

# Atomic Simulation of Basic Properties for $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> Crystal

Jierong Guo, Lei Ma

Hunan University of Arts and Science, Changde Hunan  
Email: jierong\_guo@126.com, mlml6277@126.com

Received: Apr. 1<sup>st</sup>, 2019; accepted: Apr. 15<sup>th</sup>, 2019; published: Apr. 22<sup>nd</sup>, 2019

## Abstract

The melting process and the basic mechanical properties of perfect crystal and microcrack models for  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> crystal are studied with tersoff potential function under external loading by molecular dynamics simulation. The volume-temperature curve shows that the volume of the  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> crystal shows a sharp expansion in the early stage and a slow increase in the later stage with the increasing of temperature, until it reaches a stable change, which indicates that the structure of the  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> crystal changes during the heating process. At the same time, the mechanical properties of  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> under uniaxial loading at room temperature are studied. The results show that the  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> crystal experiences three stages of elastic deformation, plastic deformation and fracture deformation during the loading process. The yield strength of the perfect crystal is 22.6 GPa, and the fracture strength is 36 GPa, indicating that the  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> has good strength. But the yield strength and fracture strength of the microcrack model of  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> are 20.7 GPa and 20 GPa, respectively, which show that the fracture mode of the  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> crystal presents brittle fracture.

## Keywords

Atomic Simulation, Mechanical Properties,  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>

# 石英 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>晶体基本特性的原子模拟

郭杰荣, 马磊

湖南文理学院, 湖南 常德  
Email: jierong\_guo@126.com, mlml6277@126.com

收稿日期: 2019年4月1日; 录用日期: 2019年4月15日; 发布日期: 2019年4月22日

## 摘要

采用分子动力学的方法, 结合tersoff势函数, 研究了石英 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>晶体融化过程以及在外载条件下完整晶

体和微裂纹晶体的基本力学性能。通过体积温度曲线可以得到 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>晶体随着温度的升高体积出现了前期的急剧膨胀和后期的缓慢增加,直到趋于稳定的变化,说明在升温过程中 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>晶体出现了结构的变化。同时研究了 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>在常温单轴加载下的力学性能,研究结果表明 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>晶体在加载过程中经历弹性变形、塑性变形以及断裂变形三个阶段,其中获得的完整晶体的屈服强度为22.6 GPa,断裂强度为36 GPa,说明 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>晶体具有很好的强度。而微裂纹晶体的屈服强度为20.7 GPa,断裂强度为20 GPa,表明 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>晶体断裂方式为脆性断裂。

## 关键词

原子模拟, 力学性能,  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>

Copyright © 2019 by author(s) 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

$\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 是石英物质和硅酸盐的重要组成部分,而且是地球上储量最丰富的物质。石英晶体在常压下有多种晶体结构:如 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>, $\beta$ -SiO<sub>2</sub>, $\alpha$ -磷 SiO<sub>2</sub>, $\beta$ -磷 SiO<sub>2</sub>以及 $\alpha$ -方 SiO<sub>2</sub>, $\beta$ -方 SiO<sub>2</sub>等等。其中石英 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>是常温常压下最稳定的晶体。对于 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>的研究通常是采用实验的方法观测其在高压下非晶化的相变。如王德军[1]研究了 $\alpha$ -石英在高温高压下的结构转变,指出 $\alpha$ -石英在高温高压下合成小尺度的柯石英;Palmer等[2]通过研究 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>在常温下的加压相变过程,发现了石英相变的规律;张广强等[3]通过机械球磨研究了 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>在高温高压下的结构转变以及形成柯石英的实验条件;Dubrovinsky等[4]研究了 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>的高压相变,得到了类似 $\alpha$ -PbO<sub>2</sub>结构的石英相,而且还发现应力在25 GPa到35 GPa之间时会出现非晶化转化,卸载压力后完全非晶化。但是,近年来随着计算机技术的飞速发展,应用分子动力学的方法,通过大规模并行计算研究晶体材料的力学性能、结构转变以及物理特性等方面成为可能[5][6][7][8][9]。如潘海波等[10]通过分子动力学的方法利用Morse势模拟了 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>的高压相变,指出晶体在高于24.6 GPa时出现非晶相变,其计算结果与实验结果较一致。因此,计算机模拟实验为研究晶体的力学性能开辟了另一条有效的途径,可以为实验研究提供理论支撑。

本文应用分子动力学的方法研究了石英 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>晶体的融化过程和单轴拉伸的力学性能,通过分析随着温度的升高体积变化曲线以及应力应变曲线的变化,探讨石英 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>随着温度的升高结构的变化过程,同时通过讨论加外载时应力应变曲线的变化规律,分析了其基本力学性能,而且还探讨了裂纹对拉伸力学性能的影响,综合评价石英 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>的基本的物理特性。

## 2. 模型和方法

### 2.1. 模型

图1为石英 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>的晶体结构。在二氧化硅中,硅位于正四面体的中心,4个氧原子位于正四面体的4个顶角上,图1(a)表示二氧化硅在体心立方结构中的晶胞。然后根据笛卡尔坐标建立了 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>的晶体结构(如图1(b)所示)。其中,晶格常数 $a = 4.978$ 埃, $b = 4.978$ 埃, $c = 6.948$ 埃,盒子的长度为 $30a \times 30b \times 30c$ ,总的原子数为324,000个,在xyz三个方向上采用周期性边界条件。

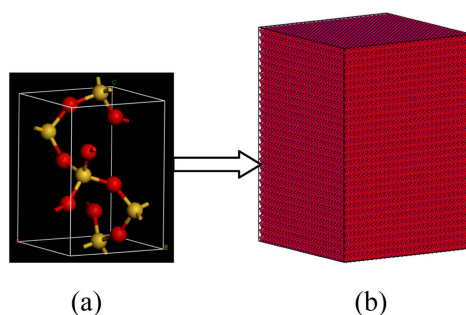


Figure 1.  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> crystal model  
图 1.  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 晶体模型

## 2.2. 模拟方法

在分子动力学的模拟过程中, 我们采用的 tersoff 势函数[11]描述 Si-O 之间的相互作用。然后在 NPT 系综下, 时间步长 1 fs, 应用 Nose-Hoover 热浴的方法[12] [13]在常温下进行弛豫, 弛豫步数 20,000 步。图 2 为模型弛豫过程中能量变化图, 从图中可以得到晶体模型在 10 ps 后达到平衡。然后在 NVT 系综下进行单轴加载, 应变率为  $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ , 这时仍用 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。然后在常温 300 K 下模拟石英  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 晶体的拉伸力学性能。模拟结果讨论分析中我们应用 CNA 结构分析方法[14]来分析体系中微观结构的演变, 利用 Ovito 软件观察原子结构, 应用 LAMMPS 代码[15]来模拟拉伸力学性能。

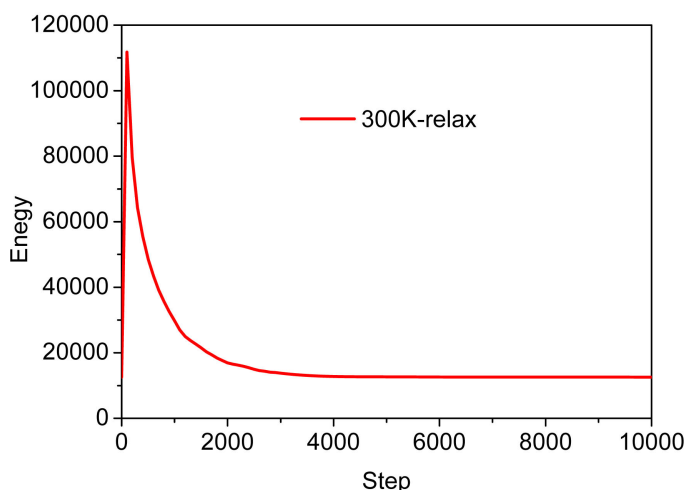


Figure 2. Diagram of energy change during model relaxation  
图 2. 模型弛豫过程中能量变化图

## 3. 结果与讨论

### 3.1. $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 体积随着温度升高的变化曲线

图 3 为  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 的体积温度曲线。从图中可以得到随着温度的升高晶体的体积出现了 A 和 B 两个变化拐点。在 A 点时, 晶体从四面体结构中逐渐的析出非晶结构。随着温度的升高, 体积以非线性的形式快速的膨胀, 晶体的非晶化程度比重也迅速的增加。到了 B 点时, 整个晶体结构完全非晶化, 晶体结构趋于稳定, 然后随着温度的升高晶体的体积缓慢稳定的增加, 结构逐渐进入融化阶段。

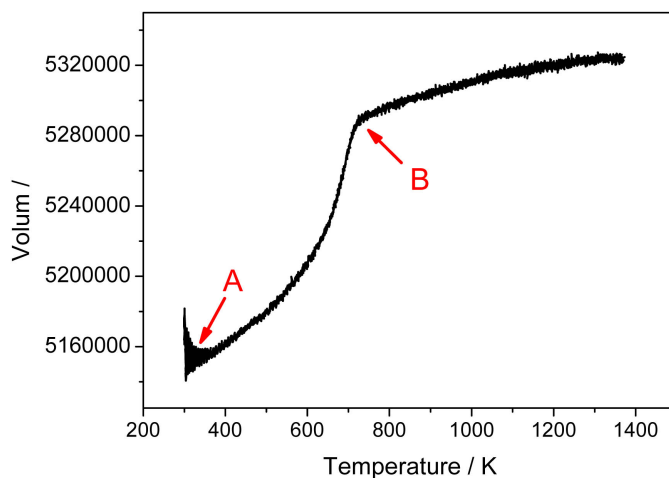


Figure 3. Volume temperature curve  
图3. 体积温度曲线

### 3.2. $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 晶体在外载下的力学性能

图4为石英 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>的完整晶体在常温下单轴拉伸的应力-应变曲线。应力-应变关系反映了材料的基本力学性能,从图中可以得到随着应变的增加石英 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>晶体在应变为4.7%时出现了弹性极限(如图4中A点),应力与应变表现出非线性关系。A点后晶体进入弹性变形阶段,应力与应变呈线性关系,此时材料结构没有发生形变。当加载的应变到达32.6%时,晶体的内部应力达到第一个屈服点,屈服应力22.6 GPa。随后晶体进入塑性变形阶段,然后随着外载的逐渐增加,从图中可以得到应力在B点和C点之间出现了上下震荡,纳米晶体进入塑性变形阶段,而且开始发生非晶化相变。应力过了C点之后,由于晶体结构完全非晶化,随着加载的进行,应力逐渐增加,一直达到曲线的峰值——断裂强度(36 GPa),晶体开始进入断裂阶段。接着随着应变的增加应力急速下降到零,此时晶体完全断裂。因此,从图中可以看出,石英 $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>晶体在常温单轴拉伸过程中经历了弹性阶段,塑性阶段(非晶化相变)以及断裂阶段,弹性模量达到了69 GPa,具有很高强度。

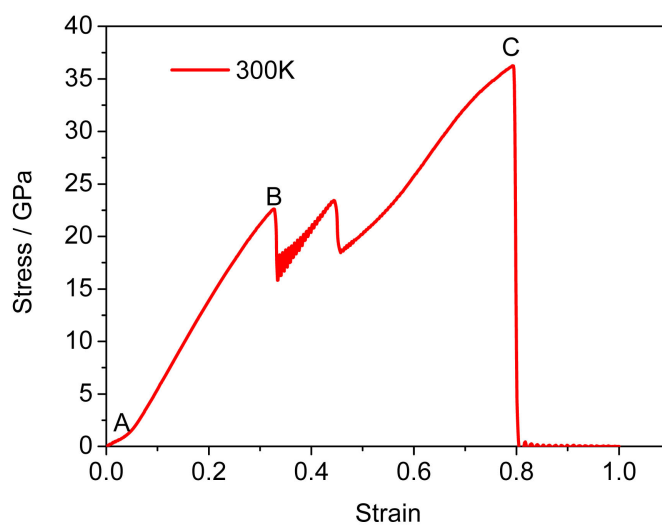


Figure 4. Stress-strain curves of  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> crystal under uniaxial tension  
图4.  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub>完整晶体在单轴拉伸下的应力-应变曲线

### 3.3. $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 晶体中裂纹扩展的力学性能

图 5 为石英  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 在常温下裂纹模型单轴拉伸时的应力 - 应变曲线。从图中可以得到随着应变的增加石英  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 裂纹晶体在应变为 31.8% 时, 应力达到最大的屈服点, 屈服应力 20.7 GPa (如图中 A 点所示)。相对于完整晶体的屈服应力和屈服应变出现了下降(如表 1 所示)。由此可以得到微裂纹可以降低石英晶体的力学性能。然后晶体由弹性变形阶段进入塑性变形阶段, 随着外载的逐渐增加应力在 A 点和 C 点之间进行上下的震荡, 石英晶体结构展现出很好的塑性, 能延缓微裂纹的快速扩展, 同时纳米晶体结构也开始发生非晶化相变。当加载应变过了 C 点之后, 由于晶体结构完全非晶化, 随着加载的进行, 应力逐渐增加, 一直达到曲线的峰值——断裂强度(20 GPa), 晶体开始进入断裂阶段。这个数值远远低于完整晶体结构。因此, 微裂纹使晶体的断裂强度出现大幅度的下降, 这主要是由于结构的非晶化降低了结构的塑性, 使得裂纹尖端的应力集中现象得不到有效的缓解, 裂纹进入快速扩展阶段, 接着随着应变的增加应力急速下降到零, 直到晶体完全断裂。

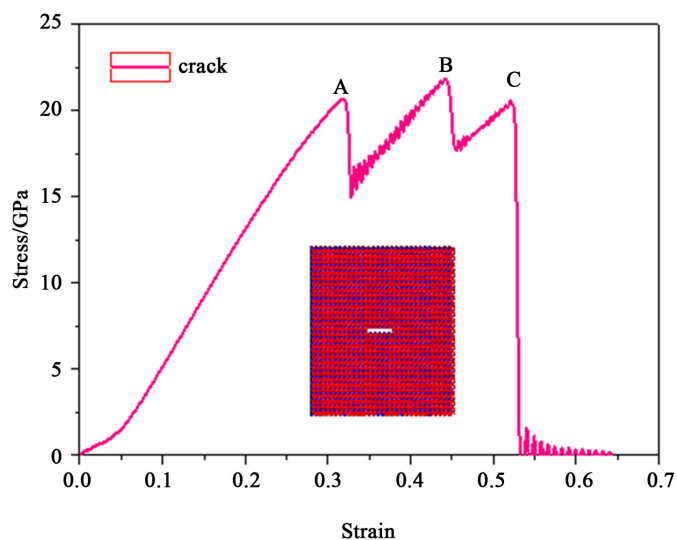


Figure 5. Stress-strain curves of  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> central crack model under uniaxial tension

图 5.  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 中心裂纹模型单轴拉伸下的应力 - 应变曲线

Table 1. Comparison of basic mechanical properties between complete crystal and crack model

表 1. 完整晶体和裂纹模型基本力学性能的对比

	屈服应变	屈服应力	断裂应变	断裂应力
完整模型	32.6%	22.6 GPa	79.2%	36 GPa
裂纹模型	31.8%	20.7 GPa	51.5%	20 GPa

## 4. 结论

本文应用分子动力学的方法, 结合 teroff 势函数, 模拟了石英  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 晶体基本的物理特性。首先通过升温, 得到了温度体积变化曲线。然后研究了  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 在常温单轴加载下的力学性能, 从应力应变曲线得出晶体在加载过程中经历弹性变形、塑性变形以及断裂变形三个阶段, 屈服强度为 22.6 GPa, 断裂强度为 36 GPa, 在塑性变形阶段观察到了  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 从晶相向非晶转化的相变过程。然后构建了  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 中心裂纹模型, 对比分析了其裂纹模型和完整晶体模型基本力学性能, 研究结果表明微裂纹导致  $\alpha$ -SiO<sub>2</sub> 晶体的屈服应力和屈服应变下降, 并引起断裂强度的极具下降, 说明裂纹在扩展过程中加剧材料内部的破坏。

## 基金项目

湖南省自然科学基金省市联合基金项目(批准号: 2016JJ5002), 湖南文理学院博士启动项目(批准号: 16BSQD05)。

## 参考文献

- [1] 王德军.  $\alpha$ -石英在高温高压下的结构转变研究[J]. 长春大学学报, 2010, 20(4): 14-16.
- [2] Palmer, D.C., Hemley, R.J. and Prewitt, C.T. (1994) Raman Spectroscopic Study of High-Pressure Phase Transitions in Cristobalite. *Physics and Chemistry of Minerals*, **21**, 481-488.
- [3] 张广强, 许大鹏, 王德涌, 等. 纳米  $\text{SiO}_2$  在高压高温下的结构转化[J]. 吉林大学学报(理学版), 2008, 46(2): 311-313.
- [4] Dubrovinsky, L.S., Dubrovinskaia, N.A., Saxena, S.K., *et al.* (2001) Pressure-Induced Transitions of Cristobalite. *Chemical Physics Letter*, **333**, 264-270.
- [5] Wang, K., Xiao, S.F., Deng, H.Q., *et al.* (2014) An Atomic Study on the Shock-Induced Plasticity and Phase Transition for Iron-Based Single Crystals. *International Journal of Plasticity*, **59**, 180-198. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2014.03.007>
- [6] Ma, L., Xiao, S., Deng, H. and Hu, W. (2014) Molecular Dynamics Simulation of Fatigue Crack Propagation in BCC Iron under Cyclic Loading. *International Journal of Fatigue*, **68**, 253. <https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2014.04.010>
- [7] Ma, L., Xiao, S., Deng, H. and Hu, W. (2015) Atomic Simulation of Fatigue Crack Propagation in  $\text{Ni}_3\text{Al}$ . *Applied Physics A*, **118**, 1399-1406. <https://doi.org/10.1007/s00339-014-8895-0>
- [8] Ma, L., Xiao, S., Deng, H. and Hu, W. (2016) Tensile Mechanical Properties of Ni-Based Superalloy of Nanophases Using Molecular Dynamic Simulation. *Physica Status Solid (b)*, **253**, 716-732.
- [9] 马磊, 钟颖, 文晓霞. 单晶纳米金属材料拉伸的分子动力学研究进展[J]. 材料导报, 2011, 25: 10-13.
- [10] 潘海波. 石英- $\alpha$ 型  $\text{SiO}_2$  高压相变的分子动力学研究[J]. 矿物学报, 2001, 21(3): 511-514.
- [11] Laino, T., *et al.* (2007) Interatomic Potential for Si-O Systems Using Tersoff Parameterization. *Computational Materials Science*, **39**, 334-339. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2006.06.010>
- [12] Nose, S. (1984) A Unified Formulation of the Constant Temperature Molecular Dynamics Methods. *The Journal of Chemical Physics*, **81**, 511-519. <https://doi.org/10.1063/1.447334>
- [13] Hoover, W.G. (1985) Canonical Dynamics: Equilibrium Phase-Space Distributions. *Physical Review A*, **31**, 1695-1697. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.31.1695>
- [14] Dana, H.J. and Andersen, H.C. (1987) Molecular Dynamics Study of Melting and Freezing of Small Lennard-Jones Clusters. *Journal of Chemical Physics*, **91**, 4950-4963. <https://doi.org/10.1021/j100303a014>
- [15] <http://lammps.sandia.gov>

### 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](mailto:ms@hanspub.org)