

Molecular Dynamics Simulation of Al-SiC Interfacial Behavior Based Cohesive Zone Model

Hongmin Pen¹, Jianhua Guo², Xianchong Wang¹, Lei Wang¹, Yufeng Wang¹

¹Tianjin Institute of Aerospace Mechanical and Electrical Equipment, Tianjin

²Tianjin Long March Technical Equipment Co. Ltd., Tianjin

Email: hmpen23@126.com

Received: Apr. 28th, 2018; accepted: May 13th, 2018; published: May 22nd, 2018

Abstract

In order to investigate the interfacial atom deformation mechanism and change rules of stress in tension and shear state, molecular dynamics models for Mode I and Model II failure were performed. The simulation results show that the stress reaches the maximum when the crack propagates and descends up to zero during tension process. During the shear process, the stress-displacement curves fluctuate to the minimal value due to the dislocation pileup and crack healing. According to the parameters obtained from stress-displacement curves, a tension finite element model based cohesive zone law for nanosized silicon carbide particles (SiCp) reinforced aluminium-based matrix composite materials has been established. The variation trend of tension stress-strain is the same as experimental data.

Keywords

Cohesive Zone Model, Multiscale, Silicon Carbide Particles, Composite Materials

基于粘聚力模型的铝 - 碳化硅界面行为的跨尺度仿真

盆洪民¹, 国建花², 王现冲¹, 王雷¹, 王玉凤¹

¹天津航天机电设备研究所, 天津

²天津航天长征技术装备有限公司, 天津

Email: hmpen23@126.com

收稿日期: 2018年4月28日; 录用日期: 2018年5月13日; 发布日期: 2018年5月22日

摘要

为研究理想构件与缺陷构件拉伸与剪切过程界面原子变形机理和应力变化规律,建立了铝-碳化硅基体 I 型和 II 型断裂模式下的三维分子动力学模型。仿真结果表明拉伸过程中裂纹发生扩展后,应力到达峰值,并开始下降直至为零;剪切过程由于位错塞积和止裂,应力-位移曲线呈锯齿状波动下降。最后采用应力-位移曲线所得参数,建立了基于粘聚力模型的纳米颗粒增强铝基复合材料的有限元模型,拉伸应力-应变仿真结果与拉伸试验结果吻合较好。

关键词

粘聚力模型, 跨尺度, 碳化硅, 复合材料

Copyright © 2018 by authors and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

颗粒增强 Al 基复合材料是由铝合金加入不连续的硬质颗粒制造而成,正在替代传统材料,广泛应用于工业工程领域。纳米级颗粒增强铝基复合材料成为研究的一大热点,纳米颗粒的加入使 Al 基复合材料的屈服强度、抗拉强度、弯曲强度、硬度、弹性模量增加,磨损率降低,而不损失其塑性[1]。由于非均质各向异性和耐磨的增强相,使得这类材料的后续成形、加工比较困难。因此有必要从微观到宏观深入研究纳米 SiCp 颗粒增强 Al 基复合材料的力学特性。

Pramanik 等[2]采用有限元方法模拟颗粒增强 Al 基复合材料的切削过程,分析结果表明刀具-颗粒间的相互作用以及加工过程中的应力/应变分布直接影响颗粒剥离、表面损伤和刀具的磨损。Dandekar 和 Shin [3]采用递阶多尺度模型模拟激光辅助加工金属基复合材料,结果显示不连续的切屑通过剪切区裂纹的扩展形成,而工件材料在高应力作用下的塑性变形形成已加工表面。Zhou 等[4]采用二维直角切削有限元模型模拟 PCD 刀具加工 SiCp 铝基复合材料,用不同切削条件下工件和 SiCp 的米塞斯等效应力分布能够很好地解释其切削加工机理。Wang 等[5]采用二维中尺度有限元模型研究 SiCp 颗粒增强铝基复合材料的铣削加工,仿真结果表明颗粒旋转、拔出、大缝隙、微裂纹和刀具与 SiC 颗粒的相互作用是主要的缺陷成形机理。Liu 等[6]采用二维微米尺度有限元模型模拟微加工铝基复合材料过程中 SiC 颗粒的脆性断裂机理,结果表明刀具的作用位置不同,基体和颗粒的变形机理有较大差异。Umer 等[7]采用粘聚力单元模拟铝基复合材料的切削过程,通过不同切削仿真模型结果对比验证其采用的粘聚力单元能够很好地模拟 SiC 颗粒与基体界面间的相互作用,但其模型没有考虑温度的影响。

本文采用分子动力学方法[8][9],描述铝-碳化硅界面间相互作用机理。并将原子级仿真结果作为粘聚力单元的输入,建立纳米颗粒增强铝基复合材料的微-宏观有限元模型,最后通过仿真与实验结果对比验证该模型的正确性。

2. 多尺度仿真模型

2.1. 分子动力学仿真模型

Al-SiC 界面拉伸和剪切的分子动力学模型如图 1 所示。工件尺寸为 $50 \text{ \AA} \times 120 \text{ \AA} \times 30$ ($1 \text{ \AA} = 0.1 \text{ nm}$),

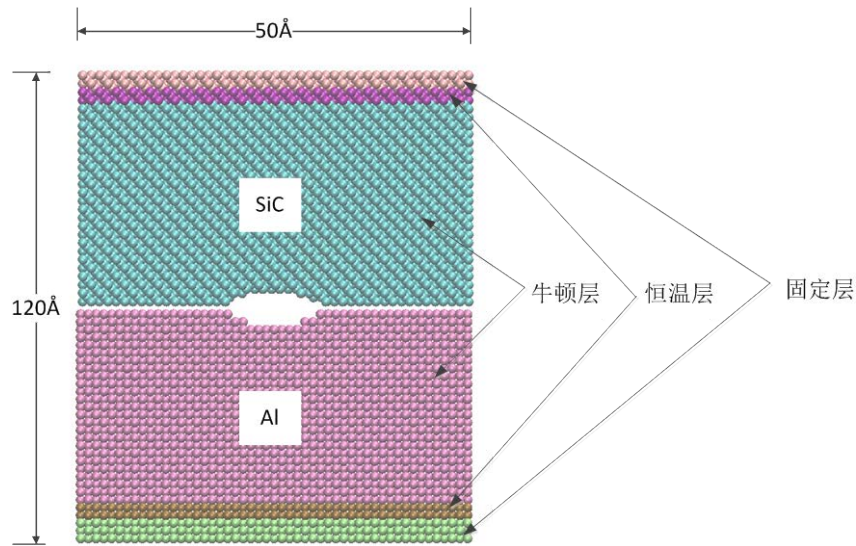


Figure 1. Molecular dynamics simulation model
图 1. 分子动力学仿真模型

包含 4284 个 Si 原子、4323 个 C 原子和 10,620 个 Al 原子。固定试件最外两层原子，挨着固定层原子的两层原子为恒温层，通过标定速度的方式保证温度为 293 K，其余原子为牛顿层，计算过程中服从牛顿第二定律。在 Z 方向采用周期性边界条件。Al 晶体与 SiC 接触平面垂直于纸面为(001)平面，Al 和 SiC 接触面平衡键长设为 3。分别建立两种拉伸和剪切模型，一种是没有缺陷的完好构件，另外一种为在接触开设裂纹长度 10 Å 的缺口的预设缺陷构件(见图 1)。

2.2. 势函数

本文 Al 材料原子间的相互作用采用 EAM 势[10]描述，

$$E = \sum_i \left[\frac{1}{2} \sum_j \phi(r_{ij}) + F(\rho_i) \right] \quad (1)$$

$$\rho_i = \sum_j f(r_{ij}) \quad (2)$$

式中 E 为系统的总能量， $\phi(r_{ij})$ 和 $F(\rho_i)$ 分别为势能和嵌入能， $f(r_{ij})$ 为电子密度分布函数。

SiC 材料原子间采用 Tersoff 势[11]描述，

$$u(r_{ij}) = V_R(r_{ij}) - B_{ij} V_A(r_{ij}) \quad (3)$$

式中 V_R ——排斥项， V_A ——吸引项， B_{ij} ——键序参数。

刀具和工件之间采用 Morse 势[12]描述，Morse 势函数参数见表 1。

2.3. 势函数

粘聚力模型[13][14]假定内聚力在损伤之前程线性关系，一旦损伤起始条件达到，材料将进入损伤演变阶段。本模拟采用的损伤起始条件为最大名义应力准则，当内聚力单元中最大名义应力比达到 1 时，材料开始损伤，如式(4)所示。

$$\max \left\{ \frac{\langle t_n \rangle}{t_n^0}, \frac{t_s}{t_s^0}, \frac{t_t}{t_t^0} \right\} \quad (4)$$

Table 1. Morse potential function parameters**表 1.** Morse 势函数参数

| 系统 | 参数 | Morse 势 |
|-------|-----------|---------|
| Al-Si | D_0 | 0.4824 |
| | A (1/Å) | 1.322 |
| | r_0 (Å) | 2.92 |
| Al-C | D_0 | 0.4691 |
| | A (1/Å) | 1.738 |
| | r_0 (Å) | 2.246 |

一旦达到损伤起始条件，材料即进入损伤阶段。损伤演化规则描述材料达到损伤起始条件后材料的刚度退化率。损伤变量 D 代表材料的整个损伤过程，初始值设为 0，随着加载的进行， D 值由 0 逐渐变为 1，材料失效。应力分量和损伤变量 D 的关系如式(5)、(6)和(7)所示，

$$t_n = \begin{cases} (1-D)\bar{t}_n, & \bar{t}_n \geq 0 \\ \bar{t}_n, & \text{其他} \end{cases} \quad (5)$$

$$t_s = (1-D)\bar{t}_s \quad (6)$$

$$t_t = (1-D)\bar{t}_t \quad (7)$$

式中 \bar{t}_n 、 t_s 和 t_t 分别为采用牵引分离模型时不考虑损伤的情况下三个坐标方向上的应力分量。

另一个用于定义损伤演化的参数为失效时的能量消耗 G^C ，如图 2 所示为典型的内聚力模型从加载、软化到最后失效的曲线图，箭头表示不同的损伤演化定义。

3. 结果和讨论

3.1. 张开位移 - 应力响应

图 3 所示为 I 型断裂模下单轴拉伸过程，Al 基体固定层原子固定不动，通过在 SiC 基体固定层施加 y 方向的载荷(SiC 颗粒固定层原子与基体未进行颜色区分)。可以看出经过 50 ps 的驰豫，SiC 和 Al 基体界面间达到稳定的平衡状态，界面分离距离约为 2.6 Å。随着载荷的增加，基体原子按比例弹性伸长。当晶格应变达到 0.06 时，材料发生屈服，可以看到界面发生裂纹扩展，如图 3(b)中“A”标记处。屈服过后，Al-SiC 界面进一步变形，当应变达到 0.14 时拉伸载荷趋于零。可以看到大量的 Al 基体粘结在 SiC 颗粒上，如图 3(c)中“B”标记处，材料大量塑性变形发生在 Al 基体上。

缺陷构件和理想构件单轴拉伸获得的应力-位移响应如图 4 所示。可以看到，拉伸初始理想构件和缺陷构件均发生弹性变形。当发生裂纹扩展时，应力到达峰值，并开始下降直至为零。与预期一样，理想构件的峰值应力大于缺陷构件。由拉伸应力 - 应变曲线能够得到构件的弹性模量值和峰值应力值。

图 5 所示为 II 型断裂模式下剪切过程，Al 基体固定层原子固定不动，通过在 SiC 基体固定层施加 x 方向的载荷(SiC 颗粒固定层原子与基体未进行颜色区分)。与拉伸情况一致，基体经过 50 ps 的驰豫达到平衡状态。当晶格应变达到 0.03 时，材料发生剪切屈服，可以看到界面发生裂纹扩展，如图 5(b)中“A”标记处。屈服过后，Al-SiC 界面进一步变形，当应变达到 0.11 时剪切载荷趋于一个低值。随着剪切进行，大量位错沿滑移面开始扩展，并在传播方向交结形成位错割阶，同时裂纹处发生止裂现象，如图 5(c)标记“B”所示。大量的位错塞积和止裂现象，使得构件发生强化。同样可以看到大量的 Al 基体粘结在 SiC 颗粒上。由拉伸与剪切过程原子变形图上可以看出，构件的变形主要发生在 Al 基体上，SiC 颗粒呈半刚体状态。

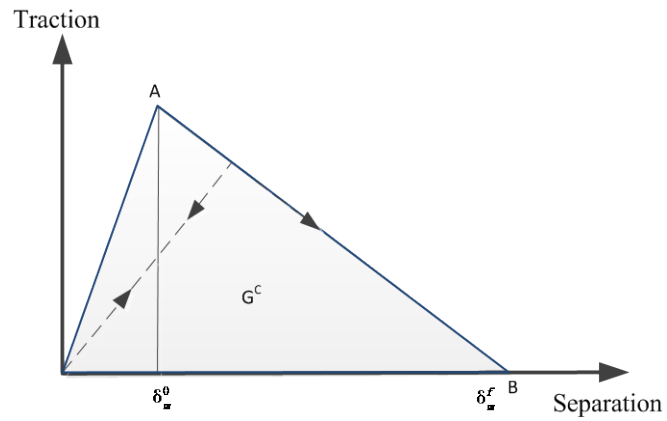


Figure 2. The damage evolution law of cohesive zone model
 图 2. 粘聚力模型的线性损伤演化

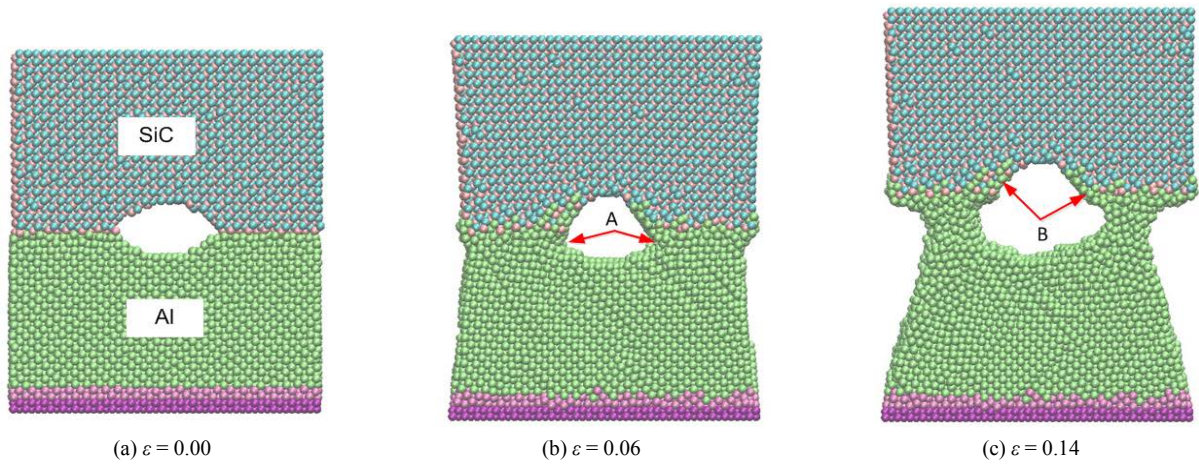


Figure 3. The tension process for mode I
 图 3. I 型断裂模式下单轴拉伸过程

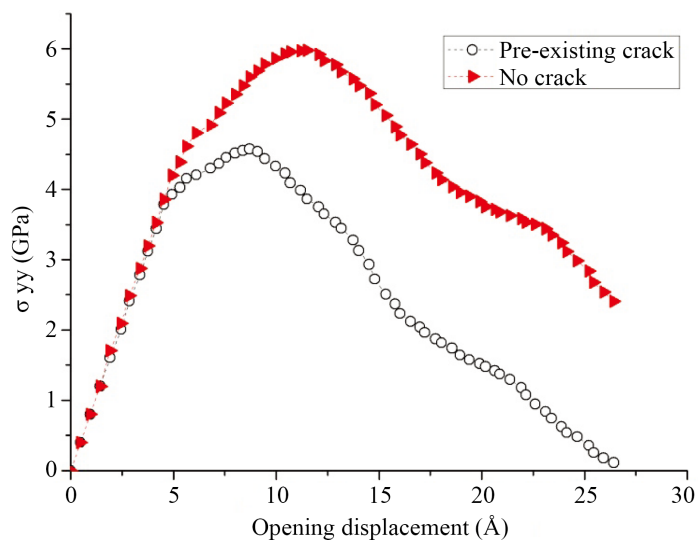


Figure 4. Opening displacement-stress curves for mode I
 图 4. I 型断裂模式下张开位移 - 应力曲线

缺陷构件和理想构件剪切获得的应力-位移响应如图 6 所示。剪切初始理想构件和缺陷构件均发生弹性变形。当发生裂纹扩展时，应力到达峰值，并开始下降直至一个应力低点。随着位错在滑移面的繁殖、塞积和裂纹处发生止裂现象，加速了拉伸应力的增加，到达曲线的第二个应力峰值。这导致剪切应力-位移曲线呈锯齿状波动下降。与预期一样，理想构件的峰值应力同样大于缺陷构件。由此曲线能够得到构件的弹性模量值。同样，由剪切应力-应变曲线同样可以得到剪切模量和剪切应力峰值。

3.2. 粘聚力有限元模型

图 7 所示为纳米颗粒 Al 基复合材料有限元仿真模型。纳米颗粒增强铝基复合材料中铝基体为 7075-T6 铝合金，采用 Johnson-cook 材料模型模拟，SiC 颗粒采用 Brittle cracking 材料失效模型。基体和 SiC 颗粒间采用零厚度的二维粘聚力单元(COH2D4)连接。粘聚力单元所需的拉伸弹性模量、剪切模量、临界断裂位移、最大拉伸应力、最大剪切应力和断裂能等参数由 3.1 节所得结果作为输入。

图 8 为基于粘聚力模型的有限元仿真所得真实应力-真实应变曲线，与文献[1]所得实验结果吻合较好，试验应力值偏高约 10%。试验和仿真结果较好的一致性，证明本文建立的基于粘聚力的跨尺度有限元模型的正确性。这表明分子动力学仿真所得铝-碳化硅界面力学特性在微米尺度复合材料的拉伸试验应力-应变曲线得到较好的复制。

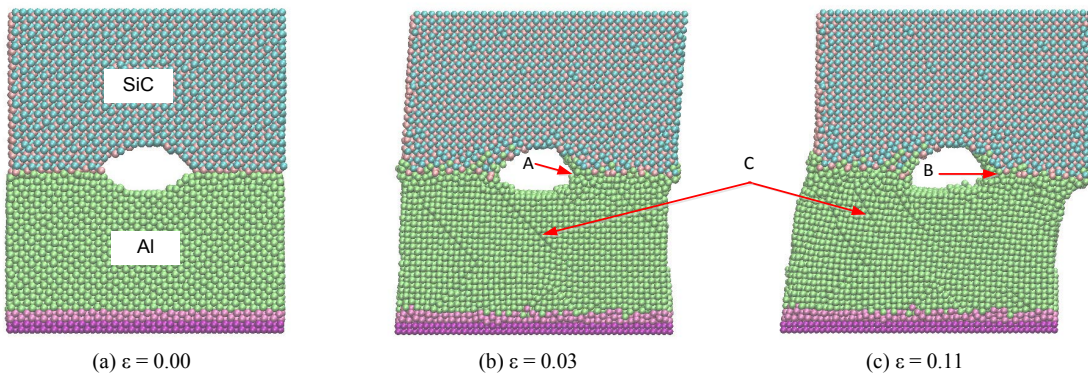


Figure 5. The shear process for mode II
图 5. II 型断裂模式下剪切过程

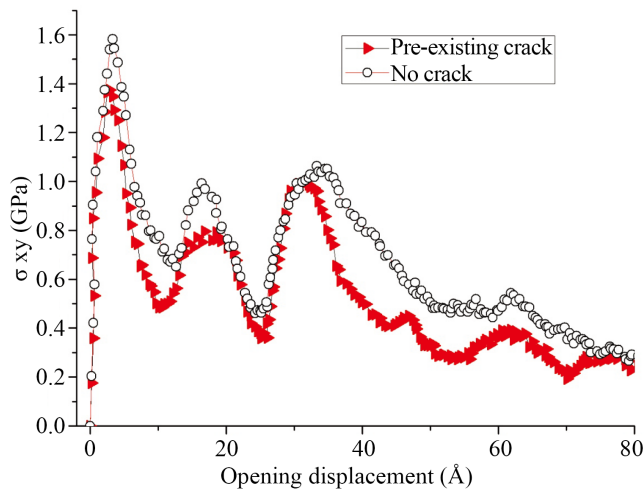


Figure 6. Opening displacement-stress curves for mode II
图 6. II 型断裂模式下张开位移-应力曲线

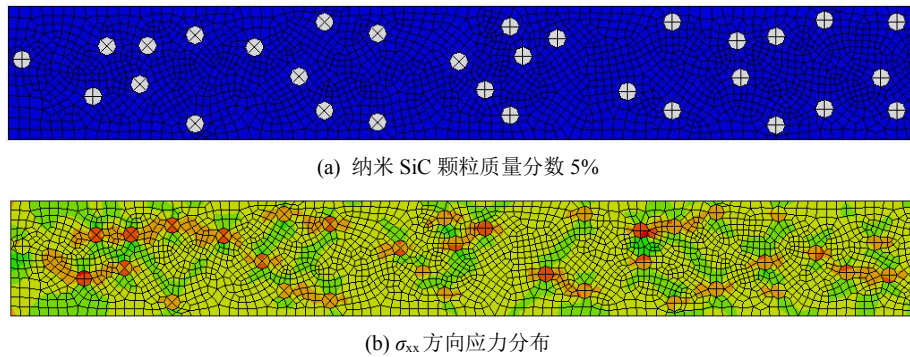


Figure 7. Finite element model for nanosized silicon carbide particles (SiCp) reinforced aluminium-based matrix composite materials

图 7. 纳米颗粒 Al 基复合材料拉伸有限元仿真模型

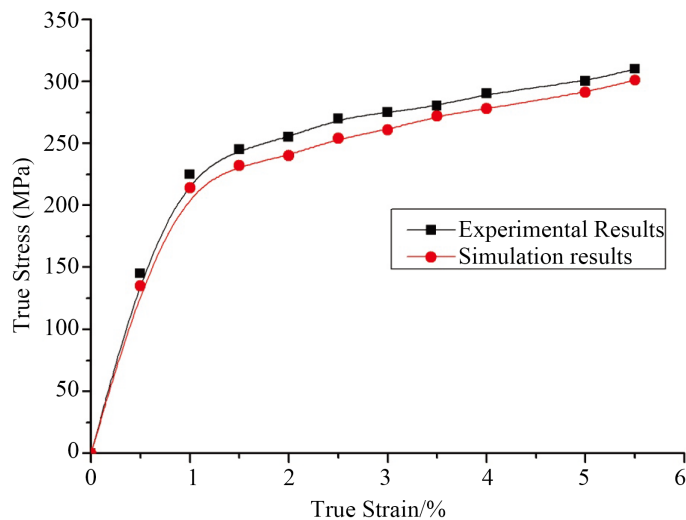


Figure 8. Comparison between simulation and experimental results

图 8. 试验与仿真应力 - 应变曲线比较

4. 结论

本文采用 AL-SiC 的 I 型和 II 型断裂模式的 MD 仿真模型, 确定了 AL 基复合材料界面拉力 - 分离关系。作为粘聚力模型的输入, 建立了连接原子级 - 微米级 - 宏观的颗粒增强复合材料的多尺度仿真模型。基于粘聚力的有限元单轴拉伸仿真模型与拉伸实验结果吻合较好。仿真结果表明建立的跨尺度的有限元模型很好地复制拉伸试验应力 - 应变曲线。

基金项目

国家自然科学基金项目(No. 51505331)。

参考文献

- [1] Nie, X. (2015) Research on Semi-Solid Thixoforming of 7075 Aluminum Alloy Composites Reinforced with Nano-Sized Sic Particles. Master's Thesis, Harbin Institute of Technology, Harbin.
- [2] Pramanik, A., Zhang, L.C. and Arsecularatne, J.A. (2007) An FEM Investigation into the Behavior of Metal Matrix Composites: Tool-Particle Interaction during Orthogonal Cutting. *International Journal of Machine Tools & Manufacture*, **47**, 1497-1506. <https://doi.org/10.1016/j.ijmactools.2006.12.004>

- [3] Dandekar, C.R. and Shin, Y.C. (2013) Experimental Evaluation of Laser-Assisted Machining of Silicon Carbide Particle-Reinforced Aluminum Matrix Composites. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, **66**, 1603-1610. <https://doi.org/10.1007/s00170-012-4443-2>
- [4] Zhou, L., Huang, S., Wang, D., et al. (2011) Finite Element and Experimental Studies of the Cutting Process of SiCp/Al Composites with PCD Tools. *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, **52**, 619-626. <https://doi.org/10.1007/s00170-010-2776-2>
- [5] Wang, T., Xie, L. and Wang, X. (2015) Simulation Study on Defect Formation Mechanism of the Machined Surface in Milling of High Volume Fraction SiCp/Al Composite. *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, **79**, 1185-1194. <https://doi.org/10.1007/s00170-015-6876-x>
- [6] Liu, J., Cheng, K., Ding, H., et al. (2017) Simulation Study of the Influence of Cutting Speed and Tool-Particle Interaction Location on Surface Formation Mechanism in Micromachining SiCp/Al Composites. *ARCHIVE Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers Part C Journal of Mechanical Engineering Science*, **203-210**, 1-13.
- [7] Umer, U., Ashfaq, M., Qudeiri, J., et al. (2015) Modeling Machining of Particle-Reinforced Aluminum-Based Metal Matrix Composites Using Cohesive Zone Elements. *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, **78**, 1171-1179. <https://doi.org/10.1007/s00170-014-6715-5>
- [8] 张霖, 赵宏伟, 杨倚寒, 等. 单层石墨烯薄膜材料纳米压痕过程的分子动力学解析[J]. 吉林大学学报(工学版), 2013, 43(6): 1558-1565.
- [9] 周晓勤, 朱志伟, 罗丹, 等. 线性改变切削深度对单晶铜纳米切削的影响[J]. 吉林大学学报(工学版), 2012, 42(1): 109-115.
- [10] Daw, M.S. and Baskes, M.I. (1984) Embedded-Atom Method: Derivation and Application to Impurities, Surfaces, and Other Defects in Metals. *Physical Review B*, **29**, 6443-6453. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.29.6443>
- [11] Tersoff, J. (1989) Modeling Solid State Chemistry: Interatomic Potentials for Multicomponent Systems. *Physical Review B*, **39**, 5566-5568. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.39.5566>
- [12] Girifalco, L.A. and Weizer, V.G. (1959) Application of the Morse Potential Function to Cubic Metals. *Physical Review Journals Archive*, **114**, 687-690. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.114.687>
- [13] Camanho, P.P. and Davila, C.G. (2002) Mixed-Mode Decohesion Finite Elements for the Simulation of Delamination in Composite Materials. 1-37.
- [14] Hibbitt, Kaarlsson, Sorensen. (2016) Abaqus/Explicit User's Manual.

知网检索的两种方式:

1. 打开知网页面 <http://kns.cnki.net/kns/brief/result.aspx?dbPrefix=WWJD>
下拉列表框选择: [ISSN], 输入期刊 ISSN: 2160-7613, 即可查询
2. 打开知网首页 <http://cnki.net/>
左侧“国际文献总库”进入, 输入文章标题, 即可查询

投稿请点击: <http://www.hanspub.org/Submission.aspx>

期刊邮箱: ms@hanspub.org