

doi: 10.3969/j.issn.0490-6756.2019.06.015

# 双相纳米结构 CuZr 合金力学行为的模拟研究

段蓓蓓, 宋海洋

(西安石油大学 材料科学与工程学院, 西安 710065)

**摘要:** 采用分子动力学方法研究了在拉伸载荷作用下, 晶粒尺寸对纳米多晶 Cu 和双相纳米结构 CuZr 复合材料塑性变形机制的影响. 研究表明, 小晶粒尺寸的纳米多晶 Cu 的变形机制以晶粒旋转以及晶界迁移为主, 并伴随着少量位错的成核与滑移. 晶粒尺寸较大的纳米多晶 Cu 的塑性变形机制则以裂纹的成核与生长为主. 对于双相纳米结构 Cu/CuZr 复合材料, 非晶相的塑性变形在复合材料的塑性变形过程中起主导作用, 且这种现象与晶粒尺寸无关. 此外, 当晶粒尺寸增加到一定尺寸时, 复合材料的晶界处也出现了晶界裂纹, 但非晶相明显延缓和阻碍了裂纹的成核与扩展. 研究表明非晶相的引入能有效提升纳米多晶 Cu 的塑性.

**关键词:** 分子动力学; 晶粒尺寸; 非晶合金; 力学性能

**中图分类号:** O482.1 **文献标识码:** A **文章编号:** 0490-6756(2019)06-1087-06

## Simulations on the mechanical behavior of dual-phase nanostructured CuZr alloy

DUAN Bei-Bei, SONG Hai-Yang

(College of Material Science and Engineering, Xi'an Shiyou University, Xi'an 710065, China)

**Abstract:** The effects of grain size on the deformation mechanisms of nano-polycrystal Cu and dual-phase nanostructured Cu/CuZr composites under tensile loading are studied by molecular dynamics method. The results show that for nano-polycrystal Cu with small grain size, the deformation mechanism is mainly dominated by grain rotation and grain boundary migration, accompanied by the nucleation and emission of a few dislocations. For nano-polycrystal Cu with large grain size, the plastic deformation mechanism is mainly dominated by the nucleation and growth of cracks. However, for the dual-phase nanostructured Cu/CuZr composites, the plastic deformation of amorphous phase plays a dominant role during plastic deformation, regardless of grain sizes. In addition, when the grain size becomes large, the grain boundary cracks also appear at the grain boundary of the composites, but the amorphous phase obviously hinders the nucleation and propagation of the cracks. The research shows that the introduction of amorphous phase can effectively enhance the plasticity of nano-polycrystal Cu.

**Keywords:** Molecular dynamics; Grain size; Amorphous alloy; Mechanical property

## 1 引言

纳米多晶金属材料由于具有传统金属材料不

具备的高塑性和高强度等优异的力学性能, 近年来已经受到各国学者的广泛关注, 其力学性能及其变形机理已经是研究的热点<sup>[1-3]</sup>. 当前, 对于纳米多

收稿日期: 2018-11-18

基金项目: 国家自然科学基金(11572259); 陕西省自然科学基金(2018JM1013); 西安石油大学研究生创新与实践能力的培养项目(YCS17211031); 西安石油大学材料科学工程省级优势学科资助项目

作者简介: 段蓓蓓(1992-), 女, 西安人, 硕士生, 主要从事金属材料力学性能的模拟研究. E-mail: duanbeibei1122@qq.com

通讯作者: 宋海洋. E-mail: gsfshy@sohu.com

晶金属材料力学性质和变形机制的研究主要集中在面心立方(fcc)结构的纳米多晶体,尤其是对纳米多晶 Cu 力学性能的研究较多<sup>[4-5]</sup>. Li 等人<sup>[6]</sup>研究了纳米多晶 Cu 在拉伸时的变形机理,发现纳米多晶 Cu 在拉伸载荷时,在晶界处由于应力集中,会出现纳米空洞或纳米裂纹,从而导致了纳米多晶 Cu 塑性的降低. Fang 等人<sup>[7]</sup>研究了梯度结构的纳米多晶 Cu 的力学性能,研究发现梯度纳米多晶 Cu 具有超强的拉伸塑性. 最近, Cheng 等人<sup>[8]</sup>通过在铜多晶中引入梯度纳米孪晶结构,实现了高强度和硬度的完美结合. 也就是说,界面结构在纳米多晶金属材料的塑性、强度以及变形机制中扮演着重要的角色.

金属玻璃,又称非晶合金,具有长程无序的非晶态结构<sup>[9]</sup>. 同时具有金属和玻璃的优异特性,如高强度、高硬度及弹性储能等<sup>[10-11]</sup>. 此外,由于非晶合金中的原子结构无序所以没有类似于晶体中的位错等缺陷,具有良好的耐磨性和耐腐蚀性<sup>[12]</sup>,然而,非晶合金相对较差的塑性限制了它在工业上的广泛应用. 值得庆幸的是,研究发现当非晶合金的尺寸减小到某一临界值时,在变形过程中,它表现出良好的均匀塑性变形,显示出很好的塑性<sup>[13]</sup>. 众所周知,在非晶合金中引入晶体相,通过增加剪切带的成核点或者阻碍剪切带的运动,从而可以有效提升非晶合金的塑性<sup>[14]</sup>. 受到提升非晶合金塑性的这一措施的启发,我们首次提出了在塑性较差的密排六方(hcp)结构的镁合金中引入塑性较好的纳米尺寸的非晶相的双相纳米结构镁合金模型,研究发现,当非晶厚度选择适当时,双相纳米结构镁合金呈现出完美的塑性<sup>[15]</sup>. 随后, Wu 等人<sup>[16]</sup>通过实验发现,该双相纳米结构模型同样可以有效提升镁合金的强度,使得镁合金在室温下的强度达到了 3.3 GPa,获得了迄今为止强度最高的镁合金材料.

在塑性载荷过程中,微裂纹的出现是衡量一个材料塑性好坏的一个重要指标. 如上所述,当纳米多晶 Cu 在塑性变形过程中,在晶界处会出现微裂纹,从而降低了纳米多晶 Cu 的塑性. 鉴于我们前期对双相纳米结构镁合金的研究,为了提升纳米多晶 Cu 的力学性能,双相纳米结构铜合金的力学性能是值得关注的一个问题. 然而,双相纳米结构铜合金的变形机制仍不清晰,需要进一步研究. 而对于金属材料变形机制的研究需要直观了解原子的运动趋势,这在实验中存在较大的困难,分子动力学模拟方法能够提供原子的运动细节,是研究材料

微观行为的有效工具. 本文采用分子动力学模拟方法研究了 CuZr 非晶相对纳米多晶 Cu 在拉伸载荷作用下变形机制的影响.

## 2 模拟方法和模拟过程

在模拟中,纳米多晶金属 Cu 与双相纳米结构 Cu/CuZr(晶体/非晶)复合材料的模型均包含 4 个柱状的六边形晶粒,模型的初始结构通过 Voronoi 方法<sup>[17]</sup>进行构建. 为了研究晶粒尺寸对纳米多晶金属材料力学性能的影响,本次仿真采用了 6 个不同晶粒尺寸的模型,晶粒尺寸的范围在 4.94~17.32 nm 之间. 纳米多晶 Cu 的四个晶粒分别旋转了 60°、30°、90°、0°,其中,坐标轴 X、Y、Z 方向分别沿着  $[\bar{1}10]$ ,  $[11\bar{2}]$  和  $[111]$  晶向,如图 1(a) 所示. 为了研究非晶相对纳米多晶金属 Cu 力学性能的影响,双相纳米结构 Cu/CuZr 复合材料由 1 个非晶晶粒和 3 个晶体晶粒组成,双相纳米结构 Cu/CuZr 复合材料的初始模型如图 1(b) 所示. 图中红色代表 hcp 结构原子,绿色代表 fcc 结构原子,白色代表其他类型原子,其中包括位错结构原子、非晶相原子和晶界结构原子. 在构造非晶相时,具有 fcc 结构的 Cu<sub>50</sub>Zr<sub>50</sub> 模型(包含 87 120 个原子,其中 43 560 个 Cu 原子和 43 560 个 Zr 原子)首先在 2 000 K 的温度下弛豫,以确保在零压力下的化学均质性. 然后,将融化后的液体合金从 2 000 K 淬火至 50 K,冷却速率为 10<sup>12</sup> K/s,从而可获得 CuZr 非晶合金. 在此期间三个方向均有周期性边界条件. 为了获得双相纳米结构模型,我们把纳米多晶金属 Cu 中的 1 个晶体晶粒和 1 个同尺寸的非晶合金进行替换.

分子动力学模拟采用自行编制的 C 语言代码结合 OpenMP 并行技术在 Linux 环境下进行,其结果是否准确的关键在于原子间相互作用势函数的选取. 在模拟计算中,采用 Mendeleev 等<sup>[18]</sup>提出的镶嵌原子势函数(EAM)描述 Cu-Cu、Cu-Zr 和 Zr-Zr 原子间的相互作用,该势函数已经被广泛用来模拟金属铜的位错成核、堆垛层错能以及孪晶变形<sup>[19-20]</sup>. 模拟算法采用 Verlet 蛙跳法算法,时间步长为 2 fs. 在拉伸载荷时系统的温度保持在 300 K. 为了研究纳米多晶金属 Cu 与双相纳米结构 Cu/CuZr 复合材料在拉伸载荷下的变形行为,本文采用公共近邻分析方法(CNA)<sup>[21]</sup>来分析晶体晶粒的变形结构,用 von Mises 应变法<sup>[22]</sup>分析非晶相

的塑性变形行为. 以上分析过程利用 OVITO 软件<sup>[23]</sup>来实现. 模拟中, 模型在 X、Y、Z 三个方向均采用周期性边界条件. 模拟过程为: 在等温、零压条件下, 先对初始模型进行趋衡, 使系统达到最稳定的状态; 在 X 和 Y 方向保持零压, 然后在 Z 方向对模型施加应变为 0.000 5 的位移载荷, 通过趋衡使系统重新达到新的平衡状态. 重复上述施加载荷和趋衡的过程, 使模型在准静态载荷过程下进行拉伸.

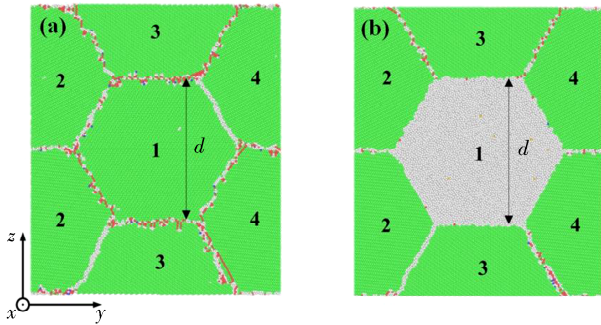


图 1 (a) 纳米多晶金属 Cu 的初始模型; (b) 双相纳米结构 Cu/CuZr 复合材料初始模型

Fig. 1 Initial structures of the nano-polycrystal Cu (a) and Cu/CuZr nanocomposite (b)

### 3 模拟结果及分析

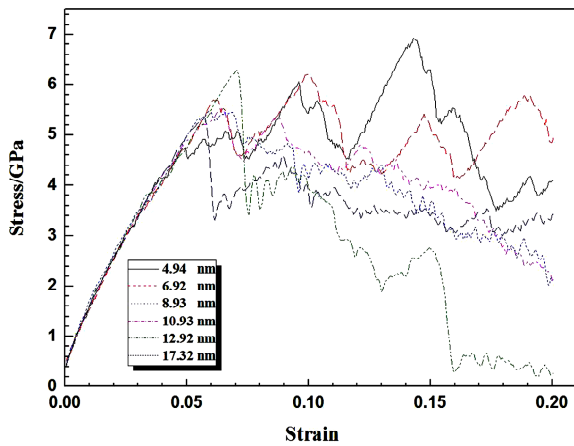


图 2 纳米多晶 Cu 的应力-应变曲线

Fig. 2 The stress-strain curves of nano-polycrystal Cu

为了研究晶粒尺寸和非晶相对纳米多晶 Cu 力学行为的影响, 图 2 和图 3 分别给出了不同晶粒尺寸的纳米多晶 Cu 和双相纳米结构 Cu/CuZr 复合材料在拉伸载荷下的应力应变曲线. 杨氏模量是应力应变曲线在线性阶段的斜率, 通过计算得到纳米多晶 Cu 的杨氏模量在 90 GPa 左右. 从图 2 也可以看出, 晶粒尺寸对杨氏模量的影响不大, 且

这种关系不依赖于所研究的模型. 根据晶粒尺寸的不同, 曲线变化趋势有所不同, 可以分成三种类型. 对于晶粒尺寸较小的纳米多晶 Cu 模型 (4.94 和 6.92 nm), 其塑性变形阶段的应力应变曲线显示了锯齿状, 呈现出典型的应变硬化行为, 每一个应力下降对应位错的成核和发射. 对于该尺寸的模型, 在其塑性变形过程中, 随着应变的增加, 平均流动应力基本恒定. 然而, 对于晶粒尺寸大于 6.92 nm 的纳米多晶 Cu 模型, 从图 2 可以看出, 在其塑性变形阶段, 随着应变的增加, 平均流动应力出现了明显的软化现象, 流动应力逐渐降低, 这主要是因为, 在拉伸载荷下, 纳米多晶 Cu 在晶界处出现了晶界裂纹. 随着载荷的继续, 裂纹逐渐长大, 从而导致了上述的塑性软化现象. 特别是当晶粒尺寸达到 17.32 nm 时, 纳米多晶 Cu 的晶界裂纹更容易开裂. 由此可以得出, 随着晶粒尺寸的增加, 纳米多晶金属 Cu 的力学性能下降, 这与 Schiøtz 等人<sup>[24]</sup>的研究结果是一致的.

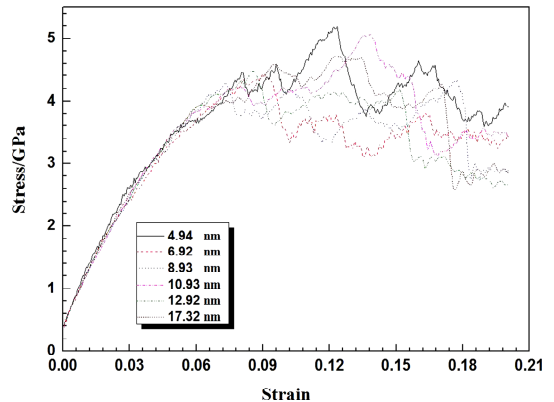


图 3 双相纳米结构 Cu/CuZr 复合材料的应力-应变曲线

Fig. 3 The stress-strain curves of Cu/CuZr nanocomposites

为了改善纳米多晶 Cu 的力学行为, 本文研究了晶粒尺寸和非晶相对纳米多晶 Cu 力学性能的影响. 图 3 给出了不同晶粒尺寸的双相纳米结构 Cu/CuZr 复合材料的应力应变曲线. 从图 3 可以观察到, 与纳米多晶 Cu 的应力应变曲线相似, 随着应变的增加, 所有模型的应力都会线性增加达到一个峰值应力, 随后进入塑性变形阶段. 通过对应力应变弹性阶段的曲线进行线性拟合, 得到双相纳米结构 Cu/CuZr 复合材料的杨氏模量在 56 GPa 左右, 且其杨氏模量对晶粒尺寸不敏感, 该依赖关系与纳米多晶 Cu 的变化趋势类似. 然后, 双相纳米结构 Cu/CuZr 复合材料的杨氏模量明显比纳米

多晶 Cu 的要低。这种现象主要是由于在双相纳米结构模型中,晶体相为硬相,而非晶相呈现软相的作用<sup>[25]</sup>。从图 3 也可以发现,在塑性变形阶段,不同晶粒尺寸的所有模型的应力应变曲线均呈现出锯齿状,与纳米多晶 Cu 的应力应变曲线的变化趋势相比,每个双相纳米结构模型的流动应力基本维持不变,没有出现流动应力具有明显下跌趋势的模型。这说明,非晶相的引入在一定程度上改变了纳米多晶 Cu 的塑性变形机制,从而有效提升了纳米多晶 Cu 的塑性。

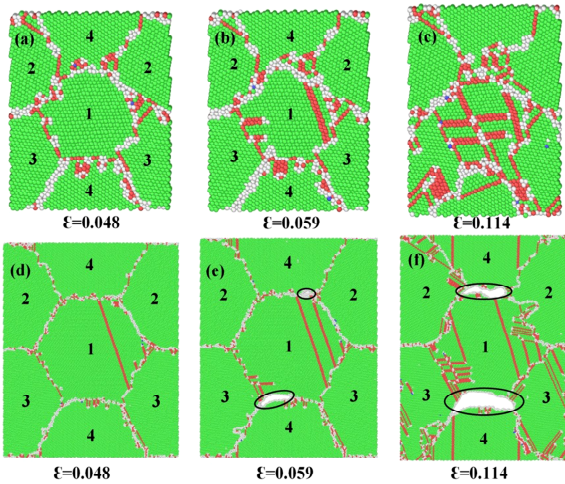


图 4 (a~c)晶粒尺寸为 4.94 nm 的纳米多晶 Cu 在不同应变下的原子结构图,(d~f)晶粒尺寸为 17.32 nm 的纳米多晶 Cu 在不同应变下的原子结构图。黑色圆圈表示裂纹的成核与扩展  
Fig. 4 (a~c) The atomic structures of nano-polycrystal Cu with a grain size of 4.94 nm at different strain, (d~f) the atomic structures of nano-polycrystal Cu with a grain size of 17.32 nm at various strain. Black circles indicate crack nucleation and propagation

为了揭示晶粒尺寸对纳米多晶 Cu 塑性变形机制的影响,图 4 给出了晶粒尺寸为 4.94 和 17.32 nm 的纳米多晶 Cu 在拉伸应变分别为 0.048,0.059,和 0.114 时的原子结构图。从图 4(a~c)中观察得出,应变为 0.048 时,晶界发生了变形,当应变增加到 0.059 时,不全位错在 1 号晶粒的两侧晶界上发射。当应变增加到 0.114 时,从图 4(c)可以看出,纳米多晶 Cu 的晶界发生了严重的变形,同时晶粒中的不全位错运动使得晶粒中出现纵横交错的堆垛层错。通过以上观察可以得出,小尺寸纳米多晶 Cu 主要以晶界的迁移和位错的成核与滑移为主要变形机制。对于晶粒尺寸较大的纳米多晶 Cu 而言,从图 4(d~f)可以看出,当应变达

到 0.048 时,位错从 1 号晶粒一侧晶界发射到相对的另一侧晶界处。然而,随着应变的增加,当应变达到 0.059 时,1 号与 2 号晶粒相邻的晶界处出现晶界裂纹,从而导致应力快速下跌,如图 2(a)所示。随着应变的继续增加,当达到 0.114 时,如图 4(f)所示,晶界裂纹在晶界上逐渐生长。也就是说,晶粒尺寸较大的纳米多晶 Cu 的塑性变形机制主要以裂纹的成核与扩张为主,同时也伴随着少量位错的成核与滑移。研究还发现,对于小晶粒尺寸的模型,即使当应变达到 0.2 时也没有出现晶界裂纹。通过以上研究可以得出,随着晶粒尺寸的增大,纳米多晶 Cu 的塑性逐渐降低。这是由于塑性变形过程中,小晶粒尺寸模型的塑性变形以晶界的滑移为主,模型中存在垂直于加载方向的晶界,由

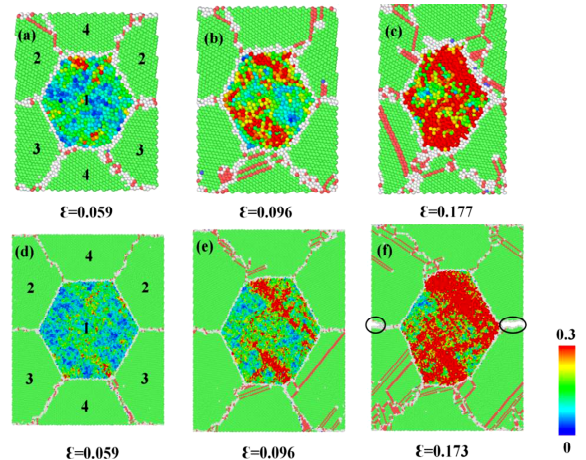


图 5 (a~c)晶粒尺寸为 4.94 nm 的双相纳米结构 Cu/CuZr 复合材料在不同应变下的原子结构图,(d~f)晶粒尺寸为 17.32 nm 的双相纳米结构 Cu/CuZr 复合材料在不同应变下的原子结构图。黑色圆圈表示裂纹的成核与扩展  
Fig. 5 (a~c) The atomic structures of Cu/CuZr nanocomposites with a grain size of 4.94 nm at different strain, (d~f) the atomic structures of Cu/CuZr nanocomposites with a grain size of 17.32 nm at various strain. Black circles indicate crack nucleation and propagation

于晶粒的旋转,在晶界处造成的应力集中也不足以使晶界受到损伤,晶界依然能协调相邻晶粒变形,晶界处不会形成裂纹。以上研究与 Jeon 等人<sup>[26]</sup>的研究结果一致。

为了进一步探明非晶相对纳米多晶 Cu 变形机制的影响,图 5 给出了晶粒尺寸分别为 4.94 和 17.32 nm 的双相纳米结构 Cu/CuZr 复合材料在应变分别为 0.059,0.096,0.177 和 0.171 时的原子结构图。图 5 中 1 号晶粒为非晶相,本文选取

0~0.3 的原子应变来观察非晶相的塑性行为。从图 5(a~c) 观察得出, 应变为 0.059 时, 非晶相中首先出现了剪切转变区。剪切转变区的出现和聚集, 也使得双相纳米结构 Cu/CuZr 复合材料由弹性阶段进入到了塑性阶段。当应变增加到 0.096 时, 剪切转变区聚集形成了两条准剪切带, 同时位错分别在 2 号晶粒与 4 号晶粒的晶界处成核并发射, 晶界变形不明显。当应变继续增加到 0.177 时, 从图 5(c) 可以看到, 由于周围晶体相晶粒对非晶相中剪切带的阻碍作用, 剪切带无法进一步滑移, 在剪切带周边聚集了大量的高应变原子, 从而使得非晶相几乎呈现出均匀的塑性变形, 当然在塑性变形的后期也出现了晶界的部分迁移。对于晶粒尺寸较大的双相纳米结构的 Cu/CuZr 复合材料, 从图 5(d~f) 可以看出, 当应变达到 0.059 时, 类似于小尺寸的复合材料模型, 在非晶相中出现了少量的剪切转变区原子, 在晶体中没有出现位错的成核和发射现象。当应变增加并达到 0.096 时, 在晶界处出现了位错的形核和发射, 且由于不全位错的运动在晶粒中留下了堆垛层错, 此时非晶相中的剪切转变区原子在应力的作用下增多, 并萌生了两条剪切带。当应变达到 0.171 时, 如图 5(f) 所示, 非晶相中的剪切转变区原子逐渐增多, 非晶相类似于小尺寸模型几乎呈现了均匀变形。同时发现, 在晶界处出现裂纹成核, 这个现象对应于图 3 曲线图中的应力下跌。然而, 和纳米多晶金属材料的模型裂纹成核应变 0.059 相比, 由于晶体相和非晶相的协同作用, 非晶相通过塑性变形对应力的释放在一定程度上制约了晶界裂纹的成核, 直到应变为 0.071 时, 双相纳米结构 Cu/CuZr 复合材料才出现晶界裂纹。这说明非晶相的引入能有效延迟晶界裂纹的成核。随着拉伸的继续, 研究发现非晶相在塑性变形过程中进一步阻碍了裂纹的扩展, 一些位错滑移在晶体内部留下了堆垛层错。通过以上研究发现, 非晶相的塑性变形在双相纳米结构 Cu/CuZr 复合材料的塑性变形过程中起主导作用, 且这种现象与晶粒尺寸无关。也就是说, 非晶相的引入在一定程度上可以提升纳米多晶 Cu 的塑性。

## 4 结 论

本文采用分子动力学模拟方法研究了在 300 K 的温度下, 二维柱状结构的纳米多晶 Cu 和双相纳米结构 Cu/CuZr 复合材料在拉伸载荷下, 晶粒尺寸对其变形机制的影响, 结果发现:

(1) 晶粒尺寸较小的纳米多晶 Cu 主要以晶粒旋转以及晶界迁移为主要变形机制, 同时伴随少量位错的成核与发射。然而, 对于较大晶粒尺寸的纳米多晶 Cu, 其塑性变形机制以裂纹的成核与扩张为主导。小晶粒尺寸纳米多晶 Cu 没有出现裂纹主要是因为塑性变形过程中, 模型中存在垂直于加载方向的晶界, 由于晶粒的旋转, 在晶界处造成的应力集中也不足以使晶界受到损伤, 晶界依然能协调相邻晶粒的变形。

(2) 纳米多晶 Cu 和双相纳米结构 Cu/CuZr 复合材料的杨氏模量对晶粒尺寸不敏感, 且双相纳米结构 Cu/CuZr 复合材料的杨氏模量明显比纳米多晶 Cu 的杨氏模量要低, 这是由于在双相纳米结构模型中, 非晶相担任软相的作用。

(3) 双相纳米结构 Cu/CuZr 复合材料在塑性变形过程中, 非晶相的塑性变形在复合材料的塑性变形过程中起主导作用, 且这种现象不依赖于晶粒的尺寸。当晶粒尺寸较大时, 虽然双相纳米结构的 Cu/CuZr 复合材料在塑性变形后期也出现晶界裂纹, 但非晶相通过与晶体相的协调作用, 可以有效延缓和阻碍裂纹的成核与扩展。研究结果指出, 非晶相的引入可以有效提升纳米多晶 Cu 的塑性。

## 参考文献:

- [1] 宋海洋, 李玉龙. 堆垛层错和温度对纳米多晶镁变形机理的影响[J]. 物理学报, 2012, 61: 226201.
- [2] Ding J, Tian Y, Wang L S, *et al.* Micro-mechanism of the effect of grain size and temperature on the mechanical properties of polycrystalline TiAl [J]. *Compu Mater Sci*, 2019, 158: 76.
- [3] 王鹏, 徐建刚, 张云光, 等. 晶粒尺寸对纳米多晶铁变形机制影响的模拟研究[J]. 物理学报, 2016, 65: 236201.
- [4] Cao A J, Wei Y G. Molecular dynamics simulation of plastic deformation of nanotwinned copper [J]. *J Appl Phys*, 2007, 102: 422.
- [5] Zhou K, Zhang T, Liu B, *et al.* Molecular dynamics simulations of tensile deformation of gradient nano-grained copper film [J]. *Comp Mater Sci*, 2018, 142: 389.
- [6] Li X, Hu W, Xiao S, *et al.* Molecular dynamics simulation of polycrystalline molybdenum nanowires under uniaxial tensile strain: size effects [J]. *Physica E*, 2008, 40: 3030.
- [7] Fang T H, Li W L, Tao N R, *et al.* Revealing extraordinary intrinsic tensile plasticity in gradient nano-

- grained copper [J]. *Science*, 2011, 331: 1587.
- [8] Cheng Z, Zhou H F, Lu Q H, *et al.* Extra strengthening and work hardening in gradient nanotwinned metals [J]. *Science*, 2018, 362: 1925.
- [9] Yang W, Liu H, Zhao Y, *et al.* Mechanical properties and structural features of novel Fe-based bulk metallic glasses with unprecedented plasticity [J]. *Sci Rep*, 2014, 4: 6233.
- [10] Axinte E. Metallic glasses from “alchemy” to pure science: present and future of design, processing and applications of glassy metals [J]. *Mater Design*, 2012, 35: 518.
- [11] Zhong C, Zhang H, Cao Q P, *et al.* Non-localized deformation in Cu, Zr multi-layer amorphous films under tension [J]. *J Alloy Compd*, 2016, 678: 410.
- [12] Telford M. The case for bulk metallic glass [J]. *Mater Today*, 2004, 7: 36.
- [13] Zhang C, Zhang H, Cao Q P, *et al.* The size-dependent non-localized deformation in a metallic alloy [J]. *Scr Mater*, 2015, 101: 48.
- [14] Song H Y, Zuo X D, Yin P, *et al.* Effect of amorphous phase on the plastic deformation mechanism of Mg: a molecular dynamics study [J]. *J Non-Cryst Solids*, 2018, 494: 1.
- [15] Song H Y, Li Y L. Atomic simulations of deformation mechanisms of crystalline Mg/amorphous Mg-Al nanocomposites [J]. *Phys Lett A*, 2015, 379: 2087.
- [16] Wu G, Chan K C, Zhu L, *et al.* Dual-phase nanostructuring as a route to high-strength magnesium alloys [J]. *Nature*, 2017, 545: 80.
- [17] Frøseth A G, Swygenhoven H V, Derlet P M. Developing realistic grain boundary networks for use in molecular dynamics simulations [J]. *Acta Mater*, 2005, 53: 4847.
- [18] Mendeleev M I, Sordelet D J, Kramer M J. Using atomistic computer simulations to analyze x-ray diffraction data from metallic glasses [J]. *J Appl Phys*, 2007, 102: 043501.
- [19] Kim D H, Ebrahimi F, Manuel M V, *et al.* Grain boundary activated pyramidal dislocations in nano-textured Mg by molecular dynamics simulation [J]. *Mater Sci Eng A*, 2011, 528: 5411.
- [20] Li B, Ma E. Zonal dislocations mediating twinning in magnesium [J]. *Acta Mater*, 2009, 57: 1734.
- [21] Faken D, Jónsson H. Systematic analysis of local atomic structure combined with 3D computer graphics [J]. *Compu Mater Sci*, 1994, 2: 279.
- [22] Shimizu F, Ogata S, Li J. Theory of shear banding in metallic glasses and molecular dynamics calculations [J]. *Mater Trans*, 2007, 48: 2923.
- [23] Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO-the open visualization tool [J]. *Model Simul Mater Sci Eng*, 2010, 18: 2154.
- [24] Schiøtz J, Jacobsen K W. A maximum in the strength of nanocrystalline copper [J]. *Science*, 2003, 301: 1357.
- [25] Song H Y, Xu J J, Zhang Y G, *et al.* Molecular dynamics study of deformation behavior of crystalline Cu/amorphous Cu<sub>50</sub>Zr<sub>50</sub>, nanolaminates [J]. *Mater Design*, 2017, 127: 173.
- [26] Jeon J B, Lee B J, Chang Y W. Molecular dynamics simulation study of the effect of grain size on the deformation behavior of nanocrystalline body-centered cubic iron [J]. *Scr Mater*, 2011, 64: 494.

#### 引用本文格式:

中文: 段蓓蓓, 宋海洋. 双相纳米结构 CuZr 合金力学行为的模拟研究 [J]. *四川大学学报: 自然科学版*, 2019, 56: 1087

英文: Duan B B, Song H Y. Simulations on the mechanical behavior of dual-phase nanostructured CuZr alloy [J]. *J Sichuan Univ: Nat Sci Ed*, 2019, 56: 1087.