, 32(7): 891-896, 908.
- [8] 毛冬辉,叶文华,熊田忠,等. 双能 X 射线识别金属物料的 R 值曲线拟合算法[J]. 机械制造与自动化, 2017, 46(5): 160-162, 166.
- [9] 王祺奥,叶文华,熊田忠,等. 废有色金属分选中散布物料动态位置的实时计算[J]. 机电工程, 2017, 34(1): 94-99.

收稿日期:2018-01-22