

# 石墨烯对镁基复合材料抗压性能影响的分子动力学研究\*

华军\*\* 邢小茹 谢云龙 赵冬

(西安建筑科技大学理学院力学系, 西安, 710055)

**摘要** 镁(Mg)作为轻质金属材料,因其塑性不足及高温下力学性能下降等缺点限制了其应用. 石墨烯(Gr)因其比表面积大、强度高优点可以作为一种理想增强材料与金属镁复合,从而提升材料的力学性能. 本文采用分子动力学(MD)方法对石墨烯/镁(Gr/Mg)复合材料在不同压缩条件下的力学性能进行研究. 结果表明,单晶 Mg 在不同晶向下压缩表现出强烈的各向异性特征. 引入 Gr 使得 Mg 基体中难以启动的滑移系因晶粒细化作用而被激活,应力得到释放,孪生变形机制难以开启. 位错和孪生等缺陷在 Gr 界面附近形核增殖,载荷有效传递至 Gr,提升了复合材料塑性阶段的平均流动应力. 此外, Mg 基体对 Gr 的约束限制了 Gr 的褶皱和弯曲,使材料韧性增强, Gr/Mg 复合材料沿 Z 轴 $[0\ 0\ 0\ 1]$ 晶向压缩的应变达 0.35 时, Gr 仍未断裂. Gr/Mg 复合材料中位错运动到 Gr 表面无法继续贯穿,抑制了 Mg 基体的破坏. 压缩荷载作用下, Gr/Mg 复合材料中位错线的增加有助于抵抗压缩塑性变形. Gr/Mg 复合材料的屈服应力、屈服应变及塑性变形阶段的平均流动应力随着 Gr 层数增加而增大,且 Gr 处于分离状态时, Gr/Mg 复合材料的屈服应变更大. 在 10K~600K 温度范围内, Gr/Mg 复合材料的弹性模量和屈服应力随着温度升高而降低. 而应变率对 Gr/Mg 复合材料的弹性模量和塑性变形阶段的平均流动应力影响不明显,但增大应变率可以提高复合材料的屈服应力和屈服应变.

**关键词** 石墨烯, 镁基复合材料, 压缩力学性能, 分子动力学, 位错

DOI: 10.19636/j.cnki.cjasm42-1250/o3.2024.024

## 0 引言

镁是一种轻质金属,具有高的比强度和比刚度,以及优良的减震性能和导热性能,在多个领域具有广泛的应用,特别是在轻量化、节能减排、航空航天、生物医用等领域具有独特的优势. 但因其塑性差、高温性能有限等缺点导致在其加工过程中容易出现裂纹和断裂,限制了它在实际生产中的应用<sup>[1-2]</sup>. 为了进一步提升金属镁的力学性能,同时保留其固有的优势特性,加入高强度材料成为了一项至关重要的策略. 石墨烯是碳原子紧密堆积而成的二维单层蜂窝状晶格结构材料,拥有高达 1.0 TPa 的理论弹性模量和 130 GPa 的拉伸强度,是已知最强材料之一<sup>[3-4]</sup>. 石墨烯独特的力学、电学、热学性能和比表面积大等特点

使其成为金属基复合材料的理想增强体.

镁是密排六方(HCP)结构金属,相比于面心立方(FCC)和体心立方(BCC)结构的金属,其变形行为更为复杂<sup>[5-12]</sup>. 单智伟<sup>[13]</sup>等介绍了 Mg 的 $\{1\ 0\ \bar{1}\ 2\}$ 形变孪晶与经典的孪晶定义不同,它是一种新的室温变形机制,即塑性的产生可以通过局部的晶胞重构来完成,不需要孪晶位错的参与. 范海冬<sup>[14]</sup>对镁中位错滑移与孪晶变形等塑性变形机制的研究进展进行了介绍. 国内外学者对于石墨烯增强金属基复合材料的研究取得了一定的进展<sup>[15-20]</sup>. 在实验方面, Xiang 等<sup>[21]</sup>采用纯镁粉与石墨烯球磨混合,热压烧结的方法制备了石墨烯/镁基复合材料,发现复合材料的硬度随着石墨烯含量的增加而增加,这种强化归因于石墨烯在晶粒内部和晶界处的均匀分布效应. Feng 等<sup>[22]</sup>对不同石墨烯浓度和层压方向的

\* 2024-06-03 收到修改稿, 2024-06-06 网络首发.

\*\* 通讯作者. E-mail: huajun211@sina.com.

Gr/Al 复合材料制成的微柱进行了单轴压缩试验, 得出结构设计在金属基复合材料增强增韧中的重要性. Zhao 等<sup>[23]</sup>对 Gr/Al 纳米柱在不同应变率下进行了单轴压缩试验, 揭示了不同应变率下复合材料变形机制的转变, 以及层间界面的位错阻碍作用, 提高了复合材料的强度和韧性. Meng 等<sup>[24]</sup>制备了具有层状结构的 Gr/Mg 复合材料, 界面有效的载荷传递和对位错运动的抑制提高了复合材料的强度. 层合结构抑制了应变局部化, 延长了裂纹扩展路径, 有利于保持复合材料的延性. 在模拟方面, 周霞和刘霄霞<sup>[25]</sup>通过分子动力学模拟方法对 Gr/Mg 复合材料的拉伸力学性能进行了研究, 与单晶 Mg 相比, 加入 Gr 和镀镍 Gr 后 Mg 基复合材料的弹性模量、最大拉伸应力和断裂应变等力学性能均显著增强. 明知非等<sup>[26]</sup>采用分子动力学方法研究得出, 在拉伸荷载作用下, 石墨烯的嵌入位置等因素能够明显影响金属镁的塑性变形能力, 并指出石墨烯对材料变形的第二次应变强化的影响较大.

目前, 对 Gr/Mg 复合材料力学性能方面的研究更侧重于实验方面, 而原子模拟方面的研究主要侧重于单轴拉伸荷载作用下的力学行为. 该复合材料在压缩荷载下的变形机理与影响其压缩力学性能的各种因素, 还需进一步的探讨. 本文采用分子动力学模拟方法研究单晶 Mg 及 Gr/Mg 复合材料在压缩荷载作用下的力学性能. 通过对不同加载条件下的单晶 Mg 和 Gr/Mg 复合材料的压缩变形过程及微观结构演化进行分析, 揭示 Gr 在复合材料力学行为中的增强作用机理, 并分析不同因素对 Gr/Mg 复合材料压缩力学性能的影响.

## 1 模拟方法及模型

### 1.1 模拟方法

本文使用分子动力学模拟软件 LAMMPS<sup>[27]</sup>对单晶 Mg 和 Gr/Mg 复合材料进行压缩模拟研究. Gr/Mg 复合材料由单晶镁块和单层或多层石墨烯的分层结构组成. 模拟过程中, 沿 X 方向、Y 方向和 Z 方向均使用周期性边界条件. 采用 Verlet 算法<sup>[28]</sup>对运动方程进行积分, 时间步长设置为 1fs. 模拟前对整个系统进行能量最小化处理, 所采用的算法为

共轭梯度法, 处理后系统能量降到算法可企及范围内的最低. 采用 NPT 系综, 保证体系的原子数、压强与温度一定的情况下弛豫 120 ps, 然后继续在 NPT 系综下采用 fix deform 命令对模型进行单轴压缩模拟, 为考虑泊松比效应, 将垂直于荷载方向的压强均设为 0bar. 模拟过程中保持温度为 300 K, 应变率为  $10^9 \text{ s}^{-1}$ <sup>[25,26]</sup>. 最后, 通过可视化软件 OVI-TO<sup>[29]</sup>分析复合材料压缩过程.

模型中镁原子间相互作用使用 Sun 等<sup>[30]</sup>提出的嵌入原子方法(embedded atom method, EAM)势函数描述, 该势函数可有效反映金属原子之间的作用力. 石墨烯中碳原子之间的相互作用采用 Stuart 等<sup>[31]</sup>提出的自适应分子间反应键序(AIREBO)势表征, 其中 C-C 键的截断半径为  $R_1 = 2 \text{ \AA}$ <sup>[32]</sup>. 利用 Lennard-Jones(L-J)势<sup>[33-36]</sup>模拟镁原子和碳原子之间以及不同石墨烯层的碳原子之间的非键相互作用, 截断半径均为  $R_2 = 10 \text{ \AA}$ . 其中镁原子与碳原子势函数参数为:  $\epsilon_{\text{Mg-C}} = 0.0028 \text{ eV}$ ,  $\sigma_{\text{Mg-C}} = 3.5015 \text{ \AA}$ . 不同石墨烯层的碳原子之间势函数参数为:  $\epsilon_{\text{C-C}} = 0.00284 \text{ eV}$ ,  $\sigma_{\text{C-C}} = 3.4 \text{ \AA}$ <sup>[37]</sup>, 利用该参数来探究不同石墨烯层数对复合材料力学性能的影响.

### 1.2 MD 模型

采用 MD 方法对单晶 Mg 和 Gr/Mg 复合材料进行压缩模拟, 首先建立单晶 Mg 和 Gr/Mg 复合材料的三维模型, 如图 1 所示.

所有模拟模型均具有相同的镁基体, 尺寸为  $108 \text{ \AA} \times 108 \text{ \AA} \times 108 \text{ \AA}$ , 插入的单层 Gr 尺寸为  $108 \text{ \AA} \times 108 \text{ \AA}$ , 厚度为  $3.4 \text{ \AA}$ . 单晶 Mg 模型中总共有 55692 个原子. Gr/Mg 复合材料模型中共包含 58854 个原子, 其中镁原子 54366 个, 碳原子 4488 个. 模型中, 镁基体在 X 轴、Y 轴和 Z 轴三个方向的晶向指数分别为  $[1 \ 1 \ \bar{2} \ 0]$ ,  $[1 \ 0 \ \bar{1} \ 0]$  和  $[0 \ 0 \ 0 \ 1]$ . 由于密排六方(HCP)结构的复杂性, 本文对于单层石墨烯/镁复合材料建立了不同石墨烯嵌入面(YZ 面、XZ 面和 XY 面)的复合材料模型. X 轴压缩方向下的单晶 Mg 和 Gr/Mg 复合材料模型分别记为  $A_0$ 、 $A_1$ ; Y 轴压缩方向下的单晶 Mg 和 Gr/Mg 复合材料模型分别记为  $B_0$ 、 $B_1$ , Z 轴压缩方向下的单晶 Mg 和 Gr/Mg 复合材料模型分别记为  $C_0$ 、 $C_1$ . 此外, 以单层模型  $C_1$  为例, 将材料中的单片石墨烯替换成为

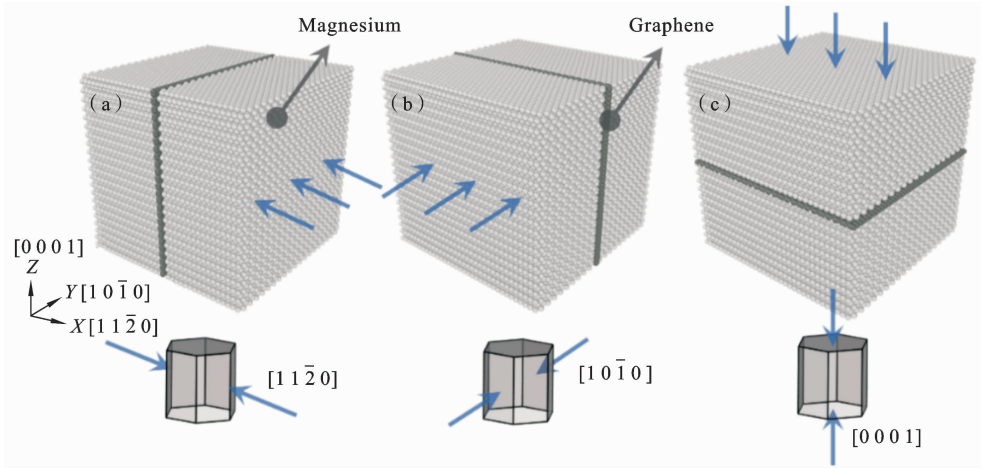


图 1 石墨烯/镁复合材料不同晶向下压缩模型图

Fig. 1 Model diagrams of graphene/magnesium nanocomposites compressed along different crystal orientations

两片和三片石墨烯,从而得到堆叠的双片石墨烯/镁(Gr2/Mg)和堆叠的三片石墨烯/镁(Gr3/Mg)复合材料的模型,将两片、三片石墨烯分别插入镁基体的不同位置,可以得到分离的双片石墨烯/镁(Gr-2/Mg)和分离的三片石墨烯/镁(Gr-3/Mg)复合材料,将以上四种模型分别记为  $C_2$ 、 $C_3$ 、 $C_2$  和  $C_3$ 。在模型压缩方向两端各取长度为  $4 \text{ \AA}$  的原子刚化,一端为固定端,另一端为压缩端。

## 2 结果和讨论

### 2.1 不同 Mg 基体晶向下压缩性能研究

采用 MD 方法研究单晶 Mg 和 Gr/Mg 复合材

料在不同镁基体晶向下的压缩力学性能,模拟得出单晶 Mg 和 Gr/Mg 复合材料的压缩应力-应变曲线,如图 2 所示.表 1 列出在  $0 \sim 0.35$  应变范围内不同晶向下施加压缩荷载时材料的弹性模量、屈服强度以及塑性变形阶段的平均流动应力.将应变为  $0.00 \sim 0.03$  弹性变形区间的应力-应变曲线进行线性拟合得到材料的弹性模量.平均流动应力能够用来描述塑性变形过程中材料抵抗变形的能力,因此通过计算材料屈服之后塑性变形阶段的平均流动应力,来对比石墨烯的加入对复合材料塑性变形行为的影响。

表 1 单晶 Mg 和 Gr/Mg 复合材料的压缩力学性能

Table 1 Compressive mechanical properties of single crystal Mg and Gr/Mg composites

模型	Mg 晶向	弹性模量(GPa)	屈服应力(GPa)	平均流动应力(GPa)
$A_0$	$[11\bar{2}0]$	48.9	11.1	1.52
$A_1$	$[11\bar{2}0]$	38.0	6.44	4.64
$B_0$	$[10\bar{1}0]$	42.7	1.58	0.49
$B_1$	$[10\bar{1}0]$	37.7	3.91	4.26
$C_0$	$[0001]$	77.2	8.05	0.93
$C_1$	$[0001]$	77.6	6.64	3.87

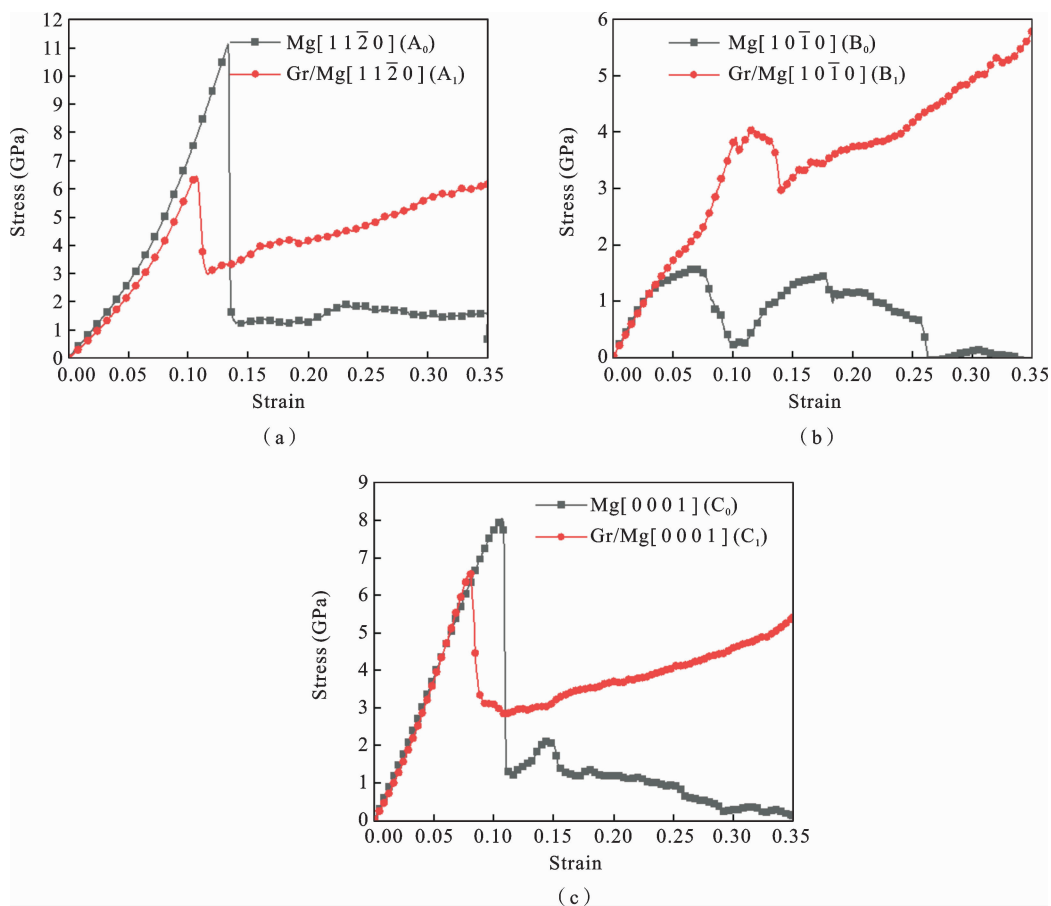


图 2 单晶 Mg 和 Gr/Mg 复合材料沿不同晶向压缩的应力-应变曲线图

Fig. 2 Stress-strain curves of single crystal Mg and Gr/Mg composites under compressive load along different crystal orientations

图 2(a)中,沿 $[11\bar{2}0]$ 晶向压缩的单晶 Mg(模型  $A_0$ )在变形初始阶段,应力随应变呈近似线性增长,材料发生弹性变形.当应变接近 0.13 时,应力迅速下降,单晶 Mg 断裂,应力在稳定值附近波动.加入 Gr 后,Gr/Mg 复合材料(模型  $A_1$ )在压缩初期亦呈线弹性,与单晶 Mg 不同的是,当应变达到约 0.10 时,应力急剧降低后回升,材料进入强化阶段.此现象表明,石墨烯的引入显著影响了镁的塑性变形阶段.单晶 Mg 在塑性变形阶段的平均流动应力为 1.52 GPa,而 Gr/Mg 复合材料的平均流动应力提升至 4.64 GPa,增幅高达 205.3%.在应力-应变曲线中,注意到 Gr/Mg 复合材料的屈服应力比单晶 Mg 的更小.通过对附录图 A1 中两种材料沿 X 轴  $[11\bar{2}0]$ 晶向压缩过程中原子结构图的分析可知,单晶 Mg 中有  $\{11\bar{2}1\}$  锥面滑移的产生,而在 Gr/

Mg 复合材料的镁基体中, $\{10\bar{1}0\}$ 柱面滑移启动.对金属镁来说,各滑移系的临界剪切应力的大小关系为:基面 < 柱面 < 锥面<sup>[38]</sup>.在滑移面内沿着滑移方向上的剪切应力达到一定的临界值时,滑移才能开启.单晶 Mg 中  $\{11\bar{2}1\}$  锥面滑移的启动,意味着其需要更高的临界剪切应力,在应力-应变曲线中表现为其屈服应力相比于 Gr/Mg 复合材料的更大.

图 2(b)中,沿 $[10\bar{1}0]$ 晶向压缩的单晶 Mg(模型  $B_0$ )在弹性变形期间,应力随应变近似线性增长.随后材料开始屈服.应力增长变缓后大幅下降.之后应力回升至较高水平,进入强化阶段.直到单晶 Mg 断裂,应力值下降,进入破坏阶段. Gr/Mg 复合材料(模型  $B_1$ )在初始变形阶段应力-应变曲线趋势与单晶 Mg 相似,但弹性极限近乎翻倍.与单晶 Mg 不同的是,Gr/Mg 复合材料屈服后有应力回升现象.单

晶 Mg 和 Gr/Mg 复合材料在该方向上压缩弹性模量分别为 42.7GPa 和 37.7GPa. 单晶 Mg 在塑性变形阶段的平均流动应力为 0.49GPa, 而 Gr/Mg 复合材料的平均流动应力提升至 4.26GPa, 增幅达 769.4%.

图 2(c)中,单晶 Mg(模型 C<sub>0</sub>)在沿[0 0 0 1]晶向压缩变形的初始阶段,应力随应变的增加呈近似线性增长,材料发生弹性变形. 当应变达到约 0.11 时,应力达到峰值后快速跌落,Mg 基体断裂. 随后应力小幅度回升后持续下降. Gr/Mg 复合材料(模型 C<sub>1</sub>)在压缩变形的初始阶段同样发生弹性变形,但石墨烯的加入对弹性模量影响不大;应变达到 0.075 后,Gr/Mg 复合材料在塑性变形阶段应力持续增加. 单晶 Mg 的平均流动应力为 0.93GPa, 而 Gr/Mg 复合材料的平均流动应力提升至 3.87GPa, 增幅为 316.1%.

以上分析可以得出,单晶 Mg 的压缩性能表现

出强的各向异性,加入石墨烯对金属镁的强化作用主要体现在塑性变形阶段,这与汉芮岐<sup>[39]</sup>研究得到在压缩荷载作用下,石墨烯的加入对金属的塑性变形阶段影响较大的结论相一致.

为进一步研究石墨烯的加入对复合材料压缩性能的影响,对三个晶向下压缩时材料中不同晶格结构类型原子数量与应变关系都进行了研究. 这里,仅以材料沿 Z 轴[0 0 0 1]晶向下压缩(模型 C<sub>0</sub>、模型 C<sub>1</sub>)为例进行详细分析. 图 3 给出材料在单轴压缩过程中不同晶格结构类型原子的数量与应变关系图. 图 4 列出了在该方向压缩时单晶 Mg 和 Gr/Mg 复合材料在不同应变下的原子结构图,以探究单晶 Mg 和 Gr/Mg 复合材料在压缩作用下的变形机制,其中红色代表 HCP 结构类型原子,蓝色代表 BCC 结构类型原子,绿色代表 FCC 结构类型原子,白色代表其他结构类型原子.

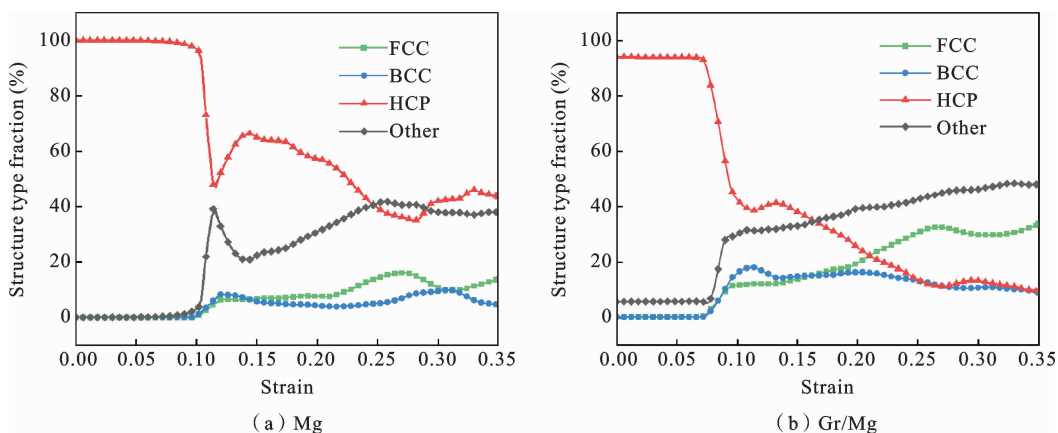


图 3 单晶 Mg 和 Gr/Mg 复合材料沿[0 0 0 1]晶向压缩时不同晶格结构类型原子的数量与应变关系图  
Fig. 3 Diagrams of the number of atoms with different lattice structure types and strains of single crystal Mg and Gr/Mg composites under compressive load along [0 0 0 1] crystal orientation

当材料处于弹性变形阶段时,单晶 Mg 和 Gr/Mg 复合材料中镁基体的原子排列保持完美的 HCP 晶格结构,材料内部几乎没有位错、孪晶等缺陷原子存在,体系内部稳定,若在弹性变形期间卸载,材料仍能恢复初始状态.

对于单晶 Mg 沿 Z 轴[0 0 0 1]晶向压缩过程如图 4(a<sub>1</sub>)~4(a<sub>8</sub>)所示. 压缩荷载作用下,镁基体中出现大量紊乱的缺陷原子,原子排列发生畸变,使得位

错在畸变原子处形核. 材料发生屈服,开始进入塑性变形阶段. 图 4(a<sub>1</sub>)可以看出,当应变等于 0.106 时,应力值到达顶峰(如图 2(c)). 应变在 0.106~0.111 期间,HCP 结构原子数量急剧下降,大量 Other 型以及少量 BCC 型和 FCC 型原子生成,如图 4(a<sub>2</sub>),应力值急剧下降. 应变在 0.111~0.142 期间,生成的 Other 型原子向新品向的 HCP 结构原子转变,如图 4(a<sub>2</sub>)~4(a<sub>3</sub>),在图 4(a<sub>3</sub>)中可以观察到在材料边

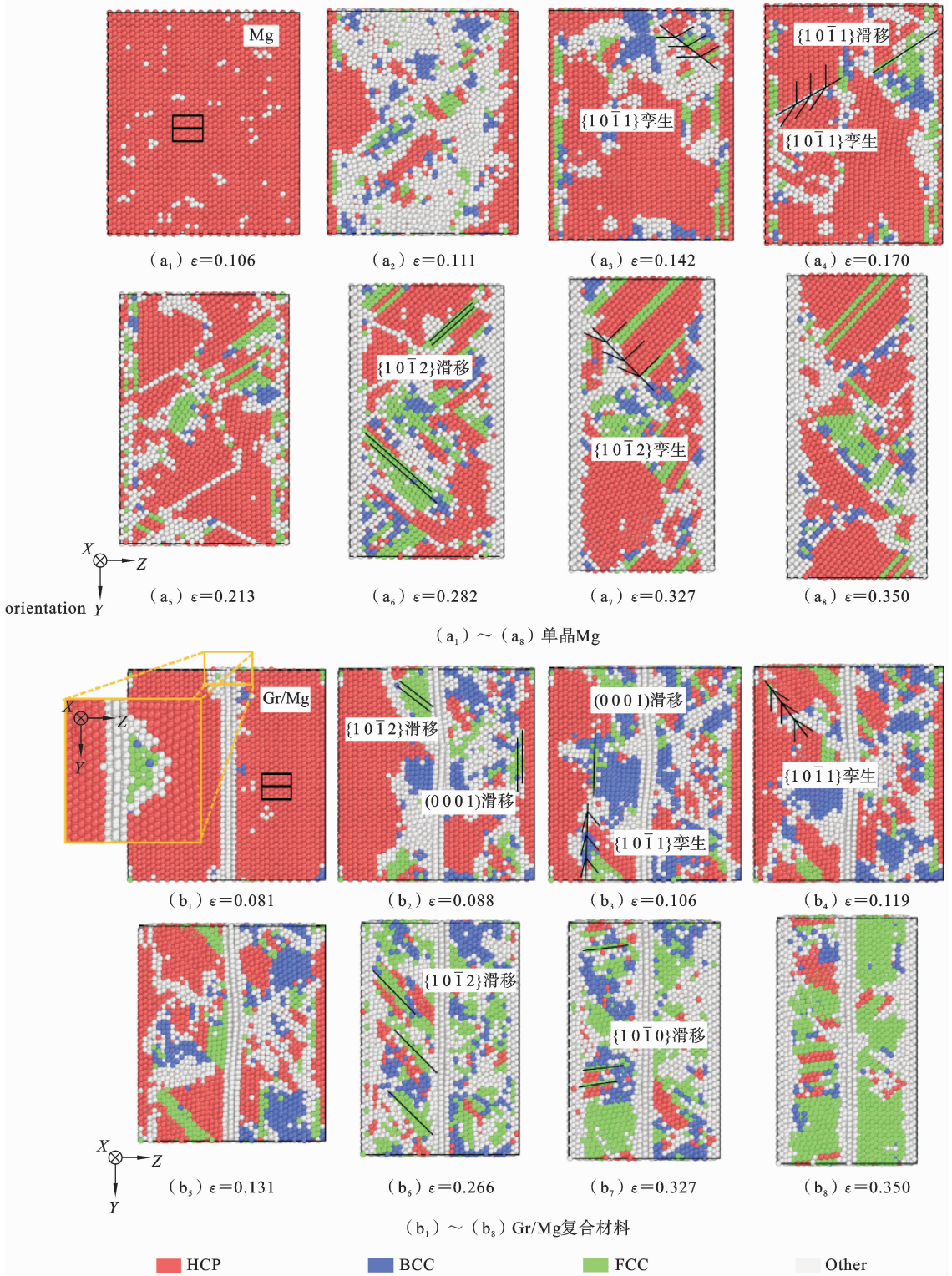


图 4 单晶 Mg 和 Gr/Mg 复合材料沿[0 0 0 1]晶向压缩原子结构图

Fig. 4 Diagrams of the atomic structure of single-crystal Mg and Gr/Mg composites under compressive load along [0 0 0 1] crystal orientation

缘有 $\{10\bar{1}1\}$ 孪晶生成. 对于单晶 Mg 来说, 在沿 $[0001]$ 晶向压缩过程中, 形成 $\{10\bar{1}1\}$ 孪生所需的临界剪切应力相比于位错滑移的更小, 位错滑移启动困难, 所以通过开启孪生来适应基体的塑性变形. 孪晶的出现使得材料硬化, 材料中应力上升. 当应变在 $0.142\sim 0.170$ 期间, 有新晶向的 HCP 结构晶粒在材料固定端附近的边缘处生成, 与未变形的原始晶粒构成 $\{10\bar{1}1\}$ 孪晶. 随着新晶粒的不断生长, 在晶粒中发现 $\{10\bar{1}1\}$ 面的层错, 如图 4(a<sub>4</sub>). 由于位错滑移, 此阶段镁基体内部应力得到释放, 应力值下降. 随着压缩荷载的继续作用, 应变在 $0.170\sim 0.282$ 期间, 晶粒不断长大后, 各个晶粒内部有大量 $\{10\bar{1}2\}$ 面上的层错原子堆积, 位错滑移在孪晶界处被中断, 应力值持续降低, 如图 4(a<sub>6</sub>). 应变在 $0.282\sim 0.350$ 期间, 堆积的大量层错 FCC 结构原子向 HCP 结构原子转变, 并且基体中观察到有大片 $\{10\bar{1}2\}$ 孪晶生成, 如图 4(a<sub>7</sub>)~(a<sub>8</sub>).

对于沿 Z 轴 $[0001]$ 晶向压缩的 Gr/Mg 复合材料变形如图 4(b<sub>1</sub>)~4(b<sub>8</sub>)所示. 应变为 $0.081$ 时, 由于石墨烯的存在, 点缺陷等在 Gr 与 Mg 界面压缩端一侧出现, 作为后期位错形核的应力源. 图 4(b<sub>1</sub>)中插图表示从 $\{10\bar{1}0\}$ 柱面观察的石墨烯附近缺陷形核的放大图, 应力在界面处释放, 开始急速下降. 在应变增加到 $0.088$ 的过程中, HCP 结构原子快速下降, 生成 BCC、FCC 以及 Other 类型原子. 同时, 应力到达石墨烯界面后又传递到固定端一侧的镁基体中, 该侧镁基体中同样有大量缺陷原子产生, 在材料中可以观测到 $(0001)$ 基面滑移和 $\{10\bar{1}2\}$ 面滑移, 如图 4(b<sub>2</sub>)所示, 应力继续降低. 随着荷载的继续作用, 材料中 HCP 结构原子主要开始向 BCC 结构原子转变, 同时有少量 FCC 和 Other 型原子生成, Gr 附近生成的 FCC 结构的原子又转化成新晶向的 HCP 结构的原子. 当应变达到 $0.106$ 时, 材料中观察到 $\{10\bar{1}1\}$ 孪晶现象, 如图 4(b<sub>3</sub>). 材料的破坏继续向材料两端延伸, 应力下降速率降低. 应变继续增加, 新晶向的 HCP 结构晶粒继续长大, 孪晶界也不断扩大, 如图 4(b<sub>4</sub>). 应变为 $0.106\sim 0.119$ 期间, 原子结构从 HCP 型向 BCC 型转变的速率与 BCC 型向新晶向 HCP 型结构转变的速率相近, 材料中各个类型原子数目处于稳定状态. 此时基体已

经破坏严重, 大部分应力由石墨烯承担, 应力开始小幅度上升. 当应变在 $0.131\sim 0.350$ 期间, 新晶向的 HCP 结构晶粒逐渐吞噬原始基体, 在此过程中观察到大量 $\{10\bar{1}2\}$ 面及 $\{10\bar{1}0\}$ 面上的层错堆积, 如图 4(b<sub>5</sub>)~4(b<sub>8</sub>). Gr/Mg 复合材料在压缩塑性变形过程中, 石墨烯的存在使其界面附近成为缺陷原子及位错滑移形核和增殖的区域, 变形分别在 Gr 两侧的镁基体中各自向材料两端延伸. 同时石墨烯的存在阻碍了位错滑移, 使得位错滑移无法穿过该界面, 在界面处形成位错积塞, 滑移速率降低, 阻碍了镁基体的进一步破坏. 由于石墨烯的强度远大于单晶镁, 当镁基体完全断裂后, 石墨烯在压缩过程中承受了大部分的应力, 使得 Gr/Mg 复合材料在塑性变形阶段的平均流动应力高于单晶 Mg. 由原子结构图可知, Gr/Mg 复合材料沿 $[0001]$ 晶向的压缩应变为 $0.35$ , 石墨烯依旧没有发生破坏, 因此, 材料在塑性变形阶段抵抗压缩变形的能力大幅提升.

由以上分析发现, 在变形小的阶段, 材料中 Other 原子很多, 而在变形大时, 各种位错和孪晶现象出现, 考虑到可能为所选取的应变率太大的原因造成, 为此通过对比分析 $210\text{ \AA}\times 210\text{ \AA}\times 210\text{ \AA}$ 的大尺寸模型, 在应变率分别为 $5\times 10^8\text{ s}^{-1}$ 与 $1\times 10^9\text{ s}^{-1}$ 下压缩变形过程中的原子结构图, 如附录图 A3 和附录图 A5 所示. 从附录图 A3 和 A5 可以看出, 沿 Z 轴 $[0001]$ 晶向压缩时, 两种应变率下模型内部原子结构的变化情况均与原始模型的类似. 附录图 A2 和附录图 A4 分别为它们的应力-应变曲线, 结合原子结构图对比可以得出, 应变率( $5\times 10^8\text{ s}^{-1}$ 及 $1\times 10^9\text{ s}^{-1}$ )对此方向上压缩力学性能及内部原子结构的转变影响较小.

结合图 2~4 可以得出, 石墨烯的加入使得材料的变形机制发生变化. 插入石墨烯使得材料中的晶粒更加细化, 细化镁基体晶粒尺寸, 可以提升材料强度及延展性等力学性能<sup>[40]</sup>. 晶粒细化会增大晶界体积与材料总体积之比, 进而增强晶界硬化效应. 这种硬化作用有助于晶界滑移 (GBS) 与非基面滑移启动, 使得晶界处的局部应力集中有效释放. 因此, 要达到孪晶形核所需的应力条件变得更加困难, 从而抑制了孪生变形的发生<sup>[41]</sup>. 在金属镁中, 孪生对于材料塑性变形的作用主要体现在协调晶粒滑移, 进

而增强材料的变形能力,提高塑性.值得注意的是,镁基体中原本不易启动的滑移系随着晶粒的细化被激活,因此可以在变形过程中观察到大量的滑移变形<sup>[42]</sup>.位错、孪生等缺陷首先在石墨烯界面附近形核增殖,逐渐向材料边缘延伸,同时界面的存在阻碍了位错的传播,使得变形在 Gr 两侧的镁基体中各自进行.当单晶 Mg 沿 $[0\ 0\ 0\ 1]$ 晶向施加压缩荷载时,可以观察到 $\{1\ 0\ \bar{1}\ 2\}$ 及 $\{1\ 0\ \bar{1}\ 1\}$ 面的滑移, $\{1\ 0\ \bar{1}\ 1\}$ 及 $\{1\ 0\ \bar{1}\ 2\}$ 孪生启动,加入石墨烯后,基体内存在 $\{1\ 0\ \bar{1}\ 2\}$ 、 $\{1\ 0\ \bar{1}\ 0\}$ 及 $(0\ 0\ 0\ 1)$ 面的滑移和 $\{1\ 0\ \bar{1}\ 1\}$ 孪生.由于复合材料模型具有层合结构,在变形过

程中能够将载荷有效传递到石墨烯上,当镁基体破坏后,石墨烯可以承受大部分应力,因此相对于单晶 Mg 而言,Gr/Mg 复合材料在塑性变形阶段的平均流动应力大幅提升.并且由于 Mg 基体对 Gr 的约束作用,有效限制了 Gr 的褶皱和弯曲,在该取向对 Gr/Mg 复合材料施加压缩荷载,应变达到 0.35 时,石墨烯依旧没有断裂,材料塑性变形能力大幅提升.

为更深入了解复合材料的强化机理,采用可视化软件 OVITO 中 DXA(位错分析模块)分析压缩变形时位错线的分布及其滑移特性,如图 5 所示.

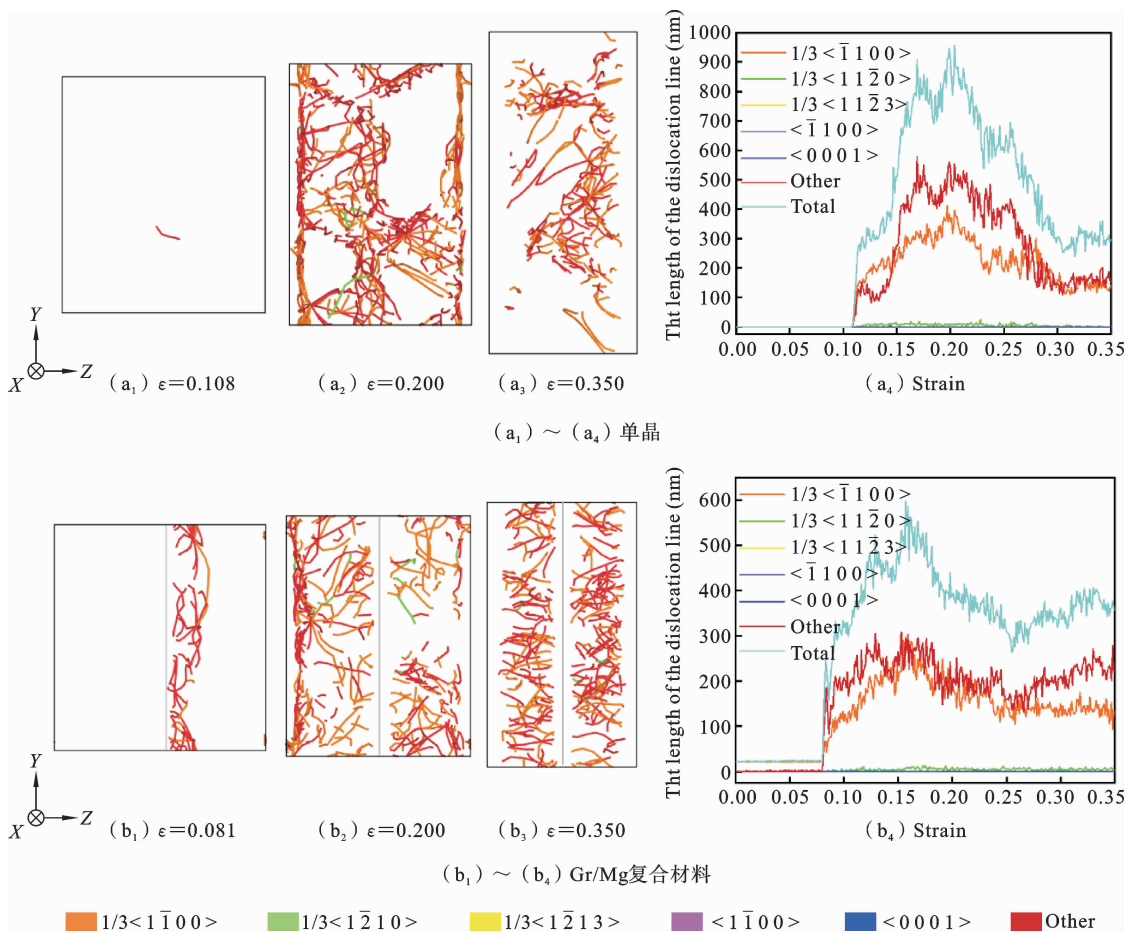


图 5 单晶 Mg 和 Gr/Mg 复合材料沿 $[0\ 0\ 0\ 1]$ 晶向压缩位错图

Fig. 5 Dislocation diagrams of single-crystal Mg and Gr/Mg composites under compressive load along  $[0\ 0\ 0\ 1]$  crystal orientation

图 5(a<sub>1</sub>)~(a<sub>3</sub>)、(b<sub>1</sub>)~(b<sub>3</sub>)分别对应单晶 Mg 和 Gr/Mg 复合材料在不同应变下的位错线分布图,而(a<sub>4</sub>)和(b<sub>4</sub>)分别表示单晶 Mg 和 Gr/Mg 复合

材料压缩时位错线长度随应变的变化曲线.其中,橙线代表 $1/3\langle\bar{1}\ 1\ 0\ 0\rangle$ 位错,绿线表示 $1/3\langle\bar{1}\ \bar{2}\ 1\ 0\rangle$ 位错,黄线表示 $1/3\langle\bar{1}\ \bar{2}\ 1\ 3\rangle$ 位错,紫线表示 $\langle\bar{1}\ 1\ 0\ 0\rangle$ 位错,蓝线表示 $\langle 0\ 0\ 0\ 1\rangle$ 位错,红线表示其他类型的位错.

$\bar{1}00$ 位错,蓝线表示 $\langle 0001 \rangle$ 位错,红线代表无法识别的 Other 类型位错。

从图 5(a<sub>1</sub>)、(b<sub>1</sub>)可以看出,沿 Z 轴 $[0001]$ 晶向压缩单晶 Mg 和 Gr/Mg 复合材料两种材料,初始位错分别出现在应变为 0.108、0.081 时,位错线破坏了晶体结构的完整性,使得原子之间结合力降低,晶体应力释放,对应图 2(c)应力-应变曲线中应力急剧降低,符合位错理论.材料发生屈服,开始进入塑性变形阶段.随着应变的增加,单晶 Mg 中大量  $1/3 \langle \bar{1}00 \rangle$  和 Other 类型位错产生并扩展,在材料变形中起主导作用,同时伴随着少量  $1/3 \langle \bar{2}10 \rangle$  位错产生.当应变达到 0.215 左右时,总位错线长度达到峰值后开始降低,应变为 0.3 时开始在一个稳定值附近波动.界面的存在本身就被视为一种缺陷,当石墨烯被引入复合材料体系时,它充当了缺陷的来源.因此,界面附近区域成为了位错形核与增殖的优选位置,位错在基体和界面附近大量生成并扩展,如图 5(b<sub>1</sub>).与单晶 Mg 相同,Gr/Mg 复合材料中位错同样主要是  $1/3 \langle \bar{1}00 \rangle$ 、Other 型和少量  $1/3 \langle \bar{2}10 \rangle$  位错.同时对比图 5(a<sub>2</sub>)与(b<sub>2</sub>)、(a<sub>3</sub>)与(b<sub>3</sub>)可以看出,由于界面的阻碍,Gr/Mg 复合材料中位错线的长度呈现出显著的短化现象.这种短化的位错线在成核过程中面临着较大的难度,这意味着石墨烯的存在对位错运动表现出强烈抑制作用.换言之,石墨烯因其出色的高强度特性,使得位错在与界面接触时产生钉扎效应,进而阻碍了位错穿越石墨烯界面进入邻近基体.结果使位错的发展在石墨烯两侧各自的镁基体中进行,抑制了镁基体的进一步塑性变形.随着应变的增加,位错湮灭速率开始大于位错生成的速率,位错的长度与数量不断减少,有效提升了复合材料的力学性能.与单晶 Mg 不同的是,应变为 0.250 左右时,Gr/Mg 复合材料中 Other 型位错又开始增殖,以抵抗材料压缩荷载下的塑性变形,如图 5(b<sub>3</sub>).

以上 DXA 分析可知,单晶 Mg 中位错线长度和数量随着应变增加显著增长,贯穿整个镁基体,之后开始下降后趋于平稳.在 Gr/Mg 复合材料中,位错到达石墨烯表面无法贯穿,位错在材料中滑移速率下降,使得材料破坏程度降低.随着加载的继续,位错线数量减少了一段时间后又开始增加,以抵抗压

缩作用下的塑性变形.结果表明,石墨烯的存在阻碍了位错的发展,抑制了镁基体的进一步破坏,复合材料的压缩强度大幅提升.

## 2.2 石墨烯层数对压缩性能的影响

制备 Gr/Mg 复合材料过程中,多层石墨烯之间会有堆积现象产生.故在此探讨不同层数和堆积状态下的 Gr 对复合材料压缩性能的影响.以 Gr/Mg 复合材料沿 Z 轴压缩为例,图 6 给出石墨烯层数为零层、一层及在不同堆积状态下(二层和三层)复合材料的应力-应变曲线,其中 Gr2/Mg、Gr3/Mg 材料中插入的石墨烯为堆叠状态,Gr-2/Mg、Gr-3/Mg 中石墨烯为分离状态.多层石墨烯复合材料的压缩应力-应变曲线规律与单层石墨烯/镁复合材料基本一致,在压缩初始阶段应力随着应变的增大近似线性增长,材料发生弹性变形;当材料中有无法恢复的缺陷原子生成时,复合材料开始发生屈服,进入塑性变形阶段;接着复合材料的应力急速下降,降低到一定值后出现应力强化现象,这是因为镁基体断裂后,大部分荷载传递到石墨烯上,由石墨烯承担.相对于单层石墨烯复合材料,多层石墨烯复合材料由于石墨烯的含量增加,在塑性变形阶段,材料的平均流动应力更高,对材料整体压缩性能的提升效果更好.

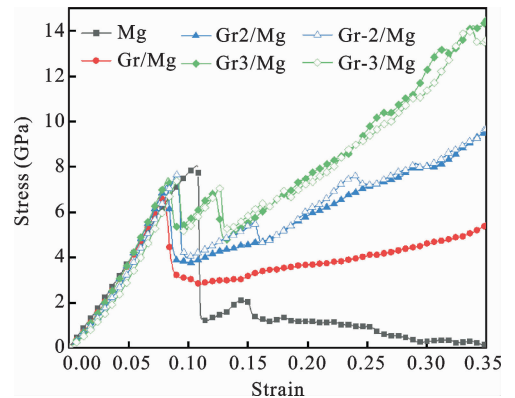


图 6 单晶 Mg 和不同层数 Gr/Mg 复合材料压缩应力-应变曲线图

Fig. 6 Stress-strain curves of single-crystal Mg and Gr/Mg composites with different number of Gr layers under compressive load

表 2 列出了含不同层数石墨烯复合材料的弹性

模量、屈服应力、屈服应变以及塑性变形阶段的平均流动应力值。可以看出相对于单层石墨烯复合材料，石墨烯堆叠型复合材料的弹性模量随着层数的增加不断升高，二层、三层分别提升了 3.3%、5.4%，为 86.8 GPa、88.5 GPa；而石墨烯分离型复合材料的弹性模量随着层数的增加不断降低，二层、三层分别减少了 4.5%、11.5%，为 80.2 GPa、74.3 GPa。这是由于石墨烯层的存在本身就是一种缺陷，石墨烯处于分离状态时，缺陷面的增加使得材料弹性模量下降。加入多层石墨烯，材料屈服应力和屈服应变均在一定程度上有所提升，然而由于石墨烯的堆积状态不同，对材料屈服应变的影响较大。通过分析可以看出当石墨烯处于分离状态时，屈服应变更大。塑性变形阶段复合材料平均流动应力随着层数的增加大幅提升，与单层石墨烯/镁复合材料相比，二层石墨烯堆叠型和分离型复合材料平均流动应力分别提高了 62.7%、71.0%，为 6.28 GPa、6.60 GPa。石墨烯为三层时堆叠型和分离型平均流动应力分别提高了 128.8%、126.4%，为 8.83 GPa、8.74 GPa。这是由

于层数越多，复合材料中会存在更大面积的石墨烯界面，从而使更多的位错可以被界面阻碍。除了界面对位错的阻碍作用，在压缩过程中，界面剪切应力将荷载由基体向石墨烯传递，石墨烯层数越多，可以承受应力的石墨烯面越大。因此，对于石墨烯层数较多的复合材料，Gr/Mg 复合材料呈现更好的压缩性能。在应力-应变曲线中，部分材料的应力出现多次骤降后回升现象。通过观察材料变形中的原子结构图和位错分布图可知，在压缩变形过程中，镁基体的变形在被石墨烯界面分离的基体中各自进行，被石墨烯隔开的各部分基体分别断裂导致应力出现骤降现象。随着压缩的进行，荷载由剩余未完全破坏的镁基体与石墨烯来承担。综上，石墨烯/镁复合材料塑性变形阶段的平均流动应力的大小与石墨烯的层数具有强相关性，而弹性模量、屈服应力和屈服应变值除了与层数相关外，还与石墨烯在复合材料中的堆积状态密切相关。适当增加石墨烯层数能显著提高 Gr/Mg 复合材料塑性变形阶段的压缩力学性能。

表 2 不同 Gr 层数复合材料的力学性能

Table 2 Mechanical properties of composites with different number of Gr layers

模型	材料	Gr 层数	弹性模量(GPa)	屈服应力(GPa)	屈服应变	平均流动应力(GPa)
C <sub>0</sub>	Mg	未添加 Gr	79.4	8.05	0.107	0.93
C <sub>1</sub>	Gr/Mg	1 层	84.0	6.64	0.081	3.86
C <sub>2</sub>	Gr2/Mg	2 层(堆叠)	86.8	7.18	0.082	6.28
C <sub>-2</sub>	Gr-2/Mg	2 层(分离)	80.2	7.65	0.090	6.60
C <sub>3</sub>	Gr3/Mg	3 层(堆叠)	88.5	7.52	0.083	8.83
C <sub>-3</sub>	Gr-3/Mg	3 层(分离)	74.3	7.40	0.091	8.74

### 2.3 温度对压缩性能的影响

通过模拟单晶 Mg 及 Gr/Mg 复合材料在不同温度下的压缩变形过程，得到了其压缩应力-应变曲线，如图 7 所示。在相同温度下，加入 Gr 的复合材料与单晶 Mg 相比，弹性模量几乎不受影响，在塑性变形阶段的压缩力学性能明显优于单晶 Mg。而不同温度下的 Gr/Mg 复合材料压缩应力-应变曲线变化趋势大体一致，但随着温度的升高，材料的压缩屈服强度出现了明显的下降趋势。这是因为在原子尺

度上，由于温度升高，原子间存在强相互干扰作用，晶体中的原子在其晶格平衡位置附近自由振动，温度越高振动越剧烈<sup>[43,44]</sup>，当温度升高时，原子在晶格位置附近无规则振动加剧，导致系统能量升高，结构的稳定性下降。其中在 600 K 高温下压缩时，由于复合材料中石墨烯两侧的镁基体分别断裂的时间不同，因此应力-应变曲线中应力出现两次骤降现象。Gr/Mg 复合材料的弹性模量和屈服应力随温度变化，在所选温度范围内(10 K-600 K)，弹性模量在

10 K 时为 97.1 GPa, 300 K 时为 81.2 GPa, 600 K 时为 70.8 GPa. 与 10 K 相比, 300 K 与 600 K 温度下 Gr/Mg 复合材料的弹性模量分别降低了 16.4%、27.1%. 复合材料屈服应力在 10 K 时为 8.17 GPa, 300 K 时为 6.64 GPa, 600 K 时为 5.64 GPa. 与温度为 10 K 相比, 300 K 与 600 K 温度下屈服应力分别降低了 18.7%、31.0%. 随着温度的升高, Gr/Mg 复合材料屈服应力明显下降, 这说明温度的变化会显著影响 Gr/Mg 复合材料的压缩力学性能.

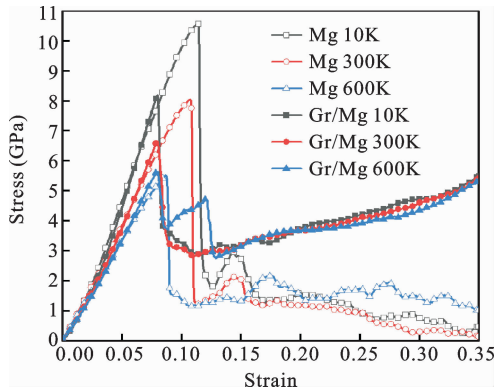


图 7 不同温度下单晶 Mg 和 Gr/Mg 复合材料压缩应力-应变曲线

Fig. 7 Stress-strain curves of single-crystal Mg and Gr/Mg composites under compressive load at different temperatures

### 2.4 应变率对压缩性能的影响

为探究应变率对 Gr/Mg 复合材料压缩力学性能的影响, 在温度不变 (300 K) 情况下, 分别在  $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 、 $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$  及  $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$  应变率下对单晶 Mg 和 Gr/Mg 复合材料进行压缩模拟, 得到了 Gr/Mg 复合材料在不同应变率下的压缩应力-应变曲线, 如图 8 所示.

弹性变形期间 (应变小于 0.075 时), Gr/Mg 复合材料在不同应变率下的应力-应变曲线与单晶 Mg 的基本处于重合状态, 弹性模量基本相同, 说明应变率对 Gr/Mg 复合材料抵抗弹性变形的能力影响不大, 这与 Li<sup>[45]</sup> 在研究中得出的应变率对 Gr/Cu 复合材料的拉伸力学性能影响较小的结果相符. 随着应变率的增大, Gr/Mg 复合材料的屈服应力和屈服应变有所提升, 而在塑性变形阶段的平均流动应力

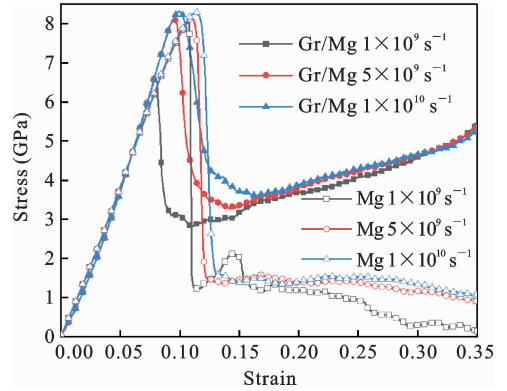


图 8 不同应变率下单晶 Mg 和 Gr/Mg 复合材料压缩应力-应变曲线

Fig. 8 Stress-strain curves of single-crystal Mg and Gr/Mg composites under compressive load with different strain rates

几乎没有发生变化.

### 3 结论

本文通过分子动力学模拟方法, 建立 Mg 及 Gr/Mg 复合材料的分子动力学模型, 研究了 Mg 和 Gr/Mg 复合材料的压缩力学性能, 对不同条件下的模型在压缩荷载作用下的变形行为进行分析, 从而探究 Gr/Mg 复合材料的压缩变形机理, 得到了以下结论:

(1) 对不同晶向施加压缩荷载时, 单晶 Mg 的力学性能展现出显著的各向异性特征. 引入石墨烯使得原本在镁基体中难以启动的滑移系因晶粒的细化而被激活, 有助于释放内部应力. 同时导致了孪晶激活应力增加, 抑制了孪生变形; 位错、孪生等缺陷在石墨烯界面附近形核增殖, 并逐渐向材料边缘延伸, 界面有效地阻碍了位错传播. 由于复合材料的层合结构, 载荷可以有效地传递到石墨烯, 使其在镁基体破坏后承受大部分应力, 阻碍镁基体的进一步破坏, 复合材料在塑性阶段的平均流动应力显著提升. 此外, Mg 基体对 Gr 的约束作用有效地限制了 Gr 的褶皱和弯曲, 当复合材料沿  $[0\ 0\ 0\ 1]$  晶向的压缩应变为 0.35 时, 石墨烯依旧没有发生破坏, 这进一步增强了复合材料的压缩力学性能.

(2) 单晶 Mg 压缩时,位错线的长度和数量随应变的增加呈现增长趋势并逐渐贯穿整个镁基体,在达到某个临界值后,开始下降后趋于平稳.相比之下,Gr/Mg 复合材料中位错运动到石墨烯表面无法继续贯穿,导致其滑移速率降低,进而降低了材料的破坏.随着加载的持续进行,位错线的数量在经历一段时间的减少后又开始增加,增加的位错线有助于抵抗压缩塑性变形.

(3) 在变形初始阶段,石墨烯堆积状态对材料弹性模量影响不大.相对于单层石墨烯,多层石墨烯复合材料中石墨烯层数越多,复合材料压缩屈服应力、屈服应变及塑性变形阶段的平均流动应力越大.复合材料中石墨烯处于分离状态时屈服应变更大.复合材料在压缩过程中,被石墨烯隔开的各部分镁基体分别断裂导致应力出现骤降又回升现象,荷载主要由剩余未完全破坏的镁基体与石墨烯来承担.

(4) 在所选的温度范围内(10 K~600 K),与10 K 相比,随着温度升高,Gr/Mg 复合材料的弹性模量分别降低了16.4%、27.1%,屈服应力也分别降低了18.7%、31.0%.结果表明,温度因素显著影响 Gr/Mg 复合材料的压缩力学性能.

(5) 在所选的应变率范围内( $10^9 \text{ s}^{-1} \sim 10^{10} \text{ s}^{-1}$ ),Gr/Mg 复合材料的弹性模量和塑性变形阶段的平均流动应力受应变率影响不明显,但随着应变率的增大,复合材料的屈服应力和屈服应变均有所提升.

## 参考文献

- [1] Song J F, She J, Chen D L, Pan F S. Latest research advances on magnesium and magnesium alloys worldwide[J]. *Journal of Magnesium and Alloys*, 2020, 8(1): 1-41.
- [2] Lu L, Lai M O, Froyen L. Structure and properties of Mg metal-metal composite[J]. *Key Engineering Materials*, 2002, 230: 287-290.
- [3] 郭文显, 陈妹琼, 张敏, 柳鹏, 张燕, 蔡志泉, 程发良. 石墨烯/碳化钴钼复合材料作为微生物燃料电池阴极催化剂的研究[J]. *环境工程学报*, 2016, 10(11): 6529-6535. (Guo X W, Chen M Q, Zhang M, Liu P, Zhang Y, Cai Z Q, Cheng F L. Graphene / Co-Mo carbide as cathodic catalyst in microbial fuel cells[J]. *Chinese Journal of Environmental Engineering*, 2016, 10(11): 6529-6535. (in Chinese))
- [4] Meyer J C, Geim A K, Katsnelson M I, Novoselov K S, Booth T J, Roth S. The structure of suspended graphene sheets [J]. *Nature*, 2007, 446 (7131): 60-63.
- [5] 蓝永庭, 陈渊, 李武军, 莫玉珍, 李启裘. 镁合金晶体塑性本构模型与非均匀孪生变形分析[J]. *固体力学学报*, 2019, 40(2): 169-182. (Lan Y T, Chen Y, Li W J, Mo Y Z, Li Q X. Crystal plasticity constitutive model and analysis of heterogeneous deformation by twinning for magnesium alloys[J]. *Chinese Journal of Solid Mechanics*, 2019, 40(2): 169-182. (in Chinese))
- [6] 郭雅芳, 汤笑之, 俎群. 密排六方金属中的孪生及孪晶位错机制[J]. *固体力学学报*, 2021, 42(2): 107-120. (Guo Y F, Tang X Z, Zu Q. Mechanisms of twinning and twinning dislocation in hcp metals[J]. *Chinese Journal of Solid Mechanics*, 2021, 42(2): 107-120. (in Chinese))
- [7] 薛春. 基于分子动力学的镁单晶组织与性能变化规律研究[D]. 山西: 太原科技大学, 2021. (Xue C. Study on the Change Law of Microstructure and Properties of Magnesium Single Crystal Based on Molecular Dynamics[D]. Shanxi: Taiyuan University Of Science and Technology, 2021. (in Chinese))
- [8] Liu B Y, Zhang Z, Liu F, Yang N, Li B, Chen P, Wang Y, Peng J H, Li J, Ma E, Shan Z W. Rejuvenation of plasticity via deformation graining in magnesium[J]. *Nature Communications*. 2022, 13(1): 1060.
- [9] 杨宝成, 彭艳, 潘复生, 石宝东. 基于分子动力学镁合金塑性变形机制的研究进展[J]. *材料工程*, 2019, 47(08): 40-48. (Yang B C, Peng Y, Pan F S, Shi B D. Research progress in plastic deformation mechanism of Mg alloys based on molecular dynamics[J]. *Journal of Materials Engineering*, 2019, 47(8): 40-48. (in Chinese))
- [10] 王煜焯, 汤爱涛, 潘荣剑, 潘复生. 分子动力学在镁及镁合金微观塑性变形中的应用进展[J]. *材料导报*, 2019, 33(19): 3290-3297. (Wang Y H, Tang A T, Pan R J, Pan F S. Progress in the application of molecular dynamics in microscopic plastic deformation

- of magnesium and its alloys [J]. *Materials Review*, 2019, 33(19): 3290-3297. (in Chinese))
- [11] Xue C, Li S, Chu Z, Yang Q, Li Y, Ma L, Tuo L. Molecular dynamics study on the effect of temperature on HCP  $\rightarrow$  FCC phase transition of magnesium alloy [J]. *Journal of Magnesium and Alloys*, 2023 Oct 1, 11(10): 3749-64.
- [12] 刘庆. 镁合金塑性变形机理研究进展 [J]. *金属学报*, 2010, 46(11): 1458-1472. (Liu Q. Research progress on plastic deformation mechanism of Mg alloys [J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2010, 46(11): 1458-1472. (in Chinese))
- [13] 单智伟, 刘博宇. Mg 的  $\{10\bar{1}2\}$  形变孪晶机制 [J]. *金属学报*, 2016, 52(10): 1267-1278. (Shan Z W, Liu B Y. The mechanism of  $\{10\bar{1}2\}$  deformation twinning in magnesium [J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2016, 52(10): 1267-1278. (in Chinese))
- [14] 范海冬. 镁合金塑性机制研究综述 [J]. *固体力学学报*, 2019, 40(4): 287-325. (Fan H D. Plastic deformation mechanisms in magnesium alloys [J]. *Chinese Journal of Solid Mechanics*, 2019, 40(4): 287-325. (in Chinese))
- [15] Zhang C, Lu C, Pei L, Li J, Wang R, Tieu K. The negative Poisson's ratio and strengthening mechanism of nanolayered graphene/Cu composites [J]. *Carbon*, 2019, 143: 125-137.
- [16] Xiao H, Ma G, Ye J, He Y. Preparation of graphene reinforced AZ31B magnesium-based composites by stirring casting [J]. *Vacuum*, 2021, 191: 110281.
- [17] Jiang Y Y, Xu R, Tan Z Q, Ji G, Fan G L, Li Z, Xiong D B, Guo Q, Li Z Q, Zhang D. Interface-induced strain hardening of graphene nanosheet/aluminum composites [J]. *Carbon*, 2019, 146: 17-27.
- [18] Wang M, Zhao Y, Wang L D, Zhu Y P, Wang X J, Sheng J, Yang Z Y, Shi H L, Shi Z D, Fei W D. Achieving high strength and ductility in graphene/magnesium composite via an in-situ reaction wetting process [J]. *Carbon*, 2018, 139: 954-963.
- [19] Pillari L K, Lessoway K, Bichler L. Carbon nanotube and graphene reinforced magnesium matrix composites; a state-of-the-art review [J]. *Journal of Magnesium and Alloys*, 2023, 11(6): 1825-1905.
- [20] Abazari S, Shamsipur A, Bakhsheshi-Rad H R, Drelich J W, Goldman J, Sharif S, Ismail A F, Razzaghi M. Magnesium-based nanocomposites: a review from mechanical, creep and fatigue properties [J]. *Journal of Magnesium and Alloys*, 2023, 11(8): 2655-2687.
- [21] Xiang S, Wang X, Gupta M., Wu K, Hu X, Zheng M. Graphene nanoplatelets induced heterogeneous bimodal structural magnesium matrix composites with enhanced mechanical properties [J]. *Scientific Reports*, 2016, 6(1): 38824.
- [22] Feng S W, Guo Q, Li Z, Fan G L, Li Z Q. Strengthening and toughening mechanisms in graphene-Al nanolaminated composite micro-pillars [J]. *Acta Materialia*, 2017, 125: 98-108.
- [23] Zhao L, Guo Q, Li Z, Fan G L, Li Z Q, Xiong D B, Su Y S, Tan Z Q, Zhang J, Zhang D. Strain-rate dependent deformation mechanism of graphene-Al nanolaminated composites studied using micro-pillar compression [J]. *International Journal of Plasticity*, 2018, 105: 128-140.
- [24] Meng L L, Hu X S, Wang X J, Zhang C L, Shi H L, Xiang Y Y, Liu N J, Wu K. Graphene nanoplatelets reinforced Mg matrix composite with enhanced mechanical properties by structure construction [J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2018, 733: 414-418.
- [25] 周霞, 刘霄霞. 石墨烯纳米片增强镁基复合材料力学性能及增强机制 [J]. *金属学报*, 2020, 56(02): 240-248. (Zhou X, Liu X X, . Mechanical properties and strengthening mechanism of graphene nanoplatelets reinforced magnesium matrix composites [J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2020, 56(02): 240-248. (in Chinese))
- [26] 明知非, 宋海洋, 安敏荣. 基于分子动力学模拟的石墨烯镁基复合材料力学行为 [J]. *物理学报*, 2022, 71(8): 086201. (Ming Z F, Song H Y, An M R. Mechanical behavior of graphene magnesium matrix composites based on molecular dynamics simulation [J]. *Acta Phys Sin*, 2022, 71(8): 086201. (in Chinese))
- [27] Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics [J]. *Journal of Computational Physics*, 1995, 117(1): 1-19.
- [28] Haile J M, Johnston I, Mallinckrodt A J, McKay S.

- Molecular dynamics simulation: elementary methods [J]. *Computers in Physics*, 1993, 7(6): 625-625.
- [29] Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO-the Open Visualization Tool[J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2009, 18(1): 015012.
- [30] Sun D Y, Mendeleev M I, Becker C A, Kudin K, Haxhimali T, Asta M, Hoyt J J, Karma A, Srolovitz D J. Crystal-melt interfacial free energies in hcp metals: A molecular dynamics study of Mg[J]. *Physical Review B*, 2006, 73(2): 024116.
- [31] Stuart S J, Tutein A B, Harrison J A. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2000, 112(14): 6472-6486.
- [32] Sammalkorpi M, Krashennnikov A, Kuronen A, Nordlund K, Kaski K. Mechanical properties of carbon nanotubes with vacancies and related defects[J]. *Physical Review B*, 2004, 70(24): 245416.
- [33] Barfmal M, Montazeri A. MD-based design of SiC/graphene nanocomposites towards better mechanical performance [J]. *Ceramics International*, 2017, 43(18): 17167-17173.
- [34] Zhou X, Liu X X, Sansoz F, Shen M Q. Molecular dynamics simulation on temperature and strain rate-dependent tensile response and failure behavior of Ni-coated CNT/Mg composites[J]. *Applied Physics A*, 2018, 124: 1-11.
- [35] Zhou X, Song S Y, Li L, Zhang R J. Molecular dynamics simulation for mechanical properties of magnesium matrix composites reinforced with nickel-coated single-walled carbon nanotubes[J]. *Journal of Composite Materials*, 2016, 50(2): 191-200.
- [36] White A. Intermolecular Potentials of Mixed Systems: Testing the Lorentz-Berthelot Mixing Rules with Ab initio Calculations[Z]. DEFENCE SCIENCE AND TECHNOLOGY ORGANISATION MELBOURNE (AUSTRALIA), 2000.
- [37] 郭融. 石墨烯/铝复合材料的拉伸、剪切和冲击性能研究[D]. 陕西: 西安建筑科技大学, 2022. (Guo R. Study on Tensile, Shear and Impact Properties of Graphene/Aluminum composites[D]. Shaanxi: Xi'an University of Architecture and Technology, 2022. (in Chinese))
- [38] 田莲娟. 合金元素对镁合金临界剪切应力影响的研究[D]. 重庆: 重庆大学, 2022. (Tian L J. Study of Effects of Alloying Elements on Critical Shear Stress of Magnesium Alloys[D]. Chongqing: Chongqing University, 2022. (in Chinese))
- [39] 汉芮岐. 石墨烯/铝基复合材料强化机制和力学行为的模拟研究[D]. 陕西: 西安石油大学, 2021. (Han R Q. Simulation of Strengthening Mechanism and Mechanical Behavior of Graphene/Aluminum Matrix Composites[D]. Shaanxi: Xi'an Shiyou University, 2021. (in Chinese))
- [40] Ali Y, Qiu D, Jiang B, Pan F S, Zhang M X. Current research progress in grain refinement of cast magnesium alloys: A review article[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2015, 619: 639-651.
- [41] Choi S H, Kim J K, Kim B J, Park Y B. The effect of grain size distribution on the shape of flow stress curves of Mg-3Al-1Zn under uniaxial compression [J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2008, 488(1-2): 458-467.
- [42] Ghaderi A, Barnett M R. Sensitivity of deformation twinning to grain size in titanium and magnesium[J]. *Acta materialia*, 2011, 59(20): 7824-7839.
- [43] Duan K, Zhu F L, Tang K, He L P, Chen Y M, Liu S. Effects of chirality and number of graphene layers on the mechanical properties of graphene-embedded copper nanocomposites[J]. *Computational Materials Science*, 2016, 117: 294-299.
- [44] 朱佳琦. 石墨烯/铝复合材料力学性能分子动力学模拟[D]. 北京: 北京工业大学, 2019. (Zhu J Q. Study on Mechanical Properties of Graphene/Aluminum Composites by Molecular Dynamics Method[D]. Beijing: Beijing University of Technology, 2019. (in Chinese))
- [45] Li L, Sun R, Zhang Y, Kitipornchai S, Yang J. Mechanical behaviours of graphene reinforced copper matrix nanocomposites containing defects[J]. *Computational Materials Science*, 2020, 182: 109759.

# Molecular Dynamics Study of the Effect of Graphene on the Compressive Properties of Magnesium Matrix Composites

Jun Hua    Xiaoru Xing    Yunlong Xie    Dong Zhao

(School of Science, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an, 710055)

**Abstract** Magnesium (Mg), a lightweight metal material, is constrained in its applications due to poor plasticity and low strength at high temperatures. Graphene (Gr) possesses a large specific surface area and high strength, making it an ideal reinforcement for improving the mechanical properties of materials. A molecular dynamics (MD) simulation was employed to investigate the mechanical behaviors of single-crystal Mg and Gr/Mg composites under compressive loading. Through the analysis of stress-strain curves, atomic structure diagrams, and dislocation distributions, the microscopic deformation mechanisms of single-crystal Mg and Gr/Mg composites under compressive loading were explored. Additionally, the influence of factors such as the number of Gr layers, loading strain rate, and temperature on the mechanical properties of materials was studied. Results reveal that single-crystal Mg exhibits anisotropic characteristics under compressive loading. Addition of Gr enables the activation of difficult-to-initiate slip systems in the Mg matrix due to grain refinement. This leads to stress release and difficulty in initiating twinning deformation. Near the Gr interface, defects such as dislocations and twins nucleate and proliferate, effectively transferring the load to Gr, thereby elevating the average flow stress during the plastic deformation stage of the composites. Furthermore, the Mg matrix restricts the folding and bending of Gr, leading to an enhancement in material toughness. As a result, when the Gr/Mg composite is compressed along the  $[0\ 0\ 0\ 1]$  crystal direction to a strain of 0.35, the Gr remains intact without fracture. Dislocations in Gr/Mg composite materials cannot penetrate the Gr layer, thus suppressing Mg matrix damage. Increased dislocation lines can resist compressive plastic deformation. In composites featuring multiple layers of Gr, the yield stress, yield strain, and average flow stress during the plastic deformation stage increase with the number of Gr layers. Additionally, the yield strain is higher when Gr layers are separated compared to being stacked. Within the temperature range of 10 K-600 K, the elastic modulus and yield stress of Gr/Mg composites decrease with increasing temperature. However, the strain rate has a minor effect on the elastic modulus and average flow stress during the plastic deformation of Gr/Mg composites. Nonetheless, increasing the strain rate can enhance the yield stress and yield strain of the composites.

**Key words** graphene, magnesium matrix composites, compressive properties, molecular dynamics, dislocation

### 附录 大尺寸模型单晶 Mg 和 Gr/Mg 的压缩性能

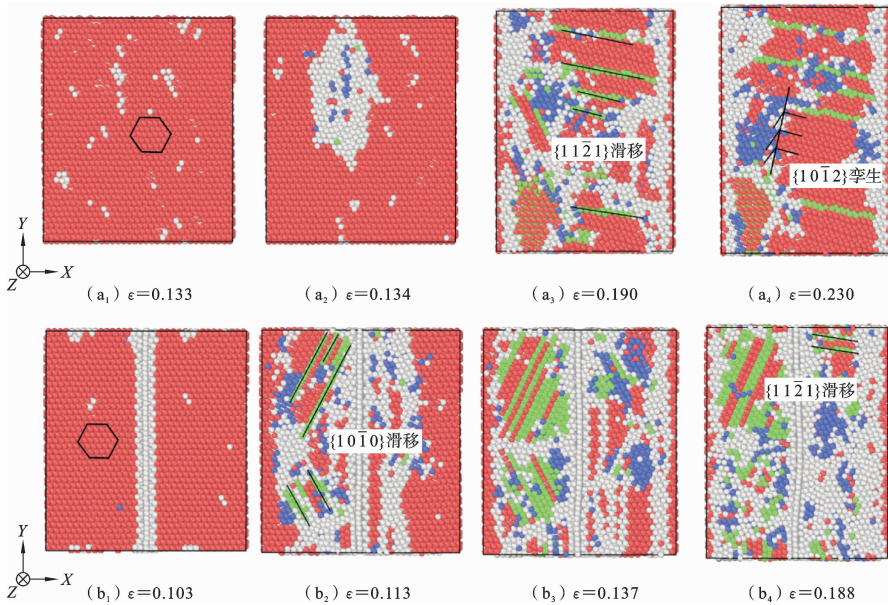


图 A1 沿 X 轴 $[1\ 1\ \bar{2}\ 0]$ 晶向压缩原子结构图:(a<sub>1</sub>)~(a<sub>4</sub>) 单晶 Mg; (b<sub>1</sub>)~(b<sub>4</sub>) Gr/Mg 复合材料

Fig. A1 Atomic structure diagram compressed along the X-axis  $[1\ 1\ \bar{2}\ 0]$  crystal direction;

(a<sub>1</sub>)~(a<sub>4</sub>) Single crystal Mg; (b<sub>1</sub>)~(b<sub>4</sub>) Gr/Mg composite materials

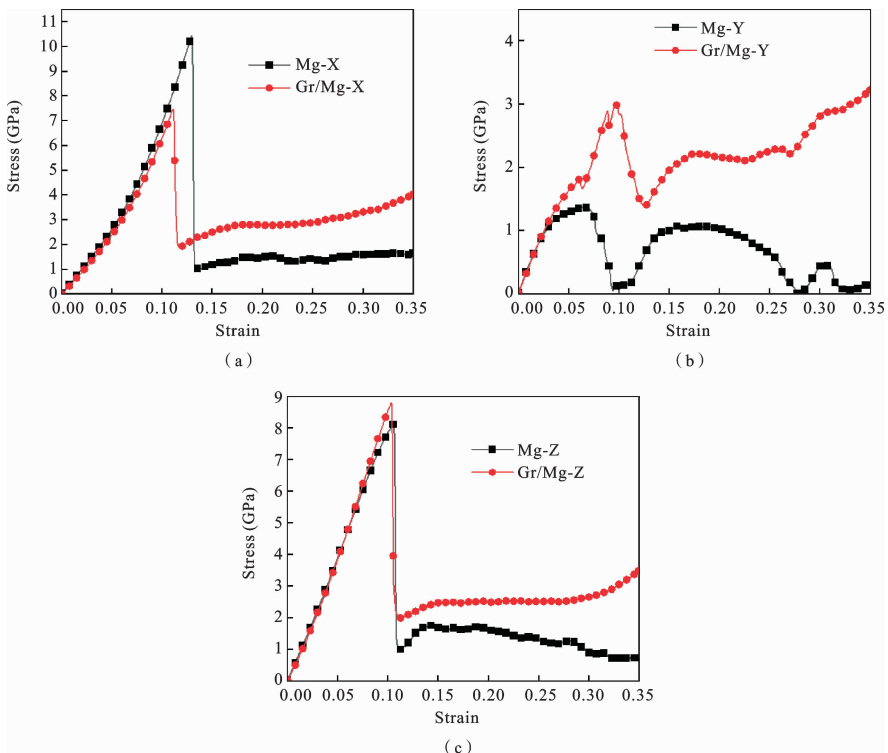


图 A2 大尺寸模型单晶 Mg 和 Gr/Mg 复合材料沿不同晶向压缩应力-应变曲线图(应变率  $5 \times 10^8\ s^{-1}$ )

Fig. A2 Compression stress-strain curves of large-sized single crystal Mg and Gr/Mg composite materials

along different crystal orientations (The strain rate is  $5 \times 10^8\ s^{-1}$ )

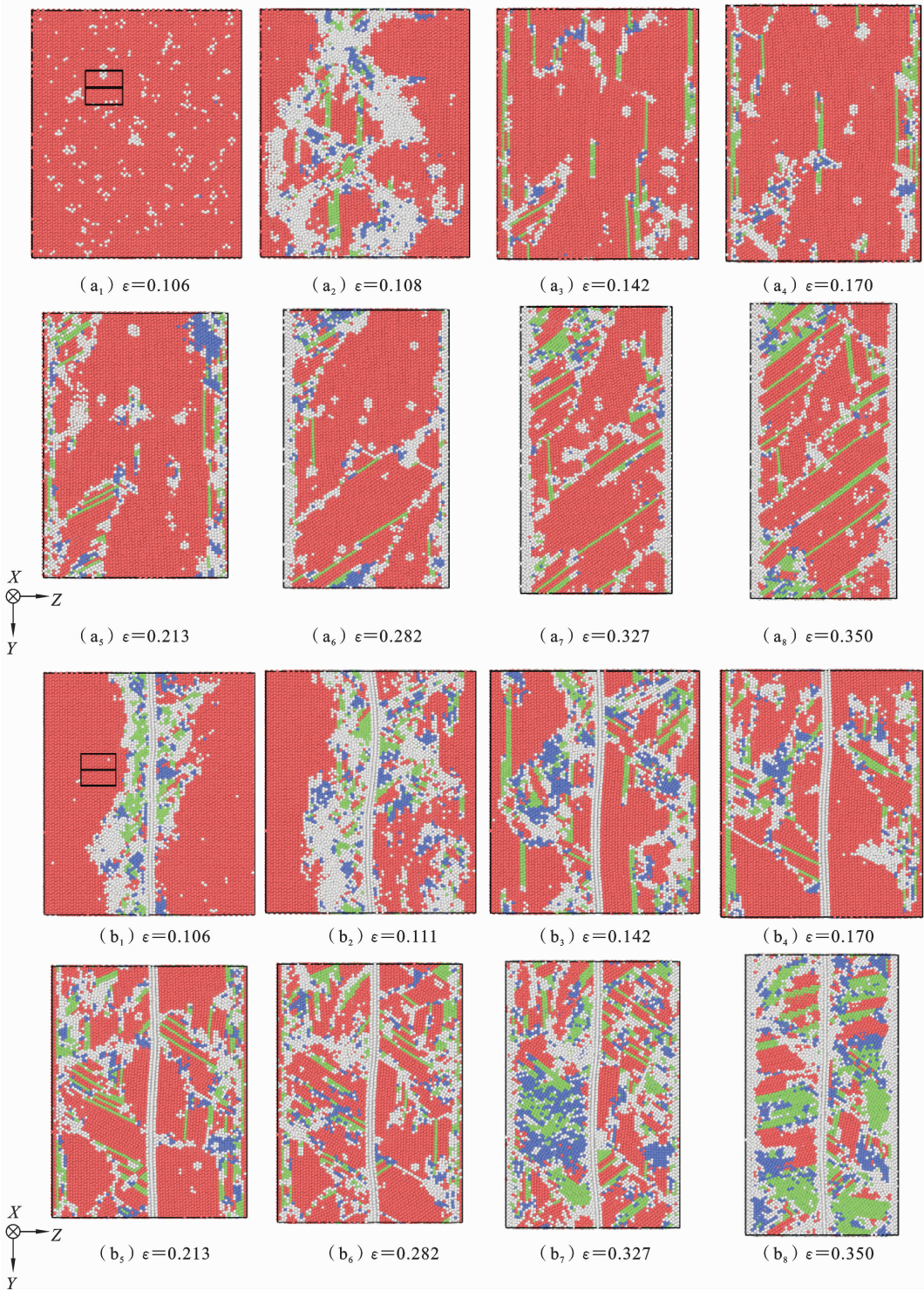


图 A3 大尺寸模型单晶 Mg 和 Gr/Mg 复合材料沿 $[0\ 0\ 0\ 1]$ 晶向压缩原子结构图(应变率 $5 \times 10^8\ \text{s}^{-1}$ ):(a<sub>1</sub>)~(a<sub>8</sub>) 单晶 Mg;(b<sub>1</sub>)~(b<sub>8</sub>) Gr/Mg 复合材料

Fig. A3 Atomic structure diagram of single crystal Mg and Gr/Mg composite materials with large-sized models compressed along the  $[0\ 0\ 0\ 1]$  crystal direction (The strain rate is  $5 \times 10^8\ \text{s}^{-1}$ ): (a<sub>1</sub>)~(a<sub>8</sub>) Single crystal Mg; (b<sub>1</sub>)~(b<sub>8</sub>) Gr/Mg composite materials

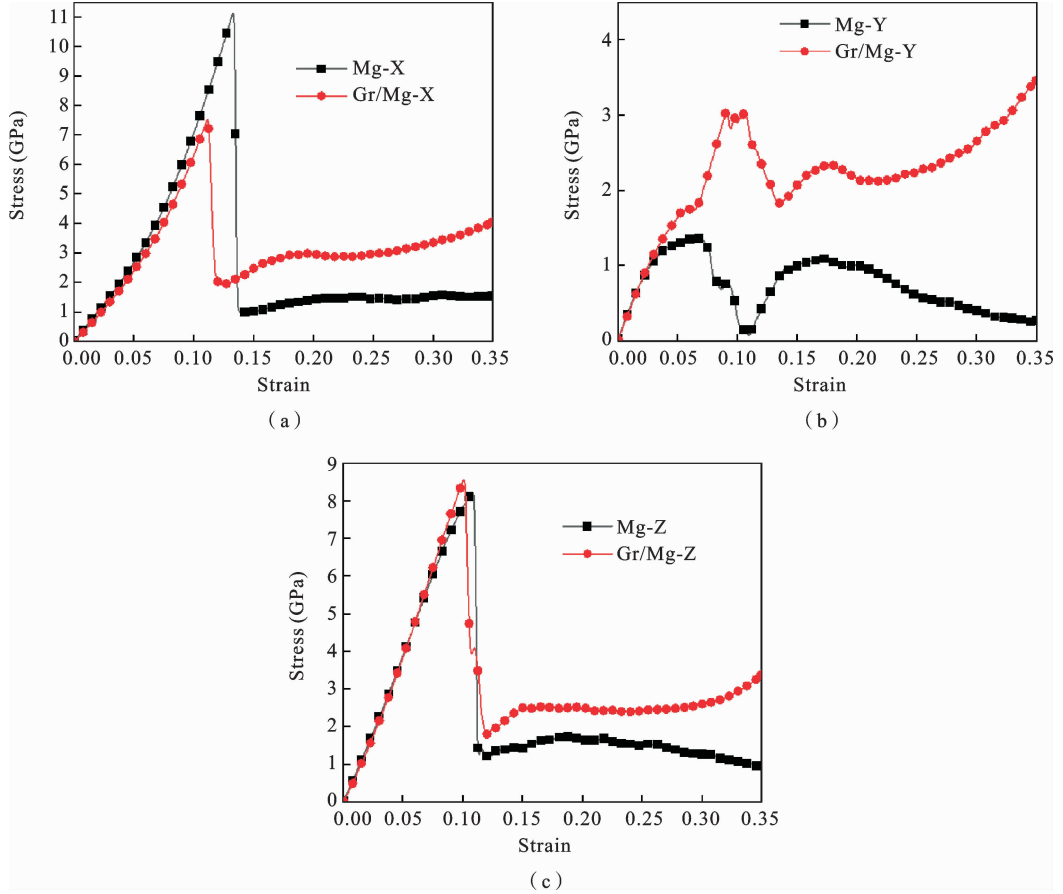


图 A4 大尺寸模型单晶 Mg 和 Gr/Mg 复合材料沿不同晶向压缩应力-应变图(应变率为  $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ )

Fig. A4 Compression stress-strain curves of large-sized single crystal Mg and Gr/Mg composite materials along different crystal orientations (The strain rate is  $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ )

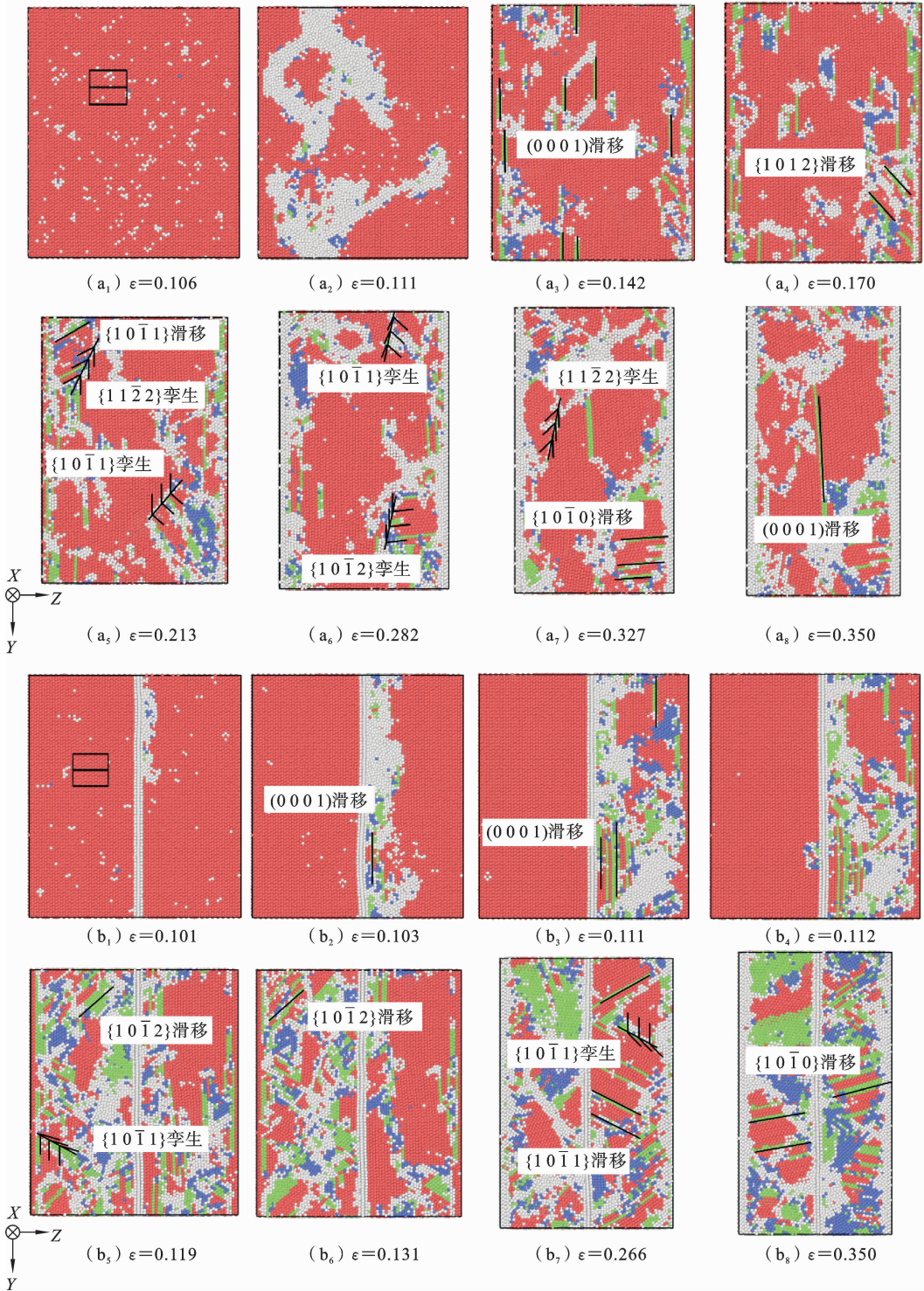


图 A5 大尺寸模型单晶 Mg 和 Gr/Mg 复合材料沿 $[0\ 0\ 0\ 1]$ 晶向压缩原子结构图(应变率  $1 \times 10^9\ \text{s}^{-1}$ ): (a<sub>1</sub>)~(a<sub>8</sub>) 单晶 Mg; (b<sub>1</sub>)~(b<sub>8</sub>) Gr/Mg 复合材料

Fig. A5 Atomic structure diagram of single crystal Mg and Gr/Mg composite materials with large-sized models compressed along the  $[0\ 0\ 0\ 1]$  crystal direction (The strain rate is  $1 \times 10^9\ \text{s}^{-1}$ ): (a<sub>1</sub>)~(a<sub>8</sub>) Single crystal Mg; (b<sub>1</sub>)~(b<sub>8</sub>) Gr/Mg composite materials