纳米构件性质的微纳米尺度模拟研究

田霞

摘要

纳米结构材料具有独特的物理、力学性质。表征这些微结构材料的力学和物理性能对于纳米结构材料的应用有着至关重要的作用。利用传统的实验来认定它们的物理、力学性能有很大的难度，采用分子动力学模拟则是一种可选的途径。然而，分子动力学模拟的时、空尺度远远没有达到人们期望的程度，因此必须发展多尺度耦合计算方法。鉴于上述原因，本文采用分子动力学模拟方法研究了纳米结构材料的力学行为，进而发展了多晶团簇结构热—力耦合行为的数值计算方法，所取得的主要进展如下：

第一部分利用分子动力学方法研究了不同构件的金属纳米线在拉伸、弯曲、扭转载荷作用下的变形模式和力学响应。具体地，在 $\langle 001\rangle/\{100\}$ 单晶铜纳米线弯曲变形过程中首次用分子动力学的方法观察到了五重变形孪晶结构。模拟结果表明，配位数为 12 的其它原子类型与 hcp 原子类型间的相互转化是导致出现这种五重变形孪晶的重要因素。然而该孪生变形机制未在相应的 $\langle 110\rangle/\{111\}$ 单晶铜纳米线弯曲加载过程中发现。其次，针对多晶铜纳米线，我们模拟了其在拉伸、弯曲、扭转变形中的力学行为并研究了样品形状、晶体结构对纳米线模量和屈服强度的影响。结果表明，晶界和自由表面均对多晶纳米线的塑性变形起支配作用。在多晶铜纳米线的拉伸过程中，我们观察到了晶界扩散现象，这是造成纳米线颈缩的原因。对多晶铜纳米线的弯曲、扭转变形来说，模拟过程中均出现了大量的全位错和变形孪晶。特别地，在扭转加载下探测到了在晶界和自由表面附近出现的五重变形孪晶。此外，我们发现，样品形状和晶体结构对模量（尤其是弯曲模量和扭转模量）影响较大；而对屈服强度来说，其受样品形状影响甚微但对晶体结构的变化异常敏感。最后，我们研究了一类功能材料 — 铜—铝双层纳米线在上述三种载荷作用下的变形。模拟发现，在铝层中形成孪晶要比在铜层中困难的多，这与理论一致。

第二部分针对纳米晶铜，研究了其在拉伸变形过程中产生各种缺陷（如不全位错、内禀层错、外禀层错、孪晶、全位错）时缺陷附近原子势能、动能的分布以及应变能的存储情况。结果显示，缺陷原子仅对其周围 1–2 层原子的势能有影响，远离这个区域，影响很小。而动能的分布几乎无规律可言。

第三部分基于分子动力学模拟，建立了一套可用于表征微观下晶粒团簇结构热—力耦合行为的算法框架。该算法的要点是将连续模型和分子模拟耦合起来，并使三大守恒定律在微观连续模型和原子层次上都得到满足。与利用传统的连续介质力学来建立晶界与晶粒的本构方程相比，我们模型中的连续流是通过原子模型准确计算得到的，这样就避免了使用经验的本构方程。具体而言，对于晶粒结构，由于其中不含缺陷，可以直

接利用中心格式求解守恒律方程，而方程中所需的本构参数（即流）可通过分子动力学计算获得，只需保证所构造的分子动力学单胞与其所处的局部环境相一致。对于晶界结构，由于连续模型的解在其附近是间断的，因此不能用一般的格式求解，文中我们采用前期追踪的方法。首先，在界面两侧分别选取合适的控制体，我们分三种情况，即对晶粒结构中、三晶交汇处和双晶界面附近控制体单元的选取进行了讨论。接着，在每个控制体上用有限体积法求解连续方程，方程中所需的界面两侧的流同样通过分子动力学计算得到，这样便获得了我们所关心的热—力学参量的信息。

关键词：分子动力学，纳米线，位错，孪晶，晶界，力学性能，晶粒团簇结构，热—力耦合。