

文章编号: 2095-2163(2020)05-0259-04

中图分类号: O469

文献标志码: A

冷却速率对3D打印模具钢拉伸性能影响的分子动力学模拟

陈传波¹, 马芳¹, 罗一平¹, 张效迅², 林志雄²

(1 上海工程技术大学 机械与汽车工程学院, 上海 201620; 2 上海工程技术大学 材料工程学院, 上海 201620)

摘要: 冷却速率对3D打印模具钢力学性能的影响一直备受关注。利用分子动力学模拟研究三种冷却速率及三种含C量下Fe-Cx合金模具钢的单轴动态拉伸过程, 研究发现冷却速率对模具钢抗拉强度影响较小, 对弹性模量有一定影响, 随着冷却速率从3.5 K/ps升高到10.5 K/ps, Fe-C_{0.04}弹性模量从140.69 GPa减小到136.82 GPa。冷却速率为10.5 K/ps, 而含C量从0.028wt%升高到0.1wt%, 弹性模量从133.48 GPa升高到158.01 GPa, 峰值应变逐渐降低。

关键词: Fe-Cx合金; 单轴动态拉伸; 冷却速率; 分子动力学模拟

Molecular Dynamics Simulation of Effect of Cooling Rate on Tensile Properties of 3D Printing Die Steel

CHEN Chuanbo¹, MA Fang¹, LUO Yiping¹, ZHANG Xiaoxun², LIN Zhixiong²

(1 School of Mechanical and Automobile Engineering, Shanghai University of Engineering Science, Shanghai 201620, China;

2 School of Materials Engineering, Shanghai University of Engineering Science, Shanghai 201620, China)

[Abstract] The effect of cooling rate on the mechanical properties of 3D printing die steel has been receiving much attention. Molecular dynamics simulation was used to study the uniaxial dynamic stretching process of three cooling rates and three Fe-Cx alloy die steels containing C. It is found that the cooling rate has little effect on the tensile strength of the die steel and has a certain influence on the elastic modulus. With the cooling rate increasing from 3.5 K/ps to 10.5 K/ps, the elastic modulus of Fe-C_{0.04} is from 140.69 GPa. Reduced to 136.82 GPa. For the cooling rate of 10.5 K/ps, and the C content increased from 0.028 wt% to 0.1 wt%, the elastic modulus increased from 133.48 GPa to 158.01 GPa, and the peak strain gradually decreased.

[Key words] Fe-Cx alloy; uniaxial tension; cooling rate; molecular dynamics simulation

0 引言

模具钢在工业生产制造中应用广泛, 而3D打印技术是基于层层堆叠成形的新型制造技术, 该技术很好的解决了传统加工技术无法实现的复杂结构。金属材料的3D打印技术有很多: 直接金属激光烧结技术(DMLS)、电子束熔化成形技术(EBM)、选区激光烧结(SLS)和选区激光熔化(SLM)等。相较于SLS技术, SLM是SLS技术的一种延伸, 成型的精度和力学性能都有很大的提高。目前, 对模具钢3D打印的研究已经十分深入, 大多集中在打印工艺, Chen等研究了H13模具钢的打印参数进行了优化; Hitzler等对S316不锈钢的拉伸性能进行研究; Suryawanshi等研究18Ni300马氏体时效钢的组织 and 室温力学性能; Tian等研究了冷却速率对Ti-4Al-1.5Mn的力学的影响, 发现较高的冷却速率会导致较高的抗拉强度; Lin等对TiC增强316L不锈

钢进行研究, 发现冷却速率的增加会提高极限抗拉强度和显微硬度。宏观层面对模具钢的3D打印的工艺对组织性能的影响已有大量研究, 但在纳米尺度下, 大多研究单质金属的拉伸性能。

分子动力学模拟(molecular dynamics simulation, MDs)是建立在牛顿经典力学和力场的统计学计算方法。周继凯等研究了Fe-C合金在不同温度和应变率下的拉伸模拟; 闻鹏等研究了C原子对Fe-C合金拉伸性能的影响; 孙寅璐等进行了多晶面银纳米线拉伸形变分子动力学模拟; 袁玉全等进行了裂纹bcc铁拉伸与疲劳的分子模拟; You等对Fe-Cu-Ni三元合金进行了不同温度下的拉伸模拟; Li等对单晶bcc Fe纳米线在应变率和热环境影响下进行了拉伸行为的分子动力模拟。

本文通过对Fe-Cx合金体系单轴动态拉伸模拟过程, 分析C含量和冷却速率对其动态拉伸性能

基金项目: 上海工程技术大学研究生创新项目(E3-0903-18-01165)。

作者简介: 陈传波(1993-), 男, 硕士研究生, 主要研究方向: 金属3D打印分子模拟; 马芳(1977-), 女, 博士, 副教授, 主要研究方向: 3D打印材料及应用研究。

通讯作者: 马芳 Email: mf1505@126.com

收稿日期: 2019-11-26

的影响。为3D打印模具钢不同冷却速率拉伸性能提供依据。

1 计算模型与方法

1.1 模型建立

模拟中的Fe晶体结构为体心立方结构(bcc),晶格常数为 $a_0 = b_0 = c_0 = 2.863 \text{ \AA}$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ 。Fe-Cx合金是通过对单晶Fe进行随机掺杂,晶胞大小为 $20 a_0 \times 12 a_0 \times 12 a_0$,如图1是Fe-Cx合金体系。笛卡尔坐标系x, y, z轴分别对应晶体的[100]、[010]、[001]晶向。模拟过程中,体系采用周期性边界。

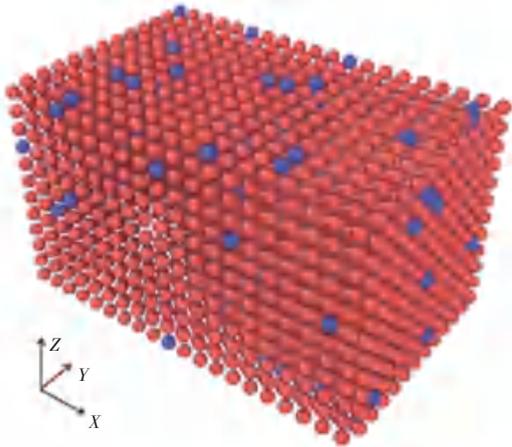


图1 Fe-Cx合金体系模型

Fig. 1 Model for Fe-Cx alloy

1.2 工况设计

由于体系属于纳米尺度的下拉模型,使得应变率比实验中高出几个数量级^[1]。本文采用的应变率为 $2 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 。冷却速率从小到大大分别为3.5 K/ps, 7 K/ps和10.5 K/ps。含C量从小到大分别为0.028wt%, 0.04wt%, 0.1wt%。

1.3 模拟过程

使用LAMMPS软件模拟单轴动态拉伸,模拟的时间步长为0.001 ps,先将体系温度保持在2100 K,在nvt系综下弛豫10 ps,在npt系综下,分别采用不同的冷却速率进行降温,直到降到5 K,并在5 K温度下弛豫30 ps。最后对弛豫后的模型沿x轴方向均匀拉伸模拟,直到模拟试样拉断为止。模拟过程

每隔0.1 ps输出体系的应变应力等参数。

1.4 势函数及分析方法

嵌入原子势EAM(Embedded Atom Method)是金属体系中广泛使用的多体势,其基本思想是把晶体的总势能分为多体中原子核,嵌入在电子云中的嵌入能和原子间相互作用的对势,其表达式(1)为:

$$E = \sum_i F_i \left[\sum_{j \neq i}^n \rho_j(r_{ij}) \right] + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \phi_{ij}(r_{ij}) \quad (1)$$

式中, E 为势能, F_i 为原子 i 的嵌入能, ρ_j 为原子 i 处的电子云密度,原子 j 是与原子 i 相邻的原子, r_{ij} 和 ϕ_{ij} 是原子 i 和原子 j 之间的距离和对势。本文使用的势函数是Hepburn修正后的EAM嵌入势,该势函数很好的描述了Fe和C之间的相互作用^[2]。

多面体模板匹配(Polyhedral Template Matching, PTM)也可以分析材料结构的变化^[3],本文采用了OVITO软件提供的PTM进行拉伸过程的原子结构分析。

2 结果与讨论

2.1 应力-应变曲线

Fe-Cx合金模型在不同的冷却速率及不同C含量的应力应变曲线,如图2所示。

从图2可以得出,在不同冷却速率和不同C含量下,Fe-Cx合金的拉伸应力-应变曲线的变化趋势都大致相似,可以将其分为三个阶段。

第一阶段为弹性形变阶段,拉伸的应力-应变曲线呈线性关系;第二阶段为屈服形变阶段,应力应变呈非线性关系,产生塑性变形;第三阶段为断裂形变阶段,应力随着应变增加而减小,直至发生断裂。Fe-Cx合金力学性能参数如表1所示。

从图2及表1可以看出,随着冷却速率从3.5 K/ps升高到10.5 K/ps,Fe-C_{0.04}弹性模量从140.69 GPa减小到136.82 GPa;对于冷却速率为10.5 K/ps,而含C量从0.028wt%升高到0.1wt%,弹性模量从133.48 GPa升高到158.01 GPa,峰值应变逐渐降低;屈服强度对冷却速率及C含量不敏感,范围大致在17.57~18.19 MPa;这也正反映了C含量的增加会导致脆性断裂。

表1 不同冷却速率下Fe-Cx合金的弹性模量及峰值应变

Tab. 1 Elastic modulus and peak strain of Fe-Cx alloy at different cooling rates

冷却速率 K/ps	弹性模量/GPa			峰值应变		
	0.028wt%	0.04wt%	0.1wt%	0.028wt%	0.04wt%	0.1wt%
3.5	134.49	140.69	157.75	0.224 4	0.214 2	0.163 2
7	133.89	135.52	156.64	0.234 6	0.224 4	0.183 6
10.5	133.48	136.82	158.01	0.193 8	0.224 4	0.183 6

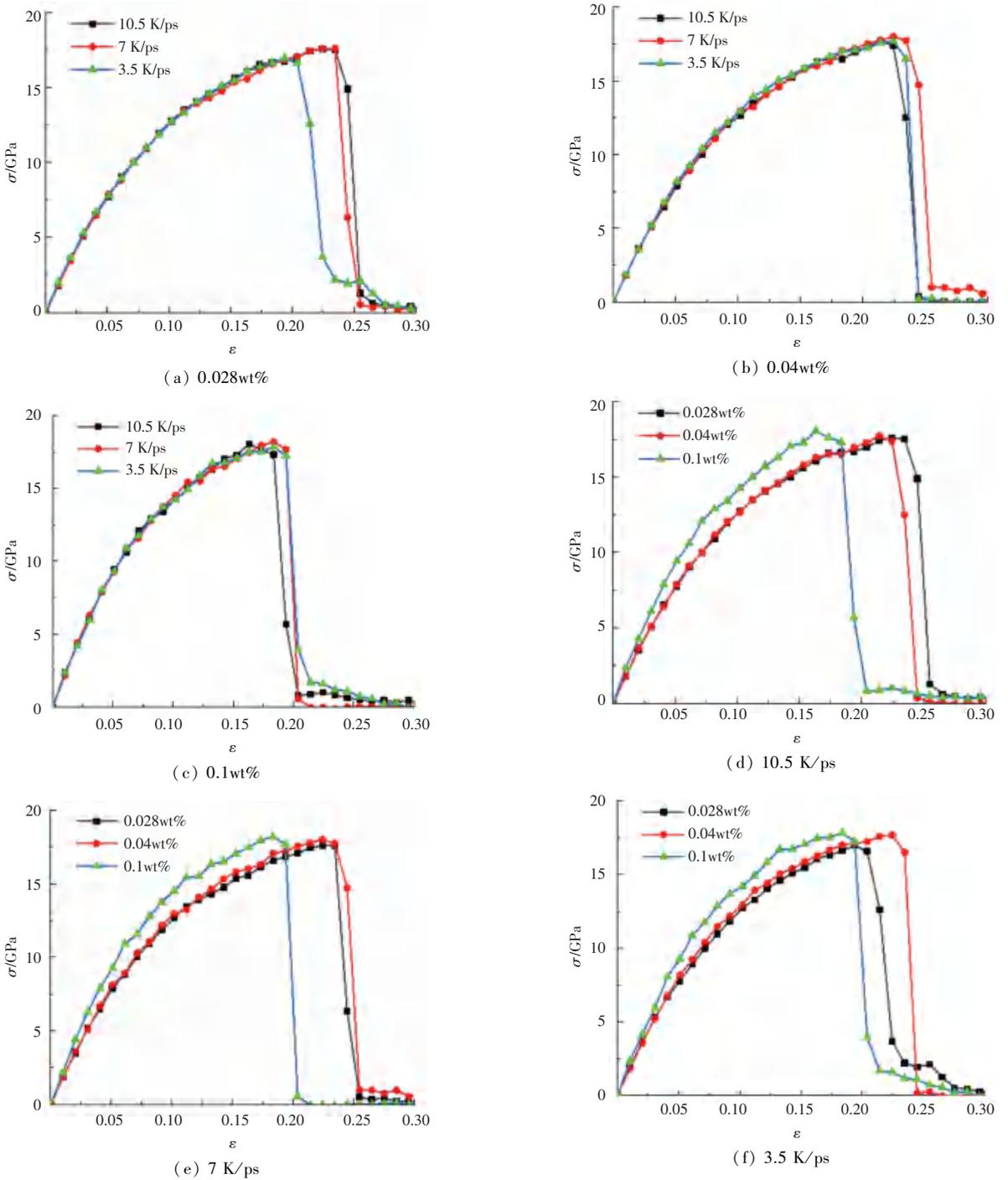


图 2 Fe-Cx 合金在不同冷却速率下的应力-应变曲线

Fig. 2 Stress-strain curves of Fe-Cx alloys at different cooling rates

2.2 原子结构演化

为了进一步对动态拉伸过程中原子结构的转变进行研究,采用 OVITO 软件对 Fe - C_x 合金体系进行 PTM 分析。图 3 是合金体系经过 2100 K 降温到 5 K 的冷却体,应变率为 2×10^9 s 条件下 Fe-C_{0.04} 合金恒温体模型在沿 x 轴动态拉伸过程中不同阶段的

原子结构图。

图 4 相较于图 3,区别是保持体系温度在 5K 的恒温体。其中灰白色、蓝色、绿色和红色分别代表 other(无序)、bcc(体心立方)、fcc(面心立方)、hcp(密排六方)、ico(二十面体协调)和 sc(简单立方)原子结构。

从图2的应力-应变曲线可知,当Fe-C_{0.04}冷却体合金体系应变为6.12%、10.20%及16.32%时,分别处于拉伸过程中的弹性形变阶段、屈服形变阶段和断裂形变阶段。从图3可以观察到,冷却体从弹性形变到屈服形变阶段,原子结构大部分都是hcp结构;随着应变的增加,出现了无序原子结构并逐渐增多,直到拉伸断裂。

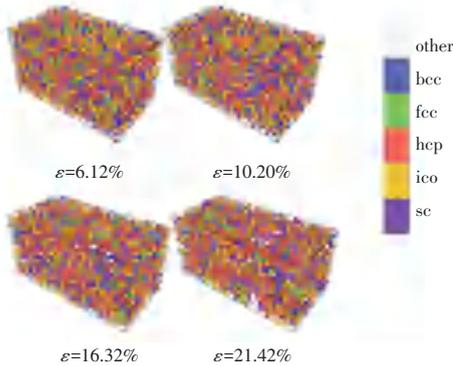


图3 冷却体原子结构演化图

Fig. 3 Evolution of the atomic structure of the cooling body

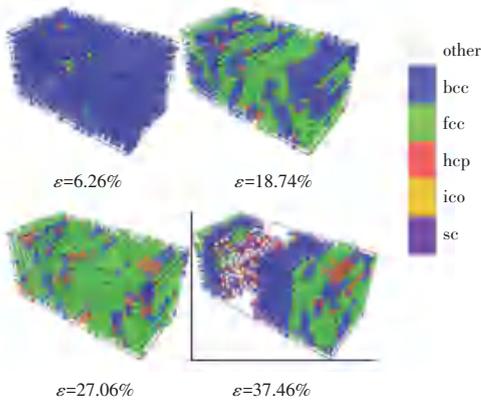


图4 恒温体原子结构演化图

Fig. 4 Atomic structure evolution diagram of thermostatic body

从图4可以看出,作为恒温在5 K温度下的Fe-C_{0.04}合金体系,在弹性形变阶段,主要原子构成为bcc结构和少量hcp结构,随着应变的增加,在C原子周围出现了fcc结构;在屈服形变阶段,bcc结构快速减少,fcc迅速增多;直到体系发生断裂形变,在断裂位置出现sc结构和无序原子,bcc结构快速增多,fcc结构迅速减少。

3 结束语

本文运用分子动力学模拟了不同冷却速率及C含量的Fe-C_x合金体系的单轴动态拉伸过程,对合金拉伸形变过程进行了研究,结论如下:

(1)随着冷却速率从3.5 K/ps升高到10.5 K/ps,Fe-C_{0.04}弹性模量从140.69 GPa减小到136.82 GPa。冷却速率为10.5 K/ps,含C量从0.028wt%升高到0.1wt%,弹性模量从133.48 GPa升高到158.01 GPa,峰值应变逐渐降低。屈服强度对冷却速率和C含量不敏感,范围大致在17.57~18.19 MPa之间。

(2)在掺杂C原子的Fe-C_x合金体系中,经高温2100 K冷却到低温5 K的冷却体,hcp结构占主体。对于温度保持在5 K的恒温体,主体结构为bcc结构,随着应变力的增加,bcc结构转变为fcc/hcp结构,直到拉断后,再次转变为bcc结构。

参考文献

- [1] 周继凯,朱清华. Fe-C合金动态拉伸力学性能温度和应变率效应分子动力学[J]. 科学技术与工程, 2019, 19(11):66-71.
- [2] HEPBURN D J, ACKLAND G J. Metallic-covalent interatomic potential for carbon in iron[J]. Physical Review B, 2008, 78(16):165115.
- [3] LARSEN P M, SCHMIDT S, SCHIØTZ J. Robust structural identification via polyhedral template matching[J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2016, 24(5): 055007.

(上接第258页)

(2)学术问题交流。创立学术讨论组后,相关人员即可加入讨论组进行学术问题交流,还可以就学术问题发言、提出相关学术问题及上传相关学术文件等。

(3)浏览学术讨论专题。通过学术问题的交流,后期将学术讨论数据整理为学术条论专题模块。学术讨论后,用户仍可根据学术条论的关键词,进行检索,查找相关学术讨论内容及信息^[6]。

5 结束语

本文对基于学科文献资源共建共享平台的主要功能及实现进行了介绍。虽然目前国内的文献资源共享平台较多,但以学校的师生为主体,并能提供全面的文献、服务及学术讨论的文献共享平台却很

少,本平台的开发为高校更好实现智慧图书馆的建设贡献了力量,推进高校图书馆的服务水平迈向新的台阶。

参考文献

- [1] 郝素珍,张志军. 文献信息资源共建共享研究——以包头地区为例[J]. 中小企业管理与科技(下旬刊),2019(10):110-111.
- [2] 黄让辉. 数字图书馆资源共建共享研究[J]. 兰台内外,2019(19):39-40.
- [3] 刘红祥,贺冰新. 高职院校图书馆与公共图书馆的文献资源共享模式探究[J]. 传播力研究,2019,3(17):286-287.
- [4] 王娟. 大数据环境下军校图书馆个性化服务及信息资源的共享[D]. 南京邮电大学,2017.
- [5] 王雪莲,孔凡晶,刘万国,等. “双一流”大学图书馆学科数据分析工作调查研究[J]. 图书馆学研究,2019(10):68-74.
- [6] 李丽珊,王乐,黄晓斌,等. 基于课程的课后交流学习系统的设计与实现[J]. 智能计算机与应用,2017,7(2):102-104.