

Nghiên cứu ảnh hưởng của tốc độ biến dạng đến các tính chất chịu kéo của hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể sử dụng phương pháp mô phỏng động lực phân tử

Trần Anh Sơn, Đoàn Đình Quân, Phạm Anh Vũ, Vũ Hồng Sơn, Hoàng Văn Hán, Phạm Thế Tân, Chu Văn Tuấn*

Trường Đại học Sư phạm Kỹ thuật Hưng Yên, đường 39A, xã Dân Tiến, huyện Khoái Châu, tỉnh Hưng Yên, Việt Nam

Ngày nhận bài 19/9/2022; ngày chuyển phản biện 21/9/2022; ngày nhận phản biện 12/10/2022; ngày chấp nhận đăng 17/10/2022

Tóm tắt:

Trong bài báo này, ảnh hưởng của các tốc độ biến dạng khác nhau đến tính chất chịu kéo của hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể được nghiên cứu bằng phương pháp mô phỏng động lực phân tử - một trong các phương pháp mô phỏng được sử dụng khá rộng rãi trong lĩnh vực vật liệu nano hiện nay. Phương pháp Voronoi được áp dụng để thiết lập cấu trúc đa tinh thể và phần mềm ATOMSK được sử dụng để tạo mẫu thử kéo hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể. Mối quan hệ giữa ứng suất - biến dạng, sự biến đổi pha tinh thể, hiện tượng sai lệch mạng tinh thể, sự phân bố ứng suất cắt và ứng suất von Mises được đánh giá. Kết quả cho thấy, ở tốc độ biến dạng càng cao thì giá trị độ bền kéo của hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể càng cao. Sự chuyển đổi pha từ cấu trúc lập phương tâm mặt (FCC) thành cấu trúc sáu phương kết chặt (HCP) là chủ yếu và kiểu sai lệch mạng tinh thể Shockley chiếm ưu thế trong suốt quá trình kéo. Các nguyên tử với biến dạng cắt cao tập trung chủ yếu tại các vị trí mà vật liệu bị biến dạng nghiêm trọng nhất, trong khi các nguyên tử với ứng suất von Mises cao tập trung chủ yếu bên trong các ranh giới hạt.

Từ khóa: biến dạng cắt, biến đổi pha, hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể, lỗi xếp chồng, ứng suất von Mises.

Chỉ số phân loại: 2.5

1. Đặt vấn đề

Phương pháp kéo là một trong những phương pháp phổ biến và điển hình nhất được sử dụng để kiểm tra, đánh giá các hiện tượng biến dạng và các tính chất cơ học của vật liệu. Tuy rằng cách thức thực hiện phương pháp kéo rất đơn giản nhưng hiệu quả mà nó mang lại thật bất ngờ. Thông qua thí nghiệm kéo, nhiều thông số cơ học quan trọng của vật liệu có thể được xác định như mô đun đàn hồi, độ bền kéo và độ dẻo dai... Cùng với đó, hiện tượng biến dạng và cơ chế phá hủy của vật liệu cũng được thể hiện rất rõ ràng thông qua quá trình kéo. Do đó, thí nghiệm kéo đã được các nhà khoa học sử dụng khá rộng rãi trong các nghiên cứu trước đây [1-3].

Cho đến nay, phần lớn các nghiên cứu về cơ tính và cơ chế biến dạng của vật liệu được thực hiện bằng các phương pháp thực nghiệm. Tuy nhiên, các phương pháp thực nghiệm còn tồn tại nhược điểm đó là kích thước các mẫu thử còn rất lớn, dẫn đến việc đánh giá các biến dạng cơ học và sự phá hủy của vật liệu được thực hiện ở vùng diện tích lớn. Trong khi đó, sự thay đổi các tính chất cơ học và sự biến dạng của vật liệu thực tế đã xảy ra ở vùng diện tích rất nhỏ ở kích cỡ nano, điều mà rất khó có thể khảo sát được bằng các phương pháp thực nghiệm. Một vấn đề cấp thiết đặt ra là phải giải quyết được bất cập này nhưng vẫn đảm bảo độ tin cậy và chính xác của kết quả thu được. Với sự phát triển nhanh chóng của khoa học máy tính và công nghệ nano hiện nay, việc thực hiện các nghiên cứu ở cấp độ nguyên tử đã không còn là rào cản đối với các nhà khoa học. Một sự lựa chọn phù hợp cho những nghiên cứu chuyên sâu về

các tính chất cơ học và cơ chế biến dạng của vật liệu nano là phương pháp mô phỏng động lực phân tử - một phương pháp đạt được độ chính xác cao, dễ thực hiện, tiết kiệm thời gian và chi phí cho quá trình thực hiện [4].

Vật liệu đa tinh thể là một loại vật liệu sở hữu các tinh thể đơn hoặc đa pha với kích thước tinh thể dao động trong khoảng vài nm (thường là từ 5 đến 20 nm), trong đó vật liệu mất đi độ kết tinh do bên trong chúng có chứa các ranh giới hạt (GBs) [5]. Các GBs chiếm khoảng 30% thể tích của vật liệu đa tinh thể và chúng cũng là nhân tố chính làm thay đổi các tính chất cơ học của vật liệu so với vật liệu kết tinh thông thường. Cụ thể, việc sở hữu các GBs làm cho độ bền và độ cứng của vật liệu đa tinh thể tăng lên, độ dẻo dai được cải thiện, tăng cường độ khuếch tán, khả năng chịu nhiệt cao hơn, hệ số giãn nở nhiệt được tăng cường và từ tính vượt trội. Do đó, vật liệu đa tinh thể được ứng dụng rộng rãi trong các lĩnh vực quan trọng như công nghệ từ tính, xử lý và y sinh, các ứng dụng trong lĩnh vực cảm biến [6-8].

Trong số các hợp kim đồng hai thành phần, hợp kim đồng-niken (CuNi) sở hữu các đặc tính cơ học vượt trội như khả năng chống ăn mòn tuyệt vời, độ bền cao, khả năng chống mài mòn cao và độ dẻo dai tốt [9]. Vì vậy, hợp kim CuNi đã trở thành vật liệu tiềm năng và có những đóng góp thiết thực cho sự phát triển của các ngành công nghiệp [10]. Cho đến nay, số lượng các nghiên cứu về đặc tính kéo và cơ chế biến dạng kéo của hợp kim CuNi đa tinh thể không nhiều, đặc biệt là các nghiên cứu sử dụng phương pháp mô phỏng động lực phân tử.

*Tác giả liên hệ: Email: chuvantuan@utehy.edu.vn

Studying the effect of strain rate on tensile properties of nanocrystalline $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ alloy using molecular dynamics simulation method

Anh Son Tran, Dinh Quan Doan, Anh Vu Pham, Hong Son Vu,
Van Han Hoang, The Tan Pham, Van Tuan Chu*

Hung Yen University of Technology and Education,
39A Street, Dan Tien Commune, Khoai Chau District, Hung Yen Province, Vietnam

Received 19 September 2022; revised 12 October 2022; accepted 17 October 2022

Abstract:

In this paper, the effect of different strain rates on the tensile properties of nanocrystalline $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ alloy was investigated using the molecular dynamics simulation method, one of the simulation methods widely used in the field of nanomaterials today. The Voronoi method was applied to establish the nanocrystalline structure, and ATOMSK software was used to create the tensile test specimens of the polycrystalline $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ alloy. The stress-strain relationship, phase transformations, lattice dislocations, shear strain and von Mises stress distributions were evaluated. The results showed that the higher the strain rate, the higher the tensile strength value of the nanocrystalline $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ alloy. The phase transition from the Face-Centered Cubic (FCC) structure to the Hexagonal Close Packed (HCP) structure is predominant, and the Shockley dislocation prevails during the tensile process. The atoms with high shear strain are mainly concentrated at the locations where the material is most severely deformed, while the atoms with high von Mises stress are mainly focused inside the grain boundaries.

Keywords: nanocrystalline $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ alloy, phase transition, shear strain, stacking faults, von Mises stress.

Classification number: 2.5

Trong quá trình chịu kéo, các tính chất cơ học của vật liệu chịu ảnh hưởng mạnh mẽ bởi tốc độ biến dạng khi kéo. Nếu yếu tố này thay đổi sẽ làm cho các tính chất cơ học của vật liệu biến đổi ra sao?

Từ những vấn đề nêu trên, chúng tôi thực hiện nghiên cứu ảnh hưởng của tốc độ biến dạng (SR) đến tính chất chịu kéo của hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể thông qua phương pháp mô phỏng động lực phân tử trong công trình này.

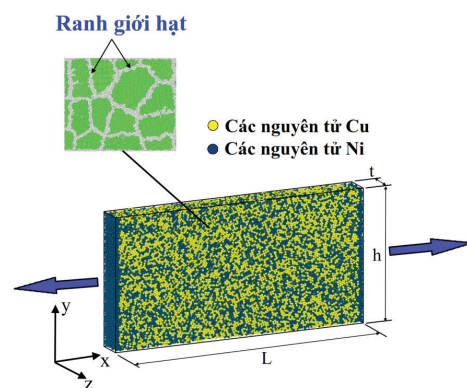
2. Phương pháp nghiên cứu

Trong nghiên cứu này, phương pháp Voronoi [11] được áp dụng để thiết lập cấu trúc đa tinh thể và phần mềm

ATOMSK được sử dụng để tạo mẫu thử kéo hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể. Hình 1 thể hiện mô hình vật lý của mẫu thử kéo. Kích thước của mẫu thử là $3 \times 30 \times 15 \text{ nm}^3$, tương ứng với độ dày (t) × chiều dài (L) × chiều cao (h) của mẫu. Kích thước hạt trung bình của mẫu hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể là 7,26 nm và các hạt được định hướng ngẫu nhiên. Quá trình kéo được thực hiện dọc theo phương trục x, các điều kiện biên tự do được gán theo phương trục y và các điều kiện biên tuần hoàn được gán theo phương trục z. Biến dạng kéo (ϵ) được xác định như sau:

$$\epsilon = \frac{\Delta L}{L} \quad (1)$$

trong đó ΔL là tổng độ giãn dài. Tập hợp chính tắc (NVT) được áp dụng trong tất cả các mô phỏng động lực phân tử.



Hình 1. Mô hình vật lý của mẫu hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể được sử dụng trong các thí nghiệm kéo.

Để có thể thu được các hiện tượng biến dạng khác biệt rõ rệt, giúp đưa ra những so sánh về đặc tính cơ học của vật liệu, các thí nghiệm mô phỏng kéo được thực hiện ở 5 giá trị SR khác nhau lần lượt là: $2,5 \times 10^8$, 5×10^8 , 10^9 , 5×10^9 và 10^{10} s^{-1} ở nhiệt độ phòng và bước thời gian mô phỏng là 2 fs thông qua hệ thống mô phỏng LAMMPS [12]. Việc chọn các giá trị tốc độ biến dạng rất cao trong các nghiên cứu này dựa trên cơ sở của nhiều nghiên cứu mô phỏng động lực phân tử trước đây. Các nghiên cứu mô phỏng động lực phân tử được thực hiện bằng cách sử dụng ứng suất rất cao (tốc độ biến dạng rất cao), chỉ có thể so sánh trực tiếp với ứng suất được áp dụng trong các thí nghiệm tải xung kích. Sau đó, cần ngoại suy các kết quả thu được từ mô phỏng động lực phân tử với các điều kiện thử nghiệm cơ học thực nghiệm thông thường hết sức cẩn thận và tỉ mỉ. Thời gian thư giãn của vật liệu trước khi kéo mẫu thí nghiệm là 500 ps. Tất cả các dữ liệu mô phỏng quá trình kéo thu được bao gồm phân tích biến đổi pha tinh thể (CNA), sai lệch mạng tinh thể (DXA), sự phân bố biến dạng cắt và phân bố ứng suất von Mises được thể hiện thông qua phần mềm OVITO. Phương pháp nhúng nguyên tử (EAM) với các thông số của hàm thế năng lấy từ cơ sở dữ liệu NIST được sử dụng trong nghiên cứu này để xác định tương tác giữa các nguyên tử

Cu và Ni [13]. Tổng năng lượng E_i của nguyên tử i được tính bởi công thức sau:

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

trong đó F , ρ , ϕ , và r_{ij} lần lượt là năng lượng nhúng, mật độ electron nguyên tử, cặp thể tương tác và khoảng cách giữa nguyên tử i và j ; α và β là các loại nguyên tố của nguyên tử i và j .

Ứng suất η_i ở mỗi nguyên tử i được tính như sau:

$$\eta_i = \sqrt{(\eta_{xy}^2 + \eta_{yz}^2 + \eta_{zx}^2) + \frac{1}{6}[(\eta_{xx} - \eta_{yy})^2 + (\eta_{xx} - \eta_{zz})^2 + (\eta_{yy} - \eta_{zz})^2]} \quad (3)$$

Ứng suất von Mises σ_{von} được tính như sau:

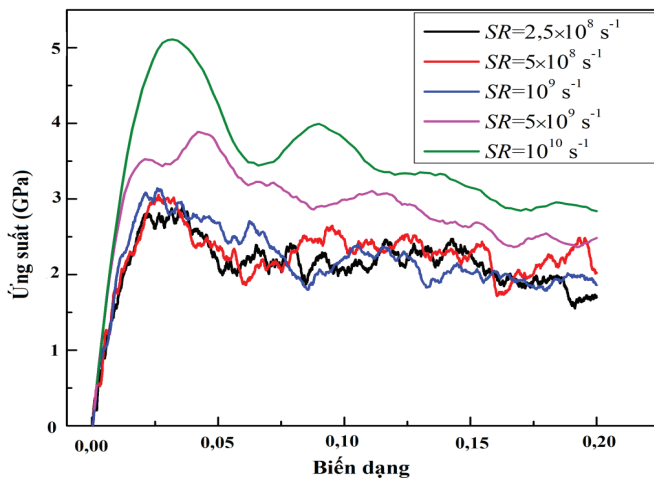
$$\sigma_{von} = \sqrt{3(\sigma_{xy}^2 + \sigma_{yz}^2 + \sigma_{zx}^2) + \frac{1}{2}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + (\sigma_{xx} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{yy} - \sigma_{zz})^2]} \quad (4)$$

trong đó, xy , yz , xz , xx , yy , zz là các vector phần tử trong hệ tọa độ $oxyz$.

3. Kết quả và bàn luận

Trong phần này, các kết quả thể hiện các tính chất chịu kéo và cơ chế biến dạng của hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể được phân tích và bàn luận. Ảnh hưởng của tốc độ biến dạng đến các biến đổi cơ học của hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể là rất rõ ràng và được đánh giá chi tiết.

3.1. Mối quan hệ ứng suất - biến dạng

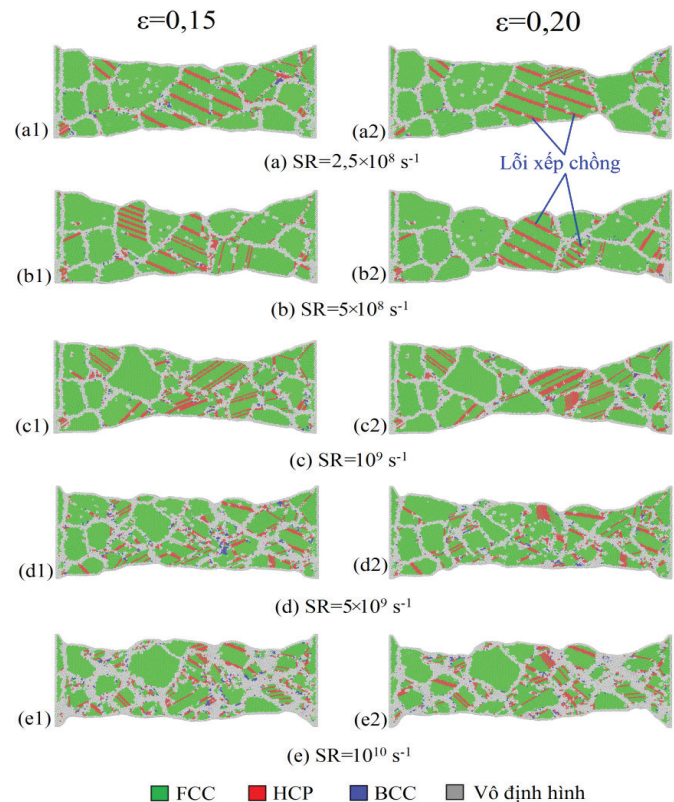


Hình 2. Mối quan hệ ứng suất - biến dạng của hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể trong các thí nghiệm kéo với SR khác nhau tại nhiệt độ phòng.

Quan hệ ứng suất - biến dạng là thông số đặc trưng nhất để đánh giá cơ tính của vật liệu trong quá trình chịu kéo. Hình 2 thể hiện mối quan hệ ứng suất - biến dạng của hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể trong các thí nghiệm kéo với SR khác nhau tại nhiệt độ phòng. Có thể thấy rằng, xu hướng biến thiên của các giá trị ứng suất là khá giống nhau ở các trường hợp SR khác nhau. Trong giai

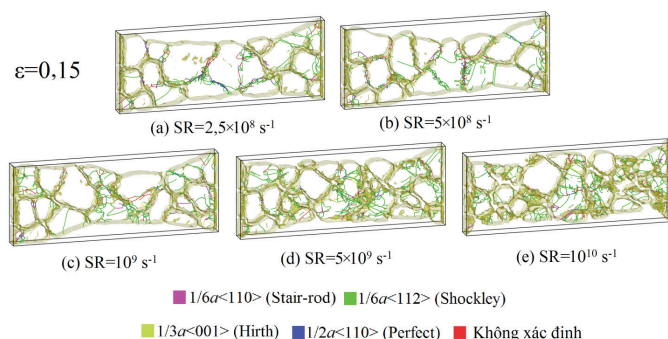
đoạn đầu của quá trình kéo, giai đoạn biến dạng đàn hồi, ứng suất tăng nhanh từ 0 đến giá trị cực đại trong khoảng $0 < \epsilon < 0,025$. Sau khi đạt đỉnh, giá trị ứng suất giảm đột ngột, đánh dấu sự bắt đầu của quá trình biến dạng dẻo. Sau đó, giá trị ứng suất ổn định hơn và giảm dần khi ϵ tăng. Điều này có nghĩa là sự phá hủy vật liệu diễn ra từ từ trong quá trình kéo. Đây là tính chất cơ học rất đặc trưng của vật liệu đa tinh thể. Một kết quả đáng chú ý khác, giá trị độ bền kéo tăng nhẹ đối với sự gia tăng tốc độ biến dạng từ $2,5 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ lên 10^9 s^{-1} , và chúng tăng lên rõ rệt khi quá trình kéo được thực hiện tại giá trị tốc độ biến dạng bằng $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ và 10^{10} s^{-1} . Có thể kết luận rằng, độ bền kéo của hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể là cao hơn khi tốc độ biến dạng cao hơn. Các giá trị độ bền kéo của các mẫu hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể lần lượt là 2,81, 3,03, 3,26, 3,75 và 5,19 GPa, tương ứng với các giá trị tốc độ biến dạng là $2,5 \times 10^8$, 5×10^8 , 10^9 , 5×10^9 và 10^{10} s^{-1} . Cùng với đó, giá trị ứng suất giảm đột ngột sau điểm đỉnh trong trường hợp tốc độ biến dạng cao nhất. Điều đó có nghĩa là, vật liệu trở nên giòn hơn, làm cho sự đứt gãy liên kết của vật liệu xảy ra dễ dàng hơn ở tốc độ biến dạng cao hơn và ngược lại. Xu hướng này cũng đã được báo cáo trong các nghiên cứu mô phỏng động lực phân tử quá trình kéo trước đây của A.S. Tran (2020) [14] với màng nano hai lớp Cu/Ta, F. Hussain và cs (2014) [15] với thủy tinh kim loại CuZr và G.P. Potirniche và cs (2005) [16] với màng niken đơn tinh thể.

3.2. Quá trình biến đổi pha tinh thể và hiện tượng sai lệch mạng tinh thể



Hình 3. Biểu đồ biến đổi pha tinh thể của hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể trong các thí nghiệm kéo với SR khác nhau ở nhiệt độ phòng tại $\epsilon = 0,15$ và $0,20$.

Hình 3 thể hiện biểu đồ biến đổi pha tinh thể của hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể trong các thí nghiệm kéo với SR khác nhau ở nhiệt độ phòng tại $\varepsilon=0,15$ và $0,20$. Kết quả cho thấy, hình thái biến dạng của các mẫu hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể là khác nhau với SR khác nhau. Nhìn chung, các mẫu đều bị giãn dài ra khi quá trình kéo được thực hiện. Tuy nhiên, hiện tượng vật liệu bị co lại xảy ra ở phần giữa của mẫu đối với các trường hợp $\text{SR}=2,5 \times 10^8$, 5×10^8 và 10^9 s^{-1} xảy ra ở 4 góc của mẫu trong các trường hợp với $\text{SR}=5 \times 10^9$ và 10^{10} s^{-1} . Vật liệu bị tổn hại, phá hủy với biểu hiện cụ thể là sự xuất hiện rõ rệt của các khuyết tật khi quá trình kéo được thực hiện. Các khuyết tật nổi bật nhất hình thành trong các mẫu hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể là sự chuyển đổi pha tinh thể và sự xuất hiện của các lỗi xếp chồng trong các hạt đa tinh thể. Ban đầu, cấu trúc tinh thể của hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể là cấu trúc lập phương tâm mặt (FCC). Dưới sự tác động của quá trình kéo, một phần của các cấu trúc FCC trong các mẫu hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể bị chuyển đổi thành các cấu trúc tinh thể khác như hình cấu trúc lục giác kết chặt (HCP), cấu trúc lập phương tâm khối (BCC) và cấu trúc vô định hình. Trong đó, quá trình chuyển đổi pha từ cấu trúc FCC sang HCP chiếm đa số, còn sự chuyển đổi pha từ cấu trúc FCC sang BCC và vô định hình là ít hơn, chủ yếu tập trung ở một số vị trí bị tổn hại nghiêm trọng nhất trong mẫu. Một kết quả đáng chú ý, các lỗi xếp chồng sở hữu cấu trúc HCP xuất hiện dày đặc trong các hạt đa tinh thể bị biến dạng mạnh dưới tác động của quá trình kéo. Các lỗi xếp chồng bắt nguồn từ sự không phù hợp cấu trúc của các nguyên tử bên trong các ranh giới hạt của các mẫu hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể và chúng bị giới hạn bên trong các hạt $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể.

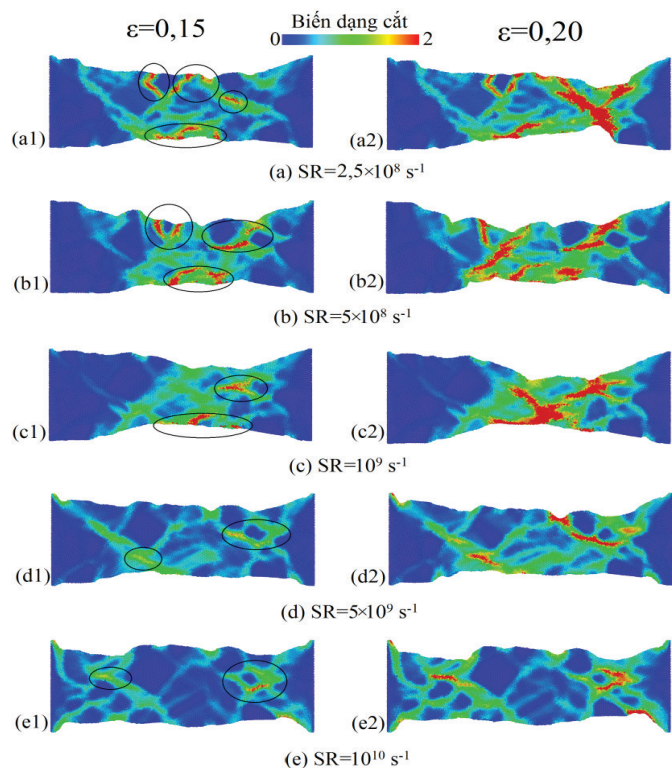


Hình 4. Sự phân bố sai lệch mạng tinh thể của hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể trong các thí nghiệm kéo với SR khác nhau ở nhiệt độ phòng tại $\varepsilon=0,15$.

Dưới sự ảnh hưởng của các tác động cơ học, một trong những dạng khuyết tật đáng chú ý của các vật liệu tinh thể là sự sai lệch mạng tinh thể. Hình 4 cho thấy sự phân bố sai lệch mạng tinh thể của hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể trong các thí nghiệm kéo với SR khác nhau ở nhiệt độ phòng tại $\varepsilon=0,15$. Các loại sai lệch mạng tinh thể khác nhau được hình thành như $1/6a\langle 110 \rangle$ (Stair-rod), $1/6a\langle 112 \rangle$ (Shockley), $1/2a\langle 110 \rangle$ (Perfect), $1/3a\langle 001 \rangle$ (Hirth), và sai lệch không xác định tương ứng với các đường màu hồng, xanh lá cây, xanh dương, vàng và đỏ như được thể hiện ở hình 4. Sự không phù hợp cấu trúc của các nguyên tử bên trong các ranh giới hạt là nguyên nhân dẫn đến sự hình thành các sai lệch mạng tinh thể dưới tác động của lực kéo. Các sai lệch mạng tinh thể sau

đó có thể tương tác với nhau hoặc bị thu hồi, dẫn đến sự hình thành các kiểu sai lệch mạng tinh thể khác hoặc khuyết tật mới. Mật độ sai lệch mạng tinh thể của các mẫu hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể trong trường hợp với SR lớn hơn là dày đặc hơn. Trong trường hợp với SR nhỏ hơn, các sai lệch mạng tinh thể tương đối dài chiếm ưu thế. Trong khi đó, các sai lệch mạng tinh thể ngắn hơn xuất hiện chủ yếu trong các mẫu hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể trong trường hợp với SR lớn hơn.

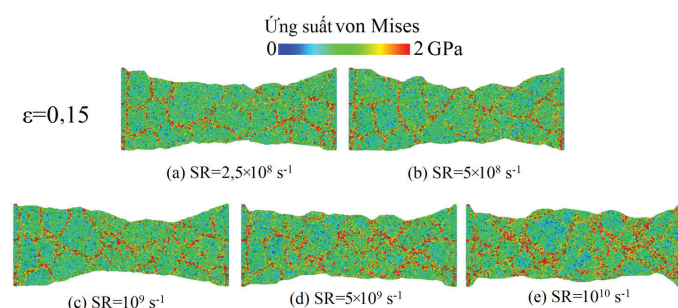
3.3. Sự phân bố biến dạng cắt và ứng suất von Mises



Hình 5. Biểu đồ phân bố biến dạng cắt của hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể trong các thí nghiệm kéo với SR khác nhau ở nhiệt độ phòng tại $\varepsilon=0,15$ và $0,20$.

Hình 5 thể hiện biểu đồ phân bố biến dạng cắt của hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể trong các thí nghiệm kéo với SR khác nhau ở nhiệt độ phòng tại $\varepsilon=0,15$ và $0,20$. Thông qua sự phân bố biến dạng cắt của các mẫu hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể, các vùng nguyên tử với các mức độ biến dạng cắt khác nhau được biểu diễn. Từ đó có thể đánh giá mức độ biến dạng và phá hủy của vật liệu tại các vị trí khác nhau trên toàn bộ mẫu trong quá trình kéo. Có thể thấy rằng, những khu vực vật liệu bị biến dạng, phá hủy càng nghiêm trọng thì ở đó càng tập trung nhiều nguyên tử có biến dạng cắt cao. Đáng chú ý, biến dạng cắt của các nguyên tử bên trong các hạt đa tinh thể là thấp hơn so với các nguyên tử bên trong các ranh giới hạt. Các thiệt hại ban đầu của vật liệu xuất hiện tại các vị trí được đánh dấu bằng các đường tròn và elip màu đen, tại các ranh giới hạt của mẫu hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể. Sau đó, quá trình kéo tiếp tục được thực hiện làm cho chúng mở rộng và lan truyền tới các vị trí khác của mẫu, dọc theo đường viền các ranh giới hạt, hình thành nên các khu vực bị ảnh hưởng và biến dạng đáng kể. Từ biểu đồ phân bố biến dạng cắt, có thể thấy rằng, biến dạng cắt của các mẫu

hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể được chia thành hai mức độ rõ ràng. Với các trường hợp $\text{SR}=2,5 \times 10^8$, 5×10^8 và 10^9 s^{-1} , các vùng nguyên tử với biến dạng cắt cao được quan sát rõ rệt tại các khu vực bị biến dạng nghiêm trọng của mẫu. Còn với các trường hợp $\text{SR} = 5 \times 10^9$ và 10^{10} s^{-1} , các vùng nguyên tử với biến dạng cắt cao xuất hiện thưa hơn và cường độ yếu hơn. Từ kết quả phân tích ở trên, có thể khẳng định rằng, các ranh giới hạt đóng một vai trò rất quan trọng trong việc hạn chế sự biến dạng, phá hủy của hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể. Hầu hết tất cả các tổn hại của vật liệu đều hình thành trong các ranh giới hạt, điều này góp phần cải thiện khả năng bảo vệ cấu trúc tinh thể của vật liệu đa tinh thể khi quá trình kéo diễn ra.



Hình 6. Biểu đồ phân bố ứng suất von Mises của hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể trong các thí nghiệm kéo với SR khác nhau ở nhiệt độ phòng tại $\epsilon=0,15$.

Hình 6 thể hiện biểu đồ phân bố ứng suất von Mises của hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể trong các thí nghiệm kéo với SR khác nhau ở nhiệt độ phòng tại $\epsilon=0,15$. Rõ ràng, ứng suất von Mises tồn tại bên trong các hạt đa tinh thể thấp hơn đáng kể so với ứng suất von Mises tồn tại bên trong các ranh giới hạt. Kết quả này hoàn toàn phù hợp với các báo cáo trước đây của A.S. Tran và cs (2019) [17] và D.Q. Doan và cs (2020) [18] và được giải thích bởi sự khác biệt trong cách sắp xếp nguyên tử giữa cấu trúc vô định hình của các nguyên tử trong các ranh giới hạt và cấu trúc tinh thể của các nguyên tử trong các hạt đa tinh thể. Bên trong các ranh giới hạt, các nguyên tử với cấu trúc vô định hình được sắp xếp rất gần nhau và không có trật tự. Do đó, chúng tương tác với nhau dễ dàng hơn và mạnh mẽ hơn dưới sự tác động của quá trình kéo, làm cho ứng suất von Mises tồn tại bên trong các ranh giới hạt là cao hơn đáng kể so với các hạt đa tinh thể. Sự thay đổi của SR gần như không ảnh hưởng đến sự phân bố ứng suất von Mises trong các mẫu hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể.

4. Kết luận

Ảnh hưởng của SR đến tính chất chịu kéo của hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể đã được phân tích và đánh giá thông qua phương pháp mô phỏng động lực phân tử. Kết quả nghiên cứu cho thấy, sự thay đổi của giá trị SR ảnh hưởng đáng kể đến độ bền kéo, hình thái biến dạng, quá trình biến đổi pha, sai lệch mạng tinh thể và sự phân bố biến dạng cắt của hợp kim $\text{Cu}_{50}\text{Ni}_{50}$ đa tinh thể. Giá trị độ bền kéo tăng cao rõ rệt với $\text{SR}=5 \times 10^9$ và 10^{10} s^{-1} . Với SR thấp hơn, vật liệu bị biến dạng khốc liệt hơn, vùng nguyên tử với biến dạng cắt cao hình thành nghiêm trọng. Sự biến đổi pha từ cấu trúc FCC chủ yếu được chuyển thành cấu trúc HCP và kiểu sai lệch mạng tinh thể Shockley chiếm đa số trong các mẫu. Tuy nhiên, SR gần như không ảnh hưởng đến sự phân bố ứng suất von Mises.

LỜI CẢM ƠN

Nghiên cứu được thực hiện với sự hỗ trợ của nhóm nghiên cứu mạnh “Vật liệu nano và ứng dụng” (mã số SKH-2022-NMA), Trường Đại học Sư phạm Kỹ thuật Hưng Yên. Các tác giả xin trân trọng cảm ơn.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] D. Wei, X. Li, W. Heng, et al. (2019), “Novel Co-rich high entropy alloys with superior tensile properties”, *Materials Research Letters*, **7**(2), pp.82-88, DOI: 10.1080/21663831.2018.1553803.
- [2] C. Huang, X. Peng, B. Yang, et al. (2018), “Effects of strain rate and annealing temperature on tensile properties of nanocrystalline diamond”, *Carbon*, **136**, pp.320-328, DOI: 10.1016/j.carbon.2018.04.052.
- [3] A.S. Tran (2021), “Deformation mechanism and tensile properties of nanocrystalline CoCrCuFeNi high-entropy alloy: A molecular dynamics simulation study”, *Physica Scripta*, **96**(12), DOI: 10.1088/1402-4896/ac3f6a.
- [4] K. Binder, J. Horbach, W. Kob, et al. (2004), “Molecular dynamics simulations”, *Journal of Physics: Condensed Matter*, **16**(5), DOI: 10.1088/0953-8984/16/5/006.
- [5] H. Gleiter (1991), “Nanocrystalline materials”, *Advanced Structural and Functional Materials*, Springer, pp.1-37, DOI: 10.1007/978-3-642-49261-7_1.
- [6] F. Li, T. Liu, J.Y. Zhang, et al. (2019), “Amorphous-nanocrystalline alloys: Fabrication, properties, and applications”, *Materials Today Advances*, **4**, DOI: 10.1016/j.mtadv.2019.100027.
- [7] A.K. Kushwaha, M. John, M. Misra, et al. (2021), “Nanocrystalline materials: Synthesis, characterization, properties, and applications”, *Crystals*, **11**(11), DOI: 10.3390/cryst11111317.
- [8] N. Ma, D.Y. Cheung, J.T. Butcher (2022), “Incorporating nanocrystalline cellulose into a multifunctional hydrogel for heart valve tissue engineering applications”, *Journal of Biomedical Materials Research Part A*, **110**(1), pp.76-91, DOI: 10.1002/jbm.a.37267.
- [9] B. Han, C. Zhang, M. Shi (2022), “Molecular dynamics simulations of nanoindentation of CuNi alloy”, *International Journal of Applied Mechanics*, **14**(2), DOI: 10.1142/S1758825122500119.
- [10] P.S. Harikumar, T.K. Hridya (2021), “Application of CuNi bimetallic nanoparticle as an adsorbent for the removal of heavy metals from aqueous solution”, *International Journal of Environmental Analytical Chemistry*, **101**(6), pp.869-883, DOI: 10.1080/03067319.2019.1673383.
- [11] F. Aurenhammer (1991), “Voronoi diagrams - A survey of a fundamental geometric data structure”, *ACM Computing Surveys (CSUR)*, **23**(3), pp.345-405, DOI: 10.1145/116873.116880.
- [12] B.F. Dale, S.J. Plimpton, M.S. Shephard (2010), “Software components for parallel multiscale simulation: An example with LAMMPS”, *Engineering with Computers*, **26**, pp.205-211, DOI: 10.1007/s00366-009-0156-z.
- [13] B. Onat, S. Durukanoglu (2013), “An optimized interatomic potential for Cu-Ni alloys with the embedded-atom method”, *Journal of Physics: Condensed Matter*, **26**(3), DOI: 10.1088/0953-8984/26/3/035404.
- [14] A.S. Tran (2020), “Phase transformation and interface fracture of Cu/Ta multilayers: A molecular dynamics study”, *Engineering Fracture Mechanics*, **239**, DOI: 10.1016/j.engfracmech.2020.107292.
- [15] F. Hussain, M. Imran, M. Rashid, et al. (2014), “Molecular dynamics simulation of mechanical characteristics of CuZr bulk metallic glasses using uni-axial tensile loading technique”, *Physica Scripta*, **89**(11), DOI: 10.1088/0031-8949/89/11/115701.
- [16] G.P. Potirniche, M.F. Horstemeyer, B. Jelinek, et al. (2005), “Fatigue damage in nickel and copper single crystals at nanoscale”, *International Journal of Fatigue*, **27**(10-12), pp.1179-1185, DOI: 10.1016/j.ijfatigue.2005.06.015.
- [17] A.S. Tran, T.H. Fang, J.W. Hsiao (2019), “Incipient plasticity and voids nucleation of nanocrystalline gold nanofilms using molecular dynamics simulation”, *Current Applied Physics*, **19**(3), pp.332-340, DOI: 10.1016/j.cap.2018.12.015.
- [18] D.Q. Doan, T.H. Fang, T.H. Chen (2020), “Effects of grain and twin boundary on friction and contact characteristics of CuZrAl nanocrystallines”, *Applied Surface Science*, **524**, DOI: 10.1016/j.apsusc.2020.146458.