

# 界面对复合材料静态及弯曲力学性能影响的分子动力学模拟

罗 旋<sup>a, b</sup> 钱革非<sup>b</sup> 刘秋云<sup>c</sup> 费维栋<sup>a</sup>

(a 哈尔滨工业大学材料科学与工程学院, 哈尔滨 150001)

(b 中国科学院物理研究所, 表面物理国家重点实验室, 北京 100080)

(c 中国科学院力学研究所, 非线性连续介质力学开放实验室, 北京 100080)

**摘 要** 选用 Ag, Ni 两块理想金属, 用分子动力学模拟方法研究了以下两种情况下的弯曲过程, 进而分析界面对复合材料力学性能的影响: (1) 二者在相距足够远以至于两类原子间无相互作用, 不形成界面; (2) 二者迭放一起取向形成界面。通过模拟这两种情况下的静态弛豫和动态弯曲过程, 比较了它们的异同之处。结果表明, 界面的存在对复合材料的力学性能影响很大, 有时甚至起控制作用。

**关键词** 分子动力学, 复合材料, 界面, 计算机模拟

**中图分类号** TB 33, O 242

界面研究是当前材料科学的前沿课题。复合材料界面的原子结构、化学成分和原子键合常不同于界面两侧的体相材料, 界面的性质与界面两侧的相有很大的差别。这就决定了界面的结构与性质对复合材料的性能会产生很大的影响。正是由于复合材料界面问题特别重要又十分复杂, 实际试验难度大, 数据可靠性又差, 近年来, 利用计算机模拟方法来研究界面结构与性质已成为界面研究的有力工具。

分子动力学模拟可以在原子尺度上研究界面的结构与性质, 它可以获得实验上无法得到的信息, 这使得界面的研究工作前进了一步。

本文用分子动力学模拟的方法研究了界面的结构与性质对复合材料弯曲力学性能的影响。

## 1 原子间相互作用势

原子间相互作用势的选取在分子动力学模拟工作中非常重要。这里用的是 Lennard-Jones “6-12” 势。虽然该势是从分子晶体推导出来的, 但用它来处理面心立方金属的界面问题, 一方面是因为简单, 另一方面有其合理之处。这主要是因为分子晶体是靠范德瓦尔斯力结合, 即瞬间电偶极距的感应作用导致两原子间的吸引, 该键没有键长, 没有方向性和饱和性, 可以说是一种体效应, 在结合成分子晶体时, 原子基本上保持原来的电子结构。金属晶体是靠电子与离子实之间的吸引力以及离子实间的排斥力达到平衡形成稳定晶体, 该键也没有方向性和饱和

性,也是一种体效应。二者的键有相似之处,明显不同于离子键和共价键。据此,模拟工作中的势函数选为L-J势。对 $N$ 个原子体系,总势能为:

$$E = 1/2N \sum_{j,i}^N \Phi(r_{ij}) = 2\epsilon N \sum_{j,i}^N [(\sigma/r_{ij})^{12} - (\sigma/r_{ij})^6] \quad (1)$$

其中 $N$ 表示总粒子数, $r_{ij}$ 是第 $j$ 个原子到第 $i$ 个原子间的距离, $\sigma, \epsilon$ 是L-J势参数,可由实验数据求得。

当晶体处于平衡状态时,有下列几种关系存在:

$$\partial E / \partial r |_{r=r_0} = 0, \quad \partial^2 E / \partial r^2 |_{r=r_0} = \beta r_0 / K \quad \text{及} \quad E |_{r=r_0} = E_b$$

其中 $r_0$ 为达到平衡时最近邻原子间距, $\beta$ 为一个由晶体结构决定的系数, $K$ 为压缩系数, $E_b$ 为结合能。

对于面心立方结构,由上述三式可以得出<sup>[1]</sup>:  $r_0 = 1.09\sigma$ ,  $\epsilon = -E_b/8 \epsilon N$  ( $N$ 是总粒子数);  $\sigma = (75\epsilon/K)^{1/3}$ 。

上面这些结论只是对面心立方晶体成立,对于界面,其势参数采用标准的结合规则来确定,即对距离作算术平均,对能量作几何平均。由此得到的界面上的势参数为:

$$\sigma_3 = (\sigma_1 + \sigma_2)/2, \quad \epsilon_3 = (\epsilon_1 \epsilon_2)^{1/2}$$

其中 $\epsilon_1, \sigma_1$ 和 $\epsilon_2, \sigma_2$ 分别代表上下两种材料块体内的势参数<sup>[2]</sup>。

对于Ag-Ni体系,其势参数如表1<sup>[3,4]</sup>。

表1 计算中所用的L-J势参数

Table 1 L-J potential parameters used in calculation

atom pair	$\epsilon/\text{ev}(\text{atom})^{-1}$	$\sigma/\text{nm}$
Ag-Ag	0.3442	0.26385
Ni-Ni	0.5157	0.22734
Ag-Ni	0.4311	0.24546

## 2 分子动力学模拟

模拟工作中,由于要对 $N$ 个原子求和,而势函数的作用范围又很长,为了计算简便和节约时间,对势函数取一级近似,其截断半径 $r_c = 2.5 r_0$ 。

为使误差减小,对势函数作归一化处理,则方程化为无量纲方程,此时能量单位为 $\epsilon_{Ag} = 0.3442\text{ev} = 5.5 \times 10^{-20}\text{J}$ ,长度单位为 $\sigma_{Ag} = 0.26385\text{nm} = 2.6385 \times 10^{-10}\text{m}$ ,力的单位为 $f_{Ag} = 48\epsilon_{Ag}/\sigma_{Ag} = 1.0 \times 10^{-12}\text{N}$ ,时间单位为 $\tau_{Ag} = (m_{Ag}\sigma_{Ag}^2/48\epsilon_{Ag})^{1/2} = 3.816 \times 10^{-11}\text{s}$ ,温度单位为 $T^* = \epsilon_{Ag}/K_B = 4.02 \times 10^3\text{K}$  ( $K_B$ 为玻尔兹曼常数)。

运动方程的数值积分采用VERLET算法<sup>[5,6]</sup>,时间步长取为 $\Delta t = 1.00 \times 10^{-2} \tau_{Ag}$ ,体系温度为300K。

## 3 计算元胞的选取及模型设计

### 3.1 计算元胞的选取

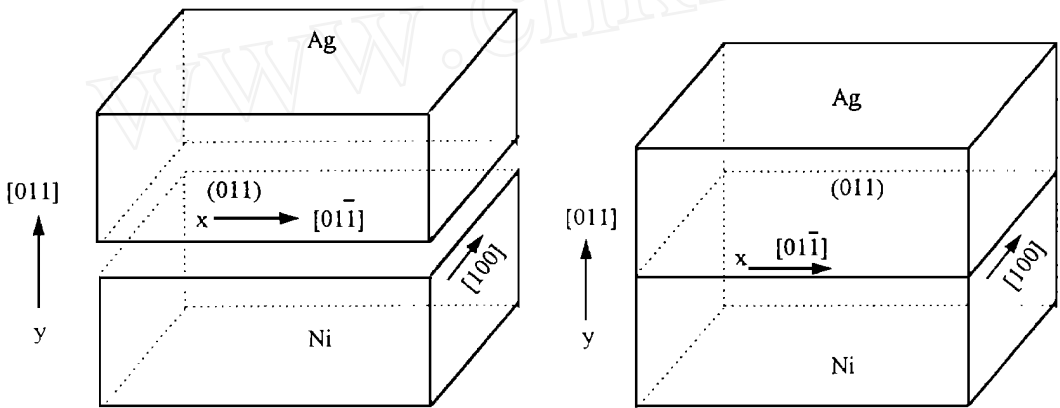
在模拟之前,首先要构造一个计算元胞。本文中计算元胞的大小取为 $(20 \times 6)$ 个Ag原子和 $(23 \times 8)$ 个Ni原子共304个原子。

(1) Ag/Ni两块理想金属在没有形成界面时的计算元胞

将  $(23 \times 8)$  个 Ni 原子放在理想金属 Ni 的 f c c 晶格上, 其上表面为 (011) 面。再将  $(20 \times 6)$  个 Ag 原子放在理想的 f c c Ag 晶格上, 然后将其底表面 (011) 面放在与 Ni (011) 表面平行的位置, 即  $(110)_{\text{Ag}} \parallel (110)_{\text{Ni}}$ ,  $[110]_{\text{Ag}} \parallel [110]_{\text{Ni}}$ , 二者的取向如图 1(a) 所示。此处 Ag 与 Ni 两块金属相隔大约 4 个原子间距, 在势能函数的切断距离  $r = 2.5r_0$  时, Ag 与 Ni 两块金属间不形成界面。

### (2) Ag/Ni 两块理想金属形成界面时的计算元胞

将上述两块 Ag、Ni 彼此靠近形成 Ag/Ni 界面后放在 MD 计算元胞中, 将其作为考察对象, Ag、Ni 两块完整晶体按图 1(b) 所示方式取向形成界面。



(a) 两块金属未形成界面 (non-interface)

(b) 两块金属形成界面 (interface presence)

图 1 计算元胞示意图 Fig. 1 Schematic diagram of calculating cell

上述两种计算元胞中均选取  $x$  轴方向为  $[0\bar{1}1]$  方向,  $y$  轴沿  $[011]$  方向,  $z$  轴沿  $[100]$  方向。考虑到原子排列的周期性, 只对  $xOy$  平面进行计算。

## 3.2 模型设计

将所研究的系统即计算元胞分为内外两个区域, 在内区中存在缺陷, 原子单个地弛豫, 外区是边界区, 其作用在于保证内区中缺陷的存在, 外区中的原子不单独考虑弛豫, 而是保持相对固定, 但可以作集体平移。

外区原子集体平移 (这里是集体向下平移) 后, 对计算元胞内的所有原子进行静态弛豫, 即对每个原子做它与周围原子间势的计算, 由此求出周围的所有原子对它的作用力, 这个原子所受的合力方向是势能的最大梯度方向。根据合力的大小和方向确定该原子的位移量和位移方向。对所有的原子做这样计算后, 将原子分别按所计算出的位移进行调整。

重复上述过程, 直至在一定外力作用下原子分配达到基本平衡。

## 4 模拟结果与讨论

### 4.1 静态弛豫过程的模拟

#### (1) Ag/Ni 两块理想金属在没有形成界面时的静态弛豫

图 2、4 分别示出了不形成界面情况下经过静态弛豫后的原子排布图和势能曲线。

从图 2 中可以看出, 两块没有形成界面的 Ag 和 Ni 之间彼此不相关联, 各自处于理想晶格的位置上。从它们的势能曲线图 4 上看出在不形成界面时总势能迅速降低, 大致需要 2000 步就

已稳定。

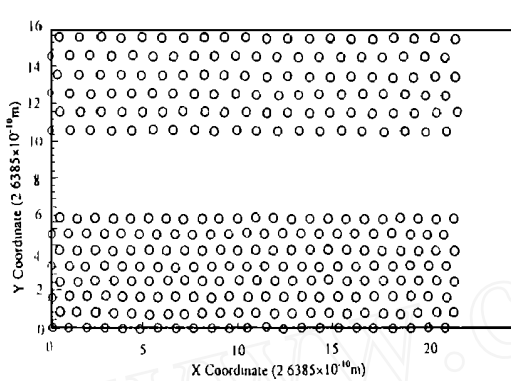


图2 未形成界面时的静态弛豫原子排布图

Fig. 2 A tom ic configuration after static relaxation in non-interface condition

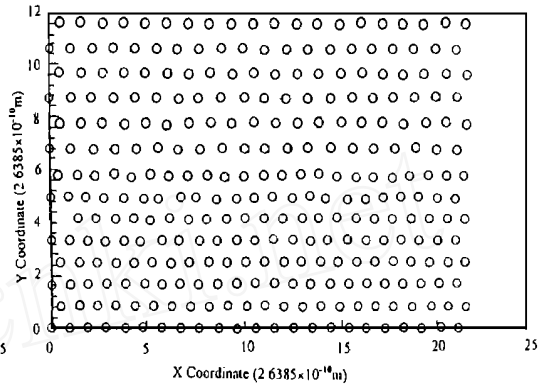


图3 未形成界面时的静态弛豫势能曲线

Fig. 3 Potential curve after static relaxation in non-interface condition

(2) Ag/Ni 两块理想金属形成界面后的静态弛豫

图3, 5分别示出了两金属形成界面情况下经过静态弛豫后的原子排布图和势能曲线。

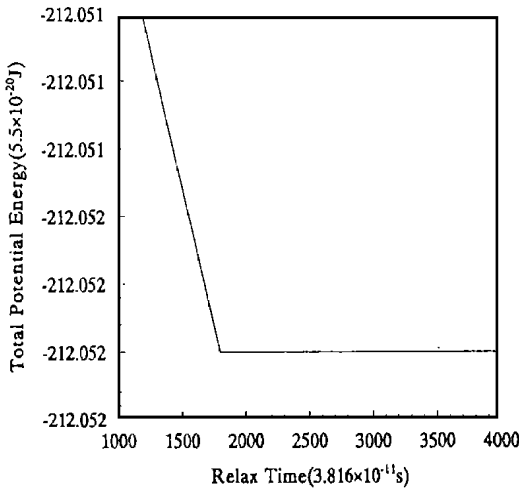


图4 形成界面后静态弛豫中的原子排布图

Fig. 4 A tom ic configuration of Ag/Ni interface after static relaxation

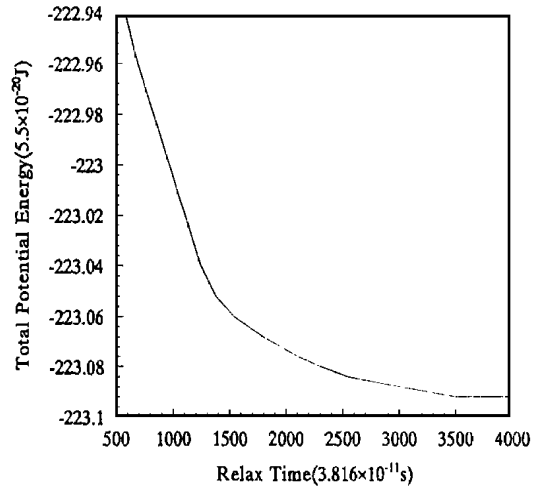


图5 形成界面后静态弛豫中的势能曲线

Fig. 5 Potential curve of Ag/Ni interface after static relaxation

将图2, 4与图3, 5进行比较可以看出, 形成界面后(如图3), 在界面处Ag 原子和Ni 原子彼此都进行了重新排布, 界面处不很平直, 3~ 4层原子有起伏. 而总的势能缓慢趋于稳定值(约需 4000步才达到平衡), 如图5所示, 其稳定值的大小约- 223.09, 要比图4中的稳定值- 212.052 小些. 这表明形成界面后原子进行了重新排布, 总能量降低, 形成稳定结构. 从上面这些比较中看到界面的存在使复合材料的结构和性能都明显不同于单纯的体相结构, 这表明界面的存在影响了复合材料结构(特别是近界面两侧晶体的结构)与性能.

## 4 2 动态弯曲过程的模拟

将4 1中静态弛豫后的两块不形成界面和形成界面的Ag/Ni分别作动态弯曲过程的模拟。先将边界上的原子作集体平移,这样相当于给内部原子施加外力,然后内部原子进行弛豫,模拟弯曲过程。势能曲线示于图6, 8, 应力-应变曲线示于图7, 9。

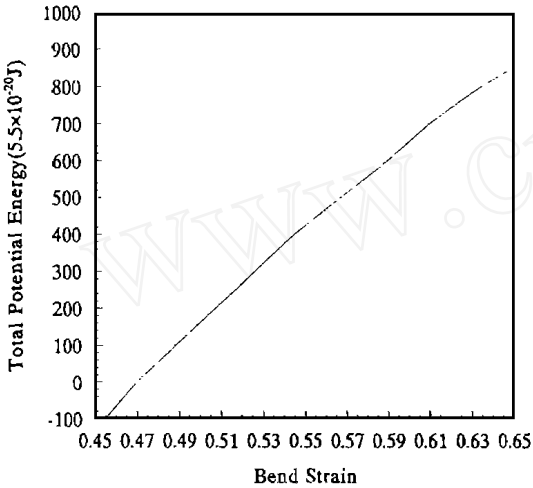


图6 未形成界面时在弯曲过程中的势能曲线

Fig 6 Potential curve in bending under non-interface condition

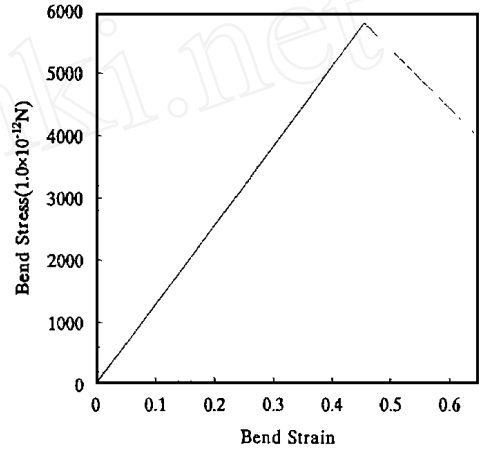


图7 未形成界面时在弯曲过程中的应力-应变曲线

Fig 7 Stress-strain curve in bending under non-interface condition

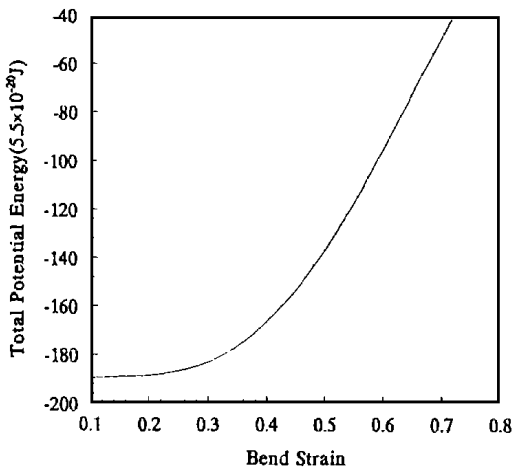


图8 形成界面后在弯曲过程中的势能曲线

Fig 8 Potential curve of Ag/Ni interface in bending

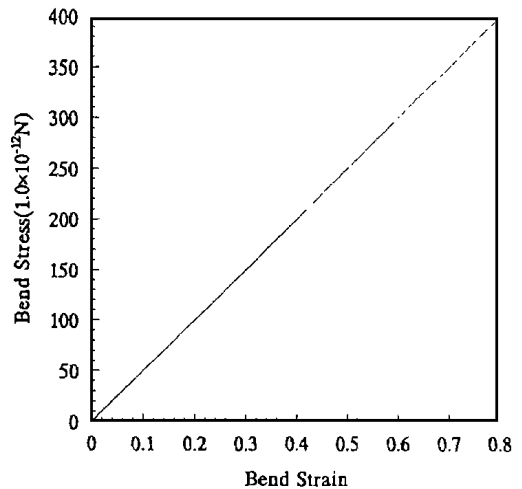


图9 形成界面后在弯曲过程中的应力-应变曲线

Fig 9 Stress-strain curve of Ag/Ni interface in bending

可以看出二者的总势能曲线的明显差别,这反映在图7与图9中便是弯曲过程中前者软化,后者硬化。同样的两块Ag和Ni,在二者没有形成界面和形成了界面两种情形中,它们的应力-应变曲线却有显著差别,这说明界面起到了硬化作用。界面的存在对复合材料的力学性能产生了很大的影响。

## 5 结 论

本文通过分子动力学模拟的方法比较了两块理想金属Ag-Ni之间有无相互作用时的原子排布,势能曲线和力学性能曲线,得出的结论是,界面对复合材料起到了硬化作用,因此它影响着复合材料的综合力学性能。

## 参 考 文 献

- 1 吴代鸣 固体物理学 长春: 吉林大学出版社, 1986 55
- 2 Heman M A, Sitter H. In: Molecular-Beam Epitaxy: Fundamentals and Current Status, edited by Panish M B. Springer, Berlin, 1989 89
- 3 Shu Zhen, Davies G J. *Phys Stat Sol (a)*, 1983, 78: 595
- 4 C 基泰尔著 杨顺华译 固体物理导论 1979 25
- 5 Rahm an A. *Phys Rev*, 1964, 136: A 405
- 6 Verlet L. *Phys Rev*, 1967, 159: 98

## MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF THE EFFECTS OF INTERFACE ON THE BENDING PROPERTIES OF COMPOSITE

Luo Xuan<sup>a,b</sup> Qian Gefei<sup>b</sup> Liu Qiuyun<sup>c</sup> Fei Weidong<sup>a</sup>

(a School of Materials Science and Engineering, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001)

(b. State Key Laboratory for Surface Physics and Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080)

(c LNM, Institute of Mechanics, CAS, Beijing 100080)

**Abstract** In this paper, two real crystals of Ag and Ni were selected. The following two conditions were studied by the Molecular Dynamics (MD) simulation method: the first one is that the two bulk metals are too far to form interface; the second one is that they form interface. By simulating the static relaxation and dynamics bending process, the differences between the two conditions were compared. The results show that the existence of interface affects greatly, sometimes even controls the mechanical properties of the composite.

**Key words** molecular dynamics, composite material, interface, computer simulation