

FeC 合金拉伸行为的分子动力学模拟研究

李佳君¹, 孙 淼², 吴慧娟¹, 吕世宁¹, 高有山^{1*}, 王爱红¹

(1. 太原科技大学机械工程学院, 山西 太原 030024; 2. 太原重工股份有限公司, 山西 太原 030024)

摘 要: 为了探究温度和应变率对 FeC 合金微观力学性能的影响, 运用分子动力学方法对 FeC 合金进行了拉伸性能的模拟, 得到了不同温度、不同应变率工况下 FeC 合金的应力应变曲线, 并对其进行了分析, 利用 MATLAB 对数据进行处理, 建立了关于温度和应变率的 FeC 合金弹性模量和屈服强度的数学预测模型。结果表明: 弹性模量和屈服强度的仿真值与数学模型的预测值之间的绝对误差最大分别为 2.680 GPa 和 0.079 GPa, 相对误差最大分别为 1.680% 和 0.737%, 数学预测模型能在一定程度上对弹性模量和屈服强度进行有效的预测。

关键词: FeC 合金; 力学性能; 分子动力学; 弹性模量; 屈服强度

中图分类号: TF76, TL341

文献标志码: A

文章编号: 1004-7638(2024)04-0158-05

DOI: 10.7513/j.issn.1004-7638.2024.04.022

开放科学(资源服务)标识码(OSID):



听语音
与作者
聊科研

Molecular dynamics simulation study on the tensile behavior of FeC alloy

Li Jiajun¹, Sun Miao², Wu Huijuan¹, Lü Shining¹, Gao Youshan^{1*}, Wang Aihong¹

(1. College of Mechanical Engineering, Taiyuan University of Science and Technology, Taiyuan 030024, Shanxi, China;

2. Taiyuan Heavy Industry Co., Ltd., Taiyuan 030024, Shanxi, China)

Abstract: In order to investigate the effects of temperature and strain rate on the micro-mechanical properties of FeC alloys, molecular dynamics methods were used to simulate the tensile properties of FeC alloys. The stress-strain curves of FeC alloys at different temperatures and strain rates were obtained and analyzed, and the data was processed using MATLAB. A mathematical model was established to predict the elastic modulus and yield strength of FeC alloys calculated on the basis of temperature and strain rate. The results show that the maximum absolute errors between the simulation and the prediction values by the mathematical model of elastic modulus and yield strength are 2.680 GPa and 0.079 GPa, respectively. The maximum relative errors are 1.680% and 0.737%, respectively. The mathematical prediction model can effectively predict the elastic modulus and yield strength to a certain extent.

Key words: FeC alloy, mechanical properties, molecular dynamics, elastic modulus, yield strength

0 引言

FeC 合金是广泛应用于工业生产的铁基材料,

其力学性能在很大程度上受到温度和应变速率的影响。在工业生产和科学研究中, 对于 FeC 合金在不同温度和应变速率条件下的微观力学性能进行深入

收稿日期: 2023-06-29

基金项目: 山西省自然科学基金(20210302123217); 山西省专利推广实施资助专项(20171064); 山西省研究生实践创新项目(2023SJ257); 太原科技大学研究生教育创新项目(BY2022014); 太原科技大学大学生创新创业训练计划(XJ2022178)。

作者简介: 李佳君, 1999 年出生, 男, 硕士研究生, 主要从事金属材料性能模拟以及机械结构疲劳寿命的研究, E-mail: 737306177@qq.com; *通讯作者: 高有山, 1974 年出生, 男, 博士, 教授, 主要从事工程机械电液传动与控制技术的教学科研工作, E-mail: 2003011@tyust.edu.cn。

研究具有重要意义。

随着分子动力学 (Molecular Dynamics, MD) 模拟技术不断发展, MD 方法已成为研究材料微观力学性能和本征性质变化的重要工具。采用 MD 模拟方法, 可以考虑材料的微观结构、原子间相互作用力、温度和应变速率等因素, 从而模拟出材料在不同条件下的力学性能的变化情况。利用 MD 方法研究一些合金的性能, 能够避免传统方法研究材料力学性能要通过材料试制再进行试验, 从而造成大量人力物力浪费的问题。

国内外学者已经利用分子动力学对一些合金的性能做出了如下研究: 西安交通大学叶天舟等人^[1]采用分子动力学方法研究了温度和应变速率两个重要影响因素下 FeCrAl 单晶的力学性能, 对应力应变、缺陷分布、位错密度的变化及变形机制进行了讨论, 分析了溶质原子对模拟结果的影响。河海大学周继凯等人^[2]研究了分子动力学 FeC 合金动态拉伸力学性能温度和应变率效应。Wu 等人^[3]在分子动力学对 Fe 纳米丝的研究中发现, 不同温度下的塑性变形都是通过孪生变形机制产生, 并且孪生增殖应力随温度上升而降低。曾强等^[4]通过分子动力学方法研究了不同晶态、孪晶界间距以及 Fe 掺杂对选区激光熔化铝力学性能的影响。Zheng 等人^[5]采用分子动力学方法研究了 Al0.1CoCrFeNi 单晶高熵合金 (HEA) 在室温 (300 K) 轴向拉伸载荷下的显微组织和力学性能。研究了含表面小裂纹的单晶 HEA 的显微组织和拉伸性能。王云天等人^[6]的研究表明温度升高, 单晶铁的成核阈值会随之降低。

笔者使用 MD 方法对 FeC 合金在不同温度和应变速率条件下的微观力学性能进行了研究。通过调节温度和应变速率, 模拟了 FeC 合金在高温和高应变速率下的应变变化和缺陷演化情况。同时, 结合分析计算得到应力-应变曲线等特性参数, 对模拟结果进行了综合分析解释。这对于材料科学和工业生产具有重要的指导意义。该研究结果将有助于深入理解 FeC 合金的力学性质和热力学性质变化机制, 从而为实际工业生产提供有力的指导和支持。

1 模型建立与模拟方法

1.1 FeC 合金钢的单晶模型

采用分子动力学方法对 FeC 合金的力学性能在微观尺度上进行研究。使用开源大规模原子/分子并行模拟器 LAMMPS 对 FeC 合金模型进行热平

衡过程和拉伸过程模拟^[7]。按照 Fe99.83%-C0.17% (质量百分比)^[8]对铁碳合金进行建模, 首先使用 LAMMPS 建立 x 、 y 、 z 三个方向尺寸分别为 $2.864\ 4\ \text{nm} \times 57.288\ \text{nm} \times 57.288\ \text{nm}$ 的单晶铁模型 (单晶铁的晶格常数为 $0.286\ 44\ \text{nm}$), 原子总数为 $800\ 000$, 然后利用 Matlab 程序随机插入质量占比为 0.17% 的 C 原子 (个数约为 $6\ 249$ 个)。

1.2 模拟方法

模拟过程使用的势函数是 D J Hepburn^[9]改进的 EMA 势函数, 可以很好地描述 FeC 合金体系中各类原子间的相互作用。采用 LAMMPS 对 FeC 合金单晶模型在不同温度和不同应变率下进行拉伸性能模拟, 在仿真过程中, x 、 y 、 z 方向均采用周期性边界, 通过 NVT 系综对模型进行充分弛豫, 直到模型达到稳定状态, 然后在 NVE 系综下进行应变的加载, 这时采用 Nose-Hoover 热浴的方法控制系统的温度, 使其保持在相应的温度条件下。仿真时间步长为 $1\ \text{fs}$, 温度 T 分别为 300 、 400 、 500 、 600 、 700 、 800 、 $900\ \text{K}$, 应变率分别为 1×10^9 、 5×10^9 、 1×10^{10} 、 5×10^{10} 、 $1 \times 10^{11}\ \text{s}^{-1}$ 。由于分子动力学模拟也受到计算资源和时间等限制, 需要在较短时间内模拟尽可能多的现象和物理特性。为了保证模拟结果的可靠性和准确性, 模拟中一般采用的应变率比试验上要高出几个数量级^[10], 而不是完全照搬试验条件。

2 仿真结果与分析

2.1 演化过程

图 1 是温度为 $500\ \text{K}$, 应变率为 $1 \times 10^{10}\ \text{s}^{-1}$ 工况下 FeC 合金单晶模型在单轴拉伸过程不同应变时的原子构型图, 其中蓝色原子代表 bcc (体心立方) 结构、灰色原子代表无序结构。FeC 合金模型在应变为 0 、 5% 、 15% 、 27% 时, 体系依次处在初始阶段、弹性变形阶段、塑性变形阶段和即将断裂阶段。可以看出, 从初始阶段到即将断裂阶段, 随着拉伸过程的不断发展, 会有越来越多的原子由 bcc 结构转变为无序结构。通过对不同应变率的原子构型演化图进行分析, 可以得出: 随着应变率的增加, 原子由 bcc 结构转化为无序结构的速度变慢, 即高应变率抑制了位错运动的产生。

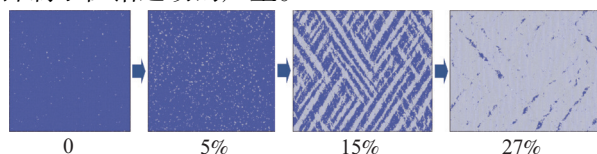


图 1 不同应变时的原子构型演化

Fig. 1 Atomic configuration evolution under different strains

2.2 温度效应

图2为通过仿真得到的FeC合金在相同温度不同应变率下的应力应变曲线。相同应变率下,随着温度升高,由于原子越来越活跃,原子间开始出现相互远离的趋势,弹性模量、屈服强度、断裂强度和断裂应变逐渐减小。从300~900 K微观拉伸过程

的应力应变曲线可以看出,在较低温度时,弹性阶段之后先出现较为明显的应变软化过程,然后再进入塑性阶段;而随着温度的升高,应变软化过程逐渐消失,并且随着温度的升高,相同应变对应的应力更小,即更容易发生塑性变形。

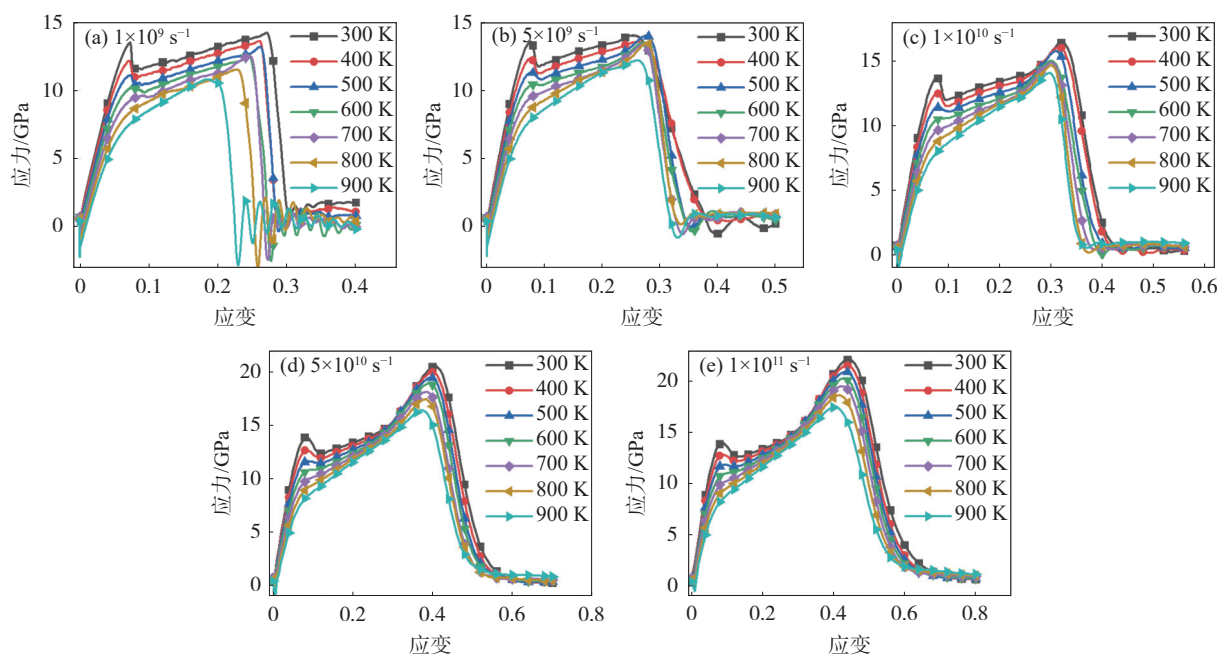


图2 温度效应下的应力应变曲线
Fig. 2 Stress-strain curves under temperature effect

2.3 应变率效应

图3为通过仿真得到的FeC合金在相同应变率不同温度下的应力应变曲线。相同温度下,随着应变率的增大,弹性模量的变化较小,屈服强度和进入塑性阶段时的应变以及断裂强度、断裂应变会逐

渐增大,这是由于高应变率抑制了位错运动的产生。从应变率为 $1 \times 10^9 \sim 1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ 微观拉伸过程的应力应变曲线可以看出,在应变率较小时,塑性阶段后期没有较为明显的应变强化过程;而随着应变率的增大,应变强化过程逐渐明显。

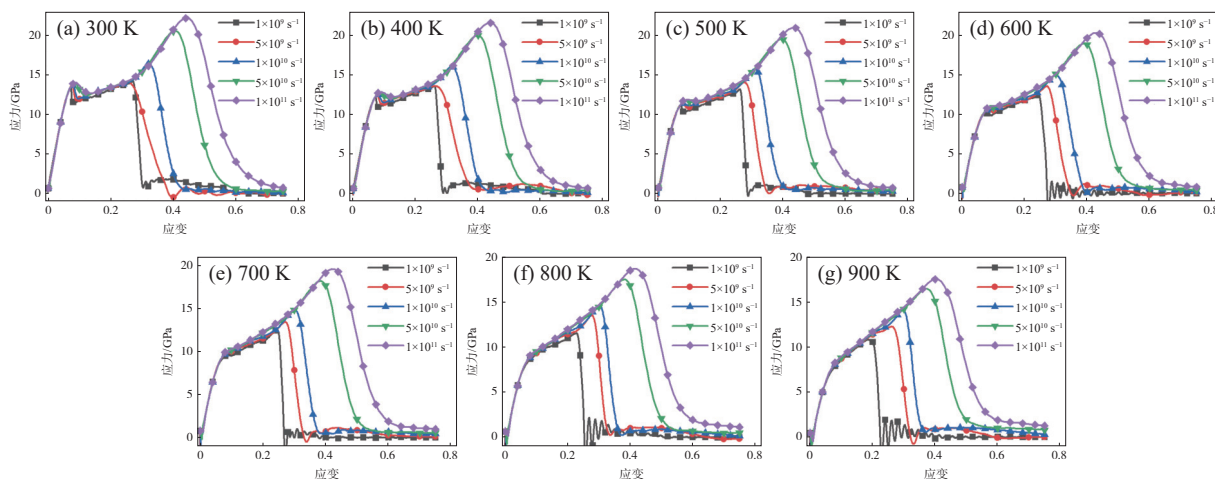


图3 FeC合金相同应变率不同温度下的应力应变曲线
Fig. 3 Stress-strain curves under strain rate effect

2.4 数学预测模型的建立

对仿真数据进行处理, 得到不同温度不同应变率下的弹性模量 E 和屈服强度 Q , 数据分别如表 1 所示。对应变率求对数 (用 η 表示), 然后利用 MATLAB 对数据进行二维插值 (插值方法为 cubic

插值) 补全数据, 并绘制弹性模量和屈服强度与温度和应变率关系三维图, 如图 4、5 所示。通过插值得到的数学模型可以用来预测温度 T 为 300 ~ 900 K, 应变率为 $1 \times 10^9 \sim 1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ 工况下 FeC 合金模型的弹性模量和屈服强度。

表 1 结果统计
Table 1 Statistic results

温度/K	E/GPa					Q/GPa				
	$1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$	$5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$	$1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$	$5 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$	$1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$	$1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$	$5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$	$1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$	$5 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$	$1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$
300	207.165	212.584	213.059	211.881	213.066	13.478	13.589	13.696	13.890	14.041
400	195.880	197.963	198.091	198.596	200.514	12.155	12.369	12.458	12.705	12.879
500	186.006	186.347	185.781	185.427	188.833	11.102	11.320	11.400	11.657	11.834
600	176.817	176.904	174.907	174.036	178.773	10.227	10.398	10.532	10.739	11.034
700	168.936	168.354	165.489	164.826	170.282	9.344	9.578	9.595	9.908	10.297
800	161.087	161.185	158.769	158.424	164.841	8.525	8.591	8.764	9.258	9.354
900	153.050	154.258	151.722	153.005	159.754	7.708	7.934	8.037	8.498	8.908

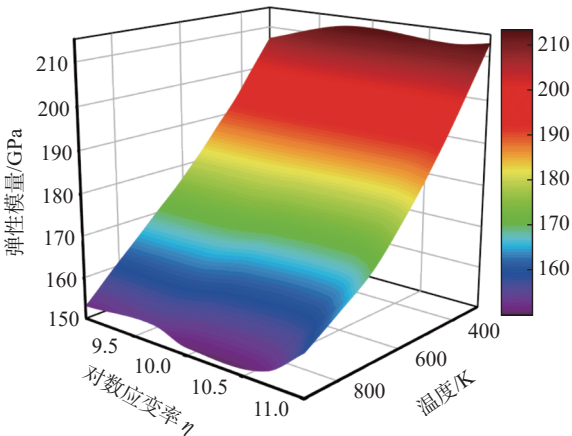


图 4 弹性模量与温度和应变率关系

Fig. 4 Temperature and strain rate effects on the elastic modulus

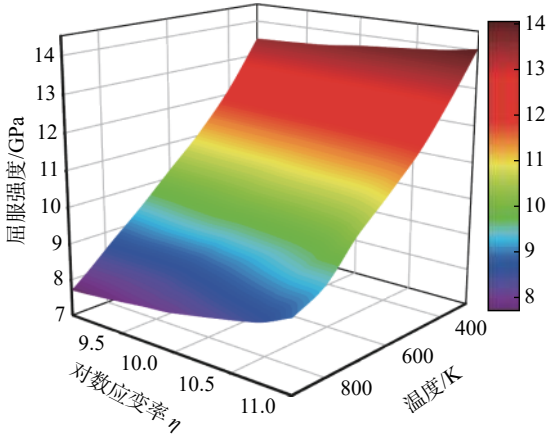


图 5 屈服强度与温度和应变率关系

Fig. 5 Temperature and strain rate effects on the yield strength

3 模型验证

为了对第 3 节得到的数学预测模型进行验证, 证明模型的可行性, 现对 FeC 合金单晶模型进行 5 组不同条件的仿真模拟, 仿真条件如表 2 所示, 得到其应力应变曲线如图 6 所示。

表 2 仿真条件
Table 2 Simulation conditions

组号	温度/K	应变率 $\times 10^{-9}/\text{s}^{-1}$
1	360	4
2	450	60
3	580	20
4	730	30
5	810	6

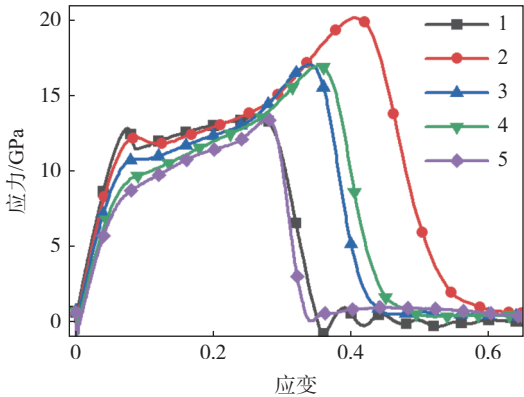


图 6 模型验证的应力应变曲线

Fig. 6 Stress-strain curves by model validation

为更好地统计误差, 对仿真得到的数值与模型预测的数值进行误差分析, 其结果记录在表 3 中。从表 3 中可以得出, 弹性模量和屈服强度仿真值与

预测值之间的绝对误差最大分别为 2.680 GPa 和 0.079 GPa, 相对误差最大分别为 1.680% 和 0.737%。

误差满足工程误差范围, 数学预测模型在一定程度上是有效的。

表 3 误差分析
Table 3 Error analysis

组号	E/GPa			E的相对误差/%	Q/GPa			Q的相对误差/%
	预测值	仿真值	绝对误差		预测值	仿真值	绝对误差	
1	203.395	204.518	-1.123	-0.549	12.811	12.806	0.005	0.039
2	192.23	190.738	1.492	0.782	12.205	12.233	-0.028	-0.229
3	176.21	176.098	0.112	0.064	10.793	10.714	0.079	0.737
4	162.192	159.512	2.680	1.680	9.538	9.524	0.014	0.147
5	160.003	160.439	-0.436	-0.272	9.218	9.199	0.019	0.207

4 结论

基于分子动力学方法对不同温度和不同应变率工况下的 FeC 合金进行了力学性能模拟与分析, 得出了如下结论:

1) 相同应变率下, 随着温度升高, 由于原子越来越活跃, 原子间开始出现相互远离的趋势, 弹性模量、屈服强度、断裂强度和断裂应变逐渐减小。在较低温度时, 弹性阶段之后会出现较为明显的应变软化过程; 而随着温度的升高, 应变软化过程逐渐消失, 并且更容易发生塑性变形。

2) 相同温度下, 由于高应变率会抑制位错运动

的产生, 因此, 随着应变率的增大, 屈服强度和进入塑性阶段时的应变以及断裂强度、断裂应变会逐渐增大。在应变率较小时, 塑性阶段后期没有较为明显的应变强化过程; 而随着应变率的增大, 应变强化过程逐渐明显。

3) 建立了关于温度和应变率的 FeC 合金弹性模量和屈服强度的数学预测模型。弹性模量和屈服强度的仿真值与数学模型的预测值之间的绝对误差最大分别为 2.680 GPa 和 0.079 GPa, 相对误差最大分别为 1.680% 和 0.737%, 误差满足工程误差范围, 数学预测模型在一定程度上是有效的。

参考文献

- [1] Ye Tianzhou, Yao Huan, Wu Yingwei, *et al.* Molecular dynamics study on tensile mechanical properties of FeCrAl alloy[J]. *Rare Metal Materials and Engineering*, 2023, 52(2): 777-784.
(叶天舟, 姚欢, 巫英伟, 等. FeCrAl合金拉伸力学性能分子动力学研究[J]. *稀有金属材料与工程*, 2023, 52(2): 777-784.)
- [2] Zhou Jikai, Zhu Qinghua. Molecular dynamics of temperature and strain rate effects of dynamic tensile mechanical properties of FeC alloy[J]. *Science Technology and Engineering*, 2019, 19(11): 61-66.
(周继凯, 朱清华. FeC 合金动态拉伸力学性能温度和应变率效应分子动力学[J]. *科学技术与工程*, 2019, 19(11): 61-66.)
- [3] Wu Qian, Wang Yong, Han Tao, *et al.* Molecular dynamics simulations of the effect of temperature and strain rate on the plastic deformation of body centred cubic iron nanowires[J]. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 2021, 143: 031007.
- [4] Zeng Qiang, Wang Lijuan, Chen Tao, *et al.* Molecular dynamics simulation on effect of nano-twin and Fe doping on mechanical properties of SLM-Al[J]. *Rare Metal Materials and Engineering*, 2023, 52(1): 145-152.
(曾强, 王丽娟, 陈韬, 等. 纳米孪晶与Fe掺杂对SLM-Al力学性能影响的分子动力学模拟[J]. *稀有金属材料与工程*, 2023, 52(1): 145-152.)
- [5] Zheng Wei, Han Junzhao, Duan Xing, *et al.* Mechanical properties of Al_{0.1}CoCrFeNi high entropy alloy based on molecular dynamics study[J]. *Rare Metal Materials and Engineering*, 2022, 51(9): 3230-3235.
- [6] Wang Yuntian, Zeng Xiangguo, Yang Xin. Molecular dynamics simulation of effect of temperature on void nucleation and growth of single crystal iron at a high strain rate[J]. *Acta Phys. Sin.*, 2019, 68(24): 246102.
(王云天, 曾祥国, 杨鑫. 高应变率下温度对单晶铁中孔洞成核与生长影响的分子动力学研究[J]. *物理学报*, 2019, 68(24): 246102.)
- [7] Aidan P Thompson, H Metin Aktulga, Richard Berger, *et al.* LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales[J]. *Computer Physics Communications*, 2022, 271: 108171.
- [8] Zhang Chuntao, Zhu Hongjie, Zhu Li. Effect of interaction between corrosion and high temperature on mechanical properties of Q355 structural steel[J]. *Construction and Building Materials*, 2021, 271: 121605.
- [9] Derek J Hepburn, Graeme J Ackland. Metallic-covalent interatomic potential for carbon in iron[J]. *Physical Review B*, 78(16), 165115.
- [10] Zhu Lshian, Zhao Shijin. Influence of Ni on Cu precipitation in Fe-Cu-Ni ternary alloy by an atomic study[J]. *Chinese Physics B*, 2014, 23(6): 193-198.