

SiC/Al 复合材料界面微区变形机理研究

潘爱琼¹, 谢敬佩¹, 王文焱¹, 郝世明¹, 宋亚虎², 柳培¹, 王爱琴¹

(1. 河南科技大学, 河南 洛阳, 471023; 2. 洛阳理工学院, 河南 洛阳, 471023;)

*通讯作者: 谢敬佩, 男, 教授, 博士。Email: xiejp@haust.edu.cn

摘 要: 本研究采用真空热压烧结工艺成功制备了 SiC 颗粒增强 2024Al 基复合材料。通过微观结构表征, 研究了 SiC/Al 界面的结构特征及典型的晶体学位向关系。基于分子动力学模拟, 深入揭示了低指数 SiC(0001)/Al(111)界面构型的微观变形机制。研究表明: SiC(0001)/Al(111)界面构型表现高的屈服应变和屈服应力。原子微观演化分析发现, 在变形过程中界面处形成了独特的三棱锥状 L-C 位错锁结构, 该结构由三条固定梯杆位错和三个堆垛层错共同构成。与常规 L-C 位错锁相比, 这种特殊几何构型的位错锁具有更高的结构稳定性, 能有效钉扎在界面处, 作为裂纹扩展的物理屏障, 从而促使材料呈现韧性断裂特征。此外, 裂纹在铝基体中的近 Al-Si 界面区域形核并扩展。

关键词: SiC/Al 复合材料; 界面; 变形机理; 分子动力学

Investigation of Interfacial Micro-Zone Deformation Mechanisms in SiC/Al Composites

PAN Ai-qiong¹, XIE Jing-pei¹, WANG Wen-yan¹, Hao Shi-ming¹, SONG Ya-hu²,
LIU Pei¹, WANG Ai-qin¹,

(1. Henan University of Science and Technology, Luoyang, Henan, 471023, China;

2. Luoyang Institute of Technology, Luoyang, Henan, 471023, China)

Abstract: This study successfully fabricated SiC particle-reinforced 2024Al matrix composites using vacuum hot-pressing sintering. Through microstructural characterization, the structural features of SiC/Al interfaces and typical crystallographic orientation relationships were investigated. Based on molecular dynamics simulations, the microscopic deformation mechanisms of low-index SiC(0001)/Al(111) interface configurations were thoroughly elucidated. The results demonstrate that the SiC(0001)/Al(111) interface configuration exhibits high yield strain and yield stress. Atomic-scale evolution analysis revealed the formation of a unique trigonal pyramid-shaped Lomer-Cottrell (L-C) dislocation lock structure at the interface during deformation, which consists of three fixed stair-rod dislocations and three stacking faults. Compared to conventional L-C dislocation locks, this geometrically distinctive dislocation lock possesses higher structural stability, effectively pinning at the interface and serving as a physical barrier against crack propagation, thereby promoting ductile fracture characteristics in the material. Furthermore, cracks nucleate and propagate in the aluminum matrix near the Al-Si interface region.

Keywords: SiC/Al composites; interface; deformation mechanism; molecular dynamics

1 前言

碳化硅增强铝基复合材料 (SiC/Al) 因其优异的比强度、热稳定性和可设计性, 已成为高性能金属基复合材料的重要体系。对于特定的增强体和基

体, 复合材料性能优化的关键在于界面工程, 其界面特性直接影响载荷传递效率和变形协调能力, 进而决定复合材料的宏观力学行为^[1-2]。尽管 SiC/Al 复合材料已获得广泛的实验研究^[3-6], 但关于其界面微区在变形过程中的动态演化规律及原子尺度机制

等关键科学问题仍未完全阐明。

近年来,随着先进表征技术的发展,研究者已能对复合材料界面进行原子尺度的直接观测。然而,实验方法仍存在明显局限性:观测周期长、成本高昂,且难以实时捕捉动态变形过程中界面结构的瞬态演变特征。得益于计算科学在材料研究领域的应用,分子动力学方法可以通过解析力场驱动下原子群的运动轨迹,实现对界面微区结构动态响应的精确描述,从而在原子尺度上揭示复合材料相界面微区的变形机制。

在 SiC/Al 的分子动力学研究方面, Xie 等人^[7]建立了 3C-SiC/Al 的互穿模型(IPCs)探讨了 SiC 体积分数、裂纹尺寸及方向等对复合材料力学性能的影响。发现复合材料的杨氏模量和极限强度随 SiC 体积分数的增加而增加,但断裂应变减小,裂纹加速了复合材料失效。Huo 等人^[8]研究了粉末冶金 3C-SiC/Al 的力学性能和强化机理,分析得到的单轴拉伸弹性模量及强度与按混合规律计算的结果吻合较好。结果表明,细小 SiC 颗粒比粗大 SiC 颗粒的 SiC/Al 纳米复合材料的力学性能更好。Tahani^[9]等人研究了温度、退火时间和空位缺陷对 6H-SiC/Al 界面自扩散系数和相互扩散系数的影响,表明碳化硅中的扩散随温度、退火时间和空位的增加而增大。这些研究多集中在 3C-SiC/Al 界面,而对具有重要工程应用价值的 6H-SiC/Al 界面的变形机制研究仍明显不足。

从制备工艺角度看,粉末冶金法相比传统铸造能有效抑制 SiC/Al 复合材料中的有害相 Al_4C_3 的生成,同时降低对润湿性的苛刻要求^[10]。基于此,本研究采用真空热压烧结法制备 6H-SiC/2024Al 复合材料,通过实验标定典型界面晶体学位向关系,结合分子动力学模拟解析复合构型在拉伸载荷下的力学响应,重点阐明:1) 界面构型的应力-应变关系;2) 界面微区原子尺度变形机制;3) 界面结构-性能关联性。该研究将为高性能 SiC/Al 复合材料的设计提供理论依据。

2 研究方法

2.1 实验方法

选用雾化技术制备的 2024Al 合金粉末为基体材料,具体化学成分详见表 1。用扫描电子显微镜观察,可见合金粉末呈球状且表面光滑,平均粒径约为 10 μ m,见图 1(a)。

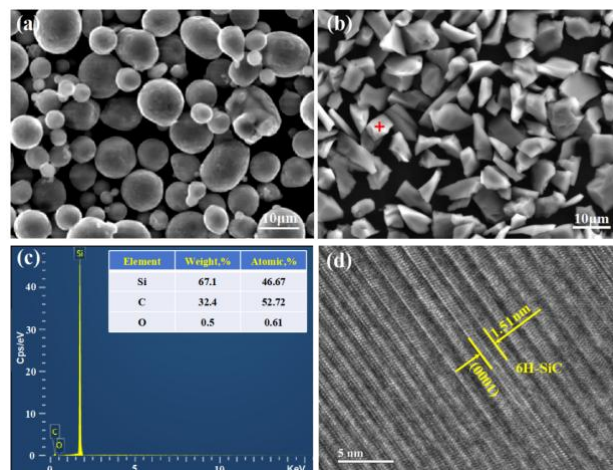
为了获得无污染的 SiC 颗粒,先用体积分数为 5%的氢氟酸溶液对其进行清洗,随后在真空干燥箱

中进行充分干燥。处理后的 SiC 颗粒表面洁净,形貌呈现典型的不规则多棱角特征,平均粒径约为 6 μ m,如图 1(b)所示。对图 1(b)红色十字标记处进行元素能谱分析(EDS),结果显示氧元素质量分数仅约为 0.5%(图 1(c)),表明酸洗处理有效去除了 SiC 颗粒表面的自然氧化物。高分辨透射电子显微像表明,所采用的增强体颗粒主要为密排六方结构的 6H-SiC(图 1(d))。

表 1 2024Al 合金粉末的化学成分(wt. %)

Tab. 1 Chemical composition of 2024 Al alloy powder (wt. %)

Alloy	Cu	Mg	Mn	Si	Al
2024Al	4.0	1.5	0.5	0.23	Bal.



(a)2024Al 合金粉末; (b)SiC 颗粒; (c)对应(b)图红色十字标记的元素分析; (d)SiC 颗粒的高分辨像

图 1 显微组织形貌

Fig. 1 Microstructural morphology: (a) 2024Al powder; (b) SiC particles; (c) elemental analysis corresponding to the red crosshair cursor in (b); (d) high-resolution image of SiC particles

复合材料制备过程如下:

(1) 混粉。称量 2024Al 基体粉末与经酸洗预处理的 SiC 粉末,将其装入不锈钢球磨罐中,其中 SiC 粉末的体积分数为 15%。选用氧化锆磨球作为研磨介质,控制球料质量比为 9:1。为防止粉末氧化并提高混合效率,添加适量无水乙醇作为控制剂。在 50 r/min 的转速下进行 24 h 的湿法球磨,确保获得均匀分散的复合浆料。随后,将浆料转移至真空干燥箱中,在 60 $^{\circ}$ C 进行充分干燥,最终获得分散均匀的 SiC/2024Al 复合粉末。

(2) 热压烧结。将混合均匀的复合粉末装入内

径为 30 mm 的石墨模具中,采用双向压制方式进行预压成型。随后,将模具转移至 ZT-40-20Y 型真空热压烧结炉中烧结。设定如下烧结参数:炉腔真空度抽至 10^{-3} Pa,随后以 $10\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 的升温速率加热至 $550\text{ }^{\circ}\text{C}$,同时施加 50 MPa 的轴向压力,达到目标温度后保温 3 h,最后随炉冷却至室温。

(3) 热处理:将试样置于箱式电阻炉中,在 $505\text{ }^{\circ}\text{C}$ 下进行 2 h 的固溶处理;随后迅速转移至室温水浴中进行淬火处理,转移时间控制在 5 s 以内;最后在 $190\text{ }^{\circ}\text{C}$ 下进行 9 h 的人工时效处理,获得 SiC/2024Al 复合材料坯体。

2.2 计算模型和方法

根据实验观察结果,建立了一种典型的 SiC(0001)/Al(111)低指数界面构型,如图 2 所示,采用的取向关系为 SiC[$11\bar{2}0$]/Al[$1\bar{2}1$](X 轴), SiC[$\bar{1}1\bar{2}0$]/Al[$10\bar{1}$](Y 轴),Z 轴垂直于界面,且界面初始间距设置为 $2\text{ }\text{\AA}$ 。Al(111)的表面晶格常数为: $a_{\text{Al}} = 4.96\text{ }\text{\AA}$, $b_{\text{Al}} = 2.864\text{ }\text{\AA}$, $\alpha = 90^{\circ}$, SiC(0001)的表面晶格常数为: $a_{\text{SiC}} = 3.077\text{ }\text{\AA}$, $b_{\text{SiC}} = 5.329\text{ }\text{\AA}$, $\alpha = 90^{\circ}$, SiC(0001)/Al(111)界面形成了非共格关系。选取 $58(X) \times 29(Y)$ 的 SiC(0001)表面超胞和 $36(X) \times 54(Y)$ 的 Al(111)表面超胞来构建 SiC(0001)/Al(111)初始构型,X、Y、Z 方向的尺寸分别约为 $179\text{ }\text{\AA}$, $155\text{ }\text{\AA}$, $167\text{ }\text{\AA}$,共包含 340003 个原子。需要说明的是,为了研究界面的基本物理机制,计算模型的基体为纯 Al。

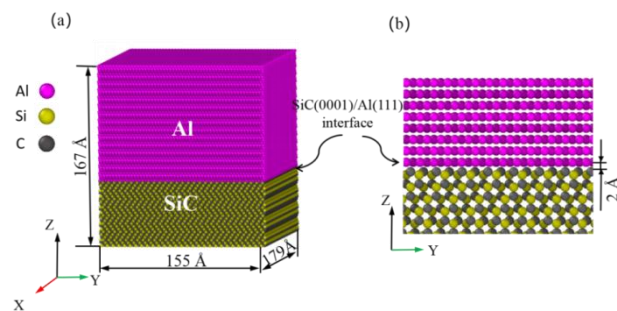


图 2 SiC(0001)/Al(111)界面模型:

(a) 三维原子结构; (b) Y-Z 平面视图界面放大

Fig. 2 SiC(0001)/Al(111) interface model: (a) three-dimensional atomic structure; (b) magnified view of the Y-Z plane

在本研究中,分子动力学模拟使用大规模原子/分子并行模拟器(LAMMPS)^[11]进行。积分时间步长为 0.001 ps 。为了消除尺度限制带来的边界效应,三个方向均采用周期性边界条件。金属 Al 原子之间的相互作用采用 EAM 势函数^[12]描述, SiC 原子之间的相互作用采用 Tersoff 势函数^[13]描述,界面 Si-Al、C-Al 原子间相互作用采用常用的 Morse 势,它能描

述化学键的断裂,对粒子振动有良好的近似,且势参数简单计算效率高,可以处理复杂的界面现象。详细的势参数列于表 2 中,它们已被广泛用于 SiC/Al 的分子动力学模拟中^[14-16]。

表 2 Si-Al、C-Al 原子间相互作用势参数

Tab. 2 Potential parameters for Si-Al and C-Al atomic interactions

Parameters	$D(\text{eV})$	$a(1/\text{\AA})$	$r_0(1/\text{\AA})$
Si-Al	0.482	1.322	2.920
C-Al	0.469	1.738	2.246

通过共轭梯度(CG)方法进行能量最小化来优化原子位置。然后采用 NPT 系综在 300 K 温度下弛豫 50 ps ,以完全释放模型的内应力。经过充分弛豫后,将模型在 NPT 系统下以应变速率 $1 \times 10^9\text{ s}^{-1}$ 沿垂直于界面方向拉伸 20 万步。使用 OVITO 软件^[17]对模拟结果进行可视化处理。

3 试验结果及分析

3.1 SiC/Al 界面结构

图 3 展示了酸洗 SiC/2024Al 复合材料的界面结构及其元素分布。从 HADDF-STEM 图像中可以观察到,大部分 SiC/Al 界面结合良好。SiC 颗粒与 Al 基体直接接触,界面处原子排列紧密,界面干净、清晰且平直,未发现明显的界面反应产物。也可观察到极少量未完全结合的界面区域。

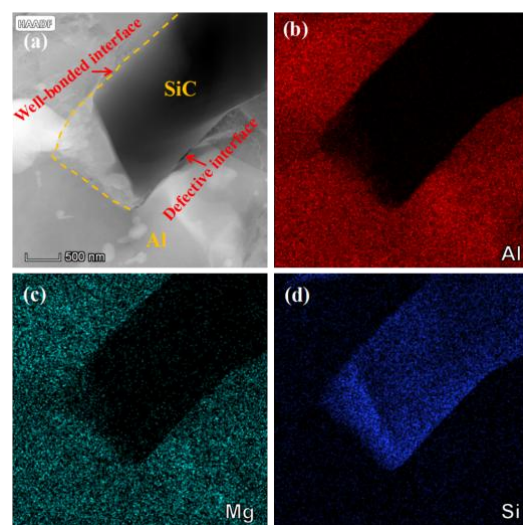


图 3 酸洗 SiC/2024Al 界面组织及元素分布 HADDF-STEM 图像

Fig. 3 Microstructure and elemental distribution of acid-washed SiC/2024Al HADDF-STEM image

图 4 是一类典型的 SiC/2024Al 界面原子结构, 其中图 4(a)是 SiC/2024Al 界面微区的高分透射电子显微镜(HRTEM)原子像, 界面区域未观察到明显的非晶层或第二相析出。采用 Digitalmicrograph 软件对不同区域的高分辨像进行傅里叶变换(FFT)和反傅里叶变换(IFFT)分析。结果表明, 图 4(a)左上部分对应的是面心立方结构的 Al 晶体, 其(111)晶面的晶面间距测量值为 0.238 nm。右下部分对应的是 6H-SiC, 其(0002)晶面的晶面间距测量值为 0.758 nm。进一步对图 4(a)中红色方形框标记的界面区域进行详细分析, 其复合衍射斑点和原子像分别见图 4(d1)和(d2), 显示这类 SiC/Al 界面存在以下晶体学取向关系:

$\text{SiC}[2\bar{1}\bar{1}0]//\text{Al}[1\bar{1}0]$, $\text{SiC}(0001)//\text{Al}(111)$

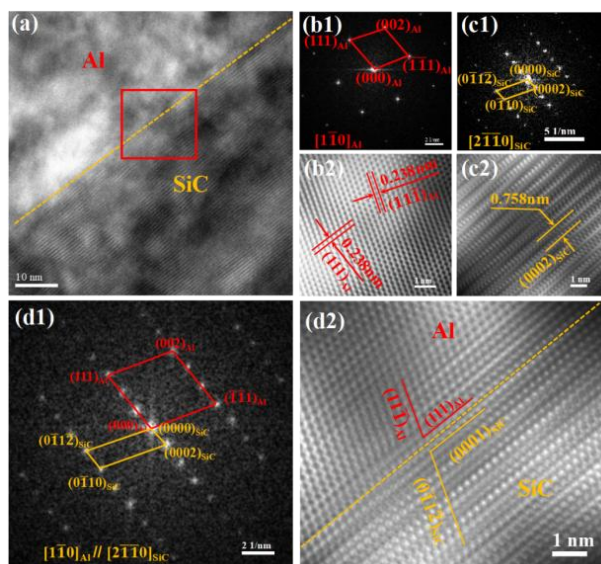


图 4 酸洗 SiC/2024Al 干净界面原子结构
(a)HRTEM 高分辨像; (b1)~(d1) 是对应(a)图中 Al、SiC 及方形区的 FFT; (b2)~(d2) 是对应(a)图中 Al、SiC 及方形区的 IFFT

Fig. 4 Atomic structure of the interface in acid-washed SiC/2024Al

(a) High-resolution HRTEM image; (b1)~(d1) correspond to the FFT of Al, SiC and the square area in image (a); (b2)~(d2) correspond to the IFFT of Al, SiC and the square area in image (a)

根据文献^[18]的计算结果, 金属 Al 几种低指数晶面的表面能大小关系为: $\text{Al}(111) < \text{Al}(001) < \text{Al}(011) < \text{Al}(012)$, 即 Al(111)面表面能低, 具有高的热力学稳定性, 因此在界面形成过程中更容易稳定存在。另一方面, SiC 的(0001)面是其基面, 具有最紧密的原子排列和较少的悬挂键, 表面能也相对较低, 这些特性使得 SiC(0001)/Al(111)容易被观察到。

3.2 SiC(0001)/Al(111)界面微区拉伸力学响应

图 5 展示了 SiC(0001)/Al(111)复合构型的拉伸应力-应变曲线及对应的位错密度统计结果, 其中曲线上的点 a 至 e 对应的应变值分别为 5.2%、7.4%、8.5%、11.5%和 12%。

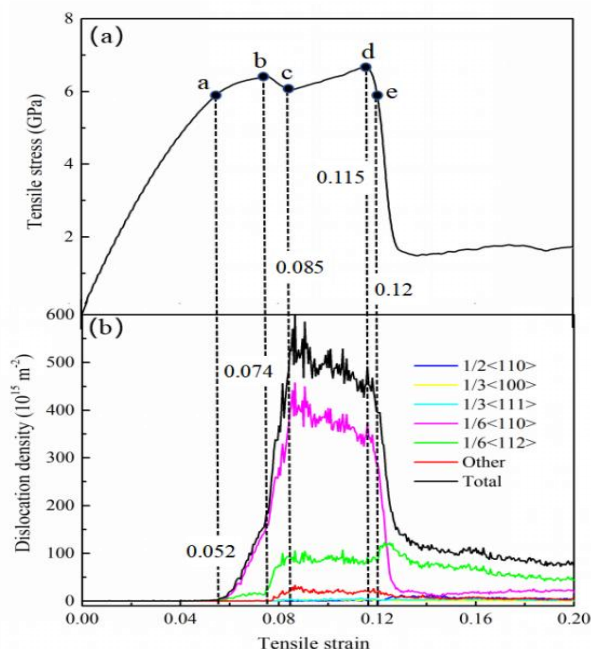


图 5 SiC(0001)/Al(111)复合构型拉伸响应

(a)应力-应变曲线; (b)位错密度

Fig. 5 Tensile response of the SiC(0001)/Al(111) composite configuration

(a) stress-strain curve; (b) dislocation density

从图中可以观察到, SiC(0001)/Al(111)复合构型的应力-应变曲线在点 a 之前几乎呈线性增长, 材料处于弹性状态, 位错密度为零。点 a 之后, 应力增长速率减缓, 伴随着位错密度的增加, 表明材料已进入塑性变形。至点 b 时, 系统的应力开始下降, 位错密度显著增加, 表明材料开启塑性屈服阶段。当应力降低到 c 点后继续拉伸, 材料进入强化阶段。当应力达到强度极限 d 点(0.115, 6.68)后, 拉伸应力快速下降。在整个塑性变形过程中 SiC(0001)/Al(111)体系以 $1/6 < 110 >$ 梯杆位错为主。

3.3 SiC(0001)/Al(111)界面微区变形机理

图 6 是 SiC(0001)/Al(111)复合构型不同应变水平下的原子结构演变分析。由于这两相间的非共格关系, 界面原子通过持续的位置调整来降低界面能, 导致界面处存在较多的无序 Al 原子。当 $\epsilon=5.2\%$ 时, 观察到错配位错在界面形核。在应变区间

5.2% $\leq\epsilon<7.4\%$ 内, 由于应变集中, 界面错配位错从无序原子区域不断形成。这些界面错配位错主要由

不可动的 $1/6 \langle 110 \rangle$ 梯杆位错组成, 这增加了体系塑性变形的抗力。

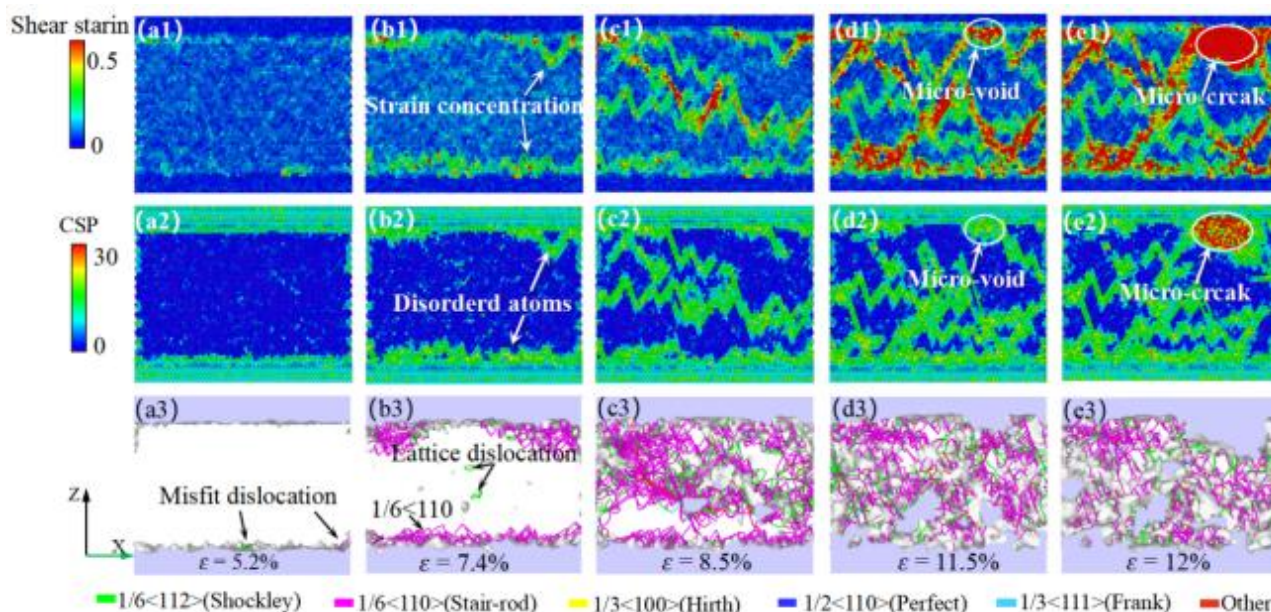


图 6 不同应变下 SiC(0001)/Al(111)复合构型原子结构演变分析

(a1)-(e1)剪切应变; (a2)-(e2) CSP; (a3)-(e3) DXA

Fig. 6 Analysis of atomic structure evolution of the SiC(0001)/Al(111) composite configuration under different strains: (a1)-(e1) shear strain; (a2)-(e2) CSP; (a3)-(e3) DXA

仔细观察图 6(b3)可以发现, 当应变增加到 7.4% 时 Al 基体内才开始出现可动的 $1/6 \langle 112 \rangle$ 肖克莱不全位。它们可沿 $\{111\}$ 晶面滑移, 这导致应力-应变曲线有轻微下降。进一步的, 一定量的肖克莱不全位错在 Al 基体内相遇并相互反应, 继续形成不可动 $1/6 \langle 110 \rangle$ 梯杆位错, 在图 6(c3-e3)中的界面上和 Al 基体内部均观察到了大量的 $1/6 \langle 110 \rangle$ 梯杆位错, 这些位错对材料的强化起到了关键作用。当 $\epsilon=11.5\%$ 时, 体系应力达到极限值 6.68 GPa, 在 Al-Si 界面开始出现微孔洞, 随后微孔洞汇聚为微裂纹, 通过图 6(e1)(e2)可以明显看到钝化后的微裂纹。SiC(0001)/Al(111)复合构型的失效形式最终表现为 Al 基体内近 Al-Si 界面侧的韧性断裂。

为进一步解释 SiC(0001)/Al(111)复合构型在塑性变形过程中表现出高屈服应变和屈服强度的原因。对应变为 5.2% $\leq\epsilon<7.4\%$ 之间的复合构型进行位错密度分析, 见图 7。可以看出复合构型中 $1/6 \langle 110 \rangle$ 梯杆位错远多于 $1/6 \langle 112 \rangle$ 肖克莱不全位错。取 a, b, c, d 四个标记点进行深入的位错演变分析, 见图 8。由前面的研究可知, 当拉伸应变为 5.2% 时, 界面开始出现错配位错, 此时界面以 $1/6 \langle 112 \rangle$ 肖克莱不全位错为主。当应变达 5.4% 时(图 8(a1 和 a2)), 在界面上开始发生位错反应, 即两个肖克莱位错生

成一个梯杆位错: $1/6[11\bar{2}] + 1/6[\bar{1}21] \rightarrow 1/6[0\bar{1}\bar{1}]$ 。一般的, 这两个不全位错在滑移时都携带着层错, 故通常将这两个堆垛层错和连接它们的梯杆位错称为 Lomer-Cottrell(L-C)位错锁, 如图 9(a)所示。与位于 $\{111\}$ 晶面可动的 $1/6 \langle 112 \rangle$ 肖克莱位错相比, 生成的 $1/6 \langle 110 \rangle$ 梯杆位错位于不可动的 $\{001\}$ 面上, 这势必会增加变形抗力, 提高材料的强度。

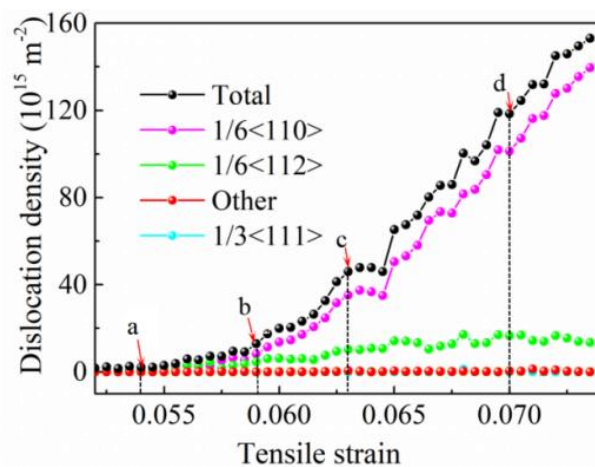


图 7 SiC(0001)/Al(111)构型 5.2% $\leq\epsilon<7.4\%$ 的位错密度

Fig. 7 Dislocation density of the SiC(0001)/Al(111) configuration for 5.2% $\leq \epsilon < 7.4\%$

当应变达到 5.8% 时, 界面上出现了一种特殊的

L-C 位错锁，如图 8(b1)和(b2)所示。与先前描述的普通 L-C 位错锁结构相比，这种特殊的 L-C 位错锁表现出多梯杆位错特征。即该 L-C 位错锁由三条固定的梯杆位错和四处堆垛层错构成，呈三棱锥状，这种几何形态赋予其更高的结构稳定性，使其能够更加牢固地钉扎于界面上。Yan^[19]等人在经高压扭转处理的纳米晶 7075 铝合金中也观察到了类似的位错

缺陷。

随着塑性应变不断增大，从图 8(c1)和(d1)可以看到界面上这种特殊结构的 L-C 锁不断增多。由于这种特殊结构可以提供比普通 L-C 锁更强的阻碍力和更高的结构稳定性，从而有效地提高了材料的屈服应变和屈服应力。

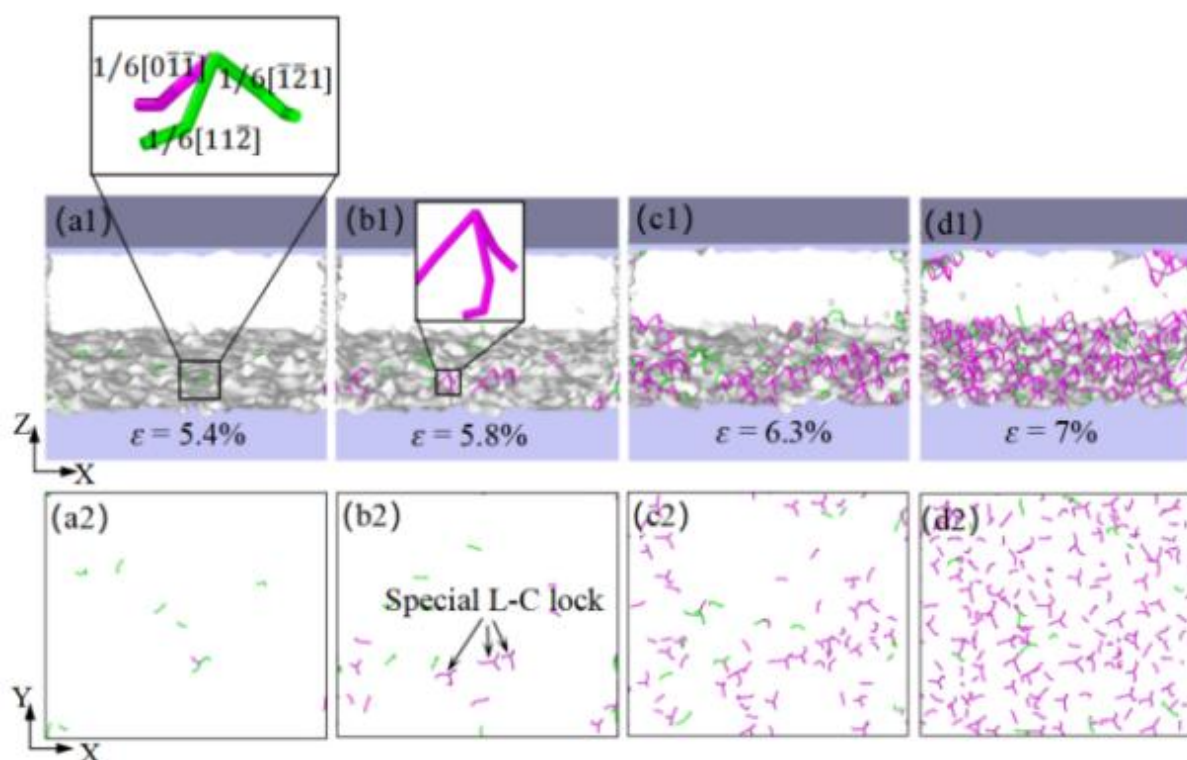


图 8 SiC(0001)/Al(111)复合构型 $0.052 < \varepsilon < 0.074$ 的位错演变:

(a1)-(d1)界面位错三维视图; (a2)-(d2)界面位错俯视图

Fig. 8 dislocation evolution of the SiC(0001)/Al(111) composite configuration for $0.052 < \varepsilon < 0.074$: (a1)-(d1) three-dimensional views of interface dislocations;

(a2)-(d2) top views of interface dislocations

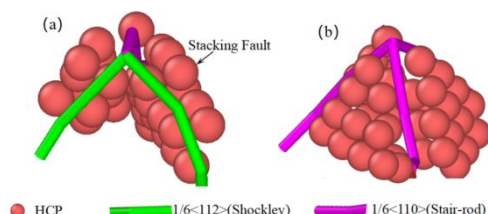


图 9 L-C 锁原子结构: (a)普通的 L-C 锁; (b)特殊的 L-C 锁

Fig. 9 Atomic structure of L-C locks: (a) regular L-C lock; (b) special L-C lock

4 结论

本章通过真空热压烧结法制备了 SiC/2024Al 复

合材料，并表征了 SiC/Al 的界面结构和晶体学位向关系，通过分子动力学方法研究了 SiC(0001)/Al(111) 界面微区的拉伸力学响应及微观变形机理，展现了结构-性能间的高度相关性，主要结论如下：

(1) 在 SiC/2024Al 复合材料中，较容易观察到的晶体学位向关系是：

SiC[2 $\bar{1}$ 10]//Al[1 $\bar{1}$ 0], SiC (0001)//Al(111)

(2) SiC(0001)/Al(111)复合构型在拉伸时具有较高的屈服应变和屈服强度，原因归结为界面出现了一种由三条固定的梯杆位错和三个堆垛层错构成的特殊 L-C 位错锁，该位错结构具有高稳定性，可以牢固的钉扎在界面上而不向基体传播。

(3) SiC(0001)/Al(111)复合构型裂纹在铝基体的 Al-Si 界面附近萌生和扩展，表现出韧性断裂特征。

参考文献:

- [1] 朱志强, 王庆平, 闵凡飞, 等. SiCp/Al 复合材料界面调控研究进展[J]. 材料导报, 2021, 35(13): 13139-13147.
- [2] 邱丰, 佟昊天, 沈平, 等. 综述:SiC/Al 界面反应与界面结构演变规律及机制[J]. 金属学报, 2019, 55(1): 97-100.
- [3] 郝世明, 刘鹏茹, 谢敬佩. 高体分 SiCp/Al 复合材料的热加工特性研究[J]. 热加工工艺, 2023, 52(16): 53-57.
- [4] 刘鹏茹, 郝世明, 谢敬佩, 等. SPS 制备 SiCp/Al-4.2Cu-xMg 复合材料的显微组织及力学性能[J]. 材料热处理学报, 2023, 44(02): 30-36.
- [5] Zhang WY, Du YH, Zhang P, et al. Air-isolated stir casting of homogeneous Al-SiC composite with no air entrapment and Al₄C₃[J]. Journal of Materials Processing Technology, 2019, 271: 226-236.
- [6] 杨飞, 阎峰云, 江海霞, 等. 酸洗处理对高体积分数 SiCp/Al 复合材料组织性能的影响[J]. 特种铸造及有色合金, 2017, 37(11): 1235-1238.
- [7] Xie L, Sun TW, He CW, et al. Enhancement of toughness of SiC through compositing SiC-Al interpenetrating phase composites [J]. Nanotechnology, 2019, 31(13): 135706.
- [8] Huo SY, Xie LJ, Xiang JF, et al. Atomic-level study on mechanical properties and strengthening mechanisms of Al/SiC nano-composites[J]. Applied Physics A, 2018, 124(2): 1-12.
- [9] Tahani M, Postek E, Motevalizadeh L, et al. Effect of vacancy defect content on the interdiffusion of cubic and hexagonal SiC/Al interfaces: a molecular dynamics study[J]. Molecules, 2023, 28(2): 28020744.
- [10] Cong XS, Shen P, Wang Y, et al. Wetting of polycrystalline SiC by molten Al and Al-Si alloys[J]. Applied Surface Science, 2014, 317: 140-146.
- [11] S. Plimpton, Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics, Computational Physics 117 (1995) 1-19.
- [12] Mishin Y, Farkas D, Mehl MJ, et al. Interatomic potentials for monoatomic metals from experimental data and ab initio calculations[J]. Physical Review B, 1999, 59(5): 3393-3407.
- [13] Paul E, Karsten A. Analytical potential for atomistic simulations of silicon, carbon, and silicon carbide[J]. Physical Review B, 2005, 71(3): 3393-3407.
- [14] Bouhemadou A, Khenata R, Zegrar F, et al. Ab initio study of structural, electronic, elastic and high pressure properties of barium chalcogenides[J]. Computational Materials Science, 2006, 38(2): 263-270.
- [15] Jin S, Li L, Xu Z, et al. A random batch ewald method for particle systems with coulomb interactions[J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 2021, 43(4): 937-960.
- [16] Caihao Q, Yishi S, Jingyu Y, et al. Microstructural characteristics and mechanical behavior of SiC(CNT)/Al multiphase interfacial micro-zones via molecular dynamics simulations[J]. Composites Part B, 2021, 220: 108912.
- [17] Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO-the Open Visualization Tool [J]. Modelling Simul. Mater. Sci. Eng., 2010, 18: 015012.
- [18] 武庆杰. SiC/Al 基复合材料界面的显微结构及第一性原理研究[D]. 郑州: 郑州大学, 2019, 64-67.
- [19] Yan Z, Lin Y. Lomer-Cottrell locks with multiple stair-rod dislocations in a nanostructured Al alloy processed by severe plastic deformation[J]. Materials Science and Engineering, 2019, 747: 177-184.