

粒度和界面原子调控对 SiC/Al 复合材料强度的影响

何卫^{1,2}, 吴昊^{1,2}, 李德阁³, 王利民^{1,2}, 陈胜男^{1,2}, 阎佳思⁴, 肖伟⁴, 杨辉⁴

(1. 南瑞集团有限公司(国网电力科学研究院有限公司), 江苏 南京 211106)

(2. 国网电力科学研究院 武汉南瑞有限责任公司, 湖北 武汉 430074)

(3. 中国电力科学研究院有限公司, 北京 100192)

(4. 有研科技集团有限公司 有色金属材料制备加工国家重点实验室, 北京 100088)

摘要: SiC/Al 复合材料作为一种轻质高强材料, 因其优异的物理化学性能被外界广泛关注。本研究利用分子动力学方法, 构建了不同 SiC 粒径的 SiC/Al 复合材料模型, 根据拉伸变形模拟结果得出更小的 SiC 粒径有利于材料获得更高的抗拉强度。随着拉伸形变的逐渐增加, SiC 颗粒在沿拉伸方向的两侧与 Al 基体发生分离从而产生孔隙, 再从孔隙缺陷处产生位错形核并扩展至 Al 基体内形成塑性形变。在调节 SiC/Al 界面上 C、Si 的占位情况后, 界面富 Si 的条件下结合更强, 孔隙产生的难度增大从而对 SiC/Al 复合材料产生强化作用。

关键词: SiC/Al 复合材料; 分子动力学; 拉伸变形; 力学性能; 影响机理

中图分类号: TB333

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2023)01-0139-06

铝合金因其密度低, 强度高, 易于加工处理等优良性质而被广泛用作基体金属^[1]。对其进行颗粒增强是获得高性能铝基复合材料的重要手段, 其中以 SiC 颗粒增强最具代表性^[2-5]。SiC/Al 复合材料具有优异的物理化学性能, 作为一种轻质高强材料, 具有高比强度、比刚度、比模量, 良好的导热性, 低膨胀、低密度, 尺寸稳定性好等优异性能^[6-10]。同时, SiC/Al 复合材料的制造工艺具有设备简单、成本低, 可批量生产、且可用常规金属加工方法(粉末冶金、铸造、挤压、轧制锻造、旋压)制造各种形状复杂的零件和型材的特点^[11], 因此被广泛用于航空航天及军事领域(激光反射镜、卫星太阳能反射镜, 以及第 3 代航天惯性器件材料等)、汽车工业民用领域(自行车车架、汽车活塞、轴承、火车刹车块等)、精密结构及电子封装领域(金属镜光学系统如红外探测器、空间激光镜等)^[12-14]。

SiC/Al 复合材料凭借其优异的性能, 被全世界广泛关注, 并迅速地实现产业化应用^[15-17]。1985 年美国将该复合材料确立为继铝合金、钛合金之后的第 3 代航天惯性器件材料。1987-1988 年, 美国 ACOM 公司与亚利桑那大学光学研究中心合作, 将 SiC/Al 复合材料用于激光反射镜、卫星太阳能反射镜、空间遥感器中扫描用高速摆镜等; 英国航天金属基复合材料公司(AMC)

的 SiC/Al 复合材料, 已成功应用于法国 Eurocopter 公司生产的 EC-120 新型民用直升机^[18]; 美国 DWA 公司的 SiC/6061Al 复合材料仪表支架已用于 Kcheed 飞机上的电子设备。中国从 20 世纪 80 年代中期开始金属基复合材料的研究, 如北京有色金属研究总院、哈尔滨工业大学、北京航空材料研究院、上海交通大学、中科院金属研究所等。SiC/Al 复合材料作为一类应用广泛的铝基复合材料, 使用需求由最初追求单一性能提高逐步发展为高强韧化与结构功能一体化^[19], 但材料本身较低的塑性限制了其二次加工与进一步推广。

随着超级计算机的计算能力和访问技术的迅速提高, 材料模拟仿真在材料设计领域得到越来越广泛的应用^[20-21], 它能够直接从原子尺度预测材料的性能, 为新合金的实验开发和设计提供理论指导。本研究以 SiC/Al 复合材料为研究对象, 利用分子动力学计算方法模拟 SiC/Al 复合材料的拉伸过程, 获取 SiC 颗粒的粒径、与 Al 基体界面处原子排布对复合材料力学性能的影响规律, 从原子尺度揭示 SiC 粒径、界面润湿对拉伸过程的影响, 为 SiC/Al 复合材料的设计提供理论基础。

1 计算方法及原胞构建

收稿日期: 2022-01-04

基金项目: 国家电网公司科技指南项目(SGZJ0000KXJS2100125)

作者简介: 何卫, 男, 1986 年生, 博士, 高级工程师, 国网电力科学研究院武汉南瑞有限责任公司, 湖北 武汉 430074, E-mail: hewei7@sgepri.sgcc.com.cn

本研究主要采用分子动力学方法，模拟使用的计算软件为美国 Sandia 国家实验室开发的 Large-scale Atomic Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS)^[22-25]。在分子动力学模拟 (molecular dynamics, MD) 中，势函数是用来描述原子间相互作用关系的函数，原子间的相互作用行为取决于原子间的相互作用势。这种势就相当于作用在该体系中的力场一样，决定着体系中粒子的受力情况，势函数的选取与模拟结果准确性密切相关。由于 SiC/Al 复合材料体系较为复杂，本研究针对弹性常数、体积模量以及泊松比等物理量进行计算与对比，以验证所选势函数的准确性。

对于 Al-Al 之间的相互作用，采用经典的 EAM 势进行描述，EAM 势是由 Daw 和 Baskes^[26-27]基于准原子理论和有效介质理论建立起来的理论方法，其基本思想是将系统中的每一个原子都看作为嵌入在由其它原子组成的基本晶格中的客体原子。在 EAM 中^[28]，系统的总能量由式 (1) 给出：

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

式中， $F_i(\rho_i)$ 是原子 i 的嵌入能， ϕ_{ij} 是原子 i 和 j 之间的短程两体势函数， ρ_i 是在原子 i 处由其它原子贡献的电子云密度之和， r_{ij} 是原子 i 和 j 之间的距离。根据线性叠加近似，总电子密度 ρ_i 由下式给出：

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

式中， f_j 是 j 原子的电荷密度。对于 Al-Al 间相互作用，需得到 2 个势函数，即 $F_{Al}(\rho)$ 和 $\phi_{AlAl}(r)$ 。金属 Al 晶格常数、弹性常数、体积模量和泊松比等计算结

果见表 1。

此外，选取 Tersoff 作用势对 SiC 体系进行探究，对应的理论与计算的力学性能计算结果见表 2。由 Tersoff 作用势产生的结果与实验相近，这验证了所选势函数的准确性。Tersoff 原子间相互作用势函数一般用来模拟具有复杂结构和能量的共价体系^[29]，目前广泛用于研究 Si、C、Ge 及其化合物断裂、非晶转变、离子辐照缺陷等^[30-31]，可表示为：

$$E = \sum_i E_i = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij} \quad (3)$$

$$V_{ij} = f_c(r_{ij})[f_R(r_{ij}) + b_{ij}f_A(r_{ij})] \quad (4)$$

式中，势能被分解为位能 E_i 和 i, j 原子的成键能 V_{ij} ， r_{ij} 是原子 i 和 j 之间的距离， f_A 和 f_R 分别是吸引和排斥对势， f_c 是平滑截止函数， b_{ij} 是吸引势系数项^[32]。

对于 Al-SiC 之间的相互作用，采用 Morse 势进行处理，具体参数见表 3。Morse 势是根据双原子分子的振动谱提出的，是除谐振子势、库伦势等外，另一个严格可解的势函数^[33]。Morse 势的一般形式为：

$$V = D_0 \left[e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2e^{-\alpha(r-r_0)} \right] \quad (5)$$

式中，Morse 势参数 D_0 、 α 和 r_0 可根据晶格常数、结合能、压缩比 (或体变模量) 来确定， r 为原子间距离。迄今为止，Morse 势在研究合金的结构稳定、金属或合金中原子间相互作用以及金属元素与 C 原子之间的相互作用等方面取得了巨大成功。

本研究构建了 SiC/Al 代表性体积元模型，通过在 Al 立方体结构的中心位置放置 SiC 球形颗粒实现，其

表 1 纯 Al 体系力学性能的理论计算 (EAM 作用势)

	Lattice constant/ $\times 10^{-1}$ nm	Elastic constant/GPa			Volume modulus/GPa	Poisson's ratio
		C_{11}	C_{12}	C_{44}		
MD	4.05	116.22	70.28	33.71	84.18	0.31
Experiment	4.05	114	61.9	31.6	79	0.33

表 2 SiC 体系力学性能的理论计算 (Tersoff 作用势)

	Lattice constant/ $\times 10^{-1}$ nm	Elastic constant/GPa			Volume modulus/GPa	Poisson's ratio
		C_{11}	C_{12}	C_{44}		
MD	4.35	415.71	112.79	243.75	176	0.21
Experiment	4.36	352	140	233	164	0.17

表 3 Al-SiC 体系 Morse 作用势参数的选取

	D_0/eV	$\alpha/\times 10 \text{ nm}^{-1}$	$r_0/\times 10^{-1} \text{ nm}$
Al-Si	0.4691	1.738	2.246
Al-C	0.4824	0.1322	2.920

结构示意图如图 1 所示。fcc 的 Al 基体和 β -SiC 增强相晶格常数分别为 0.405 和 0.436 nm。对于复合材料体系，使用 $50 \times 50 \times 50$ 的 Al 扩展晶胞，为边长呈 20.25 nm 的立方体，该结构中包含 Al 原子数 500 000 个。构建边长为 11.77 nm 的 $27 \times 27 \times 27$ 的 SiC 扩展晶胞，晶胞中含

有 157 464 原子。之后在 Al 扩展晶胞中分别去除 4、6、8、10 nm 的球体，并在构建的 SiC 晶胞中取对应尺寸的球形颗粒放置进 Al 基体中。SiC 与中间含球形空间的 Al 基体均在 0 K 下进行充分结构弛豫，使颗粒内、外表面处原子达到平衡状态。

2 分析与讨论

为了更准确地描述 SiC 颗粒对 Al 基复合材料力学性能的影响关系，本研究选取 4 种不同 SiC 粒度的复合材料进行单轴拉伸模拟，并绘制出图 2 所示的应力-应变曲线。曲线分为 2 个阶段：第 1 阶段为弹性变形阶段，在此阶段，应力与应变呈线性变化；第 2 阶段为塑性变形阶段，达到屈服点（本研究中屈服强度和抗拉强度保持一致）后，开始塑性变形，应力先下降，后呈锯齿波状的屈服变形（本研究未考虑更为复杂的断裂阶段）。从图中可以看出，随着被嵌入的 SiC 粒径减小，

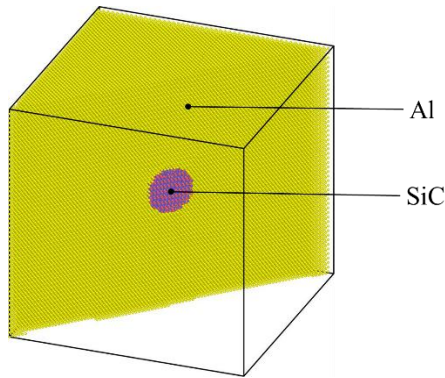


图 1 SiC/Al 计算模拟超胞构建示意图

Fig.1 Schematic diagram of SiC/Al computational simulation supercell construction: SiC particle size is 4 nm (the color is determined by the atom type, yellow is Al atom, red is C atom, and blue is Si atom)

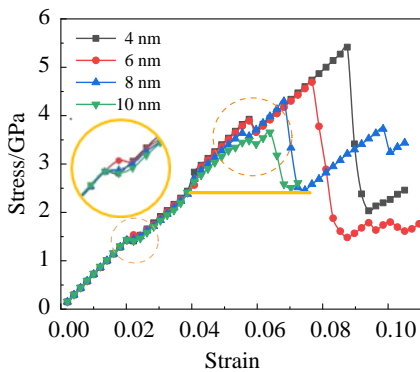


图 2 不同 SiC 粒度下的 SiC/Al 复合材料应力-应变曲线

Fig.2 Stress-strain curves of SiC/Al composites with different SiC particle sizes

弹性变形阶段曲线的斜率缓慢升高，这说明复合材料的弹性模量提高。因此，SiC 粒径尺寸会影响材料的弹性模量，且影响程度较小。

表 4 列出了不同 SiC 粒径下的 SiC/Al 复合材料的力学指标计算结果。当 SiC 粒径为 4、6、8、10 nm 时，复合材料的抗拉强度分别为 5.4、4.7、4.3、3.7 GPa，断裂应变分别为 8.75%、7.67%、6.82%、6.39%。即随着 SiC 粒径的增大，抗拉强度降低，表明其抵抗塑性变形的能力下降。

对比图 2 中不同 SiC 粒径的 SiC/Al 复合材料应力-应变曲线可以发现，在弹性阶段均有 2 次明显的下降过程。为了解释该下降过程的形成原因，本研究观察了塑性变形开始前后 SiC/Al 体系的原子结构，如图 3 所示。在弹性阶段，SiC/Al 接触面在垂直拉伸方向处分离，形成孔隙缺陷，故认为图 2 中曲线第 1 次轻微下降是由于 SiC 与 Al 基体分离形成了第 1 个孔隙造成。随着拉应力的增加，SiC 与 Al 基体间形成了第 2 个孔隙，导致了图 2 中应力-应变曲线的第 2 次下降，随后应力继续增加，孔隙缺陷处形成位错形核并向基体内扩展，材料变形开始由弹性变形阶段转向塑性变形阶段。因此，SiC 颗粒与 Al 基体接触面上孔隙的形成是导致复合体系曲线在弹性阶段轻微下降的原因，同时也是材料开始塑性变形的起始位置。

经过上述分析发现，拉伸条件下 SiC 与 Al 基体之间分离产生的孔隙是该复合材料塑性变形的起始点，因此提升 SiC/Al 复合材料抗拉强度的关键在于改善 SiC 与 Al 基体间的结合性。据文献报道^[34]，SiC 中 Si 与 Al 的结合要强于 C 和 Al 的结合，故对 SiC 颗粒最外层 0.1 nm 内的 Si 和 C 原子进行置换，形成如图 4 所示表层全是 Si（富 Si 模型）或者 C（富 C 模型）的颗粒，基于该模型，需要通过拉伸模拟来对比分析不同表面润湿下 SiC 颗粒对复合材料力学性能的影响。

首先选取 SiC 粒径为 6 nm 的复合材料体系，其拉伸模拟结果如图 5a 所示。对比 SiC 表层富 C 模型和富 Si 模型的应力-应变曲线可以发现，弹性模量均比较接近，即在系统模拟的环境条件相同时，界面结构对弹性

表 4 不同 SiC 粒径下 SiC/Al 复合材料的抗拉强度和断裂应变

Table 4 Tensile strength and fracture strain of SiC/Al composites

with different SiC particle sizes		
Particle size/nm	Tensile strength/GPa	Fracture strain/%
4	5.4	8.75
6	4.7	7.67
8	4.3	6.82
10	3.7	6.39

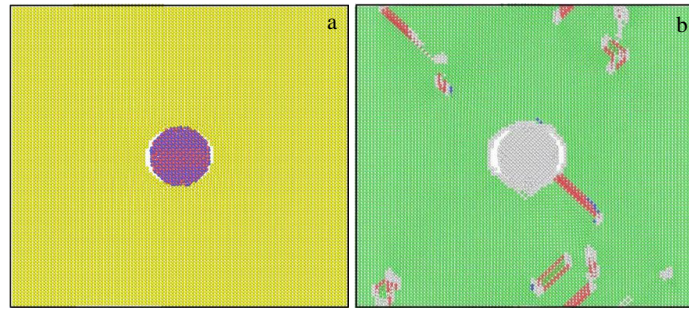


图 3 塑性变形前后 SiC/Al 复合材料 (SiC 粒径=4 nm) 的原子示意图

Fig.3 Atomic schematic diagram of SiC/Al composites (SiC particle size=4 nm) before and after plastic deformation: (a) elastic stage and (b) plastic stage (the color of the atoms in Fig.3b is determined by the Common neighbor analysis index. green is the fcc structure, blue is the bcc structure, red is the hcp structure (here is the dislocation position), and gray is other structures)

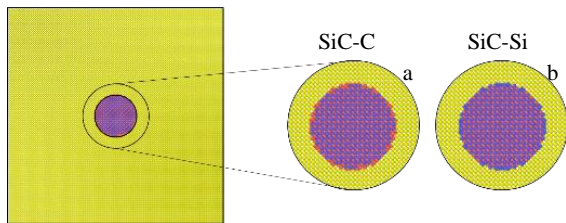


图 4 SiC 表层富 C 模型和富 Si 模型 (SiC 粒径=6 nm) 的原子示意图

Fig.4 Schematic diagram of atoms of C-rich (a) and Si-rich (b) models of SiC surface layer (SiC particle size=6 nm)

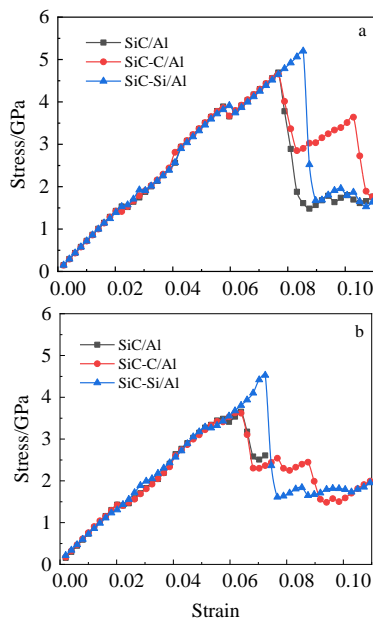


图 5 置换 Si 和 C 原子前后 SiC/Al 复合材料的应力-应变曲线

Fig.5 Stress-strain curves of SiC/Al composite before and after replacing Si and C atoms: (a) SiC particle size of 6 nm and (b) SiC particle size of 10 nm

模量的影响不大。此外,相比于初始结构,富 C 模型下 SiC/Al 复合材料的抗拉强度并没有显著提高;在富 Si 模型中,通过加强 SiC 与 Al 之间的结合,从而增大了二者分离形成孔隙的难度,材料的抗拉强度从 4.7 GPa 提升至 5.2 GPa。究其原因,Al 直接与 SiC 中 Si 原子接触会比与 C 原子接触展现出更高的拉伸强度,也就是对于 SiC/Al 复合材料,可以通过形成 SiC 表层富 Si 模型来增强 Al 与 SiC 间的结合,从而提高材料整体的抗拉强度。为了更好地检验这一结论的准确性,本研究再次选取了粒径为 10 nm 的 SiC/Al 复合材料体系,观察 2 种模型对材料力学性能的影响。结果发现 10 和 6 nm 的情况保持一致,富 Si 模型对体系的力学性能有较好的改善效果,最终将抗拉强度从 3.7 GPa 提升至 4.5 GPa,与前述结论一致。

3 结论

1) 通过对体系弹性常数、体积模量以及泊松比等物理量的计算充分验证了所选势函数的准确性。

2) 基于所选的势函数,对 SiC/Al 复合材料体系进行拉伸模拟分析,发现 SiC 粒径越小,复合材料的抗拉强度越大。随着拉伸形变的增加,首先在 SiC 颗粒沿拉伸方向的两侧发生 SiC 和 Al 基体间分离形成孔隙,之后由孔隙处形核产生位错并继续扩展,体系由弹性变形转变为塑性变形阶段。

3) 通过调整 SiC 和 Al 界面的润湿性,比较了 SiC 表层富 C 和富 Si 模型下的复合材料力学性能,结果表明 SiC 表层富 Si 模型因为界面结合强度更高,能更好地提升复合材料体系的抗拉强度。

参考文献 References

[1] Heinz A, Haszler A, Keidel C *et al.* *Materials Science and*

- Engineering A*[J], 2000, 280(1): 102
- [2] Miller W S, Humphreys F J. *Scripta Metallurgica et Materialia*[J], 1991, 25(1): 33
- [3] Quan Y M, Zhou Z H, Ye B Y. *Journal of Materials Processing Technology*[J], 1999, 91(1): 231
- [4] Cheng D F, Niu J T, Gao Z *et al. Modern Physics Letters B*[J], 2015, 29(6-7): 1 540 002
- [5] Bao Yongjie(鲍永杰), Zhu Xiaochun(朱晓春), Lu Shouxiang(卢守相) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2021, 50(3): 1084
- [6] Gnjjidi Z, Bozi D, Mitkov M. *Materials Characterization*[J], 2001, 47(2): 129
- [7] Roebuck B. *Journal of Materials Science Letters*[J], 1987, 6(10): 1138
- [8] Yousefi R, Kouchakzadeh M A, Rahiminasab J *et al. Advanced Materials Research*[J], 2011, 325: 393
- [9] Wu H B, Li J Z, Li D F *et al. Materials Science Forum*[J], 2019, 944(1): 571
- [10] Bathula S, Anandani R C, Dhar A *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2012, 545(30): 97
- [11] Sun F H, Li X K, Wang Y *et al. Key Engineering Materials*[J], 2006, 304-305: 261
- [12] Wei Shaohua(魏少华), Nie Junhui(聂俊辉), Liu Yanqiang(刘彦强) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2017, 46(11): 3464
- [13] Zhang F H, Wang K, Fu P Q *et al. Advanced Materials Research*[J], 2014, 1017: 98
- [14] Han Huihui(韩辉辉), Wang Aiqin(王爱琴), Xie Jingpei(谢敬佩). *Powder Metallurgy Industry*(粉末冶金工业)[J], 2015, 25(6): 66
- [15] Zhou Yanhua(周艳华). *Tool Engineering*(工具技术)[J], 2017, 4: 7
- [16] Xiang Junfeng(项俊锋), Xie Lijing(解丽静), Hu Xin(胡鑫) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2019, 48(5): 1687
- [17] Zhang Xiangzhao(张相召), Zhao Santuan(赵三团), Liu Guiwu(刘桂武) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2017, 46(10): 2812
- [18] Cui Y, Geng L, Yao Z K *et al. Journal of Materials Science & Technology*[J], 1997(3): 227
- [19] Sun Dazhi(孙大智), Xue Kemin(薛克敏), Wang Chengguo(王成国) *et al. Rare Metals and Cemented Carbides*(稀有金属与硬质合金)[J], 2016, 44(2): 64
- [20] Gu H, Jiao J W, Li Z. *International Journal of Materials Science and Applications*[J], 2016, 5(3): 151
- [21] Gu H, Gao X L, Li X C. *Journal of Computational & Theoretical Nanoscience*[J], 2009, 6(1): 61
- [22] Plimpton S J. *Journal of Computational Physics*[J], 1995, 117(1): 1
- [23] Plimpton S J. *MRS Bulletin*[J], 2012, 37(5): 513
- [24] Brown W M, Peng W, Plimpton S J *et al. Computer Physics Communications*[J], 2011, 182(4): 898
- [25] Brown W M, Kohlmeyer A, Plimpton S J. *Computer Physics Communications*[J], 2012, 183(3): 449
- [26] Daw M S, Baskes M I. *Physical Review Letters*[J], 1983, 50(17): 1285
- [27] Daw M S, Baskes M I. *Physical Review B*[J], 1984, 29(12): 6443
- [28] Du J P, Wang C Y, Yu T. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2012, 21(1): 15 007
- [29] Yan W J, Gao T H, Guo X T *et al. Science China Physics, Mechanics and Astronomy*[J], 2013, 56(9): 1699
- [30] Schaible M. *Critical Reviews in Solid State and Materials Science*[J], 1999, 24(4): 265
- [31] Fei G, Weber W J, Posselt M *et al. Physical Review B Condensed Matter*[J], 2004, 69(24): 1681
- [32] Tersoff J. *Phys Rev B Condens Matter*[J], 1989, 39(8): 5566
- [33] Dixit S, Mahata A, Mahapatra D R *et al. Composites Part B: Engineering*[J], 2018, 136: 63
- [34] Zhou Aihua(邹爱华), Zhou Xianliang(周贤良), Kang Zhibing(康志兵) *et al. Journal of Inorganic Materials*(无机材料学报)[J], 2019, 34(11): 1167

Influence of Particle Size and Interface Atom Adjustment on the Strength of SiC/Al Composite

He Wei^{1,2}, Wu Hao^{1,2}, Li Dege³, Wang Limin^{1,2}, Chen Shengnan^{1,2}, Yan Jiasi⁴, Xiao Wei⁴, Yang Hui⁴

(1. Nanrui Group Co., Ltd (State Grid Electric Power Research Institute Co., Ltd), Nanjing 211106, China)

(2. Wuhan NARI Limited Liability Company, State Grid Electric Power Research Institute, Wuhan 430074, China)

(3. China Electric Power Research Institute Co., Ltd, Beijing 100192, China)

(4. State Key Laboratory of Nonferrous Metals and Processes, GRINM Group Co., Ltd, Beijing 100088, China)

Abstract: As a kind of light and high strength material, SiC/Al composite has been widely concerned because of its excellent physical and chemical properties. In this study, molecular dynamics methods were used to construct SiC/Al composite material models with different SiC particle sizes. The results of tensile deformation simulation show that smaller SiC particle size is beneficial to higher tensile strength. As the tensile deformation gradually increases, the SiC particles are separated from the Al matrix on both sides along the tensile direction to generate voids, and then dislocations are generated from the void defects to nucleate and expand into the matrix to form plastic deformation. After adjusting the occupancy of C and Si on the SiC/Al interface, it is found that the bonding is stronger when the interface is rich in Si, and the generation of voids is more difficult, which strengthens the SiC/Al composite material.

Key words: SiC/Al composite; molecular dynamics; tensile deformation; mechanical properties; influence mechanism

Corresponding author: He Wei, Ph. D., Senior Engineer, Wuhan NARI Limited Liability Company, State Grid Electric Power Research Institute, Wuhan 430074, P. R. China, E-mail: hewei7@sgepri.sgcc.com.cn