2021 年 2 月 February 2021

DOI: 10.11817/j.ysxb.1004.0609.2021-35938

晶体取向对纳米单晶锆摩擦行为的影响

朱科浩¹,张晓宇²,袁新璐²,任平弟²

(1. 西南交通大学 材料科学与工程学院,成都 610031;2. 西南交通大学 牵引动力国家重点实验室 摩擦学研究所,成都 610031)

摘 要:采用分子动力学方法模拟了金刚石结构粗糙体半球与三种不同晶体取向单晶锆基体在不同滑移速 度下的摩擦滑移过程,对摩擦力、磨损量进行了测量分析并结合位错提取算法(DXA)对基体内部结构变形 机理进行了研究。结果表明:较低滑移速度时犁耕作用占主要因素,各基体摩擦力区分更为明显;较高滑 移速度时原子间黏附作用是导致摩擦力升高的主要原因。磨损量随滑移的进行持续增加,在所有滑移速度 下[0001]取向基体磨损量均明显大于其余两者。通过 DXA 分析,指出不同晶体取向上滑移系开动情况发生 变化是纳米尺度下单晶锆摩擦行为表现出较强晶体取向依赖性的主要原因。此外,基体切向位错运动相比 于法向层错结构对单晶锆摩擦力响应和磨损量的影响更为显著。

关键词:单晶锆;分子动力学;纳米尺度;摩擦磨损;晶体取向 文章编号:1004-0609(2021)-02-0373-11 中图分类号:TH117.1 文献标志码:A

引文格式: 朱科浩, 张晓宇, 袁新璐, 等. 晶体取向对纳米单晶锆摩擦行为的影响[J]. 中国有色金属学报, 2021, 31(2): 373-383. DOI: 10.11817/j.ysxb.1004.0609.2021-35938

ZHU Ke-hao, ZHANG Xiao-yu, YUAN Xin-lu, et al. Orientation effect on friction behaviors of nano-single crystalline zirconium[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2021, 31(2): 373–383. DOI: 10.11817/j.ysxb.1004.0609.2021-35938

锆(Zirconium, Zr)由于较小的中子吸收截面、 高温下良好的机械性能及抗腐蚀等特性,被广泛作 为核电设备中的包壳管材料^[1-2]。此外,因为具有 低热膨胀系数和良好的尺寸稳定性等特点,锆及其 合金材料在航天、航海及生物医学等多领域也得到 了广泛应用^[3-5]。作为关键结构组件材料,锆及其 合金材料在服役过程中往往发生小尺度下严重的 摩擦磨损^[6-9],严重影响了相关设备的运行安全性 与服役寿命。因此,对锆及其合金材料的摩擦磨损 行为机理开展相关研究以进一步提高其抗磨性能 是一个亟待解决的课题。

随着材料制备工艺与研究手段的进步,具有包括高强度、优良耐磨性、良好塑性在内等一系列优良性能的纳米晶(NG)和超细晶(UFG)纳米金属材料

受到了广泛的关注^[10],有研究指出细化晶粒能有效 提高相关金属材料的抗磨损性能^[11-13]。然而,由于 材料制备相对复杂、表征手段存在限制等因素,有 关纳米晶体材料在较小尺度下的摩擦磨损机理研 究还鲜少有人报道。

针对传统实验分析手段的局限性,计算机硬件 水平与编程技术的不断提升使计算模拟成为一种 有效的材料研究手段,其中分子动力学模拟 (Molecular dynamics simulation, MDS)由于具有易 于编程、运行效率高、模拟体系大等优点为材料宏 观特性与微观本质之间搭建了桥梁^[14-16]。晶体取向 性作为晶体结构的重要参数对摩擦过程中材料内部 结构变形机制有直接影响,近年来也有学者利用分 子动力学模拟在这方面开展了广泛工作: ALHAFEZ

基金项目:国家自然科学基金资助项目(51775459);四川省重点研发项目(2020YFG0135)

收稿日期: 2020-04-09; 修订日期: 2020-07-27

通信作者: 张晓宇, 高级工程师, 博士; 电话: 028-87603924; E-mail: zhangyu3035@126.com

等^[17]对铁(Fe)单晶在不同接触取向表面的纳米切削 过程进行了模拟,在不同晶体取向情况下观察到不 同方向和程度的晶体滑移、位错交互与孪晶变形现 象,表明单晶铁的内部结构变形机制与晶体取向密 切相关。ANDREY 等^[18]进行了不同取向钛(Ti)晶体 的纳米划痕分子动力学模拟。研究结果指出,当晶 体易滑移方向接近粗糙体滑移方向时,基体内部位 错的产生、运动与位错钉扎交替进行,位错结构的 演化呈现出明显的阶段性特征。

针对纳米晶体锆,以往的模拟研究主要集中于 纳米压痕、拉伸/压缩测试上^[19-21],对其摩擦磨损行 为还鲜有相关研究。因此,本文借助分子动力学模 拟方法分析了不同滑移速度下三种典型取向基体 的摩擦力响应、磨损量,结合内部结构可视化处理 和位错结构分析以对单晶锆在不同晶体取向下的 摩擦行为机理进行研究。

1 模拟模型与参数设置

1.1 模型建立

单晶锆具有六方密堆(HCP)的晶体结构,相比 于体心立方结构(BCC)与面心立方结构(FCC)具有 结构不完全对称的特点,因此 HCP 结构在几种典 型晶体结构中具有最少的滑移系,表现出更低的塑 性和高度的取向依赖性。在摩擦滑移过程中,晶体 内部原子根据结构特点主要沿一定滑移系进行滑 移而具有相应的晶体学特征。对于 HCP 结构晶体, 有 *a*、*c* 两个结构参数,滑移系特点如表 1 所示。 对于错单晶而言,*c*/*a* 为 1.593,此时基面已不是唯 一密排面,棱柱面和棱锥面原子密排程度与基面相 近而同样被视为滑移面,滑移方向保持不变。单晶 锆的晶格结构参数与主要滑移系如图 1 所示。

表1 HCP 结构滑移系特点

Iable I Slip systems in HCP structure

Structure standard value	Slip surfaces	Slip directions	
<i>c</i> / <i>a</i> ≥1.633	{0001}	(1120)	
<i>c/a</i> <1.633	$\{0001\},\{10\overline{1}0\},\{10\overline{1}1\}$	(1120)	

在此基础上,本文利用 Materials Studio 软件^[22] 建立了以[001]取向的金刚石结构粗糙体半球与单 晶锆基体进行组合的粗糙体-平面接触模型,并用 Ovito(Open visualization tool)软件^[23]对其进行可视 化处理。如图 2 所示,基体和粗糙体半球均被划分 为三个区域,即牛顿层、控温层以及固定层,分别 起到了模拟受力变形、控制体系温度及保证基体结 构稳定的作用,具体三维结构信息如表 2 所示。锆 单晶基体包含三种晶体取向,即[0001]、[1010]和 [1120],以研究晶体取向对其摩擦行为的影响。此 外,从图 3 所示三种基体的局部原子结构可以看出, 具有[0001]取向的单晶锆原子排布最为紧密,而 [1010]和[1120]取向基体的滑移接触面为棱面或棱 边,两者内部原子排布较为相近。



图1 单晶锆晶格结构参数与主要滑移系图示

Fig. 1 Lattice structure parameters and main slip systems of single crystalline zirconium: (a) $\{0001\}$; (b) $\{10\overline{1}0\}$; (c) $\{10\overline{1}1\}$



图2 体系模型示意图

Fig. 2 Diagram of model systems: (a) Side view; (b) Front view



图 3 基体局部原子结构示意图

Fig. 3 Diagrams of local atomic structures of substrates: (a) [0001]; (b) $[10\overline{10}]$; (c) $[11\overline{2}0]$

表2 基体模型三维结构信息

Structure type	Dimension/nm	Atom
[0001]	$30.0 \times 10.0 \times 10.0$	133920
$[10\overline{1}0]$	$30.0 \times 10.0 \times 10.0$	131688
[1120]	$30.0 \times 10.0 \times 10.0$	133812
Diamond hemisphere	<i>R</i> =3.6	18901

1.2 模拟参数设置

本 文 所 有 模 拟 均 由 开 源 程 序 Lammps^[24] (Large-scale atomic/molecular massively parallel simulator)进行计算。在所有模拟中均采用了 1 fs 的时间步长,原子运动方程由 Velocity-Verlet 算法^[25]进行求解。整个系统设置为 NVT 系综并在控温层区域通过 Langevin 控温法使体系在整个模拟过程中温度保持在 300 K 左右。此外,在体系的两个平面 *X、Y* 方向上设置了周期性边界条件以消除尺寸效应对模拟结果的影响,由此可以节省运算资源并实现大规模的体系运算。

对模型中不同种类原子合理施加势函数是保 证计算结果准确的前提。本文利用在模拟金刚石结 构中得到广泛应用的 Tersoff 势函数^[26]描述了粗糙 体半球中 C 原子之间的相互作用;单晶锆基体中 Zr 原子之间的原子间作用以 MEAM 势函数^[27]进行 描述,LU 等^[21]将该势函数的计算结果与 DFT 计算 进行了对比并证明了其能很好地描述 Zr 晶体内的 变形与位错滑移;此外,利用了 Morse 势函数^[28] 对模拟过程中粗糙体与基体相互作用,即 C-Zr 原 子之间的相互作用,进行了描述,其形式较为简单, 表达式如下:

$$V(r) = -D_e + D_e (1 - e^{-a(r-r_0)})^2$$
(1)

式中: $D_e = a$ 分别为势能阱的深度与宽度; r_0 代表两原子间的平衡距离。对于本文的 C-Zr 体系而言, 其具体参数值为: $D_e=1.56$ eV,a=3.3786 Å, $r_0=2.1187$ Å^[29]。

在模拟运动开始之前,需要对整个系统进行弛 豫 200000 时间步长(200 ps)以避免原子相互重叠。 整个模拟过程分为接触、滑移两个阶段,本文主要 对滑移阶段进行分析研究。首先对金刚石粗糙体半 球向下施加 100 nN 的法向载荷使其与基体发生接 触,保持一段时间后分别以不同滑移速度(0.1、0.2、 0.3 和 0.4 Å/ps)沿 X 方向进行滑移,总滑移距离均 为 150 Å。在整个滑移过程中,在粗糙体上方持续 施加恒定的法向载荷。模拟中的具体参数设置汇总 如表 3 所示。

表3 模拟具体参数设置

Table 3	Specific parame	eter settings in simulations
---------	-----------------	------------------------------

Parameter	Setting
Ensemble	NVT
Time step/fs	1
Temperature/K	300
Boundary condition (XYZ)	P P F
Total sliding distance/Å	150
Load/ nN	100
Sliding velocity/($Å \cdot ps^{-1}$)	0.1, 0.2, 0.3, 0.4
Potential	Tersoff (C-C), MEAM (Zr-Zr), Morse (C-Zr)

1.3 模拟分析方法

摩擦力是摩擦学研究的基础,记录摩擦力数据 并与其他表征方法进行对比研究可以提供对摩擦 磨损行为机理的深入理解。本文对粗糙体半球在滑 移相反方向上所有原子的受力进行统计加和,并将 其定义为摩擦力。

表层磨屑原子对摩擦行为有直接影响,在纳米 尺度上尤其不能被忽略^[30]。然而通过传统实验与表 征方式,很难对磨损量做出准确且实时的测量与记 录,运用分子动力学可以有效解决这一问题。根据 以往的研究^[31-32],磨损可以被视为基体原子的去除 并且与材料的具体结构参数直接相关。因此本文采 取基于位移测量的磨损定义方法,将基体内位移超 过 6 Å(Zr 晶格中两原子间最大距离约为 3 Å)且在 Z 方向上坐标高于初始接触平面位置的 Zr 原子视为 磨损原子。

此外,有研究指出滑移过程中力的变化与内部 位错结构运动之间有着紧密联系^[33],因此本文主要 运用位错提取分析(DXA)方法^[34]研究了三种晶体 取向在摩擦滑移过程中对基体内部结构变形机理 的影响。

2 模拟结果与分析

2.1 摩擦力分析

从图 4 可以看出,由于表面接触原子势能场的 周期性变化和滑动过程中所存在的犁沟作用,摩擦 力曲线在整个过程中持续波动^[35]。整个过程可分为 三个阶段:1) 在滑移初始阶段,粗糙体与基体接触 所产生的强烈变形导致摩擦力在短时间内迅速增 加;2) 随着滑移过程的进行,基体内部滑移系开动, 摩擦力逐渐上升;3) 滑移一段距离后,接触犁沟区 域内磨损原子的形成与排出达到动态平衡,摩擦力 在一定平衡范围内持续波动。

整体来看,三种晶体取向基体在平衡阶段的摩 擦力响应均随着滑移速度的增加而逐步增大,一定 程度上验证了模拟结果的可靠性。在 0.1 Å/ps 滑移 速度条件下,基体有充分响应时间传递上方载荷与 滑移作用所产生的形变能,不同晶体取向原子结构 对摩擦力的影响更为显著,此时[0001]相较于 [1010]以及[1120]两种取向基体表现出更大的摩擦 力。然而,随着滑移速度的增大,不同晶体结构对 摩擦力响应影响上的差异变得愈发不明显。

2.2 磨损量分析

如图 5 所示, 磨损量随滑移距离的增大呈几乎 线性增加, 符合经典的 Archard 磨损定律。然而与



Fig. 4 Friction curves of three crystal-oriented substrates at different sliding velocities: (a) 0.1 Å/ps; (b) 0.2 Å/ps; (c) 0.3 Å/ps; (d) 0.4 Å/ps



图 5 三种晶体取向基体在不同滑移速度下的磨损量示意图 Fig. 5 Wear atoms of three crystal-oriented substrates at different sliding velocities: (a) 0.1 Å/ps; (b) 0.2 Å/ps; (c) 0.3 Å/ps; (d) 0.4 Å/ps

摩擦力表现不同的是,磨损原子量随着滑移速度的 增大而明显减少,摩擦过程结束后 0.4 Å/ps 滑移速 度下的各基体磨损原子量仅有 0.1 Å/ps 滑移速度下 的一半左右。此外,[0001]取向基体的磨损量在较 高滑移速度下仍然明显高于其他两种取向基体而 并未表现出与摩擦力变化类似的趋同现象。

对此可以进行如下分析。根据 ZHU 等^[30]的定 义,可将纳米尺度下的总摩擦力(*F*_{friction})划分为三部 分,即犁耕力(*F*_{plouging})、黏附力(*F*_{adhesion})和磨屑阻碍 作用力(*F*_{chip}),表达式如下:

$$F_{\text{friction}} = F_{\text{plouging}} + F_{\text{adhesion}} + F_{\text{chip}} \tag{2}$$

磨损量与其中的犁耕作用分量直接相关,同时 磨损量的变化又将影响到表面磨屑原子对粗糙体 滑移的阻碍作用。这意味着在较高滑移速度下磨损 量的明显减少使上式中的犁耕力(F_{plouging})与磨屑阻 碍作用力(F_{chip})部分相应降低,而此时较高的摩擦力 响应则主要来源于接触区域原子间的黏附力作用 (F_{adhesion})的增强。这同样表明[0001]取向基体相对比 其余两种取向基体表现出更强的犁耕作用,也解释 了其磨损量随滑移速度增大并没有呈现出类似于 摩擦力变化的趋同现象。

为了对这种现象进行直观说明,本文对 0.1 Å/ps 和 0.4 Å/ps 两种滑移速度下的三种取向基体表 层磨损原子进行了如图 6 所示的可视化处理。可以 看出,磨损原子主要堆积于接触区域前方,[0001] 取向基体磨损原子堆积明显更多。此外,在较高滑 移速度下三种取向基体的接触区域后方均存在明 显更多的磨损原子附着。

2.3 内部变形机理分析

前述分析表明,在较低的滑移速度下基体对载 荷、切向滑移等作用有充分时间响应,更能体现犁 耕作用对基体变形的影响,从而使对内部变形机理 的分析更加充分和准确。因此,本文选择 0.1 Å/ps 作为本节研究的默认滑移速度。

2.3.1 [0001]取向基体

首先对[0001]取向基体进行了如图 7 所示的 DXA 分析。值得一提的是,与常见的纳米压痕分析 不同,本文所施加的是较小的 100 nN 法向载荷以 主要体现切向滑移运动对基体结构变形的影响。因 此,如图 7(a)所示,在粗糙体半球与基体接触后, 接触区域内并未发现明显基体变形。滑移运动开始 后,滑移方向前方的基体次表层出现了明显领先于 接触区域的混合位错结构(包含 1/3 (1210) 与 1/3 (1100) 两种类型,分别以不同颜色表示)。接触 区域前方位错沿滑移方向持续运动,由于滑移X方 向上设置了周期性边界条件,部分越过边界的位错 又将从体系的另一侧重新进入。随着滑移运动的进 行,两种类型的位错结构逐渐分离,位错总长度持 续增加。在滑移运动末期,位错总长度达到最大值, 在接触区域前方形成了大范围层错结构但并未朝 基体内部更深处扩展。

这种情况可以通过前文中对锆单晶的主要滑移系与滑移接触面的说明得以解释。实际上对于 [0001]取向基体而言,其滑移方向正为锆单晶滑移 系的主要滑移方向〈1120〉,晶体结构中的基面、棱 面以及锥面原子均不同程度地在基体次表层深度





Fig. 6 Visualization of wear atoms at different sliding velocities: (a), (b), (c) [0001], $[10\overline{1}0]$ and $[11\overline{2}0]$ substrates at 0.1 Å/ps; (d), (e), (f) [0001], $[10\overline{1}0]$ and $[11\overline{2}0]$ substrates at 0.4 Å/ps



图 7 [0001]取向基体随滑移距离变化的 DXA 分析

Fig. 7 DXA analysis of [0001] oriented substrate with change of sliding distance: (a) 0 Å; (b) 40 Å; (c) 80 Å; (d) 150 Å

沿此方向进行滑移,而对基体更深位置的原子没有 明显影响。另一方面,由于该晶体取向下原子排布 相对紧密,在控制滑移速度与总距离不变的条件 下,对粗糙体的滑移过程将产生更强烈的切向阻碍 作用,因此[0001]取向基体表现出最大的摩擦力响 应与磨损量。

2.3.2 [1010]取向基体

同样地,对[1010]取向基体也进行了如图 8 所 示的 DXA 分析。与[0001]取向基体相似,在接触阶 段由于载荷较小在接触区域附件原子结构变形较 为轻微。在滑移一段距离之后,在接触区域底部逐 渐形成了垂直于滑移方向的轻微层错结构且跟随 接触区域持续向前运动。随着滑移距离持续增加, 层错区域范围进一步减小并在滑移末期基本消失。 这是因为相比于长距离位错,层错意味着区域原子 堆垛次序遭到破坏,但基体局部结构相对来说仍然 保持一定的有序性;另一方面,层错结构与滑移方 向持续保持 90°垂直关系,随着切向力的不断作用 将持续分解为零散的部分位错结构,在整个滑移过 程中基体内部也没有发生明显的长距离位错运动。 此外,[1010]基体在滑移方向上的原子排列也最为 稀疏,因此表现出最轻微的摩擦力响应与磨损量。

2.3.3 [1120]取向基体

尽管在接触面原子结构与滑移方向上与 [1010]取向基体相似,[1120]取向基体的内部结构 变化却有显著不同。如图9所示,仅在接触阶段基 体接触区域底部就已经形成了较深的位错环结构, 表明[1120]取向基体在垂直方向上更容易受法向载 荷的影响。此外,在滑移初期基体底部就形成大范 围法向层错,且并未如同图8中的小范围层错直接 分解为零散的位错结构,而是又继续演化为伴随接 触区域底部运动的位错环并以此往复演化一定滑 移距离后再逐渐变小,在滑移末期仍未完全消失。 在接触区域底部所产生的相比于[1010]取向基体 更为明显的区域层错与位错结构增大了对滑移过 程的阻碍作用,但在阻碍效果上仍不及[0001]取向 基体中切向运动的长距离位错结构,因此[1120]取 向基体的摩擦力响应介于两者之间。

[1120]取向基体相比于前两者其内部表现出更 深的结构变形运动,这是因为[1120]和[1010]这两 种接触面均为棱面或棱边的取向基体更倾向于发 生棱柱面、基面原子朝 〈a〉方向的滑移。此外, [1120]取向基体在法向受载荷时具有更多的规则滑 移取向以供原子朝内部更深处滑移,滑移过程中的



图 8 [1010] 取向基体随滑移距离变化的 DXA 分析

Fig. 8 DXA analysis of [1010] oriented substrate with change of sliding distance: (a) 0 Å; (b) 40 Å; (c) 80 Å; (d) 150 Å





Fig. 9 DXA analysis of [1120] oriented substrate with change of sliding distance: (a) 0 Å; (b) 40 Å; (c) 80 Å; (d) 150 Å

上方持续施载与接触区域原子排出也进一步加深 了这种影响,这可以通过如图 10 所示予以简单说 明。值得一提的是,这种在接触区域底部产生且往 更深处发展的原子错排对表层原子排出,也即磨损 量,没有直接影响,因此这两种取向晶体在磨损原 子量上并没有表现出显著区别。



图 10 [1120] 和[1010] 取向基体部分滑移系示意图 Fig. 10 Partial sliding systems in [1120] and [1010] oriented substrates

3 结论

摩擦力响应随滑移距离呈现出先增大后平衡的变化趋势。较小滑移速度时犁耕作用占主导因素,三种取向基体摩擦力响应区分较为明显;较大滑移速度时,表面原子间黏附力的显著提高是摩擦力响应增大的主要原因。

2) 磨损量随滑移距离的增大呈线性增加,符合 经典的 Archard 磨损定律。[0001]取向基体犁耕作 用明显,在所有滑移速度中的磨损量均更大; [1010]和[1120]两种取向基体磨损量没有明显区 别。

3) 通过 DXA 分析指出,由于粗糙体滑移方向 与单晶锆主要滑移系最为接近,[0001]取向基体次 表层出现领先于接触区域运动的长距离切向位错 结构; [1010]和[1120]基体由于晶体结构类似均形 成法向垂直的层错结构,其中[1120]取向基体朝内 部易滑移结构取向更多,表现出更深的内部损伤。

 4) 以上结果表明,纳米尺度下单晶锆摩擦行为 具有较强的取向依赖性,基体中的切向位错运动相 比于法向层错结构对单晶锆摩擦力响应和磨损量 的影响更显著。

REFERENCES

- BERTOLINO G, RUDA M, FARKAS D. Fracture resistance of textured polycrystalline Zr: A simulation study[J]. Computational Materials Science, 2019, 16(2): 304–313.
- [2] TIKHONCHEV M, SVETUKHIN V. Atomistic simulation of diffusion of the self-interstitial atom in HCP Zr[J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2019, 27(3): 35005.
- [3] LONG M, RACK H J. Titanium alloys in total joint replacement—A materials science perspective[J]. Biomaterials, 1998, 19(18): 1621–1639.
- [4] WANG K. The use of titanium for medical applications in the USA[J]. Materials Science and Engineering: A, 1996, 213(1): 134–137.
- [5] LIANG Shun-xin, YIN Li-xia, MA Ming-zhen, et al. A multi-component Zr alloy with comparable strength and Higher plasticity than Zr-based bulk metallic glasses[J]. Materials Science and Engineering: A, 2013, 56(1): 13–16.
- [6] KIM K T, SUH J M. Impact of nuclear fuel assembly design on grid-to-rod fretting Wear[J]. Journal of Nuclear Science and Technology, 2009, 46(2): 149–157.
- [7] ATTIA M H. On the fretting wear mechanism of Zr-alloys[J]. Tribology International, 2006, 39(10): 1320–1326.
- [8] KIM H K. Mechanical analysis of fuel fretting problem[J]. Nuclear Engineering and Design, 1999, 192(1): 81–93.
- [9] NIE Li, ZHAN Yong-zhong, LIU Hao, et al. Novel β-type Zr-Mo-Ti alloys for biological hard tissue replacements[J]. Materials & Design, 2014, 5(3): 8–12.
- [10] 尹雁飞, 贾蔚菊, 李思兰, 等. 剧烈塑性变形制备的纳米 金属材料的力学行为[J]. 中国材料进展, 2019, 38(10): 1030-1036.
 YIN Yan-fei, JIA Wei-jü, LI Si-lan, et al. Mechanical behavior of nanostructured metallic materials prepared by severe plastic deformation[J]. Materials China, 2019, 38(10): 1030-1036.
- [11] MAKOTO T, HIDENOBU O, TORU I, et al. Wear properties of nanocrystalline aluminum alloys and their composites[J]. Scripta Materialia, 2001, 44(8/9): 2145–2148.
- [12] ZHANG Yu-sheng, HAN Zhong, WANG Ke, et al. Friction and wear behaviors of nanocrystalline surface layer of pure copper[J]. Wear, 2006, 260(9): 942–948.
- [13] LI Jie, LU Yong-hao, ZHANG Hao-yang, et al. Effect of grain size and hardness on fretting wear behavior of Inconel

600 alloys[J]. Tribology International, 2015, 8(1): 215-222.

- [14] 柳 培, 韩秀丽, 孙东立, 等. 材料摩擦磨损分子动力学 模拟的研究进展[J]. 材料科学与工艺, 2017, 25(3): 26-34.
 LIU Pei, HAN Xiu-li, SUN Dong-li, et al. Research progress in the application of molecular dynamics simulation in the frictional wear of materials[J]. Materials Science & Technology, 2017, 25(3): 26-34.
- [15] 刘晓波, 熊 震, 方 洲, 等. Al₂Cu 拉伸变形的分子动力 学模拟[J]. 中国有色金属学报, 2018, 28(9): 1746-1754.
 LIU Xiao-bo, XIONG Zhen, FANG Zhou, et al. Molecular dynamics simulation of tensile deformation of Al₂Cu[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2018, 28(9): 1746-1754.
- [16] 刘 欢,郭永博,赵鹏越,等.基于分子动力学模拟的金属材料纳米加工机理研究进展[J].中国有色金属学报,2019,29(8):1640-1653.

LIU Huan, GUO Yong-bo, ZHAO Peng-yue, et al. Research progress on nano-machining mechanism of metallic materials based on molecular dynamics simulation[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2019, 29(8): 1640–1653.

- [17] ALHAFEZ I A, URBASSEK H M. Orientation dependence in nanocutting of Fe single crystals: A molecular-dynamics study[J]. Computational Materials Science, 2018, 14(3): 286–294.
- [18] DMITRIEV A I, NIKONOV A Y, SHUGUROV A R, et al. Numerical study of atomic scale deformation mechanisms of Ti grains with different crystallographic orientation subjected to scratch testing[J]. Applied Surface Science, 2019, 47(1): 318–327.
- [19] BERTOLINO G, RUDA M, PASIANOT R, et al. Atomistic simulation of the tension/compression response of textured nanocrystalline hcp Zr[J]. Computational Materials Science, 2017, 130(1): 172–182.
- [20] RUESTES C J, BERTOLINO G, RUDA M, et al. Grain size effects in the deformation of [0001] textured nanocrystalline Zr[J]. Scripta Materialia, 2014, 7(1): 9–12.
- [21] LU Zi-zhe, NOORDHOEK M J, CHEMATYNSKIY A, et al. Deformation processes in polycrystalline Zr by molecular dynamics simulations[J]. Journal of Nuclear Materials, 2015, 46(2): 147–159.
- [22] 王宏强. Materials Studio 软件在分子力学中的基础应用[J]. 科技资讯, 2019, 17(31): 17-18.

WANG Hong-qiang. Basic application of Materials Studio software in molecular mechanics[J]. Science & Technology Information, 2019, 17(31): 17-18.

- [23] 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): 15012.
- [24] PLIMPTON S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics[J]. Journal of Computational Physics, 1995, 117(1): 1–19.
- [25] WILLIAM C S, ANDERSEN H C, BERSENS P H, et al. A computer-simulation method for the calculation of equilibrium-constants for the formation of physical clusters of moleculers—Application to small water clusters[J]. The Journal of Chemical Physics, 1982, 76(1): 637–649.
- [26] TERSOFF J. Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems[J]. Physical Review B, 1989, 39(8): 5566–5568.
- [27] MENDELEV M I, ACKLAND G J. Development of an interatomic potential for the simulation of phase transformations in zirconium[J]. Philosophical Magazine Letters, 2007, 87(5): 349–359.
- [28] MORSE P M. Diatomic molecules according to the wave mechanics II: Vibrational levels[J]. Physical Review, 1929, 34(1): 57.
- [29] ZHAO Y, ZHANG Y, LIU R P. MD simulation of chip formation in nanometric cutting of metallic glass[J]. Advanced Materials Research, 2012, 476/478: 434–437.
- [30] ZHU Peng-zhe, HU Yuan-zhong, MA Tian-bao, et al. Molecular dynamics study on friction due to ploughing and adhesion in nanometric scratching process[J]. Tribology Letters, 2011, 41(1): 41–46.
- [31] HU X L, AHLIES M. Atomistic simulation of the effect of roughness on nanoscale wear[J]. Computational Materials Science, 2015, 10(2): 208–212.
- [32] BAI Li-chun, SRIKANTH N, KORZNIKOVA E A, et al. Wear and friction between smooth or rough diamond-like carbon films and diamond tips[J]. Wear, 2017, 372/373: 12-20.
- [33] SHIARI B, MILLER R E, KLUG D D. Multiscale simulation of material removal processes at the nanoscale[J]. Journal of the Mechanics & Physics of Solids, 2007, 55(11): 2384–2405.
- [34] ARSENLIS A, BULATOV V V, STUKOWSKI A. Automated identification and indexing of dislocations in crystal interfaces[J]. Modelling and simulation in materials science and engineering, 2012, 20(8): 85001–85007.

[35] 栾智存. 基于分子动力学模拟的粗糙表面接触与摩擦特性研究[D]. 北京: 北京理工大学, 2015: 25-26.
 LUAN Zhi-cun. Research on the contact and friction

characteristics of rough surfaces based on molecular dynamics simulations[D]. Beijing: Beijing Institute of Technology, 2015: 25–26.

Orientation effect on friction behaviors of nano-single crystalline zirconium

ZHU Ke-hao¹, ZHANG Xiao-yu², YUAN Xin-lu², REN Ping-di²

 School of Materials Science and Engineering, Southwest Jiaotong University, Chengdu 610031, China;
 Tribology Research Institute, Traction Power State Key Laboratory, Southwest Jiaotong University, Chengdu 610031, China)

Abstract: The friction process of diamond structure hemisphere and single crystalline zirconium substrates with three different orientations were simulated using Molecular Dynamics method under different sliding velocities. The friction force and wear amount were detected and analyzed, the internal structure deformation mechanism was also studied with the Dislocations Extract Algorithm(DXA). The main results are as follows: the friction forces of different substrates are more distinct at lower sliding velocities due to the dominance of plouging effect while the adhesion between atoms at the higher sliding velocities is the main reason for the significant increase in friction. The wear amount continues to increase as the sliding proceeds, and the wear amount of [0001] oriented substrate is significantly greater than the others. Through the DXA analysis, it is indicated that the change of the slip system in different orientations is the main reason for the strong crystal orientation dependence of friction and wear behaviors of the single crystal zirconium at the nanoscale. Moreover, the effects of tangential dislocation motion on the friction force and wear amount of single crystal zirconium are more significant than those of normal stacking fault. **Key words:** single crystalline zirconium; molecular dynamics; nanoscale; friction and wear; crystal orientation

Foundation item: Project(51775495) supported by the National Natural Science Foundation of China; Project (2020YFG0135) supported by the Key Research and Development Program of Sichuan Province, China

Received date: 2020-04-09; Accepted date: 2020-07-27

Corresponding author: ZHANG Xiao-yu; Tel: +86-28-87603924; E-mail: zhangyu3035@126.com

(编辑 何学锋)