

# 金属材料双晶体薄板界面能密度的尺寸效应

王帅<sup>1</sup> 陈少华<sup>2\*</sup>

(<sup>1</sup> 中国科学院力学研究所非线性国家重点实验室, 100190 ;

<sup>2</sup> 北京理工大学先进结构技术研究院, 100081 )

**摘要** 界面能密度是刻画材料界面力学性质的一个重要的物理量,而在纳米尺度由于双晶体薄板具有较大的比表面积,显现出与体材料状态下不同的尺寸相关的力学性能。本文采用分子动力学的方法,计算了多种典型 FCC 金属晶体形成的双晶体薄板的界面能密度。研究表明,对于双晶体薄板,不论是拉格朗日界面能密度还是欧拉界面能密度,都随着双晶体薄板厚度的增加而增加,并逐渐趋近于体材料界面能密度的值。

**关键词:** 金属材料, 双晶体薄板界面, 界面能密度, 尺寸效应

## 一、引言

材料的比表面积随着尺寸的减少而逐渐减小,当材料的特征尺寸减小到纳米量级时,材料的比表面积会急剧增大并显著的影响纳米材料的力学性能<sup>[1-4]</sup>。界面能密度是刻画材料界面效应的一个非常重要的物理量<sup>[5,6]</sup>。已有学者通过分子动力学的方法计算了多种典型金属材料的界面能密度<sup>[7]</sup>,但是并没有考虑界面能密度的尺寸效应。本文采用分子动力学的方法,研究了多种 FCC 金属双晶体薄板的拉格朗日界面能密度和欧拉界面能密度,得到了双晶体薄板拉格朗日界面能密度和欧拉界面能密度随双晶体薄板特征尺寸的变化特征。并与以前学者研究的体材料的界面能密度进行了对比。

## 二、建模与仿真

### 2.1 双晶体薄板界面分子动力学模型

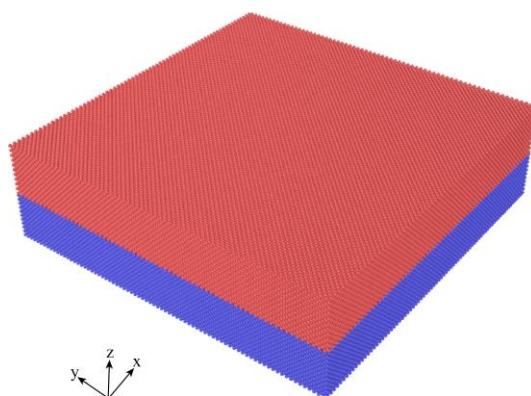


图1 FCC金属材料双晶体薄板界面分子动力学模型

本文分别计算了 Ag、Au、Cu、Ni 和 Pd 等 FCC 金属材料形成的几种非共格界面(Ag/Cu、

Ag/Ni、Au/Cu、Au/Ni 和 Pd/Cu) 的界面能密度。

在  $x$  轴和  $y$  轴方向采用周期性边界条件,  $z$  轴采用非周期性且紧缩包裹边界条件, 即可将模型视为无限大薄板界面。

原子之间的相互作用本文采用的是  $\text{eam}$  势函数<sup>[8]</sup>, 使用 Nose-Hoover 控温方法令双晶体薄板材料在恒温恒压下充分弛豫, 本文压强采用 0bar, 温度采用 1k。弛豫计算的时间步长设置为 1fs, 在经历足够时间充分弛豫 (500ps) 后, 系统达到稳定状态。

### 3.2 界面能密度的计算

选取界面附近沿  $x$  轴方向一定厚度区域内的原子计算界面的界面能, 双晶体薄板的界面能可以写成

$$\gamma_L = \frac{\sum(E_i - E_{i0})}{A_L} \quad (1)$$

$$\gamma_E = \frac{\sum(E_i - E_{i0})}{A_E} \quad (2)$$

这里,  $\gamma_L$  和  $\gamma_E$  分别代表双晶体薄板的拉格朗日界面能密度和欧拉界面能密度, 他们的区别在于参考系的选择不同。拉格朗日界面能密度以初始构型作为参考系, 界面面积是  $A_L = L_1 L_2$ ; 欧拉界面能密度以当前构型为参考系, 界面面积是  $A_E = L_1 L_2$ 。

## 三、结果与讨论

图 2(a)、(b) 表示用体材料界面能密度归一化的双晶体薄板的拉格朗日界面能密度和欧拉界面能密度。

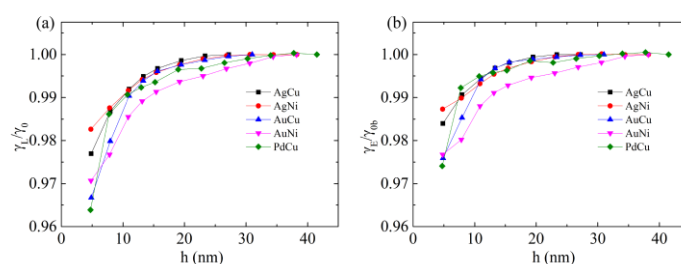


图 2 FCC金属材料双晶体薄板界面能密度 (a) 拉格朗日界面能密度 (b) 欧拉界面能密度

研究表明, 双晶体薄板材料拉格朗日界面能密度和欧拉界面能密度都随着尺寸的增加而增加并逐渐趋向于体材料界面能密度的值。

## 参 考 文 献

1. Carroll, L., M. Sternitzke, and B. Derby, Silicon carbide particle size effects in alumina-based nanocomposites. *Acta materialia*, 1996. 44(11): p. 4543-4552.
2. Reynaud, E., et al., Nanofillers in polymeric matrix: a study on silica reinforced PA6. *Polymer*, 2001. 42(21): p. 8759-8768.
3. Jordan, J., et al., Experimental trends in polymer nanocomposites—a review. *Materials science and engineering: A*, 2005. 393(1): p. 1-11.
4. Suryanarayana, C. and N. Al-Aqeeli, Mechanically alloyed nanocomposites. *Progress in Materials Science*, 2013. 58(4): p. 383-502.
5. Shuttleworth, R., The surface tension of solids. *Proceedings of the physical society. Section A*, 1950. 63(5): p. 444.
6. Cammarata, R., Surface and interface stress effects on interfacial and nanostructured materials. *Materials Science and Engineering: A*, 1997. 237(2): p. 180-184.
7. Mi, C., et al., Atomistic calculations of interface elastic properties in noncoherent metallic bilayers. *Physical Review B*, 2008. 77(7): p. 075425.
8. Johnson, R., Alloy models with the embedded-atom method. *Physical Review B*, 1989. 39(17): p. 12554.