

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

曾 强¹, 王丽娟¹, 陈 韬², 江五贵²

(1. 南昌大学 先进制造学院, 江西 南昌 330031)

(2. 南昌航空大学 航空制造工程学院, 江西 南昌 330063)

摘 要: 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 (selective laser melting, SLM) 铝力学性能的影响。结果表明, 纳米孪晶对不同晶态以及是否掺杂了 Fe 元素的铝的强化效果具有较大的差异。在不同晶态铝中插入纳米孪晶, 可以提高单晶铝的抗拉强度, 但降低了等轴晶和柱状晶铝的抗拉强度。其中, 柱状晶的力学性能对孪晶最敏感, 抗拉强度受到影响程度最大。孪晶界间距 (λ) 对柱状晶铝强度的影响存在临界值 (2.8 nm), 当 λ 小于 2.8 nm 时, 柱状孪晶铝的抗拉强度随着 λ 增加而减小, 当 λ 大于 2.8 nm 时, 柱状孪晶铝的抗拉强度随着 λ 增加而逐渐增加, 直到接近无孪晶柱状铝的强度。与不同晶态孪晶铝的强度相比, 掺杂 5at% Fe 的不同晶态孪晶铝的强度更大, 且柱状孪晶 Al-5%Fe 的强化效果最好, 表明合理控制 Fe 含量和纳米孪晶形态, 有望改善 SLM 铝的力学性能。

关键词: 选区激光融化; 铝; 晶态; 纳米孪晶; 分子动力学

中图分类号: TG146.21

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2023)01-0145-08

增材制造 (additive manufacturing, AM) 技术发展迅速, 其自下而上逐层添加材料的独特成型方式为工业制造领域带来前所未有的技术革新。与传统制造技术相比, 它可以显著降低复杂形状产品的制造成本和加工时间^[1]。选区激光熔化 (SLM) 是金属材料增材制造中的一项主流技术, 目前已成功应用于航空航天、交通运输和医疗器械等领域内复杂异形零部件的制造^[2-3]。铝及铝合金具有密度低、耐腐蚀性能好和易于成型等优点, 在上述工业领域中亦有极其广泛的应用。近年来, 结合 AM 技术的设计自由和快速成型优势, 采用 SLM 技术制造铝及铝合金构件 (SLM-Al) 的应用研究也越来越多, 大量学者对 SLM-Al 进行了细致的前期研究^[4-11]。Branco 等^[6]使用纯铝粉末为原料, 通过脉冲式 SLM 工艺获得了晶粒尺寸分别为 9.54、42.18 和 93.8 nm 的纳米晶铝。Takata 及其他研究者^[7]陆续发现 SLM-Al 优异的力学性能与其内部晶粒中精细而独特的微观结构有关。Ben 等^[10]报道了 SLM-Al 具有由熔池, 柱状晶粒和亚晶粒结构组成的分层微观结构。Chen 等^[11]通过 EBSD 分析了 SLM 铝合金的微观结构, 发现不同类型的晶粒之间具有迥异的取向分布特征。

通常情况下, 铝具有高的堆垛层错能, 因此铝及铝合金中极少出现退火孪晶; 与此同时, 铝具有 fcc (face

centered cubic) 晶体结构, 一般条件下的塑性变形由 {111}<110> 滑移系即可完美协调, 变形孪晶也极为罕见。但是, 近年来在铝及铝合金中报道了大量区别于上述 2 类孪晶的“纳米孪晶”, 其宽度在几个到几十个原子层厚度之间。Chen 等^[12]在气相沉积制备的纳米晶铝膜的塑性变形过程中首次发现了变形孪晶。刘敬勇等^[13]在经等径角挤压的粗晶铝中同时发现了变形孪晶和退火孪晶。李玉龙等^[14]在 SLM-Al 的激光熔凝区中发现了大面积的堆垛层错和纳米孪晶。Li 等^[15]通过高分辨透射电子显微镜分析 SLM-Al 时, 观察到其内部的纳米孪晶由具有共格孪晶界的 α -Al 相和非共格孪晶界的 9R 相组成。上述铝及铝合金中纳米孪晶的形成通常被认为与其经受的极端变形条件或冷却条件有关, 尤其 SLM 过程中熔融金属的冷却速度极大, 可达 $10^3 \sim 10^6$ K/s。

铝及铝合金中反常的纳米孪晶激发了科研人员的浓厚研究兴趣。然而, SLM-Al 中纳米孪晶与合金成分之间的关系不明, 具有纳米孪晶结构的 SLM-Al 合金制备困难, 且纳观结构表征和力学性能测试的研究成本高、研究周期长。因此, 纳米孪晶对 SLM-Al 力学性能影响的相关实验研究仍然较少。相比之下, 采用分子动力学 (molecular dynamics, MD) 模拟方法对此科学问题展开的研究则相对较多。主要涵盖 (i) 纳

收稿日期: 2022-01-02

基金项目: 国家自然科学基金 (12062016)

作者简介: 曾 强, 男, 1996 年生, 硕士生, 南昌大学先进制造学院, 江西 南昌 330031, E-mail: zengqiang96@email.ncu.edu.cn

米孪晶在 SLM-Al 中的形成机理和 (ii) 固溶元素掺杂对 SLM-Al 中纳米孪晶稳定性的影响。Kurian 和 Mirzaeifar^[16]采用 MD 方法模拟了 SLM 过程中铝纳米粉末的熔化和凝固过程, 研究发现经过激光束多次扫描 3 层铝纳米粉末后, 凝固的纳米铝合金由柱状晶, 等轴晶, 纳米孔, 纳米孪晶和堆垛层错组成。Zeng 等^[17]和 Yamakov 等^[18]结合 MD 方法研究了柱状晶铝在单轴拉伸条件下的结构演变和力学行为, 发现柱状晶铝在拉伸过程中会产生纳米孪晶。Li 等^[19]通过直流磁溅射方式获得了具有高密度纳米孪晶和 9R 相的 Al-Fe 合金, 发现 Fe 原子增加不稳定堆垛层错能和稳定堆垛层错能的比例并提高了纳米孪晶和 9R 相的稳定性, 使得合金获得很高的强度和硬度, 可以与多种高强度马氏体钢相媲美, 并且利用 MD 方法比较了纳米柱状孪晶 Al 和柱状孪晶 Al-5%Fe 的力学性能, 证实了这一发现, 且 Al-5%Fe 具有更高的强度。同时还有其他学者研究了纳米孪晶对金属力学性能的影响。Kurian 和 Mirzaeifar^[20]采用 MD 方法研究了 316L 不锈钢 (stainless steel, SS) 在 SLM 过程中产生的纳米孪晶对变形行为的影响, 发现相比于无孪晶柱状晶, 具有孪晶的柱状晶具有更高的强度, 且孪晶界间距较小的柱状晶强度更高。薛克敏等^[21]利用 MD 方法模拟了不同孪晶界间距的单晶钨的单轴拉伸, 发现与无孪晶单晶相比, 具有孪晶的单晶强度更小。Li 等^[22]利用 MD 方法模拟了纳米孪晶铜的力学性能, 结果表明当超过临界孪晶界间距时, 强度随着孪晶界间距的增加而减小。申天展等^[23]利用 MD 方法研究了纳米孪晶 Cr₂₆Mn₂₀Fe₂₀Co₂₀Ni₁₄ 高熵合金的力学性能, 发现当超过临界孪晶界间距时, 屈服强度对临界孪晶界间距的敏感度将会发生改变。

综上所述, 尽管有学者已经发现在 SLM-Al 中存在纳米孪晶, 但是关于纳米孪晶如何影响 SLM-Al 的力学性能的研究仍然较少, 而纳米孪晶可以对金属的力学性能产生至关重要的影响。本工作通过 MD 方法研究了纳米孪晶与 Fe 掺杂对 SLM-Al 力学性能的影响。旨在 SLM 技术广泛应用到铝及铝合金的制造与生产时, 可以为 SLM-Al 的设计提供一定的理论依据。

1 建模及方法

1.1 原子势

分子动力学通过求解牛顿运动方程来模拟分子体系之间的运动, 其中相互作用力是从原子间的电势得出的。选择精确的原子间相互作用势在分子动力学模拟中非常重要, 因此本研究采用嵌入原子势 (EAM)^[24]中的合金势来表示 Al-Al 之间的相互作用。系统的总

势能表达式如下:

$$E = \sum_i F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{ij}(r_{ij}) \quad (1)$$

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} f_j(r_{ij}) \quad (2)$$

式中, F_i 是原子 i 在电子云密度 ρ_i 的嵌入能; $\phi_{ij}(r_{ij})$ 代表原子 i 和 j 之间的对势; r_{ij} 为 i 与 j 原子间的距离, $f_j(r_{ij})$ 是原子 j 在距离 r_{ij} 处与原子 i 所产生的电子云密度。

1.2 建模方法

为了研究纳米孪晶对不同晶态铝力学性能的影响, 因此分别建立了无孪晶以及孪晶界间距 (λ) 分别为 1.4、2.1、2.8、3.5 和 4.2 nm 的不同晶态铝模型。图 1 为孪晶界间距为 1.4 nm 的不同晶态铝模型。如图 1a 所示, 单晶原子模型尺寸为 23.8 nm×23.9 nm×4.0 nm, Al 的晶格常数为 0.405 nm, 红色 hcp 原子形成孪晶界, 位于 (111) 面, 晶体取向为 $x=[11\bar{2}]$, $y=[111]$, $z=[\bar{1}10]$; 柱状和等轴晶模型使用 AtomsK^[25]软件和 Voronoi^[26]镶嵌方法来构造, 等轴晶原子模型大小采用 13.4 nm×13.4 nm×13.4 nm, 其中具有 4 个随机取向的晶粒, 平均晶粒尺寸约为 10.3 nm, 如图 1b 所示; 柱状原子模型根据文献^[10]中观察到的 TEM 图像进行建模, 柱状晶原子模型尺寸为 24.3 nm×24.3 nm×4.1 nm, 晶体初始晶向为 $x=[11\bar{2}]$, $y=[111]$, $z=[\bar{1}10]$, 4 个晶粒分别绕 z 轴 $[\bar{1}10]$ 旋转 0°, 20°, 40°, 60°, 每个晶粒的晶粒尺寸计算为圆柱体的直径^[27], 平均晶粒尺寸约为 13.7 nm, 如图 1c 所示。本工作使用的平均晶粒尺寸分别是 10.3 和 13.7 nm, 在 Branco 等^[6]实验获得的晶粒尺寸范围内。此外, 由于 MD 方法计算规模的限制, 目前大多数 MD 模拟使用的晶粒尺寸都在 10~20 nm^[28-30]。例如, Kurian 和 Mirzaeifar^[20]进行了 MD 模拟研究 SLM 316L SS 柱状晶的力学性能使用的平均晶粒尺寸为 10.3~23.24 nm, 因此本工作使用的晶粒尺寸是合理的。

1.3 计算程序

MD 模拟基于大规模原子/分子并行模拟器 (LAMMPS)^[31]进行。周期性边界应用于所有方向, 通过共轭梯度的方式进行能量最小化, 采用 NPT (恒定的原子数、温度和压力) 系综在 300 K 温度, 0 MPa 压力下进行弛豫, 时间步长为 0.001 ps, 弛豫 150 ps 得到初始构型, 体系的温度和压力通过 Nose-Hoover 恒温器和恒压器进行控制^[32]。由于 MD 时间尺度的限制, MD 模拟中的加载速率往往大于实验加载速率。李源才等^[28]和 Wen 等^[33]在利用 MD 模拟进行单轴拉伸实验时发现拉伸应变速率在 $1 \times 10^8 \sim 2 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ 范围内, 加载速率对模拟结果的影响很小。Kurian 和 Mirzaeifar^[20]采用 MD

方法研究了 SLM 316L 不锈钢在应变速率为 $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 时的拉伸力学性能。因此, 本工作所有模型都以恒定的应变速率 $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 进行单轴拉伸, 拉伸时间为 300 ps。关于单晶模型, 考虑到拉伸方向与孪晶界之间的角度对力学性能的影响, 因此, 单晶分别沿 x 轴或 y 轴拉伸; 由于等轴晶具有各向同性, 本工作只考虑等轴晶沿 x 轴拉伸; 而柱状晶具有各向异性, 因此, 柱状晶分别沿 x 轴、 y 轴或 z 轴拉伸。使用可视化软件 OVITO^[34] 观察拉伸过程中的原子结构。

2 结果与讨论

2.1 纳米孪晶对不同晶态铝力学性能的影响

为了研究纳米孪晶对力学性能的影响, 分别对无孪晶、1.4、2.1、2.8、3.5 和 4.2 nm 5 种不同孪晶间距

距的不同晶态铝模型进行了 MD 模拟。如图 2a、2b 所示, 插入孪晶在单晶铝中, 单晶铝的杨氏模量没有发生变化, 但是会改变单晶铝的强度, 当模型沿 x 轴拉伸、 $\lambda < 3.5 \text{ nm}$ 时, 孪晶单晶铝的强度都高于单晶铝的强度, 且孪晶铝的强度随着 λ 的增加而减小, 表明最小孪晶界间距的单晶铝强度最大, 这是由于孪晶的插入, 最小孪晶界间距的单晶铝具有最大的孪晶界密度, 进而提高了单晶铝的强度, 这与 Sainath 和 Choudhary^[35] 观察到的结果一致, 然而当模型沿 y 轴拉伸时, 单晶铝插入孪晶后, 孪晶单晶铝的强度也是随着孪晶界间距的增加而减小, 当 λ 增加到 3.5 nm 时, 此时孪晶单晶铝的强度反而高于单晶铝, 且沿 y 向拉伸的单晶孪晶铝强度高于沿 x 向拉伸

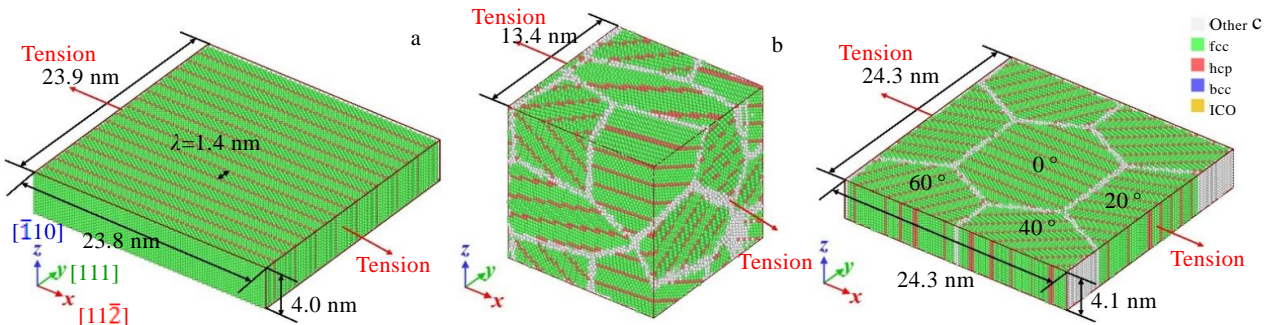


图 1 λ 为 1.4 nm 的不同晶态晶体铝模型

Fig.1 Different crystalline crystal aluminum models with λ of 1.4 nm: (a) single-crystal, (b) equiaxed grains, and (c) columnar grains

的单晶孪晶铝, 表明孪晶的插入使得材料受到不同加载方向的影响较大, 拉伸方向与孪晶界之间的角度将会改变单晶孪晶铝的力学性能; 图 3a、3b 表明, 插入孪晶在等轴晶铝中, 等轴晶铝的强度略微减小, 从图 3b 可以明显看到, 等轴孪晶铝的抗拉强度随着孪晶界间距的增加而增加, 逐渐接近于等轴晶铝的抗拉强度。

从图 4 可以看出, 当模型沿 x 轴 (横向) 拉伸时, 插入孪晶在柱状晶铝中, 柱状晶铝的强度减小程度较大, 孪晶铝的抗拉强度明显低于柱状晶铝, 且孪晶界间距对柱状晶铝强度的影响存在一个临界值 (2.8 nm), 当 $\lambda < 2.8 \text{ nm}$ 时, 随着孪晶界间距的增加, 柱状孪晶铝的强度在减小, 抗拉强度从 1.939 GPa 减小到了 1.874 GPa, 减小了 3.4%, 这是由于较小的孪晶界间距的柱状晶铝在塑性变形过程中, 位错滑移到孪晶界时, 没有足够的空间沿着滑移面进行滑移, 进一步塑性变形需要施加更高的外力, 与 Kurian 和 Mirzaeifar^[20] 的发现一致, 但是当 $\lambda > 2.8 \text{ nm}$ 时, 随着孪晶界间距的增加, 柱状孪晶铝的强度逐渐增强, 直到接近无孪晶柱状铝的强度, 从 1.874 GPa 增加到

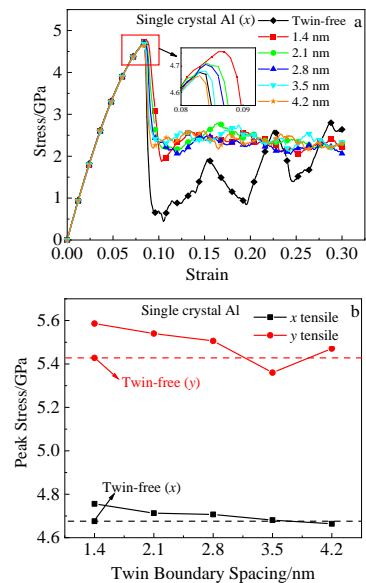


图 2 孪晶铝 (单晶) 力学性能曲线

Fig.2 Stress-strain curves (a) and curves of the peak stress (b) of twin aluminum (single crystal) with different twin boundary spacings

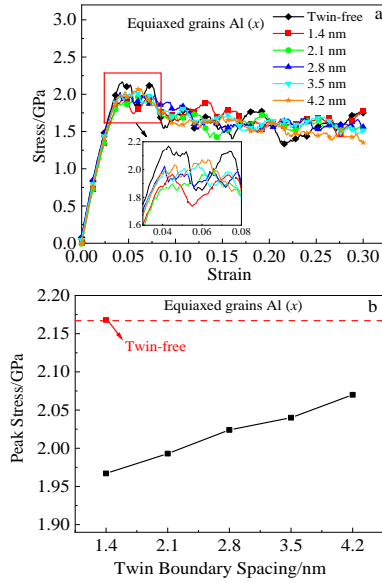


图 3 孪晶铝（等轴晶）力学性能曲线

Fig.3 Stress-strain curves (a) and curves of the peak stress (b) of twin aluminum (equiaxed grains) with different twin boundary spacings

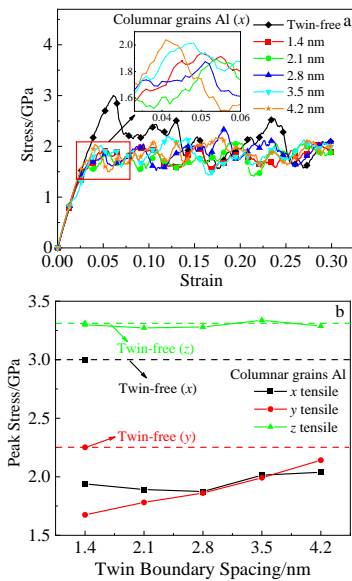


图 4 孪晶铝（柱状晶）力学性能曲线

Fig.4 Stress-strain curves (a) and curves of the peak stress (b) of twin aluminum (columnar grains) with different twin boundary spacings

2.039 GPa, 增加了 8.8%, 此时强化的机制发生改变。这表明, 不同孪晶界间距的柱状孪晶铝的塑性变形行为是不一样的, 作者将对于造成这种差异的原因进行

进一步讨论。沿 y 轴（纵向）拉伸时, 插入孪晶在柱状晶铝中, 强度变化与等轴晶铝一致, 而沿 z 轴（垂向）拉伸时, 插入孪晶在柱状晶铝中, 强度变化在无孪晶柱状晶铝上下波动, 表明此时孪晶对柱状晶铝强度的影响不大。从以上分析可以得出, 柱状孪晶铝分别沿不同方向拉伸时, 横向和纵向拉伸力学性能差异较大, 垂向拉伸具有最大的抗拉强度。合理设计不同晶态铝的孪晶含量, 能够改善材料的力学性能。

图 5 是无孪晶与插入孪晶的单晶铝的拉伸原子图。如图 5a、5d 所示, 当应变为 0.01 时, 无孪晶与插入孪晶的单晶铝都处于弹性变形阶段, 二者晶体内部均未见位错生成。随着应变增加至 0.088, 无孪晶与插入孪晶的单晶铝均进入塑性变形阶段, 晶体内部出现少量非晶结构, 且位错在滑移面上沿着滑移方向移动, 扫过的区域内形成堆垛层错 (如图 5b、5e 所示)。相比无孪晶的情况而言, 插入孪晶的单晶铝中的滑移面被数量众多的纳米孪晶隔断 (如图 5e 黄圈所示), 位错在滑移面上的移动受到明显阻碍, 导致塑性变形抗力升高, 使得孪晶单晶铝具有更高的应力水平 (图 2a)。当应变进一步增大至 0.113 时, 无孪晶单晶铝中的位错经滑移后终止于表面, 晶体内部位错密度出现明显的降低, 对应表现为如图 2a 所示的流变应力松弛。而插入孪晶的单晶铝中仅有部分位错能穿过孪晶界进行滑移, 且不断地受到孪晶界的阻碍, 使得插入孪晶的单晶铝具有更高的流变应力。

本工作研究的另一个方面是不同孪晶界间距对柱状孪晶铝拉伸性能的影响, 图 6 是应变为 0.05 时不同孪晶界间距的柱状孪晶铝拉伸原子图。如图 6a 黄圈所示, 当柱状孪晶铝的孪晶界间距为 1.4 nm 时, 几乎所有的堆垛层错都被孪晶界阻碍 (图 6a 黄圈所示), 为了克服这种阻力, 进一步塑性变形需要施加更高的外力。对于孪晶界间距为 2.8 nm 的柱状孪晶铝, 黄圈 1 可以看到孪晶界到晶界的距离较小, 位错在滑移面上的移动更容易受到孪晶界的阻碍, 而黄圈 2 中的位错在滑移面上滑移到孪晶界时还有一段距离。这说明, 对于孪晶界间距较小的柱状孪晶铝来说, 与孪晶界间距较大的柱状孪晶铝相比, 从晶界发射出的部分位错在滑移过程中更容易与第一个遇见的孪晶界相交, 进而阻碍了塑性变形, 进一步塑性变形需要施加更高的外力, 而随着孪晶界间距的增加, 位错有更多的空间进行滑移, 位错将不受限制地滑移, 这就解释了 $\lambda < 2.8$ nm 时, 更小的孪晶界间距具有更高强度的原因。当 $\lambda > 2.8$ nm 时, 如图 6c 所示, 对于孪晶界间距为 3.5 nm 的柱状孪晶铝, 黄圈位置可以看到部分堆垛层错被晶界阻碍, 相比于孪晶界, 晶界阻碍位错运动的能力

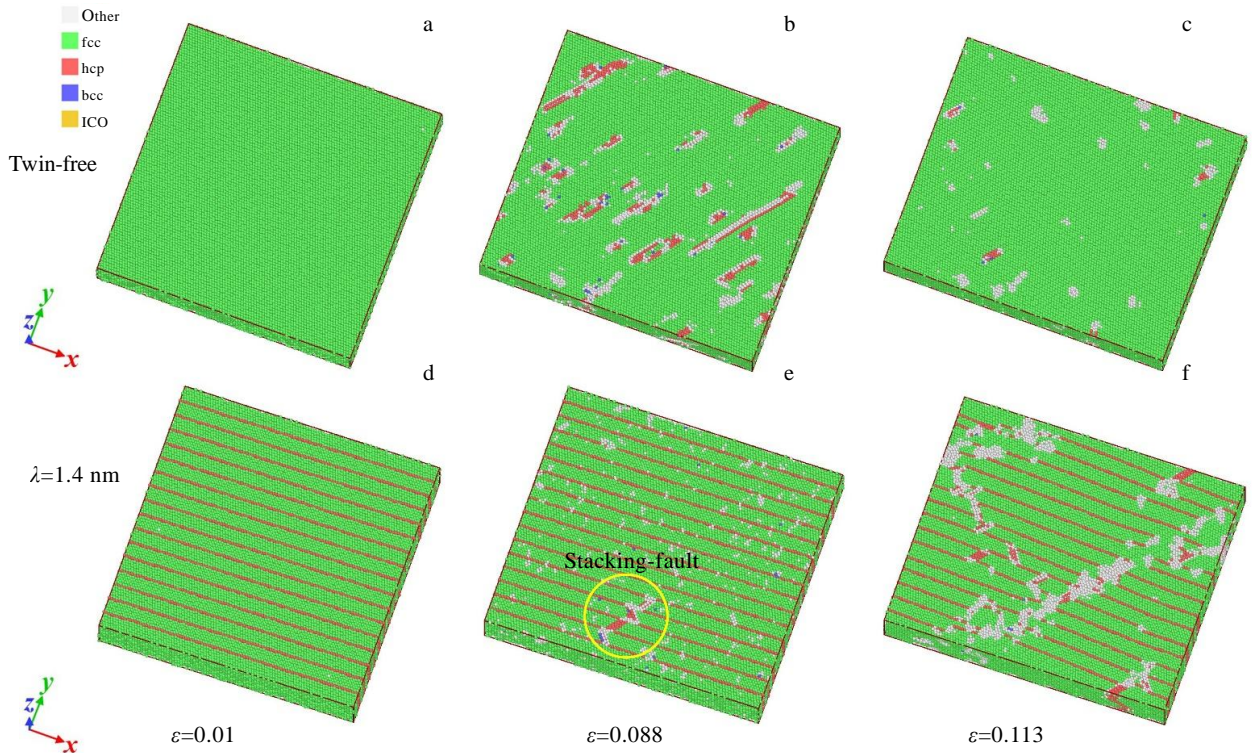


图 5 在不同应变下无孪晶与孪晶单晶 Al 的拉伸原子图 (白色原子表示晶界和非晶结构, 红色原子表示堆垛层错)

Fig.5 Tensile atomic snapshots of the twin-free (a-c) and nano-twinned (d-f) single crystal Al at different values of strain: (a, d) $\epsilon=0.01$, (b, e) $\epsilon=0.088$, and (c, f) $\epsilon=0.113$ (white atoms indicate grain boundaries and amorphous structures, and red atoms indicate stacking faults)

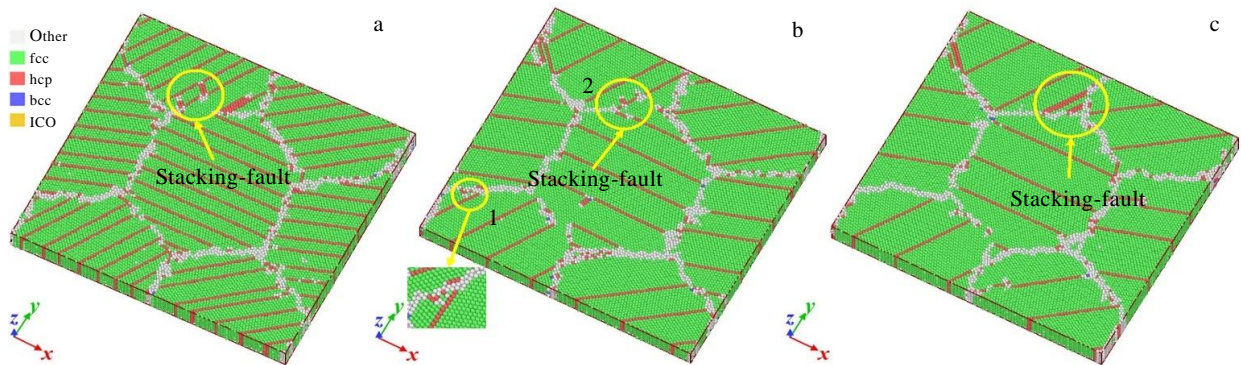


图 6 在应变为 0.05 时不同孪晶界间距的柱状晶铝的拉伸原子图

Fig.6 Tensile atomic snapshots of the columnar grains aluminum with different twin boundary spacings at $\epsilon=0.05$: (a) 1.4 nm, (b) 2.8 nm, and (c) 3.5 nm

更强, 此时的强化机制主要是晶界阻碍位错运动, 从而提高了柱状孪晶铝的强度, 这也是 $\lambda > 2.8 \text{ nm}$ 时, 柱状孪晶铝的强度反而提高的原因。

2.2 Fe 掺杂对不同晶态铝力学性能的影响

Li 等^[19]只是利用 MD 模拟比较了柱状孪晶 Al 跟柱状孪晶 Al-5%Fe 的力学性能, 并没有考虑 Fe 元素的掺杂对其他晶态孪晶 Al 力学性能的影响, 因此本工

作还研究了 Fe 元素的掺杂对不同晶态孪晶 Al 的影响, 采用修正嵌入原子势 (MEAM)^[36]进行 Al-5%Fe 力学性能的单轴拉伸模拟。从图 7 中可以看到, 与不同晶态孪晶 Al 的抗拉强度相比, 掺杂了 5at% Fe 的单晶孪晶、等轴孪晶和柱状孪晶 Al-5%Fe 具有更高的强度, 分别为 4.859、2.432 和 2.822 GPa, 分别提高了 3.8%、19.2%和 40.1%, 表明柱状孪晶 Al-5%Fe 的强度提高

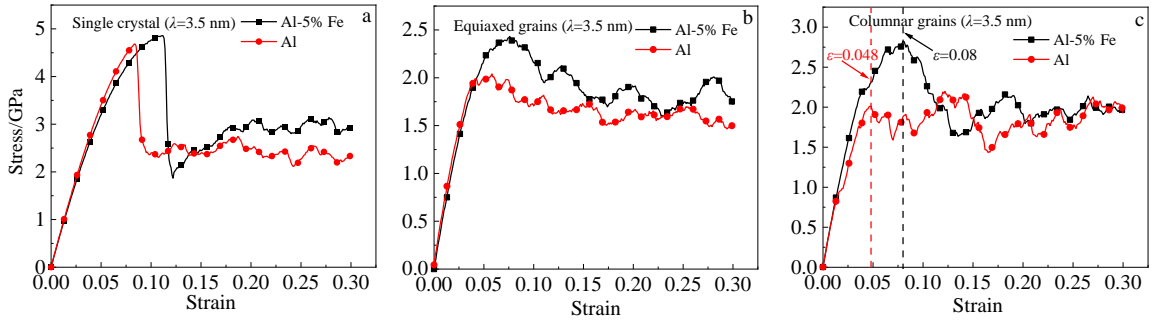


图 7 不同晶态晶体孪晶 Al 和 Al-5%Fe 的力学性能

Fig.7 Mechanical properties of the nano-twinned Al and Al-5%Fe with different crystalline: (a) single-crystal, (b) equiaxed grains, and (c) columnar grains

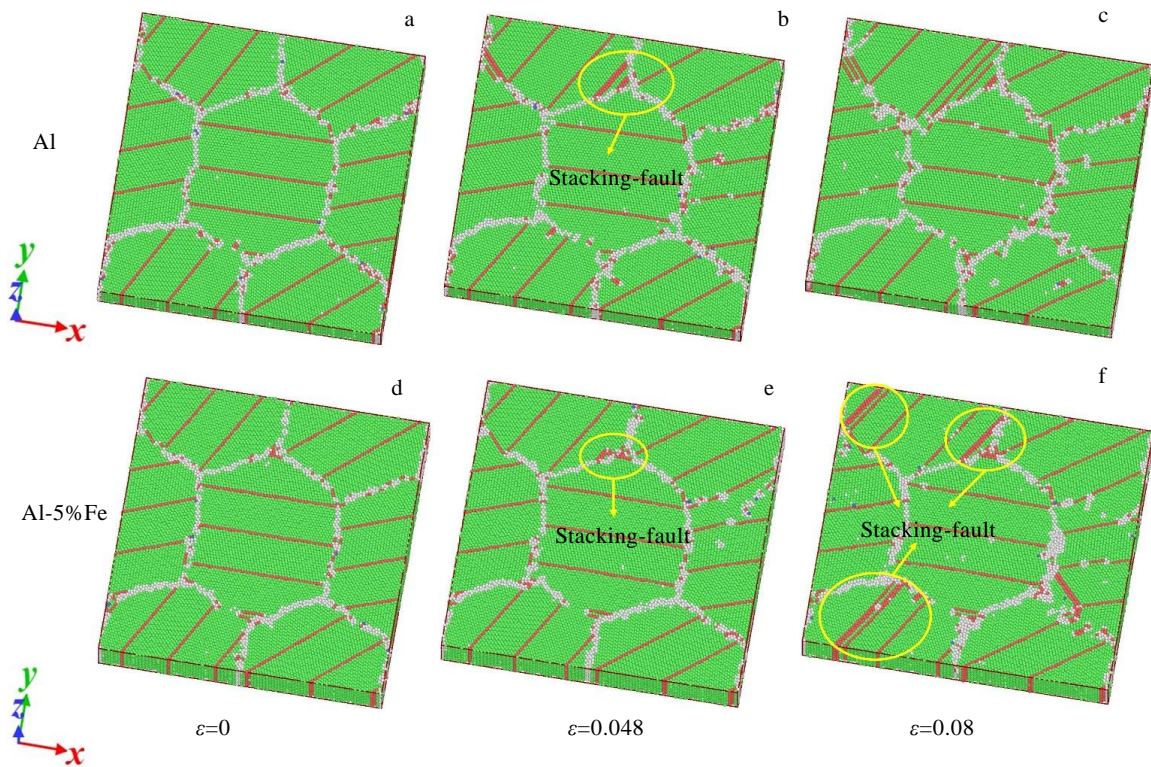


图 8 在不同应变下柱状孪晶 Al 和柱状孪晶 Al-5%Fe 的拉伸原子图

Fig.8 Tensile atomic snapshots of the twin Al (a-c) and Al-5%Fe (d-f) of columnar grains at different values of strain: (a, d) $\epsilon=0$, (b, e) $\epsilon=0.048$, and (c, f) $\epsilon=0.08$

程度最大，提高程度与 Li 等^[19]发现基本一致，掺杂一定量的 Fe 能够改变孪晶铝的强度，合理控制 Fe 含量和纳米孪晶形态，有望改善 SLM 铝的力学性能。从图 8 可以看到，未变形时 ($\epsilon=0$)，柱状孪晶 Al 和 Al-5%Fe 的初始状态基本一致，随着应变的增加，当应变增加到 0.048 时，此时柱状孪晶铝的强度达到最大，可以在图中看到圆圈处有少量的堆垛层错被晶界阻碍，然而 Al-5%Fe 晶体内部只是出现少量的堆垛层错，但是当应变增加到 0.08 时，此时在 Al-5%Fe 中可以看到大

量的堆垛层错被晶界阻碍，进一步塑性变形需要施加更高的外力，这也是导致柱状孪晶 Al-5%Fe 具有更高强度的原因。

3 结 论

1) 不同晶态铝插入孪晶时，起的作用是不同的。在单晶铝中插入孪晶，孪晶界间距较小时，孪晶铝的抗拉强度高于单晶铝，且孪晶单晶铝的抗拉强度随着孪晶界间距的增加而逐渐减小；在等轴晶铝中插入孪

晶, 孪晶铝的抗拉强度略微低于等轴晶铝, 且等轴孪晶铝的抗拉强度随着孪晶界间距的减小而减小; 在柱状晶铝中插入孪晶, 孪晶铝的抗拉强度明显低于柱状晶铝, 且发现孪晶界间距对柱状孪晶铝强度的影响存在一个临界值 (2.8 nm), 当 $\lambda < 2.8$ nm 时, 随着孪晶界间距的增加, 柱状孪晶铝的强度在减小, 但是当 $\lambda > 2.8$ nm 时, 随着孪晶界间距的增加, 柱状孪晶铝的强度逐渐增强。因此, 合理设计不同晶态铝的孪晶含量, 能够改善材料的力学性能。

2) 沿 y 向拉伸的单晶孪晶铝强度高于沿 x 向拉伸的单晶孪晶铝, 表明拉伸方向与孪晶界之间的角度将会改变单晶孪晶铝的力学性能; 且柱状孪晶铝分别沿不同方向拉伸时, 可以发现, 横向和纵向拉伸力学性能差异较大, 垂向拉伸具有最大的抗拉强度。

3) 与不同晶态孪晶铝的强度相比, 掺杂 5at% Fe 的不同晶态孪晶铝的强度更大, 且柱状孪晶 Al-5%Fe 的强化效果最好, 表明掺杂一定量的 Fe 能够改变孪晶铝的强度, 合理控制 Fe 含量和纳米孪晶形态, 有望改善 SLM 铝的力学性能。

参考文献 References

- [1] Bandyopadhyay A, Traxel K D. *Additive Manufacturing*[J], 2018, 22: 758
- [2] Guo N N, Leu M C. *Frontiers of Mechanical Engineering*[J], 2013, 8(3): 215
- [3] Tofail S A M, Koumoulos E P, Bandyopadhyay A *et al. Materials Today*[J], 2018, 21(1): 22
- [4] Zaretsky E, Stern A, Frage N. *Materials Science and Engineering A*[J], 2017, 688: 364
- [5] Larrosa N O, Wang W, Read N *et al. Theoretical and Applied Fracture Mechanics*[J], 2018, 98: 123
- [6] Branco D D C, Vasconcelos L S, An L C *et al. Journal of the Mechanics and Physics of Solids*[J], 2021, 151: 104 391
- [7] Takata N, Liu M L, Kodaira H *et al. Additive Manufacturing*[J], 2020, 33: 101 152
- [8] Takata N, Kodaira H, Sekizawa K *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2017, 704: 218
- [9] Thijs L, Kempen K, Kruth J P *et al. Acta Materialia*[J], 2013, 61(5): 1809
- [10] Ben D D, Ma Y R, Yang H J *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2020, 798: 140 109
- [11] Chen B, Moon S K, Yao X *et al. Scripta Materialia*[J], 2017, 141: 45
- [12] Chen M W, Ma E, Hemker K J *et al. Science*[J], 2003, 300 (5623): 1275
- [13] Liu Jingyong(刘敬勇), Lu Lei(卢磊), Zhong Zhengye(钟政焯). *Journal of Materials Engineering*(材料工程)[J], 2021, 49(4): 89
- [14] Li Yulong(李玉龙), Hu Jiandong(胡建东), Lu Jian(吕健). *Journal of Jilin University of Technology*(吉林工业大学学报)[J], 1992(3): 77
- [15] Li R D, Wang M B, Li Z M *et al. Acta Materialia*[J], 2020, 193: 83
- [16] Kurian S, Mirzaeifar R. *Additive Manufacturing*[J], 2020, 35: 101 272
- [17] Zeng Q, Wang L J, Jiang W G. *Crystals*[J], 2021, 11(11): 1388
- [18] Yamakov V, Wolf D, Phillpot S R *et al. Nature Materials*[J], 2002, 1(1): 45.
- [19] Li Q, Xue S C, Wang J *et al. Advanced Materials*[J], 2018, 30(11): 1 704 629
- [20] Kurian S, Mirzaeifar R. *Mechanics of Materials*[J], 2020, 148: 103 478
- [21] Xue Kemin(薛克敏), Zhang Yongqiang(张勇强), Wang Lusheng(王路生) *et al. The Chinese Journal of Nonferrous Metals*(中国有色金属学报)[J], 2021, 31(8): 2136
- [22] Li X Y, Wei Y J, Lu L *et al. Nature*[J], 2010, 464(7290): 877
- [23] Shen Tianzhan(申天展), Song Haiyang(宋海洋), An Minrong(安敏荣). *Acta Physica Sinica*(物理学报)[J], 2021, 70(18): 252
- [24] Mishin Y, Farkas D, Mehl M J *et al. Physical Review B*[J], 1999, 59: 3393
- [25] Hirel P. *Computer Physics Communications*[J], 2015, 197: 212
- [26] Finney J L. *Academic Press*[J], 1979, 32(1): 137
- [27] Bertolino G, Ruda M, Pasianot R *et al. Computational Materials Science*[J], 2016, 130: 172.
- [28] Li Yuancai(李源才), Jiang Wugui(江五贵), Zhou Yu(周宇). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2020, 49(7): 2372
- [29] Zhao Pengyue(赵鹏越), Guo Yongbo(郭永博), Wang Ziyun(王子云) *et al. Journal of Harbin Institute of Technology*(哈尔滨工业大学学报)[J], 2019, 51(11): 27
- [30] Rajput A, Paul S K. *Metals and Materials International*[J], 2021, 27(5): 825
- [31] Plimpton S. *Journal of Computational Physics*[J], 1995, 117 (1): 1
- [32] Evans D J, Holian B L. *The Journal of Chemical Physics*[J], 1985, 83(8): 4069
- [33] Wen Y H, Zhu Z Z, Zhu R Z. *Computational Materials*

- Science*[J], 2008, 41(4): 553
[34] Stukowski A. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2010, 18(1): 2154
[35] Sainath G, Choudhary B K. *Philosophical Magazine*[J], 2016, 96(32-34): 3502
[36] Lee E, Lee B J. *Journal of Physics: Condensed Matter*[J], 2010, 22(17): 175 702

Molecular Dynamics Simulation on Effect of Nano-Twin and Fe Doping on Mechanical Properties of SLM-Al

Zeng Qiang¹, Wang Lijuan¹, Chen Tao², Jiang Wugui²

(1. School of Advanced Manufacturing, Nanchang University, Nanchang 330031, China)

(2. School of Aeronautical Manufacturing Engineering, Nanchang Hangkong University, Nanchang 330063, China)

Abstract: The effects of crystalline states, twin boundary spacing, and Fe doping on the mechanical properties of SLM aluminum were examined by performing molecular dynamics simulations of uniaxial tensile tests. The results show that the strengthening effect of twins on aluminum with different crystalline states and whether or not doping Fe is quite different. Inserting nano-twin in different crystalline aluminum can increase the tensile strength of single crystal aluminum, but reduce the tensile strength of equiaxed grains and columnar grains aluminum. Among them, the mechanical properties of columnar grains are the most sensitive to twins, especially the tensile strength. There is a critical value of 2.8 nm for the effect of twin boundary spacing λ on the tensile strength of the columnar crystal aluminum. When λ is less than this value, the tensile strength of columnar twin aluminum decreases with the increase of λ , while when λ is greater than this value, the tensile strength of columnar grains aluminum gradually increases with the increase of λ , until it is close to that of columnar grains aluminum with twin-free. Compared with the tensile strength of different crystalline twin Al, the tensile strength of different crystalline twin Al doped with 5at% Fe is greater, and the strengthening effect of columnar twin Al-5%Fe is the best, indicating that reasonable control of the content of Fe and nano-twinned crystalline is expected to improve the mechanical properties of SLM aluminum.

Key words: selective laser melting; aluminum; crystalline state; nano-twin; molecular dynamics

Corresponding author: Wang Lijuan, Ph. D., Associate Professor, School of Advanced Manufacturing, Nanchang University, Nanchang 330031, E-mail: wlj@ncu.edu.cn