

纳米多晶铝压缩塑性力学行为分子动力学研究

张宇星^a, 赵熹^{a,b}, 田学栋^a, 张治民^b

(中北大学 a.航空宇航学院 b.国防科技工业复杂构件挤压成形技术创新中心, 太原 030051)

摘要: **目的** 研究纳米多晶铝在不同温度与应变速率下的力学响应与塑性变形行为以及不同变形条件下的塑性力学行为。**方法** 通过 ATOMSK 软件构建了晶粒取向随机的纳米多晶铝模型, 利用 LAMMPS 软件在 300~700 K 温度以及 1×10^9 、 5×10^9 、 1×10^{10} 、 1×10^{11} s^{-1} 应变速率下完成了纳米多晶铝的压缩模拟, 借助后处理 OVITO 软件对模拟结果进行了分析。**结果** 随温度的升高, 晶界原子所占比例增大, 纳米多晶铝的弹性模量逐渐下降, 在压缩过程中总位错密度随温度的升高而增大。随着应变速率的增大, 材料硬化速率增加, 纳米多晶铝表现出更高的屈服强度。当应变速率较低时, 位错大量存在于小晶粒之中, 且中央大晶粒相较于初始位置旋转了 20° 。当应变速率达到 1×10^{11} s^{-1} 时, 材料的硬化速率极大提高, 且在晶粒内部出现了孪晶。在塑性变形过程中, $1/6\langle 112 \rangle$ (不全位错) 的数量最多, 在位错运动中占主导地位。**结论** 温度升高导致材料弹性模量降低, 这主要是由于高温提供了更多能量, 晶界原子占比增加。应变速率会影响纳米多晶铝的塑性变形方式, 应变速率的增大使其由晶粒旋转变形转变为孪生变形与位错湮灭机制, 导致纳米多晶铝硬化速率与屈服强度提高。

关键词: 纳米多晶铝; 分子动力学; 压缩; 温度; 应变速率

DOI: 10.3969/j.issn.1674-6457.2023.05.002

中图分类号: TG146.2⁺¹ **文献标识码:** A **文章编号:** 1674-6457(2023)05-0010-08

Molecular Dynamics in Compressive Plastic Behavior of Nanocrystalline Aluminum

ZHANG Yu-xing^a, ZHAO Xi^{a,b}, TIAN Xue-dong^a, ZHANG Zhi-min^b

(a. School of Aeronautics and Astronautics, b. National Defense Industry Innovation Center for Complex Component Extrusion Technology, North University of China, Taiyuan 030051, China)

ABSTRACT: The work aims to study the mechanical response and plastic deformation behavior of nanocrystalline aluminum under different temperature and strain rate compression conditions, as well as its plastic mechanical behavior under different deformation conditions. The nanocrystalline aluminum model with random grain orientation was constructed by ATOMSK. The compression of nanocrystalline aluminum at temperature of 300-700 K and strain rate of 1×10^9 , 5×10^9 , 1×10^{10} and 1×10^{11} s^{-1} was simulated by LAMMPS. The simulation results were analyzed by post-processing OVITO. With the increase of temperature,

收稿日期: 2022-10-08

Received: 2022-10-08

基金项目: 山西省高等学校创新人才支持计划; 山西省科技合作交流专项(区域合作项目)(202104041101033)

Fund: Shanxi Province Colleges and Universities Innovative Talents Support Plan; Shanxi Science and Technology Cooperation and Exchange Special (Regional Cooperation Project) (202104041101033)

作者简介: 张宇星(1997—), 男, 硕士生。

Biography: ZHANG Yu-xing (1997-), Male, Postgraduate.

通讯作者: 赵熹(1983—), 男, 博士。

Corresponding author: ZHAO Xi (1983-), Male, Doctor.

引文格式: 张宇星, 赵熹, 田学栋, 等. 纳米多晶铝压缩塑性力学行为分子动力学研究[J]. 精密成形工程, 2023, 15(5): 10-17.

ZHANG Yu-xing, ZHAO Xi, TIAN Xue-dong, et al. Molecular Dynamics in Compressive Plastic Behavior of Nanocrystalline Aluminum[J]. Journal of Netshape Forming Engineering, 2023, 15(5): 10-17.

the proportion of grain boundary atoms increased, but the elastic modulus of nanocrystalline aluminum decreased, and the total dislocation density increased with the increase of temperature during compression. With the increase of strain rate, the hardening rate of the material increased, so the nanocrystalline aluminum presented higher yield strength. When the strain rate was low, a large number of dislocations existed in the small grains, and the central large grains rotated by 20° from the initial position. When the strain rate reached $1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$, the hardening rate of the material was greatly improved, and twins appeared inside the grains. In the process of plastic deformation, the number of $1/6$ (incomplete dislocation) was the largest, which was dominant in dislocation motion. The main reason for the decrease of elastic modulus of material due to the increase of temperature is that high temperature provides more energy, leading to the increase of proportion of grain boundary atoms. Strain rate affects the plastic deformation mode of nanocrystalline aluminum. The increase of strain rate changes the deformation mode from grain rotation to twinning and dislocation, thus improving the hardening rate and yield strength of nanocrystalline aluminum.

KEY WORDS: nanocrystalline aluminum; molecular dynamics; compression; temperature; strain rate

金属铝具有比强度高、耐腐蚀性强、塑性和加工性能良好等优点, 被广泛应用于航空航天等领域^[1]。目前超强铝合金的强化方式主要有微合金化、晶粒细化、增加第二相陶瓷颗粒、多层级纳米微观组织构筑等, 旨在实现铝合金强度的提升^[2]。其中, 制备纳米晶是强化铝合金的重要手段之一。纳米晶金属和合金会表现出与粗晶金属和合金不同的力学性能特征。与粗晶、多晶材料相比, 平均晶粒尺寸小于 100 nm 的多晶材料通常具有更高的强度^[3-6]。随着科学计算技术的进一步发展, 分子动力学已成功应用于晶体拉伸、剪切性能、原子扩散以及晶粒生长、变形等方面的研究中, 成为新的计算材料性能的方法^[7-11]。探讨纳米多晶 Al 的压缩变形力学行为可进一步揭示强化机理。

目前, 部分研究者通过实验手段对纳米多晶铝的塑性变形方式进行了研究。Ichiyangi 等^[12]通过 X 射线衍射法定量分析了多晶铝经过冲击压缩后的变形组织, 研究表明, 在冲击作用下, 铝箔中产生了位错密度较高的超细小铝晶粒, 铝晶粒取向随塑性变形而旋转, 晶粒尺寸随冲击波的传播而增加。由于目前制备纳米晶材料较难, 因此有不少研究人员通过分子动力学模拟的方法对其进行研究, 其中多数是针对单晶材料。Syarif 等^[13]利用分子动力学方法研究了等通道挤压下单晶铝的塑性变形行为, 研究表明, 初始晶粒取向对晶粒旋转角度、施加在模型上的剪切应变大小和位错密度有很大影响。Hong 等^[14]利用分子动力学方法研究了应变速率对纳米多晶铝 5052 合金力学行为的影响, 研究表明, 在拉伸载荷下, AA5052 纳米多晶的晶体结构在塑性变形过程中的 FCC-HCP 转变与应变率无关, 应变率对位错密度和相体积分数的影响较大。Zahn^[15]通过分子动力学方法研究了单晶铝和多晶铝在剪切作用下的晶体塑性变形行为。Zhou 等^[16]采用分子动力学方法研究了不同载荷下单晶铝和多晶铝的拉压不对称性, 研究表明, 在拉伸和压缩载荷

的作用下, 单晶铝和多晶铝都有加工硬化现象产生, 单晶铝与多晶铝的不同之处在于单晶铝为脆性断裂而多晶铝为韧性断裂。马文^[17]通过分子动力学方法模拟了冲击压缩下多晶铝的塑性变形过程, 研究表明, 在压缩过程中, 大量的不全位错会在晶粒内部形成堆垛层错、全位错和孪晶界。

很多学者通过分子动力学方法对单晶铝材料在不同条件下的材料性能进行了研究, 但关于多晶铝在压缩条件下位错、孪晶等微观结构对塑性力学行为影响的研究有所欠缺。因此, 文中利用分子动力学方法研究不同压缩条件下纳米多晶铝的压缩变形行为, 探究温度与应变速率对纳米多晶铝塑性变形力学行为的影响。

1 模拟方法

文中所建立的纳米多晶铝模型如图 1 所示。该模型利用 Voronoi 法通过 ATOMSK 软件构建了晶粒取向不相同的多晶模型^[18]。模型的初始尺寸为 $20 \text{ nm} \times 20 \text{ nm} \times 20 \text{ nm}$, 包含 20 个晶粒, 483 121 个铝原子。 x 、 y 、 z 坐标轴分别对应晶向 $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$ 。设置 x 、 y 方向为非周期性边界, z 方向为周期性边界, 以便在 z 方向进行压缩模拟, 在压缩过程设置 NPT 系综, 压缩应变沿 z 轴加载。

分别在应变速率为 $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$, 温度为 300、450、600、700 K 以及温度为 300 K, 应变速率为 1×10^9 、 5×10^9 、 1×10^{10} 、 $1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ 的条件下进行压缩模拟。在不同初始条件、NVT 系综下对纳米多晶铝模型进行弛豫, 当系统能量达到平衡状态后, 在 NPT 系综、不同条件下压缩模拟 200 ps。模拟中, 时间步长设置为 0.001 ps, 每过 1 ps 输出一次应力、总能量和原子位置数据。

势函数是描述体系粒子总能量 E 与粒子坐标 (r) 的数学函数形式^[19]。文中采用 Liu 等^[20]开发的嵌入原

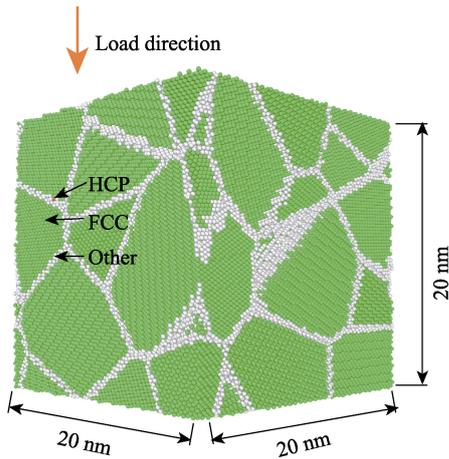


图1 纳米多晶铝模型

Fig.1 Nanocrystalline aluminum model

子势 (EAM) 来描述 Al-Al 之间的相互作用关系。在 EAM 方法中, 把每个原子当作镶嵌在余下集体中的个体, 通过一系列函数描述该个体与整体的力学关系。EAM 方法将体系的总能描述为镶嵌能和相互作用势能之和^[21], 其表达式如式 (1) 所示。

$$E_i = F_\alpha \left[\sum_{i \neq j} \rho_\beta (\gamma_{ij}) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi_{\alpha\beta} (\gamma_{ij}) \quad (1)$$

式中: E_i 为原子 i 的总能量; F_α 表示元素 α 的嵌入能量, 是原子电子密度 ρ 的函数; γ_{ij} 为原子 i 和 j 的原子间距; $\phi_{\alpha\beta}$ 为一对电位相互作用; α 、 β 为原子 i 和 j 的元素类型。

计算中, 通过 ATOMSK 构建模型, 使用开源并行分子动力学代码 LAMMPS^[21] 进行模拟, 通过 OVITO^[22] 代码对结果进行可视化和分析。

2 结果与分析

2.1 温度

不同温度条件下纳米多晶铝压缩应力-应变曲线如图 2 所示。可以看出, 随着温度的升高, 纳米多晶铝的屈服强度、极限应变均有所降低。这是因为随着温度的升高, 纳米多晶铝中原子的动能显著增加, 势能减小, 使其更容易脱离原始晶格点, 晶粒内部分靠近边缘的原子转换为晶界原子, 形成空位等点缺陷, 并诱导原子平面错位, 形成位错。然后不稳定的长程运动和位错的增殖被激活, 这增加了位错湮灭的可能性。最终导致压缩时的屈服强度、极限应变均有所减小。

应力-应变曲线在弹性阶段可以等同于一-条直线, 由图 2 也可以看出, 当温度由 300 K 升高至 700 K 时, 弹性阶段的斜率也在减小, 即材料的弹性模量也随之减小。通过计算得到, 当温度为 300 K 时, 材料的压缩弹性模量为 65 GPa, 当温度升高至 700 K 时,

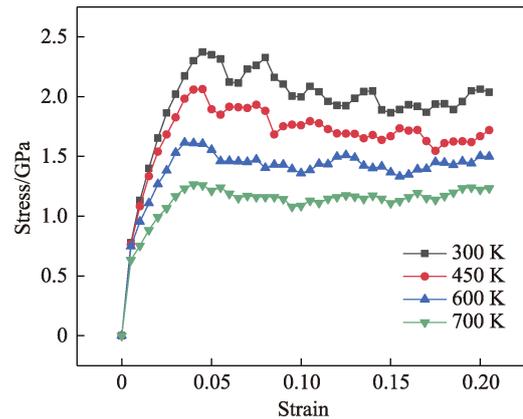


图2 不同温度压缩应力-应变曲线

Fig.2 Compression stress-strain curves at different temperature

材料的压缩弹性模量下降至 53 GPa。晶界的扩散、析出以及位错钉扎对材料性能变化有较大影响^[23-24], 因此可通过分析晶界原子占比来探究纳米多晶铝力学性能变化的原因。通过 CNA 分析原子结构, 统计得到纳米多晶铝在不同温度弛豫后的晶界原子和晶粒内原子占比, 结果如图 3 所示。可以看出, 不同温度弛豫后晶界原子在纳米多晶铝模型中占据的比例均较大, 随着压缩温度的升高, 晶界原子数目不断增多, 进而导致材料的弹性模量发生变化, 由于晶界原子错排度较大, 故材料的弹性模量变小^[25-26]。不同温度下的总位错线长度如图 4 所示。结合图 2—4 可知, 随温度的升高, 晶界原子增多, 晶体中初始位错密度降低, 导致材料的弹性模量降低, 且在应变达到 0.15 后, 位错密度增长速度逐渐变缓。

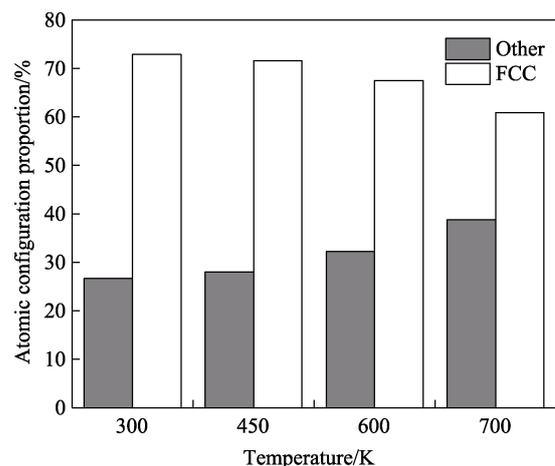


图3 不同温度弛豫后模型原子构型占比

Fig.3 Proportion of atomic configuration in model after relaxation at different temperature

根据压缩模拟结果和 OVITO 中的位错提取算法 (DXA), 得到不同类型位错的位错线长度变化情况如图 5 所示。随着压缩量增加, 模型中 $1/6\langle 112 \rangle$

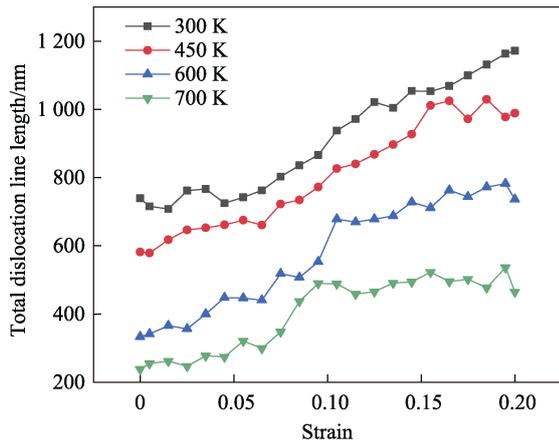


图 4 不同温度下的总位错线长度

Fig.4 Length of total dislocation lines at different temperature

(不全位错)位错线数量明显增多,位错线长度增加,位错密度增大。随着温度升高,晶粒细化效果减弱,压缩过程中产生的位错线数量减少,位错密度降低。与图 2 对比发现,当应变达到 0.05 时,纳米多晶铝的压缩过程进入塑性变形阶段,1/6<112>(不全位错)也开始急剧增加,这可能是由于常见的位错反应(1/2[110] + 1/6[211] + 1/6[12 $\bar{1}$])频繁发生。结果表明,

在压缩过程中,主要的位错运动方式是不全位错的滑移,且 1/6<112>(不全位错)在纳米多晶铝中的存在较为稳定。

2.2 应变速率

不同应变速率下纳米多晶 Al 压缩应力-应变曲线如图 6 所示。可知,在不同应变速率下,模型的应力-应变曲线均为先上升达到峰值应力,再下降直至一个稳定值。当应变速率为 $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 时,压缩应变的屈服点应变约为 0.05,压缩应力为 2.35 GPa。随着应变速率的增加,屈服点应变与压缩应力均增大。在原子尺度上,屈服强度定义为屈服点的应力。通过拟合屈服点之前直线阶段的斜率,计算得到不同应变速率下的压缩弹性模量。当应变速率为 $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 时,材料弹性模量为 61.5 GPa,当应变速率加快至 $1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ 时,弹性模量增加到 127.3 GPa。因此可以看出,在高应变速率条件下,材料的屈服强度有很大提高,而较低的应变速率对屈服强度的影响较小;当应变速率大幅加快时,硬化速率快速增大,弹性模量也有大幅提高。纳米多晶铝在高应变速率下表现出很好的抗冲击变形能力。

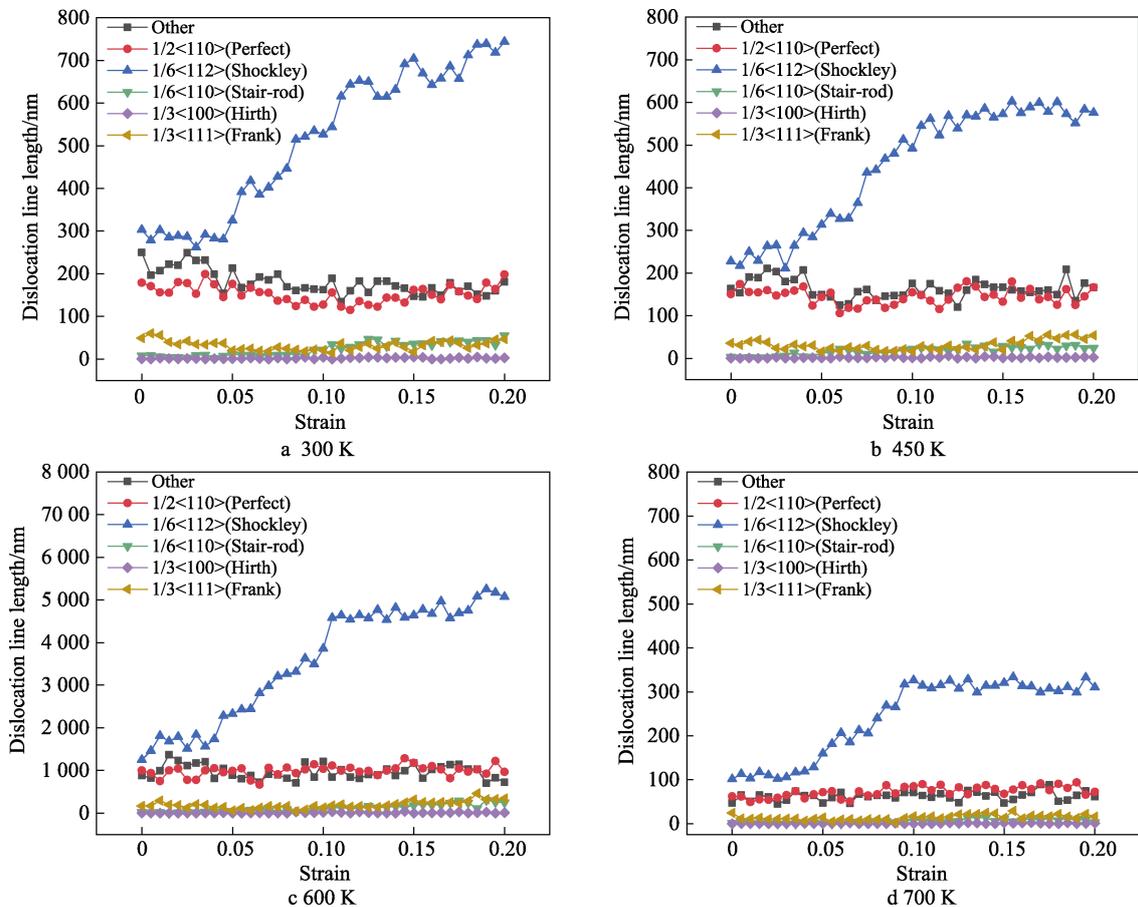


图 5 不同类型位错的位错线长度变化

Fig.5 Length variation of dislocation lines in different types of dislocations

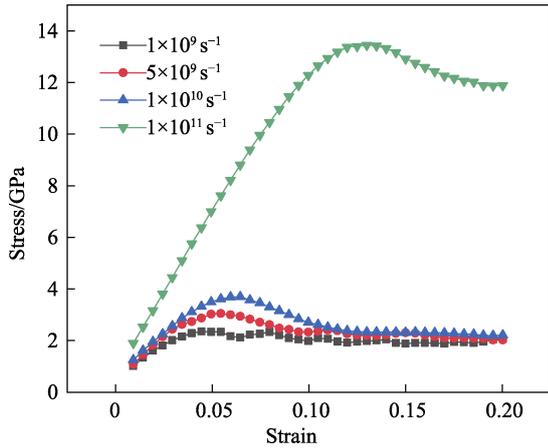


图6 不同应变速率压缩应力-应变曲线

Fig.6 Compression stress-strain curves at different strain rates

为进一步了解应变速率对纳米多晶铝弹性模量与屈服强度的影响,通过 OVITO 中的位错分析算法对模拟结果进行分析。当应变速率不同、应变为 0.2 时,位错分布情况如图 7 所示。应变速率越大,外部给予材料的动能就越多,原子更易获取能量偏移原始点阵,从而产生更多的位错,使纳米多晶铝中位错的相互作用增强,进一步促进了材料内部位错缠结、胞状结构的形成。不同应变速率下纳米多晶铝 CNA 分析原子快照如图 8 所示,分别展示了不同应变速率下纳米多晶铝初始状态、屈服点对应得到极限应变以及应变为 0.2 时的 CNA 分析结果。由图 7 与图 8 对照可知,当应变速率较小时,位错容

易在小晶粒中缠结(图 7 中黑色虚线圈起来的部分),而中间大晶粒中的位错数量较少。应变速率的加快导致位错数量增多,位错在滑移面上的运动更困难,屈服强度增大。

不同压缩应变率下纳米多晶铝的原子结构分数如图 9 所示。由图 9a 和图 9b 可以看出,随着应变率的增大,晶粒边缘处的原子获得能量变多,更容易偏离原始晶格点阵移动,转变为晶界,晶界原子数量增加。根据图 9c—f 可知,随着压缩量的增加,当应变速率为 1×10^9 、 5×10^9 、 $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ 时,一部分 FCC 结构逐渐转化成 Other 结构,构成晶界,只有少部分转化为 HCP、BCC 结构;当应变速率增大至 $1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ 时,材料由弹性变形阶段进入塑性变形阶段,原子结构由 FCC 结构快速转换为 Other 与 BCC 结构。压缩应变率增大,晶粒边缘处原子更易获得能量转换为 Other 结构,晶粒内部大部分铝原子仍保持 FCC 结构,很少转换成 HCP 和 BCC 结构。由图 6 可知,当应变速率较低时,位错的产生与湮灭是压缩变形中主要的协调变形方式。对比图 8a 与图 8c 可以发现,中央大晶粒有明显的晶粒旋转现象,经过测算旋转角度约为 20° ,推测这是由于位错大量缠结于周边小晶粒中,导致晶界软化以及晶粒产生滑动或转动的变形。随着应变速率的增大,位错在晶界处形核并逐渐向晶粒内部延伸,最终形成新的晶粒。同时,在其他晶粒中观察到了形变纳米孪晶,这种层错引起的形变纳米孪晶不够稳定,通常会在应力作用下消失,如图 8h、图 8i

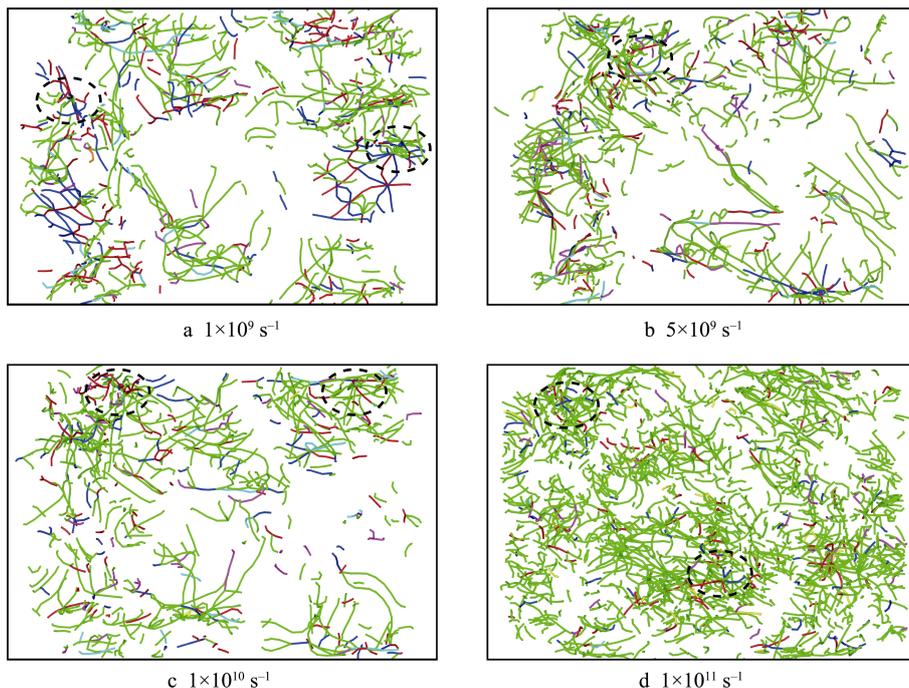


图7 不同应变速率下纳米多晶铝位错分布图

Fig.7 Dislocation distribution of nanocrystalline aluminum at different strain rates

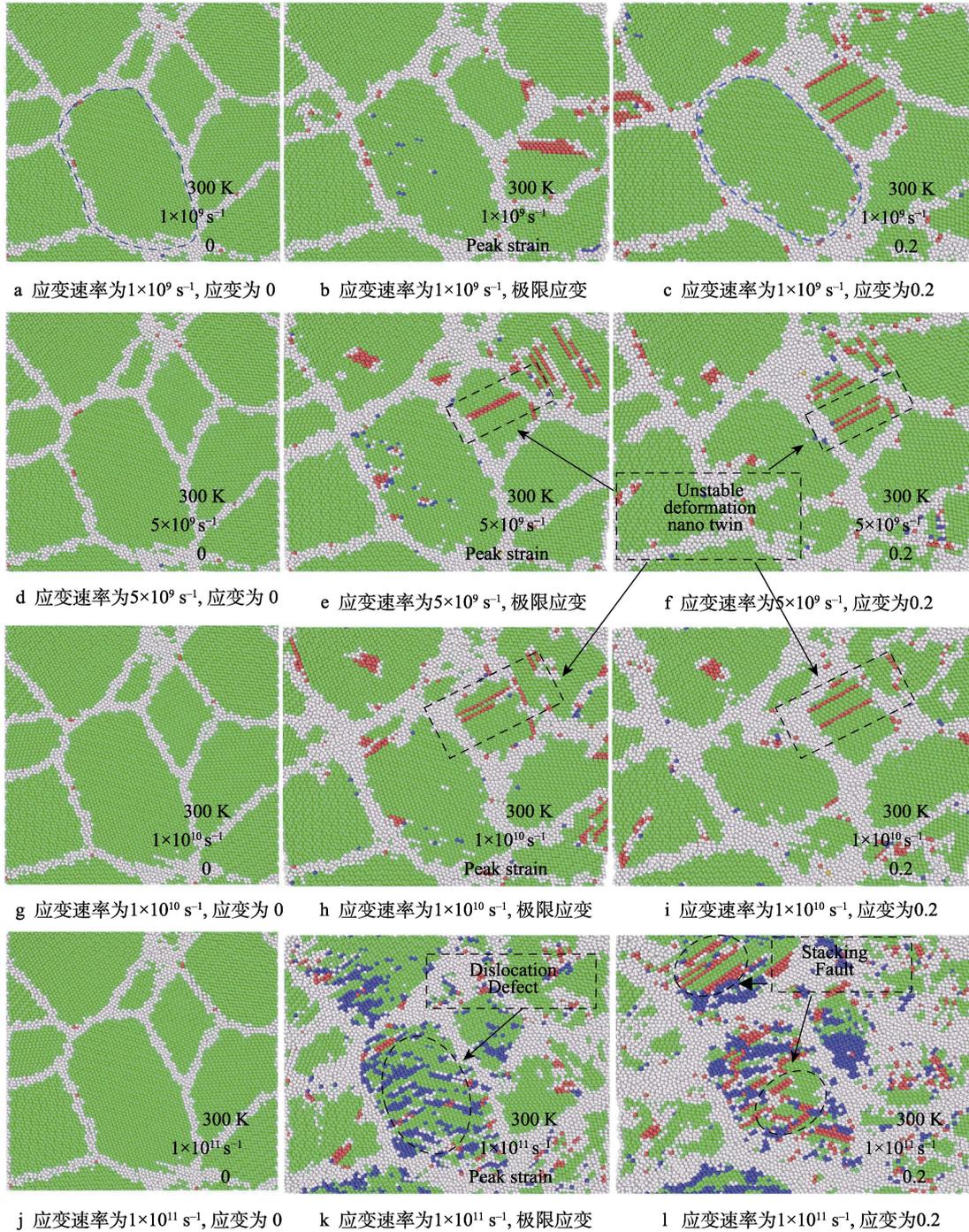


图 8 不同应变速率下纳米多晶铝 CNA 分析原子快照

Fig.8 Atomic snapshots for common nearest neighbor analysis of nanocrystalline aluminum at different strain rates a) strain rate is $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ and strain is 0; b) strain rate is $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ and ultimate strain exists; c) strain rate is $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ and strain is 0.2; d) strain rate is $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ and strain is 0; e) strain rate is $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ and ultimate strain exists; f) strain rate is $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ and strain is 0.2; g) strain rate is $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ and strain is 0; h) strain rate is $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ and ultimate strain exists; i) strain rate is $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ and strain is 0.2; j) strain rate is $1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ and strain is 0; k) strain rate is $1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ and ultimate strain exists; l) strain rate is $1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ and strain is 0.2

中黑色虚线框所示,因此在低应变速率下位错滑移为主要协调变形方式。当应变速率增大至 $1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ 时, FCC 结构大量向 Other、BCC、HCP 结构转换,这标志着位错的大量产生,对照图 8k 与图 7d 可知,在中央大晶粒中产生了大量的位错,且并没有发生明显的

晶粒旋转与晶界滑移现象;同时在图 8l 中可以观察到大量的孪晶,相较于低应变速率条件,孪晶的数量也大幅增加。因此,在高应变速率下,位错滑移与孪生变形共同协调变形,使应变速率为 $1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ 时材料的弹性模量与屈服应力大幅提高。

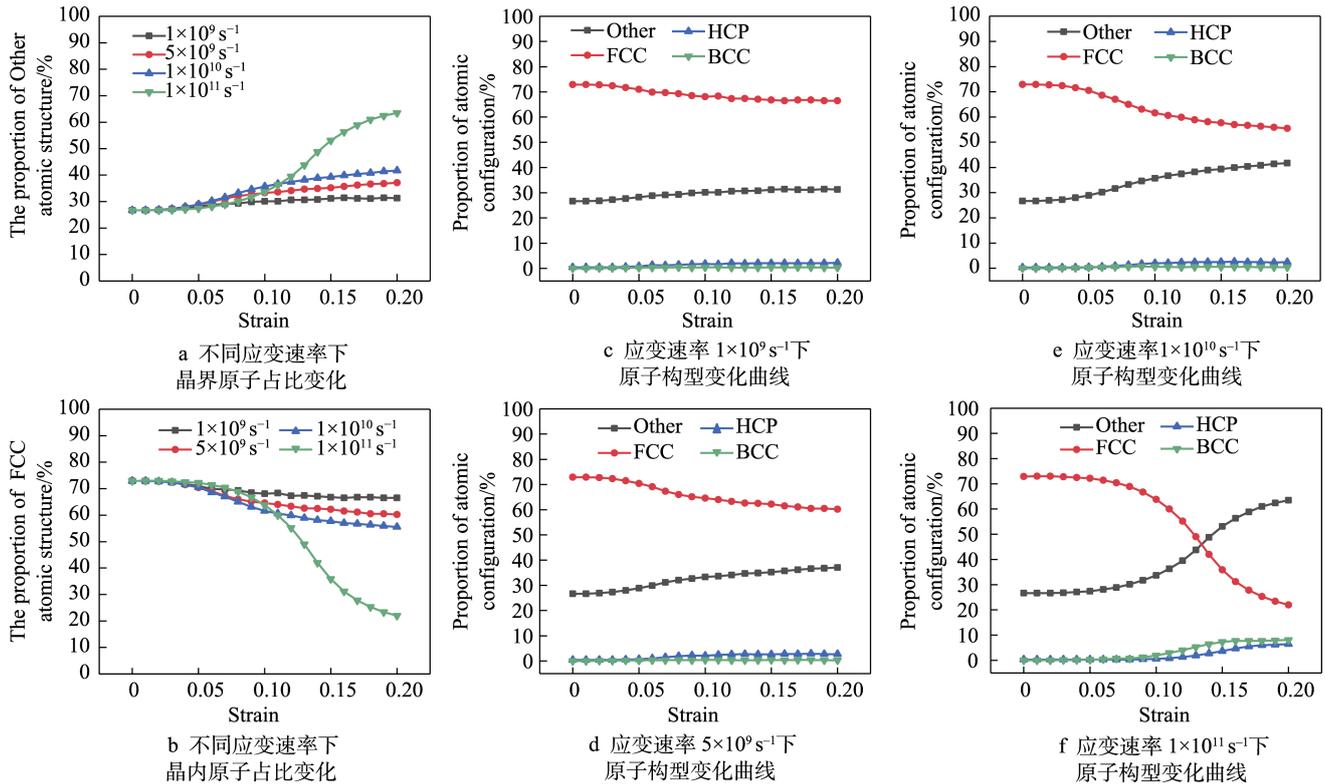


图9 不同压缩应变速率下纳米多晶铝的原子结构分数变化曲线

Fig.9 Curves of atomic structure fraction change of nanocrystalline aluminum at different compression strain rates: a) proportion change of grain boundary atoms at different strain rates; b) proportion change of intracrystalline atoms at different strain rates; c) atomic configuration change curve at strain rate of $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$; d) atomic configuration change curve at strain rate of $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$; e) atomic configuration change curve at strain rate of $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$; f) atomic configuration change curve at strain rate of $1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$

3 结论

运用分子动力学模拟方法,从原子尺度研究了纳米多晶铝在不同压缩条件下的塑性力学行为,重点分析了不同条件对力学性能的影响以及塑性变形过程中的微观结构演变。主要结论如下。

1) 温度升高导致纳米多晶铝的压缩弹性模量降低,这主要是因为高温环境下能量更多,晶粒内原子动能增加,使其更容易脱离原始晶格点,晶界原子所占比例升高,晶粒细化程度降低,由此导致材料的弹性模量、屈服强度与极限应变均减小。

2) 在低应变速率下,材料弹性模量变化较小,有少量 FCC 结构向 BCC、HCP 结构转变。纳米多晶铝有明显的晶界滑移与晶粒旋转现象,位错滑移是主要协调变形方式。应变速率增大,原子更易获得能量,位错密度更大,纳米多晶铝的屈服应力更高。当应变速率提高至 $1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ 时,孪晶数量大幅增加,很少有晶粒旋转与晶界滑移现象发生,位错滑移与孪生变形共同协调变形,使纳米多晶铝屈服应力大幅提高。

3) 在压缩变形过程中, $1/6\langle 112 \rangle$ (不全位错) 的数量最多,在位错运动中占主导地位。在低应变速率下,晶粒旋转与位错的产生湮灭共同协调变形,随着应变速率的增大,晶粒旋转作用逐渐减弱甚至消

失,孪生变形与位错湮灭机制共同协调变形。

参考文献:

- [1] 徐崇义, 李念奎. $2 \times \times \times$ 系铝合金强韧化的研究与发展[J]. 轻合金加工技术, 2005, 33(8): 13-17.
XU Chong-yi, LI Nian-kui. Development and Research of Strengthening and Toughening of $2 \times \times \times$ Aluminium Alloy[J]. Light Alloy Fabrication Technology, 2005, 33(8): 13-17.
- [2] 张琪, 王国军. 超高强铝合金的研究进展[J]. 轻合金加工技术, 2021, 49(4): 13-18.
ZHANG Qi, WANG Guo-jun. Recent Progress in Ultra-High Strength Aluminum Alloy[J]. Light Alloy Fabrication Technology, 2021, 49(4): 13-18.
- [3] SALEM H G, SADEK A A. Fabrication of High Performance PM Nanocrystalline Bulk AA2124[J]. Journal of Materials Engineering and Performance, 2010, 19(3): 356-367.
- [4] SALEM H G, EL-ESKANDARANY S, KANDIL A, et al. Bulk Behavior of Ball Milled AA2124 Nanostructured Powders Reinforced with TiC[J]. Journal of Nanomaterials, 2009, 2009: 479185.
- [5] BONETTI E, PASQUINI L, SAMPAOLESI E. The Influence of Grain Size on the Mechanical Properties of

- Nanocrystalline Aluminium[J]. *Nanostructured Materials*, 1997, 9(1): 611-614.
- [6] KHAN A S, SUH Y S, CHEN Xu, et al. Nanocrystalline Aluminum and Iron: Mechanical Behavior at Quasi-Static and High Strain Rates, and Constitutive Modeling[J]. *International Journal of Plasticity*, 2006, 22(2): 195-209.
- [7] LIU Yong-ning, CHEN Yi-qing, YANG Chun-hui. A Study on Atomic Diffusion Behaviours in an Al-Mg Compound Casting Process[J]. *AIP Advances*, 2015, 5(8): 087147.
- [8] AGHABABAEI R, JOSHI S P. Micromechanics of Tensile Twinning in Magnesium Gleaned from Molecular Dynamics Simulations[J]. *Acta Materialia*, 2014, 69: 326-342.
- [9] ZHAO Yu-hui, ZHAI Ji-qiang, GUAN Yan-jin, et al. Molecular Dynamics Study of Acoustic Softening Effect in Ultrasonic Vibration Assisted Tension of Monocrystalline/Polycrystalline Coppers[J]. *Journal of Materials Processing Technology*, 2022, 307: 117666.
- [10] MA Yong, ZHANG Song, WANG Tao, et al. Atomic Diffusion Behavior near the Bond Interface during the Explosive Welding Process Based on Molecular Dynamics Simulations[J]. *Materials Today Communications*, 2022, 31: 103552.
- [11] YASBOLAGHI R, KHOEI A R. Micro-Structural Aspects of Fatigue Crack Propagation in Atomistic-Scale via the Molecular Dynamics Analysis[J]. *Engineering Fracture Mechanics*, 2020, 226: 106848.
- [12] ICHIYANAGI K, TAKAGI S, KAWAI N, et al. Micro-structural Deformation Process of Shock-Compressed Polycrystalline Aluminum[J]. *Scientific Reports*, 2019, 9(1): 1-8.
- [13] SYARIF J, ALTOYURI A, MOHAMED I F. Equal Channel Angular Pressing of Single Crystal Aluminum: A Molecular Dynamics Simulation[J]. *Journal of Materials Research and Technology*, 2022, 17: 888-897.
- [14] HONG H D T, TRAN V K, NGUYEN V L, et al. High Strain-Rate Effect on Microstructure Evolution and Plasticity of Aluminum 5052 Alloy Nano-Multilayer: A Molecular Dynamics Study[J]. *Vacuum*, 2022, 201: 111104.
- [15] ZAHN D. Molecular Dynamics Simulation of Optimized Shearing Routes in Single- and Polycrystalline Aluminum[J]. *Computational Materials Science*, 2009, 45(4): 845-848.
- [16] ZHOU Jin-jie, SHEN Jin-chuan, ESSA F A, et al. Twins and Grain Boundaries-Dominated the Reverse Bauschinger Effect and Tension-Compression Asymmetry[J]. *Journal of Materials Research and Technology*, 2022, 18: 15-28.
- [17] 马文. 冲击压缩下纳米多晶金属塑性及相变机制的分子动力学研究[D]. 长沙: 国防科学技术大学, 2011: 76-89.
- MA Wen. Molecular Dynamics Investigations on the Mechanisms of Plastic Deformation and Phase Transformation of Nanocrystalline Metals under Shock Compression[D]. Changsha: National University of Defense Technology, 2011: 76-89.
- [18] HIREL P. AtomsK: A Tool for Manipulating and Converting Atomic Data Files[J]. *Computer Physics Communications*, 2015, 197: 212-219.
- [19] STUKOWSKI A, SADIGH B, ERHART P, et al. Efficient Implementation of the Concentration-Dependent Embedded Atom Method for Molecular-Dynamics and Monte-Carlo Simulations[J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2009, 17(7): 075005.
- [20] LIU Xiang-yang, ERCOLESSI F, ADAMS J B. Aluminium Interatomic Potential from Density Functional Theory Calculations with Improved Stacking Fault Energy[J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2004, 12(4): 665-670.
- [21] PLIMPTON S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics[J]. *Journal of Computational Physics*, 1995, 117(1): 1-19.
- [22] STUKOWSKI A. Visualization and Analysis of Atomistic Simulation Data with OVITO-The Open Visualization Tool[J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2010, 18(1): 015012.
- [23] YANG Ming, NIE Yu-jing. Study on Non-Equilibrium Grain-Boundary Segregation of Sulfur among Hastelloy X[J]. *Advanced Materials Research*, 2011, 181/182: 861-865.
- [24] SUN X Y, ZHANG B, LIN H Q, et al. Correlations between Stress Corrosion Cracking Susceptibility and Grain Boundary Microstructures for an Al-Zn-Mg Alloy[J]. *Corrosion Science*, 2013, 77: 103-112.
- [25] PAN Zhi-liang, LI Yu-long, WEI Q. Tensile Properties of Nanocrystalline Tantalum from Molecular Dynamics Simulations[J]. *Acta Materialia*, 2008, 56(14): 3470-3480.
- [26] YUAN Fu-ping. Atomistic Simulation Study of Tensile Deformation in Bulk Nanocrystalline BCC Iron[J]. *Science China Physics, Mechanics and Astronomy*, 2012, 55(9): 1657-1663.

责任编辑: 蒋红晨