

基于分子动力学的纳米压痕虚拟仿真教学设计

杨 亮, 邓乔元, 战光辉, 林仕伟*

海南大学材料与工程学院, 海南 海口

Email: *linsw@hainanu.edu.cn

收稿日期: 2021年8月13日; 录用日期: 2021年9月9日; 发布日期: 2021年9月16日

摘 要

纳米压痕实验作为一种材料表面测试手段已经应用十分广泛, 但由于经费问题该实验项目很少能引入本科实验教学, 不利于新工科学生的能力的培养和素质的提高。为使学生了解纳米压痕实验, 采用Unity3D构造纳米压痕虚拟仿真仪器, 实现高交互仪器仿真和采用分子动力学算法引入铜的EAM嵌入原子势函数进行FCC结构铜单晶的微观纳米压痕仿真实验, 通过采集载荷-位移曲线和三维可视化原子位置的演化、原子受力等数据直观向学生展示了金属铜在压头作用下微观结构的变化。通过外推实验微观表面模型、实验测试条件和压头形状和尺寸, 可丰富实验教学内容、提高教学质量, 有利于培养学生的创新意识和探索精神。

关键词

纳米压痕实验, 虚拟仿真, 物理算法, 分子动力学, 实验教学

The Design of the Nano-Indentation Virtual Simulation Based on Molecular Dynamics Algorithm

Liang Yang, Qiaoyuan Deng, Guanghui Zhan, Shiwei Lin*

School of Materials Science and Engineering, Hainan University, Haikou Hainan

Email: *linsw@hainanu.edu.cn

Received: Aug. 13th, 2021; accepted: Sep. 9th, 2021; published: Sep. 16th, 2021

Abstract

Nano-indentation experiment has been widely used as a material surface testing method, but be-

*通讯作者。

cause of the financial problems, the experimental project can rarely introduce undergraduate experimental teaching, which is not conducive to the training of the ability and quality of new engineering students. In order to enable students to master nano-indentation technology, the virtual simulation instrument of nano-indentation is constructed by Unity3D software, the simulation of high interactive instrument and the micro-nano-indentation simulation experiment of FCC structure copper by introducing copper EAM potential function using molecular dynamics algorithm are realized, and the microstructure changes of metal copper under probe are shown visually by collecting data such as load-displacement curve and three-dimensional visual atomic position evolution and atomic force. By extrapolating the surface microscopic model, experimental test conditions and probe shape and size, it can enrich the experimental teaching content, improve the teaching quality, and plays an important role to cultivate students' innovative consciousness and exploration spirit.

Keywords

Nano-Indentation Experiment, Virtual Simulation, Physical Algorithms, Molecular Dynamics, Experimental Teaching

Copyright © 2021 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

随着材料科学的进步,材料科学研究尺度已经达到纳米级别,对材料物理化学性质的测试手段也已经发展到极高精度。电子显微镜、激光粒度仪、压汞仪等设备的广泛应用为材料微观结构表征提供了有效方法,纳米压痕仪因具有较高精度载荷和超高位移分辨率[1] [2]而成为材料力学测试的重要手段[3]。由于纳米压痕实验设备采购成本高,维护成本高和使用成本高等现实问题而不能大面积应用于本科学活动,根据“能实不虚,虚实结合”的实验教学设计原则,可以利用三维仿真技术和计算机交互技术实现真实仪器的虚拟仿真进行实验教学,引导学生熟悉纳米压痕测试方法、操作技巧和结果分析方法。

目前,纳米压痕实验微观机理仿真方法主要有限元法[4] [5]和分子动力学方法[6],分子动力学法可以避免有限元方法的不足,成为微观尺度下研究结构演化过程的有力辅助工具[7],已经应用于多种结构材料分析,如金属玻璃膜[8] [9]、金属块体[10] [11]、单层材料[12]、航天材料[13]和高分子材料[14]等,不断证明分子动力学方法模拟仿真实验的可行性、可靠性及实用性,已经成为材料表征的重要辅助手段。因此,利用分子动力学方法辅助纳米压痕虚拟仿真微观结构演化切实可行。

本文以 Unity3D 实现纳米压痕仪器仿真,包括设备的结构、操作方法及软件界面等,以实现与真实实验无异的操作体验。利用分子动力学方法对测试材料的微结构演化进行仿真,以辅助真实实验难以显现的微观结构变化,并提供不同结构虚拟测试样品和不同形状尺寸的压头,获得准确的载荷-位移曲线,以期达到虚实结合提高实验教学质量。

2. 实验过程仿真

本文以 Unity3D 软件结合 C# (Visualstudio2019 社区版)实现美国(Center for Tribology Inc.) APEX 型纳米压痕仪等比例仪器虚拟模型,可实现虚拟仪器的 360 度展示,可使用学生了解仪器的结构、实现开机、放样等虚拟操作。同时配合虚拟操作软件 UMT Multi-Specimen System 可进行虚拟 APEX 型纳米压痕仪

操作、测量及数据分析等操作，操作界面如图 1 所示，以低成本、零维护和无消耗的方式使用学生完成虚拟纳米压痕测量实验。



Figure 1. Instrument simulation and operation simulation interface. (a) Overall structure of the instrument; (b) Sample table of nano indentation instrument; (c) Operation interface of simulation software

图 1. 仪器仿真及操作过程仿真界面。(a) 仪器整体结构; (b) 纳米压痕仪样品台; (c) 仿真软件操作界面

3. 模拟方法

实验过程仿真仅会使学生停留在了解仪器、掌握测试技巧和分析数据方法层面，进行更深入的实验机理分析则需要借助基于物理算法的微观结构演化。因此，利用分子动力学方法实现纳米压痕实验微观结构的仿真被用来对实验仿真进行微观解释。

3.1. 微观模型构建

为了与真实纳米压痕实验测试方法相一致，虚拟仿真纳米压痕测试微观结构模型采用上下两部分，模型上半部分为真空层，真空层内放置纳米压痕压头，为防止压头与模型底面产生相互作用，压头上端与真空层上端大于 1 nm，压头下端与材料表面相接近。模型下端为测试材料层，由上表面至底面依次为

试验层和固定层，试验层原子数量众多，固定层原子在整个模拟过程中固定不动以模拟无限厚表面[15]，虚拟测试模型示意图如图 2 所示。

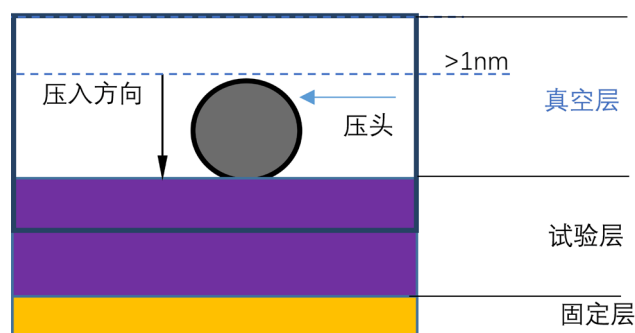


Figure 2. Structure diagram of micro simulation model

图 2. 微观模拟所设置的模型结构示意图

3.2. 微观仿真方法

为准确模拟纳米压痕实验，本文采用美国 Sandia 国家实验室开发的 LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)软件[16]进行面心结构(FCC)的金属铜的模拟仿真演示势函数采用嵌入原子势(EAM) [17]。LAMMPS 软件是大规模并行计算的开源分子动力学软件，可支持 CPU 和 GPU 进行大规模并行计算，已经在材料、物理、化学及生物等领域广泛使用[18]。嵌入原子势(EAM)可精确描述金属的结合能和原子的受力，在金属体系研究中被广泛使用，典型的 EAM 势函数中每个原子的能量由下式给出：

$$E_i = F_\alpha \left(\sum_{j \neq i} \rho_\beta(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{\alpha\beta}(r_{ij})$$

式中， F 是嵌入能，它是电子密度 ρ 的函数， ϕ 是原子之间的相互作用势， α 、 β 是分别代表原子 i 和 j 的原子类型。

仿真模型采用 FCC 相铜超胞模型，晶格常数取 0.36 nm，为提高计算效率和缩短模拟时间模型大小取 10.8 nm × 10.8 nm × 10.8 nm，固定层厚度取 0.72 nm，试验层厚度取 6.50 nm，真空层厚度为 3.61 nm，体系共计 72000 个铜原子。模拟纳米压痕实验过程采用周期性边界条件，模拟步长设置为 1 fs，首先模拟体系在 NPT 系综下进行 1 ns 结构弛豫，使体系的能量最低，消除内应力对模拟结果的影响，然后模拟过程采用 2.00 nm 的球形压头，压头下表面与试验层相切，上表面与模型下底距离超过 1 nm，下压速度沿 Z 负方向以 0.1 nm/fs 速度向下，每 0.5 ps 输出一次压头力(载荷)和压头位移(压入深度)，最终获得与真实实验相似的载荷-位移曲线，并每 1 ps 输出原子位置、原子受力数据以便观察压头压入过程中各原子的微观位置演化。

4. 实验数据仿真

4.1. 微观结构演化

目前，真实实验难以原位观察纳米压痕过程中测试材料的位错变化，而分子动力学方法在这方面具有先天优势[19]。将模拟输出的原子位置信息采用 OVITO (Open Visualization Tool)软件[20]进行三维动态可视化及采用位错分析方法 DXA (Dislocation Analysis) [21]可以动态实时显示单晶铜在压头作用下的位错产生、发展的变化过程，以此更好辅助纳米压痕实验教学，丰富实验内容，提高实验趣味性，同时为学生深入理解载荷-位移曲线的变化规律提供感性认识，典型纳米压痕过程中微观结构变形过程如图 3 所示；同时

OVITO 可视化软件支持 IMD (Interactive Molecular Dynamics) 协议[22], 可方便实现实时仿真结果的本地化三维显示, 减少模拟仿真等待时间, 增加教学的趣味性。该方法的深入讨论可加深学生对《固体物理》理论课程位错概念的理解, 引导学生做到知识的融汇贯通。

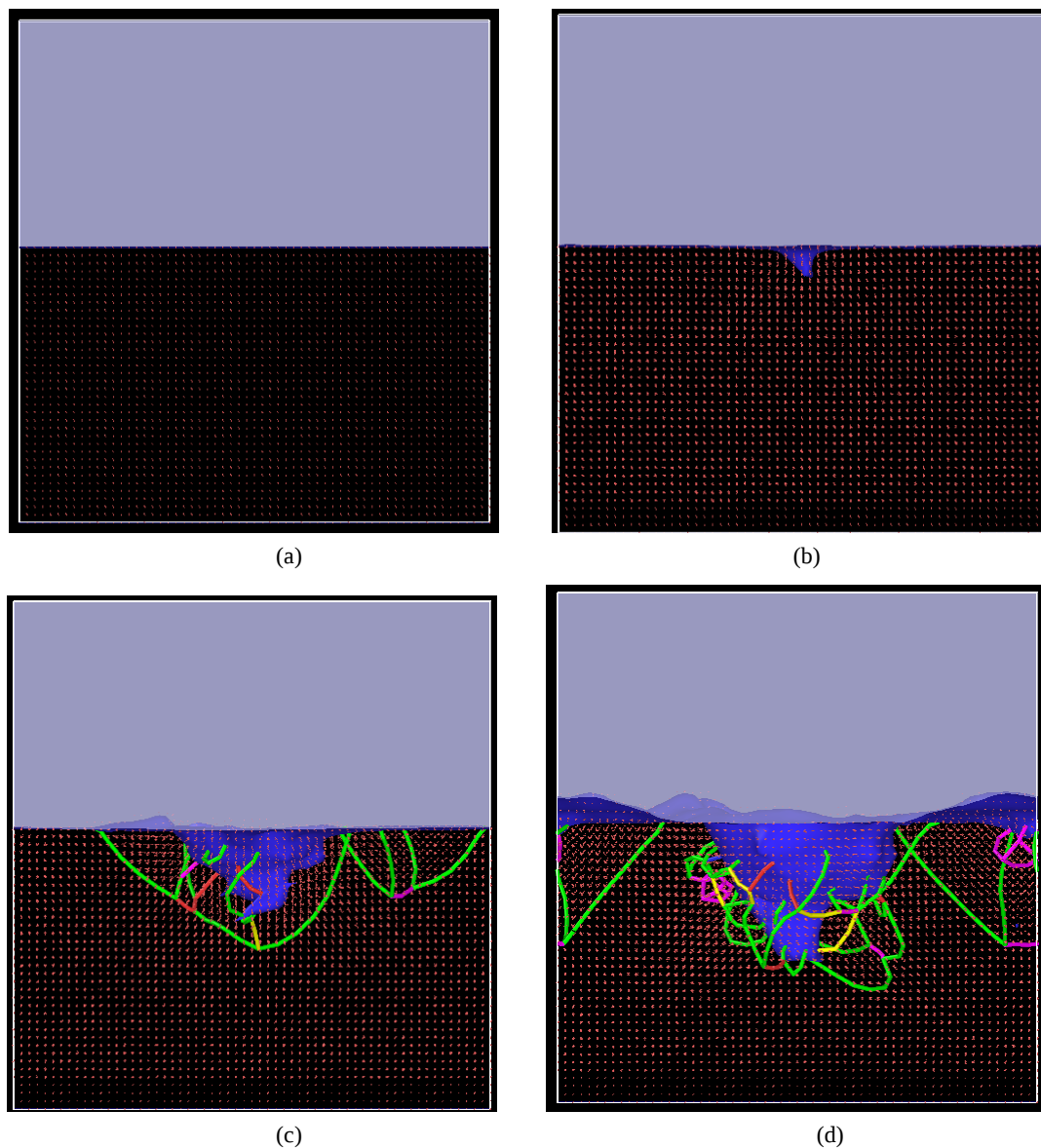


Figure 3. Microstructure deformation during nano indentation
图 3. 纳米压痕过程中微观结构变形过程

4.2. 载荷 - 位移曲线

建立在物理算法基础上的纳米压痕虚拟仿真实验获得的数据比基于经验公式和植入数据的虚拟实验更精确可信, 数据细节更加丰富, 通过改变仿真条件可获得更丰富的实验数据内容。由基于分子动力学模拟所获得的力 - 位移曲线(如图 4 所示)可以明显看出, 载荷在 60 nN 以下主要表现为塑性变形, 当载荷大于 60 nN 时 FCC 铜单晶开始出现滑移带并不断扩大, 与实验测量曲线形状相似, 可反映真实实验测量数据的内容供教学使用。

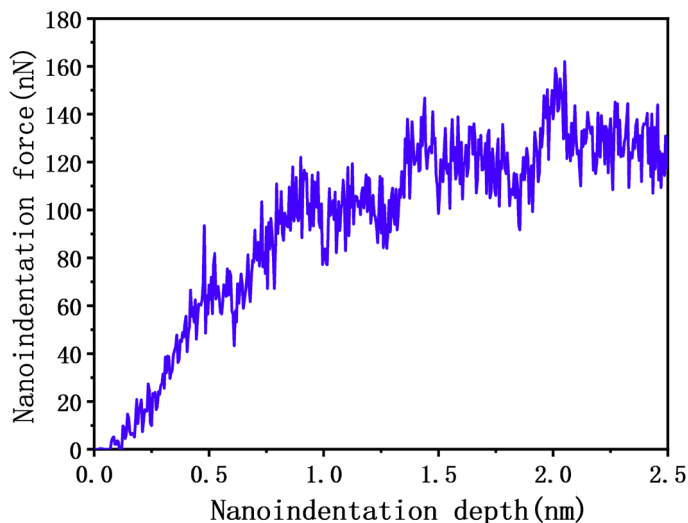


Figure 4. Variation of load with indenter depth

图 4. 载荷与压头深度的关系

4.3. 硬度曲线

真实纳米压痕实验可以用来测量材料的硬度信息[23],本虚拟实验基于载荷 - 位移数据采用如下方法近似计算材料的硬度信息, 纳米硬度 H 表示为

$$H = \frac{P}{S}$$

式中, P 表示所施加的载荷量, S 表示压头与表面之间的接触面积, $S = \pi(2R-h)h$, 其中, R 代表所用压头的半径, h 表示压头压入样品的深度。

基于分子动力学采用 2 nm 球形压头和载荷 - 位移曲线(如图 5 所示), 可以简单估计实验测量过程中不同压入深度铜的纳米硬度值, 经简单推算所得测量单晶铜的纳米硬度约为 11 GPa, 与文献[24]计算结果一致, 利用分子动力学方法进行虚拟仿真估算硬度也相对可靠, 用于教学具有可行性。

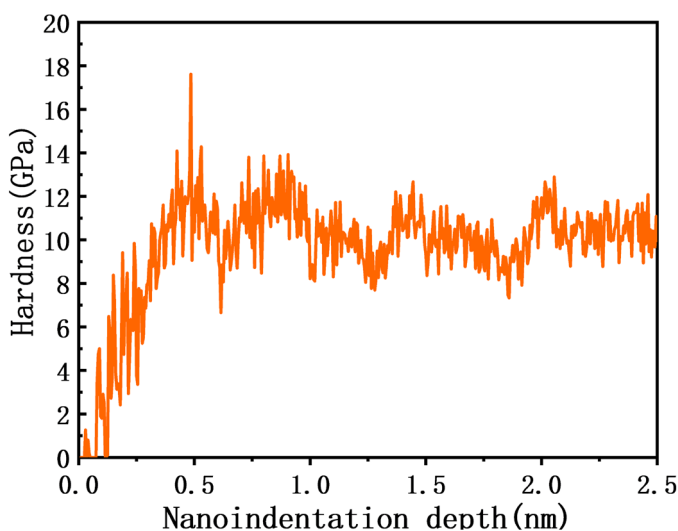


Figure 5. Variation of hardness with indenter depth

图 5. 硬度与压头深度的关系

5. 仿真实验拓展

5.1. 实验条件拓展

由于设备昂贵真实纳米压痕测试实验需要在标准实验室条件(常温常压)下进行,对不同温度条件样品进行原位测量几乎不可实现,不能满足学生对不同实验条件下纳米压痕实验的观察和测量,限制学生的创新。采用基于物理算法的虚拟实验尤其是基于分子动力学的纳米压痕虚拟仿真实验对于解决实验测量条件方面具有天然的优势,仅通过改变 NPT 系综的温度参数即可模拟预设实验条件下实验现象和结果,不但可丰富实验内容、提升教学质量也可提升学生的创新探索精神和学习兴趣。如图 6 所示,利用分子动力学算法可模拟在超低温(100 K)和超高温条件(1100 K)下的 FCC 结构铜晶体纳米压痕载荷 - 位移曲线。

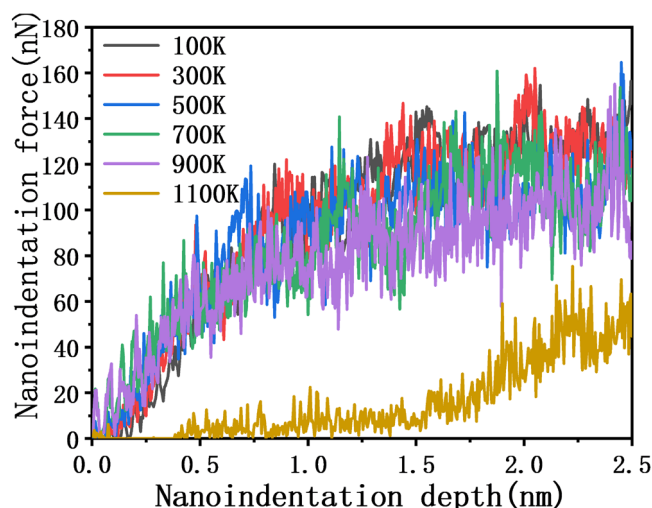


Figure 6. Force displacement curves of Cu crystal at different temperatures

图 6. 不同温度条件下 Cu 晶体的力 - 位移曲线

5.2. 实验测试样品拓展

纳米压痕实验测量数据对样品表面状态依赖较大,同种物质不同晶面或不同微观结构均可直接影响纳米压痕实验结果。限于实验经费及实验时长,真实纳米压痕实验仅可采用固定晶面或微观结构的样品进行实验测量,对比较不同结构的表面力学性质的测量比较难以实现。而虚拟实验教学恰好可弥补真实实验测量样品种类和数量的不足的缺点,利用 LAMMPS 软件包内在的建模型命令或第三方脚本可轻松构建实验所需特殊结构模型,如图 7 所展示典型的纳米压痕微观结构表面,利用 LAMMPS 内建命令构建的不同晶面指数的表面结构模型(如图 7(a)和图 7(b))、具有界面的表面微观结构(如图 7(c))、利用 Voronoi [25]可制备多晶表面结构(如图 7(d))、利退火算法制备的金属玻璃表面结构(如图 7(e))和,典型带缺陷的表面结构(如图 7(f))。以上典型表面结面结构的引入,不但丰富了实验内容,提高实验教学质量,也可培养学生的创新、创意思维,增加实验的理论深度和趣味性。

5.3. 压头形状拓展

纳米压痕实验压头种类繁多,有球形压头、锥形压头、维氏压头、玻氏压头、努氏压头、Wedge 压头等,不同形状的压头用于不同测量方法的纳米压痕测量试验。真实实验压头以球形和维氏压头为主, LAMMPS 可方便建立不同形状的压头供需虚拟教学使用,如图 8 所给出典型的球形压头和 136 度维氏压头模型。除压头形状方便改变外,还可以方便更改压头的尺寸,用于教学中展示不同形状压头和不同尺

寸压头对测量结果的影响，以弥补真实实验单一压头测试方法的不足。

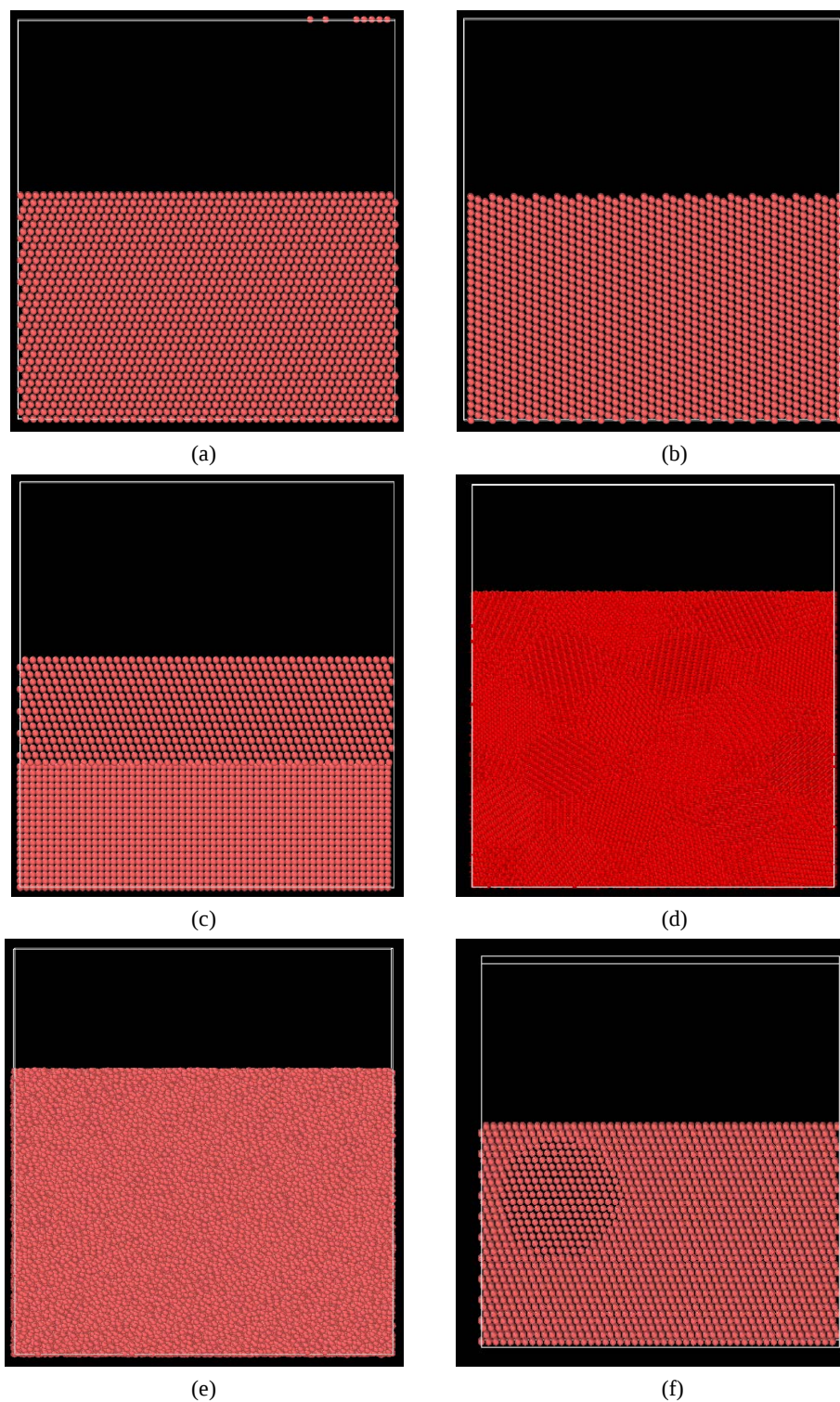


Figure 7. Microstructure of different samples in nano indentation experiment. (a) $[123]$ surface; (b) $[-1-12]$ surface; (c) Interface structure $[111]$ and $[001]$ surface; (d) Polycrystalline surface; (e) Metallic glass surface; (f) Defective surface

图 7. 纳米压痕实验不同样品的微观结构。(a) $[123]$ 表面；(b) $[-1-12]$ 表面；(c) 界面结构 $[111]$ 和 $[001]$ 表面；(d) 多晶表面；(e) 金属玻璃表面；(f) 具有缺陷表面

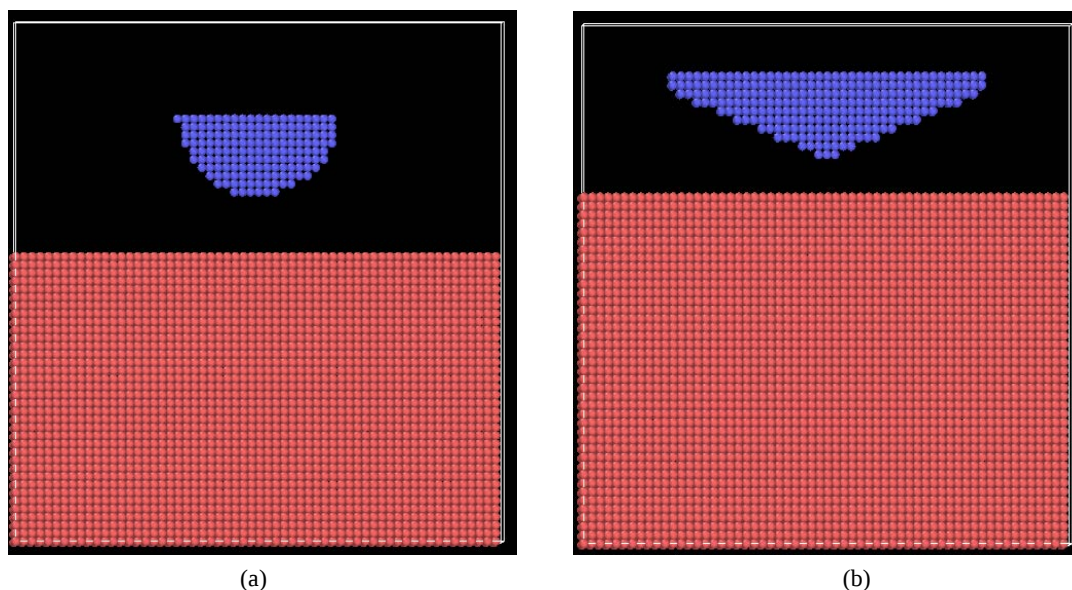


Figure 8. Simulated nano indentation virtual experiment measured with different indenter shapes. (a) Spherical indenter; (b) 136 degree conical indenter

图 8. 模拟纳米压痕虚拟实验采用不同压头形状进行测量。(a) 球形压头; (b) 136 度锥形压头

6. 结束语

遵循“科研反哺教学，教学促进科研”的虚拟教学实验设计原则，设计基于 Unity3D 的纳米压痕虚拟仪器操作实验和基于分子动力学的微观结构虚拟仿真实验，将纳米压痕实验引入本科实验教学，提高学生的动手能力、创新思维和实验与理论的融会贯通。采用 Unity3D 构造纳米压痕虚拟仿真仪器部分，实现高交互仪器仿真，可实现仪器结构仿真、操作过程仿真和数据分析仿真，使学生更深入了解纳米压痕实验的测量方法和数据分析方法；采用分子动力学算法引入铜的 EAM 嵌入原子势函数进行 FCC 结构铜单晶的微观纳米压痕仿真实验部分，直观向学生展示了金属铜在压头作用下微观结构演化和位错的产生和发展，可更深入理解载荷 - 位移曲线的内涵，通过外推实验微观表面模型、实验测试条件和压头形状和尺寸，可丰富实验教学内容、提高教学质量，有利于培养学生的创新意识和探索精神。

基金项目

海南省高等学校科学研究项目 (Hnjg2019-25, Hnjg2020ZD-4); 海南大学教育教学改革研究项目 (hdjy2004, hdjy1911)。

参考文献

- [1] 周海, 徐亚萌, 韦嘉辉, 沈军州, 冯晓雯. 基于纳米压痕的氧化镓不同晶面的蠕变特性[J/OL]. 硅酸盐学报: 1-7. <https://doi.org/10.14062/j.issn.0454-5648.20200474>, 2021-01-26.
- [2] 陈吉, 汪伟, 卢磊, 卢柯. 纳米压痕法测量 Cu 的室温蠕变速率敏感指数[J]. 金属学报, 2001, 37(11): 1179-1183.
- [3] 姬晓悦. 大型仪器设备开放共享平台纳米压痕仪的开放使用与维护[J]. 化工管理, 2018(34): 154-155. <https://doi.org/10.3969/j.issn.1008-4800.2018.34.099>
- [4] 支越, 方来旺, 王之哲, 罗宏伟, 王小强. 微型化器件中多晶 Cu 晶向排布对其受压力学特性的影响仿真研究[J]. 电子元件与材料, 2019, 38(8): 82-86.
- [5] Zamri, W.F.H., Kosasih, P.B., Tieu, A.K., Zhu, H. and Zhu, Q. (2013) Finite Element Modeling of the Nanoindentation of Layers of Porous Oxide on High Speed Steel. *Steel Research International*, **84**, 1309-1319. <https://doi.org/10.1002/srin.201300058>

- [6] Huang, J., Liu, Y., Yu, X., *et al.* (2020) Nano Mechanical Property Analysis of Single Crystal Copper Using Berkovich Nano Indenter and Molecular Dynamic Simulation. *Computational Materials Science*, **188**, Article ID: 110237. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.110237>
- [7] 翁盛槿, 陈晶晶, 胡洪钧. 纳米压痕诱导单晶铜弹塑性形变分析与破坏机理研究[J/OL]. 表面技术: 1-12. <http://kns.cnki.net/kcms/detail/50.1083.tg.20200826.1609.002.html>, 2021-01-26.
- [8] Wang, Y.C., Wu, C.Y., Chu, J.P., *et al.* (2010) Indentation Behavior of Zr-Based Metallic-Glass Films via Molecular-Dynamics Simulations. *Metallurgical and Materials Transactions A*, **41**, 3010-3017. <https://doi.org/10.1007/s11661-010-0358-4>
- [9] 操振华, 李平云, 陆海鸣, 孟祥康. 纳米压痕法测量纳米晶金属 Cu 薄膜力学性能的研究[J]. 南京大学学报(自然科学版), 2009, 45(2): 187-192.
- [10] Leng, Y., Yang, G., Hu, Y., *et al.* (2000) Computer Experiments on Nano-Indentation: A Molecular Dynamics Approach to the Elasto-Plastic Contact of Metal Copper. *Journal of Materials Science*, **35**, 2061-2067. <https://doi.org/10.1023/A:1004703527143>
- [11] 李春燕, 寇生中, 胡勇, 丁雨田, 许广济. Cu 基块状非晶晶化过程的微区变形及力学性能[J]. 中国有色金属学报, 2007(10): 1586-1591.
- [12] Lin, Y.H. and Chen, T.C. (2008) A Molecular Dynamics Study of Phase Transformations in Mono-Crystalline Si under Nanoindentation. *Applied Physics A*, **92**, 571-578. <https://doi.org/10.1007/s00339-008-4633-9>
- [13] Frontini, P., Lotfian, S., Monclús, M.A., *et al.* (2015) High Temperature Nanoindentation Response of RTM6 Epoxy Resin at Different Strain Rates. *Experimental Mechanics*, **55**, 851-862. <https://doi.org/10.1007/s11340-015-9985-4>
- [14] Chen, Z. and Diebels, S. (2012), Surface Roughness Effects in Nanoindentation of Soft Polymers. *Proceedings in Applied Mathematics & Mechanics*, **12**, 297-298. <https://doi.org/10.1002/pamm.201210138>
- [15] Zhang, Y., An, Q., Li, J., *et al.* (2020) Strengthening Mechanisms of Graphene in Copper Matrix Nanocomposites: A Molecular Dynamics Study. *Journal of Molecular Modeling*, **26**, 335. <https://doi.org/10.1007/s00894-020-04595-y>
- [16] Plimpton, S. (1995) Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *Journal of Computational Physics*, **117**, 1-19. <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>
- [17] Foiles, S.M., *et al.* (1988) Erratum: Embedded-Atom-Method Functions for the FCC Metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and Their Alloys. *Physical Review B, Condensed Matter*, **33**, 7983. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.37.10378>
- [18] 聂宁明, 胡长军, 张云泉, 贺新福, 张博尧, 李士刚. 材料微观结构演化大规模分子动力学软件比较[J]. 计算机科学与探索, 2017, 11(3): 355-364.
- [19] 王子云. 梯度多晶铜纳米压痕的分子动力学仿真研究[D]: [硕士学位论文]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2020.
- [20] Stukowski, A. (2010) Visualization and Analysis of Atomistic Simulation Data with OVITO—The Open Visualization Tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **18**, Article ID: 015012. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/18/1/015012>
- [21] 程东, 严立, 严志军. 单晶 Cu 在纳米压痕过程中的微观破坏机制[J]. 大连海事大学学报, 2005, 31(2): 72-75+80.
- [22] Interactive Molecular Dynamics (IMD). https://www.ovito.org/docs/current/particles.modifiers.interactive_molecular_dynamics.php
- [23] 李锐, 刘腾, 陈翔, 陈思聪, 符义红, 刘琳. 界面结构对 Cu/Ni 多层膜纳米压痕特性影响的分子动力学模拟[J]. 物理学报, 2018, 67(19): 51-61.
- [24] 高宇. 单晶 Cu 纳米压痕的分子动力学模拟[D]: [硕士学位论文]. 北京: 北京交通大学, 2011.
- [25] 梁海弋, 王秀喜, 吴恒安, 王宇. 纳米多晶铜微观结构的分子动力学模拟[J]. 物理学报, 2002(10): 2308-2314.