单晶 Cu 纳米杆拉伸力学特性的尺寸依赖性模拟 *

白清顺 童 振 梁迎春 陈家轩 王治国

(哈尔滨工业大学机电工程学院, 哈尔滨 150001)

摘 要 对圆形、方形截面形状的单晶 Cu 纳米杆拉伸变形过程进行了分子动力学模拟. 通过中心对称参数方法并结合位错形核理论分析了截面形状、截面面积和长细比对纳米杆拉伸力学特性的影响, 研究了单晶 Cu 纳米杆拉伸力学特性的尺寸依赖性. 结果表明: 首次屈服后, 纳米杆在“位错形核—位错延伸与滑移—晶格原子交叉滑移”的交替循环作用机制下, 产生塑性变形; 截面形状对纳米杆拉伸变形的初始塑性影响较小, 而对纳米杆拉伸力学特性的影响较大; 随着截面面积的增大, 两种截面形状的纳米杆都出现首次屈服点提前, 屈服应力减小和弹性模量增大的现象; 与方形截面形状纳米杆相比, 圆形截面形状纳米杆的屈服应力的变化率较小, 其弹性模量的变化率较大; 当截面面积增大到 500 nm^2 后, 两种截面形状纳米杆的弹性模量趋于稳定, 其值接近理论值 84 GPa. 加大仿真规模后, 长细比对纳米杆的拉伸力学特性略有影响.

关键词 分子动力学, 拉伸, 纳米杆, 位错形核, 力学特性

中图分类号 TG113.25, TB303 **文献标识码** A **文章编号** 0412-1961(2010)10-1173-08

SIMULATION OF SCALE DEPENDENCY ON TENSILE MECHANICAL PROPERTIES OF SINGLE CRYSTAL COPPER NANO-ROD

BAI Qingshun, TONG Zhen, LIANG Yingchun, CHEN Jiaxuan, WANG Zhiguo

School of Mechatronics Engineering, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001

Correspondent: TONG Zhen, Tel: (0451)86413840, E-mail: hit_tz@163.com

Supported by National Funds for Distinguished Young Scholars (No.50925521) and National Natural Science Foundation of China (No.50705023) and Natural Scientific Research Innovation Foundation in Harbin Institute of Technology (No.HIT.NSRIF.2009012) and Natural Science Foundation of Heilongjiang Province in China (No.E200903)

Manuscript received 2010-06-03, in revised form 2010-08-04

ABSTRACT The tension process of single crystal Cu nano-rods with different cross section shapes were simulated by molecular dynamics at atomic scale. Based on centrosymmetry parameter method and combined with the dislocation nucleation theory, the effect of cross-section shape, cross-sectional area and slenderness ratio on the tensile mechanical properties of the nano-rods were analyzed, and the scale dependency of tensile mechanical properties of the single crystal Cu nano-rods has been studied. The results show that after first yield, the nano-rods produce plastic deformation under the “dislocation nucleation—extended dislocation and sliding—lattice atom cross-slip” mechanism of the alternating cycle. The geometry of cross-section has negligible effects on the tensile initial plasticity of the nano-rods, while it shows apparent effects on the tensile mechanical properties. With the increase of cross-sectional area, two types of nano-rods have the phenomenon of early yield point, yield strength decreases and Young’s modulus increases. Compared with that of the square cross-sectional nano-rod, the variable rate of yield stress of the circular cross-sectional nano-rod is smaller and the variable rate of Young’s modulus is larger. As the cross-sectional area increases to 500 nm^2 , the Young’s modulus of the two types of nano-rods become stable, and is close to the theoretical value of 84 GPa. Moreover, the slenderness ratio of the nano-rods has a slight effect on the tensile mechanical properties when the

* 国家杰出青年科学基金项目 50925521, 国家自然科学基金项目 50705023, 哈尔滨工业大学科研创新基金项目

HIT.NSRIF.2009012 和黑龙江省自然科学基金项目 E200903 资助

收到初稿日期: 2010-06-03, 收到修改稿日期: 2010-08-04

作者简介: 白清顺, 男, 1974 年生, 副教授, 博士

DOI: 10.3724/SP.J.1037.2010.00266

simulation size increased.

KEY WORDS molecular dynamics, tension, nano-rod, dislocation nucleation, mechanical property

随着微机械系统 (MEMS) 的发展和纳米机械系统 (NEMS) 的出现^[1], 人们迫切要求深入了解纳米尺度下材料的力学行为和力学特性. 纳米杆作为纳米器件的基本构件, 对其力学特性进行详细地研究具有重要意义. 随着材料尺寸的减小, 材料中缺陷的存在机率降低, 强度提高, 材料的变形机理、力学特性表现出与块体材料不同甚至相反的特性. Michalske 等^[2]在表面力显微镜实验中, 发现基体剪切屈服应力随着探针半径的减小 (从 250 nm 到 50 nm) 而增加. Greer 等^[3]在对直径在微米量级 (0.4—8 μm) 的单晶 Au 柱做轴向压缩实验时发现, 单晶 Au 柱的屈服应力达到了 GPa 量级, 并且屈服应力随着细柱体直径的减小而迅速升高. 但由于技术水平及相关实验条件的限制, 目前实验对象的尺寸与人们的期待仍然有较大差距.

近年来, 原子水平的模拟技术被广泛地应用于纳米材料力学特性的研究中, 在纳米晶体材料力学行为的分子动力学模拟方面取得了很多有意义的成果. Komanduri 等^[4]对纳米尺度下的 fcc 金属 (Al, Cu 和 Ni) 和 bcc 金属 (Fe, Cr 和 W) 的拉伸变形进行了较全面地研究. 梁海弋等^[5,6]和徐洲等^[7]利用分子动力学模拟了 0 K 下理想纳米 Cu 丝的拉伸变形过程, 揭示了纳米丝的一些变形过程和机理, 以及纳米丝的应力—应变关系、应变率效应、表面效应和尺寸效应. Doyama 等^[8]和 Nozaki 等^[9]采用嵌入原子势模拟了带有凹坑缺陷的纳米单晶 Cu 杆的拉伸、弯曲和压缩过程, 认为缺口底部是应力集中区, 是产生位错等缺陷的源头. 黄丹等^[10]研究了单晶 Ni 纳米丝、纳米薄膜在 0 K 下的准静态拉伸破坏过程, 结果表明 Ni 纳米薄膜的断裂接近脆性断裂, 而 Ni 纳米丝在断裂过程表现出微弱的塑性. 梁迎春等^[11]利用分子动力学模拟了纳米加工后纳构件的拉伸过程, 通过分析、计算获得了非理想纳米构件的拉伸力学特性. Tschopp 和 McDowell^[12]模拟了单晶 Cu 纳米杆的单向拉伸与压缩变形, 并研究了温度和应力对单晶 Cu 内部位错形核影响. 张宇等^[13]研究了 0 K 下纳米双晶 Cu 杆在单向拉伸载荷作用下弹性性能的应变率效应和尺寸效应.

上述实验和数值模拟结果表明, 晶体材料的塑性行为具有很强的尺寸依赖性. 然而, 由于仿真水平的限制, 前述研究中多考虑方形截面形状和小尺寸的纳米杆, 而对圆形截面形状和大尺寸的纳米杆研究较少. 为了深入研究单晶 Cu 纳米杆的拉伸力学特性, 本文建立了多种规模下的圆形、方形截面形状的纳米杆模型, 通过分析、计算获得了纳米杆的力学特性, 进而分析了截面形状、截面面积和长细比对纳米杆力学性能的影响, 揭示了纳观尺度下单晶

Cu 纳米杆拉伸变形的尺寸依赖性.

1 模拟方法

1.1 模拟模型的建立

圆形、方形截面纳米杆的初始构型按几何方法生成, 如图 1 所示. x , y 和 z 坐标轴分别对应 fcc 的 [100], [010] 和 [001] 晶向; 横截面为 yz 面, x 轴正向为拉伸方向, 原子位置按理想点阵排列. 为获得与实际纳米杆相同的仿真结果, 模型建立时各表面均采用自由边界条件, 同时, 在拉伸前对每组模型均进行充分的弛豫过程, 弛豫后的纳米杆形貌如图 1d 和图 1e 所示. 为使纳米杆在拉伸过程中处于平衡状态, 拉伸应变速率均取 $4.610 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$.

图 1 单晶 Cu 纳米杆模型建立

Fig.1 Initial configuration of copper nano-rod

- (a) schematic of reference frame
- (b) copper nano-rod with circular cross section
- (c) copper nano-rod with square cross section
- (d) copper nano-rod with circular cross section after relaxation
- (e) copper nano-rod with square cross section after relaxation

1.2 仿真参数设置

Cu 原子之间的相互作用采用以下两式所示的 EAM 嵌入原子势^[14]描述:

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

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} \rho_j(r_{ij}) \quad (2)$$

式中, U 为系统的总能量, ρ_i 是除第 i 个原子以外的所有其它原子的核外电子在第 i 个原子处产生的电子云密度之和, r_{ij} 是第 i 个原子与第 j 个原子之间的距离, $F_i(\rho_i)$ 是嵌入能; $\phi_{ij}(r_{ij})$ 是对势项, $\rho_j(r_{ij})$ 为电子密度的分布函数.

系统原子的 Virial 应力 $\Pi^{\alpha\beta}$ ^[15] 定义为

$$\Pi^{\alpha\beta} = \frac{1}{\Omega} \left(- \sum_i m_i v_i^\alpha v_i^\beta + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} F_{ij}^{\alpha\beta} r_{ij}^\beta \right) \quad (3)$$

式中, Ω 为系统体积; m_i 和 v_i 为原子 i 的质量和速度; F_{ij}^α 为原子 i 与原子 j 之间的作用力; α, β 为 Cartesian 坐标分量指标; r_{ij}^β 为原子间距向量 $\vec{r}_{ij} (= r_i - r_j)$ 沿着 β 坐标的投影.

通过分解 Virial 应力获得原子 i 的原子级应力 $\Pi_i^{\alpha\beta}$

$$\Pi_i^{\alpha\beta} = \frac{1}{\Omega} \sum_i \omega_i \sigma_i^{\alpha\beta} \quad (4)$$

$$\sigma_i^{\alpha\beta} = \frac{1}{\omega_i} \left(- m_i v_i^\alpha v_i^\beta + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} F_{ij}^{\alpha\beta} r_{ij}^\beta \right) \quad (5)$$

式中, $\sigma_i^{\alpha\beta}$ 为原子 i 的原子级应力, $\sum \omega_i = \Omega$, ω_i 为原子 i 的有效体积.

数值积分采用速度 Verlet 算法^[16], 通过 Nose-Hoover 方法^[17,18] 将温度调节至 293 K, 加载过程中采用速度标定法使系统保持恒定的温度 293 K. 拉伸过程中原子内部缺陷采用中心对称参数 (Centrosymmetry Parameter)^[19] 来识别. 计算原子 i 的中心对称参数为

$$\rho_i = \sum_{i=1}^6 |\vec{R}_i + \vec{R}_{i+6}|^2 \quad (6)$$

式中, $\vec{R}_i$ 和 $\vec{R}_{i+6}$ 为 fcc 晶格相对最近原子的 6 对向量. 本文中原子缺陷结构识别的约定如表 1 所示.

晶体结构的无序化程度采用径向分布函数 (radial distribution function, RDF) 来表征.

2 不同截面形状的纳米杆拉伸过程仿真

为了研究截面形状对纳米杆拉伸力学特性的影响, 设定两种截面形状纳米杆的长度与截面面积相同, 其中, 纳

米杆长 $L=60a_0$, 圆形截面半径 $R=11a_0$, 方形截面边长 $A=20a_0$ ($a_0=0.3615$ nm, 为 Cu 单晶的晶格常数).

纳米杆整个拉伸过程的应力-应变曲线如图 2 所示, 根据纳米杆变形的不同形态, 将整个拉伸过程分为 3 个阶段: 弹性变形阶段 (OA 段)、塑性延展阶段 (AC 段) 和断裂阶段 (CD 段). 具有不同截面形状的纳米杆应力-应变曲线的整体变化趋势基本一致. 在弹性变形阶段, 纳米杆的应力-应变呈线性关系, 可以求得圆形、方形截面形状纳米杆的弹性模量分别为 71.6 和 80.1 GPa. 这表明在该仿真尺度下, 方形截面纳米杆抗变形能力比圆形截面纳米杆强, 这与宏观尺度下纳米杆的力学特性有所不同. 在 A 点 ($\varepsilon=0.090$), 两种截面形状的纳米杆的应力同时达到最大值, 可将其定义为纳米杆的初始屈服应力. 由图可以看出, 方形截面形状的纳米杆的初始屈服应力明显大于圆形截面形状的纳米杆. 随着应变的持续加载, 两种纳米杆的应力-应变曲线呈锯齿状波动下降.

图 3 和 4 分别为圆形、方形截面形状的纳米杆在拉伸过程中的缺陷原子演化图. 由图 3a 图 4a 可以看出, 具有不同截面形状的纳米杆在弛豫完成后, 自由表面的原子由于表面张力的作用, 严重偏离理想晶格位置, 如图中所示纳米杆表面的红色和橙色原子. 在弹性变形阶段, 纳米杆原子的晶格按比例线性伸长, 变形为弹性变形; 纳米杆内部无位错产生, 仅有少量的原子为了达到局部的能量平衡而移动, 从而产生少量空位. 在弹性变形后期, 表层原

表 1 中心对称参数缺陷识别约定

Table 1 The default value of atomic defects structure in centrosymmetry parameter

Lattice structure	P_i	Represent color
Ideal fcc structure	$P < 3$	Yellow
Partial dislocation	$3 < P < 5$	Cyan
Stacking fault	$5 < P < 9$	Blue
Surface atom	$9 < P < 20$	Orange
Whole dislocation	$P > 20$	Red

图 2 圆形、方形截面形状单晶 Cu 纳米杆拉伸应力-应变曲线

Fig.2 Tension stress-strain curves of single crystal copper nano-rod with circular and square cross section shapes

图 3 圆形截面形状纳米杆拉伸变形的原子结构演化图

Fig.3 Evolution of defects in circular cross-section nano-rod during tensile process

(a) $\varepsilon=0$ (b) $\varepsilon=0.089$ (c) $\varepsilon=0.09$ (d) $\varepsilon=0.092$ (e) $\varepsilon=0.106$ (f) $\varepsilon=0.857$ (g) $\varepsilon=0.870$

子缺陷运动加剧,同时,纳米杆内部间隙原子数量逐渐增多,少量空穴聚集一起形成空位簇且原子迁移情况明显增加,如图 3b 和 4b 中所示的蓝色和绿色原子。

由图 3c 和 4c 可以看出,在 $\varepsilon=0.09$ 时,两种纳米杆模型的自由表面均有位错开始形核,纳米杆进入首次屈服阶段。随着应变的持续增加,位错在自由表面多处形核并沿着 $\{111\}$ 滑移系滑移。纳米杆拉伸积累的能量在位错运动时被释放,纳米杆应力迅速下降。这主要是由于在纳米尺度下,位错滑移的空间有限,很快整个滑移面开始移动。在应力-应变曲线上的表现为:当达到峰值应力以后,应力会发生突降,然后在一个较小的应力水平附近震荡(如图 2 所示 AB 段)。上述现象表明,位错形核是发生在塑性流动之前,在纳米尺度下,金属单晶材料的初始屈服是由位错形核决定的。这种现象也证实了国内外相关学者对单晶 Cu 力学特性的研究结果^[11,20]。

首次屈服以后,位错环逐渐扩展形成多个完整的堆垛层错面,并在纳米杆表面生成位错运动的台阶,如图 3e 和

4e 所示。当应力累积到一定值后,大量新的位错在滑移面上繁殖,并在滑移面的交界处造成位错塞积,堆垛层错相互交错阻止了位错的进一步扩展,使得应力有所回升。当应力上升到足以驱动位错运动时,位错开始延伸,部分晶格原子沿滑移面进行交叉滑移。此过程表现为应力-应变曲线呈锯齿状波动下降(如图 2 所示 BC 段)。纳米杆在“位错形核-位错延伸与滑移-晶格原子交叉滑移”的交替循环作用机制下,产生塑性延展。随着应变的持续加载,纳米杆长度逐渐伸长,直径逐渐缩小,纳米杆内部晶格缺陷集中的部位开始产生类似宏观的“颈缩”现象,如图 3f 和 4f 所示。

图 5 为断裂前期($\varepsilon=0.825$),两种截面形状纳米杆的径向分布函数图。由图可以看出,在断裂前期,纳米杆的有序性明显降低,尤其是短程有序性明显降低,同时长程有序性也表现为逐步无序状态。结合拉伸过程的瞬间原子演化图(图 3f 和 4f)和径向分布函数可以看出,纳米杆在断裂阶段,“颈缩”区的部分晶格原子呈现非晶态,随着应

图 4 方形截面形状纳米杆拉伸变形的原子结构演化图

Fig.4 Evolution of defects in square section copper nano-rod during tensile process

(a) $\varepsilon=0$ (b) $\varepsilon=0.089$ (c) $\varepsilon=0.09$ (d) $\varepsilon=0.092$ (e) $\varepsilon=0.101$ (f) $\varepsilon=0.917$ (g) $\varepsilon=0.941$

图 5 纳米杆断裂前期径向分布函数图 ($\varepsilon=0.825$)Fig.5 Radial distribution function of nano-rod with cross section at $\varepsilon=0.825$

变的持续加载，“颈缩”区中间部分的原子间距变大，大量原子键断裂，纳米杆直径急剧变细，最终实现纳米杆的断裂 (图 3g 和 4g)。

3 截面面积对纳米杆拉伸力学特性的影响

为深入研究截面面积对纳米杆拉伸力学特性的影响

规律，计算得出了如表 2 和 3 所示的 12 组数据。计算中，圆形和方形截面形状的纳米杆长度均为 $L=60a_0$ 。表 2 和 3 中， A 代表方形截面边长， R 代表圆形截面半径。初始弹性模量为 $0.000 < \varepsilon < 0.021$ 范围的最小二乘法的线性拟合值，后期弹性模量为 $0.030 < \varepsilon < \varepsilon_{ss}$ 范围的最小二乘法的线性拟合值 (其中， ε_{ss} 为屈服点对应的应变)。

3.1 截面面积对屈服强度的影响

从表 2 和 3 可知，随着截面面积的增大，两种截面形状的纳米杆均出现屈服应变提前，屈服强度降低的现象。这种相类似的仿真结果在其它分子水平的模拟^[7,10]和微纳尺度的实验中^[2,3]也有所发现，这也说明尺寸效应是微纳米尺度下 fcc 金属晶体材料的普遍属性。

Hirth 等^[21]曾经研究过位错形核理论并给出了位错环形成的自由能 ΔG 的表达式

$$\Delta G = 2\pi rW - \pi r^2 b\tau + \pi r^2 \gamma \quad (7)$$

$$W = \frac{2-v}{2(1-v)} \frac{Gb^2}{4\pi} \left(\ln \frac{4r}{r_0} - 2 \right) \quad (8)$$

式中， W 是位错环线能， r 是位错环半径， τ 是作用在位

表 2 圆形截面形状纳米杆模型尺寸及计算结果

Table 2 Size parameters and simulation results of circular cross section nano-rod

Group	1	2	3	4	5	6
R/a_0	11	17	23	28	34	40
Real size, nm ²	50	118	217	322	474	656
Surface atoms, %	5.9	4.2	3.3	2.9	2.5	2.3
Yield strength, GPa	5.94	6.42	6.22	6.07	5.63	5.77
Yield point	0.090	0.090	0.087	0.084	0.077	0.076
Initial Young's modulus, GPa	54.32	60.94	64.07	66.99	71.23	76.00
Finial Young's modulus, GPa	71.61	76.54	78.53	79.80	82.72	84.01

表 3 方形截面形状纳米杆模型尺寸及计算结果

Table 3 Size parameters and simulation results of square section nano-rod

Group	1	2	3	4	5	6
A/a_0	20	30	40	50	60	70
Real size, nm ²	52	118	209	327	470	640
Surface atoms, %	2.3	1.8	1.6	1.5	1.4	1.3
Yield strength, GPa	6.72	5.90	5.12	4.72	4.06	3.92
Yield point	0.089	0.080	0.070	0.065	0.060	0.055
Initial Young's modulus, GPa	61.90	62.81	65.46	68.40	72.20	76.18
Finial Young's modulus, GPa	80.09	80.12	81.23	82.72	82.91	84.12

错环上的剪切应力, b 是 Burgers 矢量幅值, γ 是堆垛层错能, G 是剪切模量, ν 是 Poisson 比, r_0 是位错核半径.

位错形核的条件是作用在位错环上的剪切应力所作的功刚好等于形成位错环所需要的能量. 将式 (8) 代入式 (7), 并令 $\Delta G=0$, 即可得到临界剪切应力 τ_c

$$\tau_c = \frac{1}{r} \frac{2 - \nu}{1 - \nu} \frac{Gb}{4\pi} \left(\ln \frac{4r}{r_0} - 2 \right) + \frac{\gamma}{b} \quad (9)$$

式 (9) 表明, 塑性流动之前, 如果形成的位错环较大, 那么只需要施加较小的剪切应力就可以使其开动.

由前面对纳米杆拉伸过程中原子缺陷结构的研究可知, 在纳米尺度下, 不同截面形状纳米杆的初始塑性均表现为位错首先在纳米杆表面形核, 金属单晶材料的初始屈服主要与位错形核有关. 因此, 初始屈服应力的尺寸效应实际上是源于材料在位错形核过程中受其外观几何尺寸的影响. 在纳米杆弹性变形的后期, 位错大量形核, 由于较大的截面面积的纳米杆会为形成较大位错环提供更多的空间和机会, 所以能在较小屈服应力下形成位错核, 完成首次屈服. 此外, Michalske 等 [2] 曾通过实验分析认

为, 随着空间的增大, 与形成一个大位错环相比, 形成多个小位错环要容易得多. 这表明在相同的应力应变条件下, 较大截面面积的纳米杆内部位错形核的数量多. 因此, 增大截面面积后, 纳米杆屈服应力降低, 屈服应变减小.

图 6 为纳米杆表面原子比例随截面面积变化图, 由图可以看出, 随着截面面积的增大, 纳米杆表面原子比例逐渐减小, 尤其当截面面积增大到 500 nm² 后, 两种纳米杆的表面原子比例均大大减小且变化较小.

图 7 为两种截面形状纳米杆的屈服应力随截面面积变化图. 随着截面面积的增加, 圆形截面形状纳米杆的屈服应力具有先增后减的过程, 并与方形截面形状纳米杆的屈服应力有交叉点, 随着截面面积的进一步增大, 其屈服强度的变化率较小, 屈服强度逐渐大于方形截面形状纳米杆. 前面我们已分析得到, 初始屈服应力的尺寸效应实际上是源于材料在位错形核过程中受其外观几何尺寸的影响. 虽然两种纳米杆的长度和截面面积均相同, 但是两者的外观几何特征却不相同 (例如, 在相同长度和截面面积下, 两种纳米杆的表面原子比例不同, 如图 6 所示), 这使两种纳米杆的屈服强度产生了差异.

3.2 截面面积对弹性模量的影响

由图 8 可以看出, 随着截面面积的增大, 两种截面形状的纳米杆弹性模量均增大, 这与实验 [22] 观察到的纳米 Ag 薄膜的弹性模量随厚度变化的趋势基本一致. 同时, 同一截面面积下, 方形截面形状纳米杆的初始弹性模量和后期弹性模量均大于圆形截面形状纳米杆, 但其弹性模量随截面面积的变化率小于圆形截面形状纳米杆. 当截面面积增大到 500 nm² 后 ($A \geq 60a_0$, $R \geq 34a_0$), 两种截面形状的纳米杆弹性模量基本相等并接近理论值 84 GPa. 结合图 6 可知, 在小规模尺度下, 表面效应对纳米杆力学特性影响大, 两种纳米杆表面原子比例的差异能够对弹性模量产生较大的影响; 当截面尺寸增大到一定值后, 虽然不同截面形状纳米杆的表面原子比例仍然存在差异, 但由于此仿真尺度下, 表面原子比例已经很小, 其影响可以忽略

图 6 表面原子比例随截面面积变化曲线

Fig.6 The proportion of surface atoms as a function of cross-sectional area

图 7 屈服强度随截面面积变化曲线

Fig.7 Yield strength as a function of cross-sectional area

图 8 弹性模量随截面面积变化曲线

Fig.8 Young's modulus as a function of cross-sectional area
(a) Initial Young's modulus (b) Final Young's modulus

不计, 故两种纳米杆的弹性模量也逐渐趋近于稳定值。

4 长细比对纳米杆拉伸力学特性的影响

为进一步分析不同规模尺寸下长细比对纳米杆弹性模量和屈服强度的影响, 本文加大了仿真规模, 计算了如表 4 和 5 所示 10 组数据。

由图 9 可以看出, 加大仿真规模后, 随着长细比的增大, 具有不同截面形状的纳米杆的屈服应力和弹性模量均减小, 弹性模量出现明显的“软化”现象。该仿真结果与

表 4 圆形截面形状纳米杆仿真参数及计算结果

Table 4 Size parameters and simulation results of circular cross section nano-rod

Group	1	2	3	4	5
Length of nano-staff/ a_0	40	60	80	100	120
R/a_0	11	11	11	11	11
Slenderness ratio	2:1	3:1	4:1	5:1	6:1
Yield strength, GPa	6.12	5.99	5.91	5.89	5.90
Yield point	0.091	0.091	0.090	0.091	0.090
Initial Young's modulus, GPa	56.07	53.51	53.07	52.74	52.49
Final Young's modulus, GPa	71.77	70.99	70.40	70.17	69.89

表 5 方形截面形状纳米杆仿真参数及计算结果

Table 5 Size parameters and simulation results of square section nano-rod

Group	1	2	3	4	5
Length of nano-staff/ a_0	40	60	80	100	120
A/a_0	20	20	20	20	20
Slenderness ratio	2:1	3:1	4:1	5:1	6:1
Yield strength, GPa	6.83	6.78	6.65	6.45	6.39
Yield point	0.090	0.091	0.089	0.087	0.088
Initial Young's modulus, GPa	63.90	61.56	61.52	60.11	58.79
Final Young's modulus, GPa	81.84	80.62	80.04	79.68	77.73

图 9 屈服强度和弹性模量随长细比变化曲线

Fig.9 Yield strength and Young's modulus as a function of slenderness ratio

(a) Yield strength (b) Final Young's modulus

小规模仿真结果略有不同^[6]。这表明在小规模的仿真条件下, 由于表面原子所占比例大, 表面效应对纳米杆的内部位错形核及延展影响较大, 单独增加纳米杆的一维长度, 纳米杆的整体密度并未发生改变, 因此, 长细比对纳米杆力学特性的影响并不明显; 在大规模尺度下, 纳米杆的表面原子比例大大减小, 表层原子位错形核后更易扩展, 表面效应的影响被削弱, 因此, 随着长细比的增大, 纳米杆的屈服应力和弹性模量均略有下降, 表现为较好的塑性。

5 结论

本文利用分子动力学模拟了多种尺度下圆形、方形截面形状的单晶 Cu 纳米杆的拉伸变形过程, 结论如下:

(1) 具有不同截面形状的单晶 Cu 纳米杆在弹性变形阶段内部无位错形核, 变形为晶格尺寸的同比例放大; 屈服阶段的初始塑性均表现为位错首先在纳米杆表面形核, 且位错形核发生在塑性流动之前; 首次屈服后, 纳米杆在“位错形核—位错延伸与滑移—晶格原子交叉滑移”的交替循环的作用机制下, 产生塑性变形; 断裂前期, “颈缩”区的一部分晶格原子呈现非晶态。

(2) 截面形状对纳米杆拉伸力学特性有较大影响。在较小截面面积下, 方形截面形状纳米杆的弹性模量、屈服应力都大于圆形截面形状纳米杆; 随着截面面积的增大, 不同截面形状纳米杆的屈服应力均减小, 屈服应变提前, 弹性模量增大; 当两种截面形状纳米杆的截面积增大到某一定值后, 弹性模量趋近于其理论值。

(3) 大规模原子模拟表明, 长细比对纳米杆的力学特性略有影响。随着长细比的增大, 纳米杆的屈服应变提前, 屈服应力减小, 弹性模量出现“软化”现象。

参考文献

- [1] Craihead H G. *Science*, 2000; 290: 1532
- [2] Michalske T A, Houston J E. *Acta Mater*, 1998; 46: 391
- [3] Greer J R, Oliver W C, Nix W D. *Acta Mater*, 2005; 53: 1821
- [4] Komanduri R, Chandrasekaran R N, Raff L M. *Science*,

- 2001; 43: 2237
- [5] Liang H Y, Ni X G, Wang X X. *Acta Metall Sin*, 2001; 37: 833
(梁海弋, 倪向贵, 王秀喜. 金属学报, 2001; 37: 833)
- [6] Liang H Y, Wang X X, Wu H G, Wang Y. *Acta Mech Sin*, 2002; 34: 208
(梁海弋, 王秀喜, 吴恒安, 王宇. 力学学报, 2002; 34: 208)
- [7] Xu Z, Wang X X, Liang H Y. *Chin J Mater Res*, 2003; 17: 262
(徐洲, 王秀喜, 梁海弋. 材料研究学报, 2003; 17: 262)
- [8] Doyama M, Kogure Y, Nozaki T, Kato Y. *Phys Rev*, 2003; 202B: 64
- [9] Nozaki T, Masao D, Kogure Y. *Mater Sci Eng*, 2003; A350: 233
- [10] Huang D, Tao W M, Guo Y M. *Acta Mech Solid Sin*, 2005; 26: 241
(黄丹, 陶伟明, 郭乙木. 固体力学学报, 2005; 26: 241)
- [11] Liang Y C, Chen J X, Bai Q S, Tang Y L, Chen M J. *Acta Metall Sin*, 2008; 44: 119
(梁迎春, 陈家轩, 白清顺, 唐玉兰, 陈明君. 金属学报, 2008; 44: 119)
- [12] Tschopp M A, McDowell D L. *J Mech Phys Solids*, 2008; 56: 1806
- [13] Zhang Y, Yang X H, Chen C Y. *Acta Mech Solid Sin*, 2009; 30: 231
(张宇, 杨新华, 陈传尧. 固体力学学报, 2009; 30: 231)
- [14] Daw M S, Baskes M I. *Phys Rev*, 1984; 29B: 8486
- [15] Diao J K, Gall K, Dunn M L, Zimmerman J A. *Acta Mater*, 2006; 54: 643
- [16] Swope W C, Anderson H C, Berens P H, Wilson K R. *J Chem Phys*, 1982; 76: 637
- [17] Nose S A. *J Chem Phys*, 1984; 84: 511
- [18] Hoover W G. *Phys Rev*, 1985; 31A: 1695
- [19] Kelchner C L, Plimpton S J, Hamilton J C. *Phys Rev*, 1998; 58B: 11085
- [20] Guo Yu, Zhuang Z, Li X Y. *Chin J Theoretical and Appl Mech*, 2006; 38: 398
(郭宇, 庄茁, 李晓雁. 力学学报, 2006; 38: 398)
- [21] Hirth J P, Lothe J. *Theory of Dislocations*. New York: John Wiley and Sons, 1982: 757
- [22] Mizubayashi H, Matsuno J, Tanimoto H. *Scr Mater*, 1999; 41: 443